(19)日本国特許庁(JP)　(12)公表特許公報(A)　(11)公表番号
特表2025-521644
(P2025-521644A)
(43)公表日　令和7年7月10日(2025.7.10)

(51)国際特許分類			FI			テーマコード（参考）
Ｂ０１Ｊ	*20/22*	*(2006.01)*	Ｂ０１Ｊ	20/22	Ａ	４Ｄ０１２
Ｂ０１Ｊ	*20/30*	*(2006.01)*	Ｂ０１Ｊ	20/30		４Ｇ０６６
Ｂ０１Ｊ	*20/34*	*(2006.01)*	Ｂ０１Ｊ	20/34	Ｈ	
Ｂ０１Ｄ	*53/04*	*(2006.01)*	Ｂ０１Ｄ	53/04	２２０	

審査請求　未請求　予備審査請求　未請求　（全204頁）

(21)出願番号　特願2024-576365(P2024-576365)
(86)(22)出願日　令和5年6月30日(2023.6.30)
(85)翻訳文提出日　令和7年2月25日(2025.2.25)
(86)国際出願番号　PCT/US2023/026724
(87)国際公開番号　WO2024/006521
(87)国際公開日　令和6年1月4日(2024.1.4)
(31)優先権主張番号　63/357,758
(32)優先日　令和4年7月1日(2022.7.1)
(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)
(31)優先権主張番号　63/357,770
(32)優先日　令和4年7月1日(2022.7.1)
(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)
(31)優先権主張番号　63/357,912
最終頁に続く

(71)出願人　516326438
エックス デベロップメント エルエルシー
アメリカ合衆国 カリフォルニア州 ９４０４３ マウンテン ビュー アンフィシアター パークウェイ １６００
(74)代理人　100079108
弁理士　稲葉 良幸
(74)代理人　100126480
弁理士　佐藤 睦
(72)発明者　ゴング，チャオクン
アメリカ合衆国，カリフォルニア州 ９４０４３，マウンテン ビュー，アンフィシアター パークウェイ １６００
(72)発明者　ウィルマン，ジェレミー アーロン
アメリカ合衆国，カリフォルニア州 ９
最終頁に続く

(54)【発明の名称】　炭素捕捉のための官能化された材料及びそれらのシステム

(57)【要約】
本開示は、任意選択で吸着剤として用いられ得る官能化された材料、及びそのような材料を作製する方法、及びそのような材料を使用するシステムに関する。本明細書におけるプロセス、方法、及びシステムは、流体流れからの二酸化炭素の分離のために使用され得る。
【選択図】図１Ａ

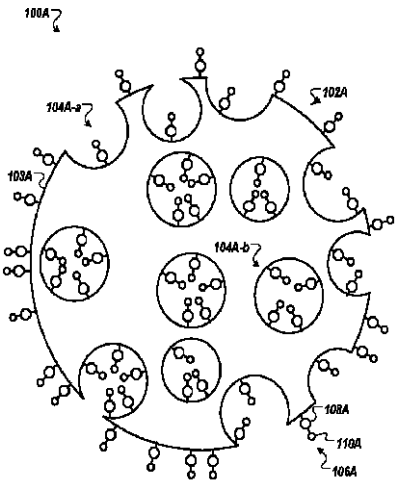


FIG. 1A

【特許請求の範囲】
【請求項１】
複数の多孔質粒子と、
前記複数の多孔質粒子のうちの少なくとも１つの表面の少なくとも一部分上に配設された表面修飾層であって、１つ以上のアミン部分を含む吸着部分を含む、表面修飾層と、を含む、官能化された材料であって、
前記材料が、大気CO_2を第１の条件下で吸着し、吸着されたCO_2を第２の条件下で可逆的に脱着するように構成されている、官能化された材料。
【請求項２】
前記複数の多孔質粒子が、複数の多孔質シリカ粒子、複数の多孔質金属有機構造体（ＭＯＦ）粒子、又は複数のイオン交換樹脂粒子を含む、請求項１に記載の材料。
【請求項３】
前記複数の多孔質粒子が、多孔質シリカ又はシリケート、多孔質セラミック、多孔質金属有機基質、多孔質ポリマー基質、多孔質シリカと一緒の多孔質セラミック／金属酸化物、多孔質アルミナ、金属有機構造体（ＭＯＦ）、又は樹脂を含む、請求項１に記載の材料。
【請求項４】
前記複数の多孔質粒子が、沈殿形態、ゾルゲル形態、煙霧形態、か焼形態、凝集形態、顆粒化形態、粉末、又は顆粒において提供された基質を含む、請求項３に記載の材料。
【請求項５】
前記複数の多孔質粒子が、約２５μｍ～４ｍｍの平均寸法（ａｖｅｒａｇｅ　ｄｉｍｅｎｓｉｏｎ）又は平均寸法（ｍｅａｎ　ｄｉｍｅｎｓｉｏｎ）（例えば、直径）を含む、請求項１に記載の材料。
【請求項６】
前記複数の多孔質粒子が、複数の細孔を含む、請求項１に記載の材料。
【請求項７】
前記複数の細孔が、約１～２００ｎｍの寸法、約３０～８０ｎｍの平均細孔サイズ、及び／又は約０．５ｍＬ／ｇ超若しくは０．１～５ｍＬ／ｇの体積を含む、請求項６に記載の材料。
【請求項８】
前記複数の多孔質粒子が、少なくとも２５μｍの最大寸法を含み、前記複数の多孔質粒子の複数の細孔が、少なくとも約１ｎｍの寸法及び約０．５ｍＬ／ｇ超の体積を含む、請求項１に記載の材料。
【請求項９】
前記表面修飾層が、前記表面修飾層を欠く前記複数の多孔質粒子に対して５％～６０％（重量／重量）のポリアミンを含むか、又は前記表面修飾層が、前記表面修飾層を欠く前記複数の多孔質粒子に対して５％～８０％（重量／重量）のアミノシランを含む、請求項１に記載の材料。
【請求項１０】
前記複数の多孔質粒子が、１乾燥グラム当たり約１００m^2超の総表面積を含む、請求項１に記載の材料。
【請求項１１】
前記材料が、１乾燥キログラム当たり約０．８ｍｏｌ超のCO_2又は１乾燥キログラム当たり約０．８～２．５ｍｏｌのCO_2を吸着する、請求項１に記載の材料。
【請求項１２】
前記材料が、CO_2を、約５％～９５％の範囲の相対湿度で吸着する、請求項１に記載の材料。
【請求項１３】
前記表面修飾層が、（ｉ）アミン部分及びシラン部分、（ｉｉ）複数のアミン部分、又は（ｉｉｉ）（ｉ）及び（ｉｉ）の両方を含む、請求項１～１２のいずれか一項に記載の

材料。
【請求項１４】
前記表面修飾層が、１つ以上の化合物を、前記複数の多孔質粒子のうちの少なくとも１つの前記表面の少なくとも一部分と相互作用させることによって提供されており、前記１つ以上の化合物が、アミノシラン及び／又はポリアミンからなる群から選択される、請求項１３に記載の材料。
【請求項１５】
前記アミノシランが、式（Ｉ）、（Ｉａ）～（Ｉｆ）、（ＩＩ）、及び（ＩＩａ）～（ＩＩｄ）のうちの１つを有する構造を含み、前記ポリアミンが、式（ＩＩＩａ）～（ＩＩＩｉ）のうちの１つを有する構造を含む、請求項１４に記載の材料。
【請求項１６】
前記第１の条件が、第１の温度範囲を含み、前記第２の条件が、前記第１の温度範囲よりも高い第２の温度範囲を含むか、又は前記第１の条件が、第１のガス圧力を含み、前記第２の条件が、前記第１のガス圧力よりも低い第２のガス圧力を含むか、又は前記第１の条件が、第１のCO_2濃度を含み、前記第２の条件が、前記第１のCO_2濃度よりも低い第２のCO_2濃度を含む、請求項１に記載の材料。
【請求項１７】
抗酸化剤部分、添加剤、疎水性シラン化合物、及び／又は疎水性ポリマーを更に含む、請求項１に記載の材料。
【請求項１８】
官能化された材料を形成する方法であって、
第１の試薬を、複数の多孔質粒子及び溶媒媒体に導入し、それによって、官能化混合物を提供することであって、前記第１の試薬が、１つ以上のアミン部分を含む少なくとも１つの吸着部分を含む、導入することと、
官能化された材料を、前記官能化混合物から除去することであって、前記官能化された材料が、前記複数の多孔質粒子と、前記複数の多孔質粒子のうちの少なくとも１つの表面の少なくとも一部分上に配設された表面修飾層と、を含み、前記表面修飾層が、前記少なくとも１つの吸着部分を含む、除去することと、
前記官能化された材料を乾燥させることと、を含む、方法。
【請求項１９】
前記第１の試薬が、アミノシランを含み、前記アミノシランが、少なくとも１つのアミノ部分及び少なくとも１つのシラン部分を含む、請求項１８に記載の方法。
【請求項２０】
前記アミノシランが、式（Ｉ）、（Ｉａ）～（Ｉｆ）、（ＩＩ）、及び（ＩＩａ）～（ＩＩｄ）のうちの１つを有する構造を含む、請求項１９に記載の方法。
【請求項２１】
前記少なくとも１つのシラン部分が、アルコキシシラン部分、トリハロシラン部分、ジハロシラン部分、モノハロシラン部分、シラントリオール部分、ジアルコキシシラノール部分、モノアルコキシシラノール部分、又はアミノシランオリゴマーを含む、請求項１９に記載の方法。
【請求項２２】
前記第１の試薬が、第２の試薬の存在下で提供され、前記第２の試薬が、ポリアミンを含む、請求項１９に記載の方法。
【請求項２３】
前記第１の試薬が、前記複数の多孔質粒子に提供され、次いで、ポリアミンを含む第２の試薬が、前記官能化混合物に提供される、請求項１９に記載の方法。
【請求項２４】
ポリアミンを含む第２の試薬が、前記官能化混合物からの除去後の前記官能化材料に提供される、請求項１９に記載の方法。
【請求項２５】

前記第１の試薬が、ポリアミンを含む、請求項１８に記載の方法。
【請求項２６】
前記ポリアミンが、式（ＩＩＩａ）～（ＩＩＩｉ）のうちの１つを有する構造を含む、請求項２５に記載の方法。
【請求項２７】
前記第１の試薬が、第２の試薬の存在下で提供され、前記第２の試薬が、アミノシランを含む、請求項２５に記載の方法。
【請求項２８】
前記第１の試薬が、前記複数の多孔質粒子に提供され、次いで、アミノシランを含む第２の試薬が、前記官能化混合物に提供される、請求項２５に記載の方法。
【請求項２９】
前記第１の試薬が、小分子ポリアミン、又は複数の小分子ポリアミンを含む混合物を含む、請求項１８に記載の方法。
【請求項３０】
前記官能化混合物が、前記複数の多孔質粒子に対して５％～８０％（重量／重量）の前記第１の試薬を含む、請求項１８に記載の方法。
【請求項３１】
前記第１の試薬が、ポリアミンを含み、前記官能化混合物が、前記複数の多孔質粒子に対して５％～６０％（重量／重量）の前記ポリアミンを含む、請求項３０に記載の方法。
【請求項３２】
前記第１の試薬が、アミノシランを含み、前記官能化混合物が、前記複数の多孔質粒子に対して５％～８０％（重量／重量）の前記アミノシランを含む、請求項３０に記載の方法。
【請求項３３】
前記溶媒媒体が、水を含む、請求項１８に記載の方法。
【請求項３４】
前記溶媒媒体が、極性非プロトン性溶媒又は中性非プロトン性溶媒を含む、請求項１８に記載の方法。
【請求項３５】
前記溶媒媒体が、トルエン、ヘキサン、シクロヘキサン、及びテトラヒドロフランからなる群から選択される有機溶媒を含む、請求項１８に記載の方法。
【請求項３６】
前記溶媒媒体が、メタノール、シクロヘキサン、ヘキサン、エタノール、水、又はそれらの組み合わせを含む、請求項１８に記載の方法。
【請求項３７】
前記乾燥させることが、前記官能化された材料に対して約５％（重量／重量）の前記溶媒媒体の水和閾値に乾燥させることを含む、請求項１８に記載の方法。
【請求項３８】
吸着剤材料が、請求項１～１７のいずれか一項に記載の官能化された材料を含む、請求項１８～３７のいずれか一項に記載の方法。
【請求項３９】
官能化された材料を形成する方法であって、
第１の試薬及び第２の試薬を、水に導入し、それによって、官能化混合物を提供することであって、前記第１の試薬が、ポリアミンを含み、前記第２の試薬が、アミノシランを含む、提供することと、
複数の多孔質粒子を、前記官能化混合物中に、ある期間にわたって導入し、それによって、官能化された材料を形成することであって、前記官能化された材料が、前記複数の多孔質粒子と、前記複数の多孔質粒子のうちの少なくとも１つの表面の少なくとも一部分上に配設された表面修飾層と、を含み、前記表面修飾層が、少なくとも１つの吸着部分を含む、形成することと、

前記官能化された材料を、前記官能化混合物から除去することと、
前記官能化された材料を乾燥させることと、を含む、方法。
【請求項４０】
前記アミノシランが、式（Ｉ）、（Ｉａ）～（Ｉｆ）、（ＩＩ）、及び（ＩＩａ）～（ＩＩｄ）のうちの１つを有する構造を含み、前記ポリアミンが、式（ＩＩＩａ）～（ＩＩＩｉ）のうちの１つを有する構造を含む、請求項３９に記載の方法。
【請求項４１】
前記複数の多孔質粒子が、少なくとも２５キログラムの量を含む、請求項３９に記載の方法。
【請求項４２】
前記乾燥させることが、前記官能化された材料に対して約５％（重量／重量）の溶媒媒体の水和閾値に乾燥させることを含む、請求項３９～４１のいずれか一項に記載の方法。
【請求項４３】
前記乾燥させることが、ダブルコーン真空乾燥機、コンベヤベルト乾燥機、又はヌッチェフィルタ乾燥機において実行される、請求項３９～４２のいずれか一項に記載の方法。
【請求項４４】
吸着剤材料が、請求項１～１７のいずれか一項に記載の官能化された材料を含む、請求項３９～４３のいずれか一項に記載の方法。
【請求項４５】
CO_2を空気から除去するための方法であって、前記方法が、
CO_2を含む周囲空気を、吸着剤材料を含むホルダに提供し、それによって、リッチ吸着剤材料を提供することと、
任意選択で、CO_2を前記リッチ吸着剤材料から脱着し、それによって、リーン材料を提供することと、を含み、
前記吸着剤材料が、請求項１～１７のいずれか一項に記載の官能化された材料を含む、方法。
【請求項４６】
吸着剤材料を受容するように構成された第１の入口、
CO_2を、周囲空気から、前記吸着剤材料を使用して吸着し、それによって、リッチ吸着剤材料を提供するように構成された吸着器システム、
CO_2を前記リッチ吸着剤材料から脱着し、それによって、リーン材料を提供し、前記リーン吸着剤材料を前記吸着器システムに送達するように構成された脱着器システムを備える直接空気捕捉（ＤＡＣ）システムであって、
前記吸着剤材料が、複数の多孔質粒子と、前記複数の多孔質粒子のうちの少なくとも１つの表面の少なくとも一部分上に配設された表面修飾層と、を含み、前記表面修飾層が、１つ以上のアミン部分を含む吸着部分を含み、
前記吸着剤材料が、大気CO_2を第１の条件下で吸着し、吸着されたCO_2を第２の条件下で可逆的に脱着するように構成されている、ＤＡＣシステム。
【請求項４７】
前記吸着剤材料が、請求項１～１７のいずれか一項に記載の官能化された材料を含む、請求項４６に記載のシステム。
【請求項４８】
反応器であって、
第１の方向に沿って第１のチャンバ壁から前記第１のチャンバ壁の反対側の第２のチャンバ壁へ延びる反応チャンバであって、前記反応チャンバが、基部から頂部壁へ、前記第１の方向に垂直な第２の方向に延びる中空区画を備え、前記区画が、前記第１の方向に垂直な断面において、前記基部に対して近位の基部部分及び前記基部に対して遠位の頂部部分を有し、前記基部部分が、前記頂部部分よりも狭い、反応チャンバと、
前記第１のチャンバ壁における、前記反応チャンバ内への入口であって、前記反応チャンバ内への粉末化吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する、入口と、

前記第２のチャンバ壁における、前記反応チャンバからの出口であって、前記反応チャンバからの前記粉末化吸着剤材料の除去のための放出を提供する、出口と、
１つ以上の空気チャンバであって、各々が、前記中空区画と、前記中空区画の前記基部におけるチャネルを介して流体連通する、１つ以上の空気チャンバと、
１つ以上の送風機であって、各々が、周囲空気を受容し、前記反応器の運転中に、空気を、前記空気チャンバのうちの対応する１つ内に送風するように配置されている、１つ以上の送風機と、
１つ以上の排気ポートであって、前記反応器の運転中に、空気を、前記反応チャンバの前記区画から除去するように構成されている、１つ以上の排気ポートと、を備える、反応器。

【請求項４９】
前記１つ以上の空気チャンバ及び前記中空区画と流体連通する分配プレートを更に備える、請求項４８に記載の反応器。
【請求項５０】
前記分配プレートが、Ｗ形状である、請求項４９に記載の反応器。
【請求項５１】
前記反応器が、追加の分配プレートを更に備え、前記追加の分配プレートが、平坦である、請求項５０に記載の反応器。
【請求項５２】
前記分配プレートが、平坦である、請求項４９に記載の反応器。
【請求項５３】
前記１つ以上の排気ポートが、前記反応チャンバの前記頂部壁において配置されている、請求項４８に記載の反応器。
【請求項５４】
前記反応器が、前記入口と流体連通するように配置された送り装置を更に備え、前記送り装置が、前記反応器の運転中に、前記粉末化吸着剤材料を前記反応チャンバに送達するように構成されている、請求項４８に記載の反応器。
【請求項５５】
前記入口が、前記基部に対して近位に位置する、請求項５４に記載の反応器。
【請求項５６】
前記反応器が、運転中に、前記反応チャンバから前記空気チャンバへの圧力低下が、９．０ｐｓｉ以下であるように構成されている、請求項４８に記載の反応器。
【請求項５７】
前記反応器が、運転中に、吸着剤チャンバが、１グラムの吸着剤材料当たり約１０リットル以上の空気を収容するように構成されている、請求項４８に記載の反応器。
【請求項５８】
前記粉末化吸着剤材料が、２５～４，０００μｍの直径を有する粒子を含む、請求項４８に記載の反応器。
【請求項５９】
前記反応器が、ルーバーを更に備え、前記ルーバーが、前記第１の方向に沿って配置されており、前記反応器の１つ以上の壁上に位置し、前記ルーバーが、周囲空気を、前記１つ以上の空気チャンバ内に引き込むように構成されている、請求項４８に記載の反応器。
【請求項６０】
前記粉末化吸着剤材料が、CO_2吸着剤である、請求項４８に記載の反応器。
【請求項６１】
前記粉末化吸着剤材料が、請求項１～１７のいずれか一項に記載の官能化された材料を含む、請求項４８に記載の反応器。
【請求項６２】
前記中空区画が、断面において、前記基部に対して近位の第１のテーパー部分を備える、請求項４８に記載の反応器。

【請求項６３】
前記中空区画が、断面において、前記第１のテーパー部分から離隔した第２のテーパー部分を更に備える、請求項６２に記載の反応器。
【請求項６４】
CO_2を大気から除去するための方法であって、
CO_2を含む周囲空気を、１つ以上の空気チャンバを備える反応器に提供することと、
前記周囲空気を送風して、これにより、前記周囲空気が、前記１つ以上の空気チャンバから反応チャンバ内に移行することと、
粉末化吸着剤材料を、前記反応チャンバに入口を介して送達することと、
前記粉末化吸着剤材料及び前記空気の流動床を、前記粉末化吸着剤材料が、前記CO_2を前記空気から吸着して、CO_2低減空気及び使用済み粉末化吸着剤材料を形成する条件下で作製することと、
使用済み粉末化吸着剤材料を、前記反応チャンバから連続的に除去することと、
CO_2低減空気を、前記反応チャンバから１つ以上の排気ポートを介して連続的に除去することと、を含む、方法。
【請求項６５】
前記粉末化吸着剤材料が、請求項１～１７のいずれか一項に記載の官能化された材料を含む、請求項６４に記載の方法。
【請求項６６】
直接空気捕捉（ＤＡＣ）システムであって、
CO_2を、周囲空気から、粉末化吸着剤材料を使用して吸着するように構成された流動床吸着反応器と、
前記粉末化吸着剤材料を前記流動床吸着反応器から受容し、CO_2を前記粉末化吸着剤材料から脱着するように構成された脱着反応器と、
廃熱を生成する産業プロセス設備であって、前記廃熱が、前記脱着反応器に提供されて、前記粉末化吸着剤材料を加熱する、産業プロセス設備と、を備える、ＤＡＣシステム。
【請求項６７】
前記粉末化吸着剤材料が、請求項１～１７のいずれか一項に記載の官能化された材料を含む、請求項６６に記載のシステム。
【請求項６８】
構造体であって、
複数のパネルによって画定されたチャンバであって、各パネルが、第１の方向に前記構造体の基部から延びる一対の梁間に吊されており、各パネルの高さが、前記第１の方向に前記パネルの底部から前記パネルの頂部へ延び、各パネルが、
多孔質内側シート、
多孔質外側シート、及び
前記パネルの前記頂部から前記パネルの前記底部へ延びる、前記内側シートと前記外側シートとの間の空洞を備える、チャンバと、
前記複数のパネルの前記頂部における前記空洞への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する入口と、
前記複数のパネルの前記空洞の前記底部からの前記吸着剤材料の除去のための放出を提供する出口と、
流体を前記チャンバ内に向けるように配置された送風機と、を備える、構造体。
【請求項６９】
前記パネルの前記空洞内の前記吸着剤材料が、垂直落下移動床吸収体を形成する、請求項６８に記載の構造体。
【請求項７０】
前記内側シートと前記外側シートとの間の前記空洞が、複数のチャネルに分割されており、前記複数のチャネルが、前記内側シート及び前記外側シートを前記パネルの側縁部間の間隔で接続する布地リブによって分離されている、請求項６８に記載の構造体。

【請求項７１】
前記複数のチャネルの各チャネルが、前記第１の方向に垂直な平面における実質的に正方形の断面を有する、請求項７０に記載の構造体。
【請求項７２】
前記空洞が、前記内側シートと前記外側シートとの間の厚さを有し、前記厚さが、２０センチメートル以下である、請求項６８に記載の構造体。
【請求項７３】
前記チャンバが、前記第１の方向に延びる円筒軸を有する、実質的に円筒の形状を有する、請求項６８に記載の構造体。
【請求項７４】
前記チャンバが、４つの壁を有する、実質的に長方角柱の形状を有する、請求項６８に記載の構造体。
【請求項７５】
前記４つの壁のうちの少なくとも１つの壁が、前記複数のパネルのうちのパネルを備える、請求項７４に記載の構造体。
【請求項７６】
前記空洞から前記出口への吸着剤材料の流れを制御するように構成された計量デバイスを備える、請求項６８に記載の構造体。
【請求項７７】
前記内側シート及び前記外側シートが、布地材料を含む、請求項６８に記載の構造体。
【請求項７８】
前記吸着剤材料が、ペレット化形態を有し、二酸化炭素を前記流体から吸着するように構成されている、請求項６８に記載の構造体。
【請求項７９】
前記吸着剤材料が、請求項１～１７のいずれか一項に記載の官能化された材料を含む、請求項６８に記載の構造体。
【請求項８０】
前記送風機が、前記第１の方向に前記チャンバの下３分の１の部分において位置決めされており、前記下３分の１の部分が、前記構造体の前記基部に最も近い部分であるか、又は前記送風機が、前記第１の方向に前記チャンバの中央の３分の１の部分において位置決めされている、請求項６８に記載の構造体。
【請求項８１】
前記送風機が、前記流体を前記第１の方向に向けるように構成されている、請求項６８に記載の構造体。
【請求項８２】
前記流体が、ガス又は空気を含む、請求項６８に記載の構造体。
【請求項８３】
方法であって、
吸着剤材料を構造体の入口において送ることであって、前記構造体が、複数のパネルによって画定されたチャンバを備え、各パネルが、一対の梁間に吊されており、各パネルが、
多孔質内側シート、
多孔質外側シート、及び
前記パネルの頂部から前記パネルの底部へ延びる、前記内側シートと前記外側シートとの間の空洞を備え、前記入口が、前記複数のパネルの前記頂部における前記空洞への前記吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する、送ることと、
吸着剤材料を前記構造体の出口から抽出することであって、前記出口が、前記複数のパネルの前記空洞の前記底部からの前記吸着剤材料の除去のための放出を提供し、吸着剤材料を前記出口から抽出することが、前記空洞内の吸着剤材料が重力に起因して落下することを引き起こす、抽出することと、

前記複数のパネルを通る流体を、前記内側シートから前記外側シートに向かう方向に向けることと、を含む、方法。

【請求項８４】

前記吸着剤材料を前記出口から抽出する速度を制御して、前記空洞を重力に起因して通る前記吸着剤材料の体積流量を制御することを含む、請求項８３に記載の方法。

【請求項８５】

前記吸着剤材料を前記構造体の前記入口において送る速度を、前記吸着剤材料を前記出口から抽出する前記速度に基づいて制御することを含む、請求項８４に記載の方法。

【請求項８６】

前記吸着剤材料を前記出口から抽出する速度を制御して、前記流体への前記吸着剤材料の曝露時間を制御することを含む、請求項８３に記載の方法。

【請求項８７】

前記流体への前記吸着剤材料の前記曝露時間を、３０分以上及び９０分以下であるように制御することを含む、請求項８６に記載の方法。

【請求項８８】

構造体であって、

第１の方向に前記構造体の基部から前記構造体の頂部に向かって延びる第１の梁と、

前記第１の梁から離隔しており、前記第１の梁に平行に延びる第２の梁と、

第１の縁部において前記第１の梁に結合しており、第２の縁部において前記第２の梁に結合しているパネルであって、前記パネルの幅が、前記第１の縁部から前記第２の縁部へ、前記第１の方向に直交する方向に延び、前記パネルの高さが、前記第１の方向に前記パネルの底部から前記パネルの頂部へ延び、前記パネルが、

多孔質内側シート、

多孔質外側シート、及び

前記パネルの前記頂部から前記パネルの前記底部へ延びる、前記内側シートと前記外側シートとの間の空洞を備える、パネルと、

前記パネルの前記頂部における前記空洞への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する入口と、

前記空洞の前記底部からの前記吸着剤材料の除去のための放出を提供する出口と、

前記パネルを通る流体を、前記内側シートから前記外側シートに向かう方向に向けるように配置された送風機と、を備える、構造体。

【請求項８９】

二酸化炭素を、バルク固体を含む吸着剤材料から除去するためのシステムであって、

熱を作動流体及び熱供給源流体から前記吸着剤材料に伝達することによって、水蒸気を前記吸着剤材料から蒸発させるように構成された第１の熱交換器と、

熱を前記水蒸気から前記作動流体に伝達することによって、前記水蒸気を凝縮させるように構成された凝縮器と、

熱を前記作動流体から前記吸着剤材料に伝達することによって、二酸化炭素を前記吸着剤材料から脱着するように構成された第２の熱交換器と、

前記二酸化炭素を前記第２の熱交換器から除去するように構成されたポンプと、

前記作動流体を、前記第１の熱交換器、前記凝縮器、及び前記第２の熱交換器間で循環させるための閉ループ流路と、

前記熱供給源流体を前記第１の熱交換器に提供するための開ループ流路と、

前記吸着剤材料を、前記第１の熱交換器から前記第２の熱交換器に輸送するためのチャネルと、を備える、システム。

【請求項９０】

前記第１の熱交換器が、

前記第１の熱交換器への前記吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する第１の入口、及び

前記第１の熱交換器からの前記吸着剤材料の除去のための放出を提供する第１の出口を

備え、
運転中に、前記第１の入口が、前記第１の出口よりも高い高度を有する、請求項８９に記載のシステム。
【請求項９１】
前記第２の熱交換器が、
前記第２の熱交換器への前記吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する第２の入口、及び
前記第２の熱交換器からの前記吸着剤材料の除去のための放出を提供する第２の出口を備え、
運転中に、前記第２の入口が、前記第２の出口よりも高い高度を有する、請求項９０に記載のシステム。
【請求項９２】
運転中に、前記第２の熱交換器の前記第２の入口が、前記第１の熱交換器の前記第１の出口よりも高い高度を有する、請求項９１に記載のシステム。
【請求項９３】
運転中に、前記第２の熱交換器の前記第２の入口が、前記第１の熱交換器の前記第１の出口よりも低い高度を有する、請求項９１に記載のシステム。
【請求項９４】
前記閉ループ流路及び前記開ループ流路が、互いに流体的に隔離されている、請求項８９に記載のシステム。
【請求項９５】
前記第１の熱交換器内への吸着剤材料の流れを制御するように構成された計量デバイスを備える、請求項８９に記載のシステム。
【請求項９６】
前記吸着剤材料が、ペレット化形態を有し、二酸化炭素を流体から吸着するように構成されている、請求項８９に記載のシステム。
【請求項９７】
前記吸着剤材料が、請求項１～１７のいずれか一項に記載の官能化された材料を含む、請求項８９に記載のシステム。
【請求項９８】
前記第１の熱交換器及び前記第２の熱交換器が、プレート熱交換器、シェルアンドチューブ熱交換器、又はシェルアンドプレート熱交換器を含む、請求項８９に記載のシステム。
【請求項９９】
前記第１の熱交換器が、蒸発器を備え、前記第２の熱交換器が、脱着器を備える、請求項８９に記載のシステム。
【請求項１００】
二酸化炭素を、バルク固体を含む吸着剤材料から除去するための方法であって、
作動流体を、第１の熱交換器、凝縮器、及び第２の熱交換器間の閉ループにおいて循環させることと、
熱供給源流体を、前記第１の熱交換器に提供することと、
熱を前記作動流体及び前記熱供給源流体から前記第１の熱交換器内の前記吸着剤材料に伝達することによって、水蒸気を前記吸着剤材料から蒸発させることと、
熱を前記水蒸気から前記凝縮器内の前記作動流体に伝達することによって、前記水蒸気を凝縮させることと、
前記吸着剤材料を、前記第１の熱交換器から前記第２の熱交換器にチャネルを介して輸送することと、
熱を前記作動流体から前記第２の熱交換器内の前記吸着剤材料に伝達することによって、二酸化炭素を前記吸着剤材料から脱着することと、
前記二酸化炭素を、前記第２の熱交換器からポンプによって除去することと、を含む、

方法。
【請求項１０１】
前記方法が、
前記吸着剤材料を前記第１の熱交換器の入口において送ることと、
前記吸着剤材料を前記第１の熱交換器の出口から抽出することと、を含み、
前記吸着剤材料が、前記第１の熱交換器の前記入口から前記第１の熱交換器の前記出口に、重力に起因して移動する、請求項１００に記載の方法。
【請求項１０２】
前記方法が、
前記吸着剤材料を前記第２の熱交換器の入口において送ることと、
前記吸着剤材料を前記第２の熱交換器の出口から抽出することと、を含み、
前記吸着剤材料が、前記第２の熱交換器の前記入口から前記第２の熱交換器の前記出口に、重力に起因して移動する、請求項１００に記載の方法。
【請求項１０３】
熱を、前記第１の熱交換器内の前記吸着剤材料から蒸発した前記水蒸気から前記第２の熱交換器内の前記吸着剤材料に、前記作動流体を介して伝達することと、
前記第２の熱交換器内の前記吸着剤材料を、前記第１の熱交換器において予備冷却された熱供給源流体を使用して冷却することと、を含む、請求項１００に記載の方法。
【請求項１０４】
第２のポンプを使用して、真空圧力を前記第１の熱交換器において確立し、前記水蒸気を、前記第１の熱交換器から前記凝縮器に輸送することを含む、請求項１００に記載の方法。
【請求項１０５】
凝縮した前記水蒸気を、前記凝縮器から水出口を介して除去することを含む、請求項１００に記載の方法。
【請求項１０６】
真空圧力を、前記第２の熱交換器において、前記ポンプを使用して確立することと、
真空圧力を、前記第１の熱交換器及び前記第２の熱交換器において、エアロックを使用して維持することと、を含む、請求項１００に記載の方法。
【請求項１０７】
前記吸着剤材料が、請求項１～１７のいずれか一項に記載の官能化された材料を含む、請求項１００に記載の方法。
【請求項１０８】
二酸化炭素を、バルク固体を含む吸着剤材料から除去するためのシステムであって、
熱を熱供給源流体から前記吸着剤材料に伝達することによって、水蒸気を前記吸着剤材料から蒸発させるように構成された第１の熱交換器、
熱を作動流体から前記吸着剤材料に伝達することによって、二酸化炭素を前記吸着剤材料から脱着するように構成された第２の熱交換器、
前記二酸化炭素を前記第２の熱交換器から除去するように構成されたポンプ、
熱を前記吸着剤材料から冷却流体に伝達することによって、前記吸着剤材料を冷却するように構成された第３の熱交換器、
前記吸着剤材料を、前記第１の熱交換器から前記第２の熱交換器及び前記第３の熱交換器に輸送するためのチャネルを備える、システム。
【請求項１０９】
前記システムが、
前記第１の熱交換器への前記吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する入口と、
前記第３の熱交換器からの前記吸着剤材料の除去のための放出を提供する出口と、を備え、
運転中に、前記入口が、前記出口よりも高い高度を有する、請求項１０８に記載のシステム。

【請求項１１０】
前記第１の熱交換器が、蒸発器を備え、
前記第２の熱交換器が、脱着器を備え、
前記第３の熱交換器が、冷却器を備え、前記吸着剤材料が、ペレット化形態を有し、二酸化炭素を流体から吸着するように構成されている、請求項１０８に記載のシステム。
【請求項１１１】
前記ポンプが、真空圧力を、前記第１の熱交換器、前記第２の熱交換器、及び前記第３の熱交換器において確立するように構成されている、請求項１０８に記載のシステム。
【請求項１１２】
前記吸着剤材料が、請求項１～１７のいずれか一項に記載の官能化された材料を含む、請求項１０８に記載のシステム。
【発明の詳細な説明】
【技術分野】
【０００１】
関連出願の相互参照
本出願は、２０２２年７月１日に出願された米国特許仮出願第６３／３５７，９３２号、２０２２年７月１日に出願された米国特許仮出願第６３／３５７，９５０号、２０２２年７月１日に出願された米国特許仮出願第６３／３５７，９３５号、２０２２年７月１日に出願された米国特許仮出願第６３／３５７，９４１号、２０２２年７月１日に出願された米国特許仮出願第６３／３５７，９１９号、２０２２年７月１日に出願された米国特許仮出願第６３／３５７，９１２号、２０２２年７月１日に出願された米国特許仮出願第６３／３５７，７５８号、２０２２年７月１日に出願された米国特許仮出願第６３／３５７，７７０号、２０２２年７月１日に出願された米国特許仮出願第６３／３５７，９５１号、２０２２年７月１日に出願された米国特許仮出願第６３／３５８，００６号、２０２２年７月１日に出願された米国特許仮出願第６３／３５８，００３号、及び２０２３年４月１８日に出願された米国特許仮出願第６３／４６０，２４３号の利益を主張する。
【０００２】
本開示は、任意選択で吸着剤として用いられ得る官能化された材料、及びそのような材料を作製する方法、及びそのような材料を使用するシステムに関する。本明細書におけるプロセス、方法、及びシステムは、流体流れからの二酸化炭素の分離のために使用され得る。
【背景技術】
【０００３】
大気炭素濃度は、産業化された活動と相関して、数十年にわたって上昇している。二酸化炭素は、総炭素濃度への主要な寄与体である。地球気候温暖化についての懸念は、二酸化炭素排出の捕捉への関心をもたらしている。
【発明の概要】
【０００４】
概して、本開示は、官能化された材料、それらの作製及び使用方法、並びにそのような材料を使用するように構成され得るシステムに関する。特定の実施形態において、官能化された材料は、二酸化炭素をガス環境から捕捉及び除去するために使用され得る。
【０００５】
したがって、一態様において、本開示は、複数の多孔質粒子と、複数の多孔質粒子のうちの少なくとも１つの表面の少なくとも一部分上に配設された表面修飾層であって、１つ以上のアミン部分を含む吸着部分を含む、表面修飾層と、を含む、官能化された材料を包含する。いくつかの実施形態において、材料は、大気CO_2を第１の条件下で吸着し、吸着されたCO_2を第２の条件下で可逆的に脱着するように構成されている。
【０００６】
いくつかの実施形態において、複数の多孔質粒子は、複数の多孔質シリカ粒子、複数の多孔質金属有機構造体（ＭＯＦ）粒子、又は複数のイオン交換樹脂粒子を含む。いくつか

の実施形態において、複数の多孔質粒子は、多孔質シリカ又はシリケート、多孔質セラミック、多孔質金属有機基質、多孔質ポリマー基質、多孔質シリカと一緒の多孔質セラミック／金属酸化物、多孔質アルミナ、金属有機構造体（ＭＯＦ）、又は樹脂を含む。いくつかの実施形態において、複数の多孔質粒子は、沈殿形態、ゾルゲル形態、煙霧形態、か焼形態、凝集形態、顆粒化形態、粉末、又は顆粒において提供された基質を含む。

【０００７】

いくつかの実施形態において、複数の多孔質粒子は、約２５μｍ～４ｍｍ（例えば、２５μｍ～３ｍｍ、２５μｍ～２ｍｍ、２５μｍ～１ｍｍ、又は本明細書に記載される他の範囲）の平均寸法（ａｖｅｒａｇｅ　ｄｉｍｅｎｓｉｏｎ）又は平均寸法（ｍｅａｎ　ｄｉｍｅｎｓｉｏｎ）（例えば、直径）を含む。

【０００８】

いくつかの実施形態において、複数の多孔質粒子は、複数の細孔を含む。いくつかの実施形態において、複数の細孔は、約１～２００ｎｍの寸法、約３０～８０ｎｍの平均細孔サイズ、及び／又は約０．１ｍＬ／ｇ若しくは０．５ｍＬ／ｇ超（例えば、０．１～５ｍＬ／ｇ）の体積を含む。

【０００９】

いくつかの実施形態において、複数の多孔質粒子は、少なくとも２５μｍの最大寸法を含む。いくつかの実施形態において、複数の多孔質粒子の複数の細孔は、少なくとも約１ｎｍの寸法及び／又は約０．５ｍＬ／ｇ超の体積を含む。

【００１０】

いくつかの実施形態において、表面修飾層は、表面修飾層を欠く複数の多孔質粒子に対して５％～６０％（重量／重量）のポリアミン（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの、例えば、小分子ポリアミン、大分子ポリアミン、低分子量（ＭＷ）ポリアミン、高ＭＷポリアミン、ポリアミンのオリゴマー形態、又はポリアミンのポリマー形態）を含む。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、大分子ポリアミン、高ＭＷポリアミン、又はポリアミンのポリマー形態である。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、式（ＩＩＩａ）～（ＩＩＩｉ）におけるもの）である。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、複数の多孔質粒子に対して約５％～６０％（重量／重量）のポリアミンの量（例えば、５％～５０％、５％～４０％、５％～３０％、１０％～６０％、１０％～５０％、１０％～４０％、１０％～３０％、２０％～６０％、２０％～５０％、２０％～４０％、２０％～３０％、３０％～６０％、３０％～５０％、４０％～６０％、又は５０％～６０％（重量／重量）の量）で存在する。

【００１１】

いくつかの実施形態において、表面修飾層は、表面修飾層を欠く複数の多孔質粒子に対して５％～８０％（重量／重量）のアミノシランを含む。いくつかの実施形態において、アミノシランは、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、式（Ｉ）、（Ｉａ）～（Ｉｆ）、（ＩＩ）、又は（ＩＩａ）～（ＩＩｄ）におけるもの）である。いくつかの実施形態において、アミノシランは、複数の多孔質粒子に対して約５％～８０％（重量／重量）のアミノシランの量（例えば、５％～７０％、５％～６０％、５％～５０％、５％～４０％、５％～３０％、１０％～８０％、１０％～７０％、１０％～６０％、１０％～５０％、１０％～４０％、１０％～３０％、２０％～８０％、２０％～７０％、２０％～６０％、２０％～５０％、２０％～４０％、２０％～３０％、３０％～８０％、３０％～７０％、３０％～６０％、３０％～５０％、４０％～８０％、４０％～７０％、４０％～６０％、５０％～８０％、５０％～７０％、又は５０％～６０％（重量／重量）の量）で存在する。

【００１２】

いくつかの実施形態において、複数の多孔質粒子は、１乾燥グラム当たり約１００m^2超の総表面積を含む。いくつかの実施形態において、材料は、１乾燥キログラム当たり約０．８ｍｏｌ超のCO_2（ｍｏｌのCO_2／ｋｇ）又は約０．８～２．５ｍｏｌのCO_2

／ｋｇを吸着する。
【００１３】
いくつかの実施形態において、材料は、CO_2を、約０％～１００％又は約５％～９５％の範囲の相対湿度で吸着する。
【００１４】
いくつかの実施形態において、表面修飾層は、（ｉ）アミン部分及びシラン部分、（ｉｉ）複数のアミン部分、又は（ｉｉｉ）（ｉ）及び（ｉｉ）の両方を含む。いくつかの実施形態において、表面修飾層は、１つ以上の化合物を、複数の多孔質粒子のうちの少なくとも１つの表面の少なくとも一部分と相互作用させることによって提供されている。いくつかの実施形態において、１つ以上の化合物は、アミノシラン及び／又はポリアミンからなる群から選択される。いくつかの実施形態において、アミノシランは、式（Ｉ）、（Ｉａ）～（Ｉｆ）、（ＩＩ）、及び（ＩＩａ）～（ＩＩｄ）のうちの１つを有する構造を含む。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、式（ＩＩＩａ）～（ＩＩＩｉ）のうちの１つを有する構造を含む。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、小分子ポリアミン、低ＭＷポリアミン、大分子ポリアミン、高ＭＷポリマー、オリゴマーポリアミン、ポリマーポリアミン、又はそれらの混合物である。
【００１５】
いくつかの実施形態において、第１の条件は、第１の温度範囲を含み、第２の条件は、第１の温度範囲よりも高い第２の温度範囲を含む。いくつかの実施形態において、第１の条件は、第１のガス圧力（例えば、CO_2についての部分圧力であるもの）を含み、第２の条件は、第１のガス圧力よりも低い第２のガス圧力（例えば、CO_2についての部分圧力であるもの）を含む。いくつかの実施形態において、第１の条件は、第１のCO_2濃度を含み、第２の条件は、第１のCO_2濃度よりも低い第２のCO_2濃度を含む。
【００１６】
いくつかの実施形態において、材料は、抗酸化剤部分、添加剤、疎水性シラン化合物、及び／又は疎水性ポリマー（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を更に含む。
【００１７】
別の態様において、本開示は、官能化された材料を形成する方法であって、第１の試薬を、複数の多孔質粒子及び溶媒媒体に導入し、それによって、官能化混合物を提供することであって、第１の試薬が、１つ以上のアミン部分を含む少なくとも１つの吸着部分を含む、導入することと、官能化された材料を、官能化混合物から除去することであって、官能化された材料が、複数の多孔質粒子と、複数の多孔質粒子のうちの少なくとも１つの表面の少なくとも一部分上に配設された表面修飾層と、を含み、表面修飾層が、少なくとも１つの吸着部分を含む、除去することと、官能化された材料を乾燥させることと、を含む、方法を包含する。
【００１８】
いくつかの実施形態において、第１の試薬は、アミノシランを含み、アミノシランは、少なくとも１つのアミノ部分及び少なくとも１つのシラン部分を含む。いくつかの実施形態において、少なくとも１つのシラン部分は、アルコキシシラン部分、トリハロシラン部分、ジハロシラン部分、モノハロシラン部分、シラントリオール部分、ジアルコキシシラノール部分、モノアルコキシシラノール部分、又はアミノシランオリゴマーを含む。いくつかの実施形態において、少なくとも１つのシラン部分は、本明細書に記載されるいずれかのものを含む。いくつかの実施形態において、アミノシランは、式（Ｉ）、（Ｉａ）～（Ｉｆ）、（ＩＩ）、及び（ＩＩａ）～（ＩＩｄ）のうちの１つを有する構造を含む。いくつかの実施形態において、アミノシランを含む第１の試薬は、第２の試薬の存在下で提供され、第２の試薬は、ポリアミンを含む。いくつかの実施形態において、第１の試薬は、複数の多孔質粒子に提供され、次いで、ポリアミンを含む第２の試薬は、官能化混合物に提供される。
【００１９】

いくつかの実施形態において、方法は、ポリアミンを含む第２の試薬が、官能化混合物からの除去後の官能化材料に提供されることを更に含む。

【００２０】

いくつかの実施形態において、第１の試薬は、ポリアミンを含む。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、小分子ポリアミン、低ＭＷポリアミン、大分子ポリアミン、高ＭＷポリマー、オリゴマーポリアミン、ポリマーポリアミン、又はそれらの混合物である。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、式（ＩＩＩａ）～（ＩＩＩｉ）のうちの１つを有する構造を含む。いくつかの実施形態において、ポリアミンを含む第１の試薬は、第２の試薬の存在下で提供され、第２の試薬は、アミノシランを含む。いくつかの実施形態において、第１の試薬は、複数の多孔質粒子に提供され、次いで、アミノシランを含む第２の試薬は、官能化混合物に提供される。

【００２１】

いくつかの実施形態において、第１の試薬は、小分子ポリアミン、又は複数の小分子ポリアミンを含む混合物を含む。

【００２２】

いくつかの実施形態において、官能化混合物は、複数の多孔質粒子に対して５％～８０％（重量／重量）の第１の試薬を含む。いくつかの実施形態において、第１の試薬は、ポリアミンを含み、官能化混合物は、複数の多孔質粒子に対して５％～６０％（重量／重量）のポリアミンを含む。いくつかの実施形態において、第１の試薬は、アミノシランを含み、官能化混合物は、複数の多孔質粒子に対して５％～８０％（重量／重量）のアミノシランを含む。他の範囲が用いられ得る（例えば、本明細書に記載されるいずれかの範囲）。

【００２３】

いくつかの実施形態において、溶媒媒体は、水を含む。いくつかの実施形態において、溶媒媒体は、極性非プロトン性溶媒又は中性非プロトン性溶媒を含む。いくつかの実施形態において、溶媒媒体は、トルエン、ヘキサン、シクロヘキサン、及びテトラヒドロフランから選択される有機溶媒を含む。いくつかの実施形態において、溶媒媒体は、メタノール、シクロヘキサン、ヘキサン、エタノール、水、又はそれらの組み合わせを含む。

【００２４】

いくつかの実施形態において、当該乾燥させることは、官能化された材料に対して約５％（重量／重量）の溶媒媒体の水和閾値に乾燥させることを含む。いくつかの実施形態において、方法は、官能化された材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含む吸着剤材料を提供する。

【００２５】

別の態様において、本開示は、官能化された材料を形成する方法であって、第１の試薬及び第２の試薬を、水に導入し、それによって、官能化混合物を提供することと、複数の多孔質粒子を、官能化混合物中に、ある期間にわたって導入し、それによって、官能化された材料を形成することと、官能化された材料を、官能化混合物から除去することと、官能化された材料を乾燥させることと、を含む、方法を包含する。

【００２６】

いくつかの実施形態において、第１の試薬は、ポリアミンを含み、第２の試薬は、アミノシランを含む。いくつかの実施形態において、アミノシランは、式（Ｉ）、（Ｉａ）～（Ｉｆ）、（ＩＩ）、及び（ＩＩａ）～（ＩＩｄ）のうちの１つを有する構造を含み、ポリアミンは、式（ＩＩＩａ）～（ＩＩＩｉ）のうちの１つを有する構造を含む。

【００２７】

いくつかの実施形態において、官能化された材料は、複数の多孔質粒子と、複数の多孔質粒子のうちの少なくとも１つの表面の少なくとも一部分上に配設された表面修飾層と、を含み、表面修飾層は、少なくとも１つの吸着部分を含む。

【００２８】

いくつかの実施形態において、複数の多孔質粒子は、少なくとも２５キログラムの量を

含む。いくつかの実施形態において、方法は、官能化された材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含む吸着剤材料を提供する。

【００２９】

いくつかの実施形態において、当該乾燥させることは、官能化された材料に対して約５％（重量／重量）の溶媒媒体の水和閾値に乾燥させることを含む。いくつかの実施形態において、当該乾燥させることは、ダブルコーン真空乾燥機、コンベヤベルト乾燥機、又はヌッチェフィルタ乾燥機において実行される。

【００３０】

別の態様において、本開示は、CO_2を空気から除去するための方法であって、CO_2を含む周囲空気を、吸着剤材料を含むホルダに提供し、それによって、リッチ吸着剤材料を提供することと、任意選択で、CO_2をリッチ吸着剤材料から脱着し、それによって、リーン材料を提供することと、を含む、方法を包含する。いくつかの実施形態において、吸着剤材料は、官能化された材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含む。

【００３１】

別の態様において、本開示は、吸着剤材料を受容するように構成された第１の入口と、CO_2を、周囲空気から、吸着剤材料を使用して吸着し、それによって、リッチ吸着剤材料を提供するように構成された吸着器システムと、CO_2をリッチ吸着剤材料から脱着し、それによって、リーン材料を提供し、リーン吸着剤材料を吸着器システムに送達するように構成された脱着器システムと、を含む、直接空気捕捉（ＤＡＣ）システムを包含する。

【００３２】

いくつかの実施形態において、吸着剤材料は、複数の多孔質粒子と、複数の多孔質粒子のうちの少なくとも１つの表面の少なくとも一部分上に配設された表面修飾層と、を含み、表面修飾層は、１つ以上のアミン部分を含む吸着部分を含む。いくつかの実施形態において、吸着剤材料は、大気CO_2を第１の条件下で吸着し、吸着されたCO_2を第２の条件下で可逆的に脱着するように構成されている。いくつかの実施形態において、吸着剤材料は、官能化された材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含む。

【００３３】

別の態様において、本開示は、反応器であって、第１の方向に沿って第１のチャンバ壁から第１のチャンバ壁の反対側の第２のチャンバ壁へ延びる反応チャンバであって、反応チャンバが、基部から頂部壁へ、第１の方向に垂直な第２の方向に延びる中空区画を含み、区画が、第１の方向に垂直な断面において、基部に対して近位の基部部分及び基部に対して遠位の頂部部分を有し、基部部分が、頂部部分よりも狭い、反応チャンバを含む、反応器を包含する。

【００３４】

いくつかの実施形態において、反応器は、第１のチャンバ壁における、反応チャンバ内への入口であって、反応チャンバ内への粉末化吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する、入口と、第２のチャンバ壁における、反応チャンバからの出口であって、反応チャンバからの粉末化吸着剤材料の除去のための放出を提供する、出口と、を更に含む。

【００３５】

いくつかの実施形態において、反応器は、１つ以上の空気チャンバであって、各々が、中空区画と、中空区画の基部におけるチャネルを介して流体連通する、１つ以上の空気チャンバと、１つ以上の送風機であって、各々が、周囲空気を受容し、反応器の運転中に、空気を、空気チャンバのうちの対応する１つ内に送風するように配置されている、１つ以上の送風機と、１つ以上の排気ポートであって、反応器の運転中に、空気を、反応チャンバの区画から除去するように構成されている、１つ以上の排気ポートと、を更に含む。

【００３６】

いくつかの実施形態において、反応器は、１つ以上の空気チャンバ及び中空区画と流体連通する分配プレートを更に含む。いくつかの実施形態において、分配プレートは、Ｗ形

状である。いくつかの実施形態において、分配プレートは、平坦である。いくつかの実施形態において、反応器は、追加の分配プレートを更に含み、追加の分配プレートは、平坦である。

【００３７】

いくつかの実施形態において、１つ以上の排気ポートは、反応チャンバの頂部壁において配置されている。

【００３８】

いくつかの実施形態において、反応器は、入口と流体連通するように配置された送り装置を更に含み、送り装置は、反応器の運転中に、粉末化吸着剤材料を反応チャンバに送達するように構成されている。いくつかの実施形態において、入口は、基部に対して近位に位置する。

【００３９】

いくつかの実施形態において、反応器は、運転中に、反応チャンバから空気チャンバへの圧力低下が、９．０ｐｓｉ以下であるように構成されている。

【００４０】

いくつかの実施形態において、反応器は、運転中に、吸着剤チャンバが、１グラムの吸着剤材料当たり約１０リットル以上の空気を収容するように構成されている。

【００４１】

いくつかの実施形態において、反応器は、１つ以上のルーバーを更に含み、１つ以上のルーバーは、第１の方向に沿って配置されており、反応器の１つ以上の壁上に位置し、ルーバーは、周囲空気を、１つ以上の空気チャンバ内に引き込むように構成されている。

【００４２】

いくつかの実施形態において、中空区画は、断面において、基部に対して近位の第１のテーパー部分を含む。いくつかの実施形態において、中空区画は、断面において、第１のテーパー部分から離隔した第２のテーパー部分を更に含む。

【００４３】

いくつかの実施形態において、粉末化吸着剤材料は、約２５～４，０００μｍの直径を有する粒子を含む。いくつかの実施形態において、粉末化吸着剤材料は、CO_2吸着剤である。いくつかの実施形態において、粉末化吸着剤材料は、官能化された材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含む。

【００４４】

別の態様において、本開示は、CO_2を大気から除去するための方法であって、CO_2を含む周囲空気を、１つ以上の空気チャンバを含む反応器に提供することと、周囲空気を送風して、これにより、周囲空気が、１つ以上の空気チャンバから反応チャンバ内に移行することと、粉末化吸着剤材料を、反応チャンバに入口を介して送達することと、粉末化吸着剤材料及び空気の流動床を、粉末化吸着剤材料が、CO_2を空気から吸着して、CO_2低減空気及び使用済み粉末化吸着剤材料を形成する条件下で作製することと、使用済み粉末化吸着剤材料を、反応チャンバから連続的に除去することと、CO_2低減空気を、反応チャンバから１つ以上の排気ポートを介して連続的に除去することと、を含む、方法を特徴とする。いくつかの実施形態において、粉末化吸着剤材料は、官能化された材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含む。

【００４５】

別の態様において、本開示は、直接空気捕捉（ＤＡＣ）システムであって、CO_2を、周囲空気から、粉末化吸着剤材料を使用して吸着するように構成された流動床吸着反応器と、粉末化吸着剤材料を流動床吸着反応器から受容し、CO_2を粉末化吸着剤材料から脱着するように構成された脱着反応器と、廃熱を生成する産業プロセス設備であって、廃熱が、脱着反応器に提供されて、粉末化吸着剤材料を加熱する、産業プロセス設備と、を含む、ＤＡＣシステムを包含する。いくつかの実施形態において、粉末化吸着剤材料は、官能化された材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含む。

【００４６】

別の態様において、本開示は、構造体であって、複数のパネルによって画定されたチャンバであって、各パネルが、第１の方向に構造体の基部から延びる一対の梁間に吊されており、各パネルの高さが、第１の方向にパネルの底部からパネルの頂部へ延びる、チャンバを含む、構造体を包含する。

【００４７】

いくつかの実施形態において、各パネルは、多孔質内側シート、多孔質外側シート、及びパネルの頂部からパネルの底部へ延びる、内側シートと外側シートとの間の空洞を含む。

【００４８】

いくつかの実施形態において、構造体は、複数のパネルの頂部における空洞への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する入口と、複数のパネルの空洞の底部からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する出口と、流体をチャンバ内に向けるように配置された送風機と、を更に含む。

【００４９】

いくつかの実施形態において、パネルの空洞内の吸着剤材料は、垂直落下移動床吸収体を形成する。

【００５０】

いくつかの実施形態において、内側シートと外側シートとの間の空洞は、複数のチャネルに分割されており、複数のチャネルは、内側シート及び外側シートをパネルの側縁部間の間隔で接続する布地リブによって分離されている。

【００５１】

いくつかの実施形態において、複数のチャネルの各チャネルは、第１の方向に垂直な平面における実質的に正方形の断面を有する。

【００５２】

いくつかの実施形態において、空洞は、内側シートと外側シートとの間の厚さを有し、厚さは、２０センチメートル以下である。

【００５３】

いくつかの実施形態において、チャンバは、第１の方向に延びる円筒軸を有する、実質的に円筒の形状を有する。いくつかの実施形態において、チャンバは、４つの壁を有する、実質的に長方角柱の形状を有する。

【００５４】

いくつかの実施形態において、４つの壁のうちの少なくとも１つの壁は、複数のパネルのうちのパネルを含む。

【００５５】

いくつかの実施形態において、構造体は、空洞から出口への吸着剤材料の流れを制御するように構成された計量デバイスを更に含む。

【００５６】

いくつかの実施形態において、内側シート及び外側シートは、布地材料を含む。

【００５７】

いくつかの実施形態において、吸着剤材料は、ペレット化形態を有し、二酸化炭素を流体から吸着するように構成されている。いくつかの実施形態において、吸着剤材料は、官能化された材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含む。

【００５８】

いくつかの実施形態において、送風機は、第１の方向にチャンバの下３分の１の部分において位置決めされており、下３分の１の部分は、構造体の基部に最も近い部分であるか、又は送風機は、第１の方向にチャンバの中央の３分の１の部分において位置決めされている。いくつかの実施形態において、送風機は、流体を第１の方向に向けるように構成されている。いくつかの実施形態において、流体は、ガス又は空気を含む。

【００５９】

別の態様において、本開示は、方法であって、吸着剤材料を構造体の入口において送る

ことであって、構造体が、複数のパネルによって画定されたチャンバを含む、送ることを含む、方法を包含する。いくつかの実施形態において、各パネルは、一対の梁間に吊されている。いくつかの実施形態において、各パネルは、多孔質内側シート、多孔質外側シート、及びパネルの頂部からパネルの底部へ延びる、内側シートと外側シートとの間の空洞を含み、入口は、複数のパネルの頂部における空洞への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する。

【００６０】

いくつかの実施形態において、方法は、吸着剤材料を構造体の出口から抽出することであって、出口が、複数のパネルの空洞の底部からの吸着剤材料の除去のための放出を提供し、吸着剤材料を出口から抽出することが、空洞内の吸着剤材料が重力に起因して落下することを引き起こす、抽出することと、複数のパネルを通る流体を、内側シートから外側シートに向かう方向に向けることと、を更に含む。

【００６１】

いくつかの実施形態において、方法は、吸着剤材料を出口から抽出する速度を制御して、空洞を重力に起因して通る吸着剤材料の体積流量を制御することを含む。

【００６２】

いくつかの実施形態において、方法は、吸着剤材料を構造体の入口において送る速度を、吸着剤材料を出口から抽出する速度に基づいて制御することを含む。

【００６３】

いくつかの実施形態において、方法は、吸着剤材料を出口から抽出する速度を制御して、流体への吸着剤材料の曝露時間を制御することを含む。

【００６４】

いくつかの実施形態において、方法は、流体への吸着剤材料の曝露時間を、３０分以上及び９０分以下であるように制御することを含む。

【００６５】

別の態様において、本開示は、構造体であって、第１の方向に構造体の基部から構造体の頂部に向かって延びる第１の梁と、第１の梁から離隔しており、第１の梁に平行に延びる第２の梁と、第１の縁部において第１の梁に結合しており、第２の縁部において第２の梁に結合しているパネルであって、パネルの幅が、第１の縁部から第２の縁部へ、第１の方向に直交する方向に延び、パネルの高さが、第１の方向にパネルの底部からパネルの頂部へ延びる、パネルと、を含む、構造体を包含する。

【００６６】

いくつかの実施形態において、パネルは、多孔質内側シート、多孔質外側シート、及びパネルの頂部からパネルの底部へ延びる、内側シートと外側シートとの間の空洞を含む。

【００６７】

いくつかの実施形態において、構造体は、パネルの頂部における空洞への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する入口と、空洞の底部からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する出口と、パネルを通る流体を、内側シートから外側シートに向かう方向に向けるように配置された送風機と、を更に含む。

【００６８】

別の態様において、本開示は、二酸化炭素を、バルク固体を含む吸着剤材料から除去するためのシステムであって、熱を作動流体及び熱供給源流体から吸着剤材料に伝達することによって、水蒸気を吸着剤材料から蒸発させるように構成された第１の熱交換器と、熱を水蒸気から作動流体に伝達することによって、水蒸気を凝縮させるように構成された凝縮器と、熱を作動流体から吸着剤材料に伝達することによって、二酸化炭素を吸着剤材料から脱着するように構成された第２の熱交換器と、二酸化炭素を第２の熱交換器から除去するように構成されたポンプと、作動流体を、第１の熱交換器、凝縮器、及び第２の熱交換器間で循環させるための閉ループ流路と、熱供給源流体を第１の熱交換器に提供するための開ループ流路と、吸着剤材料を、第１の熱交換器から第２の熱交換器に輸送するためのチャネルと、を含む、システムを包含する。

【００６９】
いくつかの実施形態において、第１の熱交換器は、第１の熱交換器への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する第１の入口、及び第１の熱交換器からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する第１の出口を含む。いくつかの実施形態において、運転中に、第１の入口は、第１の出口よりも高い高度を有する。
【００７０】
いくつかの実施形態において、第２の熱交換器は、第２の熱交換器への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する第２の入口、及び第２の熱交換器からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する第２の出口を含む。いくつかの実施形態において、運転中に、第２の入口は、第２の出口よりも高い高度を有する。
【００７１】
いくつかの実施形態において、第２の熱交換器の第２の入口は、（例えば、運転中に）第１の熱交換器の第１の出口よりも高い高度を有する。いくつかの実施形態において、第２の熱交換器の第２の入口は、（例えば、運転中に）第１の熱交換器の第１の出口よりも低い高度を有する。
【００７２】
いくつかの実施形態において、第１の熱交換器及び第２の熱交換器は、プレート熱交換器、シェルアンドチューブ熱交換器、又はシェルアンドプレート熱交換器を含む。いくつかの実施形態において、第１の熱交換器は、蒸発器を含み、第２の熱交換器は、脱着器を含む。
【００７３】
いくつかの実施形態において、閉ループ流路及び開ループ流路は、互いに流体的に隔離されている。
【００７４】
いくつかの実施形態において、構造体は、第１の熱交換器内への吸着剤材料の流れを制御するように構成された計量デバイスを更に含む。
【００７５】
いくつかの実施形態において、吸着剤材料は、ペレット化形態を有し、二酸化炭素を流体から吸着するように構成されている。いくつかの実施形態において、吸着剤材料は、官能化された材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含む。
【００７６】
別の態様において、本開示は、二酸化炭素を、バルク固体を含む吸着剤材料から除去するための方法であって、作動流体を、第１の熱交換器、凝縮器、及び第２の熱交換器間の閉ループにおいて循環させることと、熱供給源流体を、第１の熱交換器に提供することと、熱を作動流体及び熱供給源流体から第１の熱交換器内の吸着剤材料に伝達することによって、水蒸気を吸着剤材料から蒸発させることと、熱を水蒸気から凝縮器内の作動流体に伝達することによって、水蒸気を凝縮させることと、吸着剤材料を、第１の熱交換器から第２の熱交換器にチャネルを介して輸送することと、熱を作動流体から第２の熱交換器内の吸着剤材料に伝達することによって、二酸化炭素を吸着剤材料から脱着することと、二酸化炭素を、第２の熱交換器からポンプによって除去することと、を含む、方法を包含する。いくつかの実施形態において、吸着剤材料は、官能化された材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含む。
【００７７】
いくつかの実施形態において、方法は、吸着剤材料を第１の熱交換器の入口において送ることと、吸着剤材料を第１の熱交換器の出口から抽出することと、を更に含む。いくつかの実施形態において、吸着剤材料は、第１の熱交換器の入口から第１の熱交換器の出口に、重力に起因して移動する。
【００７８】
いくつかの実施形態において、方法は、吸着剤材料を第２の熱交換器の入口において送ることと、吸着剤材料を第２の熱交換器の出口から抽出することと、を更に含む。いくつ

かの実施形態において、吸着剤材料は、第２の熱交換器の入口から第２の熱交換器の出口に、重力に起因して移動する。

【００７９】

いくつかの実施形態において、方法は、熱を、第１の熱交換器内の吸着剤材料から蒸発した水蒸気から第２の熱交換器内の吸着剤材料に、作動流体を介して伝達することと、第２の熱交換器内の吸着剤材料を、第１の熱交換器において予備冷却された熱供給源流体を使用して冷却することと、を更に含む。

【００８０】

いくつかの実施形態において、方法は、第２のポンプを使用して、真空圧力を第１の熱交換器において確立し、水蒸気を、第１の熱交換器から凝縮器に輸送することを更に含む。

【００８１】

いくつかの実施形態において、方法は、凝縮した水蒸気を、凝縮器から水出口を介して除去することを更に含む。

【００８２】

いくつかの実施形態において、方法は、真空圧力を、第２の熱交換器において、ポンプを使用して確立することと、真空圧力を、第１の熱交換器及び第２の熱交換器において、エアロックを使用して維持することと、を更に含む。

【００８３】

別の態様において、本開示は、二酸化炭素を、バルク固体を含む吸着剤材料から除去するためのシステムであって、熱を熱供給源流体から吸着剤材料に伝達することによって、水蒸気を吸着剤材料から蒸発させるように構成された第１の熱交換器と、熱を作動流体から吸着剤材料に伝達することによって、二酸化炭素を吸着剤材料から脱着するように構成された第２の熱交換器と、二酸化炭素を第２の熱交換器から除去するように構成されたポンプと、熱を吸着剤材料から冷却流体に伝達することによって、吸着剤材料を冷却するように構成された第３の熱交換器と、吸着剤材料を、第１の熱交換器から第２の熱交換器及び第３の熱交換器に輸送するためのチャネルと、を含む、システムを包含する。

【００８４】

いくつかの実施形態において、システムは、第１の熱交換器への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する入口と、第３の熱交換器からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する出口と、を更に含む。いくつかの実施形態において、運転中に、入口は、出口よりも高い高度を有する。

【００８５】

いくつかの実施形態において、第１の熱交換器は、蒸発器を含み、第２の熱交換器は、脱着器を含み、第３の熱交換器は、冷却器を含む。いくつかの実施形態において、吸着剤材料は、ペレット化形態を有し、二酸化炭素を流体から吸着するように構成されている。

【００８６】

いくつかの実施形態において、ポンプは、真空圧力を、第１の熱交換器、第２の熱交換器、及び第３の熱交換器において確立するように構成されている。いくつかの実施形態において、吸着剤材料は、官能化された材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含む。

【００８７】

１つ以上の実施形態の詳細が、添付の図面及び以下の説明に記載される。他の特徴及び利点は、説明及び図面、並びに特許請求の範囲から明らかである。

【００８８】

本明細書で使用される場合、「頂部」、「底部」、「上部」、「下部」、「上」、及び「下」という用語は、構造間の相対的な関係を提供するために使用される。これらの用語の使用は、特定の構造が、装置における特定の場所において位置しなければならないことを示さないか、又はそれを必要としない。

【図面の簡単な説明】

【００８９】
【図１Ａ】官能化された材料の非限定的な概略図である。（Ａ）官能基１０６Ａを有する官能化された材料が提供される。
【図１Ｂ】官能化された材料の非限定的な概略図である。（Ｂ）官能基１０６Ｂを有する官能化された材料が提供される。
【図１Ｃ】官能化された材料の非限定的な概略図である。（Ｃ）官能基１０６Ｃを有する官能化された材料が提供される。
【図２Ａ】非限定的な例示的な化合物、アミン部分、及びシラン部分の化学図である。（Ａ）アミノシラン化合物２０６の図が提供される。
【図２Ｂ】非限定的な例示的な化合物、アミン部分、及びシラン部分の化学図である。（Ｂ）非限定的なアミン部分の図が提供される。
【図２Ｃ】非限定的な例示的な化合物、アミン部分、及びシラン部分の化学図である。（Ｃ）非限定的なアミン部分の図が提供される。
【図２Ｄ】非限定的な例示的な化合物、アミン部分、及びシラン部分の化学図である。（Ｄ）非限定的なアミノシラン化合物の図が提供される。
【図２Ｅ】非限定的な例示的な化合物、アミン部分、及びシラン部分の化学図である。（Ｅ）非限定的なアミノシラン化合物の図が提供される。
【図２Ｆ】非限定的な例示的な化合物、アミン部分、及びシラン部分の化学図である。（Ｆ）非限定的なアミノシラン化合物の図が提供される。
【図２Ｇ】非限定的な例示的な化合物、アミン部分、及びシラン部分の化学図である。（Ｇ）非限定的なアミノシラン化合物の図が提供される。
【図２Ｈ】非限定的な例示的な化合物、アミン部分、及びシラン部分の化学図である。（Ｈ）非限定的なポリアミン化合物の図が提供される。
【図２Ｉ】非限定的な例示的な化合物、アミン部分、及びシラン部分の化学図である。（Ｉ）非限定的なポリアミン化合物の図が提供される。
【図２Ｊ】非限定的な例示的な化合物、アミン部分、及びシラン部分の化学図である。（Ｊ）非限定的なポリアミン化合物の図が提供される。
【図２Ｋ】非限定的な例示的な化合物、アミン部分、及びシラン部分の化学図である。（Ｋ）非限定的なポリアミン化合物の図が提供される。
【図３】シリカ基質を含む非限定的な官能化された材料によって吸着されたCO_2についての破過吸着曲線を示す線グラフである。
【図４】シリカ基質を含む非限定的な官能化された材料による、複数のサイクルにわたるCO_2取り込みを示す線グラフである。試験サイクル数（ｘ軸）及び各サイクルにおける取り込み（ｙ軸）が提供される。
【図５Ａ】官能化された材料を生成するステップを示す非限定的なフローチャート図であり、官能化された材料は、次いで、任意選択で、吸着剤として使用され得る。（Ａ）官能化された材料を、シランカップリング材料を使用することによって生成する方法が提供される。
【図５Ｂ】官能化された材料を生成するステップを示す非限定的なフローチャート図であり、官能化された材料は、次いで、任意選択で、吸着剤として使用され得る。（Ｂ）事前官能化された材料を、シランカップリング材料を使用することによって生成し、官能化された材料を、アミン化合物を使用することによって生成する方法が提供される。
【図５Ｃ】官能化された材料を生成するステップを示す非限定的なフローチャート図であり、官能化された材料は、次いで、任意選択で、吸着剤として使用され得る。（Ｃ）官能化された金属有機構造体（ＭＯＦ）材料を生成する方法が提供される。
【図５Ｄ】官能化された材料を生成するステップを示す非限定的なフローチャート図であり、官能化された材料は、次いで、任意選択で、吸着剤として使用され得る。（Ｄ）官能化された樹脂材料を生成する方法が提供される。
【図５Ｅ】官能化された材料を生成するステップを示す非限定的なフローチャート図であり、官能化された材料は、次いで、任意選択で、吸着剤として使用され得る。（Ｅ）官能

化された材料を、ポリアミン材料を使用することによって生成する方法が提供される。
【図５Ｆ】官能化された材料を生成するステップを示す非限定的なフローチャート図であり、官能化された材料は、次いで、任意選択で、吸着剤として使用され得る。（Ｆ）官能化された材料を、アミノシラン材料を使用することによって生成する方法が提供される。
【図５Ｇ】官能化された材料を生成するステップを示す非限定的なフローチャート図であり、官能化された材料は、次いで、任意選択で、吸着剤として使用され得る。（Ｇ）別の官能化された材料を、ポリアミン材料を使用することによって生成する方法が提供される。
【図５Ｈ】官能化された材料を生成するステップを示す非限定的なフローチャート図であり、官能化された材料は、次いで、任意選択で、吸着剤として使用され得る。（Ｈ）尚別の官能化された材料を、ポリアミン材料を使用することによって生成する方法を示す図が提供される。
【図５Ｉ】官能化された材料を生成するステップを示す非限定的なフローチャート図であり、官能化された材料は、次いで、任意選択で、吸着剤として使用され得る。（Ｉ）官能化された材料を生成するための浸漬コーティング方法が提供される。
【図６Ａ】（Ａ）ダブルコーン混合及び乾燥システムを使用する例示的な浸漬コーティング方法の概略図である。
【図６Ｂ】（Ｂ）ダブルコーン混合及び乾燥システムを使用する例示的な乾燥方法の概略図である。
【図７】ヌッチェフィルタ混合／濾過／乾燥システムを使用する例示的な浸漬コーティング方法の概略図である。
【図８】バッグ浸漬コーティングシステムを使用する例示的な浸漬コーティング方法の概略図である。
【図９】パドル乾燥機を使用する例示的な浸漬コーティング及び乾燥方法の概略図である。
【図１０】リボン乾燥機を使用する例示的な浸漬コーティング及び乾燥方法の概略図である。
【図１１Ａ】（Ａ）コンベヤ乾燥機を使用する例示的な乾燥方法の概略図である。
【図１１Ｂ】（Ｂ）連続モードでの例示的な乾燥方法の運転の概略図である。
【図１２Ａ】（Ａ）試料CO_2吸着を試験するための非限定的な試料ホルダの分解図及び組み立て図である。
【図１２Ｂ】（Ｂ）CO_2の試料吸収を試験するための非限定的な実験的装備の概略図である。
【図１３Ａ】二酸化炭素抽出システムの非限定的な例示的な実装態様の概略図である。
【図１３Ｂ】二酸化炭素抽出システムの非限定的な例示的な実装態様の概略図である。
【図１４】統合電力及び二酸化炭素抽出システムの非限定的な例示的な実装態様の概略図である。
【図１５Ａ】二酸化炭素の直接空気捕捉（ＤＡＣ）のための非限定的な流動床吸着反応器の概略図である。（Ａ）斜視切り欠き図が提供される。
【図１５Ｂ】二酸化炭素の直接空気捕捉（ＤＡＣ）のための非限定的な流動床吸着反応器の概略図である。（Ｂ）図１５Ａに示される反応器の別の斜視切り欠き図が提供される。
【図１５Ｃ】二酸化炭素の直接空気捕捉（ＤＡＣ）のための非限定的な流動床吸着反応器の概略図である。（Ｃ）図１５Ｂに示される反応器の斜視切り欠き図の一部分の拡大図が提供される。
【図１５Ｄ】二酸化炭素の直接空気捕捉（ＤＡＣ）のための非限定的な流動床吸着反応器の概略図である。（Ｄ）図１５Ａに示される反応器の断面図が提供される。
【図１５Ｅ】二酸化炭素の直接空気捕捉（ＤＡＣ）のための非限定的な流動床吸着反応器の概略図である。（Ｅ）図１５Ｄに示される反応器の断面図の一部分の拡大図が提供される。
【図１６】図１５Ａに示される非限定的な流動床吸着反応器を含むシステムの斜視概略図

である。
【図１７】例示的なサイロ吸着器の断面図である
【図１８】例示的なサイロ吸着器の側面図である。
【図１９Ａ】サイロ吸着器の例示的なパネルの上面図を示す。
【図１９Ｂ】サイロ吸着器の例示的なパネルの上面図を示す。
【図２０】例示的なサイロ吸着器の上面断面図である。
【図２１Ａ】例示的な吸着器構造体の斜視図である。
【図２１Ｂ】例示的な吸着器構造体の斜視図である。
【図２２Ａ】（Ａ）例示的な吸着器構造体の上面断面図を示す。
【図２２Ｂ】（Ｂ）例示的な吸着器構造体の規模を示す斜視図である。
【図２３Ａ】（Ａ）２つのフィルタパネルと、２つの端部壁と、を有する、例示的な吸着器構造体の上面断面図を示す。
【図２３Ｂ】（Ｂ）鋸歯構成において配置されたフィルタパネルを有する例示的な吸着器構造体の上面断面図を示す。
【図２３Ｃ】（Ｃ）鋸歯構成において配置されたフィルタパネルを有する例示的な吸着器構造体の上面断面図を示す。
【図２４】サイロ吸着器のための例示的な制御システムのブロック図である。
【図２５】蒸発器と、脱着器と、を含む、例示的な脱着システムを示す。
【図２６】蒸発器と脱着器とが積み重ねられた例示的な脱着システムを示す。
【図２７Ａ】（Ａ）熱供給源流体再循環を含む、蒸発器と脱着器とが積み重ねられた例示的な脱着システムを示す。
【図２７Ｂ】（Ｂ）蒸発器と脱着器及び冷却器とが積み重ねられた例示的な脱着システムを示す。
【図２８】例示的な熱交換器を示す。
【図２９】脱着システムのための例示的な制御システムのブロック図である。
【図３０Ａ】異なる細孔サイズ分布を有する吸着剤を示す。
【図３０Ｂ】異なる細孔サイズ分布を有する吸着剤を示す。
【図３０Ｃ】異なる細孔サイズ分布を有する吸着剤を示す。
【図３０Ｄ】異なる細孔サイズ分布を有する吸着剤を示す。
【図３１】生シリカ（３１０１）、浸漬コーティングされた吸着剤（３１０２）、及びスプレーコーティングされた吸着剤（３１０３）についての細孔サイズ分布を示す。
【００９０】
図において、同様の参照符号は、同様の要素を示す。
【発明を実施するための形態】
【００９１】
概して、本開示は、官能化された材料（例えば、官能化された多孔質材料）、及びその作製方法に関し、官能化された材料は、吸着部分（例えば、化合物、例えば、アミン、アミノシラン、ポリアミン、モノアミン、又はそれらの組み合わせによって提供されるアミン部分）で官能化されている。いくつかの実施形態において、官能化は、相互作用部分（例えば、化合物、例えば、シラン、アミノシランなどによって提供されるシラン部分）を更に含む。そのような部分（例えば、アミン部分及び／又はシラン部分）は、いずれかの化合物、及び２つ以上の化合物のいずれかの有用な組み合わせ（例えば、アミン、アミノシラン、ポリアミン、モノアミンのうちの１つ以上、又はこれらのうちのいずれかの任意の組み合わせ）を提供され得る。
【００９２】
特定の実施形態において、官能化された材料は、二酸化炭素をガスから低い濃度（例えば、４００ｐｐｍ未満）又は大気条件（例えば、３５０～５５０ｐｐｍ）で可逆的に捕捉するために使用され得る。いくつかの実施形態において、多孔質基質が用いられ、基質は、大きい細孔サイズ及び／又は高い表面積を特徴とし、アミン部分が、吸着部分として、増加した炭素捕捉（例えば、１ｋｇの乾燥吸着剤当たり０．８ｍｏｌ超のCO_2（ｍｏｌ

のＣＯ$_2$／ｋｇ）、１．２ｍｏｌのＣＯ$_2$／ｋｇ超又は２ｍｏｌのＣＯ$_2$／ｋｇ超）を提供するために用いられる。１つ以上の化合物が、吸着部分及び／又は相互作用部分を提供するために使用され得る。そのような化合物は、アミン、アミノシラン、ポリアミン、モノアミン、及び本明細書に記載される他のものを含むことができる。

【００９３】

いくつかの実施形態において、吸着部分は、アミン部分を含み、相互作用部分は、シラン部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含む。例えば、非限定的に、アミン部分及びシラン部分の両方を有するアミノシラン化合物が、ある特定の基質とともに用いられ得、これにより、シラン部分は、基質の表面と相互作用し、それによって、アミン部分は、表面において、ＣＯ$_2$を吸着するためにアクセス可能である。

【００９４】

他の実施形態において、吸着部分及び相互作用部分の両方が、アミン部分を含む。例えば、非限定的に、少なくとも２つのアミン部分を有するポリアミン化合物が、ある特定の基質とともに用いられ得、これにより、第１の部分は、基質の表面と相互作用し、それによって、第２のアミン部分は、表面において、ＣＯ$_2$を吸着するためにアクセス可能である。

【００９５】

尚他の実施形態において、吸着部分は、少なくとも２つのアミン部分を含み、第１のアミン部分は、第１の化合物（例えば、アミノシラン）によって提供され、第２のアミン部分は、第２の化合物（例えば、ポリアミン）によって提供される。理解されるように、吸着部分及び／又は相互作用部分のいずれかの有用な組み合わせが用いられ得る。

【００９６】

したがって、官能化された材料、並びにそのような材料を（例えば、吸着剤として）形成及び使用する方法が、本明細書に記載される。いくつかの実施形態において、方法は、多孔質構造を含む官能化された材料を形成又は使用することを含み、多孔質構造は、ガスが材料を介して拡散することを可能にし、ガスが捕捉又は「吸着される」ための大きい表面積を提供する。また、そのような材料を様々な捕捉プロセスにおいて用いるためのシステムが、本明細書に記載される。いくつかの実施形態において、システムは、試料ホルダ、反応器、吸着器、脱着器などを含み、これらは、官能化された材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を、二酸化炭素を吸着するために用い、かつ／又は吸着された二酸化炭素を有する官能化された材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を再生する。

【００９７】

Ｉ．官能化された材料

本開示は、１つ以上の官能基を有する官能化された材料に関する。例えば、非限定的に、初期材料又は基質は、二酸化炭素（ＣＯ$_2$）を捕捉するように構成された１つ以上の官能基（例えば、１つ以上のアミン基）を含むように官能化され得る。いくつかの非限定的な実施形態において、材料は、いずれかの有用な構造（例えば、粒子として）、いずれかの有用な部分構造（例えば、１つ以上の細孔）、及びいずれかの有用な組成物（例えば、シリカ又は本明細書に記載される他のもの）を有することができる。いくつかの非限定的な実施形態において、非晶質シリカが、炭素捕捉を達成するための官能化のための多孔質基質として使用される。アミン官能化を有するシリカ基質、例えば、表面上で共有結合した１つ以上のアミン含有部分は、ガス混合物（例えば、大気）からの二酸化炭素の可逆的捕捉を達成し得る。また、炭素捕捉のための官能化された材料を提供することができる他の基質及び部分が、本明細書に記載される。

【００９８】

例えば、図１Ａは、非限定的な官能化された材料１００Ａを提供し、官能化された材料１００Ａは、複数の細孔１０４Ａ－ａ、１０４Ａ－ｂを有する基質１０２Ａを含む。次いで、基質１０２Ａの表面１０３Ａは、官能部分１０６Ａを含むことができ、次いで、官能部分１０６Ａは、吸着部分１１０Ａ（例えば、ＣＯ$_2$吸着部分）及び相互作用部分１０８

Ａ（例えば、シラン含有相互作用部分）を含むことができる。官能部分１０６Ａは、他の部分、基、又は分子を、吸着剤としての使用のための吸着材料を提供するために更に含み得る。そのような部分、基、又は分子は、アミン基（例えば、本明細書に記載される－$NR^{N1}R^{N2}$であり、次いで、これは、アミン、アミノシラン、ポリアミンなどにおいて存在することができる）、ポリマー（例えば、疎水性ポリマー又はポリアミン）、抗酸化剤などを含むことができる。更に、そのような部分、基、又は分子は、それらの間の、又はそれ自体と基質の表面との間の相互作用（例えば、共有結合及び／又は非共有結合相互作用）を形成し得る。

【００９９】

官能部分は、いずれかの数の部分を、CO_2の捕捉を容易にするために有することができる。更に、そのような部分は、いずれかの数の化合物によって提供され得る。例えば、図１Ｂは、非限定的な官能化された材料１００Ｂを提供し、官能化された材料１００Ｂは、複数の細孔１０４Ｂ－ａ、１０４Ｂ－ｂを有する基質１０２Ｂを含む。次いで、基質１０２Ｂの表面１０３Ｂは、官能部分１０６Ｂを含むことができ、次いで、官能部分１０６Ｂは、第１の吸着部分１１０Ｂ（例えば、第１のCO_2吸着部分）、第２の吸着部分１１２Ｂ（例えば、第２のCO_2吸着部分）、及び相互作用部分１０８Ｂ（例えば、シラン含有相互作用部分）を含むことができる。

【０１００】

そのような部分は、いずれかの有用な様式で提供され得る。いくつかの実施形態において、基質の表面は、第１のCO_2吸着化合物（例えば、アミノシランを含む）及び第２のCO_2吸着化合物（例えば、ポリアミン）の使用によって官能化されている。次いで、第１のCO_2吸着化合物は、第１の吸着部分（例えば、図１Ｂにおける部分１１０Ｂ）を提供することができ、第２のCO_2吸着化合物は、第２の吸着部分（例えば、図１Ｂにおける部分１１２Ｂ）を提供することができる。

【０１０１】

第１のCO_2吸着化合物が、アミノシランであるときに、アミノシランは、シラン部分を、非限定的な相互作用部分（例えば、図１Ｂにおける相互作用部分１０８Ｂ）として含むことができ、アミン部分を、非限定的な第１の吸着部分（例えば、図１Ｂにおける第１の吸着部分１１０Ｂ）として含むことができる。いくつかの実施形態において、アミノシランは、基質の外部表面（例えば、図１Ｂにおける表面１０２Ｂ）に共有結合しており、細孔内（例えば、図１Ｂにおける細孔１０４Ｂ－ａ、１０４Ｂ－ｂ）に共有結合している。吸着化合物の他の例としては、本明細書に記載されるいずれかの化合物（例えば、いずれかのアミノシラン、又は１つ以上のアミン部分を含む他の化合物）が挙げられ得る。いくつかの実施形態において、アミノシラン及びポリアミンは一緒に、ネットワークを形成し、安定したCO_2吸着機能を提供する。

【０１０２】

第２の吸着部分は、いずれかの有用な第２の吸着化合物によって提供され得る。吸着化合物の例としては、本明細書に記載されるいずれかの化合物（例えば、１つ以上のアミン部分を含むいずれかの化合物）が挙げられ得る。第２及び第１の吸着化合物のいずれかの有用な組み合わせが用いられ得、そのような化合物は、いずれかの有用な様式で相互作用して、基質の表面の上に配設された官能化されたネットワーク又はコーティングを提供することができる。次いで、そのようなネットワーク又はコーティングは、吸着部分及び相互作用部分のいずれかの有用な組み合わせによって特徴付けられ得る。

【０１０３】

第２の吸着部分は、第２の相互作用部分を有して提供されてもよく、又はそれを有することなく提供されてもよい。第２の相互作用部分は、基質の表面への直接的又は間接的付着を提供することができる。例えば、非限定的に、ポリアミンは、複数のアミン部分、及び少なくとも２つのアミン部分間に配設された少なくとも１つのリンカーを含むことができる（例えば、－$(R^A-L)_n$－であり、式中、R^Aは、アミン部分であり、Ｌは、リンカーであり、ｎは、整数である）。アミン部分R^Aは、吸着部分として作用することが

できる。官能化された材料において存在する他の構成要素に依存して、アミン部分R^A又はリンカーＬのいずれかは、相互作用部分として作用することができる。例えば、ポリアミンのアミン部分R^Aは、他のアミン部分又はシラン部分と、水素結合又はイオン相互作用によって相互作用し得る。

【０１０４】

いくつかの実施形態において、第２の吸着化合物は、ポリアミンであり、ポリアミンは、アミン部分を、非限定的な第２の吸着部分（例えば、図１Ｂにおける第２の吸着部分１１２Ｂ）として含むことができる。第２の吸着部分は、ある特定の官能基（例えば、本明細書に記載される－$NR^{N1}R^{N2}$又は－NR^{N1}－のアミン基）、又はある特定の官能基を有するある特定の化合物（例えば、本明細書に記載される－$NR^{N1}R^{N2}$又は－NR^{N1}－の１つ以上のアミン基を含む化合物）によって表され得る。吸着化合物の他の例としては、本明細書に記載されるいずれかの化合物（例えば、いずれかのポリアミン、又は１、２つ、若しくはそれ以上のアミン部分を含む他の化合物）を挙げられ得る。

【０１０５】

第２の吸着部分は、官能化材料における他の官能基、部分、又は化合物と、様々な様式で相互作用することができる。例えば、非限定的に、第２の吸着部分は、第１の吸着部分、相互作用部分、基質の表面、又は別の第２の吸着部分と相互作用し得る。そのような相互作用は、共有結合及び／又は非共有結合相互作用（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含むことができる。いくつかの実施形態において、第２の吸着部分は、第１の吸着部分と相互作用することができる。いくつかの実施形態において、第２の吸着部分は、相互作用部分と相互作用することができる。

【０１０６】

いくつかの実施形態において、第２の吸着部分は、ポリアミン又はポリアミンからのアミン部分を含む。第１の吸着部分が、アミノシランによって提供されるときに、ポリアミンは、アミノシランのアミン部分又はアミノシランの相互作用部分と相互作用することができる。いくつかの実施形態において、アミノシラン及びポリアミンのアミン部分は、アミノシランのシラノール基と、水素結合及びイオン相互作用を介して相互作用して、官能基を形成することができ、それによって、複合ネットワークを、基質の表面の上に形成する。図１Ｂを参照として使用して、官能基１０６Ｂは、アミノシランのアミン部分１１０Ｂ及びポリアミンのアミン部分１１２Ｂを含むことができ、アミン部分１１０Ｂ及びアミン部分１１２Ｂは、アミノシランのシラノール基１０８Ｂと相互作用する。

【０１０７】

図１Ｃは、非限定的な官能化された材料１００Ｃを提供し、官能化された材料１００Ｃは、複数の細孔１０４Ｃ－ａ、１０４Ｃ－ｂを有する基質１０２Ｃを含む。次いで、基質１０２Ｃの表面１０３Ｃは、官能部分１０６Ｃを含むことができ、次いで、官能部分１０６Ｃは、少なくとも１つの吸着部分（例えば、第１のCO_2吸着部分）を含むことができる。いくつかの実施形態において、複数の吸着部分が提供される。例えば、複数の吸着部分を有するポリアミン（例えば、ポリエチレンイミン（ＰＥＩ））は、基質と反応することができる。ポリアミンは、基質の表面との１又は２Ｄファンデルワールス相互作用を容易にする高い相互作用表面積によって特徴付けられ得る。基質に導入されたポリアミンは、大気ガスからのCO_2に可逆的に結合するための表面修飾層を形成することができる。いくつかの実施形態において、ポリアミン（例えば、短鎖アミン官能化と比較してより大きい分子量、例えば、約８００Ｄａ超又は約８００Ｄａ～１ＭＤａ（又は１，０００，０００Ｄａ））を有するＰＥＩ）は、全体的により少なく揮発性であることができる。

【０１０８】

別の事例において、複数の吸着部分は、１つ以上のオリゴマーアミン、又は小分子ポリアミン、又はこれらのうちのいずれかの混合物によって提供され得る。いくつかの実施形態において、オリゴマーアミンは、オリゴマーエチレンアミン又はそのようなオリゴマーを含む混合物（例えば、エチレンアミン／オリゴマー混合物）を含むことができる。例えば、オリゴマーは、エチレンアミン含有分子（例えば、－$CH_2CH_2NR^{N1}$－基を含

む分子）、又はオリゴマー、例えば、$H_2N[CH_2CH_2NH]_nH$（例えば、式中、ｎは、１、２、３、４、５、６、７、８、９、１０、又はそれ以上であり、R^{N1}は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる）を含むことができる。テトラエチレンペンタミン（ＴＥＰＡ）及びトリエチレンテトラミン（ＴＥＴＡ）は、低い揮発性を有するオリゴマーアミンの非限定的な例である。いくつかの実施形態において、オリゴマーアミンは、小分子ポリアミン（例えば、１００～８００ｇ／ｍｏｌの分子量（ＭＷ）を有する）を含むことができる。オリゴマーの他の例が、本明細書に記載される。

【０１０９】

いくつかの実施形態において、小分子アミン混合物（例えば、Ａｍｉｘ　１０００）は、市販のアミン混合物としてのアミン含有分子、例えば、２－［（２－アミノエチル）アミノ］エタノール、（アミノエチル）ピペラジン、及び／又は（ヒドロキシエチル）ピペラジンを含む。

【０１１０】

いくつかの非限定的な実施形態において、Ａｍｉｘ　１０００、ＴＥＰＡ、ＴＥＴＡ、又はこれらの若しくは同様の化合物の混合物が、基質を官能化して、官能化された材料を形成するために使用され得る。いくつかの実施形態において、Ａｍｉｘ　１０００、ＴＥＰＡ、ＴＥＴＡ、及び同様の化合物は、低コストの官能化及び大気ガスからの炭素捕捉を容易にする、反応可能なアミンの低コストの供給源である。

【０１１１】

いくつかの実施形態において、オリゴマーアミン又は小分子アミン混合物は、多孔質シリカ基質と反応して、官能化された基質を形成することができる。いくつかの実施形態において、オリゴマーアミン又は小分子アミン混合物は、基質の表面に結合した化合物であることができ、表面修飾層を、表面上にファンデルワールス相互作用を介して形成することができる。

【０１１２】

図１Ｃを参照として使用して、官能基１０６Ｃは、ポリアミン基を含むことができる。いくつかの実装態様において、ポリアミン基は、１つ以上の一級、二級、若しくは三級アミン基；エチルアミン若しくはプロピルアミンの反復単位；又は様々なリンカー（例えば、アルキレン基）を介して接続された２つ以上のアミン基；又は直鎖若しくは分岐鎖ポリアミンを含むことができる。いくつかの実施形態において、ポリアミン基は、短鎖アミン含有化合物と比較して増加した相互作用表面積を、ポリマー鎖におけるアミン基の増加した数に起因して有する。いくつかの実施形態において、ポリアミン基は、基質１０２Ｃに、ファンデルワールス相互作用、水素結合、及び／又はイオン相互作用を介して結合している。

【０１１３】

本明細書におけるいずれかの官能材料のいくつかの実施形態において、官能部分は、CO_2を捕捉する吸着部分（例えば、CO_2吸着部分におけるように）を含むことができる。いくつかの実施形態において、CO_2吸着部分は、１つ以上のアミン含有部分を含む。アミン含有部分は、アミノシラン、アミン化合物、ポリアミン化合物、又はこれらのうちのいずれかの組み合わせによって提供され得る。CO_2吸着部分に関する更なる詳細が、本明細書に記載される。

【０１１４】

また、本明細書に記載されるように、官能部分は、基質の表面の少なくとも一部分と相互作用する相互作用部分を含むことができる。相互作用部分は、官能化される基質に基づいて選択され得る。いくつかの実施形態において、官能化される基質は、シリカを含み、相互作用部分は、シリカと反応するように構成されている。いくつかの実施形態において、相互作用部分は、シリカ基質の表面と反応するシラン部分を含む。他の実施形態において、官能化される基質は、金属有機構造体（ＭＯＦ）材料を含み、相互作用部分は、ＭＯＦ材料と反応するように構成されている。いくつかの実施形態において、相互作用部分は、ＭＯＦ基質の表面と反応するシラン部分を含む。他の実施形態において、官能化される

基質は、樹脂材料を含み、相互作用部分は、樹脂材料と反応するように構成されている。いくつかの実施形態において、相互作用部分は、樹脂基質の表面と反応するアミン部分を含む。相互作用部分は、基質の表面と、共有結合及び／又は非共有結合相互作用（例えば、本明細書に記載されるもの）によって相互作用することができる。相互作用部分及び基質に関する更なる詳細が、本明細書に記載される。

【０１１５】

そのような部分は、いずれかの有用な様式で導入され得る。例えば、そのような部分は、１つ以上の化合物において存在することができ、次いで、１つ以上の化合物は、懸濁液又は混合物（例えば、官能化混合物）中で提供され得る。基質もまた存在するときに、化合物は、基質と相互作用して、官能化された材料を提供することができる。いずれかの有用な化合物（複数可）が用いられ得る。非限定的な一事例において、アミン部分及びシラン部分は、アミノシラン化合物によって提供され、次いで、アミノシラン化合物は、基質の表面と反応するか、又はそれと相互作用して、アミン含有基を提供する。別の非限定的な事例において、アミン部分は、ポリアミン化合物によって提供され、次いで、ポリアミン化合物は、基質の表面と反応するか、又はそれと相互作用して、アミン含有基を提供する。尚別の非限定的な事例において、アミノシラン化合物及びポリアミン化合物の両方が、官能化された表面を提供するために用いられる。そのような反応は、共有結合及び／又は非共有結合相互作用をもたらすことができ、共有結合及び／又は非共有結合相互作用において、連結基（例えば、任意選択で置換された脂肪族、アルキレン、アルケニレン、アルキニレン、ヘテロ脂肪族、ヘテロアルキレン、ヘテロアルケニレン、ヘテロアルキニレン、芳香族、アリーレン、ヘテロ芳香族、ヘテロアリーレンなどによるもの）は、官能基（又は部分）と基質の表面との間に存在する。アミン部分は、アミン官能基自体（例えば、本明細書に記載される－$NR^{N1}R^{N2}$）であってもよく、又はアミン官能基を含む化合物の一部分（例えば、－Ｌ－$NR^{N1}R^{N2}$であり、式中、Ｌ、R^{N1}、及びR^{N2}は、本明細書に記載されるいずれかのものあることができる）であってもよい。官能部分を提供するための化合物、懸濁液、及び混合物に関する更なる詳細が、本明細書に記載される。

【０１１６】

使用において、官能化された材料は、層（例えば、ビーズ又は粉末の層）又は床として提供され得、CO_2を含むガス混合物が、層若しくは床の上に、又は層若しくは床を通って流され得る。そのような材料は、「吸着剤（ｓｏｒｂｅｎｔ）」又は「吸着剤（ａｄｓｏｒｂｅｎｔ）」と考えられ得、これらの用語は、別途指定されない限り、互換的に使用される。吸着剤を出るガスは、入るガスよりも低いCO_2濃度を有する。いくつかの実施形態において、官能化された材料は、CO_2を、いくつかのサイクルにわたって、例えば、いくつかの吸着及び脱着ステップにわたって可逆的に吸着することができ、サイクルは、少なくとも１つの吸着ステップ及び少なくとも１つの脱着ステップを含むことができる。より高いサイクル計数が、CO_2捕捉用途において使用されたときにより長い製品寿命を有する材料を特徴付けるために使用され得る。いくつかの非限定的な実装態様において、官能化された材料は、CO_2を、１００回のサイクルにわたって（例えば、５００回のサイクルにわたって、１０００回のサイクルにわたって、２０００回のサイクルにわたって、又は３０００回のサイクルにわたって）可逆的に吸着する。ここで、かつ本明細書全体にわたって、測定可能な値、例えば、量、時間的持続期間などへの言及について、値の列挙は、正確な値、およその値、及び値の±１０％以内を包含する。例えば、ここで、１００回のサイクルは、正確に１００回のサイクル、およそ１００回のサイクル、及び１００回のサイクルの±１０％以内を含む。

【０１１７】

官能化された材料に吸着されたCO_2は、いくつかの条件下で放出され得る（例えば、脱着され得る）。一例として、官能化された材料を囲むガス圧力を低減することは、捕捉されたCO_2を脱着することができる。別の例として、官能化された材料を囲むCO_2の部分圧力を低減することは、捕捉されたCO_2を（例えば、N_2又は別のガスでパージす

ることによって）脱着することができる。これらの手法のうちの１つ以上は、二次環境における吸着されたＣＯ$_2$の再捕捉を容易にすることができる。いくつかの実装態様において、官能化された材料は、５ｐｓｉ未満（例えば、３ｐｓｉ、１．５ｐｓｉ、１ｐｓｉ、又は０．１ｐｓｉ未満）の低減されたガス圧力に曝露される。

【０１１８】

第２の例として、官能化された材料の温度を増加させることは、アミン基とＣＯ$_2$との間の結合を不安定化することができ、それによって、ＣＯ$_2$を、官能化された材料から脱着することができる。いくつかの実装態様において、官能化された材料は、ＣＯ$_2$を、６０℃超の温度（例えば、６０℃、７０℃、８０℃、又は９０℃超）で脱着する。温度を増加させ、同時にガス圧力を減少させることは、官能化された材料からのＣＯ$_2$の脱着の速度を増加させることができる。

