

## 科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 2 年 6 月 18 日現在

機関番号：13601

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17H03097

研究課題名(和文)水分子同位体の高効率分離プロセス開発を指向した量子分子篩材料の探求

研究課題名(英文) Search of quantum molecular sieve materials for development of high efficiency separation process of water isotope

研究代表者

田中 秀樹 (Tanaka, Hideki)

信州大学・先鋭領域融合研究群先鋭材料研究所・教授(特定雇用)

研究者番号：80376368

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 14,200,000円

研究成果の概要(和文)：数ある金属-有機フレームワーク(MOF)の合成報告例の中から、親水性微小空隙を有し、かつ、熱的安定性に優れるCa錯体 $[\text{Ca}(\text{C4O4})(\text{H}_2\text{O})]_n$ を見出し、その水蒸気吸着等温線測定およびin situ粉末X線回折測定を行った。そして、Ca錯体の特異な水同位体分子( $\text{H}_2\text{O}$ および $\text{D}_2\text{O}$ )の分子認識能を有することを確認すると同時に、Feynmanの経路積分法を適用したab-initio分子動力学シミュレーションを行うことで、そのCa錯体の分子認識能が、量子力学的効果に起因する微小な水素結合力の差異を鋭敏に検知することによって発現するものであることを明らかとした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究によって、究極の水同位体分子認識能を有する材料の探索・開発に資する重要な知見を得ることができた。また、多孔性材料が構造変形することによって、水同位体分子における微小な水素結合力の差異を認識する現象はこれまでに報告例が無く、極めて新規的な研究成果であると言える。以上の成果は、高付加価値同位体の分離技術開発、水素結合の構造・動力学に関する基礎研究、計算科学の発展のそれぞれに資するものと期待される。

研究成果の概要(英文)：From a number of reports on the synthesis of metal-organic frameworks (MOFs), we have chosen a Ca complex  $[\text{Ca}(\text{C4O4})(\text{H}_2\text{O})]_n$  with hydrophilic nanospaces and excellent thermal stability. Water isotope adsorption isotherms and in situ powder X-ray diffraction measurements for the Ca complex were performed, and we experimentally confirmed that the Ca complex has the ability to specifically recognize water isotope molecules ( $\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{D}_2\text{O}$ ). Moreover, we conducted ab-initio molecular dynamics simulation using Feynman's path integral method, and it was clarified that the molecular recognition ability of the Ca complex came from recognizing the minute difference in the hydrogen bonding strength between  $\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{D}_2\text{O}$  caused by quantum effects.

研究分野：吸着工学

キーワード：金属有機構造体 水同位体 量子力学的効果 経路積分ab initio MD

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

水素の安定同位体である重水素は、プラスチック光ファイバーの透過率向上、Si ウェハの重水素熱処理による LSI の長寿命化、代謝的に重要な位置にある H 原子を D 原子に置換することで薬効を増進させる重水素化医薬品などへの利用が期待される高付加価値物質である。さらに、重水素は将来の熱核融合炉 [D + T → 4He + 中性子 (14 MeV)] の燃料となると考えられているが、最近になってロッキード・マーチン (2014 年) や MIT (2015 年) が、相次いで小型熱核融合炉の技術開発にブレークスルーがあったことを報告したことから、商業用熱核融合炉実現への期待が高まってきている。現在の主要な重水素製造法は化学交換法 [H<sub>2</sub>O (l) + HDS (g) ↔ HDO (l) + H<sub>2</sub>S (g)] であるが、D 選択率が 2.3 と低く、有毒・腐食性の H<sub>2</sub>S を用いるために高コストなプロセスとなっている。そこで、研究代表者は新規重水素分離プロセスとして低温気相吸着法による量子分子篩に着目し、研究を推進してきた。ここでの「量子分子篩」とは、固体細孔内に制約された吸着分子のサイズと細孔径との差が熱 de Broglie 波長と同程度となる時、吸着分子の並進運動エネルギーが量子化される (位置不確定性が発現する) 現象を利用するもので、質量の小さな同位体分子は細孔内において不安定化し、質量の大きな同位体分子が細孔内に濃縮される。この低温気相吸着法による重水素分離プロセスは、例えば、工業用水素ガス生産における分離精製工程での寄生プロセスとして有望であるが、残念ながら重水素生産のための独立プロセスとしての経済性は良いものではない。そこで研究代表者は、低コスト・省エネルギーな水分子同位体の分離プロセス開発を可能とする量子分子篩の原理・メカニズムを着想するに至った。

