

令和 2 年 6 月 9 日現在

機関番号：11301

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2017～2019

課題番号：17H03122

研究課題名(和文) 先端エネルギーと医療応用のための多機能性ナノポーラス材料の理論設計と実験的創製

研究課題名(英文) Theoretical design and experimental realization of multifunctional nanoporous materials for advanced energy and medical applications

研究代表者

ベロスルドフ ロディオ(Belosludov, Rodion)

東北大学・金属材料研究所・准教授

研究者番号：10396517

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 12,200,000円

研究成果の概要(和文)：複雑な組成・構造を持つナノポーラス材料の電子的、動的、熱力学的特性に関する新しい研究方を提案した。経験的パラメータに頼ることなく、ガス貯蔵容量と熱力学的安定性算定を可能とした。原子レベルの制御を可能にするために、多孔質構造の設計に必要なナノポーラス材料中の弱い相互作用の役割と性質を評価した。系の安定性に寄与するゲストとホストの相互作用が理解出来ると、これらの材料の複雑な構造と特性の関係を説明する分子レベルでの重要なキーが得られる。分子レベルで実験家に情報を提供することにより、生態学的にクリーンな貯蔵材料とドラッグデリバリーシステムの実験的検討を支援出来た。

研究成果の学術的意義や社会的意義

現在のプロジェクトで得られた成果は重要で時宜を得たものである。得られた結果は、エネルギーおよび健康問題解決用に優れた特性を有する新しい種類の材料として、ソフトナノポーラス材料の実用化を支援する。現在知られている材料と比較して、有効性、価格、安全性に優れている。本研究で提案する計算アプローチと適用された実験手法は、科学的予測から工業応用までにかかる時間を短縮し、急速に発展している現代社会の動きをより持続可能な方法で支援できる。

研究成果の概要(英文)：The obtained results provide a new route to study the electronic, dynamic and thermodynamic properties of nanoporous materials with complex compositions of adsorbed gases. It allows us to calculate the gas storage capacity and thermodynamic stability without recourse to any empirical parameter fitting. The role and nature of weak interactions into nanoporous materials was evaluated in order to permit atomistic-level control in the design of porous structures. The gas storage capacity and thermodynamic conditions of selected nanoporous materials were calculated. Understanding the guest-host interactions on the stability of nanoporous materials provide the molecular-level keys to explain the complex structure-property relationship of these materials. The project involve collaboration between experimental and theoretical groups by providing information to experimentalists. This support the experimental exploration of ecologically clean storage materials and drug delivery systems.

研究分野：計算化学

キーワード：ナノポーラス材料 包接水和物 金属有機構造体 コンピューター・シミュレーション ホスト-ゲスト相互作用 ガス貯蔵・分離 熱力学的特性 水素結合ネットワーク

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属されます。

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

歴史的に、多孔質固体は膜、吸着剤、触媒などの確立されたプロセス、および多くの化学的用途に使用されてきた。革新的な保管、分離、および輸送技術に使用される多孔質材料は、長期的安定性を有し、特定の対象に対する効果および/または識別能力を備え、環境汚染や健康被害をもたらさない、という条件全てを満たす必要がある。ガスにはサイズや形状がなく、気相中の全く異なる分子でさえ自由に混合できるため、ガスの取り扱いには困難を極める。特定または高度に選択的な吸着プロセスを実現する戦略は、吸着分子の化学的および物理的特性の理解と、各分子の相違を識別できるナノポーラス化合物の設計に基づいて可能となる。そのためには、構造と物性の関係の詳細な理解が必要となる。実験は理論的な解釈を必要とすることが多いため、コンピュータシミュレーションは材料科学に不可欠な研究ツールである。実験のパラメータを使わない第一原理計算は材料特性の独立したモデルを提供できるが、現在の計算機の能力不足により現実的な系への応用は極めて制限される。一方、モンテカルロシミュレーション、分子動力学および格子力学は実験のパラメータを必要とするが、種々の温度条件での大規模シミュレーション実行に適用可能である。

