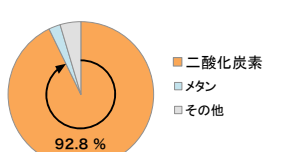


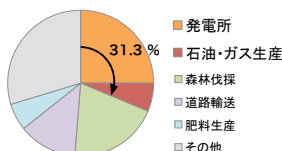


現在の生活水準を維持したまま、地球温暖化を食い止めたい！

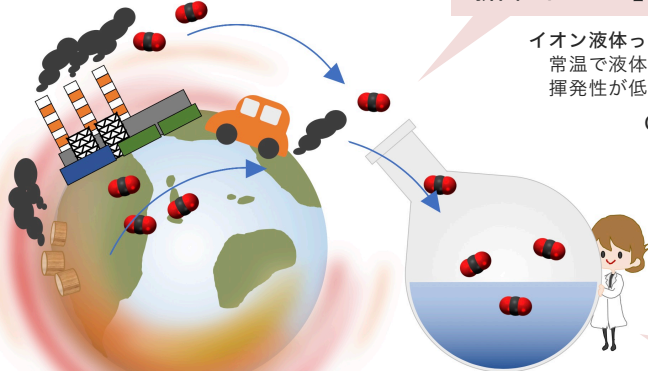
排出された CO₂ を効率よく吸収可能な新奇イオン液体を探索！



(a) 温室効果ガスの種類



(b) 世界の温室効果ガス排出源



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任意の組み合わせ）です。揮発性が低く、燃えないので、環境に優しい安全な液体です。

CO₂ 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。圧力をかけると、隙間の中に CO₂ が取り込まれます。

回収された CO₂ はどうなるの？

不純物から分離された CO₂ は、カフェインや香り成分などの有機分子を抽出する溶媒として活用できます。

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！

決まった構造を持たない機能性液体を対象にマテリアルズインフォマティクスを実施し、単一溶媒から混合溶媒まで、自在な機能デザインの可能性を拓きます。

2年間の研究成果

- ✓ イオン液体の構成要素である単分子イオンの幾何構造・電子状態データベースを作成
- ✓ 排気ガスからの CO₂ 分離回収性に優れたイオン液体の機械学習による探索 → 検証実験が成功
- ✓ 混合イオン液体の機能デザインに向けた単分子イオンデータベースの応用
- ✓ 高温高圧下における流体の輸送特性予測が可能な第一原理分子シミュレーション法 EFP2-MD の提案



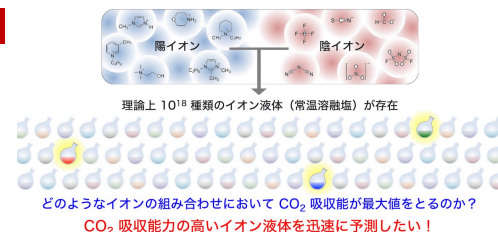
今後の展望

実用化に向け、コストや融点の最適化に挑みます。また、イオンデータベースを他の機能開発に活用することを目指します。

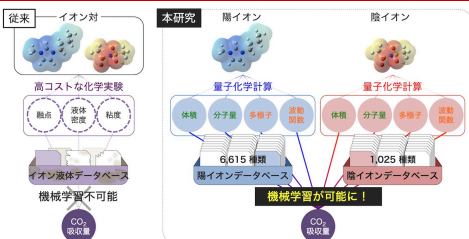
背景と研究目標

イオン液体を CO₂ 吸収剤として利用するには、数多存在する陽イオンと陰イオンの組み合わせから、優れた吸収剤になり得るものを迅速に探索することが必須です。これまでの ACT-i 研究により、ホスホニウム陽イオンを含むイオン液体は、より多くの CO₂ を吸収する傾向にあることが分かりました。しかしながら、CO₂ 吸収量のみで、CO₂ 吸収剤としての適否を問うべきではありません。すなわち、排気ガスに含まれる他のガスとの分離回収性や CO₂ 吸収速度も考慮する必要があります。

