

Poster presentation

📅 Thu. Oct 30, 2025 10:00 AM - 4:00 PM JST | Thu. Oct 30, 2025 1:00 AM - 7:00 AM UTC 🏢 Poster session
hall(3F-Lobby)

[P01-42] poster sess.

🇯🇵 Japanese

[P01]

Effect of friction surface roughness on decomposition of hydrocarbon lubricants

○Yuuma Ishitarai¹, Genki Matsumoto¹, Hidetaka Nanao¹ (1. Surface Reaction Chemistry Laboratory, Studies in Chemistry, Faculty of Chemistry and Biological Sciences, Iwate University)

🇯🇵 Japanese

[P02]

Guaiacol hydrogenation over Pt-Pd/graphite in aqueous ethanol solution

○Ko Muraoka¹, Hibari Hayashi², Masayuki Shirai¹ (1. Surface Reaction Chemistry Laboratory, Studies in Chemistry, Faculty of Chemistry and Biological Sciences, Iwate University, 2. Surface Reaction Chemistry Laboratory, Graduate Course in Chemistry, Division of Science and Engineering, Graduate School of Arts and Sciences, Iwate University)

🇯🇵 Japanese

[P03]

About property analysis of FT synthetic fuel

○nobuo oyama¹, Masaomi Amemiya¹, Toru Kyoren¹, Shunichi Koide¹, Tamayo Tani¹ (1. n Neutral Japan Petroleum and CarboFuels Energy Center)

🇯🇵 Japanese

[P04]

Simultaneous recovery of lignin and cellulose from rice straw using catalytic lignin oxidation

○Kentarou Tanaka¹, Yuma Shirakawa¹, Yuma Igarashi¹, Tsubasa Takamatsu¹, Yudai Higuchi¹, Tomonori Sonoki¹, Akihiro Yoshida¹ (1. Hirosaki University)

🇯🇵 Japanese

[P05]

Study on separation techniques for qualitative and quantitative determination of oxygenates in biofuels and synthetic fuels

○Katsura Sekiguchi¹, Naoto Hashikita¹ (1. Agilent Technologies Japan, Ltd.)

🇯🇵 Japanese

[P06]

Detailed composition analysis and physical properties of biodiesel fuel derived from soybean oil

○Masayoshi Muraoka¹, Takayuki Toyomasu¹, Takashi kubo¹, Sachi Nakashima¹ (1. Toray Reserch Center, Inc)

🇯🇵 Japanese

[P07]

The effect of ZrO₂-SiO₂ bimodal structure on FT synthesis with ethylene addition for SAF production

○Shunnosuke Fujii¹, Shiori Arai², Shuhei Yasuda¹, Yingluo He¹, Guohui Yang¹, Ken-ichiro Fujimoto², Daisuke Yokota², Noritatsu Tsubaki¹ (1. Department of Applied Chemistry, School of Engineering,

University of Toyama, 2. I-RHEX Unit, Innovation Division, INPEX CORPORATION

◆ Japanese

[P08]

Comparison of batch and flow reactions in lignin decomposition with copper hydroxide mesh catalyst

○Yuma Igarashi¹, Tsubasa Takamatsu¹, Kentarou Tanaka¹, Yudai Higuchi¹, Tomonori Sonoki¹, Akihiro Yoshida¹ (1. Hirosaki University)

◆ Japanese

[P09]

Investigation of Mechanical Properties of a Packed Bed of Metal Hydride Particles

○Masahiko OKUMURA¹ (1. National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)

◆ Japanese

[P10]

Effect of hybridization on supported Fe catalyst for selective liquid fuels synthesis by Fischer-Tropsch reaction

○Junya Chatani¹, Shahajahan Md. Kutubi¹, Hiroshi Yamada¹, Katsutoshi Sato¹, Katsutoshi Nagaoka¹ (1. Nagoya University Graduate School of Engineering Chemical Systems Engineering)

◆ Japanese

[P11]

Effect of catalyst support on H₂S tolerance in methane pyrolysis for hydrogen production

○Koki Matsuo¹, Mitsumasa Osada¹, Hiroshi Fukunaga¹, Nobuhide Takahashi¹, Iori Shimada¹ (1. Shinshu University)

◆ Japanese

[P12]

Effect of TiO₂ structure and metal addition on the Fischer-Tropsch reaction properties of Co/TiO₂ catalysts

○Saki Shigenobu¹, Satoru Ito¹, Takehisa Mochizuki¹ (1. National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)

◆ Japanese

[P13]

Single-walled carbon nanotube supported Cs-Ru catalyst for ammonia synthesis

○Masayasu Nishi¹, Shih-Yuan Chen¹, Takehisa Mochizuki¹ (1. National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST))

◆ Japanese

[P14]

Direct conversion CO₂ to aromatics over Zn-Cr catalyst

○Haruna Sasagawa¹, Miyu Tonooka¹, Shuhei Yasuda¹, Yingluo He¹, Guohui Yang¹, Noritatsu Tsubaki¹ (1. University of Toyama)

◆ Japanese

[P15]

Structure of platinum-cobalt bimetal particles between graphite layers and their cinnamaldehyde hydrogenation performance

○Satsuki Abe¹, Norihito Sakaguchi², Masayuki Shirai¹ (1. Surface Reaction Chemistry Laboratory, Graduate Course in Chemistry, Division of Science and Engineering, Graduate school of Arts and

Sciences, Iwate University, 2. Faculty of Engineering, Hokkaido University)

◆ Japanese

[P16]

Highly selective synthesis of liquid fuels from CO₂ over Fe-Zn interface

○Haruto Honjo¹, Teng Li¹, Shuhei Yasuda¹, Yinglou He¹, Guohui Yang¹, Noritatsu Tsubaki¹ (1. Department of Applied Chemistry, School of Engineering, University of Toyama)

◆ Japanese

[P17]

Adsorption of Sulfur Compounds Using Supported Gold Nanoparticles

○Akihiro Nakayama¹, Ruka Wajima¹, Haruki Ando¹, Kanta Masuda¹, Haruno Murayama², Atsuko Isogai³, Akina Yoshizawa¹, Eiji Yamamoto¹, Makoto Tokunaga¹ (1. Department of Chemistry, Graduate School of Science, Kyushu University, 2. Department of Applied Chemistry and Bioscience, Kanagawa Institute of Technology, 3. National Research Institute of Brewing)

◆ Japanese

[P18]

Synthesis of Fe-Co alloy cluster catalysts for CO₂ hydrogenation to light olefins

○Sana Shimatani¹, Teng Li¹, Shuhei Yasuda¹, Yingluo He¹, Guohui Yang¹, Noritatsu Tsubaki¹ (1. Department of Applied Chemistry, School of Engineering, University of Toyama)

◆ Japanese

[P19]

Preparation of iridium nanoparticle between graphite layers

○Io Sumida¹, Koya Sanyoshi², Masayuki Shirai¹ (1. Surface Reaction Chemistry Laboratory, Studies in Chemistry, Faculty of Chemistry and Biological Sciences, Iwate University, 2. Surface Reaction Chemistry Laboratory, Graduate Course in Chemistry, Division of Science and Engineering, Graduate school of Arts and Sciences, Iwate University)

◆ Japanese

[P20]

Simultaneous production of methane and lower hydrocarbons through CO₂ hydrogenation over oxide catalysts derived from layered double hydroxide

○Keito Kinugawa¹, Ohtsuka Hirofumi², Yamamoto Naoki², Ikenaga Naoki³ (1. Graduate School of Science and Engineering, Kansai University, 2. Advanced Technology Institute, Osaka Gas Co., Ltd., 3. Faculty of Environmental and Urban Engineering, Kansai University)

[P21]unnumbered

◆ Japanese

[P22]

Characterization of porous silica obtained by the reaction of powdered silicon with CO₂ and its use as a catalyst support

○Yusuke Tanimura¹, Shingo Hasegawa¹, Yuichi Manaka², Ken Motokura¹ (1. Yokohama National University, 2. National Institute of Advanced Industrial Science)

◆ Japanese

[P23]

Preparation and cinnamaldehyde hydrogenation performance of Pt-Tin bimetal nanosheet between graphite layer

○Koya Sanyoshi¹, Norihito Sakaguchi², Masayuki Shirai¹ (1. Surface Reaction Chemistry Laboratory, Graduate Course in Chemistry, Division of Science and Engineering, Graduate school of Arts and Sciences, Iwate University, 2. Faculty of Engineering, Hokkaido University)

◆ Japanese

[P24]

Synthesis of Diethyl Carbonate from Carbon Dioxide Mediated by Zirconium-Grafted Heterogeneous Catalysts

○Haruki Nagae¹, Hiroki Koizumi¹, Katsuhiko Takeuchi¹, Satoshi Hamura², Toshihide Yamamoto², Kazuhiro Matsumoto¹, Yoshihiro Kamimura¹, Sho Kataoka¹, Norihisa Fukaya¹, Jun-Chul Choi¹ (1. The National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), 2. Tosoh Corporation)

◆ Japanese

[P25]

Synthesis of organic-inorganic hybrid layered materials with various chemical compositions

○Taisei Mochimatsu¹, Katsutoshi Yamamoto¹, Takuji Ikeda² (1. The University of Kitakyushu, 2. National Institute of Advanced Industrial Science and Technology)

◆ Japanese

[P26]

Synthesis of methanol by hydrogenation of CO₂ using a supported Co-In catalyst

○Shinya Ogushi¹, Kenshin Chishima¹, Sakuya Hattori¹, Takuma Higo¹, Yasushi Sekine¹ (1. Waseda University)

◆ Japanese

[P27]

Synthesis and pore control of silica nanoparticle aggregates using hydrothermal synthesis

○Maki Toriyama¹, Koji Miyake¹, Yoshiaki Uchida¹, Norikazu Nishiyama¹ (1. Osaka University)

◆ Japanese

[P28]

Separation and reduction of CO₂ in CO₂/CO mixed gas using unsteady-state process.

