

平成 28 年 4 月 27 日現在

機関番号：14301

研究種目：若手研究(A)

研究期間：2013～2015

課題番号：25709074

研究課題名(和文) 量子分子篩による水素同位体分離のためのサブナノ多孔質材料創製

研究課題名(英文) Development of subnano-porous materials for hydrogen isotope separation by quantum molecular sieving

研究代表者

田中 秀樹 (Tanaka, Hideki)

京都大学・工学(系)研究科(研究院)・講師

研究者番号：80376368

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 16,100,000円

研究成果の概要(和文)：分子動力学法を用いたゼオライト-炭素複合多孔体(zeolite-carbon complex: ZCC)合成の計算機実験を行い、30種類のゼオライトから種々の炭素導入量を持つZCC(200種類)を得た。そして、各ZCCモデルを用いたグランドカノニカルモンテカル法によるH₂/D₂混合吸着シミュレーションおよび遷移状態理論計算(温度77 K)によって独自のrapid vacuum pressure swing adsorptionプロセスを構想し、AFIゼオライトを用いたAFI-ZCCならば高いD₂分離特性が得られることを明らかとした。

研究成果の概要(英文)：In silico synthesis of zeolite-carbon complexes (ZCCs) was performed by molecular dynamics method, and two hundred ZCCs with different carbon content were obtained from thirty zeolites. A new rapid vacuum pressure swing adsorption process for hydrogen isotope separation was considered based on the data obtained from grand canonical Monte Carlo simulations and transition state theory calculations using the ZCC models at 77 K, and it was found that AFI-ZCC derived from the AFI zeolite was promising for the D₂ separation.

研究分野：吸着工学

キーワード：水素同位体分離 CVD 量子分子篩 分子シミュレーション

1. 研究開始当初の背景

水素の安定同位体には質量数が 2 の重水素 (D) があり、自然界に約 150 ppm の割合で存在している。この重水素は、三重水素 (T) と共に将来の熱核融合炉 [D + T → ⁴He + 中性子 (14 MeV)] の燃料としての利用が見込まれる他、近年では、Si ウェハの重水素熱処理による LSI の長寿命化や、プラスチック光ファイバーの透過率向上など機能性材料への応用が期待されている。さらに最近では、薬化合物の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物を代謝され難くし、薬効を増進させるという重水素化医薬品¹ が注目を集めており、重水素市場規模の拡大が予想されている。しかし、日本では重水素の大部分を輸入に頼っており、その価格 (D₂ ガス, 99.5 %) は純 H₂ ガス (99.9999 %) の約 100 倍と極めて高価である。重水素 (D₂) の製造法としては、主に化学交換法や深冷蒸留法などが利用されているが、いずれも高コストなプロセスであり、選択率・比揮発度が小さい (1.5–2) という問題がある。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、実験・理論研究を推進してきた^{2,9}。この「量子分子篩」は、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顕著に量子化される現象を利用するものである。例えば、単層カーボンナノチューブ (SWNT) の内部 (細孔径 0.28 nm/直径 0.62 nm) に束縛された量子性の H₂ および D₂ 分子のポテンシャル曲線 (温度 77 K) を計算すると、D₂ 分子よりも H₂ 分子のポテンシャル井戸が浅くなる。これは、細孔内に制約された量子分子のゼロ点エネルギー (E_0) が質量に反比例するためであり、質量の小さな H₂ は細孔内において不安定化され、質量の大きな D₂ が細孔内に濃縮される。研究代表者はこの量子効果を考慮した分子シミュレーションを行なうことで、細孔径 0.28 nm のシリンダー状炭素細孔が HD や D₂ 分子の分離において最適 (D₂ 選択率: 9.9, 温度 77 K) であることを明らかとしたが⁹、その重水素選択率は既存プロセスを大きく凌駕しており、水素燃焼熱の 1/3 相当のエネルギーを消費する深冷蒸留法よりも低コストなプロセスの実現を可能とすることが期待されるものであった。同様な結果は Pittsburgh 大学や Queensland 大学の理論研究グループからも報告されているが、これまで既報の理論研究のように極めて高い重水素選択率を発現するサブナノ多孔体は見出されていなかった。例えば、上述の SWNT は、その存在は知られているものの単離することは難しく、大量に合成することも困難である。そこで研究代表者は、10-18 員環などの中・超大細孔を有するゼオライトの細孔内を熱分解炭素で被覆・修飾し、その細孔径を制御する事に着目するに至った。