クラスレート水和物は、水素結合によって形成された水分子の作るかごの内部に分子を内包するホストの水分子とゲスト分子によるナノポーラス化合物で、効果的なガス貯蔵/分離材料として魅力的で環境に優しい材料である。P-T 条件に応じて、特定のゲストと水によるガスハイドレート形成が実現する。地球上の天然ガス水和物の推定埋蔵量は膨大であり、「クリーンな」炭化水素の最大量であることが分かる。メタンガスハイドレート中の CH_4 を CO_2 に置き換えると、2 倍の恩恵が得られる (CH_4 を抽出して CO_2 に置換する)。 CH_4 や CO_2 などのさまざまなガスのクラスレート水和物は、大気圧および 245-271 K の温度範囲で異常に低い解離速度 (自己保存効果) を示す。多成分クラスレート水和物相図を実験的に作成することは大変に困難であり、ガス分子保存量算定に重大な問題を生じている。このため、クラスレート水和物相図の理論的予測は、水和物に基づくガス分子貯蔵方策開発に大きく寄与できる。

金属有機フレームワーク (MOF) は、規則的なナノサイズ空間を持つ多孔質吸着剤として従来の材料より遥に高機能である。MOF は低コストの出発原料から作られ、合成は穏やかな条件下で行われ、製造歩留まりは高いという好ましい特性を有する。MOF は、コネクター及びリンカーと呼ばれる 2 つの中心的要素から構成される。遷移金属イオンは、元素種と酸化状態 (2~7 の範囲) に応じて、さまざまな構造形状を生み出すコネクターとなる。リンカーは、さまざまな要求に対応できる表面機能を提供する。過去数年で、エネルギー及び生物医学的応用への MOF の大きな可能性が実証された。コンピュータシミュレーションを実施するに当たり、MOF 構造の規則性を活用することにより、目的の特性を持つホストフレームワークを提案するのに役立つ構造モデルを簡単に構築できる。

2. 研究の目的

このプロジェクトの目的は、新規ナノポーラス材料の理論設計と複数の構造-物性関係の原子レベル解明が、現在、貯蔵、分離、移送技術で使用されている系と競合できる水準の多機能化合物を創製しようとする実験家をどのように支援できるかを示すことである。さらに、エネルギーと医学分野への適用性も提示する。正確に決定された分子間結合強度を使用して、多孔質構造の設計における原子レベルの制御が実行され、提案された構造が合成され、分析された。要求仕様を満たす貯蔵、分離能力に対する熱力学的条件は、独自開発プログラムによって評価された。

3. 研究の方法

ホスト-ゲスト相互作用、相互浸透システムのホテル-ホテル相互作用、ホテル構造の電子的および動的特性を精密算定するために第一原理計算が使用された。分子動力学法は、有限温度でのフレームワークの安定性を分析するために適用された。構造形成の熱力学的条件と貯蔵ガス内容物の算定に格子力学が使用された。吸着等温線はモンテカルロシミュレーションで計算された。実験グループは、形成反応器でクラスレート水和物の相平衡条件を測定し、反応器により水和物結晶サンプルを準備し、種々の X 線回折計で低温測定し、吸着と各種データの同時測定を可能にするラマン分光法と熱測定装置を使用した。この結果から吸着事象の詳細が判明した。

4. 研究成果

H₂S、CH₄、CO₂、及びCO₂ + CH₄ガスハイドレートの構造、ゲスト分布、ハイドレート形成条件の分子モデリングを実行した。得られた結果は既知の実験データと一致する。クラスレート水和物におけるオゾン貯蔵能力を研究した。窒素添加が水和物中のオゾン含有量を増加させることを突き止めた。O₃ + O₂ + N₂ + CO₂ハイドレートのオゾン貯蔵量は、実験的に知られているO₃ + O₂ + CO₂ガスハイドレートのオゾン貯蔵量より少なくとも数倍高くなる可能性がある。O₃ + O₂ + N₂ + CO₂ガス混合物からO₃含有ハイドレートを形成するための有望な *p-T* 条件とガス組成を提案した (図1a)。H₂S + CH₄水和物の相図を作成した。20 mol% H₂Sが気相に存在すると、ハイドレート形成圧力が1桁低下する。H₂Sの含有量が少なくともハイドレートの形成は始まり、サワーガス混合物中のH₂S含有量を大幅に削減できる (図1b)。

