

2021年3月18日

# Press Release 京都大学アイセムス（物質－細胞統合システム拠点）

## 二酸化炭素を捕捉しアセチレンの精製を可能とする 多孔性材料を開発

- ・アセチレンと二酸化炭素の混合ガスから、選択的に二酸化炭素を捕捉する材料を開発
- ・アセチレンガスを効率よく精製する技術に繋がる

京都大学アイセムス（物質－細胞統合システム拠点）の北川進拠点長・特別教授らの研究グループは、中国同済大学の研究グループと共同で、アセチレンと二酸化炭素の混合ガスから、選択的に二酸化炭素を捕捉する材料の開発に成功しました。

アセチレンガスは、合成樹脂、ゴム、繊維などの原料となることや、金属の切断・圧接などの金属加工の際の燃料に使われていることから、現代社会に欠かせない重要な化学原料の一つです。アセチレンは工業的には主に、石油に含まれる成分を熱分解（クラッキング）して得られる混合ガスから精製することで生産されています。この混合ガスにはアセチレン以外にも、様々な炭化水素ガスや二酸化炭素が含まれていて、その精製プロセスには莫大なエネルギーが消費されています。特に、アセチレンと二酸化炭素はその分子サイズや沸点などが同じくらいであり、性質が似ているため分離することが難しいガスの組み合わせとして知られています。これまでに知られている多くの吸着材では、アセチレンと二酸化炭素の混合ガスからはアセチレンが優先的に吸着されます。これはアセチレンが二酸化炭素よりも大きな静電相互作用<sup>1)</sup>を持ちやすいことによります。アセチレンの効率的な精製を行うために、アセチレン中に含まれる二酸化炭素を優先的に吸着するような“逆転吸着”を行う吸着剤の開発が望まれてきました。

本研究で開発した多孔性材料<sup>2)</sup>は、有機分子と金属イオンからなるジャングルジム状のネットワーク構造でできており、内部にナノサイズの微小な筒状の穴（細孔）を無数に持っています。今回、この筒状の細孔中にアミノ酸基を細孔中に規則的に配置することで、アセチレンと二酸化炭素の混合ガスから優先的に二酸化炭素を取り込む「逆転吸着」を示すことが分かりました。理論計算を用いて詳細にこの機構を詳細に解析したところ、導入したアミノ酸基が二酸化炭素とは親和的に相互作用する一方で、アセチレンの細孔中への導入が抑えられる原因を突き止めることに成功しました。実際に、50%の純度のアセチレンガス・二酸化炭素混合ガスを、今回開発した多孔性材料を詰めたカラムに通すだけで、99.5%以上のアセチレンに精製できることも実証できました。

これまで謎が多かったアセチレン/二酸化炭素の逆転吸着現象のメカニズムおよびその設計指針が解明されたことで、同様の性質を示す様々な素材の開発に繋がります。アセチレンを

始めとする様々なガスの分離や、精製と言った難しい問題を解決する新素材への応用が期待されます。

本成果は米国東部時間 2021 年 2 月 17 日午後 1 時（日本時間 17 日午後 9 時）に、ドイツ科学誌「*Angewandte Chemie International Edition*」オンライン版で公開されました。

## 1. 背景

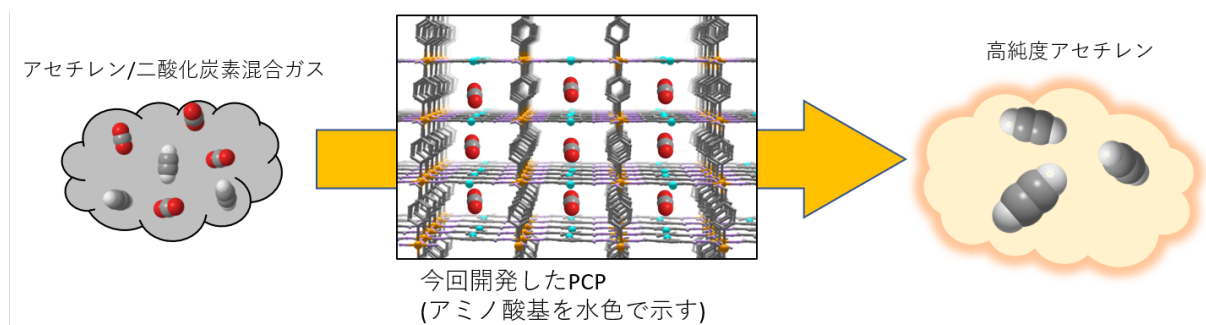
多孔性材料は、我々の身近なところで吸着、分離、貯蔵といった様々な目的で利用されており、その代表例が活性炭やゼオライトです。それらは細孔構造の緻密な設計が難しく、分子レベルでの戦略を持って構造をデザインすることはできないという問題点を抱えています。研究チームはこれまでに、多孔性材料の一種である、多孔性金属錯体<sup>3)</sup> (Porous Coordination Polymer: PCP または Metal-Organic Framework: MOF) について研究してきました。PCP は有機分子と金属イオンをパーツとした繰り返し構造をもつ結晶性の物質で、中には無数の小さい穴が規則正しく整然と並んでいます。PCP は一般的な多孔性材料と異なり、細孔の構造を設計することができ、有用な機能性を持たせることが可能です。

