

中央大学特定課題研究費 ー研究報告書ー

所属	理工学部	身分	教授
氏名	森 寛敏		
NAME	Hirotoishi MORI		

中央大学特定課題研究費による研究期間終了に伴い、中央大学学内研究費助成規程第15条に基づき、下記のとおりご報告いたします。

1. 研究課題

電子状態インフォマティクスによるCO₂吸収性深共晶溶媒の迅速設計

2. 研究期間

2021・2022年度

3. 費目別収支決算表

掲載省略

4. 研究の概要（背景・目的・研究計画・内容および成果 和文 600字程度、英文 50word程度）

（和文）

環境・エネルギーに対する意識の高まりにより、CO₂ 吸収液の開発が国内外で盛んに行われている。だが、当該分野で開発されてきたイオン液体・アミン液体は、それぞれ精製コスト・揮発毒性における課題があり、日常生活への CO₂ 吸収液の普及は進んでいない。本研究課題では、イオン液体に代わるグリーンソルVENTとして、深共晶溶媒の研究開発を提案する。深共晶溶媒とは、「水素結合ドナー性」及び「水素結合アクセプター性」の固体有機化合物を特定割合で混合した際、共晶融点降下により得ることができる混合溶媒である。だが、どのような有機分子の組み合わせで大きな融点の低下を生じるのか？ 深共晶溶媒の CO₂ の分離・回収能力を上げるにはどうすれば良いのか？ その材料設計指針は、本研究提案時点で不明である。本研究では量子化学・統計熱力学・機械学習を組み合わせた電子状態インフォマティクス的手法と簡便な検証実験の組み合わせた基礎物理化学的アプローチにより、CO₂ 吸収特性に優れた深共晶溶媒の迅速探索を行った。

1,533,528 の深共晶溶媒の CO₂ 吸収能を統計熱力学計算したところ、その結果は、実験報告をよく説明した。特に、イオン性化合物を含む深共晶溶媒は CO₂ 吸収能が高いことが確認され、非イオン種で構成されたものよりも優れていることがわかった。これは、微量イオン種が混合物中の水素結合ネットワークを弱め、CO₂ 物理吸着を改善するためである。本成果はアメリカ化学会の ACS Omega 誌に報告し、表紙にも採択された。

<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsomega.2c08250>

（英文）

It is critical to improve carbon capture efficiency while reducing costs to popularize carbon capture and storage. Considering the green chemistry and engineering objectives, this study theoretically explores the CO₂ absorption capacity of 1,533,528 hydrogen-bonded mixtures, i.e., deep eutectic solvents in a broad sense. Exhaustive statistical thermodynamic calculations well explain the experimental reports; it is confirmed that deep eutectic solvents containing ionic compounds have higher CO₂ selective absorption capacity than those composed of non-ionic species. Quantitative evaluation of hydrogen-bonding interaction also predicts that the capacity is higher when the ionic compounds work as hydrogen-bonding donors. This is because the trace ionic species weaken the hydrogen-bonding network in the mixtures to improve CO₂ physisorption.