

Adsorption News

Vol. 34, No. 1 (April 2020)

通巻 No.132

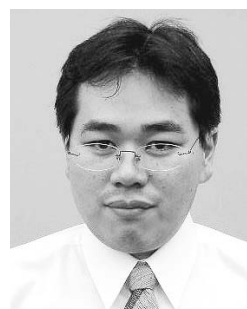
目 次

○巻頭言	2
「学会における実用プロセス企業の役割」	井上 宏志
○特別寄稿	3
「吸着学会事始め」	鈴木 基之
○学術賞受賞記念寄稿	7
「ナノ空間内吸着分子集団の不思議」	宮原 稔
○ホットトピックス	13
「プロピレン／プロパン分離を対象とした蒸留・膜分離・ 吸着分離のプロセス特性」	山木 雄大
○会告	20
第 34 回日本吸着学会研究発表会のお知らせ 第 30 回吸着シンポジウム（吸着夏の学校）開催のお知らせ	
○関連学会のお知らせ	22
○維持会員一覧	23

日本吸着学会
The Japan Society on Adsorption

学会における実用プロセス企業の役割

株式会社西部技研 井上 宏志



私が日本吸着学会に初めて参加したのは2004年の研究発表会ですので、かれこれ15年のお付き合いになります。吸着との出会いは社会人になってからで、無機材料メーカーに入社後、知識も経験もない中で、工場で何トンもの無機系消臭剤（白い砂）を製造していたことが原点になっています。何故、この白い砂で臭いがとれるのだろうか？臭いを取るメカニズムに興味を持ち、どうすればもっと大量の臭いを取ることができるのだろうか？そのためにはもっと学術的なバックボーンが必要だということで吸着の勉強を始めました。その後は吸着材をどのように使えば上手く用途展開できるか？ということに主軸を移し、実用プロセスをビジネスとしている現職で活動しています。前職の材料開発経験は、どんな材料を作ってほしいのか？と言う要望だけでなく、どんな材料ができそうか？量産の可能性はあるのか？なども見据えて材料メーカーと話すことができるので、現在でも大変役に立っています。

西部技研はハニカムに吸着材を融合させ、ガス中から水分、VOC、CO₂などを除去・濃縮するガス分離をコア技術として装置販売、ソリューションビジネス、サービス事業を展開している会社です。創業者の隈利實の時代から学会への参加も積極的で、吸着現象を利用した装置を世界展開して環境保全と省エネルギーに貢献していることが評価され、これまで日本吸着学会から様々な賞をいただいています。現在でも年間1件は研究発表会で発表することを心がけています。学会活動も積極的に進めていると言いたいところですが、ビジネスが拡大すると、企業であるがゆえに自由に学会活動する機会が制限されつつあるのが現状です。弊社は吸着がコア技術ですので、社員は定年まで吸着に携わることになり、吸着から離れられない立場にいます。しかしながら、吸着を外で学ぶ機会がどんどん失われていると最近特に実感しています。

ここ数年、研究発表会では実用プロセスの発表が少なくなっております。企業側も出席者同士の刺激を受ける場として研究発表会を活用したいのですが、現在は専ら情報収集の場として活用することが増えてきています。とはいえ、企業側が実用プロセスの発表をしないと学術側へのフィードバックが少なくなり、学術

側とリンクする機会がどんどん失われていきます。新規吸着材料が続々と提案・合成されている現在、実用プロセス側も従来にない考え方や柔軟性を持って吸着材料を活かすプロセス開発をしていかなければ、せっかくの吸着材が世の中に出ていきません。

実用プロセスの発表はビジネスに直結する内容が入るため、全てを公開することができず、公開したとしても特許出願後ということで、鮮度が落ちた発表になりがちです。企業は利益を追求するために存在していますが、一方で企業活動が社会に与える影響に責任を持つ必要があります。

