

**研究開発課題「PCP ナノ空間による分子制御科学と応用展開」
追跡評価報告書**

1. 研究成果の発展状況や活用状況

本研究開発課題では、多孔性配位高分子（以下 PCP/MOF（Porous Coordination Polymer/Metal-Organic Framework））のガス貯蔵・放出能力を最大限引き出しガス分離技術の社会実装に向けた研究開発が行われた。研究期間中、PSA（Pressure Swing Adsorption）評価により CO 分離を実証し、PCP/MOF の工業的ポテンシャルを示した。

研究終了後にこの研究成果は、カーボンニュートラル社会の実現に重要な技術として「CO₂ 分離」へと展開されており、2022 年度から開始された国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO) グリーンイノベーション基金事業「CO₂ の分離回収等技術開発」プロジェクトへとつながった。現在、本研究開発課題の参画企業であった日本製鉄株式会社および株式会社レゾナック（旧昭和電工株式会社）との産学連携体制で省エネルギーな低濃度 CO₂ 分離回収の技術の確立に向けた研究開発が行われている。さらに CO₂ 分離に関する研究開発として、「ゲート吸着材」を用いた CO₂ 吸着回収プロセスのシミュレーション技術の確立（名古屋大学）、CO₂ に対してのみゲートを開いて吸着する PCP/MOF の開発（京都大学）などが進められている。

また、研究終了後、研究期間中に出願された 9 件の特許のうち 8 件が権利化された。新たに 8 件の特許出願がなされており、産業財産権等の権利化を進めている。

以上により、研究成果の発展・活用が認められる。

2. 研究成果から生み出された科学技術や社会・経済への波及効果

本研究開発課題と並行して進めた科研費課題「階層的配位空間の化学」のなかでは、ナノから巨視的スケールにわたる PCP/MOF の階層的集積化法を確立した。本研究成果との掛け合わせにより、ガス吸着分離材だけではなく、ガス貯蔵材、触媒、誘電材料、薬剤徐放担体や膜材料等の応用研究が実施されるようになった。また本研究開発課題の研究成果が示した柔軟性 PCP/MOF の工業的ポテンシャルは、国内外の PCP/MOF 研究の発展に大きな影響を与えている。世界的に見ても、未だ PCP/MOF の大規模プロセスでの使用は実現されておらず、実用化も一部に限られている状況ではあるが、PCP/MOF の実用化に向けた研究開発は加速している。

以上により、科学技術への波及効果が認められ、さらにその先の社会・経済への波及も今後期待される。

以上

国立研究開発法人 科学技術振興機構
戦略的創造研究推進事業
ACCEL
追跡評価用資料

研究開発課題「PCP ナノ空間による
分子制御科学と応用展開」

(2013.12～2018.3)

研究代表者：北川 進
プログラムマネージャー：山本 高郁

目次

要旨	1
第 1 章 研究開発課題の概要.....	3
1.1 研究開発課題概要.....	3
1.2 研究開発期間.....	4
1.3 研究開発体制：.....	4
1.4 研究開発課題の研究成果.....	4
1.4.1 研究開発成果概要.....	4
1.4.2 社会実装/実用化に向けた取り組み.....	6
1.4.3 社会実装/実用化(POC)に向けた成果.....	7
第 2 章 研究開発課題終了から現在に至る状況.....	10
2.1 研究開発課題終了後の技術的成立性証明の実施状況.....	10
2.1.1 本課題終了後の研究開発経過.....	10
2.1.2 NEDO の GI 基金事業：革新的分離剤による低濃度 CO ₂ 分離回収システムの開発	11
2.1.3 PCP による CO ₂ ガス分離についての論文から.....	11
2.2 産業財産権等の権利化状況.....	13
2.3 第 2 章のまとめ.....	14
第 3 章 研究開発課題成果の波及と展望.....	15
3.1 科学技術への波及と展望.....	15
3.1.1 新規な理論や概念の提唱.....	15
3.1.2 新たな研究領域や研究の潮流の形成.....	15
3.1.3 国際共同研究.....	16
3.1.4 科学技術への波及のまとめと展望.....	17
3.2 社会経済への波及と展望.....	17
3.2.1 資源エネルギー分野への展開.....	17
3.2.2 電気電子分野への展開.....	17
3.2.3 化学生物分野への展開.....	17
3.2.4 社会への貢献.....	18
3.2.5 社会経済への波及のまとめと展望.....	18
3.3 第 3 章のまとめ.....	18

要旨

本資料は、ACCEL「PCP ナノ空間による分子制御科学と応用展開」課題(2013 年 12 月～2018 年 3 月、以降、本課題と記載)において、研究終了後一定期間を経過した後、副次的効果を含めて研究開発成果の発展状況や活用状況を明らかにし、国立研究開発法人科学技術振興機構(JST)事業および事業運営の改善などに資するために、追跡調査を実施した結果をまとめたものである。

ACCEL は、戦略的創造研究推進事業(CREST・さがけ・ERATO など)で創出された顕著な研究成果のうち、有望ではあるが企業ではリスクの判断が困難な成果を抽出し、プログラムマネージャー(PM)のイノベーション指向の研究開発マネジメントにより、技術的成立性の証明・提示(Proof of Concept : POC) および適切な権利化を推進することで、企業やベンチャー、他事業などに研究開発の流れをつなげることを目指す事業である。本課題の目的は、北川グループが ERATO(北川統合細孔プロジェクト、2007～2014 年度)において発展させた多孔性配位高分子 Porous Coordination Polymer(以下「PCP」)¹を用いて、産業の基盤技術の 1 つであるガス分離プロセスの革新を図ろうとするものであった。本課題において、PCP のガス貯蔵・放出能力を最大限引き出し、PCP 製造の採算性やガス分離技術の実現に向けた研究開発が行われた。

