



DUT-8(Ni)の構造解析

田中 秀樹

信州大学先鋭領域融合研究群先鋭材料研究所 (RISM)

キーワード : EXAFS, MOF

1. 背景と研究目的

Metal-organic framework の一種である DUT-8(Ni) は、ワインラック型のフレームワーク構造を有しており、as-synthesis の DUT-8(Ni) は、そのひし形細孔が閉じた構造 (cp 構造) を取っている。そして、この DUT-8(Ni) に種々の物理的的刺激を加えると、ひし形細孔が完全に開かれた構造 (op 構造) や、中程度に細孔が開かれた構造 (ccp 構造) となることが明らかとなっている。しかし、その ccp 構造については、現在のところ、粉末 X 線構造解析が困難であることから、EXAFS によって構造情報を得ることを目的とする。

2. 実験内容

種々の構造を有する DUT-8(Ni) を BN 粉末に混合し、加圧 (10 kN) してペレットを作製した。また、ペレット製作における圧力印加によって DUT-8(Ni) の構造が変形することを防ぐため、DUT-8(Ni) + BN 粉末を加圧せずに、 $\phi 7$ mm の貫通穴を持つアクリル板 (厚み 2 mm) に充填し、その両面をカプトンテープで封じた試料も作成した。全ての試料は透過法 (Quick XAFS, 測定時間 4 分) によって測定した。

3. 結果および考察

DUT-8-cp (ペレット), DUT-8-ccp (粉末), DUT-8-op (粉末) における Ni (K-edge) の動径分布関数 (RDF) を Fig. 1 に示す (Athena を使用)。Ni-O および Ni-N に対応するピーク強度 (約 1.6 Å) が、cp \rightarrow ccp \rightarrow op の順に大きくなっているが、それぞれの構造において配位数は変化しないと考えられることから、デバイ・ワラー因子が小さくなっているものと考えられる。このことは、cp \rightarrow ccp \rightarrow op の順に結晶構造のゆがみが無くなり、対称性が良くなることにも整合している。今後、それぞれの試料における RDF の解析を進めていく予定である。

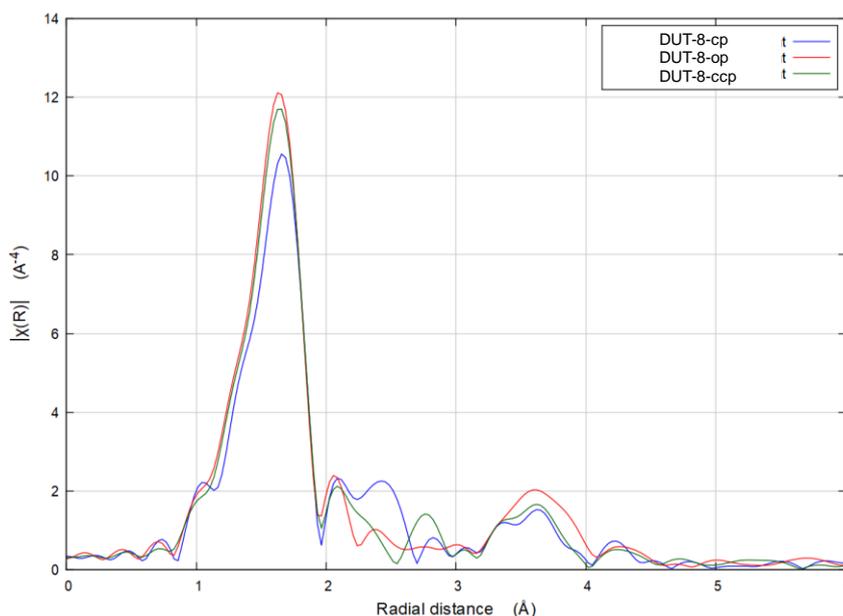


Fig. 1 DUT-8-cp (ペレット), DUT-8-ccp (粉末), DUT-8-op (粉末) における Ni (K-edge) の動径分布関数 (RDF)