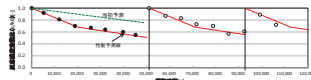
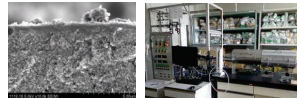
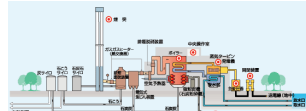
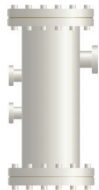
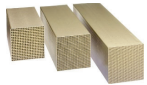
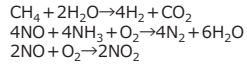


反応工学解析とラボ実験の融合による 触媒エンジニアリング



技術本部 高砂事業所
化学分析センター 山下岳史

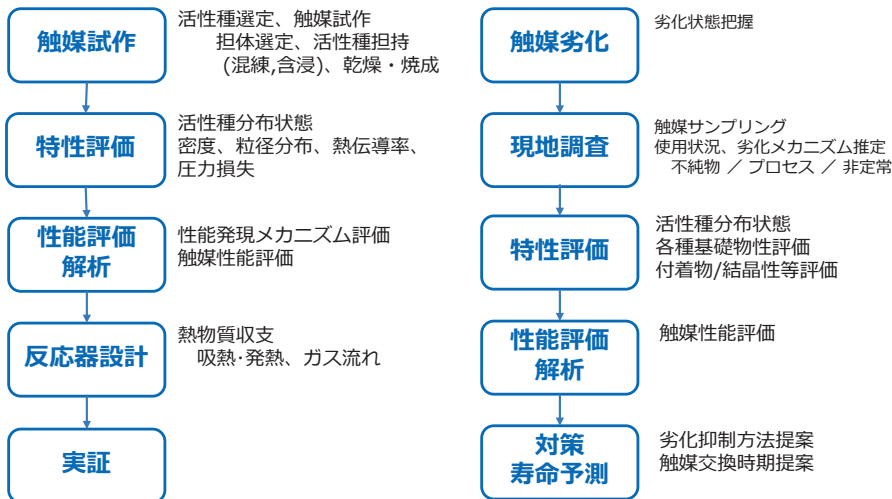
©2021 KOBELCO RESEARCH INSTITUTE, INC.

コベルコ科研 1

1. 触媒関連開発の流れ

触媒試作 ⇒ 触媒選定・調製 → 性能評価 → 反応器設計 → 実証

触媒劣化 ⇒ 触媒サンプリング・設備評価 → メカニズム解析 → 対策・交換時期提案



©2021 KOBELCO RESEARCH INSTITUTE, INC.

1.2 触媒関連技術：触媒の選定～設備安定稼働

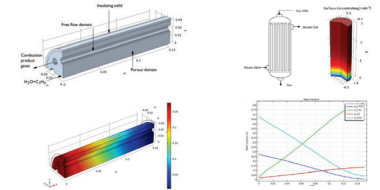
触媒を用いたプロセス開発のステップ	ポイント	コベルコ科研
目的物質		
↓		
原料	入手性、安定性、不純物	
↓		
反応式・メカニズム	素反応、律速中間生成物、吸熱・発熱	各種調査、ラボ基礎試験
↓		
触媒選定	反応性、熱管理、コスト	活性種選定、担体選定、触媒試作、触媒物性評価、触媒特性評価、触媒性能評価
↓		
反応容器	熱物質分布、効率、メンテナンス	反応容器設計、妥当性評価
↓		
プロセス	コスト、メンテナンス	プロセス設計、熱物質収支最適化 起動・停止方法、スケールアップ
↓		
劣化挙動 触媒交換	コスト、メンテナンス	劣化環境評価、劣化メカニズム解明 劣化抑制手法

<活性種選定>

機械学習を用いた活性種探索
 ・第一原理計算による対象分子と材料クラスターの吸着エネルギー計算
 ・材料基礎物性と材料に求める性能を学習
 例：NO分解反応での活性種選定

<反応解析・容器設計>

反応器内のガス流れ、温度分布の評価、反応容器の改良 反応解析 (COMSOL Multiphysics)
 反応機構 / ガス流れ (ダルシー則) / エネルギーバランス / 質量バランス
 加熱管内の流れ場 (ナビエ・ストークス式) / 熱輸送方程式



青：本報告 緑：触媒のマテリアルズ・インフォマティクスで報告

©2021 KOBELCO RESEARCH INSTITUTE, INC.