上記背景を鑑み、加速フェーズ期間では、イオン液体の探索空間の拡張および CO₂ 分離回収性・拡散性を評価し、予測結果の検証実験まで行うことを目標としました。



研究実施項目



【1】単分子イオンの化学的データベース作成

通常の化学実験では、陽イオン・陰イオンを分離した物性測定はできません。一方、量子化学計算では、イオン分子ごとの独立した計算が可能です。本研究では、BP/TZVPD レベルの密度汎関数理論を用いて、単分子イオンの幾何構造・電子状態を算出しました。7,640 種類のイオンデータベースを組み合わせることで、6,780,375 種類の純粋なイオン液体の検討が可能になりました。

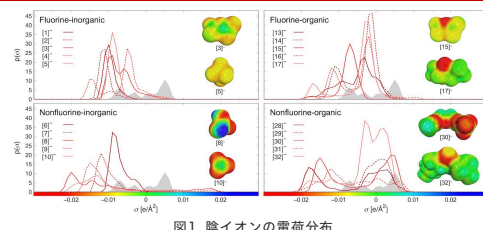


図1. 陰イオンの電荷分布

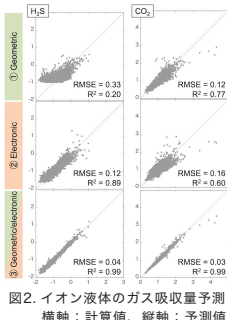
【2】CO₂ 分離回収性に優れたイオン液体探索

各イオン液体に対する燃焼排ガスの吸収量を回帰した結果、

- ①と②の比較より、
H₂S は電子的物性
CO₂ は幾何的物性がより重要

- ①, ②と③の比較より、
H₂S の分子サイズ
CO₂ の分極効果も、高精度なガス吸収能評価に必須

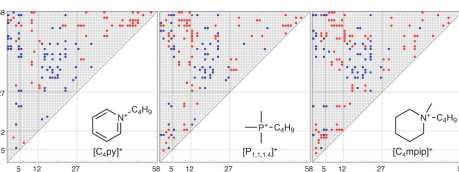
と分かりました。



予測した各ガスのヘンリー定数から選択性を算出したところ、CO₂ を N₂ や CH₄ と分離回収可能なイオン液体が存在することが示唆されました。

【3】混合イオン液体へのデータベース応用

異種イオン間に働く強い静電引力相互作用を弱めるために、第三成分の導入を検討しました。本研究では、「陰イオン効果」に着目し、イオン液体の混合により CO₂ 吸収量が増加する条件を調査しました。

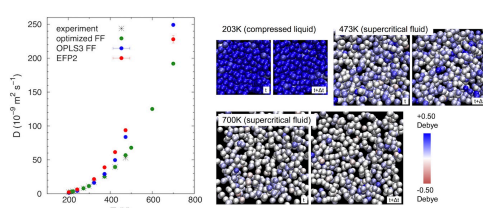


フッ素を含む陰イオンと、フッ素を含まない有機陰イオンを混合すると、CO₂ 吸収量が増加することが分かりました。

【4】高温高圧下での輸送特性予測

臨界温度・圧力を越えた領域（超臨界）の物性を求めるには、第一原理分子シミュレーションの実施が必須です。その計算コストを下げるため、フラグメント化に基づく EFP2-MD 法を提案しました。

$$E_{EFP2} = E^{ES} + E^{EXREP} + E^{POL} + E^{DISP} + E^{CT}$$



検証実験

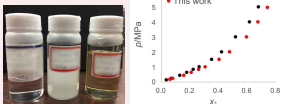


図5. CO₂ を溶解するために必要な圧力
圧力が高いほど吸収性に優れることを意味する

単分子イオンのデータベースを用いて機械学習した結果、予測されたイオン液体を合成し、CO₂ 溶解度を測定しました。本研究により、これまで CO₂ 溶解性に優れると報告されてきたイオン液体を超えるものが見つかりました。

まとめ

加速フェーズの研究結果、①単分子イオンデータベース、②純/混合イオン液体の物性予測スキーム、③高温高圧条件下に適用可能な分子シミュレーション法、を作成することができました。