【０１１９】

実際に、吸着剤からのガスの放出は、いずれかの有用なプロセスを含むことができる。一例において、スイングプロセスが用いられ得る。そのようなスイングプロセスは、ガスを吸着剤組成物から放出するための、温度における変化、圧力における変化、及び／又は真空の適用を含むことができる。スイングプロセスは、温度スイング吸着（ＴＳＡ）、圧力スイング吸着（ＰＳＡ）、及び真空スイング吸着（ＶＳＡ）、又はこれらの組み合わせを含むことができる。いくつかの実施形態において、放出されたガスは、出力として提供され得、そのような出力は、吸着剤を、温度スイング吸着プロセス、圧力スイング吸着、真空スイング吸着プロセス、又はこれらのうちのいずれかの組み合わせに曝露することによって発生し得る。

【０１２０】

ｉ．基質

官能化された材料は、いずれかの有用な基質を含むことができる。いくつかの実施形態において、基質は、多孔質表面を提供し、官能部分が、多孔質表面上に配設され得る。いくつかの実施形態において、基質は、多孔質基質、例えば、多孔質セラミック（例えば、多孔質金属酸化物、多孔質メタロイド酸化物、又はそれらの組み合わせ若しくはそれらの混合形態）、多孔質金属有機基質、又は多孔質ポリマー基質を含む。いくつかの実施形態において、基質は、多孔質シリカと一緒の多孔質セラミック／金属酸化物（例えば、多孔質アルミナ、ケイ酸カルシウム、アルミノケイ酸ナトリウムを含む）を含む。基質の尚他の非限定的な例としては、多孔質シリカ又はシリケート（例えば、非晶質シリカ、ケイ酸カルシウム、アルミノケイ酸ナトリウム）、多孔質アルミナ（例えば、アルミノケイ酸ナトリウムを含む）、金属有機構造体（ＭＯＦ）、又は樹脂（例えば、本明細書に記載されるもの）が挙げられる。基質は、いずれかの形態において提供され得る（例えば、沈殿形態、ゾルゲル形態、煙霧形態、か焼形態、凝集形態、又は顆粒化形態において提供され得、次いで、この形態は、粉末、顆粒などとして提供され得る）。基質は、標準的産業供給源から調達されてもよく、又は合成されてもよい。いくつかの実施形態において、基質は、水安定性、並びに／又は腐食及び酸化に対して抵抗性である。

【０１２１】

基質の寸法は、用途及び／又は供給源に基づいて変動し得る。基質の形状に依存して、基質の寸法は、長さ、幅、高さ、断面寸法、周長、半径（例えば、外部又は内部半径）、直径、又は基質のサイズを示すための別の測定基準を含むことができる。基質は、粒子の集団を含むことができ、集団は、ある特定の有効平均粒子サイズ及び／又はある特定のサイズ分布によって特徴付けられる。例えば、非限定的に、基質は、基質における粒子の少なくとも５０％が、指定されたサイズのものである、有効平均粒子サイズによって特徴付けられ得る。例えば、非限定的に、基質は、約２５マイクロメートル（μｍ）～３ミリメートル（ｍｍ）又は２５μｍ～４ｍｍであるサイズ分布によって特徴付けられ得る。

【０１２２】

いくつかの非限定的な実装態様において、基質は、２５μｍ～４ｍｍ（例えば、４５～８００μｍ、５０～５００μｍ、６０～３００μｍ、４５～１５０μｍ、７０～８０μｍ

、２５μｍ～３ｍｍ、２５μｍ～２ｍｍ、２５μｍ～１ｍｍ、５０μｍ～４ｍｍ、５０μｍ～３ｍｍ、５０μｍ～２ｍｍ、５０μｍ～１ｍｍ、１００μｍ～４ｍｍ、１００μｍ～３ｍｍ、１００μｍ～２ｍｍ、１００μｍ～１ｍｍ、２００μｍ～４ｍｍ、２００μｍ～３ｍｍ、２００μｍ～２ｍｍ、２００μｍ～１ｍｍ、２５０μｍ～４ｍｍ、２５０μｍ～３ｍｍ、２５０μｍ～２ｍｍ、２５０μｍ～１ｍｍ、５００μｍ～４ｍｍ、５００μｍ～３ｍｍ、５００μｍ～２ｍｍ、５００μｍ～１．５ｍｍ、１～２ｍｍ、１～２．５ｍｍ、１～３ｍｍ、又は１～４ｍｍ）の範囲であることができる平均直径を有する直径分布を有することができる。いくつかの実装態様において、基質の平均直径は、５００μｍ未満（例えば、４００μｍ未満、３５０μｍ未満、３００μｍ未満、２００μｍ未満、又は１００μｍ未満）である。いくつかの実施形態において、基質（例えば、多孔質シリカ粒子）は、少なくとも０．５ｍｍの平均半径を有する。

【０１２３】

平均についての分布の幅は、基質の吸着性能に影響し得る。いくつかの非限定的な実装態様において、分布の幅は、平均について５～５０μｍ（例えば、１０～４０μｍ又は２０～３０μｍ）の範囲である。いくつかの例において、分布の幅は、平均について５０μｍ～２ｍｍ（例えば、７５μｍ～１．５ｍｍ、１００μｍ～１．２５ｍｍ、２００μｍ～１ｍｍ、３００～８００μｍ、５００μｍ～２ｍｍ、５００μｍ～１．５ｍｍ、５００μｍ～１ｍｍ、１～２ｍｍ、１．２～１．８ｍｍ、１．４～２ｍｍ、又は１．５～２ｍｍ）の範囲である。

【０１２４】

代替として、分布の幅は、D_{90}、D_{50}、及び／又はD_{10}値を使用して記載され得る。これらの値は、最大までの値及びこの値を含む、試料における材料についての総サイズ分布の百分率を意味する。例えば、５００μｍのD_{90}値は、試料内の材料の９０％が、５００μｍ以下のサイズを有することを示す。いくつかの実装態様において、官能化された材料は、３０μｍのD_{10}値又は１５０μｍのD_{90}値を有する。いくつかの例において、官能化された材料は、１００μｍのD_{10}値若しくは５００μｍのD_{90}値、１５０μｍのD_{10}値若しくは１０００μｍのD_{90}値、４００μｍのD_{10}値若しくは１５００μｍのD_{90}値、５００μｍのD_{10}値若しくは２０００μｍのD_{90}値、又は１０００μｍのD_{10}値若しくは３０００μｍのD_{90}値を有する。いくつかの実装態様において、官能化された材料は、１０００μｍ、１１００μｍ、１２００μｍ、１３００μｍ、１４００μｍ、又は１５００μｍのD_{50}値を有する。

【０１２５】

理論によって拘束されることを望むことなく、高い多孔度又は高い細孔体積及びＢＥＴ表面積を有するより小さい粒子サイズは、より良好な官能化された材料合成結果を容易にすることができ、次いで、これは、より高いCO_2捕捉容量を、より高いアミンコーティング濃度をもたらす比較的より高い表面積に起因して可能にすることができる。そのようなタイプのより小さい粒子は、ガス拡散経路がより短くあり得るため、粒子の内部へのより速い吸着を可能にすることができる。粒子表面へのガス拡散速度が制限されない場合、より小さい粒子サイズは、ガス吸着のために有益であり得る。より小さい粒子サイズ（例えば、より小さい平均直径、半径、又は幅を有する）は、流動化プロセスのための吸着プロセスエネルギーコストを低減することができる。

【０１２６】

より小さい粒子サイズについての尚他の粒子効果は、より小さい粒子間体積、より遅い粒子間ガス動態（例えば、より長い粒子間拡散長さに起因する）、より速い粒子内ガス動態（例えば、より短い粒子内拡散長さに起因する）、より高い充填床背圧、より高い充填密度、及び／又はより高い外部表面積を含むことができる。より大きい粒子サイズについての粒子効果は、より大きい粒子間体積、より速い粒子間ガス動態（例えば、より短い粒子間拡散長さに起因する）、より遅い粒子内ガス動態（例えば、より長い粒子内拡散長さに起因する）、より低い充填床背圧、より低い充填密度、及び／又はより低い外部表面積を含むことができる。当業者は、そのようなサイズ及び効果を適合して、特定の使用のた

めのある特定の吸着剤を提供することができる。

【０１２７】

基質は、１つ以上の細孔の存在によって特徴付けられ得る。図１Ａに示されるように、細孔１０４は、基質の外部表面から内部体積内に延びる開口と考えられ得る。いくつかの実施形態において、そのような細孔の存在は、基質の表面積を増加させることができる。細孔の寸法は、細孔によって変動し得、個々の細孔内で変動し得、例えば、細孔１０４Ａ－ａ、１０４Ａ－ｂを参照されたい。更に、細孔の形状に依存して、寸法は、長さ、幅、高さ、断面寸法、周長、半径（例えば、外部又は内部半径）、直径、又は細孔のサイズを示すための別の測定基準を含むことができる。

【０１２８】

細孔は、いずれかの有用な寸法を有することができる。いくつかの実施形態において、細孔（複数可）の寸法（例えば、直径）は、６０～７００オングストローム（Å）（例えば、６０～４００Å、６０～３００Å、８０～３００Å、１００～７００Å、１００～５００Å、１００～２００Å、１５０～２５０Å、２００～７００Å、３００～７００Å、３００～５００Å、又は５００～７００Å）の範囲である。いくつかの実施形態において、細孔（複数可）の寸法（例えば、直径）は、１００～１５０Åの範囲である。いくつかの実装態様において、細孔（複数可）の寸法（例えば、直径）は、９０Å超（例えば、１００Å、１２０Å、又は１５０Å超）である。理論によって制限されることを望むことなく、細孔のより大きい直径は、吸着及び脱着速度を増加させることができ、アミン部分での細孔のより高い充填を、吸着及び脱着効率を低減し得る細孔詰まりを有することなく容易にすることができる。

【０１２９】

いくつかの実施形態において、基質は、１～２００ｎｍの多孔度及び／又は３０～８０ｎｍの平均細孔サイズによって特徴付けられ得る。いくつかの実施形態において、細孔（複数可）の寸法（例えば、直径）は、１～２００ｎｍ（例えば、１～１８０ｎｍ、１～１６０ｎｍ、１～１２０ｎｍ、１～１００ｎｍ、１～７０ｎｍ、１～３０ｎｍ、１～２０ｎｍ、１０～２００ｎｍ、１０～１８０ｎｍ、１０～１６０ｎｍ、１０～１２０ｎｍ、１０～１００ｎｍ、１０～７０ｎｍ、１０～５０ｎｍ、３０～２００ｎｍ、３０～１８０ｎｍ、３０～１６０ｎｍ、３０～１２０ｎｍ、３０～１００ｎｍ、３０～９０ｎｍ、３０～７０ｎｍ、７０～２００ｎｍ、７０～１８０ｎｍ、７０～１６０ｎｍ、又は７０～１２０ｎｍ）の範囲である。いくつかの実施形態において、細孔（複数可）の平均寸法（例えば、平均直径）は、３０～８０ｎｍ、２０～１００ｎｍ、又は２０～７０ｎｍ）の範囲である。

【０１３０】

いくつかの実施形態において、基質（例えば、シリカ基質）は、異なるサイズの複数の細孔によって特徴付けられ得る。例えば、非限定的に、１～３０ｎｍの範囲のより小さい細孔は、比較的より高い表面積に寄与することができ、これは、アミン部分でのより多くの表面固着を可能にして、コーティング又は表面官能化層の安定性を改善することができる。３０～９０ｎｍの範囲のより大きい細孔は、比較的より大きい細孔体積に寄与することができ、これは、より大きい体積の活性アミン部分が細孔内に収容されることを可能にして、CO_2取り込みを改善する。７０～２００ｎｍの範囲の最大細孔は、改善されたCO_2吸着動態のための比較的より高いガス拡散速度に寄与する開チャネルを提供することができる。機構によって制限されることを望むことなく、これらの３つの範囲の有意な多孔度を有する基質（例えば、シリカ基質）は、アミンコーティングされた吸着剤のための基質として用いられ得る。いくつかの非限定的な実施形態において、これらの範囲のうちの１又は２つの範囲の低減された多孔度を有する基質は、対応する機能における比較的減少した性能を被り得るが、依然として、アミンコーティングされた吸着剤のための基質として機能し得る。

【０１３１】

いくつかの実施形態において、基質（例えば、シリカ基質）は、複数の細孔によって特

徴付けられ得、各細孔は、細孔寸法によって特徴付けられ得、少なくとも１つの細孔寸法は、約１～３０ｎｍの第１の範囲、約３０～９０ｎｍの第２の範囲、及び／又は約７０～２００ｎｍの第３の範囲である。そのような範囲は、本明細書に記載される細孔寸法のいずれかの他の範囲であることができる。

【０１３２】

細孔は、いずれかの有用な形状（例えば、円筒、球状、管状など）、構成、分布、及び配置（例えば、六角形、立方体など）を有することができる。細孔は、不規則に丸い断面形状、又は六角形断面形状を有することができるが、これは、非限定的である。また、細孔は、細孔サイズ分布によって特徴付けられ得、細孔サイズ分布は、いずれかの有用な様式で（例えば、水銀、窒素、アルゴン、ヘリウムなどをポロシメトリーにおいて使用して、又はブルナウアー－エメット－テラー（ＢＥＴ）分析を、適切な方法、例えば、バレット－ジョイナー－ハレンダ（ＢＪＨ）若しくは非局所密度汎関数理論（ＮＬＤＦＴ）モデルとともに使用して）決定され得る。

【０１３３】

細孔サイズ分布の非限定的な例は、図３０Ａ～３０Ｄ及び図３１で提供される。高い表面積を有するが、比較的より低い細孔体積及びガス動態を有する狭い細孔のみを有する非限定的な吸着剤（図３０Ａ）、高い細孔体積、並びに中程度の表面積及びガス動態を有する中程度のサイズの細孔のみを有する非限定的な吸着剤（図３０Ｂ）、速いガス動態及び高い細孔体積を有するが、比較的より低い表面積を有する大きい細孔のみを有する非限定的な吸着剤（図３０Ｃ）、並びに安定した表面コーティング、比較的より高い濃度の活性アミン、及び速いガス動態を可能にする高い表面積、細孔体積、及びガス拡散のためのチャネルを有する複数の範囲の細孔を有する非限定的な吸着剤（図３０Ｄ）についての細孔サイズ分布プロファイルが提供される。また、生シリカ、浸漬コーティングされた吸着剤、及びスプレーコーティングされた吸着剤についての細孔サイズ分布（図３１）が提供される。

【０１３４】

細孔は、いずれかの有用な構成を有することができる。いくつかの実施形態において、細孔は、基質の表面上に提供され得る。そのような細孔は、相互接続されてもよく、又は相互接続されなくてもよい。例えば、非限定的に、細孔は、基質の中心体積内に延びることができ、相互接続されたチャネルを形成することができる。理論によって制限されることを望むことなく、細孔は、基質内の体積を作製することができ、ガスが、基質内の体積内に流れ得、そのようなガスの捕捉が強化される。更に、そのような細孔は、官能化のための追加の（例えば、アクセス可能な）表面積を作製し得る。

【０１３５】

細孔は、細孔体積、総表面積、アクセス可能な表面積、多孔度などによって特徴付けられ得る。いくつかの実施形態において、細孔の体積は、０．１ｍＬ／ｇ超（例えば、０．５ｍＬ／ｇ超、０．８ｍＬ／ｇ超、１ｍＬ／ｇ超、１．２ｍＬ／ｇ超、１．５ｍＬ／ｇ超、又は１．８ｍＬ／ｇ超）である。いくつかの実施形態において、細孔の体積は、０．１～５ｍＬ／ｇ（例えば、０．１～４．５ｍＬ／ｇ、０．１～４ｍＬ／ｇ、０．１～３ｍＬ／ｇ、０．１～３．５ｍＬ／ｇ、０．１～３ｍＬ／ｇ、０．１～２．５ｍＬ／ｇ、０．１～２ｍＬ／ｇ、０．１～１．５ｍＬ／ｇ、０．１～１．２ｍＬ／ｇ、０．１～１ｍＬ／ｇ、０．５～５ｍＬ／ｇ、０．５～４．５ｍＬ／ｇ、０．５～４ｍＬ／ｇ、０．５～３．５ｍＬ／ｇ、０．５～３ｍＬ／ｇ、０．５～２．５ｍＬ／ｇ、０．５～２ｍＬ／ｇ、０．５～１．５ｍＬ／ｇ、０．５～１ｍＬ／ｇ、１～５ｍＬ／ｇ、１～４．５ｍＬ／ｇ、１～４ｍＬ／ｇ、１～３．５ｍＬ／ｇ、１～３ｍＬ／ｇ、１～２．５ｍＬ／ｇ、１～２ｍＬ／ｇ、１．５～５ｍＬ／ｇ、１．５～４．５ｍＬ／ｇ、２．５～５ｍＬ／ｇ、２．５～４．５ｍＬ／ｇ、３．５～５ｍＬ／ｇ、３．５～４．５ｍＬ／ｇ、１．５～３．５ｍＬ／ｇ、１～３ｍＬ／ｇ、１～１．５ｍＬ／ｇ、１～１．２ｍＬ／ｇ、又は１．５～２．５ｍＬ／ｇ）である。制限された理論であることを望むことなく、細孔の増加した総体積は、より多くのアミン部分が細孔内にグラフトされるか又は細孔内にあることを可能にすることがで

き、したがって、官能化された材料の吸着潜在性を増加させることができる。

【０１３６】

総表面積は、基質を特徴付けるために使用され得る。基質の総表面積は、外側表面の表面積のみでなく、細孔内の表面積も含む。いくつかの実施形態において、総表面積は、１乾燥グラムの基質当たり１００ｍ^{2}超（ｍ^2／ｇ）である。いくつかの実装態様において、総表面積は、３００ｍ^2／ｇ超（例えば、２００ｍ^2／ｇ、４００ｍ^2／ｇ、５００ｍ^2／ｇ、又は８００ｍ^2／ｇ超）である。いくつかの実装態様において、総表面積は、１２００ｍ^2／ｇ超（例えば、２００ｍ^2／ｇ、４００ｍ^2／ｇ、５００ｍ^2／ｇ、又は８００ｍ^2／ｇ超）である。いくつかの実装態様において、総表面積は、２０００ｍ^2／ｇ超（例えば、２５００ｍ^2／ｇ、３０００ｍ^2／ｇ、４０００ｍ^2／ｇ、５０００ｍ^2／ｇ、又は６０００ｍ^2／ｇ超）である。いくつかの例において、総表面積は、１００～１２００ｍ^2／ｇ（例えば、２００～１２００ｍ^2／ｇ、４００～１２００ｍ^2／ｇ、５００～１２００ｍ^2／ｇ、７００～１２００ｍ^2／ｇ、８００～１２００ｍ^2／ｇ、１０００～１２００ｍ^2／ｇ、１００～１０００ｍ^2／ｇ、１００～８００ｍ^2／ｇ、１００～５００ｍ^2／ｇ、１００～４００ｍ^2／ｇ、１００～９００ｍ^2／ｇ、２００～９００ｍ^2／ｇ、４００～９００ｍ^2／ｇ、５００～１０００ｍ^2／ｇ、又は５００～８００ｍ^2／ｇ）の範囲である。いくつかの例において、総表面積は、１０００～１２０００ｍ^2／ｇ（例えば、１０００～１１０００ｍ^2／ｇ、１０００～１００００ｍ^2／ｇ、１０００～９０００ｍ^2／ｇ、１０００～８０００ｍ^2／ｇ、１０００～７０００ｍ^2／ｇ、１０００～６０００ｍ^2／ｇ、１０００～５０００ｍ^2／ｇ、１０００～４０００ｍ^2／ｇ、２０００～１２０００ｍ^2／ｇ、２０００～１１０００ｍ^2／ｇ、２０００～１００００ｍ^2／ｇ、２０００～９０００ｍ^2／ｇ、２０００～８０００ｍ^2／ｇ、２０００～７０００ｍ^2／ｇ、２０００～６０００ｍ^2／ｇ、２０００～５０００ｍ^2／ｇ、２０００～４０００ｍ^2／ｇ、３０００～１２０００ｍ^2／ｇ、３０００～１１０００ｍ^2／ｇ、３０００～１００００ｍ^2／ｇ、３０００～９０００ｍ^2／ｇ、３０００～８０００ｍ^2／ｇ、３０００～７０００ｍ^2／ｇ、３０００～６０００ｍ^2／ｇ、３０００～５０００ｍ^2／ｇ、３０００～４０００ｍ^2／ｇ、４０００～１２０００ｍ^2／ｇ、４０００～１１０００ｍ^2／ｇ、４０００～１００００ｍ^2／ｇ、４０００～９０００ｍ^2／ｇ、４０００～８０００ｍ^2／ｇ、４０００～７０００ｍ^2／ｇ、４０００～６０００ｍ^2／ｇ、又は４０００～５０００ｍ^2／ｇ）の範囲である。いくつかの例において、総表面積は、１００～１２０００ｍ^2／ｇの範囲（例えば、それらの間の範囲、例えば、本明細書に記載されるものを含む）である。

【０１３７】

理論によって制限されることを望むことなく、より高い総表面積は、官能化のための可用な面積を（例えば、シラン部分と基質の表面との間の相互作用によって）増加させることができ、かつ／又は官能化された材料の吸着潜在性を増加させることができる。表面積は、いずれかの有用な様式で、例えば、ＢＥＴモデル又は本明細書に記載される他の方法を使用することによって決定され得る。

【０１３８】

特徴のいずれかの有用な組み合わせが、基質において存在し得る。いくつかの実施形態において、基質は、少なくとも７０μｍの最大寸法（例えば、平均最大寸法）及び複数の細孔を含み、複数の細孔は、０．８ｍＬ／ｇ超の体積及び少なくとも９０Åのサイズ（例えば、平均サイズ）によって特徴付けられる。いくつかの実施形態において、基質は、０．５～２ｍｍの範囲の最大寸法（例えば、平均最大寸法）及び複数の細孔を含み、複数の細孔は、０．５ｍｌ／ｇ超の体積及び２０～１０００Åの範囲のサイズによって特徴付けられる。特徴の他の組み合わせが可能である。

【０１３９】

ａ．シリカ

いくつかの実施形態において、基質は、シリカ（例えば、二酸化ケイ素）を含む。本明細書におけるいずれかの方法又は化合物が、シリカ基質を官能化して、官能化されたシリ

カを提供するために使用され得る。例えば、非限定的に、官能化されたシリカは、シリカ表面に（例えば、シロキサン結合、他の共有結合、又は更には非共有結合によって）結合したアミン部分を特徴とすることができる。

【０１４０】

シリカは、いずれかの有用な形態、例えば、ビーズ（例えば、マイクロビーズ、ナノビーズ、又はそれらの組み合わせ）、粉末（例えば、マイクロ粉末、ナノ粉末、若しくはそれらの組み合わせ、又はマイクロメートルサイズからミリメートルサイズのもの）、粒子（例えば、マイクロ粒子、ナノ粒子、又はそれらの組み合わせ）などにおいて提供され得る。更に、シリカは、いずれかの有用なタイプ、例えば、非晶質若しくは非結晶性シリカ（例えば、沈殿形態、ゾルゲル形態、煙霧形態、か焼形態、凝集形態、又は他の形態のシリカ）、又はシリケート（例えば、ケイ酸カルシウム、アルミノケイ酸ナトリウムなど）を含むことができる。いくつかの実施形態において、シリカは、１つ以上の細孔を（例えば、多孔質シリカにおけるように）含むことができる。更に、そのような基質内で、細孔は、いずれかの有用な形状、構成、分布、及び配置を有することができる（例えば、ＭＣＭ－４１における六角形配置の細孔であり、次いで、六角形配置の細孔は、球状又はいずれかの他の形状であることができる）。いくつかの実施形態において、基質は、ビーズ形状であることができるが、これは、非限定的である。シリカは、いずれかの有用な様式で、例えば、合成方法を用いることによって、又は標準的産業供給源から調達することによって得られてもよく、又は提供されてもよい。

【０１４１】

いくつかの非限定的な実施形態において、基質１０２Ａ、１０２Ｂ、１０２Ｃは、シリカ基質である。いくつかの非限定的な実施形態において、基質１０２Ａ、１０２Ｂ、１０２Ｃは、非晶質シリカ、例えば、非結晶性シリカから構成されている。

【０１４２】

ｂ．金属有機構造体（ＭＯＦ）

金属有機構造体（ＭＯＦ）は、金属イオン又はクラスターを含むクラスの化合物であって、金属イオン又はクラスターが、有機リガンドに配位しており、一次元、二次元、又は三次元構造（例えば、多孔質三次元構造）を形成する、化合物である。様々な種類のＭＯＦが、金属イオン及び有機リガンドの異なる組み合わせ（例えば、本明細書に記載されるもの）で合成され得る。いくつかの実施形態において、ＭＯＦ基質は、官能化のための多孔質構造として、炭素捕捉を達成するために使用される。

【０１４３】

いくつかの実施形態において、基質は、ＭＯＦを含む。本明細書におけるいずれかの方法又は化合物が、ＭＯＦ基質を官能化して、官能化されたＭＯＦを提供するために使用され得る。理論によって制限されることを望むことなく、官能化されたＭＯＦは、代替の基質（例えば、ゼオライト、シリカなど）よりも大きい、増加した官能化のための表面積（例えば、２０００m^2／ｇ超）を特徴とすることができる。例えば、非限定的に、官能化されたＭＯＦは、表面上に存在するヒドロキシ官能側基に結合したアミン部分を特徴とすることができ、それによって、CO_2取り込みを可能にする。アミン部分は、本明細書に記載されるいずれかの化合物（例えば、アミノシラン化合物）によって、増加した炭素捕捉（例えば、２ｍｏｌのCO_2／ｋｇ超）のために提供され得る。

【０１４４】

ＭＯＦは、いずれかの有用な様式で提供され得る。いくつかの実施形態において、ＭＯＦは、反応器ベースの溶媒熱（例えば、水熱）合成方法を使用して生成され得、方法において、金属供給源（例えば、金属基質又は金属含有塩）、有機リガンド、及び任意選択の競合剤／添加剤が、一緒に反応して、１０μｍ～１ｍｍのサイズ（例えば、直径）のＭＯＦ結晶を生成し、サイズは、それらの間の範囲（例えば、１０～５００μｍ、１０～３００μｍ、５０～３００μｍ、又は５０～１００μｍのサイズ）を含む。結晶は、押出され得、ペレット化され得、吸着部分で官能化されて、ＭＯＦの表面上に配設された官能基を提供することができ、それによって、官能化されたＭＯＦを提供する。

【０１４５】
ＭＯＦは、金属供給源及び有機リガンドを提供することによって合成され得る。ある特定の条件下で、金属含有中心が、ノードを形成し、有機リガンドが、ノード間の架橋を形成して、自己組織化ネットワーク構造を提供する。ある特定の反応条件を有するある特定の金属及びリガンドを選択することによって、ＭＯＦ材料の様々な構造特徴（例えば、トポロジー、細孔構造、細孔サイズなど）が制御され得る。
【０１４６】
いずれかの有用な金属供給源が用いられ得る。非限定的な例としては、アルミニウム（Ａｌ）、クロム（Ｃｒ）、銅（Ｃｕ）、鉄（Ｆｅ）、チタン（Ｔｉ）、バナジウム（Ｖ）、亜鉛（Ｚｎ）、ジルコニウム（Ｚｒ）、及びそれらの塩（例えば、ハロゲン塩、硝酸塩、又は本明細書に記載される他のもの）を含む金属供給源が挙げられる。いくつかの実施形態において、金属供給源は、アルミニウムベースの金属供給源、鉄ベースの金属供給源、チタンベースの金属供給源、亜鉛ベースの金属供給源、又はジルコニウムベースの金属供給源であることができる。いくつかの実施形態において、ＭＯＦ基質のために選択される金属イオンは、経済的な市販のコスト効果がある金属イオン供給源、例えば、アルミニウム（Ａｌ）、鉄（Ｆｅ）、チタン（Ｔｉ）、亜鉛（Ｚｎ）（例えば、硝酸亜鉛（$ZnNO_3$））、ジルコニウム（Ｚｒ）（例えば、四塩化ジルコニウム（$ZrCl_4$））を含み得る。
【０１４７】
いずれかの有用な有機リガンドが用いられ得る。非限定的なリガンドは、例えば、３，３’，５，５’－アゾベンゼンテトラカルボキシレート（ＡＢＴＣ$^{4-}$）；１，４－ベンゼンジカルボキシレート（ＢＤＣ$^{2-}$）；（Ｘ）－ＢＤＣ$^{2-}$又は（Ｘ）$_2$－ＢＤＣ$^{2-}$（式中、各Ｘは、独立して、アルキル、ハロ、ヒドロキシ、ニトロ、アミノ、カルボキシル、アルコキシ、シクロアルコキシ、アリールオキシ、又はベンジルオキシである）（例えば、２－アミノ－１，４－ベンゼンジカルボキシレート（NH_2－ＢＤＣ$^{2-}$）、２－ヒドロキシ－１，４－ベンゼンジカルボキシレート（ＯＨ－ＢＤＣ$^{2-}$）、２，５－ジアミノ－１，４－ベンゼンジカルボキシレート（（NH_2）$_2$－ＢＤＣ$^{2-}$）、２，５－ジヒドロキシ－１，４－ベンゼンジカルボキシレート（（ＯＨ）$_2$－ＢＤＣ$^{2-}$又はＤＨＢＤＣ$^{2-}$）、２，３－ジヒドロキシ－１，４－ベンゼンジカルボキシレート、又は２，６－ジヒドロキシ－１，４－ベンゼンジカルボキシレート）；１，１’－ビフェニル－４，４’－ジカルボキシレート（ＢＰＤＣ$^{2-}$）；（Ｘ）－ＢＰＤＣ$^{2-}$又は（Ｘ）$_2$－ＢＰＤＣ$^{2-}$（式中、各Ｘは、独立して、アルキル、ハロ、ヒドロキシ、ニトロ、アミノ、カルボキシル、アルコキシ、シクロアルコキシ、アリールオキシ、又はベンジルオキシである）（例えば、２－アミノ－１，１’－ビフェニル－４，４’－ジカルボキシレート（NH_2－ＢＰＤＣ$^{2-}$）、２－ヒドロキシ－１，１’－ビフェニル－４，４’－ジカルボキシレート（ＯＨ－ＢＰＤＣ$^{2-}$）、２，２’－ジアミノ－１，１’－ビフェニル－４，４’－ジカルボキシレート（（NH_2）$_2$－ＢＰＤＣ$^{2-}$）、又は２，２’－ジヒドロキシ－１，１’－ビフェニル－４，４’－ジカルボキシレート（（ＯＨ）$_2$－ＢＰＤＣ$^{2-}$））；１，３，５－ベンゼントリカルボキシレート又は１，２，４－ベンゼントリカルボキシレート（ＢＴＣ$^{3-}$）；２，５－ジヒドロキシ－１，４－ベンゼンジカルボキシレート（ＤＨＢＤＣ$^{2-}$）；２，５－ジオキシド－１，４－ベンゼンジカルボキシレート（ＤＯＢＤＣ$^{4-}$）；４，４’，４”－ｓ－トリアジン－２，４，６－トリイル－トリベンゾエート（ＴＡＴＢ$^{3-}$）；１，３，６，８－テトラキス（ｐ－ベンゾエート）ピレン（ＴＢＡＰｙ$^{4-}$）；１，１’－トリフェニル－４，４’－ジカルボキシレート（ＴＰＤＣ$^{2-}$）；及び（Ｘ）$_2$－ＴＰＤＣ$^{2-}$又は（Ｘ）$_4$－ＴＰＤＣ$^{2-}$（式中、各Ｘは、独立して、アルキル、ハロ、ヒドロキシ、ニトロ、アミノ、カルボキシル、アルコキシ、シクロアルコキシ、アリールオキシ、又はベンジルオキシである）（例えば、２，２’－ジヒドロキシ－１，１’－トリフェニル－４，４’－ジカルボキシレート（ジ－ＯＨ－ＴＰＤＣ）又は２，２’，６，６’－テトラヒドロキシ－１，１’－トリフェニル－４，４’－ジカルボキシレート（テトラ－ＯＨ－ＴＰＤＣ））を含む。そのようなリガンドは、そのプロトン化形態における化合物

として、金属供給源に提供され得る。いくつかの実施形態において、リガンドは、任意選択で、１つ以上の対イオン（例えば、１つ以上の対アニオン又は対カチオン）、及びそれらのカチオン、それらのアニオン、それらのプロトン化形態、それらの塩、又はそれらのエステルを含むことができる。

【０１４８】

いくつかの実施形態において、リガンドは、ヒドロキシ官能側基を含む。理論又は機構によって制限されることを望むことなく、ヒドロキシ官能側基の存在は、吸着部分（例えば、アミン部分）でのＭＯＦ表面の合成後官能化を容易にし得る。

【０１４９】

いくつかの実施形態において、ヒドロキシは、ＭＯＦ基質の表面上のアミン部分の密度を増加させ、それによって、ＭＯＦ基質のCO_2捕捉容量を増加させつつ、アミノシラン化合物のシラン部分と反応して、シラン部分を、有機リガンドのヒドロキシ基に共有結合させる。炭素捕捉のためのＭＯＦ基質との結合に好適なアミノシランの非限定的な例としては、メトキシシラン、クロロシラン、エトキシシラン、及び本明細書に記載される他のものが挙げられる。

【０１５０】

いくつかの実施形態において、有機リガンドは、１，４－ジ－（４－カルボキシ－２，６－ジヒドロキシフェニル）ベンゼンである化合物によって提供される。ＭＯＦ内で、この化合物は、２，２’，６，６’－テトラヒドロキシ－１，１’－トリフェニル－４，４’－ジカルボキシレート（テトラ－ＯＨ－ＴＰＤＣ）リガンドを提供することができる。いくつかの実施形態において、この化合物は、$Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$を含む金属供給源とともに用いられる。

【０１５１】

いくつかの実施形態において、有機リガンドは、２－ヒドロキシテレフタル酸（例えば、２－ヒドロキシ－ＢＤＣリガンドを提供するために）、２，５－ジヒドロキシテレフタル酸（例えば、２，５－ジヒドロキシ－ＢＤＣリガンドを提供するために）、２，３－ジヒドロキシテレフタル酸（例えば、２，３－ジヒドロキシ－ＢＤＣリガンドを提供するために）、２，６－ジヒドロキシテレフタル酸（例えば、２，６－ジヒドロキシ－ＢＤＣリガンドを提供するために）、又は２－ボロノベンゼン－１，４－ジカルボン酸（例えば、２－ボロノ－ＢＤＣリガンドを提供するために）である化合物によって提供される。

【０１５２】

いずれかの有用なＭＯＦが用いられ得る。ＭＯＦの非限定的な例としては、例えば、ＨＣＣ－１［Zn_4O（ジ－ＯＨ－ＴＰＤＣ）$_3$］；ＨＣＣ－２［Zn_4O（テトラ－ＯＨ－ＴＰＤＣ）$_3$］、ＨＫＵＳＴ－１［Cu_3（ＢＴＣ）$_2$又はCu_3（ＢＴＣ）$_3$（H_2O）$_3$］、ＩＲＭＯＦ－１又はＭＯＦ－５［Zn_4O（ＢＤＣ）$_3$］、ＩＲＭＯＦ－３［Zn_4O（NH_2－ＢＤＣ）$_3$］、ＩＲＭＯＦ－１０［Zn_4O（ＢＰＤＣ）$_3$］、ＩＲＭＯＦ－１６［Zn_4O（ＴＰＤＣ）$_3$］、ＭＩＬ－４７［ＶＯ（ＢＤＣ）］、ＭＩＬ－１０１－Ｃｒ［Cr_3O（ＢＤＣ）$_3$（H_2O）$_2$Ｆ又はCr_3O（ＢＤＣ）$_3$（H_2O）$_3$］、ＭＩＬ－１０１－Ｆｅ［Fe_3O（ＢＤＣ）$_3$（H_2O）$_2$Ｘ又はFe_3O（ＢＤＣ）$_3$Ｘ、式中、Ｘは、モノアニオン、例えば、OH^-又はCl^-である］、NH_2－ＭＩＬ－１０１－Ｆｅ［Fe_3O（NH_2－ＢＤＣ）$_3$（H_2O）$_2$Ｘ又はFe_3O（NH_2－ＢＤＣ）$_3$Ｘ、式中、Ｘは、モノアニオン、例えば、OH^-又はCl^-である］、NH_2－ＭＩＬ－１０１－Ａｌ［Al_3O（NH_2－ＢＤＣ）$_6X_3$又はAl_3O（NH_2－ＢＤＣ）$_3$（H_2O）$_2$Ｘ、式中、Ｘは、モノアニオン、例えば、OH^-又はCl^-である］、ＭＩＬ－１２５［Ti_8O_8（ＯＨ）$_4$（ＢＤＣ）$_6$］、NH_2－ＭＩＬ－１２５［Ti_8O_8（ＯＨ）$_4$（NH_2－ＢＤＣ）$_6$］、ＭＯＦ－２［Zn_2（ＢＤＣ）$_2$］、ＭＯＦ－７４［Zn_2（ＤＨＢＤＣ）］、ＭＯＦ－８０８［Zr_6O_4（μ_3－ＯＨ）$_4$（ＯＨ）$_6$（H_2O）$_6$（ＢＴＣ）$_2$］、ＮＵ－１０００［Zr_6（μ_3－Ｏ）$_4$（μ_3－ＯＨ）$_4$（ＯＨ）$_4$（H_2O）$_4$（ＴＢＡＰｙ）$_2$］、ＰＣＮ－２５０［Fe_3O（ＡＢＴＣ）$_6$又は（Fe_3O）$_2$（ＡＢＴＣ）$_3$又は（Fe_3O）$_2$（ＡＢＴＣ）$_3$－－（ＯＨ

）$_2$（H_2O）$_4$］、ＰＣＮ－７７７［Zr_6O_4（μ_3－ＯＨ）$_4$（ＴＡＴＢ）$_2$（ＯＨ）$_6$（H_2O）$_6$又はZr_3O_4（ＯＨ）（ＴＡＴＢ）（H_2O）$_6$］、ＵｉＯ－６６［Zr_6（Ｏ）$_4$（ＯＨ）$_4$（ＢＤＣ）$_{12}$］、ＵｉＯ－６６［Zr_6O_4（ＯＨ）$_4$（ＢＤＣ）$_6$］、ＵｉＯ－６６－ＤＯＢＤＣ［Zr_6O_4（ＯＨ）$_4$（ＤＯＢＣ）$_6$］、ＵｉＯ－６６－NH_2［Zr_6O_4（ＯＨ）$_4$（NH_2－ＢＤＣ）$_6$］、ＵｉＯ－６６－ＯＨ［Zr_6O_4（ＯＨ）$_4$（ＯＨ－ＢＤＣ）$_6$］、又はＵｉＯ－６７［Zr_6O_4（ＯＨ）$_4$（ＢＰＤＣ）$_6$］が挙げられる。これらのうちのいずれかは、１つ以上のヒドロキシ基又は追加のヒドロキシ基（例えば、ヒドロキシ基が既に存在する場合）を含むように修飾され得る。いくつかの実施形態において、ヒドロキシ基は、有機リガンド上に提供される。

【０１５３】

ＭＯＦは、いずれかの有用な形態、例えば、粒子、結晶、粉末などにおいて提供され得る。いくつかの実施形態において、ＭＯＦ粒子は、ＭＩＬ－１０１－Ｆｅ、ＭＩＬ－１０１－Ａｌ、ＭＩＬ－１２５－Ｔｉ、ＰＣＮ－２５０、ＵｉＯ－６６、又はＵｉＯ－６７を含む。いくつかの実施形態において、ＭＯＦ粒子は、水安定性ＭＯＦ粒子であることができる。

【０１５４】

ＭＯＦ基質は、様々な合成条件下で処理されて、異なる細孔サイズ及び多孔度を得ることができる。いくつかの実施形態において、ＭＯＦ基質は、メソ多孔質又はマクロ多孔質ＭＯＦ材料である。概して、理論によって拘束されることを望むことなく、より高い細孔開口サイズは、増加した表面積を容易にすることができ、合成後修飾が起こり得る露出した活性部位の数を増加させる。増加した露出した活性部位は、ＭＯＦ基質上の吸着部分のより高い濃度を容易にすることができ、次いで、これは、より高いCO_2捕捉容量を可能にすることができる。

【０１５５】

ＭＯＦ基質は、細孔を含み得、細孔は、ＭＯＦ基質の内部体積内に延びる開口である。細孔は、ＭＯＦ基質の表面積を増加させることができる。細孔の寸法は、変動し、個々の細孔内で変動し得る。メソ多孔質及びマクロ多孔質ＭＯＦ材料は、大きい体積の吸着部分（例えば、アミン部分）が多孔質マトリックス内に組み込まれることを可能にすることができる。いくつかの実施形態において、メソ多孔質材料は、２ナノメートル（ｎｍ）～５０ｎｍの範囲の最大開口寸法（例えば、直径）を有する細孔を含み、マクロ多孔質材料は、５０ｎｍ超の最大開口寸法を有する細孔を含む。ＭＯＦ基質について、細孔寸法、細孔体積、及び／又は総表面積は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる（例えば、３０～４００Åの範囲又は９０Å超の細孔寸法、０．５～５ｍＬ／ｇの細孔体積、及び／又は１００m^2／ｇ超の総表面積）。

【０１５６】

ＭＯＦ基質は、官能化されて、吸着部分を有する官能部分を提供することができる。いくつかの実施形態において、吸着部分は、アミン部分（例えば、本明細書に記載される一級、二級、又は三級アミン基）である。いくつかの実施形態において、アミン部分は、ヒドロキシ官能側基が延びるＭＯＦの表面に結合する。この例において、相互作用部分は、ＭＯＦの表面上に存在するヒドロキシ基と反応するいずれかのものを含むことができる。非限定的な相互作用部分は、例えば、シラン部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であることができる。相互作用部分と表面との間に相互作用を形成することによって、アミン結合安定性及び／又は吸着剤の寿命が改善され得る。本明細書における官能化方法は、全ての形態因子のＭＯＦ基質に適用可能であることができる。

【０１５７】

いくつかの実施形態において、アミノシランが、ＭＯＦの表面に提供される。いくつかの実施形態において、アミノシランは、シラン部分（例えば、トリメトキシシラン部分、トリエトキシシラン部分、ジメトキシエトキシシラン部分、ジエトキシメトキシシラン部分など）及びアミン部分を含むことができる。いくつかの実施形態において、アミノシランは、１、２、又は３つのアミン部分（例えば、R^Aについて本明細書に記載されるいず

れかのもの）を含む。いくつかの実施形態において、アミノシランは、式［R^A］$_3$ＳｉＸを有する構造を含み、式中、各R^Aは、独立して、少なくとも１つのアミン基を含むアミン部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であり、Ｘは、側基、反応性基、又は脱離基（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）である。いくつかの実施形態において、アミノシランは、式［$R^{N1}R^{N2}$Ｎ］$_3$ＳｉＸを有する構造を含み、式中、R^{N1}及びR^{N2}の各々は、独立して、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、任意選択で置換された脂肪族、アルキル、芳香族、又はアリール）であり、Ｘは、側基、反応性基、又は脱離基（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの、例えば、ハロ、ヒドロキシなど）である。いくつかの実施形態において、アミノシランは、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシランであるか、又はそれを含む。アミノシランの他の例としては、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、式（Ｉ）を有する構造を含むアミノシラン）が挙げられる。

【０１５８】

いくつかの実施形態において、アミノシランが、ＭＯＦの表面に提供され、アミノシランは、ＭＯＦ内の有機リガンド上に存在するヒドロキシ基と相互作用する。いくつかの実施形態において、有機リガンドは、ＭＯＦ内の金属中心と相互作用し（例えば、それに結合し）、ヒドロキシ基は、金属中心から非結合である。特定の実施形態において、アミノシランのシラン部分は、有機リガンド上に存在するヒドロキシ基と相互作用する（例えば、それに結合するか、又はそれと反応する）。

【０１５９】

いくつかの非限定的な実施形態において、基質１０２Ａ、１０２Ｂ、１０２Ｃは、ＭＯＦ基質であり、細孔１０４Ａ－ａ、ｂ、１０４Ｂ－ａ、ｂ、１０４Ｃ－ａ、ｂは、細孔を表し、ＭＯＦ構造によって提供する。いくつかの非限定的な実施形態において、基質１０２Ａ、１０２Ｂ、１０２Ｃは、結晶性ナノ多孔質ＭＯＦから構成されている。

【０１６０】

ｃ．樹脂

イオン交換樹脂は、概して、多孔質構造を有し、多孔質構造は、イオン性化合物の交換のための大きい表面積を提供することができる。官能化された樹脂を提供するために、官能部分含有化合物が、細孔内に吸着され得、そのような細孔内に存在する反応性部分と相互作用することができる。そのような相互作用は、イオン結合相互作用、水素結合相互作用、ファンデルワールス力相互作用などを含むことができる。このプロセスは、様々なタイプの反応性部位、例えば、ポリスチレンスルホネートを有する複数のタイプのイオン交換樹脂（例えば、イオン交換樹脂におけるスルホン酸が、様々なアミンとのイオン結合を、イオン結合を介して形成する酸性反応性部位を含む）で行われ得る。いくつかの実施形態において、樹脂基質は、官能化のための多孔質構造として、炭素捕捉を達成するために使用される。特定の実施形態において、樹脂において存在する反応性部位は、官能化中に用いられる。

【０１６１】

いくつかの実施形態において、基質は、樹脂（例えば、イオン交換樹脂）を含む。本明細書におけるいずれかの方法又は化合物が、樹脂基質を官能化して、官能化された樹脂を提供するために使用され得る。例えば、非限定的に、官能化された樹脂は、表面上に存在する酸性反応性部位に結合したアミン部分を特徴とすることができ、それによって、CO_2取り込みを可能にする。アミン部分は、本明細書に記載されるいずれかの化合物（例えば、ポリアミン）によって、増加した炭素捕捉（例えば、１ｍｏｌのCO_2／ｋｇ超又は１～３ｍｏｌのCO_2／ｋｇ）のために提供され得る。

【０１６２】

いくつかの実施形態において、基質は、イオン交換樹脂（例えば、イオン交換樹脂粒子）を含む。いくつかの実施形態において、イオン交換樹脂は、ガス拡散及び吸着を容易にするのに十分な多孔度を、乾燥したときに保持するように十分に架橋されている。

【０１６３】

概して、樹脂基質は、標準的産業供給源から調達され得るイオン交換樹脂の一部分である。非限定的なタイプのイオン交換樹脂は、「弱塩基」官能化された樹脂、「酸」官能化された樹脂、例えば、カルボン又はスルホン酸基を有するもの、及び化学官能化を有しない中性樹脂を含む。

【０１６４】

これらのタイプにおいて、異なる分子相互作用が、導入されたアミン部分を保持するために使用され得る。弱塩基樹脂において、アミン部分は、樹脂において存在し、反応性部位として機能する。次いで、これらの反応性部位は、官能化中に（例えば、ポリアミン、モノアミン、アミノシランなどを導入することによって）導入された吸着部分に（例えば、水素結合によって）相互作用することができる。酸性樹脂において、酸性部分は、反応性部位として樹脂において存在する。アミン（例えば、ポリアミン、モノアミン、アミノシランなど）をこの樹脂に導入することは、酸塩基反応をもたらすことができ、酸塩基反応は、反応性部位とアミンとの間にイオン結合を形成することができる。中性樹脂において、ファンデルワールス力及び樹脂細孔内へのより大きいアミンの封入が、主要な相互作用である。理論によって制限されることを望むことなく、酸性樹脂でのイオン結合相互作用は、他の結合モードに対して最も高い結合強度を提供することができ、弱塩基手綱での水素結合は、イオン結合よりも少ない強度を有し、中性樹脂でのファンデルワールス力は、他の２つの結合モードに対して最も低い結合強度を有する。

【０１６５】

イオン交換樹脂は、ポリスチレン（例えば、ジビニルベンゼンと任意選択で架橋されたもの）、ポリアクリレート、ポリメタクリレート（例えば、ジビニルベンゼンと任意選択で架橋されたもの）、ポリフェノール／フェノール－アルデヒド樹脂（例えば、フェノール－ホルムアルデヒド）、メラミン樹脂、アガロース、セルロース、ポリアクリルアミド、多糖（例えば、デキストラン）、ポリオレフィン、又は同様の樹脂及び熱硬化樹脂、並びにこれらのうちのいずれかの架橋形態又はこれらのうちのいずれかのコポリマーを含むクラスの多孔質ポリマーである。

【０１６６】

樹脂は、イオンと相互作用することができるイオン化可能、キレート化、イオン性、酸性、又は塩基性官能基を含むことができる。これらの官能基は、カルボン酸、ホスホン酸、スルホン酸、スルホアルキル酸、チオール、イミノ二酢酸、チオ尿素、アミノホスホン酸、ピリジン、フェノール、ピコリルアミン、一級アミン、二級アミン、三級アミン、四級アミン、及びアルコールアミンを含み得るが、これらに限定されない。

【０１６７】

いずれかの有用な樹脂が用いられ得る。樹脂の非限定的な例としては、塩基官能化された樹脂、酸官能化された樹脂、又は化学官能化を含まない中性樹脂が挙げられる。いくつかの実施形態において、酸官能化された樹脂は、カルボン及び／又はスルホン酸基を含むことができる。いくつかの実施形態において、樹脂は、多孔度を、乾燥したときに保持する、多孔質ポリスチレン、ポリアクリルアミド、又はフェノール－ホルムアルデヒド樹脂と分子アルキルアミンとの組み合わせであることができる。多孔質イオン交換樹脂の非限定的な例としては、Ｐｕｒｏｌｉｔｅ（登録商標）Ａ１１０（ポリスチレン系マクロ多孔質、弱塩基アニオン樹脂、遊離塩基形態、一級アミンを官能基として有する）、Ｐｕｒｏｌｉｔｅ（登録商標）Ａ１０５（ポリスチレン系マクロ多孔質、弱塩基アニオン樹脂、遊離塩基形態、三級アミンを官能基として有する）、Ｐｕｒｏｌｉｔｅ（登録商標）Ｃ１４５Ｈ（ポリスチレン系マクロ多孔質、強酸カチオン樹脂、水素形態、スルホン酸を官能基として有する）、Ｐｕｒｏｌｉｔｅ（登録商標）Ｃ１６０Ｈ（ポリスチレン系マクロ多孔質、強酸カチオン樹脂、水素形態、スルホン酸を官能基として有する）、Ｐｕｒｏｌｉｔｅ（登録商標）Ｍａｃｒｏｎｅｔ（商標）ＭＮ５０２（高架橋ポリスチレン系マクロ多孔質、吸着剤樹脂、強酸官能性、水素形態、スルホン酸を官能基として有する）、Ｐｕｒｏｌｉｔｅ（登録商標）Ｃ１０４Ｐｌｕｓ（ポリアクリル系多孔質、弱酸カチオン樹脂、水素形態、カルボン酸を官能基として有する）、ＰｕｒｏＳｏｒｂ（商標）ＰＡＤ９００（

ポリジビニルベンゼンマクロ多孔質、吸着剤樹脂、非イオン形態）、Ａｍｂｅｒｌｉｔｅ（登録商標）ＩＲＡ－４０２（強塩基性アニオン交換体、Cl^-形態、四級アンモニウムを官能基として有する）、又はＤｏｗｅｘ（登録商標）５０Ｗ－Ｘ８（強酸性カチオン交換体、H^+形態、スルホン酸を官能基として有する）が挙げられるが、これらに限定されない。樹脂は、いずれかの有用な形態、例えば、ビーズ、顆粒、粉末、膜、繊維、粒子、結晶などにおいて提供され得る。

【０１６８】

樹脂は、ポリマーマトリックス内及び外へのガスイオンの拡散を容易にするのに十分な多孔質であることができる。いくつかの樹脂は、高度に架橋されており、硬質であり、多孔度を、乾燥状態（例えば、１５％（重量／重量）未満の水の水和）において保持する。「（重量／重量）」という用語は、第１の構成要素の重量（重量）対第２の構成要素の重量の比を指す。例えば、１ｇの第１の物質及び１０ｇの第２の物質は、１０％（重量／重量）の、第１の物質対第２の物質の比を定義する。

【０１６９】

いくつかの実施形態において、樹脂基質は、乾燥状態において多孔質である。機構によって制限されることを望むことなく、そのような基質は、CO_2捕捉のための、ポリマーマトリックス内へのCO_2を含有するガスの拡散を容易にすることができる。イオン交換樹脂は、様々な合成条件下で重合して、異なる細孔サイズ及び多孔度を得ることができる。より大きいメソ及びマクロ細孔は、大きい体積の吸着基が多孔質マトリックス内に組み込まれることを可能にすることができる。いくつかの実施形態において、メソ多孔質樹脂は、２～５０ｎｍの範囲の最大開口寸法（例えば、直径）を有する細孔を含み、マクロ多孔質樹脂は、５０ｎｍ超の最大開口寸法を有する細孔を含む。

【０１７０】

概して、理論によって拘束されることを望むことなく、適切な細孔サイズ（例えば、本明細書におけるいずれかの範囲の細孔を有する吸着剤におけるもの）は、安定したコーティング若しくは表面官能化層、比較的より高い濃度の吸着部分（例えば、活性アミン）、及び／又は速いガス動態を可能にする高い表面積、細孔体積、及びガス拡散のためのチャネルによって特徴付けられ得る。次いで、これは、より高いCO_2捕捉容量が可能にすることができる。いくつかの実施形態において、より高い多孔度は、流動化プロセスのための吸着プロセスエネルギーコストを低減することができる。

【０１７１】

樹脂基質は、細孔を含み得、細孔は、樹脂基質の内部体積内に延びる開口である。細孔は、樹脂基質の表面積を増加させることができる。樹脂基質について、細孔寸法、細孔体積、及び／又は総表面積は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる（例えば、９０Å超、又は６０～４００Å若しくは１～２００ｎｍの範囲の細孔寸法、３０～８０ｎｍの範囲の平均細孔サイズ、０．５ｍＬ／ｇ超、又は０．１～５ｍＬ／ｇ、０．１～４ｍＬ／ｇ、若しくは０．１～１．５ｍＬ／ｇの範囲の細孔体積、及び／あるいは１００m^2／ｇ超、１２００m^2／ｇ超、又は１００～１２００m^2／ｇの範囲の総表面積）。

【０１７２】

樹脂基質は、官能化されて、吸着部分を有する官能部分を提供することができる。いくつかの実施形態において、吸着部分は、アミン部分（例えば、本明細書に記載される一級、二級、又は三級アミン基）である。いくつかの実施形態において、アミン部分は、樹脂の反応性部位に結合する。この例において、相互作用部分は、樹脂の表面上に存在する反応性部位と反応するいずれかのものを含むことができる。非限定的な相互作用部分は、例えば、アミン部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であることができる。いくつかの実装態様において、樹脂は、第１のアミン部分を含み、反応は、第１のアミン部分に結合した第２のアミン部分を導入する。相互作用部分と表面との間に相互作用を形成することによって、アミン結合安定性及び／又は吸着剤の寿命が改善され得る。本明細書における官能化方法は、全ての形態因子のイオン交換樹脂に適用可能であることがで

きる。

【０１７３】

ｉｉ．官能部分

官能部分は、部分、基、又は化合物のいずれかの組み合わせを、吸着剤による所望のガスの吸着を容易にするために含むことができる。いくつかの実施形態において、官能部分は、吸着部分及び相互作用部分を含む。吸着部分は、所望のガスを吸着するように構成されており、相互作用部分は、吸着部分を基質の表面に（直接又は間接的に）付着させるように構成されている。任意選択で、相互作用部分は、官能部分を、例えば、吸着部分及び／又は基質の表面との結合を形成することによって安定化するように更に構成され得る。別の任意選択の実施形態において、相互作用部分は、追加の吸着部分を提供して、吸着剤の吸着を強化するように更に構成され得る。官能部分は、１つ以上の吸着部分（例えば、１つ以上のアミン部分）と１つ以上の相互作用部分（例えば、１つ以上のシラン部分）とのいずれかの有用な組み合わせを含むことができる。いくつかの実施形態において、複数のアミン部分が存在するときに（例えば、第１のアミン部分及び第２のアミン部分が存在するときに）、そのような部分は、二酸化炭素と反応することができるか、又はそれに結合することができる。

【０１７４】

図１Ａ～１Ｃに示されるように、基質１０２Ａ～Ｃの表面１０３Ａ～Ｃは、官能化されて、官能部分１０６Ａ～Ｃを提供することができる。いくつかの実施形態（例えば、図１Ａにおけるもの）において、官能部分１０６Ａは、吸着部分１１０Ａに結合した相互作用部分１０８Ａを含む。いくつかの実施形態（例えば、図１Ｂにおけるもの）において、官能部分１０６Ｂは、第１の吸着部分１１０Ｂに結合した相互作用部分１０８Ｂを含み、相互作用部分１０８Ｂ及び／又は第１の吸着部分１１０Ｂと会合した第２の吸着部分１１２Ｂを含む。いくつかの実施形態（例えば、図１Ｃにおけるもの）において、官能部分１０６Ｃは、吸着部分を含む。

【０１７５】

官能部分は、吸着部分を含むことができる。いくつかの実施形態において、吸着部分は、１、２、３つ、又はそれ以上のアミン部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含むことができる。いくつかの実装態様において、アミン部分は、以下、一級アミン（例えば、$-NH_2$）、二級アミン（例えば、$-NHR^{N1}$であり、式中、R^{N1}は、水素でない、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる）、三級アミン（例えば、$-NR^{N1}R^{N2}$であり、式中、R^{N1}及びR^{N2}の各々は、水素でない、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる）、アミノアルキル基（例えば、$-Ak-NR^{N1}R^{N2}$）、末端アミン基（例えば、$-NR^{N1}R^{N2}$）、内部アミン基（例えば、$-NR^{N3}-$、例えば、$-NH-$）、連結基（例えば、$-N(-L^1-NR^{N1}R^{N2})-$；$-N(-L^2-NR^{N3}-L^1-NR^{N1}R^{N2})-$；$-N[-L^2-N(-L^1-NR^{N1}R^{N2})_2]-$；$-L^1-NR^{N1}R^{N2}$；$-NR^{N3}-L^1-NR^{N1}R^{N2}$；$-L^2-NR^{N3}-L^1-NR^{N1}R^{N2}$；$-NR^{N4}-L^2-NR^{N3}-L^1-NR^{N1}R^{N2}$；又は$-L^3-NR^{N4}-L^2-NR^{N3}-L^1-NR^{N1}R^{N2}$）、アミノアルキルアミノ基（例えば、$-NR^{N3}-Ak-NR^{N1}R^{N2}$）、アミノアルキルアミノアルキル基（例えば、$-Ak-NR^{N3}-Ak-NR^{N1}R^{N2}$又は$-Ak-N(-Ak-NR^{N1}R^{N2})_2$）、アミノ及びシラン基を含む連結基（例えば、$-L^1-SiR^{S1}R^{S2}-NR^{N1}R^{N2}$、$-L^2-SiR^{S1}R^{S2}-L^1-NR^{N1}R^{N2}$、及び$-L^3-SiR^{S1}R^{S2}-L^2-NR^{N3}-L^1-NR^{N1}R^{N2}$）、窒素含有ヘテロシクリル（例えば、任意選択で置換されたピペラジニル、例えば、非置換ピペラジニル、又は任意選択で置換されたアルキル、アミノアルキル、ヒドロキシアルキル、アミノなどで置換されたピペラジニル）などのうちの１つ以上を含むことができる。

【０１７６】

他の実施形態において、吸着部分は、本明細書に記載される１つ以上のR^A部分を含むことができる。いくつかの実施形態において、R^Aは、$-NH-$、$-NR^{N1}-$、$-N($

－L^1－$NR^{N1}R^{N2}$）－、－N（－L^2－NR^{N3}－L^1－$NR^{N1}R^{N2}$）－、－N［－L^2－N（－L^1－$NR^{N1}R^{N2}$）$_2$］－、－NH_2、－$NR^{N1}R^{N2}$、－L^1－$NR^{N1}R^{N2}$、－NR^{N3}－L^1－$NR^{N1}R^{N2}$、－L^2－NR^{N3}－L^1－$NR^{N1}R^{N2}$、若しくは－NR^{N4}－L^2－NR^{N3}－L^1－$NR^{N1}R^{N2}$であるか、又はそれを含む。

【０１７７】

アミン部分は、リンカー及びR^A部分のいずれかの組み合わせを含む。いくつかの実装態様において、アミン部分は、以下、－L^1－［R^{A1}－L^2］$_{n1}$－R^{A2}；－NR^{N1}－［L^1－NR^{N2}］$_{n1}$－L^2－$NR^{N3}R^{N4}$；－NH－［L－NH］$_n$－H；－N［L－NH_2］$_2$；－NH［CH_2CH_2NH］$_n$H；－［CH_2CH_2NH］$_nR^{N1}$；－［CH_2CH_2NH］$_n$－；－［$CH_2CH_2NR^A$］$_nR^{N1}$；－［$CH_2CH_2NR^A$］$_n$－などのうちの１つ以上を含む。

【０１７８】

本明細書におけるいずれかのアミン部分についてのいくつかの非限定的な実施形態において、R^A、R^{A1}、又はR^{A2}の各々は、R^Aについて本明細書に記載されるいずれかのものであるか、又はそれを含み、R^{N1}及びR^{N2}の各々は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができ、R^{N3}、R^{N4}、及びR^{N5}の各々は、R^{N1}及びR^{N2}について本明細書に記載されるいずれかのものであることができ、R^{S1}及びR^{S2}の各々は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができ、L、L^1、L^2、又はL^3の各々は、独立して、リンカーであり、各Ａｋは、独立して、任意選択で置換されたアルキレンであり、ｎ及びｎ１の各々は、独立して、整数（例えば、１以上、例えば、１～２５０００、１～２４０００、１～２３０００、１～２２０００、１～２１０００、１～２００００、１～１９０００、１～１８０００、１～１７０００、１～１６０００、１～１５０００、１～１４０００、１～１３０００、１～１２０００、１～１１０００、１～１００００、１～７５００、１～５０００、１～４０００、１～３０００、１～２０００、１～１０００、１～５００、１～１００、１～５０、１～２０、１～１０、１～５、２～２５０００、２～２４０００、２～２３０００、２～２２０００、２～２１０００、２～２００００、２～１９０００、２～１８０００、２～１７０００、２～１６０００、２～１５０００、２～１４０００、２～１３０００、２～１２０００、２～１１０００、２～１００００、２～７５００、２～５０００、２～４０００、２～３０００、２～２０００、２～１０００、２～５００、２～１００、２～５０、２～２０、２～１０、２～５、５～２５０００、５～２４０００、５～２３０００、５～２２０００、５～２１０００、５～２００００、５～１９０００、５～１８０００、５～１７０００、５～１６０００、５～１５０００、５～１４０００、５～１３０００、５～１２０００、５～１１０００、５～１００００、５～７５００、５～５０００、５～４０００、５～３０００、５～２０００、５～１０００、５～５００、５～１００、５～５０、５～２０、５～１０、及びそれらの間の範囲の整数）である。

【０１７９】

いくつかの実施形態において、R^A、R^{A1}、又はR^{A2}は、－NH－、－NR^{N1}－、－N（－L^1－$NR^{N1}R^{N2}$）－、－N（－L^2－NR^{N3}－L^1－$NR^{N1}R^{N2}$）－、－N［－L^2－N（－L^1－$NR^{N1}R^{N2}$）$_2$］－、－NH_2、－$NR^{N1}R^{N2}$、－L^1－$NR^{N1}R^{N2}$、－NR^{N3}－L^1－$NR^{N1}R^{N2}$、－L^2－NR^{N3}－L^1－$NR^{N1}R^{N2}$、若しくは－NR^{N4}－L^2－NR^{N3}－L^1－$NR^{N1}R^{N2}$であるか、又はそれを含む。

【０１８０】

いくつかの実施形態において、R^{N1}、R^{N2}、R^{N3}、R^{N4}、及びR^{N5}の各々は、独立して、水素（Ｈ）、ハロ（例えば、Ｆ、Ｃｌ、Ｂｒ、又はＩ）、ヒドロキシ（例えば、－ＯＨ）、任意選択で置換されたアルキル、任意選択で置換されたアミノアルキル、任意選択で置換されたヒドロキシアルキル、任意選択で置換されたアルコキシ（例えば、－ＯＲであり、式中、Ｒは、任意選択で置換されたアルキルである）、任意選択で置換され

たアリール、任意選択で置換されたアリールオキシ（例えば、－ＯＲであり、式中、Ｒは、任意選択で置換されたアリールである）、トリアルキルシリルオキシ（例えば、－ＯＳｉＲ$_3$であり、式中、各Ｒは、独立して、任意選択で置換されたアルキルである）、又はトリアルコキシルシリルオキシ（例えば、－ＯＳｉ［ＯＲ］$_3$であり、式中、各Ｒは、独立して、任意選択で置換されたアルキルであるである。いくつかの実施形態において、Ｒ^{Ｎ１}、Ｒ^{Ｎ２}、Ｒ^{Ｎ３}、Ｒ^{Ｎ４}、Ｒ^{Ｎ５}、及びＲの各々は、独立して、Ｈ、任意選択で置換された脂肪族、任意選択で置換されたヘテロ脂肪族、任意選択で置換された芳香族、又は任意選択で置換されたヘテロ芳香族である。

【０１８１】

いくつかの実施形態において、Ｒ^{Ｓ１}及びＲ^{Ｓ２}の各々は、独立して、側基（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）、脱離基（例えば、ハロ、アシル、アシルオキシなど）、反応性基（例えば、ヒドロキシ、ハロ、アルコキシなど）、水素（Ｈ）、任意選択で置換されたアルキル、任意選択で置換されたヘテロアルキル、任意選択で置換されたアリール、任意選択で置換されたアミン、若しくはＲ^{Ａ}部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であるか、又はＲ^{Ｓ１}及びＲ^{Ｓ２}は、各々が付着しているケイ素原子と一緒になって、ヘテロシクリル基を形成する。いくつかの実施形態において、Ｒ^{Ｓ１}及びＲ^{Ｓ２}の各々は、独立して、水素（Ｈ）、任意選択で置換された脂肪族、任意選択で置換されたヘテロ脂肪族、任意選択で置換された芳香族、又は任意選択で置換されたヘテロ芳香族である。

【０１８２】

いくつかの実施形態において、リンカーは、例えば、共有結合、原子（例えば、カルボニル、オキシ、チオ、イミノなど）、任意選択で置換されたアルキレン、任意選択で置換されたヘテロアルキレン、任意選択で置換されたアリーレン、又は任意選択で置換されたヘテロアリーレンを含む。

【０１８３】

官能部分は、相互作用部分を含むことができる。いくつかの実施形態において、相互作用部分は、１、２、３つ、又はそれ以上のシラン部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含むことができる。いくつかの実施形態において、相互作用部分は、１つ以上のＳｉ－Ｏ結合を含む。

【０１８４】

いくつかの実装態様において、シラン部分は、アルコキシシラン基（例えば、－Ｓｉ（ＯＡｋ）$_{ｄ}$（Ｘ）$_{３～ｄ}$、又は－Ｓｉ（ＯＡｋ）$_{ｄ１}$（Ｘ）$_{２～ｄ１}$－、又は－Ｓｉ（ＯＡｋ）$_{ｄ}$（Ｘ）$_{２～ｄ}$Ｒ^{Ａ}）；トリアルコキシシラン基（例えば、－ＳｉＲ^{Ｓ１}Ｒ^{Ｓ２}Ｒ^{Ｓ３}であり、式中、Ｒ^{Ｓ１}、Ｒ^{Ｓ２}、及びＲ^{Ｓ３}の各々は、独立して、アルコキシである；例えば、トリメトキシシラン又はトリエトキシシラン）；ジアルコキシシラン基（例えば、例えば、－ＳｉＲ^{Ｓ１}Ｒ^{Ｓ２}Ｒ^{Ｓ３}又は－ＳｉＲ^{Ｓ１}Ｒ^{Ｓ２}－であり、式中、Ｒ^{Ｓ１}及びＲ^{Ｓ２}の各々は、独立して、アルコキシであり、Ｒ^{３}は、側基、脱離基、反応性基、又は本明細書に記載されるいずれかのものである）；モノアルコキシシラン基（例えば、－ＳｉＲ^{Ｓ１}Ｒ^{Ｓ２}Ｒ^{Ｓ３}又は－ＳｉＲ^{Ｓ１}Ｒ^{Ｓ２}－であり、式中、Ｒ^{Ｓ１}は、アルコキシであり、Ｒ^{Ｓ２}及びＲ^{Ｓ３}の各々は、独立して、側基、脱離基、反応性基、又は本明細書に記載されるいずれかのものである）；ジアルコキシシラノール基（例えば、－Ｓｉ（ＯＲ）$_2$ＯＨであり、式中、各Ｒは、独立して、アルキルである）；モノアルコキシシラノール基（例えば、－Ｓｉ（ＯＲ）（Ｒ^{Ｓ１}）ＯＨであり、式中、各Ｒは、独立して、アルキルであり、Ｒ^{Ｓ１}は、側基、脱離基、反応性基、又は本明細書に記載されるいずれかのものである）；ヒドロシラン基（例えば、－ＳｉＨ$_3$又は－ＳｉＨ$_2$－）；モノアルキルシラン基（例えば、－ＳｉＲ^{Ｓ１}Ｒ^{Ｓ２}Ｒ^{Ｓ３}又は－ＳｉＲ^{Ｓ１}Ｒ^{Ｓ２}－であり、式中、Ｒ^{Ｓ１}は、アルキルであり、Ｒ^{Ｓ２}及びＲ^{Ｓ３}の各々は、独立して、側基、脱離基、反応性基、又は本明細書に記載されるいずれかのものであり、モノアルキルシランの非限定的な例は、アルキルジアルコキシシラン又はアルキルジハロシランである）；ジアルキルシラン基（例えば、－ＳｉＲ^{Ｓ１}Ｒ^{Ｓ２}Ｒ^{Ｓ３}又は－ＳｉＲ^{Ｓ１}Ｒ^{Ｓ２}－であり、式中、Ｒ^{Ｓ１}及びＲ

R^{S2}の各々は、独立して、アルキルであり、R^{S3}は、側基、脱離基、反応性基、又は本明細書に記載されるいずれかのものであり、ジアルキルシランの非限定的な例としては、ジアルキルアルコキシシラン又はジアルキルハロシランが挙げられる）；トリハロシラン基（例えば、－SiZ_3であり、式中、各Ｚは、独立して、ハロであり、例えば、トリクロロシランである）；ジハロシラン基（例えば、－SiZ_2R^{S1}であり、式中、各Ｚは、独立して、ハロであり、R^{S1}の各々は、側基、脱離基、反応性基、又は本明細書に記載されるいずれかのものである）；モノハロシラン基（例えば、－$SiZR^{S1}R^{S2}$であり、式中、Ｚは、ハロであり、R^{S1}及びR^{S2}の各々は、独立して、側基、脱離基、反応性基、又は本明細書に記載されるいずれかのものである）；シラントリオール基（例えば、－Ｓｉ（ＯＨ）$_3$）；又はヒドロキシシラン基（例えば、－Ｓｉ（ＯＨ）R^{S1}－、－Ｓｉ（ＯＨ）$_2$－、又は－Ｓｉ（ＯＨ）$_3$）を含む。

【０１８５】

本明細書におけるいずれかのシラン部分についてのいくつかの非限定的な実施形態において、Ａｋは、任意選択で置換された脂肪族、アルキル、又はアルキレンであり、各Ｘは、独立して、本明細書に記載されるいずれかのものである側基、反応性基、又は脱離基であり、ｄは、１、２、又は３の整数であり、ｄ１は、１又は２の整数である。いくつかの実施形態において、R^{S1}、R^{S2}、及びR^{S3}の各々は、独立して、側基（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）、脱離基（例えば、ハロ、アシル、アシルオキシなど）、反応性基（例えば、ヒドロキシ、ハロ、アルコキシなど）、水素（Ｈ）、任意選択で置換されたアルキル、任意選択で置換されたヘテロアルキル、任意選択で置換されたアリール、任意選択で置換されたアミン、若しくはR^A部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であるか、又はR^{S1}及びR^{S2}は、各々が付着しているケイ素原子と一緒になって、ヘテロシクリル基を形成する。いくつかの実施形態において、R^{S1}及びR^{S2}の各々は、独立して、水素（Ｈ）、任意選択で置換された脂肪族、任意選択で置換されたヘテロ脂肪族、任意選択で置換された芳香族、又は任意選択で置換されたヘテロ芳香族である。

【０１８６】

部分のいずれかの有用な組み合わせが存在し得る。例えば、官能部分は、１つ以上の吸着部分の組み合わせ、１つ以上の相互作用部分の組み合わせ、吸着部分と相互作用部分との組み合わせ、及び１つ以上の吸着部分と１つ以上の相互作用部分との組み合わせを含むことができる。

【０１８７】

官能部分は、いずれかの有用な様式で提供され得る。例えば、吸着部分及び相互作用部分の両方を有する化合物が、基質に提供され得る。そのような化合物の非限定的な例としては、アミノ部分（例えば、吸着部分として）及びシラン部分（例えば、相互作用部分として）を含むアミノシランが挙げられ得る。いくつかの実施形態において、化合物は、長鎖多アミン含有部分を提供する。いくつかの実施形態において、化合物は、基質として機能する粒子（例えば、多孔質シリカ粒子）の各々の表面に化学結合したシラン部分を提供する。

【０１８８】

別の例において、複数の化合物が、１つ以上の吸着部分及び１つ以上の相互作用部分を提供するために使用され得る。例えば、第１の化合物は、吸着部分及び相互作用部分の両方を含むことができ、第２の化合物は、１つ以上の吸着部分を含むことができる。非限定的な例としては、アミノ部分（例えば、吸着部分として）及びシラン部分（例えば、相互作用部分として）を含むアミノシランである第１の化合物が、複数のアミノ部分（例えば、吸着部分として）を含むポリアミンである第２の化合物との組み合わせで使用され得ることが挙げられる。いくつかの実施形態において、第１の化合物は、基質の表面に（例えば、１つ以上の共有結合又は非共有結合によって）付着しており、第２の化合物は、基質に付着してもよく、又はそれに付着しなくてもよい。いくつかの実施形態において、第２の化合物は、第１の化合物（又はその一部分）と相互作用し得る。いくつかの実施形態に

おいて、第２の化合物は、第１の化合物（又はその一部分）及び基質の表面と相互作用し得る。そのような付着及び相互作用は、共有結合及び／又は非共有結合相互作用を含むことができる。非共有結合相互作用は、水素結合、イオン相互作用、ハロゲン結合、静電相互作用、η結合相互作用、疎水性相互作用、包接錯体、包接化、ファンデルワールス相互作用、及びそれらの組み合わせを含むが、これらに限定されない。

【０１８９】

１つ以上の化合物を基質に提供した際に、反応が起こって、共有結合及び／又は非共有結合相互作用を提供することができ、それによって、基質の表面上に配設された官能部分を提供する。官能部分を提供するための化合物の非限定的な例としては、アミン、アミノシラン、ポリマー、ポリアミン、及び本明細書に記載される他のものが挙げられる。

【０１９０】

ａ．アミノシラン

いくつかの実施形態において、化合物は、アミノシランである。例えば、非限定的に、基質（例えば、シリカ基質）の表面は、アミン部分に結合したシラン部分を含むアミノシラン化合物で官能化される。次いで、表面は、シラン部分及びアミン部分を有する官能基を含むことができる。本明細書で使用される場合、そのような部分はまた、当業者に理解されるように、１つ以上の結合を形成した際に存在し得る、これらの部分の反応形態（例えば、基質の表面と反応した際のシラン部分の反応形態）を含む。

【０１９１】

アミノシランは、少なくとも１つのシラン部分（例えば、１、２、３つ、又はそれ以上のシラン部分）及び少なくとも１つのアミン部分（例えば、１、２、３つ、又はそれ以上のアミン部分）を含むことができる。アミノシラン化合物、シラン部分、及びアミン部分の非限定的な例は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる。

【０１９２】

アミノシラン化合物は、１、２、３つ、又はそれ以上のシラン部分を含むことができる。いくつかの実装態様において、シラン部分は、トリアルコキシシラン（例えば、－ＳｉＲ^{S1}Ｒ^{S2}Ｒ^{S3}であり、式中、Ｒ^{S1}、Ｒ^{S2}、及びＲ^{S3}の各々は、独立して、アルコキシである；例えば、トリメトキシシラン又はトリエトキシシラン）、ジアルコキシシラン（例えば、－ＳｉＲ^{S1}Ｒ^{S2}Ｒ^{S3}であり、式中、Ｒ^{S1}及びＲ^{S2}の各々は、独立して、アルコキシであり、Ｒ^{S3}は、脱離基又は反応性基、例えば、本明細書に記載されるいずれかのものである）、ジアルコキシシラノール基（例えば、－Ｓｉ（ＯＲ）$_2$ＯＨであり、式中、各Ｒは、独立して、アルキルである）、ヒドロシラン基（例えば、－ＳｉＨ$_3$）、モノアルキルシラン基（例えば、－ＳｉＲ^{S1}Ｒ^{S2}Ｒ^{S3}であり、式中、Ｒ^{S1}は、アルキルであり、Ｒ^{S2}及びＲ^{S3}の各々は、独立して、脱離基又は反応性基、例えば、本明細書に記載されるいずれかのものであり、モノアルキルシランの非限定的な例は、アルキルジアルコキシシラン又はアルキルジハロシランである）、ジアルキルシラン基（例えば、－ＳｉＲ^{S1}Ｒ^{S2}Ｒ^{S3}であり、式中、Ｒ^{S1}及びＲ^{S2}の各々は、独立して、アルキルであり、Ｒ^{S3}は、反応性基又は脱離基、例えば、本明細書に記載されるいずれかのものであり、ジアルキルシランの非限定的な例としては、ジアルキルアルコキシシラン又はジアルキルハロシランが挙げられる）、トリハロシラン基（例えば、－ＳｉＺ$_3$であり、式中、各Ｚは、独立して、ハロであり、例えば、トリクロロシランである）、又はシラントリオール（例えば、－Ｓｉ（ＯＨ）$_3$）を含むことができる。アミノシラン化合物におけるより高い数（例えば、３つ以上）のシラン部分は、シラン部分と基質表面との間のより高い数のシロキサン結合が増加することができるため、基質との共有結合安定性を増加させることができる。追加として、シラン基は、表面への最大３つのシロキサン結合（Ｓｉ－Ｏ－Ｓｉ）を形成することができ、これは、安定性を増加させ得る。シラン部分によって形成され得るシロキサン結合の数は、シロキサン結合を形成することが可能である側基（例えば、－ＯＭｅ、－ＯＥｔ、－Ｃｌ、－ＯＨ、又はこれらのうちのいずれかの組み合わせ）の組成（例えば、Ｘ^1、Ｘ^2、及び／又はＸ^{3}のうちの１つ以上）に依存する。

【０１９３】
アミノシラン化合物は、１、２、３つ、又はそれ以上のアミン部分を含むことができる。いくつかの実装態様において、アミン部分は、一級アミン（例えば、－ＮＨ$_2$）、二級アミン（例えば、－ＮＨＲ^{Ｎ１}であり、式中、Ｒ^{Ｎ１}は、水素でない、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる）、三級アミン（例えば、－ＮＲ^{Ｎ１}Ｒ^{Ｎ２}であり、式中、Ｒ^{Ｎ１}及びＲ^{Ｎ２}の各々は、水素でない、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる）、又はアミノアルキル基（例えば、－Ａｋ－ＮＲ^{Ｎ１}Ｒ^{Ｎ２}であり、式中、Ａｋは、任意選択で置換されたアルキレンであり、Ｒ^{Ｎ１}及びＲ^{Ｎ２}の各々は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる）を含むことができる。いくつかの実施形態において、Ｒ^{Ｎ１}及びＲ^{Ｎ２}の各々は、独立して、水素（Ｈ）、ハロ（例えば、Ｆ、Ｃｌ、Ｂｒ、又はＩ）、ヒドロキシ（例えば、－ＯＨ）、任意選択で置換されたアルキル、任意選択で置換されたアミノアルキル、任意選択で置換されたヒドロキシアルキル、任意選択で置換されたアルコキシ（例えば、－ＯＲであり、式中、Ｒは、任意選択で置換されたアルキルである）、任意選択で置換されたアリール、任意選択で置換されたアリールオキシ（例えば、－ＯＲであり、式中、Ｒは、任意選択で置換されたアリールである）、トリアルキルシリルオキシ（例えば、－ＯＳｉＲ$_3$であり、式中、各Ｒは、独立して、任意選択で置換されたアルキルである）、又はトリアルコキシルシリルオキシ（例えば、－ＯＳｉ［ＯＲ］$_3$であり、式中、各Ｒは、独立して、任意選択で置換されたアルキルであるである。いくつかの実施形態において、Ｒ^{Ｎ１}、Ｒ^{Ｎ２}、及びＲの各々は、独立して、Ｈ、任意選択で置換された脂肪族、任意選択で置換されたヘテロ脂肪族、任意選択で置換された芳香族、又は任意選択で置換されたヘテロ芳香族である。

【０１９４】
いくつかの実装態様において、アミン部分は、様々なリンカー（例えば、Ｌについて本明細書に記載されるいずれかのもの）を介して接続された２つ以上のアミン基を含む。例えば、アミン部分は、末端アミン基（例えば、－ＮＲ^{Ｎ１}Ｒ^{Ｎ２}）、１つ以上の内部アミン基（例えば、－ＮＲ^{Ｎ３}－）、及び末端アミン基と内部アミン基との間に配設されたリンカー（例えば、－Ｌ－）を含むことができる。アミン部分の非限定的な例としては、アミノアルキルアミノ基（例えば、－ＮＲ^{Ｎ３}－Ａｋ－ＮＲ^{Ｎ１}Ｒ^{Ｎ２}であり、式中、Ａｋは、任意選択で置換されたアルキレンであり、Ｒ^{Ｎ１}、Ｒ^{Ｎ２}、及びＲ^{Ｎ３}の各々は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる）、又はアミノアルキルアミノアルキル基（例えば、－Ａｋ－ＮＲ^{Ｎ３}－Ａｋ－ＮＲ^{Ｎ１}Ｒ^{Ｎ２}であり、式中、各Ａｋは、独立して、任意選択で置換されたアルキレンであり、Ｒ^{Ｎ１}、Ｒ^{Ｎ２}、及びＲ^{Ｎ３}の各々は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる）が挙げられ得る。いくつかの実施形態において、Ｒ^{Ｎ１}、Ｒ^{Ｎ２}、及びＲ^{Ｎ３}の各々は、独立して、水素（Ｈ）、ハロ（例えば、Ｆ、Ｃｌ、Ｂｒ、又はＩ）、ヒドロキシ（例えば、－ＯＨ）、任意選択で置換されたアルキル、任意選択で置換されたアミノアルキル、任意選択で置換されたヒドロキシアルキル、任意選択で置換されたアルコキシ（例えば、－ＯＲであり、式中、Ｒは、任意選択で置換されたアルキルである）、任意選択で置換されたアリール、任意選択で置換されたアリールオキシ（例えば、－ＯＲであり、式中、Ｒは、任意選択で置換されたアリールである）、トリアルキルシリルオキシ（例えば、－ＯＳｉＲ$_3$であり、式中、各Ｒは、独立して、任意選択で置換されたアルキルである）、又はトリアルコキシルシリルオキシ（例えば、－ＯＳｉ［ＯＲ］$_3$であり、式中、各Ｒは、独立して、任意選択で置換されたアルキルであるである。いくつかの実施形態において、Ｒ^{Ｎ１}、Ｒ^{Ｎ２}、Ｒ^{Ｎ３}、及びＲの各々は、独立して、Ｈ、任意選択で置換された脂肪族、任意選択で置換されたヘテロ脂肪族、任意選択で置換された芳香族、又は任意選択で置換されたヘテロ芳香族である。

【０１９５】
アミノシラン化合物におけるより高い数（例えば、３つ以上）のアミン部分は、吸着剤の吸着能力を増加させることができる。いくつかの実施形態において、アミン部分は、他の部分及び基と相互作用して、官能基の安定性を安定化し得る。

【０１９６】
いくつかの実施形態において、１つのアミノシランのアミン部分（例えば、アミン基であることができるもの）は、隣接するアミノシランと（例えば、隣接するアミノシランのシラン部分内のシラン部分又は側基と）相互作用することができる。代替として、１つのアミノシランのアミン部分は、隣接するアミノシランと相互作用しなくてもよい（例えば、隣接するアミノシランのシラン部分内のシラン部分又は側基と相互作用しなくてもよい）。尚別の実施形態において、１つのアミノシランのアミン部分は、他の基、部分、又は化合物（例えば、別の化合物、例えば、ポリアミン又は別のタイプのアミノシランにおいて存在するもの）と相互作用し得る。いくつかの実施形態において、アミノシランのアミン部分（例えば、アミン基であることができるもの）は、ポリアミン（例えば、ポリアミンのアミン部分）と相互作用することができる。

【０１９７】
アミノシラン化合物は、いずれかの有用な構造を有することができる。非限定的な一例において、アミノシランは、式（Ｉ）、

$$[R^A]_aSi[X]_{4-a} \quad (I)$$

を有する構造を含み、式中、各R^Aは、独立して、少なくとも１つのアミン基を含むアミン部分であり、各Ｘは、独立して、側基、反応性基、又は脱離基であり、ａは、１～４の整数である。

【０１９８】
アミン部分（例えば、R^A）は、１つ以上のアミン基を含むことができる。一事例において、アミノ基は、$-NR^{N1}R^{N2}$又は$-NR^{N1}-$であることができ、式中、R^{N1}及びR^{N2}の各々は、独立して、水素（Ｈ）、ハロ（例えば、Ｆ、Ｃｌ、Ｂｒ、又はＩ）、ヒドロキシ（例えば、－ＯＨ）、任意選択で置換されたアルキル、任意選択で置換されたアミノアルキル、任意選択で置換されたヒドロキシアルキル、任意選択で置換されたアルコキシ（例えば、－ＯＲであり、式中、Ｒは、任意選択で置換されたアルキルである）、任意選択で置換されたアリール、任意選択で置換されたアリールオキシ（例えば、－ＯＲであり、式中、Ｒは、任意選択で置換されたアリールである）、トリアルキルシリルオキシ（例えば、$-OSiR_3$であり、式中、各Ｒは、独立して、任意選択で置換されたアルキルである）、又はトリアルコキシルシリルオキシ（例えば、$-OSi[OR]_3$であり、式中、各Ｒは、独立して、任意選択で置換されたアルキルである）である。いくつかの実施形態において、R^{N1}、R^{N2}、及びＲの各々は、独立して、Ｈ、任意選択で置換された脂肪族、任意選択で置換されたヘテロ脂肪族、任意選択で置換された芳香族、又は任意選択で置換されたヘテロ芳香族である。

【０１９９】
いくつかの実施形態において、アミン部分（例えば、R^A）は、１、２、３つ、又はそれ以上のアミン基を含む。他の実施形態において、アミン部分は、末端アミン基（例えば、$-NR^{N1}R^{N2}$として）及び／又は内部アミン基（例えば、$-NR^{N1}-$として）を含む。

【０２００】
アミン部分（例えば、R^A）の非限定的な例としては、$-NR^{N1}R^{N2}$、$-L-NR^{N1}R^{N2}$、$-NR^{N3}-L-NR^{N1}R^{N2}$、$-L^2-NR^{N3}-L^1-NR^{N1}R^{N2}$、$-L^3-NR^{N4}-L^2-NR^{N3}-L^1-NR^{N1}R^{N2}$、$-L^2-SiR^{S1}R^{S2}-L^1-NR^{N1}R^{N2}$、及び$-L^3-SiR^{S1}R^{S2}-L^2-NR^{N3}-L^1-NR^{N1}R^{N2}$が挙げられ、式中、$R^{N1}$、$R^{N2}$、$R^{S1}$、及び$R^{S2}$の各々は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができ、R^{N3}及びR^{N4}の各々は、R^{N1}及びR^{N2}について本明細書に記載されるいずれかのものであることができ、各Ｌ、L^1、L^2、又はL^3は、独立して、リンカーである。リンカーの例としては、例えば、共有結合、原子（例えば、カルボニル、オキシ、チオ、イミノなど）、任意選択で置換されたアルキレン、任意選択で置換されたヘテロアルキレン、任意選択で置換されたアリーレン、又は任意選択で置換されたヘテロアリーレンが挙げられる。いくつかの非限定的な実施形態において、Ｒ

R^{N1}、R^{N2}、R^{N3}、R^{N4}、R^{S1}、及びR^{S2}の各々は、独立して、Ｈ、任意選択で置換された脂肪族、又は任意選択で置換されたアルキルである。R^{N1}、R^{N2}、及びR^{N3}の他の例が、本明細書に記載される。

【０２０１】

アミノシランは、反応性基、脱離基、又は別の基（例えば、Ｘ）を含むことができる。そのような基の非限定的な例としては、Ｈ、ハロ（例えば、Ｆ、Ｃｌ、Ｂｒ、又はＩ）、ヒドロキシ（例えば、－ＯＨ）、任意選択で置換されたアルキル、任意選択で置換されたアミノアルキル、任意選択で置換されたヒドロキシアルキル、任意選択で置換されたアルコキシ（例えば、－ＯＲであり、式中、Ｒは、任意選択で置換されたアルキルである）、任意選択で置換されたアリール、任意選択で置換されたアリールオキシ（例えば、－ＯＲであり、式中、Ｒは、任意選択で置換されたアリールである）、又は任意選択で置換されたアルカノイルオキシが挙げられる。いくつかの実施形態において、Ｘは、独立して、Ｈ、任意選択で置換された脂肪族、任意選択で置換されたヘテロ脂肪族、任意選択で置換された芳香族、又は任意選択で置換されたヘテロ芳香族である。

【０２０２】

非限定的な一例において、アミノシランは、式（Ｉａ）、

$$R^{A1}SiX^1X^2X^3 \quad (Ia)$$

を有する構造を含み、式中、R^{A1}は、少なくとも１つのアミン基を含むアミン部分であり、X^1、X^2、及びX^3の各々は、独立して、側基、反応性基、又は脱離基である。R^{A1}、X^1、X^2、及びX^3の各々は、それぞれ、R^A及びＸについて本明細書に記載されるいずれかのものであることができる。

【０２０３】

別の非限定的な例において、アミノシランは、式（Ｉｂ）～（Ｉｅ）、

$$R^{A1}-L^1-SiX^1X^2X^3 \quad (Ib)$$

$$R^{N1}R^{N2}N-L^1-SiX^1X^2X^33 \quad (Ic)$$

$$R^{A1}-L^1-R^{A2}-L^2-SiX^1X^2X^3 \quad (Id)$$ 又は

$$R^{N1}R^{N2}N-L^1-N(R^{N3})-L^2-SiX^1X^2X^3 \quad (Ie)$$

を有する構造を含み、式中、各R^{A1}又はR^{A2}は、独立して、少なくとも１つのアミン基を含むアミン部分であり、R^{N1}、R^{N2}、及びR^{N3}の各々は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができ、X^1、X^2、及びX^3の各々は、独立して、側基、反応性基、又は脱離基であり、L^1及びL^2の各々は、リンカーである。R^{A1}、R^{A2}、X^1、X^2、X^3、L^1、及びL^2の各々は、それぞれ、R^A、Ｘ、及びＬについて本明細書に記載されるいずれかのものであることができる。いくつかの実施形態において、X^1、X^2、及びX^3の各々は、独立して、Ｈ、ハロ、任意選択で置換されたアルキル（例えば、任意選択で置換された$C_{1\sim3}$アルキル）、又は任意選択で置換されたアルコキシ（例えば、任意選択で置換された$C_{1\sim3}$アルコキシ）である。他の実施形態において、X^1、X^2、及びX^3の各々は、独立して、任意選択で置換されたアルコキシ（例えば、任意選択で置換された$C_{1\sim3}$アルコキシ）である。尚他の実施形態において、Ｌは、任意選択で置換されたアルキレン（例えば、任意選択で置換された$C_{1\sim12}$、$C_{1\sim10}$、$C_{1\sim8}$、又は$C_{1\sim6}$アルキレン）である。

【０２０４】

尚別の非限定的な例において、アミノシランは、式（Ｉｆ）、

$$R^{A1}R^{A2}R^{A3}SiX^1 \quad (If)$$

を有する構造を含み、式中、各R^{A1}、R^{A2}、又はR^{A3}は、独立して、少なくとも１つのアミン基を含むアミン部分であり、X^1は、側基、反応性基、又は脱離基である。R^{A1}、R^{A2}、R^{A3}、及びX^1の各々は、それぞれ、R^A及びＸについて本明細書に記載されるいずれかのものであることができる。

【０２０５】

いくつかの例において、アミノシランは、式（ＩＩ）、

$$[R^B]_bN[Y]_{3\sim b} \quad (II)$$

の構造を含み、式中、各R^Bは、独立して、少なくとも１つのシラン基を含むシラン部分であり、各Ｙは、独立して、Ｈ、任意選択で置換されたアルキル、又は任意選択で置換されたアリールであり、ｂは、１～３の整数である。いくつかの実施形態において、各Ｙは、独立して、Ｈ、任意選択で置換された脂肪族、任意選択で置換されたヘテロ脂肪族、任意選択で置換された芳香族、又は任意選択で置換されたヘテロ芳香族である。

【０２０６】

シラン部分（例えば、R^B）は、１つ以上のシラン基を含むことができる。一事例において、シラン基は、－ＳｉＲ^{S1}Ｒ^{S2}Ｒ^{S3}又は－ＳｉＲ^{S1}Ｒ^{S2}－であることができ、式中、R^{S1}、R^{S2}、及びR^{S3}の各々は、独立して、水素（Ｈ）、ハロ（例えば、Ｆ、Ｃｌ、Ｂｒ、又はＩ）、ヒドロキシ（例えば、－ＯＨ）、任意選択で置換されたアルキル、任意選択で置換されたアミノアルキル、任意選択で置換されたヒドロキシアルキル、任意選択で置換されたアルコキシ（例えば、－ＯＲであり、式中、Ｒは、任意選択で置換されたアルキルである）、任意選択で置換されたアリール、任意選択で置換されたアリールオキシ（例えば、－ＯＲであり、式中、Ｒは、任意選択で置換されたアリールである）、トリアルキルシリルオキシ（例えば、－ＯＳｉ^{R3}であり、式中、各Ｒは、独立して、任意選択で置換されたアルキルである）、又はトリアルコキシルシリルオキシ（例えば、－ＯＳｉ［ＯＲ］$_3$であり、式中、各Ｒは、独立して、任意選択で置換されたアルキルである）である。いくつかの実施形態において、R^{S1}、R^{S2}、R^{S3}、及びＲの各々は、独立して、Ｈ、任意選択で置換された脂肪族、任意選択で置換されたヘテロ脂肪族、任意選択で置換された芳香族、又は任意選択で置換されたヘテロ芳香族である。

【０２０７】

いくつかの実施形態において、シラン部分（例えば、R^B）は、１、２、３つ、又はそれ以上のシラン基を含む。他の実施形態において、シラン部分は、末端シラン基（例えば、－ＳｉＲ^{S1}Ｒ^{S2}Ｒ^{S3}として）及び内部シラン基（例えば、－ＳｉＲ^{S1}Ｒ^{S2}－として）を含む。

【０２０８】

シラン部分（例えば、R^B）の非限定的な例としては、－ＳｉＲ^{S1}Ｒ^{S2}Ｒ^{S3}、－Ｓｉ（ＯＲ^{S1}）（Ｒ^{S2}）（Ｒ^{S3}）、－Ｓｉ（ＯＲ^{S1}）（ＯＲ^{S2}）（Ｒ^{S3}）、－Ｓｉ（ＯＲ^{S1}）（ＯＲ^{S2}）（ＯＲ^{S3}）、－Ｌ－ＳｉＲ^{S1}Ｒ^{S2}Ｒ^{S3}、－Ｌ－Ｓｉ（ＯＲ^{S1}）（Ｒ^{S2}）（Ｒ^{S3}）、－Ｌ－Ｓｉ（ＯＲ^{S1}）（ＯＲ^{S2}）（Ｒ^{S3}）、－Ｌ－Ｓｉ（ＯＲ^{S1}）（ＯＲ^{S2}）（ＯＲ^{S3}）、－ＳｉＲ^{S4}Ｒ^{S5}－Ｌ－ＳｉＲ^{S1}Ｒ^{S2}Ｒ^{S3}、及び－ＳｉＲ^{S1}Ｒ^{S2}－ＮＲ^{N1}Ｒ^{N2}が挙げられ、式中、R^{S1}、R^{S2}、R^{S3}、R^{N1}、及びR^{N2}の各々は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができ、R^{S4}及びR^{S5}の各々は、R^{S1}、R^{S2}、及びR^{S3}について本明細書に記載されるいずれかのものであることができ、Ｌは、リンカーである。リンカーの例としては、例えば、共有結合、原子（例えば、カルボニル、オキシ、チオ、イミノなど）、任意選択で置換されたアルキレン、任意選択で置換されたヘテロアルキレン、任意選択で置換されたアリーレン、又は任意選択で置換されたヘテロアリーレンが挙げられる。いくつかの非限定的な実施形態において、R^{S1}、R^{S2}、R^{S3}、R^{S4}、R^{S5}、R^{N1}、及びR^{N2}の各々は、独立して、Ｈ、任意選択で置換された脂肪族、又は任意選択で置換されたアルキルである。

【０２０９】

非限定的な一例において、アミノシランは、式（ＩＩａ）、

$$R^{B1}NY^1Y^2 \quad (IIa)$$

を有する構造を含み、式中、R^{B1}は、少なくとも１つのシラン基を含むシラン部分であり、Y^1及びY^2の各々は、Ｙについて本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、側基、反応性基、又は脱離基）である。R^{B1}は、R^Bについて本明細書に記載されるいずれかのものであることができる。

【０２１０】

別の非限定的な例において、アミノシランは、式（ＩＩｂ）～（ＩＩｄ）、

$R^{B1}R^{B2}NY^{1}$ （ＩＩｂ）
$[R^{S1}R^{S2}R^{S3}Si-L^{1}-]NY^{1}Y^{2}$ （ＩＩｃ）又は
$[R^{S1}R^{S2}R^{S3}Si-L^{1}-]NY^{1}[-L^{2}-SiR^{S1}R^{S2}R^{S3}]$ （ＩＩｄ）
を有する構造を含み、式中、各R^{B1}又はR^{B2}は、独立して、少なくとも１つのシラン基を含むシラン部分であり、Y^{1}及びY^{2}の各々は、独立して、側基、反応性基、又は脱離基であり、R^{S1}、R^{S2}、及びR^{S3}の各々は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができ、L^{1}及びL^{2}の各々は、リンカーである。R^{B1}、R^{B2}、Y^{1}、Y^{2}、L^{1}、及びL^{2}の各々は、それぞれ、R^{B}、Ｙ、及びＬについて本明細書に記載されるいずれかのものであることができる。

