

小倉研究室

元素循環型社会構築に向けた触媒システム設計

持続型材料エネルギーインテグレーション研究センター



工学系研究科 化学システム工学専攻

環境触媒・材料科学

<https://www.ogulab.iis.u-tokyo.ac.jp>

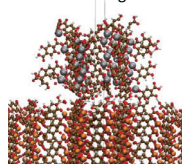
規則性多孔質材料を用いた固体触媒開発

固体触媒は「その条件では起こりにくい反応を起こす」ことができ、環境調和型社会の実現に向けた必須材料です。小倉研究室では、特に原子レベルで構造が規定された規則性多孔質材料(ゼオライト、金属有機構造体(MOF)など)を利用した固体触媒開発を行なっています。これらの材料は高い触媒活性を持つことで知られ、計算科学を用いたモデリングも容易です。最近では、計算科学で先導的に触媒の構造や活性を予測することで、「空気から都市ガスを作る触媒 (CO₂水素化触媒)」や「温室効果ガスを分解する触媒 (メタン燃焼触媒)」の開発などに成功しています。

・ MOFを前駆体としたCO₂回収/水素化触媒の開発

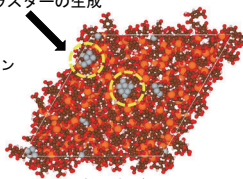
Ni-MOF-74 on Mg-MOF-74

Niクラスターの生成

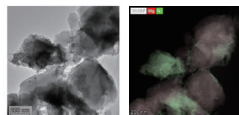


熱分解前

熱分解
シミュレーション

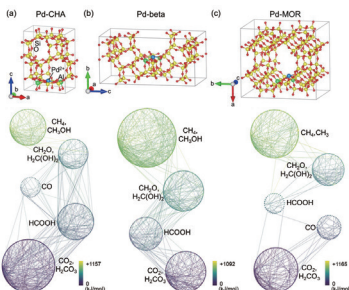


熱分解後

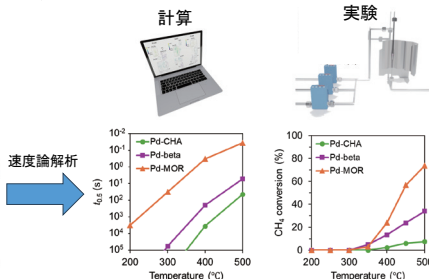


実験的にも同様の構造の生成を確認

・ ゼオライトを担体としたメタン燃焼触媒の計算先導活性予測



各ゼオライト内の反応経路全体を探索



ゼオライト触媒の活性を計算先導で予測

