

MOF 結晶の表面構造制御による革新的分離材料開発

関西学院大学 理工学部 化学科
代表研究者 田中 大輔

研究要旨

従来の多孔性材料の研究では、細孔構造（細孔のサイズや細孔表面に存在する官能基の種類）を設計することで、分離や触媒などの機能発現を実現してきた。一方、吸着に伴い構造相転移を伴うある種の金属-有機構造体（MOF）では、吸着等温線に異常に大きなヒステリシスが観測される。ある種のゼオライトでも、吸着に伴い構造変化を示す物質が報告されているが、このような大きなヒステリシスは観測されない。

本研究課題では、構造柔軟な MOF のダイナミクスを制御するために、積極的に結晶表面の構造制御を行うことを目指した。本研究課題では、従来型の設計戦略と異なり、**内部細孔のみならず結晶表面の特性を精密に制御することで、高い再現性で吸着挙動を制御することを目指す**。従来、MOF に関する研究では、フレームワークの結晶構造（X 線結晶構造解析から知ることができる細孔サイズと細孔壁の化学構造）がゲスト分子の空間機能を支配するという、「結晶構造決定論」とも言うべき論調が支配的であった。しかし、本研究で開発を目指す表面構造が制御された MOF の合成では、結晶成長のプロセスを高度に制御する必要があるため、複雑な結晶化過程を解明して、合理的な合成戦略を確立する事が必要であった。

本研究で、我々は、2 種類の異なる架橋配位子を同時に混合した際に起こる複雑な MOF の形成過程を、マイクロ流路と放射光測定及び AFM 測定を用いて、世界で初めて解明することに成功した。特に、AFM による結晶表面の観察から、金属イオンと合成溶媒の組み合わせによりさらに、我々が確立した上記技術を活用することで、これまで全く未解明であった、複数金属種を節にもつ MOF の形成機構を解明し、反応メカニズムに基づいた材料開発の指針を探索した。