【０２１１】

図２Ａは、アミノシラン２０６の例を示し、アミノシラン２０６は、アミン部分２１０（R^{A}として示される）及び非限定的なシラン部分２０８を有し、シラン部分２０８は、３つの潜在的な相互作用部位又は側基（X^{1}、X^{2}、及びX^{3}として示される）を有する。側基X^{1}～X^{3}は、官能基によって占有されており、官能基は、メトキシ基（－ＯＭｅ）、エトキシ基（－ＯＥｔ）、クロロ（－Ｃｌ）、ヒドロキシ基（－ＯＨ）、水素（－Ｈ）、又はアルキル基（例えば、直鎖アルキル基、例えば、$-(CH_2)_n(CH_3)$（式中、ｎは、０～１０の整数である）；又は分岐鎖アルキル基）を含むが、これらに限定されない。官能基の尚他の例としては、本明細書に記載されるいずれかの反応性又は脱離基が挙げられ得る。Ｘについての官能基の非限定的な例としては、ハロ、並びに任意選択で置換された脂肪族、アルキル、アルコキシ、アルカノイルオキシ、ヘテロ脂肪族、ヘテロアルキル、芳香族、アリール、アリールオキシなどが挙げられ得る。

【０２１２】

いくつかの実施形態において、１つのアミノシランのアミン部分２１０（例えば、アミン基であることができるもの）は、隣接するアミノシランの側基２０８のうちの１つ以上と相互作用することができる。代替として、アミン部分２１０は、他の側基と相互作用しなくてもよい。尚別の実施形態において、アミン部分２０１は、他の基、部分、又は化合物（例えば、別の化合物、例えば、ポリアミン又は別のタイプのアミノシランにおいて存在するもの）と相互作用し得る。いくつかの実施形態において、アミノシラン２０８のアミン部分２１０（例えば、アミン基であることができるもの）は、ポリアミンと相互作用することができる。

【０２１３】

任意選択で、更なるリンカーが、アミノシラン化合物のアミン部分とシラン部分との間に存在することができる。例えば、リンカーは、アミン部分２１０とシラン部分２０８との間に存在することができる。いくつかの実施形態において、アミノシランは、$R^{A}-L-SiX^{1}X^{2}X^{3}$を含むことができ、式中、$R^{A}$は、アミン部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であり、Ｌは、リンカー（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であり、X^{1}、X^{2}、及びX^{3}の各々は、側基、反応性基、又は脱離基（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）である。

【０２１４】

アミノシラン２０６は、これらの官能基、例えば、アミン部分２１０及び側基２０８（例えば、側基X^{1}、側基X^{2}、又は側基X^{3}を含むことができるもの）のいずれかの組み合わせを有することができ、少なくとも１つのアミン部分２１０と、シロキサン結合（例えば、Ｓｉ－Ｏ又はＳｉ－Ｏ－Ｓｉ連結）を形成することが可能である少なくとも１つの側基２０８（例えば、－ＯＭｅ、－ＯＥｔ、－Ｃｌ、－ＯＨ、－Ｈ、アルキル、又は本明細書に記載される他のもの）と、を有しなければならない。図２Ｂは、３－アミノプロピル基の非限定的な例であり、いくつかの例において、この基は、１つ以上の側基２０８（例えば、X^{1}、X^{2}、及びX^{3}のうちの１つ以上）又はアミン部分２１０として機能する。図２Ｃは、Ｎ－（２－アミノエチル）－３－アミノプロピル基の例であり、いくつかの例において、この基は、１つ以上のアミン部分２１０として機能する。

【０２１５】
非限定的な例として、図２Ｄ～２Ｇは、側基及びアミン部分を有するアミノシランの例を示す。いくつかの実施形態において、アミノシランは、$R^A(Ak)_cSi(OAk)_d$の式を有するアルキルアルコキシアミノシランであり、式中、ｃ及びｄの各々は、１又は２であることができ、R^Aは、アミン部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であり、Ａｋの各々は、独立して、任意選択で置換されたアルキルである。アルキルアルコキシアミノシランの非限定的な例としては、３－アミノプロピル（ジエトキシ）メチルシラン（図２Ｄ）及び３－（エトキシジメチルシリル）プロピルアミン（図２Ｅ）が挙げられる。

【０２１６】
いくつかの実施形態において、アミノシランは、$(HO)_3SiR^A$の式を有するアミノシラントリオールであり、式中、R^Aは、アミン部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）である。アミノシラントリオールの非限定的な例は、（３－（（２－アミノエチル）アミノ）プロピル）シラントリオール（図２Ｆ）である。

【０２１７】
いくつかの実施形態において、アミノシランは、$(R^A)_3SiX$の式を有するハロアミノシランであり、式中、各R^Aは、独立して、アミン部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であり、Ｘは、ハロ（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）である。ハロアミノシランの非限定的な例としては、トリス（ジメチルアミノ）クロロシラン（図２Ｇ）、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシランなどが挙げられる。

【０２１８】
アミノシランの他の非限定的な例としては、（３－アミノプロピル）トリメトキシシラン、（３－アミノプロピル）トリエトキシシラン、３－アミノプロピル（ジエトキシ）メチルシラン、［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシラン、Ｎ－（２－アミノエチル）－３－アミノプロピルシラントリオール、Ｎ－［３－（トリメトキシシリル）プロピル］エチレンジアミン、Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミン、３－アミノプロピルシラントリオール、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシラン、トリス（ジメチルアミノ）クロロシラン、ビス（３－（メチルアミノ）プロピル）トリメトキシシラン、ビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミン、Ｎ－［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アニリン、（Ｎ，Ｎ－ジメチルアミノプロピル）トリメトキシシラン、又はアミノシランオリゴマー（例えば、Ｅｖｏｎｉｋ　Ｉｎｄｕｓｔｒｉｅｓ　ＡＧ、Ｅｓｓｅｎ，Ｇｅｒｍａｎｙからの修飾された有機官能性ポリシロキサンであるＶＰＳ　ＳＩＶＯ　２８０）が挙げられる。

【０２１９】
ｂ．シラン
本明細書で使用される場合、シラン化合物は、$-SiR^{S1}R^{S2}R^{S3}$部分又は$-SiR^{S1}R^{S2}-$部分を有するいずれかのものを含むことができ、式中、R^{S1}、R^{S2}、及びR^{S3}の各々は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる。いくつかの実施形態において、R^{S1}、R^{S2}、及びR^{S3}の各々は、独立して、Ｈ、任意選択で置換された脂肪族、アルキル、ヘテロ脂肪族、ヘテロアルキル、芳香族、アリール、アミン、若しくは本明細書に記載される他のものであるか、又はR^{S1}及びR^{S2}は、各々が付着しているケイ素原子と一緒になって、ヘテロシクリル基を形成する。いくつかの実施形態において、R^{S1}、R^{S2}、及びR^{S3}の各々は、独立して、水素（Ｈ）、ハロ（例えば、Ｆ、Ｃｌ、Ｂｒ、又はＩ）、ヒドロキシ（例えば、－ＯＨ）、任意選択で置換されたアルキル、任意選択で置換されたアミノアルキル、任意選択で置換されたヒドロキシアルキル、任意選択で置換されたアルコキシ（例えば、－ＯＲであり、式中、Ｒは、任意選択で置換されたアルキルである）、任意選択で置換されたアリール、任意選択で置換されたアリールオキシ（例えば、－ＯＲであり、式中、Ｒは、任意選択で置換されたアリールである）、トリアルキルシリルオキシ（例えば、$-OSiR^3$であり、式中、各Ｒは、独立して、任意選択で置換されたアルキルである）、又はトリアルコキシルシリルオキシ

（例えば、－ＯＳｉ［ＯＲ］$_3$であり、式中、各Ｒは、独立して、任意選択で置換されたアルキルである）である。

【０２２０】

いくつかの実施形態において、シランは、１つ以上のアミノ部分、例えば、アミノシラン化合物（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）におけるものを含むことができる。

【０２２１】

いくつかの実施形態において、シランは、アミノ部分を含まない。非限定的な一例において、シランは、式（ＩＶ）、

$$[R^{C1}]_aSi[X]_{4-a} \quad (IV)$$

を有する構造を含み、式中、各R^{C1}は、アミノを含まず、各Ｘは、独立して、側基、反応性基、又は脱離基（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であり、ａは、１～４の整数である。

【０２２２】

いくつかの実施形態において、R^{C1}は、任意選択で置換された脂肪族、ヘテロ脂肪族、アルキル、芳香族、ヘテロ芳香族、又はアリールであり、任意選択の置換基は、アミノ（例えば、本明細書に定義されるもの）でない。いくつかの実施形態において、R^{C1}は、分岐鎖の任意選択で置換された脂肪族、ヘテロ脂肪族、アルキル、芳香族、ヘテロ芳香族、又はアリールである。いくつかの実施形態において、R^{C1}は、疎水性基（例えば、任意選択で置換された$C_{4\sim30}$脂肪族、ヘテロ脂肪族、アルキル、ペルフルオロアルキル、シクロアルキル、芳香族、ヘテロ芳香族、又はアリール）である。疎水性基の非限定的な例としては、任意選択で置換された$C_{4\sim24}$、$C_{6\sim24}$、$C_{8\sim24}$、$C_{4\sim18}$、$C_{6\sim18}$、$C_{8\sim18}$アルキル、ハロアルキル、ペルフルオロアルキル、シクロアルキルなど（例えば、ヘキシル、オクチル、ノニル、デシル、ドデシル、ペルフルオロヘキシル、ペルフルオロオクチル、シクロヘキシル、及びシクロペンチル）が挙げられる。

【０２２３】

いくつかの実施形態において、シランは、式（ＩＶａ）、

$$[X]_3Si-L-Si[X]_3 \quad (IVa)$$

を有する構造を含み、式中、Ｌは、リンカー（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であり、各Ｘは、独立して、側基、反応性基、又は脱離基（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）である。

【０２２４】

リンカーの例としては、例えば、共有結合、原子（例えば、カルボニル、オキシ、チオ、イミノなど）、任意選択で置換されたアルキレン、任意選択で置換されたヘテロアルキレン、任意選択で置換されたアリーレン、又は任意選択で置換されたヘテロアリーレンが挙げられる。リンカーの他の例としては、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、Ｌ、L^1、L^2、及びL^3について本明細書に記載されるもの）が挙げられる。

【０２２５】

シランは、反応性基、脱離基、又は別の基（例えば、Ｘ）を含むことができる。そのような基の非限定的な例としては、水素（Ｈ）、ハロ（例えば、Ｆ、Ｃｌ、Ｂｒ、又はＩ）、ヒドロキシ（例えば、－ＯＨ）、任意選択で置換されたアルキル、任意選択で置換されたアミノアルキル、任意選択で置換されたヒドロキシアルキル、任意選択で置換されたアルコキシ（例えば、－ＯＲであり、式中、Ｒは、任意選択で置換されたアルキルである）、任意選択で置換されたアリール、任意選択で置換されたアリールオキシ（例えば、－ＯＲであり、式中、Ｒは、任意選択で置換されたアリールである）、任意選択で置換されたアルカノイルオキシ、トリアルキルシリルオキシ（例えば、－ＯＳｉR^3であり、式中、各Ｒは、独立して、任意選択で置換されたアルキルである）、又はトリアルコキシルシリルオキシ（例えば、－ＯＳｉ［ＯＲ］$_3$であり、式中、各Ｒは、独立して、任意選択で置換されたアルキルである）が挙げられる。いくつかの実施形態において、Ｘは、独立して、Ｈ、任意選択で置換された脂肪族、任意選択で置換されたヘテロ脂肪族、任意選択で置

換された芳香族、又は任意選択で置換されたヘテロ芳香族である。

【０２２６】

いくつかの実施形態において、シランは、本明細書におけるいずれかの組成物又は使用のための（例えば、いずれかのコーティング、表面官能化層、官能化混合物、事前官能化混合物などのための）架橋剤又は添加剤として用いられ得る。シランの非限定的な例としては、１，２－ビス（トリエトキシシリル）エタン（ＢＴＥＳＥ）又は１，２－ビス（トリメトキシシリル）エタン（ＢＴＭＥ）が挙げられる。

【０２２７】

ｃ．ポリアミン

本明細書に記載されるように、官能部分は、いずれかの有用な化合物又は化合物の組み合わせによって提供され得る。いくつかの実施形態において、化合物は、ポリアミンである。ポリアミンは、２つ以上のアミン部分を有するいずれかの化合物又は部分を含むことができる。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、非ポリマー化合物であり、ポリアミンは、反復単位を含まない。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、ポリマー化合物（例えば、ポリマーポリアミンにおけるもの）である。他の実施形態において、ポリアミンは、オリゴマー化合物（例えば、オリゴマーポリアミンにおけるもの）である。別途指定されない限り、化合物の「ポリマー」及び「オリゴマー」形態に関する考察は、互換的に適用され得る。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、二量体、三量体、四量体、五量体、六量体、及びより高次のアミンを含むことができる。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、小分子ポリアミン（例えば、１００～８００ｇ／ｍｏｌのＭＷを有するもの）を含むことができる。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、大分子ポリアミン（例えば、８００ｇ／ｍｏｌ超のＭＷを有するもの）を含むことができる。

【０２２８】

ポリアミンは、単独で使用されてもよく、又は他の化合物（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの、例えば、アミノシランなど）とともに使用されてもよい。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、アミノシランの存在下で使用され得る。いくつかの実施形態において、第１のポリアミン（例えば、高ＭＷを有するもの、例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）は、第２のポリアミン（例えば、低ＭＷを有するもの、例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）の存在下で使用され得る。

【０２２９】

いくつかの実施形態において、高ＭＷは、３００ダルトン（Ｄａ）、４００Ｄａ、５００Ｄａ、若しくは６００Ｄａ超、又は３００～１，０００，０００Ｄａ（例えば、３００～９０００００Ｄａ、３００～８０００００Ｄａ、３００～７０００００Ｄａ、３００～６０００００Ｄａ、３００～５０００００Ｄａ、３００～４０００００Ｄａ、３００～３０００００Ｄａ、３００～２０００００Ｄａ、３００～１０００００Ｄａ、３００～９００００Ｄａ、３００～８００００Ｄａ、３００～７００００Ｄａ、３００～６００００Ｄａ、３００～５００００Ｄａ、３００～４００００Ｄａ、３００～３００００Ｄａ、３００～２００００Ｄａ、３００～１００００Ｄａ、３００～９０００Ｄａ、３００～８０００Ｄａ、３００～７０００Ｄａ、３００～６０００Ｄａ、３００～５０００Ｄａ、３００～４０００Ｄａ、３００～３０００Ｄａ、３００～２０００Ｄａ、３００～１０００Ｄａ、５００～１０００００Ｄａ、５００～９００００Ｄａ、５００～８００００Ｄａ、５００～７００００Ｄａ、５００～６００００Ｄａ、５００～５００００Ｄａ、５００～４００００Ｄａ、５００～３００００Ｄａ、５００～２００００Ｄａ、５００～１００００Ｄａ、５００～９０００Ｄａ、５００～８０００Ｄａ、５００～７０００Ｄａ、５００～６０００Ｄａ、５００～５０００Ｄａ、５００～４０００Ｄａ、５００～３０００Ｄａ、５００～２０００Ｄａ、５００～１０００Ｄａ、７００～１０００００Ｄａ、７００～９００

０００Ｄａ、７００～８０００００Ｄａ、７００～７０００００Ｄａ、７００～６０００００Ｄａ、７００～５０００００Ｄａ、７００～４０００００Ｄａ、７００～３０００００Ｄａ、７００～２０００００Ｄａ、７００～１０００００Ｄａ、７００～９００００Ｄａ、７００～８００００Ｄａ、７００～７００００Ｄａ、７００～６００００Ｄａ、７００～５００００Ｄａ、７００～４００００Ｄａ、７００～３００００Ｄａ、７００～２００００Ｄａ、７００～１００００Ｄａ、７００～９０００Ｄａ、７００～８０００Ｄａ、７００～７０００Ｄａ、７００～６０００Ｄａ、７００～５０００Ｄａ、７００～４０００Ｄａ、７００～３０００Ｄａ、７００～２０００Ｄａ、８００～１０００００Ｄａ、８００～９００００Ｄａ、８００～８００００Ｄａ、８００～７００００Ｄａ、８００～６００００Ｄａ、８００～５００００Ｄａ、８００～４００００Ｄａ、８００～３００００Ｄａ、８００～２００００Ｄａ、８００～１００００Ｄａ、８００～９０００Ｄａ、８００～８０００Ｄａ、８００～７０００Ｄａ、８００～６０００Ｄａ、８００～５０００Ｄａ、８００～４０００Ｄａ、８００～３０００Ｄａ、８００～２０００Ｄａ、又は８００～１０００Ｄａ）の範囲の重量平均分子量（M_w）又は数平均分子量（M_n）を含むことができる。高ＭＷポリアミンは、直鎖又は分岐鎖形態を含むことができる。高ＭＷポリアミンは、複数の一級アミン部分及び／又は複数の二級アミン部分を含むことができる。いくつかの実施形態において、高ＭＷポリアミンは、ポリマー形態において提供される。

【０２３０】

いくつかの実施形態において、低ＭＷは、３００Ｄａ未満、３０～３００Ｄａの範囲、１００～８００Ｄａの範囲、又はそれらの間の範囲（例えば、３０～８００Ｄａ、３０～７００Ｄａ、３０～５００Ｄａ、３０～２００Ｄａ、３０～１００Ｄａ、５０～８００Ｄａ、５０～７００Ｄａ、５０～６００Ｄａ、５０～５００Ｄａ、１００～７００Ｄａ、１００～６００Ｄａ、１００～５００Ｄａ、１００～４００Ｄａ、１００～３００Ｄａ、１５０～８００Ｄａ、１５０～７００Ｄａ、１５０～６００Ｄａ、１５０～５００Ｄａ、１５０～４００Ｄａ、１５０～３００Ｄａ、２００～８００Ｄａ、及び３００～８００Ｄａ）の重量平均分子量（M_w）又は数平均分子量（M_n）を含むことができる。低ＭＷポリアミン（例えば、オリゴマーアミンであると考えられ得るもの）は、直鎖又は分岐鎖形態を含むことができる。低ＭＷポリアミンは、複数の一級アミン部分及び／又は複数の二級アミン部分を含むことができる。いくつかの実施形態において、低ＭＷポリアミンは、オリゴマー形態において提供される。

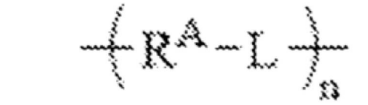
【０２３１】

機構によって制限されることを望むことなく、高ＭＷアミンは、それらのより低い揮発性（例えば、低ＭＷアミンと比較して）のために有用であり得る。より高いＭＷのポリアミンは、より高い粘度によって特徴付けされ得、これは、取り扱いをより困難し得る。より高いＭＷのポリアミンは、概して、より高価である。いくつかの非限定的な実施形態において、高い相対濃度の一級及び二級アミン部分を有するポリアミンが用いられ得る。いくつかの非限定的な実施形態において、三級アミン部分は、ＤＡＣ用途のためのより低い性能によって特徴付けられ得、あまり望まれない。二級アミンは、より長い動作寿命に等しいより高い酸化抵抗性を有する。一級アミンは、低いCO_2濃度（ＤＡＣ条件）でのより高い性能に等しいより高い反応性を有する。

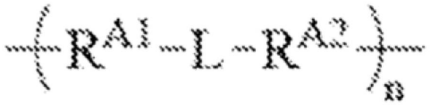
【０２３２】

ポリアミンは、いずれかの有用な構造を有することができる。非限定的な一例において、ポリアミンは、式（ＩＩＩａ）～（ＩＩＩｉ）、

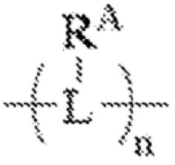
【化１】



（ＩＩＩａ）



（ＩＩＩｂ）



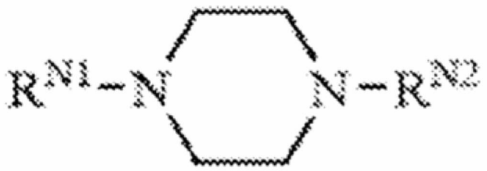
（ＩＩＩｃ）

$$R^{A1}-[L^{1}-R^{A2}]_{n1}-L^{2}-R^{A3} \quad (IIId)$$

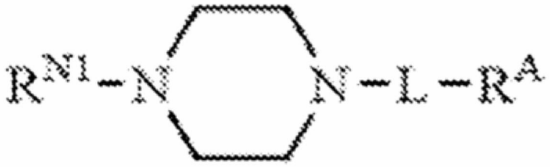
$$R^{N1}R^{N2}N-[L^{1}-NR^{N3}]_{n1}-L^{2}-NR^{N4}R^{N5} \quad (IIIe)$$

$$R^{N1}R^{N2}N-[L^{1}-NR^{N3}]_{n1}-L^{2}-R^{C} \quad (IIIf)$$

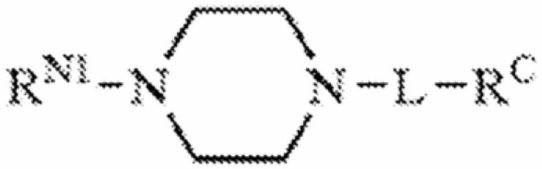
【化２】



（ＩＩＩｇ）



（ＩＩＩｈ）又は



（ＩＩＩｉ）

を有する構造を含み、式中、各R^{A}、R^{A1}、R^{A2}、及びR^{A3}は、独立して、少なくとも１つのアミン基を含むアミン部分であり、各Ｌ、L^{1}、又はL^{2}は、独立して、リンカーであり、R^{N1}、R^{N2}、R^{N3}、R^{N4}、及びR^{N5}の各々は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができ、任意選択で、R^{N1}及びR^{N2}は、各々が付着している窒素原子と一緒になって、本明細書に定義されるヘテロシクリル基を形成してもよく、又は任意選択で、R^{N4}及びR^{N5}は、各々が付着している窒素原子と一緒になって、本明細書に定義されるヘテロシクリル基を形成してもよく、R^{C}は、水素（Ｈ）、ハロ、ヒドロキシ、アミノ（例えば、－$NR^{N1}R^{N2}$）、任意選択で置換された脂肪族、ヘテロ脂肪族、アルキル、ヒドロキシアルキル、芳香族、ヘテロ芳香族、又はアリールであり、ｎは、１超（例えば、１～２５０００、１～２４０００、１～２３０００、１～２２０００、１～２１０００、１～２００００、１～１９０００、１～１８０００、１～１７０００、１～１６０００、１～１５０００、１～１４０００、１～１３０００、１～１２０００、１～１１０００、１～１００００、１～７５００、１～５０００、１～４０００、１～３０００、１～２０００、１～１０００、１～５００、１～１００、１～５０、１～２０、１～１０、１～５、２～２５０００、２～２４０００、２～２３０００、２～２２

０００、２～２１０００、２～２００００、２～１９０００、２～１８０００、２～１７０００、２～１６０００、２～１５０００、２～１４０００、２～１３０００、２～１２０００、２～１１０００、２～１００００、２～７５００、２～５０００、２～４０００、２～３０００、２～２０００、２～１０００、２～５００、２～１００、２～５０、２～２０、２～１０、２～５、５～２５０００、５～２４０００、５～２３０００、５～２２０００、５～２１０００、５～２００００、５～１９０００、５～１８０００、５～１７０００、５～１６０００、５～１５０００、５～１４０００、５～１３０００、５～１２０００、５～１１０００、５～１００００、５～７５００、５～５０００、５～４０００、５～３０００、５～２０００、５～１０００、５～５００、５～１００、５～５０、５～２０、５～１０、及びそれらの間の範囲）の整数であり、ｎ１は、１以上（例えば、１～１０００、１～１００、１～５０、１～２０、１～１０、５～１０００、５～１００、５～５０、５～２０、５～１０、及びそれらの間の範囲）の整数である。R^{A}、R^{A1}、及びR^{A2}は、本明細書に記載されるいずれかのアミン部分であることができ、Ｌ、L^{1}、及びL^{2}は、本明細書に記載されるいずれかのリンカーであることができ、R^{N1}、R^{N2}、R^{N3}、R^{N4}、及びR^{N5}の各々は、R^{N1}又はR^{N2}について本明細書に記載されるいずれかのものであることができる。

【０２３３】

いくつかの実施形態において、R^{A}、R^{A1}、R^{A2}、又はR^{A3}は、－ＮＨ－、－NR^{N1}－、－Ｎ（－L^{1}－$NR^{N1}R^{N2}$）－、－Ｎ（－L^{2}－NR^{N3}－L^{1}－$NR^{N1}R^{N2}$）－、－Ｎ［－L^{2}－Ｎ（－L^{1}－$NR^{N1}R^{N2}$）$_2$］－、－NH_2、－$NR^{N1}R^{N2}$、－L^{1}－$NR^{N1}R^{N2}$、－NR^{N3}－L^{1}－$NR^{N1}R^{N2}$、－L^{2}－NR^{N3}－L^{1}－$NR^{N1}R^{N2}$、若しくは－NR^{N4}－L^{2}－NR^{N3}－L^{1}－$NR^{N1}R^{N2}$であるか、又はそれを含み、式中、R^{N1}及びR^{N2}の各々は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができ、R^{N3}及びR^{N4}の各々は、R^{N1}及びR^{N2}について本明細書に記載されるいずれかのものであることができ、L^{1}又はL^{2}の各々は、独立して、リンカーである。

【０２３４】

リンカー（例えば、L^{1}、L^{2}、又はＬについて）の例としては、例えば、共有結合、原子（例えば、カルボニル、オキシ、チオ、イミノなど）、任意選択で置換されたアルキレン、任意選択で置換されたヘテロアルキレン、任意選択で置換されたアリーレン、又は任意選択で置換されたヘテロアリーレンが挙げられる。いくつかの実施形態において、リンカーは、アミン部分R^{A}が付着することができる骨格として用いられ得るモノマー又はポリマーである。代替として、ポリマー自体の骨格はまた、アミン部分を含むことができる。モノマーの非限定的な例としては、糖（例えば、グルコサミン、Ｎ－アセチル－グルコサミン、グルコースなど）、アミノ酸（例えば、リジン）、アルキレン、アルケニレン、アリーレンなどが挙げられる。ポリマーの非限定的な例としては、多糖（例えば、キトサン、キチンなど）、ポリペプチド（例えば、ポリ（リジン））、ビニルポリマーなどが挙げられる。

【０２３５】

ポリアミンの更なる非限定的な例としては、ポリ（リジン）（例えば、ポリ（Ｌ－リジン）、ポリ（Ｄ－リジン）、又はポリ（ＬＤ－リジン））、ポリ（エチレンイミン）、ポリ（プロピレンイミン）、ポリ（ビニルアミン）、ポリ（Ｎ－メチルビニルアミン）、ポリ（アリルアミン）、ポリ（Ｎ－イソプロピルアクリルアミド）、ポリ（４－アミノスチレン）、キトサン、スペルミジン、スペルミン、ノルスペルミン、プトレシン、カダベリン、テトラエチレンペンタミン（ＴＥＰＡ）、トリエチレンテトラミン（ＴＥＴＡ）、エチレンアミン／オリゴマー混合物（例えば、ＣＡＳ番号６８９１０－０５－４を有するＡｍｉｘ　１０００）、ジエチレントリアミン（ＤＥＴＡ）、２－（２－アミノエチルアミノ）エタノール、エチレンジアミン、ピペラジン、２－ピペラジン－１－イルエチルアミン、２－ピペラジン－１－イルエタノール、ペンタエチレンヘキサミン、テトラメチルエチレンジアミン、並びにそれらの塩、及び／又はそれらのコポリマー、及び／又はそれら

の混合物が挙げられる。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、スペルミジン、スペルミン、ノルスペルミン、プトレシン、カダベリン、テトラエチレンペンタミン（ＴＥＰＡ）、トリエチレンテトラミン（ＴＥＴＡ）、エタノールアミン、ジエチレントリアミン（ＤＥＴＡ）、ピペラジン、２－ピペラジン－１－イルエチルアミン、２－ピペラジン－１－イルエタノール、ペンタエチレンヘキサミン、テトラメチルエチレンジアミン、及びそれらのポリマー形態を含む。いくつかの実施形態において、エチレンアミン／オリゴマー混合物は、以下、２－（２－アミノエチルアミノ）エタノール、トリエンチン又はＴＥＴＡ、２，２’－イミノジ（エチルアミン）又はＤＥＴＡ、２－アミノエタノール、エチレンジアミン、ピペラジン、２－ピペラジン－１－イルエチルアミン、及び２－ピペラジン－１－イルエタノールのうちの１つ以上を含む。

【０２３６】

いくつかの実施形態において、ポリアミンは、$H_2N[CH_2CH_2NH]_nH$を含み、式中、ｎは、１以上（例えば、１、２、３、４、５、６、７、８、９、１０、又はそれ以上）の整数である。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、$H_2N[-L-NH-]_nH$又は$N[-L-NH_2]_3$を含み、式中、各Ｌは、独立して、リンカー（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの、例えば、任意選択で置換されたアルキレン）であり、ｎは、１以上の整数である。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、$H_2N[CH_2CH_2CH_2NH]_nH$を含み、式中、ｎは、１以上（例えば、１、２、３、４、５、６、７、８、９、１０、又はそれ以上）の整数である。

【０２３７】

いくつかの実施形態において、ポリアミンは、エチレンイミンのオリゴマー又はポリマー形態を含む。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、$-[CH_2CH_2NH]_n-$を含み、式中、ｎは、１以上（例えば、１、２、３、４、５、６、７、８、９、１０、又はそれ以上）の整数である。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、$-[CH_2CH_2NR^A]_n-$を含み、式中、R^Aは、アミン部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であり、ｎは、１以上（例えば、１、２、３、４、５、６、７、８、９、１０、又はそれ以上）の整数である。いくつかの非限定的な実施形態において、R^Aは、$-Ak-NR^{N1}R^{N2}$、又は$-Ak-N(-Ak-NR^{N1}R^{N2})_2$、又は$-Ak-NR^{N1}-Ak-NR^{N2}R^{N3}$であり、式中、Ａｋは、任意選択で置換されたアルキレンであり、R^{N1}、R^{N2}、及びR^{N3}の各々は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる。

【０２３８】

図２Ｈ～２Ｋは、ポリアミンを提供することができるポリアミン鎖の非限定的な一般的な例を提供する。図２Ｈ及び２Ｉのポリアミンは、アミン基（例えば、$-NH-$、$-NR^{N1}-$、$-NH_2$、又は$-NR^{N1}R^{N2}$）及びリンカーから構成された反復単位を含む。いくつかの例において、リンカーは、炭素脂肪族$-(CH_2)_n-$スペーサー基であることができ、式中、ｎは、１超の整数（例えば、１～２０、１～１０、１～１２、１～６などの整数）である。図２Ｈは、ｎ－プロピレン（$-CH_2CH_2CH_2-$）（C_3H_6）スペーサー基を示す。図２Ｉは、エチレン（$-CH_2CH_2-$）（C_2H_4）スペーサー基を示す。ポリアミンは、反復鎖部分（括弧内）を有し、反復鎖部分は、ｎの長さの活性基を、ポリマーの鎖部分において有する（例えば、ｎ＝２である場合、２つの反復基が、鎖部分においてある）。他のリンカー、例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、本明細書に記載される任意選択で置換されたアルキレン）、及びペプチド結合（例えば、$-C(O)NH-$）又はグリコシド連結を有するリンカーが使用され得る。リンカーは、ペプチド、多糖などを含むことができる。更に、ポリアミンは、直鎖又は分岐鎖構造、例えば、直鎖ポリマー、分岐鎖ポリマー、ブロックポリマー、又はデンドリマーにおいて存在するものを含むことができる。

【０２３９】

図２Ｈ～２Ｉは、ｎの長さの活性基を反復鎖部分において有するポリアミンを示す。図２Ｈ～２Ｉはまた、反復鎖部分を示し、反復鎖部分は、C_3（図２Ｈ）又はC_2（図２Ｉ

）スペーサー基のいずれかによって分離された２つの非限定的なアミン基（－Ｎ（Ｘ）－）を含む。ＮＸにおいて、Ｘは、いずれかの側基、反応性基、脱離基、又は本明細書に記載される他の基であることができる。例えば、Ｘは、Ｈ、任意選択で置換された脂肪族、ヘテロ脂肪族、芳香族などであることができる。更に、Ｘは、更なるアミン基を含むことができる。したがって、いくつかの非限定的な実施形態において、Ｘは、本明細書に記載されるいずれかのＲ^{A}基（例えば、アミノアルキル基、アルキルアミノアルキル基など）を含むことができる。図２Ｉは、異なる向きに炭素鎖から延びるアミン基を示し、図２Ｈは、同様の向きに延びるアミン基を示す。

【０２４０】

ポリアミンは、アミン部分を有する天然ポリマーに由来することができる。例えば、図２Ｊは、ポリ（リジン）の例であり、図２Ｋは、天然キトサンの例である。

【０２４１】

ポリアミンにおいて存在するアミン部分は、基質の表面に対して近位に存在する他の部分、基、又は化合物と相互作用することができる。いくつかの実施形態において、ポリアミンのアミン部分は、アミノシランにおいて存在するシラン部分（例えば、シラノール基又は他の基）と相互作用することができる。他の実施形態において、ポリアミンのアミン部分は、表面に対して近位に存在する他のポリアミン、アミノシラン、又は他の基の部分と相互作用することができる。そのような相互作用は、ネットワークを基質の表面の上に形成するための共有結合又は非共有結合相互作用（例えば、水素結合、イオン相互作用、及び／又は本明細書に記載される他のもの）を含むことができる。

【０２４２】

いくつかの例において、ポリアミンは、ポリマー／オリゴマーアミン、又はポリマー／オリゴマーアミンを含む混合物、例えば、ポリ（エチレンイミン）（ＰＥＩ）、ポリ（プロピレンイミン）（ＰＰＩ）、又は複数のアミン混合物（例えば、複数のアミン（例えば、ポリアミン及び／又はモノアミン）を含む混合物、例えば、ＢＡＳＦ　ＳＥ、Ｌｕｄｗｉｇｓｈａｆｅｎ，Ｇｅｒｍａｎｙによって製造されているＡｍｉｘ　１０００、ＣＡＳ番号６８９１０－０５－４）であることができる。いくつかの例において、ポリアミンは、アミン部分を含む小分子（例えば、小分子アミン）、アミン部分を含むオリゴマー（例えば、オリゴマーアミン）、又はエチレンアミン部分を含むオリゴマー（例えば、オリゴマーエチレンアミン）であり、例えば、テトラエチレンペンタミン（ＴＥＰＡ）、トリエチレンテトラミン（ＴＥＴＡ）、ジエチレントリアミン（ＤＥＴＡ）、エチレンジアミン、モノエタノールアミンのポリマー若しくはオリゴマー、ジエタノールアミンのポリマー若しくはオリゴマー、トリエタノールアミンのポリマー若しくはオリゴマー、２－（２－アミノエチルアミノ）エタノール、ピペラジン、２－ピペラジン－１－イルエチルアミン、２－ピペラジン－１－イルエタノール、ペンタエチレンヘキサミン、テトラメチルエチレンジアミン、又は本明細書に記載される他のものである。

【０２４３】

いくつかの実施形態において、ポリアミンは、小分子ポリアミンである。いくつかの実施形態において、小分子ポリアミンは、化合物が高い揮発性に起因して失われないのに十分に高い沸点によって特徴付けられる。いくつかの実施形態において、小分子ポリアミンは、少なくとも１７０℃の沸点を有する。いくつかの例において、これらの化合物は、代替物と比較して低減された化合物コストを有する。

【０２４４】

いくつかの実施形態において、本明細書に記載される１つ以上のアミンの混合物（例えば、アミノシラン、ポリアミン、例えば、高分子量ポリアミン若しくは小分子ポリアミン、及び／又はモノアミン）が用いられ、そのようなアミンの存在は、ポリマー又はオリゴマーを提供する。いくつかの実施形態において、混合物は、アルコール（例えば、ＲＯＨであり、式中、Ｒは、任意選択で置換された脂肪族、アルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロ脂肪族、ヘテロアルキル、芳香族、又はアリールである）を更に含むことができる。

【０２４５】

ｄ．モノアミン

本明細書に記載されるように、官能部分は、いずれかの有用な化合物又は化合物の組み合わせによって提供され得る。いくつかの実施形態において、化合物は、モノアミンである。モノアミンは、１つのアミン基を有するいずれかの化合物又は部分（例えば、－ＮＲ^{Ｎ１}Ｒ^{Ｎ２}であり、式中、Ｒ^{Ｎ１}及びＲ^{Ｎ２}は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる）を含むことができる。アミン基は、リンカー（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）に付着し得る。

【０２４６】

ある特定の実施形態において、モノアミンは、基質に提供されて、相互作用部分又は吸着部分として作用し得る。

【０２４７】

いくつかの実施形態において、モノアミンは、１つのアミン基を有するアミノシランを含むことができる。モノアミン化合物の他の例としては、アルカノールアミン（例えば、ＨＯ－Ａｋ－ＮＲ^{Ｎ１}Ｒ^{Ｎ２}であり、式中、Ａｋは、任意選択で置換されたアルキレンであり、Ｒ^{Ｎ１}及びＲ^{Ｎ２}の各々は、本明細書に記載されるいずれかのもの、例えば、モノエタノールアミンであることができる）、又はアルキルアミン（例えば、Ａｋ－ＮＲ^{Ｎ１}Ｒ^{Ｎ２}であり、式中、Ａｋは、任意選択で置換されたアルキルであり、Ｒ^{Ｎ１}及びＲ^{Ｎ２}の各々は、本明細書に記載されるいずれかのもの、例えば、エチルアミン又はヘキシルアミンであることができる）などが挙げられる。いくつかの実施形態において、モノアミンは、式Ｒ^{Ｃ１}Ｎ^{Ｒ１}Ｒ^{Ｎ２}の構造を有する化合物であり、式中、Ｒ^{Ｎ１}及びＲ^{Ｎ２}の各々は、本明細書に記載されるいずれかのものであることができ、Ｒ^{Ｃ１}は、任意選択で置換された脂肪族、ヘテロ脂肪族、アルキル、芳香族、ヘテロ芳香族、若しくはアリールであり、任意選択の置換基は、本明細書に定義されるアミノでないか、又はＲ^{Ｃ１}は、本明細書に定義されるアミノを含まない。

【０２４８】

ｉｉｉ．部分、基、又は化合物の相互作用

部分、基、又は化合物のいずれかの組み合わせが、官能部分を提供するために使用され得る。いくつかの実施形態において、官能部分は、コーティング又は表面修飾層として提供され、次いで、コーティング又は表面修飾層は、１つ以上のシラン、アミノシラン、ポリマー／オリゴマーアミン、モノアミン、及び／又は基質（例えば、シリカ基質）の表面間の相互作用の複合ネットワークから形成され得る。

【０２４９】

いくつかの実施形態において、相互作用は、基質の表面とシラン部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのシラン、アミノシラン、ポリマーシラン、又はポリマーアミノシランにおいて存在するもの）との間に形成され得る。シラン部分が（ポリ）アミノシランによって提供される事例において、シリカ表面上のシラノール部分は、シラン部分と反応して、シロキサン連結を形成し得、シロキサン連結は、共有結合の非限定的な例である。そのようなシラノール部分は、酸性であることができ、（ポリ）アミノシランの塩基性アミン部分によって脱プロトン化されて、酸塩基対を形成し得、酸塩基対は、イオン相互作用の非限定的な例である。シラノール部分（シリカ上のもの）、並びにシラノール及びアミン部分（（ポリ）アミノシラン上のもの）は、様々な水素結合相互作用を（例えば、水素結合によって）形成し得る。大きいポリマーシランの場合、これらの相互作用の合計は、有意であり得る。シリカ及び（ポリ）シランは、極性であることができ、弱い双極子－双極子相互作用を有し得る。大きいポリマーシランの場合、これらの相互作用の合計は、有意であり得る。

【０２５０】

いくつかの実施形態において、相互作用は、基質の表面とアミン部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのアミノシラン、ポリアミン、又はモノアミンにおいて存在するもの）との間に形成され得る。アミン部分がポリアミンによって提供される事例において、シリカ表面上のシラノール部分は、酸性であることができ、ポリアミンの塩基性アミン

部分によって脱プロトン化されて、酸塩基対を形成し得、酸塩基対は、イオン相互作用の非限定的な例である。シラノール部分（シリカ上のもの）及びアミン部分（ポリアミン上のもの）は、様々な水素結合相互作用を形成し得る。シリカ及びポリアミンは、極性であることができ、弱い双極子－双極子相互作用を有し得る。いくつかの非限定的なポリアミンの大きい分岐形状に起因して、これらの弱い相互作用の合計は、ポリアミンが、シリカ表面に接着するか、又はそうでなければ、それと相互作用するときに、有意であることができる。

【０２５１】

いくつかの実施形態において、相互作用は、基質の表面（例えば、シリカ基質の第１の表面及び第２の表面）間に形成され得る。基質がシリカを含む事例において、シリカ－シリカ相互作用は、シリカ基質の形成及び強度に寄与することができる。いくつかの実施形態において、シリカ基質は、単一のポリマー二酸化ケイ素分子から構成され得る。沈殿シリカの場合、シリカ基質は、多数の小さい核粒子（ｎｕｃｌｅｉｔｅ）から構成され得、多数の小さい核粒子は、より大きい凝集体に絡み合い、最終的に、完全な粒子に凝集し、物理的相互作用によって一緒に保持される。二酸化ケイ素は、個々のケイ素原子間のシロキサン（－Ｓｉ－Ｏ－Ｓｉ－）連結を形成することができ、そのようなシロキサン連結は、共有結合の非限定的な例である。シリカ核粒子及び凝集体は、物理的に絡み合い得、凝集して、基質粒子を形成し得、そのような絡み合い及び凝集相互作用は、物理的相互作用の非限定的な例である。シリカ核粒子及び凝集体の表面は、シラノール部分を含むことができ、シラノール部分は、粘着を促進する多くの水素結合相互作用を形成し得る。シリカ核粒子及び凝集体は、極性であることができ、粘着性双極子－双極子相互作用を形成し得る。

【０２５２】

いくつかの実施形態において、相互作用は、シラン部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのシラン、アミノシラン、又はポリマーアミノシランにおいて存在するもの）間に形成され得る。シラン部分がアルコキシシラン基又はシラノール基によって提供される事例において、シラン部分は、互いと反応して、シロキサン縮合結合を形成し得る。シリカ表面及びシランの両方は、シラノール部分を含むことができ、シラノール部分は、縮合して、シロキサン結合を形成することができる。このプロセスが、複数回繰り返されて、共有結合を有する分岐ポリシランネットワークを形成し得る。シラノール又はポリシランは、酸性シラノール部分を含むことができ、酸性シラノール部分は、塩基性アミン部分（例えば、アミノシランにおいて存在するもの）によって脱プロトン化されて、酸－塩基相互作用を形成することができ、酸－塩基相互作用は、イオン相互作用の非限定的な例である。シラノール又はポリシランは、シラノール及びアミノ部分を有することができ、シラノール及びアミノ部分は、様々な水素結合相互作用を形成することができる。大きい分岐ポリシランは、互いと物理的に絡み合うことができる。シラノール及びポリシランは、極性分子であることができ、互いとの弱い双極子－双極子相互作用を有し得る。大きい分岐ポリシランの場合、これらの弱い相互作用の合計は、有意であり得る。

【０２５３】

いくつかの実施形態において、相互作用は、アミン部分（例えば、いずれかのアミン、ポリアミン、アミノシラン、又はポリマーアミノシランにおいて存在するもの）間に形成され得る。アミン部分がポリアミンによって提供される事例において、ポリアミンは、水素結合を供与及び受容することができる様々なアミン部分を有し得る。ポリアミンは、ポリマーであることができるため、より高い数のこれらの分子間相互作用が（例えば、水素結合によって）可能である。大きいポリアミンは、互いに物理的に絡み合うことができる。ポリアミンは、極性分子であることができ、互いとのいくつかの弱い双極子－双極子相互作用を有し得る。いくつかのポリアミンにおいて存在する大きい分岐形状の場合、これらの相互作用の合計は、有意であることができる。

【０２５４】

いくつかの実施形態において、相互作用は、アミノ部分（例えば、いずれかのアミン、

ポリアミン、アミノシラン、又はポリマーアミノシランにおいて存在するもの）とシラン部分（例えば、いずれかのシラン、ポリマーシラン、アミノシラン、又はポリマーアミノシランにおいて存在するもの）との間に形成され得る。アミン部分がポリアミンによって提供される事例において、ポリアミンは、複数の塩基性アミン部分を有することができ、複数の塩基性アミン部分は、酸性シラノール部分（（ポリ）シランにおけるもの）を脱プロトン化して、酸－塩基相互作用を形成することができる。大きいポリシランと相互作用する大きいポリアミンの場合、これらの相互作用の合計は、更により有意であることができる（例えば、イオン相互作用による）。ポリアミンは、多くのアミン部分を有し得、多くのアミン部分は、シラノール部分（（ポリ）シランにおけるもの）及びアミン部分との様々な水素結合相互作用を形成することができる。大きいポリシランと相互作用する大きいポリアミンの場合、これらの相互作用の合計は、更により有意であることができる（水素結合）。ポリアミン及び（ポリ）シランは、極性分子であることができ、互いとのいくつかの弱い双極子－双極子相互作用を有することができる。大きいポリシランと相互作用する大きいポリアミンの場合、これらの相互作用の合計は、有意であることができる。

【０２５５】

ｉｖ．添加剤

添加剤が含まれ得る。いくつかの実装態様において、添加剤は、官能化された材料の動作寿命を延ばすために、官能化混合物中に含まれ得る。例えば、混合物へのビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミン（ＢＴＭＳＰＡ）の添加は、官能化された材料の動作寿命を増加させることができる。ＢＴＭＳＰＡは、２つの末端を有するアミノシランであり、各末端は、トリメトキシシリル反応性基を有する。ＢＴＭＳＰＡは、単一の反応性基を有するアミノシランについての３つの結合点、例えば、メトキシジアルキルシリル反応性基を有する化合物において存在するものと対照的に、基質上で６つの結合点と結合する。増加した数の結合点は、シリカ基質との結合安定性を増加させる。ＢＴＭＳＰＡは、他のアミノシラン及びポリアミンとのネットワークを表面上に形成することができ、これは、全ネットワークの結合安定性を増加させる。

【０２５６】

添加剤の他の例としては、ポリアミン（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）が挙げられ得る。添加剤の尚他の例としては、１，２－ビス（トリエトキシシリル）エタン（ＢＴＥＳＥ）、他のビスアミノシラン化合物（例えば、$X^1X^2X^3Si-L^1-NR^N-L^2-SiX^4X^5X^6$であり、式中、$X^1$、$X^2$、$X^3$、$X^4$、$X^5$、及び$X^6$の各々は、Ｘについて本明細書に記載されるいずれかのものであり、L^1及びL^2の各々は、Ｌについて本明細書に記載されるいずれかのものであり、R^Nは、R^{N1}について本明細書に記載されるいずれかのものである）、又は他のビスシラン化合物（例えば、$X^1X^2X^3Si-L^1-SiX^4X^5X^6$であり、式中、$X^1$、$X^2$、$X^3$、$X^4$、$X^5$、及び$X^6$の各々は、Ｘについて本明細書に記載されるいずれかのものであり、L^1は、Ｌについて本明細書に記載されるいずれかのものである）が挙げられる。

【０２５７】

いくつかの実装態様において、官能化された材料は、抗酸化剤添加剤を含む。理論によって制限されることを望むことなく、添加剤は、大気酸素によるアミン部分の分解を防止し得、かつ／又は官能化された材料の循環寿命を延ばし得る。例えば、抗酸化剤添加剤は、有機硫黄含有化合物、例えば、２，２－チオジエタノール、２－ヒドロキシエチルジスルフィド、及び３，３’－ジチオジプロピオン酸であることができる。いくつかの実施形態において、有機硫黄含有化合物は、Ｒ’ＳＲ”、又はＲ’ＳＳＲ”、又はＲ’Ｓ－Ｌ－ＳＲ”の式を有し、式中、Ｒ’及びＲ”の各々は、独立して、脂肪族、アルキル、ヒドロキシアルキル、カルボキシアルキル、芳香族、アリール、ヒドロキアリール、又はカルボキシアリール（例えば、本明細書に定義されるもの）であり、これらの各々は、任意選択で置換され得、Ｌは、リンカー（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）である。

【０２５８】

抗酸化剤添加剤の別の例は、金属触媒キレート剤であることができる。理論又は機構に

よって制限されることを望むことなく、遷移金属不純物（例えば、鉄又は銅）は、アミン部分の酸化速度を増加させ得、次いで、これは、吸着剤の寿命を低減し得る。いくつかの実施形態において、触媒キレート剤は、例えば、リン酸又はホスホン酸アルカリ塩（例えば、リン酸又はホスホン酸ナトリウム塩）、アミノポリカルボン酸又はその塩（例えば、エチレンジアミン四酢酸テトラナトリウム塩二水和物又はジエチレントリアミン五酢酸）、ホスホン酸又はその塩（例えば、１－ヒドロキシエタン１，１－ジホスホン酸一水和物又はエチレンジアミンテトラメチレンホスホン酸）、メルカプト酸（例えば、メソ－２，３－ジメルカプトコハク酸などを含むことができる。いくつかの実施形態において、１つ以上の触媒キレート剤は、酸化速度を低減し、吸着剤寿命を改善するために使用され得る。

【０２５９】

概して、官能化された材料における抗酸化剤添加剤の量は、基質に対して５％（重量／重量）（例えば、３％、４％、６％、又は８％（重量／重量））である。抗酸化剤添加剤は、以下の合成手順のいずれかの有用なステップ中に（例えば、懸濁液混合物又は官能化混合物の形成中に）又はその後に（例えば、溶媒、例えば、アルコール、例えば、メタノール中に溶解し、次いで、官能化された材料を、添加剤／溶媒混合物中に１時間浸すことを介して）添加され得る。

【０２６０】

いくつかの実装態様において、官能化された材料は、他の疎水性化合物を含んでもよく、又はそれらで官能化されてもよく、他の疎水性化合物は、疎水性シラン又は疎水性ポリマーコーティングを含む。いくつかの実施形態において、疎水性シランは、１、２、又は３つのアルキル鎖を含むことができる。特定の実施形態において、疎水性シランは、$R^1R^2R^3SiX^1$又は$[R^1]_aSi[X^1]_{4-a}$を含むことができ、式中、R^1、R^2、及びR^3の各々は、独立して、任意選択で置換された脂肪族、アルキル、芳香族、又はアリールであり、X^1は、側基、反応性基、又は脱離基（例えば、Ｘについて本明細書に記載されるいずれかのもの）であり、ａは、１、２、又は３である。理論によって制限されることを望むことなく、シラン分子上のアルキル鎖は、シラン分子の疎水性を増加させることができる。シラン分子はまた、基質に結合しているときに、官能化された材料の疎水性を増加させることができる。したがって、官能化された材料の水吸着容量が低減され得、これは、いくつかの場合について、例えば、吸着剤を高湿度条件下で使用するときに有益であり得る。官能化された材料の疎水性を増加させる同じ目的で、追加の疎水性ポリマーコーティングが使用され得る。ポリジメチルシロキサン（ＰＤＭＳ）、シリコーン油、ポリエチレン、ポリプロピレン、ポリ（テトラフルオルエチレン（ｔｅｔｒａｆｌｕｏｒｅｔｈｙｌｅｎｅ））、及びポリウレタンは、官能化されたシリカの外側表面をコーティングして、水吸着を高湿度用途のために低減するために使用され得る可能な疎水性ポリマーである。

【０２６１】

ｖ．特徴

官能化された材料は、吸着剤として使用され得、次いで、吸着剤は、いずれかの有用な特徴（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を有することができる。

【０２６２】

いくつかの実施形態において、官能化された材料は、CO_2を低い濃度で吸着し、大気条件において存在するレベルでの増加した捕捉を可能にする。CO_2を大気条件から捕捉することは、官能化された材料を多数の用途において用いることを容易にすることができる。

【０２６３】

いくつかの実施形態において、CO_2は、官能化された材料から研究室温度で脱着される。これは、捕捉されたCO_2を除去するために必要とされるエネルギーを低減することができ、より多くの産業及び環境への官能化された材料の適用可能性を増加させることができ、かつ／又はCO_2が脱着される速度を増加させることができる。

【０２６４】
いくつかの実施形態において、官能化された材料は、高い吸着／脱着計数を達成することができ、これは、炭素捕捉システムにおける運転コストを低減することができる。官能化された材料は、基質の繰り返し使用を可能にすることができる。
【０２６５】
いくつかの実施形態において、官能化された材料は、産業的に可用な構成要素を使用して生成され得、生成のコストを低減し、生成の拡張性を増加させる。
【０２６６】
いくつかの実施形態において、官能化された材料は、高密度のアミン官能基を有するポリマー、オリゴマー、又は分子供給源を含み、これは、乾燥吸着剤の重量当たりのCO_2の取り込みを増加させることができる。
【０２６７】
いくつかの実施形態において、基質をアミノシラン化合物で官能化することは、ポリマー、オリゴマー、又は高密度アミン供給源の結合安定性を増加させ、それによって、官能化された材料の有用な寿命を増加させる。
【０２６８】
いくつかの実施形態において、基質をポリアミン（例えば、高分子量ポリアミン）で官能化することは、短鎖アミン官能化（例えば、少なくとも２つのアミン部分を有し、１００～８００ｇ／ｍｏｌの分子量を有するオリゴマーアミン又は低分子量アミンを用いるもの）と比較して、結合安定性を増加させる。
【０２６９】
いくつかの実施形態において、基質を小分子ポリアミン（例えば、オリゴマーアミン、オリゴマーエチレンアミン、又はエチレンアミン／オリゴマー混合物化合物）で官能化することは、官能化された基質のコストを減少させ、基質の大規模な官能化を容易にする。
【０２７０】
いくつかの実施形態において、ポリアミン供給源は、増加したアミン密度を有し、市販されており、これは、吸着剤としてのポリアミン官能化された材料の使用のコスト効果を増加させる。
【０２７１】
いくつかの実施形態において、官能化された材料は、単一ポット反応において、短い時間尺度において生成されて、生成のコストを低減し、産業溶媒への依存を低減し、かつ／又は生成物の環境影響を低減する。
【０２７２】
いくつかの実施形態において、官能化された材料は、単一ポット反応において、短い時間尺度において、水のみを溶媒として使用して生成されて、生成のコストを低減し、産業溶媒への依存を低減し、かつ／又は生成物の環境影響を低減する。
【０２７３】
いくつかの実施形態において、官能化された材料は、水ベースの単一ポット反応において、周囲圧力及び温度で短い時間尺度において（例えば、浸漬コーティングプロセスを使用して）生成されて、生成のコストを低減し、産業溶媒への依存を低減し、かつ／又は生成物の環境影響を低減する。
【０２７４】
いくつかの実施形態において、組成物は、大気CO_2を（例えば、吸着部分、例えば、アミン部分に）第１の温度範囲で吸着することができ、以前に吸着されたCO_2を（例えば、吸着部分、例えば、アミン部分から）第１の温度範囲よりも高い第２の温度範囲で脱着することができる。第２の温度範囲は、６５℃～９０℃の範囲であることができる。
【０２７５】
いくつかの実施形態において、組成物は、大気CO_2を（例えば、吸着部分、例えば、アミン部分に）CO_2についての第１のガス圧力で吸着することができ、以前に吸着されたCO_2を（例えば、吸着部分、例えば、アミン部分から）第１のガス圧力よりも低いＣ

O_2についての第２のガス圧力で脱着することができる。いくつかの実施形態において、第２のガス圧力は、１．５ｐｓｉ未満（例えば、官能化されたシリカ又は本明細書に記載される他の官能化された材料について）であることができる。いくつかの実施形態において、第２のガス圧力は、０．３ｐｓｉ未満（例えば、官能化されたＭＯＦ又は本明細書に記載される他の官能化された材料について）であることができる。第１及び第２のガス圧力は、CO_2についての圧力に関連する。したがって、他のガスが吸着剤に対して近位に存在するときに、第１のガス圧力及び第２のガス圧力は、CO_2についての部分圧力に関連する。

【０２７６】

いくつかの実施形態において、組成物は、大気CO_2を（例えば、吸着部分、例えば、アミン部分に）第１のCO_2濃度で吸着することができ、以前に吸着されたCO_2を（例えば、吸着部分、例えば、アミン部分から）第１のCO_2濃度よりも低い第２のCO_2濃度で脱着することができる。第１のCO_2濃度は、４２０ｐｐｍ未満又は４００ｐｐｍ未満であることができる。

【０２７７】

いくつかの実施形態において、組成物は、基質としての多孔質シリカ粒子を含んでもよく、又はそれらから本質的になってもよい。多孔質シリカ粒子は、複数の細孔を含むことができる。複数の細孔は、６０～４００Å又は２０～１０００Åの範囲の寸法（例えば、直径）を有することができる。細孔は、１００～１５０Åの範囲のサイズを有することができる。複数の細孔は、０．５ｍＬ／ｇ超の体積を有することができる。多孔質シリカ粒子は、１乾燥グラム当たり１００m^2超の総表面積を有することができる。多孔質シリカ粒子は、２５μｍ～３ｍｍ又は２５μｍ～４ｍｍの範囲の平均直径を有することができる。

【０２７８】

いくつかの実施形態において、多孔質シリカ粒子は、７０～８０μｍの範囲の最大寸法を有する。多孔質シリカ粒子は、複数の細孔を含むことができ、複数の細孔は、０．８ｍＬ／ｇ超の体積及び少なくとも９０Åのサイズを有する。

【０２７９】

いくつかの実施形態において、組成物は、基質としてのＭＯＦ粒子を含んでもよく、又はそれらから本質的になってもよい。ＭＯＦ粒子は、複数の細孔を含むことができる。複数の細孔は、３０～４００Åの範囲の寸法（例えば、直径）を有することができる。複数の細孔は、０．５ｍＬ／ｇ超の体積を有することができる。ＭＯＦ粒子は、１乾燥グラム当たり１００m^2超の総表面積を有することができる。ＭＯＦ粒子は、１０μｍ～１ｍｍ又は５０～１００μｍの範囲の平均直径を有することができる。

【０２８０】

いくつかの実施形態において、組成物は、基質としての樹脂を含んでもよく、又はそれらから本質的になってもよい。樹脂は、複数の細孔を含むことができる。複数の細孔は、１～２００ｎｍの範囲の寸法（例えば、直径）を有することができる。複数の細孔は、０．５ｍＬ／ｇ超の体積を有することができる。樹脂は、１乾燥グラム当たり１００m^2超の総表面積を有することができる。樹脂は、２５μｍ～４ｍｍの範囲の平均直径を有することができる。

【０２８１】

いくつかの実施形態において、組成物は、１乾燥キログラム当たり０．５～２．５ｍｏｌのCO_2（ｍｏｌのCO_2／ｋｇ）、０．５～２ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、又は１～２ｍｏｌのCO_2／ｋｇを吸着することができる。組成物は、CO_2を、０％～１００％の相対湿度（ＲＨ）、５％～９５％のＲＨ、若しくは５％～９０％のＲＨ（例えば、官能化されたシリカ又は本明細書に記載される他の官能化された材料について）、又は０％～１００％のＲＨ若しくは５％～６０％のＲＨ（例えば、官能化されたＭＯＦ、官能化された樹脂、又は本明細書に記載される他の官能化された材料について）の範囲の相対湿度で吸着することができる。

【０２８２】
いくつかの実施形態において、吸着剤は、脱着プロセスを介して再使用され得る。例えば、吸着剤は、１００回以上（例えば、１０００回以上、１００００回以上）再使用され得る。脱着プロセスのために、試料は、７０℃に、真空下で３０分間又は別の持続期間にわたって加熱され得る（例えば、持続期間は、温度及び／又は真空レベルに基づいて変化し得る）。これは、吸着プロセス中に捕捉されたCO_2が放出されることを容易にすることができ、放出されたCO_2は、更なる隔離のために収集され得、これは、直接空気捕捉のためのシステムを参照して本明細書に記載される。脱着プロセスの非限定的な態様は、吸着剤が水蒸気充填真空環境（例えば、１０％超のＲＨ）下で加熱されることを維持することを含むことができる。いくつかの非限定的な実施形態において、これは、吸着剤分解を低減することができる。

【０２８３】
CO_2を含むガス混合物に曝露されたときに、アミン部分（又は他の吸着部分）は、CO_2と反応して、CO_2を官能部分に結合させる。それによって、これは、CO_2を基質に官能的に吸着し、相互作用部分は、吸着部分を基質の表面に共有結合又は非共有結合相互作用によって結合させる。理論によって拘束されることを望むことなく、総表面積、細孔の体積、及び吸着部分の数は、官能化された材料の吸着容量を決定することができる。官能化された材料の吸着容量（例えば、取り込み）は、０．１～２．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇの官能化された材料（例えば、０．１～２ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．１～１．８ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．１～１．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．１～１．２ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．１～１．０ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．１～０．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．２～２ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．２～１．０ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．２～０．８ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．５～２．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．５～２．２ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．５～２ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．５～１．８ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．５～１．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．５～０．８ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．８～２．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．８～２．２ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．８～２ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．８～１．８ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．８～１．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、１～２ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、１～１．４ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、１～１．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、１．２～２．０ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、１．２～１．８ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、１．５～２．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、１．５～２ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、又は２～２．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ）の範囲であることができる。いくつかの実施形態において、範囲は、０．５、１、１．５、２、又は２．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ超である。いくつかの実装態様において、官能化された材料は、最大１ｍｏｌのCO_2／ｋｇ又は最大２ｍｏｌのCO_2／ｋｇのCO_2吸着容量を、４２０ｐｐｍのCO_2で周囲空気条件において達成する。

【０２８４】
いくつかの実装態様において、官能化された材料（例えば、ポリアミンを含む官能化された基質）は、０．８～２．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ又は０．５～２．２ｍｏｌのCO_2／ｋｇ（例えば、１～２ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、１～１．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、１．５～２ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、１．５～２．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、又は２～２．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ）の範囲のCO_2吸着容量を達成する。いくつかの実装態様において、官能化された基質は、最大２ｍｏｌのCO_2／ｋｇのCO_2吸着容量を、４２０ｐｐｍのCO_2で周囲空気条件において達成する。

【０２８５】
いくつかの実装態様において、官能化された材料（例えば、エチレンアミン、オリゴマーエチレンアミン、又はそれらの混合物を含む官能化された基質）は、０．５～１．８ｍｏｌのCO_2／ｋｇ又は０．５～２ｍｏｌのCO_2／ｋｇ（例えば、１．５～２ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、１．５～１．８ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、１～１．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、又は１．２～１．８ｍｏｌのCO_2／ｋｇ）の範囲のCO_2吸着容量を達成する。いくつかの実装態様において、官能化された基質は、最大２ｍｏｌのCO_2／ｋｇのCO_2吸

着容量を、４２０ｐｐｍのCO_2で周囲空気条件において達成する。

【０２８６】

いくつかの実装態様において、官能化された材料（例えば、浸漬コーティングプロセスによって調製された官能化された基質）は、１～２ｍｏｌのCO_2／ｋｇの範囲のCO_2吸着容量を達成する。いくつかの実装態様において、官能化された基質は、最大２ｍｏｌのCO_2／ｋｇのCO_2吸着容量を、４２０ｐｐｍのCO_2で周囲空気条件において達成する。

【０２８７】

いくつかの実装態様において、官能化された材料（例えば、官能化されたＭＯＦ）は、０．８～２．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ又は０．１～１ｍｏｌのCO_2／ｋｇ（例えば、０．２～０．８ｍｏｌのCO_2／ｋｇ）の範囲のCO_2吸着容量を達成する。いくつかの実装態様において、官能化されたＭＯＦ基質は、最大２ｍｏｌのCO_2／ｋｇのCO_2吸着容量を、４２０ｐｐｍのCO_2で周囲空気条件において達成する。

【０２８８】

いくつかの実装態様において、官能化された材料（例えば、官能化された樹脂）は、０．８～２．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．８～３ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、又は０．１～２．０ｍｏｌのCO_2／ｋｇ（例えば、０．１～１．８ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．１～１．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．１～１．２ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．１～１．０ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．１～０．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．２～１．０ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．２～０．８ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．５～２．０ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．５～１．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、０．５～０．８ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、１．２～２．０ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、１．２～１．８ｍｏｌのCO_2／ｋｇ、又は本明細書に記載されるいずれかの範囲）の範囲のCO_2吸着容量を達成する。いくつかの実装態様において、官能化された樹脂は、最大２ｍｏｌのCO_2／ｋｇのCO_2吸着容量を、４２０ｐｐｍのCO_2で周囲空気条件において達成する。

【０２８９】

環境条件において、大気は、ある濃度の水蒸気（例えば、湿度）を含み得る。官能化された材料は、CO_2を、ＲＨレベルの範囲の大気条件から捕捉するために使用され得る。例えば、官能化された材料は、CO_2を、０％～１００％のＲＨ、例えば、５％～９５％のＲＨ（例えば、１５％～５０％のＲＨ、２５％～４０％のＲＨ、１０％～６０％のＲＨ、５％～９０％のＲＨ、１０％～９０％のＲＨ、又は２０％～８０％のＲＨ）の範囲の大気条件から捕捉することができる。いくつかの実装態様において、官能化された材料は、CO_2を、６０％超のＲＨ、７５％超のＲＨ、９０％超のＲＨ、又は９５％超のＲＨを有する大気条件から捕捉する。

【０２９０】

ｖｉ．化学定義

別途指定されない限り、「材料」という用語は、化合物、分子、構造（例えば、基質又は粒子）、又はそれらの組み合わせ（例えば、官能化された基質）を包含するために使用され得る。

【０２９１】

本明細書で使用される場合、「部分」という用語は、有機分子、化合物、又は材料の特徴的な部分を説明するために使用される。例えば、アミン部分は、アミン基を含有する化合物の分子、化合物、又は部分（例えば、本明細書に記載される－$NR^{N1}R^{N2}$）であり、シラン部分は、シラン基を含有する化合物の分子、化合物、又は部分（例えば、本明細書に記載される－$SiR^{S1}R^{S2}R^{S3}$）である。非限定的な一事例において、アミン部分は、アミノシラン化合物又はポリアミン化合物において存在し得るアミノアルキル基（例えば、本明細書に記載される－Ａｋ－$NR^{N1}R^{N2}$）を含むことができる。別の非限定的な事例において、アミン部分は、アミノ基（例えば、本明細書に記載される－$NR^{N1}R^{N2}$）を単独で含むことができる。部分という用語は、両方、基を含有するより大きい分子を説明するために使用されるか、又は基自体を説明するために使用され得る。

【０２９２】
本明細書で使用される場合、「相互作用」は、化学物質間の共有結合又は非共有結合相互作用、例えば、物理的吸着又はイオン相互作用によるものを説明するために使用される。
【０２９３】
本明細書で互換的に使用される場合、「アシル」又は「アルカノイル」とは、親分子基にカルボニル基を介して付着した、本明細書に定義される脂肪族又はアルキル基を意味する。特定の実施形態において、アルカノイルは、－Ｃ（Ｏ）－Ａｋであり、式中、Ａｋは、本明細書に定義される脂肪族又はアルキル基である。いくつかの実施形態において、非置換アルカノイルは、Ｃ$_{2\sim7}$アルカノイル基である。アルカノイル基の非限定的な例としては、アセチルが挙げられる。
【０２９４】
本明細書で互換的に使用される場合、「アシルオキシ」又は「アルカノイルオキシ」とは、親分子基にオキシ基を介して付着した、本明細書に定義されるアシル又はアルカノイル基を意味する。特定の実施形態において、アルカノイルオキシは、－Ｏ－Ｃ（Ｏ）－Ａｋであり、式中、Ａｋは、本明細書に定義される脂肪族又はアルキル基である。いくつかの実施形態において、非置換アルカノイルオキシは、Ｃ$_{2\sim7}$アルカノイルオキシ基である。アルカノイルオキシ基の非限定的な例としては、アセトキシが挙げられる。
【０２９５】
「ハロゲン化アシル」とは、－Ｃ（Ｏ）Ｘを意味し、式中、Ｘは、ハロゲン、例えば、Ｂｒ、Ｆ、Ｉ、又はＣｌである。
【０２９６】
「脂肪族」とは、少なくとも１個の炭素原子～５０個の炭素原子（Ｃ$_{1\sim50}$）、例えば、１～２５個の炭素原子（Ｃ$_{1\sim25}$）、又は１～１０個の炭素原子（Ｃ$_{1\sim10}$）を有し、アルカン（又はアルキル、例えば、本明細書に記載されるもの）、アルケン（又はアルケニル）、アルキン（又はアルキニル）を含み、それらの環式バージョンを含み、直鎖及び分岐鎖配置、また、全ての立体及び位置異性体を更に含む炭化水素基を意味する。そのような炭化水素は、非置換であってもよく、又は１つ以上の基、例えば、アルキル基について本明細書に記載される基で置換されてもよい。
【０２９７】
「脂肪族アリール」とは、本明細書に開示される化合物にカップリングしているか、又はそれにカップリングすることができるアリール基を意味し、アリール基は、本明細書に定義される脂肪族基を介してカップリングしているか、又はカップリングする。いくつかの実施形態において、脂肪族アリール基は、－Ｌ－Ｒであり、式中、Ｌは、本明細書に定義される脂肪族基であり、Ｒは、本明細書に定義されるアリール基である。
【０２９８】
「脂肪族ヘテロアリール」とは、本明細書に開示される化合物にカップリングしているか、又はそれにカップリングすることができるヘテロアリール基を意味し、ヘテロアリール基は、本明細書に定義される脂肪族基を介してカップリングしているか、又はカップリングする。いくつかの実施形態において、脂肪族ヘテロアリール基は、－Ｌ－Ｒであり、式中、Ｌは、本明細書に定義される脂肪族基であり、Ｒは、本明細書に定義されるヘテロアリール基である。
【０２９９】
「アルケニル」とは、１つ以上の二重結合を有する任意選択で置換されたＣ$_{2\sim24}$アルキル基を意味する。アルケニル基は、環式（例えば、Ｃ$_{3\sim24}$シクロアルケニル）又は非環式であることができる。アルケニル基はまた、置換されてもよく、又は非置換であってもよい。例えば、アルケニル基は、アルキルについて本明細書に記載される１つ以上の置換基で置換され得る。非限定的な非置換アルケニル基は、アリル及びビニルを含む。いくつかの実施形態において、非置換アルケニル基は、Ｃ$_{2\sim6}$、Ｃ$_{2\sim8}$、Ｃ$_{2\sim10}$、Ｃ$_{2\sim12}$、Ｃ$_{2\sim16}$、Ｃ$_{2\sim18}$、Ｃ$_{2\sim20}$、Ｃ$_{2\sim24}$、Ｃ$_{3\sim8}$、Ｃ$_{3\sim10}$、Ｃ$_{3}$

～１２、Ｃ３～１６、Ｃ３～１８、Ｃ３～２０、又はＣ３～２４アルケニル基である。アルケニル基の非限定的な例としては、ビニル又はエテニル（－ＣＨ＝ＣＨ２）、１－プロペニル（－ＣＨ＝ＣＨＣＨ３）、アリル又は２－プロペニル（－ＣＨ２－ＣＨ＝ＣＨ２）、１－ブテニル（－ＣＨ＝ＣＨＣＨ２ＣＨ３）、２－ブテニル（－ＣＨ２ＣＨ＝ＣＨＣＨ３）、３－ブテニル（－ＣＨ２ＣＨ２ＣＨ＝ＣＨ２）、２－ブテニリデン（＝ＣＨ－ＣＨ＝ＣＨＣＨ３）などが挙げられる。

【０３００】

「アルケニレン」とは、１つ以上の二重結合を有する任意選択で置換されたＣ２～２４アルキル基である、アルケニル基の多価（例えば、二価）形態を意味する。アルケニレン基は、環式（例えば、Ｃ３～２４シクロアルケニル）又は非環式であることができる。アルケニレン基は、置換されてもよく、又は非置換であってもよい。例えば、アルケニレン基は、アルキルについて本明細書に記載される１つ以上の置換基で置換され得る。アルケニレンの非限定的な例としては、－ＣＨ＝ＣＨ－又は－ＣＨ＝ＣＨＣＨ２－が挙げられる。

【０３０１】

「アルコキシ」とは、－ＯＲを意味し、式中、Ｒは、本明細書に記載される任意選択で置換された脂肪族又はアルキル基である。アルコキシ基の非限定的な例としては、メトキシ、エトキシ、ｎ－プロポキシ、イソプロポキシ、ｎ－ブトキシ、ｔ－ブトキシ、ｓｅｃ－ブトキシ、ｎ－ペントキシ、トリハロアルコキシ、例えば、トリフルオロメトキシなどが挙げられる。アルコキシ基は、置換されてもよく、又は非置換であってもよい。例えば、アルコキシ基は、アルキルについて本明細書に記載される１つ以上の置換基で置換され得る。非置換アルコキシの非限定的な例としては、Ｃ１～３、Ｃ１～６、Ｃ１～１２、Ｃ１～１６、Ｃ１～１８、Ｃ１～２０、又はＣ１～２４アルコキシ基が挙げられる。

【０３０２】

「アルコキシアルキル」とは、本明細書に定義されるアルコキシ基で置換された、本明細書に定義されるアルキル基を意味する。非置換アルコキシアルキル基の非限定的な例としては、２～１２個の炭素（Ｃ２～１２アルコキシアルキル）、並びに１～６個の炭素を有するアルキル基及び１～６個の炭素を有するアルコキシ基を有するもの（すなわち、Ｃ１～６アルコキシ－Ｃ１～６アルキル）を有するものが挙げられる。いくつかの実施形態において、アルコキシアルキル基は、－Ｌ－Ｏ－Ｒであり、式中、Ｌは、本明細書に定義されるアルキレン基であり、Ｒは、本明細書に定義されるアルキル基である。

【０３０３】

「アルキル」及び接頭辞「アルキ」とは、１～２４個の炭素原子の分岐鎖又は非分岐鎖飽和炭化水素基、例えば、メチル（Ｍｅ）、エチル（Ｅｔ）、ｎ－プロピル（ｎ－Ｐｒ）、イソプロピル（ｉ－Ｐｒ）、シクロプロピル、ｎ－ブチル（ｎ－Ｂｕ）、イソブチル（ｉ－Ｂｕ）、ｓ－ブチル（ｓ－Ｂｕ）、ｔ－ブチル（ｔ－Ｂｕ）、シクロブチル、ｎ－ペンチル、イソペンチル、ｓ－ペンチル、ネオペンチル、ヘキシル、ヘプチル、オクチル、ノニル、デシル、ドデシル、テトラデシル、ヘキサデシル、エイコシル、テトラコシルなどを意味する。アルキル基は、環式（例えば、Ｃ３～２４シクロアルキル）又は非環式であることができる。アルキル基は、分岐状又は非分岐状であり得る。アルキル基はまた、置換又は非置換であり得る。例えば、アルキル基は、１つ以上のアルケニル、アルコキシ、アルキニル、アミノ、アリール、カルボキシアルデヒド（例えば、－Ｃ（Ｏ）Ｈ）、カルボキシル（例えば、－ＣＯ２Ｈ）、シアノ（例えば、－ＣＮ）、ハロ、ニトロ（例えば、－ＮＯ２）、オキソ（例えば、＝Ｏ）などで置換され得る。別の例において、アルキル基は、１、２、３つの置換基、又は２個以上の炭素のアルキル基の場合、４つの置換基で置換され得、置換基は、独立して、以下、（１）Ｃ１～６アルコキシ（例えば、－Ｏ－Ｒであり、式中、Ｒは、Ｃ１～６アルキルである）；（２）Ｃ１～６アルキルスルフィニル（例えば、－Ｓ（Ｏ）－Ｒであり、式中、Ｒは、Ｃ１～６アルキルである）；（３）Ｃ１～６アルキルスルホニル（例えば、－ＳＯ２－Ｒであり、式中、Ｒは、Ｃ１～６アルキルである）；（４）アミン（例えば、－Ｃ（Ｏ）ＮＲ１Ｒ２又は－ＮＨＣＯＲ１であり、式

中、R^1及びR^2の各々は、独立して、本明細書に定義される水素、脂肪族、ヘテロ脂肪族、ハロ脂肪族、ハロヘテロ脂肪族、芳香族、若しくはそれらのいずれかの組み合わせから選択されるか、又はR^1及びR^2は、各々が付着している窒素原子と一緒になって、本明細書に定義されるヘテロシクリル基を形成することができる）；（５）アリール（例えば、$C_{4\sim18}$アリール）；（６）アリールアルコキシ（例えば、－Ｏ－Ｌ－Ｒであり、式中、Ｌは、$C_{1\sim6}$アルキレンであり、Ｒは、$C_{4\sim18}$アリールである）；（７）アリーロイル（例えば、－Ｃ（Ｏ）－Ｒであり、式中、Ｒは、$C_{4\sim18}$アリールである）；（８）アジド（例えば、$-N_3$）；（９）シアノ（例えば、－ＣＮ）；（１０）アルデヒド（例えば、－Ｃ（Ｏ）Ｈ）；（１１）$C_{3\sim8}$シクロアルキル；（１２）ハロ；（１３）ヘテロシクリル（例えば、本明細書に定義されるもの、例えば、１、２、３、又は４個の非炭素ヘテロ原子を含有する５、６、又は７員環）；（１４）ヘテロシクリルオキシ（例えば、－Ｏ－Ｒであり、式中、Ｒは、本明細書に定義されるヘテロシクリルである）；（１５）ヘテロシクリロイル（例えば、－Ｃ（Ｏ）－Ｒであり、式中、Ｒは、本明細書に定義されるヘテロシクリルである）；（１６）ヒドロキシ（例えば、－ＯＨ）；（１７）Ｎ保護アミノ；（１８）ニトロ（例えば、$-NO_2$）；（１９）オキソ（例えば、＝Ｏ）；（２０）$C_{1\sim6}$チオアルコキシ（例えば、－Ｓ－Ｒであり、式中、Ｒは、アルキルである）；（２１）チオール（例えば、－ＳＨ）；（２２）$-CO_2R^1$［式中、R^1は、（ａ）水素、（ｂ）$C_{1\sim6}$アルキル、（ｃ）$C_{4\sim18}$アリール、及び（ｄ）$C_{1\sim6}$アルキル－$C_{4\sim18}$アリール（例えば、－Ｌ－Ｒであり、式中、Ｌは、$C_{1\sim6}$アルキレンであり、Ｒは、$C_{4\sim18}$アリールである）からなる群から選択される］；（２３）－Ｃ（Ｏ）NR^1R^2［式中、R^1及びR^2の各々は、独立して、（ａ）水素、（ｂ）$C_{1\sim6}$アルキル、（ｃ）$C_{4\sim18}$アリール、及び（ｄ）$C_{1\sim6}$アルキル－$C_{4\sim18}$アリール（例えば、－Ｌ－Ｒであり、式中、Ｌは、$C_{1\sim6}$アルキレンであり、Ｒは、$C_{4\sim18}$アリールである）からなる群から選択される］；（２４）$-SO_2R^1$［式中、R^1は、（ａ）$C_{1\sim6}$アルキル、（ｂ）$C_{4\sim18}$アリール、及び（ｃ）$C_{1\sim6}$アルキル－$C_{4\sim18}$アリール（例えば、－Ｌ－Ｒであり、式中、Ｌは、$C_{1\sim6}$アルキレンであり、Ｒは、$C_{4\sim18}$アリールである）からなる群から選択される］；（２５）$-SO_2NR^1R^2$［式中、R^1及びR^2の各々は、独立して、（ａ）水素、（ｂ）$C_{1\sim6}$アルキル、（ｃ）$C_{4\sim18}$アリール、及び（ｄ）$C_{1\sim6}$アルキル－$C_{4\sim18}$アリール（例えば、－Ｌ－Ｒであり、式中、Ｌは、$C_{1\sim6}$アルキレンであり、Ｒは、$C_{4\sim18}$アリールである）からなる群から選択される］；及び（２６）$-NR^1R^2$［式中、R^1及びR^2の各々は、独立して、（ａ）水素、（ｂ）Ｎ保護基、（ｃ）$C_{1\sim6}$アルキル、（ｄ）$C_{2\sim6}$アルケニル、（ｅ）$C_{2\sim6}$アルキニル、（ｆ）$C_{4\sim18}$アリール、（ｇ）$C_{1\sim6}$アルキル－$C_{4\sim18}$アリール（例えば、－Ｌ－Ｒであり、式中、Ｌは、$C_{1\sim6}$アルキレンであり、Ｒは、$C_{4\sim18}$アリールである）、（ｈ）$C_{3\sim8}$シクロアルキル、及び（ｉ）$C_{1\sim6}$アルキル－$C_{3\sim8}$シクロアルキル（例えば、－Ｌ－Ｒであり、式中、Ｌは、$C_{1\sim6}$アルキレンであり、Ｒは、$C_{3\sim8}$シクロアルキルである）からなる群から選択される］からなる群から選択され、一実施形態において、２つの基は、窒素原子にカルボニル基又はスルホニル基を介して結合していない。アルキル基は、１つ以上の置換基（例えば、１つ以上のハロ又はアルコキシ）で置換された一級、二級、又は三級アルキル基であることができる。いくつかの実施形態において、非置換アルキル基は、$C_{1\sim3}$、$C_{1\sim4}$、$C_{1\sim6}$、$C_{1\sim8}$、$C_{1\sim10}$、$C_{1\sim12}$、$C_{1\sim16}$、$C_{1\sim18}$、$C_{1\sim20}$、$C_{1\sim24}$、$C_{2\sim6}$、$C_{2\sim8}$、$C_{2\sim10}$、$C_{2\sim12}$、$C_{2\sim16}$、$C_{2\sim18}$、$C_{2\sim20}$、$C_{2\sim24}$、$C_{3\sim8}$、$C_{3\sim10}$、$C_{3\sim12}$、$C_{3\sim16}$、$C_{3\sim18}$、$C_{3\sim20}$、又は$C_{3\sim24}$アルキル基である。

【０３０４】

「アルキレン」とは、本明細書に記載される脂肪族又はアルキル基の多価（例えば、二価）形態を意味する。アルキレン基の非限定的な例としては、メチレン、エチレン、プロピレン、ブチレンなどが挙げられる。いくつかの実施形態において、アルキレン基は、$C_{1\sim3}$、$C_{1\sim4}$、$C_{1\sim6}$、$C_{1\sim12}$、$C_{1\sim16}$、$C_{1\sim18}$、$C_{1\sim20}$、$C_{1\sim24}$

、Ｃ２～３、Ｃ２～６、Ｃ２～１２、Ｃ２～１６、Ｃ２～１８、Ｃ２～２０、又はＣ２～２４アルキレン基である。アルキレン基は、分岐鎖又は非分岐鎖であることができる。アルキレン基はまた、置換されてもよく、又は非置換であってもよい。例えば、アルキレン基は、アルキルについて本明細書に記載される１つ以上の置換基で置換され得る。

【０３０５】

本明細書で使用される場合、「アルキルシリル」という用語は、－ＳｉＲ^{1}Ｒ^{2}Ｒ^{3}基を指し、式中、Ｒ^{1}は、任意選択で置換されたアルキルであり、Ｒ^{2}及びＲ^{3}の各々は、独立して、Ｈ及び任意選択で置換されたアルキルから選択される。アルキルシリルは、モノ、ビス、及びトリスアルキルシリルを含む。アルキルシリルの例としては、トリメチルシリル、ジメチルシリル、メチルシリル、トリエチルシリル、ジエチルシリル、エチルシリルなどが挙げられる。

【０３０６】

「アルキルスルフィニル」とは、親分子基に－Ｓ（Ｏ）－基を介して付着した、本明細書に定義されるアルキル基を意味する。いくつかの実施形態において、非置換アルキルスルフィニル基は、Ｃ１～６又はＣ１～１２アルキルスルフィニル基である。他の実施形態において、アルキルスルフィニル基は、－Ｓ（Ｏ）－Ｒであり、式中、Ｒは、本明細書に定義されるアルキル基である。

【０３０７】

「アルキルスルフィニルアルキル」とは、アルキルスルフィニル基によって置換された、本明細書に定義されるアルキル基を意味する。いくつかの実施形態において、非置換アルキルスルフィニルアルキル基は、Ｃ２～１２又はＣ２～２４アルキルスルフィニルアルキル基（例えば、Ｃ１～６アルキルスルフィニル－Ｃ１～６アルキル又はＣ１～１２アルキルスルフィニル－Ｃ１～１２アルキル）である。他の実施形態において、アルキルスルフィニルアルキル基は、－Ｌ－Ｓ（Ｏ）－Ｒであり、式中、Ｌは、本明細書に定義されるアルキレンであり、Ｒは、本明細書に定義されるアルキル基である。

【０３０８】

「アルキルスルホニル」とは、親分子基に－ＳＯ$_{2}$－基を介して付着した、本明細書に定義されるアルキル基を意味する。いくつかの実施形態において、非置換アルキルスルホニル基は、Ｃ１～６又はＣ１～１２アルキルスルホニル基である。他の実施形態において、アルキルスルホニル基は、－ＳＯ$_{2}$－Ｒであり、式中、Ｒは、任意選択で置換されたアルキル（例えば、任意選択で置換されたＣ１～１２アルキル、ハロアルキル、又はペルフルオロアルキルを含む、本明細書に記載されるもの）である。

【０３０９】

「アルキルスルホニルアルキル」とは、アルキルスルホニル基によって置換された、本明細書に定義されるアルキル基を意味する。いくつかの実施形態において、非置換アルキルスルホニルアルキル基は、Ｃ２～１２又はＣ２～２４アルキルスルホニルアルキル基（例えば、Ｃ１～６アルキルスルホニル－Ｃ１～６アルキル又はＣ１～１２アルキルスルホニル－Ｃ１～１２アルキル）である。他の実施形態において、アルキルスルホニルアルキル基は、－Ｌ－ＳＯ$_{2}$－Ｒであり、式中、Ｌは、本明細書に定義されるアルキレンであり、Ｒは、本明細書に定義されるアルキル基である。

【０３１０】

「アルキニル」とは、１つ以上の三重結合を有する任意選択で置換されたＣ２～２４アルキル基を意味する。アルキニル基は、環式又は非環式であることができ、エチニル、１－プロピニルなどによって例示される。アルキニル基はまた、置換されてもよく、又は非置換であってもよい。例えば、アルキニル基は、アルキルについて本明細書に記載される１つ以上の置換基で置換され得る。非限定的な非置換アルキニル基は、Ｃ２～８アルキニル、Ｃ２～６アルキニル、Ｃ２～５アルキニル、Ｃ２～４アルキニル、又はＣ２～３アルキニルを含む。アルキニル基の非限定的な例としては、エチニル（－Ｃ≡ＣＨ）、１－プロピニル（－Ｃ≡ＣＣＨ$_{3}$）、２－プロピニル又はプロパルギル（－ＣＨ$_{2}$Ｃ≡ＣＨ）、１－ブチニル（－Ｃ≡ＣＣＨ$_{2}$ＣＨ$_{3}$）、２－ブチニル（－ＣＨ$_{2}$Ｃ≡ＣＣＨ$_{3}$）、３－ブ

チニル（－ＣＨ$_2$ＣＨ$_2$Ｃ≡ＣＨ）などが挙げられる。いくつかの実施形態において、非置換アルキニル基は、Ｃ$_{2～6}$、Ｃ$_{2～8}$、Ｃ$_{2～10}$、Ｃ$_{2～12}$、Ｃ$_{2～16}$、Ｃ$_{2～18}$、Ｃ$_{2～20}$、Ｃ$_{2～24}$、Ｃ$_{3～8}$、Ｃ$_{3～10}$、Ｃ$_{3～12}$、Ｃ$_{3～16}$、Ｃ$_{3～18}$、Ｃ$_{3～20}$、又はＣ$_{3～24}$アルキニル基である。

【０３１１】

「アルキニレン」とは、１つ以上の三重結合を有する任意選択で置換されたＣ$_{2～24}$アルキル基である、アルキニル基の多価（例えば、二価）形態を意味する。アルキニレン基は、環式又は非環式であることができる。アルキニレン基は、置換されてもよく、又は非置換であってもよい。例えば、アルキニレン基は、アルキルについて本明細書に記載される１つ以上の置換基で置換され得る。アルキニレン基の非限定的な例としては、－Ｃ≡Ｃ－又は－Ｃ≡ＣＣＨ$_2$－が挙げられる。

【０３１２】

「アミド」とは、－Ｃ（Ｏ）ＮＲ^{1}Ｒ^{2}又は－ＮＨＣＯＲ^{1}を意味し、式中、Ｒ^{1}及びＲ^{2}の各々は、独立して、本明細書に定義される水素、脂肪族、ヘテロ脂肪族、ハロ脂肪族、ハロヘテロ脂肪族、芳香族、若しくはそれらのいずれかの組み合わせから選択されるか、又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、各々が付着している窒素原子と一緒になって、本明細書に定義されるヘテロシクリル基を形成することができる。

【０３１３】

「アミン」又は「アミノ」とは、－ＮＲ^{Ｎ1}Ｒ^{Ｎ2}基、－ＮＲ^{Ｎ1}－基、又はそのような基を有する化合物を意味し、式中、Ｒ^{Ｎ1}及びＲ^{Ｎ2}の各々は、独立して、Ｈ、任意選択で置換された脂肪族、アルキル、ヒドロキシアルキル、ヘテロ脂肪族、ヘテロアルキル、芳香族、若しくはアリールであるか、又はＲ^{Ｎ1}及びＲ^{Ｎ2}は、各々が付着している窒素原子と一緒になって、本明細書に定義されるヘテロシクリル基を形成する。

【０３１４】

「アミノアルキル」とは、１、２、３つ、又はそれ以上のアミン基で置換された、本明細書に記載される脂肪族又はアルキル基を意味する。アミノアルキルは、内部アミン基又は末端アミン基を含むことができる。アミノアルキル基は、更に置換され得る。例えば、アミノアルキル基は、アルキルについて本明細書に記載される１つ以上の置換基で置換され得る。非置換アミノアルキル基の非限定的な例としては、Ｃ$_{1～3}$、Ｃ$_{1～6}$、Ｃ$_{1～12}$、Ｃ$_{1～16}$、Ｃ$_{1～18}$、Ｃ$_{1～20}$、又はＣ$_{1～24}$アミノアルキル基が挙げられる。いくつかの実施形態において、アミノアルキル基は、－Ｌ－ＮＲ^{1}Ｒ^{2}であり、式中、Ｌは、本明細書に定義される脂肪族又はアルキレン基であり、Ｒ^{1}及びＲ^{2}の各々は、独立して、本明細書に定義される水素、脂肪族、ヘテロ脂肪族、ハロ脂肪族、ハロヘテロ脂肪族、芳香族、若しくはそれらのいずれかの組み合わせから選択されるか、又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、各々が付着している窒素原子と一緒になって、本明細書に定義されるヘテロシクリル基を形成することができる。他の実施形態において、アミノアルキル基は、－Ｌ－Ｃ（ＮＲ^{1}Ｒ^2）（Ｒ^3）－Ｒ^{4}であり、式中、Ｌは、本明細書に定義される共有結合、脂肪族基、又はアルキレン基であり、Ｒ^{1}及びＲ^{2}の各々は、独立して、本明細書に定義される水素、脂肪族、ヘテロ脂肪族、ハロ脂肪族、ハロヘテロ脂肪族、芳香族、若しくはそれらのいずれかの組み合わせから選択されるか、又はＲ^{1}及びＲ^{2}は、各々が付着している窒素原子と一緒になって、本明細書に定義されるヘテロシクリル基を形成することができ、Ｒ^{3}及びＲ^{4}の各々は、独立して、本明細書に定義されるＨ又はアルキルである。

【０３１５】

「アミノアリール」とは、本明細書に定義されるアミノ基によって置換された、本明細書に定義される芳香族又はアリール基を意味する。

【０３１６】

「芳香族」とは、別途指定されない限り、５～１５個の環原子の環式共役基又は部分であって、環式共役基又は部分が、単一の環を有する（例えば、フェニル）か、又は少なくとも１つの環が芳香族である複数の縮合環を有し（例えば、ナフチル、インドリル、又はピラゾロピリジニル）、すなわち、少なくとも１つの環及び任意選択で複数の縮合環が、

連続的な非局在化π電子系を有する、環式共役基又は部分を意味する。典型的には、面外π電子の数は、ヒュッケル則（４ｎ＋２）に対応する。親構造への結合点は、典型的には、縮合環系の芳香族部分を通じている。

【０３１７】

「アリール」とは、少なくとも５個の炭素原子～１５個の炭素原子（Ｃ５～１５）、例えば、５～１０個の炭素原子（Ｃ５～１０）を含み、単一の環又は複数の縮合環を有する芳香族炭素環式基であって、縮合環が、芳香族であってもよく、又は芳香族でなくてもよく、但し、本明細書に開示される化合物の残りの位置への付着点が、芳香族炭素環式基の原子を介するものであることを条件とする、芳香族炭素環式基を意味する。アリール基は、水素以外の１つ以上の基、例えば、アルキル、及びアルキルについて本明細書に記載されるいずれかの置換基で置換され得る。アリール基の非限定的な例としては、ベンジル、ナフタレン、フェニル、ビフェニル、フェノキシベンゼンなどが挙げられるが、これらに限定されない。アリールという用語はまた、芳香族基を含有する基として定義されるヘテロアリールであって、芳香族基が、芳香族基の環内に組み込まれた少なくとも１個のヘテロ原子を有する、ヘテロアリールを含む。ヘテロ原子の例としては、窒素、酸素、硫黄、及びリンが挙げられるが、これらに限定されない。同様に、アリールという用語にも含まれる非ヘテロアリールという用語は、ヘテロ原子を含有しない芳香族基を含有する基を定義する。アリール基は、アルキルについて本明細書で提供される１、２、３、４、又は５つの置換基で置換され得る。特定の実施形態において、非置換アリール基は、Ｃ４～１８、Ｃ４～１４、Ｃ４～１２、Ｃ４～１０、Ｃ６～１８、Ｃ６～１４、Ｃ６～１２、又はＣ６～１０アリール基である。

【０３１８】

「アリーレン」とは、本明細書に記載される芳香族又はアリール基の多価（例えば、二価）形態を意味する。アリーレン基の非限定的な例としては、フェニレン、ナフチレン、ビフェニレン、トリフェニレン、ジフェニルエーテル、アセナフテニレン、アントリレン、又はフェナントリレンが挙げられる。いくつかの実施形態において、アリーレン基は、Ｃ４～１８、Ｃ４～１４、Ｃ４～１２、Ｃ４～１０、Ｃ６～１８、Ｃ６～１４、Ｃ６～１２、又はＣ６～１０アリーレン基である。アリーレン基は、分岐鎖又は非分岐鎖であることができる。アリーレン基はまた、置換されてもよく、又は非置換であってもよい。例えば、アリーレン基は、アルキル又はアリールについて本明細書に記載される１つ以上の置換基で置換され得る。

【０３１９】

「アリールオキシ」とは、－ＯＲを意味し、式中、Ｒは、本明細書に記載される任意選択で置換された芳香族又はアリール基である。いくつかの実施形態において、非置換アリールオキシ基は、Ｃ４～１８又はＣ６～１８アリールオキシ基である。

【０３２０】

「アリールアルコキシ」とは、親分子基に酸素原子を介して付着した、本明細書に定義されるアルキルアリール基を意味する。いくつかの実施形態において、アリールアルコキシ基は、－Ｏ－Ｌ－Ｒであり、式中、Ｌは、本明細書に定義されるアルキレン基であり、Ｒは、本明細書に定義されるアリール基である。

【０３２１】

「アリールオキシカルボニル」とは、親分子基にカルボニル基を介して付着した、本明細書に定義されるアリールオキシ基を意味する。いくつかの実施形態において、非置換アリールオキシカルボニル基は、Ｃ５～１９アリールオキシカルボニル基である。他の実施形態において、アリールオキシカルボニル基は、－Ｃ（Ｏ）Ｏ－Ｒであり、式中、Ｒは、本明細書に定義されるアリール基である。

【０３２２】

「アリーロイル」とは、親分子基にカルボニル基を介して付着したアリール基を意味する。いくつかの実施形態において、非置換アリーロイル基は、Ｃ７～１１アリーロイル基又はＣ５～１９アリーロイル基である。他の実施形態において、アリーロイル基は、－Ｃ

（Ｏ）－Ｒであり、式中、Ｒは、本明細書に定義されるアリール基である。
【０３２３】
「（アリール）（アルキル）エン」とは、アルキレン又はヘテロアルキレン基に付着した、本明細書に記載されるアリーレン基を含む二価形態を意味する。いくつかの実施形態において、（アリール）（アルキル）エン基は、－Ｌ－Ａｒ－、又は－Ｌ－Ａｒ－Ｌ－、又は－Ａｒ－Ｌ－であり、式中、Ａｒは、芳香族又はアリーレン基であり、各Ｌは、独立して、任意選択で置換された脂肪族、アルキレン基、ヘテロ脂肪族、又はヘテロアルキレン基である。
【０３２４】
「ボロノ」とは、－Ｂ（ＯＨ）$_2$基を意味する。
【０３２５】
「カルボニル」とは、－Ｃ（Ｏ）－基を意味し、これはまた、＞Ｃ＝Ｏ又は－ＣＯ－基として表され得る。
【０３２６】
「カルボキシル」又は「カルボン酸」とは、脱プロトン化及びプロトン化形態を含む、－ＣＯ$_2$Ｈ基又はそのような基を含む化合物を意味する。
【０３２７】
「カルボキシアルキル」とは、本明細書に定義される１つ以上のカルボキシル基によって置換された、本明細書に定義されるアルキル基を意味する。
【０３２８】
「カルボキシアリール」とは、本明細書に定義される１つ以上のカルボキシル基によって置換された、本明細書に定義されるアリール基を意味する。
【０３２９】
「脂環式」とは、環式である、本明細書に定義される脂肪族基を意味する。
【０３３０】
「シクロアルコキシ」とは、親分子基に酸素原子を介して付着した、本明細書に定義されるシクロアルキル基を意味する。いくつかの実施形態において、シクロアルコキシ基は、－Ｏ－Ｒであり、式中、Ｒは、本明細書に定義されるシクロアルキル基である。
【０３３１】
「シクロアルキルアルコキシ」とは、親分子基に酸素原子を介して付着した、本明細書に定義されるアルキルシクロアルキル基を意味する。いくつかの実施形態において、シクロアルキルアルコキシ基は、－Ｏ－Ｌ－Ｒであり、式中、Ｌは、本明細書に定義されるアルキレン基であり、Ｒは、本明細書に定義されるシクロアルキル基である。
【０３３２】
「シクロアルキル」とは、別途指定されない限り、３～８個の炭素の一価飽和又は不飽和非芳香族環式炭化水素基を意味し、シクロプロピル、シクロブチル、シクロペンチル、シクロヘキシル、シクロヘプチル、ビシクロ［２．２．１．ヘプチル］などによって例示される。シクロアルキル基はまた、置換されてもよく、又は非置換であってもよい。例えば、シクロアルキル基は、アルキルについて本明細書に記載されるものを含む１つ以上の基で置換され得る。
【０３３３】
「シクロヘテロ脂肪族」とは、環式である、本明細書に定義されるヘテロ脂肪族基を意味する。
【０３３４】
「ジスルフィド」とは、－ＳＳＲを意味し、式中、Ｒは、水素、脂肪族、ヘテロ脂肪族、ハロ脂肪族、ハロヘテロ脂肪族、芳香族、又はそれらのいずれかの組み合わせから選択される。
【０３３５】
「ハロ」とは、Ｆ、Ｃｌ、Ｂｒ、又はＩを意味する。
【０３３６】

