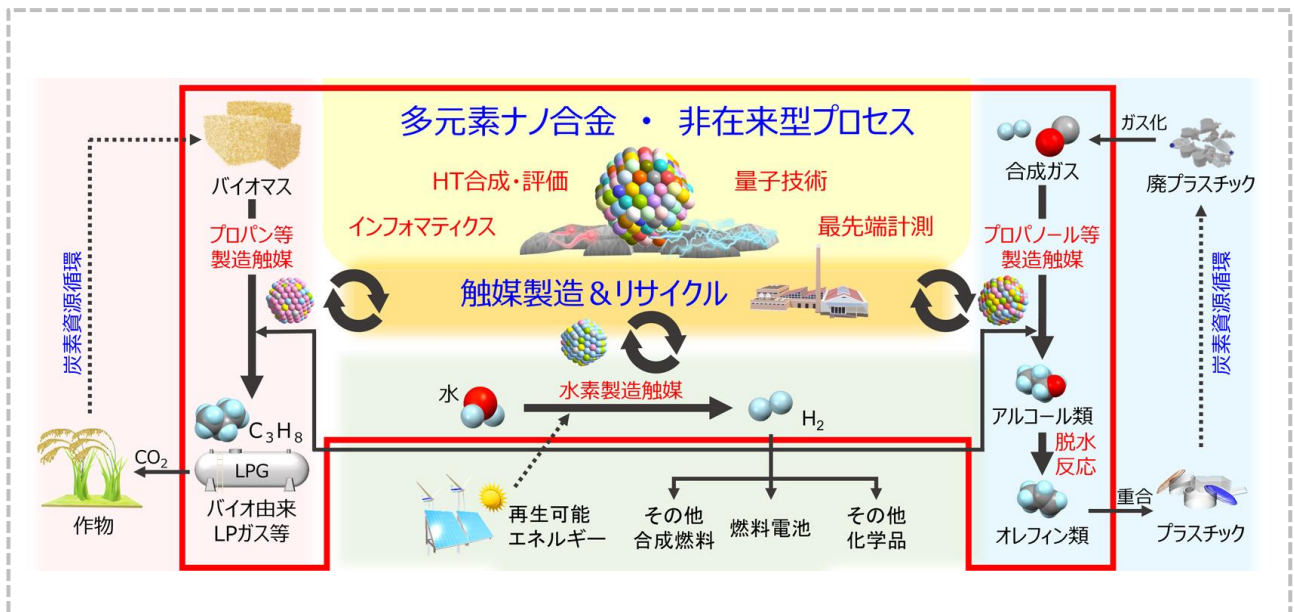


資源循環を実現する革新的触媒の開発・実証事業の開始について

—環境省「地域資源循環を通じた脱炭素化に向けた革新的触媒技術の開発・実証事業」に採択—

概要

2050 年カーボンニュートラルに向けて目標を達成するためには、水素などの脱炭素燃料の活用、プラスチック資源などの活用を始めとした循環経済への移行が求められています。北川宏 理学研究科教授、草田康平 特定准教授（白眉センター）らの研究グループが開発をしている多元素ナノ合金を用いることにより、最近、従来の金属触媒では達成できなかった高難度な反応に対しても高活性を示すことが明らかになってきました。本事業で「非平衡ハイスループット合成」、「材料創製インフォマティクス」、「最先端計測・量子計算」の技術開発を行うことで、省稀少元素化且つ省エネ地域資源循環に資する多元素ナノ合金触媒の開発を推進します。また、本事業で、関根泰 早稲田大学理工学術院教授等の研究グループが開発をしている非在来型プロセス技術と融合させた要素技術を確立することにより、現在、従来触媒技術で困難を極める温暖化対策に資する高難度反応に対する革新的触媒・反応場の開発が強力に加速されることが期待されます。また、既存貴金属触媒等に含まれる稀少元素を格段に削減した革新的触媒や CO₂ 削減の為の未開拓反応触媒技術の開発に転用可能と考えられます。本事業を採択事業者・共同実施者と共に開発を推進することにより、稀少元素の省資源化を通して価格の乱高下の抑制、地球温暖化の緩和など近い将来に向けた喫緊の課題解決の糸口につなげます。



1. 背景

脱炭素技術や資源循環技術の化学反応を促進させるために用いられる触媒には貴金属やレアメタル等が多用されています。しかし、今後のカーボンニュートラルに向けた需要に追従するように価格高騰が起きやすく、脱炭素化を促進する上で触媒材料の資源制約がボトルネックとなる可能性があります。この課題解決のためには、資源制約を生じさせることなく、廃プラスチックや地域の未利用資源等を原料にして、触媒と反応場の高度化により資源循環を実現する革新的触媒技術が必要となっています。京都大学で開発している資源制約を受けない地上資源から汎用素材とエネルギーを製造する革新的な触媒と、早稲田大学で主に開発されている、触媒の潜在能力を最大限に引き出す反応場の研究開発を合わせて行うことで、実現できると考えました。

