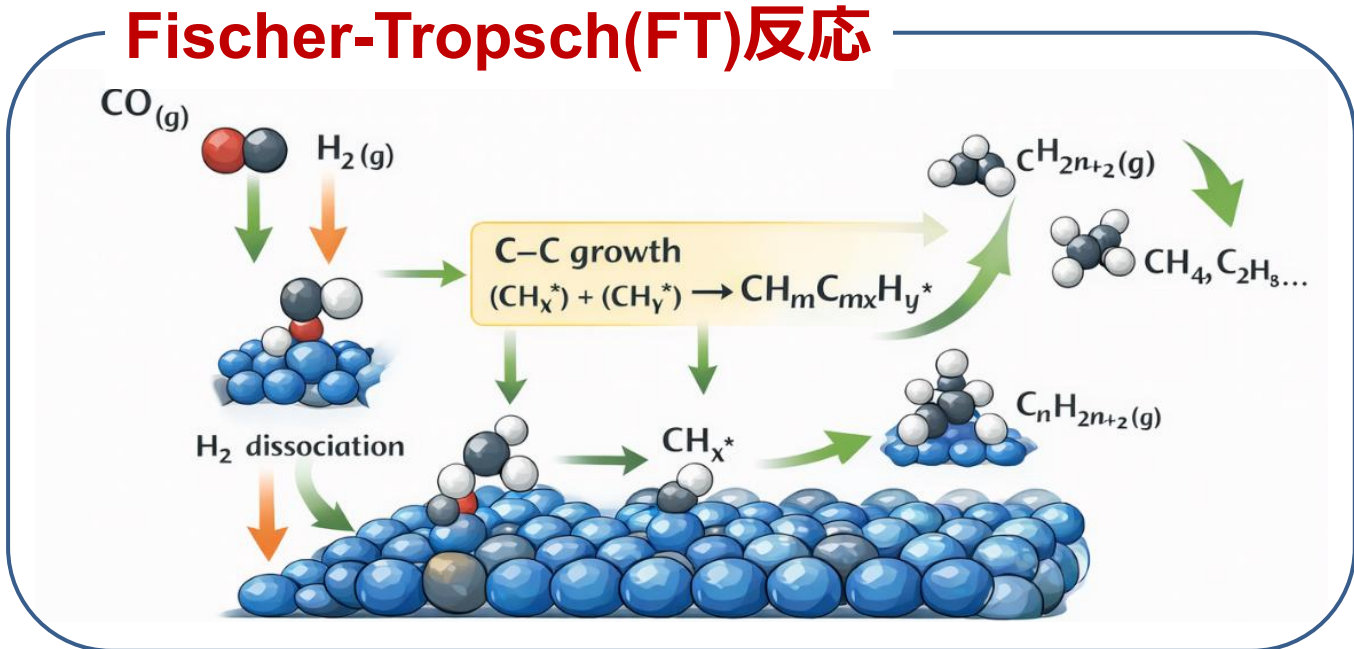


2026年度 JPECフォーラム

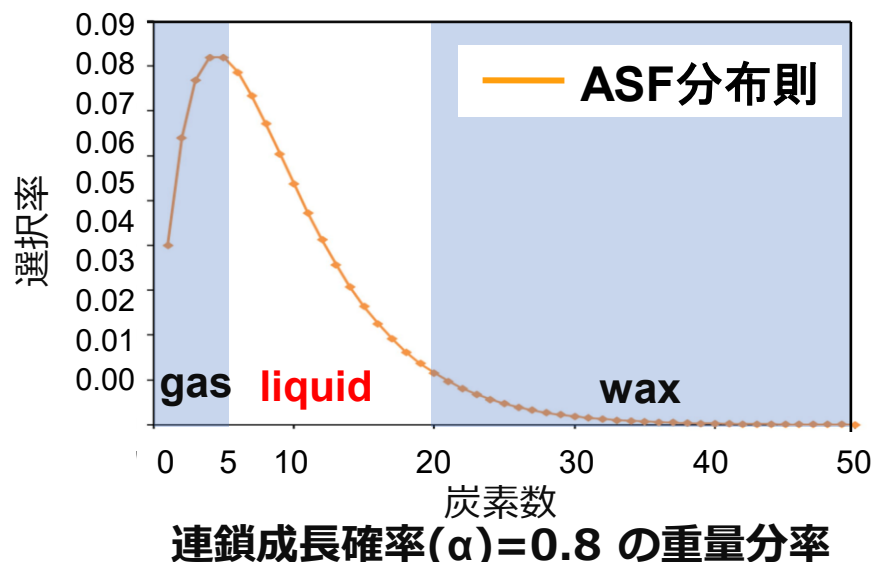
【17】合成ガスからの液体燃料への転換
～計算科学的手法による解析～

2026年5月12日

広島大学



生成物の炭化水素の重量分率は**Anderson-Schulz-Flory(ASF)分布則**に従う



液体炭化水素($\text{C}_{5\sim 20}$)の
収率を上げたい

- ガス成分の抑制
- wax成分の切断

詳細な反応機構の理解

代表的な計算科学的手法

分子シミュレーション

電子・原子(団)を単位として対象の物性や機能を調べるための手法

	古典力学	量子力学
定常状態	分子力学法(MM) 古典力学を用いて 最安定構造を計算	密度汎関数法(DFT) 量子力学を用いて 電子状態を計算
時間発展	分子動力学法(MD) 古典力学を用いて 原子の運動を計算	第一原理 MD 量子力学を用いて 原子の運動を計算