○Joji Yamaguchi¹, Akihiko Anzai¹, Takashi Toyao¹, Ken-ichi Shimizu¹ (1. Institute for Catalysis, Hokkaido University)

◆ Japanese

[P29]

Oxidative Coupling of Arenes and Alkynes with Rh-Based Bimetallic Catalysts

○Aoi Kusunoki¹, Gota Takasawa¹, Shingo Hasegawa¹, Ken Motokura¹ (1. Yokohama National University)

◆ Japanese

[P30]

Hydrogenation of CO₂ to liquid fuel over NaFeGa catalyst

○Wakana Hirozawa¹, Chufeng Liu¹, Shuhei Yasuda¹, Yingluo He¹, Guohui Yang¹, Noritatu Tsubaki¹ (1. Department of Applied Chemistry, School of Engineering, University of Toyama)

◆ Japanese

[P31]

Investigation of feedstock interactions in co-processing of plastic and bio-oil in catalytic cracking process

○Kota Okuno¹, Mitsumasa Osada¹, Hiroshi Fukunaga¹, Nobuhide Takahashi¹, Iori Shimada¹ (1. Shinshu University)

◆ Japanese

[P32]

Development of highly active supported Ni catalysts for the CH₄ synthesis reaction from CO₂ and NH₃: Investigation of the effect of Mg-Al complex oxide supports

○Yuji UEDA^{1,2}, Hiroshi YAMADA¹, Katsutoshi Nagaoka¹, Katsutoshi SATO¹ (1. Nagoya University, 2. Ube Material Industries, Ltd.)

◆ Japanese

[P33]

Development of perfluoropolymer Membranes for non-polar organic solvent separation in petrochemical industries

○Wakako Hashimoto¹, Hiroki Hayashi¹, Hideto Matsuyama², Tooru Kitagawa² (1. AGC Inc. Materials Integration Laboratories Organic Materials Division, 2. Kobe University Research Center for Membrane and Film Technology)

◆ Japanese

[P34]

Development of Highly Active Supported Ru Catalysts for CH₄ Synthesis from CO₂ and NH₃ (part 3) Effect of Oxide Support for Surface-Adsorbed Species.

○Katsutoshi Sato¹, Ishikawa Hiroki¹, Yuji Ueda¹, Hiroshi Yamada¹, Katsutoshi Nagaoka¹ (1. Graduate School of Engineering, Nagoya University)

◆ Japanese

[P35]

Development of petroleum molecular information processing technology based on petroliomics and its application to Carbon-Neutral technologies.

○Kotaro Matsumoto¹, Masanori Arai¹, Kimura Kazuhiko¹, Isao Kurihara¹ (1. JAPAN Petroleum and Carbon Neutral Fuels Energy Center PETROLEOMICS TECHNOLOGY LABORATORY)

◆ Japanese

[P36]

Results of SOEC co-electrolysis durability test

○Hideki Nojo¹, Tomohiro Konishi¹, Haruhiko Watanabe¹ (1. Japan Petroleum and Carbon Neutral Fuels Energy Center)

◆ Japanese

[P37]

Catalytic cracking performance of USY zeolite with controlled acidity and mesoporosity

○Chizu Inaki¹, Tomoyasu Kagawa¹, Rei Hamada¹, Tomoyuki Mitate¹, Hisao Sakoda¹ (1. JGC Catalysts and Chemicals Ltd.)

◆ Japanese

[P38]

High pressure in situ DRIFT measurements for characterization of products formed during Fischer-Tropsch synthesis.

○Yuki Asanuma¹, Masayoshi Muraoka¹, Maki Urabe¹, Ryoichi Kumazawa¹ (1. Toray Research Center, Inc.)

◆ Japanese

[P39]

Development of performance screening system and data analytical platform for data-driven catalyst investigations

○Shun Nishimura¹, Junya Ohyama², Keisuke Takahashi³ (1. Japan Advanced Institute of Science and Technology, 2. Kumamoto University, 3. Hokkaido University)

◆ Japanese

[P40]

Electrochemical production of hydrogen peroxide from oxygen using mesh-typed carbon or metal electrodes

○Yosuke Ishida¹, Hikaru Kinoshita¹, Kojiro Fuku² (1. Graduate School of Kansai University, 2. Kansai University)

◆ Japanese

[P41]

Highly selective hydrogenation of 4-chloronitrobenzene by controlling metal-support interactions

○Atsuhiro Inui¹, Hiromu Aikiyama¹, Saegusa Koki¹, Sampei Hiroshi¹, Higo Takuma¹, Kyogo Maeda², Shota Ohno², Toshiyuki Watanabe², Shigeru Kado², Hiromi Nakai¹, Yasushi Sekine¹ (1. Waseda University, 2. Chiyoda Corp.)

◆ Japanese

[P42]

Theoretical investigation of acetate synthesis pathways on Rh surfaces and Rh/ZrO₂ interfaces

○Takanori Mizugaki¹, Kenshin Chishima¹, Takumi Masuda¹, Hiroshi Sampei¹, Koki Saegusa¹, Sakuya Hattori¹, Yasushi Sekine¹ (1. Waseda University)

炭化水素系潤滑油の分解に対する摩擦材表面粗さの影響

(岩手大 1*) ○石手洗友真 1*, 松本元輝 1*, 七尾英孝 1*

機械システムの故障や寿命の原因の多くは摩擦により引き起こされる摩耗に起因する。摩耗を防ぐためには、摩擦場で低摩擦を維持し続ける必要がある。そこで、摩擦による化学反応（トライボケミカル反応）を利用し、摩擦面へ潤滑性をもつ物質を供給し続ける方法に注目した。潤滑性をもつ物質としては、層状構造をもつグラファイトに着目した。炭化水素系潤滑油の分解反応によりグラファイトを生成し続けることができれば、低摩擦の維持が期待できるからである。一方、摩擦材の表面粗さは、潤滑剤の摩擦面への供給のしやすさ、接触面圧に影響

する。特に接触面圧が高ければ、摩擦熱により温度が上昇し分解反応へ影響することが考えられる。本研究では、継続的なグラファイト生成実現のため、炭化水素系潤滑油の分解が起こりやすい表面粗さを調べることを目的とした。

摩擦材にセラミックス材料である Si_3N_4 ball と SiC disk、潤滑剤にグラファイトの炭素源として炭化水素系潤滑油の multi-alkylated cyclopentane (MAC) を用いて潤滑試験を行った。MAC の分解およびグラファイトの生成の確認にはそれぞれ四重極型質量分析計およびラマン分光法を用いた。

黒鉛担持白金-パラジウム触媒を用いたエタノール水溶液中でのグアイアコールの水素化反応挙動

(岩手大 1*) ○村岡 康 1*, 林 ひばり 1*, 白井 誠之 1*

リグニンのモデル部位であるグアイアコールの芳香環を水素化することで得られる 2-メトキシシクロヘキサノン(NONE), 2-メトキシシクロヘキサノール(NOL)は, 医薬中間体として重要である. 本研究では水素ガスを使用せず, セルロースから得られるバイオエタノールを水素源とした, グアイアコールの核水素化反応に活性な触媒開発を行った.

触媒はグラファイト粉末担体に塩化パラジウム(II), ヘキサクロロ白金酸(IV)もしくはその両方の水溶液を含浸させ, 水素化ホウ素ナトリウムを用いて液相還元を行い調製した. 金属担持量は

1wt%とした. 得られた触媒を 1Pt/G, 1Pd/G, 1Pt1Pd/G と示す. グアイアコール核水素化反応はステンレス製反応器を用いてバッチ法で実施した. 気体生成物は GC-TCD で液体生成物は GC-FID で分析した.

1Pt/G は水素生成に活性を示したが, 核水素化反応には活性を示さなかった. 1Pd/G は 1Pt/G よりも水素活性は低かったが, 核水素化活性で NONE および NOL が生成した. 1Pt1Pd/G は水素生成および核水素化反応に最も高い活性を示した.

「FT 合成燃料の性状分析について」

(一般財団法人カーボンニュートラル燃料技術センター)

おおやま のぶ お あめみや まさおみ きょうれん とおる こいで しゅんいち たに たまよ
○大山 信雄・雨宮 正臣・教蓮 亨・小出 俊一・谷 珠代

■カーボンニュートラル燃料技術センターでは新エネルギー・産業技術総合開発機構の委託事業として温室効果ガス排出削減を目的とした、SOEC 共電解と FT (フィッシャー・トロプシュ) 合成を組み合わせた液体合成燃料一貫製造プロセスの検討を 2020 年度より実施している。

FT 合成にて得られる生成物は、化石燃料から得られる成分とは異なる分子構造・物性の炭化水素であるため詳細分析が重要である。そこで従来の試験方法と比較し FT 合成燃料に適応した試験方法を確立した。

■従来の試験方法にて分析した結果と検討した

試験方法を比較し差異を確認した。また確立されていない重質分の分析方法についても確立することが出来た。

■FT 合成燃料をガソリン、ディーゼル燃料、Jet 燃料の製造に適した長鎖炭化水素に効率的に変換するためには、さらにサブクラス分離(1-オレフィン、内部オレフィン)を確認する必要があるが複数の分析機器を組合せて分析データを取得するため分析・解析時間が増大し複雑になることが課題でもある。これらの課題に対して包括的 2 次元ガスクロマトグラフィーを用いることで n-パラフィンからオレフィンを分離し正確に定量出来ることを確認した。

稲わらの触媒分解によるリグニンとセルロースの有効利用技術の開発

(弘前大学) ○田中 謙太郎、白川 夢大、五十嵐 悠真、
高松 翼、樋口 雄大、園木 和典、吉田 暁弘

我々は触媒を用いたリグニン酸化分解による未利用系バイオマスからの単環芳香族フェノールの回収に取り組んできた。本研究では銅触媒を用いた稲わらの直接酸化分解において、リグニン酸化により得られる単環芳香族フェノールの収率(以下、P 収率)と酸化により低下するセルロース回収率(以下、C 回収率)を両立すべく、触媒量や塩基濃度の最適化を検討した。

触媒量を基準の半分量とすると、P 収率が下がるだけでなく C 回収率も低下した。これはリグニンの不完全な分解によるものと推測される。逆に触媒量を増やすと、P 収率が向上する一方、

C 回収率は低下した。塩基(NaOH)水溶液の濃度を変更した場合、これまでの2 Mから0.5 Mとすることで、C 回収率は96%を示しつつもP 収率もほとんど低下しなかった。これら結果から、塩基濃度の最適化がリグニン分解とセルロース回収の両立に重要であることがわかった。

