

新規有機配位子H₄TBACPAと種々の金属イオンを用いたMOFの水熱合成

Hydrothermal synthesis of MOF with original ligand, H₄TBACPA and various metal ions.

北大院総化¹, 北大院工², ○(M1C) 鎌田美穂¹, 横倉聖也^{1,2}, 和泉廣樹^{1,2}, 島田敏宏^{1,2}

CSE.¹ & Eng². Hokkaido Univ., Miho Kamata¹, Seiya Yokokura^{1,2}, Hiroki Waizumi^{1,2}, Toshihiro Shimada^{1,2}

E-mail: kamata.miho.11@elms.hokudai.ac.jp

【緒言】

Metal Organic Frameworks (MOF)とは金属イオンと有機配位子の錯体から成る多孔性材料であり、ガス貯蔵や光触媒への応用が期待される。金属イオンや有機配位子の種類を変えることにより、MOFの物性を調節することができる。本研究ではHOMO-LUMOギャップが狭い有機配位子を用いることで、広い光学吸収域を有するMOFの構築を目指した。1,2,6,7-Tetraphenylcyclopenta[hi]aceanthrylene (TPCPA)は狭いHOMO-LUMOギャップを持つ半導体材料である。我々はTPCPAにカルボキシ基を4つ付加した新規の有機配位子1,2,6,7-tetrakis(p-benzoic-acid)cyclopenta[hi]anthrylene (H₄TBACPA)を合成した(図1)。さらに、H₄TBACPAと種々の金属イオンを用いMOFの合成を試みた。

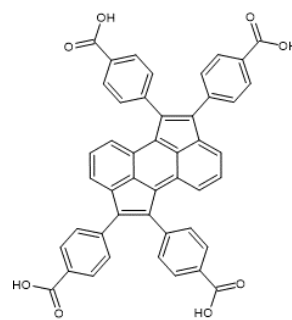


図 1 H₄TBACPA の構造

【実験方法】

まず既報¹を参考にH₄TBACPA分子を合成した。次にH₄TBACPAと種々の金属イオン硝酸塩を用いて水熱合成法によりMOFを合成した。Ni-H₂TBACPA, Bi-HTBACPA, Zn₂-TBACPAの3種類のMOFの単結晶が得られたため単結晶X線構造解析(SCXRD)により構造解析を行った。

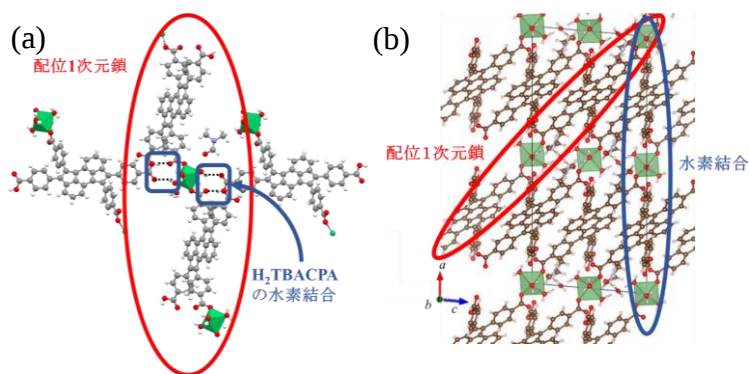


図 2 Ni-H₂TBACPA の(a)配位構造 (b)結晶構造

【結果と考察】

Ni-H₂TBACPAの組成式は[Ni(H₂O)₄(H₂TBACPA)] · 2DMF · H₂Oであり、結晶溶媒として水とDMFが含まれる。空間群はC2/cであり、Ni(II)にH₂TBACPA 2分子とH₂O 4分子が配位し、八面体構造が形成されている(図2(a))。この八面体ユニットがH₂TBACPA分子を介して連なり、配位一次元鎖を形成している。さらにこの配位一次元鎖同士は、Ni(II)に配位したH₂TBACPAのカルボキシ基と配位していないカルボキシ基の水素結合によって架橋されている(図2(b))。このように本物質では配位結合と水素結合により3次元ネットワークが形成されることがわかった。

【参考文献】

[1] E. Lütke et al., *Chemistry - A European Journal* **2011**, 17 (45), 12756–12762.