

令和 3 年 6 月 6 日現在

機関番号：14301

研究種目：挑戦的研究(萌芽)

研究期間：2018～2020

課題番号：18K18975

研究課題名(和文) ゲート型吸着剤が切り開く吸着分離工学の新展開の探求

研究課題名(英文) New horizon of adsorptive separation engineering opened up by gate-type adsorbents

研究代表者

宮原 稔 (Miyahara, Minoru)

京都大学・工学研究科・教授

研究者番号：60200200

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 4,800,000円

研究成果の概要(和文)：柔軟多孔性錯体(Flexible MOF)のゲート吸着挙動ならびに自己熱補償能を活かした新規吸着分離プロセスを模索すべく、吸着カラムの温度変化を取得可能な破過曲線測定装置と物質・熱収支に基づいた非等温吸着カラムモデルの開発を行った。まずは、熱補償効果のみを評価するために潜熱型蓄熱材の混合による吸着熱制御を試み、カラム内の温度変化を抑えることによるメリットは吸着剤充填量減少によるデメリットをも上回ることを明らかにした。そして、Flexible MOFの一種であるELM-11を用いた新規CO₂/CH₄分離プロセスについて検討を行い、その吸着分離性能が従来システムの性能を著しく上回ることを見出した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

昨今のエネルギー情勢に鑑みれば、蒸留を始めとする熱エネルギーに依存した分離方法からの脱却は急務であり、多孔体を用いた吸着・膜分離プロセスの革新が求められている。本研究は、最初の材料が発見されてから約20年に渡り、爆発的な注目を集めてきたFlexible MOFについて、吸着分離プロセスにおけるその優位性を定量的に示した初めての研究である。また、Flexible MOFを分離プロセスで利用する上で最大の壁となる、Slipping-off問題を解決可能な新規吸着分離システムを見出した点で、Flexible MOFの実用化、ひいてはエネルギー問題の解決に大きなブレークスルーをもたらした成果と言える。

研究成果の概要(英文)：In order to explore new adsorption separation processes that utilize the gate adsorption behavior and intrinsic thermal management capability of flexible metal-organic frameworks, we developed a breakthrough curve measurement system that can obtain the temperature change in the adsorption column and a non-isothermal adsorption column simulator based on mass balance and heat balance. We first discussed the system containing conventional adsorbents and phase change materials to evaluate only the effect of thermal management on adsorption properties and found that the advantage of suppressing the temperature change in the column exceeded the disadvantage of decreasing the amount of adsorbent packed. Then, we investigated a novel CO₂/CH₄ separation process using one of flexible MOF, ELM-11, and demonstrated that its adsorption separation performance was significantly higher than that of the conventional adsorption separation system.

研究分野：吸着工学

キーワード：多孔性配位錯体 ゲート吸着 自己熱補償能 非等温吸着 破過曲線

様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

昨今のエネルギー情勢に鑑みると、蒸留を始めとする熱エネルギーに依存した分離方法からの脱却は急務であり、多孔性材料を用いた吸着・膜分離による代替が求められている [D. S. Sholl and R. P. Lively, *Nature* **532**, 435-437 (2016)]。この最重要課題を前に近年注目を集めているのが、多孔性配位錯体 (Metal-organic framework: MOF)、とりわけ、その中でも骨格構造に柔軟性を有する Flexible MOF である。Flexible MOF は、ある閾値の圧力において骨格構造の変形を伴うステップ状の吸着挙動を示す。従来材料には見られないこの特異な現象は『ゲート吸着』や『ブリージング』などと呼ばれ、構造柔軟性に帰する高い分子認識能や、僅かな圧力操作により容易に吸着成分の脱着・回収が可能といった利点が見込まれている。我々の研究グループでは、ゲート吸着挙動の機構解明にいち早く取り組み、ゲート吸着挙動が『構造変形の不安定化』と『ガス吸着による安定化』の熱力学的な均衡により説明できることを明らかにしてきた [例えば S. Watanabe *et al.*, *J. Chem. Phys.* **130**, 164707 (2009)]。さらに近年では、それら解析を通じて、構造変形が吸熱的に作用することで吸着熱の一部が相殺される『自己熱補償能』とでも言うべき性質が Flexible MOF に備わっていることを明らかとしている [S. Hiraide *et al.*, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **9**, 41066-41077 (2017)]。これは、吸着熱による温度上昇、ひいてはそれに起因した吸着性能低下を抑制可能であることを意味しており、非温度制御下で実施される多くの吸着プロセスにおいて、Flexible MOF は吸着『等温』線からだけでは評価できない有用性を秘めていることになる。この自己熱補償能は、もちろん構造変形を生じない従来材料にはない特性であり、高選択性、高ワーキングキャパシティに次ぐ Flexible MOF の第三の利点と言えよう。しかしながら、現行の吸着工学では、従来型吸着剤の、しかも等温過程を前提とした検討が多く、自己熱補償能を吸着分離性能として評価するための理論的基盤が固まっていない。