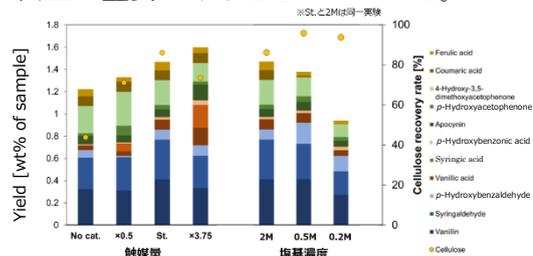


図1. 触媒量・塩基濃度別の単環芳香族フェノール収率・セルロース回収率

バイオ燃料・合成燃料中の含酸素化合物の定性・定量のための分離手法の検討

(アジレント・テクノロジー^{1*}) ○関口 桂^{1*}, 橋北 直人^{1*}

植物、藻類、農業産業廃棄物などさまざまな原料から製造される再生燃料や合成燃料には従来の化石燃料には含まれていなかった多くの化合物が混在しており、中でもアルコール、エステル、脂肪酸などの含酸素化合物は燃料の品質に与える影響が大きく正確な分析が必要である。本研究では燃料の主成分である炭化水素類と含酸素化合物類をクロマトグラフィーにより分離し、より正確な定性・定量を行うための手法について検討を行った。

炭化水素類と分けるには1本のカラムだけでは難しいためアルコールやエーテル類を含む燃料には無極性カラムと PLOT カラムを組み合わせ

たシステムが、脂肪酸メチルエステル類を含むバイオディーゼルには無極性カラムと極性カラムを組み合わせたハートカットシステムが有効であるが、本研究ではカラム2本組み合わせた GC x GC のシステム構成で実験を行った。PLOT カラムは化合物の種類によっては検出が困難であり網羅的な含酸素化合物の分析には適さない可能性があり、また高極性カラムは含酸素化合物に対して選択性が高く分離も優れていたがサンプル全体の溶出が困難な場合があることが分かった。中極性のカラムは温度上限が比較的高いく汎用性もあり、含酸素の化合物の種類によっては十分な分離が得られることが分かった。

大豆油バイオディーゼル燃料の詳細組成分析と物性評価

(株東レリサーチセンター) ○村岡 正義, 豊増 孝之
久保 貴史, 中島 沙知

植物油由来のバイオディーゼル燃料 (BDF) はカーボンニュートラルの実現に向けた重要な燃料の一つとして期待されている。現在日本国内で使用する際には軽油と 5%混合して用いられているが、脱炭素化の推進とともに将来的には BDF 混合比率の引き上げが見込まれている。しかしながら混合比を上げた場合にエンジン不具合や品質管理のリスクが懸念され、これら課題を解決するための技術開発の推進と BDF 含有燃料の詳細な組成・物性の評価が求められている。

本研究では大豆油 BDF を軽油に混合した燃料の組成および物性について分析を実施した。通

常の GC 測定では軽油と BDF 成分が重複してしまうが、GC×GC 測定を用いることで、軽油と BDF 成分を明確に分離して検出する事ができた。

BDF の混合比率を上げた際の蒸気圧を測定したところ、混合比率 5%の蒸気圧は軽油と差が認められなかったが、20%混合では有意な変化が認められた。また体積弾性率も同様の変化を示した。酸化発熱温度を測定したところ、BDF の混合比率を上げると酸化開始温度が急激に低下する結果が得られ、BDF 混合燃料の酸化されやすさが示された。

エチレン導入 FT 合成による SAF 合成の ZrO_2 - SiO_2 バイモダル構造効果

(富山大学*, 株式会社 INPEX**)

○^{ふじいしゅんのすけ}藤井俊之介*, ^{あらい}新井しおり**, ^{やすだしゅうへい}保田修平*, ^{かえいらく}何英洛*, ^{ようこくき}楊國輝*, ^{ふじもとけんいちろう}藤本健一郎**, ^{よこただいすけ}横田大助**, ^{つばきのりたつ}椿範立*

Fischer-Tropsch 合成(FTS)による合成ガス($CO \cdot H_2$)から持続可能な航空燃料(SAF)への合成技術は持続可能な社会の実現のために非常に有効なルートである。SAF は低温流動性のある炭化水素、特に炭素数 7 から 15 のイソパラフィンを含有する炭化水素から構成され、高効率な SAF 合成のために高 CO 転化率・高 SAF 選択率の反応プロセスの開発が求められている。触媒の性能評価は固定床反応装置で合成ガスに炭素鎖成長促進剤としてエチレンを同時に流通して行った。本研究は Co-Mn 系触媒の担体に着目し、 ZrO_2 - SiO_2 バイモダル構造担体の開発・評価を行った。

ZrO_2 - SiO_2 バイモダル構造担体は SiO_2 担体の細孔径より小さい粒子径(10 nm 以下)の ZrO_2 分散液を SiO_2 担体に含浸して調製した。バイモダル構造は窒素吸脱着等温線から得られる BJH プロットでピークを二つもつことで確認した。 ZrO_2 粒子径が SiO_2 担体の細孔径より大きい触媒と反応比較をすると、バイモダル触媒の方が高効率な SAF 合成が可能であった。また、 SiO_2 担体の細孔径を大きくするとさらに高効率な SAF 合成結果となった。これらはバイモダル構造の大細孔の利点である細孔内での物質拡散の促進効果が影響したと考えられる。

水酸化銅メッシュ触媒を用いたリグニン酸化分解における バッチ式及びフロー式反応の比較

(弘前大学) ○五十嵐悠真, 高松翼, 田中謙太郎, 樋口雄大, 園木和典, 吉田曉弘

リグニンは天然の芳香族高分子材料であり、製紙やバイオエタノール製造といったバイオマス利用プロセスにおける副生成物として多量に発生することから芳香族原料としての有効利用が望まれる。水酸化銅はリグニンを酸化分解し有用なフェノール類を与える触媒となるが、粉末状では回収・再利用が難しい。そこで、金属メッシュに固定化した水酸化銅触媒を開発し、バッチ反応とフロー反応を行い、それら条件における性能比較を行った。

バッチ反応は、リグニン液(13.5 mL)と触媒(約 4.3 g)を用い、酸素雰囲気下(0.5 MPa)、200℃で 15~720 分反応させた。フロー反応は独自に開

発した装置で 200℃で反応を行った。HPLC および GPC 分析を基に、得られた単環フェノールの収率、分解後のリグニン分子量、触媒比活性を算出し、各条件の優劣を評価した。開発したメッシュ触媒はバッチ反応において粉末水酸化銅触媒と同程度の活性を示し、回収性も良好であった。また、長時間の連続フロー反応が可能であった。両反応における触媒比活性を同程度の反応度(=分解後のリグニン分子量)となる条件で比較すると、フロー反応の方がバッチ反応よりも 1.5 倍ほど高くなった。これはフロー反応における連続的な酸素導入と、触媒とリグニン液との高い接触効率によるものと推測される。

水素吸蔵合金粒子充填層の力学的特性に関する検討

(国立研究開発法人産業技術総合研究所) ○奥村真彦

水素吸蔵合金は、固体状態を維持しつつ水素ガスと直接可逆的に化合する合金であり、温和な条件下において水素を高い体積貯蔵密度で貯蔵可能にする優れた材料として知られている。産総研は着火のおそれがない安全な合金を開発し、高圧ガス保安法および消防法に抵触しない街区利用に適した安全性の高い大容量の水素貯蔵システムを企業と共同で開発している。

合金を用いた水素貯蔵システムでは、破碎した合金を封入したタンクに、水素を充填し貯蔵する。この過程で合金は水素と化合するが、その際に格子体積が増大し、体積膨張する。その

ため、タンクは合金から荷重を受け、応力が発現し変形する。これによる水素漏えいは必ず避ける必要があり、変形を抑制するためタンク構造は通常厚肉に設計される。しかしながら、荷重の特性は解明されていない点もあり、タンクの肉厚が過大となっているおそれがある。

タンクに合金充填層が及ぼす荷重に、充填層の力学的特性は影響を及ぼすと予想される。そこで、本研究では、最も一般的な水素吸蔵合金である LaNi_5 の充填層の力学的特性を評価し、既知の特性とあわせて検討することにより、その力学的特性が荷重に及ぼす影響を検討した。

Fischer-Tropsch 反応による選択的な液体燃料の合成を目指した 担持 Fe 触媒の開発-ハイブリッド化の影響に関する検討

(名古屋大) ○^{ちやたに}茶谷 ^{じゆんや}純矢・クトゥビ シヤハジャハン・
^{やまだ}山田 ^{ひろし}博史・^{きとう}佐藤 ^{かつとし}勝俊・^{ながおか}永岡 ^{かつとし}勝俊

一酸化炭素と水素から炭化水素を生成する FT 反応では、C1-C4 の気体成分、C5-C19 の液体成分、C20+の固体成分が同時に生成される。その中でも液体成分はガソリンや航空燃料として需要が高いため、液体成分を高選択的に生成する触媒の開発が期待されている。ゼオライトは酸点の働きにより、低級オレフィンの重合や長鎖炭化水素の分解、含酸素化合物の変換などを促進することが知られている。本研究では、担持 Fe 触媒を用いた FT 反応によって生成した炭化水素を、ハイブリッドしたゼオライト上で逐次的に変換して、液体成

分の選択性を高めることを目指し、種々のゼオライトの影響を検討した。

鉄触媒にはプロモーターとして K を添加した SiO₂担持 Fe 触媒を用い、ゼオライトには ZSM-5、ZSM-22、β、Y、MOR、FER の 6 種を使用し、280、300、320 °C の 3 条件で活性測定を行った。その結果、担持 Fe 触媒とゼオライトを組み合わせることで C20+の分解が進行し、C5-C19 の選択率が向上したが、その効果はゼオライトの種類や反応温度によって異なった。本研究の一部は NEDO の委託事業により実施した。

