

選択的 CO₂ 吸着のための孤立空間の設計

(東工大理¹・ENEOS (株)²) ○嶋田 光将¹・Pavel Usov¹・和田 雄貴¹・大津 博義¹・渡邊 卓²・松本 隆也^{1,2}・河野 正規¹

Design of Isolated Spaces for Selective CO₂ Adsorption (¹*School of Science, Tokyo Institute of Technology*, ²*ENEOS Corporation*) ○Terumasa Shimada,¹ Pavel Usov,¹ Yuki Wada,¹ Hiroyoshi Ohtsu,¹ Taku Watanabe,² Takaya Matsumoto,^{1,2} Masaki Kawano¹

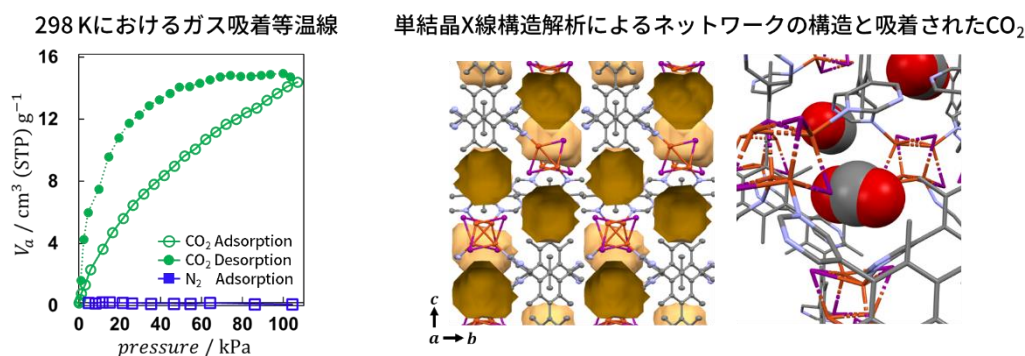
In this work, a novel porous coordination network was synthesized by combining a tetrahedral¹ ligand and copper(I) iodide. Although the network has isolated pores with no clear exterior access, it was able to selectively adsorb CO₂ at rt and maintain it for more than one week while exposed to atmosphere, as revealed by adsorption isotherms, IR spectra, and single crystal X-ray diffraction measurements. Furthermore, we determined the adsorption energy of CO₂ and its diffusion mechanism throughout the network using MatlantisTM, a high-speed versatile atomic-scale simulator. The calculations helped explain the adsorption mechanism, which was in good agreement with the experimental results. In conclusion, a novel design strategy for CO₂ sorbents based on isolated spaces was proposed.

Keywords : Metal-Organic Frameworks; Gas Adsorption; Carbon dioxide; X-ray Structure Analysis; Deep Learning

本研究では四面体型の配位構造¹⁾を持つピリミジン配位子とヨウ化銅(I)の組み合わせにより、新規の細孔性ネットワーク錯体を合成した。ネットワークは細孔として外部との接点を持たない孤立空間のみを有していたにもかかわらず、室温でCO₂を選択的に吸着し、加えて、空気中で1週間以上CO₂を貯蔵可能であることが吸着等温線およびIRスペクトル、単結晶X線回折の測定によって明らかになった。

さらに、汎用原子シミュレーターMatlantisTMを用いて、CO₂のネットワークに対する吸着エネルギー、およびネットワーク中のCO₂の拡散経路を計算した。それにより孤立空間へのCO₂の吸着メカニズムが説明され、実験結果との良い一致を示した。

以上から、孤立空間を利用したCO₂吸着材の新たな設計戦略を提案する。



1) Xiu-Liang Lv, Shuai Yuan, Lin-Hua Xie, Hannah F. Darke, Ya Chen, Tao He, Chen Dong, Bin Wang, Yong-Zheng Zhang, Jian-Rong Li, and Hong-Cai Zhou, *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 26, 10283–10293