2. 研究の目的

本研究の目的は、吸着工学において長らく未着手であった、物質移動および熱移動様式に立脚した非等温系の速度論と操作論の構築することである。具体的には、①吸着カラム内の温度変化を取得可能な吸着破過曲線測定装置と②物質収支・熱収支に基づいた非等温吸着カラムモデルを構築することでこれを達成する。ここで、自己熱補償能は現行の吸着工学が経験していない新規な現象であることから、まずは、A. 活性炭と潜熱型蓄熱材 (PCM) を同梱した吸着カラムシステムについて検討することで、開発した①および②の妥当性検証、並びに吸着熱抑制による吸着性能向上効果について精査した。後に、B. Flexible MOF の一種である ELM-11 ([Cu(4,4'-bipyridine)₂(BF₄)₂)_n) について、環境工学でも重要な landfill ガス (CO₂/CH₄) 分離を想定した検討を実施した。

3. 研究の方法

①破過曲線測定の開発

図 1 に示すような、マスフローコントローラー (MFC)、ガスミキサー、吸着カラム、バイパス流路、四重極型質量分析計 (Q-MS) からなる破過曲線測定装置を開発した。この装置では、2 台の MFC によって規定組成の混合ガスを流通させ、吸着カラム通過後のガス組成を Q-MS を用いて分析する。また、全長 15 cm の吸着カラムには、入口から 5.5, 7.5 および 9.5 cm の位置に熱電対が挿入されており、吸着カラム内温度の位置、時間依存性が測定可能である。検討項目 A では、活性炭ペレットと融点 36°C の PCM (大阪ガスケミカル) を種々の重量分率でカラムに詰め、150°C で 3 時間の前処理 (N₂ 流通下) を行った。種々の混合比率・ガス流量条件で N₂ と n-ブタンの混合ガスを吸着カラムに流通し、カラム内温度変化および破過曲線を測定した。

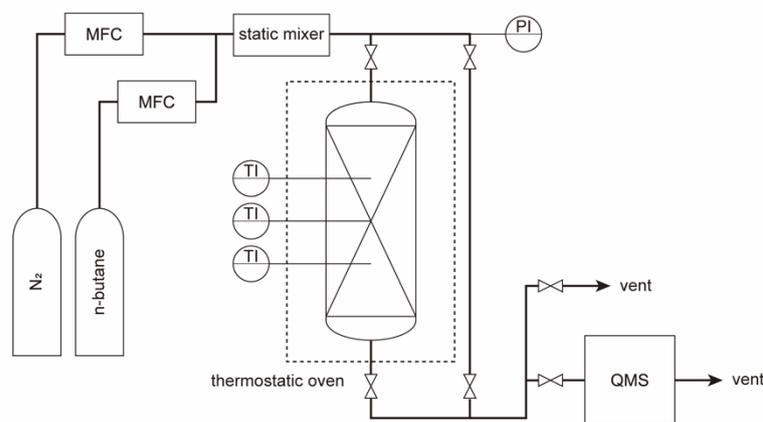


図 1 開発した破過曲線測定装置の概略図

②非等温吸着カラムモデルの構築

吸着カラム内の物質移動および熱移動をシミュレート可能なプログラムを作成した。検討項目 A では、吸着剤および PCM を充填した吸着カラムを、図 2 に概念的に示した熱・物質についての移流・拡散・反応項からなる一次元の収支式によってモデル化した。カラム長さ方向を微小区間に分割し、有限体積法を用いることでガス分圧、吸着量および温度の位置・時間発展を求解した。

