

赤い枠をクリックすると見本のページにジャンプします

触媒技術の動向と展望 2022

— 目次 —

第一編 触媒研究の動向と展望

1. 時評	神奈川大学 上田 渉	3
2. 会長寄稿 アフターコロナの触媒学会	2021 年度触媒学会会長・北海道大学 朝倉清高	5
3. 未来展望 エネルギー変換型光触媒・光電気化学の現状と課題 —太陽エネルギーの大規模利用に向けて—	信州大学・東京大学 堂免一成	7
4. 分野別触媒研究の現状と将来動向		
[4-1] 触媒材料		
(a) 金属触媒 多元素合金を基盤とした触媒材料の開発と設計指針	北海道大学 古川森也	21
(b) 酸化物触媒 金属含有ゼオライトを用いたメタン転換	東京工業大学 横井俊之	31
(c) 錯体・有機合成触媒 ギ酸分解による高压水素製造	産業技術総合研究所 川波 肇・姫田雄一郎	41
(d) その他 アニオンサイトが機能する固体触媒によるアンモニア合成	東京工業大学 北野政明・細野秀雄	52
[4-2] 触媒反応		
(a) 高分子分野 ポリエステル加水分解酵素	群馬大学 粕谷健一・鈴木美和・ P. Souleenthone・橘 熊野	62
(b) 資源・エネルギー変換分野 バイオマス多糖の選択的触媒変換	高知大学 恩田歩武	75
(c) 環境触媒分野 高温排ガス処理を施した貴金属触媒の反応解析	名古屋工業大学 羽田政明	85

(d) 光触媒分野 光エネルギーを用いたメタン転化反応のための触媒開発	京都大学	吉田寿雄・山本旭	94
(e) 電極触媒分野 TiO_2 上での電気化学反応を利用した有機酸からの液体エネルギーキャリア および機能性物質の合成	九州大学	山内美穂	103
[4-3] 触媒解析			
(a) キャラクタリゼーション分野 <i>in-situ</i> XAFSによる高濃度 H ₂ S存在下での触媒反応解析	九州大学 日本製鉄(株)	永長久寛・杉山武晴 平 健治	113
(b) コンピュータ利用分野 反応経路自動探索法の固体触媒への応用に向けて	北海道大学	前田 理	122
[4-4] 先端技術			
(a) マイクロ波を利用する触媒化学研究開発ナウ	東京工業大学・マイクロ波化学※(株)	和田雄二※・小澤 聰	130
(b) 機能性化学品の連続精密生産に向けた反応・触媒開発	産業技術総合研究所	市塚知宏・増田光一郎・甲村長利	148
5. 2021年の科学技術政策動向および触媒関連国家プロジェクトの状況	産業技術総合研究所	花岡隆昌	160

第二編 工業触媒の技術と動向

1. 国内の触媒工業の概況について	(一社)触媒工業協会	伊藤宏行	173
2. エンジニアリング会社から見た最近のプラントビジネスとプロセスの動向	日揮グローバル(株)	沖田 充司	183
3. 触媒が関わる主要プロジェクトの動向	年鑑出版委員会		190
4. 工業触媒注目技術			
[4-1] CO ₂ リフォーミング技術 (CT-CO ₂ AR TM)	千代田化工建設(株)	角 茂・神田剛紀	198
[4-2] 担持白金ナノ粒子触媒の基礎研究からフードロス削減のための触媒技術への展開	北海道大学	福岡 淳	210
5. 2021年の海外の触媒技術動向	早稲田大学 アイシーラボ	関根 泰 室井高城	220
6. 2021年の国内触媒関連技術動向	ユミコア日本触媒(株)	堀 正雄	254

