

## 構造応答性を利用した高選択的二酸化炭素吸着材料の開発

京都大学 高等研究院 物質-細胞統合システム拠点 特定拠点准教授 大竹 研一

工場や発電所、化学プラントなどから排出される産業ガスには、二酸化炭素(CO<sub>2</sub>)に加えて、窒素、水素、酸素、水蒸気など多様な気体が混在する。これらの混合ガスの中からCO<sub>2</sub>のみを低エネルギーで選択的に分離・回収する技術は、地球温暖化対策と産業プロセスの高度化の両面から強く求められている。しかし、CO<sub>2</sub>は他の小分子ガスと比べて分子サイズが中程度であり、相互作用も特別に強くないため、吸着材料を用いた吸着分離法によって混合ガス中から“CO<sub>2</sub>のみ”を選択的に回収することは依然として困難であり、従来は除湿などを含む数段階の分離工程を経る必要があった。本研究では、金属有機構造体(Metal-Organic Framework: MOF)と呼ばれる結晶性多孔性材料に着目し、CO<sub>2</sub>を高選択的に吸着し、かつ低エネルギーで脱着可能な新規CO<sub>2</sub>吸着分離材料の開発に取り組んだ。MOFは、内部にナノメートルサイズの空間を持ち、その構造や化学環境を分子レベルで設計できる特長を有する。特に本研究の最大の特長は、ガスの種類や圧力に応じて骨格構造が可逆的に変化する「構造応答性」を活用した点にある。

本研究に置いて開発した材料は、分子サイズが類似した他の気体には応答せず、混合ガス中のCO<sub>2</sub>のみを選択的に吸着する。この特異な挙動は「排他的識別ゲーティング(Exclusive Discriminatory Gating: EDG)効果」と名付けた。さらに、この高い選択性は単なる吸着相互作用の

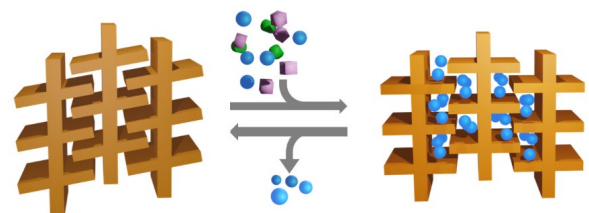


図. 混合ガス中からCO<sub>2</sub>のみを選択的に取り込む、排他的吸着特性を示す構造応答性MOF

強さによるものではなく、分子の拡散特性と材料骨格の構造変形が協奏的に作用することで生じることで発現することを明らかにした。本効果は、従来の吸着材料では達成が困難であった高精度な分子識別を可能にするものである。こうして得られた設計指針は、他の難分離混合系への応用展開も期待され、今後の分離材料設計に新たな指針を与えるものである。この成果は、*Nature Communications* 誌(2023年、Vol. 14, 4245)に報告し、日本経済新聞電子版等でも報道された。

### 【実用化が期待される分野】

- 発電所・工場排ガスからの省エネルギーCO<sub>2</sub>回収(CCUS)
- 天然ガス、水素製造、化学プロセスにおけるガス精製
- 従来分離が困難であった分子種を対象とした新規分離技術の開発

## 研究の現状と将来

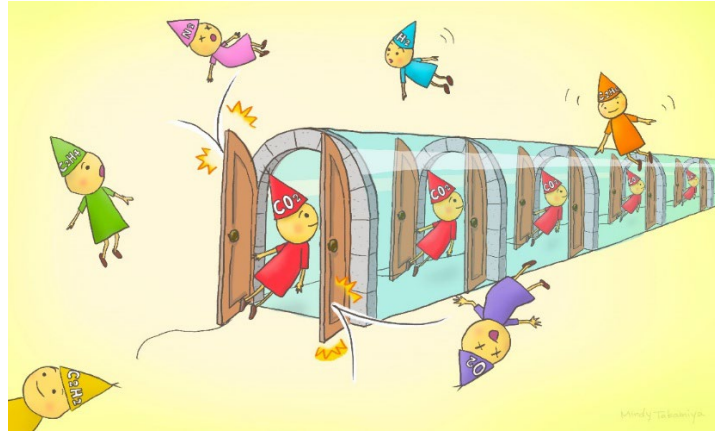


図 1. 本研究で開発した、特定のガス( $\text{CO}_2$ )にのみ応答してゲートが開き、分子の透過を許容する高選択的細孔を有する吸着材料の構造イメージ図。



図 2. 将来展望：省エネルギー分離技術の開発による  $\text{CO}_2$  リサイクルによる低環境負荷型循環社会の実現（画像生成 AI により作成）