

# 石炭分子工学の確立： 超分子構造の解明とその制御に基づく革新的利用技術の開発

## Molecular Engineering of Coal: Supramolecular Structure and Novel Utilization Technology

(研究プロジェクト番号：JSPS-RFTF 96R14801)

プロジェクトリーダー

飯野 雅 東北大学反応化学研究所・教授

コアメンバー

富田 彰 東北大学多元物質科学研究所・教授

野村 正勝 大阪大学大学院工学研究科・教授

林 潤一郎 北海道大学エネルギー先端工学研究センター・助教授



### 1. 研究目的

石炭は石油、天然ガスと比して埋蔵量が圧倒的に多く、世界に広く分布している。従って、エネルギー供給源としての石炭の役割は大きい。しかし、石炭が極めて複雑な化学構造を有しており、その化学構造には未だに分らない点が多い。これが石炭を効率的、クリーンに利用する技術の開発を遅らせている。本プロジェクトは未だ不明な点が多い石炭構造、特に分子間相互作用に基づく超分子構造（分子集合体構造）の解明を行い、さらにそれに基づく高効率・高選択的な革新的石炭利用プロセスの設計・開発を行うこと及び石炭のような複雑な超多成分から成る混合系の科学と言う新しい学問分野を創ることを目的として下記の研究を行った。

- (1) 石炭の分子（一次）構造解明
- (2) 超分子構造（会合相互作用による高次構造）解明
- (3) 超分子構造制御を目的とした前処理
- (4) 超分子構造制御に基づく高効率・高選択のプロセス設計
- (5) 超多成分・複雑系の化学と工学の開拓

### 2. 研究成果概要

#### (1) 石炭の分子（一次）構造解明

固体NMR、酸素官能基解析の新しい手法を用いて炭素骨格と酸素官能基に関して従来法より信頼性の高いデータを取得した。

#### (2) 超分子構造解明

石炭中の会合相互作用の研究として図1、2に示すように *in situ* IR による石炭中の6種の水素結合の強さとその量的分布の評価<sup>1)</sup>と透過型電子顕微鏡による石炭の芳香環積層構造の観測<sup>2)</sup>に世界で初めて成功した。石炭分子の会合挙動を石炭抽出率および抽出物の溶解度に及ぼす添加物の影響（図3）<sup>3)</sup>とコンピューターシミュレーション（図4）<sup>4)</sup>から明らかにした。

