

研究成果報告書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		高密度水素安定貯蔵を目的とした細孔空間を有する配位高分子錯体の設計構築			
研究テーマ (欧文) AZ		Study of crystal engineering coordination polymer for highly-condensed and stable hydrogen storage			
研究氏 代 表 名 者	カタカナ CC	姓)コソネ	名)タカシ	研究期間 B	2011 ~ 2012 年
	漢字 CB	小曾根	崇	報告年度 YR	2012 年
	ローマ字 CZ	Kosone	Takashi	研究機関名	理化学研究所
研究代表者 CD 所属機関・職名		独立行政法人 理化学研究所・特別研究員			
概要 EA (600字~800字程度にまとめてください。)					
<p>本研究では、物理吸着を支配する要因である「ホスト-ゲスト相互作用」を調べることで、より水素分子吸着に適した相互作用を持つ細孔構造の設計構築のための知見を得ることを目的とする。本研究期間において、大型放射光施設 SPring-8 の高輝度 X 線を利用したマキシマムエントロピー法 (MEM) による精密な電子密度分布解析による吸着水素の直接観測及び、MEM 電子密度情報を基にした静電ポテンシャル可視化法による、細孔空間内部の静電相互作用の観測によるホスト-ゲスト相互作用の検討を行った。本研究では、優れた構造制御が可能なホフマン型配位高分子 <math>\{M(L)_x[M'(CN)_4]_y\}</math>, <math>\{M(L)_x[M'(CN)_2]_2\}</math> (<math>M = Mn, Fe, Co, Ni, etc.</math>, <math>M' = Cu, Au, Ag, Ni, Pd, Pt</math>, <math>L = pyridine</math> 系配位子) と呼ばれる有機・無機複合フレームワーク物質群に着目した。この物質系は配位子 L を変えることで設計的に骨格構造を変化させることが出来ることが知られており、配位子 L の分子構造のみを微細に変化させることで細孔構造の微細な設計が期待でき、水素吸蔵のための材料開発に有用と考えている。今回、ホフマン型配位高分子の中でも、対称性の高い細孔空間を有する <math>\{Fe(Pyrazine)[Pd(CN)_4]\}</math> について、研究を行った。</p> <p>本研究から、ホフマン型多孔性配位高分子における細孔内部の吸着水素の構造状態についての情報を得ることに成功した。さらに、静電ポテンシャル可視化手法によって、実験的に細孔内部の空間に広がる静電相互作用 (化学的な相互作用点) の存在を可視化出来た。</p> <p>この手法によって、従来の X 線構造解析手法による空間内の局所情報である原子サイト情報だけではなく、空間全体に存在する原子・分子間のクーロン力をポテンシャル情報として、回折実験から直接的に引き出すことが可能となることを提示できた。今後、系統的に細孔構造を変化させた物質群を作り、同様に、それらの細孔内部のポテンシャルを比較・検討することで、より水素吸着材料に望ましい吸着エネルギーを持つ細孔空間構造の予想を立てていく。</p>					
キーワード FA	多孔性配位高分子	水素吸蔵			

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC					シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>								
	著者名 <sup>GA</sup>		雑誌名 <sup>GC</sup>						
	ページ <sup>GF</sup>	～	発行年 <sup>GE</sup>					巻号 <sup>GD</sup>	
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>								
	著者名 <sup>GA</sup>		雑誌名 <sup>GC</sup>						
	ページ <sup>GF</sup>	～	発行年 <sup>GE</sup>					巻号 <sup>GD</sup>	
雑誌	論文標題 <sup>GB</sup>								
	著者名 <sup>GA</sup>		雑誌名 <sup>GC</sup>						
	ページ <sup>GF</sup>	～	発行年 <sup>GE</sup>					巻号 <sup>GD</sup>	
図書	著者名 <sup>HA</sup>								
	書名 <sup>HC</sup>								
	出版者 <sup>HB</sup>		発行年 <sup>HD</sup>					総ページ <sup>HE</sup>	
図書	著者名 <sup>HA</sup>								
	書名 <sup>HC</sup>								
	出版者 <sup>HB</sup>		発行年 <sup>HD</sup>					総ページ <sup>HE</sup>	

欧文概要 <sup>EZ</sup>

The interaction between hydrogen molecules and pore walls on the hydrogen storage properties of 3-D Hofmann-like coordination polymers Fe(pyrazine)[Pd(CN)<sub>4</sub>] has been investigated. Microporous coordination polymers have heterogeneous van der Waals potentials within their pores. Therefore, partial charges on the pore walls can provide a means of strengthening the interactions between H<sub>2</sub> and the pore walls. However, the precise potential design in the pore for high physisorbing H<sub>2</sub> storage with smooth sorption reversibility is still not clear. In this report, we have experimentally visualized the charge density distribution and electrostatic potential by using in-situ synchrotron powder diffraction data of H<sub>2</sub> gas adsorption for investigating Host-Guest interaction, in which we experimentally observed aggregating H<sub>2</sub> molecules and revealed minimum potentials in the pore space due to the open metal site affinity.