第三編 国際会議の記録

1. 国際会議の記録	297
------------	-----

第四編 触媒学会活動記録

1. 2021年度表彰受賞者および業績一覧	301
2. 2021年度触媒討論会の記録	302
3. 第127回触媒討論会注目発表	
[1] 表面担持酸化コバルトナノ粒子の電子ポテンシャルの見積もり方法の確立 東京工業大学 岡崎めぐみ・石谷 治・前田和彦 成蹊大学 山崎康臣	305
[2] Rh薄膜触媒の耐酸化性およびNO還元特性に及ぼす表面酸素種の影響 熊本大学 芳田嘉志・久保崎大貴・三角仁志 ・佐藤徹哉・大山順也・町田正人	306
4. 触媒 Vol.63 (2021) 総索引	308
5. 部会・研究会アニュアルリポート	
[1] 参照触媒部会	313
[2] ファインケミカルズ合成触媒研究会	314
[3] 有機金属研究会	316
[4] コンピュータの利用研究会	318
[5] 生体関連触媒研究会	320
[6] 界面分子変換研究会	322
[7] 高難度選択酸化反応研究会	324
[8] 水素の製造と利用のための触媒技術研究会	325
[9] 天然ガス転換触媒研究会	327
[10] 規則性多孔体研究会	328
[11] ナノ構造触媒研究会	330
[12] 燃料電池関連触媒研究会	331
[13] 光触媒研究会	333
[14] 環境触媒研究会	334
[15] 工業触媒研究会	335
[16] バイオマス変換触媒研究会	337
[17] 固体酸塩基点の作用と設計研究会	339
[18] 元素戦略研究会	340
[19] 二酸化炭素変換触媒研究会	341
6. 各支部活動記録	
[1] 北海道支部活動記録	343
[2] 東日本支部活動記録	345
[3] 西日本支部活動記録	347
7. 2021年触媒学会活動カレンダー	349

第五編 工業触媒リスト

351

執筆者索引

405

編集後記

407

目次に戻る

エネルギー変換型光触媒・光電気化学の現状と課題 —太陽エネルギーの大規模利用に向けて—

信州大学先鋭材料研究所/東京大学特別教授室 堂免一成

1. はじめに

私が光触媒の研究を始めたのは 40 年以上前になる。当時、触媒学会で光触媒の研究を行っていたのは 2, 3 研究室程度であった。もちろん、世界的には固体光触媒の研究は古くから行われていた。二酸化チタンや酸化亜鉛に光が当たると何らかの化学反応を引き起こすというようなことはずっと古く（1900 年頃）から知られており、それを触媒反応として利用しようという研究、例えばアルカンの選択酸化反応等に応用しようという研究は私の知る限り 1950 年から 1960 年代には始まっていた。ちなみに、「光触媒」(Photocatalysis)という単語は 1910 年には既に使われている¹⁾。一方、半導体光電気化学の世界では 1960 年代に、Gerischer や Marcus らによりその原理がほぼ確立し²⁾、1970 年頃二酸化チタン光アノードを用いた水分解、いわゆるホンダ・フジシマ効果が報告され光電気化学によるエネルギー変換が注目を集めていた。私が東京大学理学部化学科の田丸研究室の博士課程で研究を始めた 1979 年当時は、粉末（微粒子）の固体触媒でも水分解ができるのではないかということで世界的に研究が行われていた。1980 年に粉末の光触媒で水を水素と酸素に化学量論比で分解したという報告が 3 件なされている³⁻⁵⁾。面白いことにこれらは全て水蒸気の分解である。その後、光触媒および光電気化学の分野でしばらく水の光分解の研究が行われていたが、1985 年頃にはほぼ下火になっていた。理由は、太陽光を利用できるような可視光応答型の水分解材料が見つからなかったからである。特に米国では光電気化学的水分解の研究者はいなくなっていた。一方、日本の触媒学会では光触媒の研究を行うグループは次第に増えていった。その理由は、研究対象が水分解だけでなくアルカンの酸化やその他の種々の反応、さらに、光励起状態や中間体の研究など多岐にわたっていたことと、触媒研究者は様々な種類の光触媒材料を検討していたからであろう。この傾向は現在もある程度引き継がれていて、欧米の大部分の研究者は光電気化学がバックグラウンドであるのに対して、日本の研究者は現状大部分が触媒化学をバックグラウンドとしている。中国や韓国の研究者は両者が混在しているようである。2000 年頃までは水分解光触媒の研究者は日本でもかなり少なくなっていたが研究が途絶えたわけではなく、色々な紫外光応答型光触媒を検討し光エネルギー変換型光触媒の備えるべき条件についての知見を蓄積していった。そのような中で、2001 年に産総研の荒川グループに居た佐山・阿部らが 2 種類の光触媒を用いて可視光で水を分解することに成功した⁶⁾。現在、2 段階水分解あるいは Z-スキーム型水分解といわれている方法である。この時用いられた可視光応答型光触媒は、東京理科大の工藤らによって開発されたものである。さらに、2005 年から 2006 年にかけて、堂免らのグループによって单一の光触媒で水を可視光分解できる光触媒、GaN:ZnO 固溶体が報告され^{7,8)}、太陽エネルギー変換型光触媒の研究が幕を開けた。この頃から欧米でも環境問題・エネルギー問題が再び脚光を浴び始め、特に水分解をはじめとする光電気化学的エネルギー変換に

