



令和6年11月18日



平面分子の結晶に顕在化する包接空孔を利用した異性体分子の分離に成功
～ガスや石油などの分離に利用される新しい吸着・分離材料の創出へ～

論文掲載

【本研究成果のポイント】

・平面分子が形成する潜在的な包接空孔を利用した新しい選択的吸着・分離技術の開発

【概要】

広島大学大学院先進理工系科学研究科の構造有機化学研究室（小野雄大（広島大学持続可能性に寄与するキラルノット超物質拠点/WPI-SKCM² 研究員）・平尾岳大（准教授）・河田尚美（広島大学自然科学研究支援開発センター/N-BARD 技術職員）・灰野岳晴（教授））は、トリス(フェニルイソキサゾリル)ベンゼン^{*1}が分子間相互作用^{*2}により配列することで分子結晶中に形成される潜在包接空孔^{*3}を用いて、デカヒドロナフタレン（デカリン）のシス-トランス異性体^{*4}の選択的分離に成功した。本成果は、平面分子に潜在する包接空孔の新たな活用法として吸着・分離技術に新しい概念を提供するものであり、今後の発展が期待される。

研究成果は Springer Nature より出版されている「Nature Communications」（I.F.=14.7）の2024年9月27日オンライン版に掲載された。

【背景】

包接空孔を有する有機結晶は、熱源を必要としない省エネルギーな吸着分離技術として研究されてきた。この技術は省エネルギー性能が高いだけでなく、分留が困難な分子混合物を分離できる。しかし、このような包接空孔を提供できる分子は、明確な環構造を持つものに限られる。これは、選択的吸着分離を達成するためには、分子内に環状構造のような結晶化時に包接空孔を提供できる空間が必要であると考えられてきたからである。この制約を克服できれば、吸着分離技術における分子設計の幅が大きく広がり、新たな吸着分離材料の創出が期待される。

【研究成果の内容】

構造有機化学研究室のグループは、トリス(フェニルイソキサゾリル)ベンゼンの分子間相互作用により形成される積層構造に着目し、固体状態において積層構造間に潜在する空間を分子吸着に用いることができないかを検討した（図 1a）。その結果、様々な溶媒分子を結晶構造中に吸着できることがわかった（図 1b）。そこで、この結晶にデカリンのシス-トランス異性体混合蒸気を曝露し、吸着の選択性を調査したところ、シス-デカリンが選択的に吸着された（図 1c）。

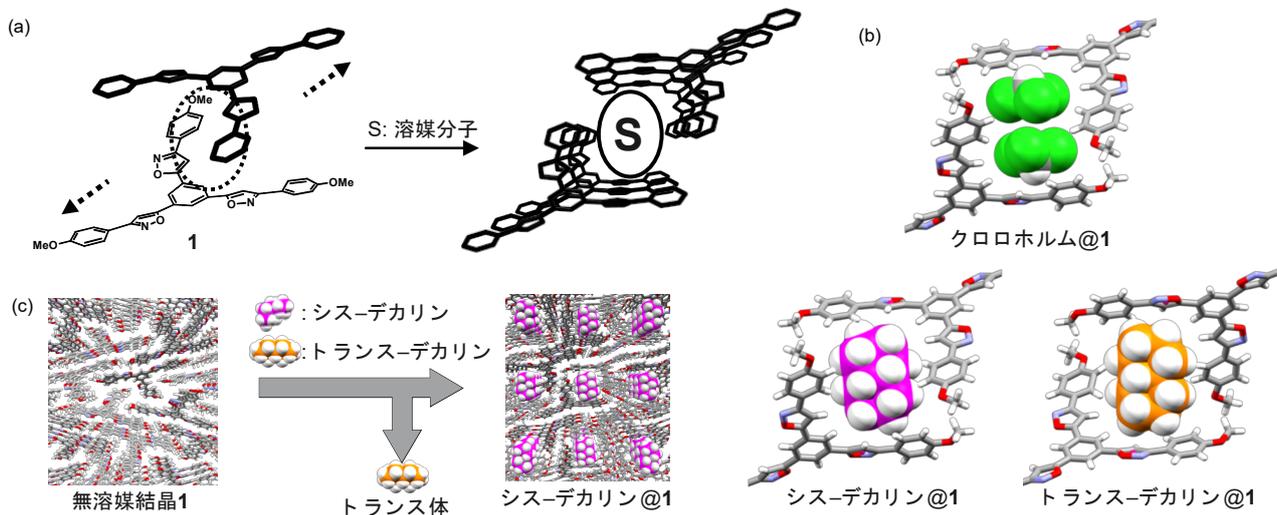


図 1. (a) トリス(フェニルイソキサゾリル)ベンゼンの分子間相互作用により形成される積層構造とその構造間に現れる空間 (b) トリス(フェニルイソキサゾリル)ベンゼンの形成する包接空孔に様々な溶媒分子を吸着した状態 (c) シス-選択的な吸着挙動の概念図

この結果は、分子が包接空孔を提供するために必ずしも環状構造をしないことを意味しており、単純な平面分子も、選択的吸着・分離に利用可能な包接空孔を提供できることを明らかにした。

【今後の展望】

今回の研究成果は、吸着・分離分野において、これまで注目されることのなかった平面分子を利用する新たな選択肢を提供するものである。既存の環状構造をもつ多孔性材料とは異なり、高い吸着性能と選択性を兼ね備えた、金属を含まない軽量の平面分子を基盤とする新しい吸着・分離材料の創出が期待できる。

【論文情報】

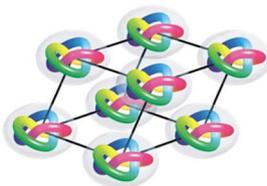
- ・ 論文題目 : Latent Porosity of Planar Tris(phenylisoxazolyl)benzene
- ・ 著者名
Yudai Ono^{1,2,†}, Takehiro Hirao^{2,†}, Naomi Kawata³, and Takeharu Haino^{1,2,*}
- 1. 広島大学持続可能性に寄与するキラルノット超物質拠点/WPI-SKCM²
- 2. 広島大学大学院先進理工系科学研究科 (化学プログラム)
- 3. 広島大学自然科学研究開発センター/N-BARD
- † These authors contributed equally to this work.
- * 責任著者
- ・ 掲載誌 : Nature Communications
- ・ 論文掲載日 : 2024 年 9 月 27 日 (公開は 2024 年 9 月 27 日)
- ・ DOI: 10.1038/s41467-024-52526-9

【用語解説】

- *1 トリス(フェニルイソキサゾリル)ベンゼン: 窒素と炭素、酸素で出来た五員環構造であるイソキサゾール環をもつ平面分子
- *2 分子間相互作用: 分子同士が引き合ったり反発したりする共有結合を介さない弱い力
- *3 包接空孔: 結晶内に存在する、分子を取り込むことが可能な空間
- *4 シス-トランス異性体: 二重結合している炭素につく置換基の位置の違いにより性質が異なる分子



World Premier International
Research Center Initiative



SKCM²
WPI HIROSHIMA UNIVERSITY

【お問い合わせ先】

大学院先進理工系科学研究科化学プログラム
教授 灰野岳晴（はいのたけはる）
Tel : 082-424-7426
E-mail : haino@hiroshima-u.ac.jp

大学院先進理工系科学研究科化学プログラム
准教授 平尾岳大（ひらおたけひろ）
Tel : 082-424-7138
E-mail : thirao@hiroshima-u.ac.jp

発信枚数：A4版 3枚