2019年から2020年の冬は、記録的な温かさでした。毎年気候が変動していることは誰もが感じていることです。CO₂削減は誰しもやらなければならないこと、しかしながら、CO₂は価値の低いガス、CO₂を回収しても、CO₂削減のためのイニシャルコストとランニングコストを賄うことは現状難しいです。最近よく耳にするDirect Air Capture (DAC) 空気中からCO₂を回収・固定するとなるとさらにコストが合いません。一企業、一団体がCO₂の回収・固定をやっても進みません。日本吸着学会には材料側・プロセス側に豊富な人材がそろっています。学会の皆様の知識と技術を集結できれば、最適な技術開発ができると思っています。例えばCO₂削減という旗を上げて予算が付けば、企業側もCSRの一環として実用プロセスの発表ができると思っています。弊社には若手の活きのいい技術者がたくさんいます。学会を通じて企業側の技術者がレベルアップすることで、学術側へフィードバックできる人材が増え、吸着技術のさらなる向上につながると考えています。

氏名 井上 宏志

所属 株式会社西部技研 開発本部 開発本部長

略歴 1996年3月 静岡大学大学院農学研究科
修士課程修了

1996年4月 水澤化学工業株式会社入社

2003年7月 株式会社西部技研入社

2011年3月 九州大学大学院総合理工学府
博士後期課程修了、工学博士

2019年4月 現職

特別寄稿

吸着学会事始め

東京大学名誉教授 鈴木 基之



今回、日本吸着学会の名誉会員に推挙いただき、この機会に私と吸着の関わりやの始まりの流れや、本学会の誕生のいきさつなどの記憶を辿ってみたいと思います。多分、この頃のことを語る方も少なくなってきたのではと思うからです。ただ、非常に偏った記録になっていることをあらかじめお断りいたしておきます。

1. 生い立ち

私自身は、東大の工学部に化学工学科が設立された折の第一期生（1963年卒）で、わが国が重厚長大産業を基盤にした高度成長に邁進し始めていた時代でありました。卒論及び大学院では国井大蔵教授のもとで、固定層内の移動現象に関する研究を行い、複雑な熱・物質移動系のモデル化、技術論など多くのものを学びました。博士課程修了後は工学部助手を経て、東大生産技術研究所（生研）に講師として採用頂きました。生研では、河添邦太郎教授が吸着を中心とする化学工学研究室を主宰されておられましたが、私は間もなくCalifornia大学（Davis）へ博士研究員として渡米し、J.M. Smith教授のもとでクロマト法のモーメント解析を利用した固定層内の速度過程の解析などの手法開発にあたり、2年後に帰国、1971年から小さいながらも研究室を持たせて頂きました。生研は工学部と異なり、教官が独立した研究室を持つ仕組みで、何を研究の方向、対象として選ぶか、大いに考えさせられる時期を経験致しました。当時は、公害問題など厳しい状況で70年代の初めは環境庁も発足（1971）、国際的には国連環境計画（UNEP）の設立（1972）などもあり、公害・環境問題に対して化学工学はどのように寄与できるかに関心を持ち、当時の生研が取り組んでいた「都市災害・公害に関する研究」プロジェクトなどへの参加、さらに大学院後期にピークであった東大紛争の時期に、大学における工学研究のあり方などの激論の体験から、環境問題への取り組みを研究方向の核にしたいと思っておりました。生研が研究室制度を採用していたということは、若年の教員も研究費を自前で調達

することが求められますので、初めは大変でしたが、これも楽しみの一つと思うようになり、自立することの意味を学びました。

隣室の河添教授の研究室は、当時、電力会社などの大量に発生する燃焼排ガス中の硫黄酸化物除去のための活性炭触媒による乾式脱硫方式の開発や地下水からのヨードの回収などへの吸着の応用その他、実験室レベルから大規模プロセスへの展開という、まさに化学工学の真髓的なプロセス開発に取り組んでおられ、拝見していて大変刺激を頂きました。

当時、大気汚染と同時に水質汚濁の対策が喫緊の課題となっていました。私は、工場排水の処理、水道浄水プロセスなどにおける活性炭の利用に関心を持ち、水中の多様な有機汚濁成分を除去するためには活性炭が有効ということは既に明らかとなっていたものの、多種・多様な有機物を対象とするときに、どのような現象が吸着装置の開発上で支配的となるのか、また、使用後の活性炭の再生には何が主要因子となるのかなど、従来の経験知に対応する部分の基礎的な体系化が必要なのではないかと思い、まずは活性炭の水溶液吸着の基礎的な検討から始めました。

