

# 触媒技術の動向と展望 2023

## — 目次 —

### 第一編 触媒研究の動向と展望

1. 時評				赤字の頁の 見本があります
新しい時代の触媒研究への期待	信州大学・東京大学	堂免一成	3	
2. 会長寄稿				
意見交換の大切さ	2022年度触媒学会会長・東京工業大学	山中一郎	5	
3. 未来展望				
世界展開可能な革新的触媒プロセスの考察	三菱ケミカル（株）	瀬戸山亨	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				
高効率な分子間結合形成に有効な金ナノ粒子-他元素協働触媒作用	東京都立大学	三浦大樹・宍戸哲也	27	
(b) 酸化物触媒				
酸化物担体を用いたアンモニア合成触媒の開発	名古屋大学	永岡勝俊・佐藤勝俊	37	
(c) 錯体・有機合成触媒				
固定化による金属錯体の触媒性能向上	横浜国立大学	本倉 健	46	
(d) その他				
グラフェン系触媒（有機合成）	岡山大学	仁科勇太	59	
[4-2] 触媒反応				
(a) 高分子分野				
二酸化炭素を原料としたポリマー合成	大阪公立大学	田村正純	68	
(b) 資源・エネルギー変換分野				
常温作動のメタン化技術による CO <sub>2</sub> の資源化と合成ガスからの炭素固体化	静岡大学	福原長寿	80	
(c) 環境触媒分野				
タンデム型貴金属フリー三元触媒	名古屋大学	植田格弥・薩摩 篤	90	
(d) 光触媒分野				

層状酸化物を基盤とした色素増感型光触媒による水素製造	東京工業大学	西岡駿太・前田和彦	100
(e) 電極触媒分野			
気相中の水蒸気からの水素製造のための光電気化学システム	東京都立大学	天野史章	110
[4-3] 触媒解析			
(a) コンピュータ利用分野			
触媒インフォマティクスの創成のための理論・データ科学研究	北海道大学	鳥屋尾隆・清水研一	120
	産業技術総合研究所	日沼洋陽	
	福岡工業大学	蒲池高志	
[4-4] 先端技術			
液-固相分離による高速 Direct Air Capture 技術開発	東京都立大学	山添誠司	130
5. 2022 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	140
<b>第二編 工業触媒の技術と動向</b>			
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	155
2. 触媒が関わる主要プロジェクトの動向		年鑑出版委員会	165
3. 工業触媒注目技術			
[3-1] シリーズハイブリッド乗用車における三元触媒浄化反応モデルの構築	エヌ・イー ケムキャット (株)	岡島利典	172
[3-2] エチレン-スチレン-ブタジエンの共重合と触媒設計	(株) ブリヂストン	会田昭二郎	182
[3-3] 機械学習による触媒設計技術の開発	日揮触媒化成 (株)	中野宏二	191
4. 2022 年の海外の触媒技術動向	早稲田大学	関根 泰	200
	アイシーラボ	室井高城	
5. 2022 年の国内の触媒関連技術動向	三井化学 (株)	市川真一郎	230
<b>第三編 国際会議の記録</b>			
1. 国際会議の記録			275
<b>第四編 触媒学会活動記録</b>			
1. 2022 年度表彰受賞者および業績一覧			279

2. 2021 年度触媒学会技術進歩賞受賞技術			
水素サプライチェーン構築に向けた脱水素触媒の開発と国際事業による実証	千代田化工建設 (株)	今川健一	280
3. 2022 年度触媒討論会の記録			284
4. 第 129 回触媒討論会注目発表			
[1] 水素スピルオーバー現象を利用した酸化チタンへの欠陥導入と光触媒活性に与える影響	大阪大学	山崎友香理・森 浩亮 ・桑原泰隆・山下弘巳	287
	京都工芸繊維大学	小林久芳	
[2] 時分割 DXAS による光熱変換型ドライリフォーミング中の Rh ナノ粒子触媒の局所温度測定	京都大学	高見大地・山本 旭 ・吉田寿雄	289
	東京都立大学	宍戸哲也	
5. 触媒 Vol. 64 (2022) 総索引			290
6. 研究会アニュアルレポート			
[1] ファインケミカルズ合成触媒研究会			295
[2] 有機金属研究会			297
[3] コンピュータの利用研究会			299
[4] 生体関連触媒研究会			301
[5] 界面分子変換研究会			303
[6] 高難度選択酸化反応研究会			305
[7] 水素の製造と利用のための触媒技術研究会			306
[8] 天然ガス転換触媒研究会			308
[9] 規則性多孔体研究会			309
[10] ナノ構造触媒研究会			311
[11] 燃料電池関連触媒研究会			312
[12] 光触媒研究会			314
[13] 環境触媒研究会			315
[14] 工業触媒研究会			316
[15] バイオマス変換触媒研究会			318
[16] 固体酸塩基点の作用と設計研究会			320
[17] 二酸化炭素変換触媒研究会			321
7. 各支部活動記録			
[1] 北海道支部活動記録			323
[2] 東日本支部活動記録			325
[3] 西日本支部活動記録			327
8. 2022 年触媒学会活動カレンダー			329

