

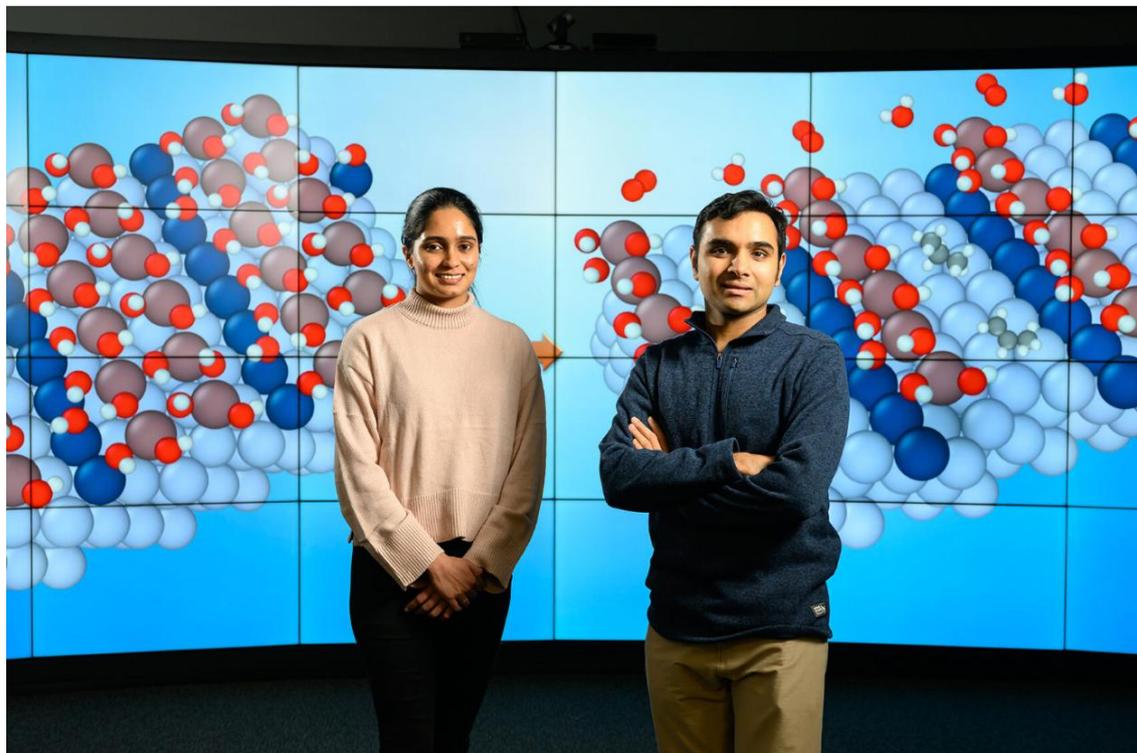
【環境・省エネルギー分野】

仮訳

化学物質製造の効率を向上させる原子の知見（米国）

2025年11月13日

Luke Auburn: Director of Communications, Hajim School of Engineering & Applied Sciences



プロピレンからプロダクツへ: Siddharth Deshpande 助教授と博士課程学生の Snehitha Srirangam 氏は、ロチェスター大学 VISTA コラボラトリーのデータビジュアライゼーションを用いて、触媒がシェールガスをポリプロピレンに変換する際に原子レベルで起こっている現象を明らかにしている。彼らが開発した新しいアルゴリズムは、日用品をより効率的に製造する方法につながる可能性がある。

(写真: ロチェスター大学 / J. Adam Fenster)

プラスチック製の調味料用ボトルから屋外用家具まで、無数にある日用品は最初にプロパンをプロピレンに変換することで製造されている。[2021年にScienceに掲載された研究](#)では、タンデムナノスケール触媒を用いることで、複数のプロセスを単一の反応に統合できることが実証されている。これは、企業による収量向上とコスト削減を可能にするものである。しかし、原子レベルで何が起こっているかが不明であったため、主要な他産業プロセスへのこの技術の適用は困難であった。

[ロチェスター大学](#)の研究者らは、ナノスケール触媒がプロパンをプロピレンに変換する際の複雑な化学反応を促進する主要な原子の状態を明示するアルゴリズムを開発した。[アメリカ化学会誌に掲載された論文](#)において、複数の物質の状態によって複雑化するこれらの入り組んだ反応について論じている。

「触媒活性部位で起こっていることには非常に多くの可能性が考えられるため、膨大に存在するそれらの可能性を極めて容易かつ論理的に選別し、最も重要なものに焦点を当てるアルゴリズム的アプローチが必要です」と、[Department of Chemical and Sustainable Engineering](#)の助教授である [Siddharth Deshpande 氏](#)は説明する。「私たちはアルゴリズムを改良し、それを用いてこの非常に複雑な反応を促進する金属相と酸化物相の詳細な分析を実施しました」。

Deshpande 助教授と化学工学の博士課程学生である [Snehitha Srirangam 氏](#)は、分析を実施する中で驚くべき事実を発見した。化学反応における酸化物は、欠陥のある金属部位の周囲に極めて選択的に成長し、このことが触媒の安定性にとって重要であることを特定した。また、酸化物は様々な化学組成下で存在し得るにも関わらず、欠陥のある金属部位の周囲にあるという働きを決して失うことがなかった。

Deshpande 助教授によると、この知見と彼らのアルゴリズムのアプローチを活用することで、塗料から燃料電池にいたる製品に用いられるメタノール合成等の化学反応の原子構造が理解できるようになるという。最終的には、企業によるプロピレン等の工業材料のより効率的な生産方法の戦略的な模索と、長年続いてきた試行錯誤的な手法への依存の低減に役立つと Deshpande 助教授は考えている。

「私たちのアプローチは非常に汎用性が高く、何十年もの間不明であったこれらのプロセスの多くを解明する扉を開く可能性があります」と Deshpande 助教授は言う。

「これらの産業プロセスは有効で大量の化学物質を生産していますが、その働きの正確な解明にはまだ学ぶべきことが多くあるのです」。

訳：NEDO（担当 イノベーション戦略センター）

出典：本資料は、米国・ロチェスター大学の記事 “Atomic insights could boost chemical manufacturing efficiency (<https://www.rochester.edu/newscenter/atomic-insights-boost-chemical-manufacturing-efficiency-680462/>) を翻訳したものである。
(Reprinted with permission of the University of Rochester)