

大阪科学・大学記者クラブ 御中  
(同時資料提供先：文部科学記者会、科学記者会)



ハウスダストなど、有害化学物質の選択的除去に貢献

2022年5月13日  
大阪公立大学

## ナノサイズの孔の中で分子が整列する様子をリアルタイムで観察することに成功

### <ポイント>

- ・ 多孔質材料に分子が詰まっていく様子をリアルタイムで観察することに成功
- ・ 孔の中のような狭い空間で分子が整列する効果（オイルサーディン缶効果）を初めて実証
- ・ 環境有害物質の効率的な除去や触媒材料の開発に大いに貢献する可能性

### <概要>

大阪府立大学大学院 工学研究科の真下 理彩大学院生（博士前期課程 2年生）、大阪公立大学大学院 工学研究科の岡田 健司准教授、深津 亜里紗助教、Bettina Baumgartner 研究員、高橋 雅英教授らのグループは、多孔質材料に分子が詰まっていく様子をリアルタイムで観察することに成功しました。

ナノからメソサイズ（1 nm～50 nm 程度）の孔を大量に有する「多孔質材料」は、単位質量あたりの表面積が大きいことから、循環型社会を実現するキーとして環境有害物質（揮発性有機化合物<sup>※1</sup>（VOC）やCO<sub>2</sub>などのガス）の除去や材料合成時の触媒として利用されており、原発事故における放射性物質除去でも活躍したことで広く知られています。多孔質材料の中でも、金属有機構造体は、サイズのそろったナノ孔が規則正しく整列しており、表面積も非常に大きい（1gでサッカーグラウンド程度の表面積を示すものもある）ため、次世代の多孔質材料として注目されています。これまでの研究で、多孔質材料の小さな孔に特定の分子が捕獲できることは広く知られていましたが、分子が孔に入っていく様子や孔の中での配置については、放射光施設を用いた大規模実験を行わなければならない、実験的に解析することが非常に困難であり、高効率な分離・触媒多孔質材料の実現の課題となっていました。

そこで本研究グループは、汎用型の赤外分光装置に、三次元プリンターで作製した簡易なアタッチメントを実装した装置を用いて、金属有機構造体<sup>※2</sup>中に分子が入っていく様子と孔の中での分子の向きや場所を、リアルタイムで精密に検出することに成功しました。その結果、狭い孔の中に分子を詰めていくと、いわゆる「オイルサーディン缶効果：イワシの缶詰の中でイワシが整列するように、分子が向きをそろえて規則正しく並ぶことでナノ空間を有効に利用する効果」を実証しました（図1）。本研究成果により、ナノサイズの孔の中に分子が規則正しく並びながら詰まっていく様子が明らかになり、ハウスダストや大気汚染の原因となる有害物質のみをターゲットとした選択的除去や優れた触媒の開発に大いに貢献することが期待されます。

本研究成果は、2022年5月16日14時（日本時間）に国際学術誌『Angewandte Chemie International Edition』（IF=15.336）に掲載されました。

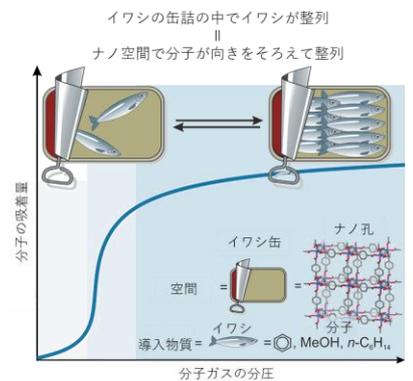


図1



真下 理彩大学院生

分子サイズの孔に「どのように分子が入っていく」、「どのように整列していくのか」を明らかにしたこの研究成果は、多孔質材料を研究しているすべての学生・研究者にとって関心が高いと思います。私自身、初めてこの現象を捉えたときは興奮して鳥肌が立ちました。この手法をベースにSDGs達成に貢献する高性能な多孔質材料の開発が期待されます！