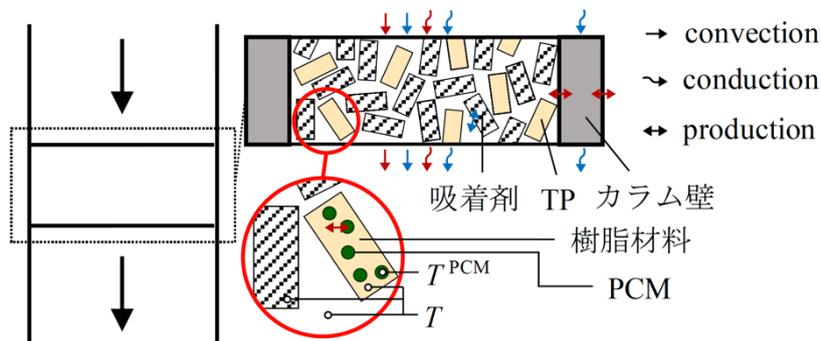


図 2 物質収支・熱収支の概略図（青矢印：物質移動，赤矢印：熱移動）

4. 研究成果

A. PCM を同梱した吸着カラムシステムにおける熱補償効果

まず、PCM を充填しなかったときの *n*-ブタン破過曲線および吸着カラム内の温度変化を図 3a および 3b に示す。この条件では、カラム内の温度上昇は約 22 K であった。一方で、PCM を同梱した条件での *n*-ブタン破過曲線および吸着カラム内の温度変化は図 3c および 3d に示す通りであり、カラム内の温度上昇は約 16 K であった。つまり PCM の混合により温度上昇は約 27% 低減された。また、同条件について、非等温吸着カラムモデルを用いて破過曲線およびカラム内温度を計算した結果を図 3a-d に実線で示す。解析結果は実測値と良好に一致しており、このことから、開発した破過曲線装置および非等温吸着カラムモデルの妥当性が示された。

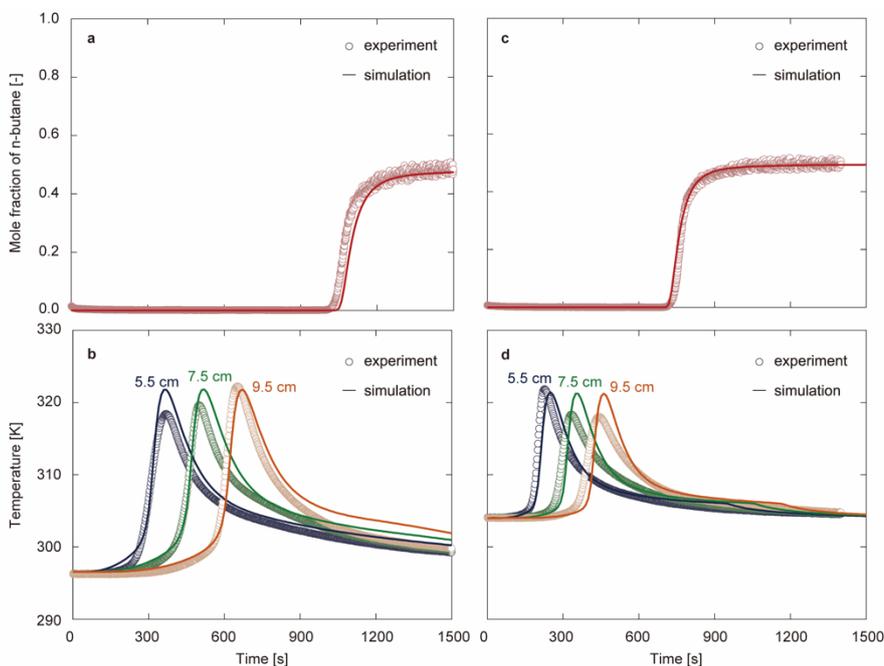


図 3 破過曲線および吸着カラム内の温度分布 (a,b: PCM なし, c,d: PCM あり)