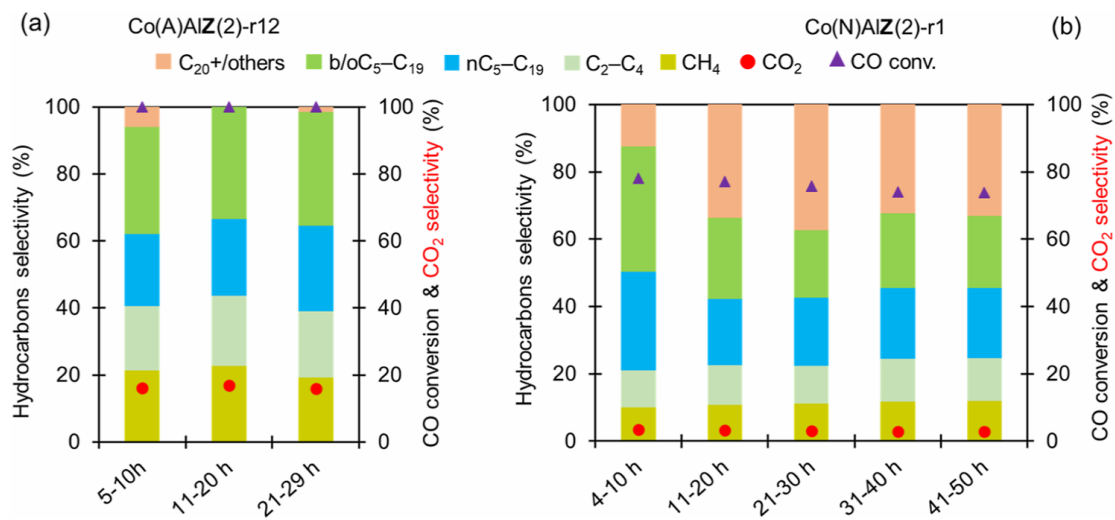


反応性MD・・・結合の生成・解離を評価可能
機械学習ポテンシャル(MLP)
反応性力場(ReaxFF)

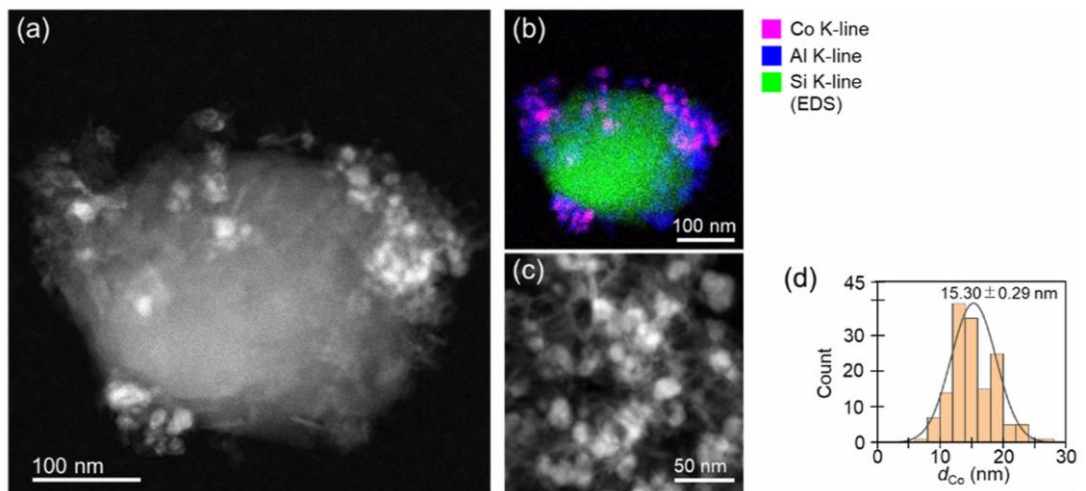
- ・ ガス成分の抑制(DFT)
Co表面でのCH₄生成抑制機構の解析
- ・ wax成分の切断(MD・反応性MD)
ゼオライト界面での動特性・反応性評価

Co表面でのCH₄生成抑制機構の解析

実験検証(名古屋大学) ACS Catal. 15, 11573 (2025).