## <研究の背景>

循環型社会の実現や環境問題への意識がこれまでになく高まる中、循環型社会を実現するために重要な材料の一つとして「多孔質材料」が大きな注目を集めています。分子サイズの「孔」を有する材料は、その「孔」のサイズと化学組成に依存して特定の分子を選択的に吸着する特性を有しています。

「孔」が多いため、CO<sub>2</sub>などの温室効果ガスや揮発性有機化合物（VOC）などを大量に吸着・固定化することができ、環境改善に広く利用されています。表面積が異常に大きいことも重要な特徴で、高比表面積材料として工業上重要な合成触媒あるいは触媒担持体としても広く利用されています。このように、多孔質材料は現代社会に欠くことのできない重要な材料となっており、その高効率化や高機能化が求められていました。

高性能な多孔質材料を実現する上で課題となっているのが、「孔」が小さすぎて「どのように分子が入っていくのか」や「孔の中での分子の向き」などの情報が実験的に測定できないことでした。これまでコンピューターシミュレーションを用いた間接的な手法か、放射光施設などを用いた大規模実験を複数種類行って推測するしかなく、分子が吸着する様子をリアルタイムで簡便に測定できれば、多孔質材料の研究が加速し、高機能化が加速されることで、SDGsの達成が加速できると期待されていました。

## <研究の内容>

本研究グループは、赤外光吸収分光法を用いることで孔の中の分子を簡便かつ高効率に検出できることに着目し、偏光した赤外光を用いることで多孔質材料中の分子の配向を検出できることを2021年に報告しました（次頁<参考>）。

本研究では、偏光赤外分光法<sup>\*3</sup>を分子吸着法と融合することで、リアルタイムにナノ孔に分子が吸着していく様子や孔の中での分子の配置や向きの情報を得る手法を新たに開発しました（図2）。測定したいガスの分圧を調整できるチャンバーを用いたガス吸着測定と偏光赤外分光法を同時に行うことで、分子の吸着挙動のリアルタイム測定に成功しました。その結果、吸着量が小さい段階では孔の中でランダムに存在している吸着分子が、吸着量の増大に伴って徐々に孔の形を反映した向きにそろっていく様子の観察に成功しました。イワシの缶詰の中でイワシが整列するように、分子が向きをそろえて規則正しく並ぶことでナノ空間を有効に利用するいわゆる「オイルサーディン缶効果」を実験的に実証しました。

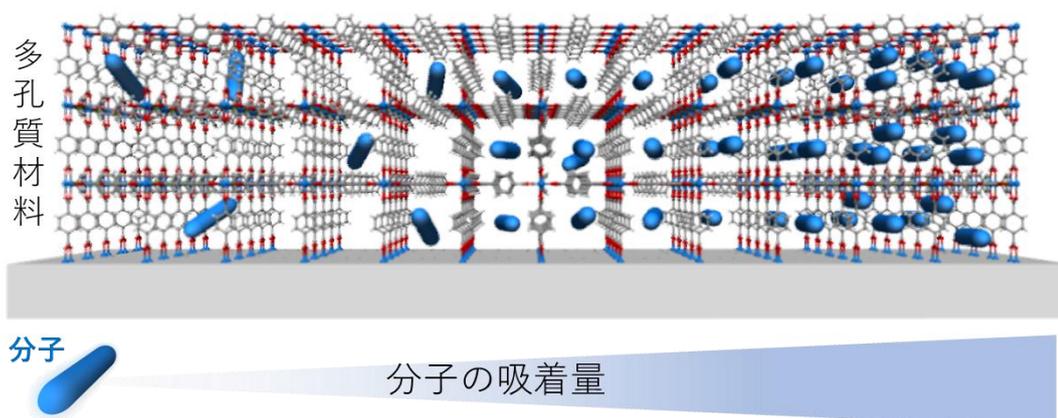


図2：孔の中での分子の配置や向きの様子。吸着量が小さいときは孔の中で分子の向きはそろわない（左）が、吸着量の増大に伴って徐々に孔の形を反映した向きにそろっていく（右）。