2. 研究の目的

「量子分子篩」による水素同位体分離に最適な極微細孔を有するゼオライト-炭素複合多孔体 (zeolite-carbon complex: ZCC) を創製し、高効率な重水素分離プロセスの設計を可能とすることを最終目的とする。すなわち、化学気相成長法により 10-18 員環といった中・超大細孔を有するゼオライトの細孔内を熱分解炭素で被覆・修飾し、その細孔径を 0.3 nm に制御することで高い重水素選択性を実現することを目指す。この ZCC の合成・探索では、その効率化のために分子シミュレーションを導入する。さらに、量子分子篩の平衡論/速度論的理解を可能とするための分子シミュレーション・理論計算コードの開発を行い、混合吸着等温線測定および破過曲線測定等の実験結果と比較・検討することで、ZCC の重水素分離特性を明らかとし、重水素分離プロセスへの応用に向けた性能予測を行なう。

3. 研究の方法

3. 1 ZCC の合成シミュレーション

ZCC の合成シミュレーションでは、quench molecular dynamics (QMD) 法を用い、炭素原子間相互作用ポテンシャルとして、reaction state summation ポテンシャルを採用した。また、炭素原子とゼオライトのフレームワーク中の酸素原子との相互作用には Lennard-Jones (LJ) ポテンシャルを仮定し、 $\sigma(\text{C-O}) = 0.3054 \text{ nm}$, $\epsilon(\text{C-O})/k_B = 53.337 \text{ K}$ とした。初期配置は炭素原子をゼオライトフレームワーク内にランダムに配置した状態とし、温度 1000 K から 300 K まで quench をした。運動方程式の数値積分には速度 Verlet 法を用い、時間刻みは 0.057 fs、quench rate は 1.3 K/ps とした。ゼオライトについては 12 員環以上の 1 次元細孔を持つ 30 種 (コード: AET, AFI, ASV, ATO, ATS, CAN, CFI, CZP, DON, EZT, GON, IFO, IFR, LTL, MAZ, MOR, MTW, NPO, OFF, OSI, RON, SAF, SFE, SFH, SFN, SSO, SSY, STO, VET, VFI) を選択し、各ゼオライト種について細孔容量あたりの初期導入炭素密度 $\rho_c [\text{atoms}/\text{nm}^3]$ を変えることで、約 100 種の ZCC モデルを構築した。

3. 2 H₂/D₂ 混合吸着シミュレーション

QMD により得られた ZCC の D₂ 選択性を評価するため、グランドカノニカルモンテカルロ法を用いた H₂/D₂ 混合吸着シミュレーション (77 K) を行った。混合ガスの組成は H₂/D₂ = 1 とし、H₂ および D₂ の分子間相互作用としては、古典的な LJ ポテンシャルに量子効果を補正した以下の Feynman-Hibbs の有効ポテンシャルを採用した。

$$\phi_{\text{FH}}(r_{ij}) = \phi_{\text{LJ}}(r_{ij}) + (\beta \hbar^2 / 24m_r) \nabla^2 \phi_{\text{LJ}}(r_{ij}) \quad (1)$$

ここで、 r_{ij} : 分子 i と j の間の距離、 $m_r = m/2$ (m : H₂ または D₂ 分子の質量)、 $\hbar = h/2\pi$, h : プランク定数、 $\beta = 1/k_B T$, k_B : ボルツマン定