### 2. 研究の目的

原子位置不確定性に起因する微小な水素結合力の差異を鋭敏に認識 (水素結合力 T > D > H) し、水分子同位体の重成分 (分子量: T<sub>2</sub>O > TDO > THO = D<sub>2</sub>O > DHO > H<sub>2</sub>O) を濃縮することが可能な金属・有機フレームワーク (MOF) を探索することを目的とする。

水分子同位体認識が可能となると期待される原理・メカニズムを図 1 に示す。まず、真空下において、水分子同位体よりも小さな親水性微小空隙を有する MOF が熱力学的安定状態にあるとする (図 1a)。そして、この MOF が D<sub>2</sub>O 分子と水素結合を形成し、かつ、その分子サイズにフィットするように空隙のサイズが拡大する場合を考える (図 1b)。このとき、D 原子は室温下といえども量子化されており、図 1b では、その位置不確定性を Feynman の経路積分表示に基づいて図示している。この D<sub>2</sub>O 分子を H<sub>2</sub>O 分子に置換するためには、その空隙のサイズをさらに拡大しなければならず、このとき、系の全自由エネルギーはさらに増加する (図 1c)。これは、質量の小さな H 原子では位置不確定性が増大し、その有効サイズが D 原子よりも大きくなるためであるが、一方で、親水性微小空隙内において形成される水素結合は、D 原子の位置不確定性の小さい D<sub>2</sub>O 分子の方が強くなる。このように、「室温下」において通常は無視小である量子効果を、ホストの自由エネルギー変化として増幅・増強させ、究極の分子認識能を発現する材料を探索することを目指す。

### 3. 研究の方法

これまでの金属・有機フレームワーク (MOF) の合成報告例の中から、そのフレームワーク中に結晶水を含有し、かつ、熱的安定性に優れるものを選び出し、水同位体分子 (H<sub>2</sub>O および D<sub>2</sub>O) の吸着挙動を検討すべき MOF を絞り込む。そして、候補となるべき MOF を合成し、その水同位体分子の吸着挙動を蒸気吸着等温線測定および in situ 粉末 X 線回折測定によって明らかとする。さらに、Feynman の経路積分法を適用した ab initio 分子動力学シミュレーション (量子効果を考慮) を行うことで、H<sub>2</sub>O および D<sub>2</sub>O に対する分子認識能の発現メカニズムを解明すると同時に、所望の量子分子篩性を発現すべき MOF の予測を行う。

### 4. 研究成果

数ある MOF の中で、Ca にスクアリン酸が配位した MOF (Ca1: [Ca(C<sub>4</sub>O<sub>4</sub>)(H<sub>2</sub>O)]<sub>n</sub>) に着目した。Ca1 は c 軸方向の一次元チャンネルに水分子を物理吸着 (p-H<sub>2</sub>O) することができる他 (図 2a)、Ca 原子に水分子 (c-H<sub>2</sub>O) が化学的に吸着したフレームワーク構造を有している (図 2b)。この Ca1 を合成し、粉末 X 線回折 (XRPD) パターンを測定したところ (SPRing8, BL02B2 ビームライン)、Ca1 (c-H<sub>2</sub>O のみを含む) の格子定数 c は大きな温度依存性を示さない一方で、a (= b) 軸方向には特異的な負の熱膨張を示すことが分かった (図 3)。そこで、分散力補正密度汎関数法 (DFT-D: CP2K ソフトウェア) を用いた ab-initio 分子動力学シミュレーションを行ったところ、実験によって確認された a 軸方向の負の熱膨張を良好に再現することができ (図 4)、かつ、この負の熱膨張は、スクアリン酸の分子面に対して垂直方向の分子振動がフレームワークを収縮させる方向

