



## 2次元MOFの結晶構造解析

富中 悟史

国立研究開発法人物質・材料研究機構

キーワード：金属有機骨格、二次元物質、X線回折、結晶構造解析

### 1. 背景と研究目的

金属有機骨格 (MOF) は吸着材や触媒としての応用が期待され開発が進んできた材料であるが、近年では電子材料への応用も検討されている。中でも特に2次元構造を有する材料は、その異方性や層間を利用した特異的な機能が電子材料や電池材料への応用に適しており、今後ますます期待できる材料群である。しかしながら、2次元構造を有する材料は層間に乱れが入りやすく、一般的に結晶性が悪い材料が多い。ゆえに構造モデルは有機リンカーと金属イオン種をもとに仮定したもので議論されることが多く、完全に解明できていないものも少なくない。本研究では SPring-8 の高エネルギーX線にて二体分布関数を、あいちSRで回折パターンを測定し、実空間データと逆空間データを合わせて、詳細な構造解析を行うことを目的とし、粉末回折実験を行った。

### 2. 実験内容

リンデンマンガラスに2次元MOFを入れ、真空乾燥を行い、窒素を導入後、直ちに火で封止した。サンプルはNi、Co、Cuイオンとビスジイミノ (bis(diimino)) リンカーを用いたMOFである (詳細は参考文献を参照) [1,2]。測定はあいちSRのBL5S2にて、PILATUS100K検出器を用いて、X線のエネルギーを12.4 keVで行った。

### 3. 結果および考察

Fig. 1は2次元MOFの回折パターンである (キャピラリーのみで測定したバックグラウンドを除去済み)。NiカチオンやCuカチオンを用いたMOFの場合、非常に似通った回折パターンが得られた。それらと比較し、Coを用いた時は14度付近の2つのピークの相対強度が異なり、またシャープになった。さらに18度付近のピークが高角度にシフトしている。全体的な回折パターンは似ているため、類似の構造であると予想はできるものの、何らかの構造の違いが生じていることは間違いない。現在は二体分布関数と合わせて詳細を解析中である。

### 4. 参考文献

1. Wada, K.; Sakaushi, K.; Sasaki, S.; Nishihara, H., *Angew Chem Int Edit* **2018**, 57 (29), 8886-8890.
2. Dou, J. H.; Sun, L.; Ge, Y. C.; Li, W.; Hendon, C. H.; Li, J.; Gul, S.; Yano, J. K.; Stach, E. A.; Dinca, M., *J Am Chem Soc* **2017**, 139 (39), 13608-13611.

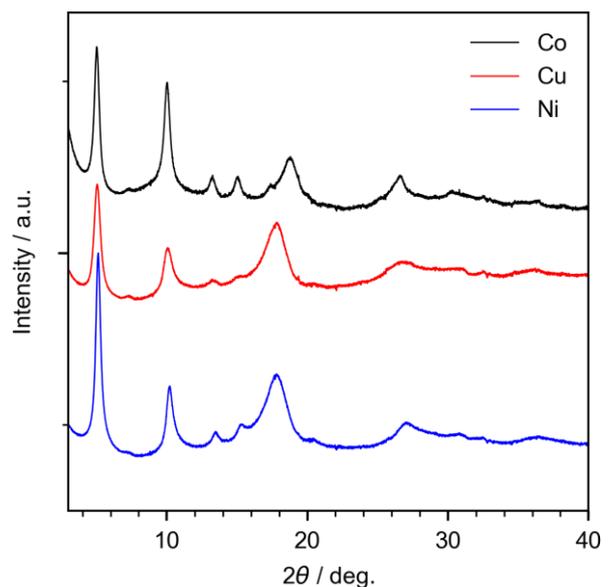


Fig. 1 2次元MOFのX線回折パターン (12.4 keV)