

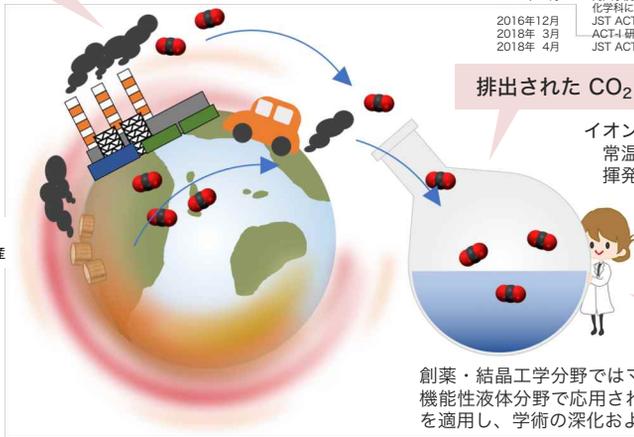
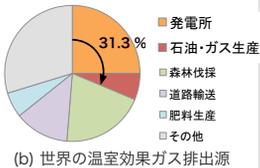
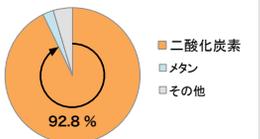
# 材料情報学による CO<sub>2</sub> 吸収液設計

研究課題：CO<sub>2</sub> フリー社会実現のための物理化学と情報科学の融合

黒木 菜保子

お茶の水女子大学 大学院人間文化創成科学研究科  
理学専攻 化学・生物化学領域 博士後期課程 3年

現在の生活水準を維持したまま、地球温暖化を食い止めたい！



排出された CO<sub>2</sub> を効率よく吸収可能な新奇イオン液体を探そう！

イオン液体ってなに？

常温で液体の塩（陽イオンと陰イオンの組み合わせ）です。揮発しないので、環境に優しく安全な液体です。

CO<sub>2</sub> はイオン液体のどこに吸収されるの？

イオン液体中には、隙間がたくさんあります。その隙間の中に CO<sub>2</sub> が取り込まれます。

物理化学者として、イオン液体の  
マテリアルズインフォマティクスに挑戦！

創薬・結晶工学分野ではマテリアルズインフォマティクスが活用されていますが、機能性液体分野で応用された例はありません。イオン液体にインフォマティクスを適用し、学術の深化および地球環境に貢献します。

1年4ヶ月の成果

- イオン液体の構成要素である単分子イオンの幾何構造・電子状態のデータベース作成
- 単分子イオンの組み合わせと CO<sub>2</sub> 吸収特性の相関に関する機械学習・モデル検証
- 混合液体の熱力学物性予測のための分子動力学計算

今後の展望

実験研究者と共同し、提案したイオン液体の合成・測定を行い、実応用化を目指します！

## 1. 背景と目的

地球温暖化の進行が深刻化しています。現在の生活水準を維持・向上しつつ地球温暖化を解決するには、CO<sub>2</sub> の効率良い回収が必須です。近年、イオン液体が CO<sub>2</sub> 吸収能を持つことが報告されました。イオン液体とは、陽イオンと陰イオンの組み合わせのみから構成される、不揮発性・高安定性な常温熔融塩です。イオン液体を CO<sub>2</sub> 吸収液として利用するには、理論上 10<sup>18</sup> 通り存在するイオン液体から、狙って CO<sub>2</sub> を吸収可能なものを探索せねばなりません。

本研究の目的は、CO<sub>2</sub> を効率良く吸収するイオン液体を、物理化学と情報科学の融合により高精度かつ迅速に提案することです。

## 2. 研究実施項目

### [1] 単分子イオンの化学的 DB 作成

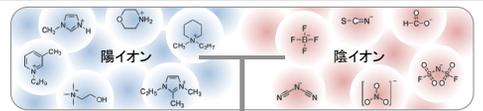
密度汎関数理論を用いて、陽イオン 3,767 種類、陰イオン 109 種類の計算を行いました。計算の結果得られた各単分子イオンの幾何構造・電荷分布の情報を DB としてまとめました。

### [2] 単分子イオンの組み合わせと CO<sub>2</sub> 吸収特性の相関に関する機械学習・モデル検証

各イオンの幾何構造・電荷分布の偏り特徴量とし、25°C におけるイオン液体の CO<sub>2</sub> 吸収量を予測するための機械学習（ガウス過程回帰）を実行しました。モデル構築に使用したデータ数は 10,000 点で、5 分割交差検定を行いました。モデルの評価のためにテストデータ 10,000 点を使用しました。