## 第五編 大学・高専・国公立研究機関における研究活動（都道府県別）

旭川工業高等専門学校	333	日本大学	391
北海道大学	333	早稲田大学	391
帯広畜産大学	339	芝浦工業大学	393
室蘭工業大学	339	成蹊大学	393
弘前大学	340	神奈川大学	394
八戸工業高等専門学校	342	慶應義塾大学	395
秋田大学	342	東海大学	397
岩手大学	343	東京工業大学（長津田）	398
石巻専修大学	344	防衛大学校	402
産業技術総合研究所（東北）	345	横浜国立大学	403
東北大学	345	信州大学	405
産業技術総合研究所（福島）	351	山梨大学	410
宇都宮大学	351	静岡大学	410
群馬大学	353	沼津工業高等専門学校	412
群馬工業高等専門学校	354	富山県立大学	412
茨城工業高等専門学校	354	富山大学	413
筑波大学	355	金沢大学	414
物質・材料研究機構	356	北陸先端科学技術大学院大学	416
産業技術総合研究所（つくば）	357	岐阜大学	417
千葉大学	362	岐阜薬科大学	418
埼玉工業大学	365	産業技術総合研究所（中部）	419
埼玉大学	365	豊田工業大学	420
理化学研究所	366	豊橋技術科学大学	420
東洋大学	367	名古屋工業大学	421
日本工業大学	367	名古屋市立大学	422
工学院大学	368	名古屋大学	423
国際基督教大学	369	分子科学研究所	428
東京都立大学	369	三重大学	428
上智大学	373	立命館大学	429
中央大学	374	京都大学	429
帝京科学大学	374	京都工芸繊維大学	435
電気通信大学	375	京都府立大学	436
東京工科大学	375	同志社大学	436
東京工業大学（大岡山）	376	地球環境産業技術研究機構	438
東京農業大学	380	大阪大学	438
東京大学	380	大阪工業大学	444
東京都市大学	387	大阪公立大学	445
東京農工大学	388	関西大学	449
東京理科大学	390	近畿大学	451

産業技術総合研究所（関西）	454	山口東京理科大学	466
奈良女子大学	454	香川大学	466
奈良先端科学技術大学院大学	455	徳島大学	467
神戸大学	456	愛媛大学	469
神戸薬科大学	457	高知工科大学	470
兵庫県立大学	457	高知工業高等専門学校	471
神戸市立工業高等専門学校	458	高知大学	471
甲南大学	458	北九州市立大学	472
鳥取大学	459	九州工業大学	473
岡山大学	460	九州大学	474
海上保安大学校	461	福岡工業大学	477
広島大学	462	福岡大学	478
県立広島大学	464	長崎大学	479
産業技術総合研究所（中国）	464	熊本大学	480
島根大学	465	鹿児島大学	482
山口大学	465	琉球大学	482

## 執筆者氏名索引

499

## 編集後記

500

# 世界展開可能な革新的触媒プロセスの考察

三菱ケミカル(株) 瀬戸山 亨

## 1. はじめに

以下の寄稿文は、化学企業の研究者という立場から、企業の研究開発の実態と限界、アカデミアの研究に対する個人的な思い、国の科学技術戦略への期待・疑問を合わせて、技術の詳細にはなるべく踏み込まずに、技術の概要について自分なりの考えを分かり易く開陳しようとしたものである。それぞれの研究開発課題について擁護・推進してきた研究者からは異論・反論が寄せられて当然ではないかと思う。必要とあれば幾らでも議論させていただきたいと思うので遠慮なくご連絡ください。

