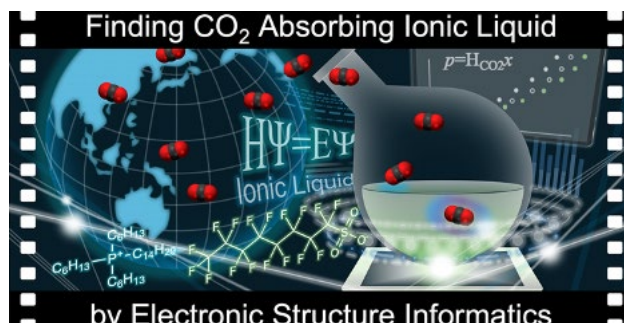


報道関係各位

電子状態インフォマティクス・合成・精密測定三位一体研究により  
CO<sub>2</sub> 物理吸収液の機能最適化法を確立

## 概 要



中央大学の理論化学研究グループと、日本大学・地球環境産業技術研究機構 RITE・金沢大学の実験グループは、「過去最高の物理吸収量を持つ CO<sub>2</sub> 吸収液（イオン液体）の理論設計とその迅速具現化」に成功しました。

イオン液体は、正および負の電荷を帯びた分子イオン種の組み合わせからなる常温熔融塩で、理論上 10<sup>18</sup> 種以上存在します。そのあまりの数の多さのため、従来の実験主導型研究でイオン液体の機能を最適化することは、時間・資金の両観点から不可能です。今回、電子状態インフォマティクスを基盤とした「イオン構造自動探索」と「実験科学的知見」「精密測定技術」の連携により、過去十数年に亘り更新されることがなかった CO<sub>2</sub> 物理吸収量のレコードを、実質 1 年の研究で更新しました。同技術の応用により、混合排ガスから CO<sub>2</sub> を効率的に選択分離できる機能の最適化も拓かれました。今後、合成の容易さなども考慮に入れた分子設計機能を電子状態インフォマティクスに付与することで、脱炭素社会の基盤構築に寄与することが期待されます。

<著 者> \* は責任著者

黒木 菜保子\* (中央大学理工学部 応用化学科・助教)

鈴木 祐輝 (日本大学大学院工学研究科博士前期課程 生命応用化学専攻・大学院生)

児玉 大輔\* (日本大学工学部 生命応用化学科・准教授)

Firoz Alam CHOWDHURY (地球環境産業技術研究機構 RITE・主任研究員)

山田 秀尚 (金沢大学・先端科学社会共創推進機構・准教授)

森 寛敏\* (中央大学理工学部 応用化学科・教授)

<発表雑誌>

The Journal of Physical Chemistry B

<https://doi.org/10.1021/acs.jpccb.2c07305> (Selected as Cover; Open Access 無料でご覧頂けます)

<タイトル>

Machine Learning-Boosted Design of Ionic Liquids for CO<sub>2</sub> Absorption and Experimental Verification

## 1. 研究背景

カーボンニュートラルな社会を実現しつつ豊かな生活を維持するためには、CO<sub>2</sub> を効率的に回収することが不可欠です。イオン液体 (IL: 室温溶融塩) が CO<sub>2</sub> を吸収することが発見されて以来、様々な分子イオンからなる IL が研究されてきました。しかし、イオンの混合物としての IL の機能制御を目的として、IL を構成する各イオン成分のみを取り出して、その特性を観察することは困難です。そのため、IL を構成する陽イオン・陰イオンが織りなす膨大な化学空間の中から、CO<sub>2</sub> 吸収剤に最適なイオンの組み合わせを見つけ出すことは、事実上不可能でした。

## 2. 研究成果

本研究では、森教授らの研究グループが開発推進している溶液/凝集系中ではたらく分子間相互作用を精密にシミュレート可能な「量子化学計算」と「機械学習」を組み合わせた材料開発技術「電子状態インフォマティクス」(図1・左)を応用し、402,114 個の IL 候補から CO<sub>2</sub> 溶解度の高い IL を迅速探索しました。機械学習に用いる特徴量は、簡単に実施できる「小さな分子イオン群に対する量子化学計算」によって決定され、分子相互作用を支配する分子形状と電子状態の重要度が、ラッパー法 (機械学習) によって定量されました。その結果、イオン種の電子状態の露わな考慮が IL の機能設計に本質的に重要であることが明らかとなりました。

