



## 酸素吸着過程における多孔性金属錯体の表面状態の X 線吸収微細構造解析

堀 彰宏  
名古屋大学

キーワード：ナノポーラス金属錯体(MOF), ガス吸着下 XAFS 測定

### 1. 背景と研究目的

ナノポーラス金属錯体の中でも特に無限骨格を有する多孔性金属錯体(MOF)は金属イオンと有機配位子が自己集合することで形成される結晶性固体で、内部に均一なナノサイズの空孔を有するため、ガスの分離・貯蔵への応用展開が期待される次世代の機能性材料である<sup>[1]</sup>。MOF の特徴として、金属イオンや有機配位子を適切に選択することで、多様な構造や有機配位子由来の機能を容易に導入できることが挙げられる、申請者のグループでは、アジド基を有する有機配位子を構成要素とする MOF を用いることで、一酸化炭素(CO)と窒素(N<sub>2</sub>)から CO のみを選択的に吸着できる材料を報告した<sup>[2]</sup>。しかしながら、これらの MOF のガス吸着過程における金属種の配位環境は不明であり、吸着メカニズムの解明には至っていない。そこで本研究では、吸着測定下 *in situ* XAFS 測定を行うことが可能な装置を開発し、実際に MOF の金属種まわりの電子状態を観察することによって、ガス吸着過程における MOF 細孔内の構造状態を解明することを目的とした。

### 2. 実験内容

まず、実際に試料部分にガス導入が可能な独自のセルの設計・開発を行った。さらに、そのセルの評価を行うための試料として、すでに Rietveld 解析によりガス導入下の構造が報告されている、kagomé 型 MOF を用いた。この MOF を作成したセル中に詰め、ガス導入前後の *in situ* XAFS 測定を試みた。

### 3. 結果および考察

今回作成したセル及び装置図を右記の Fig. 1 に示す。セルとガスラインを直接連結することにより、ガスが試料内に導入することを可能とした。さらに、これらの試料セルをクライオスタットと連結させることにより、低温から高温まで幅広い温度条件下におけるガス吸着下 *in situ* XAFS 測定を行うことが可能となった。実際に作成したセルを用いて、合成直後の kagomé 型 MOF の XAFS 測定を行ったところ、単結晶 X 線回折により得られた構造から見積もられる XAFS スペクトルと同じ結果が得られた。今後温度調節装置の改良等を行うことにより、ガス吸着過程での構造変化の詳細が確認できると期待される。

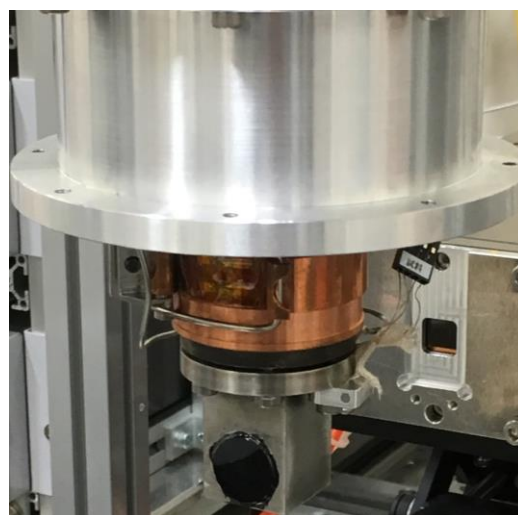


Fig. 1 XAFS 用セルと装置図

### 4. 参考文献

1. R. Matsuda *et al.*, *Nature Commun.*, **2017**, 8, 100.
2. H. Sato *et al.*, *Science*, **2014**, 343, 167.