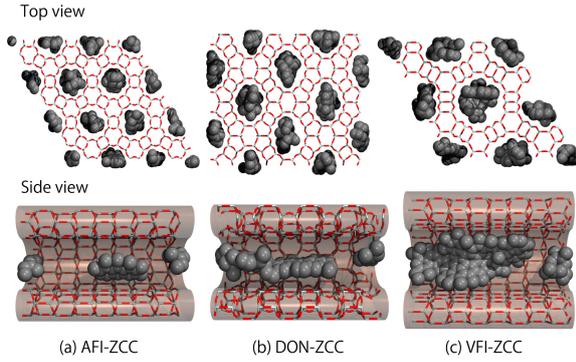


Fig. 1 ZCC のスナップショット

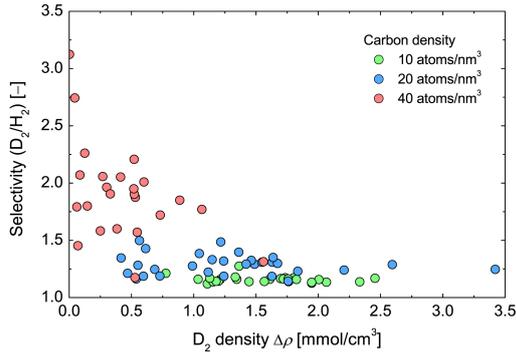


Fig. 2 炭素導入量の異なる各 ZCC モデルの D_2 選択率と回収 D_2 量(吸着圧:1 MPa, 脱着圧:0.001 MPa, 温度 77 K)

数, T : 系の絶対温度である。 H_2 および D_2 の LJ パラメーターは, $\sigma_{\text{H}} = 0.296 \text{ nm}$ および $\varepsilon_{\text{H}} / k_{\text{B}} = 34.2 \text{ K}$ とした。 吸着分子-固体原子間相互作用については, ゼオライト細孔壁の酸素原子との相互作用 (LJ パラメーター: $\sigma_{\text{sf}} = 0.304 \text{ nm}$ および $\varepsilon_{\text{sf}} / k_{\text{B}} = 32.1 \text{ K}$) のみを考慮し, $m_r = m$ とした。

3. 3 遷移状態理論による移動係数の推算

吸着分子の細孔内拡散が遅く, その拡散挙動を分子動力学法によって検討することが困難である場合, その吸着分子の移動係数の推算には, Transition State Theory (TST) が用いられる。 TST によると, 安定な状態 A から遷移状態 (dividing surface: DS) を経て, 隣の安定な状態 B へと吸着分子が移動する際の移動係数 $k_{\text{A} \rightarrow \text{B}}$ は以下のように表される。

$$k_{\text{A} \rightarrow \text{B}} = \kappa \sqrt{\frac{k_{\text{B}} T}{2\pi m}} \frac{\int_{\text{DS}} \exp[-\beta \phi_{\text{sf}}(r)] d^2 r}{\int_{\text{A}} \exp[-\beta \phi_{\text{sf}}(r)] d^3 r} \quad (2)$$

ここで, κ は透過係数 ($0 < \kappa \leq 1$) である。 本研究では吸着分子が希薄な状態を想定し, $\kappa = 1$ とした。 また, $\phi_{\text{sf}}(r)$ は吸着分子-固体原子間の相互作用ポテンシャルであり, その計算には式 (1) を用いた。

4. 研究成果

ゼオライト AFI, DON, VFI を用いた ZCC 合成シミュレーションによって得られた各 ZCC モデル (AFI-ZCC, DON-ZCC, VFI-ZCC)

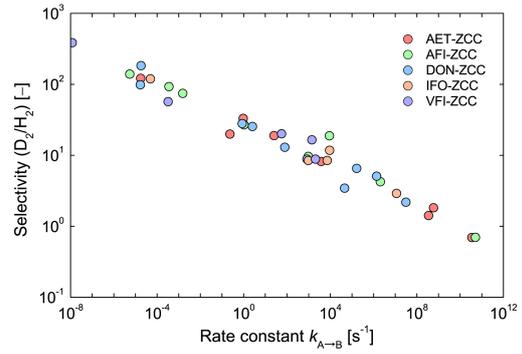


Fig. 3 確率的に初期速度を変えて構築した各 ZCC モデルの D_2 選択率と D_2 の速度定数 (温度 77 K)

のスナップショットを Fig. 1 に示す。 Fig. 1 の top view によると, 炭素被膜はゼオライトの 1 次元細孔を閉塞しているかのように見えるが, side view から明らかなように, その炭素被膜は島構造を形成しており, その炭素被膜とゼオライト壁の間には極めて微細な細孔が形成されている。つまり, このネック部分では, ポテンシャル場が増強され, D_2 を濃縮する, あるいは, H_2 と D_2 の移動係数を逆転させ, 相対的に D_2 の拡散速度を大きくする効果が発現することが期待される。