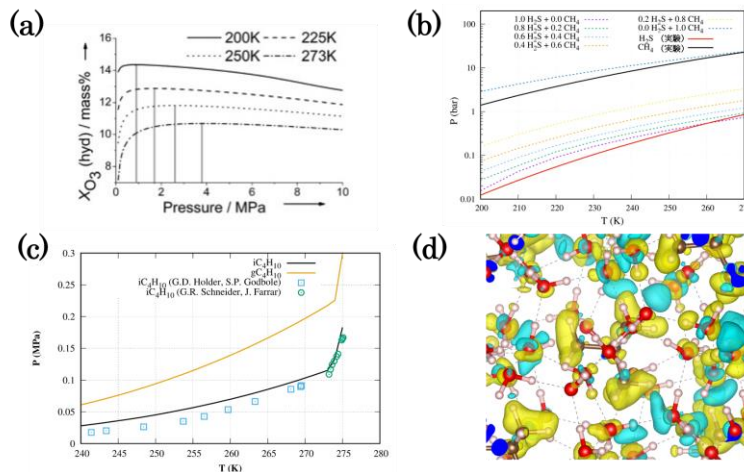


図 1. (a) 5% O₃ + 45% O₂ + 40% N₂ + 10% CO₂ ガス混合物から O₃ + O₂ + N₂ + CO₂ ハイドレートのオゾン貯蔵量形成; (b) H₂S、CH₄、H₂S + CH₄ 水和物の相図; (c) C₄H₁₀ 水和物の相図; (d) イソブタン水和物のスト-ホテル相互作用。

最大2.5 GPaの圧力と200~330 Kの温度範囲での水素-水システムの *p-T* 相図と組成を研究した。計算結果の平衡線は既知の実験データおよび理論データと良く一致する。82 MPaまでの圧力領域は *I_h* 相の安定範囲に対応する。この領域では、水素含有量は圧力の増加とともに徐々に増加する。2番目の82 - 472 MPa領域は *h_{II}* 水和物領域であり、この領域では水素含有量は氷 *I_h* の水素含有量よりも高く、増大し続ける。*h_{II}* から *C₁* 相への転移後 (472 MPaから2 GPaへ)、水素含有量は最大1.82 wt%まで大幅に低下する。圧力が約2 GPa程度になると、*C₁* 相が *C₂* 相に転移する。この構造はすでに水素で完全に飽和している。したがって、適度な圧力で *h_{II}* 水和物が最も高い水素含有量を示すと結論される。

分子レベルでCO₂ハイドレートと *I_h*氷融解の速度論的プロセスを研究した結果は、固液転移中のH結合ネットワークの瞬間的な変化を示唆する。解離プロセスの本質は集団現象である。分析結果は、各H₂O分子の動的な水素結合ネットワーク形成への関与を示す。ネットワークの整合性は相転移の影響を受けず、水素結合の15~17%が切断され融点に達しても持続する。この結果は、H₂O-CO₂相互作用に関連する水和物構造の分解に対するCO₂分子の重要な影響を示す。ハイド

レートと I_h 氷のエネルギー特性を比較すると、結晶構造に空洞が存在する場合には、予想通りその安定性が低下することが分かる。ゲスト分子による空洞占有により、水和物の安定性が向上する。ブタンおよび2成分メタン-ブタン包接水和物の熱力学的特性が、ホスト格子中のゲスト分子の影響とゲスト-ホスト及びゲスト-ゲスト相互作用を考慮して計算された(図1c)。水和物ケージ内にゲスト分子が含まれた後に発生する全ての相互作用が第一原理計算によって解析された。ゲスト-ゲスト相互作用は、*n*-ブタン+メタンとイソブタン+メタンの水和物では異なることが示された。トランス-*n*-ブタン水和物は、線形トランス-*n*-ブタン分子と水フレームワークとの相互作用が弱く、ゲスト-ゲスト反発相互作用が寄与するため安定しない。イソ-ブタン水和物で最も強い相互作用が見られ、最も安定した水和物相である(図1d)。メタン添加により、熱力学的安定性を制御できる。