### [3] 混合液体の熱力学物性予測のための分子動力学計算

イオン液体の混合性を求めるためには、一般に汎用可能な分子間相互作用を記述する力場を作成することが必須です。本研究期間においては、その準備段階として、混合液体一般の熱力学物性を記述可能な力場を検討し、論文にまとめました。

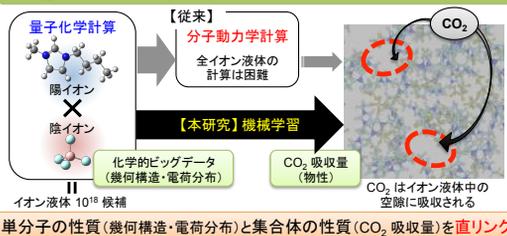


理論上 10<sup>18</sup> 通りのイオン液体が存在。

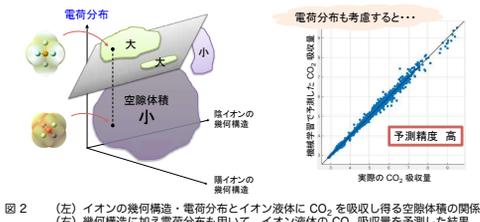
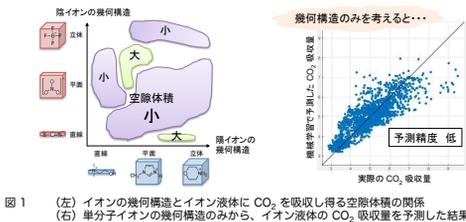
実験・分子動力学計算共に高コスト。網羅的探索は不可能。

情報科学を用いれば、高精度な液体物性予測が可能に！

## CO<sub>2</sub> フリー社会実現のための物理化学と情報科学の融合

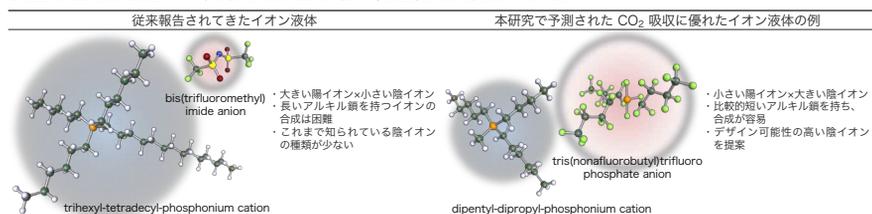


## 3. 結果と考察



まず、各イオンの幾何構造に関する特徴量のみから CO<sub>2</sub> 吸収量予測器を作成しました (図 1 (左))。しかし、機械学習で予測された CO<sub>2</sub> 吸収量は、実際の吸収量とは大きく異なる値を示し、予測精度は上がりませんでした (図 1 (右)、決定係数は 0.8)。これは、同様なサイズ感のイオンであっても、電荷分布の違いにより、CO<sub>2</sub> を吸収し得る空隙体積の大きさが異なるためであると考えました。そこで、イオンの幾何構造に加え電荷分布も露に考慮した場合の予測器を作成しました (図 2 (左))。その結果、決定係数は 0.98 まで向上しました (図 2 (右))。

この予測器を、(陽イオン 3,767 種類) × (陰イオン 109 種類) = (候補イオン液体 410,603 種類) に対して応用することで、ホスホニウム陽イオンを用いると、より多くの CO<sub>2</sub> を吸収可能になることが分かります。機械学習を援用せずに候補イオン液体 410,603 種類全てについて調査した場合と比べ、本研究では 240 倍の高速化を実現しました。



## 4. まとめ

本研究推進により、①単分子イオンの化学的 DB、②イオン液体物性 (CO<sub>2</sub> 吸収量) 予測のための学習モデル、③混合液体の熱力学物性を記述可能な力場、を作成することができました。本研究は、従来行われていない機能性液体のマテリアルズインフォマティクスの可能性を拓くものだと考えています。今後、本成果を、Green & Sustainable Chemistry シンポジウム (2018/6 @神戸、2018/11 @シンガポール) にて報告します。GSC への参加は、本研究目的である地球環境への貢献について、一定の成果を得たことを意味すると考えています。また、加速フェーズ期間では、吸収速度最大化に挑みます。