

ジペプチド誘導体の単結晶が発現する気体吸着特性の理論的解析
Theoretical analysis of the gas sorption behavior of dipeptide crystals

京都大学 大学院人間・環境学研究科 人間・環境学専攻 物質科学講座
津江広人

研究成果概要

多孔性材料は、気体分子の分離・精製・貯蔵などの用途に広く適用可能なため、古くから研究されており、現在でもなお新規材料の開拓が活発に進められている。これまでに当研究室では、有機結晶が発現する気体吸着特性の解明を目的として、安価かつ生体適合性をもつジペプチドに着目し、その結晶構造と気体吸着挙動の関係について報告してきた。本研究では、N末端とC末端の両方を保護した化合物 **1–3** (図1) について、合成、結晶構造解析、および気体吸着特性の評価を行った。

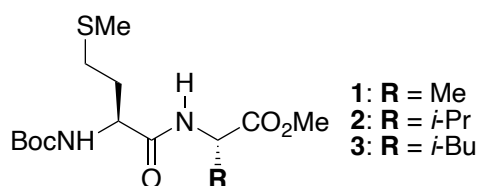


図1 化合物 **1–3** の分子構造

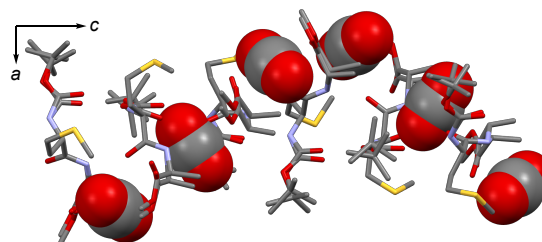


図2 化合物 **1** の CO₂ 吸着状態

合成した **1–3** のうち、**1** の単結晶のみが−78 °Cで CO₂ を選択的に吸着した。そこで、**1** の CO₂ 吸着状態についての単結晶X線構造解析を行い(図2)、その原子座標を用いて、結晶中で **1** と CO₂ との間に働く分子間相互作用を計算化学により解析した。ここでは、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用した。

まず計算化学アプリケーション Materials Studio を用いて、**1** の CO₂ 吸着状態における水素原子のみを構造最適化した。次いで、Gaussian 16を用いた *ab initio* 計算とエネルギー分割計算を行い、**1** と CO₂ の間に働いている分子間相互作用を解析した。その結果、両者に働く主要な分子間相互作用は分散力であることが分かった。また、**1–3** の結晶構造の比較から、**1** の単結晶が発現した選択的な CO₂ 吸着挙動には、結晶中での原子のゆらぎが大きく関与していることが明らかとなった。

発表論文(謝辞あり)

K. Yamanaka, R. Oketani, Y. Mori, T. Sato, S. Tsuzuki, H. Takahashi and H. Tsue,
CrystEngComm, 2024, **26**, 2314–2321.