

令和 5 年 5 月 27 日現在

機関番号：24405

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2020～2022

課題番号：20H02575

研究課題名(和文)多孔性配位高分子のガス分子認識と吸着過程の構造変化の観測

研究課題名(英文) Gas recognition and observation of the structural change in adsorption process in porous coordination polymers

研究代表者

久保田 佳基 (Kubota, Yoshiki)

大阪公立大学・大学院理学研究科・教授

研究者番号：50254371

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 14,000,000円

研究成果の概要(和文)：多孔性配位高分子のガス吸着に伴う結晶構造の変化を放射光粉末回折法により調べた。多段の吸着等温線を持つCID-35のアセチレン吸着構造を明らかにした。ガス圧力増加に伴い、構造ユニットの間隔増加とスライド、ピラー分子の回転が連動して柔軟に骨格構造が変化し、さらにアセチレン分子間の相互作用も寄与して段階的な安定状態ができていると示唆された。また、CPL-1のCO<sub>2</sub>吸着におけるミリ秒オーダーの時間分解粉末回折実験を行い、吸着相の時間発展を動力学モデルで解析することにより、吸着初期に2段階の過程があることが分かった。以上のように多孔性配位高分子のガス吸着過程の構造変化に関する知見を得ることができた。

研究成果の学術的意義や社会的意義

多孔性配位高分子は骨格構造を変形しながらガス分子を取り込む点が極めて重要な性質である。回折法によりガス吸着前後の静的な結晶構造は明らかにされてきたが、ガス吸着過程の動的な結晶構造はほとんど解明されていない。本課題で時間分解粉末回折法によりガス吸着相の時間発展と同時に結晶構造の変化を捉えることができたことは大きな進展である。本研究の結果は、多孔性配位高分子の機能を理解し、さらに応用に繋げる上で有用な情報となり得る。例えば、圧力スイング法によるガス分離では、骨格構造の変形やリガンドの変化がどのように起こっているかを知ることにより、より優れたガス分離能を持つ物質の設計・合成に繋がると期待される。

研究成果の概要(英文)：In this study, structural changes of porous coordination polymers upon gas adsorption process were investigated by synchrotron powder diffraction. The acetylene adsorption structure of CID-35 with multi-step acetylene adsorption isotherms was determined. It was suggested that with increasing gas pressure, the framework changes flexibly accompanied with increasing spacing between structural units, sliding structural units, and rotation of pillar molecules. The interaction between acetylene molecules also contributes to the creation of a stepwise stable state. Millisecond-order time-resolved powder diffraction experiments on the adsorption of CO<sub>2</sub> on CPL-1 were performed, and the obtained time evolution of the adsorption phase was analyzed by a kinetic model, which revealed that there are two steps in the initial stage of CO<sub>2</sub> adsorption. As described above, we could obtain the knowledge on the structural changes in the gas adsorption process of porous coordination polymers.

研究分野：構造物性，結晶学，放射光科学

キーワード：多孔性配位高分子 MOF ガス吸着 放射光粉末回折法 結晶PDF解析

## 様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

多孔性配位高分子 (PCP: Porous Coordination Polymer / MOF: Metal-Organic Framework) は、金属イオンと有機配位子の配位結合により構成される骨格構造を持ち、ナノスケールの細孔が規則正しく配列した結晶物質である。細孔表面積が極めて大きく、高いガス吸着能を持つため、ガス分子の貯蔵や分離・精製など広範囲にわたる応用が期待されている。また、骨格構造を自在に設計し、合成することが可能であるという他の多孔性材料にはない魅力的な特徴を持つため、この20年ほどの間、膨大な数の新規PCPが合成され論文が創出されている。

PCPのガス吸着に関する研究において、ガス分子の吸着位置や配向、骨格構造を原子・分子レベルで明らかにし、ゲスト-ホストの相互作用を理解することが大変重要であることは言うまでも無い。研究代表者らのグループは世界に先駆けて、放射光によるPCPのガス吸着構造解析に着手し、2002年に酸素分子が細孔内で整列構造をとりながら吸着されている様子を世界で初めて明らかにした。この研究を契機にX線や中性子の回折法によるガス吸着構造解析が国内外の研究者により行われるようになった。しかしながら、未だにPCPの研究論文において、精緻な結晶構造情報に基づいた議論がスタンダードとはなっていないように見える。それはこの物質群の結晶構造解析に特有の難しさがあるためと考えられる。