触媒の調整時間により
CH₄生成量が変化

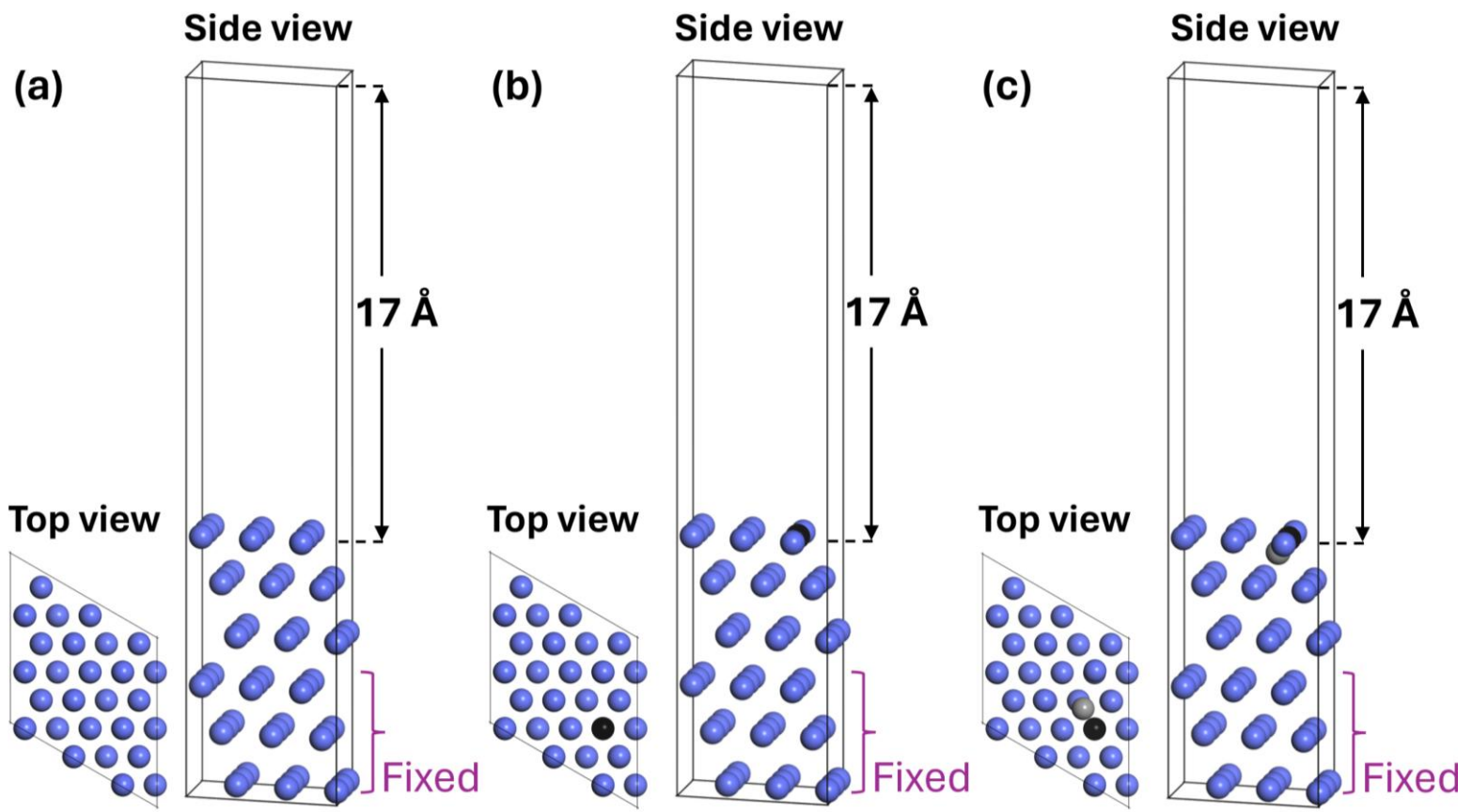


表面構造、表面付着物などの影響？
メカニズムの解明
→Co欠陥、炭素付着、
Co欠陥+炭素付着

DFTによる反応経路予測

Co表面でのCH₄生成抑制機構の解析

計算モデル



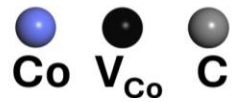
計算方法

計算プログラム：VASP

汎関数：PBE + D3

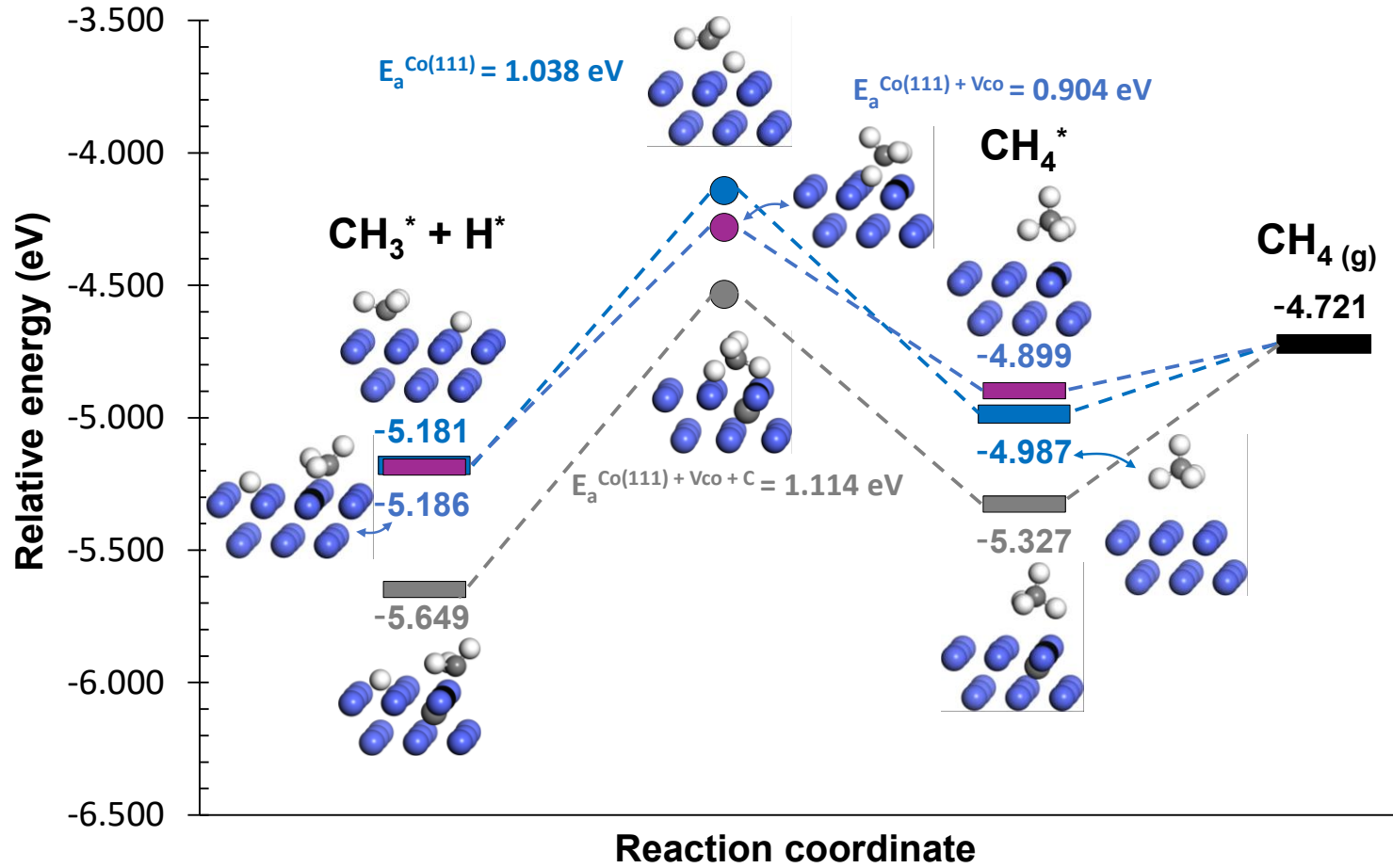
カットオフエネルギー：400eV