メタン熱分解による水素製造において触媒の H₂S 耐性に担体が及ぼす影響

(信州大) ○松尾洗樹, 長田光正, 福長博, 高橋伸英, 嶋田五百里

水素は、使用時に CO₂を排出しないクリーンなエネルギーとして注目されている。現状の水素製造の多くは、水素製造時に CO₂を排出する問題点がある。そこで、バイオマスの発酵で生成するバイオガス（主成分：メタン）を原料に用いたメタン熱分解に注目した。メタン熱分解はメタンから水素と固体炭素を生成する反応であり、バイオガスを原料に用いることでカーボンネガティブな水素製造を達成できる可能性がある。しかし、バイオガスには H₂S が含まれており、触媒を被毒してしまうことが課題である。そこで、本研究では H₂S 共存下でのメタン熱分解において、H₂S 耐性に担体が及ぼす影響の解明を目指した。

触媒は、担体である Al₂O₃または BaTiO₃に

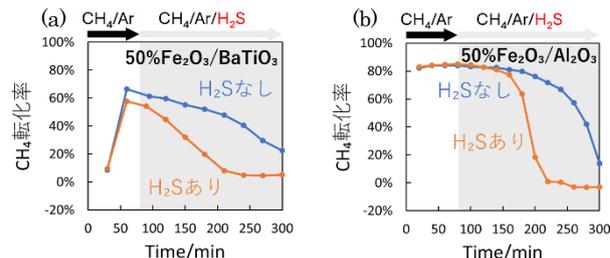


図1 担体の異なる触媒を用いたメタン熱分解における
反応時間とメタン転化率の関係

(a) Fe₂O₃/BaTiO₃ (b) Fe₂O₃/Al₂O₃

Fe₂O₃を担持して用いた。反応は、CH₄/Ar 混合ガスを流通させて触媒活性を安定させた後、系内に H₂S を添加し、その影響を評価した。図1より Al₂O₃担体ではしばらく活性を維持した後、急激な失活を引き起こすことが確認された。一方で BaTiO₃担体では、H₂S 添加後から緩やかな失活が確認された。

Co/TiO₂触媒を用いた Fischer-Tropsch 反応における担体構造と金属添加の影響

(産総研) ○重信咲季, 伊藤覚, 望月剛久

Fischer-Tropsch (FT) 反応は、一酸化炭素と水素を原料として炭化水素を合成する反応であり、石油代替の液体燃料を製造可能とする重要なプロセスである。特に、バイオマスや CO₂ 由来の合成ガスを利用することで、カーボンニュートラル社会の実現に大きく貢献できる点から、近年その意義がますます高まっている。FT 反応に用いられる触媒としては、Fe 系および Co 系が代表的である。Co 担持触媒は高い活性を有し連鎖成長に有利であることから液体燃料の合成に広く利用されている。その中でも、TiO₂ を担体とした Co/TiO₂ 触媒は、機械的・熱的安定

性に優れており、多くの研究が行われている。

本研究では、TiO₂ 担体の結晶構造の違いや、助触媒としての金属添加剤の効果に着目し、それらが Co/TiO₂ 触媒の構造や還元挙動、さらには FT 反応活性・生成物分布に及ぼす影響を系統的に検討した。その結果、アナターゼ型 TiO₂ を担体とした場合と比較して、ルチル型あるいはアナターゼとルチルの混合相 TiO₂ を担体とした場合においてより高い CO 転化率が得られた。また、金属添加によりメタン生成が抑制され、炭素数の大きい炭化水素の生成が促進されることが確認された。

Cs-Ru 担持単層カーボンナノチューブ触媒によるアンモニア合成

(産業技術総合研究所) ○西 政康, 陳 仕元, 望月 剛久

従来のアンモニア合成法は化石燃料由来の水素を利用するため大量の CO₂ を排出している。CO₂ 排出量の削減のため、再生可能エネルギーから得られる電力を利用した水電解水素を用いて温和な条件でアンモニアを合成可能な触媒の開発が求められる。我々は炭素材料担体 Ru 触媒に着目し、特にスーパージョイント法により製造された単層カーボンナノチューブ(SGCNT)に Ru および Cs を担持した触媒(Cs-Ru/SGCNT)が温和な条件で高い活性を示すことを見出した。本研究では、Cs-Ru/SGCNT の触媒特性評価の結果について報告する。

SGCNT(日本ゼオン社製 ZEONANO@SG101)

に含浸法を用いて 10 wt% の Ru を担持し、さらに助触媒として Cs ($C_{Smol}/Ru_{mol}=2.5$) を担持し触媒を調製した。

Cs-Ru/SGCNT 触媒のアンモニア合成活性の温度依存性を検討したところ、比較触媒に比べ、低温で高いアンモニア合成活性を示すことがわかった。TPD 測定等の触媒特性評価を行った結果、窒素の吸着および解離を促進する活性サイトが豊富に存在することがわかった。また、水素脱離温度が比較触媒よりも低いことから、活性の阻害となる水素被毒の影響が小さいことにより、低温で高活性が発現したと考えられる。

二酸化炭素のメタノール経由による直接芳香族化反応用触媒の開発

(富山大学) ○^{ききがわはるな}笹川陽菜,^{とのおかみゆ}外岡未有,^{やすだしゆへい}保田修平,^{かえいらく}何英洛,^{ようこくき}楊國輝,^{つばきのりたつ}椿範立

CO₂ 排出削減と資源循環利用の観点から、CO₂ を原料とした高付加価値化学品合成が注目されている。CO₂ を原料とする軽質芳香族(BTX)合成反応プロセスの開発が研究されており、CO₂ をメタノールに変換する触媒とメタノールを芳香族に変換するゼオライト触媒とを組み合わせ実施されている。本研究では、ゼオライト触媒は HZSM-5 を用い、外表面酸点での副反応を促成することを目的に、ゼオライト外表面をアモルファス炭素で修飾した触媒の開発およびその触媒性能評価を実施した。

HZSM-5 への炭素修飾はグルコースを含浸法で調製した (C/HZSM-5)。触媒性能評価は ZrCr 酸

化物触媒と C/HZSM-5 触媒を混合させた触媒を充填した固定床流通式反応装置を用いて実施した。

炭素修飾を施さない HZSM-5 では炭化水素中の BTX 選択率 36.2% (CO₂ 転化率 16.6%、芳香族選択率 66.2%) に対し、炭素修飾量を変化させた結果、炭素修飾量 1.45 wt% が最も高い BTX 選択率 45.4% (CO₂ 転化率 16.4%、芳香族選択率 75.8%) を示した。さらに、触媒成分の混合方法について検討したところ、粉末混合が最大芳香族選択率および BTX 選択率を示し、粒子混合、触媒層を石英砂で分けた二段充填では芳香族選択率が著しく減少した。

白金およびコバルトを有する黒鉛層間化合物の構造および シンナムアルデヒド水素化活性

(岩手大 1*, 北海道大 2**) ○阿部颯希 1*, 坂口紀史 2**, 白井誠之 1*

黒鉛はグラフェン層が van der Waals 力で積み重なった構造をし、その層間に様々な化合物を挿入することができる。我々はこれまで黒鉛粉末と貴金属塩化物の混合物を塩素雰囲気下で熱処理することにより黒鉛層間に様々な金属塩化物を挿入できること (MCl_x-GIC)、塩素熱処理後に水素還元を行うことで二次元状の金属微粒子を黒鉛層間に挿入した黒鉛層間化合物 (M-GIC) が得られることを報告してきた。¹⁾ 本研究では黒鉛層間での二次元系粒子の合成を目指し、白金-コバルトバイメタルの調製とシンナムアルデヒド水素化反応との関係を調べた。

高圧塩素混合法を用い、塩化コバルト (II) と塩化白金 (IV) を黒鉛層間に挿入し、更に水素還元することで黒鉛層間に白金コバルト微粒子 (PtCo-GIC) を合成した。TEM、STEM 解析により白金とコバルトが均一に混合した厚みが 1-5 nm、幅が 5-100 nm の合金微粒子が、黒鉛層間に形成されていることが分かった。PtCo-GIC は超臨界二酸化炭素溶媒を用いるシンナムアルデヒドの水素化反応において高い活性を示した。
1) M. Shirai, *Chem. Record*, **19**, 1263-1271 (2019).
本研究は JSPS 科研費 24K01249 の助成を受けた。

Fe-Zn 触媒における CO₂ から液体燃料の高選択的合成

(富山大学) ○本庄遥登^{ほんじょうはると}, 李騰^{りとう}, 保田修平^{やすだしゅうへい}, 何英洛^{かえいらく}, 楊國輝^{ようこくき}, 椿範立^{つばきのりたつ}

近年、地球温暖化の抑制などの観点からカーボンニュートラルな社会構築が望まれている。特に CO₂ から合成される液体燃料は持続可能な社会に貢献するため大いに期待されている。合成方法として、Fe 系触媒を用いた逆水性シフト(RWGS)反応と Fischer-Tropsch 合成による CO₂ から直接、液体燃料成分の炭素数 5 以上の炭化水素(C₅₊)を合成する技術の開発が世界中で研究されている。本研究では Fe-Zn 界面を豊富に含む ZnFe₂O₄ 触媒を溶解塩法により調製し、CO₂ を原料として C₅₊炭化水素合成への性能評価および反応メカニズムの解明を行った。

触媒性能試験を固定床流通式反応装置で行ったところ従来の Fe₂O₃ 触媒であると CO₂ 転化率は

20.3%、C₅₊の選択率は 28.4%だったのに対して ZnFe₂O₄ 触媒では転化率は 48.2%、選択率は 72.2%に向上した。また通常多量に生成される CH₄、CO はそれぞれ選択率 5.8%、8.9%まで抑えることができた。EPR や CO₂-TPD など分析結果より、Zn の導入により酸素空孔量と CO₂吸着量の増加も見られた。DRIFT 測定の結果から、ZnFe₂O₄ 触媒は Fe₂O₃ 触媒と比較して RWGS 反応の中間体である HCOO*シグナルが反応ガスを導入後速やかに観測された。これは Zn の添加により CO₂ の反応性が増加したことを示している。

以上の結果から、Zn の導入により酸素空孔量が増大し CO₂ の活性化につながり、その結果触媒性能が向上したと考えられる。

担持金ナノ粒子を用いた硫黄化合物の吸着

(九州大学*, 神奈川工科大学**, 酒類総合研究所***) ○中山晶皓*, 和嶋瑠花*, 安東春希*, 益田栞大*, 村山美乃**, 磯谷敦子***, 吉澤明菜*, 山本英治*, 徳永信*