骨格構造の柔軟性はPCPの最大の特徴であるが、ガスの吸脱着に伴う骨格構造の変化が大きいため単結晶は崩壊し、X線結晶構造解析ができないことが多い。一般的に粉末法によるPCPの結晶構造解析は容易ではないが、現在では高輝度かつ平行性の高い放射光X線の利用により、高い角度分解能と統計精度を持つ粉末回折データを比較的容易に得ることができる。また、解析法においてもCharge Flipping法や実空間法を用いて未知結晶構造解析が可能になってきた。これら実験法と解析法の両面の発展、相乗効果により粉末法による精密結晶構造解析は不可能ではなくなってきた。しかし、粉末結晶構造解析には、プロファイル関数やバックグラウンドの取り扱いなど、粉末法特有の問題がいくつかあり経験を必要とするため、本格的に粉末結晶構造解析を行う研究者は少ない。

PCPでは多くの場合、As-synthesizedの構造は単結晶構造解析により解かれ、骨格構造を構成する分子・原子の繋がりわかる。ここで、結晶格子の変化がわかれば、想像でガス吸着における構造変化のシナリオが書けるが、それが正しいという保証はない。骨格構造を構成する配位子分子がガスの吸脱着でどのように変化するのか、ガス分子がどこにどのように取り込まれているのか、骨格構造とどのように相互作用しているのかという基本的構造情報は、PCPの基礎研究として必ず解明する必要がある。

### 2. 研究の目的

本研究では、高輝度放射光を用いたX線回折実験による精密結晶構造解析と、X線全散乱実験によるPDF (Pair Distribution Function) 解析を駆使して、平均構造と局所構造の両側面からPCPのガス吸着構造を調べ、吸着開始時から飽和吸着に至るまでの骨格構造の変化を明らかにすることを目的とする。

高輝度放射光を用いた精密電子密度解析まで含めた粉末結晶構造解析は、申請者が得意としてこれまで行ってきた路線であるが、本研究では結晶PDF解析を組み合わせ、構造の乱れを調べる。PDF解析は、Bragg反射だけでなく、バックグラウンドの散漫散乱も含めた全散乱データから原子対の相関の情報を引き出し、局所的な構造の乱れを解析する方法である。この手法は結晶に限らず、非晶質に対しても局所構造の情報を得られるため、物質科学の様々な分野において適用されている。PCPに対して結晶PDF解析を適用した例はまだほとんどない。それはPCPの構造パラメータの数が多いことと、無機物に比べて結晶性がそれほど高くないため高いQの領域で回折ピーク強度が減衰してしまうことなどが原因と考えられる。PDF解析により得られた構造の乱れの情報は、粉末結晶構造解析にも反映することが可能であり、これまでのPCPの構造研究より一歩先に進んだ研究が展開できると期待される。

### 3. 研究の方法

粉末回折では、高い角度分解能と統計精度を持つ放射光粉末回折データを得て、Rietveld解析により構造精密化を行う。そして、MEM電子密度解析、静電ポテンシャル解析を行う。吸着等温線のデータに基づいて、特徴的な状態、すなわち、Degas状態、飽和吸着状態について定常状態の平均構造を明らかにする。測定するPCP試料については、予め高純度ガス/蒸気吸着量測定装置によりガス吸着量測定を行い、ガス吸着の条件を抑えておく。

粉末回折・全散乱データ測定はSPring-8のBL02B2のデバイセラー回折計を用いて行う。この回折計は多連装の一次元半導体検出器MYTHENと二次元のイメージングプレート(IP)の2種類の検出器を有する。そして、これらはガス・蒸気圧力制御(RGVPC: Remote Gas and Vapor Pressure Control)システムと同期し、吸着ガスの圧力を精密に制御して吸着等温線に対応した条件を作り、粉末回折・全散乱データを測定することができる。PDF解析用の全散乱データは、高