得られた吸着カラムモデルを用いて、商用規模の長さ 2 m、塔径 1.2 m の吸着塔における *n*-ブタン吸着性能を評価した。ここで、25°C の *n*-ブタン/ N_2 混合ガス (1:9) を総流量 1200 m^3/h で流入することを想定し、塔内は断熱であると仮定した。吸着剤と PCM の総充填密度を 450 kg/m^3 に固定した上で、総充填量に対する PCM 充填比率 ϕ を変更することで、PCM による吸着熱抑制効果を評価した。種々の ϕ における吸着剤重量当たりの吸着量および破過時点でのカラム内最高温度を図 4a に、吸着カラムあたりの吸着量を図 4b に示す。ここで、吸着カラム出口のモル分率が 0.005 となったときを破過とみなした。カラム内最高温度は ϕ に対して単調減少す

るのに対し、吸着剤重量あたりの吸着量は $\phi < 0.4$ の範囲で増加し、その後頭打ちとなった。これは、 $\phi < 0.4$ ではPCMによる温度上昇抑制が効果的に働いている一方で、それ以上になると、PCMが潜熱によって吸熱可能なキャパシティよりも吸着熱の方が小さくなっているためである。ここで、当然 ϕ が増加すればその分だけ充填可能な吸着剤量 $(1 - \phi)$ は減少してしまうので、吸着カラムあたりの吸着性能は低下することが予想される。しかしながら、 $\phi < 0.3$ においては、吸着カラムあたりの吸着量でも性能向上が見込めることが明らかとなった。つまり、この範囲では吸着剤充填量の減少よりも、温度上昇抑制による吸着性能の向上の方が大きく、これは吸着熱をハンドリングすることがいかに重要であるかを示している。また、カラムあたりの吸着量が増加したということは、原料流量あたりのカラム長さを短くすることが可能である。そこでPCMなしの場合と同じ破過時間となるように $\phi = 0.3$ のカラムを再設計すると、カラム長さは11%、吸着剤量は38%減らせることがわかった。

本検討を通して、PCMを用いた熱補償は、吸着性能を向上する上で非常に有用であることが明らかとなった。しかしながら、PCMを充填したことによる吸着剤充填量の減少は避けられず、熱補償の恩恵を最大限に得られないことも明らかとなった。また、紙面の都合上詳細は割愛するが、相変化材料の融解温度と吸着プロセスの温度域が合致しないと良い効果が出ず、また吸着剤-相変化材料間の伝熱抵抗が無視できないことも明らかとなっており、これらは、蓄熱材を利用した吸着熱抑制法の弱点として浮き彫りになる結果となった [詳しくは本成果に関する論文 Y. Sakanaka et al., *Ind. Eng. Chem. Res.* **59**, 14485–14495 (2020)を参照されたい]。一方で、ゲート型吸着剤が有する自己熱補償能はこれらの阻害要因とは一切無縁である。なぜなら、ゲート型吸着剤自身の構造変形が吸熱効果を持つので吸着剤充填密度の低下は生じ得ず、かつ、吸着と構造変形は必ず同時に生じるため、吸着熱と構造変形による吸熱の発現にラグはなく、その間に伝熱抵抗は存在しないはずだからである。

B. ELM-11 を用いた landfill ガス(CO₂/CH₄)分離の検討

破過曲線測定に先立ち、まずは、ELM-11 が有する自己熱補償能の優位性を確認すべく、従来型(剛直性)吸着剤の中で landfill ガス分離に最も有望とされているHKUST-1 との吸着性能を比較した。CO₂/CH₄分離には、以下の4つの工程からなる Vacuum pressure swing adsorption (VPSA)操作を想定した。①500 kPaにおける原料ガス(CO₂:CH₄ = 50:50)の供給・吸着工程、②250 kPaへの塔内減圧および純CO₂ガスによる洗浄工程、③15 kPaでの脱着工程、④15 kPaの純CH₄ガスによるパーージ工程。また、以下の4つの吸着性能について評価し、ELM-11 とHKUST-1の比較を行った。