CH₄ + HFC-245fa及びCH₄ + HFO-1234ze (E) 二元系クラスレート水和物の相図と構造を研究した。計算結果によると、HFC-245faおよびHFO-1234ze (E) 分子は水フレームワークと水素結合を形成せず、静電およびvdW相互作用を介して相互作用する。2種のバイナリハイドレートシステムに対する計算相図は実験データと一致する。計算によると、HFC-245fa-水相互作用は、HFC-245fa分子の2つの終端群にフッ素原子がより多く存在することにより、HFO-1234ze (E) よりも強い。メタンの存在は HFC-245fa - HFC-245fa相互作用をHFO-1234ze (E) - HFO-1234ze (E) よりも大幅に増大する。CH₄ + C₅H₁₀OおよびCH₄ + C₆H₁₁CH₃水和物の結晶成長プロセスを研究した。輸送プロセスの観点から、ハイドレート結晶のサイズ制御のためには、形成温度と相平衡温度の違いが重要であると検証された。TBPACおよびTME水和物の平衡温度と解離熱を調べた。ゲスト分子の最適な質量分布を、これらのハイドレートを一般または空調システムの熱エネルギー貯蔵媒体として応用するために評価した。

提案されたポルフィリン基ナノケージとナノバレル構造に対するCO₂、C₂H₂吸着等温線を算定した。CO₂/C₂H₂ガス混合物の場合、低圧条件下で高多孔性共役構造体に対して20%の分離能力が観察されることが判明した。提案するナノケージとナノバレルの構成要素は、1.5 nmサイズのカプセル化CdSe量子ドット(QD)用細孔サイズを得るために変更された。6(4)ナフトロシアニン型フラグメントを組み合わせて、それぞれ sp^3 炭素グループとベンゼンで接続された非共役および共役ナノケージ(ナノバレル)を形成した。全てのナノ構造が最適化され、動的安定性が計算された。ポルフィリン基MOF構造に関しては、1.5 nmのサイズで低Cd濃度の貯蔵用QDについて研究した。1.5 nmのカプセル化CdSe量子ドットの電子構造と光学特性を評価した。

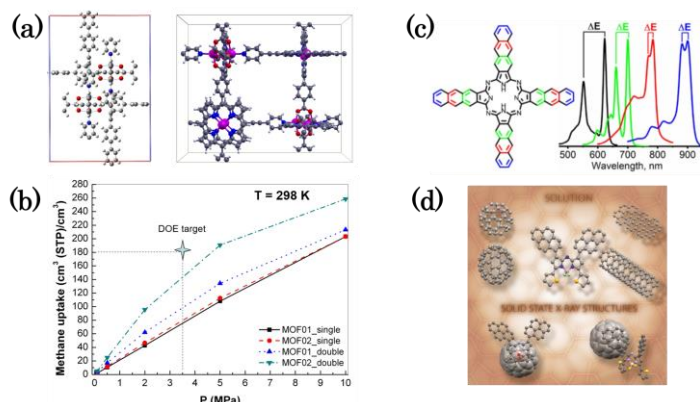


図2. (a) Zn-ピフェニルとZn-ポルフィリンMOF互侵入構造; (b) CH₄の吸着; (c) ポルフィリンおよびフタロシアニン基プラットフォームの電子構造; (d) BODIPYとナノカーボン材料。

低密度で大表面積のMOF構造は、八面体形状(Zn₂(R)₄L₂)を持つ有名な二核カルボン酸錯体などの大表面積を持つリンカーを備えた大きな分子ビルディングブロックを使用して設計した。ピリジン分子およびテルフェニルジカルボキシレートを通じて亜鉛原子に接続されたピフェニルは、各々LおよびRリガンドとして選択される。ポアサイズを大きくするために、ピフェニル

