



特異なガス吸着誘起構造相転移を示す柔軟性 MOF の in-situ 構造解析

日下心平¹, 永井一輝¹, 根喜他康平²

1 名古屋大学大学院工学研究科 2 名古屋大学工学部化学生命工学科

キーワード：MOF、粉末 X 線

1. 背景と研究目的

有機金属構造体(MOF)は金属イオンと有機配位子の自己集合により生じる結晶性固体で、内部にゲスト分子を吸脱着可能なナノ空間を有している。MOF は気体分子等の小分子の吸着に伴い、脱ゲスト構造から構造が変化することが知られている。この時の構造変化を詳細に分析することは、より優れた気体吸着特性を持つ材料を設計する指針として重要である。今回、MOF 構造転移のメカニズム解明を目的とし、MOF の合成時構造、脱ゲスト時構造、ガス吸着構造における粉末 X 線回折パターンを測定し、その違いについて情報を得ることを目的に、MOF の合成時、脱ゲスト時およびゲスト吸着時のサンプルの粉末 X 線回折測定を行った。

2. 実験内容

合成した MOF(MOF-A、MOF-B)の粉末サンプルをキャピラリーに詰め、これを真空下加熱することで脱ゲスト状態の MOF サンプルを得た。これにゲストとして溶媒分子(guest1 および guest2)の蒸気を導入し、封じ切ることでゲスト吸着状態のサンプルを得た。このキャピラリーを用いて吸着時粉末 X 線パターンの観測を行った。使用波長 0.8 Å であり、露光時間 10 秒での予備測定による粉末 X 線パターン確認の後、露光時間 3 分での測定により高解像度データを得た。

3. 結果および考察

図 1 に得られた粉末 X 線回折パターンを示す。赤線で示される脱ゲスト時サンプルの粉末 X 線パターンは、黒線で示される合成時構造のものから、18°付近のピークが顕著に高角度側へとシフトしていることが明らかとなった。ピークの指数付けは現在のところ行っていないが、このことは脱ゲストにより単位格子の収縮が起こっていることを意味している。さらに、溶媒蒸気を吸着させたサンプル(緑線：guest1 および栗生線：guest2)の X 線回折パターンにおいて、主要ピークの位置が合成時構造のものと同であった。このことから、今回測定した MOF が、ゲスト分子の吸脱着により構造が可逆に変化することが明らかとなった。

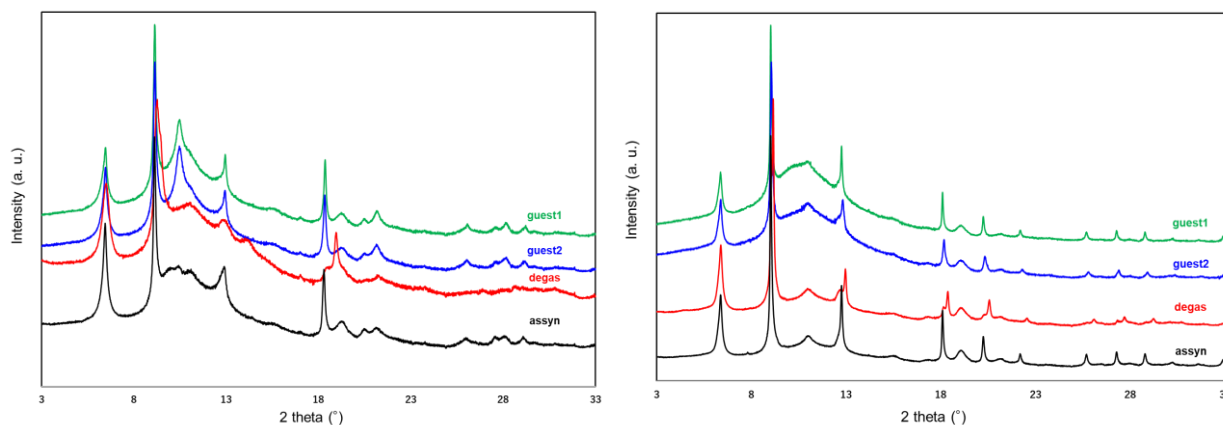


図 1. 測定した MOF の粉末 X 線回折パターン (左 MOF-A および