「ハロ脂肪族」とは、１つ以上のハロで置換された、本明細書に定義される脂肪族基を意味する。

【０３３７】

「ハロアルキル」とは、１つ以上のハロで置換された、本明細書に定義されるアルキル基を意味する。

【０３３８】

「ハロアルケニル」とは、１つ以上のハロで置換された、本明細書に定義されるアルケニル基を意味する。

【０３３９】

「ハロアルキニル」とは、１つ以上のハロで置換された、本明細書に定義されるアルキニル基を意味する。

【０３４０】

「ハロアルキレン」とは、１つ以上のハロで置換された、本明細書に定義されるアルキレン基を意味する。

【０３４１】

「ハロヘテロ脂肪族」とは、本明細書に定義されるヘテロ脂肪族であって、１個以上の水素原子、例えば、１～１０個の水素原子が、独立して、ハロゲン原子、例えば、フルオロ、ブロモ、クロロ、又はヨードで置き換えられている、ヘテロ脂肪族を意味する。

【０３４２】

「ヘテロ脂肪族」とは、少なくとも１個のヘテロ原子～２０個のヘテロ原子、例えば、１～１５個のヘテロ原子、又は１～５個のヘテロ原子を含む、本明細書に定義される脂肪族基であって、ヘテロ原子が、ホウ素、ハロ、窒素、酸素、リン、セレン、ケイ素、硫黄、及び適用可能な場合、この基内のそれらの酸化形態から選択され得るが、これらに限定されない、脂肪族基を意味する。

【０３４３】

「ヘテロアルキル」、「ヘテロアルケニル」、及び「ヘテロアルキニル」とは、それぞれ、少なくとも１個のヘテロ原子～２０個のヘテロ原子、例えば、１～１５個のヘテロ原子、又は１～５個のヘテロ原子を含む、本明細書に定義されるアルキル、アルケニル、又はアルキニル基（分岐鎖、直鎖、又は環式であることができるもの）であって、ヘテロ原子が、ホウ素、ハロ、窒素（例えば、イミノにおいて存在するもの）、酸素、リン、セレン、ケイ素、硫黄、及び適用可能な場合、この基内のそれらの酸化形態から選択され得るが、これらに限定されない、アルキル、アルケニル、又はアルキニル基を意味する。

【０３４４】

「ヘテロアルキレン」とは、本明細書に記載されるヘテロ脂肪族又はヘテロアルキル基の多価（例えば、二価）形態を意味する。ヘテロアルキレン基は、置換されてもよく、又は非置換であってもよい。例えば、ヘテロアルキレン基は、アルキルについて本明細書に記載される１つ以上の置換基で置換され得る。

【０３４５】

「ヘテロアルケニレン」とは、１つ以上の二重結合を有する任意選択で置換されたヘテロアルキル基である、ヘテロアルケニル基の多価（例えば、二価）形態を意味する。ヘテロアルケニレン基は、環式又は非環式であることができる。ヘテロアルケニレン基は、置換されてもよく、又は非置換であってもよい。例えば、ヘテロアルケニレン基は、アルキルについて本明細書に記載される１つ以上の置換基で置換され得る。

【０３４６】

「ヘテロアルキニレン」とは、１つ以上の三重結合を有する任意選択で置換されたヘテロアルキル基である、ヘテロアルキニル基の多価（例えば、二価）形態を意味する。ヘテロアルキニレン基は、環式又は非環式であることができる。ヘテロアルキニレン基は、置換されてもよく、又は非置換であってもよい。例えば、ヘテロアルキニレン基は、アルキルについて本明細書に記載される１つ以上の置換基で置換され得る。

【０３４７】

「ヘテロ芳香族」とは、少なくとも１個のヘテロ原子～２０個のヘテロ原子、例えば、１～１５個のヘテロ原子、又は１～５個のヘテロ原子を含む、本明細書に定義される芳香族基であって、ヘテロ原子が、ホウ素、窒素、酸素、リン、セレン、ケイ素、硫黄、及びこの基内のそれらの酸化形態から選択され得るが、これらに限定されない、芳香族基を意味する。

【０３４８】

「ヘテロアリール」とは、少なくとも１個のヘテロ原子～６個のヘテロ原子、例えば、１～４個のヘテロ原子を含むアリール基であって、ヘテロ原子が、ホウ素、窒素、酸素、リン、セレン、ケイ素、硫黄、及びこの環内のそれらの酸化形態から選択され得るが、これらに限定されない、アリール基を意味する。そのようなヘテロアリール基は、単一の環又は複数の縮合環を有することができ、縮合環は、芳香族であってもよく、若しくは芳香族でなくてもよく、又はヘテロ原子を含有してもよく、但し、付着点が、芳香族ヘテロアリール基の原子を介するものであることを条件とする。ヘテロアリール基は、水素以外の１つ以上の基、例えば、アルキル、及びアルキルについて本明細書に記載されるいずれかの置換基で置換され得る。ヘテロアリールの非限定的な例としては、芳香族である、本明細書に定義されるヘテロシクリル基のサブセット、すなわち、４ｎ＋２パイ電子を一環式又は多環式環系内に含有するヘテロシクリル基のサブセットが挙げられる。

【０３４９】

「ヘテロアリーレン」とは、本明細書に記載されるヘテロ芳香族又はヘテロアリール基の多価（例えば、二価）形態を意味する。ヘテロアリーレン基の非限定的な例としては、ピリジニレンなどが挙げられる。いくつかの実施形態において、ヘテロアリーレン基は、Ｃ４～１８、Ｃ４～１４、Ｃ４～１２、Ｃ４～１０、Ｃ６～１８、Ｃ６～１４、Ｃ６～１２、又はＣ６～１０ヘテロアリーレン基である。ヘテロアリーレン基は、分岐鎖又は非分岐鎖であることができる。ヘテロアリーレン基はまた、置換されてもよく、又は非置換であってもよい。例えば、ヘテロアリーレン基は、アルキル又はアリールについて本明細書に記載される１つ以上の置換基で置換され得る。

【０３５０】

「ヘテロシクリル」とは、別途指定されない限り、１、２、３、又は４個の非炭素ヘテロ原子（例えば、独立して、窒素、酸素、リン、セレン、ケイ素、又は硫黄からなる群から選択される）を含有する３、４、５、６、又は７員環（例えば、５、６、又は７員環）を意味する。３員環は、０～１つの二重結合を有し、４及び５員環は、０～２つの二重結合を有し、６及び７員環は、０～３つの二重結合を有する。「ヘテロシクリル」という用語はまた、二環式、三環式、四環式、又は他の多環式基を含む。複素環は、アクリジニル、アデニル、アロキサジニル、アザアダマンタニル、アザベンズイミダゾリル、アザビシクロノニル、アザシクロヘプチル、アザシクロオクチル、アザシクロノニル、アザヒポキサンチニル、アザインダゾリル、アザインドリル、アゼシニル、アゼパニル、アゼピニル、アゼチジニル、アゼチル、アジリジニル、アジリニル、アゾカニル、アゾシニル、アゾナニル、ベンズイミダゾリル、ベンズイソチアゾリル、ベンズイソキサゾリル、ベンゾジアゼピニル、ベンゾジアゾシニル、ベンゾジヒドロフリル、ベンゾジオキセピニル、ベンゾジオキシニル、ベンゾジオキサニル、ベンゾジオキソシニル、ベンゾジオキソリル、ベンゾジチエピニル、ベンゾジチニル、ベンゾジオキソシニル、ベンゾフラニル、ベンゾフェナジニル、ベンゾピラノニル、ベンゾピラニル、ベンゾピレニル、ベンゾピロニル、ベンゾキノリニル、ベンゾキノリジニル、ベンゾチアジアゼピニル、ベンゾチアジアゾリル、ベンゾチアゼピニル、ベンゾチアゾシニル、ベンゾチアゾリル、ベンゾチエニル、ベンゾチオフェニル、ベンゾチアジノニル、ベンゾチアジニル、ベンゾチオピラニル、ベンゾチオピロニル、ベンゾトリアゼピニル、ベンゾトリアジノニル、ベンゾトリアジニル、ベンゾトリアゾリル、ベンゾキサチニル、ベンゾトリオキセピニル、ベンゾキサジアゼピニル、ベンゾキサチアゼピニル、ベンゾキサチエピニル、ベンゾキサチオシニル、ベンゾキサゼピニル、ベンゾキサジニル、ベンゾキサゾシニル、ベンゾキサゾリノニル、ベンゾキサゾリニル、ベンゾキサゾリル、ベンジルスルタミル、ベンジルスルチミル、ビピラジニ

ル、ビピリジニル、カルバゾリル（例えば、４Ｈ－カルバゾリル）、カルボニル（例えば、β－カルボニル）、クロマノニル、クロマニル、クロメニル、シンノリニル、クマリニル、シトジニル、シトシニル、デカヒドロイソキノリニル、デカヒドロキノリニル、ジアザビシクロオクチル、ジアゼチル、ジアジリジンチオニル、ジアジリジノニル、ジアジリジニル、ジアジリニル、ジベンズイソキノリニル、ジベンゾアクリジニル、ジベンゾカルバゾリル、ジベンゾフラニル、ジベンゾフェナジニル、ジベンゾピラノニル、ジベンゾピロニル（キサントニル）、ジベンゾキノキサリニル、ジベンゾチアゼピニル、ジベンゾチエピニル、ジベンゾチオフェニル、ジベンゾキセピニル、ジヒドロアゼピニル、ジヒドロアゼチル、ジヒドロフラニル、ジヒドロフリル、ジヒドロイソキノリニル、ジヒドロピラニル、ジヒドロピリジニル、ジヒドロイピリジル（ｄｉｈｙｄｒｏｙｐｙｒｉｄｙｌ）、ジヒドロキノリニル、ジヒドロチエニル、ジヒドロインドリル、ジオキサニル、ジオキサジニル、ジオキシインドリル、ジオキシラニル、ジオキセニル、ジオキシニル、ジオキソベンゾフラニル、ジオキソリル、ジオキソテトラヒドロフラニル、ジオキソチオモルホリニル、ジチアニル、ジチアゾリル、ジチエニル、ジチニル、フラニル、フラザニル、フロイル、フリル、グアニニル、ホモピペラジニル、ホモピペリジニル、ヒポキサンチニル、ヒダントイニル、イミダゾリジニル、イミダゾリニル、イミダゾリル、インダゾリル（例えば、１Ｈ－インダゾリル）、インドレニル、インドリニル、インドリジニル、インドリル（例えば、１Ｈ－インドリル又は３Ｈ－インドリル）、イサチニル、イサチル、イソベンゾフラニル、イソクロマニル、イソクロメニル、イソインダゾイル、イソインドリニル、イソインドリル、イソピラゾロニル、イソピラゾリル、イソキサゾリジニル、イソキサゾリル、イソキノリニル、イソキノリニル、イソチアゾリジニル、イソチアゾリル、モルホリニル、ナフチインダゾリル、ナフチインドリル、ナフチリジニル、ナフトピラニル、ナフトチアゾリル、ナフトチオキソリル、ナフトトリアゾリル、ナフトキシインドリル、ナフチリジニル、オクタヒドロイソキノリニル、オキサビシクロヘプチル、オキサウラシル、オキサジアゾリル、オキサジニル、オキサジリジニル、オキサゾリジニル、オキサゾリドニル、オキサゾリニル、オキサゾロニル、オキサゾリル、オキセパニル、オキセタノニル、オキセタニル、オキセチル、オキシテナイル、オキシインドリル、オキシラニル、オキソベンゾイソチアゾリル、オキソクロメニル、オキソイソキノリニル、オキソキノリニル、オキソチオラニル、フェナントリジニル、フェナントロリニル、フェナジニル、フェノチアジニル、フェノチエニル（ベンゾチオフラニル）、フェノキサチニル、フェノキサジニル、フタラジニル、フタラゾニル、フタリジル、フタルイミジニル、ピペラジニル、ピペリジニル、ピペリドニル（例えば、４－ピペリドニル）、プテリジニル、プリニル、ピラニル、ピラジニル、ピラゾリジニル、ピラゾリニル、ピラゾロピリミジニル、ピラゾリル、ピリダジニル、ピリジニル、ピリドピラジニル、ピリドピリミジニル、ピリジル、ピリミジニル、ピリミジル、ピロニル、ピロリジニル、ピロリドニル（例えば、２－ピロリドニル）、ピロリニル、ピロリジジニル、ピロリル（例えば、２Ｈ－ピロリル）、ピリリウム、キナゾリニル、キノリニル、キノリジニル（例えば、４Ｈ－キノリジニル）、キノキサリニル、キヌクリジニル、セレナジニル、セレナゾリル、セレノフェニル、スクシンイミジル、スルホラニル、テトラヒドロフラニル、テトラヒドロフリル、テトラヒドロイソキノリニル、テトラヒドロイソキノリル、テトラヒドロピリジニル、テトラヒドロピリジル（ピペリジル）、テトラヒドロピラニル、テトラヒドロピロニル、テトラヒドロキノリニル、テトラヒドロキノリル、テトラヒドロチエニル、テトラヒドロチオフェニル、テトラジニル、テトラゾリル、チアジアジニル（例えば、６Ｈ－１，２，５－チアジアジニル又は２Ｈ，６Ｈ－１，５，２－ジチアジニル、チアジアゾリル、チアントレニル、チアニル、チアナフテニル、チアゼピニル、チアジニル、チアゾリジンジオニル、チアゾリジニル、チアゾリル、チエニル、チエパニル、チエピニル、チエタニル、チエチル、チラニル、チオカニル、チオクロマノニル、チオクロマニル、チオクロメニル、チオジアジニル、チオジアゾリル、チオインドキシル、チオモルホリニル、チオフェニル、チオピラニル、チオピロニル、チオトリアゾリル、チオウラゾリル、チオキサニル、チオキソリル、チミジニル、チミニル、トリアジニル、トリアゾリル、トリチアニル、ウラジニル、ウ

ラゾリル、ウレチジニル、ウレチニル、ウリシル、ウリジニル、キサンテニル、キサンチニル、キサンチオニルなど、並びにそれらの修飾形態（例えば、１つ以上のオキソ及び／又はアミノを含むもの）及びそれらの塩を含む。ヘテロシクリル基は、置換されてもよく、又は非置換であってもよい。例えば、ヘテロシクリル基は、アルキルについて本明細書に記載される１つ以上の置換基で置換され得る。

【０３５１】

「ヘテロシクリルオキシ」とは、親分子基に酸素原子を介して付着した、本明細書に定義されるヘテロシクリル基を意味する。いくつかの実施形態において、ヘテロシクリルオキシ基は、－Ｏ－Ｒであり、式中、Ｒは、本明細書に定義されるヘテロシクリル基である。

【０３５２】

「ヘテロシクリロイル」とは、親分子基にカルボニル基を介して付着した、本明細書に定義されるヘテロシクリル基を意味する。いくつかの実施形態において、ヘテロシクリロイル基は、－Ｃ（Ｏ）－Ｒであり、式中、Ｒは、本明細書に定義されるヘテロシクリル基である。

【０３５３】

「ヒドロキシ」とは、－ＯＨを意味する。

【０３５４】

「ヒドロキシアルキル」とは、１～３つのヒドロキシ基によって置換された、本明細書に定義されるアルキル基であって、但し、１つ以下のヒドロキシ基が、アルキル基の単一の炭素原子に付着し得る、アルキル基を意味し、ヒドロキシメチル、ジヒドロキシプロピルなどによって例示される。

【０３５５】

「ヒドロキシアリール」とは、１～３つのヒドロキシ基によって置換された、本明細書に定義されるアリール基であって、但し、１つ以下のヒドロキシ基が、アリール基の単一の炭素原子に付着し得る、アリール基を意味し、ヒドロキシフェニル、ジヒドロキシフェニルなどによって例示される。

【０３５６】

「イミド」とは、＝ＮＲ基を意味し、式中、Ｒが、本明細書に定義されるＨ、脂肪族、アルキル、ヘテロ脂肪族、ヘテロアルキル、芳香族、若しくはアリール、又はそれらのいずれかの組み合わせから選択される。

【０３５７】

「イミノ」とは、－ＮＲ－を意味し、式中、Ｒは、Ｈ、任意選択で置換された脂肪族、アルキル、ヘテロ脂肪族、ヘテロアルキル、芳香族、又はアリールであることができる。

【０３５８】

「ニトロ」とは、－NO_2基を意味する。

【０３５９】

「ニトロアルキル」とは、１～３つのニトロ基によって置換された、本明細書に定義されるアルキル基を意味する。いくつかの実施形態において、ニトロアルキル基は、－Ｌ－ＮＯであり、式中、Ｌは、本明細書に定義されるアルキレン基である。他の実施形態において、ニトロアルキル基は、－Ｌ－Ｃ（ＮＯ）（R^1）－R^2であり、式中、Ｌは、本明細書に定義される共有結合又はアルキレン基であり、R^1及びR^2の各々は、独立して、本明細書に定義されるＨ又はアルキルである。

【０３６０】

「オキソ」又は「酸化物」とは、＝Ｏ基を意味する。

【０３６１】

「オキシ」とは、－Ｏ－を意味する。

【０３６２】

「ホスホノ」又は「ホスホン酸」とは、脱プロトン化及びプロトン化形態を含む、－Ｐ（Ｏ）（$OH)_2$基又はそのような基を含む化合物を意味する。

【０３６３】
「ペルフルオロアルキル」とは、フッ素原子で置換された各水素原子を有する、本明細書に定義されるアルキル基を意味する。ペルフルオロアルキル基の非限定的な例としては、トリフルオロメチル、ペンタフルオロエチルなどが挙げられる。いくつかの実施形態において、ペルフルオロアルキル基は、－（CF_2）$_n$$CF_3$であり、式中、ｎは、０～２０、１～２０、１～１８、１～１６、１～１４、１～１２、１～１０、１～８、２～２０、２～１８、２～１６、２～１４、２～１２、２～１０、２～８、及びそれらの間の範囲の整数である。
【０３６４】
「ペルフルオロアルコキシ」とは、フッ素原子で置換された各水素原子を有する、本明細書に定義されるアルコキシ基を意味する。いくつかの実施形態において、ペルフルオロアルコキシ基は、－Ｏ－Ｒであり、式中、Ｒは、本明細書に定義されるペルフルオロアルキル基である。
【０３６５】
「塩」とは、電気的に中性の化合物又は構造を形成するためのカチオン又はアニオン化合物を含む、化合物又は構造（例えば、本明細書に記載されるいずれかの式、化合物、又は組成物）のイオン形態を意味する。塩は、当該技術分野で周知である。例えば、非毒性塩は、Ｂｅｒｇｅ Ｓ．Ｍ．ｅｔ ａｌ．，“Ｐｈａｒｍａｃｅｕｔｉｃａｌ ｓａｌｔｓ，”Ｊ．Ｐｈａｒｍ．Ｓｃｉ．１９７７ Ｊａｎｕａｒｙ；６６（１）：１－１９、及び“Ｈａｎｄｂｏｏｋ ｏｆ Ｐｈａｒｍａｃｅｕｔｉｃａｌ Ｓａｌｔｓ：Ｐｒｏｐｅｒｔｉｅｓ，Ｓｅｌｅｃｔｉｏｎ，ａｎｄ Ｕｓｅ，”Ｗｉｌｅｙ－ＶＣＨ，Ａｐｒｉｌ ２０１１（２ｎｄ ｒｅｖ．ｅｄ．，ｅｄｓ．Ｐ．Ｈ．Ｓｔａｈｌ ａｎｄ Ｃ．Ｇ．Ｗｅｒｍｕｔｈに記載されている。塩は、インサイツで、本発明の化合物の最終の単離及び精製中に調製されてもよく、又は別個に、遊離塩基を好適な有機酸と反応させる（それによって、アニオン塩を生成する）ことよって調製されてもよく、又は酸基を好適な金属若しくは有機塩と反応させる（それによって、カチオン塩を生成する）ことによって調製されてもよい。代表的なアニオン塩は、酢酸塩、アジピン酸塩、アルギン酸塩、アスコルビン酸塩、アスパラギン酸塩、ベンゼンスルホン酸塩、安息香酸塩、炭酸水素塩、硫酸水素塩、酒石酸水素塩、ホウ酸塩、臭化物塩、酪酸塩、樟脳酸塩、カンフルスルホン酸塩、塩化物塩、クエン酸塩、シクロペンタンプロピオン酸塩、ジグルコン酸塩、二塩酸塩、二リン酸塩、ドデシル硫酸塩、エデト酸塩、エタンスルホン酸塩、フマル酸塩、グルコヘプトン酸塩、グルコン酸塩、グルタミン酸塩、グリセロリン酸塩、ヘミ硫酸塩、ヘプトン酸塩、ヘキサン酸塩、臭化水素酸塩、塩酸塩、ヨウ化水素塩、ヒドロキシエタンスルホン酸塩、ヒドロキシナフトエ酸塩、ヨウ化物塩、乳酸塩、ラクトビオン酸塩、ラウリン酸塩、ラウリル硫酸塩、リンゴ酸塩、マレイン酸塩、マロン酸塩、マンデル酸塩、メシル酸塩、メタンスルホン酸塩、臭化メチル塩、硝酸メチル塩、硫酸メチル塩、ムチン酸塩、２－ナフタレンスルホン酸塩、ニコチン酸塩、硝酸塩、オレイン酸塩、シュウ酸塩、パルミチン酸塩、パモ酸塩、ペクチン酸塩、過硫酸塩、３－フェニルプロピオン酸塩、リン酸塩、ピクリン酸塩、ピバル酸塩、ポリガラクツロ酸塩、プロピオン酸塩、サリチル酸塩、ステアリン酸塩、塩基性酢酸塩、コハク酸塩、硫酸塩、タンニン酸塩、酒石酸塩、テオフィリネート塩、チオシアン酸塩、トリエチオジド塩、トルエンスルホン酸塩、ウンデカン酸塩、吉草酸塩などを含む。代表的なカチオン塩は、金属塩、例えば、アルカリ又はアルカリ土類塩、例えば、バリウム、カルシウム（例えば、エデト酸カルシウム）、リチウム、マグネシウム、カリウム、ナトリウムなど；他の金属塩、例えば、アルミニウム、ビスマス、鉄、及び亜鉛；並びにアンモニウム、テトラメチルアンモニウム、テトラエチルアンモニウム、メチルアミン、ジメチルアミン、トリメチルアミン、トリエチルアミン、エチルアミン、ピリジニウムなどを含むが、これらに限定されない、非毒性アンモニウム、四級アンモニウム、及びアミンカチオンを含む。他のカチオン塩は、有機塩、例えば、クロロプロカイン、コリン、ジベンジルエチレンジアミン、ジエタノールアミン、エチレンジアミン、メチルグルカミン、及びプロカインを含む。尚他の塩は、アンモニウム、スルホニウム

、スルホキソニウム、ホスホニウム、イミニウム、イミダゾリウム、ベンズイミダゾリウム、アミジニウム、グアニジウム、ホスファジニウム、ホスファゼニウム、ピリジニウムなど、及び本明細書に記載される他のカチオン基（例えば、任意選択で置換されたイソキサゾリウム、任意選択で置換されたオキサゾリウム、任意選択で置換されたチアゾリウム、任意選択で置換されたピロリウム、任意選択で置換されたフラニウム、任意選択で置換されたチオフェニウム、任意選択で置換されたイミダゾリウム、任意選択で置換されたピラゾリウム、任意選択で置換されたイソチアゾリウム、任意選択で置換されたトリアゾリウム、任意選択で置換されたテトラゾリウム、任意選択で置換されたフラザニウム、任意選択で置換されたピリジニウム、任意選択で置換されたピリミジニウム、任意選択で置換されたピラジニウム、任意選択で置換されたトリアジニウム、任意選択で置換されたテトラジニウム、任意選択で置換されたピリダジニウム、任意選択で置換されたオキサジニウム、任意選択で置換されたピロリジニウム、任意選択で置換されたピラゾリジニウム、任意選択で置換されたイミダゾリニウム、任意選択で置換されたイソキサゾリジニウム、任意選択で置換されたオキサゾリジニウム、任意選択で置換されたピペラジニウム、任意選択で置換されたピペリジニウム、任意選択で置換されたモルホリニウム、任意選択で置換されたアゼパニウム、任意選択で置換されたアゼピニウム、任意選択で置換されたインドリウム、任意選択で置換されたイソインドリウム、任意選択で置換されたインドリジニウム、任意選択で置換されたインダゾリウム、任意選択で置換されたベンズイミダゾリウム、任意選択で置換されたイソキノリナム（ｉｓｏｑｕｉｎｏｌｉｎｕｍ）、任意選択で置換されたキノリジニウム、任意選択で置換されたデヒドロキノリジニウム、任意選択で置換されたキノリニウム、任意選択で置換されたイソインドリニウム、任意選択で置換されたベンズイミダゾリニウム、及び任意選択で置換されたプリニウム）を含む。

【０３６６】

「シラン」とは、－ＳｉＲ^{Ｓ１}Ｒ^{Ｓ２}Ｒ^{Ｓ３}、－ＳｉＲ^{Ｓ１}Ｒ^{Ｓ２}－、又はそのような基を有する化合物を意味し、式中、Ｒ^{Ｓ１}、Ｒ^{Ｓ２}、及びＲ^{Ｓ３}の各々は、独立して、Ｈ、任意選択で置換された脂肪族、アルキル、ヘテロ脂肪族、ヘテロアルキル、芳香族、アリール、アミン、若しくは本明細書に記載される他のものであるか、又はＲ^{Ｓ１}及びＲ^{Ｓ２}は、各々が付着しているケイ素原子と一緒になって、ヘテロシクリル基を形成する。

【０３６７】

「シリルエーテル」とは、本明細書に定義される、アルコキシ基に共有結合したケイ素原子を含む官能基を意味する。いくつかの実施形態において、シリルエーテルは、－Ｓｉ－Ｏ－Ｒ又はＳｉ－Ｏ－Ｒであり、式中、Ｒは、本明細書に定義されるアルキル基である。

【０３６８】

「スルフィニル」とは、－Ｓ（Ｏ）－基を意味する。

【０３６９】

「スルホ」又は「スルホン酸」とは、脱プロトン化及びプロトン化形態を含む、－Ｓ（Ｏ）$_{2}$ＯＨ基又はそのような基を含む化合物を意味する。

【０３７０】

「スルホニル」又は「スルホネート」とは、－Ｓ（Ｏ）$_{2}$－基又は－ＳＯ$_{2}$Ｒを意味し、式中、Ｒは、本明細書に定義される水素、脂肪族、アルキル、ヘテロ脂肪族、ヘテロアルキル、ハロ脂肪族、ハロヘテロ脂肪族、芳香族、アリール、又はそれらのいずれかの組み合わせから選択される。

【０３７１】

「チオ」とは、－Ｓ－を意味する。

【０３７２】

「チオール」とは、－ＳＨ基を意味する。

【０３７３】

「チオアルコキシ」とは、親分子基に硫黄原子を介して付着した、本明細書に定義されるアルキル基を意味する。非置換チオアルコキシ基の非限定的な例としては、Ｃ$_{1～6}$チ

オアルコキシが挙げられる。いくつかの実施形態において、チオアルコキシ基は、－Ｓ－Ｒであり、式中、Ｒは、本明細書に定義される脂肪族又はアルキル基である。

【０３７４】

「チオアルコキシアルキル」とは、本明細書に定義されるチオアルコキシ基で置換された、本明細書に定義されるアルキル基を意味する。非置換チオアルコキシアルキル基の非限定的な例としては、２～１２個の炭素（$C_{2\sim12}$チオアルコキシアルキル）、並びに１～６個の炭素を有するアルキル基及び１～６個の炭素を有するチオアルコキシ基を有するもの（すなわち、$C_{1\sim6}$チオアルコキシ－$C_{1\sim6}$アルキル）が挙げられる。いくつかの実施形態において、チオアルコキシアルキル基は、－Ｌ－Ｓ－Ｒであり、式中、Ｌは、本明細書に定義されるアルキレンであり、Ｒは、本明細書に定義されるアルキル基である。

【０３７５】

ＩＩ．　官能化された材料を形成する方法

官能化された材料は、いずれかの有用な様式で調製され得る。いくつかの実施形態において、官能化混合物が調製され、この混合物は、基質、溶媒、及び官能部分を提供するための１つ以上の化合物を含む。いくつかの実施形態において、化合物のうちの少なくとも１つは、アミン部分を含み、化合物のうちの少なくとも１つは、シラン部分を含む。特定の実施形態において、少なくとも１つの化合物は、アミン部分及びシラン部分の両方を含む。

【０３７６】

官能化混合物は、いずれかの有用な様式で調製され得る。非限定的な一例において、基質及び溶媒を含む懸濁液混合物が調製され得る。この懸濁液混合物に、化合物（官能部分を提供するためのもの）が、添加されて、官能化混合物を提供することができる。化合物の非限定的な例としては、シランカップリング材料、アミノシラン、ポリアミン、又はこれらの化合物のうちのいずれかの組み合わせが挙げられる。いくつかの実施形態において、官能化は、溶液ベースの反応条件を使用して行われる。

【０３７７】

様々な方法が、本明細書に記載される官能化された材料を提供するために用いられ得る。いくつかの実施形態において、官能化された材料（例えば、官能化された多孔質シリカ）は、溶液ベースの反応方法を使用して生成され得、方法において、アミノシラン化合物（例えば、アミン部分及びシラン部分を有する化合物）が溶媒和し、基質が添加される。シラン部分は、表面に結合し、アミン部分は、シラン部分から延びる。官能化された基質は、溶媒から濾過され得、洗浄され得、乾燥に供され得る。そのような方法（例えば、図５Ａ、５Ｂ、及び５Ｅにおけるプロセス）は、本明細書に記載されるいずれかの官能化された材料（例えば、図１Ａ～１Ｃにおける官能化された材料１００Ａ～１００Ｃ）を提供することができる。

【０３７８】

いくつかの実施形態において、事前官能化された材料（例えば、官能化された多孔質シリカ）は、溶液ベースの反応方法を使用して生成され得、方法において、シラン含有化合物（例えば、アミン部分及びシラン部分を有するアミノシラン化合物）が溶媒和し、基質が添加される。シラン部分（例えば、アルコキシシラン部分）は、表面に結合し、アミン部分は、シラン部分から延びる。事前官能化された基質は、溶媒から濾過され得、洗浄され得、乾燥に供され得る。ポリマー／オリゴマーアミン化合物が溶媒和することができ、事前官能化された基質が添加され得る。混合物が、かき混ぜられ得、次いで、乾燥に供され得、それによって、基質を、シラン含有化合物及びポリマー／オリゴマーアミンの両方で官能化する。そのような方法（例えば、図５Ｂ及び５Ｅにおけるプロセス）は、本明細書に記載されるいずれかの官能化された材料（例えば、図１Ａ～１Ｃにおける官能化された材料１００Ａ～１００Ｃ）を提供することができる。

【０３７９】

いくつかの実施形態において、官能化された材料（例えば、官能化された多孔質シリカ

）は、水ベースの反応方法を使用して生成され得、方法において、ポリアミン（例えば、複数のアミン部分を有する化合物）及びアミノシラン化合物（例えば、アミン部分及びシラン部分を有する化合物）が、水中で溶媒和し、基質が添加される。ポリアミン及びアミノシラン化合物は、反応して、複合ネットワークを形成し、次いで、複合ネットワークは、基質の表面に結合している。得られた材料は、水から濾過され得、任意選択で、洗浄され得、乾燥に供され得る。そのような方法（例えば、図５Ｆにおけるプロセス）は、本明細書に記載されるいずれかの官能化された材料（例えば、図１Ａ～１Ｃにおける官能化された材料１００Ａ～１００Ｃ）を提供することができる。

【０３８０】

いくつかの実施形態において、官能化された材料（例えば、官能化された多孔質シリカ）は、溶媒ベースの反応方法を使用して生成され得、方法において、ポリアミン（例えば、複数のアミン部分を有する化合物）が溶媒和し、基質が添加される。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、官能化された材料における増加した炭素捕捉（例えば、２ｍｏｌ／ｋｇ超）のための増加した数のアミン部分を有する。得られた材料は、かき混ぜられ得、任意選択で、濾過され得、任意選択で、洗浄され得、乾燥に供され得る。そのような方法（例えば、図５Ｇにおけるプロセス）は、本明細書に記載されるいずれかの官能化された材料（例えば、図１Ａ～１Ｃにおける官能化された材料１００Ａ～１００Ｃ）を提供することができる。

【０３８１】

いくつかの実施形態において、官能化された材料（例えば、官能化された多孔質シリカ）は、溶媒ベースの反応方法を使用して生成され得、方法において、オリゴマーエチレンアミン化合物（例えば、複数のエチレン基及びアミン部分を有する化合物、並びに本明細書に記載されるいずれかのものを含む、そのような化合物の混合物）が溶媒和し、基質が添加される。いくつかの実施形態において、オリゴマーエチレンアミン化合物又はその混合物は、官能化された材料における増加した炭素捕捉（例えば、１ｍｏｌ／ｋｇ超）のための増加した数のアミン部分を有する。得られた材料は、かき混ぜられ得、任意選択で、濾過され得、任意選択で、洗浄され得、乾燥に供され得る。そのような方法（例えば、図５Ｈにおけるプロセス）は、本明細書に記載されるいずれかの官能化された材料（例えば、図１Ａ～１Ｃにおける官能化された材料１００Ａ～１００Ｃ）を提供することができる。

【０３８２】

いくつかの実施形態において、官能化された材料（例えば、官能化されたＭＯＦ）は、反応器ベースの溶媒熱（例えば、水熱）合成方法を使用して生成され得、方法において、金属供給源、リガンド、及び競合剤が、一緒に反応して、基質を形成し、次いで、アミノシランが、溶媒媒体中で溶媒和し、基質に提供される。シラン部分は、ＭＯＦの表面上のヒドロキシ基と反応し、アミン部分は、シラン部分から延びる。粉末は、溶媒から濾過され得、洗浄され得、乾燥に供され得る。そのような方法（例えば、図５Ｃにおけるプロセス）は、本明細書に記載されるいずれかの官能化された材料（例えば、図１Ａ～１Ｃにおける官能化された材料１００Ａ～１００Ｃ）を提供することができる。

【０３８３】

いくつかの実施形態において、官能化された材料（例えば、官能化された樹脂）は、溶液ベースの反応条件を使用して生成され得、反応条件において、アミン（例えば、ポリアミンを含むことができる１、２つ、又はそれ以上のアミン部分を有する化合物）が溶媒和し、樹脂が添加される。アミン部分は、樹脂の表面上に存在する反応性部位と相互作用し（例えば、酸性反応性部位に結合し）、それによって、吸着部分（例えば、アミン部分）を有する官能化された樹脂を提供する。官能化された樹脂は、精製され得、乾燥に供され得、任意選択で、活性化され得る。そのような方法（例えば、図５Ｄにおけるプロセス）は、本明細書に記載されるいずれかの官能化された材料（例えば、図１Ａ～１Ｃにおける官能化された材料１００Ａ～１００Ｃ）を提供することができる。

【０３８４】

本明細書及びいくつかの非限定的な実施形態におけるいずれかの基質について、より長い炭素鎖長さ及び高いアミノ基密度を有するアミノシラン化合物が、炭素捕捉潜在性を増加させるために使用され得、追加のシラン部分は、基質の表面へのシラン－アミン化合物の結合強度を増加させ得る。これは、低いCO_2濃度、例えば、直接空気捕捉であっても高い二酸化炭素捕捉容量が可能な官能化された材料を生成することができる。

【０３８５】

脱着は、研究室温度（例えば、７０℃超）及び０．３ｐｓｉ未満で実行され得、それによって、官能化された材料が、二酸化炭素を含むガス混合物に再導入されて、繰り返し再捕捉を可能にする。いくつかの実装態様において、高い吸着／脱着サイクル計数が達成される（例えば、１００回超のサイクル又は１０００回超のサイクル）。

【０３８６】

他の実施形態において、官能化された材料は、少なくとも２つの化合物を使用することによって生成され得る。例えば、非限定的に、共有結合したシランの第１の層は、ポリマー／オリゴマーアミン化合物を、増加した安定性で結合させるための、基質の更なる表面修飾を可能にすることができる。いくつかの実施形態において、第１の化合物は、シラン又はアミノシランであり、第２の化合物は、ポリマー／オリゴマーアミン、例えば、ポリエチレンイミン（ＰＥＩ）であることができ、増加した炭素捕捉（例えば、２ｍｏｌのCO_2／ｋｇ超）のための増加した数のアミン部分を有する。官能化された多孔質材料は、溶液ベースの反応方法を使用して生成され得、方法において、シラン含有化合物が溶媒和し、基質（例えば、シリカ粉末）が添加され得る。シラン部分は、アミン部分が延びる基質の表面に共有結合する。事前官能化された粉末は、溶媒から濾過され得、洗浄され得、乾燥に供され得る。

【０３８７】

次いで、ポリマー／オリゴマーアミン化合物は、溶媒和することができ、事前官能化された粉末は、添加されて、官能化混合物を形成することができる。混合物が、かき混ぜられ得、次いで、乾燥に供され得、基質を、シラン含有化合物及びポリマー／オリゴマーアミンの両方で官能化する。脱着は、研究室温度（例えば、７０℃超）で実行され得、それによって、官能化された多孔質材料が、二酸化炭素に再導入されて、再捕捉を可能にする。高い吸着／脱着サイクル計数が達成され得る（例えば、１００回超のサイクル）。いくつかの実施形態において、吸着剤は、最大１．５～１．８ｍｏｌのCO_2／ｋｇ又は０．５～１．８ｍｏｌのCO_2／ｋｇのCO_2取り込みを、４２０ｐｐｍのCO_2の周囲空気条件において達成する。そのような方法（例えば、図５Ｂ、５Ｅ、又は５Ｈにおけるプロセス）は、本明細書に記載されるいずれかの官能化された材料（例えば、図１Ａにおける官能化された材料１００Ａ又は図１Ｃにおける官能化された材料１００Ｃ）を提供することができる。

【０３８８】

官能化後に、得られた材料は、更に精製され得、乾燥に供され得、かつ／又は活性化され得る。活性化は、官能化された材料内の残留溶媒を除去するためのいずれかのプロセスを含むことができる。活性化は、熱、加熱空気、真空加熱など（例えば、約７０℃の温度へのもの）の使用を含むことができる。

【０３８９】

ｉ．官能化

本明細書における方法は、基質及び溶媒媒体を含む懸濁液混合物を形成することを含むことができる。溶媒媒体は、１つ以上の溶媒を含むことができる。次いで、化合物（官能部分を提供するためのもの）が、懸濁液混合物中に含められ得、それによって、官能化材料を形成する。

【０３９０】

いずれかの有用な試薬又は化合物が、官能部分を基質に提供するために用いられ得る。非限定的な試薬及び化合物は、シランカップリング材料（例えば、アミノシラン）、複数のシランカップリング材料（例えば、複数のアミノシラン）、ポリアミン、複数のポリア

ミン、モノアミン、複数のモノアミン、アミン化合物（例えば、ポリアミン又はモノアミン）との組み合わせでのシランカップリング材料（例えば、アミノシラン）、モノアミンとの組み合わせでのポリアミンなどを含む。そのような試薬及び化合物は、単一の溶液（例えば、単一の懸濁液混合物）又は別個の溶液（例えば、別個の懸濁液混合物）において提供され得る。

【０３９１】

いくつかの実施形態において、懸濁液混合物は、反応して基質を形成することができる試薬を含むことができる。例えば、非限定的に、本明細書における方法は、１つ以上の試薬を含む懸濁液混合物を形成して、基質及び溶媒媒体を提供することを含むことができる。溶媒媒体は、１つ以上の溶媒を含むことができる。次いで、化合物（官能部分を提供するためのもの）が、懸濁液混合物中に含められ得、それによって、官能化材料を形成する。

【０３９２】

いくつかの実施形態において、本明細書における方法は、溶媒媒体及び官能部分を提供するための少なくとも１つの化合物を含む官能化混合物を形成することを含むことができる。いくつかの実施形態において、官能化混合物は、更なる構成要素（例えば、基質）を含むことができ、次いで、更なる構成要素は、官能化された材料を提供することができる。

【０３９３】

他の実施形態において、本明細書における方法は、第１の溶媒媒体及び第１の化合物を含む事前官能化混合物を形成して、官能部分の一部分を提供する（例えば、それによって、事前官能化された材料を提供する）ことと、次いで、事前官能化混合物からの１つ以上の構成要素及び第２の溶媒媒体を含む官能化混合物を形成することと、を含むことができる。いくつかの実施形態において、事前官能化混合物は、更なる構成要素（例えば、基質）を含むことができ、次いで、更なる構成要素は、事前官能化された材料を提供することができ、官能化混合物は、更なる構成要素（例えば、基質又は事前官能化された基質）を含むことができ、次いで、更なる構成要素は、官能化された材料を提供することができる。本明細書におけるいずれかの実施形態において、事前官能化混合物は、事前官能化された材料（例えば、任意選択で更に反応することができるもの）を提供することができ、官能化混合物は、官能化された材料を提供することができる。

【０３９４】

任意選択で、懸濁液混合物、事前官能化混合物、及び／又は官能化混合物は、粒子サイズ若しくは分布についての変化を最小化するか、又は粒子分解を最小化する撹拌方法で形成され得る。非限定的な撹拌方法は、オーバーヘッド撹拌を含むことができる。

【０３９５】

いずれかの有用な溶媒が、混合物（例えば、懸濁液混合物、事前官能化混合物、又は官能化混合物）中で用いられ得る。いくつかの実施形態において、溶媒は、官能部分を提供するための化合物を溶解する有機溶媒である。いくつかの実施形態において、溶媒は、シロキサン結合を加水分解させない。いくつかの例において、溶媒媒体は、中性非プロトン性有機溶媒（例えば、トルエン、ヘキサン、シクロヘキサン、又はテトラヒドロフラン（ＴＨＦ））又はそれらの溶媒混合物である。いくつかの実施形態において、溶媒媒体は、メタノール、シクロヘキサン、エタノール、水、又はそれらの溶媒混合物を含むことができる。いくつかの実施形態において、液体は、シクロヘキサン及びエタノールを、体積による１：１～５：１の範囲の混合物比で含むことができる。

【０３９６】

いくつかの実施形態において、５０°～１００℃の範囲の沸点を有する１つ以上の溶媒が望ましくあり得る。

【０３９７】

いくつかの実施形態において、溶媒媒体の量（例えば、懸濁液混合物中、事前官能化混合物中、又は官能化混合物中）が最小化され得る。例えば、非限定的に、溶媒媒体は、器

内の基質を全体的に覆うように、例えば、基質に対して０．５ｍＬ／ｇ超（例えば、１ｍＬ／ｇ、２ｍＬ／ｇ、５ｍＬ／ｇ、８ｍＬ／ｇ、１０ｍＬ／ｇ、若しくは１５ｍＬ／ｇ、又は０．５～１０ｍＬ／ｇ、０．５～５ｍＬ／ｇ、１～５ｍＬ／ｇ、若しくは１～３ｍＬ／ｇの範囲）の溶媒媒体を分注することによって分注され得る。

【０３９８】

混合物（例えば、懸濁液混合物、事前官能化混合物、又は官能化混合物）は、いずれかの有用な様式で更に処理され得る。例えば、非限定的に、混合物は、（例えば、所望の溶解、吸着、又は反応条件を提供するように）加熱され得る。いくつかの実施形態において、混合物は、約２０°～９０℃の温度に加熱される。他の処理方法は、撹拌、冷却などを含むことができる。

【０３９９】

いくつかの実施形態において、事前官能化混合物は、事前官能化された材料を溶媒から分離するように処理され得る。いくつかの事例において、事前官能化された材料は、官能化された混合物を調製するために使用され得る。いくつかの実施形態において、官能化混合物（例えば、事前官能化混合物を用いて、又はそれを用いることなく調製されたもの）は、官能化された材料を溶媒から分離するように処理され得る。そのようなプロセスは、濾過、洗浄などを含むことができる。濾過は、当該技術分野で既知の、固相を液相から分離するための方法を使用して実行され得る。これは、真空濾過、遠心分離、真空蒸発、又はこれらの若しくは他の方法の組み合わせを含むことができるが、これらに限定されない。

【０４００】

洗浄は、１つ以上の溶媒の存在下で実行されて、いずれもの未反応の化合物を除去することができる。いずれかの溶媒が用いられ得る（例えば、洗浄溶媒としてのいずれかの中性非プロトン性溶媒）。いくつかの実施形態において、単一の洗浄ステップは、官能化された材料を、洗浄体積の新鮮な溶媒媒体に浸し、これにより、官能化された材料が、全体的に、新鮮な溶媒媒体中に浸されることを含むことができる。いくつかの実装態様において、１つ以上の洗浄ステップ（例えば、２回の洗浄、３回の洗浄、４回の洗浄、又はそれ以上）が実行され得る。官能化された材料から分離されたか、又は官能化された材料を洗浄するために使用された体積の溶媒媒体は、廃棄されてもよく、貯蔵されてもよく、又は再循環してもよい。

【０４０１】

官能化された材料は、使用前に乾燥に供され得る。官能化されたシリカ材料を乾燥させることは、温度を増加させること、大気圧を低減すること、不活性乾燥ガスを試料の上に通すこと、又はこれらの組み合わせを含むことができる。

【０４０２】

いくつかの非限定的な実施形態において、官能化された材料は、（例えば、真空オーブンにおいて）約３０°～８０℃の温度で６～１２時間の期間にわたって、研究室規模のプロセス（例えば、５００ｇ未満）について、乾燥に供される。更なる条件は、より大規模な処理のために最適化され得、乾燥プロセスは、当業者によって理解されるように、官能化された材料の質量、温度、圧力、及び他の条件に依存し得る。試料を通る不活性ガス流（例えば、５０ｍＬ／分のN_2流）での（例えば、熱重量分析（ＴＧＡ）において測定された場合の）、約１５％の重量損失（例えば、溶媒除去のための重量損失）又は最小重量損失（例えば、約２時間の期間にわたって１００℃で約５％未満の重量損失）を有する試料を提供するためのいずれかの条件が用いられ得る。

【０４０３】

ｉｉ．　官能化されたシリカの調製

本明細書に記載されるように、本明細書における方法は、懸濁液混合物を調製することを含むことができ、次いで、懸濁液混合物は、シリカ及びシリカの表面を官能化するための試薬を含む。次いで、そのような懸濁液混合物は、官能部分を提供するための少なくとも１つの化合物との組み合わせで使用され得、それによって、事前官能化混合物（例えば

、官能部分の一部分を提供するための構成要素を有するもの）又は官能化混合物（例えば、完全に組織化された官能部分を提供するための構成要素を有するもの）を形成する。

【０４０４】

いずれかの有用な試薬又は化合物が、官能部分をシリカに提供するために用いられ得る。非限定的な試薬及び化合物は、シランカップリング材料（例えば、アミノシラン）、複数のシランカップリング材料（例えば、複数のアミノシラン）、ポリアミン、複数のポリアミン、モノアミン、複数のモノアミン、アミン化合物（例えば、ポリアミン又はモノアミン）との組み合わせでのシランカップリング材料（例えば、アミノシラン）、モノアミンとの組み合わせでのポリアミンなどを含む。そのような試薬及び化合物は、単一の溶液（例えば、単一の懸濁液混合物）又は別個の溶液（例えば、別個の懸濁液混合物）において提供され得る。

【０４０５】

いくつかの実施形態において、方法は、シラン部分及びアミン部分を含む第１の化合物を含む第１の試薬を、液体混合物中に、第１の化合物のシラン部分が基質（例えば、多孔質シリカ粒子）の表面に化学結合することを引き起こして、官能化された材料（例えば、官能化されたシリカ粒子）を形成するのに十分な条件下で導入することであって、液体混合物が、液体及び基質を含む、導入することと、官能化された材料を液体から除去することと、を含む。

【０４０６】

いくつかの実施形態において、方法は、シラン部分及びアミン部分を含む第１の化合物を含む第１の試薬を、第１の液体混合物中に、第１の化合物のシラン部分が基質（例えば、多孔質シリカ粒子）の表面に化学結合することを引き起こして、官能化された材料（例えば、官能化されたシリカ粒子）を形成するのに十分な条件下で導入することであって、第１の液体混合物が、液体及び基質を含む、導入することと、官能化された材料を液体から除去することと、官能化された材料を、（例えば、真空オーブンにおいて）水和閾値に達するまで乾燥させることと、ポリアミンを含む第２の化合物を含む第２の試薬を、第２の液体混合物中に、第２の化合物が第１の化合物と相互作用することを引き起こして、複合ネットワーク又は表面官能化層を形成するのに十分な条件下で導入することであって、第２の液体混合物が、第２の液体及び官能化された材料を含む、導入することと、更なる官能化された材料を第２の液体から除去することと、を含む。いくつかの実施形態において、更なる官能化された材料は、官能化されたシリカ酸化物粒子を含む。

【０４０７】

第１の試薬は、シラン部分を含むことができる。いくつかの実施形態において、シラン部分は、アルコキシシラン部分を含む。アルコキシシラン部分の非限定的な例としては、メトキシシラン（例えば、－Ｓｉ（ＯＭｅ）$_{d}$（Ｘ）$_{3-d}$であり、式中、各Ｘは、独立して、本明細書に記載されるいずれかのものである側基、反応性基、又は脱離基であり、ｄは、１、２、又は３の整数である）、又はエトキシシラン（例えば、－Ｓｉ（ＯＥｔ）$_{d}$（Ｘ）$_{3-d}$であり、式中、各Ｘは、独立して、本明細書に記載されるいずれかのものである側基、反応性基、又は脱離基であり、ｄは、１、２、又は３の整数である）が挙げられる。アルコキシシラン部分を提供するための化合物は、R^{A}Ｓｉ（ＯＭｅ）$_{d}$（Ｘ）$_{3-d}$又はR^{A}Ｓｉ（ＯＥｔ）$_{d}$（Ｘ）$_{3-d}$を含むことができ、式中、各R^{A}は、独立して、アミン部分であり、各Ｘは、独立して、本明細書に記載されるいずれかのものである側基、反応性基、又は脱離基であり、ｄは、１、２、又は３の整数である）。化合物の非限定的な例としては、（３－アミノプロピル）トリメトキシシラン、（３－アミノプロピル）トリエトキシシラン、［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシラン、Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミン、又はアミノシランオリゴマー（例えば、Ｅｖｏｎｉｋ　Ｉｎｄｕｓｔｒｉｅｓ　ＡＧ、Ｅｓｓｅｎ，Ｇｅｒｍａｎｙからの修飾された有機官能性ポリシロキサンであるＶＰＳ　ＳＩＶＯ　２８０）が挙げられる。いくつかの実施形態において、アミノシランオリゴマーは、アミノシランのオリゴマーである（例えば、本明細書におけるいずれかのアミノシランのオリゴマ

ー、例えば、$R^A Si[OMe]_d[X]_{3-d}$のオリゴマー又は$R^A Si[OEt]_d[X]_{3-d}$のオリゴマーであり、式中、各R^Aは、独立して、アミン部分であり、各Xは、独立して、本明細書に記載されるいずれかのものである側基、反応性基、又は脱離基であり、dは、１、２、又は３の整数である）。いくつかの実施形態において、アミノシランオリゴマーは、式$[-SiR^{S1}R^{S2}-L-NR^{N1}-]_n$又は$[-SiR^{S1}R^{S2}-NR^{N1}-L-NR^{N2}-]_n$の構造を含み、式中、$R^{S1}$及び$R^{S2}$の各々が、独立して、脱離基、反応性基、水素（Ｈ）、任意選択で置換された脂肪族、ヘテロ脂肪族、芳香族、又はヘテロ芳香族（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であり、各Lが、リンカー（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であり、R^{N1}及びR^{N2}の各々が、独立して、本明細書に記載されるいずれかのものであり、nが、１以上の整数である。

【０４０８】

いくつかの実施形態において、シラン部分は、ヒドロキシシラン部分を含む。ヒドロキシシラン部分の非限定的な例としては、シラノール、シランジオール、又はシラントリオールが挙げられる。いくつかの実施形態において、ヒドロキシシラン部分は、$-Si(OH)R^{S1}R^{S2}$、$-Si(OH)_2R^{S1}$、又は$-Si(OH)_3$を含み、式中、R^{S1}及びR^{S2}の各々は、独立して、脱離基、反応性基、水素（Ｈ）、任意選択で置換された脂肪族、ヘテロ脂肪族、芳香族、又はヘテロ芳香族である。いくつかの実施形態において、ヒドロキシシラン部分を含む化合物は、式$R^A Si[OH]_d[R^{S1}]_{3-d}$の構造を含み、式中、$R^A$は、アミン部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であり、R^{S1}は、脱離基、反応性基、水素（Ｈ）、任意選択で置換された脂肪族、ヘテロ脂肪族、芳香族、又はヘテロ芳香族であり、dは、１、２、又は３の整数である。化合物の非限定的な例としては、３－アミノプロピルシラントリオール又はＮ－（２－アミノエチル）－３－アミノプロピルシラントリオールが挙げられる。

【０４０９】

いくつかの実施形態において、シラン部分は、ハロシラン部分を含む。ハロシラン部分の非限定的な例としては、クロロシラン、フルオロシラン、ブロモシラン、又はヨードシランが挙げられる。いくつかの実施形態において、ハロシラン部分を含む化合物は、式$[R^A]_d Si[X]_{3-d}$の構造を含み、式中、R^Aは、アミン部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であり、Xは、ハロであり、dは、１、２、又は３の整数である。化合物の非限定的な例としては、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシラン又はトリス（ジメチルアミノ）クロロシランが挙げられる。

【０４１０】

第１の試薬は、シラン部分及びアミン部分（例えば、アミノシランにおけるもの、例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含むことができる。第２の試薬は、２つ以上のアミン部分を含むことができる。いくつかの実施形態において、第２の試薬は、ポリアミン（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）である。第２の化合物の非限定的な例としては、直鎖又は分岐鎖ポリアミン、ポリエチレンイミン（ＰＥＩ）、ポリプロピレンイミン、テトラエチレンペンタミン（ＴＥＰＡ）、トリエチレンテトラミン（ＴＥＴＡ）、ジエタノールアミン（又はジエタノールアミンのポリマー形態）、大分子量アミン混合物（ＢＡＳＦ　Ａｍｉｘ　１０００）、又は本明細書に記載される他のポリアミンが挙げられる。

【０４１１】

いくつかの実施形態において、方法は、アルコキシシラン部分及びアミン部分を含む第１の化合物を含む第１の試薬を、液体及び基質（例えば、多孔質シリカ粒子）を含む第１の液体混合物中に、第１の化合物のアルコキシシラン部分が基質の表面に化学結合することを引き起こして、事前官能化された材料（例えば、事前官能化又は修飾されたシリカ粒子）を形成するのに十分な条件下で導入することと、事前官能化された材料を液体から除去することと、事前官能化された材料を、（例えば、真空オーブンにおいて）水和閾値に達することができるまで乾燥させることと、ポリアミンを含む第２の化合物を含む第２の

試薬を、第２の液体及び事前官能化された材料を第２の液体混合物中に、第２の化合物のアミン部分が第１の化合物のアミン部分に化学結合することを引き起こして、官能化された材料（例えば、官能化されたシリカ粒子）を形成するのに十分な条件下で導入することと、官能化された材料（例えば、官能化されたシリカ粒子又は官能化されたシリカ酸化物粒子）を第２の液体から除去することと、を含む。

【０４１２】

非限定的な実装態様において、水ベースの反応が用いられ得る。いくつかの実施形態において、官能化された材料は、水ベースの反応方法を使用して生成され、方法において、ポリアミン及びアミノシランが、水中に溶解されて、溶液を形成する。アミノシランは、加水分解し、アミノシランオリゴマーを形成する。ポリアミン及びアミノシランは、水中で室温で反応し、複合ネットワークを、結合相互作用（例えば、非共有結合相互作用、例えば、イオン及び／又は水素結合）を介して形成する。基質は、溶液に添加され得、結合したポリアミン及びシランと反応することが可能にされ得る。アミノシランは、基質の表面上に縮合し得る（例えば、シロキサン結合が、シリカ基質と形成され得る）。機構によって制限されることを望むことなく、結合したアミノシランは、ポリアミンと、ポリマー絡み合い、イオン相互作用、及び／又は水素結合を介して相互作用することができ、それによって、ネットワークを基質に結合させ、官能化された材料を作製する。

【０４１３】

いくつかの実施形態において、方法は、ポリアミンを含む第１の試薬、シラン部分及びアミン部分を含む第２の試薬、並びに基質（例えば、多孔質シリカ粒子）を、ある体積の水中に、ポリアミンのアミン部分が基質の表面と（例えば、イオン相互作用、水素結合相互作用などによって）相互作用することを引き起こし、第２の試薬のシラン部分が基質の表面に化学結合することを引き起こし、それによって、官能化された材料（例えば、官能化されたシリカ粒子）を形成するのに十分な条件下で導入することと、官能化された材料を水から除去することと、を含む。いくつかの実施形態において、方法は、官能化された材料を、真空オーブンにおいて８０℃で、水和閾値に達する（例えば、官能化された材料に対して５％（重量／重量）未満の水）まで乾燥させることを更に含むことができる。

【０４１４】

いくつかの実施形態において、方法は、ポリエチレンイミンを含む第１の試薬、並びにシラン部分及びアミン部分を含む第２の試薬を、ある体積の水中に導入して、懸濁液を作製することと、懸濁液を５～１０分の範囲の第１の持続期間にわたって撹拌することと、基質（例えば、多孔質シリカ粒子）を懸濁液中に導入して、官能化混合物を作製することと、官能化混合物を５～２０分の範囲の第２の持続期間にわたって撹拌して、官能化された材料を作製することと、官能化された材料を濾過又は蒸発によって回収することと、官能化された材料を１２０℃で２０分間以下乾燥させることと、を含む。機構又は理論によって制限されることを望むことなく、乾燥させることは、官能化された材料の酸化を最小化する条件（例えば、真空なしで、乾燥させるのに十分に高い温度で、２０分未満の期間内で、ＴＧＡ又は本明細書における他の方法によって測定された場合の乾燥まで加熱する条件）下で行われ得る。

【０４１５】

いずれかの有用な濃度が用いられ得る。いくつかの実施形態において、基質は、多孔質シリカ粒子を含み、多孔質シリカ粒子は、上記の体積の水中に、１５０％～３００％（重量／重量）又は２～２．５ｍＬ／ｇの水対多孔質シリカ粒子（例えば、１５０％～２５０％（重量／重量）、２００％～３００％（重量／重量）、又は２００％～２５０％（重量／重量）の水対多孔質シリカ粒子）の比で添加され得る。溶媒対シリカ比は、用いられるコーティング方法に基づいて適合され得る。例えば、非限定的に、約２．２ｍＬ／ｇの細孔体積及び約０．２５ｇ／ｍＬの密度を有するシリカ基質について、１ｇのシリカが、２～２．５ｍＬの溶液を用いて、シリカを完全に湿らせる（例えば、細孔を充填する）ことができる。溶媒対シリカのより低い比は、不完全な湿しをもたらし得、溶媒対シリカのより大きい比は、シリカの表面上及び粒子間の過剰な溶媒をもたらし得る。溶媒タイプ及び

シリカと溶媒との相互作用に基づく変動が観察され得る。シリカの所与の非限定的な例について、２～２．５ｍＬ／ｇ以下の溶液比が、湿し又はスプレーコーティングプロセスのために用いられ得る。この場合、溶液は、混合されてもよく、又はシリカ基質上にスプレーされてもよく、全体的に吸収される。シリカの所与の非限定的な例について、２．５ｍｌ／ｇ超のより大きい溶液比が、過剰な溶液が濾過除去され得る浸漬コーティング又は液浸／スラリープロセスのために用いられ得る。シリカの所与の非限定的な例について、１．５ｍＬ／ｇ未満の非常に低い溶媒比が、ある程度の深さまでのシリカの表面のみがアミンでコーティングされるプロセスのために使用され得る。これは、スプレーコーティングによって行われて、均一な表面コーティングを達成することができる。他の比及びプロセスが用いられ得る。

【０４１６】

第１の試薬は、水に、５％～２５％（重量／重量）の第１の試薬対多孔質シリカ粒子の比で添加され得る。機構及び理論によって制限されることを望むことなく、より高い比は、ある程度までのより高いCO_2取り込みを提供することができる。例えば、非限定的に、より高い比（例えば、大きいＭＷのポリアミン又はポリマーポリアミンのもの）は、より粘着性になり得、これは、取り扱いなどについて問題であり得る。いくつかの実施形態において、最大比は、第１の試薬による細孔封鎖によって制限され得る。細孔が、過ロードによって完全に充填又は封鎖された場合、CO_2は、効率的に、細孔に入らないことがあるか、又はそれを出ないことがあり、これにより、動態及び性能が影響され得る。いくつかの実施形態において、ポリアミン比を増加させることは、ある点後の性能における回復の低下をもたらし得る。いくつかの実施形態において、ポリアミンの存在は、ある程度までアミノシランと相乗的であり得る。

【０４１７】

第２の試薬は、水に、２０％～８０％（重量／重量）の第２の試薬対多孔質シリカ粒子の比で添加され得る。機構及び理論によって制限されることを望むことなく、より高い比は、ある程度までのより高いCO_2取り込みをもたらす。例えば、非限定的に、より高い比（例えば、アミノシラン）は、粘着性に有意に寄与しないことがあるが、細孔充填又は封鎖に寄与し得る。いくつかの実施形態において、アミノシランの存在は、ある程度までポリアミンと相乗的である。いくつかの実施形態において、アミノシランは、ポリアミンの安定性を、ある程度まで改善し得る。いくつかの実施形態において、アミノシラン比を増加させることは、ある点後の性能における回復の低下をもたらし得る。

【０４１８】

第１の試薬は、２つ以上のアミン部分を含むことができる。いくつかの実施形態において、第１の試薬は、ポリアミン（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）である。第２の試薬は、シラン部分及びアミン部分（例えば、アミノシランにおけるもの、例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含んでもよく、又はポリアミン（例えば、本明細書に記載されるもの）を含んでもよい。第２の試薬の非限定的な例としては、アルコキシシラン、メトキシシラン、シラントリオール、アルコキシシラノール、クロロシラン、ヒドロシラン、エトキシシラン、ポリアミン（例えば、直鎖又は分岐鎖ポリアミン）、又は本明細書に記載される他のもの（例えば、（３－アミノプロピル）トリメトキシシラン、（３－アミノプロピル）トリエトキシシラン、［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシラン、Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミン、３－アミノプロピルシラントリオール、Ｎ－（２－アミノエチル）－３－アミノプロピルシラントリオール、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシラン、トリス（ジメチルアミノ）クロロシラン、アミノシランオリゴマー（例えば、ＥｖｏｎｉｋからのＶＰＳ　ＳＩＶＯ　２８０）、ポリエチレンイミン（ＰＥＩ）、ポリプロピレンイミン、テトラエチレンペンタミン（ＴＥＰＡ）、トリエチレンテトラミン（ＴＥＴＡ）、若しくは大分子量アミン混合物（例えば、ＢＡＳＦ　Ａｍｉｘ　１０００）が挙げられる。

【０４１９】

いくつかの実施形態において、方法は、複数のアミン部分を含む第１の化合物を含む第

１の試薬を、液体及び基質（例えば、多孔質シリカ粒子）を含む液体混合物中に、複数のアミン部分が基質の表面に化学結合することを引き起こして、官能化された材料（例えば、官能化又は修飾されたシリカ粒子）を形成するのに十分な条件下で導入することと、官能化された材料を液体から除去することと、官能化された材料を、（例えば、真空オーブンにおいて）水和閾値に達するまで乾燥させることと、を含む。

【０４２０】

いくつかの実施形態において、第１の化合物は、小分子ポリアミン、オリゴマーアミン、オリゴマーエチレンアミン、エチレンアミン／オリゴマー混合物、小分子混合物、又はこれらのうちのいずれかの組み合わせであることができる。第１の化合物は、Ａｍｉｘ１０００、テトラエチレンペンタミン（ＴＥＰＡ）、又はトリエチレンテトラミン（ＴＥＴＡ）を含むことができる。

【０４２１】

いくつかの実施形態において、方法は、硫黄含有化合物（例えば、抗酸化剤）を含む第２の化合物を含む第２の試薬を、第２の液体及び官能化された粒子（例えば、官能化されたシリカ酸化物粒子）を含む第２の液体混合物中に導入することと、官能化された材料を第２の液体から除去することと、官能化された材料を、（例えば、真空オーブンにおいて）水和閾値に達するまで乾燥させることと、を更に含むことができる。第２の化合物は、第２の液体混合物中に、基質（例えば、シリカ酸化物材料）に対して０．５％～１０％（重量／重量）の範囲内の第２の化合物で含まれ得る。

【０４２２】

いくつかの実施形態において、方法は、複数のアミン部分を含むポリエチレンイミン化合物を含む第１の試薬を、メタノール又はエタノール及び基質（例えば、多孔質シリカ粒子）を含む液体混合物中に、ポリエチレンイミン化合物の複数のアミン部分が基質の表面と（例えば、基質の表面上のシラノール基とのファンデルワールス相互作用、水素結合相互作用、又はイオン結合相互作用によって）相互作用することを引き起こして、官能化された材料（例えば、官能化又は修飾されたシリカ粒子）を形成するのに十分な条件下で導入することと、液体を官能化された材料から蒸発させることによって、官能化された材料を液体から除去することと、官能化された材料を、（例えば、真空オーブンにおいて）官能化された材料に対して５％（重量／重量）の第１の液体の水和閾値に達するまで乾燥させることと、を含むことができる。

【０４２３】

いくつかの実施形態において、方法は、複数のアミン部分を含むエチレンアミン混合物化合物を含む第１の試薬を、メタノール又はエタノール及び基質（例えば、多孔質シリカ粒子）を含む液体混合物中に、エチレンアミン混合物化合物の複数のアミン部分が基質の表面と化学的に相互作用することを引き起こして、官能化された材料（例えば、官能化又は修飾されたシリカ粒子）を形成するのに十分な条件下で導入することと、液体を官能化された材料から蒸発させることによって、官能化された材料を液体から除去することと、官能化された材料を、（例えば、真空オーブンにおいて）官能化された材料に対して５％（重量／重量）の第１の液体の水和閾値に達することができるまで乾燥させることと、を含むことができる。

【０４２４】

官能化されたシリカを調製する更なる非限定的な方法は、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、図５Ａ、５Ｂ、及び５Ｅ～５Ｉにおけるもの）を含むことができる。

【０４２５】

ｉｉｉ．　官能化されたＭＯＦの調製

本明細書に記載されるように、本明細書における方法は、懸濁液混合物を調製することを含むことができ、次いで、懸濁液混合物は、ＭＯＦを提供するための試薬を含む。次いで、そのような懸濁液混合物は、官能部分を提供するための少なくとも１つの化合物との組み合わせで使用され得、それによって、事前官能化混合物又は官能化混合物（例えば、本明細書に記載されるもの）を形成する。

【０４２６】
いくつかの実施形態において、方法は、懸濁液を調製して、ＭＯＦ基質（例えば、ＭＯＦ粒子）を形成することと、次いで、ＭＯＦ基質及び官能部分を提供するための化合物を含む官能化混合物を調製することと、を含むことができる。
【０４２７】
懸濁液は、いずれかの有用な様式で調製され得る。いくつかの実施形態において、方法は、金属供給源を含む第１の試薬、及び有機リガンドを含む第２の試薬を、溶媒媒体（又は液体）中に、第１の試薬と第２の試薬との間の反応を引き起こして、ＭＯＦ基質（例えば、ＭＯＦ粒子）を作製するのに十分な条件下で導入することを含む。いくつかの実施形態において、吸着部分を有するＭＯＦ基質（例えば、ＭＯＦ構造のヒドロキシル官能側基に結合することができる１つ以上のアミン含有部分で官能化されたもの）は、ガス混合物（例えば、大気）からの二酸化炭素の可逆的捕捉を達成することができる。いくつかの実施形態において、有機リガンドは、少なくとも１つのヒドロキシ基を含むことができる。金属供給源及び有機リガンド、並びにそのような金属供給源及び有機リガンドを提供するための化合物の例としては、本明細書に記載されるいずれかのものが挙げられ得る。
【０４２８】
いくつかの実施形態において、ヒドロキシ官能側基は、相互作用部分及び／又は吸着部分と反応することができる。いくつかの実施形態において、ヒドロキシ官能側基は、ＭＯＦ基質と吸着部分との間の共有結合を形成する（例えば、ヒドロキシ基が、相互作用部分と反応し、それによって、ＭＯＦ表面と吸着部分との間に存在する共有結合を形成する）ために使用され得る。
【０４２９】
懸濁液（ＭＯＦ基質を含むもの）が、官能化混合物を提供するために更に調製され得る。いくつかの実施形態において、方法は、吸着部分（例えば、アミン部分）を含む第３の試薬を、懸濁液に導入することを更に含むことができる。いくつかの実施形態において、第３の試薬は、本明細書に記載されるいずれかのアミノシランであることができる。非限定的なアミノシラン化合物は、例えば、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシラン、トリス（ジメチルアミノ）クロロシラン、ビス（３－（メチルアミノ）プロピル）トリメトキシシラン、Ｎ－［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アニリン、（Ｎ，Ｎ－ジメチルアミノプロピル）トリメトキシシラン、３－アミノプロピル（ジエトキシ）メチルシラン、ビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミン、（３－アミノプロピル）トリエトキシシラン、（３－アミノプロピル）トリメトキシシラン、Ｎ－［３－（トリメトキシシリル）プロピル］エチレンジアミン、Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミン、又は［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシランを含む。
【０４３０】
いくつかの実施形態において、当該第３の試薬を導入することは、第３の試薬が第２の試薬に化学結合することを引き起こして、修飾されたＭＯＦ基質（例えば、修飾されたＭＯＦ粒子）を形成するのに十分な条件下で行われ得る。いくつかの実施形態において、第３の試薬は、アミノシラン化合物（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であり、シラン部分が、有機リガンド（例えば、有機リガンド上に存在するヒドロキシ基又は他の反応性基）と相互作用する。アミノシラン化合物のアミン部分は、ＭＯＦ基質の表面上に配設され得る。官能化混合物中で、官能化されたＭＯＦ（例えば、官能化されたＭＯＦ粒子）を含む官能化された材料が形成され得る。
【０４３１】
任意選択で、方法は、第２の溶媒媒体又は第２の液体を提供することを含むことができる。いくつかの実施形態において、方法は、第３の試薬を導入する前に、ＭＯＦ基質を液体から除去することと、第２の液体を、ＭＯＦ基質に、ある持続期間にわたって導入することと、ＭＯＦ基質を第２の液体から除去することと、を更に含むことができる。第２の液体は、第２の体積の溶媒媒体（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含む

ことができる。

【０４３２】

官能化混合物は、更に処理され得る。いくつかの実施形態において、方法は、官能化されたＭＯＦ基質（例えば、修飾されたＭＯＦ粒子）を、官能化混合物中に存在する溶媒媒体又は液体から除去することを含むことができる。液体は、いずれかの有用な溶媒（例えば、極性溶媒）であることができる。溶媒の非限定的な例としては、水、Ｎ，Ｎ－ジメチルアセトアミド（ＤＭＡｃ）、Ｎ，Ｎ－ジメチルホルムアミド（ＤＭＦ）、Ｎ，Ｎ－ジエチルホルムアミド（ＤＥＦ）、メタノール、エタノール、アセトニトリル、ジメチルスルホキシド（ＤＭＳＯ）、及びそれらの組み合わせが挙げられる。

【０４３３】

競合剤又は添加剤の存在は、リガンドの配位、結晶の形態及びサイズ、核形成及び結晶成長などに影響し得る。非限定的な調節又は競合剤及び添加剤は、無機酸（例えば、塩酸又はフッ化水素酸）、カルボン酸（例えば、安息香酸、ギ酸、酢酸、トリフルオロ酢酸、ドデカン酸、又はラウリン酸）などを含む。

【０４３４】

いくつかの実施形態において、方法は、第１の試薬及び第２の試薬との競合剤を含む第４の試薬を導入することを更に含むことができる。第４の試薬は、非配位塩基を含むことができる。非配位塩基は、２，６－ルチジン、Ｎ，Ｎ－ジイソプロピルエチルアミン、トリエチルアミン、２－ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－２－ジエチルアミノ－１，３－ジメチルペルヒドロ－１，３，２－ジアザホスホリン、又は１，８－ジアザビシクロ［５．４．０］ウンデカ－７－エンであることができる。いくつかの実施形態において、非配位塩基は、ＭＯＦ基質の表面上に存在する１つ以上のヒドロキシ側基を脱プロトン化するための化合物を含むことができる。次いで、脱プロトン化された側基は、シラン部分と反応して、コーティング又は表面官能化層を提供することができる。

【０４３５】

方法は、官能化されたＭＯＦ基質（例えば、修飾されたＭＯＦ粒子）を、水和閾値（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）に達することができるまで乾燥させることを更に含むことができる。

【０４３６】

いずれかの有用なＭＯＦ材料及び官能化されたＭＯＦが調製され得る。いくつかの実施形態において、方法は、金属塩（例えば、亜鉛塩、例えば、$Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$）を含む第１の試薬及び第２の試薬を、極性溶媒液体中に、第１の試薬と第２の試薬との間の反応を引き起こして、ＭＯＦ基質（例えば、ＭＯＦ粒子）を作製するのに十分な条件下で導入することを含む。いくつかの実施形態において、第２の試薬は、有機リガンド（例えば、$TPDC^{2-}$又はその誘導体、例えば、$(X)_2-TPDC^{2-}$又は$(X)_4-TPDC^{2-}$）、又は有機リガンドを提供する化合物（例えば、H_2TPDC、$H_2(X)_2-TPDC$、又は$H_2(X)_4-TPDC$などの化合物）を含む。

【０４３７】

いくつかの実施形態において、方法は、ＭＯＦ基質を液体から除去することと、第２の極性溶媒液体を、ＭＯＦ基質に、ある持続期間にわたって導入することと、金属酸化物構造体粒子を第２の液体から除去することと、第３の極性溶媒液体を、ＭＯＦ基質に、ある持続期間にわたって導入することと、第３の試薬（例えば、アミノシラン、例えば、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシラン又は本明細書に記載されるいずれかのものを含むもの）を、第３の液体中に、第３の試薬が第２の試薬に化学結合することを引き起こして、官能化されたＭＯＦ（例えば、修飾又は官能化されたＭＯＦ粒子）を形成するのに十分な条件下で導入することと、官能化されたＭＯＦを液体から除去することと、を更に含むことができる。官能化されたＭＯＦを調製する非限定的な方法は、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、図５Ｃにおけるもの）を含むことができる。

【０４３８】

ｉｖ．　官能化された樹脂の調製

本明細書に記載されるように、本明細書における方法は、懸濁液混合物を調製することを含むことができ、次いで、懸濁液混合物は、樹脂材料を含む。

【０４３９】

懸濁液は、いずれかの有用な様式で調製され得る。いくつかの実施形態において、懸濁液は、第１の薬剤（例えば、樹脂基質を含むもの）及び第２の試薬（例えば、吸着部分を含むもの）を含むことができる。第２の試薬は、樹脂の多孔質構造内に導入され得るいずれかの反応性アミン（複数可）を含むことができる。液体アミンの非限定的な例としては、液体アミンベースのポリマー（例えば、ポリエチレンイミン（ＰＥＩ））、液体分子モノ、ジ、トリ、テトラ、ペンタ、及びより大きいエチルアミン、液体アミン官能化された炭化水素、シリルアミン（又はアミノシラン）、又はこれらのいずれかの組み合わせが挙げられる。

【０４４０】

いくつかの実施形態において、方法は、第１の試薬及び第２の試薬を、第２の試薬を樹脂基質上にスプレーすることによって導入することを含む。いくつかの実施形態において、方法は、第１の試薬及び第２の試薬を、第１の試薬及び第２の試薬を含む溶液を形成することによって導入することと、官能化された樹脂を溶液から回収することと、を含む。

【０４４１】

いくつかの実施形態において、方法は、多孔質樹脂粒子を含む第１の試薬、及びアミン部分を含む第２の試薬を、第１の試薬と第２の試薬との間の反応を引き起こして、官能化された樹脂（例えば、官能化された多孔質樹脂粒子）を作製するのに十分な条件下で組み合わせることを含む。いくつかの実施形態において、方法は、液体を、官能化された樹脂に、ある持続期間にわたって導入することと、官能化された樹脂を液体から回収することと、を更に含むことができる。方法は、官能化された樹脂を、水和閾値に達するまで乾燥させることを更に含むことができる。液体又は第２の液体は、エタノール、メタノール、又は本明細書に記載されるいずれかの溶媒であることができる。

【０４４２】

いくつかの実施形態において、方法は、多孔質樹脂粒子を含む第１の試薬、及びアミン部分を含む第２の試薬を、第１の試薬と第２の試薬との間の反応を引き起こして、官能化された樹脂を作製するのに十分な条件下で組み合わせることと、官能化された樹脂を溶液から回収することと、官能化された樹脂を、水和閾値に達するまで乾燥させることと、を含む。

【０４４３】

いくつかの実施形態において、ポリアミンが、樹脂の表面に提供される。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、２つ以上のアミン部分を含む。いくつかの実施形態において、ポリアミンは、エチレンジアミン（$H_2NCH_2CH_2NH_2$）、ジエチレンテトラミン（ＤＥＴＡ、$H_2N[CH_2CH_2NH]_2H$）、トリエチレンテトラミン（ＴＥＴＡ、$H_2N[CH_2CH_2NH]_3H$）、分岐鎖トリエチレンテトラミン（$N[CH_2CH_2NH]_3$）、テトラエチレンペンタミン（$H_2N[CH_2CH_2NH]_4H$）、又はペンタエチレンヘキサミン（$H_2N[CH_2CH_2NH]_5H$）である。いくつかの実装態様において、ポリアミンは、ポリエチレンイミン（ＰＥＩ）（例えば、直鎖、分岐鎖、又はデンドリマー形態のＰＥＩ）である。いくつかの実装態様において、ポリアミンは、アミンベースのポリマーである。いくつかの実施形態において、第１のアミン部分は、樹脂の反応性部位（例えば、酸性反応性部位）と反応して、樹脂を官能化するように構成されており、残りのアミン部分は、CO_2吸着のための反応部位として機能する。

【０４４４】

いくつかの実施形態において、モノアミンが、樹脂の表面に提供される。モノアミンの非限定的な例としては、アミン官能化された炭化水素が挙げられ得、エタノールアミン、ヘキシルアミンなどが挙げられ得る。

【０４４５】

いくつかの実施形態において、アミン官能化された炭化水素が、樹脂の表面に提供され

る。アミン官能化された炭化水素は、１、２、３つ、又はそれ以上のアミン部分（例えば、１、２、３つ、又はそれ以上のアミン基）を含むことができる。アミン官能化された炭化水素の非限定的な例としては、エタノールアミン、ヘキシルアミン、又は１，６－ヘキサンジアミンが挙げられる。

【０４４６】

いくつかの実施形態において、分子エチルアミンが、樹脂の表面に提供される。分子エチルアミンの非限定的な例としては、モノ、ジ、トリ、テトラ、ペンタ、及び／又はより大きいエチルアミン、並びにテトラエチレンペンタミン（ＴＥＰＡ）、トリエチレンテトラミン（ＴＥＴＡ）、又はペンタエチレンヘキサミン（ＰＥＨＡ）が挙げられる。

【０４４７】

いくつかの実施形態において、シリルアミン（又はアミノシラン）が、樹脂の表面に提供される。シリルアミンの非限定的な例としては、（３－アミノプロピル）トリメトキシシラン、［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシラン、Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミン、３－アミノプロピルシラントリオール、Ｎ－（２－アミノエチル）３－アミノプロピルシラントリオール、及び本明細書に記載されるいずれかのアミノシランが挙げられ得る。

【０４４８】

いくつかの実施形態において、アミンベースのポリマーが、樹脂の表面に提供される。ポリマーの非限定的な例としては、ポリプロピレンイミン、天然キトサン、ポリリジン、小分子ポリアミン、又はエチレンアミン／オリゴマー混合物（ＢＡＳＦ　Ａｍｉｘ　１０００）が挙げられる。

【０４４９】

いくつかの実施形態において、樹脂の表面に提供される化合物は、アミンベースのポリマー、ポリエチレンイミン（ＰＥＩ）、分子エチルアミン、アミン官能化された炭化水素、シリルアミン（又はアミノシラン）、又はそれらのいずれかの組み合わせを含むことができる。

【０４５０】

官能化された樹脂を調製する非限定的な方法は、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、図５Ｄにおけるもの）を含むことができる。

【０４５１】

ｖ．官能化された材料を形成するためのプロセスの非限定的な例

図５Ａ～５Ｈは、官能化された材料を生成するためのステップの例を示す非限定的なフローチャート図である。これらの図面は、以下に更に記載される。

【０４５２】

これらの図面のうちのいずれかにおいて、プロセスは、可逆的吸着剤材料における使用のための官能化された材料を作製するために使用され得、例えば、可逆的CO_2吸着剤、例えば、官能化されたシリカを合成するために使用され得る。いくつかの実装態様において、プロセスは、大規模に実行され得、例えば、１キログラム以上の官能化された材料を、単一のプロセスにおいて生成する。本来の粒子サイズ分布を維持するために、基質が接触しない撹拌方法、例えば、オーバーヘッド撹拌が好ましい。

【０４５３】

本明細書におけるプロセスは、吸着部分を提供するように構成された化合物としてのシランカップリング材料に言及し得るが、他の化合物が用いられ得る。例えば、非限定的に、シランカップリング材料は、吸着部分及び／又は相互作用部分を含むいずれかの化合物（例えば、本明細書に記載されるいずれかの化合物）で置き換えられ得る。

【０４５４】

図５Ａに示されるように、プロセス５００Ａは、溶媒媒体及び基質を含む懸濁液混合物を調製すること（ステップ５０２Ａ）を含むことができる。総体積の溶媒媒体及び基質に好適な器、例えば、３つ口丸底フラスコにおいて、溶媒媒体及び基質（例えば、シリカ材料又は酸化ケイ素材料）が分注される。基質は、いずれかの好適な基質（例えば、シリカ

基質又は本明細書に記載されるいずれかの他の基質）であることができる。溶媒媒体は、器内の基質を全体的に覆うように、例えば、基質に対して１～１５ｍＬ／ｇ（例えば、１ｍＬ／ｇ、５ｍＬ／ｇ、８ｍＬ／ｇ、１５ｍＬ／ｇ、２～２ｍＬ／ｇ、２～２．５ｍＬ／ｇ、又は本明細書における他の範囲）の溶媒媒体を分注することによって分注され得る。溶媒媒体は、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、中性非プロトン性有機溶媒、例えば、トルエン、ヘキサン、シクロヘキサン、又はテトラヒドロフラン（ＴＨＦ）、及びこれらのうちのいずれかの組み合わせ）であることができる。

【０４５５】

プロセス５００Ａは、溶媒媒体中の基質を、第１の期間にわたって撹拌すること（ステップ５０４Ａ）を含むことができる。懸濁液混合物は、基質が溶媒媒体中に浸されている間に、器内で、例えば、磁気撹拌バー及び撹拌プレート、又は当業者に既知の他の好適な方法で撹拌され得る（例えば、かき混ぜられ得る）。撹拌は、拡散速度を増加させて、均質な混合物を確実にすることができる。第１の期間は、基質が溶媒媒体を最大容量まで吸収していることを確実にするのに十分であるべきである。例えば、第１の期間は、１０分～３時間の範囲（例えば、２時間）であることができる。

【０４５６】

撹拌している間に、シランカップリング材料が、懸濁液混合物に添加されて、官能化混合物を形成すること（ステップ５０６Ａ）ができる。シランカップリング材料は、シラン部分を有するいずれかの化合物、例えば、本明細書に記載されるいずれかのアミノシラン化合物を含むことができる。シランカップリング材料は、基質に対して２０％～８０％（重量／重量）の範囲のロードシランで分注され得る。

【０４５７】

撹拌している間に、官能化混合物は、周囲温度超及び９０℃未満（例えば、２５℃超及び９０℃未満）の加熱温度に加熱され得る（ステップ５０８Ａ）。官能化混合物が加熱される加熱温度は、プロセス５００Ａのために選択される溶媒媒体に依存し得る。一例として、トルエンが溶媒媒体として選択される実装態様において、加熱温度は、７０°又は９０℃であることができる。温度は、好ましくは、アミンの酸化が起こる温度未満（例えば、７０°～８０℃である温度又は９０℃未満である温度）であることができる。

【０４５８】

プロセス５００Ａは、官能化混合物を、加熱温度で第２の期間にわたって撹拌すること（ステップ５１０Ａ）を含むことができる。第２の期間は、基質の表面へのシランカップリング材料の最大官能化（例えば、結合）を可能にするのに十分であることができる。概して、理論によって拘束されることを望むことなく、第２の期間は、６時間超であることができ、溶媒媒体、加熱温度、及びシランカップリング材料に依存する。いくつかの実装態様において、第２の期間は、８時間超（例えば、１０時間超、１２時間超、１８時間超、２０時間超、又は２４時間超）であることができる。

【０４５９】

第２の期間後に、プロセス５００Ａは、官能化混合物を冷却すること（ステップ５１２Ａ）を含むことができる。いくつかの実装態様において、冷却は、受動的に（例えば、放射冷却）行われる。例えば、器は、周囲空気温度で、官能化混合物が目標温度に冷却されるまで冷却されることが可能にされ得る。いくつかの実装態様において、目標冷却温度は、周囲温度（例えば、室温）である。代替の実装態様において、冷却は、能動的に（例えば、熱交換）、例えば、器についての水浴で行われる。

【０４６０】

プロセス５００Ａは、官能化された材料を官能化混合物から濾過すること（ステップ５１４Ａ）を更に含むことができる。濾過は、当該技術分野で既知の、固相を液相から分離するための方法を使用して実行され得る。これは、真空濾過、遠心分離、真空蒸発、又はこれらの若しくは他の方法の組み合わせを含むことができるが、これらに限定されない。官能化された材料から分離された体積の溶媒媒体は、廃棄されてもよく、貯蔵されてもよく、又は再循環してもよい。

【０４６１】
プロセス５００Ａは、官能化された材料を、少なくとも１つの洗浄体積の新鮮な（例えば、新しい体積の）溶媒媒体中で洗浄すること（ステップ５１６Ａ）を更に含むことができる。いくつかの実施形態において、新鮮な溶媒媒体対官能化された材料の、ステップ５０２Ａと同様の比（例えば、１０ｍＬ／ｇの新鮮な溶媒媒体対アミン官能化された基質）が使用され得る。例えば、官能化された材料は、洗浄体積の新鮮な溶媒媒体（例えば、４ｇの官能化された材料について４０ｍＬの溶媒）中に浸され得、単一の洗浄又は複数の洗浄が実行され得る。いくつかの実施形態において、洗浄溶媒は、シラン部分を溶解して、官能化された基質の表面上にコーティングされているが、反応していない部分を除去する。

【０４６２】
プロセス５００Ａは、官能化された材料を乾燥させること（ステップ５１８Ａ）を更に含むことができる。官能化された材料を乾燥させることは、温度を増加させること、大気圧を低減すること、不活性乾燥ガスを試料の上に通すこと、又はこれらの組み合わせを含むことができる。官能化された材料は、乾燥に供されて、官能化された材料内に封入された実質的に全ての洗浄体積の溶媒媒体を除去することができる。例えば、いくつかの実装態様において、官能化された材料は、真空オーブンにおいて、５０℃で１２時間、例えば、一晩、乾燥に供される。非限定的な例として、乾燥閾値は、試料を通る不活性ガス流（例えば、５０ｍＬ／分のN_2流）での（例えば、ＴＧＡにおいて測定された場合の）、試料による１５％の重量損失（例えば、溶媒除去のための重量損失）又は最小重量損失（例えば、約２時間の期間にわたって１００℃で約５％未満の重量損失）を有することである。いくつかの実装態様において、官能化された材料は、水和閾値に達するまで、例えば、官能化された材料に対して５％（重量／重量）未満の溶媒が残るまで、乾燥に供される。次いで、官能化された材料は、可逆的吸着剤材料としての使用のために調製され得る。

【０４６３】
図５Ｂに示されるように、プロセス５００Ｂは、溶媒媒体及び基質を含む懸濁液混合物を調製すること（ステップ５０２Ｂ）と、溶媒媒体中の基質を、第１の期間にわたって撹拌すること（ステップ５０４Ｂ）と、を含むことができる。追加の詳細は、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、ステップ５０２Ａ又は５０４Ａについてのもの）を含むことができる。

【０４６４】
撹拌している間に、シランカップリング材料が、懸濁液混合物に添加されて、事前官能化混合物を形成すること（ステップ５０６Ｂ）ができる。シランカップリング材料は、シラン部分を有するいずれかの化合物、例えば、本明細書に記載されるいずれかのアミノシラン化合物又はシラン化合物を含むことができる。シランカップリング材料は、基質に対して２０％～８０％（重量／重量）の範囲のロードシランで分注され得る。

【０４６５】
撹拌している間に、事前官能化された混合物は、周囲温度超及び９０℃未満（例えば、２５℃超及び９０℃未満）の加熱温度に加熱され得る（ステップ５０８Ｂ）。官能化混合物が加熱される加熱温度は、プロセス５００Ｂのために選択される溶媒媒体に依存し得る。一例として、トルエンが溶媒媒体として選択される実装態様において、加熱温度は、９０℃であることができる。別の例として、ヘキサンが溶媒媒体として選択される実装態様において、加熱温度は、６５℃である。温度は、好ましくは、アミンの酸化が起こる温度未満（例えば、７０°～８０℃である温度又は９０℃未満である温度）である。

【０４６６】
プロセス５００Ｂは、事前官能化混合物を、加熱温度で第２の期間にわたって撹拌すること（ステップ５１０Ｂ）を含むことができる。第２の期間は、基質の表面へのシランカップリング材料の最大官能化（例えば、結合）を可能にするのに十分であることができる。第２の期間後に、プロセス５００Ｂは、事前官能化混合物を冷却すること（ステップ５１２Ｂ）と、事前官能化された材料を事前官能化混合物から濾過すること（ステップ５１

４Ｂ）と、事前官能化された材料を、少なくとも１つの洗浄体積の新鮮な（例えば、新しい体積の）溶媒媒体中で洗浄すること（ステップ５１６Ｂ）と、事前官能化された材料を乾燥させること（ステップ５１８Ｂ）と、を含むことができる。いくつかの実施形態において、新鮮な溶媒媒体対事前官能化された材料の、ステップ５１２Ａと同様の比（例えば、１０ｍＬ／ｇの新鮮な溶媒媒体対事前官能化された材料）が使用され得る。追加の詳細は、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、ステップ５１０Ａ、５１２Ａ、５１４Ａ、５１６Ａ、及び５１８Ａについてのもの）を含むことができる。

【０４６７】

プロセス５００Ｂは、第２の溶媒媒体及び事前官能化された材料を含む第２の懸濁液混合物を調製すること（ステップ５２０Ｂ）を更に含むことができる。例えば、総体積の第２の溶媒媒体及び事前官能化された材料に好適な器、例えば、３つ口丸底フラスコにおいて、事前官能化された基質（例えば、アミンがグラフトされたシリカ材料）及び第２の溶媒媒体を分注する。いくつかの例において、第２の溶媒は、メタノールである。いくつかの例において、第２の溶媒媒体は、溶媒混合物、例えば、２：１のエタノール及びシクロヘキサンの混合物である。第２の溶媒媒体のための溶媒混合物選択は、吸着剤取り込みに影響し得る。

【０４６８】

一例において、ステップ５２０Ｂにおいて使用される溶媒媒体、例えば、メタノール又は水は、第１の吸着部分の加水分解（例えば、シランカップリング材料によって提供され、シラン層として堆積するもの）を引き起こし得る。いくつかの実施形態において、溶媒混合物は、シラン層を基質の表面から容易に加水分解及び溶媒和させないことにおいて特徴付けられる。第２の溶媒媒体は、器内の事前官能化された基質を全体的に覆うように、例えば、事前官能化された基質に対して２～２．５ｍＬ／ｇ又は６ｍＬ／ｇ（例えば、１ｍＬ／ｇ、２ｍＬ／ｇ、３ｍＬ／ｇ、又は５ｍＬ／ｇ）の溶媒媒体を分注することによって分注され得る。

【０４６９】

プロセス５００Ｂは、アミン化合物を第２の溶媒媒体中に添加すること（ステップ５２２Ｂ）を更に含み得る。アミン化合物は、１つ以上のアミン部分を含む、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる。いくつかの実施形態において、アミン化合物は、ポリアミン又は小分子アミン、例えば、本明細書に記載されるいずれかのものである。アミン化合物は、第２の溶媒媒体中に、第２の溶媒媒体中の事前官能化された基質に対して３０％（重量／重量）又は５％～２５％（重量／重量）の比で分注され得る。いくつかの実装態様において、アミン化合物は、第２の溶媒媒体中に、最大５０％（重量／重量）の比又は２０％（重量／重量）の比（例えば、２０％～５０％（重量／重量）又は２％～２０％（重量／重量）の範囲）で分注される。

【０４７０】

プロセス５００Ｂは、第２の溶媒媒体中のアミン化合物及び事前官能化された材料を、ある期間にわたって撹拌すること（ステップ５２４Ｂ）を含み得る。懸濁液は、事前官能化された材料の基質が第２の溶媒媒体中に浸されている間に、本明細書に記載される器内で撹拌され得る（例えば、かき混ぜられ得る）。第１の期間は、事前官能化された材料が、第２の溶媒媒体を最大容量まで吸収しており、かつ／又はアミン化合物と相互作用しており、官能化された材料を形成することを確実にするのに十分であり得る。例えば、非限定的に、期間は、１時間～３時間の範囲（例えば、１時間超、例えば、２時間）であることができる。

【０４７１】

プロセス５００Ｂは、官能化された材料を官能化混合物から濾過すること（ステップ５２６Ｂ）と、官能化された材料を乾燥させること（ステップ５２８Ｂ）と、を含み得る。追加の詳細は、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、ステップ５１４Ａ及び５１８Ａについてのもの）を含むことができる。

【０４７２】

いくつかの代替の実装態様において、シランカップリング材料及びアミン化合物は、第１の溶媒媒体にステップ５０６Ｂにおいて添加される。そのような実装態様は、官能化された混合物を生成するために使用される時間及び溶媒体積を低減することができる。第１の溶媒媒体についての溶媒の非限定的な例としては、水、メタノール、エタノール、又はこれらの混合物（例えば、及び本明細書に記載されるいずれかの他のもの）が挙げられ得る。

【０４７３】

図５Ｃに示されるように、プロセス５００Ｃは、溶媒媒体、金属供給源（例えば、金属イオン供給源）、及び有機リガンド化合物を含む懸濁液混合物を調製すること（ステップ５０２Ｃ）を含むことができる。総体積の溶媒媒体、金属供給源、及び有機リガンド化合物に好適な器、例えば、密封可能な反応器において、金属供給源、有機リガンド、及び溶媒媒体を分注する。

【０４７４】

金属供給源は、本明細書に記載されるいずれかの好適な供給源（例えば、$ZnNO_3$、$ZrCl_4$、又はそれらの代替の塩）であることができる。有機リガンドは、本明細書に記載されるいずれかの好適な供給源（例えば、２－ヒドロキシテレフタル酸）であることができる。有機リガンド材料対金属供給源材料の比は、有機リガンドと金属原子との具体的な相互作用に従って変動し得る。概して、比は、１：１、又は約１：５～５：１の非限定的な範囲のｍｏｌの有機リガンド対ｍｏｌの金属であることができる。官能化されたＭＯＦの合成は、いずれかの有用な条件、例えば、溶媒熱反応器ベースの反応条件又は水熱反応器ベースの反応条件下で行われ得る。

【０４７５】

溶媒媒体は、器内の金属供給源及び有機リガンド化合物を全体的に覆うように、例えば、金属供給源に対して５０ｍＬ／ｇ（例えば、１０ｍＬ／ｇ、１５ｍＬ／ｇ、２０ｍＬ／ｇ、又は３０ｍＬ／ｇ）の溶媒媒体を分注することによって分注され得る。概して、理論によって拘束されることを望むことなく、ＭＯＦが、酸性条件（例えば、カルボン酸含有リガンドと反応する金属塩化物の存在下で存在することができるもの）において合成されるときに、不活性高沸点非プロトン性溶媒が好ましくあり得る。いくつかの非限定的な例において、ＭＯＦが、塩基性条件において合成されるときに、又は窒素ベースのリガンド（例えば、イミダゾールリガンド）で合成されるときに、プロトン性溶媒、例えば、メタノール、エタノール、又は更には水が使用され得る。溶媒媒体の非限定的な例としては、極性溶媒、例えば、水、ジメチルアセトアミド（ＤＭＡｃ）、Ｎ，Ｎ－ジメチルホルムアミド（ＤＭＦ）、ジエチルホルムアミド（ＤＥＦ）、メタノール、エタノール、ジメチルスルホキシド（ＤＭＳＯ）、又はこれらのうちのいずれかの組み合わせが挙げられる。

【０４７６】

任意選択で、プロセス５００Ｃは、調節又は競合剤を懸濁液混合物に分注すること（ステップ５０４Ｃ）を含むことができる。そのような薬剤は、金属イオン供給源と有機リガンド材料との間で起こる結晶化反応動態を変化させることができる。例えば、非限定的に、調節又は競合剤は、ＭＯＦ合成反応混合物（例えば、懸濁液混合物）に添加され得、最終ＭＯＦ基質の再現性及び結晶化度を増加させることができる。調節剤及び競合剤は、金属イオン供給源及び有機リガンド材料に基づいて選択され得、そのようなものは、カルボン酸、例えば、安息香酸を含むことができる。いくつかの実施形態において、調節剤又は競合剤は、有機リガンドと競合して、ＭＯＦ構造における金属中心に配位する薬剤を含む。機構又は理論によって制限されることを望むことなく、そのような薬剤の存在は、ＭＯＦが「再成長」又はエラー訂正し、それによって、欠陥を低減することを可能にすることができる。

【０４７７】

プロセス５００Ｃは、懸濁液混合物を撹拌すること（ステップ５０６Ｃ）を含むことができる。懸濁液混合物は、金属イオン供給源及び有機リガンドが溶媒媒体中に浸されている間に、反応チャンバ内で、例えば、磁気撹拌バー及び撹拌プレート、又は当業者に既知

の他の好適な方法で撹拌され得る（例えば、かき混ぜられ得る）。懸濁液混合物は、金属イオン供給源及び有機リガンド、並びに添加された場合、調節／競合剤が完全に溶解されるまで撹拌され得る。

【０４７８】

任意選択で、プロセス５００Ｃは、懸濁液混合物を、ある期間にわたって加熱すること（ステップ５０８Ｃ）を含むことができる。懸濁液混合物の温度は、増加して、結晶化反応を容易にすることができる。反応の目標温度は、金属供給源及び有機リガンドに基づいて選択される。いくつかの例において、懸濁液混合物は、周囲温度超に加熱され、例えば、３０℃以上、４５℃以上、６０℃以上、８０℃以上、１００℃以上、又は１２０℃以上に加熱される。懸濁液混合物が目標温度で留まる期間は、懸濁液混合物の組成、例えば、金属供給源、有機リガンド材料、及び任意選択の調節／競合剤に依存し得る。いくつかの例において、期間は、１２～７２時間（例えば、１２～２４時間、２４～４８時間、又は２４～３６時間、例えば、２４時間又は４８時間）の範囲である。