およびフェニルモチーフは、LおよびRリガンドのポルフィリンに置き換えた。ZnMOF構造の安定性に対する相互侵入効果を研究した (図 2a)。相互侵入構造がエネルギー的により有利であることが示された。ポルフィリン部分によるビフェニルの置換は、リガンド間の距離の増加によりフレームワークの接着を防ぐ。ポルフィリンの導入により、CH₄とH₂の吸着が改善されることが判明した (図 2b)。種々のポルフィリンおよびフタロシアニン基プラットフォームの電子構造を密度汎関数法DFT、時間依存DFT、およびZINDO/S計算によって算定した。TDDFT予測エネルギーは、HFに加えるべき実験と最良の一致を与えるLC-BP86およびLC-wPBE交換相関関数によって最善の一致を得ることを示した (図 2c)。第一原理計算により、1,7-ジピレン-アザ-BODIPYとナノカーボン材料の間の弱い相互作用エネルギーを算定した (図 2d)。β-ピレン置換基の導入は、それがナノカーボン基電子受容体との複合体形成を促進するための効果的な分子間結合要素を提供するという仮説によって動機付けられた。合成された化合物に付加されたピレン間の意図された相対的な幾何学構造は、フラーレンとSWCNTアクセプタの曲率を補完するものとして実現され、好ましい幾何学構造の重複可能性を支持する。DFTと時間依存DFT計算を、実験データの支援と1,7-ジピレン-アザ-BODIPYとナノカーボン材料間の弱い相互作用エネルギー算定に使用した。ピレン置換基は、NMR、UV-vis、および定常状態の蛍光分光法の実験データをサポートするナノカーボン材料との複合体形成を促進・誘導する効果がないことが実証された。

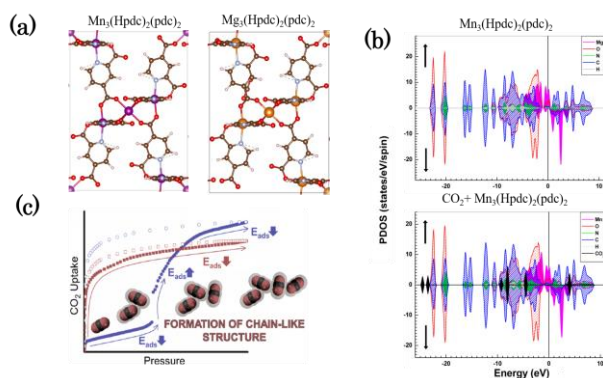


図 3. $Mn_3(Hpdc)_2(pdc)_2$ への CO_2 ガス吸着: (a) MOF 構造; (b) MOF と CO_2+MOF 電子構造; (c) 安定 CO_2 固有チェーン構成。