アセチレンは二酸化炭素よりも静電相互作用を起こしやすいという性質をもっています。その結果、従来の吸着剤では、アセチレンが二酸化炭素よりも優先的に吸着されることが知られています。そのため、アセチレンガスから二酸化炭素を除去したい際には、アセチレンガスを吸着剤に捕捉してから回収するための数段階のプロセスが必要となります。もしも、アセチレンと二酸化炭素の混合物から二酸化炭素だけを吸着できる「逆転吸着」材料が作り出せたら、アセチレンの精製のプロセスを大幅に簡略化・低エネルギーコスト化できることが期待できます。

こうした背景から、我々はアセチレンガスと二酸化炭素の混合ガスから二酸化炭素を優先的に吸着（逆転吸着）する新しい PCP の開発を目指しました。

## 2. 研究内容と成果

研究チームは、コバルトイオンとジ(4-ピリジル)グリコールと、2-アミノテレフタル酸もしくは 2-アミノイソフタル酸から、一次元状の細孔を無数に有する新しい PCP を合成しました。これらの細孔中では、アミノ酸が細孔の上下に位置する形で規則正しく並んでいます。導入したアミノ酸基が二酸化炭素とは親和的に相互作用する一方で、アセチレンの細孔中への導入が抑えるゲートのような役割をすることによって、アセチレンと二酸化炭素の混合ガスから優先的に二酸化炭素を取り込む“逆転吸着”を示すことが分かりました。実際に、50%の純度のアセチレンガス・二酸化炭素混合ガスを、今回開発した多孔性材料を詰めたカラムに通すだけで、99.5%以上のアセチレンに精製できることも実証できました。



---

### 3. 今後の展開

---

今回の成果により、現代社会に欠かせない重要な化学原料の一つであるアセチレンの精製にかかる効率を大幅に改善できる技術の実現に一步近づきました。

---

### 4. 用語解説

---

#### ※1 静電相互作用

分子間で働く電磁気学的な相互作用。全体的に中性な分子でも、電荷的な揺らぎによって局所的な帯電が生じている。こうした帯電によって生じる電荷が引き合うことによって、分子間での相互作用が生じる

#### ※2 多孔性材料

細孔が非常に多く空いている材料のことで、我々の身近なところで吸着、分離、貯蔵といった様々な目的で利用されており、その代表例が活性炭やゼオライトです。

#### ※3 多孔性金属錯体

有機物と金属イオンが相互に結合し、三次元的な格子構造を形成した結晶性の多孔性の化合物。数Åから数nmの無数の細孔を有し、その細孔に様々な小分子を取り込むことができます。この機能を利用し、ガスの分離や貯蔵、細孔内部でのイオンの輸送などといった応用研究が盛んに行われています。

---

### 5. 研究プロジェクトについて

---

本成果に関わる研究は日本学術振興会（JSPS）科学研究費補助金のサポートを受けて行われました。

---

### 6. 論文タイトル・著者

---

“Host-guest Interaction Modulation in Porous Coordination Polymers for Inverse Selective CO<sub>2</sub>/C<sub>2</sub>H<sub>2</sub> Separation”

（参考訳：多孔性金属錯体における二酸化炭素/アセチレンの逆転吸着分離を引き起こすための、ホスト-ゲスト相互作用の調整法）

著者：Yifan Gu, Jia-Jia Zheng, Ken-ichi Otake, Mohana Shivanna, Shigeyoshi Sakaki, Haruka Yoshino, Masaaki Ohba, Shogo Kawaguchi, Ying Wang, Fengting Li, Susumu Kitagawa  
*Angewandte Chemie International Edition* | DOI: 10.1002/anie.202016673