

常磁性ナノ結晶細孔に閉じ込められた階層的水クラスターの固体²H NMR による解析

(東理大理¹・金沢大院自然²) ○並木智哉¹・齋藤 明¹・尾花駿一¹・小林文也¹・栗原拓也²・水野元博²・田所 誠¹

Spectral analysis on solid-state ²H NMR for hierarchical water clusters confined to paramagnetic nanoporous crystals (¹*Department of Chemistry, Faculty of Science, Tokyo University of Science*, ²*Graduate School of Natural Science and Technology, Kanazawa University*) ○Tomoya Namiki¹, Akira Saito¹, Shunichi Obana¹, Fumiya Kobayashi¹, Takuya Kurihara², Motohiro Mizuno², Makoto Tadokoro¹

Water clusters confined to hydrophilic nano-porous crystals have hierarchical H-bonding structures originated in interactions with the nano-channel pores. It is important for understanding of a biomolecule to elucidate the water hierarchy, which would be expected in a hydration structure on proteins. In this study, we have succeeded to prepare {[Os(D₂bim)₃](TMA)·20D₂O}_n (**1'**) (H₂bim = 2,2'-biimidazole, TMA³⁻ = trimesate), which has pseudo-1D nanochannels confining the hierarchical water clusters. This time, measuring the powder sample of **1'** by variable-temperature solid-state ²H-NMR spectra, we would like to reveal the hierarchy of three-layered structures for the water clusters (Fig. 1), which have the different relaxation times depending on each a layer.

Keywords : Solid-State NMR; Hydrophilic Nano-Pores; Water; Hydrogen Bond; Molecular Crystals

親水性ナノ空間に閉じ込められた水は壁面との相互作用により、階層的なクラスター構造を形成する。ナノスケールでの水の階層性は生体タンパク質の水和構造にもみられ、その水の階層性の役割を明らかにすることは、生体を理解する上で重要な課題の1つである。私たちはこれまで、水分子クラスター (WMC) を親水性ナノチャネル細孔に閉じ込めたナノ多孔質結晶 {[Os^{III}(H₂bim)₃](TMA)·20H₂O}_n (**1**) (H₂bim = 2,2'-biimidazole, TMA³⁻ = trimesate) の合成に成功した。この結晶 **1** は壁面に規則的な親水性官能基である O 原子によって、階層性の3層構造からなる WMC を有している。本研究では、**1** を D₂O に置換した **1'** の WMC の階層性を固体 ²H-NMR 解析を用いてスペクトル的に証明することを目標に挙げた。153~293 K における **1'** の粉末サンプルによる固体 ²H-NMR スペクトルを測定した結果、階層的な WMC 構造に起因する異方的なピークが観測された (Fig. 1)。各温度におけるスペクトルについて、緩和時間などを考慮してフィッティングした解析と合わせて報告する。

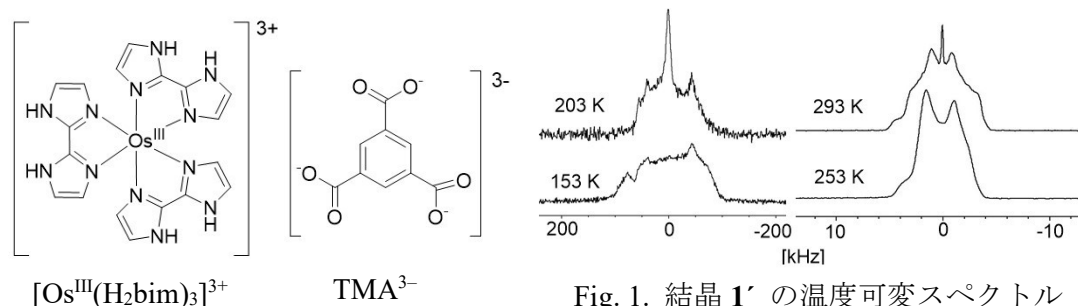


Fig. 1. 結晶 **1'** の温度可変スペクトル