### <以下解説的 Review>

21世紀に入り、人類の産業活動における化石資源の燃焼によるCO<sub>2</sub>排出を主要原因の一つとする温暖化、地球規模での気候変動によるいろいろな災害、経済への深刻な影響が顕在化した脅威として認識されるようになり、世紀末の破局到来を回避する為に、世紀半ばまでにCO<sub>2</sub>排出を実質ゼロにする Net Zero Emission Scenario (NZE)、即ちカーボンニュートラルの実現の必要性が提唱されている。図1に現状と今後の削減レベルと温暖化抑制効果のIPCCによる simulation 結果を示す<sup>1)</sup>。

これを目的とした様々な政策を実現する為には多くの技術革新が必要になることは言うまでもない。再生可能電力としてのPV、風力発電、Li電池に代表される二次電池、それを用いたEVの導入などエネルギー自身のカーボンニュートラル化は着実に進展している。

これに対し、炭化水素が製品の大半である化学産業の場合、再生可能電力の寄与は限定的であり炭素自身の質を変えることが必須である。即ち化学製品のグリーン化である。LCA的な観点からは、よりCO<sub>2</sub>排出の少ない天然ガス、水分解水素、バイオマス等を用いた様々な触媒プロセスの開発が進められているが、原料調達工程、製造工程、消費・燃焼を含めた全工程を通じて本当にCO<sub>2</sub>削減効果があるのかを可能な限り正確に見積もる必要がある。

また欧米、日本等の先進国でのグリーン化が進めば、化石資源の消費量が減退し、結果的に化石資源の国際取引価格が低下し、経済力の無い発展途上国は安価な化石資源の利用に走るというグリーンパラドックスは避けるべきシナリオ<sup>2)</sup>であり、グリーン化学品は従来の化石資源と同程度の製造コストであるべきだろう。

本稿では、こうしたCO<sub>2</sub>排出の観点、製造コストの観点から求められる触媒プロセ

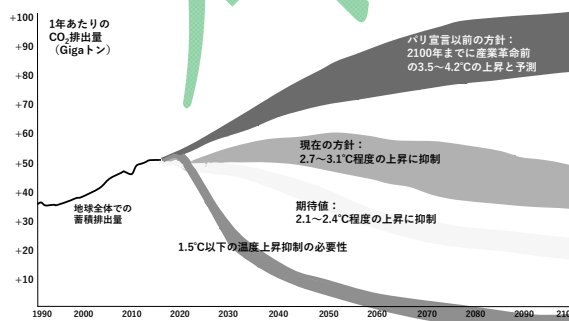


図1. 温暖化抑制の為のCO<sub>2</sub>削減のシナリオ

## [4-1-b] 触媒材料 酸化物触媒

## 酸化物担体を用いたアンモニア合成触媒の開発

名古屋大学大学院工学研究科 永岡勝俊・佐藤勝俊

## 1. はじめに

アンモニアは世界で年間約 2 億トンが生産される極めて重要な基礎化学品である。生産量のうち約 8 割は硫安などの肥料の製造に利用されており、現在の工業的アンモニア合成プロセスの主流である Haber-Bosch 法 (HB 法) が「空気からパンを作る方法」とも呼ばれる所以である。一方で、アンモニアは水素貯蔵密度が高く、比較的容易に液化するという特徴を持つことから、再生可能エネルギーによって製造される水素 (グリーン水素) や、CO<sub>2</sub> 回収プロセスとの組み合わせで化石資源から製造される水素 (ブルー水素) を使用した、エネルギー/水素の貯蔵、輸送媒体 (エネルギーキャリア) として期待されている<sup>1,2)</sup>。