K-points：4x4x1



Co表面でのCH₄生成抑制機構の解析

計算モデル



- Co欠陥
- 活性化障壁の低下
- Co欠陥 + 炭素
- 活性化障壁が増大⇒CH₄生成抑制

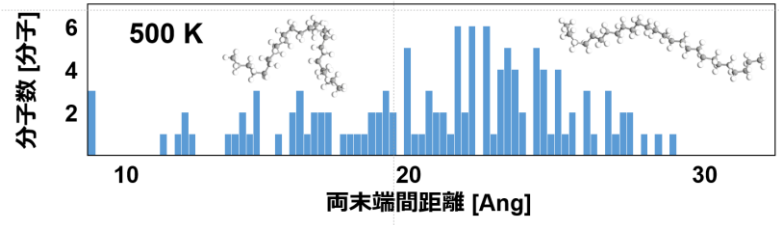
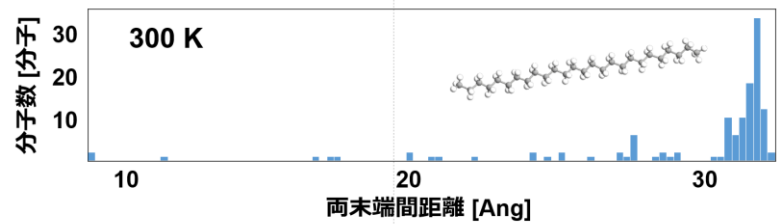
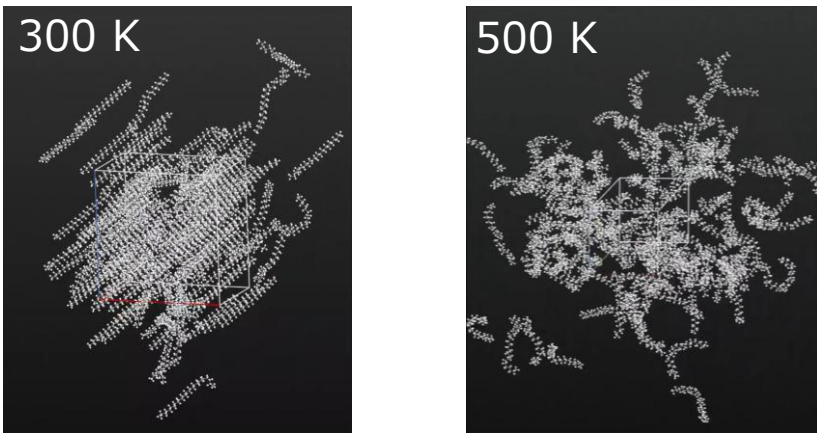
- ・ ガス成分の抑制(DFT)
Co表面でのCH₄生成抑制機構の解析
- ・ wax成分の切断(MD・反応性MD)
ゼオライト界面での動特性・反応性評価