## <期待される効果・今後の展開>

多孔質材料を用いた環境材料では、「いかに多くの分子を吸着するか」と「吸着分子の分解や反応を制御するか」が重要な課題となります。今回の新しい測定法の開拓により、分子が孔に入っていく様子や孔の中での存在状態をリアルタイムで可視化できることになり、環境材料の高機能化の研究が大いに活性化することに寄与します。また、孔の中の分子がユニークな向きに向いていることが新たに判明し、固体表面における分子吸着の新たな知見も提唱できました。汎用装置

を用いて手軽に測定できるため、大学や企業における材料研究の現場で大いに活躍することが期待できます。赤外分光装置は小型化されているため、フィールドワークに持参して農場、ジャングルや極地などの極限環境でのその場測定も可能となります。環境問題の解決に貢献する重要な成果であると考えています。

### <資金情報>

本研究は、科研費（基盤研究 A「金属有機構造体による配向薄膜の基礎学理の確立と応用開拓」課題番号：20H00401）、JST さきがけ研究（「熱輸送のスペクトル学的理解と機能的制御」領域、「結晶性ナノ多孔質材料を用いた熱輸送の理解と能動的制御」課題番号：JPMJPR19I3,）、JSPS 外国人特別研究員（課題番号：PE20025）、泉科学技術振興財団 研究助成、北海道大学触媒科学研究所 共同利用・共同研究事業からの助成を受けて行われました。

### <用語解説>

#### ※1 揮発性有機化合物

常温常圧で大気中に容易に揮発する有機化学物質の総称であり、トルエン、ベンゼン、フロン類、ジクロロメタン等を指す。Volatile Organic Compounds（略称 VOC）

#### ※2 金属有機構造体

有機配位子と金属クラスターの間で錯体形成を行うことにより、金属原子が互いに有機部位で架橋された構造を有する周期性の高いマイクロ多孔性の結晶性化合物である。Metal Organic Framework（略称 MOF）

#### ※3 偏光赤外分光法

赤外分光法とは測定対象の物質に赤外光を照射し、透過（あるいは反射）光を分光することでスペクトルを得て、対象物の特性を知る方法である。光は波長の性質から交流電場・磁場を生じるが、電場振動の振動方向がそろった光を「偏光」といい、赤外光の波長の偏光を偏光赤外光と称する。

### <参考>

- ・実験の説明動画を以下 URL で紹介しています。

<https://youtu.be/wfzIVMDfGMM>

- ・2021年6月18日発表（大阪府立大学プレスリリース）

「迅速かつ安価に構造を決定する手法を実現！偏光赤外光×アクセサリで結晶中の分子や化学結合の向きを解明！—有機デバイスの開発加速や夢の高集積デバイスの実現へ期待—」

<https://www.osakafu-u.ac.jp/press-release/pr20210618/>

### ■掲載誌情報

【発表雑誌】 Angewandte Chemie International Edition (IF=15.336)

【論文名】 Guest Alignment and Defect Formation during Pore Filling in Metal–Organic Framework Films

【著者】 Bettina Baumgartner, Risa Mashita, Arisa Fukatsu, Kenji Okada, Masahide Takahashi

【論文 URL】 <https://doi.org/10.1002/anie.202201725>

#### 【研究内容に関する問い合わせ先】

大阪公立大学大学院 工学研究科  
教授 高橋 雅英  
T E L : 072-254-9309  
MAIL : masa[at]omu.ac.jp  
[at]の部分>@と差し替えてください。

#### 【報道に関する問い合わせ先】

大阪公立大学広報課  
担当：長谷川  
T E L : 06-6605-3411  
MAIL : koho-upco[at]list.osaka-cu.ac.jp  
[at]の部分>@と差し替えてください。