【０４７９】

プロセス５００Ｃは、事前官能化されたＭＯＦ材料を懸濁液混合物から回収すること（ステップ５１０Ｃ）を含むことができる。回収は、当該技術分野で既知の、固相を液相から分離するための方法を使用して実行され得る。これは、真空濾過、遠心分離、真空蒸発、又はこれらの若しくは他の方法の組み合わせを含むことができるが、これらに限定されない。事前官能化されたＭＯＦから分離された体積の溶媒媒体は、廃棄されてもよく、貯蔵されてもよく、又は再循環してもよい。

【０４８０】

プロセス５００Ｃは、事前官能化されたＭＯＦ材料を、少なくとも１つの洗浄体積の新鮮な（例えば、新しい体積の）溶媒媒体中で洗浄すること（ステップ５１２Ｃ）を含むことができる。追加として又は代替として、極性非プロトン性溶媒が、洗浄溶媒として機能することができる。単一の洗浄ステップは、官能化されたＭＯＦ材料を、洗浄体積の新鮮な溶媒媒体に浸し、これにより、官能化されたＭＯＦ材料が、全体的に、新鮮な溶媒媒体中に浸されることを含むことができる。いくつかの実施形態において、新鮮な溶媒媒体対事前官能化されたＭＯＦ材料の、ステップ５０２Ｃと同様の比（例えば、５０ｍＬ／ｇの新鮮な溶媒媒体対事前官能化されたＭＯＦ基質）が使用され得る。例えば、０．２ｇの事前官能化されたＭＯＦ材料は、１０ｍＬの洗浄体積の新鮮な溶媒媒体中に浸され得、単一の洗浄又は複数の洗浄が実行され得る。いくつかの実施形態において、洗浄ステップは、未反応の金属供給源材料、有機リガンド材料、及び任意選択の調節／競合剤を除去することができる。

【０４８１】

プロセス５００Ｃは、事前官能化されたＭＯＦ材料を乾燥させること（ステップ５１４Ｃ）を更に含むことができる。事前官能化されたＭＯＦ材料を乾燥させることは、温度を増加させること、大気圧を低減すること、不活性乾燥ガスを試料の上に通すこと、又はこれらの組み合わせを含むことができる。事前官能化されたＭＯＦ材料は、乾燥に供されて、ＭＯＦ材料内に封入された実質的に全ての洗浄体積の溶媒媒体を除去することができる。例えば、いくつかの実装態様において、事前官能化されたＭＯＦ材料は、真空オーブンにおいて、６０℃で１２時間、乾燥に供される。

【０４８２】

プロセス５００Ｃは、第２の溶媒媒体、事前官能化されたＭＯＦ材料、及びアミノシランを含む官能化混合物を調製すること（ステップ５１６Ｃ）を更に含むことができる。総体積の第２の溶媒媒体、事前官能化されたＭＯＦ材料、及びアミノシランに好適な器、例えば、密封可能な反応器において、上記の体積の第２の溶媒媒体、事前官能化されたＭＯＦ材料、及びアミノシランを分注する。

【０４８３】

第２の溶媒媒体は、中性非プロトン性溶媒、例えば、テトラヒドロフラン（ＴＨＦ）、ジクロロメタン（ＤＣＭ）、１，２－ジクロロエタン（ＤＣＥ）、ＤＭＦ、又はアセトニ

トリル（ＭｅＣＮ）であることができる。第２の溶媒媒体は、１：２０重量／体積の、事前官能化されたＭＯＦ材料対第２の溶媒媒体の比（例えば、１：１０重量／体積～１：３０重量／体積の範囲の、ＭＯＦ材料対第２の溶媒媒体の比）で分注され得る。

【０４８４】

アミノシランは、官能化混合物中に、事前官能化されたＭＯＦ材料における可用なヒドロキシル基の過剰（例えば、モル過剰）比で分注され得る。アミノシランの非限定的な例としては、クロロシリルアミン（例えば、［R^A］$_a$Ｓｉ［Ｃｌ］$_{4-a}$であり、式中、各R^Aが、独立して、少なくとも１つのアミン基を含むアミン部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であり、ａが、１～４の整数である）、及びアルコキシシリルアミン（例えば、［R^A］$_a$Ｓｉ［ＯＡｋ］$_{4-a}$であり、式中、各R^Aが、独立して、少なくとも１つのアミン基を含むアミン部分（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であり、各Ａｋが、独立して、任意選択で置換されたアルキルであり、ａが、１～４の整数である）、及び本明細書に記載される他のものが挙げられる。クロロシリルアミンの例としては、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシラン及びトリス（ジメチルアミノ）クロロシランが挙げられる。アルコキシシリルアミンの例としては、ビス（３－（メチルアミノ）プロピル）トリメトキシシラン、Ｎ－［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アニリン、（Ｎ，Ｎ－ジメチルアミノプロピル）トリメトキシシラン、３－アミノプロピル（ジエトキシ）メチルシラン、ビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミン、（３－アミノプロピル）トリエトキシシラン、（３－アミノプロピル）トリメトキシシラン、Ｎ－［３－（トリメトキシシリル）プロピル］エチレンジアミン、Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミン、及び［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシランが挙げられる。いくつかの例において、アミノシラン材料は、０．１：１～１：１の範囲の、アミノシラン材料対有機リガンド材料のモル比で分注される。

【０４８５】

任意選択で、プロセス５００Ｃは、非配位塩基材料、例えば、本明細書に記載されるいずれかのものを、官能化混合物に分注すること（ステップ５１８Ｃ）を含むことができる。非配位塩基材料は、化学量論に基づいて、ＭＯＦリガンド上の過剰のヒドロキシ基で分注され得る。これは、ヒドロキシ基（例えば、有機リガンドのもの）を脱プロトン化し、アミノシラン材料との反応を容易にするために機能する。追加として、塩基は、反応中に形成され得るいずれかの酸と反応することができる。塩基は、例えば、有機リガンドに対して２～２０倍のモル当量で使用され得る。いくつかの実施形態において、非配位塩基材料は、ＭＯＦ構造内の金属中心に有意に配位しない塩基である。いくつかの実施形態において、非配位塩基材料は、ＭＯＦ構造内の金属中心に有意に配位しない塩基である。非配位塩基材料の非限定的な例としては、２，６－ルチジン、Ｎ，Ｎ－ジイソプロピルエチルアミン、トリエチルアミン、２－ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－２－ジエチルアミノ－１，３－ジメチルペルヒドロ－１，３，２－ジアザホスホリン、又は１，８－ジアザビシクロ［５．４．０］ウンデカ－７－エンが挙げられる。いくつかの例において、非配位塩基材料は、非配位塩基材料の組み合わせである。

【０４８６】

プロセス５００Ｃは、官能化混合物を撹拌すること（ステップ５２０Ｃ）を更に含むことができる。官能化混合物は、事前官能化されたＭＯＦ材料、アミノシラン、及び任意選択の非配位塩基材料が、第２の溶媒媒体中にある間に、反応チャンバ内で、例えば、当業者に既知の好適な方法で撹拌され得る（例えば、かき混ぜられ得る）。懸濁液混合物は、官能化混合物が加熱されている間に撹拌され得る。

【０４８７】

プロセス５００Ｃは、懸濁液混合物を、第２の期間にわたって加熱すること（ステップ５２２Ｃ）を含むことができる。官能化混合物の温度は、増加して、シラン部分の結合及び／又はアミン部分での表面の官能化を容易にすることができる。反応の目標温度は、選択されるアミノシラン及び第２の溶媒媒体に基づいて選択され得る。いくつかの例におい

て、懸濁液混合物は、周囲温度超に加熱され、例えば、３０℃以上、４０℃以上、又は６０℃以上に加熱される。官能化混合物が目標温度で留まる第２の期間は、官能化混合物の組成、例えば、事前官能化されたＭＯＦ材料、アミノシラン、及び任意選択の非配位塩基材料に依存し得、概して、事前官能化されたＭＯＦ材料の最大シリル化／シラン化、及び官能化されたＭＯＦ材料の作製を確実にするのに十分である。いくつかの例において、期間は、２～２４時間（例えば、２～１２時間、１２～２４時間、又は６～１６時間、例えば、１２時間又は２４時間）の範囲である。

【０４８８】

プロセス５００Ｃは、官能化されたＭＯＦ材料を官能化混合物から回収すること（ステップ５２４Ｃ）を更に含むことができる。回収は、当該技術分野で既知の、固相を液相から分離するための方法（例えば、本明細書に記載されるもの、例えば、ステップ５１０Ｃについてのもの）を使用して実行され得る。官能化されたＭＯＦ材料から分離された体積の第２の溶媒媒体は、廃棄されてもよく、貯蔵されてもよく、又は再循環してもよい。

【０４８９】

プロセス５００Ｃは、官能化されたＭＯＦ材料を、少なくとも１つの洗浄体積の新鮮な（例えば、新しい体積の）溶媒媒体中で洗浄すること（ステップ５２６Ｃ）を含むことができる。いくつかの実施形態において、新鮮な溶媒媒体対官能化されたＭＯＦ材料の、ステップ５１６Ｃと同様の比（例えば、２０ｍＬ／ｇの新鮮な溶媒媒体対官能化されたＭＯＦ基質）が使用され得る。いくつかの実装態様において、２つ以上の洗浄ステップ（例えば、２回の洗浄、３回の洗浄、４回の洗浄、又はそれ以上）が実行される。いくつかの実施形態において、洗浄ステップは、未反応のアミノシラン及び任意選択の非配位塩基材料を、官能化されたＭＯＦ材料から除去することができる。

【０４９０】

プロセス５００Ｃは、官能化されたＭＯＦ材料を乾燥させること（ステップ５２８Ｃ）を更に含むことができる。官能化されたＭＯＦ材料を乾燥させることは、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、ステップ５１４Ｃについてのもの）を含むことができる。官能化されたＭＯＦ材料は、乾燥に供されて、ＭＯＦ材料内に封入された実質的に全ての洗浄体積の洗浄溶媒を除去することができる。例えば、いくつかの実装態様において、官能化されたＭＯＦ材料は、真空オーブンにおいて、５０ｍｂａｒ及び５０℃で１２時間、乾燥に供される。

【０４９１】

図５Ｄに示されるように、プロセス５００Ｄは、官能化された樹脂を提供することができる。任意選択で、プロセスは、樹脂材料を、少なくとも１つの洗浄体積の溶媒媒体中で洗浄すること（ステップ５０２Ｄ）を含むことができる。樹脂材料は、本明細書に記載されるいずれかのイオン交換樹脂であることができる。いくつかの実装態様において、樹脂材料は、塩基官能化された樹脂、酸官能化された樹脂、又は化学官能化を含まない中性樹脂である。溶媒媒体は、選択される樹脂のタイプに基づいて選択され得る。酸官能化された樹脂の例において、溶媒媒体は、有機溶媒、例えば、メタノール、アセトン、又は両方の組み合わせであることができる。洗浄ステップは、官能化のための樹脂材料を、封入された水を除去することによって、かつ／又はより少ないゲル収縮を有する乾燥を容易にすることによって調製するために用いられ得る。いくつかの例において、封入された水を有機溶媒で置き換えることは、このプロセスを支援することができる。例えば、洗浄は、溶媒媒体を、樹脂材料に対して２０ｍＬ／ｇの溶媒媒体で分注することを含むことができる。

【０４９２】

任意選択の洗浄ステップ５０２Ｄが実行される場合、プロセス５００Ｄは、樹脂材料を乾燥させること（ステップ５０４Ｄ）を含むことができる。洗浄された樹脂材料は、乾燥に供されて、液体溶媒を樹脂から官能化前に除去することができる。樹脂材料を乾燥させることは、温度を増加させること、大気圧を低減すること、不活性乾燥ガスを試料の上に通すこと、又はこれらの組み合わせを含むことができる。

【０４９３】
任意選択で、プロセス５００Ｄは、樹脂材料を粉砕すること（ステップ５０６Ｄ）を含むことができる。産業供給源から購入されるイオン交換樹脂材料は、いくつかの形態において得られ得、形態は、ビーズ、顆粒、膜、及び／又は繊維を含む。樹脂材料を粉砕すること、例えば、ビーズ又は顆粒を粉末形態に粉砕することは、樹脂材料の全表面積を増加させることができ、官能部分を提供するためのその後のステップにおける強化された官能化を容易にすることができる。いくつかの実施形態において、樹脂材料を粉砕することは、平均樹脂材料サイズを低減することによって、CO_2吸着の動態を増加させることができる。粉砕プロセスは、官能化される樹脂の量に依存し得る。例えば、非限定的に、小さい量（例えば、１００ｇ未満）は、乳鉢及び乳棒で粉砕され得、より大きい量は、機械的摩砕機において粉砕され得る。

【０４９４】
任意選択で、プロセス５００Ｄは、樹脂材料をふるい分けすること（ステップ５０８Ｄ）を含むことができる。粉砕された樹脂材料をふるい分けすることは、回収された粉砕された樹脂の均一性を増加させることができ、次いで、これは、直接空気捕捉方法におけるCO_2取り込み及び樹脂充填密度における均一性を増加させることができる。いくつかの実装態様において、粉砕された樹脂は、均一なサイズの細孔を有する非反応性メッシュ、例えば、非限定的に、２５０ミクロンの細孔（例えば、５００ミクロン、３００ミクロン、又は２００ミクロンの細孔）を有するステンレス鋼メッシュに通される。

【０４９５】
プロセス５００Ｄは、溶媒媒体及び樹脂材料を含む懸濁液混合物を調製すること（ステップ５１０Ｄ）を含むことができる。総体積の溶媒媒体及び樹脂材料に好適な器、例えば、３つ口丸底フラスコ又はガラスバイアルにおいて、樹脂材料及び溶媒媒体を分注する。溶媒媒体は、有機溶媒（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）又は有機溶媒の混合物であることができる。溶媒媒体は、ステップ５０２Ｄにおける上記のものと同じ有機溶媒（ステップ５０２Ｄが行われる場合）又は異なる有機溶媒であることができる。溶媒媒体は、器内の樹脂材料を全体的に覆うように分注され得る。例えば、樹脂材料に対して２０ｍＬ／ｇ（例えば、５ｍＬ／ｇ、８ｍＬ／ｇ、１０ｍＬ／ｇ、又は１５ｍＬ／ｇ）の溶媒媒体を分注することによる。

【０４９６】
プロセス５００Ｄは、ポリアミン材料を懸濁液混合物中に添加して、官能化混合物を形成すること（ステップ５１２Ｄ）を含むことができる。ポリアミン材料は、ポリアミン、例えば、ＰＥＩ、エチルアミン、シリルアミン、又は小分子アミン、例えば、本明細書に記載されるものを含むことができる。いくつかの実施形態において、ポリアミン材料は、材料の組み合わせ、例えば、高分子量ポリアミンと低分子量ポリアミンとの組み合わせ、例えば、ＰＥＩとペンタエチレンヘキサミンとの組み合わせである。いくつかの実施形態において、ポリアミン材料は、樹脂に対して１０％～６０％（重量／重量）のポリアミンを提供するように適合され得る。いくつかの実施形態において、ポリアミン材料は、溶媒媒体中に、樹脂に対して５０％（重量／重量）の比又は０％～３０％（重量／重量）の比で分注され得る。いくつかの実装態様において、ポリアミン材料は、溶媒媒体中に、溶媒媒体に対して１０％～６０％（重量／重量）又は３０％～１００％（重量／重量）の範囲のポリアミンで分注される。

【０４９７】
プロセス５００Ｄは、官能化混合物を、ある期間にわたって撹拌すること（ステップ５１４Ｄ）を更に含むことができる。官能化混合物は、樹脂材料が溶媒媒体中に浸されている間に、器内で、例えば、磁気撹拌バー及び撹拌プレート、回転デバイス、又は当業者に既知の他の好適な方法で撹拌され得る（例えば、かき混ぜられ得る）。撹拌は、樹脂材料の官能化の速度を増加させることができる。第１の期間は、樹脂材料がポリアミン材料を最大容量まで吸着して、官能化された樹脂材料を形成することを確実にするのに十分であるべきである。例えば、第１の期間は、１０時間～２４時間の範囲（例えば、１２時間）

であることができる。いくつかの実施形態において、溶媒媒体は、撹拌後にデカントされ得る。

【０４９８】

プロセス５００Ｄは、官能化された樹脂材料を、少なくとも１つの洗浄体積の第２の溶媒媒体中で洗浄すること（ステップ５１６Ｄ）を含むことができる。第２の溶媒媒体は、選択される樹脂及びポリアミン材料のタイプに基づいて選択され得る。一例において、第２の溶媒媒体は、溶媒、例えば、水、メタノール、シクロヘキサン、又は有機溶媒の組み合わせ（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）である。

【０４９９】

プロセス５００Ｄは、官能化された樹脂材料を乾燥させること（ステップ５１８Ｄ）を含むことができる。官能化された樹脂材料を乾燥させることは、温度を増加させること、大気圧を低減すること、不活性乾燥ガスを試料の上に通すこと、又はこれらの組み合わせを含むことができる。官能化された樹脂材料は、乾燥に供されて、官能化された樹脂材料内に封入された実質的に全ての洗浄体積の第２の溶媒媒体を除去することができる。例えば、いくつかの実装態様において、官能化された樹脂材料は、真空オーブンにおいて、５０℃で５０ｍｂａｒで１２時間、乾燥に供される。非限定的な例として、乾燥閾値は、試料を通る不活性ガス流（例えば、５０ｍＬ／分のN_2流）での（例えば、ＴＧＡにおいて測定された場合の）、試料による１５％の重量損失（例えば、溶媒除去のための重量損失）又は最小重量損失（例えば、約２時間の期間にわたって１００℃で約５％未満の重量損失）を有することである。

【０５００】

図５Ｅに示されるように、プロセス５００Ｅは、溶媒媒体及び基質を含む懸濁液混合物を調製すること（ステップ５０２Ｅ）を含むことができる。追加の詳細は、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、ステップ５０２Ａについてのもの）を含むことができる。

【０５０１】

プロセスは、懸濁液混合物を、還流条件下で、周囲温度超及び９０℃未満（例えば、２５℃超及び９０℃未満）の加熱温度に加熱及び撹拌すること（ステップ５０４Ｅ）を更に含むことができる。例えば、ヘキサンを溶媒媒体として使用して、懸濁液混合物は、６５°～７０℃に加熱され得るが、概して、懸濁液混合物が加熱される加熱温度は、プロセス５００Ｅのために選択される溶媒媒体に依存し得る。第２の例として、トルエンが溶媒媒体として選択される実装態様において、加熱温度は、９０℃であることができる。懸濁液混合物は、基質が溶媒媒体中に浸されている間に、器内で、例えば、磁気撹拌バー及び撹拌プレート、又は当業者に既知の他の好適な方法で撹拌される（例えば、かき混ぜられる）。いくつかの実施形態において、撹拌は、基質吸収速度を増加させることができる。

【０５０２】

プロセス５００Ｅは、ポリマー／オリゴマーアミン材料を懸濁液混合物に添加して、事前官能化混合物を形成すること（ステップ５０６Ｅ）を含むことができる。ポリアミン材料は、本明細書に記載されるいずれかのものを含むことができる。第２の極性溶媒（例えば、水、メタノール、又はエタノール）は、第１の溶媒に対して５％体積／体積（ｖｏｌｕｍｅ／ｖｏｌｕｍｅ）（体積／体積（ｖｏｌ／ｖｏｌ））比で添加されて、ポリマー／オリゴマーアミンの分散を増加させ得る。いくつかの例において、中性非プロトン性有機溶媒対極性溶媒の比は、２０：１体積／体積である。ポリマー／オリゴマーアミン材料は、５％～２５％（重量／重量）の範囲のポリアミン材料対基質の重量比に分注され得る。

【０５０３】

プロセス５００Ｅは、溶媒媒体中の基質及びポリアミン材料を、第１の期間にわたって反応させること（ステップ５０８Ｅ）を含むことができる。第１の期間は、ポリアミン材料が最大容量まで基質と反応していることを確実にするのに十分であることができる。例えば、第１の期間は、４～２４時間（例えば、６～１８時間）の範囲であることができる。

【０５０４】
プロセス５００Ｅは、シランカップリング材料を懸濁液混合物に添加して、官能化混合物を形成すること（ステップ５１０Ｅ）を含むことができる。追加の詳細は、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、ステップ５０６Ａについてのもの）を含むことができる。いくつかの実施形態において、シランカップリング材料は、基質に対して２０％～８０％（重量／重量）の範囲のロードシランで分注され得る。
【０５０５】
プロセス５００Ｅは、溶媒媒体中の基質、シランカップリング材料、及びポリアミン材料を、第２の期間にわたって反応させること（ステップ５１２Ｅ）を含むことができる。第２の期間は、ポリアミン処理された基質の表面へのシランカップリング材料の最大官能化（例えば、結合）を可能にするのに十分であることができる。概して、理論によって拘束されることを望むことなく、第２の期間は、１２時間超であることができ、溶媒媒体、加熱温度、及びシランカップリング材料に依存し得る。いくつかの実装態様において、第２の期間は、１２時間超（例えば、１８時間超、２０時間超、又は２４時間超）である。例えば、非限定的に、第２の期間は、１２～２４時間（例えば、１６～１８時間）の範囲であることができる。
【０５０６】
プロセス５００Ｅは、官能化された材料を官能化混合物から濾過すること（ステップ５１４Ｅ）と、官能化された材料を、洗浄体積の新鮮な（例えば、新しい体積の）溶媒媒体中で洗浄すること（ステップ５１６Ｅ）と、官能化された材料を乾燥させること（ステップ５１８Ｅ）と、を含むことができる。追加の詳細は、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、ステップ５１４Ａ、５１６Ａ、５１８Ａ、及び５２８Ｂについてのもの）を含むことができる。
【０５０７】
図５Ｆに示されるように、プロセス５００Ｆは、水ベースの反応を含むことができる。特定の実施形態において、プロセス５００Ｆは、ある体積の水及びポリアミン材料を含む液体混合物を調製すること（ステップ５０２Ｆ）を含むことができる。総体積の水及びポリアミン材料に好適な器、例えば、３つ口丸底フラスコ又はビーカーにおいて、ポリアミン材料（例えば、ＰＥＩ）及び上記の体積の水を分注する。ポリアミン材料は、いずれかのポリアミン材料（例えば、本明細書に記載されるもの）であることができる。水は、器内のポリアミン材料を完全に懸濁させるように、例えば、ポリアミン材料に対して２０ｍＬ／ｇ（例えば、１０ｍＬ／ｇ、１５ｍＬ／ｇ、又は２５ｍＬ／ｇ）の水を分注することによって分注され得る。ポリアミン材料は、水に、５％～２５％（重量／重量）の範囲の、ステップ５０８Ｆにおいて添加されるシリカ基質で添加され得る。
【０５０８】
任意選択で、液体混合物は、ポリアミン材料が水中に完全に懸濁するまでかき混ぜられ得る。いくつかの例において、プロペラ、磁気撹拌器、又は超音波処理での機械的撹拌は、ポリアミン材料を、５～６０分（例えば、１０～３０分、５～３０分、又は１０～４５分）の範囲の時間内で分散させる。
【０５０９】
撹拌している間に、プロセス５００Ｆは、シランカップリング材料（例えば、アミノシラン）を液体混合物に添加すること（ステップ５０４Ｆ）を更に含むことができる。シランカップリング材料は、２０％～８０％（重量／重量）又は４０％～８０％（重量／重量）の範囲（例えば、２０％、３０％、４０％、４５％、５０％、６０％、又は７０％（重量／重量））の、ステップ５０８Ｆにおいて添加される基質で分注され得る。
【０５１０】
プロセス５００Ｆは、液体混合物を、第１の期間にわたって撹拌して、懸濁液混合物を形成すること（ステップ５０６Ｆ）を更に含むことができる。第１の期間は、シランカップリング材料の加水分解及び溶解を可能にするのに十分であることができる。概して、第１の期間は、１～１０分（例えば、５分）の範囲である。

【０５１１】
プロセス５００Ｆは、基質を懸濁液混合物に添加して、官能化混合物を形成すること（ステップ５０８Ｆ）を更に含むことができる。基質（例えば、シリカ材料又は酸化ケイ素材料）は、いずれかの好適な基質、例えば、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる。基質は、ある量の官能化された材料がプロセスからもたらされることを達成するように添加され得、量は、プロセスの規模に依存する。
【０５１２】
プロセス５００Ｆは、官能化混合物を、第２の期間にわたって撹拌すること（ステップ５１０Ｆ）を含むことができる。第２の期間は、基質へのポリアミン材料及びシランカップリング材料の最大吸収、例えば、基質の表面への官能化又は結合を可能にするのに十分であることができる。概して、理論によって拘束されることを望むことなく、第２の期間は、６０分未満であることができ、官能化混合物中のポリアミン材料及びシランカップリング材料の量及び濃度に依存し得る。例えば、第２の期間は、５～６０分の範囲、例えば、１０分、２０分、３０分、又は４５分であることができる。いくつかの非限定的な実施形態において、３０分超の撹拌時間は、官能化されたシリカの吸収容量を低減し得る。
【０５１３】
プロセス５００Ｆは、官能化された材料を官能化混合物から濾過すること（ステップ５１２Ｆ）と、官能化された材料を乾燥させること（ステップ５１４Ｆ）と、を含むことができる。追加の詳細は、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、ステップ５１４Ａ、５１８Ａ、及び５２８Ｂについてのもの）を含むことができる。いくつかの実施形態において、官能化された材料は、溶液から濾過又は蒸発を介して除去され、保持された水は、材料から加熱を介して除去される。いくつかの実施形態において、水を溶媒として使用するバッチ形式における、官能化された材料の調製は、プロセスのコスト及び環境影響を低減することができる。
【０５１４】
いくつかの実装態様において、官能化された材料は、オーブンにおいて、１２０℃で５～２０分間、乾燥に供される。３０分超の乾燥時間は、最終生成物の吸収容量を低減し得る。代替として、官能化された材料は、オーブンにおいて（例えば、８０℃で）、水和閾値に達するまで、乾燥に供され得る。非限定的な例として、水和閾値は、試料を通る不活性ガス流（例えば、５０ｍＬ／分のN_2流）での（例えば、ＴＧＡにおいて測定された場合の）、試料による１５％の重量損失（例えば、水除去のための重量損失）又は最小重量損失（例えば、約２時間の期間にわたって１００℃で約５％未満の重量損失）を有することであることができる。代替として、官能化された材料は、オーブンにおいて、材料における水含有量が５％（重量／重量）未満になるまで、乾燥に供される。
【０５１５】
図５Ｇに示されるように、プロセス５００Ｇは、溶媒媒体及び基質を含む懸濁液混合物を調製すること（ステップ５０２Ｇ）を含むことができる。総体積の溶媒媒体及び基質に好適な器、例えば、３つ口丸底フラスコにおいて、基質（例えば、シリカ又は酸化ケイ素材料）及び溶媒媒体を分注する。基質は、いずれかの好適な基質、例えば、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる。溶媒媒体は、器内の基質を全体的に覆うように、例えば、シリカ基質に対して１～１０ｍＬ／ｇ（例えば、１ｍＬ／ｇ、５ｍＬ／ｇ、８ｍＬ／ｇ、１５ｍＬ／ｇ、又は２～３ｍＬ／ｇ若しくは２～２．５ｍＬ／ｇ）の溶媒媒体を分注することによって分注され得る。一例において、溶媒媒体は、メタノールである。いくつかの例において、溶媒媒体は、溶媒混合物、例えば、２：１のエタノール及びシクロヘキサンの混合物である。溶媒媒体についての溶媒混合物は、基質によるポリアミンの最適な取り込みを提供するように選択され得る。
【０５１６】
プロセス５００Ｇは、溶媒媒体中の基質を撹拌すること（ステップ５０４Ｇ）を更に含むことができる。懸濁液混合物は、基質が溶媒媒体中に浸されている間に、器内で、例えば、磁気撹拌バー及び撹拌プレート、又は当業者に既知の他の好適な方法で撹拌され得る

（例えば、かき混ぜられ得る）。

【０５１７】

撹拌している間に、ポリアミン材料は、懸濁液混合物に添加され得る（ステップ５０６Ｇ）。ポリアミン材料は、ポリアミン、例えば、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる。ポリアミン材料は、溶媒媒体中に、溶媒媒体中の基質に対して１０％～６０％（重量／重量）又は３０％（重量／重量）の比で分注され得る。いくつかの実装態様において、ポリアミン材料は、溶媒媒体中に、最大２０％（重量／重量）、５０％（重量／重量）、又は６０％（重量／重量）（例えば、１０％～６０％（重量／重量）、１０％～５０％（重量／重量）、１５％～６０％（重量／重量）、１５％～５０％（重量／重量、又は２０％～６０％（重量／重量）の範囲）の比で分注され得る。

【０５１８】

任意選択で、懸濁液混合物は、周囲温度超及び９０℃未満（例えば、２５℃超及び９０℃未満）の加熱温度に加熱され得る（ステップ５０８Ｇ）。懸濁液混合物が加熱される加熱温度は、プロセス５００Ｇのために選択される溶媒媒体に依存し得る。

【０５１９】

プロセス５００Ｇは、懸濁液混合物を、加熱温度で、ある期間にわたって撹拌すること（ステップ５１０Ｇ）を含むことができる。期間は、基質の表面へのポリアミン材料の最大官能化（例えば、結合）を可能にするのに十分であることができる。概して、理論によって拘束されることを望むことなく、期間は、１０分～６時間の範囲であることができ、溶媒媒体、加熱温度、ポリアミン材料の濃度、及びポリアミン材料の特徴に依存し得る。いくつかの実装態様において、期間は、１０分～１時間、１０分～２時間、１０分～４時間、１～６時間、２～６時間、又は３～６時間の範囲である。

【０５２０】

この期間後に、プロセス５００Ｇは、懸濁液混合物を冷却すること（ステップ５１２Ｇ）を含むことができる。いくつかの実装態様において、冷却は、受動的に（例えば、放射冷却によって）行われる。例えば、器は、周囲空気温度で、懸濁液混合物が目標温度に冷却されるまで冷却されることが可能にされ得る。いくつかの実装態様において、目標冷却温度は、周囲温度（例えば、室温）である。代替の実装態様において、冷却は、能動的に（例えば、熱交換によって）、例えば、器についての水浴で行われる。

【０５２１】

プロセス５００Ｇは、官能化された材料を懸濁液混合物から濾過すること（ステップ５１４Ｇ）と、任意選択で、官能化された材料を、少なくとも１つの洗浄体積の新鮮な（例えば、新しい体積の）溶媒媒体中で洗浄すること（ステップ５１６Ｇ）と、官能化された材料を乾燥させること（ステップ５１８Ｇ）と、を含むことができる。追加の詳細は、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、ステップ５１４Ａ、５１６Ａ、５１８Ａ、及び５２８Ｂについてのもの）を含むことができる。

【０５２２】

追加として又は代替として、いずれかの中性非プロトン性溶媒が、洗浄溶媒として機能することができる。単一の洗浄ステップは、官能化された材料を、洗浄体積の新鮮な溶媒媒体に浸し、これにより、官能化されたシリカ材料が、全体的に、新鮮な溶媒媒体中に浸されることを含むことができる。新鮮な溶媒媒体対基質の、ステップ５０２Ｇと同様の比（例えば、１０ｍＬ／ｇの新鮮な溶媒媒体対官能化された基質）が使用され得る。例えば、官能化された材料は、４０ｍＬの洗浄体積の新鮮な溶媒媒体中に、単一の洗浄又は複数の洗浄（例えば、２回の洗浄、３回の洗浄、４回の洗浄、又はそれ以上）の実行として浸され得る。

【０５２３】

図５Ｈに示されるように、プロセス５００Ｈは、溶媒媒体及び基質を含む懸濁液混合物を調製すること（ステップ５０２Ｈ）を含むことができる。総体積の溶媒媒体及び基質に好適な器、例えば、３つ口丸底フラスコにおいて、基質（例えば、シリカ又は酸化ケイ素材料）及び溶媒媒体を分注する。追加の詳細は、本明細書に記載されるいずれかのもの（

例えば、ステップ５０２Ｇについてのもの）を含むことができる。
【０５２４】
いくつかの例において、エチレンアミン／オリゴマー材料は、懸濁液媒体中に懸濁しているものとして市販の供給源から得られる。そのような例において、ステップ５０２Ｇ及び５０４Ｈは、省略されてもよく、又は溶媒媒体が、懸濁液媒体に添加されて、混合物を形成してもよい。
【０５２５】
プロセスは、溶媒媒体中の基質を撹拌すること（ステップ５０４Ｈ）を更に含むことができる。懸濁液混合物は、基質が溶媒媒体中に浸されている間に、器内で、例えば、磁気撹拌バー及び撹拌プレート、又は当業者に既知の他の好適な方法で撹拌され得る（例えば、かき混ぜられ得る）。
【０５２６】
撹拌している間に、ポリアミン材料は、懸濁液混合物に添加され得る（ステップ５０６Ｈ）。ポリアミン材料は、約１００～８００ｇ／ｍｏｌのＭＷを有するポリアミン（例えば、小分子ポリアミン）、オリゴマーアミン、オリゴマーエチレンアミン、及び／又はエチレンアミン／オリゴマー、例えば、本明細書に記載されるいずれかのものを含むことができる。いくつかの実施形態において、ポリアミン材料は、小分子ポリアミン材料であることができる。小分子ポリアミン材料は、溶媒媒体中に、溶媒媒体中の基質に対して１０％～６０％（重量／重量）の比で分注され得る。いくつかの実装態様において、小分子ポリアミン材料は、溶媒媒体中に、最大５０％（重量／重量）又は最大６０％（重量／重量）（例えば、１０％～６０％（重量／重量）、１０％～５０％（重量／重量）、２０％～６０％（重量／重量）、又は２０％～５０％（重量／重量）の範囲）の比で分注される。機構又は理論によって制限されることを望むことなく、小分子ポリアミンは、基質にファンデルワールス相互作用を介して結合することができ、ポリマー／オリゴマーアミンの官能化層を作製する。
【０５２７】
任意選択で、プロセス５００Ｈは、懸濁液混合物を、周囲温度超及び９０℃未満（例えば、２５℃超及び９０℃未満）の加熱温度に加熱すること（ステップ５０８Ｈ）を含むことができる。懸濁液混合物が加熱される加熱温度は、プロセス５００Ｈのために選択される溶媒媒体に依存し得る。
【０５２８】
プロセス５００Ｈは、懸濁液混合物を、加熱温度で、ある期間にわたって撹拌すること（ステップ５１０Ｈ）を含むことができる。期間は、基質の表面への小分子ポリアミン材料の最大官能化（例えば、結合）を可能にするのに十分であることができる。概して、理論によって拘束されることを望むことなく、期間は、６時間超であることができ、溶媒媒体、加熱温度、小分子ポリアミン材料の濃度、及び小分子ポリアミン材料の特徴に依存し得る。いくつかの実装態様において、期間は、１０分～６時間（例えば、１０分～５時間、１０分～４時間、１０分～３時間、１０分～２時間、１０分～１時間、３０分～５時間、１～５時間、２～５時間、３～５時間、１～３時間、又は３０分～２時間）の範囲である。
【０５２９】
この期間後に、プロセス５００Ｈは、懸濁液混合物を冷却すること（ステップ５１２Ｈ）と、官能化された材料を懸濁液混合物から濾過すること（ステップ５１４Ｈ）と、任意選択で、官能化された材料を、少なくとも１つの洗浄体積の新鮮な（例えば、新しい体積の）溶媒媒体中で洗浄すること（ステップ５１６Ｈ）と、官能化された材料を乾燥させること（ステップ５１８Ｈ）と、を含むことができる。追加の詳細は、本明細書に記載されるいずれかのもの（例えば、ステップ５１２Ｇ、５１４Ａ、５１６Ａ、５１８Ａ、及び５２８Ｂについてのもの）を含むことができる。
【０５３０】
いくつかの実施形態において、プロセスは、以下で考察される図５Ｉに記載されるもの

を含むことができる。

【０５３１】

ｖｉ．　浸漬コーティングプロセス

本開示はまた、官能化された材料を商業規模（例えば、２５ｋｇ以上のバッチ）で作製する方法、及びそれから生成される化合物に関する。いくつかの実施形態において、基質（例えば、多孔質シリカ粒子）は、ポリアミン、例えば、ポリエチレンイミン（ＰＥＩ）、並びに少なくとも１つのシラン部分及び少なくとも１つのアミン部分を含有するアミノシラン化合物、例えば、アミノアルキルで置換されたトリアルキオキシシラン（ｔｒｉａｌｋｙｏｘｙｓｉｌａｎｅ）（例えば、Ｎ－（２－アミノエチル）－３－アミノプロピルトリメトキシシラン））で官能化される。いくつかの実施形態において、ポリアミン及びアミノシランの組み合わせは、シリカ基質に結合したアミン部分の数を、増加した炭素捕捉（例えば、２ｍｏｌ／ｋｇ超）のために増加させる。第１のポリアミン層は、アミノシランとのネットワークを形成する。ポリマー層は、アミノシラン化合物によって、多孔質シリカへの結合中に安定化される。官能化された材料は、溶液ベースの反応方法（例えば、浸漬コーティング）を使用して生成され得、方法において、アミノシラン化合物及びポリアミン化合物は、水ベースの溶液中で溶媒和する。基質は、混合物中に分注され、かき混ぜられ、除去される。これは、基質を、シラン含有化合物及びポリアミンの両方で同時に官能化する。

【０５３２】

いくつかの実施形態において、浸漬コーティングプロセスは、規模拡大された吸着剤製造及びいくつかのプロセス成分の再循環を容易にし、これは、長期生成コストを低減する。浸漬コーティング方法は、ある体積の吸着剤を乾燥させるためのエネルギー及び時間を低減することができる。浸漬コーティング方法は、かき混ぜ生成方法よりもより穏やかであることができ、浸漬コーティングされた基質（例えば、浸漬コーティングされたシリカ粒子）への損傷を低減する。

【０５３３】

いくつかの実施形態において、方法は、ポリアミンを含む第１の試薬、並びにシラン部分及びアミン官能基を含む第２の試薬を、ある体積の水中に導入して、官能化混合物を形成することと、基質（例えば、多孔質シリカ粒子）を官能化混合物中に導入することと、官能化混合物中の基質を、ある期間にわたって、第１の試薬及び第２の試薬を基質の表面と相互作用させて、官能化された基質（例えば、官能化されたシリカ粒子）を形成するのに十分な条件下で静止させることと、官能化された材料を、上記の体積の水から除去することと、を含むことができる。

【０５３４】

いくつかの実施形態において、官能化された材料を形成するための条件は、周囲圧力及び２０℃～７０℃の範囲の温度を含み得る。第２の試薬は、（３－アミノプロピル）トリメトキシシラン、（３－アミノプロピル）トリエトキシシラン、［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシラン、ｎ－（２－アミノエチル）－３－アミノプロピルシラントリオール、ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミン、３－アミノプロピルシラントリオール、ｎ－（２－アミノエチル）－３－アミノプロピルシラントリオール、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシラン、又はトリス（ジメチルアミノ）クロロシランを含み得る。

【０５３５】

いくつかの実施形態において、方法は、官能化された材料を、５０℃以上で、水和閾値に達することができるまで乾燥させるか、又はオーブンにおいて窒素の流れ下で５０℃以上で乾燥させることを更に含み得る。乾燥させることは、ダブルコーン真空乾燥機、コンベヤベルト乾燥機、Ｂｌｅｔ乾燥機、又はヌッチェフィルタ乾燥機において実行され得る。

【０５３６】

いくつかの実施形態において、基質は、少なくとも２５キログラムの量（例えば、少な

くとも２５キログラムの多孔質シリカ粒子）を含み得る。量は、１００キログラム～１０，０００キログラムの範囲であることができる。

【０５３７】

第１の試薬は、上記の体積の水中に、基質（例えば、シリカ酸化物材料）に対して５％～２０％（重量／重量）の範囲の第１の試薬で含まれ得る。第２の試薬は、上記の体積の水中に、基質（例えば、シリカ酸化物材料に対して２０％～７０％（重量／重量）の範囲の第２の試薬で含まれ得る。

【０５３８】

導入することは、複数の量の基質（例えば、複数の量の多孔質シリカ粒子）を官能化混合物中に連続的に導入して、複数の量の官能化された材料（例えば、複数の量の官能化されたシリカ粒子）を形成することを含み得、除去することは、複数の量の官能化された材料（例えば、複数の量の官能化されたシリカ粒子）を連続的に除去することを含み得る。

【０５３９】

いくつかの実施形態において、方法は、第３の試薬を、抗酸化剤化合物を含み得、上記の体積の水中に導入することを含み得る。抗酸化剤化合物は、有機硫黄含有化合物（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）であることができる。いくつかの実施形態において、基質は、官能化混合物中に３～７２時間維持され得る。

【０５４０】

図５Ｉは、官能化された材料を生成するための非限定的な浸漬コーティングプロセス５００Ｉを提供する。いくつかの実装態様において、浸漬コーティングプロセス５００Ｉは、大規模に実行され、例えば、１キログラム以上の官能化された材料を、単一プロセスにおいて生成する。いくつかの実装態様において、プロセス５００Ｉは、１００キログラム以上、例えば、最大１０，０００ｋｇの官能化された材料を生成する。本来のサイズ分布を維持するために、基質が比較的低い摩擦又はかき混ぜ力に供される撹拌方法、例えば、オーバーヘッド撹拌、穏やかなタンブリング、緩徐な定期的撹拌、又は振動が好ましい。

【０５４１】

図５Ｉに示されるように、プロセス５００Ｉは、ポリアミンを含む第１の試薬、並びにシラン部分及びアミン官能基を含む第２の試薬を、ある体積の水中に導入して、官能化混合物を形成すること（ステップ５０２Ｉ）、例えば、ポリアミン及びアミノシランを、上記の体積の水中に導入することを含む。溶媒はまた、いくつかの場合において、有機溶媒であることができる。本明細書で使用される場合、試薬及び化合物は、互換的に使用され得る。使用に依存して、試薬は、任意選択で、１つ以上の溶媒、塩、又は他の化合物を含み得る。

【０５４２】

総体積の試薬に好適な器、例えば、３つ口丸底フラスコ、ビーカー、ドラム、又はミキサにおいて、第１の試薬、第２の試薬、及び上記の体積の水を分注する。第１の試薬は、ポリアミン材料、例えば、本明細書に記載されるポリアミン化合物である。水は、器内のポリアミン材料を完全に懸濁させるように、例えば、ポリアミン材料に対して２０ｍＬ／ｇ（例えば、１０ｍＬ／ｇ、１５ｍＬ／ｇ、又は２５ｍＬ／ｇ）の水を分注することによって分注されるべきである。ポリアミン材料は、水に、５％～２０％（重量／重量）の範囲（例えば、６％（重量／重量）、８％（重量／重量）、１０％（重量／重量）、１２％（重量／重量）、１４％（重量／重量）、１６％（重量／重量）、又は１８％（重量／重量））の、ステップ３０４において添加される基質で添加される。

【０５４３】

第２の試薬は、本明細書に記載されるシラン化合物の例を含むシランカップリング材料であることができる。シランカップリング材料は、２０％～８０％（重量／重量）の範囲（例えば、２５％（重量／重量）、３０％（重量／重量）、３５％（重量／重量）、４５％（重量／重量）、５０％（重量／重量）、又は６０％（重量／重量））の、ステップ５０４Ｉにおいて添加される基質で分注され得る。

【０５４４】

液体混合物は、ポリアミン材料及びシランカップリング材料が水中に完全に懸濁するまでかき混ぜられ得る。いくつかの例において、プロペラ、磁気撹拌器、又は超音波処理での機械的撹拌は、ポリアミン材料を、５～６０分（例えば、１０～３０分、５～３０分、１０～４５分）の範囲の時間内で分散させる。

【０５４５】

任意選択で、官能化混合物は、シランカップリング材料及びポリアミン材料の加水分解及び完全な溶解を可能にするためのある持続期間にわたって撹拌され得る。概して、第１の期間は、１～１０分（例えば、５分）の範囲である。

【０５４６】

プロセス５００Ｉは、基質（例えば、多孔質シリカ粒子）を官能化混合物に導入すること（ステップ５０４Ｉ）を含むことができる。基質（例えば、シリカ又は酸化ケイ素材料）は、いずれかの好適な基質、例えば、本明細書に記載されるいずれかのものであることができる。基質は、ある量の官能化された材料がプロセスからもたらされることを達成するように添加され、量は、プロセスの規模に依存する。

【０５４７】

プロセス５００Ｉは、官能化混合物中の基質を、ある期間にわたって静止させること（ステップ５０６Ｉ）を含むことができる。基質は、官能化混合物中に、第１の試薬及び第２の試薬を基質の表面に化学結合させて、官能化された材料（例えば、官能化されたシリカ粒子）を形成するのに十分な条件下で静止し得る。期間は、基質の表面へのポリアミン材料及びシランカップリング材料の最大吸収、例えば、官能化を可能にするのに十分である。概して、理論によって拘束されることを望むことなく、期間は、６０分未満であり、官能化混合物中のポリアミン材料及びシランカップリング材料の量及び濃度に依存する。例えば、期間は、５～６０分の範囲、例えば、１０分、２０分、３０分、又は４５分であることができる。

【０５４８】

プロセス５００Ｉは、官能化された材料を官能化混合物から除去すること（ステップ５０８Ｉ）を含むことができる。除去は、当該技術分野で既知の、固相を液相から分離するための方法を使用して実行される。これは、真空濾過、遠心分離、真空蒸発、又はこれらの若しくは他の方法の組み合わせを含むことができるが、これらに限定されない。官能化された材料から分離された体積の官能化混合物は、廃棄されてもよく、貯蔵されてもよく、又は再循環してもよい。任意選択で、ポリアミン材料及びシランカップリング材料の濃度が、依然として、追加の量の基質を官能化するのに十分に高い場合、官能化混合物は、プロセス５００Ｉにおいて２回以上再使用され得る。官能化混合物を複数のプロセス３００にわたって再使用することは、材料コストを節約することができ、官能化された材料の製造効率を増加させることができる。

【０５４９】

任意選択で、プロセス５００Ｉは、官能化された材料を乾燥させること（ステップ５１０Ｉ）を含むことができる。官能化された材料を乾燥させることは、温度を増加させること、大気圧を低減すること、不活性乾燥ガスを試料の上に通すこと、加熱された乾燥ガスを試料の上に通すこと、又はこれらの組み合わせを含むことができる。官能化された材料は、乾燥に供されて、官能化された材料内に封入された実質的に全ての水を除去することができる。

【０５５０】

例えば、いくつかの実装態様において、官能化された材料は、オーブンにおいて、７０℃で５～２０分間、乾燥に供される。いくつかの実施形態において、６０分超の乾燥時間は、最終生成物の吸収容量を低減し得る。しかしながら、乾燥時間は、規模又は条件依存性であり得る。例えば、N_2又は真空下で乾燥させる場合、乾燥時間は、より長くあり得る。バッチ乾燥が実行される例において、N_2又は真空であっても、乾燥時間は、６０分超であり得る。代替として、官能化された材料は、オーブンにおいて、７０℃で、水和閾値に達するまで、乾燥に供され得る。非限定的な例として、水和閾値は、不活性（例えば

、N_2）流通過での（例えば、ＴＧＡにおいて測定された場合の）、試料による１５％の重量損失（例えば、水除去のための重量損失）であってもよく、又は７０℃での更なる重量損失がないことであってもよい。代替として、官能化された材料は、（例えば、オーブンにおいて）材料における水含有量が５％（重量／重量）未満になるまで、乾燥に供され得る。

【０５５１】

吸着剤は、脱着プロセスを介して再使用され得る。例えば、吸着剤は、１００回以上（例えば、１０００回以上、１００００回以上）再使用され得る。脱着プロセスのために、試料は、７０℃以上に、真空下で３０分間加熱され得る（持続期間は、温度及び／又は真空レベルに基づいて変化し得る）。理論によって制限されることを望むことなく、これは、吸着プロセス中のCO_2捕捉の放出を容易にすることができ、放出されたCO_2は、更なる隔離のために収集され得、これは、直接空気捕捉のためのシステムを参照して本明細書に記載される。脱着プロセスの非限定的な態様は、吸着剤が水蒸気充填真空環境（例えば、１０％超の相対湿度）下で加熱されることを維持することであることができる。機構によって制限されることを望むことなく、これは、吸着剤分解を低減することができる。

【０５５２】

いずれかの有用な構成要素が、官能化された材料を形成するために使用され得る。いくつかの実施形態において、１つ以上の構成要素は、浸漬コーティングシステムにおいて用いられ得る。図６～１１は、例示的なシステムであり、システムによって、官能化された材料が、本明細書に記載される浸漬コーティング方法において生成され得る。

【０５５３】

図６Ａ～６Ｂは、ダブルコーンタンブル混合システム６００を示し、ダブルコーンタンブル混合システム６００は、タンブラ６０２を含み、タンブラ６０２は、入口６０４、出口６０６、及び内側体積６０８を有する。ダブルコーン混合システム６００は、高い程度の粒子移動度を、基質が内側体積６０８に入口６０４を介して添加されるときの混合中にもたらす。概して、タンブラ６０２の内容物は、タンブラ６０２を、中心水平軸を中心として回転させることによって混合される。

【０５５４】

ダブルコーンタンブル混合システム６００は、乾燥粉末及び顆粒を均質に混合するための効率的な機械である。内容物に接触する表面の全ては、非反応性金属、例えば、ステンレス鋼、ガラス、又はガラスコーティングされた内部から製造されており、シラン化合物、ポリアミン、又は基質（例えば、シリカ粒子）との相互作用を防止することができる。概して、理論によって拘束されることを望むことなく、最適な均質性のための有効体積は、タンブラ６０２の内側体積６０８の３５～７０％である。ダブルコーンタンブル混合システム６００は、タンブラ６０２の円錐形状及び滑らかな内側壁が撹拌中の基質の摩耗を低減するため、脆弱性基質（例えば、脆弱性シリカ粒子）との使用のために有利である。

【０５５５】

概して、事前官能化混合物構成要素及び／又は官能化混合物構成要素は、入口６０４内に注がれ、官能化混合物を形成することを可能にされる。換言すれば、図６Ａの最左の画像に示されるように、アミノシラン、ポリアミン、及び／又はある体積の溶媒（例えば、水）水が、混合システム６００の内側体積６０８内にスプレーされる。必要な場合、入口６０４は密封され、構成要素は、混合システム６００内で撹拌されて、事前官能化混合物若しくは官能化混合物を形成するか、又はその形成を促進する。

【０５５６】

基質（例えば、多孔質シリカ粒子）は、官能化混合物に入口６０４を介して添加され、図６Ａの中央画像に示されるように、タンブラ６０２は、密封及び撹拌されて、官能化された材料を形成する。

【０５５７】

官能化された材料は、官能化混合物から、出口６０６を開放し、官能化混合物を官能化された材料から濾過又は他の手段を介してデカントすること（図６Ａの最右の画像）によ

って分離され得る。いくつかの例において、タンブラ６０２は、出口６０６を含まず、代わりに、入口６０４が、官能化混合物をデカントし、官能化された材料を分離するために使用される。

【０５５８】

いくつかの例において、混合システム６００は、シリカ粒子の官能化及び乾燥の両方のために使用される。図６Ｂにおいて、混合システム６００は、熱６１８を、タンブラ６０２の内側体積６０８に適用し、これは、官能化された材料によって吸収された過剰な官能化混合物が蒸発することを引き起こす。タンブラ６０２は、回転して、官能化された材料を撹拌し、これは、吸収された官能化混合物の蒸発速度を、加熱中に増加させる。

【０５５９】

図７は、例示的なヌッチェフィルタ混合システム７００の３つの画像であり、ヌッチェフィルタ混合システム７００は、閉鎖システムにおける圧力又は真空下での液体からの固体物質の分離を有効に実行する。図７の最左の画像は、混合システム７００の切り欠き図を示す。混合システム７００は、器７０２を含み、器７０２は、入口７０４、フィルタ排出７１０、及び出口７１４を有する。器７０２のいくつかの例は、温度制御のためにジャケット付きである。撹拌器７０６は、器７０２内で、駆動モータ７０８によって駆動モータ７０８シャフトを中心として回転可能である。入口７０４は、シラン化合物、ポリアミン、ある体積の溶媒（例えば、水）、及び／又は基質（例えば、シリカ基質）を含む事前官能化混合物構成要素又は官能化混合物構成要素を受容する。

【０５６０】

駆動モータ７０８は、撹拌器７０６を回転させ、これにより、混合物はかき混ぜられ、基質は、官能化混合物中で流動する。器７０２は、フィルタ７１２を含み、フィルタ７１２は、固体基質及び液体官能化混合物を、撹拌中に分離するようにサイズ設定されている。排出７１０及び出口７１４が開放しているときに、フィルタ７１２が官能化された材料を分離する間に、液体は、器７０２から除去され、廃棄される。固体基質は、出口７１４を介して出て、液体官能化混合物は、排出７１０を介して出る。フィルタ７１２は、ワイヤメッシュ、クロス層、又は有孔金属層であることができる。

【０５６１】

混合システム７００のいくつかの例としては、加熱機構が挙げられ、加熱機構は、フィルタ７１２内に統合されており、これにより、図７の最右の画像における液体のデカント後に、分離された官能化された材料は、器７０２内で乾燥に供され得る。

【０５６２】

図８は、官能化された材料を生成するために使用される濾過バッグ浸漬コーティング方法の３つの画像である。頂部開放型容器８０２、例えば、バットは、官能化混合物の液体構成要素で充填され、均質な混合物を生成することが可能にされる。いくつかの例において、液体構成要素は、撹拌されて、均質な混合物を生成する。最左の画像において、メッシュ濾過バッグ８０４は、官能化される基質（例えば、シリカ粒子）で充填される。濾過バッグ８０４のメッシュは、基質（例えば、シリカ粒子の微粒子）を保留しつつ、液体の侵入を可能にするのに十分に小さい。いくつかの場合において、メッシュは、濾過バッグ８０４が液浸されているときに細塵が基質から分離されることを可能にするのに十分に大きい。

【０５６３】

図８の中央画像において、濾過バッグ８０４は、液体構成要素中に液浸され、ある持続期間にわたって静止する。濾過バッグ８０４は、容器８０２内で移動して、官能化混合物と濾過バッグ８０４内に収容された基質との間の均一な接触を容易にすることができる。均一な接触は、濾過バッグ８０４が取り除かれ、官能化された材料が乾燥したときに、均質な官能化された材料を生成する。

【０５６４】

図８の最右の画像において、濾過バッグ８０４は、容器８０２から取り除かれ、過剰な官能化混合物は、デカント、例えば、排出され、これにより、官能化された材料は、濾過

バッグ８０４において維持される。次いで、官能化された材料（例えば、官能化されたシリカ粒子）は、濾過バッグ８０４から除去され得、乾燥に供されて、官能化プロセスを完了することができる。

【０５６５】

図９及び１０は、ドラムミキサの２つの異なる例を示し、ドラムミキサは、官能化混合物の混合及び官能化された材料（例えば、官能化されたシリカ粒子）の乾燥のために使用され得る。図９の左の画像において、パドルミキサ９００は、円筒ドラム９０２を含み、円筒ドラム９０２において、官能化混合物が混合される。パドル撹拌器９０４は、ドラム９０２と独立して回転して、官能化混合物を混合する。基質が、ドラム９０２内に分注され、パドル撹拌器９０４は、回転して、官能化混合物中の基質（例えば、シリカ粒子）を撹拌する。

【０５６６】

図１０の左の画像において、リボンミキサ１０００は、円筒ドラム１００２を含み、円筒ドラム１００２において、官能化混合物が、リボン撹拌器１００４によって混合され、リボン撹拌器１００４は、ドラム１００２と独立して回転して、官能化混合物を混合する。基質が、ドラム１００２内に分注され、リボン撹拌器１００４は、回転して、官能化混合物中の基質（例えば、シリカ粒子）を撹拌する。

【０５６７】

パドルミキサ９００及びリボンミキサ１０００の例としては、加熱機構、例えば、ジャケット付きドラム９０２及び１００２、又は固体基質を液体官能化混合物から分離した後に、加熱されたガスを官能化された材料の上に流すための強制ガス通気が挙げられ得る。いくつかの例において、加熱されたガスは、空気又は不活性ガス（例えば、窒素、N_2）であることができる。熱媒体が、パドルミキサ９００又はリボンミキサ１０００のジャケットを通って飛行する場合、熱媒体は、加熱された油、蒸気、又は熱水であることができる。熱媒体が器の内部で飛行する（例えば、強制ガス通気）場合、不活性ガス、例えば、N_2が使用され得る。しかしながら、強制ガス通気の例において、空気は、酸化を防止するために回避されるべきである。このように、パドルミキサ９００及びリボンミキサ１０００は、シリカ粒子の官能化及び乾燥の両方のために使用され得る。ミキサ９００及び１０００は、熱を、ミキサの内側体積に適用し、これは、官能化された材料によって吸収された過剰な官能化混合物が蒸発することを引き起こす。撹拌器９０４及び１００４は、回転して、官能化された材料を撹拌するため、吸収された官能化混合物の蒸発速度は、加熱中に増加する。

【０５６８】

図１１Ａ～１１Ｂは、例示的な浸漬コーティングコンベヤシステム１１００を示し、浸漬コーティングコンベヤシステム１１００において、官能化されるシリカ粒子が、容器１１０２内に置かれ、浸漬コーティングプロセスにわたって、コンベヤ１１０４によって搬送される。示される容器１１０２は、頂部開放型器であるが、他の例において、基質を収容するメッシュバッグは、コンベヤシステム１１００とともに機能する。容器１１０２は、基質による官能化混合物の急速かつ完全な吸収を容易にするために、無孔又は有孔であることができる。

【０５６９】

図１１Ａは、コンベヤ１１０４上に配置された容器１１０２を示す。コンベヤは、コントローラによって運転され、コントローラは、容器１１０２が浸漬タンク１１０６に入ることを引き起こす。浸漬タンク１１０６は、基質（例えば、シリカ粒子）を官能化するためのアミノシラン及び／又はポリアミンを含む官能化混合物を収容する。浸漬タンク１１０６のいくつかの例としては、撹拌要素、例えば、混合若しくは撹拌ブレード、又はポンプが挙げられる。

【０５７０】

コンベヤ１１０４は、容器１１０２を浸漬タンク１１０６内に輸送する。コンベヤ１１０４は、連続的に又は断続的に運転され、このため、容器１１０２は、官能化混合物中に

、基質を官能化するのに十分な時間存在する。コンベヤ１１０４は、容器１１０２を官能化混合物から除去するように運転される。

【０５７１】

コンベヤシステム１１００は、過剰な官能化混合物を、官能化された材料（例えば、官能化されたシリカ粒子）から除去するための乾燥機１１０８を、浸漬タンク１１０６後に含む。乾燥機１１０８は、基質の温度を、加熱されたガスを送風することによって、受動的加熱要素を介して、又は両方によって上昇させることができる。

【０５７２】

図１１Ｂは、連続モードで運転されるコンベヤシステム１１００を示し、連続モードにおいて、複数の容器１１０２が、コンベヤ１１０４によって同時に輸送される。図１１Ｂは、容器１１０２ａ、１１０２ｂ、及び１１０２ｃを示し、容器１１０２ａ、１１０２ｂ、及び１１０２ｃは各々、浸漬コーティングプロセスの異なる段階にある。このようにして、コンベヤシステム１１００は、効率的に運転されて、シリカ粒子のバッチを、順次に、浸漬コーティングすることができ、乾燥させることができる。

【０５７３】

ＩＩＩ．　官能化された材料を使用又は試験する方法

官能化された材料は、吸着剤として使用され得る。そのような材料を試験するための方法及びシステムが、本明細書に記載される。

【０５７４】

ｉ．官能化された材料を使用する方法

本開示は、官能化された材料を使用して、大気CO_2を空気から直接空気捕捉によって除去する方法を包含する。空気に加えて、官能化された材料は、CO_2を流体から除去するために使用され得る。

【０５７５】

使用方法は、CO_2を捕捉（例えば、可逆的に捕捉）するための官能化された材料を提供することを含むことができる。概して、官能化された材料は、従来の又は均一なビーズ、顆粒、ペレット、繊維、膜、又は粉末の層であり、その上に、CO_2を含むガス混合物が流される。官能化された材料の層を出るガスは、入るガスよりも低いCO_2濃度を有する。

【０５７６】

CO_2の捕捉は、反応器又は試料ホルダ、例えば、本明細書に記載されるいずれかのものを使用することによって達成され得る。したがって、使用方法は、空気を、吸着剤を含む反応器（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）又は試料ホルダ（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）に提供することであって、吸着剤が、官能化された材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含むことができる、提供することと、吸着剤を、CO_2を空気から吸着して、CO_2低減空気を形成するための条件に曝露することと、を含むことができる。いくつかの実施形態において、吸着剤は、流動床として提供される。

【０５７７】

使用方法は、吸着されたCO_2を、ある特定の条件下で放出して、CO_2を吸着剤から脱着して、CO_2富化空気を形成することを更に含むことができる。非限定的な条件は、例えば、温度スイング吸着プロセス、圧力スイング吸着、真空スイング吸着プロセス、又はこれらのうちのいずれかの組み合わせを含むことができる。

【０５７８】

いくつかの実施形態において、方法は、CO_2を含む周囲空気を、１つ以上の空気チャンバを備える反応器（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）に提供することと、周囲空気を送風して、これにより、周囲空気が、１つ以上の空気チャンバから反応チャンバ内に移行することと、粉末化吸着剤材料を、反応チャンバに入口を介して送達することと、粉末化吸着剤材料及び空気の流動床を、粉末化吸着剤材料が、CO_2を空気から吸着して、CO_2低減空気及び使用済み粉末化吸着剤材料を形成する条件下で作製すること

と、使用済み粉末化吸着剤材料を、反応チャンバから連続的に除去することと、CO_2低減空気を、反応チャンバから１つ以上の排気ポートを介して連続的に除去することと、を含む。

【０５７９】

ｉｉ．　試料ホルダ

官能化された材料は、試料ホルダ内に、試験のためにかつ／又は吸着剤としての使用中に提供され得る。図１２Ａは、吸着剤のための非限定的な試料ホルダ１２００の分解図（左）及び組み立て図（右）を概略的に示す。官能化された材料は、試料ホルダ１２００における２つの層のフィルタ１２０４（例えば、グラスウール）間に配置された試料空間１２０６内に置かれ得る。試料ホルダ１２００の密封端部１２０２は、ガス流を許容する入口１２０８及び出口１２１０を含むことができる。密封端部１２０２は、試料ホルダ１２００を組み立てるための可逆的ねじ接続を含むことができる。組み立てられたときに（右）、試料ホルダ１２００は、異なって、ガス流入に対して密封された。

【０５８０】

図１２Ｂにおいて、実験的装備１２２０の概略図が示される。ここで、図１２Ａ及び１２Ｂを参照して、ガス供給源、例えば、空気圧縮機１２２２は、圧縮環境空気を、試験試料ホルダ１２００の入口１２０８に提供した。空気は、フィルタ１２０４を通り、それによって、官能化された材料を環境空気に曝露する。空気は、出口１２１０から排気され得る。圧縮環境空気中のCO_2の濃度は、ガス分析器、例えば、CO_2ガス分析器１２２４及び１２２６によって、入口１２０８に入る前にかつ出口１２１０を出た後に測定され得る。

【０５８１】

官能化された材料の試料は、データ収集前に、活性化プロセスで処理された。試料は、真空乾燥機（例えば、真空加熱器１２２８）において、７０℃に３０分間真空下で（例えば、０．３ｐｓｉで）加熱されて、吸着剤を、例えば、活性化プロセスとして活性化した。代替として、図１２Ｂに示されるように、加熱要素１２２８及び真空システム１２３０は、装備１２２０の別個の要素であり、一斉に機能して、試料ホルダ１２００を加熱し、真空をそれに適用する。いくつかの実装態様において、冷却要素１２３２は、装備１２２０において、試料ホルダ１２００における環境の温度を更に制御するように含まれる。加熱要素１２２８及び冷却要素１２３２の両方は、実験的装備１２２０における試料ホルダ１２００内に統合されており、温度制御を、吸着剤試料に直接適用する。活性化プロセスは、官能化されたシリカの細孔内の残留溶媒媒体の除去、例えば、蒸発を容易にすることができ、合成プロセス（例えば、プロセス５００Ａ～５００Ｉ）中に結合したCO_2分子を、大気に排出するために脱着する。

【０５８２】

非限定的な吸着手順のために、０．５ｇ～１０ｇの範囲の官能化されたシリカの試料が、試験試料ホルダ１２００における２つの層のガラス繊維フィルタ１２０４間に置かれた。ガス供給源１２２２からの圧縮環境空気（例えば、入力空気）は、試験試料ホルダ１２００を介して、１分当たり１～１０標準リットル（ｓｌｐｍ）の範囲の速度で連続的に送られ得、それによって、活性化された官能化された材料を曝露する。活性化された官能化された材料は、３０～６０分の範囲の期間にわたって曝露された。入力空気の湿度は、２１℃で１５％～５０％の相対湿度（ＲＨ）の範囲であるように制御され得る。活性化された官能化された材料がCO_2を吸着した際に、CO_2の濃度が、両方、試料ホルダ前にCO_2ガス分析器１２２４で測定され、試料ホルダ後にCO_2ガス分析器１２２６で測定される。次いで、同じ試料ホルダが、真空システム１２３０によって真空に供され得、加熱要素１２２８によって加熱されて、二酸化炭素を試料から抽出することができる。また、抽出された二酸化炭素の量が、ガス分析器１２２６によって測定された。

【０５８３】

湿度は、「乾燥空気」及び「湿潤空気」のブレンドを介して、流量計（図示せず）で制御され得る。一例として、５０％のＲＨを有する入力空気を、５ｓｌｐｍの流量で生成す

るために、２．５ｓｌｐｍでの乾燥空気（例えば、１０％未満のＲＨ）及び湿潤空気（例えば、９５％超のＲＨ又は１００％のＲＨ）が各々、２．５ｓｌｐｍでブレンドされ得る。乾燥空気及び湿潤空気流制御は、閉ループコントローラを使用して達成され得る。

【０５８４】

CO_2濃度を含む圧縮環境空気は、試験試料ホルダ１２００の入力及び出力におけるガス分析器１２２４及び１２２６によって、実験期間中に、ｍｏｌのCO_2／ｋｇの吸着剤単位で監視され得る。

【０５８５】

ＩＶ．　官能化された材料を用いるシステム

官能化された材料を用いるためのシステムが、本明細書に開示される。いくつかの実施形態において、官能化された材料は、吸着剤として、直接空気捕捉（ＤＡＣ）における使用のための流動床反応器において使用される。

【０５８６】

ｉ．直接空気捕捉システム

本開示の吸着剤を使用するCO_2の直接空気捕捉（ＤＡＣ）のためのシステムの例は、図１３Ａ～１３Ｂ及び図１４を参照して記載され、それらの例は、米国特許出願公開第２０２１／０３００７６５号又は国際公開第２０２１／２０２４９９号に記載されており、それらの開示は、それらの全体が参照により本明細書に組み込まれる。

【０５８７】

図１３Ａは、二酸化炭素抽出システム１３００の例示的な実装態様の概略図であり、二酸化炭素抽出システム１３００は、廃熱を使用して、二酸化炭素直接空気捕捉（ＤＡＣ）システム１３１５のためのエネルギーを提供する。示されるように、二酸化炭素抽出システム１３００は、廃熱１３０２を発生させる産業プロセス１３０５を含む。いくつかの実装態様において、産業プロセスは、電力入力１３０３を使用する。廃熱１３０２は、この例において、熱的熱再使用システム１３１０に供給され、熱的熱再使用システム１３１０はまた、電力入力１３０６を使用する。

【０５８８】

熱的熱再使用システム１３１０は、加熱流体１３０４を二酸化炭素ＤＡＣシステム１３１５に提供する。二酸化炭素ＤＡＣシステム１３１５はまた、電力入力１３０８及び周囲空気流入力１３１１を受容する。二酸化炭素ＤＡＣシステム１３１５は、二酸化炭素供給流れ１３１２、二酸化炭素低減空気流出力流れ１３１４、及び脱塩水１３１６を出力する。本明細書でより詳細に考察されるように、ＤＡＣシステム１３１５は、吸着器システム（例えば、任意選択で、流動床反応器又はサイロ吸着器を備え得るもの）と、脱着器システム（例えば、任意選択で、重力送り脱着システムを含み得るもの）と、を含む。

【０５８９】

概して、二酸化炭素抽出システム１３００は、加熱流体１３０４を、廃熱１３０２から熱的熱再使用システム１３１０によって発生する熱的エネルギーとして使用するように運転される。加熱流体１３０４中の熱的エネルギーは、二酸化炭素ＤＡＣシステム１３１５によって使用されて、周囲空気流入力１３１１から捕捉された二酸化炭素を分離し、分離された二酸化炭素を、二酸化炭素供給流れ１３１２として供給する。次いで、加熱流体１３０４は、加熱流体戻り１３１３を介して、熱的熱再使用システム１３１０に戻され、廃熱１３０２は、産業プロセス１３０５に、廃熱戻り１３１７を介して戻される。いくつかの態様において、二酸化炭素供給流れ１３１２は、地下層内への注入剤として、炭化水素生成運転中に提供され得る。いくつかの態様において、注入された二酸化炭素は、地下層内に（炭化水素生成運転を支援して、又はそれを支援することなく）隔離され得る。

【０５９０】

産業プロセス１３０５は、出力として、廃熱の形態での熱的エネルギー、すなわち、捕捉されない限り、そうでなければ、例えば、周囲環境に失われるエネルギーを発生させるいずれかのプロセスであり得る。一例として、産業プロセス１３０５は、コンピュータデータセンターであり得、コンピュータデータセンターは、概して、コンピュータシステム

、並びに関連する構成要素、例えば、電気通信及び記憶システムを収容する。いくつかの態様において、データセンターは、熱を発生させる数十、数百、数千、又は更にはそれ以上のサーバデバイス、例えば、ハードウェアプロセッサ、電圧調整器、メモリモジュール、スイッチ、及び特定の量の情報技術（ＩＴ）電力を提供するように運転される他のデバイスを含む。そのようなデバイスは、典型的には、電力を使用して、運転され、熱を運転中に出力する。そのようなデバイスが正確に運転されるために、出力熱は、冷却流体流（例えば、空気、水、冷媒）中に捕捉されなければならず、データセンターから排出されなければならない。例えば、空気取り扱いシステム（例えば、ファン、冷却コイル）は、熱発生構成要素の上を循環する空気流中の出力熱を捕捉するように運転され得る。ここで、空気流中にある出力熱は、冷却液体、例えば、冷却コイル内のものに伝達される。次いで、冷却液体に伝達された熱は、典型的には、周囲環境に、廃熱として、例えば、蒸発冷却システム、又はチラー／冷却塔システムなどを介して除かれる。この例において、この廃熱は、廃熱１３０２の形態をとる。

【０５９１】

例示的な熱的熱再使用システム１３１０は、廃熱１３０２及び電力入力１３０８を使用して、加熱流体１３０４を提供する。熱的熱再使用システム１３１０は、熱ポンプのバンク、及び加熱流体１３０４を提供するための熱交換器のバンクを備える。受動的及び能動的加熱の使用のバランスを保つことにより、電力が節約されて、二酸化炭素ＤＡＣシステム１３１５に、必要とされる温度の加熱流体１３０４を提供することができる。概して、熱的熱再使用システム１３１０は、１つ以上の蒸気圧縮サイクル（「熱ポンプ」）を含み、１つ以上の蒸気圧縮サイクルは、圧縮の熱の形態での熱的エネルギーを廃熱１３０２に添加し、そのようなエネルギーの合計を流体に伝達して、加熱流体１３０４（例えば、加熱液体）を発生させる。概して、熱的熱再使用システム１３１０内の各熱ポンプ及び熱交換器は、熱的エネルギーを、熱シンクから熱供給源に、すなわち、自発的な熱伝達の反対方向に伝達するように運転される。熱的熱再使用システム１３１０の１つ以上の熱ポンプは、電力入力１３０６を使用して、エネルギーを熱供給源から熱シンクに伝達する機能を達成する。熱的熱再使用システム１３１０における各熱ポンプは、２つの熱交換器（蒸発器として作用するもの、凝縮器として作用するもの）、膨張デバイス（例えば、弁又は固定オリフィス）、及び圧縮機（例えば、遠心、ねじ、往復、又はスクロールなど）の主要な構成要素を含む。これらの構成要素の各々は、熱ポンプにおける閉ループ冷媒回路内で流体的に結合している。

【０５９２】

一般に既知のように、蒸気圧縮熱ポンプサイクルにおいて、冷媒は、第１の熱交換器を出て、第１の熱交換器において、冷媒からの熱は、第１の媒体に放出される。次いで、冷媒は、圧縮機に入り、圧縮機において、冷媒は圧縮され、圧縮の熱は、それに添加される。次いで、冷媒は、第２の熱交換器に入り、第２の熱交換器において、第２の媒体からの熱が添加される。次いで、冷媒は、膨張デバイスに入り、等エンタルピー圧力低下に供される。冷媒は、蒸発器に入って、圧縮の熱及び第２の媒体からの熱を第１の媒体に放出することによって、サイクルを完了する。

【０５９３】

本開示は、廃熱の供給源と二酸化炭素ＤＡＣシステムとの間の熱伝達システムとしての蒸気圧縮熱ポンプサイクルを記載するが、記載される蒸気圧縮熱ポンプサイクルの代わりに（又はそれと一緒に）、他の熱力学的サイクルもまた使用され得る。例えば、１つ以上の蒸気吸着サイクルが、記載される蒸気圧縮熱ポンプサイクルの代わりに（又はそれと一緒に）使用され得る。例えば、蒸気吸着サイクルは、脱着－凝縮－膨張－蒸発、その後の吸着のサイクルからなる。

【０５９４】

二酸化炭素ＤＡＣシステム１３１５は、概して、周囲空気流入力１３１１（低濃度のガス二酸化炭素を含むもの）を、１つ以上の媒体（例えば、「フィルタ」）の上に通すか、又はそれらに通すように運転される。いくつかの態様において、１つ以上のファン（図示

せず）は、電力入力１３０８を使用して、周囲空気流入力１３１１を循環させる。いくつかの態様において、媒体又はフィルタは、固体吸着剤を含み、空気流入力１３１１中の大気二酸化炭素が、固体吸着剤に結合する。二酸化炭素で飽和した吸着剤は、「リッチ吸着剤」と称され得る。

【０５９５】

固体吸着剤、例えば、本開示に記載される吸着剤の場合、空気流入力１３１１が固体媒体又はフィルタの上を通った際に、空気流入力１３１１中の大気二酸化炭素は、媒体又はフィルタに結合する。媒体又はフィルタは、二酸化炭素で飽和したときに、加熱されて（例えば、６００～６２０℃又は６０～１００℃に加熱されて）、収集のための二酸化炭素（本明細書に記載されるもの）を放出することができる。

【０５９６】

加熱流体１３０４からの熱的エネルギーを使用して、熱は、固体又は液体吸着剤に適用され、これは、二酸化炭素と吸着剤との間の結合を破壊する。分離された二酸化炭素は、二酸化炭素ＤＡＣシステム１３１５からの二酸化炭素供給流れ１３１２として提供される。ここで二酸化炭素を含まない（すなわち、固体又は液体）「リーン吸着剤」は、再循環して戻されて、より多くの二酸化炭素を周囲空気流入力１３１１から捕捉する。空気流出力１３１４は、典型的には、二酸化炭素をほとんど含有しないか、又はそれを含有しない。

【０５９７】

図１３Ｂは、例示的な二酸化炭素ＤＡＣシステム１３１５を示す。二酸化炭素ＤＡＣシステム１３１５は、吸着器システム１３２６と、脱着器システム１３２８と、を含む。

【０５９８】

吸着器システム１３２６は、概して、周囲空気流入力１３１１（ガス二酸化炭素を含むもの）を、１つ以上の吸着剤（例えば、媒体又はフィルタにおけるもの）がCO_2を空気から吸着する条件下で、吸着剤の上に通すか、又はそれらに通すように運転される。いくつかの実施形態において、吸着剤は、流動床反応器内に提供され、流動床反応器において、空気は、空気入口１５３８を通って反応チャンバ１５１０内に流れ、分配プレート１５４２を介して拡散して、吸着剤と接触する（例えば、図１５Ａ～１５Ｅ又は図１６のうちのいずれかにおける反応器１５００）。いくつかの実施形態において、吸着器システムは、例えば、図１７、１８、１９Ａ～１９Ｂ、２０、２１Ａ～２１Ｂ、２２Ａ～２２Ｂ、又は２３Ａ～２３Ｃのうちのいずれかにおける吸着器を含むことができる。他の実施形態において、図１７及び図１９Ｂを参照して、空気１７０５は、サイロ吸着器１７００のフィルタパネル１８０２を通って流れる。

【０５９９】

脱着器システム１３２８は、概して、吸着された二酸化炭素を吸着剤材料から除去するように運転される。脱着器システムは、例えば、図２５、２６、又は２７Ａ～２７Ｂのうちのいずれかの脱着システムを含むことができる。

【０６００】

いくつかの態様において、１つ以上のファン（図示せず）は、電力入力１３０８を使用して、周囲空気流入力１３１１を循環させる。例えば、図１７及び図２０を参照して、送風機１７２０は、電力入力１３０８を使用して、空気流入力を、サイロ吸着器１７００のチャンバ１７０２に循環させることができる。

【０６０１】

いくつかの態様において、媒体、フィルタ、又は吸着剤は、固体吸着剤を含み、空気流入力１３１１中の大気二酸化炭素が、固体吸着剤に結合する。例えば、固体吸着剤は、ペレット化又は粉末化形態であることができる。代替として、液体吸着剤はまた、媒体又はフィルタの上に通され得、空気流入力１３１１中の大気二酸化炭素が、媒体又はフィルタに結合する。二酸化炭素で飽和した吸着剤は、「リッチ吸着剤」と称され得る。リッチ吸着剤１３２２は、吸着器システム１３２６を出て、脱着器システム１３２８に入る。二酸化炭素低減空気は、吸着器システム１３２６を、空気流出力１３１４を介して出る。

【０６０２】
空気流入力１３１１が吸着剤（例えば、固体媒体としてのもの及び／又はフィルタでのもの）の上を通った際に、空気流入力１３１１中の大気二酸化炭素は、吸着剤に結合する。空気流出力１３１４は、システムを、二酸化炭素低減空気として出て、大気中に放出される。空気流出力１３１４は、典型的には、二酸化炭素をほとんど含有しないか、又はそれを含有しない。吸着剤は、二酸化炭素で飽和したときに、加熱されて（例えば、７０～１２０℃に加熱されて）、収集のための二酸化炭素を放出することができる。
【０６０３】
いくつかの態様において、粉末化吸着剤材料が使用され得る。例えば、シリカベースの吸着剤粉末、例えば、アミン化合物で官能化された多孔質シリカが可能である。また、いくつかの場合において、金属酸化物構造体（ＭＯＦ）粉末が使用され得る。粉末の粗さ（粒度）の程度は、用途に依存して変動し得る。いくつかの場合において、５０～１，７００μｍ又は５０～３，０００μｍの範囲の平均粒サイズを有する粒子が使用され得る。いくつかの例において、吸着剤粉末は、ペレット化されている。
【０６０４】
いくつかの態様において、例えば、液体吸着剤が使用される場合、そのような液体は、二酸化炭素への高い親和性を有し、非反応性金属（又は他の材料）フィルタの上を循環する。二酸化炭素で飽和した際に、液体は、加熱されて（例えば、８００℃に加熱されて）、二酸化炭素（本明細書に記載されるもの）を放出することができる。次いで、液体は、より多くの二酸化炭素を連続的サイクルにおいて捕捉するために再使用され得る。
【０６０５】
脱着器システム１３２８は、加熱流体１３０４からの熱的エネルギーを使用して、熱を固体又は液体リッチ吸着剤１３２２に適用する。熱は、二酸化炭素とリッチ吸着剤１３２２との間の結合を溶解する。加熱流体戻り１３１３は、脱着器システム１３２８を出て、より多くの熱を、二酸化炭素ＤＡＣシステムの外部のプロセスから収集する。分離された二酸化炭素は、二酸化炭素ＤＡＣシステム１３１５からの二酸化炭素供給流れ１３１２として提供される。熱はまた、水分子とリッチ吸着剤１３２２との間の結合を溶解し、リッチ吸着剤１３２２は、システムを、脱塩水出力１３１６として出る。脱着器システム１３２８を出る吸着剤は、「リーン吸着剤」と称され得、例えば、二酸化炭素を含まず、任意選択で、水分を含まない吸着剤である。リーン吸着剤１３２０（例えば、固体又は液体としてのもの）は、脱着器システム１３２８を出て、吸着器システム１３２６に再循環して戻される。吸着器システム１３２６のフィルタにおけるリーン吸着剤１３２０は、より多くの大気二酸化炭素を周囲空気流入力１３１１から捕捉する。脱塩水出力１３１６は、典型的には、二酸化炭素をほとんど含有しないか、又はそれを含有しない。
【０６０６】
図１４は、統合電力及び二酸化炭素ＤＡＣシステム（「統合システム」）１４００の例示的な実装態様の概略図である。示されるように、統合システム１４００は、ＣＣＳ燃焼排ガス二酸化炭素スクラバ１４２５に取り付けられた天然ガスプラント１４２０を含み、ＣＣＳ燃焼排ガス二酸化炭素スクラバ１４２５は、廃熱１４０２を発生させる。廃熱１４０２は、この例において、熱的熱再使用システム１４１０に供給され、熱的熱再使用システム１４１０はまた、電力入力１４０６を使用する。熱的熱再使用システム１４１０は、加熱流体１４０４を二酸化炭素直接空気捕捉（ＤＡＣ）システム１４１５に提供する。
【０６０７】
天然ガスプラント１４２０は、二酸化炭素を含有する燃焼排ガス及び電力１４２８を発生させ、二酸化炭素を含有する燃焼排ガス及び電力１４２８は、ＣＣＳ燃焼排ガス二酸化炭素スクラバシステム１４２５に送られる。スクラバシステム１４２５は、二酸化炭素を燃焼排ガスから分離する。スクラバシステム１４２５は、廃熱１４０２を二酸化炭素直接空気捕捉（ＤＡＣ）システム１４１５に提供する。二酸化炭素ＤＡＣシステム１４１５はまた、電力入力１４０８及び周囲空気流入力１４１１を受容する。二酸化炭素ＤＡＣシステム１４１５は、二酸化炭素供給流れ１４１２及び二酸化炭素低減空気流出力流れ１４１

４を出力する。
【０６０８】
概して、統合システム１４００は、廃熱１４０２を捕捉し、廃熱１４０２を含む熱的エネルギー及び熱的熱再使用システム１４１０からの圧縮の熱を有する加熱流体１４０４を発生させ、加熱流体１４０４中のそのような熱的エネルギーを使用して、周囲空気流入力１４１１から捕捉された二酸化炭素を分離して、分離された二酸化炭素を二酸化炭素供給流れ１４１２として供給するように運転される。いくつかの態様において、二酸化炭素供給流れ１４１２は、地下層内への注入剤として、炭化水素生成運転中に提供され得る。いくつかの態様において、注入された二酸化炭素は、地下層内に（炭化水素生成運転を支援して、又はそれを支援することなく）隔離され得る。
【０６０９】
この実装態様において、電力１４２６は、炭素負電力と考えられるため、産業プロセス１４０５は、電力網ではなく、天然ガスプラント１４２０によって電力供給される。
【０６１０】
例示的な熱的熱再使用システム１４１０は、ＣＣＳ燃焼排ガスCO_2スクラバ１４２５からの廃熱１４０２及び電力入力１４０６を使用して、加熱流体１４０４を提供する。概して、熱的熱再使用システム１４１０は、１つ以上の蒸気圧縮サイクル（「熱ポンプ」）を含み、１つ以上の蒸気圧縮サイクルは、圧縮の熱の形態での熱的エネルギーを廃熱１４０２に添加し、そのようなエネルギーの合計を流体に伝達して、加熱流体１４０４（例えば、加熱液体）を発生させる。概して、熱的熱再使用システム１４１０内の各熱ポンプは、熱的エネルギーを、熱シンクから熱供給源に、すなわち、自発的な熱伝達の反対方向に伝達するように運転される。熱的熱再使用システム１４１０の１つ以上の熱ポンプは、電力入力１４０６を使用して、エネルギーを熱供給源から熱シンクに伝達する機能を達成する。熱的熱再使用システム１４１０における各熱ポンプは、２つの熱交換器（蒸発器として作用するもの、凝縮器として作用するもの）、膨張デバイス（例えば、弁又は固定オリフィス）、及び圧縮機（例えば、遠心、ねじ、往復、又はスクロールなど）の主要な構成要素を含む。これらの構成要素の各々は、熱ポンプにおける閉ループ冷媒回路内で流体的に結合している。
【０６１１】
二酸化炭素ＤＡＣシステム１４１５は、概して、周囲空気流入力１４１１（ガス二酸化炭素を含むもの）を、１つ以上の媒体（例えば、「フィルタ」）の上に通すか、又はそれらに通すように運転される。いくつかの態様において、１つ以上のファン（図示せず）は、電力入力１４０８を使用して、周囲空気流入力１４１１を循環させる。いくつかの態様において、媒体又はフィルタは、固体吸着剤を含み、空気流入力１４１１中の大気二酸化炭素が、固体吸着剤に結合する。二酸化炭素で飽和した吸着剤は、「リッチ吸着剤」と称され得る。
【０６１２】
固体吸着剤、例えば、本開示に記載される吸着剤の場合、空気流入力１４１１が固体媒体又はフィルタの上を通った際に、入力１４１１中の大気二酸化炭素は、媒体又はフィルタに結合する。媒体又はフィルタは、二酸化炭素で飽和したときに、加熱されて（例えば、１００～１２０℃、６０～１００℃に加熱されて）、収集のための二酸化炭素（本明細書に記載されるもの）を放出することができる。
【０６１３】
加熱流体１４０４からの熱的エネルギーを使用して、熱は、固体吸着剤に適用され、これは、二酸化炭素と吸着剤との間の結合を破壊する。分離された二酸化炭素は、二酸化炭素ＤＡＣシステム１４１５からの二酸化炭素出力流れ１４１２として提供される。ここで二酸化炭素を含まない（すなわち、固体又は液体）「リーン吸着剤」は、再循環して戻されて、より多くの二酸化炭素を周囲空気流入力１４１１から再び捕捉する。空気流出力１４１４は、典型的には、二酸化炭素をほとんど含有しないか、又はそれを含有しない。二酸化炭素ＤＡＣシステム１４１５は、二酸化炭素１４１２及び脱塩水１４１６を出力する

。

【０６１４】

図１４の例示的な実施形態に更に示されるように、統合システム１４００は、電力プラント１４２０（例えば、天然ガス電力プラント１４２０）と、スクラビングシステム１４２５（例えば、ＣＣＳ燃焼排ガスCO_2スクラビングシステム１４２５）と、を含む。この例に示されるように、電力プラント１４２０は、廃熱１４０２（例えば、電力プラント１４２０による電力の発生を介して発生したもの）をＤＡＣシステム１４１５に提供し得る。この例において、電力プラント１４２０はまた、電力１４２２及び１４２８を発生させる。いくつかの態様において、示されるように、電力１４２２は、１つ以上のスイッチ１４３０（１つとしてここで示されるが、より多くが可能である）を通って、電力１４２４をＤＡＣシステム１４１５に提供し、バックアップ電力１４２６を産業プロセス１４０５に提供する。

【０６１５】

この例に示されるように、電力プラント１４２０の電力出力は、通常の運転のために、電力１４２４の合計をＤＡＣシステム１４１５に提供し、電力１４２８をスクラビングシステム１４２５に提供し、必要とされる場合（すなわち、産業プロセス１４０５が、電力網１４１７を失ったか、又はそれを使用することができないときに）、バックアップ電力１４２６を産業プロセス１４０５に提供するようにサイズ設定され得る。したがって、いくつかの態様において、産業プロセス１４０５が、バックアップ電力１４２６を必要とするときに、電力１４２８及び電力１４２４は、依然として、それらのそれぞれのユーザに提供される。代替として、いくつかの態様において、電力プラント１４２０の電力出力は、通常の運転のために、電力１４２４の合計をＤＡＣシステム１４１５に提供し、電力１４２８をスクラビングシステム１４２５に提供し、必要とされる場合（すなわち、産業プロセス１４０５が、電力網１４１７を失ったか、又はそれを使用することができないときに）、バックアップ電力１４２６を産業プロセス１４０５に提供し、電力入力１４０６又は１４０８のうちの一方又は両方を提供するようにサイズ設定され得る。

【０６１６】

代替として、いくつかの態様において、電力プラント１４２０の電力出力は、必要とされる場合（すなわち、産業プロセス１４０５が、電力網１４１７を失ったか、又はそれを使用することができないときに）、バックアップ電力１４２６を産業プロセス１４０５に提供するようにのみサイズ設定され得る。したがって、産業プロセス１４０５がバックアップ電力１４２６を必要としない運転期間中に、電力１４２８及び／又は電力１４２４（及び他の電力入力）は、電力プラント１４２０によって提供され得る。産業プロセス１４０５がバックアップ電力１４２６を必要とする運転期間中に、電力１４２８及び／又は電力１４２４（及び他の電力入力）は、電力プラント１４２０によって提供されなくてもよい。例えば、電力１４２２は、そのような運転期間内に、スイッチ１４３０を介して、バックアップ電力１４２６として送られ得る。

【０６１７】

いくつかの態様において、電力プラント１４２０から産業プロセス１４０５に供給される電力１４２６は、「バックアップ」電力でなくてもよく、代わりに、産業プロセス１４０５のための一次電力供給源であり得る。例えば、いくつかの態様において、電力プラント１４２０は、一次電力１４２６を、産業プロセス１４０５に提供し、いくつかの態様において、統合システム１４００において示される１つ以上の他の構成要素に提供するようにサイズ設定され得る。

【０６１８】

図１４に更に示されるように、いくつかの態様において、スクラバシステム１４２５から発生する廃熱１４０２は、熱的熱再使用プラント１４１０によって使用されて、加熱流体をＤＡＣシステム１４１５に提供することができる。いくつかの実装態様において、次いで、加熱流体１４０４は、加熱流体戻り１４１３を介して熱的熱再使用システム１４１０に戻され、廃熱１４０２は、産業プロセス１４０５に廃熱戻り１４１７を介して戻され

る。

【０６１９】

この例示的な実装態様に示されるように、スクラビングシステム１４２５はまた、排気流体１４３２（例えば、１００％のCO_2を有する燃焼排ガス）を電力プラント１４２０から受容する。例えば、いくつかの態様において、電力プラント１４２０は、天然ガス電力プラントであり得、天然ガス電力プラントにおいて、天然ガスが、燃焼して、電力発生機器を駆動し、電力発生機器は、図１４に示される電力を生成するように運転される。他の態様において、電力プラント１４２０は、天然ガスでなく、他の炭素ベースの燃料を使用し得る。更なる他の態様において、電力プラント１４２０は、非炭素ベースの燃料を使用して、電力（例えば、地熱、太陽光、及び他）を発生させ得る。天然ガス電力プラント１４２０について、具体的にここに示されないが、そのような機器は、例えば、ガスタービンに回転可能に結合した圧縮機を含み得、ガスタービンは、圧縮機を駆動する。ガスタービンは、燃焼生成物流体を燃焼チャンバから受容し、燃焼チャンバは、圧縮天然ガスを圧縮機から受容する。燃焼生成物流体は、ガスタービンを駆動し、次いで、ガスタービンは、発電機に結合しており、発電機を駆動して、電力を生成する。

【０６２０】

そのようなガスタービンからの（燃焼生成物流体よりも低い圧力での）出力は、排気流体１４３２（例えば、燃焼排ガスとしてのもの）である。燃焼生成物流体と排気流体１４３２との間の圧力における差は、ガスタービンを駆動して、電力を発電機から生成する。この例に示されるように、排気流体１４３２は、スクラビングシステム１４２５によって、複数の出力流れに分離される。例えば、１００％のCO_2を有する燃焼排ガス１４３２は、二酸化炭素供給流れ１４１２、及び５％のCO_2を有する燃焼排ガス流れ１４３６に分離される。５％のCO_2を有する燃焼排ガス流れ１４３６は、ＤＡＣシステム１４１５に送られて、残りの二酸化炭素を、天然ガスプラント１４２０の出力空気流１４３６から除去する。これは、天然ガスプラントから発生する得られた電力を炭素負電力にする。例えば、ＤＡＣシステム１４１５と同様に、二酸化炭素供給流れ１４１２及び二酸化炭素低減空気流出力流れ１４１４の出力は、スクラビングシステム１４２５から出力され得る。

【０６２１】

いくつかの態様において、二酸化炭素供給流れ１４１２は、（例えば、CO_2－ＥＯＲ、隔離、及び／又は他のプロセスのために）販売され得る。例えば、二酸化炭素供給流れ１４１２は、収益を排出量取引及び連邦税取引を介してもたらし得る。いくつかの態様において、そのような収益は、ＤＡＣシステム１４１５、電力プラント１４２０、両方、又はシステム１４００の他の構成要素の資本及び／又は運転コストを相殺し得る。

【０６２２】

統合システム１４００は、有利には、通常アイドル状態であり得る電力プラント１４２０を使用して、二酸化炭素流体流れ１４１２中の販売可能な生成物を生成し得、これはまた、環境利点を提供する。追加として、産業プロセス１４０５における停電の事象において、電力プラント１４２０が既に運転されているということは、停電とプロセス１４０５への電力の提供との間の遅延が低減されることを意味する。更に、スクラバ１４２５からの廃熱１４０２からの熱的エネルギー１４０２を使用することによって、ＤＡＣシステム１４１５の運転コストが、有意に低減され得、捕捉された二酸化炭素が、ＤＡＣシステム１４１５の構築に資金を供給し、産業プロセスのバックアップ電力のコストを補助することを助長することを可能にする。加えて、統合システム１４００は、ＤＡＣシステム１４１５が二酸化炭素を空気から引き出した際に、水を周囲湿度から生成し得る。水は、例えば、産業プロセス１４０５において販売又は使用され得る。

【０６２３】

いくつかの実施形態において、ＤＡＣシステムは、CO_2を、周囲空気から、吸着剤材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を使用して吸着するように構成された流動床吸着反応器（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）と、吸着剤材料を流動床吸着反応器から受容し、CO_2を吸着剤材料から脱着するように構成された脱着反

応器と、廃熱を生成する産業プロセス設備であって、廃熱が、脱着反応器に提供されて、吸着剤材料を加熱する、産業プロセス設備と、を備える。

【０６２４】

いくつかの実施形態において、ＤＡＣシステムは、CO_2を、周囲空気から、吸着剤材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を使用して吸着するように構成された流動床反応器又はサイロ吸着器（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を備える。いくつかの実施形態において、システムは、吸着剤材料を流動床反応器又はサイロ吸着器から受容し、CO_2を吸着剤材料から脱着するように構成された脱着システム（例えば、反応器、脱着器、重力送り脱着システム、又は本明細書に記載される他のもの）を更に備える。

【０６２５】

いくつかの実施形態において、ＤＡＣシステムは、CO_{2-}を吸着剤材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）から脱着するように構成された重力送り脱着システム（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を備える。いくつかの実施形態において、システムは、CO_2を、周囲空気から、吸着剤材料を使用して吸着するように構成されており、吸着剤材料を重力送り脱着システムに提供するように構成された吸着システム（例えば、反応器、吸着器、サイロ吸着器、又は本明細書に記載される他のもの）を更に備える。

【０６２６】

本明細書に記載される主題及び運転の実施形態（例えば、本明細書におけるいずれかのシステム、例えば、ＤＡＣシステム、流動床反応器、サイロ吸着器、重力送り脱着システム、並びにそれらの組み合わせ及び部分組み合わせについてのもの）は、部分的に、デジタル電子回路によって、又は本明細書に開示される構造及びそれらの構造等価物を含むコンピュータソフトウェア、ファームウェア、若しくはハードウェアにおいて、又はそれらのうちの１つ以上を組み合わせで実装され得る。

【０６２７】

コンピュータ記憶媒体は、コンピュータ可読記憶デバイス、コンピュータ可読記憶基板、ランダム若しくはシリアルアクセスメモリアレイ若しくはデバイス、又はそれらのうちの１つ以上の組み合わせであってもよく、あるいはそれ内に含まれてもよい。また、コンピュータ記憶媒体は、伝搬信号でないが、コンピュータ記憶媒体は、人工的に発生する伝搬信号において符号化されたコンピュータプログラム命令の送信元又は送信先であることができる。

【０６２８】

本明細書に記載される運転は、データ処理装置によって、１つ以上のコンピュータ可読記憶デバイスにおいて記憶されたデータ、又は他の送信元から受信されたデータにおいて実行される運転として実装され得る。「データ処理装置」という用語は、データを処理するための全ての種類の装置、デバイス、及び機械を包含し、これらは、例として、プログラマブルプロセッサ、コンピュータ、オンチップシステム、又は上記の複数のもの若しくは上記の組み合わせを含む。

【０６２９】

本明細書に記載される実施形態（例えば、本明細書におけるいずれかのシステムについてのもの）における様々なシステムモジュール及び構成要素の分離は、そのような分離を全ての実施形態において必要とすると理解されるべきでなく、記載されるプログラム構成要素及びシステムは、概して、単一のソフトウェア製品において一緒に統合されてもよく、又は複数のソフトウェア製品にパッケージ化されてもよいと理解されるべきである。ある特定の状況においては、マルチタスク及び並列処理が有利である。

【０６３０】

ｉｉ．　流動床反応器

流動床反応器は、固体粒子試薬が流体のように挙動するタイプの化学反応器である。そのような反応器は、典型的には、流体、例えば、ガスを、固体粒子の床を介してポンプ輸

送することを含む。十分に高い流体速度で、これは、運転中でないときの反応器の底部において静止する固体材料が懸濁することを引き起こす。これは、固体材料が流体中に封入されない充填床と対照的に、反応器を流動床にする。流動床は、連続状態で運転され得、これは、流動床を、実質的に無限の入力流体を有する用途に適切なものにする。流動床は、流動化を達成するときの固体材料における体積増加に適応するように、充填床反応器よりも大きい傾向がある。このタイプの反応器における大きい流体速度に起因して、固体材料は、流体中に封入される傾向がある。しばしば、捕捉された固体材料は、後で分離される流体の一部分とともに反応器を出る。

【０６３１】

本開示はまた、二酸化炭素（CO_2）の直接空気捕捉（ＤＡＣ）のための大気CO_2の吸着のための反応器、並びにシステム及びその副生成物のための使用に関する。反応器は、流動床吸着器であり、設計及び運転条件は、大気濃度、例えば、約３５０～５５０ｐｐｍでのCO_2の吸着を容易にする。反応チャンバは、１つ以上の中空区画を含み、粉末化吸着剤材料が、１つ以上の中空区画を通って流れる。各中空区画の流れの方向に垂直な断面は、広い頂部を示し、広い頂部は、狭い基部へテーパー状になる。各中空区画は、対応する空気チャンバと、対応する中空区画の基部におけるチャネルを介して流体連通する。分配プレートが、各中空区画の各狭い基部の下にあり、ファンが、各分配プレートに対して近位に位置する。追加として、ルーバーが、第１の方向に沿って、チャンバの１つの端部から反対側の端部へ延び、チャンバの側壁の一部を形成する。ルーバーは、周囲空気を、狭い基部の隣に位置する空気チャンバ内に引き込む。