合成した一部の ZCC モデルに対して H_2/D_2 混合吸着シミュレーション (吸着圧: 1 MPa, 脱着圧: 0.001 MPa, 77 K) を行った結果を Fig. 2 に示す。ここで, H_2 に対する D_2 の選択率 S_c を, 脱着される混合ガスの比 $S_c(D_2/H_2) = \rho(D_2)/\rho(H_2)$ として定義する。 $\rho(D_2)$ を吸着材体積あたりの D_2 吸着量とするならば, S_c および $\rho(D_2)$ の値が共に大きくなるのが望まれるが, 炭素導入量の少ない ZCC ($\rho_c = 10 \text{ atoms/nm}^3$) の D_2 選択率は 1.2 程度であり, 極めて小さい。そこで, 導入炭素密度を $\rho_c = 20 \text{ atoms/nm}^3$ から 40 atoms/nm^3 へと増加させると, D_2 選択率は大きくなり, その値は最大で 3 程度となるが, D_2 吸着量 $\rho(D_2)$ はほぼゼロとなることが分かった。 D_2 選択率が 3 程度と低い値にとどまるのは, 炭素被膜によって形成される細孔径に分布があること, また, D_2 吸着量が著しく減少するのは, ゼオライトの細孔がほぼ炭素によって満たされてしまうためである。以上のように, ZCC は平衡分離型の吸着分離プロセスには適さないことが明らかとなった。

一方, ZCC のネック部分では, H_2 と D_2 の拡散速度に差異が生じることが期待される。そこで, TST 計算によって得られた H_2 と D_2 の移動係数 $k_{\text{A} \rightarrow \text{B}}$ の比を動的 D_2 選択率 $S_k(D_2/H_2) = k_{\text{A} \rightarrow \text{B}}(D_2)/k_{\text{A} \rightarrow \text{B}}(H_2)$ として定義し, $k_{\text{A} \rightarrow \text{B}}(D_2)$ に対する S_k の依存性をプロットしたものが Fig. 3 である。ここで, 5 つの ZCC モデルについては, それぞれ導入炭素密度 ρ_c の等しい 10 個のモデルを構築し, その動的 D_2 選択率を評価している。各 10 個のモデルは, QMD において確率的に初期速度を変えて計算したものであり, ρ_c が等しいにも関わらず,

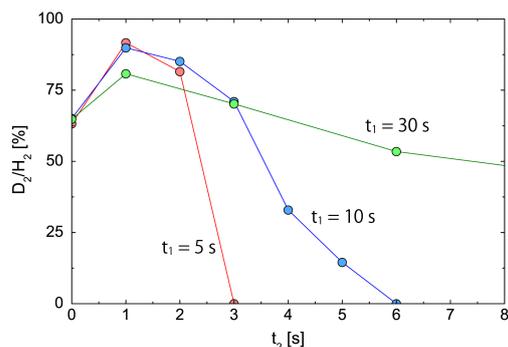


Fig. 4 RVPSA プロセスにおける D₂ 回収濃度の還流時間 t₂ 依存性 (AFI-ZCC, 温度 77 K)

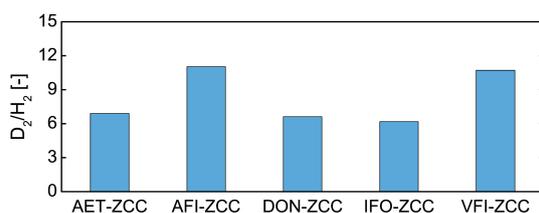


Fig. 5 各 ZCC モデルを用いた RVPSA プロセスにおける D₂ 回収濃度比 (温度 77 K)

$S_k(D_2/H_2)$ に差異を生じている。これは、各モデルにおける炭素被膜の構造が異なっていることを示唆している。つまり、ゼオライトの細孔内における炭素被膜構造の形成は確率的であることになるが、中には数十から数百もの動的 D₂ 選択率を有する細孔が形成され得ることを意味する。また、Fig. 3 から、 $k_{A \rightarrow B}(D_2)$ の値が小さいほど $S_k(D_2/H_2)$ の値が大きくなっていることが分かる。このことから、H₂/D₂ 混合ガスの吸着過程において、 $S_k(D_2/H_2)$ 値の小さな細孔 **a** では、直ちに吸着平衡が達成され、その吸着層における D₂ の濃度はさほど大きくならない [$S_e(D_2/H_2)$ 値が小さいことによる] のに対して、 $S_k(D_2/H_2)$ 値の大きな細孔 **b** では、吸着平衡に達する以前において、一時的に D₂ 濃度が極めて大きくなることが期待される。そして、この細孔 **b** において吸着平衡が達成される以前に系を減圧するならば、細孔 **a** において S_e の低い混合物が迅速に脱着・排出された後に、細孔 **b** から濃縮された D₂ が脱着されてくるはずである。

