

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		多孔性配位高分子の単結晶－単結晶構造転移過程の実時空間観察とその機構解明			
研究テーマ (欧文) AZ		Spatiotemporal Observation of Single Crystal- Single Crystal Transformation on Porous Coordination Polymers			
研究氏 代表名 者	カナ CC	姓) ホソノ	名) ノブヒコ	研究期間 B	2015～ 2017 年
	漢字 CB	細野	暢彦	報告年度 YR	2017 年
	ローマ字 CZ	HOSONO	NOBUHIKO	研究機関名	京都大学
研究代表者 CD 所属機関・職名		京都大学高等研究院物質-細胞統合システム拠点・特定助教			
概要 EA (600 字～800 字程度にまとめてください。)					
<p>本研究では、高速・高解像度の原子間力顕微鏡(AFM)観測技術を利用して、多孔性配位高分子(PCP/MOF)の単結晶－単結晶構造転移プロセスを実空間・実時間で観測し、分子レベルでその描像を明らかにすることで、転移メカニズムの解明に挑んだ。</p> <p>細孔内にゲスト分子を包摂することで明確な結晶構造転移を示すPCPを用い、その単結晶表面を溶媒中で直接観察し、高解像度のAFM像の取得を試みた。詳細な条件検討の末、結晶表面の格子構造を長時間安定的に、かつ分子解像度で観察することに成功した。これまで、PCPの単結晶には多くの欠陥構造が存在すると考えられてきたが、溶液中でとらえられた単結晶表面は少なくとも50nm四方にわたって非常に均一かつ完全な格子構造をとっていることが明らかとなった。一方で、観測条件を変えることにより結晶の表面の安定性は大きく変わり、典型的な分子結晶にみられる点欠陥の存在も確認された。高解像度を保ちながら観察を続けつつ、測定溶媒中にゲストを投入することで、そのゲスト応答を実時間で観測したところ、結晶格子がゲスト濃度に対して素早く変形応答する様子を実時間でとらえることに成功した。解析の結果、PCPのゲスト応答は10分程度の時間スケールで起こり、その変形はゲスト濃度に依存することが明らかとなった。また、同変化は可逆的に起こり、ゲストを取り除くことでもとの格子形に戻る。</p> <p>本成果は、PCPの結晶構造転移を実時間かつ実空間で追跡した初めての例であり、今まで知られていなかったPCP結晶表面の動的挙動が明らかとなった非常に重要な知見となった。本成果の内容は、昨年に学術誌に投稿し、現在審査中である。</p>					
キーワード FA	多孔性配位高分子	原子間力顕微鏡	構造転移	表面・界面	

(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 EZ

Flexible porous coordination polymers (PCPs) and metal-organic frameworks (MOFs) have attracted increased attention, especially regarding their structural dynamism depending upon the guest accommodated in their pores. This dynamic response has been recognized as guest-induced single-crystal-to-single-crystal (SCSC) transformation and is accompanied by large structure changes without appreciable loss of crystallinity. Capturing the transition process of the SCSC transformation at real time/molecular scale resolution has still remained a formidable challenge in PCP/MOF science because of technical limitations of analytical and observation methods while it would provide numerous insights regarding the mechanism of SCSC transformation.

I have demonstrated atomic-scale direct observations of flexible PCP surfaces by *in-situ* solution atomic force microscopy (AFM), in which I could successfully capture every moment of guest-induced SCSC transition processes at the liquid-solid interface of PCPs with an atomic-scale resolution. It was found that the PCP lattice at the crystal surface recognize the guest molecule and changes the lattice structure sharply in response to the guest concentration. The SCSC transformation occurs reversibly and the entire process generally takes ~10 min, that represents the highly flexible feature of PCP crystal surface. The results were summarized in the paper and submitted to academic journal last year.