第 1 章では、本課題期間中の研究開発成果をまとめた。

第 2 章では、本課題終了後から現在に至るまでの研究開発成果の発展についてまとめた。

第 3 章では、科学技術的および社会経済的な観点から、本課題が与えた波及効果についてまとめた。

¹ 金属イオンと有機物から構成された多数の微細な孔を持つ物質。金属-有機構造体 (Metal-Organic Framework:MOF) とも呼ばれる。

まとめ図

戦略目標、達成目標/研究開発課題目標(ねらい)	インプット	アクティビティ/アウトプット	アウトカム (short/mid-term)		アウトカム (long-term) / インパクト																																	
			～追跡調査時点	今後予想される展開	今後想定される波及効果																																	
目的・目標 目標: ガス分離材としての性能が格段に高い多孔性配位高分子(PCP)のガス貯蔵・放出能力を最大限引き出し、省スペース、省エネルギーで高効率なガス分離技術の実現に向けた研究開発を行い、実環境を模擬したベンチ設備を使った実用性の証明を目指す。 実用化に向けた目標: 目標1・原材料の視点から、PCPの原料価格がリーズナブルであること。ユビキタス原料であること。 目標2・製造面から、製造原価がリーズナブルであること。製造工程がシンプルで極低温や高圧が不要で量産ができ、製品歩留まりが高いこと。 目標3・利用時の視点から、PCPの優れた性能が顧客にとってどんなメリットがあるか明確であること。使用時の耐久性(寿命、耐熱、耐水、耐酸等)が用途の許容範囲にあること。 目標4・インパクトある実用先の調査。コンパクト・ダウンサイジング・高機能を生かす。(ニーズ、競合材、先進技術、市場の調査)	研究開発体制 研究代表者: 北川進 (京都大学iCeMS拠点長・特別教授) PM: 山本高郁 グループ: GL ① 京都大学: 新しいPCPの開発と分子制御メカニズムの解明 ②新日鐵住金(株): CO₂分離材料開発および他ガス分離材料開発への展開 ③大阪府立大学: PCPのガス吸着能の検討 ④北海道大学: PCP 賦形用バインダーの合成と特性評価 ⑤ (株)エア・リキッド・ラボラトリーズ(ALL): 空気分離への応用を目的としたPCP 吸着剤の開発 ⑥ハイケム(株): PCP 分離の工業化応用展開 ⑦名古屋大学: 実用を指向したPCP 分離材料	研究開発成果のまとめ 論文投稿 <table><tr><th>①成果論文数</th><th>②発展論文数</th></tr><tr><td>34(8)</td><td>112(31)</td></tr></table> ()の値はTop10%以内論文数 特許申請・登録 <table><tr><th rowspan="2">出願</th><th rowspan="2">国内</th><th>期間中</th><th>終了後</th></tr><tr><td>8</td><td>8</td></tr><tr><th rowspan="2">登録</th><th>国内</th><td>8</td><td>0</td></tr><tr><th>海外</th><td>1</td><td>0</td></tr></table> 受賞 <table><tr><th>賞の名称</th><th>受賞年</th></tr><tr><td>英国王立協会外国人会員</td><td>2023年</td></tr><tr><td>日本学士院会員</td><td>2019年</td></tr><tr><td>エマニュエル・メルクレーチャーシップ賞</td><td>2019年</td></tr><tr><td>フランス化学会グランプリ</td><td>2018年</td></tr><tr><td>ソルベイ未来化学賞 藤原賞</td><td>2017年 2017年</td></tr><tr><td>米国化学会バソロ賞 日本学士院賞</td><td>2016年 2016年</td></tr><tr><td>江崎玲於奈賞 英国王立化学会フェロー会員 RSCD・ジェンス賞</td><td>2013年 2013年 2013年</td></tr></table>	①成果論文数	②発展論文数	34(8)	112(31)	出願	国内	期間中	終了後	8	8	登録	国内	8	0	海外	1	0	賞の名称	受賞年	英国王立協会外国人会員	2023年	日本学士院会員	2019年	エマニュエル・メルクレーチャーシップ賞	2019年	フランス化学会グランプリ	2018年	ソルベイ未来化学賞 藤原賞	2017年 2017年	米国化学会バソロ賞 日本学士院賞	2016年 2016年	江崎玲於奈賞 英国王立化学会フェロー会員 RSCD・ジェンス賞	2013年 2013年 2013年	終了後を含む本プロジェクトの成果 (要約) 研究開発項目1 : PCP構造とガス吸・脱着機構解明によるナノ空間の創生 ・ガス吸脱着分離メカニズムの解明(細孔内の配位子配向が重要) ・ガス種選択性向上検討(化学型吸着サイトの利用率アップ) ・ナノ空間材料設計デザインの構築(シーズPCP類縁体) ・ユビキタス原料による合成探索(安価配位子でゲート型CO₂吸着特性を発現) ・量産性検討(2.6 Kg/バッチの製造) 研究開発項目2: ハイスループット評価システム開発 ・高速スクリーニング用システム(微小重量変化検出) ・メカニズム解明を加速する吸着同時ラマン分光装置開発 研究開発項目3: 実使用環境下での基本特性の把握 ・実使用温度域での特性検討 シーズPCP類縁体PCPについて、CO₂/N₂を中心とした吸着特性。 ・実用混合ガスでの分離特性把握 シーズPCPで混合ガス吸着比が概ね単成分ガス吸着比と同じと確認。 混合ガスでも、ターゲットガスの分圧のみでゲート特性を予測。 ・1塔式と3塔式PSAでの実ガス検証 ・PSA等への適用時の計算モデル検討 ガス濃度、流量、圧力条件の最適化を実施。良好な分離性能を確認。 ・実用的賦形化技術研究開発 3通りの新規賦形技術を開発。柔軟性PCPの賦形を可能とした。 ・短期耐久性の把握 高温高圧(70℃、9気圧)・耐水試験(150℃7日)で劣化無し。 ・実用的不純ガス分離研究開発 代表的NO_xの一酸化窒素を除去可能なPCPを創製。 ・長期安定性、繰り返しガス吸着特性の調査 3年の大気暴露、2000回超の繰り返しCO₂吸着試験で劣化無し。 研究開発項目4: PCPを活用したインパクトある実用先の調査 ・O₂/Ar研究開発(ALL) 高選択性柔軟性PCP吸着剤を開発。 ・C1化学への適用(シーズPCPは高価であるが、ユビキタスPCPは価格低減努力等により実用化の可能性)セミコマーシャル試験が望まれる。 ・競合材の調査(調査の結果、本課題で創生したPCPは目標の『室温、正圧』を達成しているが、これに競合しうるものはない。 ・先進技術の調査結果、本課題で創生したPCPは最先端技術である。 ・知財戦略は、基本となる物質特許とエンジニアリングとしての賦形化の基本特許を海外出願し、ノウハウは秘匿することを根幹とし、対応した特許群を出願。 ・市場調査 ①新日鐵住金グループは製鉄副生ガスからのCO₂/N₂分離(燃料、化成品原料用途)ニーズの可能性を確認。 ②ハイケムグループは中国現地調査・コンタクトを行い、中国では基礎原料をCOとする石炭化学やカーバイド法等が盛んであり、効率的なCO回収技術開発のニーズが非常に高いことを明らかにした。ユビキタスPCP適用に大きな市場の可能性を確認。 ③ALLグループは現有設備への適用を市場とすることを前提に、室温でのO₂/Ar分離PCPの適用の見極めを行った。	科学技術的な展望 POC1: 原材料の視点 解明メカニズムに基づいた合理的設計及び、開発した高速PCP探索システムを利用することで、さらなる安価なCO₂分離PCPの創出 POC2: 製造面の視点 反応性は極めて良好、高収率で、不純物の発生がほとんど無いため、精製も不要、廃液処理費のミニマム化 POC3: 利用時の視点 ・マテリアルリサイクルが可能な固体型 CO₂ 分離材料実用化の為にさらなる検討の加速。 ・京都大名古屋大、新日鐵住金の産学連携共同研究。 ・賦形ペレット強度の向上(北海道大・新日鐵住金) ・PSA の装置構成、操業条件のPCP用最適化 ガス分離技術の展開 ー排ガス処理・CO₂からCO₂へ ーアセチレン分離技術 ー炭化水素ガスへの展開 ーPCP用PSAプロセス最適化 ー常温常圧省エネルギー分離 研究開発課題の展開 ー 目的に合致したPCPの設計・合成法、その賦形法、吸着プロセスの確立 ー 省エネルギーガス分離プロセスの実用化	科学技術的および社会・経済的な波及効果 分離技術としてのPCP ーCO₂分離・濃縮/CCS ー重水・重水素の分離 ー原発排水処理 触媒としてのPCP ーCO₂からCOへ(還元) ーC1化学への展開 ー選択的異性化 反応場としてのPCP ー常温常圧省エネルギー ー重合場 ー異性化制御 電気電子用途へのPCP ー燃料電池用途 ー電子・カチオン移動媒体 生物化学分野へのPCP ー薬品のカプセル化 ー薬品の複合化 ードラッグデリバリーに応用 新しい学理の創成 階層的配位空間
①成果論文数	②発展論文数																																					
34(8)	112(31)																																					
出願	国内	期間中	終了後																																			
		8	8																																			
登録	国内	8	0																																			
	海外	1	0																																			
賞の名称	受賞年																																					
英国王立協会外国人会員	2023年																																					
日本学士院会員	2019年																																					
エマニュエル・メルクレーチャーシップ賞	2019年																																					
フランス化学会グランプリ	2018年																																					
ソルベイ未来化学賞 藤原賞	2017年 2017年																																					
米国化学会バソロ賞 日本学士院賞	2016年 2016年																																					
江崎玲於奈賞 英国王立化学会フェロー会員 RSCD・ジェンス賞	2013年 2013年 2013年																																					

