

原子・分子の自在配列と特性・機能
2020 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書

佐藤 弘志

理化学研究所 創発物性科学研究センター
ユニットリーダー

トポロジカル結合の自在配列による革新的機械特性発現

§ 1. 研究成果の概要

本研究では、「トポロジカル結合」を自在に配列し、革新的力学材料開拓を実現することを目的としている。2021年度は、昨年度トポロジカル結合「カテナン」を配列させることで実現した多孔性結晶^{CTN}MOF の特性を引き続き調査し、論文¹⁾にまとめた。具体的な知見を以下に述べる。

(1) 2つのリングユニットが知恵の輪様に連結された[2]カテナン配位子 $H_4^{CTN}L$ を、コバルトイオン (Co^{2+})と反応させることで、緑色単結晶試料^{CTN}MOF が得られる。^{CTN}MOF は多孔性構造を有しており、カテナン部位が協同的に動きうる構造を取っていた。有機溶剤中でのナノインデンテーション測定を実施し、同種の材料群で世界最小のヤング率を記録することを見出した。

(2) ナノインデンテーション測定において、10分以上のインターバルを設けた場合、同一箇所を複数回押しした際にほぼ同じヤング率が確認できた。これは、結晶表面を数マイクロメートル押し込んでも測定後に圧痕が認められない、すなわち、結晶が表面形状を回復するとともに力学特性も回復することを示している。これらの実験結果は、本材料がただ柔らかいだけでなく、弾性に富んでいることを明確に示している。

(3) 計算科学的なアプローチによって、[2]カテナンのマクロサイクルどうしに形成される水素結合が材料特性に影響を与えることが示唆された。

(4) ダイヤモンドアンビルセルを用いた高圧実験に新たに取り組んだ。圧力印加時のセルパラメータ変化量が結晶の a 軸(または b 軸)方向と c 軸方向で大きく異なることがわかった。また、高圧下での結晶構造解析の結果、カテナンのリング同士の相対位置が変化することで、c 軸方向の構造変化が実現されていることが明らかとなった。これは、^{CTN}MOF の構造変化とカテナンの構造変化がリンクしていることを直接示す重要な知見である。

【代表的な原著論文情報】

- 1) An Elastic Metal-Organic Crystal with a Densely Catenated Backbone
W. Meng, S. Kondo, T. Itoh, K. Komatsu, J. Pirillo, Y. Hijikata, Y. Ikuhara, T. Aida*, and H. Sato*
Nature **2021**, *598*, 298-303.