【０６３２】

他の利点のうち、本明細書に記載される反応器は、CO_2を、周囲空気から、比較的低い濃度、例えば、４００ｐｐｍ又は３５０～５５０ｐｐｍの大気濃度で有効に除去することができる。反応器の規模は、大きい空気流量に適応することができ、これは、CO_2の大気レベルを減少させる問題に適切である。反応器の効率の結果として、反応器における空気対粉末化吸着剤材料の質量の体積の比は、他の流動床反応器と比較して比較的高くあることができ、例えば、約５０Ｌ／ｇであることができる。追加として、ある特定の実施形態において、粉末化吸着剤材料は、吸着及び脱着プロセスに供された後に、反応チャンバ内に再循環して戻され得る。これらの因子の両方は、反応器の運転に関連する初期投資及び維持コストを低減することができる。

【０６３３】

反応器は、その設計に起因して、高いレベルのエネルギー効率に達することができる。頂部においてより大きく下部においてより狭い反応器の形状は、空気の循環（例えば、反応器の断面における垂直循環）及び粉末化吸着剤材料の循環を促進し、粉末の封入を保持するための、反応器の頂部と底部との間の大きい圧力差の必要性を減らす。分配プレートの設計はまた、比較的少ない入力電力を必要としつつ、循環のレベルを増加させることができる。更に、いくつかの実施形態において、吸着反応は、反応を容易にするための入力加熱をほとんど有することなく又はそれを有することなく進行することができる。

【０６３４】

上記のように、吸着器システム１３１６は、空気をリーン吸着剤と反応させるための流動床反応器を含むことができる。図１５Ａ～１５Ｄを参照して、ＤＡＣシステム１３１５に好適な例示的な流動床反応器は、吸着剤流の方向に２つのチャンバ壁１５１２と１５１４との間で延びる反応チャンバ１５１０を含む。参照のためのこれらの図で提供されるデカルト座標系を参照して、この方向は、ｙ方向である。反応チャンバ１５１０は、中空区画から構成されており、中空区画は、チャンバ壁１５１２とチャンバ壁１５１４との間で延び、実質的に均一な断面を、その長さに沿って有する。垂直に、すなわち、ｚ方向に、反応チャンバ１５１０は、基部部分１５１６から天井１５１８へ延びる。チャンバの幅（すなわち、ｘ方向での寸法）は、基部部分１５１６において最も狭く、天井１５１８まで広がる。

【０６３５】

チャンバ壁１５１２は、反応チャンバ１５１０内への粉末化又はペレット化吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する吸着剤入口１５２２を含む。吸着剤ディスペンサ１５２０は、吸着剤入口１５２２に接続されており、吸着剤材料を、チャンバ１５１０に吸着剤入口１５２２を介して送達する。反対側の壁１５１４において、吸着剤出口ポート１５２４が、反応チャンバ１５１０からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する。

【０６３６】

反応器１５００はまた、複数の空気チャンバ１５３０を含み、複数の空気チャンバ１５３０は各々、反応チャンバ１５１０の中空区画と、反応チャンバ１５１０の基部部分１５１６におけるチャネル１５３２を介して流体連通する。複数の送風機１５３４が各々、チャンバ１５３０のうちの対応する１つに関連し、複数の送風機１５３４は、周囲空気を受容し、反応器の運転中に、区画１５１０が吸着剤で部分的に充填されている間に、空気を、圧力で、対応する空気チャンバ１５３０内に送風するように配置されている。

【０６３７】

反応器１５００の外側側壁は、環境から反応器１５００内への周囲空気の通過を可能にする入口を含む。空気は、ルーバー１５３６を介して、送風機１５３４によって発生する低圧によって引き込まれ、送風機１５３４は、空気をチャンバ１５３０内に強制的に送る。

【０６３８】

反応器１５００は、天井１５１８における複数の排気ポート１５４０を含む。排気ポート１５４０は、空気が反応器１５１０の運転中に吸着剤と混合された後に空気を反応チャンバ１５１０から除去するために提供されている。排気ポート１５４０は、排気マニホールド１５４２に接続されており、排気マニホールド１５４２は、空気を反応チャンバから除去するための導管を提供する。排気マニホールド１５４２は、反応器の垂直長さにわたる空気の流れを統一するための漸増管サイズで設計されている。

【０６３９】

図１５Ｄ～１５Ｅを具体的に参照して、図１５Ｄ～１５Ｅは、反応器１５００を、ｘ－ｚ平面における断面において示し、反応チャンバ１５１０は、変動する幅（ｘ方向）をその深さにわたって有する。具体的には、反応チャンバは、基部部分１５１６における第１のテーパー部分１５１０Ａを有し、第１のテーパー部分１５１０Ａにおいて、反応チャンバの幅は、チャンバが空気をチャンバ１５３０から受容する空気入口１５３８における最小幅から第１の一定幅部分１５１０Ｂに増加する。部分１５１０Ｂは、ｚ方向での高さに延び、反応チャンバにおける一定幅のトレンチを提供する。反応チャンバ１５１０の主体積は、第２のテーパー部分１５１０Ｃ、及び反応チャンバの最も広いセクションである頂部区画１５１０Ｄから構成されている。各部分の幅及び深さ（１５１０Ａ～１５１０Ｄ）、並びに部分１５１０Ａ及び１５１０Ｃがテーパー状になる角度を含む、反応チャンバの寸法は、他のパラメータのうち、空気入口１５３８における空気圧力及び吸着剤粉末の性質に基づいて選択され、これにより、反応チャンバにおける空気圧力は、粉末を流動化し、空気と吸着剤との間の反応を容易にするのに十分である。空気圧力は、空気入口１５３８において最も高くなり、反応チャンバの幅が増加するにつれて低下する。

【０６４０】

圧力における差は、粉末化吸着剤の流動化を容易にし、粉末化吸着剤及び周囲空気の循環を促進すると考えられる。反応チャンバ１５１０の底部から頂部への圧力低下は、（例えば、チャンバの形状、空気圧力、及び吸着剤の性質によって）管理され得、これにより、吸着剤は、流動床において下に排気ポート１５４０から離れてあり、吸着剤をチャンバから排気ポート１５４０を介して不意にパージすることを低減する。

【０６４１】

分配プレート１５４２は、チャンバ１５３０から反応チャンバ１５１０内への空気入口１５３８の直下に位置する。分配プレート１５４２は、チャンバ１５３０の上に存在し、チャンバ１５３０は、対応する送風機に対して近位の空気プレナムとして作用する。分配プレート１５４２は、２つの分配チャネル１５３２を形成し、２つの分配チャネル１５３

２は、チャンバ１５３０から反応チャンバ１５１０内への空気の流れを制御する。分配プレートはまた、吸着剤粉末が、反応チャンバ１５１０から空気チャンバ１５３０内に漏れ、送風機１５３４を損傷することを防止する止め具として機能する。

【０６４２】

分配プレート１５４２は、W形状を断面において有し、中央隆起を有する湾曲した金属シートによって形成されており、中央隆起は、入口１５３８内に延び、入口を２つのチャネルに分割し、２つのチャネルは、空気をチャンバ１５３０の向かい合う側から引き込む。

【０６４３】

W形状は、同等の量の粉末循環を達成しつつ、反応チャンバの頂部と底部との間のより小さい圧力低下を可能にすると考えられる。更に、より小さい圧力低下は、粉末化吸着剤材料及び周囲空気流量を緩徐にすることができ、これは、封入のレベルを増加させることができ、それによって、吸着反応を容易にすると考えられる。

【０６４４】

概して、分配プレートの形状は、粉末化吸着剤材料と周囲空気との混合物の循環の程度、及び吸着反応の効率に影響し得る。したがって、分配プレートについての他の形状が可能である。例えば、平坦なプレートが使用され得る。いくつかの場合において、反転V形状プレートが使用され、例えば、Vの頂点が、空気入口１５３８の中心においてある。

【０６４５】

いくつかの非限定的な実装態様において、W形状の分配プレートは、単独で、空気と吸着剤との間の十分な混合を提供し得る。例えば、送風機１５３４が、空気を、空気チャンバ１５３０を介して送風した際に、空気は、最も少ない抵抗の経路を見出し、それを介して運ばれる。いくつかの実装態様において、W形状分配プレートによって決定される最も少ない抵抗の経路は、空気と吸着剤との間の制限された接触を引き起こす。したがって、反応チャンバ１５１０Ａと反応チャンバ１５１０Ｂとの間に位置する二次分配プレート１５４４は、一次分配プレート（例えば、W形状の分配プレート）を補完することができる。例えば、図１５Ｅにおいて、二次分配プレート１５４４は、反応チャンバ１５１０Ａ及び１５１０Ｂを互いから分割する。二次分配プレート１５４４が存在するときに、図１５Ｅにおける断面図から、分配プレート１５４４は、平坦な長方形として示される。分配プレート１５４４は、いずれかの有用な寸法、例えば、８０ｍｍの幅×１８００ｍｍの長さを有することができる。反応チャンバ１５１０Ａ及び１５１０Ｂの断面寸法に依存して、二次分配プレートは、それらの間に置かれるように適切にサイズ設定され得る。いくつかの非限定的な実施形態において、一次分配プレートは、単独で使用されてもよく、又は二次分配プレートとの組み合わせで使用されてもよい。他の非実施形態において、二次分配プレートは、単独で使用されてもよく、又は一次分配プレートとの組み合わせで使用されてもよい。

【０６４６】

二次分配プレートは、プレート（例えば、有孔ステンレス鋼シート金属プレート）、若しくはメッシュ（例えば、メッシュステンレス鋼ワイヤクロス）、又はメッシュがプレートの頂部上にある、これらの２つのある組み合わせを含むことができる。いくつかの実装態様において、有孔プレートは、千鳥状穴（例えば、０．０６５インチ以下の直径）を有し、メッシュは、開口（例えば、ミクロンサイズの開口、例えば、７００ミクロン以下のサイズ）を有する。有孔プレートが、３０％開口し、メッシュが、７０％開口するときに、有孔プレートのパラメータは、反応器の頂部と底部との間の空気圧力低下を決定することができる。いくつかの実装態様において、メッシュは、吸着剤粉末が空気入口１５３８及び空気チャンバ１５３０内に漏れることを防止するように作用する。二次分配プレート１５４４は、空気チャンバ１５３０における圧力ゾーンを作製するために使用され得、圧力ゾーンは、反応器の長さにわたる均一な空気流を促進する。いくつかの実施形態において、一次及び二次分配プレートの組み合わせは、吸着剤と空気との間の均一な混合を可能にすることができる。

【０６４７】
概して、反応チャンバの長さ及びその断面形状は、吸着剤を十分な量の空気に曝露しつつ、吸着剤を、可能な限り迅速に、チャンバを介して移動させ、チャンバ外に移動させ、これにより、吸着剤が、反応チャンバ１５１０を吸着剤出口ポート１５２４を介して出るときに、CO_2で完全に又はほぼ完全に飽和しているように設計されている。
【０６４８】
反応器の構成要素及びＤＡＣシステムにおける他の要素の様々な寸法は、システムが、CO_2を大気から除去するという目的を満たすことを可能にすべきである。いくつかの例において、反応チャンバは、３メートル～２０メートルの範囲の長さ（ｙ寸法）、及び１メートル～４メートルの範囲の高さ（ｚ寸法）を有する。最大幅（すなわち、部分１５１０Ｄにおけるｘ次元）は、５０ｃｍ～２メートルの範囲であることができ、最小幅（すなわち、空気入口１５３８におけるｘ寸法）は、１ｃｍ～２０ｃｍの範囲であることができる。
【０６４９】
周囲空気に向けられる効率的なＤＡＣシステムを作製することは、例えば、燃焼排ガスと比較して比較的低い、周囲空気中のCO_2の濃度に起因して、困難であり得る。一手法は、高い空気流量を提供することであり、高い空気流量は、そのような反応器設計の典型的なものよりも吸着剤の量に対して大きい反応チャンバの使用をもたらし得る。したがって、反応チャンバ及び空気チャンバのサイズは、ガス供給源中のCO_2を、比較的低い濃度、例えば、約４００ｐｐｍ又は約３５０～５５０ｐｐｍで効率的に吸着するために必要な大きい空気流量に適応するのに十分に大きいべきである。
【０６５０】
粉末化吸着剤を流動化するのに十分な圧力を提供することに加えて、反応チャンバ１５１０を通る空気流量は、粉末化吸着剤材料が効率的に使用されるように適切であるべきである。例えば、粉末化吸着剤材料が反応チャンバを介して移行するのが迅速すぎる場合、粉末化吸着剤材料は、CO_2でほぼ飽和するか又は完全に飽和する前にチャンバを出ることがある。しかしながら、吸着剤流量が低すぎる場合、及び／又は反応チャンバが長すぎる場合、粉末化吸着剤材料は、反応チャンバを出る十分前に完全に飽和し得、もはや吸着反応に関与していないときに、反応チャンバにおいて残り得、これは、不必要なエネルギーを使用する。両方の事例において、吸着反応器の効率は、理想的でない。いくつかの実施形態において、粉末化吸着剤材料は、反応器の長さを、CO_2で完全に飽和する時間頃までに移行する。
【０６５１】
概して、吸着剤に依存して、空気の体積対粉末化吸着剤材料の質量の比は、１０リットル／グラム以上（例えば、２０リットル／グラム以上、３０リットル／グラム以上、４０リットル／グラム以上、５０リットル／グラム以上、６０リットル／グラム以上、８０リットル／グラム以上、１００リットル／グラム以上、例えば、２００リットル／グラム以下）であることができる。
【０６５２】
図１６を参照して、概して、流動床反応器１５００を使用するシステム１６００は、反応器の様々な機能を監視及び制御するための電子制御モジュール１６０１を含む。例えば、電子制御モジュール１６０１（例えば、コントローラによるもの）は、反応器の様々な運転条件を測定する１つ以上のセンサと通信することができ、運転条件は、例として、反応チャンバに入る吸着剤粉末の流量、反応チャンバから出る吸着剤粉末の流量、反応器における１つ以上の点における空気圧力、反応器から排気される空気圧力を含む。電子制御モジュール１６０１は、反応器を通る吸着剤粉末の流れを、例えば、入力及び／若しくは出力流量を制御することによって調節することができ、かつ／又は反応器を通る空気圧力を、例えば、送風機１５３４の力を制御することによって調節することができる。
【０６５３】
いくつかの例において、システム１６００は、環境条件、例えば、温度、空気圧力、湿

度、及び／又は反応器を囲む周囲空気の化学組成を監視する１つ以上のセンサを含むことができ、環境条件は全て、粉末化吸着剤材料によるCO_2取り込みの効率に影響し得る。制御モジュール１６０１は、反応器の運転を、そのような監視される環境パラメータのうちの１つ以上についての変化に応答して調節することができる。

【０６５４】

更に、図１６に示されるように、反応器１５００の頂部における排気ポート１５４０は、反応チャンバ１５１０から排気された空気を、サイクロン分離器１６１０に、排気マニホールド１５４２を含む輸送管を介して送る。サイクロン分離器１６１０は、いずれもの封入された吸着剤（例えば、２５ミクロン未満）を、反応チャンバ１５１０から排気された空気から除去する。代替として又は追加として、吸着剤粉末を排気空気から濾過するのに好適な他のデバイスが、排気された空気が周囲大気に排気される前に粉末を実質的に含まないことを確実にするために使用され得る。

【０６５５】

図１５Ａ～１５Ｅは、流動床反応器１５００の具体的な例を示すが、本開示は、そのように限定されず、様々な変形形態が可能である。例えば、ディスペンサ１５２０は、反応チャンバ１５１０の底部に取り付けられているが、いずれかの高さにおいて、反応器の外部に沿って取り付けられ得る。更に、いくつかの実装態様において、粉末化吸着剤材料は、異なる搬送システムを介して送達され得る。例えば、ある特定の例において、ディスペンサは、再循環する吸着剤をシステムの脱着器から送達する送り装置であることができる。概して、いずれかの好適な粉末搬送機構が、吸着剤を反応チャンバに送達するために使用され得る。例えば、ディスペンサ１５２０は、反応器１５００に、ツインウォーム歯車で取り付けられ得る。

【０６５６】

ｉｉｉ．　炭素捕捉のためのサイロ吸着器

本開示はまた、大気二酸化炭素（CO_2）を吸着するための重力送りシステムに関する。例示的なシステムは、サイロ又はタワー構造体を含む。システムは、１つ以上のパネルによって画定されたチャンバを含む。各パネルは、垂直平面において延び、一対の垂直梁の間に吊されている。各パネルは、多孔質内側シート、多孔質外側シート、及び内側シートと外側シートとの間の空洞を含む。各空洞は、パネルの頂部からパネルの底部へ延びる。運転中に、吸着剤材料は、パネルの空洞を下方に通って流れ、二酸化炭素を、パネルを通って流れる空気から吸着する。

【０６５７】

梁は、例えば、構造体を支持するアルミニウム梁であることができる。梁は、内側シート及び外側シートの側縁部に取り付けるための取り付け機構、例えば、ケダーレールを含むことができる。内側シート及び外側シートは各々、梁の取り付け機構内に嵌合されるように構成された取り付け構成要素、例えば、ケダー端部を含むことができる。

【０６５８】

内側シート及び外側シートは各々、多孔質又は透過性布地材料から形成され得る。いくつかの例において、内側シートと外側シートとの間の空洞は、複数のチャネルに分割されている。各チャネルは、垂直に、パネルの頂部からパネルの底部へ延びることができる。チャネルは、内側シート及び外側シートをパネルの側縁部間の水平な間隔で接続する布地リブによって分離され得る。いくつかの例において、各チャネルは、水平平面におけるおよそ正方形の断面を有する。

【０６５９】

入口は、パネルの頂部における空洞への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する。出口は、パネルの空洞の底部からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する。吸着剤材料は、粉末化又はペレット化形態を有することができる。いくつかの例において、吸着剤材料は、シリカベースのペレットを含む。

【０６６０】

運転中に、吸着剤材料は、空洞に、パネルの頂部における入口を介して入る。吸着剤材

料は、空洞を重力に起因して下方方向に通る。吸着剤材料は、パネルの底部端部における空洞から出て、出口を通って放出チャネルに入る。いくつかの例において、メータが、出口において位置決めされており、放出チャネルへの吸着剤材料の流量を制御する。例示的な実施形態において、ペレットが空洞の頂部に入り、空洞の底部を出る持続期間は、およそ１時間である。

【０６６１】

１つ以上の送風機が、空気をチャンバ内に向けるように配置されている。いくつかの例において、送風機は、チャンバの底部において又はその近くに位置決めされており、送風機は、空気を、軸方向に、例えば、垂直に上方に、チャンバ内に向ける。いくつかの例において、送風機は、チャンバの垂直中心の近くに、又はチャンバの頂部の近くに位置決めされている。いくつかの例において、１つ以上の送風機は、空気を、水平にパネルのうちの１つ以上に向かって向ける。運転中に、１つ以上の送風機は、空気がパネルを通ることを引き起こす。パネルの空洞内の吸着剤材料は、空気からの二酸化炭素の濾過機能、捕捉、又は除去を実行する。吸着剤材料は、後に、脱着プロセスに供されて、二酸化炭素を吸着剤材料から除去することができる。次いで、吸着剤材料は、チャンバの頂部に輸送されて戻され得、再使用され得る。

【０６６２】

概して、本明細書に記載される主題の革新的な態様は、構造体であって、複数のパネルによって画定されたチャンバであって、各パネルが、第１の方向に構造体の基部から延びる一対の梁間に吊されており、各パネルの高さが、第１の方向にパネルの底部からパネルの頂部へ延び、各パネルが、多孔質内側シート、多孔質外側シート、及びパネルの頂部からパネルの底部へ延びる、内側シートと外側シートとの間の空洞を含む、チャンバと、複数のパネルの頂部における空洞への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する入口と、複数のパネルの空洞の底部からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する出口と、流体をチャンバ内に向けるように配置された送風機と、を含む、構造体において具現化され得る。

【０６６３】

これらの及び他の実施形態は、以下の特徴を、単独で又はいずれかの組み合わせで含むことができる。いくつかの実装態様において、パネルの空洞内の吸着剤材料は、垂直落下移動床吸着器を形成する。

【０６６４】

いくつかの実装態様において、内側シートと外側シートとの間の空洞は、複数のチャネルに分割されており、複数のチャネルは、内側シート及び外側シートをパネルの側縁部間の間隔で接続する布地リブによって分離されている。

【０６６５】

いくつかの実装態様において、複数のチャネルの各チャネルは、第１の方向に垂直な平面における実質的に正方形の断面を有する。

【０６６６】

いくつかの実装態様において空洞は、内側シートと外側シートとの間の厚さを有し、厚さは、２０センチメートル以下である。

【０６６７】

いくつかの実装態様において、チャンバは、第１の方向に延びる円筒軸を有する、実質的に円筒の形状を有する。いくつかの実装態様において、チャンバは、４つの壁を有する、実質的に長方角柱の形状を有する。いくつかの実装態様において、４つの壁のうちの少なくとも１つの壁は、複数のパネルのうちのパネルを含む。

【０６６８】

いくつかの実装態様において、構造体は、空洞から出口への吸着剤材料の流れを制御するように構成された計量デバイスを含む。

【０６６９】

いくつかの実装態様において、内側シート及び外側シートは、布地材料を含む。

【０６７０】
いくつかの実装態様において、吸着剤材料は、ペレット化形態を有する。いくつかの実装態様において、吸着剤材料は、二酸化炭素を流体から吸着するように構成されている。
【０６７１】
いくつかの実装態様において、送風機は、チャンバにおいて位置決めされている。いくつかの実装態様において、送風機は、第１の方向にチャンバの下３分の１の部分において位置決めされており、下３分の１の部分は、構造体の基部に最も近い部分である。
【０６７２】
いくつかの実装態様において、送風機は、第１の方向にチャンバの中央の３分の１の部分において位置決めされている。いくつかの実装態様において、送風機は、流体を第１の方向に向けるように構成されている。
【０６７３】
いくつかの実装態様において、流体は、ガスを含む。いくつかの実装態様において、流体は、空気を含む。
【０６７４】
概して、本明細書に記載される主題の革新的な態様は、方法であって、吸着剤材料を構造体の入口において送ることであって、構造体が、複数のパネルによって画定されたチャンバを含み、各パネルが、一対の梁間に吊されており、各パネルが、多孔質内側シート、多孔質外側シート、及びパネルの頂部からパネルの底部へ延びる、内側シートと外側シートとの間の空洞を含む、送ることを含む、方法において具現化され得る。入口は、複数のパネルの頂部における空洞への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する。方法は、吸着剤材料を構造体の出口から抽出することを含む。出口は、複数のパネルの空洞の底部からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する。吸着剤材料を出口から抽出することは、空洞内の吸着剤材料が重力に起因して落下することを引き起こす。方法は、複数のパネルを通る流体を、内側シートから外側シートに向かう方向に向けることを含む。
【０６７５】
これらの及び他の実施形態は、以下の特徴を、単独で又はいずれかの組み合わせで含むことができる。いくつかの実装態様において、方法は、吸着剤材料を出口から抽出する速度を制御して、空洞を重力に起因して通る吸着剤材料の体積流量を制御することを含む。
【０６７６】
いくつかの実装態様において、方法は、吸着剤材料を構造体の入口において送る速度を、吸着剤材料を出口から抽出する速度に基づいて制御することを含む。
【０６７７】
いくつかの実装態様において、方法は、吸着剤材料を出口から抽出する速度を制御して、流体への吸着剤材料の曝露時間を制御することを含む。
【０６７８】
いくつかの実装態様において、方法は、流体への吸着剤材料の曝露時間を、３０分以上であるように制御することを含む。いくつかの実装態様において、方法は、流体への吸着剤材料の曝露時間を、９０分以下であるように制御することを含む。
【０６７９】
概して、本明細書に記載される主題の革新的な態様は、構造体であって、第１の方向に構造体の基部から構造体の頂部に向かって延びる第１の梁と、第１の梁から離隔しており、第１の梁に平行に延びる第２の梁と、第１の縁部において第１の梁に結合しており、第２の縁部において第２の梁に結合しているパネルであって、パネルの幅が、第１の縁部から第２の縁部へ、第１の方向に直交する方向に延び、パネルの高さが、第１の方向にパネルの底部からパネルの頂部へ延び、パネルが、多孔質内側シート、多孔質外側シート、及びパネルの頂部からパネルの底部へ延びる、内側シートと外側シートとの間の空洞を含む、パネルと、パネルの頂部における空洞への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する入口と、空洞の底部からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する出口と、パネルを通る流体を、内側シートから外側シートに向かう方向に向けるように配置された送風機と

、を含む、構造体において具現化され得る。

【０６８０】

図１７は、例示的なサイロ吸着器１７００の断面図である。サイロ吸着器１７００は、パネルによって画定されたチャンバ１７０２を含む。チャンバ１７０２は、およそ円筒の形状を有する。チャンバ１７０２の円筒軸は、重力の方向、例えば、ｚ方向に対して垂直方向に延びる。

【０６８１】

各パネルは、多孔質内側シート、多孔質外側シート、及び内側シートと外側シートとの間の空洞を含む。空洞は、パネルの頂部からパネルの底部へ、垂直方向、例えば、ｚ方向に延びる。パネルの内側シートは、内側スクリーン１７０８を形成する。パネルの外側シートは、外側スクリーン１７１２を形成する。

【０６８２】

吸着剤入口１７０４は、パネルの頂部における空洞への吸着剤材料１７１０の送達のためのアクセスを提供する。吸着剤出口１７１４は、パネルの空洞の底部からの吸着剤材料１７１０の除去のための放出を提供する。吸着剤材料１７１０は、粉末化又はペレット化形態を有することができる。いくつかの例において、吸着剤材料１７１０は、シリカベースのペレットを含む。いくつかの実施形態において、吸着剤材料１７１０は、官能化された材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）を含む。

【０６８３】

運転中に、吸着剤材料１７１０は、空洞に、入口１７０４を介して入る。吸着剤材料１７１０は、チャンバ１７０２の頂部１７２６の上を通り、空洞内に入る。吸着剤材料１７１０は、空洞を重力に起因して下方方向に通って流れる。いくつかの例において、空洞を通って流れる吸着剤材料流は、例えば、パネルを振動させるように構成された振動デバイスによって、又は吸着剤材料１７１０を空洞を介して空気作用で搬送する圧縮された空気によって支援される。

【０６８４】

いくつかの例において、パネルの空洞内の吸着剤材料１７１０は、重力送り充填床を形成する。したがって、パネルの空洞内の吸着剤材料は、垂直落下移動床吸収体を形成することができる。いくつかの例において、吸着剤材料１７１０は、空洞に、空洞が、依然として、吸着剤材料１７１０で満たされているか、又はほぼ満たされているような速度で導入される。例えば、吸着剤材料は、空洞の完全な高さを占有することができる。

【０６８５】

パネルの空洞内の吸着剤材料１７１０は、フィルタを形成する。流体、例えば、空気１７０５は、フィルタを通って、例えば、半径方向に、内側スクリーン１７０８から外側スクリーン１７１２に向かって流れることができる。気象シールド１７２５は、フィルタを、気象要素、例えば、雨から保護する。流体がフィルタを通って流れる際に、吸着剤材料１７１０は、二酸化炭素を流体から吸着することによって、二酸化炭素を流体から除去する。

【０６８６】

チャンバ１７０２は、空気流のための中空空間である。１つ以上の送風機、例えば、ファンが、空気をチャンバ１７０２内に向けるように配置され得る。図１７の例において、送風機１７２０は、チャンバ１７０２の底部において又はその近くに位置決めされており、送風機は、空気を、軸方向に、例えば、垂直に上方に、チャンバ内に向ける。例えば、送風機１７２０は、ｚ方向に測定された場合、チャンバの下３分の１において位置決めされ得る。いくつかの例において、送風機１７２０は、ｚ方向に測定された場合、チャンバの中央の３分の１に位置決めされ得る。いくつかの例において、送風機１７２０は、チャンバの上３分の１に位置決めされ得る。送風機１７２０は、送風機１７２０の回転を駆動するためのモータ１７２２を含む。１つ以上の送風機入口１７２４が、空気を送風機に案内する。

【０６８７】

運転中に、送風機１７２０は、空気をチャンバ１７０２内に押し込み、空気をサイロ吸着器のパネルに強制的に通す。パネルの空洞内の吸着剤材料１７１０は、空気からの二酸化炭素の濾過機能、除去を実行する。

【０６８８】

いくつかの例において、吸着剤材料１７１０は、入口１７０４に連続的又はほぼ連続的に提供される。例えば、搬送システムは、入口１７０４への吸着剤材料１７１０の一貫した送りを提供し得る。いくつかの例において、吸着剤材料１７１０は、吸着剤入口１７０４にバッチにおいて提供される。いくつかの例において、吸着剤材料１７１０は、入口１７０４に、吸着剤出口１７１４を通る吸着剤材料１１０の放出の速度におよそ一致する体積流量で提供される。

【０６８９】

吸着剤材料１７１０は、パネルの底部端部における空洞から出て、出口１７１４を通って放出チャネル１７１６に入る。いくつかの例において、メータ１７０６が、出口１７１４において位置決めされており、放出チャネル１７１６への吸着剤材料の流量を制御する。いくつかの例において、ローダ１７１８が、空洞を出る吸着剤材料を収集し、吸着剤材料を出口１７１４に送り込む。

【０６９０】

例示的な実施形態において、ペレット、顆粒、又は吸着剤材料１７１０が空洞の頂部に入り、空洞の底部を出る持続期間は、およそ１時間（例えば、２時間以下、９０分以下、３０分以上）である。メータ１７０６は、吸着剤材料１７１０の放出の速度を制御して、空洞を通る吸着剤材料の体積流量を制御することができ、空気への吸着剤材料の曝露時間を制御することができる。

【０６９１】

いくつかの例において、吸着剤材料１７１０は、出口１７１４を介して連続的又はほぼ連続的に出る。いくつかの例において、吸着剤材料１７１０は、出口を介してバッチにおいて出る。例えば、メータ１７０６は、ある量の吸着剤材料１７１０がローダ１７１８に流れ、その後、ローダ１７１８への吸着剤材料１７１０の流れを、例えば、弁を閉じることによって停止し、これにより、吸着剤材料の第１のバッチが、ローダ１７１８において収集されることを可能にすることができる。次いで、ローダ１７１８における吸着剤材料１７１０の第１のバッチは、出口１７１４を介して放出され得る。次いで、メータ１７０６は、別の量の吸着剤材料１７１０がローダ１７１８に流れ、これにより、吸着剤材料の第２のバッチが、ローダ１７１８において収集されることを可能にすることができる。

【０６９２】

いくつかの例において、出口１７１４を介して出た後に、吸着剤材料１７１０は、後に、脱着プロセスに供されて、二酸化炭素を吸着剤材料から除去することができる。次いで、吸着剤材料１７１０は、チャンバ１７０２の頂部に輸送、例えば、搬送されて戻され得、チャンバ１７０２内に入口１７０４を介して提供され得る。

【０６９３】

図１８は、例示的なサイロ吸着器１７００の側面図である。サイロ吸着器１７００は、パネル１８０２によって画定されたチャンバを含む。各パネル１８０２は、垂直平面において、例えば、ｚ方向平行又はほぼ平行な平面において延びる。各パネル１８０２は、垂直方向に構造体の基部１８０６から延びる一対の梁１８１０間に吊されている。各パネルの高さ１８０８は、垂直方向にパネルの底部１８１２からパネルの頂部１８１４へ延びる。

【０６９４】

いくつかの例において、パネル１８０２は、梁１８１０から取り外し可能である。例えば、各パネル１８０２は、吊された梁１８１０から着脱可能である。したがって、各パネル１８０２は、修理又は交換のために取り外され得る。また、追加のパネル１８０２が、サイロ吸着器１７００に付加されて、空気と接触する吸着剤材料１７１０の表面積を増加させることができ、したがって、CO_2取り込みを増加させることができる。

【０６９５】
図１９Ａ～１９Ｂは、サイロ吸着器の例示的なパネル１８０２の上面図を示す。図１９Ａを参照して、パネル１８０２は、内側シート１９０２及び外側シート１９０４を含む。パネル１８０２は、内側シート１９０２と外側シート１９０４との間の空洞１９０５を含む。パネル１８０２は、２０センチメートル以下（例えば、１８０ｍｍ以下、１５０ｍｍ以下、１２０ｍｍ以下）の厚さ１９１１を有することができる。
【０６９６】
内側シート１９０２及び外側シート１９０４は各々、多孔質又は透過性布地材料から形成され得る。例えば、布地材料は、流体、例えば、空気に透過性であることができる。内側シート１９０２、外側シート１９０４、及び内側シート１９０２と外側シート１９０４との間を流れる吸着剤材料を含むパネル１８０２は、透過性フィルタパネルを形成する。いくつかの例において、内側シート１９０２、外側シート１９０４、又は両方は、金属、プラスチック、メッシュ、又は複合材料から形成され得る。
【０６９７】
いくつかの例において、内側シートと外側シートとの間の空洞は、複数のチャネル、例えば、チャネル１９０７ａ、１９０７ｂに分割されている。各チャネルは、垂直方向にパネルの底部１８１２からパネルの頂部１８１４へ延びることができる。チャネル１９０７ａ、１９０７ｂは、布地ドロップステッチ又はリブ１９０６によって分離され得る。リブの数は、チャネルを通る吸着剤材料流を制御するように選択され得る。例えば、より多くの数のリブは、チャネルのサイズを低減し、チャネルを通る吸着剤材料の流量を低減することができる。より少ない数のリブは、チャネルのサイズを増加させ、チャネルを通る吸着剤材料の流量を増加させることができる。
【０６９８】
布地リブ１９０６は、内側シート１９０２と外側シート１９０４とを、水平間隔で、例えば、ｘ方向に、パネル１８０２の側縁部１９０３ａと側縁部１９０３ｂとの間で接続することができる。いくつかの例において、各チャネルは、水平平面、例えば、ｘ－ｙ平面におけるおよそ正方形の断面を有する。いくつかの例において、パネル１８０２の側縁部１９０３ａ、１９０３ｂは、不透過性布地材料１９１２、又は不透過性金属、プラスチック、若しくは複合材料から形成されている。
【０６９９】
いくつかの例において、内側シート１９０２及び外側シート１９０４は各々、取り付け構成要素、例えば、ケダー端部１９２０を含む。図１９Ｂを参照して、ケダー端部１８２０は、梁、例えば、梁１８１０ａ、１８１０ｂのケダーレール内に嵌合されるように構成されている。パネル１８０２はまた、パネル１８０２が梁１８１０ａと梁１８１０ｂとの間に吊されているときの張力を調整するための張力ループ１９０８を含むことができる。張力は、水平方向、例えば、ｘ方向に適用され得る。パネル１８０２の張力は、チャネル１９０７ａ、１９０７ｂを通る吸着剤材料１７１０の流量を制御するように調整され得る。例えば、より少ない張力は、パネル１８０２の厚さ１９１１を増加させることができ、チャネル１９０７ａ、１９０７ｂを通る吸着剤材料１７１０の流量を増加させることができる。より大きい張力は、パネル１８０２の厚さ１９１１を減少させることができ、チャネル１９０７ａ、１９０７ｂを通る吸着剤材料１７１０の流量を減少させることができる。
【０７００】
梁１８１０ａ、１８１０ｂは、例えば、構造体を支持するアルミニウム梁であることができる。梁１８１０は、パネル１８０２の側縁部１９０３ａ、１９０３ｂに取り付けるための取り付け機構、例えば、ケダーレール１９１４を含むことができる。例えば、内側シート１９０２及び外側シート１９０４の取り付け構成要素は、梁１８１０ａ、１８１０ｂの取り付け機構内及び外に摺動され得る。したがって、パネル１８０２は、梁１８１０ａ、１８１０ｂに取り外し可能に結合している。パネル１８０２は、梁又はいずれかの他のパネルを移動させることなく、取り外され得、再度取り付けられてもよく、又は取り外さ

れ得、交換されてもよい。

【０７０１】

運転中に、吸着剤材料１７１０は、チャネル１９０７ａ、１９０７ｂを通って流れる。空気１７０５は、パネル１８０２を通って、内側シート１９０２から外側シート１９０４への方向に流れる。

【０７０２】

図２０は、例示的なサイクロ吸着器１７００の上面断面図である。サイクロ吸着器１７００は、送風機１７２０を含む。送風機１７２０は、モータ１７２２及びブレード２００２を含む。モータ１７２２は、送風機１７２０の回転を駆動する。送風機１７２０の直径２０１０は、およそ８メートル以下（例えば、１０メートル以下、９メートル以下、７メートル以下）であることができる。サイクロ吸着器１７００は、梁１８１０を含む。パネル１８０２は、梁１８１０の間に吊されている。パネル１８０２は、チャンバ１７０２を取り囲む。チャンバ１７０２は、上面断面視から、およそ円形の形状を有する。

【０７０３】

図２１Ａ～２１Ｂは、例示的な吸着器構造体２１００の斜視図である。構造体２１００は、４つの壁２１０１を含む。４つの壁２１０１は、チャンバ２１０２を取り囲む。チャンバ２１０２は、実質的に長方角柱の形状を有する。

【０７０４】

４つの壁２１０１のうちの少なくとも１つの壁は、フィルタパネル２１１０を含む。パネル１８０２と同様に、フィルタパネル２１１０は、多孔質布地材料から形成され得、複数のチャネルを含むことができる。図２１Ａ～２１Ｂは、４つの壁のうちの１つがフィルタパネル２１１０を含む例を示す。いくつかの例において、追加の壁、例えば、２、３、又は４つの壁が、フィルタパネル２１１０を含むことができる。

【０７０５】

吸着器構造体２１００は、送風機２１２０を含む。送風機２１２０は、構造体の壁２１０１と統合されている。送風機２１２０は、構造体２１００の基部２１０６の近くに位置決めされている。例えば、送風機２１２０は、壁２１０１の底部部分、例えば、基部２１０６に最も近い、壁２１０１の一部分内に統合され得る。壁の底部部分は、例えば、ｚ方向に測定された場合、壁の下３分の１又は下４分の１であることができる。

【０７０６】

図２２Ａは、例示的な吸着器構造体２１００の上面断面図である。吸着器構造体２１００は、梁２１１０ａと梁２１１０ｂとの間に吊されたフィルタパネル２１１０を含む。４つの壁は、チャンバ２１０２を取り囲む。送風機２１２０は、壁２１０１のうちの１つと統合されている。送風機２１２０は、空気をチャンバ２１０２内に向ける。

【０７０７】

図２２Ｂは、例示的な吸着器構造体２１００の規模を示す斜視図である。いくつかの例において、吸着器構造体は、およそ２０メートル（例えば、７０フィート以下、６５フィート以下、６０フィート以下）の高さ２２１０を有する。いくつかの例において、フィルタパネルは、構造体の高さ未満の高さを有する。例えば、フィルタパネルは、およそ１０メートル（例えば、４０フィート以下、３５フィート以下、３０フィート以下）の高さ２２２０を有することができる。

【０７０８】

図２３Ａは、例示的な吸着器構造体２３００の上面断面図であり、吸着器構造体２３００は、２つのフィルタパネル２３０２、２３０４及び２つの端部壁２３０６、２３０８を有する。構造体２３００は、フィルタパネル２３０２、２３０４を含み、フィルタパネル２３０２、２３０４は各々、ｘ－ｚ平面において延び、互いに平行である。フィルタパネル２３０２、２３０４及び端部壁２３０６、２３０８は、チャンバ２３１０を取り囲む。チャンバ２３１０は、実質的に長方角柱の形状を有する。送風機２３２０は、空気を、水平に、例えば、ｘ方向にチャンバ２３１０内に向ける。次いで、空気２３３０は、チャンバ２３１０外に、フィルタパネル２３０２、２３０４を通って流れる。フィルタパネル２

３０２、２３０４は、多孔質布地材料から形成され得、複数のチャネルを含むことができる。

【０７０９】

図２３Ｂ～２３Ｃは、鋸歯構成において配置されたフィルタパネルを有する例示的な吸着器構造体２３４０、２３８０の上面断面図である。図２３Ｂを参照して、構造体２３４０は、鋸歯構成において配置された８つのフィルタパネル２３４４を含む。各フィルタパネル２３４４は、多孔質布地材料から形成され得、複数のチャネルを含むことができる。構造体２３４０は、チャンバ２３５０を取り囲む壁２３４２を含む。チャンバ２３５０の壁２３４２は、実質的に長方角柱の形状を形成する。送風機２３５５は、空気を、水平に、例えば、ｘ方向にチャンバ２３５０内に向ける。次いで、空気２３６０は、チャンバ２３５０外に、出口２３６５を通って流れる。出口２３６５は、例えば、多孔質壁又は壁の多孔質セクションであることができる。

【０７１０】

図２３Ｃを参照して、構造体２３４０は、鋸歯構成において配置された２４個のフィルタパネル２３８４を含む。各フィルタパネル２３８４は、多孔質布地材料から形成され得、複数のチャネルを含むことができる。構造体２３８０は、チャンバ２３９０を取り囲む壁２３８２を含む。チャンバ２３９０は、実質的に長方角柱の形状を有する。送風機２３９５は、空気を、水平に、例えば、ｘ方向にチャンバ２３９０内に向ける。次いで、空気２３７０は、チャンバ２３９０外に、出口２３７５を通って流れる。出口２３７５は、例えば、多孔質壁又は壁の多孔質セクションであることができる。

【０７１１】

平行、長方形、及び鋸歯構成を有するように示されるが、フィルタパネルの他の構成が可能である。例えば、フィルタパネルは、上面断面視から、いずれかの多角形形状において配置され得る。いくつかの例において、複数のフィルタパネルは、上面断面視から、直線において配置され得る。いくつかの例において、フィルタパネルは湾曲し得る。いくつかの例において、フィルタパネルは、円形、楕円形、長円形、又は他の非多角形形状において配置され得る。

【０７１２】

図２４は、サイロ吸着器のための例示的な制御システム２４００のブロック図である。サイロ吸着器のための制御システム２４００は、センサを含む。センサは、水分センサ２４０２、吸着剤流量センサ２４０４、空気流量センサ２４０６、及び圧力センサ２４０８を含むことができる。サイロ吸着器のための制御システム２４００は、コントローラ２４１０を含む。

【０７１３】

センサは、センサデータをコントローラ２４１０に出力する。センサデータに基づいて、コントローラ２４１０は、制御システム２４００の構成要素を制御する。構成要素は、例えば、送風機モータ１７２２、空気入口弁２４１４、吸着剤入口弁２４１６、及び吸着剤出口弁２４１８を含むことができる。構成要素はまた、例えば、吸着剤材料を入口１７０４に搬送するためのコンベヤシステムを含むことができる。

【０７１４】

いくつかの例において、コントローラ２４１０は、送風機モータ１７２２の速度を制御することによって、空気流を増加又は減少させることができる。コントローラ２４１０は、空気入口弁２４１４の位置を制御することによって、空気流を増加又は減少させることができる。コントローラ２４１０は、吸着剤入口弁の速度を調整することによって、空洞内への吸着剤流を増加又は減少させることができる。コントローラ２４１０は、吸着剤出口弁２４１８の速度を調整することによって、空洞外への吸着剤流を増加又は減少させることができる。

【０７１５】

コントローラ２４１０は、制御システム２４００の構成要素を制御して、システムのパラメータを制御することができる。パラメータは、例えば、パネル１８０２にわたる圧力

低下、チャンバ内及び外への空気の流量、吸着剤材料の水分含有量、吸着剤材料の二酸化炭素含有量などを含むことができる。

【０７１６】

ｉｖ．　重力送り炭素脱着システム

概して、本開示は、二酸化炭素の脱着のための重力送りシステムに関する。例示的なシステムは、水を吸着剤材料から蒸発させるように構成された第１の熱交換器又は蒸発器を含む。システムは、二酸化炭素を吸着剤材料から脱着するように構成された第２の熱交換器又は脱着器を含む。いくつかの実装態様において、システムは、吸着剤材料を冷却するように構成された第３の熱交換器又は冷却器を含む。蒸発及び脱着は、熱を、吸着剤材料と作動流体との間、及び吸着剤材料と熱供給源流体との間で伝達することによって達成される。

【０７１７】

作動流体は、蒸発器から凝縮器へ、脱着器へ、蒸発器に戻る閉ループにおいて流れる。熱供給源流体は、供給源から蒸発器へ、脱着器へ、供給源に戻る開ループにおいて流れることができる。

【０７１８】

蒸発器及び脱着器は各々、間接液体－固体熱交換器であることができる。例えば、蒸発器及び脱着器は各々、シェルアンドチューブ熱交換器、プレート熱交換器、又は組み合わせ熱交換器、例えば、プレートアンドシェル熱交換器であることができる。吸着剤材料は、自由流動性バルク固体であり、粉末化又はペレット化形態を有することができる。いくつかの例において、吸着剤材料は、シリカベースのペレットを含む。

【０７１９】

運転中に、吸着剤材料は、蒸発器に、蒸発器の頂部における入口を介して入り、蒸発器を重力に起因して下方に通って流れる。吸着剤材料は、蒸発器に、およそ１５℃～２０℃の周囲温度で、湿潤及びリッチの状態で入る。吸着剤材料が蒸発器を通って流れる際に、吸着剤材料は、チューブ及び／又はプレートの上を流れ、作動流体及び熱供給源流体は、チューブ及び／又はプレートを通って流れる。

【０７２０】

廃熱供給源からのものであり得る熱供給源流体は、熱を蒸発器における吸着剤材料に伝達し、その後、蒸発器を出て、脱着器に流れる。作動流体はまた、熱を蒸発器における吸着剤材料に伝達する。作動流体は、吸着剤材料を、およそ４０℃～５５℃に加熱する。吸着剤材料は、水蒸気を蒸発器内に真空条件下で、増加した温度に起因して放出する。

【０７２１】

水蒸気は、蒸発器から第１の真空ポンプによって除去される。第１の真空ポンプは、水蒸気を蒸発器から凝縮器に輸送する。蒸発器外に流れる作動流体は、凝縮器のための冷却剤として機能し、熱を凝縮器における水蒸気から抽出する。したがって、作動流体は、凝縮器において再加熱され、その後、脱着器に流れる。

【０７２２】

吸着剤材料は、蒸発器を、およそ水が蒸発器の真空圧力において蒸発する温度で、水が乾燥し二酸化炭素においてリッチの状態で出る。吸着剤材料は、蒸発器からチャネルを介して脱着器の入口に輸送される。いくつかの例において、蒸発器の出口は、垂直に脱着器の入口の上に位置決めされており、吸着剤材料は、蒸発器から脱着器に、重力に起因して流れる。いくつかの例において、蒸発器の出口は、垂直に脱着器の入口の下に位置決めされており、コンベヤ又はリフトシステムが、吸着剤材料を、蒸発器の出口から脱着器の入口に輸送する。

【０７２３】

吸着剤材料は、脱着器に、脱着器の頂部における入口を介して入り、脱着器を重力に起因して下方に通って流れる。脱着器は、熱を作動流体から吸着剤材料に伝達することによって、二酸化炭素を吸着剤材料から除去するように構成されている。作動流体は、吸着剤材料を、およそ６５℃～８０℃に加熱する。これらの温度での真空条件下で、吸着剤材料

は、二酸化炭素を放出する。二酸化炭素は、脱着器から第２の真空ポンプによって除去される。次いで、二酸化炭素は、貯蔵されてもよく、又は再循環してもよい。

【０７２４】

蒸発器において冷却された熱供給源流体は、脱着器を通って流れ、熱を吸着剤材料から吸収し、吸着剤材料を冷却する。吸着剤材料は、脱着器を、吸着剤への損傷を回避するための４０℃以下の温度で、水が乾燥し二酸化酸素においてリーンの状態で出る。いくつかの例において、吸着剤材料は、脱着器を、およそ周囲温度で出る。いずれかの適切な冷却流体が、吸着剤材料を、脱着器を出る前に冷却するために使用され得る。

【０７２５】

いくつかの例において、システムは、蒸発器及び脱着器の真空圧力において密封するエアロックを含む。例えば、システムは、蒸発器の入口におけるエアロック、蒸発器と脱着器との間のエアロック、及び脱着器の出口におけるエアロックを含むことができる。いくつかの例において、システムは、システムへの入口におけるエアロック、及びシステムへの出口におけるエアロックを含む。例えば、システムは、蒸発器への入口におけるエアロック、及び脱着器の出口におけるエアロックを含むことができ、蒸発器と脱着器との間のエアロックを含まない。いくつかの例において、システムは、蒸発器への入口におけるエアロック、及び冷却器の出口におけるエアロックを含み、蒸発器と脱着器との間のエアロック、及び脱着器と冷却器との間のエアロックを含まない。

【０７２６】

システムは、蒸発器内への流れ、蒸発器と脱着器との間の流れ、及び／若しくは脱着器外への流れ、脱着器と冷却器との間の流れ、冷却器外への流れ、又はそれらのいずれかの組み合わせを制御するためのメータを含むことができる。いくつかの例において、メータは、エアロックを通る吸着剤材料の質量流量を制御して、システムを通る質量流量を制御する。

【０７２７】

システムを出た後に（例えば、脱着器又は冷却器を出た後に）、吸着剤材料は、二酸化炭素を大気から吸着するための吸着プロセスに供され得る。次いで、吸着剤材料は、蒸発器の入口に輸送されて戻されて、脱着プロセスを再開することができる。

【０７２８】

概して、本明細書に記載される主題の革新的な態様は、二酸化炭素を、バルク固体を含む吸着剤材料から除去するためのシステムにおいて具現化され得る。システムは、熱を作動流体及び熱供給源流体から吸着剤材料に伝達することによって、水蒸気を吸着剤材料から蒸発させるように構成された第１の熱交換器と、熱を水蒸気から作動流体に伝達することによって、水蒸気を凝縮させるように構成された凝縮器と、熱を作動流体から吸着剤材料に伝達することによって、二酸化炭素を吸着剤材料から脱着するように構成された第２の熱交換器と、二酸化炭素を第２の熱交換器から除去するように構成されたポンプと、作動流体を、第１の熱交換器、凝縮器、及び第２の熱交換器間で循環させるための閉ループ流路と、熱供給源流体を第１の熱交換器に提供するための開ループ流路と、吸着剤材料を、第１の熱交換器から第２の熱交換器に輸送するためのチャネルと、を含む。

【０７２９】

これらの及び他の実施形態は、以下の特徴を、単独で又はいずれかの組み合わせで含むことができる。いくつかの実装態様において、第１の熱交換器は、第１の熱交換器への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する第１の入口、及び第１の熱交換器からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する第１の出口を含む。運転中に、第１の入口は、第１の出口よりも高い高度を有する。

【０７３０】

いくつかの実装態様において、第２の熱交換器は、第２の熱交換器への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する第２の入口、及び第２の熱交換器からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する第２の出口を含む。運転中に、第２の入口は、第２の出口よりも高い高度を有する。

【０７３１】
いくつかの実装態様において、運転中に、第２の熱交換器の第２の入口は、第１の熱交換器の第１の出口よりも高い高度を有する。いくつかの実装態様において、運転中に、第２の熱交換器の第２の入口は、第１の熱交換器の第１の出口よりも低い高度を有する。
【０７３２】
いくつかの実装態様において、閉ループ流路及び開ループ流路は、互いに流体的に隔離されている。
【０７３３】
いくつかの実装態様において、システムは、第１の熱交換器内への吸着剤材料の流れを制御するように構成された計量デバイスを含む。
【０７３４】
いくつかの実装態様において、吸着剤材料は、自由流動性バルク固体であり、粉末化又はペレット化形態を有することができる。
【０７３５】
いくつかの実装態様において、吸着剤材料は、二酸化炭素を流体から吸着するように構成されている。
【０７３６】
いくつかの実装態様において、第１の熱交換器及び第２の熱交換器は、プレート熱交換器である。いくつかの実装態様において、第１の熱交換器及び第２の熱交換器は、シェルアンドチューブ熱交換器である。
【０７３７】
いくつかの実装態様において、第１の熱交換器及び第２の熱交換器は、シェルアンドプレート熱交換器である。
【０７３８】
いくつかの実装態様において、第１の熱交換器は、蒸発器である。
【０７３９】
いくつかの実装態様において、第２の熱交換器は、脱着器である。
【０７４０】
概して、本明細書に記載される主題の革新的な態様は、二酸化炭素を、バルク固体を含む吸着剤材料から除去するための方法において具現化され得る。方法は、作動流体を、第１の熱交換器、凝縮器、及び第２の熱交換器間の閉ループにおいて循環させることと、熱供給源流体を、第１の熱交換器に提供することと、熱を作動流体及び熱供給源流体から第１の熱交換器内の吸着剤材料に伝達することによって、水蒸気を吸着剤材料から蒸発させることと、熱を水蒸気から凝縮器内の作動流体に伝達することによって、水蒸気を凝縮させることと、吸着剤材料を、第１の熱交換器から第２の熱交換器にチャネルを介して輸送することと、熱を作動流体から第２の熱交換器内の吸着剤材料に伝達することによって、二酸化炭素を吸着剤材料から脱着することと、二酸化炭素を、第２の熱交換器からポンプによって除去することと、を含む。
【０７４１】
これらの及び他の実施形態は、以下の特徴を、単独で又はいずれかの組み合わせで含むことができる。いくつかの実装態様において、方法は、吸着剤材料を第１の熱交換器の入口において送ることと、吸着剤材料を第１の熱交換器の出口から抽出することと、を含む。吸着剤材料は、第１の熱交換器の入口から第１の熱交換器の出口に、重力に起因して移動する。
【０７４２】
いくつかの実装態様において、方法は、吸着剤材料を第２の熱交換器の入口において送ることと、吸着剤材料を第２の熱交換器の出口から抽出することと、を含む。吸着剤材料は、第２の熱交換器の入口から第２の熱交換器の出口に、重力に起因して移動する。
【０７４３】
いくつかの実装態様において、方法は、熱を、第１の熱交換器内の吸着剤材料から蒸発

した水蒸気から第２の熱交換器内の吸着剤材料に、作動流体を介して伝達することを含む。

【０７４４】

いくつかの実装態様において、方法は、第２の熱交換器内の吸着剤材料を、第１の熱交換器において予備冷却された熱供給源流体を使用して冷却することを含む。

【０７４５】

いくつかの実装態様において、方法は、ポンプを使用して、真空圧力を第１の熱交換器において確立し、水蒸気を、第１の熱交換器から凝縮器に輸送することを含む。

【０７４６】

いくつかの実装態様において、方法は、凝縮した水蒸気を、凝縮器から水出口を介して除去することを含む。

【０７４７】

いくつかの実装態様において、方法は、真空圧力を、第２の熱交換器において、ポンプを使用して確立することを含む。

【０７４８】

いくつかの実装態様において、方法は、真空圧力を、第１の熱交換器及び第２の熱交換器において、エアロックを使用して維持することを含む。

【０７４９】

概して、本明細書に記載される主題の革新的な態様は、二酸化炭素を、バルク固体を含む吸着剤材料から除去するためのシステムであって、熱を熱供給源流体から吸着剤材料に伝達することによって、水蒸気を吸着剤材料から蒸発させるように構成された第１の熱交換器、熱を作動流体から吸着剤材料に伝達することによって、二酸化炭素を吸着剤材料から脱着するように構成された第２の熱交換器、二酸化炭素を第２の熱交換器から除去するように構成されたポンプ、熱を吸着剤材料から冷却流体に伝達することによって、吸着剤材料を冷却するように構成された第３の熱交換器、吸着剤材料を、第１の熱交換器から第２の熱交換器及び第３の熱交換器に輸送するためのチャネルを備える、システムにおいて具現化され得る。

【０７５０】

いくつかの実装態様において、システムは、第１の熱交換器への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する入口と、第３の熱交換器からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する出口と、を備え、運転中に、入口は、出口よりも高い高度を有する。

【０７５１】

いくつかの実装態様において、第１の熱交換器は、蒸発器を備え、第２の熱交換器は、脱着器を備え、第３の熱交換器は、冷却器を備え、吸着剤材料は、ペレット化形態を有し、二酸化炭素を流体から吸着するように構成されている。

【０７５２】

いくつかの実装態様において、ポンプは、真空圧力を、第１の熱交換器、第２の熱交換器、及び第３の熱交換器において確立するように構成されている。

【０７５３】

開示されるシステム及び方法は、以下の利点をもたらすことができる。水を第１の熱交換器における吸着剤材料から除去し、その後、吸着剤材料を第２の熱交換器に送達することは、第２の熱交換器における吸着剤材料からの二酸化炭素の脱着の効率を改善する。蒸発及び脱着を真空圧力で実行することは、プロセスが行われる温度を低減する。エネルギー効率は、凝縮器における作動流体を、水蒸気からの熱を使用して再加熱することによって増加する。エネルギー効率は、第２の熱交換器内の吸着剤材料を、第１の熱交換器において予備冷却された熱供給源流体を使用して冷却することによって増加する。廃熱は、熱供給源として使用され得、効率を改善する。少ない可動部品を有するか、又は可動部品を有しない垂直向きのモジュラー設計に起因して、維持コストが低減され得る。伝導による間接加熱は、バルク固体吸着剤材料を加熱するための低グレードの熱を捕捉及び使用することを可能にする。

【０７５４】
図２５は、蒸発器２５１０と、脱着器２５２０と、を含む、例示的な脱着システム２５００を示す。脱着システム２５００は、二酸化炭素及び水分を吸着剤材料から除去するためのシステムである。
【０７５５】
図２５において、様々な段階における吸着剤材料が、２５０１Ａ、２５０１Ｂ、２５０１Ｃとして示される。水及び二酸化炭素を含有する湿潤リッチ吸着剤材料が、２５０１Ａと示される。水が放出された二酸化炭素を含有する乾燥リッチ吸着剤材料が、２５０１Ｂと示される。水及び二酸化炭素の両方が放出された乾燥リーン吸着剤材料が、２５０１Ｃと示される。概して、吸着剤材料は、吸着剤材料２５０１と称され得る。吸着剤材料２５０１は、自由流動性バルク固体であることができ、粉末化又はペレット化形態を有することができる。いくつかの例において、吸着剤材料２５０１は、シリカベースのペレットを含む。脱着システム２５００に導入される前に、吸着剤材料２５０１は、吸着プロセスに供され得る。吸着プロセス中に、吸着剤材料２５０１は、二酸化炭素を、流体、例えば、空気流れから吸着することができる。
【０７５６】
脱着システム２５００は、第１の熱交換器（例えば、蒸発器２５１０）と、第２の熱交換器（例えば、脱着器２５２０）と、を含む。蒸発器２５１０は、熱を作動流体及び熱供給源流体から吸着剤材料２５０１に伝達することによって、水蒸気を吸着剤材料２５０１から蒸発させるように構成されている。脱着器２５２０は、熱を作動流体２５１５から吸着剤材料２５０１に伝達することによって、二酸化炭素を吸着剤材料２５０１から脱着するように構成されている。
【０７５７】
図２５において、様々な段階における作動流体が、２５１５Ａ、２５１５Ｂ、２５１５Ｃとして示される。脱着器２５２０を出て蒸発器２５１０に入る熱い作動流体が、２５１５Ａと示される。蒸発器２５１０を出る冷却された作動流体が、２５１５Ｂと示される。脱着器２５２０に入る再加熱された作動流体が、２５１５Ｃと示される。概して、作動流体は、作動流体２５１５と称され得る。作動流体２５１５は、液体、例えば、水であることができる。
【０７５８】
様々な段階における熱供給源流体が、２５０５Ａ、２５０５Ｂ、２５０５Ｃと示される。蒸発器２５１０に入る熱い熱供給源流体は、２５０５Ａと示される。蒸発器２５１０を出て脱着器２５２０に入る冷却された熱供給源流体は、２５０５Ｂと示される。脱着器２５２０を出る再加熱された熱供給源流体は、２５０５Ｃと示される。概して、熱供給源流体は、熱供給源流体２５０５と称され得る。作動流体２５１５は、液体、例えば、水であることができる。
【０７５９】
蒸発器２５１０及び脱着器２５２０は、同じタイプの熱交換器であってもよく、又は各々、異なるタイプの熱交換器であってもよい。いくつかの例において、蒸発器２５１０、脱着器２５２０、又は両方は、プレート熱交換器である。いくつかの例において、蒸発器２５１０、脱着器２５２０、又は両方は、シェルアンドチューブ熱交換器である。いくつかの例において、蒸発器２５１０、脱着器２５２０、又は両方は、組み合わせ熱交換器、例えば、シェルアンドプレート熱交換器である。
【０７６０】
湿潤リッチ吸着剤材料２５０１Ａは、蒸発器２５１０に、蒸発器入口２５０６を介して送達され得る。蒸発器２５１０に入る吸着剤材料２５０１Ａは、例えば、１５℃～２０℃の温度を有することができる。より高い圧力で、吸着剤材料２５０１Ａは、より高い温度を有し得る。
【０７６１】
蒸発器入口２５０６は、蒸発器２５１０への湿潤リッチ吸着剤材料２５０１Ａの送達の

ためのアクセスを提供する。いくつかの例において、入口２５０６は、重力方向に対して蒸発器２５１０の近くにあるか、又はその頂部においてある。吸着剤材料２５０１は、蒸発器２５１０に入口２５０６を介して入り、蒸発器２５１０を重力に起因して下方に通って流れる。

【０７６２】

いくつかの例において、ローダ２５０８は、吸着剤材料２５０１を収集し、その後、蒸発器２５１０に入る。ローダ２５０８は、蒸発器２５１０内への吸着剤材料２５０１の流れを制御するための計量デバイスを含むことができる。

【０７６３】

いくつかの例において、蒸発器２５１０は、エアロック２５１２を含む。エアロック２５１２は、蒸発器２５１０の真空圧力において密封することができる。エアロック２５１２は、蒸発器２５１０の内部の真空圧力を中断させることなく、吸着剤材料２５０１が蒸発器２５１０内に入ることを可能にすることができる。いくつかの実装態様において、エアロック２５１２はまた、蒸発器２５１０内への吸着剤材料２５０１の流れを制御するための計量デバイスとして使用され得る。エアロックはまた、蒸発器２５１０の出口と脱着器２５２０の入口との間に位置することができ（例えば、エアロック２５４２）、脱着器の出口において位置することができる（例えば、エアロック２５６８）。

【０７６４】

シェルアンドチューブ熱交換器の例において、蒸発器２５１０は、チューブ２５１４を含む。流体、例えば、作動流体２５１５及び熱供給源流体２５０５は、チューブ２５１４を通って流れる。蒸発器２５１０の内部で、吸着剤材料２５０１は、チューブの上を流れ、熱を吸収する。吸収された熱は、吸着剤材料２５０１が水蒸気を蒸発器２５１０内に放出することを引き起こす。

【０７６５】

作動流体２５１５は、閉ループ流路において流れる。流路は、作動流体２５１５を、蒸発器２５１０、凝縮器２５５０、及び脱着器２５２０間で循環させる。作動流体は、蒸発器２５１０から凝縮器２５５０へ、脱着器２５２０へ、蒸発器２５１０に戻る閉ループにおいて流れる。蒸発器に入るときに、作動流体２５１５Ａは、およそ７０℃以上（例えば、６５℃以上、７０℃以上、７５℃以上、８０℃以上）の温度を有する。

【０７６６】

熱供給源流体２５０５は、熱供給源から蒸発器２５１０へ、脱着器２５２０へ、供給源に戻る開ループ流路において流れる。廃熱供給源からのものであり得る熱供給源流体２５０５は、熱を蒸発器２５１０における吸着剤材料２５０１に伝達し、その後、蒸発器２５１０を出て、脱着器２５２０に流れる。いくつかの実装態様において、作動流体２５１５の閉ループ流路及び熱供給源流体２５０５の開ループ流路は、互いに流体的に隔離されている。蒸発器に入るときに、熱供給源流体２５０５Ａは、およそ３５℃以上（例えば、３０℃以上、４０℃以上、４５℃以上）の温度を有する。

【０７６７】

蒸発器２５１０の内部で、作動流体２５１５Ａ及び熱供給源流体２５０５Ａは、熱を湿潤リッチ吸着剤材料２５０１Ａに伝達する。湿潤リッチ吸着剤材料２５０１Ａは、水蒸気を蒸発器２５１０内に真空条件下で、蒸発器２５１０における増加した温度に起因して放出する。

【０７６８】

蒸発器２５１０を出る作動流体２５１５Ｂは、蒸発器２５１０に入る作動流体２５１５Ａと比較して低減された温度を有する。例えば、蒸発器２５１０を出る作動流体２５１５Ｂは、およそ６０℃以下（例えば、５０℃以下、５５℃以下、６５℃以下）の温度を有することができる。

【０７６９】

蒸発器２５１０を出る熱供給源流体２５０５Ｂは、蒸発器２５１０に入る熱供給源流体２５０５Ａと比較して低減された温度を有する。例えば、蒸発器２５１０を出る熱供給源

流体２５０５Ｂは、およそ１５℃以下（例えば、２５℃以下、２０℃以下、１０℃以下）の温度を有することができる。低減された温度の熱供給源流体２５０５は、配管を通って、蒸発器２５１０から脱着器２５２０に流れる。

【０７７０】

吸着剤材料２５０１は、蒸発器２５１０を、蒸発器出口２５２２を介して出る。蒸発器出口２５２２は、蒸発器２５１０からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する。蒸発器出口２５２２は、蒸発器入口２５０６よりも低い、例えば、ｚ方向における高度を有し、これにより、吸着剤材料２５０１は、蒸発器入口２５０６から蒸発器出口２５２２に、重力に起因して流れることができる。乾燥リッチ吸着剤材料２５０１Ｂは、蒸発器出口２５２２から抽出され得る。

【０７７１】

吸着剤材料２５０１Ｂは、蒸発器２５１０を、真空における水の蒸発温度で、水が乾燥し二酸化炭素においてリッチの状態で出る。１平方インチ当たり０．６５ポンドの絶対圧力（ｐｓｉａ）を有する例示的な蒸発器において、吸着剤材料２５０１Ｂは、蒸発器２５１０を、およそ３０℃で、水が乾燥し二酸化炭素においてリッチの状態で出る。吸着剤材料２５０１Ｂは、蒸発器２５１０からチャネルを介して脱着器２５２０の入口２５３６に輸送される。いくつかの例において、脱着器入口２５３６は、蒸発器出口２５２２よりも高い高度にある。いくつかの例において、脱着器入口２５３６は、蒸発器出口２５２２と同じ又はそれよりも低い高度にある。いくつかの例において、蒸発器出口２５２２は、垂直に脱着器入口２５３６の上に位置決めされており、吸着剤材料２５０１Ｂは、蒸発器２５１０から脱着器２５２０に、重力に起因して流れる。いくつかの例において、蒸発器出口２５２２は、垂直に脱着器入口２５３６の下に位置決めされており、コンベヤ又はリフトシステムが、吸着剤材料２５０１Ｂを、蒸発器出口２５２２から脱着器入口２５３６に輸送する。

【０７７２】

蒸発器ポンプ２５５６は、水蒸気を蒸発器２５１０から除去する。蒸発器ポンプ２５５６は、真空圧力を蒸発器において確立する。真空圧力は、例えば、０．２５～２．０ｐｓｉａであることができる。いくつかの例において、蒸発器２５１０及び脱着器２５２０は、同じ又は同様の圧力で運転される。いくつかの例において、蒸発器２５１０及び脱着器２５２０は、異なる圧力で運転される。

【０７７３】

いくつかの実装態様において、蒸発器ポンプ２５５６は、水蒸気を蒸発器２５１０から凝縮器２５５０に輸送する。いくつかの実装態様において、水蒸気は、蒸発器２５１０から凝縮器２５５０に、他の経路を介して、例えば、ターボ圧縮機を介して輸送される。いくつかの実装態様において、蒸発器ポンプ２５５６は、水蒸気を、水出口２５５５を介して放出する。

【０７７４】

凝縮器２５５０は、熱を水蒸気から作動流体２５１５Ｂに伝達することによって、水蒸気を凝縮させる。蒸発器２５１０外に流れる作動流体２５１５Ｂは、凝縮器２５５０のための冷却剤として機能し、熱を凝縮器２５５０における水蒸気から抽出する。したがって、作動流体２５１５Ｂは、凝縮器において、蒸発器ポンプ２５５６からの排気蒸気を熱供給源として使用して再加熱される。再加熱された作動流体２５１５Ｃは、配管を通って、凝縮器２５５０外に流れ、脱着器２５２０内に流れる。脱着器に入る作動流体２５１５Ｃは、およそ８５℃以上（例えば、７５℃以上、８０℃以上、９０℃以上）の温度を有することができる。したがって、熱は、蒸発器２５１０における吸着剤材料２５０１から蒸発した水蒸気から脱着器２５２０における吸着剤材料２５０１に、作動流体２５１５を介して伝達される。凝縮器２５５０における凝縮した水蒸気は、水２５５５として、水出口を介して除去される。いくつかの実装態様において、例えば、熱ポンプが熱供給源として使用される実装態様において、凝縮器は、真空ポンプ前に位置決めされ得る。

【０７７５】

いくつかの実装態様において、機械的蒸気再圧縮が、廃熱を再循環させて、効率を改善するために使用され得る。機械的蒸気再圧縮を用いるために、ターボ圧縮機器が、蒸発器２５１０からの蒸気を、凝縮器２５５０に入る前に圧縮するために使用され得る。いくつかの実装態様において、再圧縮された蒸気が、作動流体として使用され得、蒸発器２５１０において凝縮することができる。

【０７７６】

乾燥リッチ吸着剤材料２５０１Ｂは、脱着器２５２０に脱着器入口２５３６を介して入る。乾燥リッチ吸着剤材料２５０１Ｂは、およそ３０℃以上（例えば、２５℃以上、３５℃以上、４０℃以上）の温度を有することができる。脱着器入口２５３６は、脱着器２５２０への吸着剤材料２５０１の送達のためのアクセスを提供する。エアロック２５４２、２５７２、及びエアロック２５６８は、脱着器２５２０の真空圧力において密封する。

【０７７７】

シェルアンドチューブ熱交換器の例において、脱着器２５２０は、チューブ２５６４を含む。プレート熱交換器の例において、脱着器２５２０は、チューブの代わりに、プレートを含み得る。流体、例えば、作動流体２５１５及び熱供給源流体２５０５は、チューブ２５６４を通って流れる。脱着器２５２０の内部で、吸着剤材料２５０１は、チューブの上を流れ、熱を吸収する。吸収された熱は、吸着剤材料２５０１が二酸化炭素を脱着器２５２０内に放出することを引き起こす。吸着剤材料２５０１は、脱着器２５２０に、脱着器２５２０の頂部における脱着器入口２５３６を介して入り、脱着器２５２０を重力に起因して下方に通って流れる。脱着器２５２０は、熱を作動流体２５１５から吸着剤材料に伝達することによって、二酸化炭素を吸着剤材料２５０１から除去する。

【０７７８】

本明細書に記載されるように、作動流体２５１５Ｃは、脱着器に、およそ８５℃で入る。熱を吸着剤材料２５０１に伝達した後に、作動流体２５１５Ａは、脱着器を、およそ７０℃以下（例えば、７５℃以下、６５℃以下、６０℃以下）で出る。

【０７７９】

脱着器２５２０の内部で、作動流体２５１５によって加熱された吸着剤材料２５０１は、およそ６５℃～８０℃の温度に上昇する。これらの温度での真空条件下で、吸着剤材料２５０１は、二酸化炭素を脱着器内に放出する。

【０７８０】

脱着器ポンプ２５６６は、二酸化炭素を脱着器２５２０から除去し、真空圧力を脱着器２５２０において確立する。二酸化炭素２５６５は、脱着器２５２０から脱着器ポンプ２５６６によって除去される。次いで、二酸化炭素２５６５は、貯蔵されてもよく、又は再循環してもよい。

【０７８１】

蒸発器２５１０においておよそ１５℃以下の温度に冷却された熱供給源流体２５０５Ｂは、脱着器２５２０に入る。熱供給源流体２５０５は、脱着器２５２０のチューブ又はプレートを通って流れ、熱を吸着剤材料２５０１から吸収し、吸着剤材料２５０１を冷却する。吸着剤材料２５０１Ｃは、脱着器２５２０を、５０℃以下の温度で出る。いくつかの例において、吸着剤材料２５０１Ｃは、脱着器２５２０を、およそ周囲温度（例えば、１５℃、２０℃、２５℃、又はそれらの間の範囲、例えば、１５℃～２５℃）で、水が乾燥し二酸化酸素においてリーンの状態で出る。熱供給源流体２５０５Ｃは、脱着器２５２０を、脱着器に入った熱供給源流体２５０５Ｂよりも高い温度で出る。例えば、熱供給源流体２５０５Ｃは、およそ１９℃以上（例えば、２０℃以上、２５℃以上、３０℃以上）の温度を有することができる。

【０７８２】

乾燥リーン吸着剤材料２５０１Ｃは、脱着器２５２０を、脱着器出口２５８２を介して出る。脱着器出口２５８２は、脱着器２５２０からの吸着剤材料２５０１Ｃの除去のための放出を提供する。

【０７８３】

脱着器２５２０を出た後に、乾燥リーン吸着剤材料２５０１Ｃは、二酸化炭素を大気から吸着するための吸着プロセスに供され得る。次いで、吸着剤材料は、蒸発器の入口２５０６に輸送されて戻されて、脱着プロセスを再開することができる。

【０７８４】

図２６は、蒸発器２６１０と脱着器２６２０とが積み重ねられた例示的な脱着システム２６００を示す。湿潤リッチ吸着剤材料２６０１Ａは、蒸発器２６１０に、蒸発器入口２６０６及びエアロック２６０８を介して送達され得る。湿潤リッチ吸着剤材料２６０１Ａは、蒸発器２６１０に入口２６０６を介して入り、蒸発器２６１０を重力に起因して下方に通って流れる。

【０７８５】

熱供給源流体２６０５は、熱供給源から蒸発器２６１０へ、供給源に戻る開ループ流路において流れる。廃熱供給源からのものであり得る熱供給源流体２６０５は、熱を蒸発器２６１０における吸着剤材料２６０１に伝達し、その後、蒸発器２６１０を出る。

【０７８６】

熱供給源流体２６０５Ａは、蒸発器２６１０に、およそ３５℃以上（例えば、３０℃以上、４０℃以上、４５℃以上）で入る。蒸発器２６１０の内部で、熱供給源流体２６０５Ａは、熱を湿潤リッチ吸着剤材料２６０１Ａに伝達し、湿潤リッチ吸着剤材料２６０１Ａを、およそ４０℃～５５℃の温度に上昇させる。湿潤リッチ吸着剤材料２６０１Ａは、水蒸気を蒸発器２６１０内に真空条件下で、蒸発器２６１０における増加した温度に起因して放出する。真空ポンプ（図示せず）は、水蒸気２６５５を蒸発器２６１０から除去し、真空圧力を蒸発器２６１０において確立する。

【０７８７】

熱供給源流体２６０５Ｂは、蒸発器を、およそ１５℃以下（例えば、２５℃以下、２０℃以下、１０℃以下）で出る。乾燥リッチ吸着剤材料２６０１Ｂは、蒸発器２６１０を、およそ周囲温度で出て、蒸発器２６１０からチャネルを介して脱着器２６２０に輸送される。

【０７８８】

作動流体２６１５Ｃは、脱着器２６２０に、高い温度で入る。高い温度は、およそ８５℃以上（例えば、８０℃以上、９０℃以上、９５℃以上）であることができる。脱着器２６２０の内部で、作動流体２６１５によって加熱された吸着剤材料２６０１は、およそ６５℃～８０℃の温度に上昇する。これらの温度での真空条件下で、吸着剤材料２６０１は、二酸化炭素を脱着器２６２０内に放出する。

【０７８９】

作動流体２６１５Ａは、脱着器２６２０を、およそ７０℃以下（例えば、７５℃以下、６５℃以下、６０℃以下）の、入口温度と比較してより低い温度で出る。ポンプ（図示せず）は、二酸化炭素を脱着器２６２０から真空入口２６３２を介して除去する。ポンプはまた、真空圧力を脱着器２６２０において確立する。

【０７９０】

脱着システム２６００は、熱ポンプ２６２２を含む。熱ポンプ２６２２は、冷却剤を循環させて、熱を、脱着器２６２０の底部２６２６に近い吸着剤材料から除去し、熱を、脱着器２６２０の頂部２６２４に近い吸着剤材料に提供する。したがって、吸着剤材料２６０１は、熱ポンプ２６２２によって循環する冷却剤によって冷却され、その後、脱着器２６２０を出る。乾燥リーン吸着剤材料２６０１Ｃは、脱着器２６２０を、エアロック２６６８を介して出る。エアロックは、真空圧力を、脱着器２６２０において保持する。乾燥リーン吸着剤材料２６０１Ｃは、吸着剤材料２６０１Ｃが脱着システム２６００を出るときに損傷されないことを確実にするための、およそ２５℃以下の温度（例えば、３０℃以下、２０℃以下、１５℃以下の温度）を有する。

【０７９１】

図２７Ａは、熱供給源流体再循環を含む、蒸発器２７１０と脱着器２７２０とが積み重ねられた例示的な脱着システム２７００を示す。湿潤リッチ吸着剤材料２７０１Ａは、蒸

発器２７１０に、蒸発器入口２７０６及びエアロック２７０８を介して送達され得る。湿潤リッチ吸着剤材料２７０１Ａは、蒸発器２７１０に入口２７０６を介して入り、蒸発器２７１０を重力に起因して下方に通って流れる。

【０７９２】

熱供給源流体２７０５は、熱供給源から蒸発器２７１０へ、脱着器２６２０へ、供給源に戻る開ループ流路において流れる。廃熱供給源からのものであり得る熱供給源流体２７０５は、熱を蒸発器２７１０における吸着剤材料２７０１に伝達し、その後、蒸発器２７１０を出る。

【０７９３】

熱供給源流体２７０５Ａは、蒸発器２７１０に、およそ３５℃以上（例えば、３０℃以上、４０℃以上、４５℃以上）で入る。蒸発器２７１０の内部で、熱供給源流体２７０５Ａは、熱を湿潤リッチ吸着剤材料２７０１Ａに伝達し、湿潤リッチ吸着剤材料２７０１Ａを、およそ４０℃～５５℃の温度に上昇させる。湿潤リッチ吸着剤材料２７０１Ａは、水蒸気を蒸発器２７１０内に真空条件下で、蒸発器２７１０における増加した温度に起因して放出する。真空ポンプ（図示せず）は、水蒸気２７５５を蒸発器２７１０から除去し、真空圧力を蒸発器２７１０において確立する。

【０７９４】

熱供給源流体２７０５Ｂは、蒸発器を、およそ１５℃以下（例えば、２５℃以下、２０℃以下、１０℃以下）で出る。熱供給源流体２７０５Ｂは、再循環配管を通って、脱着器２７２０に流れる。乾燥リッチ吸着剤材料２７０１Ｂは、蒸発器２７１０を、およそ周囲温度で出て、蒸発器２７１０からチャネルを介して脱着器２７２０に輸送される。

【０７９５】

作動流体２７１５Ｃは、脱着器２７２０に、高い温度で入る。高い温度は、およそ８５℃以上（例えば、８０℃以上、９０℃以上、９５℃以上）であることができる。脱着器２７２０の内部で、作動流体２７１５によって加熱された吸着剤材料２７０１は、およそ６５℃～８０℃の温度に上昇する。これらの温度での真空条件下で、吸着剤材料２７０１は、二酸化炭素を脱着器２７２０内に放出する。

【０７９６】

作動流体２７１５Ａは、脱着器２７２０を、およそ７０℃以下（例えば、７５℃以下、６５℃以下、６０℃以下）の、入口温度と比較してより低い温度で出る。ポンプ（図示せず）は、二酸化炭素２７６５を脱着器２７２０から真空入口２７３２を介して除去する。ポンプはまた、真空圧力を脱着器２７２０において確立する。

【０７９７】

蒸発器２７１０において冷却された熱供給源流体２７０５Ｂは、脱着器２７２０に再循環配管を介して入る。熱供給源流体２７０５Ｂは、乾燥リーン吸着剤材料２７０１Ｃを冷却し、その後、乾燥リーン吸着剤材料２７０１は、脱着器２７２０を出て、吸着剤材料が真空下にないときに損傷されないことを確実にする。

【０７９８】

乾燥リーン吸着剤材料２７０１Ｃは、脱着器２７２０を、エアロック２７６８を介して出る。エアロックは、真空圧力を、脱着器２７２０において保持する。乾燥リーン吸着剤材料２７０１Ｃは、およそ２５℃以下（例えば、３０℃以下、２０℃以下、１５℃以下）の温度を有する。

【０７９９】

図２７Ｂは、例示的な脱着システム２７５０を示し、脱着システム２７５０は、単一の真空密封システムにおいて、蒸発器２７３０と、脱着器２７６０と、冷却器２７７０と、を含む。水分及び二酸化炭素リッチ吸着剤材料２７５１Ａは、蒸発器２７３０に、蒸発器入口２７５６及び上部エアロック２７７７を介して送達され得る。水分及び二酸化炭素リッチ吸着剤材料２７５１Ａは、蒸発器２７３０に入口２７５６を介して入り、蒸発器２７３０を重力に起因して下方に通って流れる。

【０８００】

上部エアロック２７７７と下部エアロック２７７８との間の脱着システム２７５０全体は、真空ポンプ２７６４で、一定の真空下で保持される。真空レベルは、およそ２ｐｓｉａ以下（例えば、１．５ｐｓｉａ以下、１．０ｐｓｉａ以下、０．５ｐｓｉａ以下）である。真空ポンプ２７６４は、出口空気２７８５を、蒸発器２７３０、脱着器２７６０、及び冷却器２７７０から真空入口を介して引き込む。

【０８０１】

低熱作動流体であることができる熱供給源流体２７２５Ａは、熱供給源から蒸発器２７３０へ、供給源に戻る閉ループ流路において流れる。廃熱供給源又は専用熱ポンプからのものであり得る熱供給源流体２７２５Ａは、熱を吸着剤材料２７５１Ａに伝達し、その後、蒸発器２７３０を出る。

【０８０２】

熱供給源流体２７２５Ａは、蒸発器２７３０に、およそ３０℃以上（例えば、３５℃以上、４０℃以上、４５℃以上）で入る。蒸発器２７３０の内部で、熱供給源流体２７２５Ａは、熱を水分及び二酸化炭素リッチ吸着剤材料２７５１Ａに伝達する。水分及び二酸化炭素リッチ吸着剤材料２７５１Ａは、水蒸気を蒸発器２７３０内に真空条件下で、増加した温度に起因して放出する。

【０８０３】

事前凝縮器２７６２は、水蒸気２７７５を蒸発器２７３０から除去し、その後、出口空気２７５６が、真空ポンプ２７６４に達する。真空ポンプ２７６４は、真空圧力を蒸発器２７３０において確立する。

【０８０４】

熱供給源流体２７２５Ｂは、蒸発器２７３０を、およそ２５℃以下（例えば、２０℃以下、１５℃以下、１０℃以下）で出る。乾燥二酸化炭素リッチ吸着剤材料２７５１Ｂは、蒸発器２７３０を、およそ２５℃以上（例えば、３０℃以上、３５℃以上、４０℃以上）で出て、蒸発器２７３０から脱着器２７６０に重力送りされる。

【０８０５】

高熱作動流体であることができる作動流体２７３５Ａは、脱着器２７６０に、高い温度で入る。高い温度は、およそ７５℃以上（例えば、８０℃以上、８５℃以上、９０℃以上）であることができる。脱着器２７６０の内部で、作動流体２７３５Ａによって加熱された吸着剤材料２７５１Ｂは、およそ７０℃以上（例えば、７５℃以上、８０℃以上、８５℃以上）の温度に上昇する。これらの温度での真空条件下で、吸着剤材料２７５１Ｂは、二酸化炭素を脱着器２７６０内に放出する。

【０８０６】

二酸化炭素圧縮機２７６６は、水蒸気２７７５が出口空気２７５６から除去された後に、二酸化炭素２７７６を出口空気２７５６から除去する。真空ポンプ２７６４は、真空圧力を脱着器２７６０において確立する。

【０８０７】

作動流体２７３５Ｂは、脱着器２７６０を、およそ７５℃以下（例えば、７０℃以下、６５℃以下、６０℃以下）の、入口温度と比較してより低い温度で出る。乾燥二酸化炭素リーン吸着剤材料２７５１Ｂは、脱着器２７６０を、およそ６０℃以上（例えば、６５℃以上、７０℃以上、７５℃以上）で出て、脱着器２７６０から冷却器２７７０に重力送りされる。

【０８０８】

冷却流体２７４５Ａは、冷却器２７７０に、およそ２５℃以下（例えば、２０℃以下、１５℃以下、１０℃以下）で入る。冷却器２７７０の内部で、冷却流体２７４５Ａは、乾燥二酸化炭素リーン吸着剤材料２７５１Ｃを、およそ３５℃以下（例えば、３０℃以下、２５℃以下、２０℃以下）の温度に冷却する。乾燥二酸化炭素リーン吸着剤材料２７５１Ｃは、冷却され、その後、吸着剤材料は、脱着器システム２７５０によって作製された真空から放出されて、吸着剤が酸化することを防止する。冷却流体２７４５Ｂは、冷却器２７７０を、およそ３５℃以下（例えば、３０℃以下、２５℃以下、２０℃以下）の、入口

温度と比較してより高い温度で出る。
【０８０９】
冷却及び清浄化された吸着剤材料２７５１Ｄは、冷却器２７７０を、エアロック２７７８を介して出る。エアロックは、真空圧力を、脱着器システム２７５０全体において保持する。冷却及び清浄化された吸着剤材料２７５１Ｄは、およそ周囲温度の温度を有する。
【０８１０】
図２８は、例示的な熱交換器２８００を示す。熱交換器２８００は、チューブ２８１０及びプレート２８２０の組み合わせを含む。熱交換器２８００は、本開示の実装態様による蒸発器又は脱着器として実装され得る。
【０８１１】
熱交換器２８００は、頂部における入口２８０２と、底部における出口２８０４と、を含む。自由流動性バルク固体、例えば、吸着剤材料（例えば、本明細書に記載されるいずれかのもの）は、熱交換器２８００に、入口２８０２を介して入ることができ、熱交換器２８００を、出口２８０４を介して出ることができる。バルク固体は、一連の垂直中空熱交換器プレートの間を緩徐に下方に通る。
【０８１２】
流体、例えば、蒸気、熱水、熱油、又は空気は、プレートを通って流れて、バルク固体材料を伝導によって加熱する。質量流量排出送り装置は、均一な生成物速度を作製し、生成物流量を調節する。バルク固体は、垂直ヒーターを、重力によって、吸着剤材料流量を調節するための、出口２８０４における外部計量システムを使用して通る。
【０８１３】
熱交換器２８００を使用して、廃熱は、捕捉及び再使用され得、効率を改善する。可動部品を有しない垂直向きのモジュラー設計に起因して、維持コストが低減され得、機器の整備が容易であることができる。伝導による間接加熱は、バルク固体を加熱するための低グレードの熱を捕捉及び使用することを可能にする。
【０８１４】
図２９は、脱着システムのための例示的な制御システム２９００のブロック図である。脱着システムのための制御システム２９００は、センサを含む。センサは、圧力センサ２９０２、吸着剤流量センサ２９０４、空気流量センサ２９０６、及び熱供給源流体流量センサ２９０５を含むことができる。脱着システムのための制御システム２９００は、コントローラ２９１０を含む。
【０８１５】
センサは、センサデータをコントローラ２９１０に出力する。センサデータに基づいて、コントローラ２９１０は、制御システム２９００の構成要素を制御する。構成要素は、例えば、蒸発器ポンプ２５５６、脱着器ポンプ２５６６、蒸発器入口及び出口弁２９１６、並びに脱着器入口及び出口弁２９１８を含むことができる。構成要素はまた、例えば、吸着剤材料を蒸発器の出口から脱着器の入口に搬送するためのコンベヤシステムを含むことができる。
【０８１６】
いくつかの例において、コントローラ２９１０は、蒸発器ポンプ２５５６及び脱着器ポンプ２５６６を制御することによって、それぞれ、蒸発器及び脱着器における真空圧力を増加又は減少させることができる。いくつかの例において、ガス分析器は、水２５５５及び二酸化炭素２５６５の出力を測定して、脱着システム２５００の効率を定量化するために使用され得る。
【０８１７】
コントローラ２９１０は、蒸発器入口及び出口弁２９１６を制御することによって、蒸発器を通る吸着剤材料の流量を増加又は減少させることができる。コントローラ２９１０は、脱着器入口及び出口弁２９１８を制御することによって、脱着器を通る吸着剤材料の流量を増加又は減少させることができる。
【０８１８】

コントローラ２９１０は、制御システム２９００の構成要素を制御して、システムのパラメータを制御することができる。パラメータは、例えば、蒸発器の内部の圧力、脱着器の内部の圧力、蒸発器を通る吸着剤材料の流量、脱着器を通る吸着剤材料の流量、吸着剤材料の水分含有量、吸着剤材料の二酸化炭素含有量などを含むことができる。

【０８１９】

コントローラは、１つ以上のメモリデバイス、１つ以上の大容量記憶デバイス、及び１つ以上のプロセッサを含むことができ、１つ以上のプロセッサは、ＣＰＵ又はコンピュータ、アナログ及び／又はデジタル入力／出力接続、ステッパモータコントローラボードなどを有する。コントローラは、いずれかの方法を実行するように、又は本明細書に記載されるいずれかのパラメータを制御する（例えば、システム制御ソフトウェアを実行すること、又はコントローラ内にハードコーディングされた制御ロジックを実行することによる）ように構成され得る。

【実施例】

【０８２０】

実施例１

炭素捕捉のための可逆的アミノシラン官能化された多孔質シリカ

実施例１．１～１．４は、概して、官能化された多孔質シリカに関し、より具体的には、二酸化炭素を可逆的に捕捉するための官能化された多孔質シリカに関する。

【０８２１】

実施例１．１

Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミングラフト

３つ口丸底フラスコにおいて、４．８５ｇ（８０ｍｍｏｌ）のシリカ粒子を、４０ｍＬの溶媒（例えば、トルエン、ヘキサン、シクロヘキサン、及び／又はＴＨＦ）中に周囲温度で添加した。シリカ粒子を、かき混ぜ、溶媒中に２時間（ｈｏｕｒｓ）（時間（ｈｒｓ））浸した。Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミンを、上記の溶液中に、２．３ｇ～４．７ｇの範囲のモル比（例えば、８ｍｍｏｌ～１６ｍｍｏｌ、例えば、５：１～１０：１の範囲のシリカ粒子対ポリアミン材料のモル比）で添加した。混合物を、６０℃以上（例えば、最大９０℃）で加熱し、かき混ぜた。温度は、選択される溶媒に依存する。混合物を、１８時間かき混ぜた（いくつかの場合において、混合を２４時間継続した）。混合物を、室温に冷却した。官能化されたシリカ粒子を、溶媒から濾過し、かき混ぜながら２回洗浄し、毎回４０ｍＬの体積の溶媒で洗浄した。官能化されたシリカ粒子を、真空オーブンにおいて５０℃で１２時間乾燥させた。

【０８２２】

実施例１．２

［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシラングラフト

３つ口丸底フラスコにおいて、４．８５ｇ（８０ｍｍｏｌ）のシリカ粒子を、４０ｍＬの溶媒（例えば、トルエン、ヘキサン、シクロヘキサン、及び／又はＴＨＦ）中に周囲温度で添加した。シリカ粒子を、かき混ぜ、溶媒中に２時間浸した。［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシランを、上記溶液の中に、２．２ｇ～４．５ｇ（例えば、８ｍｍｏｌ～１６ｍｍｏｌ、例えば、５：１～１０：１の範囲のシリカ粒子対アミン材料のモル比）で添加した。混合物を、６０℃以上（例えば、最大９０℃）で加熱し、かき混ぜた。温度は、選択される溶媒に依存する。混合物を、１８時間かき混ぜた。混合物を、室温に冷却した。官能化されたシリカ粒子を、溶媒から濾過し、かき混ぜながら２回洗浄し、毎回４０ｍＬの体積の溶媒で洗浄した。官能化されたシリカ粒子を、真空オーブンにおいて５０℃で１２時間乾燥させた。

【０８２３】

実施例１．３

ビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミングラフト

２つ以上のシラン部分（例えば、２つのトリメトキシシラン又はトリエトキシシラン官能基）を同じ分子において有するシラン化合物、例えば、ビス［３－（トリメトキシシリ

ル）プロピル］アミンを使用することは、シラン基とシリカとの間の複数の相互作用を容易にすることができ、潜在的に、シリカ表面へのシラン結合の結合安定性を改善する。

【０８２４】

ビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミン）を反応に添加するために、［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシラングラフトについてと同じ手順に従った。

【０８２５】

３つ口丸底フラスコにおいて、４．８５ｇ（８０ｍｍｏｌ）のシリカ粒子を、４０ｍＬの溶媒（例えば、トルエン、ヘキサン、シクロヘキサン、及び／又はＴＨＦ）中に周囲温度で添加した。シリカ粒子を、かき混ぜ、溶媒中に２時間浸した。［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシランを、上記溶液の中に、２．２ｇ～４．５ｇ（例えば、８ｍｍｏｌ～１６ｍｍｏｌ、例えば、５：１～１０：１の範囲のシリカ粒子対アミン材料のモル比）で添加した。ビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミン）を、上記の溶液中に、０．６８ｇ（例えば、２ｍｍｏｌ、４０：１のシリカ粒子対ビス－アミン材料比）で添加した。混合物を、６０℃以上（例えば、最大９０℃）で加熱し、かき混ぜた。温度は、選択される溶媒に依存する。混合物を、１８時間かき混ぜた。混合物を、室温に冷却した。官能化されたシリカ粒子を、溶媒から濾過し、かき混ぜながら２回洗浄し、毎回４０ｍＬの体積の溶媒で洗浄した。官能化されたシリカ粒子を、真空オーブンにおいて５０℃で１２時間乾燥させた。

【０８２６】

実施例１．４

実験結果

本明細書に記載されるプロセス（例えば、図５Ａ又は非限定的な実施形態Ａにおけるもの）を使用して生成された官能化されたシリカは、CO_2取り込み測定（例えば、図１２Ａ～１２Ｂにおける試料ホルダを使用するもの）によって特徴付けられる。

【０８２７】

図３は、４８分（ｍｉｎｕｔｅｓ）（分（ｍｉｎｓ））における、官能化されたシリカ基質によって吸着されたCO_2についての破過吸着曲線を示す線グラフである。上部曲線３０２は、ｐｐｍの単位におけるベースライン環境CO_2濃度を表す。下部曲線３０４は、吸着プロセス中に変化する結果CO_2濃度（ｐｐｍ）を表す。

【０８２８】

吸着プロセスの開始時に（線３０４）、吸着剤は、CO_2を非常に迅速に吸着し、これは、結果CO_2濃度（ｐｐｍ）が非常に迅速に低下することをもたらす。次いで、CO_2濃度は、漸増する。２つの曲線間の面積×流量×吸着持続期間（経時的な曲線積分×流量）は、吸着期間で吸着された総CO_2（ｍｏｌの単位）である。吸着されたCO_2の総ｍｏｌを、試験において使用された吸着剤の量（質量）によって割ったものを使用することは、１ｋｇの吸着剤当たりのｍｏｌのCO_2の値を提供する。以下に示される試料について、取り込みは、１．５ｍｏｌのCO_2／ｋｇの吸着剤である。試料ホールドにおいて添加された適切な量の吸着剤に対して適切な流量で、CO_2濃度は、大質量低流量の場合について０ｐｐｍに低減され得る。

【０８２９】

実施例２

炭素捕捉のためのシラン及びポリマーアミン官能化された多孔質シリカ

実施例２．１～２．３は、概して、官能化された多孔質シリカに関し、より具体的には、二酸化炭素を可逆的に捕捉するための官能化された多孔質シリカに関する。

【０８３０】

実施例２．１

Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミン及びＰＥＩグラフト

３つ口丸底フラスコにおいて、４．８５ｇ（８０ｍｍｏｌ）のシリカ粒子を、４０ｍＬの溶媒（例えば、トルエン、ヘキサン、シクロヘキサン、及び／又はＴＨＦ）中に周囲温

度で添加した。シリカ粒子を、かき混ぜ、溶媒中に２時間浸した。Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミンを、上記の溶液中に、２．３ｇ～４．７ｇの範囲のモル比（例えば、８ｍｍｏｌ～１６ｍｍｏｌ、例えば、５：１～１０：１の範囲のシリカ粒子対アミン材料のモル比）で添加した。混合物を、６０℃以上（例えば、最大９０℃）で加熱し、かき混ぜた。温度は、選択される溶媒に依存する。混合物を、１８時間かき混ぜた（いくつかの場合において、混合を２４時間継続した）。混合物を、室温に冷却した。官能化されたシリカ粒子を、溶媒から濾過し、かき混ぜながら２回洗浄し、毎回４０ｍＬの体積の溶媒で洗浄した。官能化されたシリカ粒子を、真空オーブンにおいて５０℃で１２時間乾燥させた。代替として、［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシランを、溶液中に、２．２ｇ～４．５ｇ（例えば、８ｍｍｏｌ～１６ｍｍｏｌ、例えば、５：１～１０：１の範囲のシリカ粒子対アミン材料のモル比）で添加し得る。

【０８３１】

第２の丸底フラスコにおいて、３０ｍＬのメタノール又は溶媒混合物（例えば、シクロヘキサン：エタノール＝２：１）、上記のステップからの５ｇのシラン処理シリカ、及び１．５ｇのポリエチレンイミン（ＰＥＩ）又は他の第２のアミン（シリカに対して３０重量％）を添加した。混合物を、１時間かき混ぜた。溶媒を、官能化されたシリカから、蒸発、例えば、回転蒸発器介して乾燥させて、官能化されたシリカを回収した。官能化されたシリカ粒子を、真空オーブンにおいて５０℃で１２時間乾燥させた。第２のステップを、大規模なプロセスとして、例えば、真空乾燥をアミン／溶媒混合物スプレープロセスと一緒に使用して実行することができる。

【０８３２】

実施例２．２

ビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミングラフト

２つ以上のシラン部分（例えば、２つのトリメトキシシラン又はトリエトキシシラン官能基）を同じ分子において有するシラン化合物、例えば、ビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミンを使用することは、シラン基とシリカとの間の複数の相互作用を容易にすることができ、潜在的に、シリカ表面へのシラン結合の結合安定性を改善する。

【０８３３】

ビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミン）を反応に添加するために、［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシライングラフトについてと同じ手順に従った。

【０８３４】

３つ口丸底フラスコにおいて、４．８５ｇ（８０ｍｍｏｌ）のシリカ粒子を、４０ｍＬの溶媒（例えば、トルエン、ヘキサン、シクロヘキサン、及び／又はＴＨＦ）中に周囲温度で添加した。シリカ粒子を、かき混ぜ、溶媒中に２時間浸した。［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシランを、上記溶液の中に、２．２ｇ～４．５ｇ（例えば、８ｍｍｏｌ～１６ｍｍｏｌ、例えば、５：１～１０：１の範囲のシリカ粒子対アミン材料のモル比）で添加した。ビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミン）を、上記の溶液中に、０．６８ｇ（例えば、２ｍｍｏｌ、４０：１のシリカ粒子対ビス－アミン材料比）で添加した。混合物を、６０℃以上（例えば、最大９０℃）で加熱し、かき混ぜた。温度は、選択される溶媒に依存する。混合物を、１８時間かき混ぜた。混合物を、室温に冷却した。官能化されたシリカ粒子を、溶媒から濾過し、かき混ぜながら２回洗浄し、毎回４０ｍＬの体積の溶媒で洗浄した。官能化されたシリカ粒子を、真空オーブンにおいて５０℃で１２時間乾燥させた。