- 1) CO₂吸着量: $N_{CO_2}^{ads}$
- 2) CO₂選択率: $S_{CO_2}^{ads} = (N_{CO_2}^{ads}/N_{CH_4}^{ads}) / (y_{CO_2}/y_{CH_4})$
- 3) ワーキングキャパシティ: $\Delta N_{CO_2} = N_{CO_2}^{ads} - N_{CO_2}^{des}$
- 4) Regenerability: $R = \Delta N_{CO_2} / N_{CO_2}^{ads}$

ここで、 N_i^j は工程jにおける成分iの吸着量、 y_i は気相における成分iのモル分率、添字"ads"および"des"はそれぞれVPSAにおける吸着と脱着工程を表す。図5にHKUST-1およびELM-11の298 Kにおける等温吸着プロセスおよび263 Kを開始温度とした断熱吸着プロセスにおける4つの吸着性能を示す。HKUST-1の $N_{CO_2}^{ads}$ は、ELM-11(4.56 mmol/cm³)の2.2倍にあたる10.02

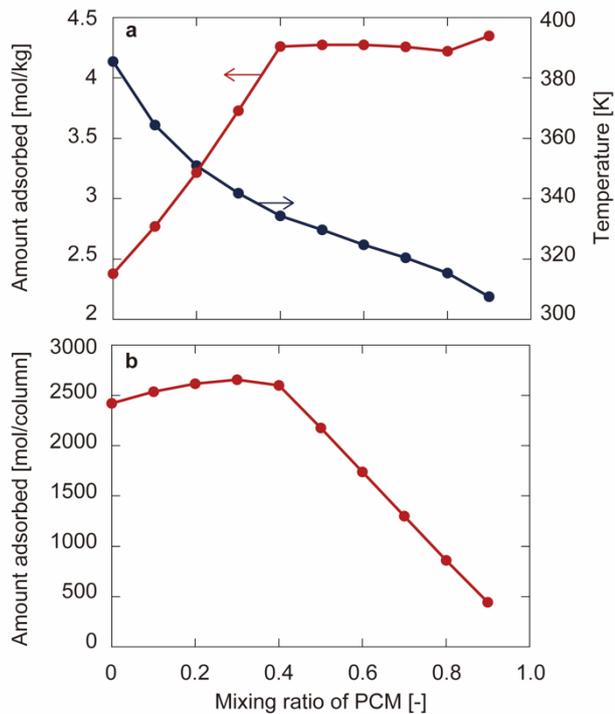


図4 (a)吸着剤重量あたりの吸着量と破過時点でのカラム内最高温度 (b)吸着カラムあたりの吸着量

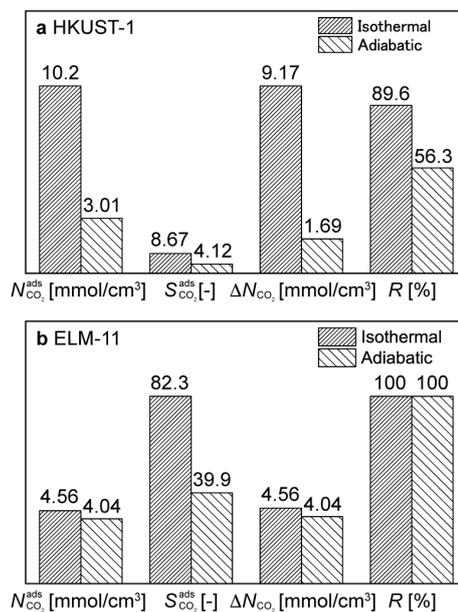


図5 等温過程と断熱過程における吸着性能の比較

mmol/cm³であった。これは、HKSUT-1がELM-11に比して大きな細孔空間を有しているためと考えられる。一方で、ELM-11はその構造柔軟性により、CO₂分子を包み込むかのような細孔場を有しており、HKUST-1の9.5倍のS_{CO₂}^{ads}を発現することが分かった。さらに、ELM-11のRは最大値である100%となった。これは、脱着工程においてELM-11は無孔性の閉構造となり、吸着量がゼロとなるためである。以上をまとめると、ELM-11はS_{CO₂}^{ads}およびRでHKUST-1に勝るものの、細孔容量が重要なN_{CO₂}^{ads}やΔN_{CO₂}といった基準では劣ることが分かった。一方で断熱過程では、HKUST-1は自身の吸着熱による温度上昇の結果、吸着等温線から期待されるほどの性能は発揮されないことが分かった。例えば、N_{CO₂}^{ads}は3.01 mmol/cm³まで落ち込んでおり、これは等温過程での1/3以下である。しかしながら、ELM-11はその自己熱補償能により、等温過程に見劣りしない吸着性能となった。結果的に、元から優勢であったS_{CO₂}^{ads}およびRに加え、N_{CO₂}^{ads}およびΔN_{CO₂}でもHKUST-1を上回ることが分かった。

