

実験データを用いない触媒の性能予測

1. メタン転換固体触媒の性能を理論計算で予測

物質・材料研究機構は、石川敦之主任研究員が、固体触媒の性能を理論的に評価するシミュレーション手法を開発したと発表した。

触媒反応において、原料消費量や目的化合物の生成量を知るためには、反応速度論的シミュレーションが有効で、その実施には多くの素反応を直接的に考慮する手法が広く用いられてきた。

同研究では、対象とする素反応すべてに対し第一原理計算を実行し、反応速度論的情報を算出し、それらの実験結果を用いずに、反応速度論的シミュレーションを実行する手法及びプログラムを開発した。必要な計算(第一原理計算、データ収集、速度論方程式のコーディング)をパイソンで自動化させ、更に、短時間で計算を完了させるために、第一原理計算の並列処理を実装した。

対象として、天然ガスの化学的有効利用の一例であるメタンの酸化カップリング反応(OCM)を取り上げた。触媒は酸化マグネシウムを用い、素反応は109種の気相反応と61種の表面反応を含む計170種を対象とし、計算を実行した。

最初に、メタン転化率とC2化合物選択率に最も寄与する素反応を確認したところ、触媒表面上の酸素原子によるメタンからの水素原子引き抜きであった。

反応シミュレーションでは、速度論的実験結果を用いることなく、メタンの転化率とC2化合物の選択率が得られた。反応温度(600–900°C)と原料ガス組成($P(\text{CH}_4)/P(\text{O}_2)$)の上記転化率と選択率の相関は、実験結果と一致した。

また、反応時間と原料及び生成物組成分布の相関をみたところ、接触時間を短くした方が、C2選択率が高くなる結果を示し、このことも、同様に実験での提言と一致した。

これらの結果から、実験を行うことなく酸化マグネシウム触媒の性能予測ができることを示した。

2. 今後の展開

同開発手法によるシミュレーション結果を解析すると、反応進行に重要な中間体等を特定することが可能で、特定の間mediate生成を抑制する触媒や反応条件の提案等ができると期待される。

同手法は汎用性が高く、メタン転換触媒だけではなく、自動車排ガス浄化、二酸化炭素還元、水素生成等幅広い触媒系への適用が可能であるため、触媒探索の新技术として、脱炭素社会の実現を加速するものと期待される。(化学工業日報記事 2021/3/9、科学技術振興機構報 第1488号を基に作成)

参考文献

1) ACS Catal., 2021, 11, 2691-2700

<https://doi.org/10.1021/acscatal.0c04104>

文責 広栄化学 木村 学