石油化学原料や半導体プロセス材料、さらには日本酒などの飲料に含まれる硫黄化合物は、不快臭の原因となるのみならず、触媒被毒や製造品の品質低下などを引き起こすため、その選択的脱硫技術の開発が求められている。本研究では、吸着材として担持金ナノ粒子を用い、液相試料、特に日本酒などの酒類からの脱硫を検討した。日本酒を常温で長期保管すると生じる「老香」は主にジメチルトリスルファン (DMTS) が原因物質であり、その嗅覚閾値は 0.18 ppb と極めて低い。そこで、担持金ナノ粒子による DMTS の吸着速度をバッチ式・フロー

式の両方式で評価した。吸着剤の調製は金-βアラニン錯体を金前駆体として用いる含浸法を行い、担体のシリカ上に粒子径 4 nm 前後の金ナノ粒子が担持されたことを確認した。

吸着実験の結果、バッチ式よりもフロー式で 100 倍以上速い DMTS の吸着速度が得られた。他の硫黄化合物と比べて、DMTS の吸着速度は試料中に含まれるグルコースの影響を受けにくいことが明らかとなった。実用化に向け、食品添加物担体を用いた吸着材開発とその吸着性能評価についても検討を進めており、詳細は当日発表予定である。

CO₂水素化による軽質オレフィン合成を促進する FeCo 合金クラスターを用いた三元触媒の開発

(富山大学) ○島谷沙菜, 李騰, 保田修平, 何英洛, 楊國輝, 椿範立

持続可能な社会の実現に向け、CO₂から軽質オレフィンを直接合成する技術(Direct-FT 合成)が注目されている。Direct-FT 合成で Fe 系触媒は有望だが、活性などに開発余地があるため、遷移金属の添加等の研究が行われている。本研究では FeZn 系触媒に Co を添加した FeCo 合金クラスターをもつ三元触媒を調製し、軽質オレフィンの高選択的合成法の開発を行った。

反応試験は固定床反応器を用いて行った。触媒は縮合還流法で調製し、性能評価及び構造解析を行った。

Na_{0.02}Co_{0.4}ZnFe₂O₄ は、Na_{0.02}ZnFe₂O₄ と比べて

CO 選択率が低く、軽質オレフィンの高収率合成に適していることが確認できた。in-situ XRD では、Co 添加で反応中に新たに FeCo 相の形成が確認された。また DRIFTS 測定より CH_x 中間体の生成と連鎖成長が確認でき、軽質オレフィン生成の促進が確認できた。このことから Co 添加により触媒表面の吸着特性や中間体生成挙動が変化し、反応選択性に影響を与える。この結果から、Na_{0.02}Co_{0.4}ZnFe₂O₄ は Fe₃O₄-FeCo-Fe₅C₂ の 3 つの触媒活性点を有し、FeCo 相は CO 生成抑制、CH_x 形成と Fe₅C₂ 相での炭素鎖成長に寄与し、オレフィン選択性の向上が示された。

黒鉛層間金属イリジウム微粒子の合成

(岩手大 1*) ○住田衣緒 1*, 算用子晃哉 1*, 白井誠之 1*

黒鉛層間に塩化白金(IV)に挿入し水素還元処理することにより黒鉛層間に 2-3 nm の厚みを有し幅 100 nm の広がりを持ったシート状の白金微粒子（白金ナノシート）が調製できる。黒鉛層間白金ナノシートは黒鉛上に担持した白金微粒子に比較してシンナムアルデヒドの水素化反応において高いシンナミルアルコール選択性を示す。1) 本研究では黒鉛層間にイリジウム微粒子の形成を試みた。

黒鉛（KS6）とイリジウム塩との混合物を塩素雰囲気下で熱処理し、更に水素気流下で還元処理した。

イリジウム塩としてヘキサクロロイリジウム(IV)酸 n 水和物 ($\text{H}_2\text{IrCl}_6 \cdot n\text{H}_2\text{O}$) を用い、塩素 0.46 MPa 下 450 °C で 3 日間処理し、水素気流下で 300 °C 還元処理することで、黒鉛層間に、厚さ 1-5 nm、幅 2-65 nm の二次元状の金属イリジウム微粒子を黒鉛層間に形成できた。

1) M. Shirai, *Chem. Rec.* **19** (2019) 1263.

本研究は JSPS 科研費 24K01249 の助成を受けた。

層状複水酸化物由来酸化物触媒を用いる CO₂ 水素化による メタンと低級炭化水素の同時製造

(関西大院*, 大阪ガス**, 関西大***)

○衣川敬人*, 大塚浩文**, 山本直生**, 池永直樹***

カーボンニュートラル実現に向け、CO₂ 水素化によるメタン(CH₄)合成が注目されているが、都市ガスとして CH₄ のみではカロリー不足のため、低級炭化水素(C₂-C₄)でカロリーを補う必要がある。

本研究では、CH₄ および C₂-C₄ の同時製造を目的とし、逆水性ガスシフト反応とフィッシャー・トロプシュ反応の両方に活性を有し、C₂-C₄ を合成可能な Co-Fe 系層状複水酸化物由来触媒(CoFeAl)の後段に、CH₄ 生成能を有する Ni 系層状複水酸化物由来触媒(NiMnAl)の導入を検討した。反応は常圧固定床流通式反応器を用い、触媒 200 mg を 400 °C まで昇温し、60 min 水素還元した後、CO₂/H₂=10/40

mL/min を供給し、30 min 反応を行った。

CoFeAl 単独と比較して、後段に NiMnAl を全触媒量中 1 wt% 導入することで、C₂-C₄ 収率は 4.5 % から 3.8 % へやや低下したが、CO₂ 転化率は 39.7 % から 51.8 % へ、CH₄ 収率は 9.5 % から 32.9 % へと大幅に向上した。これは、CoFeAl で反応できなかった CO₂ が、後段の NiMnAl で CH₄ に転換されたためであると考えられる。

一方、Ni は炭化水素の水素化分解に対して活性を有すると報告されており¹⁾、C₂-C₄ 生成物の一部が分解され、C₂-C₄ 収率の低下を招いたと考えられる。

1) S. Wang, *et al.*, *Energy Fuels*, **27** (2013) 7

シリコン粉末と CO₂ の反応で得られる多孔質シリカの構造解析と活用

(横浜国立大学大学院 1*, 産業技術総合研究所 2*) ○谷村勇亮 1*,

長谷川慎吾 1*, 眞中雄一 2*, 本倉健 1*

多孔質シリカは、吸着材や触媒担体等に用いられる重要な材料である。本研究では、金属ケイ素を還元剤として CO₂ からギ酸を生成する触媒反応において、同時に生成するケイ素由来生成物が 1 nm 程度の細孔をもつ多孔質アモルファスシリカになることを見出した。さらに、得られたシリカにヨウ化アルキルアンモニウム塩を担持し、CO₂ とエポキシドからの環状カーボネート合成反応の触媒に用いたところ、収率 73 % で生成物が得られた。

TBAF·3H₂O を触媒、NMP を溶媒、水をプロトン源としてシリコン粉末と CO₂ の反応を行った結果、ギ酸収量は 0.41 mmol であり、得られたシリカの比

表面積は 600 m²g⁻¹ であった。シリカの窒素吸脱着等温線を **Figure 1(A)** に示す。得られた吸脱着等温線は I 型と II 型を組み合わせたとような形状であった。また、**Figure 1(B)** の細孔径分布より、1 nm 程度の細孔が確認された。

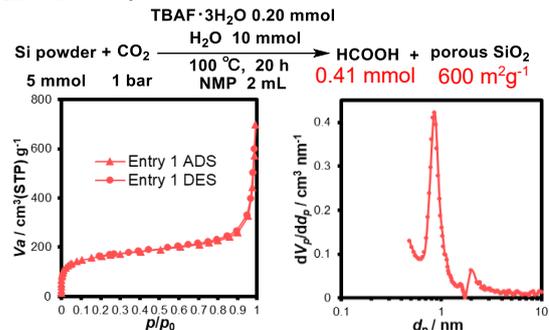


Figure 1. (A) Nitrogen sorption isotherms and (B) pore size distribution of porous SiO₂

黒鉛層間白金-スズバイメタルナノシートの調製および シンナムアルデヒドの水素化反応

(岩手大 1*, 北海道大 2**) ○算用子晃哉 1*, 坂口紀史 2**, 白井誠之 1*

黒鉛層間に金属塩化物を挿入し、水素還元や硫化処理を行なうことで黒鉛層間に金属ナノシートが形成されること、黒鉛層間ナノシートは黒鉛表面に形成したナノ微粒子とは異なる触媒活性を示すことを報告してきた¹⁾。本研究では、黒鉛層間に白金とスズのバイメタルナノシートを形成することを試みた。

黒鉛と、塩化白金(IV)を塩素 0.4 MPa 下、723 K で 7 日間熱処理を行い得られた試料 (PtCl₄-GIC) を水素流通下 573 K で処理した (Pt-GIC)。次に、Pt-GIC と、塩化スズ (II) の混合物を真空下 513 K で 7 日間熱処理し、更

に 573 K で水素還元処理した (PtSn-GIC)。比較のために白金及びスズを黒鉛表面に担持した触媒 (PtSn/Gmix) も調製した。

TEM 観察により、PtSn-GIC では、二次元状の板状粒子が観察された。また、シンナムアルデヒドの水素化反応において、PtSn-GIC は PtSn/Gmix と比較して高いシンナミルアルコール選択性を示した。

1) M. Shirai, *Chem. Rec.* **19** (2019) 1263.

