

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、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。実験によって、当該触媒への第二金属の添加によって反応速度、反応選択性ともに敏感に変化することから、添加金属種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を意味している。また、見かけの反応速度から生成物の吸着阻害が示唆されたことから、対象反応系での触媒表面の吸着状態の理解が反応系の生成速度向上のために重要であることが示唆された。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。

発表論文(謝辞あり)

発表論文(謝辞なし)

W. Wang, T. Tago, H. Fujitsuka, “Hydrodeoxygenation of C3–4 polyols to C3–4 diols over carbon-supported bimetallic MgCu@C catalysts prepared from ion exchange resin”, *Catal. Today* (2022) in press. DOI: 10.1016/j.cattod.2022.06.042