$Mn_3(Hpdc)_2(pdc)_2$ と $Mg_3(Hpdc)_2(pdc)_2$ への CO_2 吸着メカニズムを研究した (図 3a)。 CO_2 分子の導入によって MOF 複合体の電子構造が大きく変化することはなく、 CO_2 分子間の純粋な静電相互作用と見なすことができる (図 3b)。マンガンはより大きな役割を果たすため、吸着はより複雑な特性を示し、フレームワークとゲスト分子の両方の局所的な電荷分布に依存する。理論的モデリングにより、ゲスト-ゲスト相互作用が多孔質化合物のチャンネル内で安定した CO_2 の特異な鎖状構造形成に重要な役割を果たすことを明らかにした (図 3c)。実験の吸着等温線で観察された非常に顕著な段階は、 $Mn_3(Hpdc)_2(pdc)_2$ 細孔内のゲストの低透過性に関連する鎖形成の遅延によって説明された。 $-CH_2X$ ($X = Cl, Br, I$) グループで装飾された新規多孔性配位ポリマーの設計を実施した。これらの化合物は、 CO_2 ガスの段階的な吸着と、対応する官能基によって調整された段階的の圧力を示す。選択した MOF を使用した硫化ジメチル (DMS) の吸着的除去を報告し、それを Ag-Y ゼオライトの性能と比較した。HKUST-1 中の Cu-OMS は、湿気の存在下でもシミュレートされた実際のガスから DMS を選択的に吸着する。これは実際の工業および環境のアプリケーションにおいて重要なことである。新規水安定性 Mg 配位ポリマーが合成され、そのルミネセンス特性が研究された。この多孔質材料は、高い安定性、強い発光特性、および Fe^{3+} イオンを感知する能力を示した。4 つのスパイ分子が合理的に配置された柔軟な MOF が設計された。これにより、ゲスト溶媒を使用した格子変換によって反応性と反応位置を切り替えることが可能となった。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計18件（うち査読付論文 16件 / うち国際共著 14件 / うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Subbotin Oleg S., Bozhko Yulia Yu., Zhdanov Ravil K., Gets Kirill V., Belosludov Vladimir R., Belosludov Rodion V., Kawazoe Yoshiyuki	4. 巻 20
2. 論文標題 Ozone storage capacity in clathrate hydrates formed by O ₃ + O ₂ + N ₂ + CO ₂ gas mixtures	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Chemistry Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 12637 ~ 12641
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c8cp01595c	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 Arai Yuta, Takeya Satoshi, Alavi Saman, Yamauchi Yuji, Ohmura Ryo	4. 巻 122
2. 論文標題 Effect of Nonspherical Encapsulated Guests on the Volumetric Behavior of Structure H Clathrate Hydrates	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 27631 ~ 27639
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b09923	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 Zatsikha Yuriy V., Blesener Tanner S., Goff Philip C., Healy Andrew T., Swedin Rachel K., Herbert David E., Rohde Gregory T., Chanawanno Kullapa, Ziegler Christopher J., Belosludov Rodion V., Blank David A., Nemykin Victor N.	4. 巻 122
2. 論文標題 1,7-Dipyrene-Containing Aza-BODIPYs: Are Pyrene Groups Effective as Ligands To Promote and Direct Complex Formation with Common Nanocarbon Materials?	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 27893 ~ 27916
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b09504	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 Belosludov Rodion V., Nevenon Dustin, Rhoda Hannah M., Sabin Jared R., Nemykin Victor N.	4. 巻 123
2. 論文標題 Simultaneous Prediction of the Energies of Q _x and Q _y Bands and Intramolecular Charge-Transfer Transitions in Benzoannulated and Non-Peripherally Substituted Metal-Free Phthalocyanines and Their Analogues: No Standard TDDFT Silver Bullet Yet	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry A	6. 最初と最後の頁 132 ~ 152
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpca.8b07647	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 Sapchenko Sergey A., Barsukova Marina O., Belosludov Rodion V., Kovalenko Konstantin A., Samsonenko Denis G., Poryvaev Artem S., Sheveleva Alena M., Fedin Matvey V., Bogomyakov Artem S., Dybtsev Danil N., Schroder Martin, Fedin Vladimir P.	4. 巻 58
2. 論文標題 Understanding Hysteresis in Carbon Dioxide Sorption in Porous Metal-Organic Frameworks	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Inorganic Chemistry	6. 最初と最後の頁 6811 ~ 6820
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.inorgchem.9b00016	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 Zhdanov Ravil K., Bozhko Yulia Y., Belosludov Vladimir R., Subbotin Oleg S., Gets Kirill V., Belosludov Rodion V., Kawazoe Yoshiyuki	4. 巻 294
2. 論文標題 Phase diagram and composition of water based crystalline phases in hydrogen-Water binary system	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Solid State Communications	6. 最初と最後の頁 6 ~ 10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ssc.2019.03.002	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 Ozawa Kazuya, Ohmura Ryo	4. 巻 19