アンモニアの利用方法としては、消費地への運搬後に触媒プロセスによって分解して水素を取り出し、これを各種の燃料電池や水素タービン等で利用することが考えられる。また、アンモニアは直接燃焼させることも可能である。特に日本では直接燃焼させる“燃料アンモニア”としての利用に注目が集まっており、石炭火力発電用のボイラーを改造して混焼、あるいは専焼することで、国内の主要な CO<sub>2</sub> 発生源である火力発電からの CO<sub>2</sub> 排出量を大きく削減することが期待されている。一方で、火力発電での利用を想定するとその需要も莫大な量になる。例えば、国内主要電力会社の全石炭火力発電所でアンモニアを 20% の割合で混焼利用すると仮定した場合、年間の必要量は約 2,000 万トンと試算されており、これは世界の年間アンモニア生産量の約 1 割に相当する<sup>3)</sup>。このため、アンモニアの燃料としての普及、拡大を目指すには何らかの形でアンモニア製造設備の新設が避けられない。当面は HB 法と CO<sub>2</sub> の分離回収プロセスを組み合わせることで大気中への CO<sub>2</sub> 排出を抑えつつアンモニアの増産を目指すことが現実的であるが、将来的には再生可能エネルギーによる水の電解や光触媒による水分解によって製造した水素を用いることで、CO<sub>2</sub> を排出しないプロセスへと移行することが望ましい。この様なプロセスでは HB 法のような高温、高圧のプロセスを構築することは現実的ではなく、全体の効率化をはかるために温和な条件 (<400°C, <10 MPa) での運転を想定する必要がある。したがって、HB 法の様な過酷な条件 (>450°C, >20 MPa) に最適化された現行の触媒をそのまま利用することは難しく、温和な条件下でアンモニアを合成可能な触媒が必要となる<sup>4)</sup>。

## 2. アンモニア合成触媒

不均一系のアンモニア合成触媒は大別してバルク型、担持型の 2 種類が挙げられる。バルク型触媒として最も典型的なのは HB 法に使用されている二重促進鉄触媒であり、Fe の凝集体 (バルク) に化学的促進剤として K 等のアルカリ、構造的促進剤として Al

[4-2-c] 触媒反応 環境触媒分野

## タンデム型貴金属フリー三元触媒

名古屋大学工学研究科 植田格弥・薩摩 篤

### 1. はじめに

自動車三元触媒(Three-Way Catalyst: TWC)は排気ガスに含まれる窒素酸化物( $\text{NO}_x$ :  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$ ), 未燃焼炭化水素(HC), 一酸化炭素(CO)を同時に浄化してクリーンな排気を実現している. 触媒の活性種には白金族(Platinum Group Metal: PGM) とよばれる, 白金(Pt), ロジウム(Rh), パラジウム(Pd)が用いられる<sup>1-4)</sup>. これらの貴金属は元素利用効率を上げるためナノレベルの粒子に分散され, 熱的に安定なアルミナベースの担体に担持される. また, 排気ガスはアクセルのオンオフ等によって, 酸化ガス( $\text{O}_2$ ,  $\text{NO}_x$ )と還元ガス(CO, HC)の比率が変動するため, 活性成分近傍の酸化状態を一定に保つため酸素吸蔵放出能を持つ  $\text{CeO}_2\text{-ZrO}_2$  が助触媒として添加される. メーカーや車種に応じた多様な触媒が設計されるが, 活性成分として PGM が使用される点は共通している. しかしながら, PGM は高価で希少性が高く, また社会・経済情勢による価格変動も大きい. 2022年2月のロシアによるウクライナ侵攻当初のPdの価格高騰は典型的な例である. 自動車の電動化が進む中でも, LiやCo等の資源問題, 電源供給の問題から全てを電気自動車に置き換えられるのは時間がかかり, エンジン搭載車用の PGM を使用しない PGM フリー-TWC 触媒が継続して求められている.

