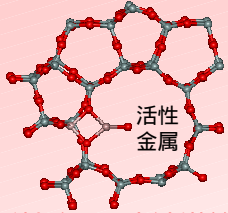


# 三次元多孔質シミュレータによる触媒微細構造定量評価

(東北大) 古山通久・SAHNOUN Riadh・坪井秀行・畠山 望・  
遠藤 明・高羽洋充・久保百司・DEL CARPIO Carlos・宮本 明

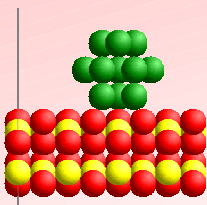
## 背景：触媒高性能化のアプローチ

### 活性点制御



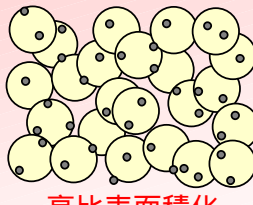
活性金属・助触媒等

### ナノ界面制御



担体・三相界面等

### メソ反応場制御



高比表面積化  
高分散化等

触媒高性能化のアプローチは、左図に示すように、1)活性点の制御、2)ナノ界面の制御、3)メソ反応場の制御に大別される。このうちメソ反応場の制御は工業上極めて重要であるにも関わらず、実験的にも理論的にも有効な最適化手法が全く存在しなかった。これは、メソ反応場の複雑な不規則性多孔質構造の定量的な評価が困難であったためである。21世紀において試行錯誤や経験など暗黙的知識によらない合理的触媒設計を実現するためには、メソ反応場を制御するための新規技術の開発が必須であり、本研究の目標とした。

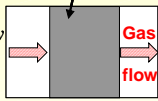
## 背景：従来のシミュレーションアプローチ

### 1. 連続媒体近似

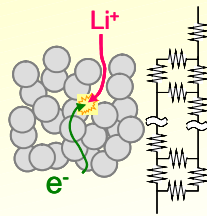
$$\frac{\partial C}{\partial t} = \varepsilon \frac{D}{\tau} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

$\varepsilon$ : porosity  
 $\tau$ : tortuosity

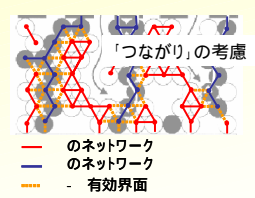
Porosity: 0.3  
Tortuosity: 2



### 2. 多孔質電極理論



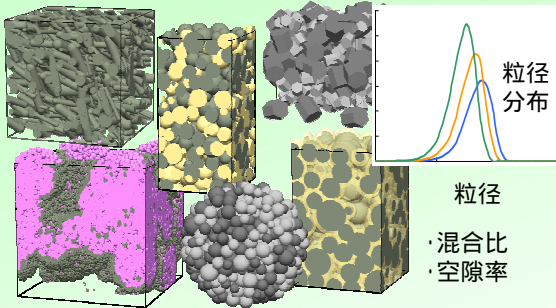
### 3. パーコレーション理論



メソ反応場に関する従来のアプローチは、左図に示すように、1)単純均質媒体近似、2)多孔質電極理論、3)パーコレーション理論がある。このうちはじめの2つは構造を頭にも考慮することができず、最後の手法は構造は考慮できるがごく単純化されており、現実の複雑な不規則構造により発現する多孔質触媒の機能の本質に迫ることは全く不可能であった。

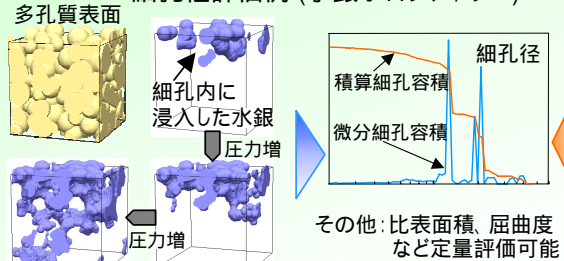
## 本研究：メソ反応場制御のための新規アプローチ

### 不規則な多孔質構造のモデル化



### 複雑な微細構造の定量評価の実現

#### 細孔径評価例 (水銀ポロシメトリー)



実験結果との直接比較

本研究では、多孔質構造のモデル化技術である三次元多孔質シミュレータ( )をベースとし、複雑な多孔質微細構造の定量評価手法を開発した。多孔質構造細孔部に水銀が浸入する過程のシミュレーションに基づく細孔径評価( )をはじめとし、実験的測定と直接比較可能な様々な微細構造パラメータの定量評価を実現した。

## 本研究により実現可能となった将来展開

### 不規則性多孔質構造最適化基盤

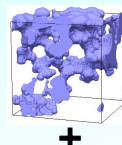
様々な多孔質構造の作成  
(空隙率 × 粒径 × 粒径分布 × 膜厚etc.)

微細構造定量評価に基づく特性予測  
(温度 × 圧力 × ガス組成 × 物性etc.)

最適な多孔質構造の提案

開発済みの多孔質構造モデル化技術と微細構造定量評価技術を組み合わせることで、様々な多孔質材料の実特性の定量評価が可能となり、不規則な多孔質構造の最適化が初めて実現可能となった。

### 水銀フリーの微細構造評価技術



実構造評価技術

実構造評価技術(断面写真+画像処理など)と開発した水銀ポロシメトリー過程のシミュレーション手法を組み合わせることで、水銀を全く使用しない細孔評価技術が実現される。RoHS規制など水銀使用規制強化にも対応可能なグリーンサステナブルケミストリー技術としての応用が期待される。