ゼオライト界面での動特性・反応性評価

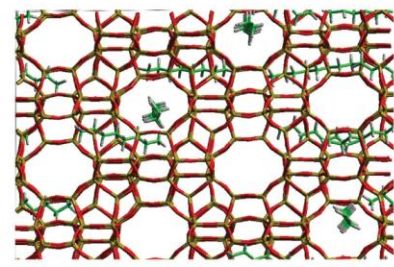
Wax成分の動特性

ゼオライト界面での挙動(古典MDによる解析)

C₂₆H₅₄の構造解析



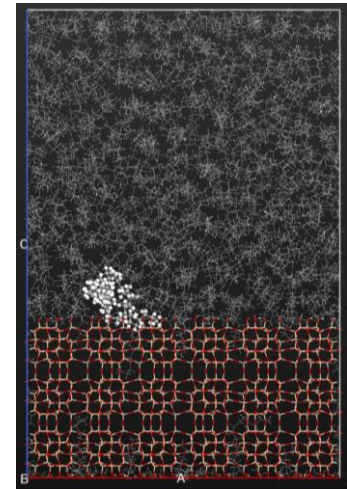
炭化水素の安定性、反応性、動特性 + ゼオライトとの(界面での)相互作用



ゼオライトの中での
拡散挙動がほとんど

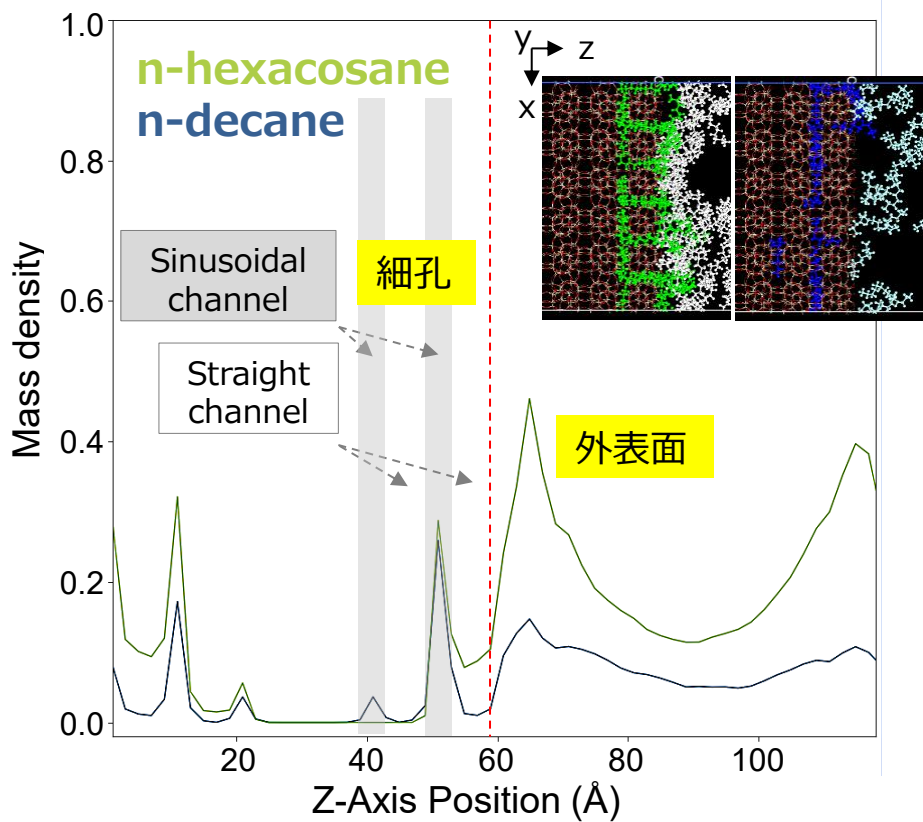
Phys. Chem. Chem. Phys.,
17, 1943 (2015).