吸着プロセスとしてのより詳細な検討を行うべく、開発した装置を用いてELM-11のCO₂:CH₄ = 1:1混合ガスに対する破過曲線を測定した(図6a)。この実験において、理想的な吸着カラムが満足すべき結果は、ページガスであるArガスが押し出された後に純CH₄が検出され、カラムの破過に伴いCO₂/CH₄の1:1混合ガスが検出されるというものである。しかしながら、ELM-11のみからなる吸着カラムでは、1.5 min付近に示されるArガスの流出後、CH₄だけではなく、分率で0.16のCO₂が検出されるという従来材料では見られない結果となった。調査の結果、これはゲート吸着がステップ状の吸着挙動であるがゆえに、ゲート圧以下のCO₂は吸着されずにカラム出口から滑り抜けてしまう(Slipping-off)ことにより生じている問題であることが分かった。なお、観測されたCO₂分率0.16は、ゲート吸着圧P^{gate} = 33.1 kPaと全圧P_t = 200 kPaから理論的に予想される値P^{gate}/P_t = 0.165とよく一致していた。このSlipping-off問題を解決するために、ELM-11を充填したカラムの後続に通常の吸着剤カラムを設置する二段式カラムシステムを考案した。実際に、後段のカラムにHKUST-1を封入した場合の破過曲線を測定したところ、図6bのような結果となった。15 min付近の破過に至るまで純CH₄が得られており、二段式カラムによってSlipping-off問題が解決可能であることを実証した。このELM-11とHKUST-1からなる二段式カラムの有用性を確かめるために、規定量FのCH₄製品ガスを得るために必要な吸着カラムサイズ(吸着剤量)および原料流量について評価し、HKUST-1のみを充填した従来型カラムとの比較を行った(図7)。その際、開始温度263 Kの断熱VPSAプロセスを想定し、カラム全体に対する巨視的な物質・熱収支式から概算を行った。まず、カラムサイズに着目すると、提案プロセスは二塔を接続したある種冗長なシステムであるにも関わらず、従来型プロセスより全体で69%も小型化できることが分かった。また、ELM-11の優れた吸着特性は原料流量により如実に現れており、流量Fの純CH₄ガスを得るのに必要な原料ガス(CO₂:CH₄ = 50:50)の量論的な最小流量が2Fであることに留意すると、提案プロセスが要求する余剰原料は最小流量の20%弱で済むことが分かった。これは従来プロセスが必要とする余剰原料のわずか9%である。以上のように4つの吸着性能を吸着分離プロセスの処理能力として統合することで、Flexible MOFの工学的優位性を顕在化することに成功した。上記成果は、Nature 姉妹誌であるNature Communications への掲載を果たした[S. Hiraide et al., Nat. Commun. 11, 3867 (2020)]。また、各所にプレスリリースを打ち出し、特に、AAAS (American Association for the Advancement of Science) が提供する世界最大規模のオンライン科学ニュースサービス「EurekAlert!」では、公開後まもなくトレンド入りを果たした。

