

CO₂を原料とした多孔性配位高分子の合成とCO₂吸着材としての応用

CO₂ Adsorption by Porous Metal–Organic Frameworks Constructed from CO₂

京都大学 高等研究院 物質－細胞統合システム拠点 堀毛 悟史

研究成果概要

本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、二酸化炭素(CO₂)を原料とした有機金属構造体(Metal–Organic Framework、以下 MOF)の形成機構等、解析を行った。MOF は金属イオンと架橋配位子から構成される結晶性材料である。本研究では、CO₂、CO₂と結合して架橋配位子となるピペラジンなどの環状ジアミン、亜鉛イオンから MOF を合成し、ガス吸着材としての機能を評価した。

上述の原料をもとに合成した MOF の構造を同定するために、スーパーコンピュータシステムの X 線結晶構造データベース検索(Cambridge Structural Database 使用)を行った。検索結果及びリートベルト解析結果から、CO₂、ピペラジン、亜鉛イオンからなる MOF は、ベンゼン-1,4-ジカルボン酸と亜鉛イオンからなる既報の MOF (MOF-5)と同様に面心立方構造(*Fm3m*)を有し、内部細孔を有する3次元的フレームワークを形成していることが明らかとなった。さらに、*S*-(+)-2-メチルピペラジン、*R*-(-)-2-メチルピペラジン、*trans*-2,5-ジメチルピペラジンを原料とした場合も、同様の構造が得られることがわかった。本情報をもとに、固体 NMR、EXAFS、熱重量分析、赤外吸収などの測定を進め、MOF のさらなる同定を行った。さらに骨格に組み入れた CO₂ の安定性をスーパーコンピュータシステムを利用した計算により推察し、その高い熱安定性が高次骨格の形成によることを明らかとした。

本 MOF は内部細孔を有することから、ガス吸着材となることが期待される。そこで、25 °C、2.6 MPa 加圧下で CO₂ 吸着測定を行ったところ、用いた MOF の重量に対し最大 37 wt%の CO₂ が吸着されることがわかった。MOF 自体も CO₂を原料として得られることから、本 MOF は「CO₂ 由来の CO₂ 吸着材」であり、今後温室効果ガス削減に役立つ技術として期待できる。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

“One-Pot, Room-Temperature Conversion of CO₂ into Porous Metal–Organic Frameworks”

Kentaro Kadota, You-lee Hong, Yusuke Nishiyama, Easan Sivaniah, Daniel Packwood, Satoshi Horike*, *J. Am. Chem. Soc.*, 2021, 143, 16750–16757.