本研究は JSPS 科研費 24K01249 の助成を受けた。

新規ジルコニウム固定化触媒による二酸化炭素を原料とする ジエチルカーボネート合成

(産総研*, 東ソー(株)**) ○長江 春樹*・小泉 博基*・竹内 勝彦*・羽村 敏**
山本 敏秀**・松本 和弘*・上村 佳大*・片岡 祥*・深谷 訓久*・崔 準哲*

近年、カーボンニュートラルを実現するために、二酸化炭素 (CO₂) の排出を削減するだけでなく、大気に存在する CO₂ を資源ととらえ、燃料やさまざまな製品に再利用する技術が盛んに研究されている。我々は、これまでにテトラアルキルオルトシリケート (TROS) を再生可能な反応剤として用いることで、CO₂ を原料としたジアルキルカーボネートやカルバメートなどの合成手法を開発してきた^{1,2}。今回我々は、CO₂ とテトラエチルオルトシリケート (TEOS) を原料としたジエチルカーボネート (DEC) 合成において、以前に報告していた均一系触媒である Zr(OEt)₄ を金属酸化物上に担持した触媒を調製し、その触媒活性と

再利用試験を行った。その結果、シリカ (CARICT Q10) に硝酸セリウム水溶液を含浸させ、焼成することで作成した CeO₂/SiO₂ 担体に Zr(OEt)₄ を担持した触媒が最も高い触媒活性を示したので、その詳細を報告する³。

- 1) Putro, W. S.; Ikeda, A.; Shigeyasu, S.; Hamura, S.; Matsumoto, S.; Lee, V. Y.; Choi, J.-C.; Fukaya, N. *ChemSusChem* **2021**, *14*, 842.
- 2) Zhang, Q.; Yuan, H.-Y.; Fukaya, N.; Yasuda, H.; Choi, J.-C. *Green Chem.* **2017**, *19*, 5614.
- 3) Nagae, H.; Koizumi, H.; Takeuchi, K.; Hamura, S.; Yamamoto, T.; Matsumoto, K.; Kamimura, Y.; Kataoka, S.; Fukaya, N.; Choi, J.-C. *ChemCatChem* **2024**, *16*, e202400673.

この成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) の助成事業 (JPNP21021) の結果得られたものです。

様々な組成を持つ有機-無機ハイブリッド型層状物質の合成

(北九大*, 産総研**) ○持松 泰誠*, 山本 勝俊*, 池田 拓史**

これまでメチルトリメトキシシラン(MTMS)をケイ素源とする有機-無機ハイブリッド型層状物質 KCS-11 (Fig.1(a))の合成について報告した。本研究では様々な組成を持つ物質の合成を試みた。

MTMS とともに TEOS を用いた場合(MTMS : TEOS = 0.9 : 0.1)、より低角側に XRD ピークが確認でき(Fig.1(b))、TEOS の添加により KCS-11 より層が厚い生成物が副生したと考えられた。ここで $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 比を上げると CAN 型ゼオライトが得られ(Fig.1(c))、TEOS のみをケイ素源とする結晶化が起こったようだが、MTMS のみを先行して加水分解させてから水熱合成したところ、異なる生成物が得られ(Fig.1(d))、複合化されたと考えられる。

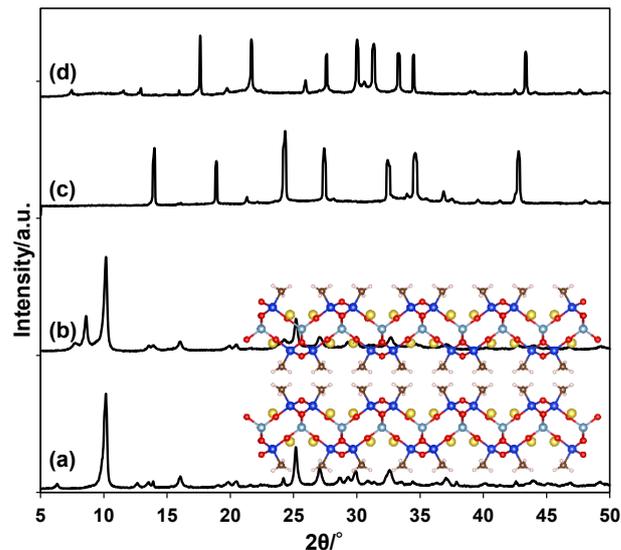


Fig.1 MTMS から得られた物質の XRD パターン.

担持型 Co-In 触媒を用いた CO₂ 水素化メタノール合成

(早稲田大) ^{おおぐし しんや} 大串 真也・^{ちしま けんしん} 千島 健伸・^{はっとり さくや} 服部 朔弥・^{ひご たくま} 比護 拓馬・^{せきね やすし} 関根 泰

循環型社会実現に向けて CO₂ を回収・利用する CCUS 技術¹⁾が注目されており、CO₂ 水素化によるメタノール合成は有効な手段のひとつである。近年、Co-In 系触媒によるメタノール合成が報告されており、特に担体への担持による触媒性能の向上が報告されている。しかし、担体と Co-In との相互作用は十分に明らかにされていない。

そこで本研究では、CO₂ の活性化に重要な役割を果たす酸素欠陥²⁾を多く有する Ce-Zr 酸化物に着目し、これを担体とした Co-In 触媒を調製した。さらに、活性評価と各種キャラクタリゼーションにより、担体と Co-In の相互作用機構を検討することを目的とした。担体はクエン酸錯体重合法により調製し Co と In を所定比率で含浸させ Co-In/Ce_{1-x}Zr_xO_{2-δ}を得た。活性試験は固定床流通式反応器を用いて行い、触媒 0.3 g を充填した。反応

条件は H₂/CO₂ = 3/1 (全流量 80 mL min⁻¹)、圧力 0.9 MPa とし、反応温度 250–350°C の範囲で生成物を四重極質量分析計 (Q-MASS) により定量した。

CeZr 組成比を変化させた場合の 275°C における活性試験結果を調べた。Co-In/Ce_{0.9}Zr_{0.1}O_{2-δ} においてメタノール生成量が最大を示し、それ以上の Zr 含有量では生成量が減少した。250–350°C での活性試験結果をもとに、CeO₂ および Ce_{0.9}Zr_{0.1}O_{2-δ} 担体に担持した Co-In 触媒のアレニウスプロットを作成した。Ce_{0.9}Zr_{0.1}O_{2-δ} 担体では見かけの活性化エネルギーが約 7.5 kJ mol⁻¹ 低下した。これら Zr 少量ドーブによる活性向上は、分散性や粒径ではなく、反応経路に関わるエネルギー障壁低下に起因する可能性が高いと結論づけられた。

- 1) S. Nagireddi *et al.*, *ACS Eng. Au.*, **4** (2023) 22-48.
- 2) K. Tianjue *et al.*, *Chem. Eng. J.*, **503** (2025) 158236.

水熱合成法を用いたシリカナノ粒子集合体の合成と細孔制御

(大阪大学) ○鳥山 真希, 三宅 浩史, 内田 幸明, 西山 憲和

近年、ナノ細孔を有する多孔質材料は、規則的な細孔構造や高い細孔容積などの特性から触媒担体や吸着剤などとして応用が期待されており、大きな注目を集めている。中でも、生体適合性に優れ、官能基化が容易な表面が豊富に存在することから、メソポーラスシリカは大きな関心を集める材料となっている。従来のメソポーラスシリカは有機材料を鋳型として用いて合成されるのが一般的であるが、生産コストが高いことや、鋳型を除去する際に有毒ガスが発生するなどの課題があった。

本研究では、有機鋳型を用いないメソポーラスシリカの新規合成法の開発を目指した。アプ

ローチとして、シリカナノ粒子集合体を合成し、粒子間の空隙を細孔として用いる手法を考え、核形成を促進するため水熱合成法を用いた。本アプローチにより、均一な空隙をもつシリカナノ粒子の凝集体、つまり均一な細孔を有するメソポーラスシリカが得られた。細孔径は前駆溶液の pH 値、水熱合成の温度と時間を変えることにより、7-109 nm の範囲で制御できる。

合成した材料に Ni を含浸させ、メタン分解反応に応用した。Ni 担持シリカは、市販のメソポーラスシリカ担体と比較して優れた活性を示し、合成した新規メソポーラスシリカの有用性を確認した。

Rh系二元金属触媒を用いるアレーンとアルキンの酸化のカップリング反応

(横浜国立大学) ○楠碧彩, 高澤豪太, 長谷川慎吾, 本倉健

アリールアセチレンは天然物や医薬品の合成中間体として重要な構造単位である。代表的な合成法として菌頭カップリング反応が知られているが、ハロゲンを含む副生成物が量論量生じる課題がある。これに対し、分子状酸素を酸化剤とする酸化のカップリング反応では水のみが副生し、アレーンのハロゲン化を省略することができる。本研究ではアレーンとアルキンの酸化のカップリング反応に対して高い活性を示す担持金属触媒の開発に取り組んだ。

種々の金属触媒について活性評価を行なったところ、一元系金属触媒の中では Rh/C が最も高活性を示した(**Figure 1**)。さらに、RhCu/C を用い

ると 48%まで収率が向上し、副生成物も抑制されることが見出された。一方、Cu/C が本反応に活性をほとんど示さなかったことから、Rh と Cu が相乗的に機能する触媒反応機構が示唆された。

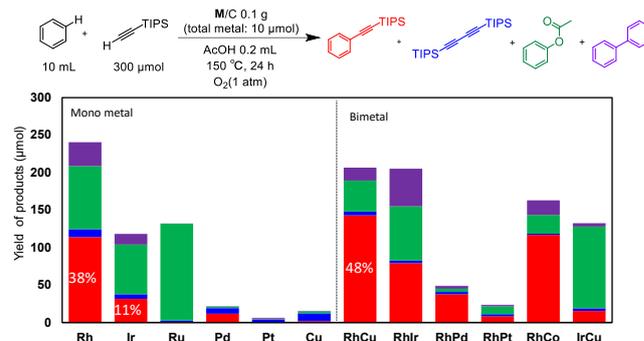


Figure 1. Oxidative dehydrogenation coupling of benzene and triisopropylsilylacetylene

NaFeGa 触媒を用いた二酸化炭素水素化による高効率液体燃料合成

(富山大) ○廣澤^{ひろざわ} 和佳奈^{わかな}, 劉^{りゅう} 初鳳^{はつふう}, 保田^{やすだ} 修平^{しゅうへい}, 何^か 英洛^{えいらく}, 楊^{よう} 國輝^{こくき}, 椿^{つばき} 範立^{のりたつ}

炭素循環型社会の実現に向け、二酸化炭素を原料とする液体燃料合成プロセスが盛んに検討されている。本研究では、 C_{5+} の重質炭化水素を選択的に合成することを目的として、NaFe 系触媒に助触媒として Ga を添加した NaFeGa 触媒を合成し、固定床流通式反応装置を用いて二酸化炭素水素化による直接 C_{5+} 液体燃料合成反応に対する評価を行った。