に作用していることが要因であることを示唆する結果が得られた。

さらに **Ca1** の一次元チャンネル内に **p-H<sub>2</sub>O** 分子を配置し、**ab-initio** 分子動力学シミュレーションを行ったところ、温度 300 K において、格子定数 *a* および *c* が共に収縮することが分かった。この時、**p-H<sub>2</sub>O** 分子は、**c-H<sub>2</sub>O** 分子と水素結合を形成しており、この引力相互作用が *a, c* 軸方向の格子収縮を生じさせたものと考えられる。また、**Ca1+p-H<sub>2</sub>O** の構造最適化(温度 0 K)を実施したところ、格子定数 *c* は大きく変化しない一方、格子定数 *a* は増加し、**p-H<sub>2</sub>O** の存在下においても負の熱膨張が生じることが明らかとなった(図 4)。この負の熱膨張は、**p-H<sub>2</sub>O** 分子と **c-H<sub>2</sub>O** 分子との水素結合を形成するよりも、**p-H<sub>2</sub>O** 分子同士の水素結合による規則的な一次元鎖を優先的に形成した方がエネルギー的に有利であることを示唆している。つまり、温度 300 K においては、**p-H<sub>2</sub>O** 分子と **c-H<sub>2</sub>O** 分子との水素結合を多く形成することで、エントロピー的に有利となる構造が選択されているものと考えられる。

温度可変の *in situ* チャンバーを備えた XRPD 測定装置(ラボ)を開発し、**H<sub>2</sub>O** および **D<sub>2</sub>O** を包摂した **Ca1** の粉末 X 線回折パターン(蒸気圧依存性(温度 300 K))を詳細に検討した(図 5)。**Ca1** への **H<sub>2</sub>O** 吸着量が増加するに従って格子定数 *a* は小さくなっており、これは、**p-H<sub>2</sub>O** 分子と **c-H<sub>2</sub>O** 分子との間に形成される水素結合数が増加したためと考えられる。一方、**D<sub>2</sub>O** については、吸着量の増加に伴う格子定数 *a* の収縮が生じるものの、その収縮量は **H<sub>2</sub>O** 吸着の場合よりも小さくなることが明らかとなった。このことは、**D** 原子の位置不確定性の小さい **D<sub>2</sub>O** 分子の方が、強固な水素結合が形成されることに反するよう見えるが、上述の **Ca1+p-H<sub>2</sub>O** における負の熱膨張現象とのアナロジーが存在するものと考えられる。つまり、**Ca1+p-D<sub>2</sub>O** の系では、**p-D<sub>2</sub>O** と **c-H<sub>2</sub>O** との水素結合の形成によってエントロピー的に有利となるよりも、**p-D<sub>2</sub>O** 分子間で強固な水素結合による規則的な一次元鎖を形成することでエンタルピー的に有利な構造がとられているものと考えられる。そして、この現象は、原子核における量子力学的効果を考慮した経路積分 *ab initio* 分子動力学シミュレーション(i-PI + CP2K)によって再現することができた(図 6)。このことは、**Ca1** における水同位体分子の分子認識能が、量子力学的効果に由来することを意味している。以上のように本研究では、究極の水同位体分子認識能を有する材料の探索・開発に資する重要な知見を得ることができた。

また、構造柔軟性を有する flexible MOF (ELM-31b)における特異的な構造転移(ゲート吸着)挙動に着目し、その構造および転移メカニズムを明らかとするための検討を行った。これまでに、ELM-31b の *in situ* XRPD パターン(SPring-8, BL02B2 ビームライン)の Rietveld 解析によって、**N<sub>2</sub>** (77 K)、**CH<sub>4</sub>** (112 K)、**CO<sub>2</sub>** (195 K)の吸着構造と、事前の吸着ガス種に依存した異なる ELM-31b の degas 構造を決定することに成功した。現在までに、ELM-31b の水吸着構造を決定することができていないが、この ELM-31b の水吸着については、多くの興味深い特性を見出すことができた。例えば、ELM-31b は高温多湿の環境下においても全く影響を受けず、極めて高い安定性を有しており、ゲート吸着によって急激な水吸着等温線の立ち上がりを示すことから、本研究課題において目的とする、水を作動媒体とする吸着ヒートポンプを応用した水分子同位体分離プロセスの実現が期待される。ここで、多くの MOF は水に対して不安定であると言われていたが、この ELM-31b の水に対する安定性は驚異的なものであることから、引き続き、ELM-31b の水吸着構造の精密決定と、得られた構造を用いた計算科学的検討によって、その水安定性の起源を解明すると同時に、期待される水同位体分離能の評価を進めていく予定である。

