

【課題番号】 2RB-2502

【研究課題名】 メタン燃焼に有効な活性金属カチオンのバーチャルスクリーニング

【研究期間】 2025 年度（令和 7 年度）～2027 年度（令和 9 年度）

【研究代表者（所属機関）】 安村 駿作（東京大学）

研究の全体概要

メタン(CH₄)を主成分とする天然ガスは、その豊富な資源量と二酸化炭素当たりの熱量の高さから、石油に代わるエネルギー源として注目されている。近年、天然ガス自動車や発電用途に広く利用されているが、排ガス中に含まれる未燃 CH₄ の放出が課題である。CH₄ は非常に安定な分子で、強力な温室効果(全ての温室効果ガスが地球温暖化に与える影響の 23%分)を持つため、欧米各国での排出量規制は年々厳しくなっている。未燃 CH₄ 排出量の抑制のため、排ガスの下流で CH₄ を低温完全酸化できる触媒が必要である。Pd 導入ゼオライトを用いた先行研究では、主に MFI 型や beta 型、MOR 型などが検討されている。この触媒系では、Pd の導入方法やフレームワークに含まれるアルミニウム量(Si/Al 比)などで触媒活性が細かく変化する。そのため、限られた種類のゼオライトに対して、細かな合成条件の検討と網羅的スクリーニングに基づく研究が多くなされている。ゼオライトは規則性構造を持つため、計算先導で予測された有望な活性点構造を実験的に合成できる可能性が高い。本研究ではニューラルネットワークポテンシャル(NNP)で高速化された反応経路自動探索法(NNP-AFIR 法)を用いたメタン燃焼ゼオライト触媒のバーチャルスクリーニング法を確立する。ゼオライト内に活性として導入される金属カチオンについて NNP-AFIR 法を用いた広範囲なスクリーニングを実施する。有望と思われるゼオライト担体と活性金属カチオンの組み合わせについて実際に触媒合成し、実験的に確かめる。反応経路探索で示された反応経路についても in situ/operando 分光法(IR, XAFS, UV- vis)を駆使して計算と実験の整合性を詳細に検討する。上記計算手法と実験手法を駆使し、低温メタン燃焼触媒の計算先導開発に取り組む。

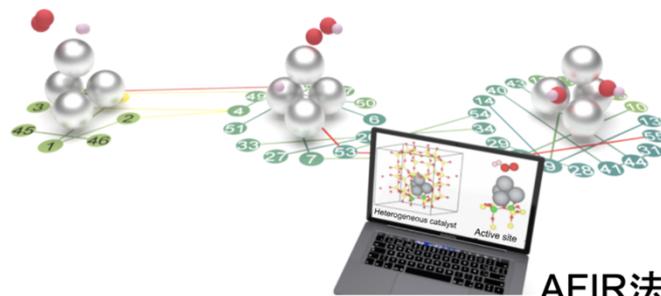
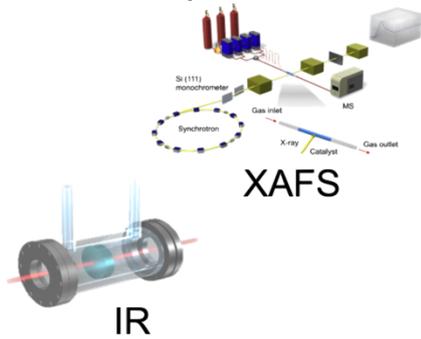
研究の全体概要図

メタン燃焼に有効な活性金属カチオンのバーチャルスクリーニング

研究機関: 東京大学 生産技術研究所

In situ/operando 分光法

NNPによる触媒活性予測



AFIR法
(反応経路自動探索法)



産業的にも有用な
固体触媒の開発を迅速化