#### (3) 超分子構造制御を目的とした前処理

超分子構造を特徴付ける8種のパラメータを設定し、熱および溶媒処理により超分子構造の変化を明らかにした。石炭の600K

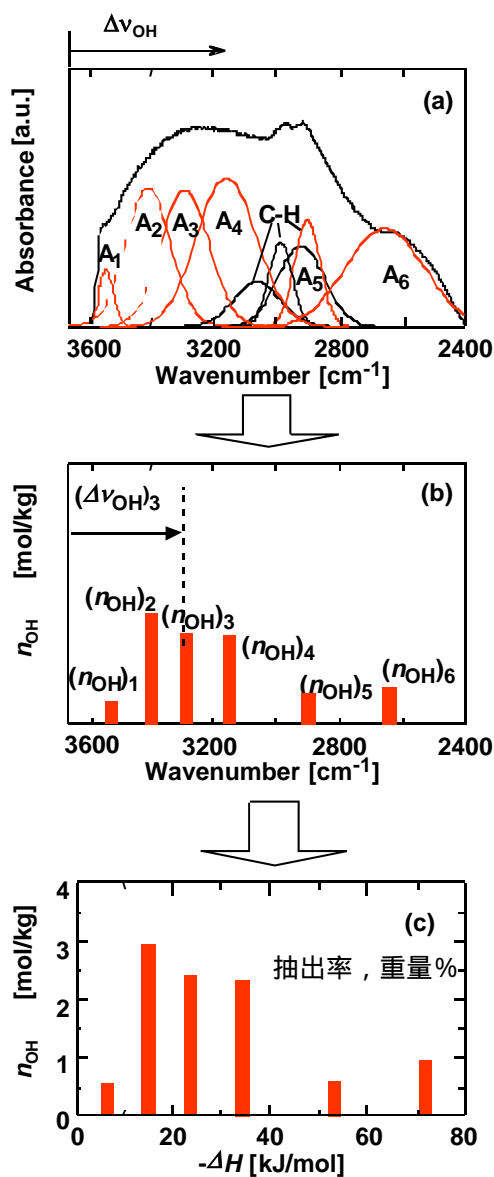


図1 本プロジェクトで提案された石炭の赤外吸収スペクトルから石炭中の水素結合の強度分布を評価する手順

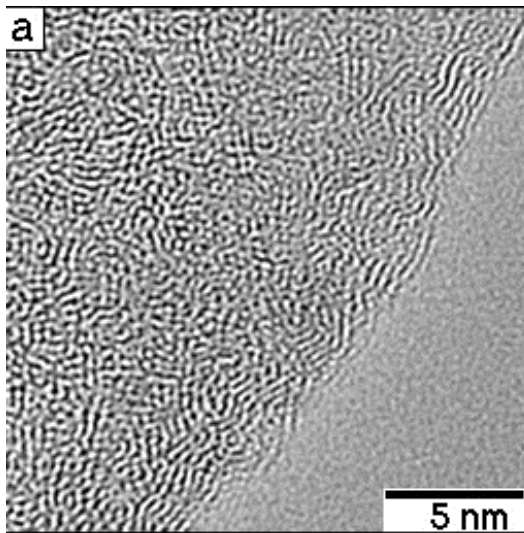


図2 石炭の高分解能透過型電子顕微鏡写真

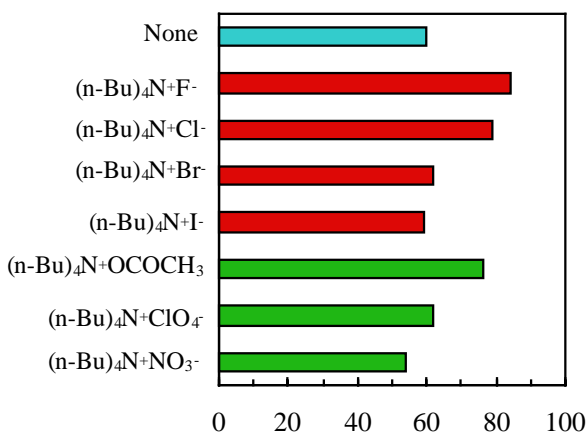


図3 石炭の抽出率に及ぼす種々の塩の添加効果

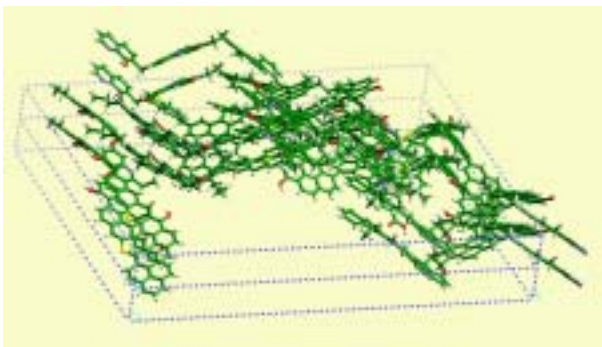


図4 コンピューターシミュレーションにより構築された石炭の超分子構造モデル

における水処理で超分子構造の変化による抽出率の大きな増加が見られた。これは高効率石炭利用プロセスの開発に結びつく結果である。

**(4) 超分子構造制御に基づく高効率・高選択的プロセス設計**

石炭の熱分解及び液化の反応性の前処理による変化を検討した。

**(5) 超多成分・複雑系の化学と工学の開拓**

石炭分子溶液の熱力学の研究として石炭抽出物 - 溶媒混合物が分子間相互作用により

ゲルを形成することを見いだした。

**3. 結論**

石炭の超分子構造の解明とパラメーター化を行い、溶媒、熱処理により超分子構造が制御できることを明らかにした。特に水処理の結果は石炭の新規高効率・高選択的プロセスの開発に結びつくものである。超多成分・相互作用系の化学についてもいくつかの重要な知見が得られた。

**主な発表論文**

- (1) K. Miura, K. Mae, W. Li, T. Kusakawa, F. Morozumi and A. Kumano: "Estimation of Hydrogen Bond Distribution in Coal through the Analysis of OH Stretching Bands in Diffuse Reflectance Infrared Spectrum Measured by in-Situ Technique," *Energy Fuels*, 15(3) (2001) 599-610.
- (2) A. Sharma, T. Kyotani and A. Tomita: "A New Quantitative Approach for Microstructural Analysis of Coal Char Using HRTEM Images," *Fuel*, 78(10) (1999) 1203-1212.
- (3) K. Takahashi, K. Norinaga, Y. Masui and M. Iino: "Effect of Addition of Various Salts on Coal Extraction with Carbon Disulfide/*N*-Methyl-2-pyrrolidinone Mixed Solvent," *Energy Fuels*, 15(1) (2001) 141-146.
- (4) T. Takanohashi, K. Nakamura and M. Iino: "Computer Simulation of Methanol Swelling of Coal Molecules," *Energy Fuels*, 13(4) (1999) 922-926.