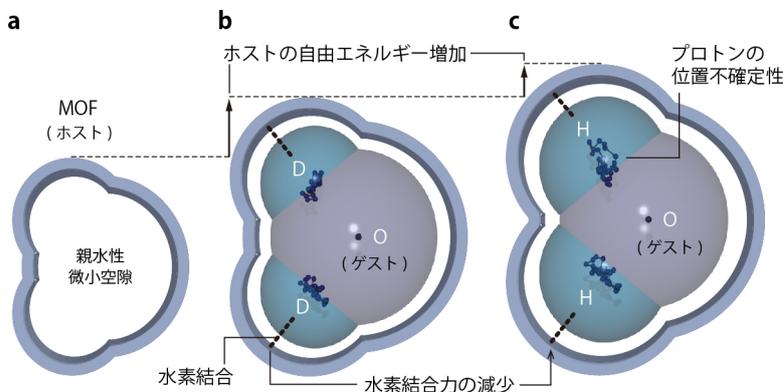


図 1 親水性微小空隙を有する MOF の概念図、**a** 真空下、**b** **D<sub>2</sub>O** 分子を包摂した状態、**c** **H<sub>2</sub>O** 分子を包摂した状態

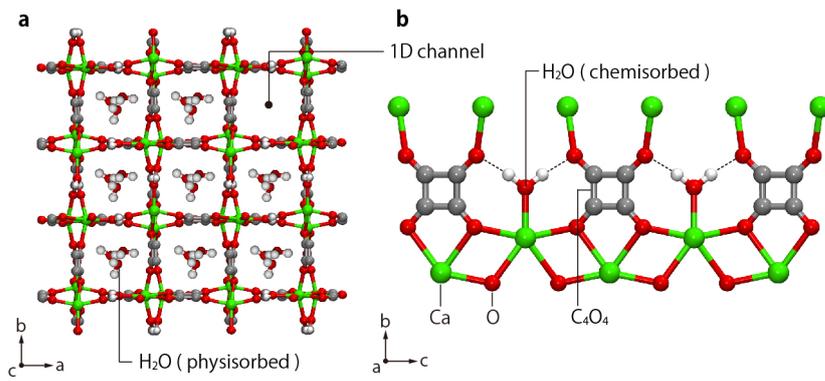


図2 Ca1 ( $[\text{Ca}(\text{C}_4\text{O}_4)(\text{H}_2\text{O})]_n$ ) の結晶構造, **a**  $a$ - $b$  面, **b**  $b$ - $c$  面

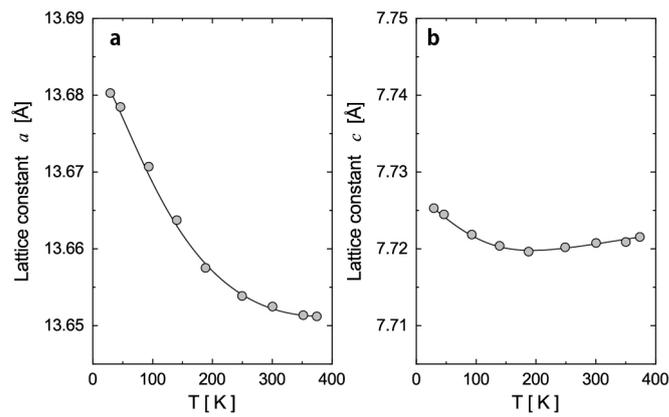


図3 in situ XRPD 測定によって得られた Ca1 構造の温度依存性, **a** 格子定数  $a$ , **b** 格子定数  $c$

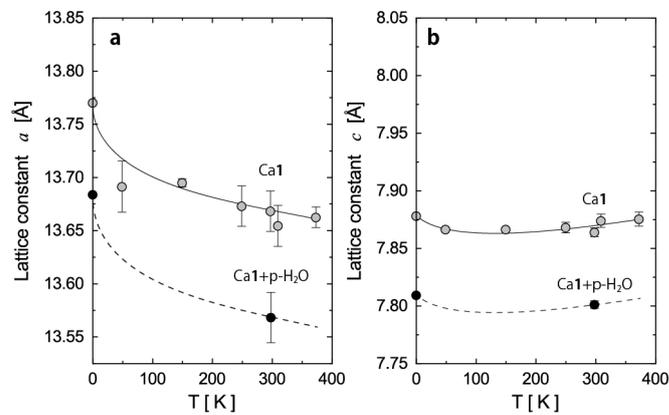


図4 ab-initio 分子動力学シミュレーションによる Ca1 および Ca1+p-H<sub>2</sub>O 構造の温度依存性, **a** 格子定数  $a$ , **b** 格子定数  $c$