上述の特性を生かした吸着分離プロセスとして独自に構想したものが、秒単位での吸着塔の切替操作を行う rapid vacuum pressure swing adsorption (PVPSA) を応用したプロセスである。ここでは、以下のような操作を仮定する：(i) 吸着塔 I の下部からの H₂/D₂ 混合ガス (H₂/D₂ = 1, 0.2 MPa) のフィードと、上部からの H₂ 濃縮ガスの回収、および真空ポンプ (0.02 MPa) による吸着塔 II 下部からの D₂ 濃縮ガスの回収 (吸着時間 t₁)、(ii) 吸着塔 I 下部から吸着塔 II 下部への D₂ 濃縮ガスの還流 (還流時間 t₂)、(iii) (i) に戻る (但し、I ↔ II と

する)。Fig. 4 は、10 個の AFI-ZCC モデルを用いて、回収 D₂ 量 (結晶粒子体積あたり) と濃度の t₁ および t₂ 依存性を計算したものである。吸着時間を t₁ = 5 s、還流時間を t₂ = 1 s とするとき、回収 D₂ 濃度 91 % を達成することができ、t₁ = 10 s および 30 s の場合よりも多くの D₂ を回収できることが分かった。ここで、t₂ = 1 s において回収 D₂ 濃度が最大となった後、減少に転じるのは、移動係数の小さな H₂ が遅れて脱着されるためである。Fig. 5 は、5 つの有望な ZCC モデルについて、回収 D₂ 濃度が最大となる時の回収 D₂ 量と D₂/H₂ 比を比較したものであり、その中では、AFI-ZCC が極めて有望であることが明らかとなった。

<引用文献>

1. K. Sanderson, *Nature*, **458**, 372 (2009).
2. H. Tanaka, H. Kanoh, M. El-Merraoui, W. A. Steele, M. Yudasaka, S. Iijima and K. Kaneko, *J. Phys. Chem. B*, **108**, 17457-17465 (2004).
3. H. Tanaka, J. Fan, H. Kanoh, M. Yudasaka, S. Iijima and K. Kaneko, *Mol. Simul.*, **31**, 465-474 (2005).
4. H. Tanaka, H. Kanoh, M. Yudasaka, S. Iijima and K. Kaneko, *J. Am. Chem. Soc.*, **127**, 7511-7516 (2005).
5. Y. Hattori, H. Tanaka, F. Okino, H. Touhara, Y. Nakahigashi, S. Utsumi, H. Kanoh and K. Kaneko, *J. Phys. Chem. B*, **110**, 9764-9767 (2006).
6. D. Noguchi, H. Tanaka, A. Kondo, H. Kajiro, H. Noguchi, T. Ohba, H. Kanoh and K. Kaneko
7. H. Tanaka, D. Noguchi, A. Yuzawa, T. Kodaira, H. Kanoh and K. Kaneko, *J. Low Temp. Phys.*, **157**, 352-373 (2009).
8. D. Noguchi, H. Tanaka, T. Fujimori, H. Kagita, Y. Hattori, H. Honda, K. Urita, S. Utsumi, Z.-M. Wang, T. Ohba, H. Kanoh, K. Hata and K. Kaneko, *J. Phys.: Condens. Matter.*, **22**, 334207 (14 pp) (2010).
9. H. Tanaka and M. T. Miyahara, *J. Chem. Eng. Jpn*, **44**, 355-363 (2011)

5. 主な発表論文等

[雑誌論文] (計 12 件)

- 1) "Reversible Pore Size Control of Elastic Microporous Material by Mechanical Force", M. Ito, H. Nishihara, K. Yamamoto, H. Itoi, H. Tanaka, A. Maki, M. T. Miyahara, S. J. Yang, C. R. Park and T. Kyotani, *Chem. Eur. J.*, **19**, 13009-13016 (2013), 査読有, DOI: 10.1002/chem.201301806.
- 2) "Fluids in Nanospaces: Molecular Simulation Studies to Find Out Key Mechanisms for Engineering", M. T. Miyahara, R. Numaguchi, T. Hiratsuka, K. Nakai and H. Tanaka, *Adsorption*, **20**, 213-223 (2014), 査読有,

