金属有機構造体における二酸化炭素の拡散挙動に関する理論的解析

（千葉工大院工）〇井上 友希・山本 典史

Theoretical Insights of the Diffusion Behavior of CO_2 in Metal-Organic-Frameworks

(*Grad. Sch. Eng., Chiba Tech.*)〇Yuki Inoue, Norifumi Yamamoto

Metal-Organic-Frameworks (MOF) is a functional porous material consisting of metals and organic compounds. One of the most distinctive features of MOF is its conformational flexibility. The molecular adsorption concentration in MOF can be controlled by altering the pore size according to the concentration of guest gas molecules. Thus, MOF has become a potential technology for the efficient separation and recovery of CO_2, a factor contributing to global warming in the present study, we have studied the CO_2 diffusion behavior in MIL-53, a typical MOF, using molecular simulations. There is no generic molecular force field to adequately describe the structural flexibility of MOFs. Therefore, in this study, molecular dynamics (MD) simulations were performed by building a molecular force field based on quantum chemical calculations.

Keywords : MOF(Metal-Organic-Frameworks); Molecular Dynamics ; QuickFF

有機金属構造体（MOF）は、多孔質材料の一種であり、金属と有機配位子で構成される。MOF の特徴として、「柔軟に構造変化すること」が挙げられる。MOF は、ゲスト分子の濃度に応じて細孔径が変化するため、その吸着量を制御することが可能であり、地球温暖化の要因である CO_2 を分離・回収するための技術として期待される。

本研究では、代表的な MOF である MIL-53 中における CO_2 の拡散挙動について、分子シミュレーションを用いた解析に取り組んだ。現状では、MOF の構造柔軟性を適切に記述するための汎用的な分子力場はない。本研究では、量子化学計算に基づいて分子力場を *ad hoc* に作成することで、分子動力学（MD）計算を実行した。量子化学計算には Gaussian 16、分子力場の作成には QuickFF、MD 計算には LAMMPS を用いた。下表に示すように、MOF 中における CO_2 の拡散定数の値について、今回作成した分子力場を用いて得られた結果は、MOF の構造を固定した剛体モデルに比べて、約 150 倍小さくなっていた。柔軟モデルの場合、CO_2 の濃度に応じて細孔径が小さくなるように変化したことで、ゲスト分子の拡散が阻害されたと考えられる。

表 1　柔軟モデル及び剛体モデルで記述した MOF 中の CO_2 の拡散係数

	柔軟モデル	剛体モデル
拡散係数 (m^2/s)	2.055×10^{-9}	1.300×10^{-7}

1) Lamar, A. A., Nicholas, K. M., *J. Org. Chem.* **2010**, *75*, 7644.

© The Chemical Society of Japan