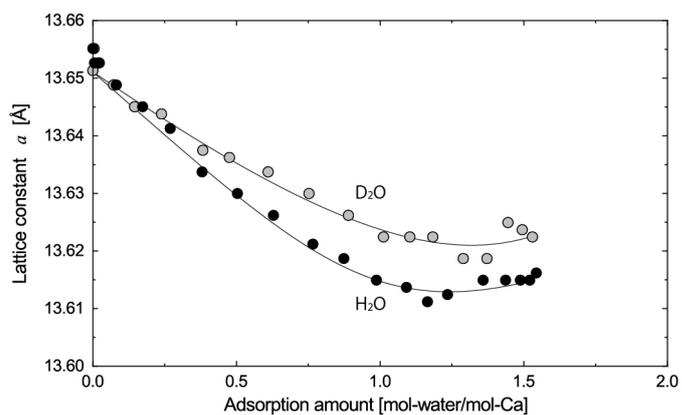


図 5 in situ XRPD 測定によって得られた Ca1+p-H<sub>2</sub>O および Ca1+p-D<sub>2</sub>O の格子定数  $a$  の吸着量依存性 (300 K)

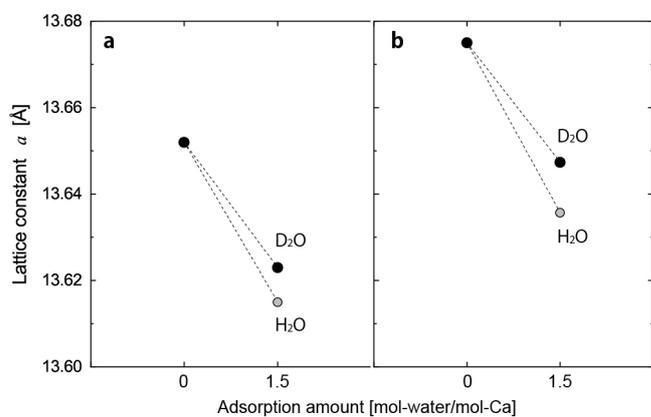


図 6 Ca1+p-H<sub>2</sub>O および Ca1+p-D<sub>2</sub>O の格子定数  $a$  (300 K), **a** in situ XRPD 測定, **b** 経路積分 ab-initio 分子動力学シミュレーション