- DOI: 10.1007/s10450-013-9588-2
- 3) "Dependence of Adsorption-Induced Structural Transition on Framework Structure of Porous Coordination Polymers", R. Numaguchi, H. Tanaka, S. Watanabe and M. T. Miyahara, *J. Chem. Phys.*, **140**, 044707 (10 pp) (2014), 査読有, DOI: 10.1063/1.4862735
 - 4) "Adsorption-Induced Structural Transition of ZIF-8: A Combined Experimental and Simulation Study", H. Tanaka, S. Ohsaki, S. Hiraide, D. Yamamoto, S. Watanabe and M. T. Miyahara, *J. Phys. Chem. C* **118**, 8445-8454 (2014), 査読有, DOI: 10.1021/jp500931g
 - 5) "Metal-Semiconductor Transition like Behavior of Naphthalene-Doped Single Wall Carbon Nanotube Bundles", F. Khoerunnisa, A. Morelos-Gomez, H. Tanaka, T. Fujimori, D. Minami, R. Kukobat, T. Hayashi, S. Y. Hong, Y. C. Choi, M. Miyahara, M. Terrones, M. Endo and K. Kaneko, *Faraday Discuss.* **173**, 145-156 (2014), 査読有, DOI: 10.1039/C4FD00119B
 - 6) "Modelling and Visualization of CO₂ Adsorption on Elastic Layer-Structured Metal-Organic Framework-11: Toward a Better Understanding of Gate Adsorption Behavior", H. Tanaka, S. Hiraide, A. Kondo and M. T. Miyahara, *J. Phys. Chem. C* **119**, 11533-11543 (2015), 査読有, DOI: 10.1021/jp512870p
 - 7) "Potential Theory for Gate Adsorption on Soft Porous Crystals", R. Numaguchi, H. Tanaka, S. Hiraide and M. T. Miyahara, *Mol. Simul.*, **41**, 1329-1338 (2015), 査読有, DOI: 10.1080/08927022.2015.1047369
 - 8) "Understanding gate adsorption behaviour of CO₂ on elastic layer-structured metal-organic framework-11", S. Hiraide, H. Tanaka and M. T. Miyahara, *Dalton Trans.*, **45**, 4193-4202 (2016), 査読有, DOI: 10.1039/C5DT03476K
 - 9) "吸着等温線の解析法—マイクロ孔径分布解析—", 田中 秀樹, *Adsorption News*, **29**(3), 22-26 (2015), 査読無 http://www.j-ad.org/adsorption_news.html
 - 10) "吸着等温線の解析法—メソ孔径分布解析—", 田中 秀樹, *Adsorption News*, **29**(4), 12-19 (2016), 査読無 http://www.j-ad.org/adsorption_news.html
 - 11) "低温物理吸着による水素同位体分離", 田中 秀樹, 宮原 稔, *エアロゾル研究*, **31**, 32-38 (2016), 査読有 DOI: 10.11203/jar.31.32

[学会発表] (計 17 件)

- 1) H. Tanaka, S. Ohsaki, D. Yamamoto, R. Numaguchi, S. Watanabe and M. T. Miyahara, "Adsorption-Induced Structural Transition of ZIF-8", 11th International Conference on Fundamentals of Adsorption (FOA11),

