

## 配位構造が制御された亜鉛イオンを活性中心に有する二酸化炭素水和触媒の開発

(大阪大学基礎工学部<sup>1</sup>・太陽エネルギー化学研究センター<sup>2</sup>・大阪大学院基礎工<sup>3</sup>) ○ 山本 泰暉<sup>1</sup>・加藤 慎太郎<sup>3</sup>・原田 隆史<sup>2</sup>・神谷 和秀<sup>2,3</sup>・中西 周次<sup>2,3</sup>

Development of the novel CO<sub>2</sub> hydration catalysts composed of single Zn centers (<sup>1</sup> Osaka University Engineering Science, <sup>2</sup> Osaka university Research Center for Solar Energy Chemistry, <sup>3</sup> Osaka University Graduate School of Engineering Science) ○ Hiroki Yamamoto<sup>1</sup>, Shintaro Kato<sup>3</sup>, Takashi Harada<sup>2</sup>, Kazuhide Kamiya<sup>2,3</sup>, and Shuji Nakanishi<sup>2,3</sup>

Carbon capture utilization and storage (CCUS) technologies have attracted much attention to maintain a closed carbon cycle. An efficient catalyst for CO<sub>2</sub> hydration/bicarbonate dehydration (CH/BD) reactions is expected to be an essential component for the CCUS technics. In natural systems, carbonic anhydrases with Zn-histidine complexes as the cofactor can facilitate these reactions. However, the studies on developing abiotic catalysts are limited, and the design guideline has not been established.

In the present work, we attempted to develop efficient artificial catalysts composed of single Zn atoms coordinated with N doped graphene and organic ligands and evaluate their catalytic CH/BD reaction activities. In the presentation, in addition to experimental results, we will also discuss the reaction mechanism using the first principle calculations

*Keywords : Carbonic anhydrase, Carbon dioxide hydration reaction*

大気中の CO<sub>2</sub> ガスの高効率な回収・資源化技術の開発は人類が取り組むべき喫緊の課題である。CO<sub>2</sub> の水和およびその逆反応である炭酸の脱水反応を高速に進めることができる触媒は、新たな CO<sub>2</sub> 回収プロセスの重要な要素技術になると期待される。生物は亜鉛-ヒスチジン錯体を活性中心に有する炭酸脱水酵素により、これらの反応を高効率に進めることが知られている。しかし、人工系においてこれらの反応を高速に進める触媒材料はほとんど研究されておらず、その設計指針すら確立していない。本研究では亜鉛錯体および単一亜鉛イオン担持ナノカーบอนをモデル触媒に用い、実験および計算化学を用いた反応速度解析を行うことで、高効率な CO<sub>2</sub> の水和/炭酸脱水触媒の設計指針を得ることを目的とした。