

メソポーラスシリカ内の水溶液の構造とダイナミクス

福岡大理

吉田亨次

Structure and dynamics of solutions confined in mesoporous silica

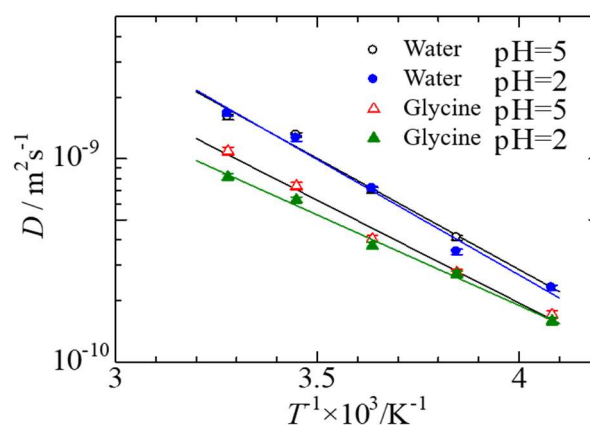
Dept. of Chem. Fukuoka Univ.

K. Yoshida

近年のナノテクノロジーの発達に伴い、ナノ空間（ナノチャネル、ナノチューブ、ナノポア等）に閉じ込められた流体を利用した物質やエネルギー輸送（物質の分離精製やエネルギー貯蔵も含む）や環境に負荷をかけない化学合成などが注目されている[1]。これら細孔内の流体の性質は閉じ込め効果や細孔壁との相互作用によりバルクとは異なっており、マクロな物性値を用いた流体力学や連続体近似では細孔内の流体の挙動を説明できない。分子レベルでの観測に基づく新たな流体理論の確立が望まれる。細孔特性を利用した分離精製技術である高速液体クロマトグラフィーは化学・工学・薬学等の分析分野で広く利用されている。溶離液に溶存している溶質は溶媒分子だけでなく、細孔壁との相互作用を受け、その溶媒和構造は複雑である。

本研究では、制限空間内のモデル溶質分子としてグリシンを用いた。グリシンは最も単純な生体分子であるが、アミノ基とカルボキシル基を持ち、pHの違いにより異なる電荷の平衡状態が存在する。この電荷の違いが細孔水に及ぼす影響を明らかにするためにメソ細孔シリカ（MCM-41 C18; 細孔径 3.6 nm）にグリシン水溶液を閉じ込め、グリシンおよび水のダイナミクスを中性子準弾性散乱(QENS)でそれぞれ明らかにした[2]。図はグリシンおよび水の拡散係数の温度依存性である。MCM-41 中のグリシン分子の拡散の活性化エネルギーは pH=5 の場合(19.3 kJ/mol)が pH=2 の場合(17.0 kJ/mol)よりも大きい。一方、水分子では pH=2 の場合(21.8 kJ/mol)が pH=5 の場合 (20.9 kJ/mol)より大きくなった。この結果から pH=5 の時のグリシン分子は細孔表面近傍に位置しており、シラノール基と相互作用していると考えられる。

[1] C. Sun *et al.*, *J. Phys. Chem. Lett.* **11**, 4678–4692 (2020). [2] K. Yoshida, *et al.*, *J. Chem. Phys.* **149**, 124502 (2018).



図：MCM-41 中のグリシンおよび水の拡散係数