PGM フリー-TWC の開発は以前から検討され, 合金, あるいはペロブスカイトやスピネルなどの複合酸化物などが検討されてきた<sup>5-10)</sup>. これらの触媒はHC, COの酸化に高い活性を示す一方で, NO還元活性が不十分である. 図1にこれまで報告されたPGM フリー-TWC 上でのNO転

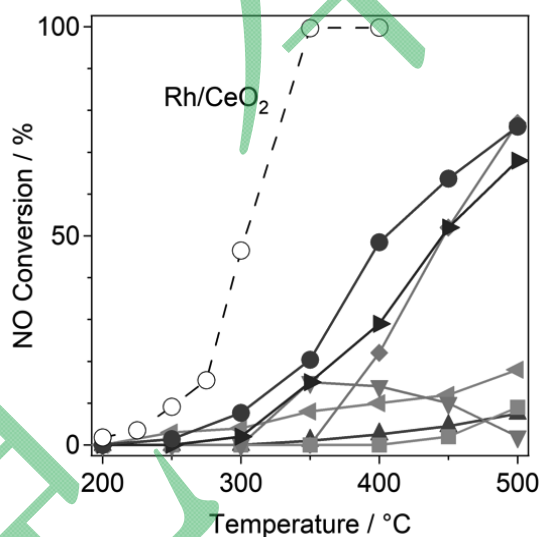


図1. PGMフリー触媒と典型的な貴金属触媒 (○Rh/CeO<sub>2</sub>)のNO還元活性比較<sup>5-10)</sup>

- NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>, ◆ Cu/CeO<sub>2</sub>, ▴ La<sub>0.9</sub>Sr<sub>0.1</sub>FeO<sub>3</sub>,
- ◀ Cu@LaNiO<sub>3</sub>, ▲ LaCo<sub>0.5</sub>Cu<sub>0.5</sub>O<sub>3</sub>
- La<sub>0.8</sub>Sr<sub>0.2</sub>Co<sub>0.9</sub>Mn<sub>0.1</sub>O<sub>6</sub>, ▼ CuO/LaCoO<sub>3</sub>



## [4-3-a] 触媒解析 コンピュータ利用分野

触媒インフォマティクスの創成のための理論・データ  
科学研究北海道大学触媒科学研究所 鳥屋尾隆・清水研一  
産業技術総合研究所エネルギー・環境領域 日沼洋陽  
福岡工業大学工学部 蒲池高志

## 1. はじめに

理論科学・材料科学・データ科学の融合領域としてマテリアルズ・インフォマティクス (MI) が近年注目されているが、触媒のような複合的・化学的現象への展開は未だ萌芽段階にあり、他の材料分野に遅れをとっている。MI では、候補材の性能を表す目的変数と説明変数 (電子状態) を密度汎関数理論 (Density Functional Theory, DFT) を用いて網羅的に計算し、構造・電子状態と性能の関係をデータ科学的手法により計算機に学ばせることにより望みの材料を「推薦」することを目指す。固体触媒の場合、現在の計算化学では触媒性能 (反応中の構造変化, 逐次・併発反応, 物質移動を伴う複雑現象) の理論計算が困難、バルクとは異なり網羅的な表面モデルの作成が容易ではない、反応分子の多様性も考慮する必要がある等の理由により、バルク材料の融点等 (計算可能データ) で性能が決まる物理材料分野の MI 手法は適用できない。我々は、MI 手法を固体触媒開発に取り込み、「どの触媒材料を用いればよいのか？」を予測するための手法開発を行ってきた<sup>1-19)</sup>。本稿では、理論データの系統的な取得、理論データの機械学習による設計指針提案、実験データの機械学習による新触媒開発のための方法論と実施例を解説する。

## 2. 表面欠陥生成に影響する電子的因子

2.1 種々の酸化物<sup>1-3)</sup>

金属酸化物の redox 型触媒作用は還元剤による表面酸素の除去 (欠陥生成) と欠陥上での含酸素分子の解離吸着 (表面酸素の回復) の繰り返し (Mars-Van Krevelen 機構) で進行する。従って、各種酸化物表面の表面酸素欠陥形成エネルギー ( $E_{\text{Ovac}}$ ) の理論値を網羅的に計算すれば理論先導型の触媒・担体探索が可能になるが、DFT による網羅的な  $E_{\text{Ovac}}$  の計算例は少ない。我々は 20 種の酸化物 (半導体・絶縁体) の 32 表面の  $E_{\text{Ovac}}$  及び電子状態に関する記述子を DFT 計算した<sup>1)</sup>。様々な記述子のなかでも、バンドギャップ (BG) が  $E_{\text{Ovac}}$  と最も高い相関性があり、BG が小さいほど酸素欠陥が生成しやすいことがわかった (図 1a)。機械学習を用いて各記述子の重要度を比較したところ (図 1a, b), BG 以外にも、生成エネルギー ( $E_{\text{form}}$ ), 電子親和力 (EA), 仕事関数 (WF) 等が重要な因子であることがわかった。計算した DFT データの範囲内ではあるが、機械学習による  $E_{\text{Ovac}}$  の予測も可能である。次に、上述の表面の一部について、酸素欠陥における  $\text{O}_2$  吸着エネルギーを計算した。吸着エネルギーは  $E_{\text{Ovac}}$  と強く相関し (図 1c), 酸素欠陥が熱力学的に生成しにくい表面ほど、生成した欠陥上での吸着  $\text{O}_2$  種は安定で

