

## G320

## 二酸化炭素吸収のための新規アミン化合物の設計と検証

(東大院工) ○ (学) 山城 直也, (学) 右田啓也, 宮尾 知幸,  
(正) 荒川 正幹, (正) 船津 公人\*

## 1. 緒言

大気中の二酸化炭素濃度の上昇を抑制するための手法として、二酸化炭素地中貯留技術(CCS)が注目されている[1]。しかし、その実用化のためにはコストの高さが大きな課題となっている。特に二酸化炭素を分離回収する過程におけるコストが全体の大部分を占めると計算され、その低減が求められている。

現在有力と考えられる分離回収技術としてアミン水溶液による化学吸収法が挙げられる。その吸収液に求められる性質としては、二酸化炭素を放散させるために必要な熱量が少なく、吸収速度が速いことが挙げられ、新規吸収液の開発に関する研究が盛んに行われている[1]。

そこで本研究では、これらの要求を満たすような吸収液を統計モデルにより効率よく探索する手法を提案することを目的とした。これにより、実験や量子化学計算に基づいた探索と比較し、低コストで多数の吸収液の評価を行うことが可能になると期待される。まずアルカノールアミンの構造と、吸収速度および反応熱の関係性を定量的に表す回帰モデルを構築し、それらのモデルを利用することで優れた性質を示すと考えられる構造の探索を行う。

## 2. 手法

回帰モデルの構築にあたって、各構造を化学構造記述子により説明変数へ変換する必要がある。そこで構造記述子には分子量、構造内のアミノ基の級数、アミンと炭素および酸素の結合距離、構造中に含まれる立体障害の大きい原子団の個数などを用いた。回帰モデルの構築には、線型回帰モデル構築手法である PLS 法を用いた。

そして、このモデルを利用し、より良好な物性を示すと考えられるアミン構造の探索を行った。炭素、酸素、窒素原子を合計 5 個から 12 個含む化学構造を網羅的に発生させ、各構造について物性値の予測を行った。ただ、記述子の値が訓練データの範囲から大きく外れるデータについては、その予測精度が大幅に低下することが適用範囲の概念[2]から予想される。そこで、適用範囲を定めるための手法として OCSVM

(One-Class Support Vector Machine) を用いた。OCSVM は、記述子空間内の高密度領域の境界面を定義する手法である。訓練データから定義された密度領

域と予測誤差の関係を関連付けることにより、テストデータの予測誤差を計算する。

## 3. 結果

実測値の知られている 28 のアルカノールアミンを対象とし、吸収速度・反応熱に対する PLS モデルの構築を行った。その結果、反応熱については、 $R^2=0.937$ 、吸収速度については、 $R^2=0.846$  のモデルが得られた。ここで、 $R^2$  は説明分散であり、それぞれ十分高い値が得られたと言える。次にこのモデルによって仮想的に生成した構造の物性値を予測し、さらに各物性値の予測誤差を OCSVM により計算した。その計算結果を図 1 に示す。図中のプロットは実測値が赤い四角、2つの物性値の予測誤差が小さいと計算された構造が青色、予測誤差が大きいと計算された構造が緑色で示されている。予測誤差が少なく、良好な物性値を持つ候補構造の詳細な検討を行うことで二酸化炭素の分離回収コスト低減につながる吸収液が開発できると考えられる。

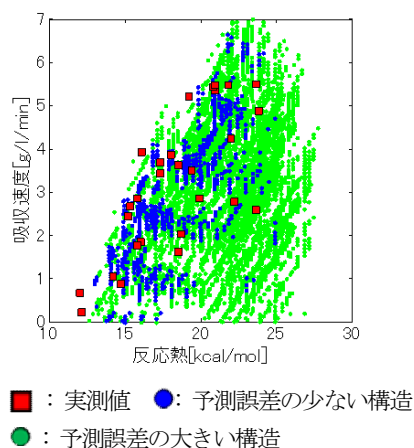


図 1 候補構造の物性予測値

## 謝辞

データを提供していただいた財団法人地球環境産業技術研究機構に深く感謝します。

また、本研究は独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構の委託業務によるものです。

## 参考文献

- [1] 乾智之, CO<sub>2</sub>固定化・隔離技術, CMC出版, 2008.  
[2] Jaworska J. et al., ATLA, 445-459, 2005.

\*funatsu@chemsys.t.u-tokyo.ac.jp