

多能性細孔物質の深化

Development of multifunctional porous materials

京都大学 高等研究院 物質－細胞統合システム拠点 北川グループ

大竹研一

研究成果概要

多孔性物質は、古代エジプト時代(例:活性炭)から現代に至るまで、人類の生活において重要な役割を果たしてきた。特に、活性炭やゼオライトに代表される多孔性材料は、貯蔵、分離、変換といった機能を担い、現代社会に不可欠な存在となっている。これら既存材料を凌駕する、あるいは全く新しい機能を有する多孔性物質を開発できれば、人類の生活に革新的な変化をもたらすことが期待される。その実現には、微小空間を有する物質の合成、構造、物性に関する新たな科学の開拓が不可欠である。

我々は、金属有機構造体(Metal-Organic Framework: MOF)と呼ばれる結晶性多孔体を基盤として、多様な機能空間の設計および新規現象・機能の探索に取り組んできた。MOF は均一な細孔構造を有し、さまざまな気体分子を吸着・取り込む特性を示す。さらに、一部の MOF はガス吸着に伴って結晶格子が可逆的に変形する「フレキシブル」な性質を有し、いわゆるゲート型吸着挙動を示すことが知られている。近年、世界中で多様な MOF が開発され、特定のガス分子に対する特異的なゲート型吸着挙動が数多く報告されている。しかしながら、その詳細な機構については未解明な点が依然として多い。ゲート型吸着挙動を本質的に理解するためには、格子変形エネルギーとガス吸着エネルギーの双方を統合的に考慮する必要がある。

本研究では、京都大学化学研究所のスーパーコンピュータシステムを利用し、MOF の結晶構造に基づいてガス分子の吸着サイトを予測するとともに、ゲート開閉前後におけるエネルギー変化および吸着エネルギーの評価を行った。具体的には、ゲート型吸着を示す MOF を対象として、Material Studio の DMol³ パッケージを用いた密度汎関数法(LDA, VWN)による構造最適化を実施した。その後、Adsorption Locator パッケージを用い、Simulated Annealing 法に基づくモンテカルロ探索によりガス吸着サイトを同定した。さらに、MOF 細孔内における van der Waals 相互作用は、Lennard-Jones (LJ) ポテンシャルを用いて評価した。

得られた吸着構造を基に、一般化勾配近似(GGA, PBE)による一点計算を行い、エネルギーを算出することで、MOF における格子変形エネルギーと吸着エネルギーの関係を明らかにした。これにより、ゲート型吸着挙動の起源に対する理解を深めることを試みた。本研究で得られた知見は、MOF を基盤とした選択的吸脱着を利用する将来のガス分離・貯蔵技術の設計指針として、有用であると期待される。