い Q 値の領域 ( $Q < 20 \text{ \AA}^{-1}$ ) をカバーするために、通常の測定データと湾曲 IP カセットを高角度側にずらして測定したデータをマージしてデータを得る。

結晶 PDF 解析により得られた局所構造と、粉末結晶構造解析により得られた平均構造という相補的な情報を併せて考えることにより、PCP 骨格構造がガス分子を認識し、どのような過程を経て飽和吸着に至るのかその過程の構造変化を可視化する。

#### 4. 研究成果

##### 4 - 1 . 多段の吸着等温線を示す Interdigitated 型 PCP のアセチレン吸着過程の観測

ガス吸着開始圧力の閾値を持つ Gate-Open 型吸着を示す Interdigitated 型の PCP、CID-35 (CID: Coordination polymer with interdigitated structure,  $[\text{Zn}(\text{pyda})(\text{dpe})]_n$  (pyda = 3,5-pyridine-dicarboxylate, dpe = 1,2-di(4-pyridyl)ethylene) のアセチレン吸着構造解析を行った。CID-35 のアセチレン吸着等温線は多段のステップを持ち、1、2、3、5 分子を吸着した安定な状態があることが示唆されている。この段階的な吸着の機構を明らかにするために、SPring-8 の粉末結晶解析 BL02B2 の RGVPC システムを用いて高分解能粉末回折のアセチレン吸着その場測定を行った。

図 1 に示す解析の結果得られた Degas 構造、2 分子、3 分子、5 分子吸着構造から、吸着量の増加に伴い、構造ユニットの間隔が広がるだけでなく相対的にスライドすると同時に、dpe ピラー分子の六員環が回転して細孔の空間を拡げていることが分かった。アセチレン分子は細孔表面の酸素や窒素と水素結合を形成し、ピラー分子の六員環と相互作用していることも示唆された。また、アセチレン分子間の相互作用が分子配向と吸着構造に影響していることも示唆された。以上より、ガス圧力上昇に伴い、構造ユニットの間隔増加やスライド、分子の回転が連動して柔軟に骨格構造が変化し、さらにアセチレン分子間の相互作用も寄与して段階的な安定状態ができていないのかと示唆された。また、CID-35 の類縁物質である CID-31:  $[\text{Zn}(\text{ipa})(\text{dpe})]_n$  (ipa=イソフタル酸) のアセチレン吸着構造解析も行った。CID-31 は CID-35 と配位子が 1 原子だけ異なる同型の結晶構造を持つが、アセチレンを 1 分子しか吸着しない。CID-31 のアセチレン吸着構造解析の結果から、シート状の ipa 分子とアセチレン分子間の  $\pi$ - $\pi$  相互作用や  $\pi$ -H 相互作用が CID-35 よりも強いことが示唆され、骨格構造が変形し難くなっているため吸着量が少ないと考えられた。これらの成果については、論文投稿予定である。

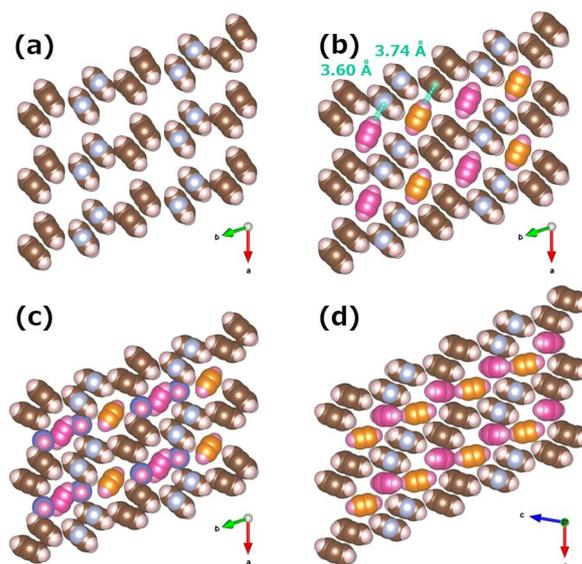


図 1 . CID-35 のアセチレン吸着構造 (a)Degas 相 (b) 2 分子吸着相 (c) 3 分子吸着相 (d) 5 分子吸着相において細孔が並んだ層を示している。