【０８３５】

実施例２．３

実験結果

本明細書に記載されるプロセス（例えば、図５Ｂ又は非限定的な実施形態Ｂにおけるもの）を使用して生成された官能化されたシリカは、CO_2取り込み測定（例えば、図１２

Ａ～１２Ｂにおける試料ホルダを使用するもの）によって特徴付けられる。
【０８３６】
図４は、サイクル数、例えば、吸収及び脱着サイクルの数（ｘ軸）に対する、ｍｏｌのCO_2／ｋｇでのCO_2取り込み（左ｙ軸）及び環境空気の１００万分率（ｐｐｍ）でのCO_2濃度（右ｙ軸）を示す線グラフである。上部線４０２は、単一の脱着中の官能化されたシリカ試料の総CO_2取り込みを示し、下部線４０４は、ガス分析器によって測定された場合のCO_2濃度を示す。上部線４０２は、約１．６ｍｏｌのCO_2／ｋｇのCO_2取り込み値のあたりで変動する。
【０８３７】
CO_2取り込みは、CO_2濃度とともに変動し、これは、増加したCO_2濃度が取り込みと相関することを示す。上部線４０２における円のデータ点は、７０℃での２時間の延長された活性化時間を示す。延長された活性化時間は、隣接するデータ点の上のCO_2取り込みを増加させた。
【０８３８】
実施例３
炭素捕捉のための、活性ヒドロキシル官能基を有する金属酸化物構造体
実施例３．１～３．２は、概して、官能化されたＭＯＦに関し、より具体的には、二酸化炭素を可逆的に捕捉するための官能化されたＭＯＦに関する。
【０８３９】
実施例３．１
ＭＯＦ合成
一例において、０．２ｇの四塩化ジルコニウム（$ZrCl_4$）を、１０ｍＬのＮ，Ｎ－ジメチルホルムアミド（ＤＭＦ）に添加して、懸濁液混合物を作製することができる。０．１６ｇの２－ヒドロキシテレフタル酸を、懸濁液混合物に添加し得る。任意選択で、２．４ｇの安息香酸を、調節剤として添加し得る。この懸濁液混合物を、完全な溶解が観察され得るまで撹拌し得る。
【０８４０】
懸濁液混合物を、２０ｍＬのガラスバイアルに添加し得、１２０℃のオーブンにおいて４８時間（ｈｏｕｒｓ）（時間（ｈｒ））置き得る。得られたＵｉＯ－６６－ＯＨ　ＭＯＦ結晶粉末（添加されたヒドロキシ基を有するもの）を、冷却し得、新鮮なＤＭＦ及びエタノールで洗浄し得る。結晶粉末を、６０℃の真空オーブンにおいて１２時間乾燥させ得る。
【０８４１】
１ｇの得られたＵｉＯ－６６－ＯＨ　ＭＯＦ粉末を、２０ｍＬのテトラヒドロフラン（ＴＨＦ）中に、例えば、１：２０重量／体積のＭＯＦ粉末対ＴＨＦの比で懸濁させ得る。任意選択で、非配位塩基、例えば、２，６－ルチジンを、過剰に（３ｍＬ）添加し得る。０．２ｇのトリス（ジメチルアミノ）クロロシランを、可用なヒドロキシ基に対して過剰に添加し得る。反応を、４０℃に加熱し得、１２時間維持して、シリル化ＭＯＦを作製することができる。生成物を、新鮮なＤＭＦで洗浄し得、続いて、ＴＨＦの第２の洗浄を行い得る。シリル化ＭＯＦを、６０℃の真空オーブンにおいて１２時間乾燥させ得る。
【０８４２】
実施例３．２
実験結果
本明細書に記載されるプロセス（例えば、図５Ｃ又は非限定的な実施形態Ｃにおけるもの）を使用して生成された官能化されたＭＯＦは、CO_2取り込み測定（例えば、図１２Ａ～１２Ｂにおける試料ホルダを使用するもの）によって特徴付けられ得る。
【０８４３】
実施例４
炭素捕捉のためのポリマーアミンイオン交換樹脂
実施例４．１～４．２は、概して、官能化されたイオン交換樹脂に関し、より具体的に

は、二酸化炭素を可逆的に捕捉するためのイオン交換樹脂に関する。
【０８４４】
実施例４．１
ペンタエチレンヘキサミン及びＰＥＩグラフト
ガラスバイアルにおいて、１リットル当たり０．７当量（当量／Ｌ）～０．９当量／Ｌの範囲のスルホン酸基で官能化された１０ｇのＰｕｒｏｌｉｔｅ（著作権）Ｍａｃｒｏｎｅｔ（商標）ＭＮ５０２酸性樹脂ビーズ（球状ビーズの形態での、ジビニルベンゼンと架橋されたマクロ多孔質ポリスチレン、Ｐｕｒｏｌｉｔｅ（著作権）、Ｅｃｏｌａｂ Ｉｎｃ．社、Ｓａｉｎｔ Ｐａｕｌ，ＭＮから市販されている）試料を、洗浄し、メタノール及びアセトンの各々２００ｍＬ（例えば、２回の２００ｍＬの洗浄、メタノールの１回の洗浄及びアセトンの１回の洗浄）で浸した。
【０８４５】
樹脂ビーズを、５０℃の真空オーブンにおいて５０ｍｂａｒで１２時間乾燥させた。乾燥したビーズを、乳鉢及び乳棒で粉砕し、２５０μｍのステンレス鋼メッシュふるいに通した。
【０８４６】
１０ｍＬのメタノール、０．５ｇの分岐鎖ポリエチレンイミン（８００ダルトンの重量平均分子量（Ｍｗ）、６００ダルトンの数平均分子量（Ｍｎ））、及び０．５ｇのペンタエチレンヘキサミンの溶液を、２０ｍＬのガラスバイアル内に分注した。１ｇのふるい分けされた粉末を、メタノール、ＰＥＩ、及びペンタエチレンヘキサミン溶液を収容するガラスバイアル内に分注した。
【０８４７】
バイアルに栓をし、バイアルを、回転デバイス（例えば、Ｓｃｉｌｏｇｅｘ，ＬＬＣ、Ｒｏｃｋｙ Ｈｉｌｌ，ＣＴから入手可能なＳＣＩＬＯＧＥＸ ＳＣＩ－Ｔ６－Ｓアナログチューブローラー）上に置いて、１２時間混合した。官能化された粉末を、液体溶液をデカントすることによって回収した。
【０８４８】
回収された粉末を、１５ｍＬの１：１のシクロヘキサン：ＭｅＯＨ混合物で遠心チューブにおいて洗浄した。洗浄溶液をデカントし、回収された生成物を、５０℃の真空オーブンにおいて５０ｍｂａｒで１２時間乾燥させた。任意選択で、洗浄混合物を遠心分離し、その後、洗浄溶液をデカントする。
【０８４９】
実施例４．２
実験結果
本明細書に記載されるプロセス（例えば、図５Ｄ又は非限定的な実施形態Ｄにおけるもの）を使用して生成された官能化された樹脂は、CO_2取り込み測定（例えば、図１２Ａ～１２Ｂにおける試料ホルダを使用するもの）によって特徴付けられ得る。
【０８５０】
実施例５
炭素捕捉のためのポリマーアミンシリカ酸化物
実施例５．１～５．３は、概して、官能化された多孔質シリカに関し、より具体的には、二酸化炭素を可逆的に捕捉するための官能化された多孔質シリカに関する。
【０８５１】
実施例５．１
ＰＥＩ及びＮ－［３－（トリメトキシシリル）プロピル］エチレンジアミングラフト
３つ口丸底フラスコにおいて、４．８５ｇ（例えば、８０ｍｍｏｌ）のシリカ粒子を、６０ｍＬの溶媒（例えば、ヘキサン）中に周囲温度で添加した。混合物を、還流条件下で（例えば、溶媒蒸気を凝縮器によって捕捉した）６５℃（例えば、６５℃～７０℃の範囲内）に加熱した。
【０８５２】

２．３ｇのＰＥＩ（例えば、５３ｍｍｏｌ）を、３ｍＬのエタノール中に溶解した。ＰＥＩ／エタノール混合物を、加熱されたシリカ／溶媒混合物に添加した。混合物を、ＰＥＩ分子量に依存して６～１８時間かき混ぜた（いくつかの場合において、混合を２４時間継続した）。

【０８５３】

３．６ｇ（例えば、１６ｍｍｏｌ）のＮ－［３－（トリメトキシシリル）プロピル］エチレンジアミンを、フラスコに添加した。混合物を、１６～１８時間かき混ぜた。

【０８５４】

混合物を、室温に冷却した。官能化されたシリカ粒子を、溶媒から濾過し、かき混ぜながら５０ｍＬの体積の溶媒で洗浄した。代替として、混合物を遠心分離し得、溶媒をデカントして、官能化されたシリカ粒子を除去し得、その後、洗浄を行い得る。

【０８５５】

実施例５．２

ビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミングラフト

２つのトリメトキシシラン又はトリエトキシシラン官能基を分子の両方の末端において有するシラン供給源、例えば、ビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミンを使用することは、シラン基がシリカに結合する２つの点を容易にすることができ、潜在的に、シリカ表面へのシラン結合の結合安定性を改善する。

【０８５６】

ビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミン）を反応に添加するために、ｎ－［３－（トリメトキシシリル）プロピル］エチレンジアミングラフトについてと同じ手順に従った。

【０８５７】

３つ口丸底フラスコにおいて、４．８５ｇ（例えば、８０ｍｍｏｌ）のシリカ粒子を、６０ｍＬの溶媒（例えば、ヘキサン）中に周囲温度で添加した。混合物を、還流条件下で（例えば、溶媒蒸気を凝縮器によって捕捉した）６５℃（例えば、６５℃～７０℃の範囲内）に加熱した。

【０８５８】

２．３ｇのＰＥＩ（例えば、５３ｍｍｏｌ）を、３ｍＬのエタノール中に溶解した。ＰＥＩ／エタノール混合物を、加熱されたシリカ／溶媒混合物に添加した。混合物を、ＰＥＩ分子量に依存して６～１８時間かき混ぜた（いくつかの場合において、混合を２４時間継続した）。

【０８５９】

３．６ｇ（例えば、１６ｍｍｏｌ）のＮ－［３－（トリメトキシシリル）プロピル］エチレンジアミン及び０．６８ｇのビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミン）（例えば、２ｍｍｏｌ、４０：１のシリカ粒子対ビス－アミン材料比）を、フラスコに添加した。混合物を、１６～１８時間かき混ぜた。

【０８６０】

混合物を、室温に冷却した。官能化されたシリカ粒子を、溶媒から濾過し、かき混ぜながら５０ｍＬの体積の溶媒で洗浄した。代替として、混合物を遠心分離し得、溶媒をデカントして、官能化されたシリカ粒子を除去し得、その後、洗浄を行い得る。

【０８６１】

実施例５．３

実験結果

本明細書に記載されるプロセス（例えば、図５Ｅ又は非限定的な実施形態Ｅにおけるもの）を使用して生成された官能化されたシリカは、CO_2取り込み測定（例えば、図１２Ａ～１２Ｂにおける試料ホルダを使用するもの）によって特徴付けられ得る。

【０８６２】

実施例６

水ベース方法からの、炭素捕捉のためのポリマーアミン及びシランを含む多孔質シリカ

実施例６．１～６．３は、概して、官能化された多孔質シリカに関し、より具体的には、二酸化炭素を可逆的に捕捉するための官能化された多孔質シリカに関する。

【０８６３】

実施例６．１

５０ｇのシリカをポリマーアミン及びシラン化合物でコーティングする

大きいビーカーにおいて、２００ｍＬの水をかき混ぜた（例えば、４：１の重量比の水対シリカ）。１０ｇのＰＥＩを、水に添加し、かき混ぜた（例えば、シリカに対して２０％（重量／重量）のＰＥＩ）。アミノシラン材料を、ＰＥＩ／水混合物に、３０ｇ（シリカに対して６０％（重量／重量））の範囲で添加した。混合物を、５分間かき混ぜて、加水分解を可能にした。

【０８６４】

５０ｇの乾燥シリカ酸化物材料を、混合物溶液に添加した。シリカ酸化物材料の試料は、０．７ｍＬ／ｇ超の細孔体積を有した。混合物を、シリカが溶液中に分配されるまでかき混ぜた。溶液を、室温で１０分間かき混ぜ、これにより、液体混合物を、シリカによって吸収させた。

【０８６５】

シリカ／水を、回転蒸発機器において乾燥させて、残留水を除去し、湿潤シリカ固体を回収した。湿潤シリカ固体を、オーブンにおいて１２０℃で５分～２０分間置いた。

【０８６６】

実施例６．２

ビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミングラフト

２つのトリメトキシシラン又はトリエトキシシラン官能基を分子の両方の末端において有するシラン供給源、例えば、ビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミンを使用することは、シラン基がシリカに結合する２つの点を容易にし、潜在的に、シリカ表面へのシラン結合の結合安定性を改善する。

【０８６７】

ビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミン）を反応に添加するために、他のアミノシラングラフトについてと同じ手順に従った。

【０８６８】

大きいビーカーにおいて、２００ｍＬの水をかき混ぜた（例えば、４：１の重量比の水対シリカ）。１０ｇのＰＥＩを、水に添加し、かき混ぜた（例えば、シリカに対して２０％（重量／重量）のＰＥＩ）。アミノシラン材料を、ＰＥＩ／水混合物に、３０ｇ～４０ｇ（シリカに対して６０％～８０％（重量／重量））の範囲で添加した。ビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミン）を、ＰＥＩ／水混合物に、５ｇ～１０ｇ（シリカに対して１０～２０％（重量／重量））の範囲で添加した。混合物を、５分間かき混ぜて、加水分解を可能にした。

【０８６９】

５０ｇの乾燥シリカ酸化物材料を、混合物溶液に添加した。シリカ酸化物材料の試料は、０．７ｍＬ／ｇ超の細孔体積を有した。混合物を、シリカが溶液中に分配されるまでかき混ぜた。溶液を、室温で１０分間かき混ぜ、これにより、液体混合物を、シリカによって吸収させた。

【０８７０】

シリカ／水を、回転蒸発機器において乾燥させて、残留水を除去し、湿潤シリカ固体を回収した。湿潤シリカ固体を、オーブンにおいて１２０℃で５～２０分間置いた。

【０８７１】

実施例６．３

実験結果

本明細書に記載されるプロセス（例えば、図５Ｆ又は非限定的な実施形態Ｆにおけるもの）を使用して生成された官能化されたシリカは、CO_2取り込み測定（例えば、図１２Ａ～１２Ｂにおける試料ホルダを使用するもの）によって特徴付けられ得る。

【０８７２】
実施例７
炭素捕捉のためのポリマーアミン多孔質シリカ
　実施例７．１～７．２は、概して、官能化された多孔質シリカに関し、より具体的には、二酸化炭素を可逆的に捕捉するための官能化された多孔質シリカに関する。
【０８７３】
実施例７．１
ＰＥＩグラフト
　大きいビーカーにおいて、５０ｇのシリカを、１００ｍＬのメタノール中に分散させる。全混合物を、１０分間穏やかにかき混ぜる。次いで、１２．５ｇのＰＥＩを、上記の混合物に添加し、全混合物がシリカによって吸収されることを可能にする。
【０８７４】
　シリカ／メタノールを、回転蒸発機器において乾燥させて、残留メタノールを除去し、湿潤シリカ固体を回収した。湿潤シリカ固体を、真空オーブンにおいて７０℃で一晩置いた。
【０８７５】
実施例７．２
実験結果
　本明細書に記載されるプロセス（例えば、図５Ｇ又は非限定的な実施形態Ｇにおけるもの）を使用して生成された官能化されたシリカは、CO_2取り込み測定（例えば、図１２Ａ～１２Ｂにおける試料ホルダを使用するもの）によって特徴付けられ得る。
【０８７６】
実施例８
炭素捕捉のための小分子ポリアミン官能化された多孔質シリカ
　実施例８．１～８．２は、概して、官能化された多孔質シリカに関し、より具体的には、二酸化炭素を可逆的に捕捉するための官能化された多孔質シリカに関する。
【０８７７】
実施例８．１
Ａｍｉｘ　１０００グラフト
　大きいビーカーにおいて、５０ｇのシリカを、１００ｍＬのメタノール中に分散させる。全混合物を、１０分間穏やかにかき混ぜる。次いで、１２．５ｇ～２５ｇ（２５重量％～５０重量％）のＡｍｉｘ　１０００を、上記の混合物に添加し、全混合物がシリカによって吸収されることを可能にする。
【０８７８】
　シリカ／メタノールを、回転蒸発機器において乾燥させて、残留メタノールを除去し、湿潤シリカ固体を回収した。湿潤シリカ固体を、真空オーブンにおいて７０℃で一晩置いた。
【０８７９】
実施例８．２
実験結果
　本明細書に記載されるプロセス（例えば、図５Ｈ又は非限定的な実施形態Ｈにおけるもの）を使用して生成された官能化されたシリカは、CO_2取り込み測定（例えば、図１２Ａ～１２Ｂにおける試料ホルダを使用するもの）によって特徴付けられ得る。
【０８８０】
実施例９
ポリマーアミン及びシラン官能化された多孔質シリカを生成する浸漬コーティング方法
　実施例９．１は、概して、官能化された多孔質シリカに関し、より具体的には、二酸化炭素を可逆的に捕捉するための官能化された多孔質シリカに関する。
【０８８１】
実施例９．１

実験結果
本明細書に記載されるプロセス（例えば、図５Ｉ又は非限定的な実施形態Ｉにおけるもの）を使用して生成された官能化されたシリカは、CO_2取り込み測定（例えば、図１２Ａ～１２Ｂにおける試料ホルダを使用するもの）によって特徴付けられ得る。
【０８８２】
実施例１０
非限定的な水性溶媒ベースの方法
これは、水性溶媒ベースの反応についての非限定的な例であり、水性溶媒ベースの反応において、第１の試薬及び第２の試薬を、１つのステップにおいて添加し、次いで、過剰な溶液を、最後に除去する。１Ｌのビーカーにおいて、１１．５ｇのＰＥＩ及び５３ｇのＮ－［３－（トリメトキシシリル）プロピル］エチレンジアミンを、２６０ｍＬの水中に添加する。次いで、溶液を（例えば、少なくとも１０分間）かき混ぜて、溶液がよく混合されることを可能にし、ＰＥＩを水中に完全に溶解する。次いで、１００ｇのシリカを、溶液中に注ぐ。シリカ粒子の分解を回避するために、穏やかな撹拌を、緩徐にかつ／又は定期的に少なくとも１０分間適用して、溶液がシリカ中に拡散することを可能にする。その後、過剰な液体をデカントしてもよく、又は官能化されたシリカ粒子を、溶液から濾過してもよい。次いで、官能化されたシリカ粒子を、例えば、真空オーブンにおいて１２時間６０℃で乾燥させ得る。
【０８８３】
実施例１１
非限定的な水性溶媒ベースの方法
これは、水性溶媒ベースの反応についての別の非限定的な例であり、水性溶媒ベースの反応において、第１の試薬及び第２の試薬を、１つのステップにおいて添加し、過剰な溶液を、最後に除去しない。１Ｌのビーカーにおいて、７．７ｇのＰＥＩ及び３６ｇのＮ－［３－（トリメトキシシリル）プロピル］エチレンジアミンを、１６０ｍＬの水中に添加する。次いで、溶液を（例えば、少なくとも１０分間）かき混ぜて、溶液がよく混合されることを可能にし、ＰＥＩを水中に完全に溶解する。次いで、１００ｇのシリカを、溶液中に注ぐ。シリカ粒子の分解を回避するために、穏やかな撹拌を、緩徐にかつ／又は定期的に少なくとも１０分間適用して、溶液がシリカ中に拡散することを可能にする。その後、官能化されたシリカ粒子を、例えば、真空オーブンにおいて１２時間６０℃で直接乾燥させ得る。
【０８８４】
非限定的な実施形態Ａ
Ａ１．　組成物であって、
多孔質シリカ粒子と、
シラン部分及びアミン部分を含む化合物であって、化合物のシラン部分が、多孔質シリカ粒子の各々の表面に化学結合している、化合物と、を含む、組成物。
Ａ２．　組成物が、大気CO_2を、第１の温度範囲で吸着し、以前に吸着されたCO_2を、第１の温度範囲よりも高い第２の温度範囲で脱着する、実施形態Ａ１に記載の組成物。
Ａ３．　組成物が、大気CO_2を、第１のガス圧力で吸着し、以前に吸着されたCO_2を、第１のガス圧力よりも低い第２のガス圧力で脱着する、実施形態Ａ２に記載の組成物。
Ａ４．　組成物が、大気CO_2を、第１のCO_2濃度で吸着し、以前に吸着されたCO_2を、第１のCO_2濃度よりも低い第２のCO_2濃度で脱着する、実施形態Ａ２に記載の組成物。
Ａ５．　組成物が、多孔質シリカ粒子と、化合物と、から本質的になる、実施形態Ａ１に記載の組成物。
Ａ６．　多孔質シリカ粒子が、複数の細孔を含む、実施形態Ａ１に記載の組成物。
Ａ７．　複数の細孔が、６０～４００オングストローム又は１～２００ｎｍの範囲の直径を有する、実施形態Ａ６に記載の組成物。
Ａ８．　複数の細孔が、０．５ｍＬ／ｇ超の体積を有する、実施形態Ａ６に記載の組成物。

Ａ９．　多孔質シリカ粒子が、１乾燥グラム当たり１００ｍ^{2}超の総表面積を有する、実施形態Ａ１に記載の組成物。
Ａ１０．　組成物が、１乾燥キログラムの吸着剤当たり０．５ｍｏｌ～２ｍｏｌのCO_2を吸着する、実施形態Ａ１に記載の組成物。
Ａ１１．　組成物が、CO_2を、５％～９５％の相対湿度の範囲の相対湿度で吸着する、実施形態Ａ１に記載の組成物。
Ａ１２．　第２の温度範囲が、６５℃～９０℃の範囲である、実施形態Ａ２に記載の組成物。
Ａ１３．　第２のガス圧力が、１．５ｐｓｉ又は２ｐｓｉ未満である、実施形態Ａ３に記載の組成物。
Ａ１４．　第１のCO_2濃度が、４２０ｐｐｍ未満である、実施形態Ａ１に記載の組成物。
Ａ１５．　化合物が、１～３つのシラン部分を含む、実施形態Ａ１に記載の組成物。
Ａ１６．　シラン部分が、メトキシシラン、エトキシシラン、アルコキシシラン、クロロシラン、アルコキシシラノール、シラントリオール、又はアミノシランオリゴマーを含む、実施形態Ａ１に記載の組成物。
Ａ１７．　アミン部分が、一級、二級、又は三級アミン基である、実施形態Ａ１に記載の組成物。
Ａ１８．　化合物が、２つ以上のアミン部分を含む、実施形態Ａ１に記載の組成物。
Ａ１９．　化合物が、（３－アミノプロピル）トリメトキシシラン、（３－アミノプロピル）トリエトキシシラン、［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシラン、Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミン、３－アミノプロピルシラントリオール、Ｎ－（２－アミノエチル）－３－アミノプロピルシラントリオール、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシラン、トリス（ジメチルアミノ）クロロシラン、又はアミノシランオリゴマー（例えば、ＥｖｏｎｉｋからのＶＰＳ　ＳＩＶＯ　２８０）を含む、実施形態Ａ１に記載の組成物。
Ａ２０．　抗酸化剤部分を、多孔質シリカ粒子に対して５％の重量比で更に含む、実施形態Ａ１に記載の組成物。
Ａ２１．　抗酸化剤部分が、２，２－チオジエタノール、２－ヒドロキシエチルジスルフィド、及び３，３’－ジチオジプロピオン酸を含むリストから選択される有機硫黄含有化合物である、実施形態Ａ２０に記載の組成物。
Ａ２２．　方法であって、
　シラン部分及びアミン部分を含む第１の化合物を含む第１の試薬を、液体及び多孔質シリカ粒子を含む液体混合物中に、第１の化合物のシラン部分が多孔質シリカ粒子の表面に化学結合することを引き起こして、修飾されたシリカ粒子を形成するのに十分な条件下で導入することと、
　修飾されたシリカ粒子を液体から除去することと、を含む、方法。
Ａ２３．　液体混合物が、液体及び多孔質シリカ粒子を、少なくとも５ｍＬ／ｇ又は０．５～３ｍＬ／ｇの比で含む、実施形態Ａ２２に記載の方法。
Ａ２４．　第２の試薬が、液体混合物に、５：１～１０：１の範囲の多孔質シリカ粒子対第１の試薬のモル比、又は２０％～８０％（重量／重量）の第２の試薬対多孔質シリカ粒子の比で添加される、実施形態Ａ２２に記載の方法。
Ａ２５．　液体が、トルエン、ヘキサン、シクロヘキサン、又はテトラヒドロフランを含むリストから選択される有機溶媒を含む、実施形態Ａ２２に記載の方法。
Ａ２６．　修飾されたシリカ粒子を液体から除去した後に、第２の液体を、修飾されたシリカ粒子に、ある持続期間にわたって導入することと、
　修飾されたシリカ粒子を第２の液体から除去することと、を更に含む、実施形態Ａ２２に記載の方法。
Ａ２７．　第２の液体が、第２の体積の液体を含む、実施形態Ａ２６に記載の方法。
Ａ２８．　修飾されたシリカ粒子を、真空オーブンにおいて５０℃で、水和閾値に達するまで乾燥させることを更に含む、実施形態Ａ２２又は実施形態Ａ２６に記載の方法。

Ａ２９．　第１の試薬を液体混合物中に導入した後に、液体混合物を撹拌することと、撹拌中に、第２の試薬を導入することと、を更に含む、実施形態Ａ２２に記載の方法。
Ａ３０．　第２の試薬を導入した後の液体混合物を、第１の温度に、６時間超の持続期間にわたって加熱することを更に含む、実施形態Ａ２２又は実施形態Ａ２９に記載の方法。
Ａ３１．　加熱後に、液体混合物を冷却することを更に含む、実施形態Ａ３０に記載の方法。
Ａ３２．　実施形態Ａ２２に記載の方法によって修飾された多孔質シリカ粒子を含む、組成物。
Ａ３３．　実施形態Ａ１に記載の組成物を使用して、大気CO_2を空気から直接空気捕捉によって除去することを含む、方法。
Ａ３４．　化合物が、疎水性化合物を更に含む、実施形態Ａ１に記載の組成物。
Ａ３５．　疎水性化合物が、疎水性シラン化合物又は疎水性ポリマーである、実施形態Ａ３４に記載の組成物。
Ａ３６．　疎水性シラン化合物が、シラン分子（例えば、シラン部分）、及び１、２、又は３つのアルキル鎖を含む、実施形態Ａ３５に記載の組成物。
Ａ３７．　疎水性ポリマーが、ポリジメチルシロキサン（ＰＤＭＳ）、シリコーン油、ポリエチレン、ポリテトラフルオルエチレン、又はポリウレタンを含む、実施形態Ａ３６に記載の組成物。
Ａ３８．　ＢＴＭＳＰＡを更に含む、実施形態Ａ１に記載の組成物。
Ａ３９．　抗酸化剤を、多孔質シリカ粒子に対して５％～１０％（重量／重量）の重量比で更に含む、実施形態Ａ１に記載の組成物。
Ａ４０．　抗酸化剤が、２，２－チオジエタノール、２－ヒドロキシエチルジスルフィド、及び３，３’－ジチオジプロピオン酸を含むリストから選択される有機硫黄含有化合物であるか、又は抗酸化剤が、金属触媒キレート剤である、実施形態Ａ３９に記載の組成物。

【０８８５】
非限定的な実施形態Ｂ
Ｂ１．　組成物であって、
　多孔質シリカ粒子と、
　シラン部分及び少なくとも１つのアミン部分を含む第１の化合物であって、シラン部分が、多孔質シリカ粒子の表面に結合しており、少なくとも１つのアミン部分のアミン部分が、シラン部分に化学結合している、第１の化合物と、
　少なくとも２つのアミン部分を含む第２の化合物であって、第２の化合物が、第１の化合物のアミン部分に化学結合している、第２の化合物と、を含む、組成物。
Ｂ２．　多孔質シリカ粒子が、複数の細孔を含む、実施形態Ｂ１に記載の組成物。
Ｂ３．　細孔が、６０～４００オングストローム又は１～２００ｎｍの範囲のサイズを有する、実施形態Ｂ２に記載の組成物。
Ｂ４．　細孔が、１００～１５０オングストローム又は１～２００ｎｍの範囲のサイズを有する、実施形態Ｂ２に記載の組成物。
Ｂ５．　複数の細孔が、０．５ｍＬ／ｇ超の体積を有する、実施形態Ｂ２に記載の組成物。
Ｂ６．　シラン部分が、アルコキシシラン部分（例えば、メトキシシラン又はエトキシシラン）、トリハロシラン部分、ジハロシラン部分、モノハロシラン部分、シラントリオール部分、ジアルコキシシラノール部分、モノアルコキシシラノール部分、又はアミノシランオリゴマーを含む群から選択される、実施形態Ｂ１に記載の組成物。
Ｂ７．　第１の化合物が、（３－アミノプロピル）トリメトキシシラン、（３－アミノプロピル）トリエトキシシラン、［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシラン、Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミン、３－アミノプロピルシラントリオール、Ｎ－（２－アミノエチル）－３－アミノプロピルシラントリオール、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシラン、トリス（ジメチルアミノ）クロロシラン、又はアミノシランオリゴマー（例えば、ＥｖｏｎｉｋからのＶＰＳ　ＳＩＶＯ

２８０）を含む群から選択される、実施形態Ｂ１に記載の組成物。
Ｂ８．　第２の化合物が、ポリマーアミンである、実施形態Ｂ１に記載の組成物。
Ｂ９．　第２の化合物が、直鎖又は分岐鎖ポリマーアミンである、実施形態Ｂ８に記載の組成物。
Ｂ１０．　第２の化合物が、ポリエチレンイミン（ＰＥＩ）、ポリプロピレンイミン、テトラエチレンペンタミン（ＴＥＰＡ）、トリエチレンテトラミン（ＴＥＴＡ）、ジエタノールアミン、ポリアミン、又は大分子量アミン混合物（例えば、ＢＡＳＦ　Ａｍｉｘ　１０００）を含む群から選択される、実施形態Ｂ９に記載の組成物。
Ｂ１１．　多孔質シリカ粒子が、２５μｍ～１ｍｍ又は２５μｍ～４ｍｍの範囲の平均直径を有する、実施形態Ｂ１に記載の組成物。
Ｂ１２．　第１の化合物のアミン部分及び第２の化合物のアミン部分が、二酸化炭素と反応可能である、実施形態Ｂ１に記載の組成物。
Ｂ１３．　組成物が、１乾燥キログラム当たり約０．５ｍｏｌ～２ｍｏｌのCO_2を吸着する、実施形態Ｂ１に記載の組成物。
Ｂ１４．　組成物が、約６５℃～９０℃で脱着する、実施形態Ｂ１に記載の組成物。
Ｂ１５．　組成物が、CO_2を、５％～９５％の相対湿度の範囲の相対湿度で吸着する、実施形態Ｂ１に記載の組成物。
Ｂ１６．　組成物であって、
　７０ミクロン～８０ミクロンの範囲の最大寸法を有する多孔質シリカ粒子であって、多孔質シリカ粒子が、複数の細孔を含み、複数の細孔が、０．８ｍＬ／ｇ超の体積及び少なくとも９０オングストロームのサイズを有する、多孔質シリカ粒子と、
　シラン部分及び少なくとも１つのアミン部分を含む第１の化合物であって、シラン部分が、多孔質シリカ粒子の表面に結合しており、少なくとも１つのアミン部分のアミン部分が、シラン部分に化学結合している、第１の化合物と、
　少なくとも２つのアミン部分を含む第２の化合物であって、第２の化合物が、第１の化合物のアミン部分に化学結合している、第２の化合物と、を含む、組成物。
Ｂ１７．　方法であって、
　シラン部分及びアミン部分を含む第１の化合物を含む第１の試薬を、液体及び多孔質シリカ粒子を含む第１の液体混合物中に、第１の化合物のシラン部分が多孔質シリカ粒子の表面に化学結合することを引き起こして、修飾されたシリカ粒子を形成するのに十分な条件下で導入することと、
　修飾されたシリカ粒子を液体から除去することと、
　修飾されたシリカ粒子を、真空オーブンにおいて、水和閾値に達するまで乾燥させることと、
　ポリマーアミンを含む第２の化合物を含む第２の試薬を、第２の液体及び修飾されたシリカ粒子を含む第２の液体混合物中に、第２の化合物のアミン部分が第１の化合物のアミン部分に化学結合することを引き起こして、官能化されたシリカ酸化物粒子を形成するのに十分な条件下で導入することと、
　官能化されたシリカ酸化物粒子を第２の液体から除去することと、を含む、方法。
Ｂ１８．　官能化されたシリカ酸化物粒子が、流体からの二酸化炭素の除去における使用のためのものである、実施形態Ｂ１７に記載の方法。
Ｂ１９．　液体が、メタノール、シクロヘキサン、又はエタノール、又は水を含む、実施形態Ｂ１７に記載の方法。
Ｂ２０．　液体が、シクロヘキサン及びエタノールを、体積による１：１～５：１の範囲の混合物比で含む、実施形態Ｂ１９に記載の方法。
Ｂ２１．　官能化されたシリカ酸化物粒子が、（３－アミノプロピル）トリメトキシシラン、（３－アミノプロピル）トリエトキシシラン、［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシラン、Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミン、３－アミノプロピルシラントリオール、Ｎ－（２－アミノエチル）－３－アミノプロピルシラントリオール、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシラン、トリス（ジ

メチルアミノ）クロロシラン、又はアミノシランオリゴマー（例えば、ＥｖｏｎｉｋからのＶＰＳ　ＳＩＶＯ　２８０）を含む、実施形態Ｂ１７に記載の方法。
Ｂ２２．　官能化されたシリカ酸化物粒子を、真空オーブンにおいて５０℃で、水和閾値に達するまで乾燥させることを更に含む、実施形態Ｂ１７に記載の方法。
Ｂ２３．　官能化されたシリカ酸化物粒子を第２の液体から除去することが、第２の液体を、官能化されたシリカ酸化物粒子から蒸発させることを含む、実施形態Ｂ１７に記載の方法。
Ｂ２４．　第２の化合物が、第２の液体混合物中に、シリカ酸化物材料に対して１０％～５０％（重量／重量）の範囲の第２の化合物で含まれる、実施形態Ｂ１７に記載の方法。
Ｂ２５．　第２の化合物が、液体混合物中に、シリカ酸化物材料に対して約３０％（重量／重量）の第２の化合物で含まれる、実施形態Ｂ１７に記載の方法。
Ｂ２６．　実施形態Ｂ１７に記載の方法によって修飾された多孔質シリカ粒子を含む、組成物。
Ｂ２７．　実施形態Ｂ１に記載の組成物を使用して、大気CO_2を空気から直接空気捕捉によって除去することを含む、方法。
Ｂ２８．　抗酸化剤を、多孔質シリカ粒子に対して５％の重量比で更に含む、実施形態Ｂ１又は実施形態Ｂ１６に記載の組成物。
Ｂ２９．　抗酸化剤部分が、２，２－チオジエタノール、２－ヒドロキシエチルジスルフィド、及び３，３’－ジチオジプロピオン酸を含むリストから選択される有機硫黄含有化合物である、実施形態Ｂ２８に記載の組成物。
Ｂ３０．　化合物が、疎水性化合物を更に含む、実施形態Ｂ１に記載の組成物。
Ｂ３１．　疎水性化合物が、疎水性シラン化合物又は疎水性ポリマーである、実施形態Ｂ３０に記載の組成物。
Ｂ３２．　疎水性シラン化合物が、シラン分子、及び１、２、又は３つのアルキル鎖を含む、実施形態Ｂ３１に記載の組成物。
Ｂ３３．　疎水性ポリマーが、ポリジメチルシロキサン（ＰＤＭＳ）、シリコーン油、ポリエチレン、ポリテトラフルオルエチレン、又はポリウレタンを含む、実施形態Ｂ３２に記載の組成物。
Ｂ３４．　ＢＴＭＳＰＡを更に含む、実施形態Ｂ１に記載の組成物。
【０８８６】
非限定的な実施形態Ｃ
Ｃ１．　金属供給源、及び少なくとも１つのヒドロキシル基を含む有機リガンドを含む金属酸化物構造体（ＭＯＦ）粒子であって、有機リガンドが、金属供給源に化学結合している、ＭＯＦ粒子と、
　少なくとも１つのアミン部分を含む化合物であって、化合物が、金属酸化物構造体粒子の各々のヒドロキシル基に化学結合している、化合物と、を含む、組成物であって、
　大気CO_2に曝露されたときに、組成物が、第１の温度範囲である間に、CO_2を少なくとも１つのアミン部分に吸着し、第２の温度範囲である間に、以前に吸着されたCO_2を少なくとも１つのアミン部分から脱着し、第２の温度範囲が、第１の温度範囲よりも高い、組成物。
Ｃ２．　組成物が、第１のガス圧力で、CO_2を少なくとも１つのアミン部分に吸着し、第１のガス圧力よりも低い第２のガス圧力で、以前に吸着されたCO_2を少なくとも１つのアミン部分から脱着するように配合されている、実施形態Ｃ１に記載の組成物。
Ｃ３．　第２のガス圧力が、０．３ｐｓｉ未満である、実施形態Ｃ２に記載の組成物。
Ｃ４．　組成物が、第１のCO_2濃度で、大気CO_2を少なくとも１つのアミン部分に吸着し、第１のCO_2濃度よりも低い第２のCO_2濃度で、以前に吸着されたCO_2を少なくとも１つのアミン部分から脱着するように配合されている、実施形態Ｃ１に記載の組成物。
Ｃ５．　第１のCO_2濃度が、４００ｐｐｍ未満又は５００ｐｐｍ未満である、実施形態Ｃ４に記載の組成物。

Ｃ６．　組成物が、ＭＯＦ粒子と、化合物と、から本質的になる、実施形態Ｃ１に記載の組成物。
Ｃ７．　ＭＯＦ粒子が、複数の細孔を含む、実施形態Ｃ１に記載の組成物。
Ｃ８．　複数の細孔が、約６０～４００オングストロームの範囲の寸法を有する、実施形態Ｃ７に記載の組成物。
Ｃ９．複数の細孔が、０．５ｍＬ／ｇ超の体積を有する、実施形態Ｃ８に記載の組成物。
Ｃ１０．　ＭＯＦ粒子が、１乾燥グラム当たり１００ｍ^{2}超の総表面積を有する、実施形態Ｃ１に記載の組成物。
Ｃ１１．　第１の温度範囲について、組成物が、１乾燥キログラム当たり０．５ｍｏｌ～２ｍｏｌのCO_2のCO_2吸着剤容量を有する、実施形態Ｃ１に記載の組成物。
Ｃ１２．　組成物が、５％～６０％の相対湿度の範囲の相対湿度を有する環境に曝露されたときに、CO_2を少なくとも１つのアミン部分に吸着するように配合されている、実施形態Ｃ１に記載の組成物。
Ｃ１３．　第２の温度範囲が、６５°～９０℃の範囲である、実施形態Ｃ１に記載の組成物。
Ｃ１４．　有機リガンドが、１，４－ジ－（４－カルボキシ－２，６－ジヒドロキシフェニル）ベンゼンであり、金属供給源が、$Zn(NO_3)_2・6H_2O$である、実施形態Ｃ１に記載の組成物。
Ｃ１５．　金属供給源が、鉄ベースの金属供給源、アルミニウムベースの金属供給源、チタンベースの金属供給源、亜鉛ベースの金属供給源、又はジルコニウムベースの金属供給源である、実施形態Ｃ１に記載の組成物。
Ｃ１６．　ＭＯＦ粒子が、ＭＩＬ－１０１－Ｆｅ、ＭＩＬ－１０１－Ａｌ、ＭＩＬ－１２５－Ｔｉ、ＰＣＮ－２５０、ＵＩＯ－６６、又はＵＩＯ－６７を含むリストから選択される、実施形態Ｃ１５に記載の組成物。
Ｃ１７．　有機リガンドが、２－ヒドロキシテレフタル酸、２，５－ジヒドロキシテレフタル酸、２，３－ジヒドロキシテレフタル酸、又は２－ボロノベンゼン－１，４－ジカルボン酸である、実施形態Ｃ１に記載の組成物。
Ｃ１８．　ＭＯＦ粒子が、水安定性ＭＯＦ粒子である、実施形態Ｃ１に記載の組成物。
Ｃ１９．　化合物が、少なくとも１つのアミン部分に化学結合したメトキシシラン部分又はエトキシシラン部分を含む、実施形態Ｃ１に記載の組成物。
Ｃ２０．　$Zn(NO_3)_2・6H_2O$、及び少なくとも１つのヒドロキシル基を含む１，４－ジ－（４－カルボキシ－２，６－ジヒドロキシフェニル）ベンゼンを含む有機リガンドを含む金属酸化物構造体（ＭＯＦ）粒子であって、有機リガンドが、金属供給源に化学結合しており、ヒドロキシル基が、金属供給源から非結合である、ＭＯＦ粒子と、
トリス（エチルメチルアミノ）クロロシランを含む化合物であって、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシランが、１，４－ジ－（４－カルボキシ－２，６－ジヒドロキシフェニル）ベンゼンのヒドロキシル基に化学結合したシラン部分を含む、化合物と、を含む、組成物であって、
大気CO_2に曝露されたときに、組成物が、第１の温度範囲である間に、CO_2を少なくとも１つのアミン部分に吸着し、第２の温度範囲である間に、以前に吸着されたCO_2を少なくとも１つのアミン部分から脱着し、第２の温度範囲が、第１の温度範囲よりも高く、６５℃～９０℃の範囲である、組成物。
Ｃ２１．　方法であって、
金属供給源を含む第１の試薬、並びにリガンド及び官能基を含む第２の試薬を、液体中に、第１の試薬と第２の試薬との間の反応を引き起こして、金属酸化物構造体粒子を作製するのに十分な条件下で導入することと、
金属酸化物構造体粒子を作製した後に、アミン部分を含む第３の試薬を、液体中に、第３の試薬が第２の試薬に化学結合することを引き起こして、修飾された金属酸化物構造体粒子を形成するのに十分な条件下で導入することと、
修飾された金属酸化物構造体粒子を液体から除去することと、を含む、方法。

Ｃ２２．　液体が、極性溶媒である、実施形態Ｃ２１に記載の方法。
Ｃ２３．　極性溶媒が、水、ＤＭＡｃ、ＤＭＦ、ＤＥＦ、メタノール、エタノール、又はＤＭＳＯである、実施形態Ｃ２１に記載の方法。
Ｃ２４．　第１の試薬及び第２の試薬との競合剤を含む第４の試薬を導入することを更に含む、実施形態Ｃ２１に記載の方法。
Ｃ２５．　第４の試薬が、非配位塩基を含む、実施形態Ｃ２４に記載の方法。
Ｃ２６．　非配位塩基が、２，６－ルチジン、Ｎ，Ｎ－ジイソプロピルエチルアミン、トリエチルアミン、２－ｔｅｒｔ－ブチルイミノ－２－ジエチルアミノ－１，３－ジメチルペルヒドロ－１，３，２－ジアザホスホリン、又は１，８－ジアザビシクロ［５．４．０］ウンデカ－７－エンである、実施形態Ｃ２５に記載の方法。
Ｃ２７．　第３の試薬が、シラン化合物に化学結合した少なくとも１つのアミン部分を有するシラン化合物を含む、実施形態Ｃ２１に記載の方法。
Ｃ２８．　シラン化合物が、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシラン、トリス（ジメチルアミノ）クロロシラン、ビス（３－（メチルアミノ）プロピル）トリメトキシシラン、Ｎ－［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アニリン、（Ｎ，Ｎ－ジメチルアミノプロピル）トリメトキシシラン、３－アミノプロピル（ジエトキシ）メチルシラン、ビス［３－（トリメトキシシリル）プロピル］アミン、（３－アミノプロピル）トリエトキシシラン、（３－アミノプロピル）トリメトキシシラン、Ｎ－［３－（トリメトキシシリル）プロピル］エチレンジアミン、Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミン、又は［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシランである、実施形態Ｃ２７に記載の方法。
Ｃ２９．　第３の試薬を導入する前に、金属酸化物構造体粒子を液体から除去し、第２の液体を、金属酸化物構造体粒子に、ある持続期間にわたって導入することと、
　金属酸化物構造体粒子を第２の液体から除去することと、を更に含む、実施形態Ｃ２１に記載の方法。
Ｃ３０．　第２の液体が、第２の体積の液体を含む、実施形態Ｃ２９に記載の方法。
Ｃ３１．　修飾された金属酸化物構造体粒子を、水和閾値に達するまで乾燥させることを更に含む、実施形態Ｃ２１又は実施形態Ｃ２９に記載の方法。
Ｃ３２．　方法であって、
　$Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$を含む第１の試薬、を含む第２の試薬を、極性溶媒液体中に、第１の試薬と第２の試薬との間の反応を引き起こして、金属酸化物構造体粒子を作製するのに十分な条件下で導入することと、
　金属酸化物構造体粒子を液体から除去することと、
第２の極性溶媒液体を、金属酸化物構造体粒子に、ある持続期間にわたって導入することと、
　金属酸化物構造体粒子を第２の液体から除去することと、
第３の極性溶媒液体を、金属酸化物構造体粒子に、ある持続期間にわたって導入することと、
　トリス（エチルメチルアミノ）クロロシランを含む第３の試薬を、第３の液体中に、第３の試薬が第２の試薬に化学結合することを引き起こして、修飾された金属酸化物構造体粒子を形成するのに十分な条件下で導入することと、
　修飾された金属酸化物構造体粒子を液体から除去することと、を含む、方法。
Ｃ３３．　実施形態Ｃ２１に記載の方法によって修飾された多孔質金属酸化物構造体粒子を含む、組成物。
【０８８７】
非限定的な実施形態Ｄ
Ｄ１．　組成物であって、
　ガス拡散及び吸着を容易にするのに十分な多孔度を、乾燥したときに保持するように十分に架橋されているイオン交換樹脂粒子と、
　少なくとも１つのアミン部分を含む化合物であって、化合物が、イオン交換樹脂粒子に

化学結合しており、官能化されたイオン交換樹脂粒子を作製する、化合物と、を含む、組成物。
Ｄ２．　イオン交換樹脂粒子が、塩基官能化された樹脂、酸官能化された樹脂、又は化学官能化を含まない中性樹脂を含む、実施形態Ｄ１に記載の組成物。
Ｄ３．　酸官能化された樹脂が、カルボン及び／又はスルホン酸基を含む、実施形態Ｄ２に記載の組成物。
Ｄ４．　イオン交換樹脂粒子の形態が、ビーズ、顆粒、粉末、膜、及び／又は繊維を含む、実施形態Ｄ１に記載の組成物。
Ｄ５．　イオン交換樹脂粒子が、多孔度を、乾燥したときに保持する、多孔質ポリスチレン、ポリアクリルアミド、又はフェノール－ホルムアルデヒド樹脂と分子アルキルアミンとの組み合わせである、実施形態Ｄ１に記載の組成物。
Ｄ６．　イオン交換樹脂粒子が、Ｐｕｒｏｌｉｔｅ（登録商標）Ａ１１０（ポリスチレン系マクロ多孔質、弱塩基アニオン樹脂、遊離塩基形態）、Ｐｕｒｏｌｉｔｅ（登録商標）Ａ１０５（ポリスチレン系マクロ多孔質、弱塩基アニオン樹脂、遊離塩基形態）、Ｐｕｒｏｌｉｔｅ（登録商標）Ｃ１４５Ｈ（ポリスチレン系マクロ多孔質、強酸カチオン樹脂、水素形態）、Ｐｕｒｏｌｉｔｅ（登録商標）Ｃ１６０Ｈ（ポリスチレン系マクロ多孔質、強酸カチオン樹脂、水素形態）、Ｐｕｒｏｌｉｔｅ（登録商標）Ｍａｃｒｏｎｅｔ（商標）ＭＮ５０２（高架橋ポリスチレン系マクロ多孔質、吸着剤樹脂、強酸官能性、水素形態）、Ｐｕｒｏｌｉｔｅ（登録商標）Ｃ１０４Ｐｌｕｓ（ポリアクリル系多孔質、弱酸カチオン樹脂、水素形態）、ＰｕｒｏＳｏｒｂ（商標）ＰＡＤ９００（ポリジビニルベンゼンマクロ多孔質、吸着剤樹脂、非イオン形態）、Ａｍｂｅｒｌｉｔｅ（登録商標）ＩＲＡ－４０２（強塩基性アニオン交換体）Cl^-形態、又はＤｏｗｅｘ（登録商標）５０Ｗ－Ｘ８（強酸性カチオン交換体、H^+形態）を含むリストから選択される、実施形態Ｄ５に記載の組成物。
Ｄ７．　化合物が、アミンベースのポリマー、ポリエチレンイミン（ＰＥＩ）、分子エチルアミン、アミン官能化された炭化水素、シリルアミン、又はそれらのいずれかの組み合わせを含む、実施形態Ｄ１に記載の組成物。
Ｄ８．　シリルアミンが、（３－アミノプロピル）トリメトキシシラン、［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシラン、又はＮ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミンを含む、実施形態Ｄ７に記載の組成物。
Ｄ９．　アミン官能化された炭化水素が、エタノールアミン、ヘキシルアミン、又は１，６－ヘキサンジアミンを含む、実施形態Ｄ７に記載の組成物。
Ｄ１０．　ポリマーが、ポリプロピレンイミン、天然キトサン、ポリリジン、又は大分子アミン混合物（例えば、ＢＡＳＦ　Ａｍｉｘ　１０００）を含む、実施形態Ｄ７に記載の組成物。
Ｄ１１．　分子エチルアミンが、モノ、ジ、トリ、テトラ、ペンタ、及び／又はより大きいエチルアミンを含む、実施形態Ｄ７に記載の組成物。
Ｄ１２．　分子エチルアミンが、テトラエチレンペンタミン（ＴＥＰＡ）、トリエチレンテトラミン（ＴＥＴＡ）、又はペンタエチレンヘキサミン（ＰＥＨＡ）を含む、実施形態Ｄ１１に記載の組成物。
Ｄ１３．　組成物が、第１のガス圧力で、大気CO_2を吸着し、第１のガス圧力よりも低い第２のガス圧力で、以前に吸着されたCO_2を脱着するように配合されている、実施形態Ｄ１に記載の組成物。
Ｄ１４．　組成物が、大気CO_2に曝露されたときに、第１の温度範囲である間に、CO_2を少なくとも１つのアミン部分に吸着し、第２の温度範囲である間に、以前に吸着されたCO_2を少なくとも１つのアミン部分から脱着するように配合されており、第２の温度範囲が、第１の温度範囲よりも高い、実施形態Ｄ１に記載の組成物。
Ｄ１５．　第２のガス圧力が、０．３ｐｓｉ未満である、実施形態Ｄ１３に記載の組成物。
Ｄ１６．　組成物が、第１のCO_2濃度で、大気CO_2を少なくとも１つのアミン部分に吸着し、第１のCO_2濃度よりも低い第２のCO_2濃度で、以前に吸着されたCO_2を少

なくとも１つのアミン部分から脱着するように配合されている、実施形態Ｄ１３に記載の組成物。
Ｄ１７．　第１のCO_2濃度が、４００ｐｐｍ未満である、実施形態Ｄ１６に記載の組成物。
Ｄ１８．　イオン交換樹脂粒子が、多孔質イオン交換樹脂粒子である、実施形態Ｄ１に記載の組成物。
Ｄ１９．　多孔質イオン交換樹脂粒子が各々、約６０～４００オングストロームの範囲の寸法を有する複数の細孔を含む、実施形態Ｄ１８に記載の組成物。
Ｄ２０．　複数の細孔が、０．５ｍＬ／ｇ超の体積を有する、実施形態Ｄ１９に記載の組成物。
Ｄ２１．　イオン交換樹脂粒子が、１乾燥グラム当たり１００m^2超の総表面積を有する、実施形態Ｄ１に記載の組成物。
Ｄ２２．　第１の温度範囲について、組成物が、１乾燥キログラムの吸着剤当たり０．５ｍｏｌ～２ｍｏｌのCO_2のCO_2吸着剤容量を有する、実施形態Ｄ１４に記載の組成物。
Ｄ２３．　組成物が、５％～６０％の相対湿度の範囲の相対湿度を有する環境に曝露されたときに、CO_2を少なくとも１つのアミン部分に吸着するように配合されている、実施形態Ｄ１に記載の組成物。
Ｄ２４．　第２の温度範囲が、６５°～９０℃の範囲である、実施形態Ｄ１４に記載の組成物。
Ｄ２５．　組成物であって、
　複数の細孔を有するイオン交換樹脂粒子であって、イオン交換樹脂粒子が、ガス拡散及び吸着を容易にするのに十分な多孔度を、乾燥したときに保持するように十分に架橋されており、複数の細孔が、０．５ｍＬ／ｇ超の体積及び６０オングストローム～４００オングストロームの範囲の寸法を有する、イオン交換樹脂粒子と、
　少なくとも１つのアミン部分を含む化合物であって、化合物が、イオン交換樹脂粒子に化学結合しており、官能化されたイオン交換樹脂粒子を作製し、官能化されたイオン交換樹脂粒子が、CO_2を吸着するように配合されており、１乾燥キログラムの吸着剤当たり２ｍｏｌのCO_2のCO_2吸着剤容量を有する、化合物と、を含む、組成物。
Ｄ２６．　多孔質樹脂粒子を含む第１の試薬、及びアミン部分を含む第２の試薬を、第１の試薬と第２の試薬との間の反応を引き起こして、官能化された多孔質樹脂粒子を作製するのに十分な条件下で組み合わせることを含む、方法であって、
　大気CO_2に曝露されたときに、官能化された多孔質樹脂粒子が、第１の温度範囲である間に、CO_2を吸着し、第２の温度範囲である間に、以前に吸着されたCO_2を脱着し、第２の温度範囲が、第１の温度範囲よりも高い、方法。
Ｄ２７．　第１の試薬及び第２の試薬を導入することが、第２の試薬を、多孔質樹脂粒子上にスプレーすることを含む、実施形態Ｄ２６に記載の方法。
Ｄ２８．　第１の試薬及び第２の試薬を導入することが、第１の試薬を、第２の試薬にガス相中で曝露することを含む、実施形態Ｄ２７に記載の方法。
Ｄ２９．　第１の試薬及び第２の試薬を導入することが、第１の試薬及び第２の試薬を含む溶液を形成し、官能化されたイオン交換樹脂粒子を溶液から回収することを含む、実施形態Ｄ２７に記載の方法。
Ｄ３０．　官能化された多孔質樹脂粒子を回収することと、
　液体を、官能化された多孔質樹脂粒子に、ある持続期間にわたって導入することと、
　官能化された多孔質樹脂粒子を液体から回収することと、を更に含む、実施形態Ｄ２９に記載の方法。
Ｄ３１．　官能化された多孔質樹脂粒子を、水和閾値に達するまで乾燥させることを更に含む、実施形態Ｄ２９又は実施形態Ｄ３０に記載の方法。
Ｄ３２．　液体又は第２の液体が、エタノール又はメタノールである、実施形態Ｄ２７、Ｄ３１、又はＤ２９のうちのいずれか１つに記載の方法。

Ｄ３３．　多孔質樹脂粒子を含む第１の試薬、及びアミン部分を含む第２の試薬を、第１の試薬と第２の試薬との間の反応を引き起こして、官能化された多孔質樹脂粒子を作製するのに十分な条件下で組み合わせることと、
　官能化されたイオン交換樹脂粒子を溶液から回収することと、
　官能化された多孔質樹脂粒子を、水和閾値に達するまで乾燥させることと、を含む、方法であって、
　大気CO_2に曝露されたときに、官能化された多孔質樹脂粒子が、第１の温度範囲である間に、CO_2を吸着し、第２の温度範囲である間に、以前に吸着されたCO_2を脱着し、第２の温度範囲が、第１の温度範囲よりも高い、方法。
Ｄ３４．　実施形態Ｄ２６に記載の方法によって修飾された多孔質イオン交換樹脂粒子を含む、組成物。
Ｄ３５．　実施形態Ｄ１に記載の組成物を使用して、大気CO_2を空気から直接空気捕捉によって除去することを含む、方法。
【０８８８】
非限定的な実施形態Ｅ
Ｅ１．　組成物であって、
　多孔質シリカ粒子と、
　アルコキシシラン部分及び少なくとも１つのアミン部分を含む第１の化合物であって、アルコキシシラン部分が、多孔質シリカ粒子の表面に結合しており、少なくとも１つのアミン部分のアミン部分が、アルコキシシラン部分に化学結合している、第１の化合物と、
　少なくとも２つのアミン部分を含む第２の化合物であって、第２の化合物が、第１の化合物のアミン部分に化学結合している、第２の化合物と、を含む、組成物。
Ｅ２．　多孔質シリカ粒子が、複数の細孔を含む、実施形態Ｅ１に記載の組成物。
Ｅ３．　細孔が、６０～４００オングストローム又は１～２００ｎｍの範囲のサイズを有する、実施形態Ｅ２に記載の組成物。
Ｅ４．　細孔が、１００～１５０オングストローム又は１～２００ｎｍの範囲のサイズを有する、実施形態Ｅ２に記載の組成物。
Ｅ５．　複数の細孔が、０．５ｍＬ／ｇ超の体積を有する、実施形態Ｅ２に記載の組成物。
Ｅ６．　アルコキシシラン部分が、メトキシシラン、シラントリオール、若しくはエトキシシランを含む群から選択されるか、又はアルコキシシラン部分が、ジアルコキシシラノール部分、モノアルコキシシラノール部分、若しくはアミノシランオリゴマーを含む、実施形態Ｅ１に記載の組成物
Ｅ７．　第１の化合物が、（３－アミノプロピル）トリメトキシシラン、（３－アミノプロピル）トリエトキシシラン、［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシラン、Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミン、３－アミノプロピルシラントリオール、Ｎ－（２－アミノエチル）－３－アミノプロピルシラントリオール、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシラン、トリス（ジメチルアミノ）クロロシラン、又はアミノシランオリゴマー（例えば、ＥｖｏｎｉｋからのＶＰＳ　ＳＩＶＯ２８０）を含む群から選択される、実施形態Ｅ１に記載の組成物。
Ｅ８．　第２の化合物が、ポリマーアミンである、実施形態Ｅ１に記載の組成物。
Ｅ９．　第２の化合物が、直鎖又は分岐鎖ポリマーアミンである、実施形態Ｅ８に記載の組成物。
Ｅ１０．　第２の化合物が、ポリエチレンイミン（ＰＥＩ）、ポリプロピレンイミン、テトラエチレンペンタミン（ＴＥＰＡ）、トリエチレンテトラミン（ＴＥＴＡ）、ジエタノールアミン、又は大分子量アミン混合物（例えば、ＢＡＳＦ　Ａｍｉｘ　１０００）を含む群から選択される、実施形態Ｅ９に記載の組成物。
Ｅ１１．　多孔質シリカ酸化物粒子が、２５μｍ～１ｍｍ又は２５μｍ～４ｍｍの範囲の平均直径を有する、実施形態Ｅ１に記載の組成物。
Ｅ１２．　第２のアミン部分が、二酸化炭素に反応性である、実施形態Ｅ１に記載の組成物。

Ｅ１３．　組成物が、１乾燥キログラム当たり約０．５ｍｏｌ～２ｍｏｌのCO_2を吸着する、実施形態Ｅ１に記載の組成物。
Ｅ１４．　組成物が、約６５℃～９０℃で脱着する、実施形態Ｅ１に記載の組成物。
Ｅ１５．　組成物が、CO_2を、５％～９５％の相対湿度の範囲の相対湿度で吸着する、実施形態Ｅ１に記載の組成物。
Ｅ１６．　方法であって、
　アルコキシシラン部分及びアミン部分を含む第１の化合物を含む第１の試薬を、液体及び多孔質シリカ粒子を含む第１の液体混合物中に、第１の化合物のアルコキシシラン部分が多孔質シリカ粒子の表面に化学結合することを引き起こして、修飾されたシリカ粒子を形成するのに十分な条件下で導入することと、
　修飾されたシリカ粒子を液体から除去することと、
　修飾されたシリカ粒子を、真空オーブンにおいて、水和閾値に達するまで乾燥させることと、
　ポリマーアミンを含む第２の化合物を含む第２の試薬を、第２の液体及び修飾されたシリカ粒子を含む第２の液体混合物中に、第２の化合物のアミン部分が第１の化合物のアミン部分に化学結合することを引き起こして、官能化されたシリカ酸化物粒子を形成するのに十分な条件下で導入することと、
　官能化されたシリカ酸化物粒子を第２の液体から除去することと、を含む、方法。
Ｅ１７．　官能化されたシリカ酸化物粒子が、流体からの二酸化炭素の除去における使用のためのものである、実施形態Ｅ１６に記載の方法。
Ｅ１８．　液体が、メタノール、シクロヘキサン、又はエタノール、又は水を含む、実施形態Ｅ１６に記載の方法。
Ｅ１９．　液体が、シクロヘキサン及びエタノールを、体積による１：１～５：１の範囲の混合物比で含む、実施形態Ｅ１８に記載の方法。
Ｅ２０．　官能化されたシリカ酸化物粒子が、（３－アミノプロピル）トリメトキシシラン、（３－アミノプロピル）トリエトキシシラン、［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシラン、Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミン、３－アミノプロピルシラントリオール、Ｎ－（２－アミノエチル）－３－アミノプロピルシラントリオール、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシラン、トリス（ジメチルアミノ）クロロシラン、又はアミノシランオリゴマー（例えば、ＥｖｏｎｉｋからのＶＰＳ　ＳＩＶＯ　２８０）を含む、実施形態Ｅ１６に記載の方法。
Ｅ２１．　官能化されたシリカ酸化物粒子を、真空オーブンにおいて５０℃で、水和閾値に達するまで乾燥させることを更に含む、実施形態Ｅ１６に記載の方法。
Ｅ２２．　官能化されたシリカ酸化物粒子を第２の液体から除去することが、第２の液体を、官能化されたシリカ酸化物粒子から蒸発させることを含む、実施形態Ｅ１６に記載の方法。
Ｅ２３．　第２の化合物が、水性混合物中に、シリカ酸化物材料に対して１０％～５０％（重量／重量）の範囲の第２の化合物で含まれる、実施形態Ｅ１６に記載の方法。
Ｅ２４．　第２の化合物が、液体混合物中に、シリカ酸化物材料に対して約３０％（重量／重量）の第２の化合物で含まれる、実施形態Ｅ１６に記載の方法。
Ｅ２５．　実施形態Ｅ１６に記載の方法によって修飾された多孔質シリカ粒子を含む、組成物。
Ｅ２６．　実施形態Ｅ１に記載の組成物を使用して、大気CO_2を空気から直接空気捕捉によって除去することを含む、方法。
Ｅ２７．　抗酸化剤部分を、多孔質シリカ粒子に対して５％の重量比で更に含む、実施形態Ｅ１に記載の組成物。
Ｅ２８．　抗酸化剤部分が、２，２－チオジエタノール、２－ヒドロキシエチルジスルフィド、及び３，３’－ジチオジプロピオン酸を含むリストから選択される有機硫黄含有化合物である、実施形態Ｅ２７に記載の組成物。
Ｅ２９．　化合物が、疎水性化合物を更に含む、実施形態Ｅ１に記載の組成物。

Ｅ３０．　疎水性化合物が、疎水性シラン化合物又は疎水性ポリマーである、実施形態Ｅ２９に記載の組成物。
Ｅ３１．　疎水性シラン化合物が、シラン分子、及び１、２、又は３つのアルキル鎖を含む、実施形態Ｅ３０に記載の組成物。
Ｅ３２．　疎水性ポリマーが、ポリジメチルシロキサン（ＰＤＭＳ）、シリコーン油、ポリエチレン、ポリテトラフルオルエチレン、又はポリウレタンを含む、実施形態Ｅ３１に記載の組成物。
Ｅ３３．　ＢＴＭＳＰＡを更に含む、実施形態Ｅ１に記載の組成物。
【０８８９】
非限定的な実施形態Ｆ
Ｆ１．　方法であって、
　ポリマーアミンを含む第１の試薬、シラン部分及びアミン部分を含む第２の試薬、並びに多孔質シリカ粒子を、ある体積の水中に、
　　ポリマーアミンのアミン部分が多孔質シリカ粒子の表面に化学結合することを引き起こして、修飾されたシリカ粒子を形成し、
　　第２の試薬のシラン部分が多孔質シリカ粒子の表面に化学結合することを引き起こして、官能化されたシリカ粒子を形成するのに十分な条件下で導入することと、
　官能化されたシリカ粒子を水から除去することと、を含む、方法。
Ｆ２．　多孔質シリカ粒子が、上記の体積の水中に、４：１（重量／重量）の水対多孔質シリカ粒子の比で添加される、実施形態Ｆ１に記載の方法。
Ｆ３．　第１の試薬が、水中に、２０％（重量／重量）の第１の試薬対多孔質シリカ粒子の比で添加される、実施形態Ｆ１に記載の方法。
Ｆ４．　第２の試薬が、水中に、４０％～８０％（重量／重量）の第２の試薬対多孔質シリカ粒子の比で添加される、実施形態Ｆ１に記載の方法。
Ｆ５．　第２の試薬が、アルコキシシラン、メトキシシラン、シラントリオール、アルコキシシラノール、クロロシラン、ヒドロシラン、又はエトキシシランを含む、実施形態Ｆ１に記載の方法。
Ｆ６．　第２の試薬が、（３－アミノプロピル）トリメトキシシラン、（３－アミノプロピル）トリエトキシシラン、［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシラン、Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミン３－アミノプロピルシラントリオール、Ｎ－（２－アミノエチル）－３－アミノプロピルシラントリオール、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシラン、トリス（ジメチルアミノ）クロロシラン、又はアミノシランオリゴマー（例えば、ＥｖｏｎｉｋからのＶＰＳ　ＳＩＶＯ　２８０）を含む、実施形態Ｆ５に記載の方法。
Ｆ７．　第２の試薬が、ポリマーアミンである、実施形態Ｆ１に記載の方法。
Ｆ８．　第２の試薬が、直鎖又は分岐鎖ポリマーアミンである、実施形態Ｆ７に記載の方法。
Ｆ９．　第２の試薬が、ポリエチレンイミン（ＰＥＩ）、ポリプロピレンイミン、テトラエチレンペンタミン（ＴＥＰＡ）、トリエチレンテトラミン（ＴＥＴＡ）、ジエタノールアミン、又は大分子量アミン混合物（例えば、ＢＡＳＦ　Ａｍｉｘ　１０００）を含む群から選択される、実施形態Ｆ８に記載の方法。
Ｆ１０．　官能化されたシリカ粒子を、真空オーブンにおいて８０℃で、官能化されたシリカ基質に対して５％（重量／重量）未満の水の水和閾値に達するまで乾燥させることを更に含む、実施形態Ｆ１に記載の方法。
Ｆ１１．　方法であって、
　ポリエチレンイミンを含む第１の試薬、並びにシラン部分及びアミン部分を含む第２の試薬を、ある体積の水中に導入して、官能化混合物を作製することと、
　官能化混合物を、５～１０分の範囲の第１の持続期間にわたって撹拌することと、
　多孔質シリカ粒子を官能化混合物中に導入して、官能化懸濁液を作製することと、
　官能化懸濁液を、５～２０分の範囲の第２の持続期間にわたって撹拌して、官能化され

たシリカ粒子を作製することと、
官能化されたシリカ粒子を、濾過又は蒸発によって回収することと、
官能化されたシリカ粒子を、１２０℃で２０分間乾燥させることと、を含む、方法。
Ｆ１２．　実施形態Ｆ１に記載の方法によって修飾された多孔質シリカ粒子を含む、組成物。
Ｆ１３．　第２の試薬が、二酸化炭素に反応性である、実施形態Ｆ１２に記載の組成物。
Ｆ１４．　組成物が、１乾燥キログラム当たり約０．５ｍｏｌ～２．５ｍｏｌのCO_2を吸着する、実施形態Ｆ１２に記載の組成物。
Ｆ１５．　組成物が、約６５℃～９０℃で脱着する、実施形態Ｆ１２に記載の組成物。
Ｆ１６．　組成物が、CO_2を、５％～９５％の相対湿度の範囲の相対湿度で吸着する、実施形態Ｆ１２に記載の組成物。
Ｆ１７．　実施形態Ｆ１に記載の官能化されたシリカ粒子を使用して、大気CO_2を空気から直接空気捕捉によって除去することを含む、方法。
Ｆ１８．　方法が、第３の試薬を導入することを更に含み、第３の試薬が、抗酸化剤を、多孔質シリカ粒子に対して５％の重量比で含む、実施形態Ｆ１に記載の方法。
Ｆ１９．　抗酸化剤部分が、２，２－チオジエタノール、２－ヒドロキシエチルジスルフィド、及び３，３’－ジチオジプロピオン酸を含むリストから選択される有機硫黄含有化合物である、実施形態Ｆ１８に記載の方法。
Ｆ２０．　化合物が、疎水性化合物を更に含む、実施形態Ｆ１に記載の組成物。
Ｆ２１．　疎水性化合物が、疎水性シラン化合物又は疎水性ポリマーである、実施形態Ｆ２０に記載の組成物。
Ｆ２２．　疎水性シラン化合物が、シラン分子、及び１、２、又は３つのアルキル鎖を含む、実施形態Ｆ２１に記載の組成物。
Ｆ２３．　疎水性ポリマーが、ポリジメチルシロキサン（ＰＤＭＳ）、シリコーン油、ポリエチレン、ポリテトラフルオルエチレン、又はポリウレタンを含む、実施形態Ｆ２２に記載の組成物。
ＦＩ２４．ＢＴＭＳＰＡを更に含む、実施形態Ｆ１に記載の組成物。
【０８９０】
非限定的な実施形態Ｇ
Ｇ１．　組成物であって、
多孔質シリカ粒子と、
複数のアミン部分を含む第１の化合物であって、第１の化合物が、多孔質シリカ粒子の表面に結合しており、表面修飾層を、多孔質シリカ粒子の表面上に形成する、第１の化合物と、を含む、組成物。
Ｇ２．　多孔質シリカ粒子が、複数の細孔を含む、実施形態Ｇ１に記載の組成物。
Ｇ３．　細孔が、６０～４００オングストロームの範囲のサイズを有する、実施形態Ｇ２に記載の組成物。
Ｇ４．　細孔が、１００～１５０オングストロームの範囲のサイズを有する、実施形態Ｇ２に記載の組成物。
Ｇ５．　複数の細孔が、０．５ｍＬ／ｇ超の体積を有する、実施形態Ｇ２に記載の組成物。
Ｇ６．　第１の化合物が、ポリマーアミンである、実施形態Ｇ１に記載の組成物。
Ｇ７．　第１の化合物が、直鎖又は分岐鎖ポリマーアミンである、実施形態Ｇ６に記載の組成物。
Ｇ８．　第１の化合物が、ポリエチレンイミン（ＰＥＩ）又はポリプロピレンイミンを含むことから選択される、実施形態Ｇ７に記載の組成物。
Ｇ９．　多孔質シリカ粒子が、２５μｍ～３ｍｍ又は２５μｍ～４ｍｍの範囲内の平均直径を有する、実施形態Ｇ１に記載の組成物。
Ｇ１０．　複数のアミン部分が、二酸化炭素に反応性である、実施形態Ｇ１に記載の組成物。
Ｇ１１．　組成物が、１乾燥キログラム当たり約０．５ｍｏｌ～２．２ｍｏｌのCO_2を

吸着する、実施形態Ｇ１に記載の組成物。
Ｇ１２．　組成物が、約６５°～９０℃で脱着する、実施形態Ｇ１に記載の組成物。
Ｇ１３．　組成物が、CO_2を、５％～９５％の相対湿度の範囲の相対湿度で吸着する、実施形態Ｇ１に記載の組成物。
Ｇ１４．　組成物が、第２の化合物を含み、第２の化合物が、有機硫黄含有化合物である、実施形態Ｇ１に記載の組成物。
Ｇ１５．　第２の化合物が、２，２－チオジエタノール、２－ヒドロキシエチルジスルフィド、又は３，３’－ジチオジプロピオン酸である、実施形態Ｇ１４に記載の組成物。
Ｇ１６．　第２の化合物が、組成物の５％（重量／重量）を構成する、実施形態Ｇ１４に記載の組成物。
Ｇ１７．　組成物であって、
　少なくとも７０ミクロンの最大寸法を有する多孔質シリカ粒子であって、多孔質シリカ粒子が、複数の細孔を含み、複数の細孔が、０．８ｍＬ／ｇ超の体積及び少なくとも９０オングストロームのサイズを有する、多孔質シリカ粒子と、
　複数のアミン部分を含む第１のポリマーアミン化合物であって、第１の化合物が、多孔質シリカ粒子の表面に結合しており、表面修飾層を、多孔質シリカ粒子の表面上にファンデルワールス相互作用を介して形成する、第１のポリマーアミン化合物と、を含む、組成物。
Ｇ１８．　方法であって、
　複数のアミン部分を含む第１の化合物を含む第１の試薬を、液体及び多孔質シリカ粒子を含む液体混合物中に、複数のアミン部分が多孔質シリカ粒子の表面に化学結合することを引き起こして、修飾されたシリカ粒子を形成するのに十分な条件下で導入することと、
　修飾されたシリカ粒子を液体から除去することと、
　修飾されたシリカ粒子を、真空オーブンにおいて、水和閾値に達するまで乾燥させることと、を含む、方法。
Ｇ１９．　官能化されたシリカ粒子が、流体からの二酸化炭素の除去における使用のためのものである、実施形態Ｇ１８に記載の方法。
Ｇ２０．　液体が、メタノール、シクロヘキサン、エタノール、又は水を含む、実施形態Ｇ１８に記載の方法。
Ｇ２１．　液体が、シクロヘキサン及びエタノールを、体積による１：１～５：１の範囲の混合物比で含む、実施形態Ｇ２０に記載の方法。
Ｇ２２．　官能化された多孔質シリカ粒子を液体から除去することが、液体を、官能化された多孔質シリカ粒子から蒸発させることを含む、実施形態Ｇ１８に記載の方法。
Ｇ２３．　硫黄含有化合物を含む第２の化合物を含む第２の試薬を、第２の液体及び修飾されたシリカ粒子を含む第２の液体混合物中に、第２の化合物のアミン部分が第１の化合物のアミン部分に化学結合することを引き起こして、官能化されたシリカ酸化物粒子を形成するのに十分な条件下で導入することと、
　官能化されたシリカ酸化物粒子を第２の液体から除去することと、
　修飾されたシリカ粒子を、真空オーブンにおいて、水和閾値に達するまで乾燥させることと、を更に含む、実施形態Ｇ１８に記載の方法。
Ｇ２４．　第２の化合物が、第２の液体混合物中に、シリカ酸化物材料に対して１０％～５０％（重量／重量）の範囲内の第２の化合物で含まれる、実施形態Ｇ２３に記載の方法。
Ｇ２５．　第２の化合物が、液体混合物中に、シリカ酸化物材料に対して約３０％（重量／重量）の第２の化合物で含まれる、実施形態Ｇ２３に記載の方法。
Ｇ２６．　実施形態Ｇ１８に記載の方法によって修飾された多孔質シリカ粒子を含む、組成物。
Ｇ２７．　方法であって、
　複数のアミン部分を含むポリエチレンイミン化合物を含む第１の試薬を、メタノール又はエタノール及び多孔質シリカ粒子を含む液体混合物中に、ポリエチレンイミン化合物の

複数のアミン部分が多孔質シリカ粒子の表面に化学結合することを引き起こして、修飾されたシリカ粒子を形成するのに十分な条件下で導入することと、
液体を、修飾されたシリカ粒子から蒸発させることによって、修飾されたシリカ粒子を液体から除去することと、
修飾されたシリカ粒子を、真空オーブンにおいて、修飾されたシリカ粒子に対して５％重量／重量の第１の液体の水和閾値に達するまで乾燥させることと、を含む、方法。
Ｇ２８．　実施形態Ｇ１に記載の組成物を使用して、大気CO_2を空気から直接空気捕捉によって除去することを含む、方法。
Ｇ２９．　化合物が、疎水性化合物を更に含む、実施形態Ｇ１に記載の組成物。
Ｇ３０．　疎水性化合物が、疎水性シラン化合物又は疎水性ポリマーである、実施形態Ｇ２９に記載の組成物。
Ｇ３１．　疎水性シラン化合物が、シラン分子、及び１、２、又は３つのアルキル鎖を含む、実施形態Ｇ３０に記載の組成物。
Ｇ３２．　疎水性ポリマーが、ポリジメチルシロキサン（ＰＤＭＳ）、シリコーン油、ポリエチレン、ポリテトラフルオルエチレン、又はポリウレタンを含む、実施形態Ｇ３１に記載の組成物。
【０８９１】
非限定的な実施形態Ｈ
Ｈ１．　組成物であって、
多孔質シリカ粒子と、
複数のアミン部分を含む第１の化合物であって、第１の化合物が、多孔質シリカ粒子の表面に結合しており、表面修飾層を、多孔質シリカ粒子の表面上に形成する、第１の化合物と、を含む、組成物。
Ｈ２．　多孔質シリカ粒子が、複数の細孔を含む、実施形態Ｈ１に記載の組成物。
Ｈ３．　細孔が、６０～４００オングストロームの範囲のサイズを有する、実施形態Ｈ２に記載の組成物。
Ｈ４．　細孔が、１００～１５０オングストロームの範囲のサイズを有する、実施形態Ｈ２に記載の組成物。
Ｈ５．　複数の細孔が、０．５ｍＬ／ｇ超の体積を有する、実施形態Ｈ２に記載の組成物。
Ｈ６．　第１の化合物が、エチレンアミン／オリゴマー混合物、小分子混合物、又は両方の組み合わせである、実施形態Ｈ１に記載の組成物。
Ｈ７．　第１の化合物が、直鎖又は分岐鎖エチレンアミン／オリゴマー混合物、小分子混合物、又は両方の組み合わせである、実施形態Ｈ６に記載の組成物。
Ｈ８．　第１の化合物が、Ａｍｉｘ　１０００、テトラエチレンペンタミン（ＴＥＰＡ）、又はトリエチレンテトラミン（ＴＥＴＡ）を含む群から選択される、実施形態Ｈ７に記載の組成物。
Ｈ９．　多孔質シリカ粒子が、２５μｍ～３ｍｍ、又は２５μｍ、又は４ｍｍの範囲内の平均直径を有する、実施形態Ｈ１に記載の組成物。
Ｈ１０．　複数のアミン部分が、二酸化炭素に反応性である、実施形態Ｈ１に記載の組成物。
Ｈ１１．　組成物が、１乾燥キログラム当たり約０．５ｍｏｌ～１．８ｍｏｌのCO_2を吸着する、実施形態Ｈ１に記載の組成物。
Ｈ１２．　組成物が、約６５°～９０℃で脱着する、実施形態Ｈ１に記載の組成物。
Ｈ１３．　組成物が、CO_2を、５％～９５％の相対湿度の範囲の相対湿度で吸着する、実施形態Ｈ１に記載の組成物。
Ｈ１４．　組成物が、第２の化合物を更に含み、第２の化合物が、有機硫黄含有化合物である、実施形態Ｈ１に記載の組成物。
Ｈ１５．　第２の化合物が、２，２－チオジエタノール、２－ヒドロキシエチルジスルフィド、又は３，３’－ジチオジプロピオン酸である、実施形態Ｈ１４に記載の組成物。
Ｈ１６．　第２の化合物が、組成物の５％（重量／重量）を構成する、実施形態Ｈ１４に

記載の組成物。
Ｈ１７．　組成物であって、
　少なくとも７０ミクロンの最大寸法を有する多孔質シリカ粒子であって、多孔質シリカ粒子が、複数の細孔を含み、複数の細孔が、０．８ｍＬ／ｇ超の体積及び少なくとも９０オングストロームのサイズを有する、多孔質シリカ粒子と、
　複数のアミン部分を含む第１のエチレンアミン／オリゴマー化合物であって、第１の化合物が、多孔質シリカ粒子の表面に結合しており、表面修飾層を、多孔質シリカ粒子の表面上にファンデルワールス相互作用を介して形成する、第１のエチレンアミン／オリゴマー化合物と、を含む、組成物。
Ｈ１８．　方法であって、
　複数のアミン部分を含む第１の化合物を含む第１の試薬を、液体及び多孔質シリカ粒子を含む液体混合物中に、複数のアミン部分が多孔質シリカ粒子の表面に化学結合することを引き起こして、修飾されたシリカ粒子を形成するのに十分な条件下で導入することと、
　修飾されたシリカ粒子を液体から除去することと、
　修飾されたシリカ粒子を、真空オーブンにおいて、水和閾値に達するまで乾燥させることと、を含む、方法。
Ｈ１９．　官能化されたシリカ粒子が、流体からの二酸化炭素の除去における使用のためのものである、実施形態Ｈ１８に記載の方法。
Ｈ２０．　液体が、メタノール、シクロヘキサン、エタノール、又は水を含む、実施形態Ｈ１８に記載の方法。
Ｈ２１．　液体が、シクロヘキサン及びエタノールを、体積による１：１～５：１の範囲の混合物比で含む、実施形態Ｈ２０に記載の方法。
Ｈ２２．　官能化された多孔質シリカ粒子を液体から除去することが、液体を、官能化された多孔質シリカ粒子から蒸発させることを含む、実施形態Ｈ１８に記載の方法。
Ｈ２３．　硫黄含有化合物を含む第２の化合物を含む第２の試薬を、第２の液体及び修飾されたシリカ粒子を含む第２の液体混合物中に、第２の化合物のアミン部分が第１の化合物のアミン部分に化学結合することを引き起こして、官能化されたシリカ酸化物粒子を形成するのに十分な条件下で導入することと、
　官能化されたシリカ酸化物粒子を第２の液体から除去することと、
　修飾されたシリカ粒子を、真空オーブンにおいて、水和閾値に達するまで乾燥させることと、を更に含む、実施形態Ｈ１８に記載の方法。
Ｈ２４．第２の化合物が、第２の液体混合物中に、シリカ酸化物材料に対して１０％～５０％（重量／重量）の範囲の第２の化合物で含まれる、実施形態Ｈ２３に記載の方法。
Ｈ２５．　第２の化合物が、液体混合物中に、シリカ酸化物材料に対して約３０％（重量／重量）の第２の化合物で含まれる、実施形態Ｈ２３に記載の方法。
Ｈ２６．　実施形態Ｈ１８に記載の方法によって修飾された多孔質シリカ粒子を含む、組成物。
Ｈ２７．　方法であって、
　複数のアミン部分を含むエチレンアミン混合物化合物を含む第１の試薬を、メタノール又はエタノール及び多孔質シリカ粒子を含む液体混合物中に、エチレンアミン混合物化合物の複数のアミン部分が多孔質シリカ粒子の表面に化学結合することを引き起こして、修飾されたシリカ粒子を形成するのに十分な条件下で導入することと、
　液体を、修飾されたシリカ粒子から蒸発させることによって、修飾されたシリカ粒子を液体から除去することと、
　修飾されたシリカ粒子を、真空オーブンにおいて、修飾されたシリカ粒子に対して５％重量／重量の第１の液体の水和閾値に達するまで乾燥させることと、を含む、方法。
Ｈ２８．　実施形態Ｈ１に記載の組成物を使用して、大気CO_2を空気から直接空気捕捉によって除去することを含む、方法。
Ｈ２９．　化合物が、疎水性化合物を更に含む、実施形態Ｈ１に記載の組成物。
Ｈ３０．　疎水性化合物が、疎水性シラン化合物又は疎水性ポリマーである、実施形態Ｈ

２９に記載の組成物。
Ｈ３１．　疎水性シラン化合物が、シラン分子、及び１、２、又は３つのアルキル鎖を含む、実施形態Ｈ３０に記載の組成物。
Ｈ３２．　疎水性ポリマーが、ポリジメチルシロキサン（ＰＤＭＳ）、シリコーン油、ポリエチレン、ポリテトラフルオルエチレン、又はポリウレタンを含む、実施形態Ｈ３１に記載の組成物。
【０８９２】
非限定的な実施形態Ｉ
Ｉ１．　方法であって、
　ポリマーアミンを含む第１の試薬、並びにシラン部分及びアミン官能基を含む第２の試薬を、ある体積の水中に導入して、官能化混合物を形成することと、
　多孔質シリカ粒子を官能化混合物中に導入することと、
　官能化混合物中の多孔質シリカ粒子を、ある期間にわたって、第１の試薬及び第２の試薬を多孔質シリカ粒子の表面と相互作用させて、官能化されたシリカ粒子を形成するのに十分な条件下で静止させることと、
　官能化されたシリカ粒子を、上記の体積の水から除去することと、を含む、方法。
Ｉ２．　官能化されたシリカ粒子を形成するための条件が、周囲圧力及び２０°～７０℃の範囲の温度を含む、実施形態Ｉ１に記載の方法。
Ｉ３．　第２の試薬が、（３－アミノプロピル）トリメトキシシラン、（３－アミノプロピル）トリエトキシシラン、［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシラン、Ｎ－（２－アミノエチル）－３－アミノプロピルシラントリオール、Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミン、３－アミノプロピルシラントリオール、Ｎ－（２－アミノエチル）－３－アミノプロピルシラントリオール、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシラン、又はトリス（ジメチルアミノ）クロロシランを含む、実施形態Ｉ１に記載の方法。
Ｉ４．　官能化されたシリカ粒子を、５０℃以上で、水和閾値に達するまで乾燥させるか、又はオーブンにおいて窒素の流れ下で５０℃以上で乾燥させることを更に含む、実施形態Ｉ１に記載の方法。
Ｉ５．　乾燥させることが、ダブルコーン真空乾燥機、コンベヤベルト乾燥機、Ｂｌｅｔ乾燥機、又はヌッチェフィルタ乾燥機において実行される、実施形態Ｉ４に記載の方法。
Ｉ６．　多孔質シリカ粒子が、少なくとも２５キログラムの量の多孔質シリカ粒子を含む、実施形態Ｉ１に記載の方法。
Ｉ７．　量が、１００キログラム～１０，０００キログラムの範囲である、実施形態Ｉ６に記載の方法。
Ｉ８．　第１の試薬が、上記の体積の水中に、シリカ酸化物材料に対して５％～２０％（重量／重量）の範囲の第２の試薬で含まれる、実施形態Ｉ１に記載の方法。
Ｉ９．　第２の試薬が、上記の体積の水中に、シリカ酸化物材料に対して２０％～７０％（重量／重量）の範囲の第２の試薬で含まれる、実施形態Ｉ１に記載の方法。
Ｉ１０．　導入することが、複数の量の多孔質シリカ粒子を官能化混合物中に連続的に導入して、複数の量の官能化されたシリカ粒子を形成することを含み、除去することが、複数の量の官能化されたシリカ粒子を連続的に除去することを含む、実施形態Ｉ１に記載の方法。
Ｉ１１．　官能化されたシリカ粒子を使用して、二酸化炭素を流体から除去することを更に含む、実施形態Ｉ１に記載の方法。
Ｉ１２．　抗酸化剤化合物を含む第３の試薬を、上記の体積の水中に導入することを更に含む、実施形態Ｉ１に記載の方法。
Ｉ１３．　抗酸化剤化合物が、２，２－チオジエタノール、２－ヒドロキシエチルジスルフィド、及び３，３’－ジチオジプロピオン酸を含むリストから選択される有機硫黄含有化合物である、実施形態Ｉ１２に記載の方法。
Ｉ１４．　多孔質シリカ粒子が、官能化混合物中に３時間～７２時間維持される、実施形

態Ｉ１に記載の方法。
Ｉ１５．　組成物であって、
　多孔質シリカ粒子と、
　少なくとも２つのアミン部分を含む第１の化合物であって、第１の化合物のアミン部分が、多孔質シリカ粒子の表面に結合している、第１の化合物と、
　シラン部分及び少なくとも１つのアミン官能基を含む第２の化合物であって、第２の化合物が、多孔質シリカ粒子の表面に化学結合しており、アミン部分が、シラン部分に化学結合している、第２の化合物と、を含む、組成物。
Ｉ１６．　多孔質シリカ粒子が、複数の細孔を含む、実施形態Ｉ１５に記載の組成物。
Ｉ１７．　細孔が、６０～４００オングストロームの範囲のサイズを有する、実施形態Ｉ１６に記載の組成物。
Ｉ１８．　細孔が、１００～１５０オングストロームの範囲のサイズを有する、実施形態Ｉ１６に記載の組成物。
Ｉ１９．　複数の細孔が、０．５ｍＬ／ｇ超の体積を有する、実施形態Ｉ１６に記載の組成物。
Ｉ２０．　シラン部分が、メトキシシラン、シラントリオール、又はエトキシシランを含む群から選択される、実施形態Ｉ１５に記載の組成物。
Ｉ２１．　第２の化合物が、（３－アミノプロピル）トリメトキシシラン、（３－アミノプロピル）トリエトキシシラン、［３－（２－アミノエチルアミノ）プロピル］トリメトキシシラン、Ｎ－（２－アミノエチル）－３－アミノプロピルシラントリオール、Ｎ１－（３－トリメトキシシリルプロピル）ジエチレントリアミン、３－アミノプロピルシラントリオール、Ｎ－（２－アミノエチル）－３－アミノプロピルシラントリオール、トリス（エチルメチルアミノ）クロロシラン、又はトリス（ジメチルアミノ）クロロシランを含む群から選択される、実施形態Ｉ１５に記載の組成物。
Ｉ２２．　第１の化合物が、ポリマーアミンである、実施形態Ｉ１５に記載の組成物。
Ｉ２３．　第１の化合物が、直鎖又は分岐鎖ポリマーアミンである、実施形態Ｉ２２に記載の組成物。
Ｉ２４．　第１の化合物が、ポリエチレンイミン（ＰＥＩ）、ポリ（プロピレンイミン）（ＰＰＩ）、若しくは他の大分子アミン混合物、テトラエチレンペンタミン（ＴＥＰＡ）、トリエチレンテトラミン（ＴＥＴＡ）、エタノールアミン、ジエチレントリアミン、ピペラジン、ペンタエチレンヘキサミン、又はテトラメチルエチレンジアミンを含む群から選択される、実施形態Ｉ２３に記載の組成物。
Ｉ２５．　多孔質シリカ粒子が、少なくとも０．５ミリメートルの平均半径を有する、実施形態Ｉ１５に記載の組成物。
Ｉ２６．　第１の化合物及び第２の化合物のアミン部分が、二酸化炭素と反応性である、実施形態Ｉ１５に記載の組成物。
Ｉ２７．　組成物が、１乾燥キログラム当たり１ｍｏｌ～２ｍｏｌのCO_2を吸着する、実施形態Ｉ１５に記載の組成物。
Ｉ２８．　組成物が、CO_2を、６５℃～９０℃の温度で脱着する、実施形態Ｉ１５に記載の組成物。
Ｉ２９．　組成物が、CO_2を、５％～９０％の相対湿度の範囲の相対湿度で吸着する、実施形態Ｉ１５に記載の組成物。
Ｉ３０．　組成物であって、
　０．５ｍｍ～２ｍｍの範囲の最大寸法を有する多孔質シリカ粒子であって、多孔質シリカ粒子が、複数の細孔を含み、複数の細孔が、０．５ｍＬ／ｇ超の体積及び６０～４００オングストロームの範囲のサイズを有する、多孔質シリカ粒子と、
　少なくとも２つのアミン部分を含む第１の化合物と、
　シラン部分及び少なくとも１つのアミン部分を含む第２の化合物であって、シラン部分が、多孔質シリカ粒子の表面に結合しており、第１の化合物の少なくとも２つのアミン部分が、第２の化合物の少なくとも１つのアミン部分に非共有結合している、第２の化合物

と、を含む、組成物。
Ｉ３１．　実施形態Ｉ１に記載の方法によって修飾された多孔質シリカ粒子を含む、組成物。
Ｉ３２．　実施形態Ｉ１５に記載の組成物を使用して、大気CO_2を空気から直接空気捕捉によって除去することを含む、方法。
【０８９３】
非限定的な実施形態Ｊ
Ｊ１．　反応器であって、
　第１の方向に沿って第１のチャンバ壁から第１のチャンバ壁の反対側の第２のチャンバ壁へ延びる反応チャンバであって、反応チャンバが、基部から頂部壁へ、第１の方向に垂直な第２の方向に延びる中空区画を備え、区画が、第１の方向に垂直な断面において、基部に対して近位の基部部分及び基部に対して遠位の頂部部分を有し、基部部分が、頂部部分よりも狭い、反応チャンバと、
　第１のチャンバ壁における、反応チャンバ内への入口であって、反応チャンバ内への粉末化吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する、入口と、
　第２のチャンバ壁における、反応チャンバからの出口であって、反応チャンバからの粉末化吸着剤材料の除去のための放出を提供する、出口と、
　１つ以上の空気チャンバであって、各々が、中空区画と、中空区画の基部におけるチャネルを介して流体連通する、１つ以上の空気チャンバと、
　１つ以上の送風機であって、各々が、周囲空気を受容し、反応器の運転中に、空気を、空気チャンバのうちの対応する１つ内に送風するように配置されている、１つ以上の送風機と、
　１つ以上の排気ポートであって、反応器の運転中に、空気を、反応チャンバの区画から除去するように構成されている、１つ以上の排気ポートと、を備える、反応器。
Ｊ２．　１つ以上の空気チャンバ及び中空区画と流体連通する分配プレートを更に備える、実施形態Ｊ１に記載の反応器。
Ｊ３．　分配プレートが、Ｗ形状である、実施形態Ｊ２に記載の反応器。
Ｊ４．　分配プレートが、平坦である、実施形態Ｊ２に記載の反応器。
Ｊ５．　第１の分配プレートが、Ｗ形状であり、第２の分配プレートが、平坦である、実施形態Ｊ２に記載の反応器。
Ｊ６．　１つ以上の排気ポートが、反応チャンバの頂部壁において配置されている、実施形態Ｊ１に記載の反応器。
Ｊ７．　反応器が、入口と流体連通するように配置された送り装置を更に備え、送り装置が、反応器の運転中に、粉末化吸着剤材料を反応チャンバに送達するように構成されている、実施形態Ｊ１に記載の反応器。
Ｊ８．　入口が、基部に対して近位に位置する、実施形態Ｊ７に記載の反応器。
Ｊ９．　反応器が、運転中に、反応チャンバから空気チャンバへの圧力低下が、９．０ｐｓｉ、０．１ｐｓｉ、又はそれ以下であるように構成されている、実施形態Ｊ１に記載の反応器。
Ｊ１０．　反応器が、運転中に、吸着剤チャンバが、１グラムの吸着剤材料当たり約１０リットル以上の空気を収容するように構成されている、実施形態Ｊ１に記載の反応器。
Ｊ１１．　粉末化吸着剤材料が、５０～１，７００μｍ、又は５０～３，０００μｍ、又は２５～４，０００μｍの直径を有する粒子を含む、実施形態Ｊ１に記載の反応器。
Ｊ１２．　反応器が、ルーバーを更に備え、ルーバーが、第１の方向に沿って配置されており、反応器の１つ以上の壁上に位置し、ルーバーが、周囲空気を、１つ以上の空気チャンバ内に引き込むように構成されている、実施形態Ｊ１に記載の反応器。
Ｊ１３．　粉末化吸着剤材料が、CO_2吸着剤である、実施形態Ｊ１に記載の反応器。
Ｊ１４．　中空区画が、断面において、基部に対して近位の第１のテーパー部分を備える、実施形態Ｊ１に記載の反応器。
Ｊ１５．　中空区画が、断面において、第１のテーパー部分から離隔した第２のテーパー

部分を更に備える、実施形態Ｊ１４に記載の反応器。
Ｊ１６．　CO_2を大気から除去するための方法であって、
　CO_2を含む周囲空気を、１つ以上の空気チャンバを備える反応器に提供することと、
　周囲空気を送風して、これにより、周囲空気が、１つ以上の空気チャンバから反応チャンバ内に移行することと
　粉末化吸着剤材料を、反応チャンバに入口を介して送達することと、
　粉末化吸着剤材料及び空気の流動床を、粉末化吸着剤材料が、CO_2を空気から吸着して、CO_2低減空気及び使用済み粉末化吸着剤材料を形成する条件下で作製することと、
　使用済み粉末化吸着剤材料を、反応チャンバから連続的に除去することと、
　CO_2低減空気を、反応チャンバから１つ以上の排気ポートを介して連続的に除去することと、を含む、方法。
Ｊ１７．　直接空気捕捉（ＤＡＣ）システムであって、
　CO_2を、周囲空気から、粉末化吸着剤材料を使用して吸着するように構成された流動床吸着反応器と、
　粉末化吸着剤材料を流動床吸着反応器から受容し、CO_2を粉末化吸着剤材料から脱着するように構成された脱着反応器と、
　廃熱を生成する産業プロセス設備であって、廃熱が、脱着反応器に提供されて、粉末化吸着剤材料を加熱する、産業プロセス設備と、を備える、ＤＡＣシステム。
【０８９４】
非限定的な実施形態Ｋ
Ｋ１．　構造体であって、
　複数のパネルによって画定されたチャンバであって、各パネルが、第１の方向に構造体の基部から延びる一対の梁間に吊されており、各パネルの高さが、第１の方向にパネルの底部からパネルの頂部へ延び、各パネルが、
　多孔質内側シート、
　多孔質外側シート、及び
　パネルの頂部からパネルの底部へ延びる、内側シートと外側シートとの間の空洞を備える、チャンバと、
　複数のパネルの頂部における空洞への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する入口と、
　複数のパネルの空洞の底部からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する出口と、
　流体をチャンバ内に向けるように配置された送風機と、を備える、構造体。
Ｋ２．　パネルの空洞内の吸着剤材料が、垂直落下移動床吸収体を形成する、実施形態Ｋ１に記載の構造体。
Ｋ３．　内側シートと外側シートとの間の空洞が、複数のチャネルに分割されており、複数のチャネルが、内側シート及び外側シートをパネルの側縁部間の間隔で接続する布地リブによって分離されている、実施形態Ｋ１又はＫ２に記載の構造体。
Ｋ４．　複数のチャネルの各チャネルが、第１の方向に垂直な平面における実質的に正方形の断面を有する、実施形態Ｋ３に記載の構造体。
Ｋ５．　空洞が、内側シートと外側シートとの間の厚さを有し、厚さが、２０センチメートル以下である、実施形態Ｋ１～Ｋ４のうちのいずれか１つに記載の構造体。
Ｋ６．　チャンバが、第１の方向に延びる円筒軸を有する、実質的に円筒の形状を有する、実施形態Ｋ１～Ｋ５のうちのいずれか１つに記載の構造体。
Ｋ７．　チャンバが、４つの壁を有する、実質的に長方角柱の形状を有する、実施形態Ｋ１～Ｋ５のうちのいずれか１つの構造体。
Ｋ８．　４つの壁のうちの少なくとも１つの壁が、複数のパネルのうちのパネルを備える、実施形態Ｋ７に記載の構造体。
Ｋ９．　空洞から出口への吸着剤材料の流れを制御するように構成された計量デバイスを備える、実施形態Ｋ１～Ｋ８のうちのいずれか１つに記載の構造体。
Ｋ１０．　内側シート及び外側シートが、布地材料を含む、実施形態Ｋ１～Ｋ９のうちの