2. 論文標題 Crystal Growth of Clathrate Hydrate with Methane plus Partially Water Soluble Large-Molecule Guest Compound	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Crystal Growth & Design	6. 最初と最後の頁 1689 ~ 1694
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.cgd.8b01625	査読の有無 無
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 Arai Yuta, Koyama Ryo, Endo Fuyuki, Hotta Atsushi, Ohmura Ryo	4. 巻 131
2. 論文標題 Thermophysical property measurements on tetrabutylphosphonium sulfate ionic semiclathrate hydrate consisting of the bivalent anion	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Thermodynamics	6. 最初と最後の頁 330 ~ 335
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jct.2018.11.017	査読の有無 無
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 Nemoto Kotaro, Ikeda Takumi, Mori Hiroyuki, Alavi Saman, Takeya Satoshi, Ohmura Ryo	4. 巻 43
2. 論文標題 Stability and characterization of the structure II binary clathrate hydrate of the refrigerant trans-1,3,3,3-tetrafluoropropene + methane	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 New Journal of Chemistry	6. 最初と最後の頁 13068 ~ 13074
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9nj02605c	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 Matsuura Riku, Horii Shunsuke, Alavi Saman, Ohmura Ryo	4. 巻 19
2. 論文標題 Diversity in Crystal Growth Dynamics and Crystal Morphology of Structure-H Hydrate	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Crystal Growth & Design	6. 最初と最後の頁 6398 ~ 6404
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.cgd.9b00870	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 Kusaka Shinpei, Kiyose Atsushi, Sato Hiroshi, Hijikata Yuh, Hori Akihiro, Ma Yunsheng, Matsuda Ryotaro	4. 巻 141
2. 論文標題 Dynamic Topochemical Reaction Tuned by Guest Molecules in the Nanospace of a Metal-Organic Framework	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 15742 ~ 15746
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.9b07682	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 Liu Yi, Hori Akihiro, Kusaka Shinpei, Hosono Nobuhiko, Li Mingrun, Guo Ang, Du Dongying, Li Yanshuo, Yang Weishen, Ma Yunsheng, Matsuda Ryotaro	4. 巻 14
2. 論文標題 Microwave Assisted Hydrothermal Synthesis of [Al(OH)(1,4 NDC)] Membranes with Superior Separation Performances	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemistry An Asian Journal	6. 最初と最後の頁 2072 ~ 2076
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/asia.201900152	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 Liu Ye, Xu Ji, Tang Xiaoyan, Ma Yunsheng, Yuan Rongxin, Matsuda Ryotaro	4. 巻 48
2. 論文標題 Selective Sensing of Fe ³⁺ Ions Using a Water-stable Magnesium Coordination Polymer	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 156 ~ 158
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1246/cl.180921	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 Gets Kirill, Belosludov Vladimir, Zhdanov Ravil, Bozhko Yulia, Belosludov Rodion, Subbotin Oleg, Marasanov Nikita, Kawazoe Yoshiyuki	4. 巻 499
2. 論文標題 Transformation of hydrogen bond network during CO ₂ clathrate hydrate dissociation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Surface Science	6. 最初と最後の頁 143644 ~ 143644
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.apsusc.2019.143644	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 Belosludov Vladimir, Gets Kirill, Zhdanov Ravil, Malinovsky Valery, Bozhko Yulia, Belosludov Rodion, Surovtsev Nikolay, Subbotin Oleg, Kawazoe Yoshiyuki	4. 巻 10
2. 論文標題 The nano-structural inhomogeneity of dynamic hydrogen bond network of TIP4P/2005 water	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 Art.7323
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-020-64210-1	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 該当する

