「革新的触媒の科学と創製」
平成 29 年度採択研究者

2018 年度
実績報告書

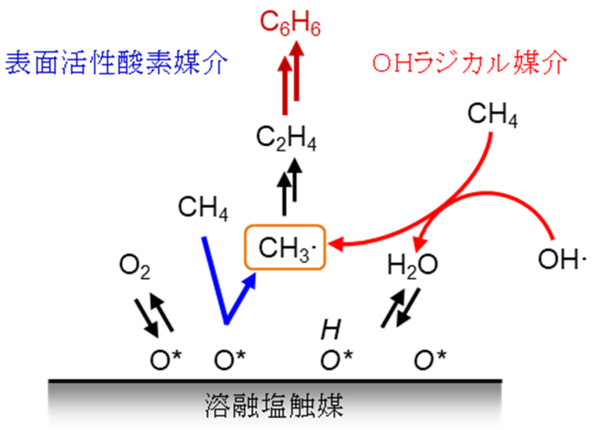
高鍋　和広

東京大学大学院工学系研究科
教授

アルカリ溶融塩触媒による炭化水素の転換反応

§1. 研究成果の概要

天然ガスは地球上に豊富に遍在する化石資源であり、その効率的転換は持続可能な社会の実現に向けた鍵となり得る。特にその主成分である CH_4 を一段で有用な化成品原料である炭化水素等へ転換するプロセスはその経済性から有用であると期待される。本研究課題においては、これまで CH_4 の酸化カップリング反応に高活性を示す材料として知られていた溶融塩触媒に関する研究を行っている。図に示すように、在来型触媒を用いた場合には表面に生成される酸素種 O*が CH_4 中の水素を引き抜くことで CH_3 ラジカルが生成され、それがカップリングして C_2H_6 が、さらに脱水素化され C_2H_4 が得られる機構が知られている。しかしこの表面酸素種は反応性が高く、生成された C_2H_6 および C_2H_4 の燃焼反応も進行し、目的生成物である $C_{\geq 2}$ の収率が低い。これに対し、溶融塩触媒は異なる反応機構で CH_4 の高効率転換を実現する。すなわち、本触媒は反応雰囲気下でまず溶融状態となり、それが反応中生成物である H_2O と反応して OH ラジカルを生成する。この OH ラジカルは選択的に CH_4 から H を引き抜く特異的な挙動を示し、結果 C_2H_4 が高い収率で得られる。



こうした特徴を持つ溶融塩触媒を対象に、本年度はこれまでの研究で判明した反応機構仮設を基に、コンピューターシミュレーションを通じてその更なる理解を試みた。その結果 C_2H_4 が生成されるのみではなく、それが反応雰囲気下で気相トリメリゼーションによりベンゼンへと転換される可能性があることを見出した。すなわち、本触媒を用いた場合にはメタンの効率的な直接芳香族化が進行し得る事が期待され、今後はその実験的な検証を進めていく。

§2. 研究実施体制

①研究者:高鍋　和広　(東京大学大学院工学系研究科　教授)

②研究項目

- 種々の新規反応装置の立ち上げ
- ChemKin を用いた CH_4 の酸化的転換に係る理論的検討
- 溶融塩触媒の安定性評価
- 溶融塩触媒の熱物性評価