続いて、機械学習モデルによって絞り込まれた IL 候補の中から合成の容易さを考慮し、山田准教授らの研究グループが、トリヘキシル (テトラデシル) ホスホニウムパーフルオロオクタンサルホン酸 (図1・右) を合成しました。児玉准教授らの研究グループが保有する磁気浮遊天秤を用いた精密で迅速な測定実験により、新たに創成した IL は、従来最大の CO<sub>2</sub> 吸収量を与える IL として知られてきたトリヘキシル (テトラデシル) ホスホニウムビス (トリフルオロメタンサルホン) アミドよりも、高い CO<sub>2</sub> 溶解度を有することを確認しました。

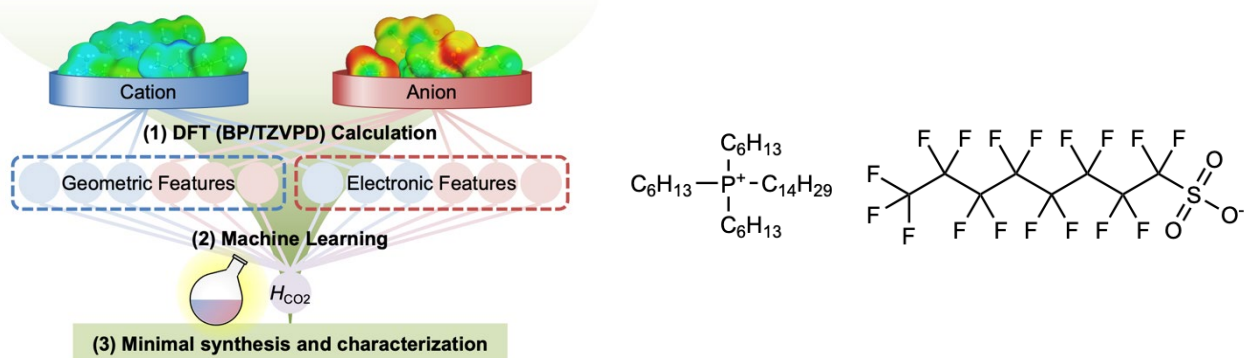


図1 (左) CO<sub>2</sub> 吸収性 IL の高精度迅速探索のための電子状態インフォマティクスの概要と (右) 本研究で具現化された過去最高の CO<sub>2</sub> 物理吸収量を示す IL の分子構造

実験的に単離不可能なイオン種も理論的な量子化学計算でその電子状態 (表面電荷分布) を定量評価し、データベース化が可能。そこから得られる分子イオンの幾何構造的特徴と電子的特徴を CO<sub>2</sub> 吸収量と関連づける機械学習を実施した後、得られたモデルを未知イオンの組み合わせに応用展開 → 最小限の手数の実験で検証することで、優れた IL を迅速に具現化することに成功した。

今後、電子構造インフォマティクスを用いて、官能基の導入や元素置換などによる新しいイオン種も計画的に検討することで、IL の膨大な化学空間に邪魔されずに CO<sub>2</sub> 吸収液の更なる研究開発を加速させることができます。本研究で提案した機能性液体の開発手法は、深部共晶溶媒 (広義の水素結合性混合有機溶媒) など弱い分子間相互作用を有する他のガス吸蔵液体や、多成分系からなる一般の機能性材料にも適用可能です。本手法は、

カーボンニュートラルな社会および SDGs の実現に大きく貢献することが期待されます。

## 謝辞

本研究は、JST ACT-I (JPMJPR16UB)、JST ACT-X (JPMJAX20A9) および JSPS 科研費 (19K05130, 21H01894) の支援を受けて実施されました。また、計算の一部には、自然科学研究機構計算科学研究センターが使用されました (22-IMS-C015)。

## リンク

- 中央大学 理工学部 応用化学科・[理論化学研究室](#)
- 日本大学 工学部 生命応用化学科・[環境化学工学研究室](#)

### <本件に関するお問い合わせ>

中央大学理工学部応用化学科 教授 森 寛敏

Email : [qc-forest.19d@g.chuo-u.ac.jp](mailto:qc-forest.19d@g.chuo-u.ac.jp)

TEL : 03-3817-1918

日本大学工学部生命応用化学科 准教授 児玉 大輔

Email : [kodama.daisuke@nihon-u.ac.jp](mailto:kodama.daisuke@nihon-u.ac.jp)

TEL : 024-956-8813

### <取材に関するお問い合わせ>

中央大学広報室

Email : [kk-grp@g.chuo-u.ac.jp](mailto:kk-grp@g.chuo-u.ac.jp)

日本大学工学部研究事務課

Email : [ceb.kenkyu@nihon-u.ac.jp](mailto:ceb.kenkyu@nihon-u.ac.jp)