2. 研究手法・成果

京都大学では非平衡合成手法で様々な多元素ナノ合金の開発に世界で初めて着手しており、これまでに Rh や Pt、Ir 代替触媒となり得る新ナノ合金の開発、さらに、その量産化技術として、世界初の多元素ナノ合金のフロー合成装置の開発にも成功しています。また複数の共同研究機関と共に、更なる技術開発・改良のため、電子顕微鏡、高輝度シンクロトロン X 線、in-situ IR 分光等の最先端計測を用いた多元素ナノ合金触媒の構造解析に着手・一部成功しています。加えて、開発を進める上で多元素化による組み合わせ爆発を回避するため、従来の第一原理計算に加え、汎用ニューラルネットワークポテンシャルを活用しデジタルスクリーニングや機械学習、ゲート型量子計算技術の活用を開始しています。複雑な原子配置構造を有する多元素ナノ合金を設計するにあたり、所望の物性・機能から膨大な選択肢に埋もれる最適解（触媒の組成、組成比、構造、担体等）とその合成条件を導く「材料創成インフォマティクス」の開発に着手しており、共同実施先との連携により開発を推進します。また、文部科学省量子技術イノベーション拠点である大阪大学（量子ソフトウェア研究拠点：北川勝浩拠点長）が共同実施者として参画し、量子技術の本触媒探索へ活用し、触媒技術開発を加速します。

3. 波及効果、今後の予定

事業において要素技術を確立し、多元素ナノ合金触媒と非在来型プロセスが実用化された場合、本手法を貴金属を使用している触媒反応に適用させることで、既存貴金属触媒等に含まれる稀少元素を格段に削減した革新的触媒や CO₂ 削減の為に未開拓反応触媒の開発に転用可能と考えられます。本事業において、採択事業者と共同開発を実施することで、バイオマスを原料とした「プロパン等製造触媒」、水を水素に電気分解する「水素製造触媒」、合成ガスからアルコールを製造する「プロパノール等製造触媒」開発の推進を行います。これにより、稀少元素の省資源化を通して価格の乱高下の抑制、地球温暖化の緩和など近い将来に向けた喫緊の課題解決につながります。

4. 研究プロジェクトについて

環境省 令和 4 年度地域資源循環を通じた脱炭素化に向けた革新的触媒技術の開発・実証事業

「革新的多元素ナノ合金触媒・反応場活用による省エネ地域資源循環を実現する技術開発」

実施期間：令和 4 年度～令和 11 年度（予定）

予算額：約 19 億円/年（2022 年度）（予定）

採択事業者：国立大学法人京都大学（※代表事業者）

学校法人早稲田大学

株式会社クボタ

住友化学株式会社

株式会社フルヤ金属

共同実施者：国立大学法人九州大学

学校法人明治大学

国立大学法人名古屋工業大学

国立大学法人信州大学

独立行政法人国立高等専門学校機構明石工業高等専門学校

公益財団法人高輝度光科学研究センター

国立大学法人大阪大学

学校法人慶應義塾大学

国立研究開発法人理化学研究所

自然科学研究機構分子科学研究所

国立大学法人高知大学

国立大学法人静岡大学

株式会社東芝

<用語解説>

① 多元素ナノ合金：

粒径がナノメートルオーダーの固溶体の粒子であり、その固溶体が多数の元素から構成されるもの。

② 非平衡ハイスループット合成：

研究者が多数の非平衡合成を迅速に実施することを可能にする合成手法

③ 非平衡合成手法：

熱力学的に非平衡な（したがって不安定な）状態を高温・高圧下などの極端場で瞬間的に出現させ、その非平衡状態を常温・常圧下へと瞬時に安定化させる合成法。

④ 材料創製インフォマティクス：

材料の分野で活用されてきたマテリアルズ・インフォマティクス、化学の分野で分子の機能や合成経路の予測を中心として展開されてきたケモインフォマティクス、工学分野において発展してきたプロセスインフォマティクスをそれぞれ高度化するとともに、それらを統合し相補的に活用するプラットフォームである

本提案では特に、インプット・パラメータを合成条件とし、アウトプット・パラメータを触媒性能とし、合成パラメータは非平衡状態の範囲まで広げて機械学習させることで、ダイヤモンドのような非平衡物質の検索も可能とする新しい開発手法までを含有する

HTS と併せることで材料探索の大幅な時間短縮が可能となる。欧米にも例を見ない材料創製プラットフォームである

⑤ 量子計算：

通常の0か1の二値情報（ビット）を扱うデジタルコンピュータと異なり、0と1の量子的重ね合わせ状態

(量子ビット) を取り扱うコンピュータを量子計算機 (量子コンピュータ) という

量子計算技術は、この量子計算機を用いる演算技術の総称。暗号解読など、通常のコンピュータ (古典コンピュータ) では膨大な計算コストがかかる一部の問題を、理論上短時間で計算することができる。近年急速にハードウェアの開発が進み、2019 年には Google が特殊なタスクに対してではあるが、当時最高速のスーパーコンピュータを上回る性能を持つことを実証している

⑥ ハイスループットスクリーニング (HTS)

研究者が多数の試験を迅速に実施することを可能にする科学実験の方法

⑦ in-situ IR 分光

触媒などが作用する雰囲気 (反応ガス、温度など) において構造や表面状態などを分光装置を用いてその場 (in situ) 観察する手法のことである

⑧ 汎用ニューラルネットワークポテンシャル

第一原理計算の結果をニューラルネットワークで学習し、高速な計算を実現する計算手法をニューラルネットワークポテンシャルと言う従来のニューラルネットワークポテンシャルは、少数の元素にしか適用できなかったが、周期表上の多くの元素に汎用的に適用可能なように開発されたニューラルネットワークポテンシャルを汎用ニューラルネットワークポテンシャルと言う

<研究者のコメント>

多元素ナノ合金触媒による物質循環社会の実現を目指し、「革新的触媒材料」 × 「革新的反応技術」によるシナジー効果によりこれまで人類が実現したことのない触媒反応を実現します。