2.1 触媒関連技術：各種物性評価

触媒の各種物性評価

分析項目	測定手法
比表面積	BET法
細孔分布、細孔容積	BET法、水銀圧入法
粒径分布	マイクロトラック法、篩い分け
圧縮・引っ張り・圧壊強度	圧壊強度測定装置
構成元素の定性・定量	蛍光X線
表面元素の定性・定量	X線光電子分光法 (XPS, ESCA, EXAFS)
元素分布	X線マイクロアナリシス (EPMA)
表面形状・組織観察	電子顕微鏡 透過型：TEM, 走査型：SEM
結晶形態	X線回折法 (XRD) 結晶構造確認
分子構造	固体核磁気共鳴吸収法 (FT-NMR)
元素分析	酸素気流中燃焼-赤外線吸収法、溶解後のIC等 C, H, N, O, S, Cl等

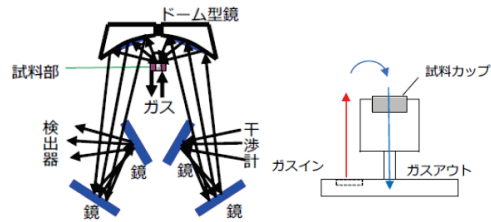
- 触媒活性と各種物性測定結果を評価して性能発現因子を明確化する。
- 劣化した触媒に対して各種物性を測定し、劣化挙動との関連性を評価し、劣化原因を検討する。
- 原料や触媒利用プロセス、設備の非正常運転を精査し、触媒の劣化原因との関連を明らかにする。

©2021 KOBELCO RESEARCH INSTITUTE, INC.

2.2 触媒評価技術：触媒挙動

触媒挙動評価

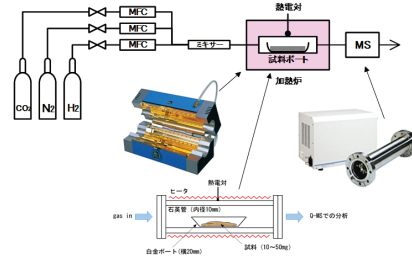
評価試験	測定手法
熱挙動解析	示差熱分析、熱重量分析 (DTA, TGA)
原子団、官能基同定	赤外分光光度法 (FT-IR)
酸・塩基特性、吸脱着特性	昇温脱離測定法 (TPD)
金属表面積測定	COパルス法



FT-IR 測定部

連続光を試料に照射し、干渉パターンをフーリエ変換して分子構造に応じた吸収スペクトルを測定して物質に含まれる原子団を検知
⇒原子団の変化を検知、劣化との関係の評価可能

©2021 KOBELCO RESEARCH INSTITUTE, INC.



TPD 試験装置

ある条件下で所定のガスを吸着させ、その後、条件を変更して脱離させ、吸着量や脱離挙動 (温度依存性等) を評価
⇒触媒反応の起点となる吸着挙動を解析

5

2.3 触媒評価技術：計算科学/シミュレーション

計算科学/シミュレーション

適用技術	計算手法	活用例
触媒活性種選定	機械学習を用いた材料探索	素反応、律速反応を考慮した活性種選定
反応容器設計	熱・流体シミュレーション	ガス流れ、吸熱・発熱を考慮した最適反応器設計
プロセス設計	プロセスシミュレーション	プロセス全体の熱物質収支を考慮したプロセス設計

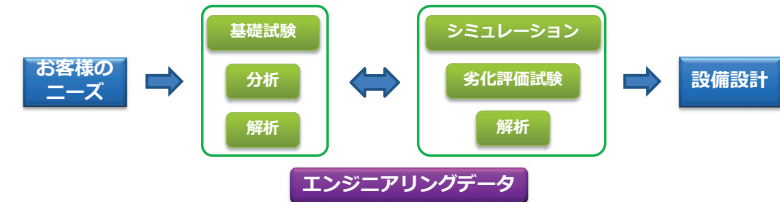
- 選定された材料の妥当性評価、触媒合成方法の検討、活性種担持方法の検討
元素(化合物)の溶解性、被毒物質の除去方法、高分散化、安定化
- 反応容器の形状検討、ガス流れの最適化、加熱・冷却方法の最適化
触媒充填方法、メンテナンス可能な形状
- プロセス全体の熱・物質収支の最適化

©2021 KOBELCO RESEARCH INSTITUTE, INC.