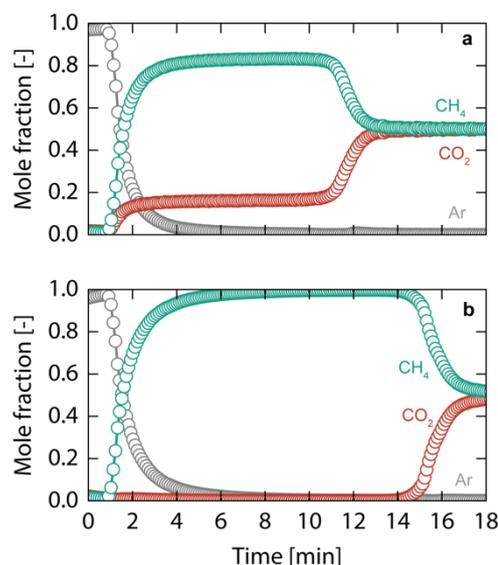


図6 (a) ELM-11の破過曲線 (b) ELM-11とHKUST-1からなる二段カラムシステムの破過曲線

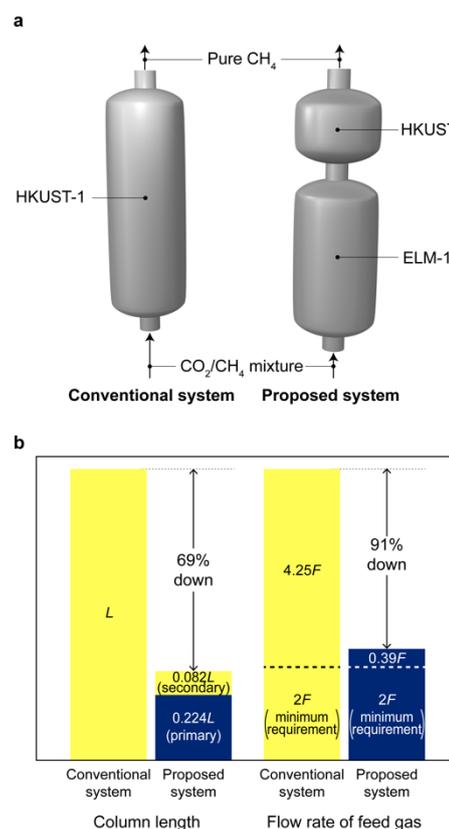


図7 提案した二段カラムシステムの概要と従来システムとの比較

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Hiraide Shotaro, Sakanaka Yuta, Kajiro Hiroshi, Kawaguchi Shogo, Miyahara Minoru T., Tanaka Hideki	4. 巻 11
2. 論文標題 High-throughput gas separation by flexible metal-organic frameworks with fast gating and thermal management capabilities	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 3867
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1038/s41467-020-17625-3	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 Sakanaka Yuta, Hiraide Shotaro, Tanaka Hideki, Hiratsuka Tatsumasa, Kojima Natsuko, Yamane Yasuyuki, Miyahara Minoru T.	4. 巻 59
2. 論文標題 Efficiency of Thermal Management Using Phase-Change Material for Nonisothermal Adsorption Process	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Industrial & Engineering Chemistry Research	6. 最初と最後の頁 14485 ~ 14495
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1021/acs.iecr.0c02344	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 Kawaguchi Shogo, Takemoto Michitaka, Tanaka Hideki, Hiraide Shotaro, Sugimoto Kunihisa, Kubota Yoshiki	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 Journal of Synchrotron Radiation	6. 最初と最後の頁 -
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 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 -

〔学会発表〕 計20件 (うち招待講演 2件 / うち国際学会 4件)