液系においては、吸着速度を支配するのは粒子内の拡散が主となります。有機物水溶液の活性炭吸着における粒子内の拡散においては、通常想定される細孔内の液相拡散に比して吸着状態の分子が吸着状態のまま粒子内部に拡散する「表面拡散」の方が支配的になると想定しました。多種の有機物水溶液について活性炭吸着時の粒子内有効表面拡散係数の測定を始めましたが、課題は、吸着平衡関係の非線形性、粒子流体間の物質移動抵抗などをいかに切り離すかで、籠型接触装置を用い、非線形吸着平衡下での回分吸着濃度変化の解析線図を準備することによりかなり精度よく表面拡散係数を算出することができました。結果、揮発性有機物の有効表面拡散係数が、有機物の沸点ときれいな相関が取れました。吸着状態の有機物が隣の吸着点に移動する際の活性化エネルギーが吸着熱に比例しているという仮説で説明がつくものです。

水溶液吸着で、かなり思い切った仮説でしたが、J. Chem. Eng. Japan への投稿論文は、化学工学会の論文賞を頂き（1975）、私の吸着デビュー作となりました。以降、高分子有機物の吸着、活性炭の再生、当時わが国で先進的に開発が進んでいた繊維状活性炭などに面白く取り組ませていただきました。これらの仕事の80年代までを纏めて、怖いもの知らずで、成書に残すことにし、Elsevier-Kodansha Scientific から Adsorption Engineering (1990) を上梓することができ、ホッとした気持ちでありました。

2. 吸着学会事始め

1980年代には、吸着分野の研究は化学会におけるコロイド界面部会、触媒学会、化学工学会、物理学会などでそれぞれ独自の価値観で研究に取り組まれており、いずれの分野でも独特のクラスターを構成していたのではなかったかと思われます。

米国における化学工学分野の学会、AIChEの年會では、吸着に関するセッションが常時持たれており、私は70年代の後期から大体参加しておりましたが、この間の交流がキッカケとなり、このグループから1983年ドイツのGarmisch-Partenkirchen (Elmau 城、後にG7の会場にもなる)で吸着に関する国際会議を開催する計画があり、私もプログラム委員として参画を求められました。Pennsylvania大学のAlan Myers教授とRensselaer工科大学のGeorges Belfort教授の共同議長の会議となりましたが、これが今に続く、「吸着の基礎」(Fundamentals of Adsorption, FOA)の第一回会議となりました。我が国からは、明治大学の竹内雍教授をお誘いし、小生と共に、ミュンヘンの空港からレンタカーでバイエルンのアルプス中腹、高度1000 mに位置する会場へと向かって頂いたのが楽しい思い出です。私は当時のテーマの内から、水溶液における活性炭粒子内の2成分系有機物表面拡散に関する発表を行いました。当時研究室で堀雅文君が仕上げた修論で、色々な方からコメントを頂き、想定外の質問もあり、吸着に関する多様な取り組みの世界を実感するものがありました。この会議の成功を受け、FOAは3年毎に開催することを約し、2回目はSanta Barbara (カリフォルニア)、3回目は再度ドイツのSonnhofen (ババリア)で持つこととなりましたが、この間、将来的には米大陸、欧州、アジア(日本)を順に巡って開催することとしようということとなり、第4回目(FOA4、1992)は日本で開くことの要請を受け、その可能性の検討や、国内の体制づくりの準備に入ることとしたのが1985年ころからでありました。

生研の高橋浩教授の下から、豊橋技術科学大学の教授になっておられた堤和男先生は、私と生研のほぼ同世代であったこともあり、まず相談をして、86年の11月に豊橋技科大で予定される中部化学関係学協会連合(通称「中化連」)で吸着に関する物理、化学、化学工学分野の共同シンポジウムを開催しようと企み、無事開催することができ、国内のice-breakingの機会となりました。

この折に、わが国で「吸着学会」を設立しては、という話もさせて頂き、翌87年1月末に少人数での相談を持たせて頂きました。化学工学協会から竹内雍先生、化学会関連では近藤精一先生、物理学会では高石哲男先生、若手(当時)として堤和男、鈴木喬(山梨大教授)、小生の6名が当時六本木にあった東大の生研において相談を行う機会を持ち、設立趣意書などを準備し、存じ上げている方々に発起人のお誘いをさせて頂き、無事、同年5月29日に、生研において設立総会を開催するに至りました。因みに、発起人に賛同いただいた方々は78名、内設立総会に出席いただいたのが40名、その内、民間企業からのご出席は12名であり、企業関係からも大いに期待を頂いていることが感じられた総会となりました。