目次に戻る

[4-1-a] 触媒材料 金属触媒

多元素合金を基盤とした触媒材料の開発と設計指針

北海道大学触媒科学研究所 古川森也

1. はじめに

二元系合金は触媒材料として古くから様々な反応系において用いられ、学術的にも実用面でも幅広く研究されてきた。一方で、様々な検討が行われてきた中で、2種類の金属の組み合わせで達成できることには限界があることも浮き彫りになってきた¹⁾。この様な背景の下、三元系合金やそれ以上の多元系合金を触媒として用いる研究が近年盛んになっており、二元系合金を大きく上回る高性能触媒の開発や触媒設計指針と学理の拡充が進んできている²⁾。本稿では、その最初のステップとして二元系から三元系に拡張する際の設計指針や材料・元素選定について説明し、NO_x還元やアルカン脱水素の系を例に多元化により触媒性能や機能がどの程度向上するのかについて解説する。

2. 触媒化学的見地から見た合金材料の構造学的分類

一口に合金と言っても、様々な形態のものがある。原子配列の観点から見れば二元系の場合では2種類の原子がランダムに固溶した固溶体合金と、画一的な原子配列と結晶構造を有する金属間化合物に大別される（厳密にはこれらの中間のようなものも存在するが、ここでは簡単のため省略する）。ある合金がこれらのどちらに属するかは、構成金属の特性に強く依存することが知られている。一般に、構成金属元素が周期表で互いに隣接または非常に接近している場合（つまり、電子的特性や原子半径といった性質が類似している場合）、結果として生じる合金は固溶体合金になることが多い。逆に、周期表で離れている金属元素同士の組み合わせの場合は、金属間化合物を形成することが多い（全く混ざらない場合もある）^{1,2)}。触媒として活性がある金属元素（第一金属）は、主に8~11族の後周期遷移金属であるため、第二金属も後周期遷移金属である場合は固溶体になることが多く、逆に第二金属が前周期遷移金属や典型金属の場合に金属間化合物を形成することが多い²⁾。前周期遷移金属はイオン化傾向が極めて高いため、0価の金属状態は非常に不安定であり、合金化したとしても極微量の水や酸素によって酸化されてしまうため（ものによってはppbレベルで）³⁾、触媒として使用する場合には技術的に困難を伴う。そのため、触媒を指向した金属間化合物としては後周期遷移金属—典型金属の組み合わせが用いられる場合が多い^{1,2)}。

3. 摠二元系合金を利用した触媒の多機能化

3.1 摊二元系合金の構造・機能的特徴

二元系の金属間化合物 A_mB_nに関して、AまたはBの一部をそれぞれと性質の近い第三の元素（A'またはB'）で部分的に置換できる場合がある。このとき、元の結晶構造は変化せず(A_{1-x}A'_x)_mB_nまたはA_m(B_{1-y}B'_y)_nで表される摠二元系合金が形成される²⁾。摠

目次に戻る

[4-3-b] 触媒解析 コンピュータ利用分野

反応経路自動探索法の固体触媒への応用に向けて

北海道大学化学反応創成研究拠点 前田 理

1. はじめに

第一原理計算に基づく反応機構解析は近年盛んに行われている。これは、第一原理計算によって様々な素反応過程の活性化障壁を求めることで、反応性や選択性の起源を明らかにすることができるためである。その知見を更なる反応設計に用いる流れは、触媒開発において一般的になりつつある。

第一原理計算を用いる反応機構解析にはいくつかの問題が存在する。その一つは、近似を含む第一原理計算の精度の問題である。例えば、コーン・シャム方程式に基づく密度汎関数計算では、汎関数や基底関数の選択によって障壁の予測値が変化する。変化の幅は系の電子状態の複雑さに依存するが、汎関数や基底関数の選択が適切であれば、定性的には妥当な予測値が得られることも多い。この問題は非常に重要ではあるが、その議論は本稿の範囲外である。

もう一つは、計算結果が初期構造などの入力に依存する、という問題である。起こり得る素反応過程が複数ある場合には、それらすべてを見逃しなく列挙し、一つ一つ検討しなければならない。もし重要な素反応過程を見落せば、誤った結論を導いてしまうことすらあり得る。筆者らは、この問題の解決へ向けて、反応経路自動探索法の開発に取り組んできた^{1,2)}。