##### 4 - 2 . CPL-1 の CO<sub>2</sub> 吸着過程における静的および動的なガス吸着構造

CPL-1 (Coordination Polymer 1 with pillared-layer structure,  $\text{Cu}_2(\text{pzdc})_2(\text{pyz})_n$  (pzdc = pyrazine-2,3-dicarboxylate, pyz = pyrazine)) は pzdc 二次元シート構造を pyz 分子が架橋したピラードレイヤー型の PCP である。2002 年にその酸素吸着構造が放射光粉末 X 線回折法により初めて解明され、続いて H<sub>2</sub>、N<sub>2</sub>、Ar、CH<sub>4</sub> など様々なガス吸着構造が明らかにされた。しかし、当時 CO<sub>2</sub> 吸着構造は解明されず、現在に至るまで未解明であった。そして、これまでの我々の CPL-1 についての多数の回折実験の経験から、CO<sub>2</sub> は他のガスに比べて、吸着による構造変化に要する時間が長いことが分かってきた。これは、PCP がガス分子を認識する過程や、その後の拡散過程の違いを示唆しており、このようなガス吸着過程の違いを理解するためには、CO<sub>2</sub> 吸着過程に特有の挙動を把握することが重要と考えられる。本研究では、放射光粉末 X 線回折のガス吸着その場測定により、静的および動的なガス吸着構造解析を行い、CPL-1 の CO<sub>2</sub> 吸着現象と結晶構造変化の関係を明らかにすることを目的とした。

SPring-8 BL02B2 の RGVPC システムを用いて、高分解能粉末回折の CO<sub>2</sub> 吸着その場測定を行った。CO<sub>2</sub> 吸着相の回折ピークの位置や強度は、ガス導入後すぐに変化し始めるが、ほとんど飽和吸着量に達してからも少しずつ変化が続くことが分かった。そこで、ガス導入後十分に時間が経過し、完全に飽和吸着に達した状態でデータを取得することにより CO<sub>2</sub> 吸着構造の決定に成功した。この結果から、以前に構造解析が成功しなかったのは、完全に飽和吸着に達していない状態のデータであったためと想像される。

CPL-1 に吸着した CO<sub>2</sub> 分子は一次元細孔に平行に並んだ二量体を形成しながら整列していた。このような二量体の配列は、これまでに報告されている O<sub>2</sub> や N<sub>2</sub> などの棒状ガス分子の吸着構造と類似していた。一方、CO<sub>2</sub> 吸着は他のガスの吸着と比べて骨格構造の変化が大きく、細孔の

窓の形状が平行四辺形から長方形に近づくように変化しながら、細孔サイズが大きくなっていることが分かった。これは、CO<sub>2</sub>分子の大きさが他のガス分子と比べ大きく、取り込み時により大きく細孔を拡大する必要があるためと理解された。また、CO<sub>2</sub>の飽和吸着構造において、CO<sub>2</sub>分子間およびCO<sub>2</sub>分子と細孔表面はほとんど接触距離にあり、CO<sub>2</sub>分子は細孔内のほとんどの隙間を埋めていた。精密化された等方性原子変位パラメータからもCO<sub>2</sub>分子の位置は固定されており、細孔内でオーダーした構造をとっていることが分かった。一方、CO<sub>2</sub>分子は他のガス分子と比べて大きな電気四重極子モーメントを持っており、電気四重極子モーメント相互作用の観点からは2つのCO<sub>2</sub>分子が真横に並ぶ配列は望ましくないと考えられる。静電ポテンシャル解析を行ったところ、細孔表面に位置するピラジン分子およびカルボン酸にはそれぞれ正と負の電荷の偏りが観測された。CO<sub>2</sub>分子内にも電荷の偏りが観測された。そのため、細孔表面の周期ポテンシャルもCO<sub>2</sub>分子の位置や配向に強い影響を与えていることが示唆され、CPL-1においてはCO<sub>2</sub>分子の電気四重極子モーメント相互作用と細孔内の周期ポテンシャルから受ける力とのバランスでこのようなほぼ横並びの配列が実現していると考えられる。

