

第15回 北陸銀行若手研究者助成金 研究実績報告書

氏名	所属・職名		助成金額
栗原 拓也	理工研究域物質化学系・助教		700,000 円
研究課題名	湿潤雰囲気下における金属-有機構造体の CO ₂ 吸着メカニズムの解明		
研究の概要	<p>金属-有機構造体 (MOF) は多孔性を活かした CO₂ 分離材料としての利用が期待されているものの、そのほとんどが水分子の吸着によってガス吸着能が著しく低下する欠点を有し、材料の実用化における問題点の一つとなっている。水分子存在下でも CO₂ を吸着できる MOF も少数報告されているが、その吸着メカニズムは明らかでない。本研究では、どのような構造や特性の MOF が湿潤雰囲気下において CO₂ を吸着できるのかを理解すべく、固体 ¹³C および ²H NMR による CO₂ および D₂O の動的な吸着状態の解析を通じた、吸着メカニズムの解明を目指した。</p>		
研究の成果	<p>比較的狭い細孔を持ち、水分子より CO₂ を高い選択性で吸着するとされる UTSA-16、および一度水を吸着した状態から特定の CO₂ 圧力で構造転移を伴い CO₂ を吸着する MIL-53 の 2 種類の性質の異なる MOF を対象とした。UTSA-16 では、CO₂ 下および重水加湿 N₂ 下に静置した時間に対する吸着量の増加を NMR 信号強度より評価したところ、D₂O の方が吸着平衡に向かう速度が遅いことが明らかとなった。²H スペクトルの線形解析より、狭い細孔中で D₂O が詰まって拡散が妨げられ吸着が進行しないことが示唆された。湿潤雰囲気下での CO₂ 分離には細孔の狭い MOF の利用が有効な可能性がある。今後は重水加湿 CO₂ 下で同様の実験を行い、CO₂ と D₂O の吸着が競合した状態での評価を行う。MIL-53 では、先に D₂O を吸着させた状態から CO₂ 圧力を上げつつ NMR 測定を行い、¹³C および ²H スペクトルの圧力変化を解析した。CO₂ 吸着を伴う構造転移は 1MPa 付近から見られたが、それ以下でも少量の CO₂ の吸着が観測された。線形解析より、転移圧以下では CO₂ と D₂O が競合吸着し、それによって一定量の D₂O の吸着が弱まることで MOF の構造変化が生じ多量の CO₂ が取り込まれることが明らかとなった。今後は共同研究を通じ、量子化学計算による吸着エネルギー変化の評価など定量的な解析を加え、より詳細なメカニズムの理解を試みる予定である。</p>		
研究成果発表状況	<p>曾利惟恵、栗原拓也、雨森翔悟、重田泰宏、井田朋智、水野元博「ガス雰囲気下固体 NMR 測定による金属 - 有機構造体 MIL-53 の CO₂ 吸着メカニズムの解析」第 62 回 NMR 討論会 (2023 年 11 月)</p>		
経費の執行状況	費目	事項 (主な使用事項を記載)	執行額 (円) (費目毎総額を記入)
	物品費	¹³ CO ₂ ガス、重水、ガス雰囲気下固体 NMR 実験用設備、試薬	482,820
	旅費	学外実験、学会参加	217,180
	人件費・謝金	なし	
	その他	なし	