第 1 章 研究開発課題の概要

1.1 研究開発課題概要

ERATO で開発した多孔性配位高分子(PCP)は、剛性に加えて柔軟性を併せ持つという独自の特徴を持つ。この PCP のガス分離材としての性能(ガス貯蔵・放出能力)が格段に高いことが ERATO 研究の成果の 1 つとして得られており、ACCEL では、この PCP のガス貯蔵・放出能力を最大限引き出し、PCP 製造の採算性やガス分離装置の小型化による用途拡大を視野に入れて、省スペース、省エネルギーで高効率なガス分離技術の実現に向けた研究開発を行うことになった。企業にて、プロセス開発を含む実践的な研究開発・マネジメントの実績を持つ山本高郁を PM に起用し、その知見・ネットワークを生かした出口指向の戦略的な研究マネジメントを目指した。

具体的には、以下の研究開発を推進することになった。

1) 研究を進めてきた PCP のなかで、最も高いガス分離能を示す CO 用 PCP 材料²について、吸着・脱着メカニズムの解明、分離性能の向上、PCP の製造方法の開発を行う。研究開発期間の後半には実環境を模擬したベンチ設備を使った実用性の証明を目指す。

2) CO の研究開発で得られた知見を酸素やほかのガスを分離する PCP の研究開発にも応用できるよう、PCP の設計指針を得ることを目指す。

研究開発の推進に当たっては、オープンラボを立ち上げて企業や研究者を幅広く結集し、ガス分離技術の利用ニーズを広く探り、基礎研究成果ができるだけ広く応用展開できるように留意した。また、本課題においては、特に戦略的な知的財産の確保に取り組み、本課題に参画しなかった企業などにも本課題の成果が広く活用できるように留意した。

以上を推進することで、産業用途として高いニーズを持つ酸素(O₂)、一酸化炭素(CO)、水素(H₂)、メタン(CH₄)などを安価、省エネルギー、高効率に空気や天然ガスなどから分離・貯蔵する技術を創出し、我が国の産業力強化や省エネルギー化への貢献を目指した。

² ERATO においては 2 価銅イオン(Cu²⁺)と 5-アジドイソフタル酸(5-N₃aip)から得られた PCP が高選択性を示した。(Sato.H et.al, “Self-Accelerating CO Sorption in a Soft Nanoporous Crystal”, *Science*, 343, 167(2014).)

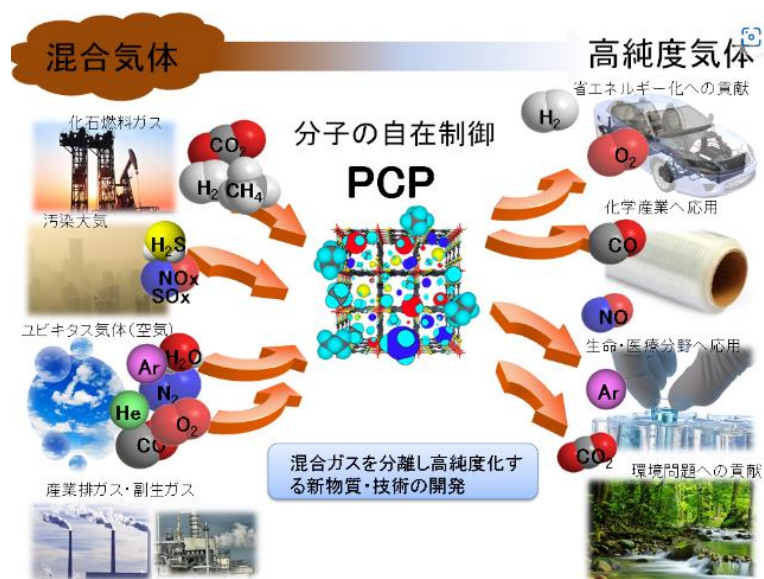


図 1-1 目指すビジョンの図

1.2 研究開発期間

2013 年 12 月～2018 年 3 月

1.3 研究開発体制：

研究機関名	研究開発項目
京都大学	自在分子制御が可能な新しい PCP の開発と分子制御メカニズムの解明
新日鐵住金(株)	PCP を利用した CO 分離材料開発および他ガス分離材料開発への展開
大阪府立大学	無機多孔体中に構築した PCP のガス吸着能の検討
北海道大学	PCP 賦形用バインダーの合成と賦形体特性評価
(株)エア・リキード・ラボラトリーズ*	空気分離への応用を目的とした PCP 吸着剤の開発および応用利用研究
ハイケム(株)	PCP 分離材料の工業化応用展開に関する研究
名古屋大学	実用を指向した PCP 分離材料の開発

1.4 研究開発課題の研究成果

1.4.1 研究開発成果概要

本 ACCEL 課題では、CO 分離に関して低温でなくても安定して高い分離能を示す柔軟性 PCP、「シーズ PCP³⁾」、およびその類縁体を中心として、吸脱着メカニズムの解明、分離性の向上検討、PCP の効率的製造方法の開発を行った。メカニズム解明を通じて、安価化＝ユビキタ

³⁾ シーズ PCP: 5-ヘプタフルオロプロピルイソフタル酸と 2 価銅イオン (Cu^{2+}) からなる PCP $\{[\text{Cu}(\text{C}_3\text{F}_7\text{ipa})](\text{guest})_n\}$ 特願 2014-180685

ス⁴化を図る検討も進められた。研究開発期間の後半では、実環境を模擬したベンチ設備を使った実用性の証明と共に、CO の研究開発で得られた知見を酸素や他のガスに応用して行くことを目指した。

具体的には、(1)PCP 構造とガス吸・脱着機構解明によるナノ空間の創生、(2)ハイスループット評価システム開発、(3)実使用環境下での基本特性の把握、(4)PCP を活用したインパクトある実用先の調査等が必須であってそれぞれサイエンスベース/応用ベース/商業ベースで、独自かつ相補的アプローチで上記項目に取り組んだ。

(1)に関して、シーズ PCP 類縁体の網羅的合成および、吸着特性を解明していくことにより、ゲート型 CO 吸着特性⁵の発現法則を明らかにし、この知見を基にして特殊元素を含まない安価配位子でのゲート型 CO 吸着を発現させることに成功した。また、量産可能な PCP 合成法開発にも取り組み、プロジェクト開発当初、3mg/バッチ、反応時間＝数週間で合成していたシーズ PCP の合成法を改良し、室温、反応時間数時間で多量に安定的に合成できる改良合成法を開発し、2.6kg/バッチでの製造に成功し、数トン/年の製造に目処を付けた。この成果により、本課題の研究開発チームの全メンバーに潤沢にシーズ PCP が供給され、メカニズム検討のための測定、賦形⁶法開発、賦形体を用いた PSA⁷測定が実施可能となった。

(2)に関して、熱重量分析を用いた PCP のハイスループットシステムの構築を行い、従来に加えて少量(1/10 以下)のサンプルで、短時間(従来比 1/10 以下)でのガス分離特性の評価を可能とした。また、吸着ラマン装置⁸を開発し、メカニズム解明を加速した。