計算モデル例



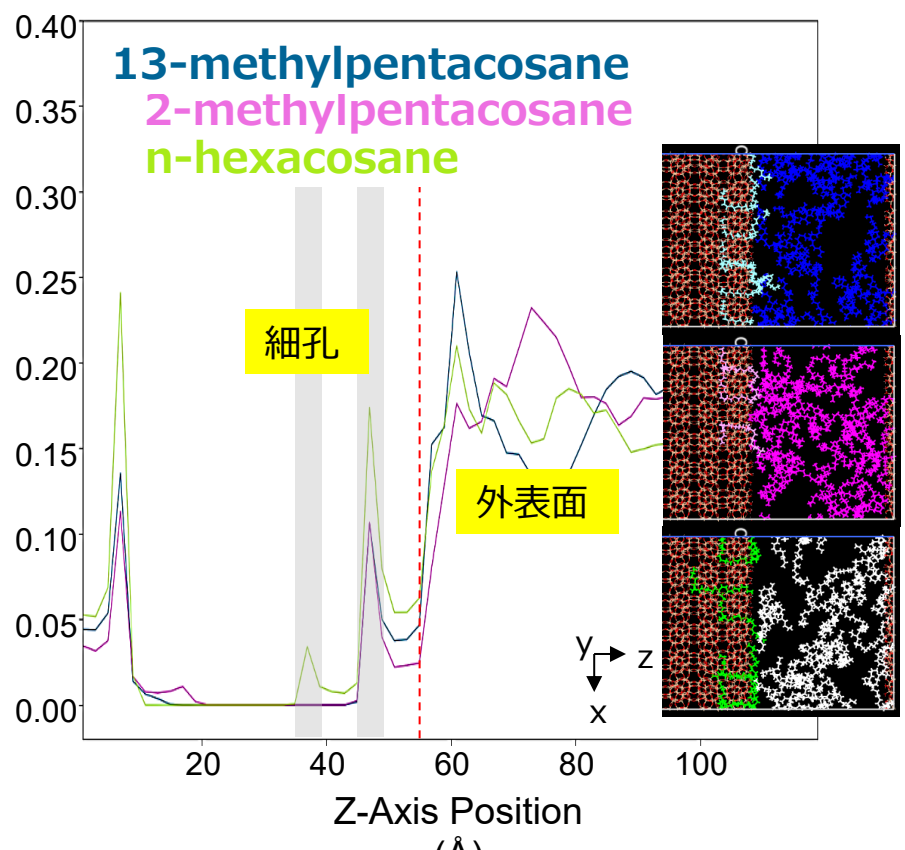
Material
zeolite: MFI (*)
SiOH-terminated
alkane: C₂₆H₅₄ (hexacosane)
density: 0.61 g/cm³ at 500K
cell size (600, 40, 90) (Å)
MD simulation
potential set: DREIDING
type: NVT Nose Hoover
temperature: 500K
steps: 500,000

分子鎖長の影響



n-hexacosaneの方が外表面に局在
 ⇒ 長鎖アルカンは細孔に入りきらない

メチル分岐の影響



メチル分岐があっても外表面配向性は保持
 中央メチル基は外表面への分布を促進
 末端メチル基は細孔、外表面への分布を抑制
 ⇒ メチル基の立体障害による影響か

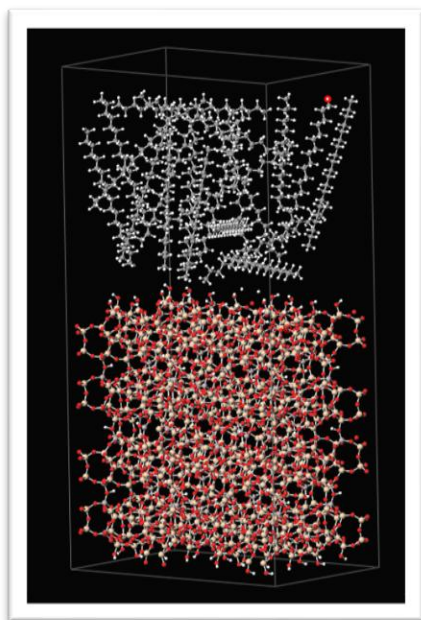
ゼオライト界面での動特性・反応性評価

Wax成分の動特性

ゼオライトによるC-C切断の反応性評価 (反応性MDによる解析)

