



一酸化炭素吸着に誘起される多孔性配位高分子の構造変化のX線吸収スペクトル観察

日下心平¹、上代洋²、堀彰宏³

1. 京都大学高等研究院、2. 新日鐵住金株式会社、3. 名古屋大学工学系研究科

キーワード：多孔性配位高分子、金属有機構造体、ガス吸着、

1. 背景と研究目的

我々のグループは、既存材料とは全く異なるメカニズムでCO（一酸化炭素）を分離可能な多孔性配位高分子(Porous Coordination Polymer 以下PCP)を発見した¹。この第一世代CO分離PCP（以降PCP1）の特性を向上させ、実用材料として利用可能な優れた特性を発現する第二世代PCP(以降PCP2)を開発したが、特性向上の原因が未解明である。本研究では、PCP2の優れたガス分離メカニズム解明を目的とし、PCPの金属イオン第一配位圏の構造をX線吸収法(XAFS)により検討した。

2. 実験内容

本PCPは、ガスの圧力、温度によってその構造を変える特徴がある。このため、XAFS測定は、(1)4K~300Kまで制御可能なクライオスタット、(2)サンプルの雰囲気真空~1気圧まで制御可能(各種ガス導入が可能)なガス導入管付き3連式セル、(3)ガス圧制御装置、から成る自作システムを利用して行われた。本システムにより、サンプルのin situでの減圧加熱処理や、真空/任意のガス種・ガス圧、温度での測定が可能になる。クライオスタットは、精密かつ自由な温度制御を可能にするが、サンプルの交換に時間がかかる欠点がある。3個のサンプルをセット可能な本システムはそれを解決し、多くの測定を迅速に行う事が可能となる



写真左：ガス配管付き3連式セル

写真右：ガス制御システム

3. 結果および考察

新規に設計したシステムを利用して、PCP1、2のas synthesis構造、120°C真空減圧処理後の乾燥構造のXAFS測定を行った。この結果、従来はPCP1,2の乾燥時構造は異なると思われていたが、実は同一であること、さらにPCP2では金属イオン周りのひずみが小さい事が明らかになった。本結果は、PCP2の優れたガス分離メカニズムを明らかにすると共に、更に高性能な第3世代PCPの開発指針を示す重要な成果である。

4. 参考文献

1. H. Sato, et al. *Science* **2014**, *343*, 167.