

Flexible PCP/MOF が示すゲート吸着を活用した吸着分離プロセス

(京大院工) ○平出 翔太郎

(Department of Chemical Engineering, Kyoto University) ○Shotaro Hiraide

Flexible porous coordination polymers or metal-organic frameworks (PCPs/MOFs) exhibit the adsorption-induced structural transition so-called “gate-opening” behavior. The gate-opening effect induces stepwise change in the amount adsorbed at a specific gas pressure, which engenders larger working capacities and higher selectivities than the conventional adsorbents do. This presentation introduces our recent research progress toward the implementation of adsorption separation processes using flexible PCPs/MOFs.

Keywords : *Flexible PCP/MOF; Gate Adsorption; Adsorption Separation Processes*

構造柔軟性を有する PCP/MOF は、骨格構造の変形を伴うステップ状の吸着挙動を示す。この現象はゲート吸着と呼ばれ、吸着成分の容易な脱着回収に加え、ゲート圧のガス種依存性に起因する高いガス選択性といった利点を有する。我々のグループでは、このゲート吸着に関する理論的な研究に長く取り組んでおり、特に ELM-11^[1]と呼ばれる銅錯体の CO₂ 吸着を対象とした検討を進めてきた。そして、蓄積してきた熱力学的知見をもとに、ELM-11 を用いた圧力スイング吸着分離プロセス (PSA) が、従来材料を用いた場合に比して飛躍的に高効率であるという試算結果を近年報告している^[2]。これは、Flexible PCP/MOF による吸着分離の有用性を定量的に示した初の成果であると自負しているものの、あくまで理想条件を仮定した『試算』に留まる。すなわち、真の意味で吸着分離における Flexible PCP/MOF の優位性を明らかにし実用化に繋げるためには、物質・熱移動を頭に考慮した PSA シミュレーションとその実証実験が必須である。しかしながら、Flexible PCP/MOF の PSA シミュレーションに至るまでには、解決すべき課題がいくつか存在する。例えば、吸着速度式には実圧と平衡圧の差を推進力とした線形推進力近似を用いるのが通例であるが、この出处は Fick の拡散方程式である。構造転移しなければ細孔が存在しない Flexible PCP/MOF に果たして本式が適用可能であろうか。また、物質・熱移動定数の決定には破過曲線測定結果との整合が必須であるが、その実験のためには、粉末状サンプルの成形が求められる。しかし、ゲート吸着は体積膨張を伴うため、その賦形方法には工夫が必要である。実際、高分子バインダーによる成形を試みたところ、バインダー量が少なすぎると吸着による微粉化が避けられず、逆に多すぎるとゲート吸着によるステップ状の吸着量変化が緩慢になるという不可解な現象を確認している^[3]。本講演ではこれらの問題に対する我々の最新の取り組みについて紹介する。

[1] A. Kondo *et al.*, *Nano Lett.* **6**, 2581–2584 (2006).

[2] S. Hiraide *et al.*, *Nat. Commun.* **11**, 3867 (2020).

[3] S. Hiraide *et al.*, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13**, 30213–30223 (2021).