各種金属 M (Al, Zn, Mg, Ce, Ca, Y, La, Ga) を 20wt% 添加した NaFeM 触媒の触媒性能比較により、NaFeGa が高い CO_2 転化率と C_{5+} 選択性を示した。さらに、Ga の最適含有量を検討した結果、Ga を 30wt% 含む NaFeGa-30 が最も優れた性能を示し、FeGa と比べて CO_2 転化率は 44.4%、 C_{5+} 選択性は 59.7% を達

成した。

N_2 吸着-脱着測定の結果、NaFeGa-30 は他の金属を添加した触媒と比較して細孔径がより小さく、比表面積が大きいことが確認された。この構造的特性により、反応ガスとの接触効率が向上し、 CO_2 吸着能の向上につながったと考えられる。また、 H_2 -TPR 測定では、Ga 添加によってピークが高温側にシフトしたため、Fe の還元が抑制されたことが示された。この還元の抑制により、反応中間体の過剰な水素化反応が抑えられ、炭素鎖成長が促進された。その結果、メタンなどの軽質炭化水素の生成が抑制され、目的とする C_{5+} の高い選択性及び高い時空収率が実現された。

プラスチックとバイオオイルの混合接触分解における原料間相互作用の解析

(信州大) ○奥野皓太, 長田光正, 福長博, 高橋伸英, 嶋田五百里

プラスチックのカーボンニュートラル化のためにはバイオマス資源の利用や廃プラスチックのケミカルリサイクルの促進が求められる。その方法として、プラスチックとバイオオイルの混合接触分解に着目した。接触分解反応場では、プラスチックが水素供与体として寄与することで、炭素損失の少ない H_2O としての脱酸素が進行することに加え、分解されたプラスチックから芳香族化合物が多く生成することが期待される。そこで、本研究ではプラスチックとバイオオイルの混合接触分解における原料間相互作用の解明を目指した。

原料にはポリエチレン (PE)、ポリプロピレン (PP)、ポリスチレン (PS) の熱分解油とバイオオイルモデル物質であるグアイアコールを用

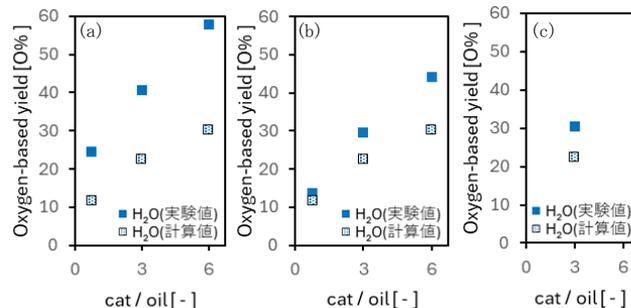


図1 H_2O 収率 (a)Guaiacol:PE=1:1 (b)Guaiacol:PP=1:1 (c) Guaiacol:PS=1:1

いた。原料間相互作用の評価は実験結果を計算値と比較することで行った。計算値は原料間に相互作用がないと仮定した場合の値であり、各原料単体の接触分解における実験値をもとに算出した。図1に示すように、バイオオイルとプラスチックの混合接触分解において、PE・PP・PSからの水素供与により、バイオオイルの H_2O としての脱酸素の進行が確認された。

CO₂ と NH₃ からの CH₄ 合成反応に対する高活性担持型 Ni 触媒の開発： Mg-Al 複合酸化物担体効果の検討

(名古屋大*, 宇部マテリアルズ**) ○上田 祐司*^{**,} 山田 博史*
永岡 勝俊*, 佐藤 勝俊*

1. 緒言 : CO₂ とグリーン H₂ から製造される e-メタンは既存インフラを活用できる汎用性が高いカーボンニュートラル燃料である。最近ではグリーン H₂ のキャリアとして NH₃ が注目されていることから、将来的に CO₂ と NH₃ からの CH₄ 合成プロセスの需要が見込まれる。本プロセスの実現に向けて、我々は担持型 Ni 触媒による安価な高活性触媒の開発を行っている。今回、Mg-Al 複合酸化物を担体とした担持型 Ni 触媒を上記の反応に適用し、担体の Mg, Al 混合比 (Mg/Al) が触媒活性に及ぼす影響を検討した。

2. 結果と考察 : Mg/Al=1/1 の担体を用いた触媒が MgO と Al₂O₃ 担体の触媒よりも著しく高い活性を示した。種々のキャラクタリゼーションより、Ni の分散度が活性に強く影響を及ぼしていることがわかった。Mg/Al=1/1 の担体は高比表面積かつ細孔径が大きく、Ni 前駆体の担持に有利なモルフォロジーであるために Ni の分散度が向上したと推測された。また、反応雰囲気での IR 測定より、Ni-担体界面が本反応の活性サイトであることが示唆され、これにより Ni の分散度が活性に強く影響を及ぼすと推察された。

石油化学産業におけるパーフルオロポリマー膜による非極性有機溶媒分離技術の開発

(AGC(株)*, 神戸大先端膜工学セ** , 神戸大科技イノベ***, 神戸大院工****)

○橋本和可子*, 林宏紀*, 北河享**,**, 松山秀人**,**

膜分離技術は、省エネルギー型プロセスとして注目されているが、非極性有機溶媒に対応する膜は少ない。石油化学産業では、従来の蒸留分離がエネルギー消費とCO₂排出の一因となっており、持続可能な分離技術の開発が求められている。本研究では、フッ素由来の安定性と疎水性を有するパーフルオロポリマーを用いて、有機溶媒逆浸透(OSRO)膜を作製した。膜性能はトルエン/1,3,5-トリイソプロピルベンゼン(TIPB) (95/5wt%)混合溶媒で評価し、従来の膜を超える高い分離選択比と透過性を確認した(図1)。これにより、OSROのトレードオフラインを大幅に超える性能を示し、

非極性有機溶媒分離技術としての可能性を示唆した。

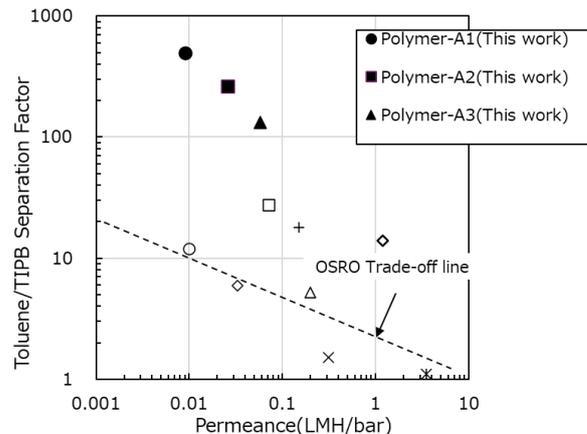


図1. トルエン/TIPB 混合液における透過性と分離選択比

CO₂ と NH₃ からの CH₄ 合成を目指した高活性 Ru 系触媒の開発(3) 酸化物担体が表面吸着種に与える影響

(名古屋大) ○^{きとう かつとし いしかわ ひろき うへだ ゆうじ やまだ ひろし ながおか かつとし}佐藤 勝俊・石川 広樹・上田 祐司・山田 博史・永岡 勝俊

燃料分野のカーボンニュートラル化はCO₂排出量の削減インパクトが大きく近年特に注目されている。CH₄は産業、民生の分野で需要が高く、日本国内ではCO₂を原料とした合成CH₄ (eメタン)の実用化が期待されている。一方、再生可能エネルギーに乏しい我が国でCH₄を合成する場合、CO₂と共にH₂の確保が課題となる。本研究では液化圧縮が容易で、H₂キャリアとして期待されているNH₃をCO₂と直接反応させたCH₄の合成反応に注目した。政府はカーボンニュートラルなグリーン/ブルーNH₃を大量に輸入することを構想しており、将来的にNH₃が水素源として大規模に利

用できる可能性は高い。これまでの研究で我々は酸化物担持 Ru 触媒の開発に取り組んでおり、酸化物担体の酸塩基特性等が活性に影響を与える可能性を報告している。これは、反応雰囲気下で生成し、メタン化反応を阻害するイソシアネート種の安定性に酸塩基強度が影響を及ぼすためと考えられる。そこで、本研究では in-situ DRIFT による分光学的な検討を触媒ごとに実施し、触媒表面の吸着種の生成、分解挙動を比較することで、担体による活性差の原因について検討した結果を報告する。

ペトロリオミクス技術を活用した石油分子情報処理アプリケーションの開発、およびカーボンニュートラル技術への活用

(一財) カーボンニュートラル燃料技術センター(JPEC)

○まつもとこうたろう松本幸太郎、あらいひるまさ新井宏昌、きむらかずひこ木村一彦、くりはらいきお栗原 功

ペトロリオミクス技術は、原油や重質油を構成する数万～数百万種類以上の分子構造と組成を分析し、その結果を基に石油精製プロセスの革新的な効率化を実現するための基盤技術である。

フーリエ変換イオンサイクロトロン共鳴質量分析 (FT-ICR MS) を核とするデータと情報処理を組み合わせることで、膨大な分子レベル情報を取り扱うことができる。同分析で得られる分子情報の数は数千から数十万に及び、その中から有用な知見を見出すためには、高度な解析により容易に解釈できる汎用レベルの情報に変換する必要

がある。しかしながら、これらの情報処理は一般的な表計算ソフトウェアでのハンドリングは不可能なことから、ビッグデータをハンドリングするための新しいアプリケーション開発・改良した。

更には、当該技術の低炭素原料のコプロセッシングへの展開について紹介する。

SOEC 共電解耐久性実験結果について

(一財) カーボンニュートラル燃料技術センター(JPEC)

○能星英喜、小西友弘、渡邊治彦

カーボンニュートラル燃料技術センターでは新エネルギー・産業技術総合開発機構の委託事業として温室効果ガス排出削減を目的とし、固体酸化物形電解セル (SOEC) を使用した水と CO₂ の共電解による合成ガス製造と FT (フィッシャー・トロプシュ) 合成を組み合わせた液体燃料一貫製造プロセスの検討を 2020 年度より開始した。