CO<sub>2</sub>吸着が極端に長い時間を要することから、吸着過程の観測が重要であるとの認識を持ち、サブ秒オーダーの時間分解放射光粉末回折のガス吸着その場測定を行い、CPL-1のCO<sub>2</sub>吸着現象と結晶構造変化の相関について述べた。図2に示すように回折ピークのシフトや強度の変化から、参照試料として測定したAr吸着では、ガス導入後約5秒のうちにDegas相から吸着相単相への速やかな相変化が観測された。一方、CO<sub>2</sub>吸着ではガス導入後直ちに吸着相が現れたが、単相にはならず、Degas相と吸着相の二相混合状態のままゆっくり進行することが分かった。CO<sub>2</sub>吸着は約30秒後に80%の吸着が完了したが、その後も変化は続き、飽和吸着まで400秒以上を要した。

時間分解回折データから得られた吸着相の時間発展をAvramiの式を用いて解析したところ、CO<sub>2</sub>吸着の初期過程で2段階の吸着過程の存在が示唆された。このことからCO<sub>2</sub>吸着初期過程には何らかのエネルギー障壁が存在し、それは骨格構造の変化に関係していると考えられた。そこで、Degas構造とCO<sub>2</sub>およびAr吸着構造を比較し、ガス吸着過程の格子変化からガス吸着過程の相変化について検討した。Ar吸着における骨格構造の変化はあまり大きくないことが分かった。一方、CO<sub>2</sub>吸着構造はDegas構造から大きく変化しており、特にピラーリガンドが互いに離れる方向に細孔が変形していることが分かった。このとき、細孔窓の形は平行四辺形から長方形に近づくように変化し、細孔の空間を拡げていると考えられた。以上のことから、CO<sub>2</sub>分子が細孔内へ取り込まれる際には細孔の形を大きく変化させる必要があると推定され、これが吸着初期過程のエネルギー障壁の要因となっていると考えられた。吸着相の相分率がゆっくりと変化し続ける2段階目の過程では、CO<sub>2</sub>分子が細孔形状を少しずつ押し広げながら拡散し、最終的な飽和吸着相の分子配列に至る過程と考えられた。この非常に遅い変化は、CO<sub>2</sub>分子が細孔内に拡散する際の分子配向と最終的な安定配列が異なっている可能性を示唆している。

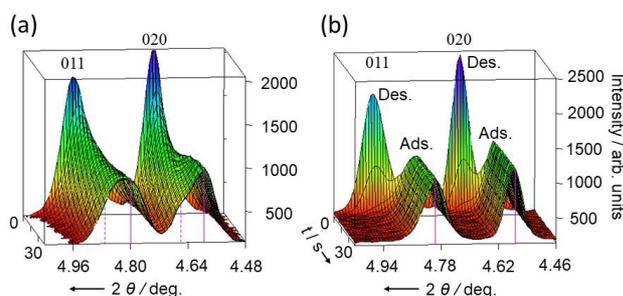


図2 . CPL-1の時間分解粉末回折データ  
(a) CO<sub>2</sub> 32 kPa, 195 K (b) Ar 32 kPa, 100 K

#### 4 - 3 . PCPのガス吸着過程における結晶PDF解析

多孔性配位高分子における構造の乱れの観測を目指し、SPring-8 BL02B2において、イメージングプレート(IP)検出器を用いて、高いQ値の領域( $Q < 20 \text{ \AA}^{-1}$ )までの全散乱データを測定した。しかし、期待どおりガスが吸着せず、本来の目的の測定に至らなかったことも幾度かあった。その原因の一つとして、回折測定前に細孔内ゲスト分子を取り除く加熱真空引きにおいて、処理温度が若干高く、結晶性が損なわれている可能性が挙げられる。これは、過去の論文においても指摘されており、本課題で購入した高精度ガス/蒸気吸着量測定装置を用いた吸着等温線測定からも示唆されたため、前処理条件の設定に注意が必要であることを認識した。