3. 触媒特性評価・物性・性能評価

お客様のニーズに合わせた各種物性測定や触媒評価試験を提案させていただくとともに、データの反応工学的な解析を行い、エンジニアリングデータを提供いたします。

また、その結果をシミュレーションに反映させ、装置設計の最適化もお手伝いいたします。



- ガス流通式試験と反応工学的な解析

吸着・吸収試験、各種環境での反応評価、触媒性能・劣化挙動評価

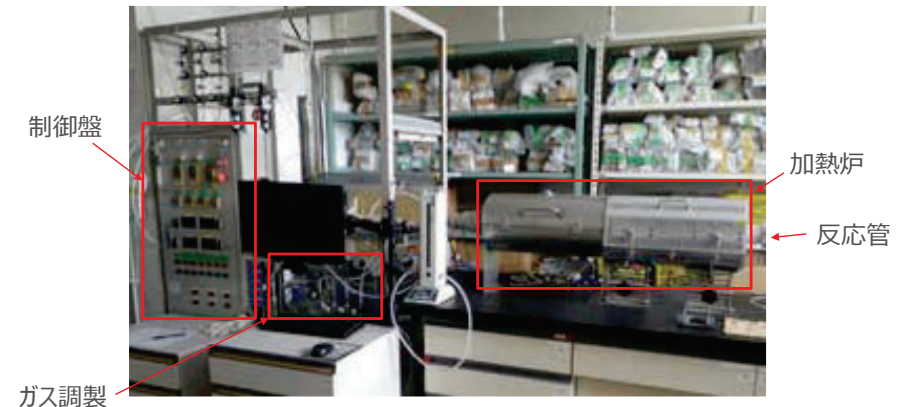
- 触媒・材料の劣化環境への曝露試験

高温・低温、恒温恒湿、腐食環境、腐食物質流通 等

©2021 KOBELCO RESEARCH INSTITUTE, INC.

7

4.1 触媒評価装置



脱硝触媒評価装置
ガス流量/組成/各種ガス濃度：実機相当

6

©2021 KOBELCO RESEARCH INSTITUTE, INC.

8

5.2 脱硝反応（アンモニアSCR）

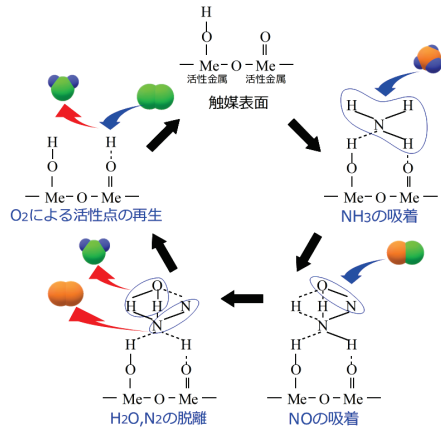


図 NH₃-SCR反応(脱硝反応)のメカニズム

表 各ガス除去率

ガス	入口 [ppm]	出口 [ppm]	除去率 [%]
NOx	150	15	90
NH ₃	136	1	99.3

低濃度NOx域でのNH₃の効率的な反応が重要
ガス流れ/濃度に分布あり
→ガス流れ/濃度に合致したNH₃の安定的な分配が必須



触媒：V-W/TiO₂

出典：JM HP
https://www.jmsec.com/air-pollution-solutions/selective-catalytic-reduction-scr/scr-catalyst-sinow-honeycomby

©2021 KOBELCO RESEARCH INSTITUTE, INC.

13

5.3 脱硝触媒の劣化メカニズム

劣化	原因	イメージ
① シンタリング 活性点減少	>400℃ 凝集 表面積低下 活性種変質	TiO ₂ → TiO ₂
② 活性点被覆	Na, K Ca, Mg 活性点減少	Me-O-Me → Na, K Me-O-Me
③ 活性点被覆	As 活性点減少	触媒表面 → D成分
④ 細孔閉塞	CaSO ₄ Al ₂ O ₃ ガス拡散阻害	触媒表面 → 触媒表面 閉塞成分
⑤ 表面被覆	SiO ₂ ガス拡散阻害	触媒表面 → 触媒表面 SiO ₂
⑥ 表面被覆	SiO ₂ + CaSO ₄ ガス拡散阻害	触媒表面 → 触媒表面 CaSO ₄ SiO ₂
⑦ 触媒結晶変化? 細孔閉塞?	表面積低下 活性点減少 ガス拡散阻害	TiO ₂ アナターゼ → K ₄ P ₂ O ₈ KTi ₂ (PO ₄) ₃
⑧ 触媒セル閉塞	クリンカ (石炭灰) セルの物理的な閉塞	触媒セル → 触媒セル

©2021 KOBELCO RESEARCH INSTITUTE, INC.

