

ポリオール類の水素化反応用銅系触媒の開発

Development of Cu based catalyst for selective hydrogenation of polyols

京都大学大学院工学研究科化学工学専攻反応工学研究室 藤墳大裕

研究成果概要

本研究では、申請者がこれまで実験的に開発してきたポリオール選択水素化用炭素担持銅触媒を基に、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用し、低温低水素圧下でのポリオール類水素化反応のさらなる高選択化、高速化に資する銅系触媒の提案・開発を目指したものである。

これまでに炭素担持銅系触媒を調製し、グリセリン(C3 ポリオール)、エリスリトール(C4 ポリオール)の選択水素化脱酸素反応、キシロース(C5 ポリオール)の選択水素化反応に有効であることを見出している。また、炭素担持銅触媒に Mg を添加することでグリセリンの水素化脱酸素反応活性は増加するが、エリスリトールの水素化脱酸素反応活性は低下する。これは添加金属によって触媒表面における吸着状態、反応経路が変わることとともに添加金属種によって当該反応を促進できる可能性を示唆している。そこで、添加金属による Cu 表面の性状の変化および Cu 表面上(添加金属との界面を含む)へのポリオール類と水素の吸着状態を計算し、ポリオール類による反応性の違い、反応を促進する添加金属の探索を行う。

今年度は操作、計算手順の習得を兼ね、ポリオール類の構造最適化を行い、触媒表面を介さない異性化反応に対し遷移状態探索を実施した。次年度は Cu 表面へのポリオール類と水素の吸着、反応機構の計算を行う。実験結果と本計算との整合性を確認したうえで、Mg 添加 Cu 表面の構築、ポリオールと水素の吸着、反応経路推定を行う予定である。また、触媒調製が可能な添加金属種(Ni, Pt, Ru 等)に展開し、水素化反応活性を向上しうる添加金属種の検討を目指す。