2022年秋よりSPring-8 BL13XUにおいてアンジュレータ光源を利用して高精度回折・全散乱データが測定できるようになった。また、実験の機会は少なく、目的の結晶PDF解析には至っていないが、統計精度が向上し、より時間分解能が高い粉末回折・全散乱測定も可能となった。PCPは軽元素を多く含むため、その散乱能が低いうえにガラスキャピラリと同程度であることが難しい理由の一つと考えられた。X線全散乱データでは特にガラスキャピラリのバックグラウンドの差し引きが肝心であると考えられ、現在もX線全散乱データの測定条件の検討が続いている。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計9件（うち査読付論文 9件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Wang Ping, Kajiwara Takashi, Otake Ken-ichi, Yao Ming-Shui, Ashitani Hirotaka, Kubota Yoshiki, Kitagawa Susumu	4. 巻 13
2. 論文標題 Xylene Recognition in Flexible Porous Coordination Polymer by Guest-Dependent Structural Transition	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 ACS Applied Materials & Interfaces	6. 最初と最後の頁 52144 ~ 52151
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.1c10061	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yao Ming-Shui, Wang Ping, Gu Yi-Fan, Koganezawa Tomoyuki, Ashitani Hirotaka, Kubota Yoshiki, Wang Zao-Ming, Fan Ze-Yu, Otake Ken-ichi, Kitagawa Susumu	4. 巻 50
2. 論文標題 A comparative study of honeycomb-like 2D $\pi$ -conjugated metal-organic framework chemiresistors: conductivity and channels	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Dalton Transactions	6. 最初と最後の頁 13236 ~ 13245
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d1dt02323c	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 KUBOTA Yoshiki, MORIYOSHI Chikako, NISHIBORI Eiji, KAWAGUCHI Shogo	4. 巻 64
2. 論文標題 Upgrade and Achievements at the Powder Diffraction Beamline in SPring-8	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Nihon Kessho Gakkaishi	6. 最初と最後の頁 17 ~ 25
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.5940/jcrsj.64.17	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 S. Kawaguchi, M. Takemoto, H. Tanaka, S. Hiraide, K. Sugimoto, and Y. Kubota	4. 巻 27
2. 論文標題 Fast continuous measurement of synchrotron powder diffraction synchronized with controlling gas and vapour pressures at beamline BL02B2 of SPring-8	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J. Synchrotron Rad.	6. 最初と最後の頁 616-624
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S1600577520001599	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 J. Manabe, K. Nishida, X. Zhang, Y. Nakano, M. Fujibayashi, G. Cosquer, K. Inoue, S. Shimono, H. Ishibashi, Y. Kubota, M. Shiga, R. Tsunashima, Y. Tatewaki, and S. Nishihara	4. 巻 10
2. 論文標題 Gas-Dependent Reversible Structural and Magnetic Transformation between Two Ladder Compounds	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Crystals	6. 最初と最後の頁 841(9 pages)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3390/cryst10090841	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mukoyoshi Megumi, Kobayashi Hirokazu, Kusada Kohei, Otsubo Kazuya, Maesato Mitsuhiko, Kubota Yoshiki, Yamamoto Tomokazu, Matsumura Syo, Kitagawa Hiroshi	4. 巻 57
2. 論文標題 Ni@onion-like carbon and Co@amorphous carbon: control of carbon structures by metal ion species in MOFs	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemical Communications	6. 最初と最後の頁 5897 ~ 5900
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/D1CC02154K	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Mukoyoshi Megumi, Maesato Mitsuhiko, Kawaguchi Shogo, Kubota Yoshiki, Cho Keigo, Kitagawa Yasutaka, Kitagawa Hiroshi	4. 巻 61
2. 論文標題 Systematic Tuning of the Magnetic Properties in Mixed-Metal MOF-74	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 7226 ~ 7230
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.2c00646	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Xue Ziqian, Zheng Jia Jia, Nishiyama Yusuke, Yao Ming Shui, Aoyama Yoshitaka, Fan Zeyu, Wang Ping, Kajiwara Takashi, Kubota Yoshiki, Horike Satoshi, Otake Ken ichi, Kitagawa Susumu	4. 巻 62
2. 論文標題 Fine Pore Structure Engineering by Ligand Conformational Control of Naphthalene Diimide Based Semiconducting Porous Coordination Polymers for Efficient Chemiresistive Gas Sensing	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Angewandte Chemie International Edition	6. 最初と最後の頁 e202215234
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/anie.202215234	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ashitani Hirotaka, Kawaguchi Shogo, Furukawa Hiromichi, Ishibashi Hiroki, Otake Kenichi, Kitagawa Susumu, Kubota Yoshiki	4. 巻 319
2. 論文標題 Time-resolved in-situ X-ray diffraction and crystal structure analysis of porous coordination polymer CPL-1 in CO <sub>2</sub> adsorption	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Solid State Chemistry	6. 最初と最後の頁 123796 - 123796
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jssc.2022.123796	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計10件 (うち招待講演 0件 / うち国際学会 5件)

