

京都大学教育研究振興財団助成事業
成果報告書

2023年7月19日

公益財団法人京都大学教育研究振興財団
会長 藤 洋作 様

所属部局・研究科 工学研究科

職名・学年 助教

氏名 大谷 俊介

助成の種類	令和5年度・国際研究集会発表助成			
研究集会名	第17回大環状および超分子化学国際会議 (ISMSC2023)			
発表形式	<input type="checkbox"/> 招待 ・ <input type="checkbox"/> 口頭 ・ <input checked="" type="checkbox"/> ポスター ・ <input type="checkbox"/> その他(
発表題目	Size-selective capture and extraordinary storage of halogenated organic compounds by molecular-scale cavities of crystalline pillar[n]quinones			
開催場所	アイスランド・レイキャビック			
渡航期間	2023年6月25日～2023年6月29日			
成果の概要	タイトルは「成果の概要／報告者名」として、A4版1枚程度・和文で作成し、添付して下さい。「成果の概要」以外に添付する資料 <input checked="" type="checkbox"/> 無 <input type="checkbox"/> 有()			
会計報告	交付を受けた助成金額	350,000 円		
	使用した助成金額	350,000 円		
	返納すべき助成金額	0 円		
	助成金の使途内訳 (差し支えなければ要した 経費総額をご記入ください)	費目	金額 (円)	
		航空運賃	318,220	
		宿泊費(一部)	27,603	
		滞在費(or日当)		
学会参加費				
その他(現地交通費)	4,177			
以上に助成金を充当				
当財団の助成について	(今回の助成に対する感想、今後の助成に望むこと等お書き下さい。助成事業の参考にさせていただきます。)この度は助成いただきましてありがとうございます。国際研究集会への参加および発表を通じて貴重な経験を得ることができました。申請書の作成や手続きも簡潔にさせていただいており、大変ありがたく思います。			

成果の概要 / 大谷俊介

【学会の概要】

今回参加した大環状および超分子化学国際会議 (ISMSC2023) は、1977年の初開催から数えて第17回目にあたる。本年は世界各地から500名以上の環状分子、超分子化学を専門とする化学者が参加した。また、開催期間中にノーベル化学賞受賞者を初めとした当該分野をけん引する著名な研究者による基調講演や2件の受賞講演、47件の招待講演、20件の口頭発表、その他392件のポスター発表が行われた。口頭発表は1会場のみで行われているため、一つ一つの講演をじっくり聴講することができ、大変有意義な会となった。ポスター発表は発表時間以外も閲覧できる状態になっており、コーヒブレイク中なども活発な議論が行われていた。懇親会においては研究者だけではなく、世界的に著名な学術誌のエディターも参加しており、論文投稿について貴重な話を聞くことができた。

【発表の概要】

発表形式：シンポジウム (ポスター)

発表題目：Size-selective capture and extraordinary storage of halogenated organic compounds by molecular-scale cavities of crystalline pillar[*n*]quinones

大気中に拡散したハロゲン系有機化合物は、環境や人体に有害な影響を及ぼすため、強い毒性を持った有害物質として認知されている。そのため、大気中から分離・回収するための技術の開発が望まれている。これまで、活性炭やゼオライト、金属有機構造体 (MOF) などの多孔質材料がハロゲン系有機化合物の吸着に活用されてきた。一方でこれらの多孔質材料は空孔サイズ (>1 nm) が大きいため選択性に乏しく、容易に脱着してしまうという問題点があった。そこで我々は環状分子が持つÅレベルでの空孔が、これらの有害物質の吸着や安定貯蔵に利用できるのではないかと着想した。本研究では、ベンゾキノンを構成単位とした環状分子であるピラー[*n*]キノン (P[*n*]Q) が、結晶状態においてフッ素化炭化水素ガスや揮発性ハロゲン有機化合物の蒸気を選択的に捕捉可能であることを見出した。このとき、P[*n*]Qは分子レベルで小さな空孔を持つため、フッ素化炭化水素ガスの吸着において明確なサイズ選択性を示すことが明らかになった。興味深いことに、P[5]Qの空孔内に吸着された揮発性ハロゲン有機化合物は、空孔内部で1:1のホスト-ゲスト錯体を形成することによって強く束縛されており、揮発性が大幅に低下することがわかった。このことからP[*n*]Qの分子レベルでの空孔は貯蔵性能の向上に寄与することが明らかになることができた。さらに、フーリエ変換赤外分光法 (FT-IR)、固体核磁気共鳴分光法 (NMR)、分子動力学 (MD) シミュレーションを用いた解析の結果、結晶性P[5]Qの優れた吸着・貯蔵性能は、電子不足の環状骨格による静電的な相互作用に加えて、カルボン酸部位で形成される水素結合に起因したものであることがわかった。本学会で発表することにより、同様の分子を扱う研究者と意見交換を行うことができ有意義な機会となった。