(3)に関しては、シーズ PCP とその類縁体の CO/N₂ 吸着基礎特性の詳細な検討を行い、メカニズム解明に貢献した。シーズ PCP を用いて多様な材料耐久性評価を実施した。特に以下の 3 点の過酷な試験、①大気暴露(3 年)、②耐水試験(150℃沸騰水、7 日)、③高温高压(70℃、9 気圧)でも劣化が認められず、シーズ PCP の耐久性が極めて高いことが立証された。また、シーズ PCP の容易な回収再利用法を開発し、劣化した場合廃棄となる既存材に対して PCP は廃棄物をミニマム化できる点で環境に優しい材料であることを明らかにした。

吸脱着に伴う体積変化による構造崩壊という特有の現象故、柔軟性 PCP の賦形は困難とされていたが、吸脱着後も賦形体の形態を維持できる新規なバインダーの開発に成功した。新規開発バインダーを用いて、工業生産に使用されている連続打錠機実機にて打錠を行い、製造速度 3.7Kg/h で効率よく PCP 賦形体の製造ができる事を実証した。開発した賦形体を

⁴ ユビキタス PCP : 特殊元素を含まず(一般的な CHON 原子のみで可能)かつ室温で CO ゲート吸着を示す PCP
例えば $\{[\text{Cu}(\text{Me}_2\text{Nipa})](\text{guest})_n\}$

⁵ ゲート型 CO 吸着特性 : CO ガスの圧力がある「閾値」を超えると、構造変形し急激にガス分子を吸着する「柔らかい」吸着剤。PCP/MOF と呼ばれる材料に多く見られる。

⁶ 賦形 : PCP の機能を保ちながら形を付与する。AG ゲル型ビーズ法(北海道大・特願 2019-067364)、バインダー法(賦形剤を加える)、マッシュマロゲル法(大阪府立大・特願 2017-035539) など。

⁷ PSA(Pressure Swing Adsorption) : 圧力変動吸着法。ガスの分子特性及び吸着剤物質に対する親和性に基づき、圧力の下でガス混合物から一部のガスを分離するために使用される技術。

⁸ 吸着ラマン装置 : 吸着物質のラマンスペクトルを同時に測定する装置。研究者らは(株)堀場製作所製顕微レーザー Raman スペクトル測定装置と(株)マイクロトラック・ベル製吸着測定装置を組み合わせた吸着同時 Raman スペクトル測定装置を開発した。

用いた 1 塔式 PSA 評価試験により、破過曲線等の動的なガス分離特性を評価し、従来の静的評価(吸着等温線)から推定された「ゲート型 PCP の優位性(容易なガス回収)」を、より実用条件に近い動的条件に於いても確認した(明確なゲート型の吸着を示す PCP では世界初の成果)。さらに、実機と同等の構成である 3 塔式 PSA 装置を設計・製造し、PCP の実用的ガス分離特性を評価し、「ゲート型 PCP の優位性(容易なガス回収)」が、実機同様のガス洗浄工程を有する装置でも発現することを明らかにした。開発した PCP ペレットは試験中における繰り返し吸脱着(常温、～9 気圧、2000 サイクル)後も崩壊、吸着特性低下等を起こさず、ペレットの優れた安定性も確かめた。

将来への展望として、PSA 評価試験の結果、当初想定の実用条件に対して材料に合わせたシステム改善が必要な事が判明し、さらに高効率な PCP-PSA 装置開発の方向性(例：高圧特性改善のための流量制御、放圧 3 工程の代わりに均圧工程が必要、他)を見いだした。3 塔式 PSA 測定結果を基に、PCP を用いた PSA 装置(150Nm³/h 規模)の設計を行い、既存 PSA と同等のコストで設備新造が可能であることを確認した。

1.4.2 社会実装/実用化に向けた取り組み

(1) 研究開発の加速

目標の製造工程が、シンプルで、極低温や高圧が不要な『室温、正圧(プラス圧)』で機能する CO ガス分離柔軟性シーズ PCP 創生を達成できたので、実機適用に向け実用化のための開発を加速する施策を提案、実行した。

特に社会実装して行くためには、ランニングコストが従来の吸着材を凌駕していくことが必要で、そのためのユビキタス化研究を加速すべく、予算増を得た。その結果、性能的には更なる改善が望まれるが、コスト試算の結果、従来材に対抗しうる有望なユビキタス PCP (Me₂N-ipa 型)⁴を創生できた。また、社会実装のためには、PCP 自体は微小であるため賦形化技術が、また実用的不純ガス分離技術が不可欠で、期中に賦形化研究のため、北海道大学野呂教授(バインダー方式)、大阪府立大学松岡教授(構造体への付与)、実用的不純ガス分離研究のため名古屋大学松田教授の参入を得、POC 達成に大きく貢献した。

(2) 実用化(POC 実現)の加速

・インパクトある実用先検討

一つは、CO ガス分離柔軟性シーズ PCP の C1 化学への適用検討に関して、2015 年度新たにハイケム株式会社⁹の参画を実現した。該社と協力して、市場の創案と規模調査、第 1 次、第 2 次適用試算を実施し、実用化の可能性を示すことができた。中国企業とのコンタクトを

⁹ ハイケム株式会社 : https://highchem.co.jp/company_top/

継続した¹⁰。次に、CO 分離に引き続く新たなガス種として O₂/Ar ガスに着目して、2015 年度新たに株式会社エア・リキード・ラボラトリーズ¹¹(ALL)の参画を実現した。ALL は、現有設備への適用を前提に O₂/Ar ガス分離柔軟 PCP の見極め研究を行った。有望な PCP は見つかったが、室温レベルには至らなかった。

・スケールアップ技術

当初計画の最終年度(2017 年度)、中規模(Kg オーダー)アップスケール試験は、研究レベルサイズを勘案すると、スケールアップオーダーが非常に大きいことと、早期に実用化時に必要なシーズ PCP(賦形体含む)の機能要件を明確にするには時期的に遅すぎると、判断し、事前に 50g サイズの 1 塔式 PSA 評価試験機を 2015 年度に製作完了し、試験を開始した。これにより、PCP 自体、及び賦形化の必要条件(分離能、耐久性、形体、強度等)を把握して開発の方向性、及び実用化検討(フィージビリティスタディ(FS)等)を効率的に明確化できた。さらに、この 1 塔式 PSA 評価試験機試験を通じた改善、検討により、50g サイズ×3 塔の 3 塔式 PSA 評価試験機により、試験データに基づいて実機設計が可能なが判明したので、2016 年度制作、2017 年度実施し、そのデータから PSA における本 ACCEL 課題のゲート型 PCP の性能が、世界で初めて確認でき、POC 達成に結実した。

(3) 知財戦略

社会実装のためには、知財戦略が不可欠である。技術調査の結果、現在の所、本技術が非常に先進であり、『室温、正圧』で機能を発揮する PCP を本課題以外では創生できていないので、問題となる特許はない。このため、本課題の特許戦略は、基本となる物質特許とエンジニアリングとしての大量合成、賦形化の基本特許を海外出願し、ノウハウは秘匿することを根幹とした。