Baltimore, USA, 19-24 May, 2013

- 2) H. Tanaka, K. Nakamura, A. Maki and M. T. Miyahara, "Hydrogen Isotope Separation in Zeolite-Carbon Complex", 11th International Conference on Fundamentals of Adsorption (FOA11), Baltimore, USA, 19-24 May, 2013
- 3) 田中 秀樹, 真木 晶, 山根 康之, 國本 泰徳, 酒井 正信, 宮原 稔, "分子篩炭素合成過程の分子シミュレーション", 第26回日本吸着学会研究発表会, 千葉, 2013年11月21-22日
- 4) 田中 秀樹, 真木 晶, 山根 康之, 國本 泰徳, 酒井 正信, 宮原 稔, "活性炭への炭素被膜形成の分子シミュレーション", 第40回炭素材料学会年会, 京都, 2013年12月3-5日
- 5) 田中 秀樹, 平出 翔太郎, 大崎 修司, 渡邊 哲, 宮原 稔, "多孔性配位錯体における吸着誘起構造転移の自由エネルギー解析", 化学工学会 第79年会, 岐阜, 2014年3月18-20日
- 6) H. Tanaka, S. Hiraide, R. Numaguchi, S. Watanabe, and M. T. Miyahara, "Gate opening in ELM-11 induced by CO₂ adsorption", 10th International Symposium on the Characterization of Porous Solids (COPS X), Granada, Spain, 11-14 May, 2014
- 7) 田中 秀樹, 瀬戸 樹, 西原 洋知, 京谷 隆, 宮原 稔, "分子シミュレーションによる新規ゼオライト鑄型炭素の探索", 第65回コロイドおよび界面化学討論会, 東京, 2014年9月3-5日
- 8) 田中 秀樹, 瀬戸 樹, 西原 洋知, 京谷 隆, 宮原 稔, "分子シミュレーションによる新規ゼオライト鑄型炭素の探索", 化学工学会 第46回秋季大会, 福岡, 2014年9月17-19日
- 9) H. Tanaka, S. Hiraide, S. Watanabe, and M. T. Miyahara, "Modeling and Visualization of Elastic Layer-Structured Metal-Organic Framework-11 Encapsulating CO₂: Toward a Better Understanding of Gate Adsorption Behavior", 4th International Conference on Metal-Organic Frameworks & Open Framework Compounds (MOF2014), Kobe, Japan, 28 September-1 October, 2014
- 10) 田中 秀樹, 平出 翔太郎, 近藤 篤, 渡邊 哲, 加納 博文, 金子 克美, 宮原 稔, "金属有機構造体 ELM-11 におけるゲート吸着挙動のモデリング", 第28回日本吸着学会研究発表会, 北海道, 2014年10月23-24日
- 11) H. Tanaka, S. Hiraide, S. Watanabe, and M. T. Miyahara, "Modeling and Visualization of Elastic Layer-Structured Metal-Organic Framework-11 Encapsulating CO₂: Toward a Better Understanding of Gate Adsorption Behavior", 2014 AIChE Annual Meeting, Atlanta, USA, 16-21 November, 2014
- 12) 田中 秀樹, 瀬戸 樹, 西原 洋知, 京谷 隆,

宮原稔, “新規ゼオライト鑄型炭素の in silico 合成およびその応用可能性の検討”, 第 40 回炭素材料学会年会, 福岡 (大野城市), 2014 年 12 月 8-10 日

- 13) H. Tanaka, and M. T. Miyahara, “Hydrogen Isotope Separation by Carbon Nanopores”, The 4th Symposium on Future Challenges for Carbon-Based Nanoporous Materials (CBNM-4), Nagano, Japan, 16-18 March, 2015
- 14) H. Tanaka, “Molecular Modeling of Carbonaceous Materials for Gas Separation and Storage”, 13th China-Japan-Korea Joint Symposium on Carbon Materials to Save the Earth (CES2015), Xi’An, China, August 19-22, 2015, Keynote lecture
- 15) H. Tanaka and M. T. Miyahara, “Hydrogen isotope separation by carbonaceous materials”, 2015 AIChE Annual Meeting, Salt Lake City, USA, 8-13 November, 2015
- 16) 田中 秀樹, “分子シミュレーションによる炭素材料のモデリング”, 岡山大学異分野融合研究育成支援事業 シンポジウム 酸化グラフェン-無機・有機・高分子複合材料の合成と用途開拓, 岡山大学, 岡山, 2015 年 8 月 28 日, 依頼講演
- 17) 田中 秀樹, “ナノ空間設計による吸着特性制御とその工学的モデル化”, 材料化学システム工学討論会 2015, 化学工学会 材料・界面部会, 東京工業大学, 東京, 2015 年 8 月 31 日, 依頼講演

〔図書〕 (計 0 件)

〔産業財産権〕

○出願状況 (計 0 件)

○取得状況 (計 0 件)

〔その他〕

ホームページ等:

<http://www.cheme.kyoto-u.ac.jp/2koza/index.html>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

田中 秀樹 (TANAKA Hideki)

京都大学・工学研究科・講師

研究者番号 : 80376368