結合生成・切断を再現可能な反応性力場ReaxFFの採用

作成モデル



MFI型ゼオライト
3640atoms

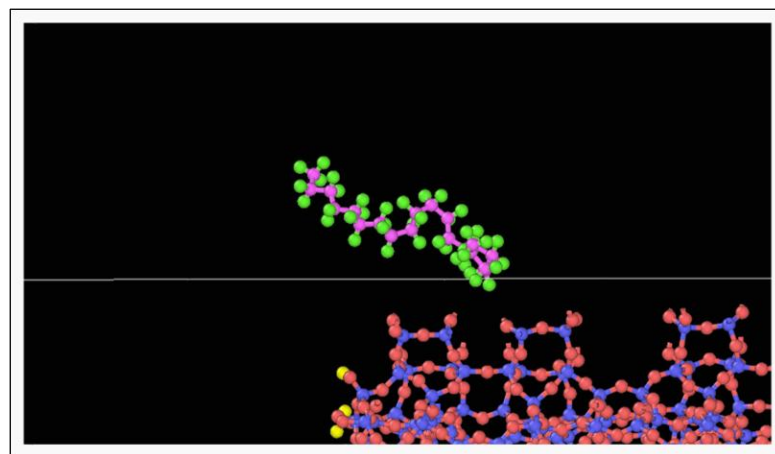
直鎖C20を20分子
界面に配置

三種のSi/Al比

Al free

Si/Al = 31 (= 774/24)

Si/Al = 15 (= 720/48)



↑ 動画

ゼオライト孔内のC20が解離する様子

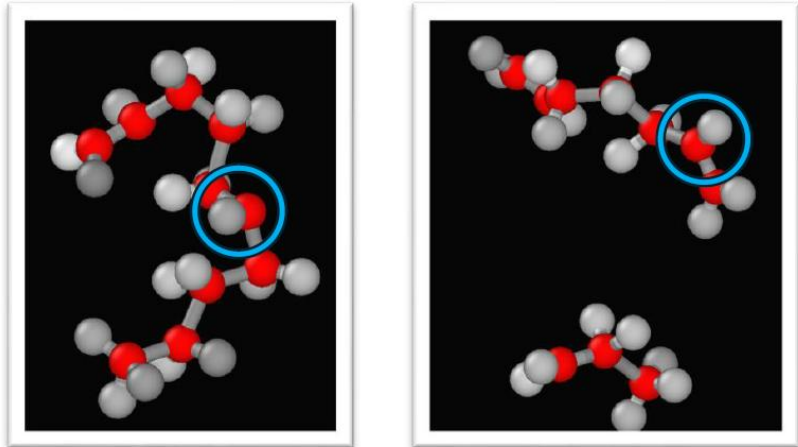
高温条件で十分な時間緩和することにより結合の解離を観察

ゼオライト界面での動特性・反応性評価

Wax成分の動特性

ゼオライトによるC-C切断の反応性評価 (反応性MDによる解析)