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計11件（うち査読付論文 11件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 S. Kawaguchi, M. Takemoto, H. Tanaka, S. Hiraide, K. Sugimoto and Y. Kubota	4. 巻 27
2. 論文標題 Fast continuous measurement of synchrotron powder diffraction synchronized with controlling gas and vapour pressures at beamline BL02B2 of SPring-8	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 J. Synchrotron Radiat.	6. 最初と最後の頁 616-624
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S1600577520001599	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 A. Kondo, H. Kajiro, T. Nakagawa, H. Tanaka and H. Kanoh	4. 巻 49
2. 論文標題 A flexible two-dimensional layered metal - organic framework functionalized with (trifluoromethyl) trifluoroborate: synthesis, crystal structure, and adsorption/separation properties	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Dalton. Trans.	6. 最初と最後の頁 3692-3699
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1107/S1600577520001599	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 T. Sudare, S. Tamura, H. Tanaka, F. Hayashi and K. Teshima	4. 巻 58
2. 論文標題 Highly Crystalline - Co Layered Double Hydroxide Fabricated via Topochemical Transformation with a High Adsorption Capacity for Nitrate Ions	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Inorg. Chem.	6. 最初と最後の頁 15710-15719
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.9b00905	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 E. Ustinov, H. Tanaka and M. T. Miyahara	4. 巻 151
2. 論文標題 Low-temperature hydrogen-graphite system revisited: Experimental study and Monte Carlo simulation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 J. Chem. Phys.	6. 最初と最後の頁 24704
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5109625	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 K. Nomura, H. Nishihara, M. Yamamoto, A. Gabe, M. Ito, M. Uchimura, Y. Nishina, H. Tanaka, M. T. Miyahara and T. Kyotani	4. 巻 10
2. 論文標題 Force-driven reversible liquid-gas phase transition mediated by elastic nanosponges	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nat. Commun.	6. 最初と最後の頁 2599
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-019-10511-7	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 H. Tanaka and M. T. Miyahara	4. 巻 24
2. 論文標題 Free energy calculations for adsorption-induced deformation of flexible metal-organic frameworks	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Curr. Opin. Chem. Eng.	6. 最初と最後の頁 19-25
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.coche.2019.01.001	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 田中 秀樹, 瀬戸 樹, 西原 洋知, 京谷 隆, 宮原 稔	4. 巻 285
2. 論文標題 メタン貯蔵材料開発を指向したゼオライト鑄型炭素合成の分子シミュレーション	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 炭素	6. 最初と最後の頁 197-203
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7209/tanso.2018.197	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Y. Yamane, H. Tanaka and M. T. Miyahara	4. 巻 141
2. 論文標題 In silico synthesis of carbon molecular sieves for high-performance air separation	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Carbon	6. 最初と最後の頁 626-634
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.carbon.2018.10.021	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 T. Hiratsuka, H. Tanaka and M. T. Miyahara	4. 巻 122
2. 論文標題 What is the Smallest Atom as a Probe for Characterizing Nanostructures?	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. C	6. 最初と最後の頁 15446-15455
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b04107	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 S. Hiraide, H. Tanaka, N. Ishikawa and M. T. Miyahara	4. 巻 9
2. 論文標題 Intrinsic Thermal Management Capabilities of Flexible Metal-Organic Frameworks for Carbon Dioxide Separation and Capture	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 ACS Appl. Mater. Interface	6. 最初と最後の頁 41066-41077
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsami.7b13771	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 T. Hiratsuka, H. Tanaka, and M. T. Miyahara	4. 巻 121
2. 論文標題 Comprehensive Modeling of Capillary Condensation in Open-Ended Nanopores: Equilibrium, Metastability, and Spinodal	5. 発行年 2017年
3. 雑誌名 J. Phys. Chem. C	6. 最初と最後の頁 26877-26886
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.7b09631	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計17件 (うち招待講演 7件 / うち国際学会 7件)

1. 発表者名 田中 秀樹
2. 発表標題 計算科学的手法を援用した多孔性材料のモデル化と吸着特性評価
3. 学会等名 第76回表面技術アカデミック研究会討論会&関東支部第98回講演会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Tanaka, S. Hiraide, K. Nagai, A. Bagusetty, J. K. Johnson, M. T. Miyahara, K. Kaneko, K. Teshima
2. 発表標題 Molecular Recognition of Water Isotopes on Porous Coordination Polymer
3. 学会等名 Materials Research Meeting 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田中 秀樹
2. 発表標題 計算科学的手法を援用した多孔性固体のモデル化と吸着特性評価
3. 学会等名 第124回触媒討論会 (招待講演)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 H. Tanaka, S. Hiraide, H. Kajiro, S. Kawaguchi, Y. Sakanaka, M. T. Miyahara
2. 発表標題 Pressure-Aided Fast Gating and Thermal Management Capabilities of Flexible MOFs for CO2 Separation
3. 学会等名 13th International Conference on Fundamentals of Adsorption (FOA13) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 田中 秀樹, 平出 翔太郎, 永井 和宏, A. Bagusetty, J. K. Johnson, 宮原 稔, 金子 克美, 手嶋 勝弥
2. 発表標題 金属有機構造体における水同位体の分子認識
3. 学会等名 第50回中部化学関係学協会支部連合秋季大会
4. 発表年 2019年