## [4-4] 先端技術

# 液-固相分離による高速 Direct Air Capture 技術開発

東京都立大学大学院理学研究科化学専攻 山添誠司

### 1. はじめに

人類は産業革命以降、科学技術の発展とともに急速な進化を遂げてきた。化石資源によるエネルギー利用や化成品製造により豊かな生活を得てきた一方で、化石資源の利用による二酸化炭素の放出による大気中の二酸化炭素濃度の急激な上昇により、地球温暖化現象やそれに伴う気候変動など、地球規模で環境問題が発生している。この問題を解決し、持続可能な社会を実現するためには、大気中の二酸化炭素の濃度を産業革命以前の状態に戻す必要がある。大気中の二酸化炭素濃度を減少させるには、排出される二酸化炭素を大幅削減することはもとより、これまでに放出された大気中の二酸化炭素を回収する必要がある。現在、日本では、2050年にネットエミッション・ゼロ（二酸化炭素の物質収支で排出量ゼロ）を達成すべく、工場等の排気ガス中から二酸化炭素を回収し、地中に貯留する二酸化炭素回収・貯留（Carbon Capture and Storage; CCS）技術の試験運用が開始され、プラントレベルでの運用が始まっている。また、最近では、回収した二酸化炭素をより付加価値のある製品へと変換する（Carbon Capture and Utilization; CCU）技術の開発も進められている。CCUでは、回収した二酸化炭素をもう一度エネルギーや有用な化成品合成のための炭素源として利用することから、二酸化炭素の排出量をマイナスに転換できる可能性を秘めている。

工場等の排気ガス中に含まれる高濃度（～30%）の二酸化炭素を回収する技術として、アミン吸収法がある。一般的なアミン吸収法ではモノエタノールアミン（MEA）溶液が用いられている。アミン吸収法は、排気ガス中の二酸化炭素を吸収する吸収塔と二酸化炭素を吸収したアミン溶液から二酸化炭素を脱離・回収する再生塔で構成され、二酸化炭素吸収効率は吸収塔の高さで制御できることが知られている。90%以上の二酸化炭素吸収率を達成するには吸収塔の高さを約 20 m にする必要がある。高い二酸化炭素吸収効を実現するには高い吸収塔を設置する必要があること、また、二酸化炭素を脱離・回収する際に加熱（393 K 以上）する必要があること、設備の大型化とエネルギーコストの面で課題が残っている。

一方、大気中の低濃度（約 400ppm）の二酸化炭素を回収する技術は Direct Air Capture（DAC）と呼ばれており、上述の高濃度の二酸化炭素を回収する技術とは全く異なる。DAC 技術として、Carbon Engineering 社は KOH と  $\text{Ca}(\text{OH})_2$  を組み合わせて  $\text{CO}_2$  を  $\text{CaCO}_3$  として吸収する技術（KOH/ $\text{Ca}(\text{OH})_2$ ）を試験的に運用している。しかし、二酸化炭素の回収効率は 90%にも満たないため、改善が望まれる。また、KOH/ $\text{Ca}(\text{OH})_2$  法では  $\text{CO}_2$  と反応してできた  $\text{CaCO}_3$  からの  $\text{CO}_2$  脱離に 800°C以上の高温が必要であり、 $\text{CO}_2$  の脱離・回収の面でも課題が散見される。Climeworks 社はアミンを固定化した固体吸収材によるドライプロセスを用いた DAC 技術を用いている。これら KOH/ $\text{Ca}(\text{OH})_2$  法や固