

佐々木雪和  
デザイン情報コース  
自然応用化学

## 1. 背景と目的

環境保全に対する関心が高まり続けるなか、広く普及している石油系燃料に焦点が当たるとは少なくない。これらの燃料には硫黄化合物が含まれていて、燃焼させると大気汚染物質の硫黄酸化物が発生するためだ。

対策のひとつに、予め燃料から硫黄を取り除く「脱硫」がある。当研究室で研究を行ってきた「酸化脱硫法」では、酸化という過程を経て化合物の性質（沸点や極性等）を変化させる。酸化生成物はもとの化合物とは異なる性質を持っているため、その差を利用して、例えば蒸留や抽出などの方法で分離することが容易になる。

これらの性質のうち、極性とは分子内の電子の偏りをいう。分子を構成する原子にはそれぞれ電子を引きつける力があり、力の大きさは構造や種類によって変わる。その数値をここでは双極子モーメントと記しており、大きいほど極性は強くなる。硫黄化合物の数値をあげると、ジベンゾチオフェン(DBT)では1.5であり、小さいながらも極性を持っている。

これに対して、石油系燃料油の大部分を占めている炭化水素の極性は、0に近い。したがって、極性のない炭化水素から、極性のある硫黄化合物を抽出するとき、極性のある溶媒が有

用と考えられる。

本研究の目的は、極性溶媒を用いた、模擬軽油からの硫黄化合物の抽出の可能性について検討を行うことである。

## 2. 実験方法

実験は以下の手順で実施した。

- (1) フラスコにDBT100mgとヘキサン10gの混合物、所定量の極性溶媒を入れ、室温で30分間、磁気による攪拌を行う。
- (2) 静置して二層に分離させた後、上層であるヘキサンの部分を別の容器にとり、内部標準物質100mgを加える。さらにアセトン10gを加えてよく攪拌する。
- (3) ガスクロマトグラフを用いてヘキサン中に残存したDBTの量を求め、抽出率と、抽出能力の指標となる分配係数を計算する。

溶媒は、極性溶媒であることと、炭化水素溶媒と混ざり合わないことを要件として、9種を選定した(表1)。

溶媒の極性を示すパラメータの一つである双極子モーメントは、分子軌道計算ソフトChem3D(ver.20) GAMESS 3-21G法を用いて計算した。

## 3. 結果

まず、ヘキサン10gに対し、極性溶媒5gを用いて抽出実験を行った。結果を表1および図1に示す。抽出率はいずれの溶媒

を用いても49%を超えており、抽出率をもとに計算した分配係数は2から12という結果となった。この結果は、極性溶媒を用いると炭化水素から硫黄化合物を選択的に抽出可能であることを示している。溶媒の種類でみると、アミド系および尿素系の溶媒の抽出能力が高いことがわかる。特に、アミド類を含む、双極子モーメント4.2~4.7の溶媒を用いた場合、分配係数が大きくなった。

続いて、使用する極性溶媒の量を変化させた場合の抽出率への影響について検討した。n-ヘキサンの量を10gに固定し、極性溶媒の量を1~10gに変えて抽出実験を行ったところ、極性溶媒の量が多いほど抽出率は向上した。また、この範囲で分配係数はおおよそ一定になった。

## 4. 結論

極性溶媒を用いた石油系燃料油モデルからの硫黄化合物の抽出実験を行い、以下に示す結論を得た。

- (1) 極性溶媒を用いて抽出を行った結果、使用したすべての溶媒で硫黄化合物を抽出可能であり、その際の分配係数は2を超えることがわかった。
- (2) 用いた極性溶媒の双極子モーメントと相関があり、双極子モーメントが4.2~4.7程度の溶媒が最も効果的であることがわかった。

溶媒種別	溶媒名称	略号	D.M.	抽出率	分配係数
ニトリル	アセトニトリル	MeCN	3.9	52	2.2
エステル	炭酸プロピレン	PC	5.4	75	6.0
	γ-ブチロラクトン	GBL	6.3	49	1.9
スルホキシド	ジメチルスルホキシド	DMSO	4.9	71	4.9
アミド	N,N-ジメチルアセトアミド	DMAc	4.0	67	4.1
	N,N-ジメチルホルムアミド	DMF	4.2	78	7.2
	N-メチルピロリドン	NMP	4.3	86	12
尿素	N,N'-ジメチルプロピレン尿素	DMPU	4.6	83	9.8
	1,3-ジメチル-2-イミダゾリジノン	DMI	4.7	84	11

表1) 極性溶媒によるn-ヘキサンからのDBTの抽出  
※D.M.: 双極子モーメント

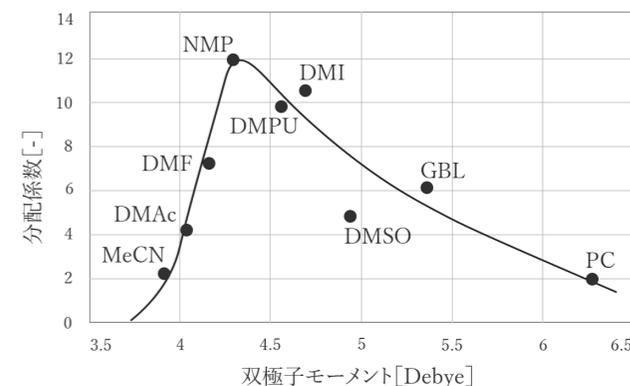


図1) モデル燃料油からのDBTの抽出と溶媒の双極子モーメントとの関係 (分配係数が大きいほど、抽出能力は高い)