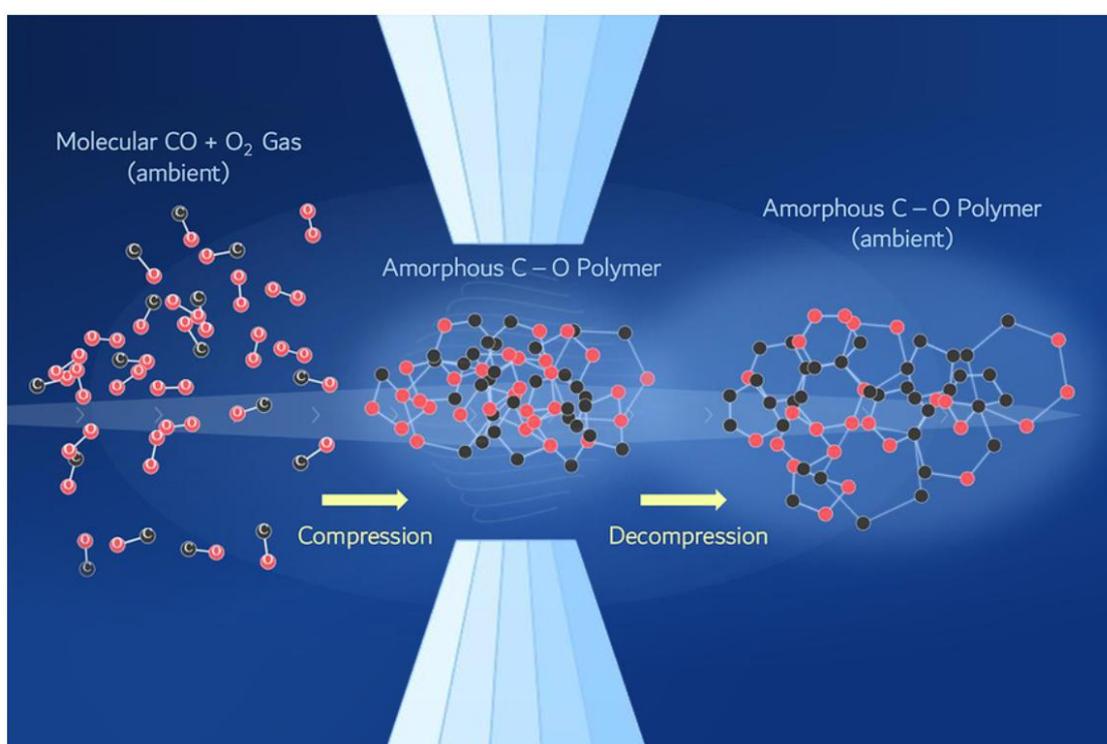


【環境・省資源分野】

仮訳

暫定から安定へ：  
二酸化炭素ベースの新しいエネルギー材料のレシピを発見(米国)

2026年1月26日



ローレンス・リバモア国立研究所(LLNL)の研究者らは、一酸化炭素と酸素の混合物が減圧後も安定性を保持するポリマーを形成する経路について計算モデルを用いて特定した。

(画像提供: Stanimir Bonev)

物質が圧縮されると、その原子は一般的な条件下では存在しない異例の配列を強いられる。こうした配列は多くの場合一時的なものであり、圧力が解放されると原子は安定した低圧状態に戻る。ダイヤモンドのようなごく限られた物質だけが、室温・大気圧に戻った後も高压構造を維持する。

しかし、この異例の原子配列を常温下で固定することで、幅広いアプリケーションを持つ有用な新材料を創出することができる。特に優れた一例として、推進剤や爆薬に役立てられるエネルギー物質が挙げられる。

ローレンス・リバモア国立研究所 (LLNL) の研究者らが、[Nature Communications Chemistry](#) に掲載された研究において、高压状態から回収できる二酸化炭素(CO<sub>2</sub>)相当量ポリマーについて初めて特定している。

「CO<sub>2</sub> の重合体では、高密度の共有結合ネットワークで原子が固定されているため、通常の CO<sub>2</sub> に比べてはるかに多くのエネルギーを蓄えます」と、LLNL の科学者で論文著者の Stanimir Bonev 氏は言う。「このような材料を回収し、安定化できれば、単位質量・体積あたりに大量のエネルギーを貯蔵・放出できる、高エネルギー密度材料としての可能性が期待できます」。

LLNL の研究チームは、量子分子動力学シミュレーションと大規模機械学習(ML)モデルを組み合わせ、ポリマーの形成経路を予測し、高压下と圧力解放時のその挙動を解明した。これらの手法の組み合わせにより、管理された体系的な方法で幅広い圧力・温度条件を探索し、将来の実験に向けた明確な指針を得ることができた。

このブレイクスルーは、CO<sub>2</sub> そのものではなく、一酸化炭素と酸素の混合物の圧縮に焦点を当てたことで実現した。分子混合物から出発することで、より低い圧力下で変化が発生し、より柔軟な反応経路が開かれる。このアプローチは、規則的な結晶構造を持たず、圧力解放時により安定する非晶質固体の形成にも有効である。

「これらの非晶質構造では、圧力解放時に結合ひずみが減少し、常温下での安定性が向上すると考えられます」と Bonev 氏は言う。「このことは、結晶に取って代わられがちで見過ごされてきた非晶質材料が、より高い安定性と有用な特性を提供する可能性を浮き彫りにしています」。

研究者らは、この混合物を用いて 7 ギガパスカル付近の圧力から始まる合成経路を特定した。これは、これまで高分子 CO<sub>2</sub> ベース材料の形成に必要とされていた 100 ギガパスカル超の圧力よりも一桁以上低いものである。

この材料の合成方法を示すシミュレーションに加え、研究者らはそれが機能する理由の物理的な説明をも提供している。鍵は炭素-炭素結合にあり、この結合は混合物中で容易に形成され、圧力の解放後も材料の状態の維持を助ける、独特で安定した構造に貢献する。

研究者らは、本研究の成果が将来の実験的取り組みに向けた具体的な目標と実用的な戦略を提供することを期待している。より広範囲には、このアプローチを炭素、酸素、

窒素、または水素を含む他の軽元素系に適用すれば、回収可能な新しい種類のエネルギー材料や機能性材料につながる可能性がある。

本研究は、LLNL の Laboratory Directed Research and Development Program が支援した。

訳：NEDO（担当 イノベーション戦略センター）

出典：本資料は、ローレンス・リバモア国立研究所(LLNL)の記事 “From fleeting to stable: scientists uncover recipe for new carbon dioxide-based energetic materials” (<https://www.llnl.gov/article/53936/fleeting-stable-scientists-uncover-recipe-new-carbon-dioxide-based-energetic-materials>) を翻訳したものである。