

化学プロセスにおける固体酸触媒のはたらき

上席研究員 丹羽 幹

再生可能エネルギーに対する期待が高まっているが、いまのところその貢献度はわずか1%にすぎない。当面は石油のような既存のエネルギー資源に依存せざるをえない状況にあると考えられる。石油を精製して、ガソリン燃料を作り出す場合、ゼオライト触媒が使われている。化学的には、ゼオライトに含まれる固体酸点がその役割を担っている。この酸点がどのような構造、組成であるかを見極め、もっとも適当と判断される酸点の構造を構築することによって、合理的に効果的な触媒を開発することが可能であると考えられる。

石油精製の技術はすでに長い歴史をもっているが、実用化されている石油精製のプロセスや触媒の技術には経験的な要素が多く含まれており、科学的に理解されたとはいえないものが多く含まれている。したがって、科学的に精選された知識を実用化すれば、さらに効果的で、環境にも適合する触媒と技術を提供できるのではないかと考えている。

以下の二つの研究例を紹介する。

- 赤外線とマススペクトロスコピーを併用することによる酸性質測定のためのアンモニアの昇温脱離法（これを IRMS-TPD 実験とよんでいる）。
- 正確な構造にもとづく酸点強度に関する理論計算（これは DFT と呼ばれる）これらを総合して、炭化水素が酸点上でどのように反応するかを見極め、さらに高活性な触媒を作るための指針を紹介する。