

## オペランド CT-XAFS による MOF 結晶内の分子吸着過程の三次元イメージング

(名大理<sup>1</sup>・名大院理<sup>2</sup>・名大院工<sup>3</sup>・名大物国セ<sup>4</sup>・AichiSR<sup>5</sup>・JASRI/SPRing-8<sup>6</sup>) ○山田 笑菜<sup>1</sup>・坂本 裕俊<sup>4</sup>・松井 公佑<sup>2</sup>・堀 彰宏<sup>3</sup>・松田 亮太郎<sup>3</sup>・永見 哲夫<sup>5</sup>・加藤 弘泰<sup>5</sup>・東 晃太郎<sup>6</sup>・宇留賀 朋哉<sup>6</sup>・唯 美津木<sup>4</sup>

Operando 3D visualization of molecular adsorption process of MOF by CT-XAFS (<sup>1</sup> Faculty of Science, Nagoya University, <sup>2</sup> Graduate School of Science, Nagoya University <sup>3</sup> Graduate School of Sngineering, Nagoya University <sup>4</sup>Nagoya University RCMS, <sup>5</sup>AichiSR, <sup>6</sup>JASRI/SPRing-8) Emina Yamada,<sup>1</sup> Hirotsi Sakamoto,<sup>4</sup> Hirosuke Matsui,<sup>2</sup> Akihiro Hori,<sup>3</sup> Ryotaro Matsuda,<sup>3</sup> Tetsuo Nagami,<sup>5</sup> Hiroyasu Kato<sup>5</sup>, Kotaro Higashi,<sup>6</sup> Tomoya Uruga<sup>6</sup>, Mizuki Tada<sup>4</sup>

The imaging of single crystal particles of MOF (MOF-74Co) for gas adsorption process was investigated by Computed-Tomography XAFS (CT-XAFS). MOF-74Co crystals, which had suitable sizes for the CT-XAFS imaging, were prepared and the structural changes in the single crystal particles for water adsorption was visualized at Co K-edge CT-XAFS for the first time.

**Keywords :** MOF, XAFS, adsorption, imaging, operando measurement

MOF (Metal-Organic Framework)は、適切な有機配位子と金属イオンから、希望するサイズ・性質をもつ規則性ナノ空間を構築でき、ゲスト分子の化学的性質やサイズに応じた吸着機能を発現する。MOF 結晶の分子吸着による構造変化は、X 線回折によって明らかにされてきたが、固体結晶粒子内で分子吸着が伝搬して反応が進行する様子は可視化されていない。本研究では、ジヒドロキシテレフタル酸と Co イオンからなる MOF-74Co 結晶 (図 a,b)を調製し、水分子吸着にともなう結晶粒子内の Co イオンの配位構造の変化と分布を、Co K 端の CT-XAFS 法により可視化した。水の配位吸着量を変化させ、各吸着段階において CT-XAFS 計測を行い、得られた二次元画像の XANES カーブフィッティング解析から、水が配位した Co の量を算出した。これをマッピングすることで、結晶粒子内の水分子吸着反応の様子を初めて可視化できた (図 c)。

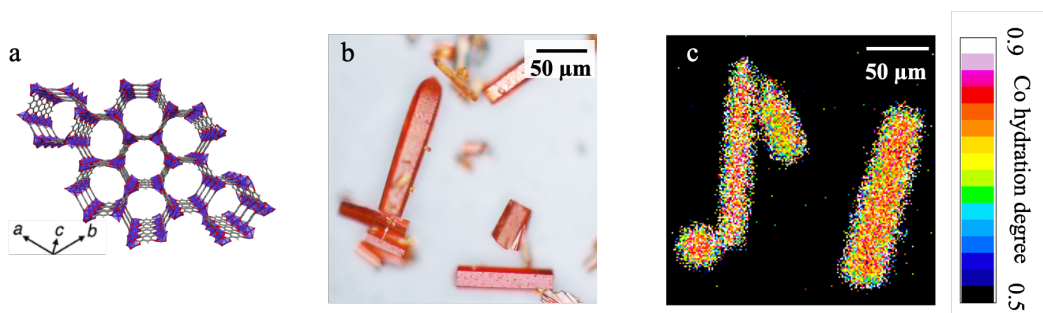


Fig. MOF-74Co の (a)結晶構造、(b)調製した試料像、(c) XANES フィッティングによって得られたキャピラリ内の結晶の水の吸着の二次元空間分布。