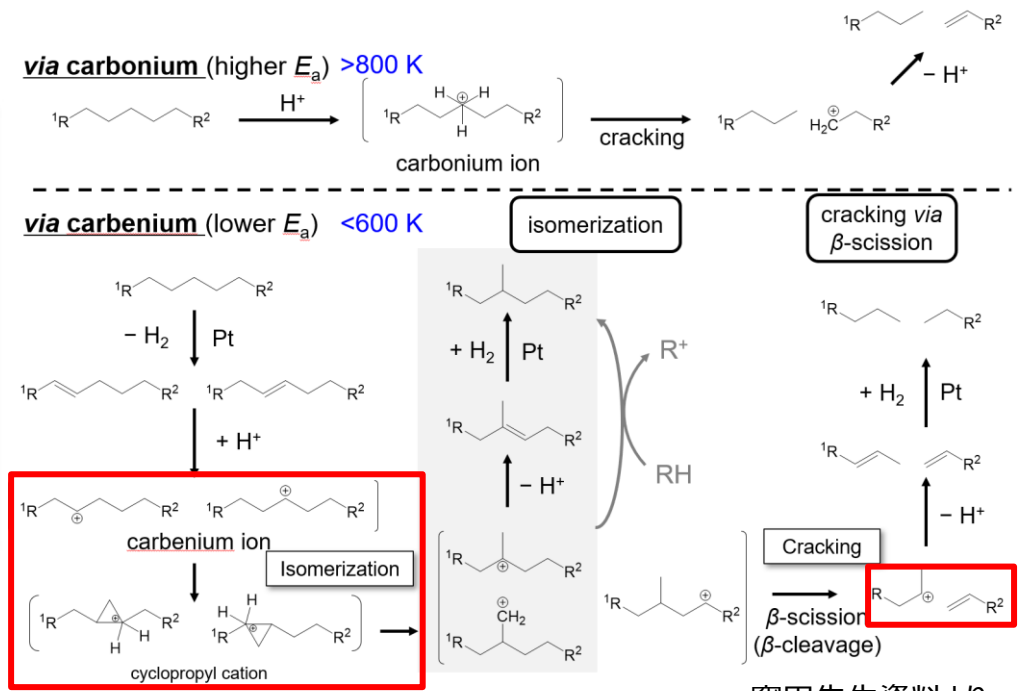
C-C結合解離前後の構造変化



Hを失ったのは6C
C-C結合切断は7 C-8C

同様の傾向を複数観測

量子化学計算を組み合わせた
より詳細な機構解析が必要



提案されているスキームの一部と類似

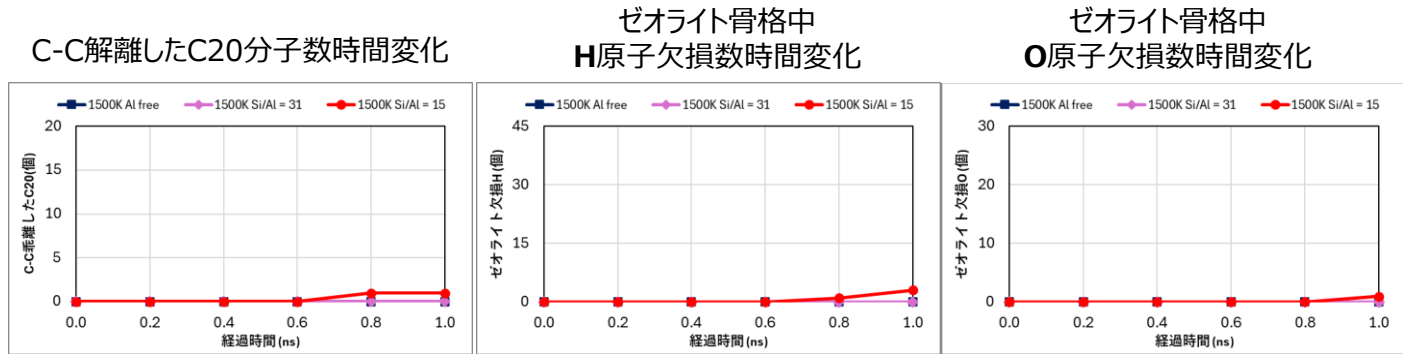
ゼオライト界面での動特性・反応性評価

Wax成分の動特性

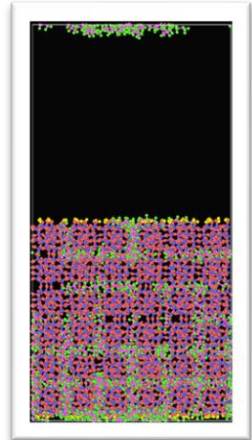
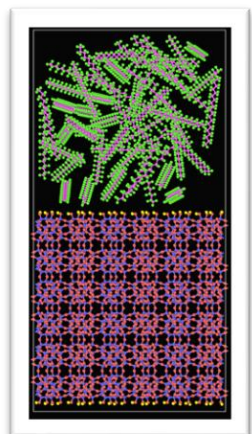
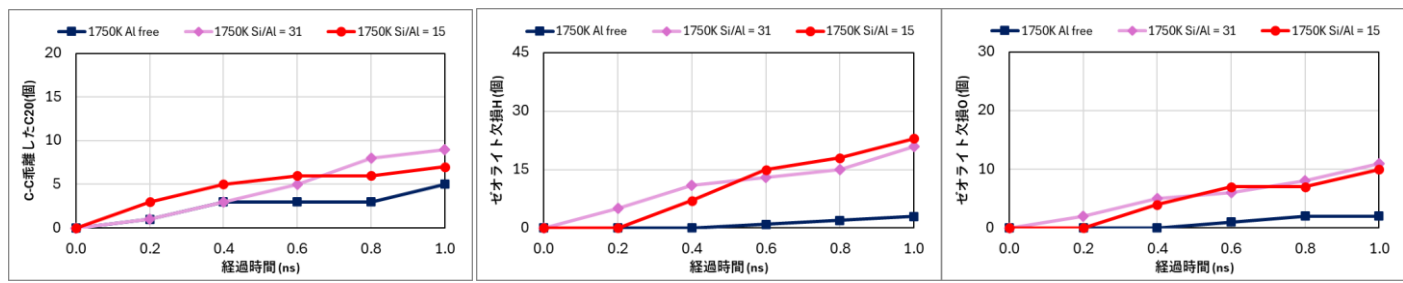
ゼオライトによるC-C切断の反応性評価 (反応性MDによる解析)

目的温度にて1.0 nsのNVTアンサンブルを実施

1500 K



1750 K



- Al置換無しゼオライトは崩壊しにくい
- 骨格中の原子欠損とC20分子のC-C解離は、同一温度条件下においてほぼ同時に起こる
→1500K~1750Kではもっと骨格崩壊を抑制しつつC20の解離が観察できる可能性

- ・ ガス成分の抑制(DFT)
Co表面でのCH₄生成抑制機構の解析
- ・ wax成分の切断(MD・反応性MD)
ゼオライト界面での動特性・反応性評価

計算科学的手法(電子状態計算・分子動力学計算)および機械学習を活用することで、原子・分子スケールでの現象理解が可能。実験研究と共同することで、課題克服に向けた設計指針の獲得が可能。

本発表内容は、国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の委託事業として行った研究成果である。ここに謝意を表する。