1. 著者名 Morita Masashi, Yonezu Akira, Kusaka Shinpei, Hori Akihiro, Ma Yunsheng, Matsuda Ryotaro	4. 巻 10
2. 論文標題 Direct observation of dimethyl sulfide trapped by MOF proving efficient removal of sulfur impurities	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 RSC Advances	6. 最初と最後の頁 4710 ~ 4714
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/c9ra09702c	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 該当する

1. 著者名 Kanoo Prakash, Matsuda Ryotaro, Sato Hiroshi, Li Liangchun, Hosono Nobuhiko, Kitagawa Susumu	4. 巻 26
2. 論文標題 Pseudo Gated Adsorption with Negligible Volume Change Evoked by Halogen Bond Interaction in the Nanospace of MOFs	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry A European Journal	6. 最初と最後の頁 2148 ~ 2153
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/chem.201904703	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 Koyama Ryo, Hotta Atsushi, Ohmura Ryo	4. 巻 144
2. 論文標題 Equilibrium temperature and dissociation heat of tetrabutylphosphonium acrylate (TBPAC) ionic semi-clathrate hydrate as a medium for the hydrate-based thermal energy storage system	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Thermodynamics	6. 最初と最後の頁 106088 ~ 106088
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jct.2020.106088	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14件 (うち招待講演 5件 / うち国際学会 13件)

1. 発表者名 Rodion Belosludov
2. 発表標題 Role of guest-host and guest-guest interactions in selective gas adsorption mechanism in MOF materials: Theoretical aspects.
3. 学会等名 256th ACS National Meeting (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Rodion Belosludov
2. 発表標題 Gas storage and separation in nanoporous materials: Role of interaction between adsorbed gas molecules.
3. 学会等名 ACCMS-Theme Meeting on "Multiscale Modelling of Materials for Sustainable Development" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Rodion Belosludov
2. 発表標題 Theoretical aspects in realization of functional nanomaterials for energy and medical applications.
3. 学会等名 Russia-Japan Joint Seminar "Non-equilibrium processing of materials: experimental and modeling" (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Rodion Belosludov
2. 発表標題 Theoretical study of gas adsorption/separation in nanoporous materials: Role of guest-host and guest-guest interactions.
3. 学会等名 6th International Conference on Multifunctional, Hybrid and Nanomaterials (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Rodion Belosludov
2. 発表標題 Atomistic-level Description of Clathrate Hydrates Structure-property Relationships toward Gas Storage and Separation: Lattice Dynamics and First-principles Methods
3. 学会等名 The 9th International Conference on Gas Hydrates (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Rodion Belosludov
2. 発表標題 Design of Porphyrin-based Functional Nanoporous Materials
3. 学会等名 The 9th Conference of Asian Consortium for Computational Materials Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Rodion Belosludov
2. 発表標題 Theoretical Study of Functional Carbon Nanomaterials based on tetraazaporphyrin subunits
3. 学会等名 2017 International Conference on Functional Carbons (2017 ICFC) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Rodion Belosludov
2. 発表標題 Conceptual design of the functional defects and dopants in carbon- based nanomaterials
3. 学会等名 MRS Fall Meeting (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 Rodion Belosludov
2. 発表標題 Theoretical Aspects in Realization of Effective Gas Storage and Separation Media based of Gas Hydrates
3. 学会等名 Natural Gas Hydrate Systems Gordon Research Conference (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Rodion Belosludov
2. 発表標題 Thermodynamic description of storage ability of nanoporous materials: Lattice dynamics and first-principles methods.
3. 学会等名 European Materials Research Society (E-MRS) Spring Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Rodion Belosludov
2. 発表標題 Structure-property relationship of nanoporous materials based on guest-host interaction
3. 学会等名 The 10th Conference of Asian Consortium for Computational Materials Science (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Rodion Belosludov
2. 発表標題 Theoretical design of porphyrin-based nanostructures
3. 学会等名 ナノ学会2019年(第17回)大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Rodion Belosludov
2. 発表標題 Atomistic-level description of stability and composition of multi-component clathrate hydrates
3. 学会等名 258th ACS National Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Rodion Belosludov
2. 発表標題 Theoretical study of porphyrin-based MOF structure for storage, separation and drug delivery applications
3. 学会等名 258th ACS National Meeting (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

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	松田 亮太郎 (Matsuda Ryotaro) (00402959)	名古屋大学・工学研究科・教授 (13901)	
研究分担者	川添 良幸 (Kawazoe Yoshiyuki) (30091672)	東北大学・未来科学技術共同研究センター・名誉教授 (11301)	
研究分担者	竹谷 敏 (Takeya Satoshi) (40357421)	国立研究開発法人産業技術総合研究所・計量標準総合センター・上級主任研究員 (82626)	
研究分担者	大村 亮 (Ohmura Ryo) (70356666)	慶應義塾大学・理工学部(矢上)・教授 (32612)	