1.4.3 社会実装/実用化(POC)に向けた成果

(1) 目標 1(POC1/マイルストーン 1)：原材料の視点

A. PCP の原料価格がリーズナブルであること：ユビキタス PCP(Cu(Me₂Nipa))での初期評価までは行ったが、より一層のユビキタス化の検討に入る前に期間が終了した。

B. ユビキタス原料(=いつでもどこでも容易に入手できる原料)であること

シーズ PCP は高価なフッ素元素を含んでおり、PCP 製造の為の素材費が極めて高価であることが判明した。このため、特殊元素を含まず、ゲートの CO を分離可能な PCP を探索し、ユビキタス PCP(Cu(Me₂Nipa))の開発に成功した。これにより、CO 分離 PCP 開発には特殊元素は必要とせず、汎用的な CHON 元素及び安価な遷移金属イオンのみで製造可能である事を

¹⁰ 日本鉄鋼協会環境・エネルギー・社会工学部会「日中の CO₂ 低減を目指して—C1 化学と水素社会構築—」(2019.10.23) <https://www.isij.or.jp/event/event2019/muoygxp24.html>

¹¹ 日本エア・リキード合同会社 <https://jp.airliquide.com/Overview-AirLiquideJapan>

立証した。ユビキタス PCP の時点で素材費はシーズ PCP 費で約 1/30 にコストダウンしたが、
解明メカニズムに基づいた合理的設計及び、開発した高速 PCP 探索システムを利用すること
で、さらなる安価な CO 分離 PCP の創出が可能であると判断した。

(2) 目標 2 (POC2/マイルストーン 2) : 製造面の視点

A. PCP 製造原価がリーズナブルであること

B. 製造工程がシンプルで、極低温や高压が不要で、量産ができ製品歩留りが高いこと

シーズ PCP のプロセス研究を行い、汎用的な化成品製造実機を使用して室温常圧という
温和な反応条件で、2.6Kg/バッチでの製造を行った。反応性は極めて良好、高収率で、不純
物の発生がほとんど無いため、精製も不要、廃液処理費のミニマム化が可能である。すなわ
ち PCP 製造プロセスが化成品製造プロセスの中にあっても最安価な部類に属している事を
確認した。

(3) 目標 3 (POC3/マイルストーン 3) : 利用時の視点 (人体・環境への低リスクをベースとし て)

A. PCP の優れた性能が顧客にとってどんなメリットがあるか明確であること

B. 使用時の耐久性 (寿命、耐熱、耐水、耐酸等) が使途の許容範囲にあること

既存材料と比較して、シーズ PCP がより小さな圧力変動で CO ガスを分離可能である事を、
実機を模した PSA システムにより確認した。これは、PSA 装置を用いて安価な CO 分離がで
きるというビジネス的な優位性を与えるだけではなく、小さな圧力変動＝省電力であり、CO
製造に伴う二酸化炭素排出のミニマム化も可能とする。本 PCP の製造は、水溶媒を用いて行
われるため、製造プロセスは環境に優しいプロセスである。また本材料は、水溶性、脂溶性
ともに低く、環境への流出が少ない。また弱酸に分類される配位子と、汎用的に用いられる
金属イオンから構成されているため、万が一の環境流出に際しても、人体、環境へのリスク
は小さい。本材料の耐水性は驚異的で 150℃で 7 日間の沸騰水暴露でも劣化を生じない。す
なわち大気中の湿度程度では全く劣化を生じない。また高温 (70℃) での CO 暴露試験、PSA
を用いた 2000 回以上の吸脱着試験でも劣化は認められず、ロングライフであることが立証
された。万が一の劣化は工業使用の場合起こりえるが、既存材料 (活性炭、ゼオライト) は再
生不可能であり、廃棄物となる。一方で開発 PCP は、原料である金属イオンと配位子に分解
して回収可能であり、さらに回収した原料から再度高品質の PCP を合成する事が可能であ
る。世界で初めてのマテリアルリサイクルが可能な固体型 CO 分離材料である。産業応用の
視点から、本材料が極めて魅力的な材料である事が実証された。この結果を受け、実用化の
為にさらなる検討の加速が行われた。

材料コストは合理的設計と高速スクリーニングにより、実用化射程に入ることが示され
た。本検討は、京都大学、名古屋大学、新日鐵住金株式会社の産学連携共同研究により継続
実施されることとなった。

従来、賦形不能と言われていた柔軟性 PCP が、本課題により賦形可能であることは立証された。但し、吸脱着に伴う粉化のミニマム化、大型吸着塔に装填した際のペレットの圧壊防止のためのペレット強度の向上は継続して実施されるべき検討項目であった。本項目は、北海道大学―新日鐵住金の産学共同研究により継続検討された。

特異的なガス吸着メカニズムにより CO を分離する本材料は、既存の PSA システムで利用しても、高い CO 分離能を発現する事は本課題により確認された。但し、新規な材料に PSA の装置構成、操業条件を適合させる、あるいは PSA 以外の装置開発により新規な材料特性を最大化させられる可能性は大きい。

第 2 章 研究開発課題終了から現在に至る状況

本 ACCEL 課題終了後の PCP によるガス分離技術の発展としては国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO)「グリーンイノベーション(GI)基金事業¹²/CO₂の分離回収等技術開発」の第二項「工場排ガス等からの中小規模 CO₂分離回収技術開発・実証」の中の「革新的分離剤による低濃度 CO₂分離回収システムの開発」(以下、「NEDO プロジェクト」と表記)に発展した。

ここでは本課題終了後の経過と各 POC のその後の実施状況について公開情報とインタビュー結果に基づきまとめる。

2.1 研究開発課題終了後の技術的成立性証明の実施状況

2.1.1 本課題終了後の研究開発経過

CO₂分離 PCP については前記 NEDO プロジェクトの技術開発・実証の実施機関として、日本製鉄株式会社(旧新日鐵住金株式会社)が入っており、本課題の CO ガス分離 PCP 開発の拡大発展プロジェクトとして技術開発・実証が進められている。

それ以外の本課題の成果として期待されたハイケム¹³の C1 化学原料としての CO 分離と応用については、該社は UBE 株式会社と共同で SEG 技術¹³と言う名で、合成ガスを原料としてエチレングリコールを合成するというプロセスを確立し 180 万トンプラントを 2022 年に生産開始、現在フル稼働と言われている。この原料 CO 製造プロセスとして本課題の PCP 分離も検討されたが現実には深冷分離法が採用されていると言われている。もう一つの実用化の可能性を挙げられた ALL の O₂/Ar ガス分離への適用については、技術的には可能性は確認できた¹⁴が、エネルギー面、コスト面での競争力が見いだせず、現時点(2024 年 8 月時点)では未だ実用化に至っていない状況となっている。

柔軟性 PCP の賦形技術については北海道大学・野呂¹⁵らのバインダー法、大阪府立大学(現大阪公立大学)・松岡¹⁶らのマシュマロゲル法が共同研究され、前者に近い方法¹⁷で本課題のパイロット試験まで進めた。バインダー法では PSA により実用評価したが粉化が起こり、現在も CO₂分離で強度向上検討が継続されている。後者のマシュマロゲル法は株式会社 Atomis での賦形実験を実施予定である。本プロジェクトで開発された柔軟性 PCP の賦形法は、前記 NEDO プロジェクトにおいても発展的に検討されている。

¹² NEDO/GI 基金事業 : <https://green-innovation.nedo.go.jp/>

¹³ ハイケム社 SEG 技術 : https://highchem.co.jp/seg_slider/

¹⁴ Gu C., Hosono N., Zheng J.-J., Sato Y., Kusaka S., Sakaki S., Kitagawa S., "Nanoporous materials: Design and control of gas diffusion process in a nanoporous soft crystal", *Science*, 363, 387(2019).