1 . 発表者名 H. Tanaka, S. Hiraide, K. Nagai, A. Bagusetty, J. K. Johnson, M. T. Miyahara, K. Kaneko, K. Teshima
2 . 発表標題 Molecular Recognition of Water Isotopes on Porous Coordination Polymer
3 . 学会等名 Okinawa Colloids 2019 (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 H. Tanaka, S. Hiraide, H. Kajiro, S. Kawaguchi, Y. Sakanaka, M. T. Miyahara
2 . 発表標題 Pressure-Aided Fast Gating for CO <sub>2</sub> adsorption on ELM-11
3 . 学会等名 Japan Adsorption 2019 (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 H. Tanaka, S. Hiraide and M. T. Miyahara
2 . 発表標題 Intrinsic Thermal Management Capabilities of Flexible Metal-Organic Frameworks for CO <sub>2</sub> separation
3 . 学会等名 8th Pacific Basin Conference on Adsorption Science and Technology (招待講演) (国際学会)
4 . 発表年 2018年

1 . 発表者名 T. Hiratsuka, H. Tanaka and M. T. Miyahara
2 . 発表標題 Thermodynamic and Kinetic Modeling of Capillary Condensation and Evaporation in Open-Ended Nanopores
3 . 学会等名 8th Pacific Basin Conference on Adsorption Science and Technology
4 . 発表年 2018年

1. 発表者名 清水 亮, 田中 秀樹, 宮原 稔, 酒井 求, 松方 正彦
2. 発表標題 Ag置換ゼオライトX - 炭化水素吸着系のin situ X線構造解析および計算科学的検討
3. 学会等名 第 69 回コロイドおよび界面化学討論会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 平塚 龍将, 田中 秀樹, 宮原 稔
2. 発表標題 量子分子シミュレーションによる微細構造解析に最適な希ガスプローブ原子の探索
3. 学会等名 第32回日本吸着学会研究発表会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 田中 秀樹, 山根 康之, 足立 平, 宮原 稔
2. 発表標題 分子篩炭素のin silico合成とその空気分離特性評価
3. 学会等名 第45回炭素材料学会年会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 田中 秀樹, 平出 翔太郎, 石川 徳知, 宮原 稔
2. 発表標題 ソフト金属有機構造体のCO2吸着における自己熱補償メカニズム
3. 学会等名 第27回吸着シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 H. Tanaka, S. Hiraide, N. Ishikawa and M. T. Miyahara
2. 発表標題 Intrinsic Thermal Management Capabilities of Flexible Metal-Organic Frameworks for CO <sub>2</sub> separation
3. 学会等名 The 11th International Conference on Separation Science and Technology (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 H. Tanaka, S. Hiraide, N. Ishikawa, and M. T. Miyahara
2. 発表標題 Intrinsic Thermal Management Capability of Elastic Layer-Structured MOF-11 for CO <sub>2</sub> Capture and Separation
3. 学会等名 JST ACCEL R&D Project International Symposium, The Nanospace Science of PCP for Molecular Control - Application and Development (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 田中 秀樹, 平出 翔太郎, 宮原 稔
2. 発表標題 ソフト金属有機構造体の自己熱補償メカニズムとCO <sub>2</sub> 吸着分離への応用
3. 学会等名 化学工学会金沢大会2017
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 田中 秀樹, 平出 翔太郎, 宮原 稔
2. 発表標題 ソフト金属有機構造体のCO <sub>2</sub> 吸着分離への応用検討
3. 学会等名 化学工学会 第83年会
4. 発表年 2017年

## 〔図書〕 計2件

1. 著者名 Y. Ma, H. Tanaka and R. Matsuda	4. 発行年 2019年
2. 出版社 Springer	5. 総ページ数 27
3. 書名 Nanoporous Materials for Gas Storage	

1. 著者名 田中 秀樹, 宮原 稔	4. 発行年 2019年
2. 出版社 技術情報協会	5. 総ページ数 14
3. 書名 PCP/MOFおよび各種多孔質材料の作り方, 使い方, 評価解析	

## 〔出願〕 計1件

産業財産権の名称 自己熱補償型柔軟性PCPを使用したガス分離装置	発明者 上代 洋, 堂野前 等, 平出 翔太郎, 田中 秀樹, 宮原 稔	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、147065	出願年 2018年	国内・外国の別 国内

## 〔取得〕 計0件

## 〔その他〕

<a href="http://soar-rd.shinshu-u.ac.jp/profile/ja.ZaTUgmye.html">http://soar-rd.shinshu-u.ac.jp/profile/ja.ZaTUgmye.html</a>
---

## 6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分 担 者	近藤 篤  (Kondo Atsushi)  (60533619)	成蹊大学・理工学部・研究員     (32629)	