

Neutron Diffraction studies on the compound, $[\text{C}_5\text{Me}_4(\text{SiMe}_3)]_4\text{Y}_4\text{H}_8(\text{WH}_3\text{C}_5\text{Me}_5)(\text{PMe}_3)$.
 $[\text{C}_5\text{Me}_4(\text{SiMe}_3)]_4\text{Y}_4\text{H}_8(\text{WH}_3\text{C}_5\text{Me}_5)(\text{PMe}_3)$ の中性子構造解析.

新村信雄¹⁾ 田中伊知朗¹⁾ バウ ロバート²⁾ アズナブール クリステン²⁾

Nobuo Niimura, Ichiro Tanaka, Robert Bau, Kristen Aznavour

¹⁾茨城大学 ²⁾南カリフォルニア大学

(JRR-3 原子炉の炉室に設置された単結晶中性子回折計 BIX-3 を用いてイットリウムとタングステンを含む多核金属ヒドリド錯体である $[\text{C}_5\text{Me}_4(\text{SiMe}_3)]_4\text{Y}_4\text{H}_8(\text{WH}_3\text{C}_5\text{Me}_5)(\text{PMe}_3)$ の単結晶中性子回折測定を行った。現在構造解析を行っている。)

キーワード:

多核金属ヒドリド錯体, イットリウム, タングステン, 単結晶中性子回折, BIX-3

1. 目的

近年、金属錯体化学の分野では、複数のランタノイド等の重金属原子クラスターを中心部分を持つ多核金属錯体が数多く発見、合成されている。このようなエレクトロンリッチなクラスターには周囲に水素原子が結合しているものも幾つか報告されており^{1,2,3}、金属表面における水素原子の挙動のモデルとして材料化学、触媒化学の分野への応用が期待されている。本研究で対象とする $[\text{C}_5\text{Me}_4(\text{SiMe}_3)]_4\text{Y}_4\text{H}_8(\text{WH}_3\text{C}_5\text{Me}_5)(\text{PMe}_3)$ 錯体はこのような多核金属ヒドリド錯体の代表的な例であり、水素原子はイットリウムおよびタングステン原子に対して特異な結合を持つと考えられているが、実際の水素原子の構造学的データはこれまで得られていない。そこで本研究では、JRR-3 原子炉の炉室に設置された単結晶中性子回折計 BIX-3 を用いてイットリウムとタングステンを含む多核金属ヒドリド錯体である $[\text{C}_5\text{Me}_4(\text{SiMe}_3)]_4\text{Y}_4\text{H}_8(\text{WH}_3\text{C}_5\text{Me}_5)(\text{PMe}_3)$ の構造解析を行い、この錯体中の金属原子を架橋する形で結合していると思われる 4 個の水素原子の位置を詳細に決定することを目的とした。

2. 方法

JRR-3 設置の BIX-3 を用いて 10 日間かけて単結晶中性子回折データの収集を行った。そのデータを用いて構造解析を行っている。

3. 研究成果

回折測定の結果、 $d_{\min} \sim 0.85 \text{ \AA}$ で 8532 個の独立反射を測定できた。ただし、これは全独立反射の 65.7% にしか相当する。また、得られた格子は三斜晶系であり、これは事前の X 線での測定で得られた単斜晶系の格子とは異なる新規の多形であった。

4. 結論・考察

測定用に得られた大型結晶が当初の予想とは異なり対称性の低い多形であったため、Completeness が 65.7% と低い値となってしまった。このため、現在構造解析を行っているが、適切な構造モデルを得るのに時間を要している。

5. 引用(参照)文献等

- (1a) D.W. Hart, et al., *Angew Chem. Int. Ed. Engl.* **18**, 80 (1979)
- (1b) D. W. Hart et al., *J. Am Chem. Soc.* **103**, 1448 (1981)
- (2) P.F. Jackson, et al., *J Chem. Soc. Chem. Commun.* **295**, (1980)
- (3) R. Bau, et al., *Science* **274**, (1997)1099