¹⁵ バインダー法 : 特願 2019-067364

¹⁶ マシュマロゲル法(シルセスキオキサン法) : 特願 2018-542945

¹⁷ パルプ繊維バインダー法 : 特願 2017-51610

2.1.2 NEDO の GI 基金事業：革新的分離剤による低濃度 CO₂ 分離回収システムの開発

2020 年 10 月、日本政府は「2050 年カーボンニュートラル」を宣言し、2050 年までに温室効果ガスの排出を全体としてゼロにする目標を掲げた。この目標を実現するため、経済産業省は NEDO に総額 2 兆円の基金を造成し、官民で目標を共有した上で、これに経営課題として取り組む企業などを研究開発・実証から社会実装まで 10 年間継続して支援するグリーンイノベーション (GI) 基金事業を立ち上げた。

その重点分野の一つとして「カーボンリサイクル・マテリアル産業」を挙げた。二酸化炭素 (CO₂) 分離回収の低コスト化・低エネルギー化には、CO₂ 回収効率を飛躍的に向上させる素材などの開発、カーボンリサイクル/CCUS までを包含した全体システムの開発が必要となるが、利用形態に応じて排ガス特性はさまざまであることから、一定の分類の下に、最適な素材・プロセスなどを開発することが求められる。これまで、EOR¹⁸ (原油増進回収法) に用いられる CO₂ 分離回収技術の商用プラントが国外で稼働している他、国内でも、石炭火力発電や製鉄プロセスなどにおける CO₂ 分離回収技術の開発・実証が進められている。今後は、より低圧・低濃度の排ガスへの対応に進展していくことが見込まれる。

そこで、NEDO は経済産業省が策定した研究開発・社会実装計画に基づき、ガス火力発電、工業炉といった産業プロセスなど、CO₂ 濃度が 10% 以下の領域を対象とした「CO₂ の分離回収等技術開発プロジェクト」を公募し、7 テーマを採択した。その中の一つが「CO₂ の分離回収等技術開発プロジェクト¹⁹」であり、①天然ガス火力発電排ガスからの大規模 CO₂ 分離回収技術開発・実証、②工場排ガス等からの中小規模 CO₂ 分離回収技術開発・実証、③CO₂ 分離素材の標準評価共通基盤の確立、を目指している。この②の中に「革新的分離剤による低濃度 CO₂ 分離システムの開発」として「革新的分離剤を用いた物理吸着法による低濃度 CO₂ 排ガスからの CO₂ 分離回収システムの技術開発および検証」が採択された。「構造柔軟型 PCP の特徴を生かした分離剤を低濃度 CO₂ 用に改良する。分離剤の量産スケールでの製法を確立する。材料特性ならびに工場排ガス条件に合わせたプロセスを開発して省エネルギーな低濃度 CO₂ 分離回収の技術を確立する。」という内容で PCP 技術確立が目標化されている。現在、前記 NEDO プロジェクトにおいて、ACCEL の成果の展開を行っている²⁰。

2.1.3 PCP による CO₂ ガス分離についての論文から

前記 NEDO プロジェクトで進められている研究開発の内容について、2020 年以降に発表された学術論文からニュースリリースされているものを紹介する。

¹⁸ EOR (Enhanced Oil Recovery) : 原油増進回収 (岩石や地層流体の物理・化学的特性を変化させ地下に残る原油を回収する)

¹⁹ <https://www.nedo.go.jp/content/100946348.pdf>

²⁰ 日本経済新聞 2022 年 12 月 22 日 https://www.nikkei.com/article/DGXZRS646666_S2A221C2000000/

(1) 「ゲート吸着材」を用いた二酸化炭素吸着回収プロセスのモデルベースの開発 ～カーボンリサイクル社会の実現に向けた貢献が期待～^{21 22} (名古屋大学、日本製鉄株式会社)

新材料である「ゲート吸着材」を用いた CO₂ 回収プロセスのシミュレーション技術を確認し、既存分離材に対する優位性を明らかにした。「ゲート吸着材」を用いたプロセスシミュレーションは計算が煩雑なため、実施が難しいとされていたが、プロセスシミュレーションの実施を妨げていた計算上の課題を解決し、世界で初めて、「ゲート吸着材」を用いた CO₂ 回収プロセスを、分離装置実機の動作を想定した動的シミュレーションにより評価した。

(2) 二酸化炭素に対してのみゲートを開いて吸着するフレキシブル多孔性材料を開発²³ (京都大学・iCeMS、中国同济大学)

これまでの多孔性材料をもちいたガス分離の研究では、主に 2 成分混合ガスに焦点が当てられ、多数の類似成分ガスから単 1 成分を識別する多孔性材料の開発に関する研究はほとんど行われていなかった。ここでは、構造に柔軟性を持つ多孔性配位高分子を設計し、構造の柔軟性を活かした波形チャンネルシステムを実現することによって、特定のガス分子に対して選択的な反応を示すことを明らかにした。吸着ガスとの結合部位と構造変化を相乗的に作用させることにより、N₂、CH₄、CO、O₂、H₂、Ar、C₂H₂、C₂H₄、C₂H₆などの類似ガス分子 9 種類に対して CO₂ のみを分離することができることを初めて実証した。

具体的には PCP 内での分子認識の機構である分子ふるい効果と細孔構造の立体化学的な設計、および選択的なゲートオープン挙動を相乗的に利用する構造開発に取り組み、コバルトイオン、ジ(4-ピリジル)グリコール、およびピリジンジカルボン酸を使用して新しいフレキシブル PCP を合成した。得られたフレキシブル PCP は、コバルトイオンとカルボン酸イオンがコバルトイオンで連結して構成される 2 次元シートが交互にズレた相互箝合(かんごう)型の 2 次元シート積層構造を持っている。この相互箝合型構造の細孔を観察すると、ガス吸着前の状態では、ガスの吸着サイトとなるポケット同士が分断され、デコボコで波打ったような細孔構造をしている。このような相互箝合型構造では、シート間の相互作用を上回る吸着エネルギーを持つガスのみが吸着挙動を示す。一方で、ガス分子の中でチャンネルを通過するための障壁エネルギーが大きい場合、そのガスはチャンネルを通過することができず、吸着が妨げられる。これらのメカニズムが複合的に作用することにより、この新しいフレキシブル PCP が特異的な吸着特性を実現していることが明らかになった。

²¹ Takakura Y., Sugimoto S., Fujiki J., Kajiro H., Yajima T., Kawajiri Y., “Model-based analysis of highly efficient CO₂ separation process using flexible metal-organic frameworks with isotherm hysteresis”, *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 10, 14935(2022).

²² <https://www.nagoya-u.ac.jp/researchinfo/result/2022/11/co2.html>

²³ Gu Y., Zheng J., Otake K., Sakaki S., Ashitani H., Kubota Y., Kawaguchi S., Yao M.S., Wang P., Wang Y., Li F., and Kitagawa S., “Soft Corrugated Channel with Synergistic Exclusive Discrimination Gating for CO₂ Recognition in Gas Mixture”, *Nature Communications*, 14, 4245(2023).