14

5.4 脱硝触媒劣化メカニズムの解明

- 触媒劣化特性を解析し、脱硝触媒性能予測式を作成した。
- 触媒劣化原因は触媒表面のシリカ層形成である。石炭特性の変化によって微細SiO₂が増加し、触媒表面に付着・層形成したと考えられる。

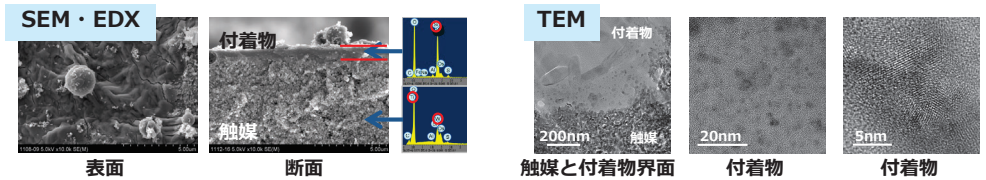
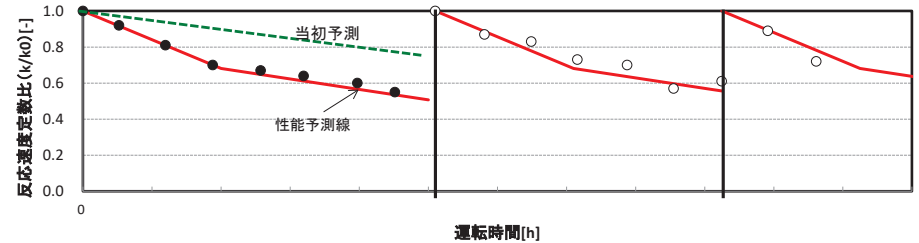


図 触媒表面のSEM像 (表面, 断面)
表面に約1μmの被膜(主成分:Si)

図 触媒と付着物のTEM像

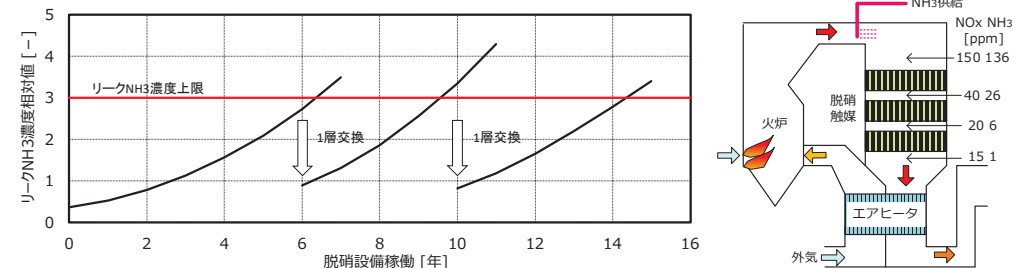
付着物:表面密着,一次粒子径<nm,結晶含有
粒子付着 or 気相析出物かは不明



©2021 KOBELCO RESEARCH INSTITUTE, INC.

15

5.5 脱硝触媒交換時期の予測



- 脱硝触媒の劣化挙動や層構造、ガス流れ等を考慮し、リークNH₃濃度を予測。
- リークNH₃濃度とエアヒータ圧力損失上昇の関係を把握し、リークNH₃濃度の上限（管理値）を設定し、脱硝性能を維持する触媒交換時期を予測。
- 触媒の劣化メカニズムや設備の経年劣化を考慮し、低劣化と推定する脱硝触媒仕様の決定と選定。

©2021 KOBELCO RESEARCH INSTITUTE, INC.

16

6. コベルコ科研の触媒関連技術

触媒例：自動車関連、排ガス処理、原料製造、改質等 CO₂関連

触媒を試作し、物性／特性を評価するとともに、メカニズムや性能発現因子を明らかにして基礎特性を評価します。

劣化した触媒の物性／特性を評価し、さらに使用環境（原料中の不純物、プロセス、稼働・停止などの非定常操作 など）を評価し、劣化メカニズムを明らかにするとともに、劣化抑制技術を提案させていただきます。



H₂、NH₃、CO₂等

©2021 KOBELCO RESEARCH INSTITUTE, INC.