1. 発表者名 H. Ashitani, S. Kawaguchi, H. Ishibashi, K. Otake, S. Kitagawa, and Y. Kubota
2. 発表標題 Kinetics in the gas adsorption process of porous coordination polymers by time-resolved X-ray powder diffraction measurement
3. 学会等名 XXV Congress of the International Union of Crystallography (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 S. Kawaguchi, M. Takemoto, K. Sugimoto, H. Ashitani, and Y. Kubota
2. 発表標題 Development of high-speed capillary spinner cell for in-situ powder diffraction under gas pressure control
3. 学会等名 XXV Congress of the International Union of Crystallography (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 芦谷拓嵩、河口彰吾、石橋広記、大竹研一、北川進、久保田佳基
2. 発表標題 多孔性配位高分子のガス吸着過程における格子変化と速度論
3. 学会等名 日本結晶学会令和3年(2021年)度年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 渡部友瑛、芦谷拓嵩、河口彰吾、大竹研一、細野暢彦、北川進、石橋広記、久保田佳基
2. 発表標題 多孔性配位高分子CID-35の段階的なアセチレン吸着機構に関する構造研究
3. 学会等名 日本結晶学会令和2年（2020年）度年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Makoto Hirofuji, Hirotaka Ashitani, Shogo Kawaguchi, Kenichi Otake, Susumu Kitagawa, Hiroki Ishibashi, and Yoshiki Kubota
2. 発表標題 Crystal structure analysis and gas adsorption measurement of CPLs
3. 学会等名 The 17th Conference of the Asian Crystallographic Association (AsCA2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hiromichi Furukawa, Hirotaka Ashitani, Shogo Kawaguchi, Hiroki Ishibashi, Yuichi Yokoyama, Masaichiro Mizumaki, and Yoshiki Kubota
2. 発表標題 Analysis of phase change in porous coordination polymer CPL-1 using Bayesian estimation
3. 学会等名 The 17th Conference of the Asian Crystallographic Association (AsCA2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hirotaka Ashitani, Shogo Kawaguchi, Hiromichi Furukawa, Kenichi Otake, Susumu Kitagawa, and Yoshiki Kubota
2. 発表標題 Dynamic structural measurement of CPL-1 during CO <sub>2</sub> adsorption process
3. 学会等名 The 17th Conference of the Asian Crystallographic Association (AsCA2022) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 廣藤誠、芦谷拓嵩、河口彰吾、大竹研一、北川進、石橋広記、久保田佳基
2. 発表標題 CPL系多孔性配位高分子のガス吸着測定と結晶構造解析
3. 学会等名 日本結晶学会令和4年度年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 古川裕陸、芦谷拓嵩、河口彰吾、石橋広記、横山優一、水牧仁一郎、久保田佳基
2. 発表標題 ベイス推定を用いた多孔性配位高分子CPL-1のガス吸着過程の観測
3. 学会等名 日本結晶学会令和4年度年会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 芦谷拓嵩、古川裕陸、河口彰吾、石橋広記、大竹研一、北川進、久保田佳基
2. 発表標題 CPL-1のCO2吸着過程における動的構造計測とCO2吸着構造の解明
3. 学会等名 日本結晶学会令和4年度年会
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	松田 亮太郎  (Matsuda Ryotaro)  (00402959)	名古屋大学・工学研究科・教授    (13901)	

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	河口 彰吾  (Kawaguchi Shogo)  (10749972)	公益財団法人高輝度光科学研究センター・回折・散乱推進室・主幹研究員    (84502)	
研究分担者	石橋 広記  (Ishibashi Hiroki)  (70285310)	大阪公立大学・大学院理学研究科 ・准教授    (24405)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関