この新規 PCP には CO₂ 以外のガスはほとんど吸着せず、また CO₂ を含む混合ガスからも CO₂ のみを排他的に識別・分離することができた。

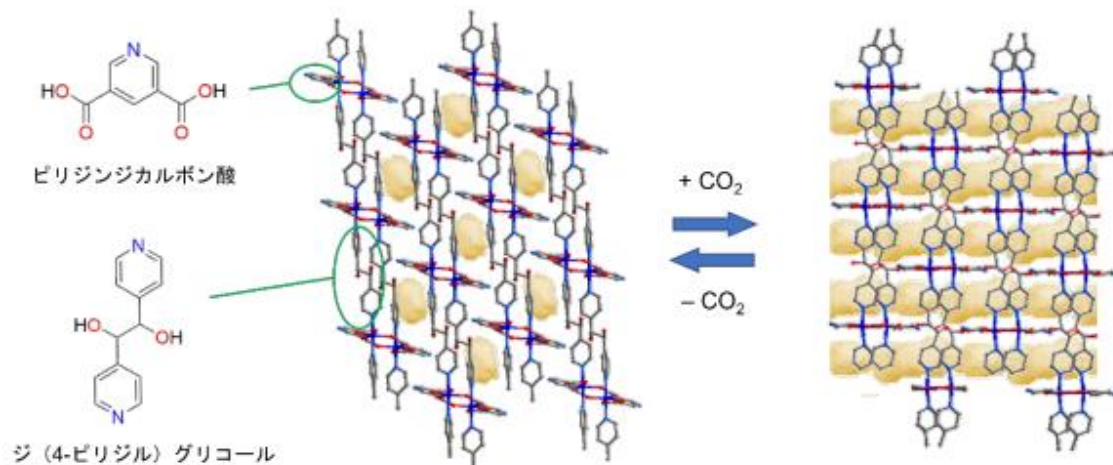


図 2-1 CO₂ を選択的に吸着する新規フレキシブル PCP

2.2 産業財産権等の権利化状況

期間中に 9 件の特許が出願されて、8 件が日本で成立している(内 1 件は、中国・韓国・米国でも成立)。成立率は 88%を超える非常に高いものとなっており、これは開発した技術レベルが高いとも言える。課題終了後も 8 件の特許が出願されている(2024 年 8 月現在)。

表 2-1 期間中に提出された特許で成立した特許

No.	特許番号	出願日	発明の名称	権利者	登録国
1	特 許 第 6338476 号	2014.07.15	ふっ素を含有する配位高分子錯体、ガス吸着材、これを用いたガス分離装置およびガス貯蔵装置	日本製鉄株式会社、国立大学法人京都大学	日本
2	特 許 第 6525686 号	2015.04.02	多孔性高分子金属錯体、ガス吸着材、これを用いたガス分離装置およびガス貯蔵装置	日本製鉄株式会社、国立大学法人京都大学	日本
3	特 許 第 6671128 号	2015.09.08	多孔性高分子金属錯体、ガス吸着材、これを用いたガス分離装置及びガス貯蔵装置	日本製鉄株式会社、国立大学法人京都大学	日本
4	特 許 第 664904 号	2015.11.04	ガス分離装置	日本製鉄株式会社	日本
5	特 許 第 676125 号	2016.02.25	多孔高分子金属錯体、これを用いたガス吸着材、ガス分離装置、ガス貯蔵装置、触媒、導電性材料、センサー	日本製鉄株式会社、国立大学法人京都大学	日本
6	特 許 第 667640 号	2016.02.25	三次元多孔高分子金属錯体、これを用いたガス吸着材、ガス分離装置、ガス貯蔵装置、触媒、導電性材料、センサー	日本製鉄株式会社、国立大学法人京都大学	日本
7	特 許 第 722965 号	2017.03.16	多孔性高分子金属錯体の賦形体	日本製鉄株式会社	日本

No.	特許番号	出願日	発明の名称	権利者	登録国
8	特 許 第 714813 号	2017.09.29	複合材料及びガス吸着材並びに複合材 料の製造方法	国立研究開発 法人科学技術 振興機構	日本 中国 米国 韓国

2.3 第2章のまとめ

本課題スタート時は実用化対象として製鉄業界における高炉廃ガス中の CO 分離濃縮利用を第一候補として研究を進めた。しかしながら、期間終了後、CO 分離については（ゼオライト法、アミン吸収法などの）既存プロセスが実用化され、CCUC などの貯蔵法へと進んでいる。製鉄業界は、脱炭素のトレンドに合わせ、加熱源の水素への転換（CO₂ の発生を抑える）、廃ガスから CO₂ を分離して、貯蔵、利用するという方向へと舵を切った。20 年前から理論的に提唱されていた柔軟性 PCP の PSA 適用可能性を本課題で実証できたことの意義は大きく、前記 NEDO プロジェクトにつながった。そういう意味において、本課題で生み出した成果は大きな意味を持っていると言える。

第 3 章 研究開発課題成果の波及と展望

3.1 科学技術への波及と展望

3.1.1 新規の理論や概念の提唱

研究代表の北川は本課題とほぼ同時期（2013～2017 年度）に科研費特別推進研究（課題名：「階層的配位空間の化学」）を獲得、並行して PCP（配位空間）最適設計の研究を進めた²⁴。PCP の造り出すナノ空間を階層的に集積化させ、あらゆる細孔機能を統合した「階層的配位空間」は新たな学理の創成となる。特に分子の分離・変換・輸送機能をテーマに、PCP の合成および細孔内空間での新現象の開拓、そしてナノから巨視的スケールに互る PCP の階層的集積化法を確立し、新しい空間の学問領域を開拓した。結果として、PCP の階層的細孔構造を精緻にデザインすることによって、 C_2H_2/CO_2 や C_2H_4/C_2H_6 などの一般的に極めて難しいとされるガス種の分離²⁵や細孔内物質変換²⁶を達成する配位空間をもたらす PCP の合成に成功した。さらに、高分子素材との複合化手法を開発し PCP の階層的集積化への道筋を開き、PCP を基盤とする新しい分離膜の開発にも成功している。

ガス分離技術として柔軟性 PCP を適用する本課題の成果は、①ガス種に合った PCP の設計と合成、②柔軟性・ゲート効果の応用、③PSA プロセスの適用、④PSA に耐えられる強度を持たせる賦形化技術の確立である。PCP の実用化は世界的に見てもまだ一部に限られており、依然課題は多く残されているが、反対に実用化に向けた研究は世界中で盛り上がりを見せている。本課題と並行して行った基礎研究と本課題における実証研究の相乗した成果がその後の PCP 研究の発展に及ぼした影響は大きい。

3.1.2 新たな研究領域や研究の潮流の形成

上に記したように、PCP 適用技術により「設計された微小空間における現象」の科学が明らかになってくるが、北川は PCP の歴史を俯瞰した上で以下の様な「第 4 世代 PCP」を論じている²⁶。

これまでの配位結合ネットワークは第 1 世代(ゲストが無いと壊れる)、第 2 世代(強い骨格、吸着剤、ゼオライト的)、第 3 世代(柔軟性多孔質フレームワーク、外部刺激に応答)に分けられる。今後第 4 世代の PCP は 3 つの属性で特徴付けられる。北川はそれを a)b)c) と分け、a)は細孔内のハイブリッドと階層性(H:Hierarchy & Hybrid)、b)は異方性と非対称性

²⁴ 研究成果報告書「階層的配位空間の化学」 <https://kaken.nii.ac.jp/ja/file/KAKENHI-PROJECT-25000007/25000007seika.pdf>

²⁵ Krause S., Hosono N., Kitagawa S., “Chemistry of Soft Porous Crystals: Structural Dynamics and Gas Adsorption Properties”, *Angew. Chem. – Intern. Ed.*, 59, 15325(2020).

²⁶ Gu Y., Zheng J.-J., Otake K.-I., Sugimoto K., Hosono N., Sakaki S., Li F., Kitagawa S., “Structural-Deformation-Energy-Modulation Strategy in a Soft Porous Coordination Polymer with an Interpenetrated Framework”, *Angew. Chem. – Intern. Ed.*, 59, 15517(2020).