反応経路自動探索では、ある平衡（EQ: Equilibrium）構造から別の EQ 構造を見つける構造発見アルゴリズムが必要である。そのような構造発見アルゴリズムを、得られた EQ 構造に次々に適用していくことにより、様々な EQ 構造とそれらの間の反応経路を介したつながりが明らかになる。このとき、構造発見アルゴリズムは、様々な種類の化学反応に統一的に適用できる必要がある。また、一回の探索において数千回もしくはそれ以上の回数繰り返し適用されるため、シンプルである必要もある。また、EQ 構造の数は系に含まれる原子数に依存して指数関数的に増加するため³⁾、構造発見アルゴリズムを適用する対象を適切に絞り込む探索制御アルゴリズムも必要である。筆者らは、構造発見アルゴリズムとして人工力誘起反応（AFIR）法を⁴⁾、探索制御アルゴリズムとして速度論ナビゲーションを⁵⁾、それぞれ開発した。本稿では、これらの手法、および、最近の固相反応への応用について解説する。

2. 理論的背景

2.1 人工力誘起反応（AFIR）法

AFIR 法の基本アイデアは非常に単純である。すなわち、分子や錯体の部分構造同士を仮想的な力で押し付け合ったり引き離したりすることを繰り返す。図 1 (A) には、仮想的な力を部分構造 A と部分構造 B の間に印加する AFIR 関数 F が示されている。

目次に戻る

[4-4-a] 先端技術

マイクロ波を利用する触媒化学研究開発ナウ

東京工業大学・マイクロ波化学※（株） 和田雄二※・小澤 聰

1. はじめに

長期にわたる研究とその結果として多くの知見が蓄積されている触媒化学は、反応機構の解明とそれを基とした触媒設計化学を基とする新規触媒創成研究において成熟した段階に達している。この成熟期に至り、触媒構造設計だけでは実現困難な化学反応系に挑戦するために、電磁波、放射線、プラズマなど、いわゆる外場を導入する試みが注目を浴びている。これは、CREST やさきがけなどの大型研究支援プログラムが、「革新的反応技術」「反応制御」といったテーマをもとに設定され多額の研究資金が投入されていることや「Nontraditional Methods」のキーワードをタイトルとする書籍の発行からも伺い知ることができる。外場のひとつであるマイクロ波を利用する加熱技術開発は、電子レンジ方式の加熱技術が装置・試作品として形づくられた 1950 年代に端を発するが、実際に有機合成反応に対してマイクロ波が利用され、その特殊効果が報告された 1986 年をマイクロ波化学の事始めと考えることが適切である^{1,2)}。図 1 のマイクロ波技術変遷図をご覧いただきたい。

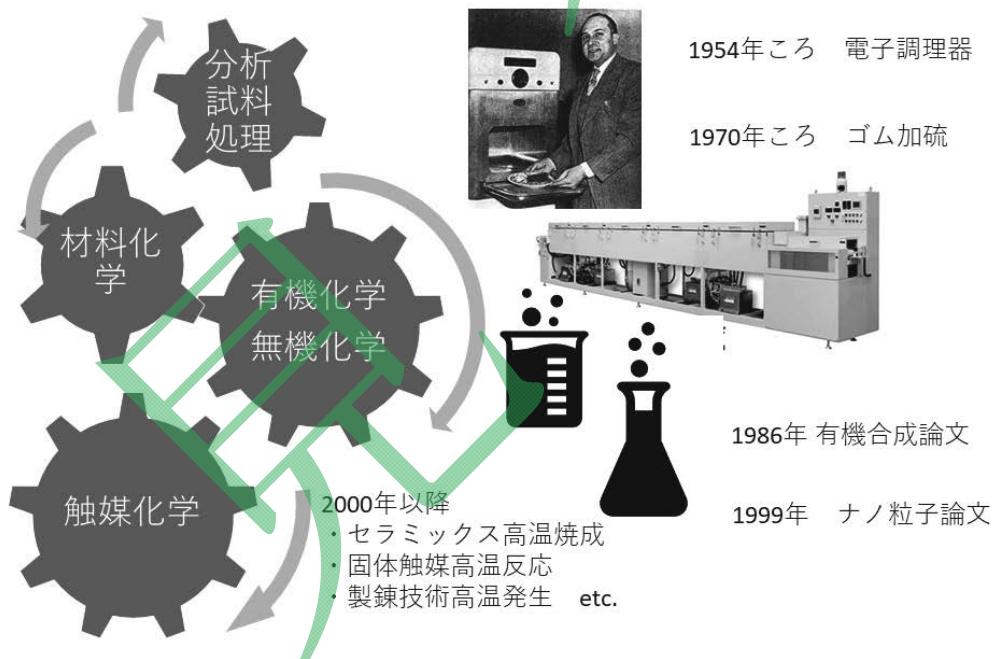


図 1. マイクロ波加熱とマイクロ波化学の発展の系譜