1. 発表者名 有馬 誉, 平出翔太郎, 宮原 稔
2. 発表標題 Flexible MOF の成形加工がゲート吸着挙動に与える影響とその熱力学的考察
3. 学会等名 第71回コロイドおよび界面化学討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 坂中勇太, 平出翔太郎, 平塚龍将, 田中秀樹, 小嶋夏子, 山根康之, 宮原稔
2. 発表標題 相変化材料による熱管理効果を活用した吸着分離プロセスの構築
3. 学会等名 第71回コロナおよび界面化学討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 有馬誉, 平出翔太郎, 宮原稔
2. 発表標題 ソフト多孔性錯体が見すゲート吸着挙動の外力印加に伴う緩慢化の解析
3. 学会等名 化学工学会 第51回秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 坂中勇太, 平出翔太郎, 平塚龍将, 田中秀樹, 小嶋夏子, 山根康之, 宮原稔
2. 発表標題 相変化材料による熱補償効果を取り入れた非等温吸着カラムモデルの構築
3. 学会等名 化学工学会 第51回秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 平出翔太郎, 坂中勇太, 田中秀樹, 上代洋, 河口彰吾, 宮原稔
2. 発表標題 ソフト多孔性錯体が見すゲート吸着挙動を活かした新規吸着分離プロセスの検討
3. 学会等名 化学工学会 第51回秋季大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山下達之, 平出翔太郎, 宮原稔
2. 発表標題 ゲート型吸着剤を用いた圧カスイング吸着分離システムとその新規操作論の確立
3. 学会等名 化学工学会 広島大会2020
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 菅原伊織, 坂中勇太, 平出翔太郎, 宮原稔
2. 発表標題 ソフト多孔体が示す吸着誘起構造転移挙動の速度論的解析
3. 学会等名 第23回化学工学会学生発表会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 坂中勇太, 菅原伊織, 平出翔太郎, 宮原稔
2. 発表標題 ソフト多孔体が示すゲート吸着挙動の速度論的解析
3. 学会等名 化学工学会 第86年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hideki Tanaka, Shotaro Hiraide, Hiroshi Kajiro, Shogo Kawaguchi, Yuta Sakanaka, Minoru T. Miyahara
2. 発表標題 Pressure-Aided Fast Gating and CO ₂ on ELM-11
3. 学会等名 The International Symposium on Adsorption 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名	Hideki Tanaka, Shotaro Hiraide, Hiroshi Kajiro, Shogo Kawaguchi, Yuta Sakanaka, Minoru T. Miyahara
2. 発表標題	Pressure-Aided Fast Gating and Thermal Management Capabilities of Flexible MOFs for CO ₂ Separation
3. 学会等名	13th international conference on the fundamentals of adsorption (FOA-13) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年	2019年

1. 発表者名	Yuta Sakanaka, Tatsumasa Hiratsuka, Shotaro Hiraide, Hideki Tanaka, Minoru T Miyahara
2. 発表標題	Development of Non-isothermal Detailed Column Model for High-performance Gas Separation System Using Phase Change Materials
3. 学会等名	18th Asian Pacific Confederation of Chemical Engineering Congress (国際学会)
4. 発表年	2019年

1. 発表者名	坂中勇太, 平出翔太郎, 平塚龍将, 田中秀樹, 小嶋夏子, 山根康之, 宮原稔
2. 発表標題	吸着分離プロセスにおける吸着熱の影響と相変化材料による熱補償効果
3. 学会等名	第33回日本吸着学会研究発表会
4. 発表年	2019年

1. 発表者名	有馬誉, 平出翔太郎, 宮原稔
2. 発表標題	ペレット化した層状多孔性錯体が示す緩慢なゲート吸着挙動の原因究明
3. 学会等名	第22回化学工学会学生発表会
4. 発表年	2020年

1. 発表者名 坂中勇太, 平出翔太郎, 平塚龍将, 田中秀樹, 小嶋夏子, 山根康之, 宮原稔
2. 発表標題 相変化材料による熱補償効果を取り入れた非等温吸着カラムモデルの構築
3. 学会等名 化学工学会第85年会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 平出翔太郎, 有馬誉, 谷内冬馬, 田中秀樹, 宮原稔
2. 発表標題 ソフト多孔性錯体の成形加工とゲート吸着挙動の緩慢化
3. 学会等名 化学工学会第85年会
4. 発表年 2020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 ₂ 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講演要旨
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

〔図書〕 計1件

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 15
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 (第3章5節の分担執筆)	

〔出願〕 計0件

〔取得〕 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、2020-018995	取得年 2020年	国内・外国の別 国内

〔その他〕

研究室HP http://www.cheme.kyoto-u.ac.jp/2koza/
--

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	平出 翔太郎 (Hiraide Shotaro) (60853207)	京都大学・工学研究科・助教 (14301)	
研究分担者	田中 秀樹 (Tanaka Hideki) (80376368)	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) (13601)	
研究分担者	平塚 龍将 (Hiratsuka Tatsumasa) (70806744)	京都大学・工学研究科・特定助教 (14301)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------