(A:Anisotropy & Asymmetry)、c)は構造的欠陥と無秩序さ(D:Disorder & Defect)と分類し(統合してHAD)、それらの組み合わせで新しい科学の広がりや新機能の創出などが期待されると解説している。本課題と繋がるガス吸着については柔軟性からくる変形と選択性変化を加え呼吸にも似た吸脱着の可能性を論じている。(図 3-1)

PCP に関する研究はこのように新しい学問分野を形成したこともあって、吸着分離剤、ガス貯蔵材、触媒(としての PCP)、導電材料、薬剤徐放担体、膜材料など多岐に亘って応用が研究されている。

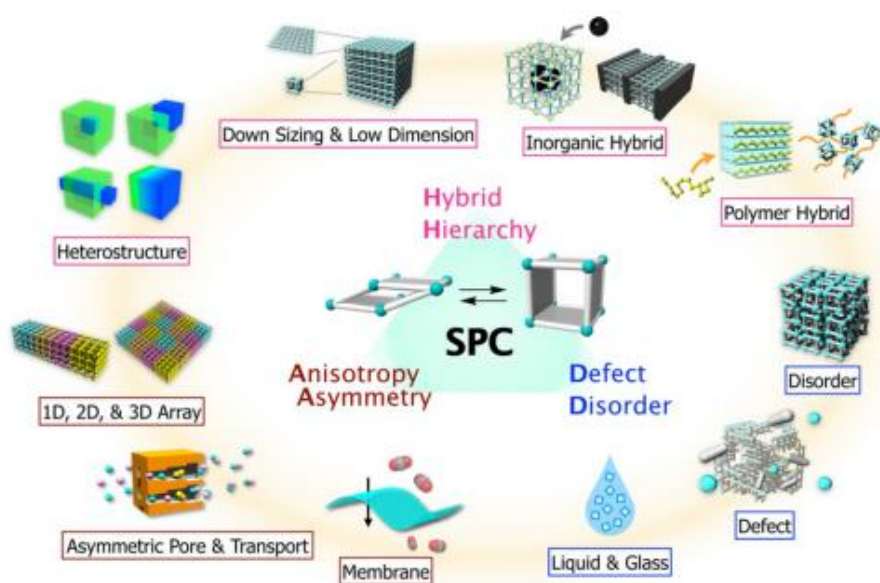


図 3-1 Different aspects of fourth-generation PCPs obtained from SPC(Soft Porous Crystals)²⁶

3.1.3 国際共同研究

本課題では「インパクトある PCP 実用先」の候補として中国のハイケムグループの基礎原料を C0 とする C1 化学を念頭に置いた²⁷。2.1.1 項で述べたように該社では 180 万トン規模のグリコールプラントをフル稼働しているがその原料は深冷分離法で分離された C0 である。コスト如何では PCP 法が採用される可能性もあった。

CO₂ ガス分離については 2.1.3 項で述べた新規 PCP は中国同濟大学との共同研究である。「中国における C1 化学原料」は今後も注目される。

²⁷ ハイケム社の C1 事業 : https://highchem.co.jp/seg_slider/

3.1.4 科学技術への波及のまとめと展望

微小空間ならではの現象は予想できない分野を創り出す可能性があり、かつその構成要素の組み合わせによる任意性もある。今後の新しい分野の創成に、新しい PCP の創成が寄与することが期待される。

3.2 社会経済への波及と展望

本課題からの波及と展望とは限定できないが、最近の PCP 技術の展開は非常に多岐に亘っている。特に PCP による新規微小空間の設計により既存の科学研究対象について新たな常識を創造できる可能性がある。統計的集団として扱われた物質を個々の分子レベルで議論することで新規な現象を生み出せる。

3.2.1 資源エネルギー分野への展開

人類にとって喫緊の課題になりつつある地球温暖化と解決策としての脱炭素化について、特に CO₂ を始めとする各種ガスの分離・精製・貯蔵の解決策を与える。前記 NEDO プロジェクトにおける CO₂ 分離から資源化までの総合計画に期待したい。CO₂ を分離精製貯蔵し、人工光合成(PCP 触媒)で CO にし、それを原料に進める C1 化学は人類にとっての新しい資源を提供する。

3.2.2 電気電子分野への展開

北川の率いる京都大学 iCeMS では導電性 PCP やイオン・プロトン伝導性 PCP を開発し、燃料電池への応用など、電気電子分野への応用を検討している。PCP の細孔内へのイオン・プロトンなどの取り込みで有機物の電気特性を制御できる²⁸。

3.2.3 化学生物分野への展開

触媒空間としての PCP も広範囲で研究されているが特に光還元触媒としての PCP が注目される。Ru 錯体を触媒とする有機ヒドリドを介した CO₂ の光還元によるギ酸の合成は天然の酸化還元補酵素(NAD⁺/NADH) をモデルとして人工光合成系の創製へと期待される²⁹。

CO₂ からの人工光合成プロセスが完成すれば CO₂ 原料の C1 化学が大きく進展する。

触媒空間のみならず、より広く「制御された反応場」としての PCP の利用も新しい学問領域を与えている。例えばデザインされた PCP の細孔中にモノマーを入れて重合させること

²⁸ 例えば Wu X., Hong Y.-L., Xu B., Nishiyama Y., Jiang W., Zhu J., Zhang G., Kitagawa S., Horike S., “Perfluoroalkyl-Functionalized Covalent Organic Frameworks with Superhydrophobicity for Anhydrous Proton Conduction”, *Journal of the American Chemical Society*, 142, 14357(2020).

²⁹ Kinoshita Y., Deromachi N., Kajiware T., Koizumi T.-A., Kitagawa S., Tamiaki H., Tanaka K., “Photoinduced Catalytic Organic-Hydride Transfer to CO₂ Mediated with Ruthenium Complexes as NAD⁺/NADH Redox Couple Models”, *ChemSusChem*, 16(6), e202300032

で単分子鎖の高分子構造・集積や立体規則性の制御など従来法では困難な重合反応制御が可能³⁰となっている。

また生物分野への PCP の応用は医薬にマッチした PCP の設計により DDS (ドラッグデリバリーシステム) 用担体としての応用が期待できる³¹。

3.2.4 社会への貢献

これまでの技術で解決できなかった問題を解決し得る新しいツールの一つとして PCP で創り出せる新しい空間が応用できる可能性がある。それによりこれまでの学問で解決できなかった問題に新しい解決の糸口を与えることができる。

3.2.5 社会経済への波及のまとめと展望

既存の学問分野であっても対象とする空間を制御することでこれまで見られなかった現象が見られ、それが新しい分野を創成する可能性がある。PCP は多くの分野でその可能性を示すことで適用分野を拡大している。

3.3 第3章のまとめ

PCP は金属イオンと配位子の組み合わせにより全く新しい空間を創り出すことで新しい学理を提供した。この無限の可能性を広い分野に適用することで、新しいイノベーションを生み出せる。この新学理が多くの分野の専門家の目に留まりその応用を考えてもらえることを期待したい。

³⁰ Mochizuki S., Ogiwara N., Takayanagi M., Nagaoka M., Kitagawa S., Uemura T., "Sequence-regulated copolymerization based on periodic covalent positioning of monomers along one-dimensional nanochannels", *Nature Communications*, 9, 329 (2018).

³¹ Lim J.Y.C., Goh L., Otake K.-I., Goh S.S., Loh X.J., Kitagawa S., "Biomedically-relevant metal organic framework-hydrogel composites", *Biomaterials Science*, 11, 2661 (2023).