今回、電解運転におけるセルの劣化状況を確認すること、また、耐久性を向上させるための共電解条件を把握することを目的とした耐久性実験を実施した。

耐久性実験は、DSS (Daily Startup Shutdown) で実施し、共電解のベース条件は、以下の通り設定した。

原料 (水蒸気・CO ₂) 利用率	80%
原料の H ₂ /C 比	2.0
温度、圧力	800℃、常圧
電流密度	0.250、0.500、0.674A/cm ²
セル電圧の上限、閾値	1.4V

実験条件を変更し、全 7 パターン実施した。本ポスター発表ではその結果について報告する。

USY ゼオライトの酸性質・メソ孔制御と分解性能評価

(日揮触媒化成株式会社*) ○稲木 千津*, 香川 智靖*
濱田 玲*, 見立 友幸*, 迫田 尚夫*

USY ゼオライト(以下, USY)は流動接触分解触媒, 水素化分解触媒に長年使用されている。近年ではプラスチック分解や FT ワックス分解などカーボンニュートラルに向けたプロセスの触媒にも用いられており, 目的に応じた分解性能の制御が重要である。

当社は USY 製品 (ZCP®シリーズ)を有しており, $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 比や骨格内外 Al 量を変えることにより酸性質の制御が可能である。また, 近年開発した手法により USY のメソ孔分布の制御が可能になった。

本研究では, これら USY を直留軽油の接触分

解反応で評価し, USY の酸性質・メソ孔が分解性能に及ぼす影響を調査した。Brønsted 酸(B 酸)量が少ないほど転化率は低下し, 灯油選択率は向上した。同一 B 酸量では, メソ孔径制御によりゼオライト外表面積を増大させた USY の転化率・灯油収率が高く, 拡散性向上の効果と考えられる。現在, これら USY, バインダー, 活性金属を含む触媒を用いて, 減圧軽油(VGO)やモデル化合物の水素化分解反応を評価中である。

USY の酸性質・細孔分布を変えることにより分解性能の制御が可能であり, 幅広い分野への展開が期待できる。

高圧 *in situ* DRIFT 測定を用いた、FT 合成反応過程における生成物の評価

(株式会社東レリサーチセンター*) ○浅沼 佑紀*, 村岡 正義*
ト部 麻紀*, 熊沢 亮一*

近年、カーボンニュートラル社会の実現に向け、CO と H₂ から炭化水素を合成するフィッシャー・トロプシュ (FT) 反応が注目されており、触媒の高性能化や反応プロセスの研究開発が積極的に進められている。これらの反応条件やメカニズムの解明には、実プロセスを模した条件下での *in situ* 測定が重要である。本報告では触媒表面の吸着・生成物評価に有効な手法である拡散反射 FT-IR (DRIFT) を用いて温度・雰囲気・圧力制御下における Ni/SiO₂+Al₂O₃ 触媒表面の吸着・生成物の変化について評価した例を示す。H₂+CO 0.5MPa 流通下で試料を加熱

しながら測定を行った結果、200°C付近で C₂ 以上の炭化水素の生成、Ni-CO, formate 等の中間、副生成物が確認され、250°C以上ではこれらの生成量が減少し、CH₄ と CO₂ が発生するなど、反応温度による生成物の違いが認められた。さらにタンデム μ -リアクターGC/MS、STEM 測定により、200°Cでは C₂~C₁₀ の種々の炭化水素が生成し、粒径の変化やコーキング等の触媒劣化は認められないという結果が得られた。本測定により、高温・高圧下での触媒反応メカニズムの解明や、反応条件の最適化に有用な知見が得られることが示された。

データ駆動型触媒開発をアシストする触媒評価システム・データプラットフォームの開発

(北陸先端大 1*, 熊本大 2**, 北海道大 3**)

○西村俊 1*, 大山順也 2**, 高橋啓介 3***

収集・生成データの解析を基礎とした材料開発 (MI: Materials Informatics) が広く認知されるようになり、あらゆる分野で従来のアプローチでは到達できなかった未探索・未発見の材料開拓が進む期待が高まっている。ロボティクス・オートメーションの実装による“スマートな実験室”を構築し、効率的に実験データの収集・解析・探索を行う自立探索システムの開発も進められている。より多くの研究者がアクセス可能な汎用システムの実現は、技術の一般化による人材育成や技術開発の加速が期待できる。

本発表では、メタン酸化カップリング (OCM: Oxidation Coupling of Methane) 触媒の開発実践を挙げながら、固体触媒開発に用いられる固定相流通式反応装置の並列化による効率的な触媒評価システムと、ソフトウエアのインストールを必要とせずにデータの保存・解析・公開が可能なプラットフォーム (CADS: Catalyst Acquisition by Data Science) の開発について報告する。

JST-CREST (No.JPMJCR17P2)、科研費・基盤 B (No.24K01241)、JST-GAP ファンドプログラム (TeSH2025-03)の支援に謝意を表す。

メッシュ状カーボンまたは金属電極を用いる酸素からの電気化学的な過酸化水素製造

(関西大学大学院*, 関西大学**)

○石田陽介*, 木野下輝*, 福康二郎**

過酸化水素 (H_2O_2) をクリーンに生成する方法の1つとして、水や酸素 (O_2) を原料に用いる電気化学反応がある。本研究では、 O_2 の電気化学的な還元反応による H_2O_2 生成に着目した。 H_2O_2 生成のファラデー効率 (F. E.) や電流密度に及ぼすメッシュ状のカーボン (C) 電極と金属 (SUS) 電極の影響を調査した。C 電極にはカーボンペーパー (MGL190、AvCarb)、疎水性カーボンペーパー (TGP-H-060, 090, 120 [膜厚: 190, 280, 370 μm]、東レ(株))、SUS 電極にはステンレスメッシュ (SUS [250 メッシュ]) を使用した。SUS 電極は、C 電極よりも高い電流密度を示したが、

H_2O_2 の生成・蓄積は、ほとんど確認されなかった。一方、疎水性 C 電極は、最も高い性能を示し、10 C で約 1.6 mM の H_2O_2 が蓄積され、F. E. > 99% に達した。これは、電極表面の疎水化によって親水性の H_2O_2 と電極表面との接触が物理的に抑えられ、 H_2O_2 の分解反応が抑制されたことが示唆される。疎水性 C 電極上での H_2O_2 生成・蓄積に及ぼす膜厚の影響も調査した。いずれの場合も、F. E. > 99% での H_2O_2 生成が確認され、電流密度は、膜厚低下に伴い向上することがわかった。以上より、低膜厚かつ疎水性のメッシュ状 C 電極が高効率な H_2O_2 生成に有効であることがわかった。

金属担体相互作用の制御による 4-クロロニトロベンゼンの高選択的水素化

(早稲田大*, 千代田化工建設**) ○ 乾 敦寛*, 秋山 広夢*, 七種 紘規*,
三瓶 大志*, 比護 拓馬*, 前田 恭吾*, 大野 彰太*, 渡邊 利行*, 角 茂*, 中井 浩巳*, 関根 泰*

担持金属触媒は多様な反応に利用されており、活性・寿命とともに重要な指標である選択性を向上させるための取り組みが盛んに行われてきた。従来、合金化やプロモーター添加による金属の電子状態の制御が選択性向上に有効であることが報告されているが、これらの手法は触媒調製の容易さ、耐久性に課題がある^{1,2)}。そこで、本研究では調製が容易であり、高い耐久性が期待される、強い金属-担体相互作用 (SMSI) に着目し、Pd/TiO₂ 触媒の電子状態制御を活用した、4-クロロニトロベンゼンの選択的水素化について検討した³⁾。

還元温度を変化させた場合の CO パルス、DRIFTS、XPS 測定より、493 K 以上の還元処理で

SMSI が発現し、Pd 表面の部分的被覆と、Pd への電荷移動が生じることが明らかになった。活性試験からは 493 K 以上での還元により 4-クロロアニリンの選択性が向上することが確認された。この要因を DFT 計算により検討すると、SMSI の発現に伴い Pd が負電荷を帯び、Cl 基を反発することが明らかになった。このことから、Pd 上での Cl 基解離が抑制され、4-クロロアニリンの選択性が向上したことが示唆された⁴⁾。

- 1) T. Conant *et al.*, *J. Catal.*, **257**, 64–70 (2008).
- 2) J. Xie *et al.*, *ACS Catal.*, **6**, 4017–4024 (2016).
- 3) P. Chen *et al.*, *ACS Catal.*, **7**, 1197–1206 (2017).
- 4) H. Akiyama *et al.*, *Appl. Catal. A: Gen.*, in press.

Rh 表面および Rh/ZrO₂ 界面における酢酸合成経路の理論的検討

(早稲田大学) ○^{みずがき たかのり}水垣 孝紀, ^{ちしま けんしん}千島 健伸, ^{ますだ たくみ}増田 拓海,
^{さんべい ひろし}三瓶 大志, ^{さへぐさ こうき}七種 紘規, ^{はつとり さくや}服部 朔弥, ^{せきね やすし}関根 泰

近年、重要な化学品である酢酸を不均一触媒によって合成ガスから直接合成する需要が高まっている。また、CO の接触水素化による酢酸合成において、Rh/ZrO₂ 界面の重要性が示唆されている。

本研究では Rh 表面および Rh/ZrO₂ 界面における酢酸合成経路を Matlantis を用いて計算化学的に検討した。その際、合成経路の効率的な探索のため、触媒表面に吸着する酢酸分子中の結合が逐次的に切断される過程から逆算し、酢酸の結合生成過程を検討した。

その結果、Rh 表面では CHCO(H) 経由(律速段階

活性化障壁: 1.41 eV)、Rh/ZrO₂ 界面では CH₃CO 経由(0.95 eV)の経路が速度論的に有利であることが分かった。Rh/ZrO₂ 界面では Rh-CO 構造の O 原子と ZrO₂ の酸素欠陥との相互作用が、律速段階の活性化障壁の減少に寄与している可能性が示唆された。

本研究は、金属/酸化物界面における酸素欠陥が活性化障壁の観点から C₂ 含酸素化合物の合成を促進する可能性を示唆しており、C₂ 含酸素化合物の合成において界面の寄与を考慮する重要性を示している。