いずれか１つに記載の構造体。
Ｋ１１．　吸着剤材料が、ペレット化形態を有する、実施形態Ｋ１～Ｋ１０のうちのいずれか１つに記載の構造体。
Ｋ１２．　吸着剤材料が、二酸化炭素を流体から吸着するように構成されている、実施形態Ｋ１～Ｋ１１のうちのいずれか１つに記載の構造体。
Ｋ１３．　送風機が、チャンバにおいて位置決めされている、実施形態Ｋ１～Ｋ１２のうちのいずれか１つに記載の構造体。
Ｋ１４．　送風機が、第１の方向にチャンバの下３分の１の部分において位置決めされており、下３分の１の部分が、構造体の基部に最も近い部分である、実施形態Ｋ１～Ｋ１３のうちのいずれか１つに記載の構造体。
Ｋ１５．　送風機が、第１の方向にチャンバの中央の３分の１の部分において位置決めされている、実施形態Ｋ１～Ｋ１３のうちのいずれか１つに記載の構造体。
Ｋ１６．　送風機が、流体を第１の方向に向けるように構成されている、実施形態Ｋ１～Ｋ１５のうちのいずれか１つに記載の構造体。
Ｋ１７．　流体が、ガスを含む、実施形態Ｋ１～Ｋ１６のうちのいずれか１つに記載の構造体。
Ｋ１８．　流体が、空気を含む、実施形態Ｋ１～Ｋ１７のうちのいずれか１つに記載の構造体。
Ｋ１９．　方法であって、
　吸着剤材料を構造体の入口において送ることであって、構造体が、複数のパネルによって画定されたチャンバを備え、各パネルが、一対の梁間に吊されており、各パネルが、
　多孔質内側シート、
　多孔質外側シート、及び
　　パネルの頂部からパネルの底部へ延びる、内側シートと外側シートとの間の空洞を備え、入口が、複数のパネルの頂部における空洞への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する、送ることと、
　吸着剤材料を構造体の出口から抽出することであって、出口が、複数のパネルの空洞の底部からの吸着剤材料の除去のための放出を提供し、吸着剤材料を出口から抽出することが、空洞内の吸着剤材料が重力に起因して落下することを引き起こす、抽出することと、
　複数のパネルを通る流体を、内側シートから外側シートに向かう方向に向けることと、
を含む、方法。
Ｋ２０．　吸着剤材料を出口から抽出する速度を制御して、空洞を重力に起因して通る吸着剤材料の体積流量を制御することを含む、実施形態Ｋ１９に記載の方法。
Ｋ２１．　吸着剤材料を構造体の入口において送る速度を、吸着剤材料を出口から抽出する速度に基づいて制御することを含む、実施形態Ｋ２０に記載の方法。
Ｋ２２．　吸着剤材料を出口から抽出する速度を制御して、流体への吸着剤材料の曝露時間を制御することを含む、実施形態Ｋ２０又はＫ２１に記載の方法。
Ｋ２３．　流体への吸着剤材料の曝露時間を、３０分以上であるように制御することを含む、実施形態Ｋ２２に記載の方法。
Ｋ２４．　流体への吸着剤材料の曝露時間を、９０分以下であるように制御することを含む、実施形態Ｋ２２又はＫ２３に記載の方法。
Ｋ２５．　構造体であって、
　第１の方向に構造体の基部から構造体の頂部に向かって延びる第１の梁と、
　第１の梁から離隔しており、第１の梁に平行に延びる第２の梁と、
　第１の縁部において第１の梁に結合しており、第２の縁部において第２の梁に結合しているパネルであって、パネルの幅が、第１の縁部から第２の縁部へ、第１の方向に直交する方向に延び、パネルの高さが、第１の方向にパネルの底部からパネルの頂部へ延び、パネルが、
　　多孔質内側シート、
　　多孔質外側シート、及び

パネルの頂部からパネルの底部へ延びる、内側シートと外側シートとの間の空洞を備える、パネルと、
パネルの頂部における空洞への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する入口と、
空洞の底部からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する出口と、
パネルを通る流体を、内側シートから外側シートに向かう方向に向けるように配置された送風機と、を備える、構造体。

【０８９５】

非限定的な実施形態Ｌ

Ｌ１．　二酸化炭素を、バルク固体を含む吸着剤材料から除去するためのシステムであって、
熱を作動流体及び熱供給源流体から吸着剤材料に伝達することによって、水蒸気を吸着剤材料から蒸発させるように構成された第１の熱交換器と、
熱を水蒸気から作動流体に伝達することによって、水蒸気を凝縮させるように構成された凝縮器と、
熱を作動流体から吸着剤材料に伝達することによって、二酸化炭素を吸着剤材料から脱着するように構成された第２の熱交換器と、
二酸化炭素を第２の熱交換器から除去するように構成されたポンプと、
作動流体を、第１の熱交換器、凝縮器、及び第２の熱交換器間で循環させるための閉ループ流路と、
熱供給源流体を第１の熱交換器に提供するための開ループ流路と、
吸着剤材料を、第１の熱交換器から第２の熱交換器に輸送するためのチャネルと、を備える、システム。

Ｌ２．　第１の熱交換器が、
第１の熱交換器への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する第１の入口、及び
第１の熱交換器からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する第１の出口を備え、
運転中に、第１の入口が、第１の出口よりも高い高度を有する、実施形態Ｌ１に記載のシステム。

Ｌ３．　第２の熱交換器が、
第２の熱交換器への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する第２の入口、及び
第２の熱交換器からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する第２の出口を備え、
運転中に、第２の入口が、第２の出口よりも高い高度を有する、実施形態Ｌ２に記載のシステム。

Ｌ４．　運転中に、第２の熱交換器の第２の入口が、第１の熱交換器の第１の出口よりも高い高度を有する、実施形態Ｌ３に記載のシステム。

Ｌ５．　運転中に、第２の熱交換器の第２の入口が、第１の熱交換器の第１の出口よりも低い高度を有する、実施形態Ｌ３に記載のシステム。

Ｌ６．　閉ループ流路及び開ループ流路が、互いに流体的に隔離されている、実施形態Ｌ１～Ｌ５のうちのいずれか１つに記載のシステム。

Ｌ７．　第１の熱交換器内への吸着剤材料の流れを制御するように構成された計量デバイスを備える、実施形態Ｌ１～Ｌ６のうちのいずれか１つに記載のシステム。

Ｌ８．　吸着剤材料が、ペレット化形態を有する、実施形態Ｌ１～Ｌ７のうちのいずれか１つに記載のシステム。

Ｌ９．　吸着剤材料が、二酸化炭素を流体から吸着するように構成されている、実施形態Ｌ１～Ｌ８のうちのいずれか１つに記載のシステム。

Ｌ１０．　第１の熱交換器及び第２の熱交換器が、プレート熱交換器を含む、実施形態Ｌ１～Ｌ９のうちのいずれか１つに記載のシステム。

Ｌ１１．　第１の熱交換器及び第２の熱交換器が、シェルアンドチューブ熱交換器を含む、実施形態Ｌ１～Ｌ９のうちのいずれか１つに記載のシステム。

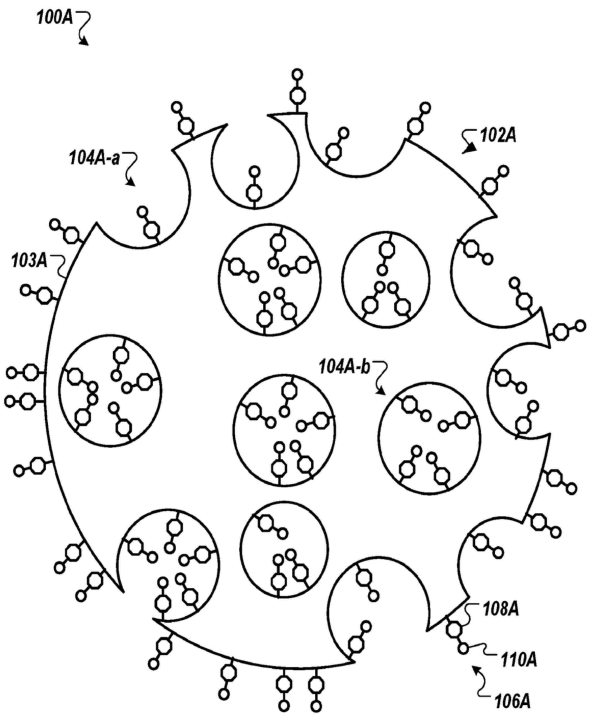
Ｌ１２．　第１の熱交換器及び第２の熱交換器が、シェルアンドプレート熱交換器を含む、実施形態Ｌ１～Ｌ９のうちのいずれか１つに記載のシステム。

Ｌ１３．　第１の熱交換器が、蒸発器を備える、実施形態Ｌ１～Ｌ１２のうちのいずれか１つに記載のシステム。
Ｌ１４．　第２の熱交換器が、脱着器を備える、実施形態Ｌ１～Ｌ１３のうちのいずれか１つに記載のシステム。
Ｌ１５．二酸化炭素を、バルク固体を含む吸着剤材料から除去するための方法であって、
作動流体を、第１の熱交換器、凝縮器、及び第２の熱交換器間の閉ループにおいて循環させることと、
熱供給源流体を、第１の熱交換器に提供することと、
熱を作動流体及び熱供給源流体から第１の熱交換器内の吸着剤材料に伝達することによって、水蒸気を吸着剤材料から蒸発させることと、
熱を水蒸気から凝縮器内の作動流体に伝達することによって、水蒸気を凝縮させることと、
吸着剤材料を、第１の熱交換器から第２の熱交換器にチャネルを介して輸送することと、
熱を作動流体から第２の熱交換器内の吸着剤材料に伝達することによって、二酸化炭素を吸着剤材料から脱着することと、
二酸化炭素を、第２の熱交換器からポンプによって除去することと、を含む、方法。
Ｌ１６．　方法が、
吸着剤材料を第１の熱交換器の入口において送ることと、
吸着剤材料を第１の熱交換器の出口から抽出することと、を含み、
吸着剤材料が、第１の熱交換器の入口から第１の熱交換器の出口に、重力に起因して移動する、実施形態Ｌ１５に記載の方法。
Ｌ１７．　方法が、
吸着剤材料を第２の熱交換器の入口において送ることと、
吸着剤材料を第２の熱交換器の出口から抽出することと、を含み、
吸着剤材料が、第２の熱交換器の入口から第２の熱交換器の出口に、重力に起因して移動する、実施形態Ｌ１５又はＬ１６に記載の方法。
Ｌ１８．　熱を、第１の熱交換器内の吸着剤材料から蒸発した水蒸気から第２の熱交換器内の吸着剤材料に、作動流体を介して伝達することを含む、実施形態Ｌ１５～Ｌ１７のうちのいずれか１つに記載の方法。
Ｌ１９．　第２の熱交換器内の吸着剤材料を、第１の熱交換器において予備冷却された熱供給源流体を使用して冷却することを含む、実施形態Ｌ１５～Ｌ１８のうちのいずれか１つに記載の方法。
Ｌ２０．　第２のポンプを使用して、真空圧力を第１の熱交換器において確立し、水蒸気を、第１の熱交換器から凝縮器に輸送することを含む、実施形態Ｌ１５～Ｌ１９のうちのいずれか１つに記載の方法。
Ｌ２１．　凝縮した水蒸気を、凝縮器から水出口を介して除去することを含む、実施形態Ｌ１５～Ｌ２０のうちのいずれか１つに記載の方法。
Ｌ２２．　真空圧力を、第２の熱交換器において、ポンプを使用して確立することを含む、実施形態Ｌ１５～Ｌ２１のうちのいずれか１つに記載の方法。
Ｌ２３．　真空圧力を、第１の熱交換器及び第２の熱交換器において、エアロックを使用して維持することを含む、実施形態Ｌ１５～Ｌ２２のうちのいずれか１つに記載の方法。
Ｌ２４．　二酸化炭素を、バルク固体を含む吸着剤材料から除去するためのシステムであって、
熱を熱供給源流体から吸着剤材料に伝達することによって、水蒸気を吸着剤材料から蒸発させるように構成された第１の熱交換器、
熱を作動流体から吸着剤材料に伝達することによって、二酸化炭素を吸着剤材料から脱着するように構成された第２の熱交換器、
二酸化炭素を第２の熱交換器から除去するように構成されたポンプ、
熱を吸着剤材料から冷却流体に伝達することによって、吸着剤材料を冷却するように構

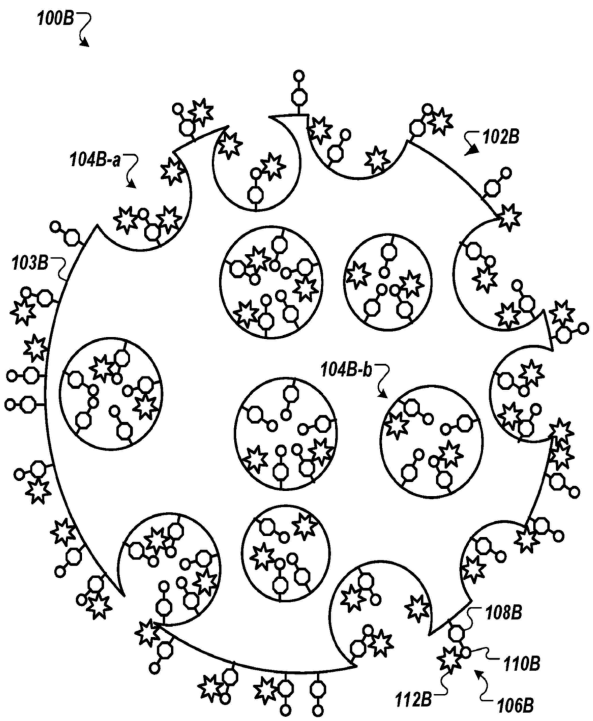
成された第３の熱交換器、
　吸着剤材料を、第１の熱交換器から第２の熱交換器及び第３の熱交換器に輸送するためのチャネルを備える、システム。
Ｌ２５．　システムが、
　第１の熱交換器への吸着剤材料の送達のためのアクセスを提供する入口と、
　第３の熱交換器からの吸着剤材料の除去のための放出を提供する出口と、を備え、
　運転中に、入口が、出口よりも高い高度を有する、実施形態Ｌ２４に記載のシステム。
Ｌ２６．　第１の熱交換器が、蒸発器を備え、
　第２の熱交換器が、脱着器を備え、
　第３の熱交換器が、冷却器を備え、吸着剤材料が、ペレット化形態を有し、二酸化炭素を流体から吸着するように構成されている、実施形態Ｌ２４に記載のシステム。
Ｌ２７．　ポンプが、真空圧力を、第１の熱交換器、第２の熱交換器、及び第３の熱交換器において確立するように構成されている、実施形態Ｌ２４に記載のシステム。
【０８９６】
　本明細書は、多くの詳細を含むが、これらは、特許請求され得るものの範囲についての限定として解釈されるべきでなく、むしろ、特定の例の具体的な特徴の説明として解釈されるべきである。別個の実装態様の文脈において本明細書に記載されるある特定の特徴はまた、組み合わされ得る。対照的に、単一の実装態様の文脈において記載される様々な特徴はまた、複数の実施形態において、別個に実装されてもよく、又はいずれかの好適な部分組み合わせで実装されてもよい。また、特徴は、ある特定の組み合わせで作用するものとして本明細書に記載され得、更にはそのように最初に特許請求され得るが、特許請求される組み合わせからの１つ以上の特徴は、いくつかの場合において、組み合わせから削除され得、特許請求される組み合わせは、部分組み合わせ又は部分組み合わせの変形形態を対象とし得る。
【０８９７】
　同様に、運転が、図面に特定の順序で示されるが、これは、そのような運転が、示される特定の順序若しくは逐次的順序で実行されること、又は全ての示される運転が実行されることを、望ましい結果を得るために必要とするとして理解されるべきでない。ある特定の状況においては、マルチタスク及び並列処理が有利である。また、本明細書に記載される実施形態における様々なシステムモジュール及び構成要素の分離は、そのような分離を全ての実施形態において必要とするとして理解されるべきでなく、記載されるプログラム構成要素及びシステムは、概して、単一のソフトウェア製品において一緒に統合されてもよく、又は複数のソフトウェア製品にパッケージ化されてもよいことが理解されるべきである。
【０８９８】
　いくつかの実装態様を説明した。それにもかかわらず、本発明の趣旨及び範囲から逸脱することなく、種々の変更が行われ得ることを理解されたい。したがって、他の実装態様は、以下の特許請求の範囲の範囲内である。

【図面】

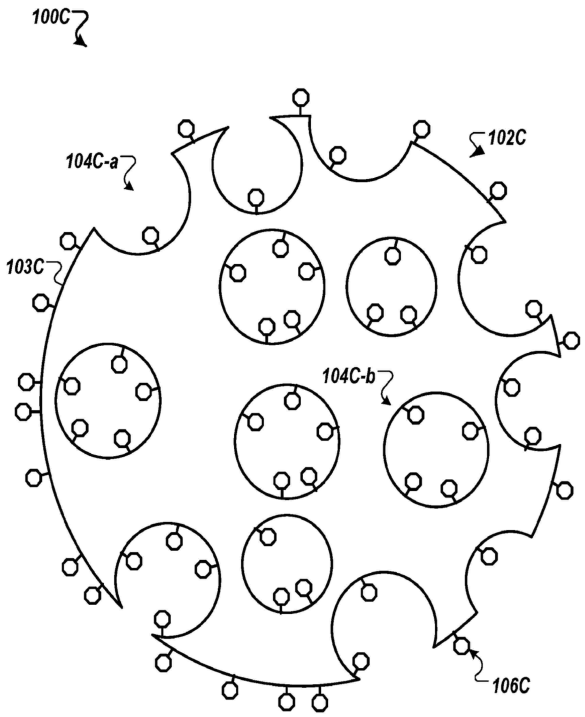
【図１Ａ】



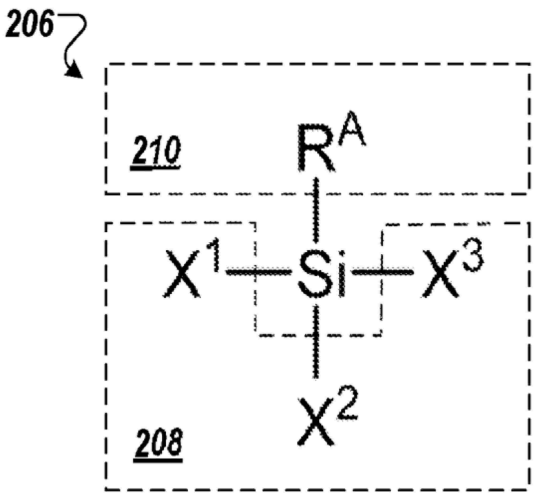
【図１Ｂ】



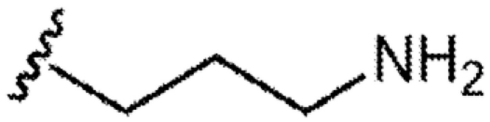
【図１Ｃ】



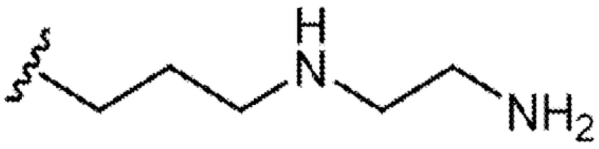
【図２Ａ】



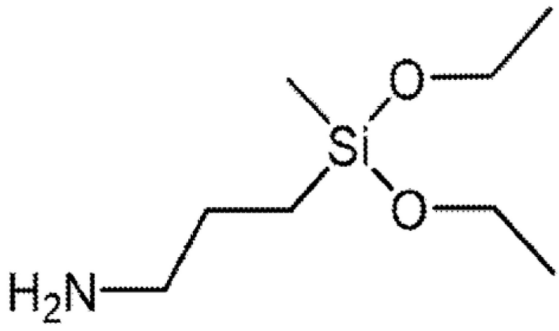
【図２Ｂ】



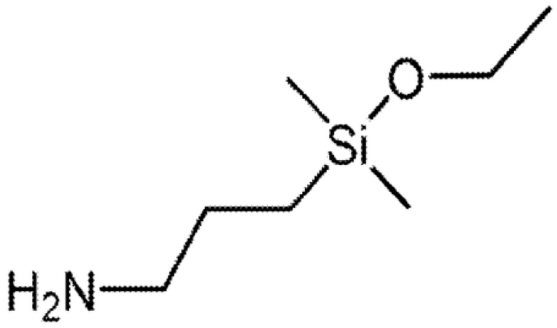
【図２Ｃ】



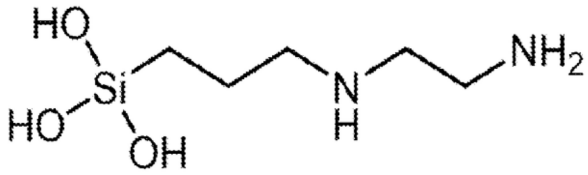
【図２Ｄ】



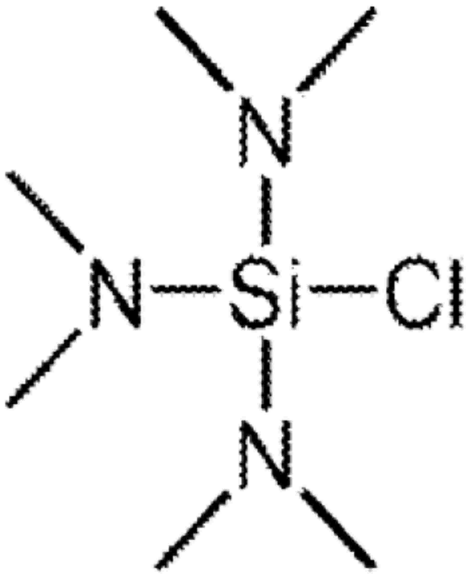
【図２Ｅ】



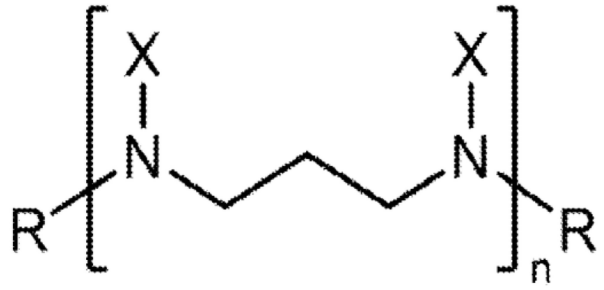
【図２Ｆ】



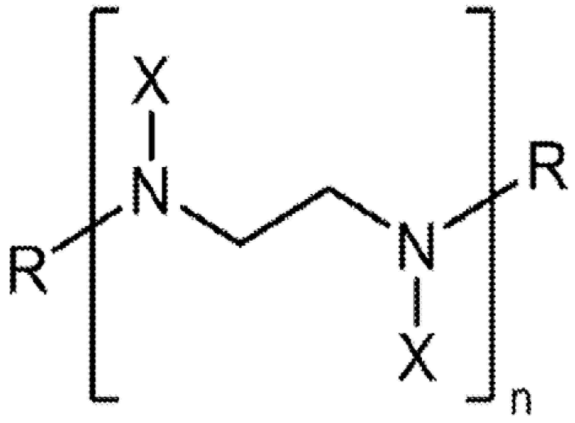
【図２Ｇ】



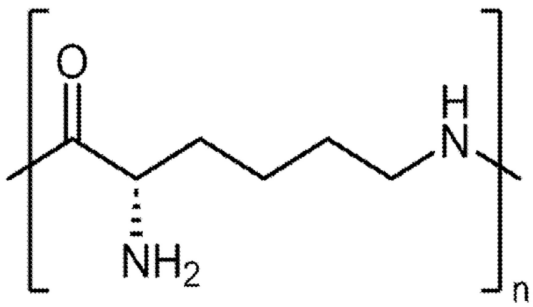
【図２Ｈ】



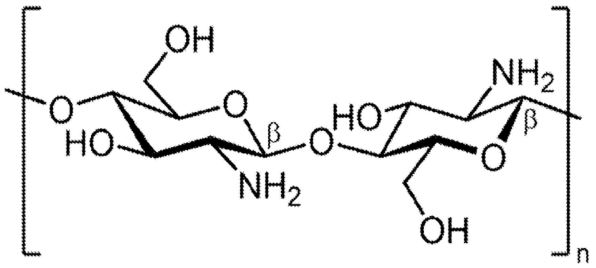
【図２Ｉ】



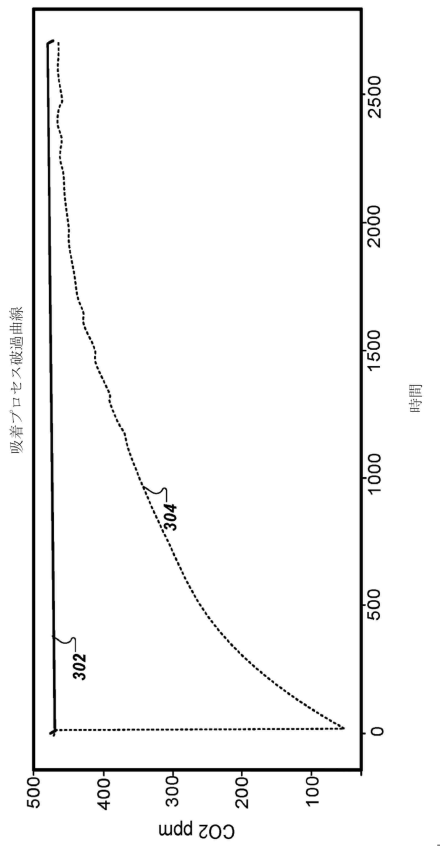
【図２Ｊ】



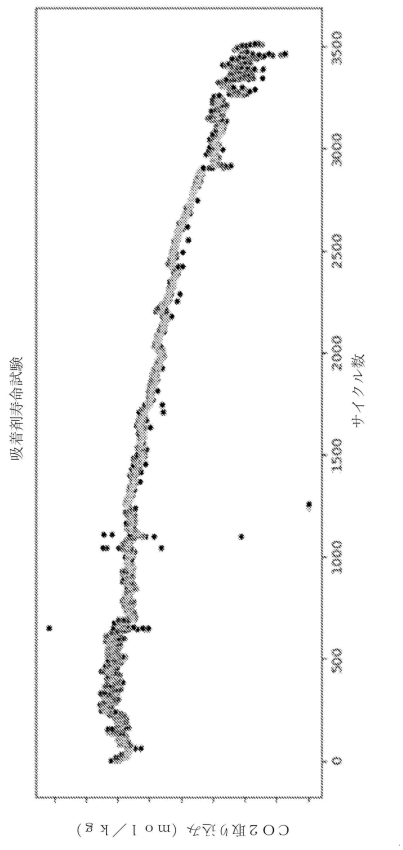
【図２Ｋ】



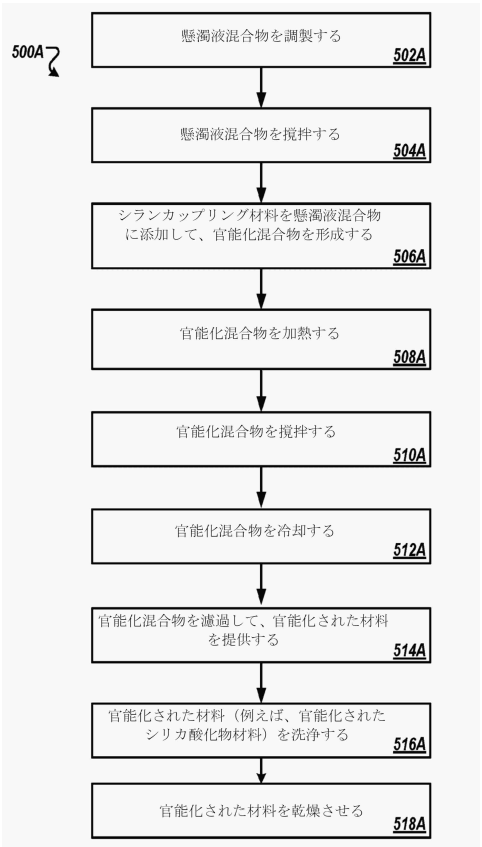
【図３】



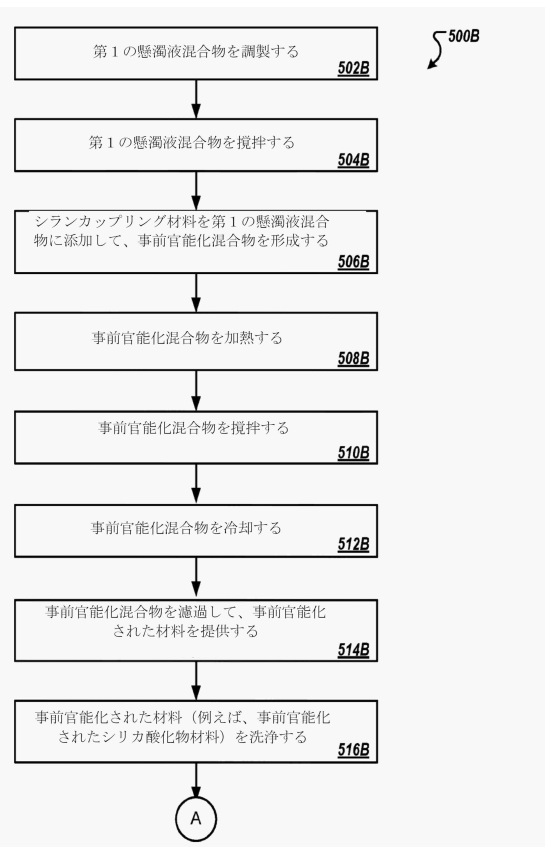
【図４】



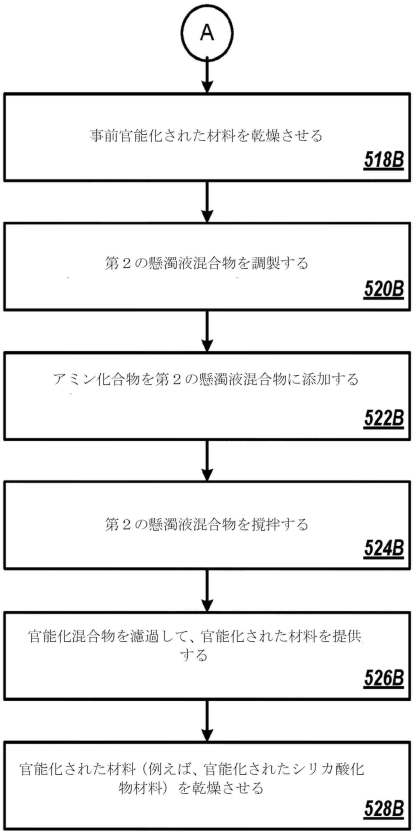
【図５Ａ】



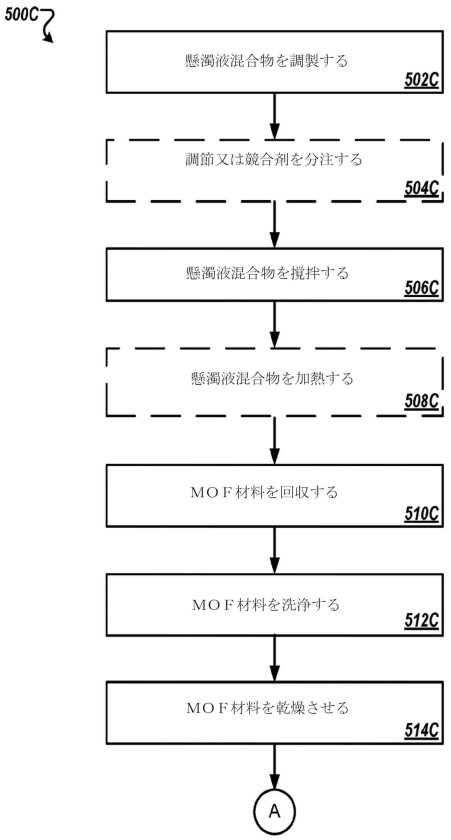
【図５Ｂ－１】



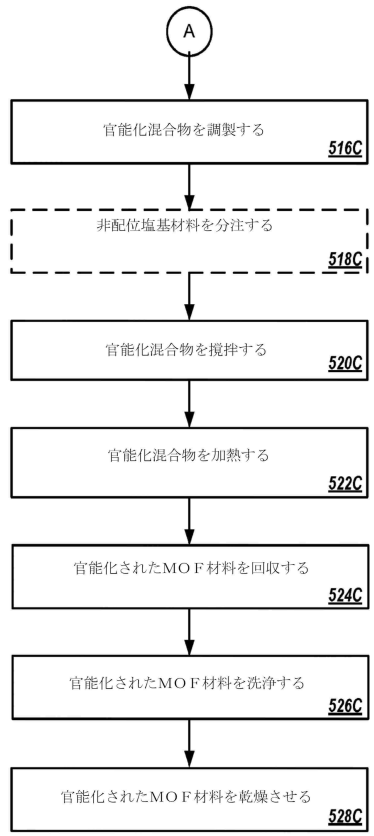
【図５Ｂ－２】



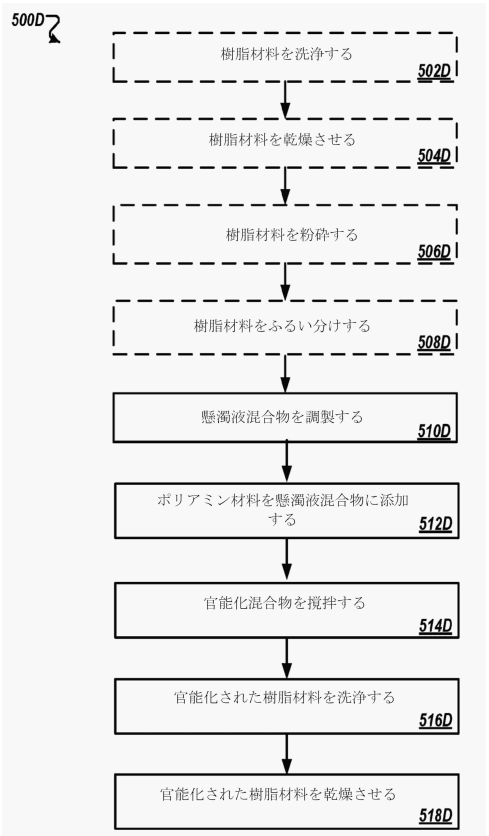
【図５Ｃ－１】



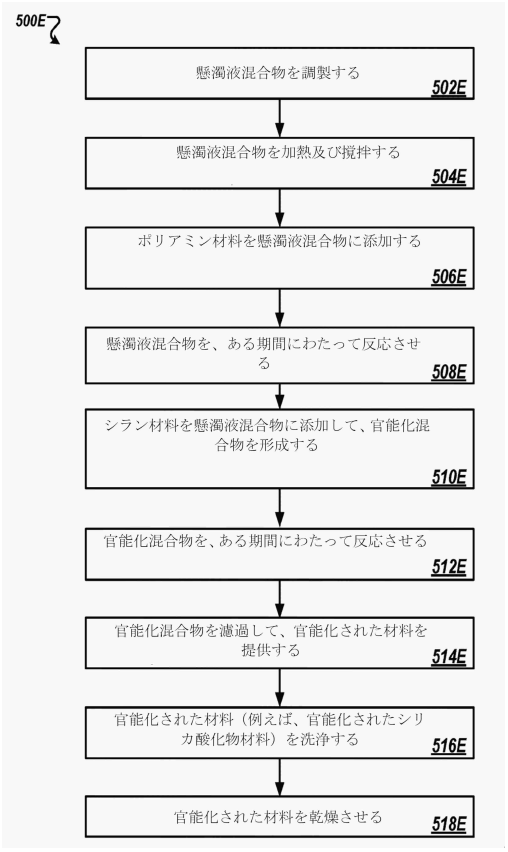
【図５Ｃ－２】



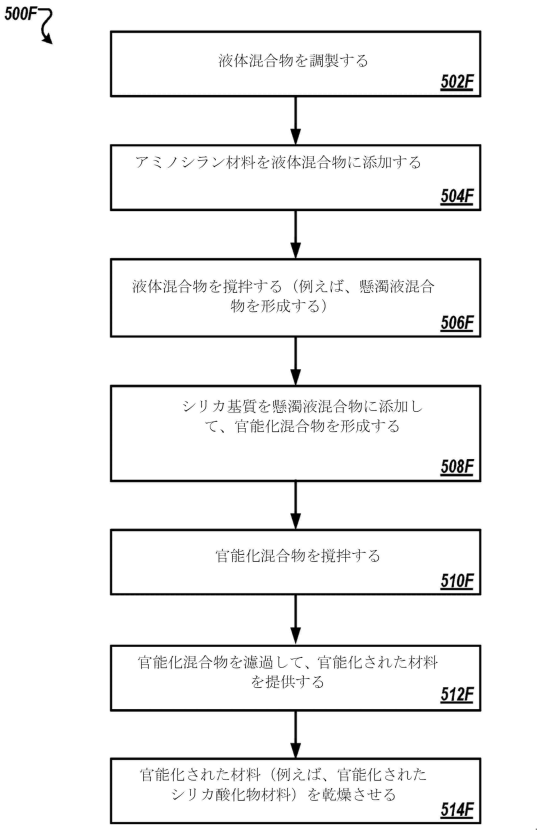
【図５Ｄ】



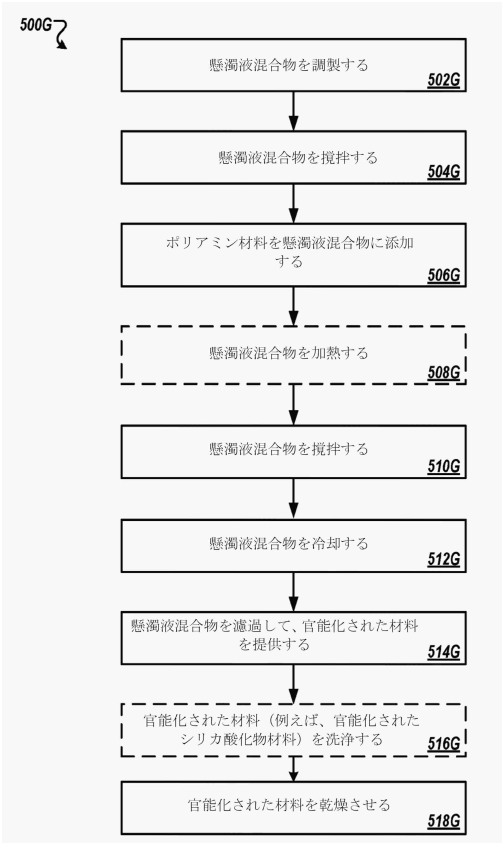
【図５Ｅ】



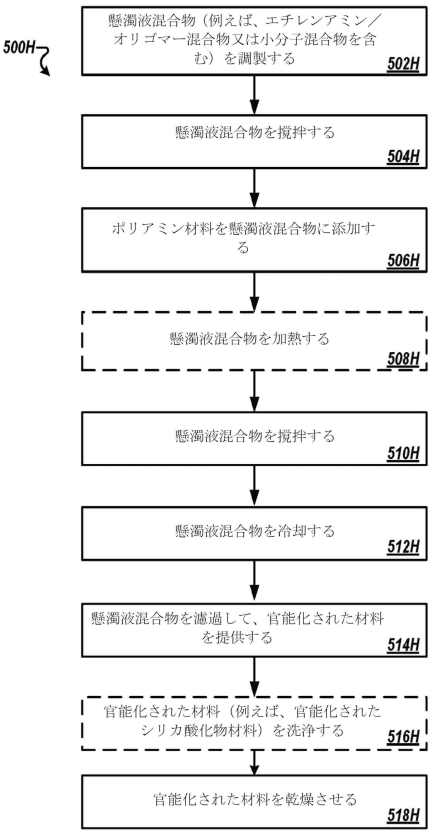
【図５Ｆ】



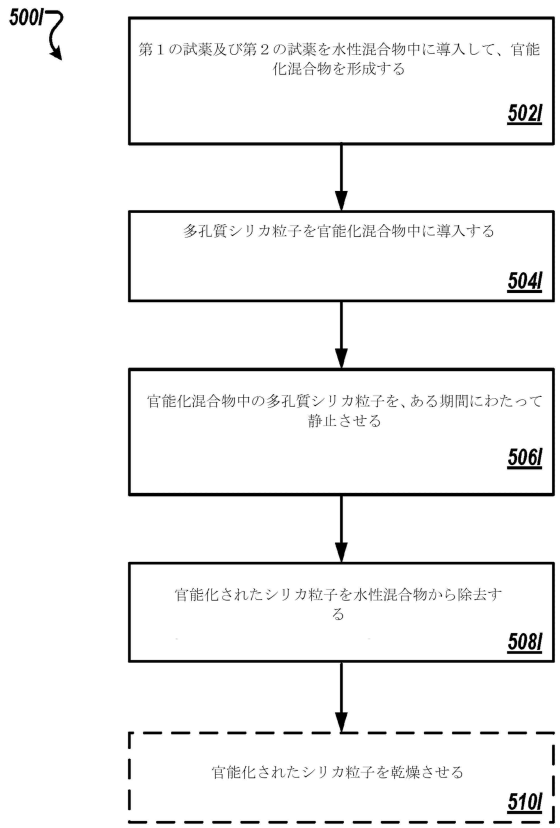
【図５Ｇ】



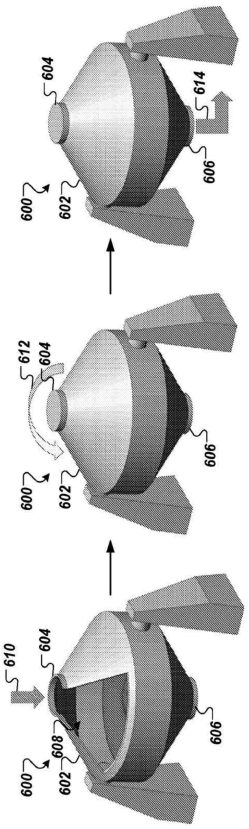
【図５Ｈ】



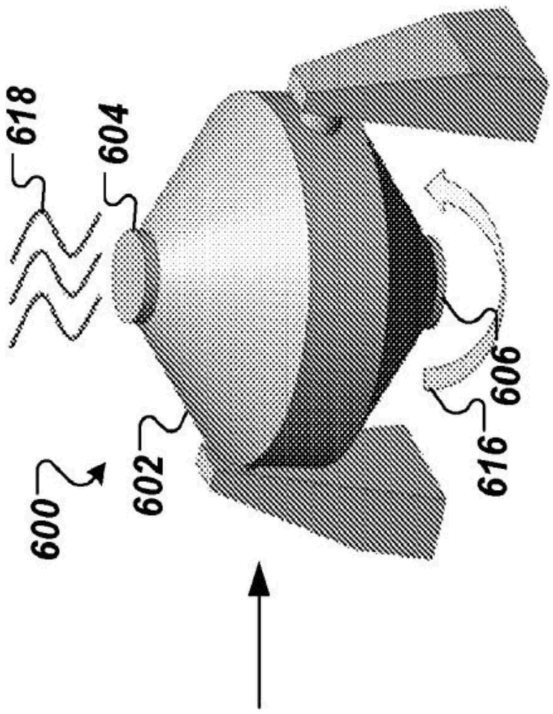
【図５Ｉ】



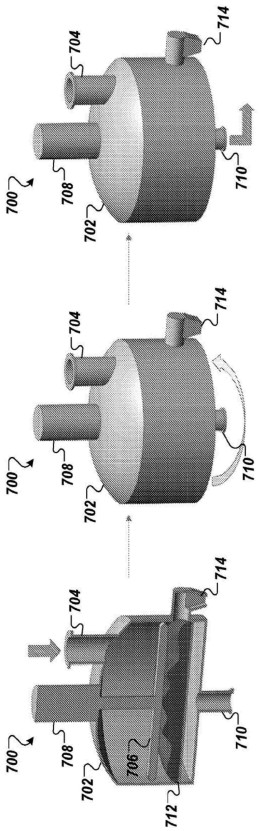
【図６Ａ】



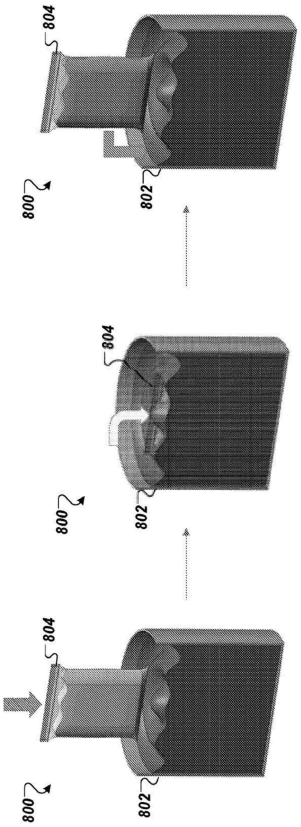
【図６Ｂ】



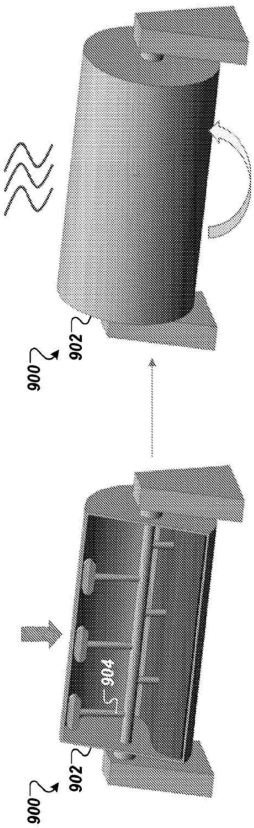
【図７】



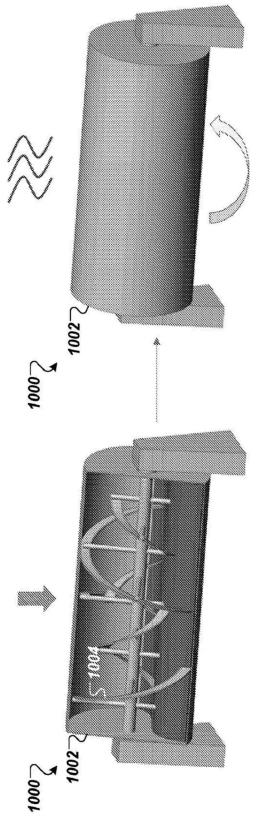
【図８】



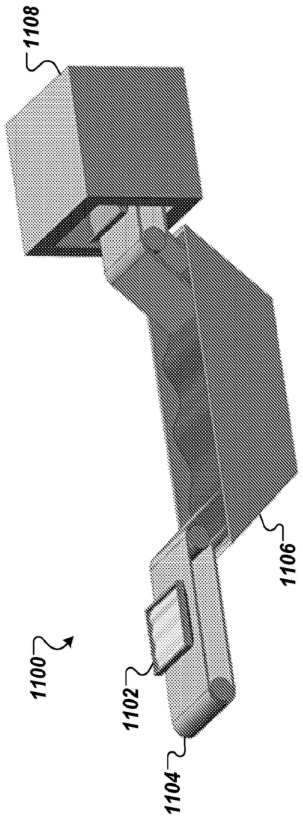
【図９】



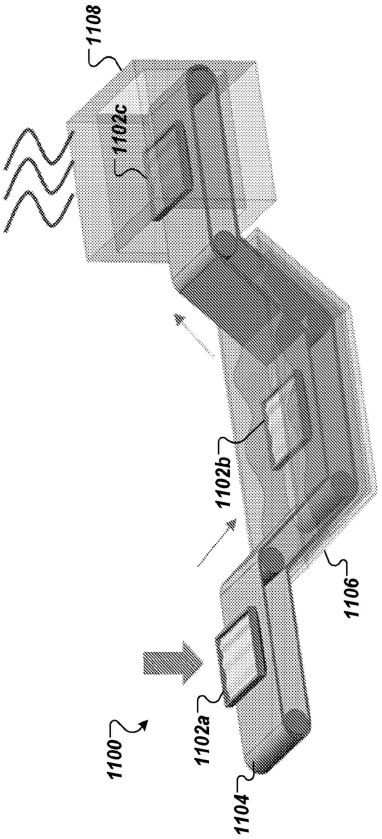
【図１０】



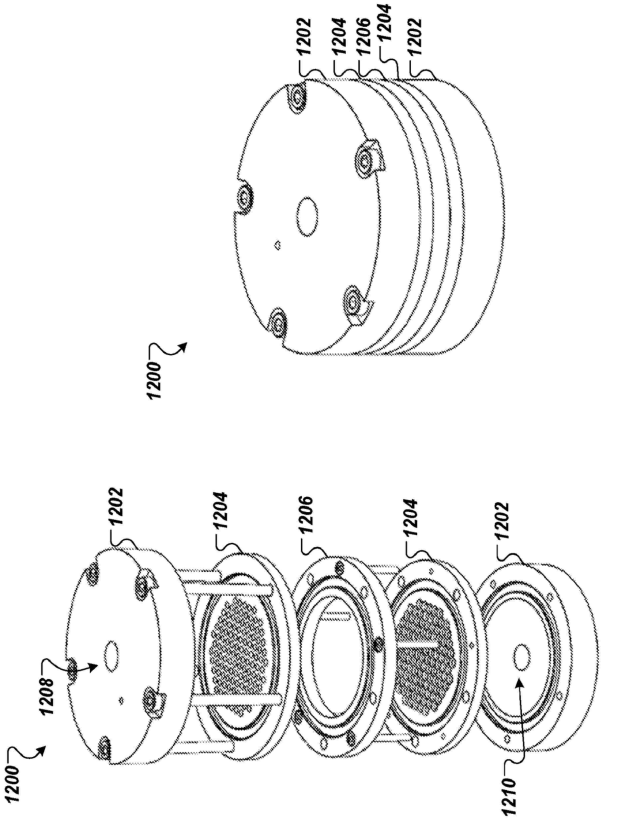
【図１１Ａ】



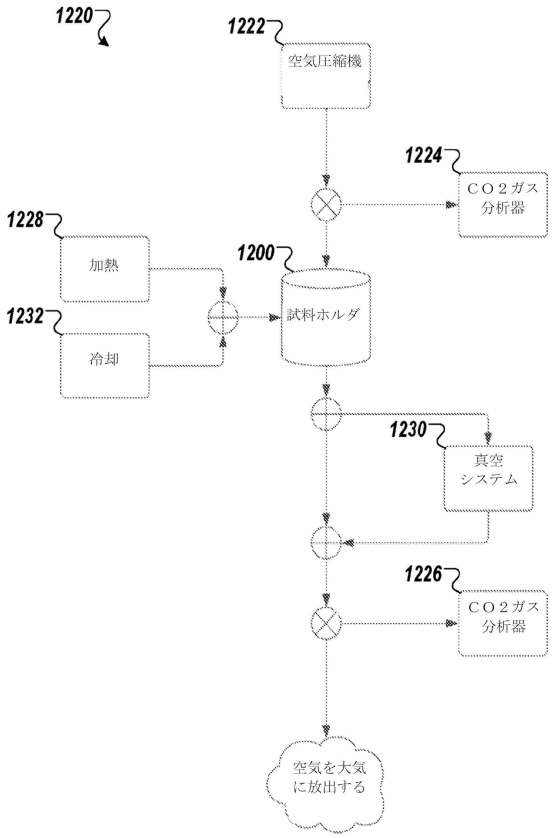
【図１１Ｂ】



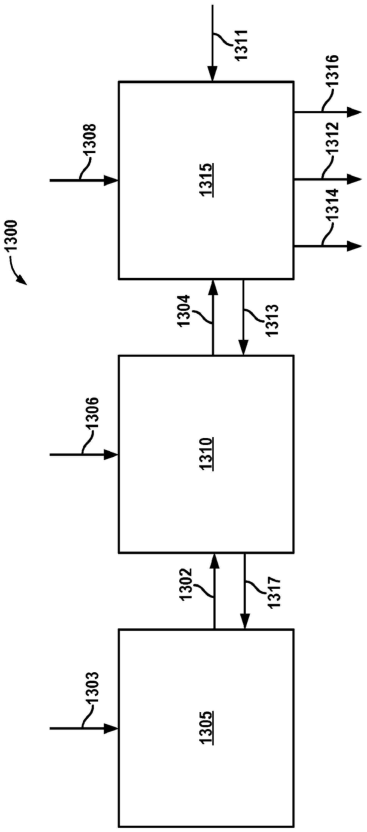
【図１２Ａ】



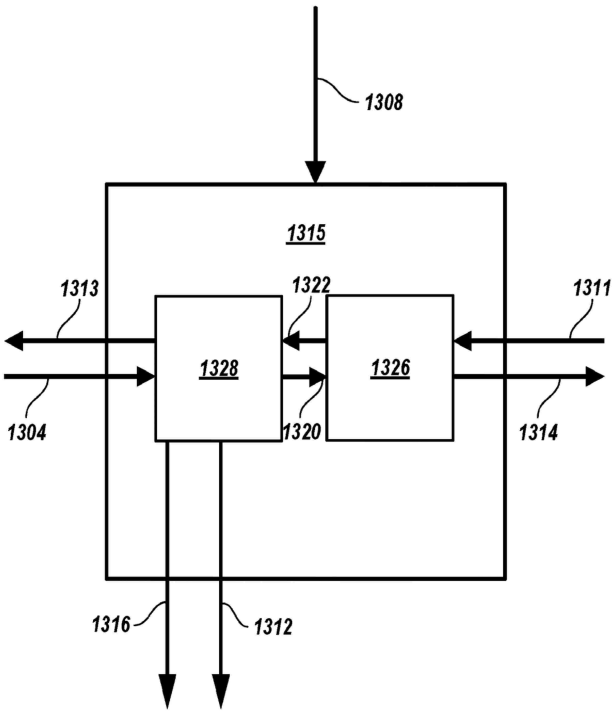
【図１２Ｂ】



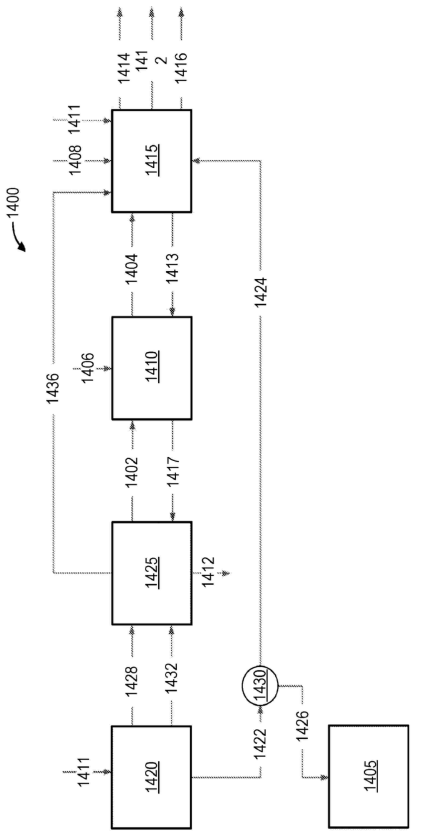
【図１３Ａ】



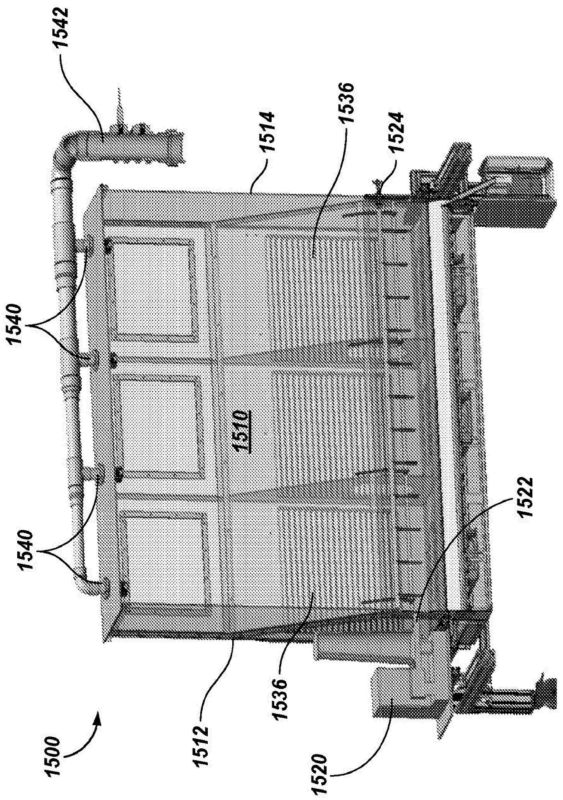
【図１３Ｂ】



【図１４】



【図１５Ａ】



【図１５Ｂ－Ｃ】

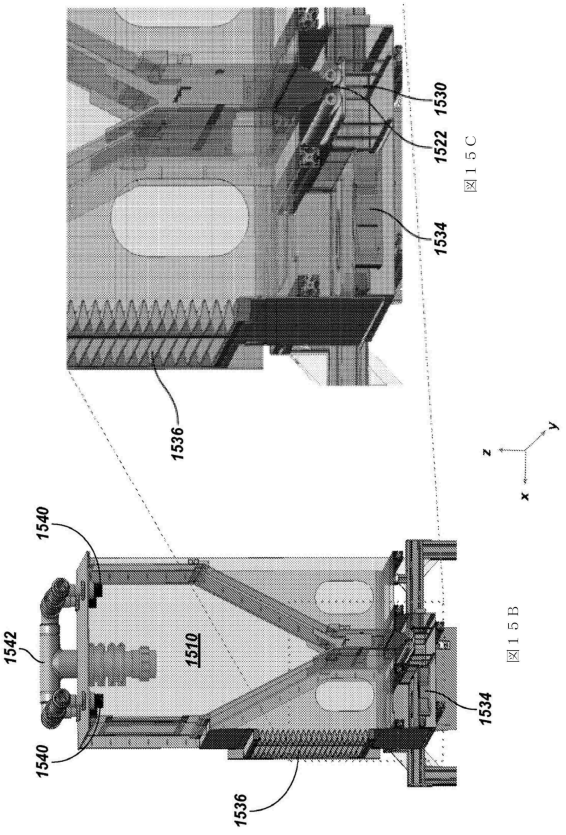


図１５Ｃ

図１５Ｂ

【図１５Ｄ－Ｅ】

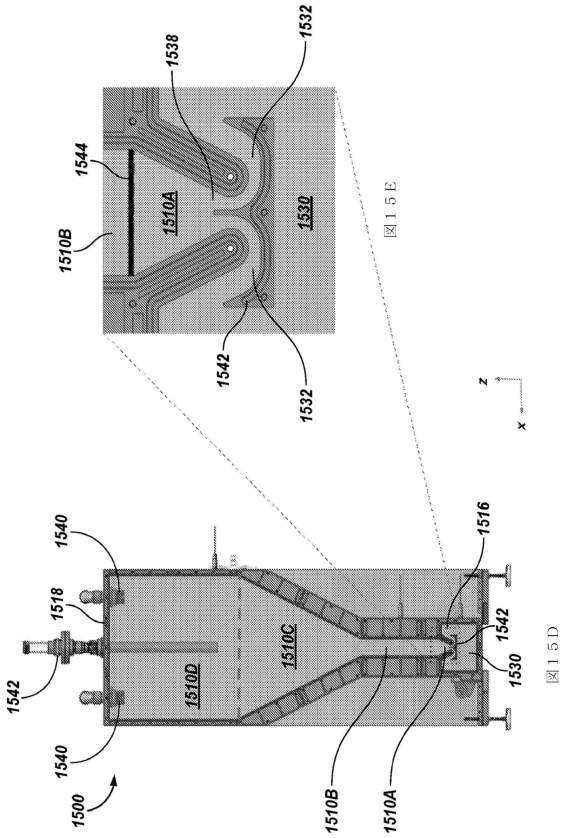
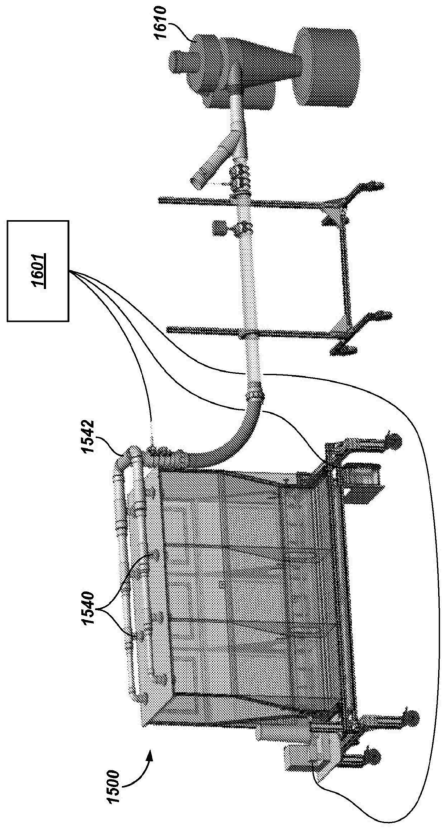


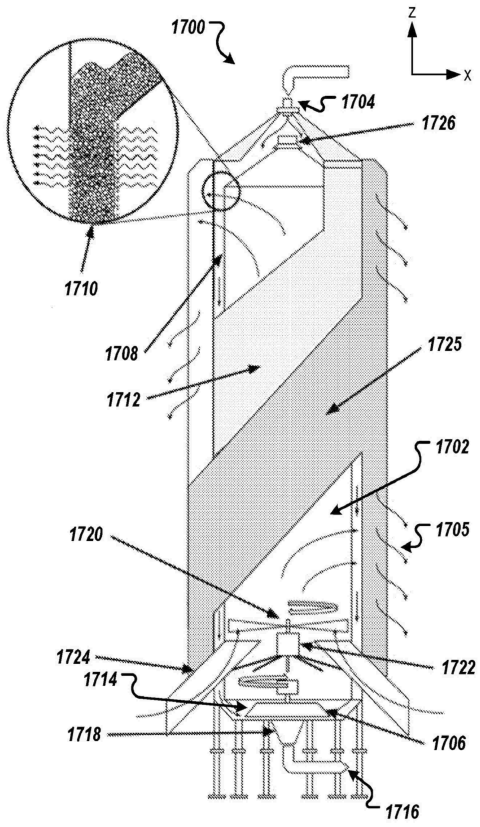
図１５Ｅ

図１５Ｄ

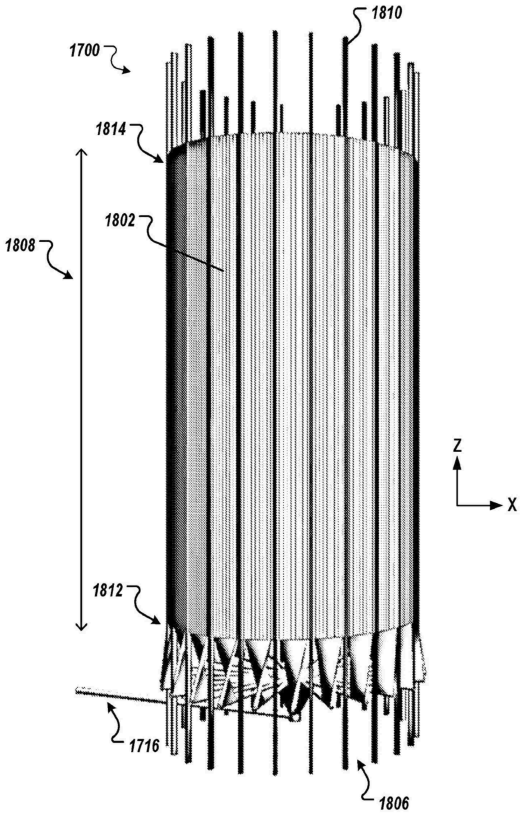
【図１６】



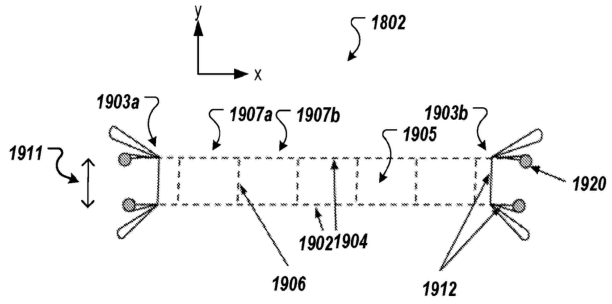
【図１７】



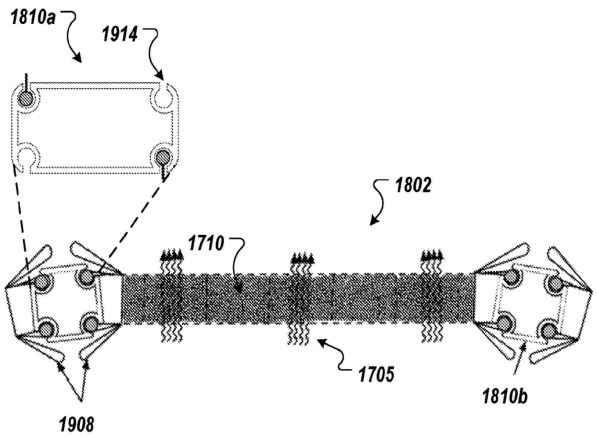
【図１８】



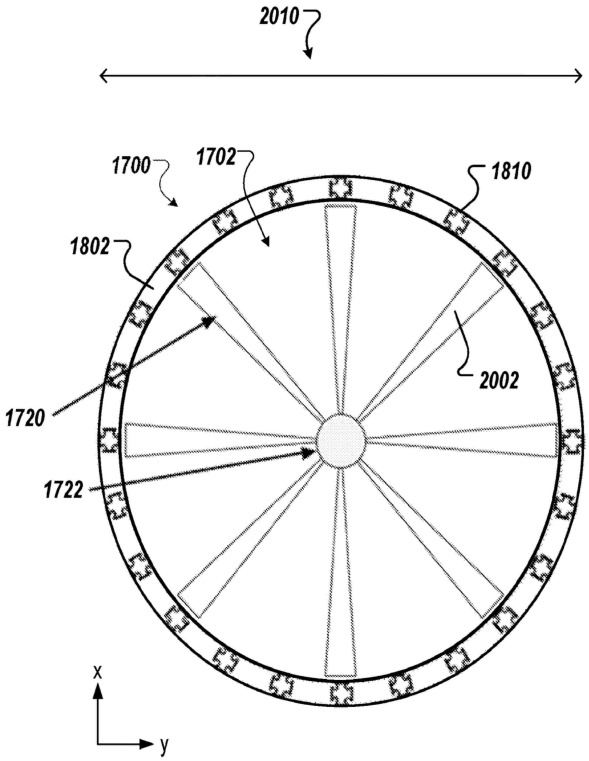
【図１９Ａ】



【図１９Ｂ】



【図２０】



【図２１Ａ－Ｂ】

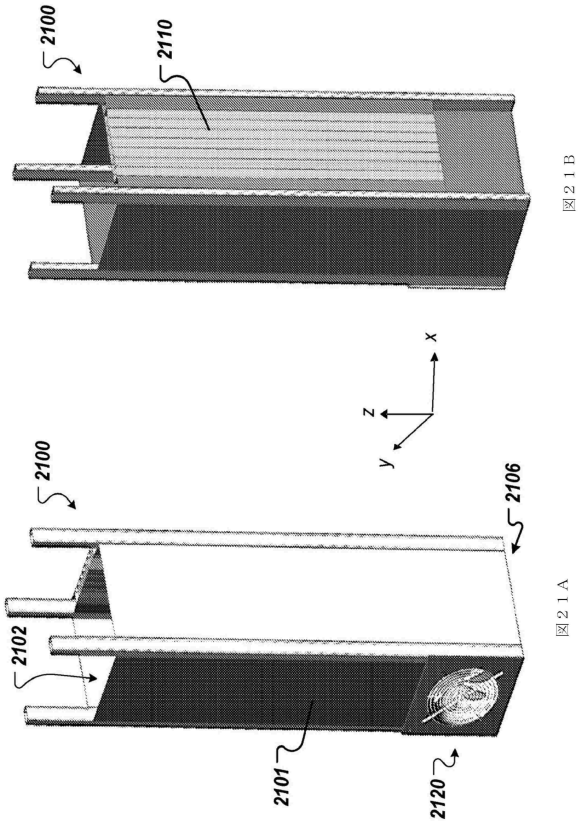
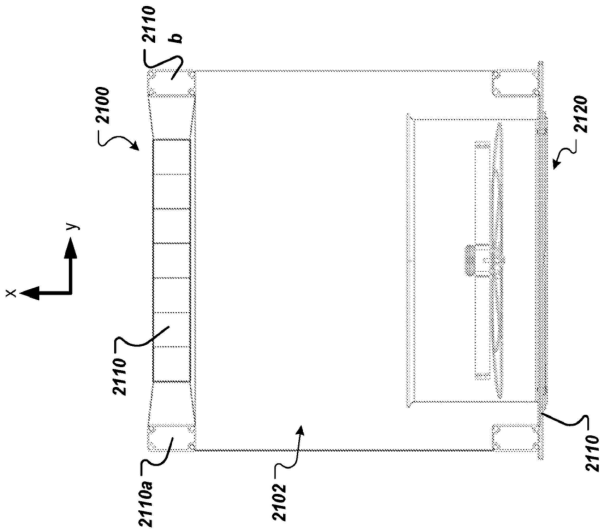


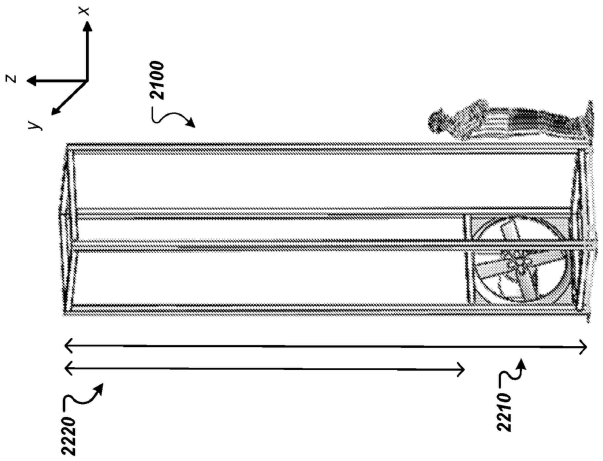
図２１Ｂ

図２１Ａ

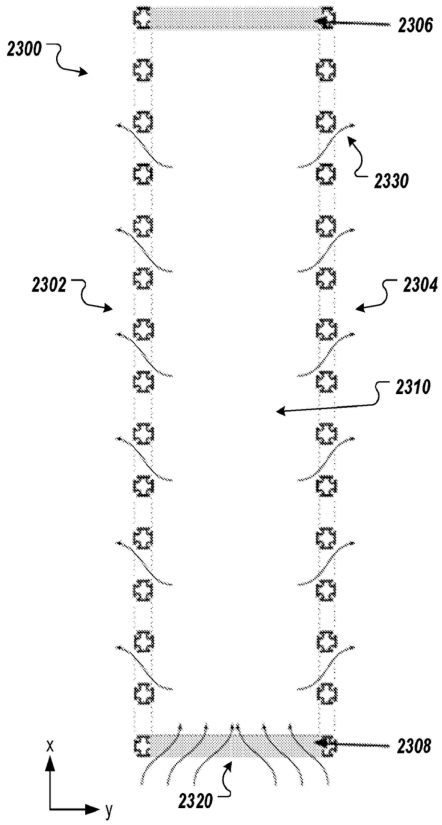
【図２２Ａ】



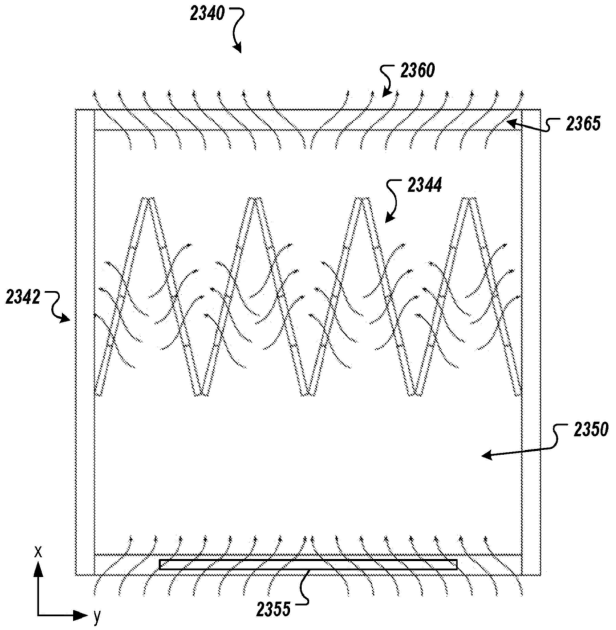
【図２２Ｂ】



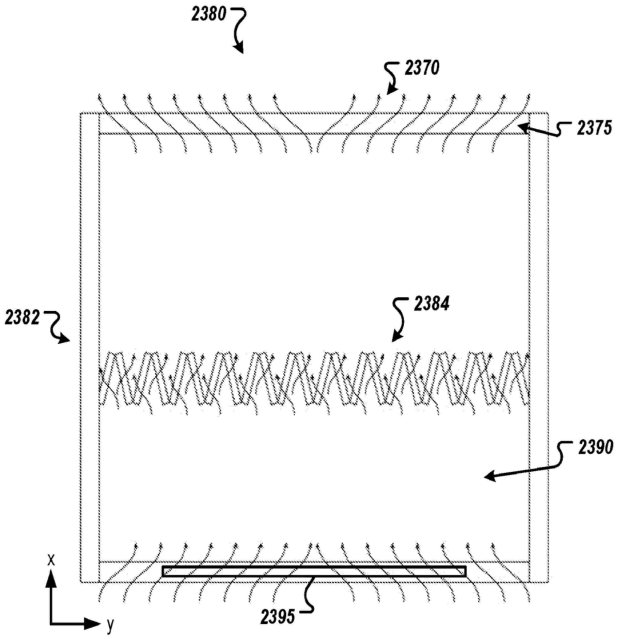
【図２３Ａ】



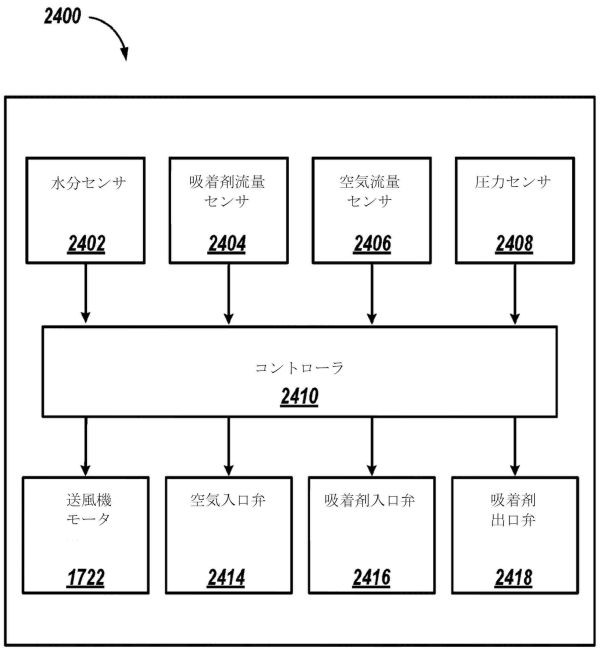
【図２３Ｂ】



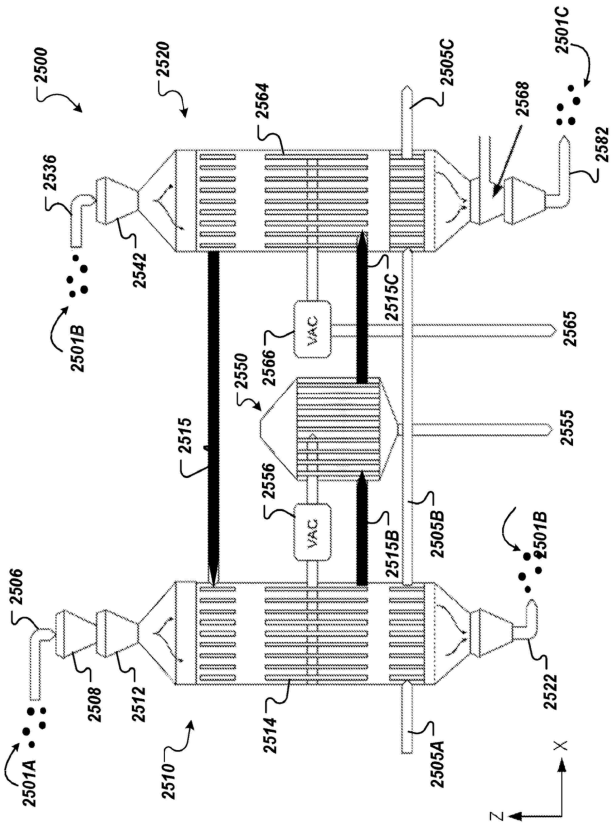
【図２３Ｃ】



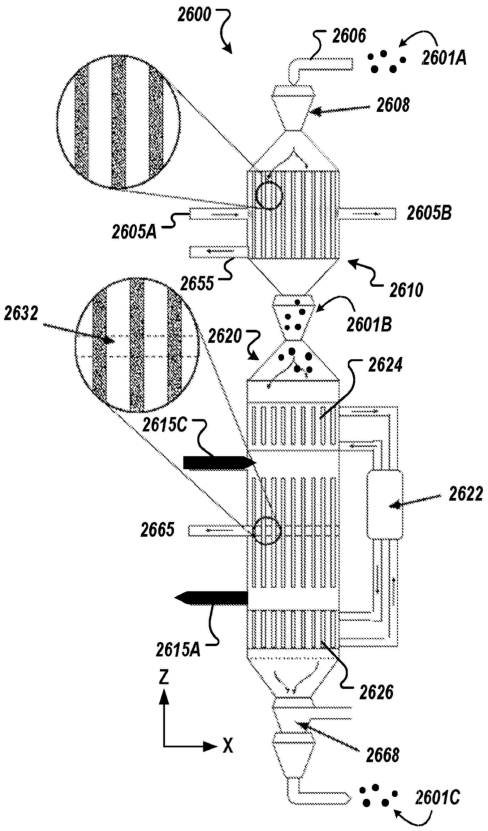
【図２４】



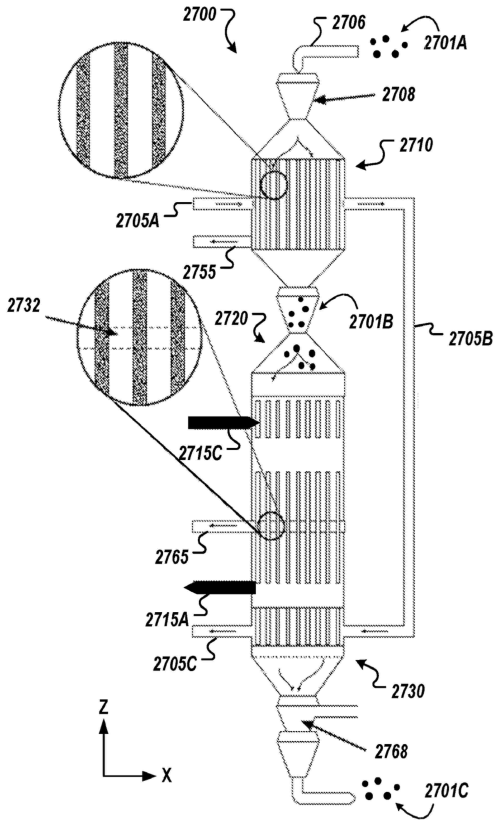
【図２５】



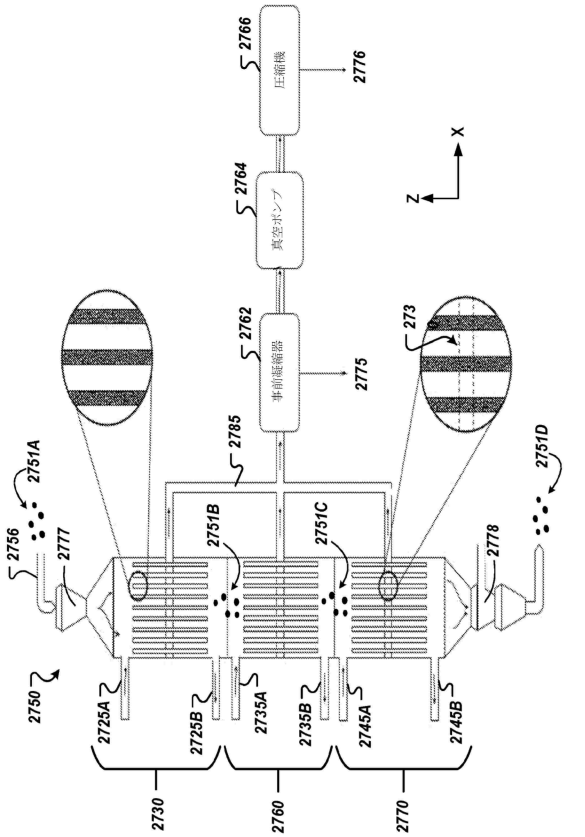
【図２６】



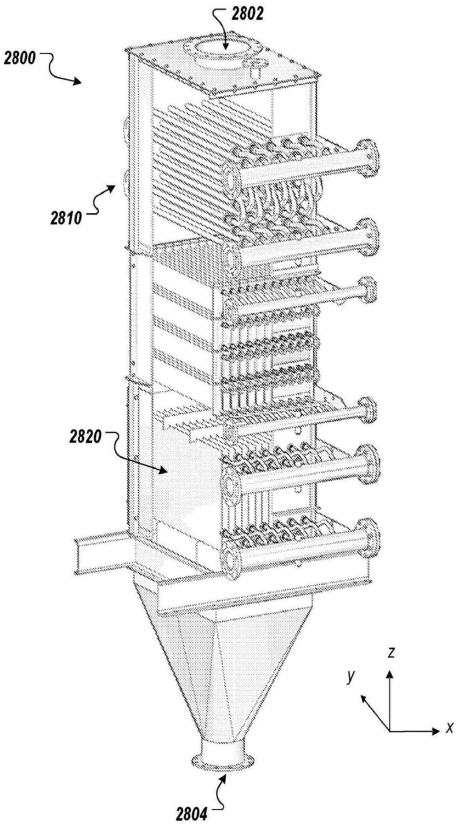
【図２７Ａ】



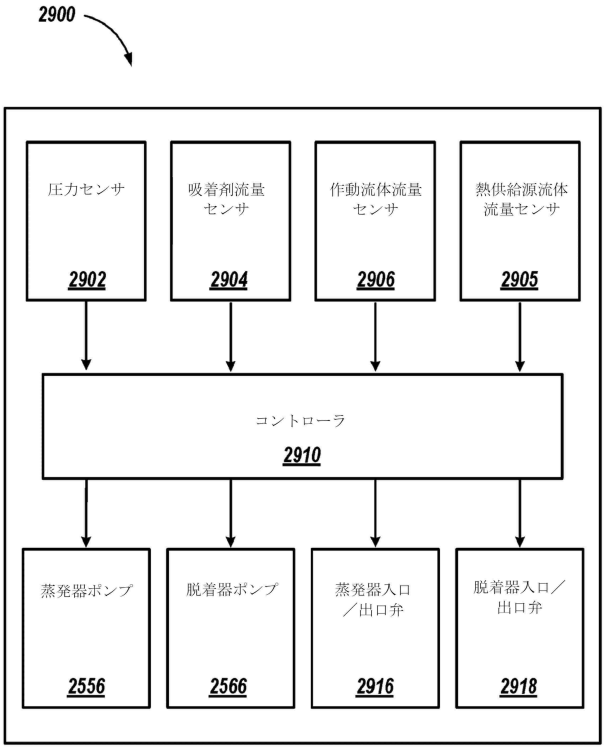
【図２７Ｂ】



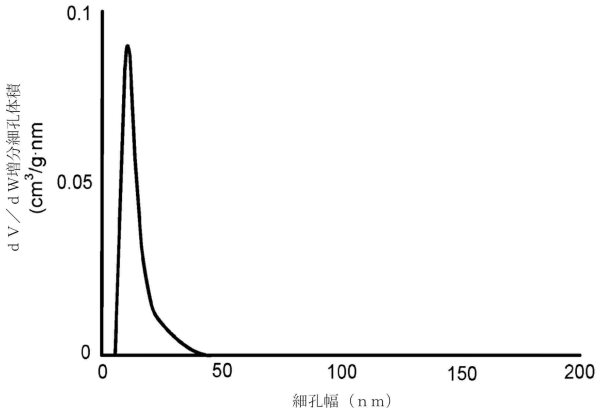
【図２８】



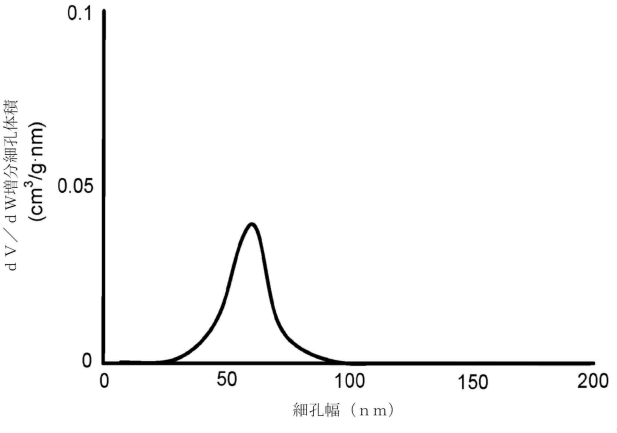
【図２９】



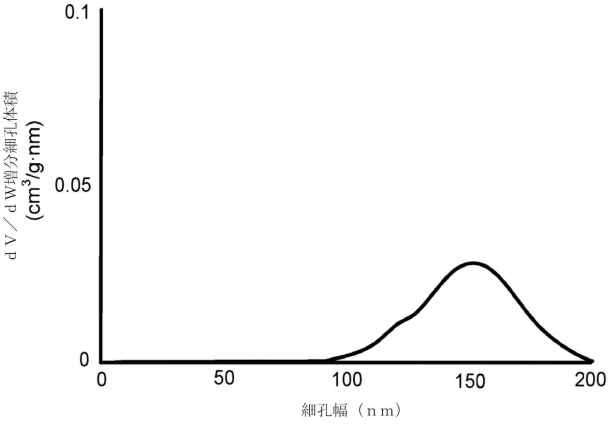
【図３０Ａ】



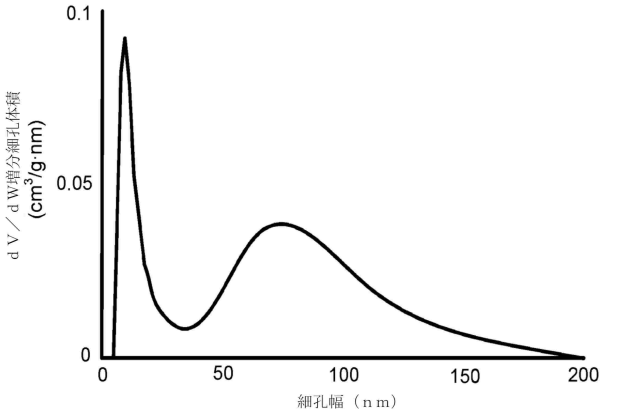
【図３０Ｂ】



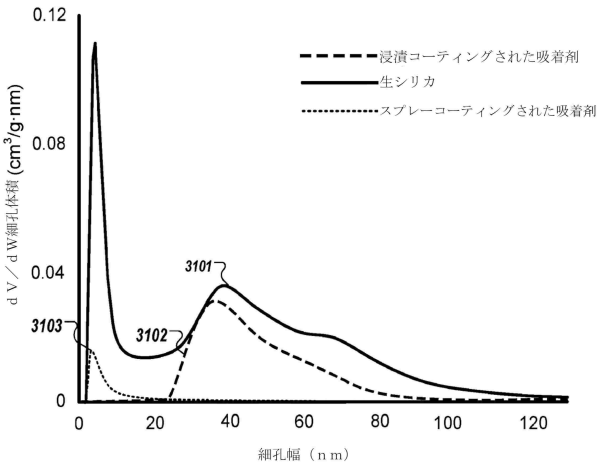
【図３０Ｃ】



【図３０Ｄ】



【図３１】


0.12
0.08
0.04
0
dV／dW細孔体積(cm³/g·nm)
浸漬コーティングされた吸着剤
生シリカ
スプレーコーティングされた吸着剤
3101
3102
3103
0
20
40
60
80
100
120
細孔幅（ｎｍ）

【国際調査報告】

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/US2023/026724

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER
INV. B01J20/10 B01J20/22 B01J20/32 B01D53/08 B01D53/62
B01D53/83
ADD.
According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED
Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)
B01J B01D

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)
EPO-Internal, WPI Data

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	GIRIMONTE ROSSELLA ET AL: "Adsorption of CO2 on Amine-Modified Silica Particles in a Confined-Fluidized Bed", PROCESSES, vol. 8, no. 12, 25 November 2020 (2020-11-25), page 1531, XP093094718, CH ISSN: 2227-9717, DOI: 10.3390/pr8121531 abstract section: "2.1. Experimental Apparatus"; page 2 - page 3; figure 1 section: "2.2. Adsorbent Preparation and Characterization"; page 3 - page 4 ----- -/--	1-21,30, 36-38, 41-43,45

[x] Further documents are listed in the continuation of Box C. [x] See patent family annex.

* Special categories of cited documents :
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance;; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance;; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
15 April 2024	26/04/2024

Name and mailing address of the ISA/	Authorized officer
European Patent Office, P.B. 5818 Patentlaan 2 NL - 2280 HV Rijswijk Tel. (+31-70) 340-2040, Fax: (+31-70) 340-3016	Klemps, Christian

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (April 2005)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/US2023/026724

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	ANYANWU JOHN-TIMOTHY ET AL: "Amine-Grafted Silica Gels for CO2 Capture Including Direct Air Capture", INDUSTRIAL & ENGINEERING CHEMISTRY RESEARCH, vol. 59, no. 15, 3 December 2019 (2019-12-03), pages 7072-7079, XP093072646, ISSN: 0888-5885, DOI: 10.1021/acs.iecr.9b05228 abstract sections: "2. MATERIALS", "3. CHARACTERIZATION"; page 7073 tables 1,2 -----	1-21,25, 26, 29-38, 41-43,45
X	SÁNCHEZ-ZAMBRANO KLÉVER ET AL: "CO2 Capture with Mesoporous Silicas Modified with Amines by Double Functionalization: Assessment of Adsorption/Desorption Cycles", MATERIALS, vol. 11, no. 6, 25 May 2018 (2018-05-25), page 887, XP093094734, CH ISSN: 1996-1944, DOI: 10.3390/ma11060887 abstract sections: "2.1.3. Grafting with APTES", "2.1.4. Impregnation with Polyethylenimine (PEI)"; page 3 -----	1-4,6,7, 9-21,23, 24, 30-32, 34,35, 37,38, 41-43
X	BAO SHUANGYOU ET AL: "PEI grafted amino-functionalized graphene oxide nanosheets for ultrafast and high selectivity removal of Cr(VI) from aqueous solutions by adsorption combined with reduction: Behaviors and mechanisms", CHEMICAL ENGENEERING JOURNAL, ELSEVIER, AMSTERDAM, NL, vol. 399, 6 June 2020 (2020-06-06), XP086229687, ISSN: 1385-8947, DOI: 10.1016/J.CEJ.2020.125762 [retrieved on 2020-06-06] abstract section: "2.1. Synthesis of GONN"; page 2 -----	1,4-6,8, 9,11-22, 25-33, 36, 38-40,44
17 X	AU 2020 386 642 A1 (EISENBERGER PETER [US]; GLOBAL THERMOSTAT OPERATIONS LLC [US]) 16 June 2022 (2022-06-16) paragraph [0060] - paragraph [0061]; claim 1; figures 1-6 -----	46,47
	-/--	

3

Form PCT/ISA/210 (continuation of second sheet) (April 2005)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No
PCT/US2023/026724

C(Continuation). DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	BE 1 013 447 A6 (PROC C EPT NV [BE]) 5 February 2002 (2002-02-05) figure 1	48-63
X	CN 110 227 408 A (HUANG HUALI) 13 September 2019 (2019-09-13) figure 1; example 21	64,65
X A	US 2018/272266 A1 (SPRACHMANN GERALD [NL] ET AL) 27 September 2018 (2018-09-27) paragraph [0019] - paragraph [0030]; figure 2 paragraph [0051] - paragraph [0054] paragraph [0058] figure 1	66,67, 89-112 68-88

Form PCT/ISA/210 (continuation of second sheet) (April 2005)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/US2023/026724

Box No. II Observations where certain claims were found unsearchable (Continuation of item 2 of first sheet)

This international search report has not been established in respect of certain claims under Article 17(2)(a) for the following reasons:

1. ☐ Claims Nos.:
because they relate to subject matter not required to be searched by this Authority, namely:

2. ☐ Claims Nos.:
because they relate to parts of the international application that do not comply with the prescribed requirements to such an extent that no meaningful international search can be carried out, specifically:

3. ☐ Claims Nos.:
because they are dependent claims and are not drafted in accordance with the second and third sentences of Rule 6.4(a).

Box No. III Observations where unity of invention is lacking (Continuation of item 3 of first sheet)

This International Searching Authority found multiple inventions in this international application, as follows:

see additional sheet

1. ☒ As all required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers all searchable claims.

2. ☐ As all searchable claims could be searched without effort justifying an additional fees, this Authority did not invite payment of additional fees.

3. ☐ As only some of the required additional search fees were timely paid by the applicant, this international search report covers only those claims for which fees were paid, specifically claims Nos.:

4. ☐ No required additional search fees were timely paid by the applicant. Consequently, this international search report is restricted to the invention first mentioned in the claims;; it is covered by claims Nos.:

Remark on Protest

☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest and, where applicable, the payment of a protest fee.

☐ The additional search fees were accompanied by the applicant's protest but the applicable protest fee was not paid within the time limit specified in the invitation.

☒ No protest accompanied the payment of additional search fees.

Form PCT/ISA/210 (continuation of first sheet (2)) (April 2005)

International Application No. PCT/US2023/026724

FURTHER INFORMATION CONTINUED FROM PCT/ISA/ 210

This International Searching Authority found multiple (groups of) inventions in this international application, as follows:

1. claims: 1-45

directed towards a functionalized material, a method of forming such material and a method of removing carbon dioxide with the said material

---

2. claims: 46-112

directed towards various direct air capture systems, a reactor, structures, and systems for capturing and desorbing carbon dioxide as well as methods for operating these devices

---

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

Information on patent family members

International application No
PCT/US2023/026724

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member(s)	Publication date
AU 2020386642 A1	16-06-2022	AU 2020386642 A1	16-06-2022
		BR 112022009939 A2	09-08-2022
		CA 3162284 A1	27-05-2021
		CN 115515700 A	23-12-2022
		EP 4061507 A1	28-09-2022
		IL 293183 A	01-07-2022
		JP 2023502736 A	25-01-2023
		KR 20220121806 A	01-09-2022
		US 2023023050 A1	26-01-2023
		WO 2021102385 A1	27-05-2021
BE 1013447 A6	05-02-2002	NONE	
CN 110227408 A	13-09-2019	NONE	
US 2018272266 A1	27-09-2018	AU 2015345356 A1	25-05-2017
		BR 112017009639 A2	19-12-2017
		CA 2966244 A1	19-05-2016
		CN 107073385 A	18-08-2017
		EP 3218089 A1	20-09-2017
		US 2018272266 A1	27-09-2018
		WO 2016074980 A1	19-05-2016

Form PCT/ISA/210 (patent family annex) (April 2005)

フロントページの続き

(32)優先日　令和4年7月1日(2022.7.1)
(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)
(31)優先権主張番号　63/357,919
(32)優先日　令和4年7月1日(2022.7.1)
(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)
(31)優先権主張番号　63/357,932
(32)優先日　令和4年7月1日(2022.7.1)
(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)
(31)優先権主張番号　63/357,935
(32)優先日　令和4年7月1日(2022.7.1)
(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)
(31)優先権主張番号　63/357,941
(32)優先日　令和4年7月1日(2022.7.1)
(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)
(31)優先権主張番号　63/357,950
(32)優先日　令和4年7月1日(2022.7.1)
(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)
(31)優先権主張番号　63/357,951
(32)優先日　令和4年7月1日(2022.7.1)
(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)
(31)優先権主張番号　63/358,003
(32)優先日　令和4年7月1日(2022.7.1)
(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)
(31)優先権主張番号　63/358,006
(32)優先日　令和4年7月1日(2022.7.1)
(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)
(31)優先権主張番号　63/460,243
(32)優先日　令和5年4月18日(2023.4.18)
(33)優先権主張国・地域又は機関
米国(US)
(81)指定国・地域　AP(BW,CV,GH,GM,KE,LR,LS,MW,MZ,NA,RW,SD,SL,ST,SZ,TZ,UG,ZM,ZW),EA(AM,AZ,BY,KG,KZ,RU,TJ,TM),EP(AL,AT,BE,BG,CH,CY,CZ,DE,DK,EE,ES,FI,FR,GB,GR,HR,HU,IE,IS,IT,LT,LU,LV,MC,ME,MK,MT,NL,NO,PL,PT,RO,RS,SE,SI,SK,SM,TR),OA(BF,BJ,CF,CG,CI,CM,GA,GN,GQ,GW,KM,ML,MR,NE,SN,TD,TG),AE,AG,AL,AM,AO,AT,AU,AZ,BA,BB,BG,BH,BN,BR,BW,BY,BZ,CA,CH,CL,CN,CO,CR,CU,CV,CZ,DE,DJ,DK,DM,DO,DZ,EC,EE,EG,ES,FI,GB,GD,GE,GH,GM,GT,HN,HR,HU,ID,IL,IN,IQ,IR,IS,IT,JM,JO,JP,KE,KG,KH,KN,KP,KR,KW,KZ,LA,LC,LK,LR,LS,LU,LY,MA,MD,MG,MK,MN,MU,MW,MX,MY,MZ,NA,NG,NI,NO,NZ,OM,PA,PE,PG,PH,PL,PT,QA,RO,RS,RU,RW,SA,SC,SC,SD,SE,SG,SK,SL,ST,SV,SY,TH,TJ,TM,TN,TR,TT,TZ,UA,UG,US,UZ,VC,VN,WS,ZA,ZM,ZW
４０４３，マウンテン ビュー，アンフィシアター パークウェイ １６００

(72)発明者　ギャグニー，ジャックス
アメリカ合衆国，カリフォルニア州　９４０４３，マウンテン ビュー，アンフィシアター パークウェイ　１６００
(72)発明者　ランパータブ，アマンダ マリー
アメリカ合衆国，カリフォルニア州　９４０４３，マウンテン ビュー，アンフィシアター パークウェイ　１６００
(72)発明者　ロバートソン，ケニス ジェラルド
アメリカ合衆国，カリフォルニア州　９４０４３，マウンテン ビュー，アンフィシアター パークウェイ　１６００
(72)発明者　サクセナ，アナンド
アメリカ合衆国，カリフォルニア州　９４０４３，マウンテン ビュー，アンフィシアター パークウェイ　１６００
(72)発明者　ネルソン，ロバート
アメリカ合衆国，カリフォルニア州　９４０４３，マウンテン ビュー，アンフィシアター パークウェイ　１６００

Ｆターム（参考）　4D012　BA01 CA03 CD04 CG03 CK01
4G066　AA20C AA22C AA72C AB13B AB18B AB24C AC11C AE10C BA09 BA20 BA23 BA25 BA26 CA35 FA03 FA11 FA37 FA38 GA04