初代会長は、高石哲男先生にお願いし、事務局は明治大学の竹内研究室、Adsorption News(本誌)を刊行することとし、その編集委員長を産業医学総合研究所の松村芳美氏にお願いすることで、日本吸着学会の最初のスタートを切ることとなりました。以来、第二代会長は明治大学竹内雍教授(二期)、第三代は京都大学岡崎守男教授、第四代は豊橋技科大の堤和男教授にお願いし、第五代を小生が務めさせて頂きました。以後、現在の松本明彦会長に至る16名の会長経験者、そして役員、事務局をお引き受けの方々、編集委員長、同委員を担当された方々の多大な労に敬意を表したいと思います。

3. FOA4までの道

さて、多くの期待を背に受けて、日本吸着学会は立ち上がりましたが、なんといっても、当面の目標は、1992年に日本で開催するFOA4の準備でありました。

FOA3は1989年5月にSonnhofenで開催されましたが、日本からも9名が参加しました。会議は150名を超える参加者が1週間を同一ホテルに缶詰めとなり、夜遅くまでの発表や音楽、Neuschwanstein城の観光など社交プログラムを含め、ババリアの山村の雰囲気をつぶり楽しみ、親交を深める場でありました。このFOAの会議の文化・態様を如何に京都の場で具体化するか、海外の期待も感じ、同時に知恵が試され

る感を持って帰国しました。

また、この頃から、FOA 参加者の間でも国際的な学会組織を構築しようという動きとなり、The International Adsorption Society (IAS) が誕生する準備に入りました。

日本吸着学会発足後、92 年までの間に FOA 3 の他にもいくつかの国際会議が持たれました。わが国に関連しても、吸着分野で目立った会議が持たれています。

1988 年 6 月には、IUPAC の関連会議として国際吸着シンポジウム (ISA) が大阪教育大学の近藤精一教授 (当時本会副会長) が中心となって開催され、会場の京大会館に入りきらないほどの参加者が集まり、Brunel 大学の K.S.W. Sing 教授など私の旧知の先生方も国際顧問委員として参加されました。

また、この頃、比較的小規模ではありましたが「日中米吸着会議」が、米国 Worcester 大学の Yi Hua (Ed.) Ma 教授が中心となって、中国の地で開催されていました。Ma 教授は台湾の出身ですが、中国の吸着研究を支援しようと、日米の研究者と共に中国にわたり、シンポジウムを開催することにより、互いの情報交流・親交を深めようとしていたもので、1988 年には杭州市の浙江大学、1991 年 5 月には、杭州郊外の千島湖で開催されました。中国側のホスト役であった浙江大学の呉平東教授は、私の研究室にも数か月滞在されことがあります。会議には日本から企業からの参加も含め 10-20 名の方が参加されました。

この第二回目の千島湖での会議に続く日程で、日本において FOA 4 の Scientific Advisory Committee を開催することを企画し、千島湖の会議にはこれらの方々にも参加いただいております。5 月の下旬に Alan Myers, D.M. Ruthven, K.K. Unger, E. Richter, Shivaji Sircar, Martin Bülow, K.S.W. Sing, G. Findenegg, Pingdong Wu (呉平東)、Hanju Lee, A.S. T. Chiang という錚々たるメンバーに FOA 4 の準備会合のためにということで、東京に集まって頂くこととなり、折角の機会となることから、これらの方々に、ほぼ同数のわが国のトップ研究者を配した豪華なシンポジウムを 2 日間にわたり企画し、「吸着分離の科学と工学」と称する生研シンポジウム (SEIKEN SYMPOSIUM) が出来上がりました。来日された方々には日光ツアーなどの息抜きも頂きながら、FOA 4 への結束を固めた機会となりました。

4. FOA 4、そして国際吸着学会 (IAS) 設立

いよいよ 1992 年には、京都において、FOA 4 が開催される段取りに入りました。会議の Scientific Advisory Board (SAB) とし て、上 記 SEIKEN

SYMPOSIUM に来日された方々に A.I. Liapis, J. Rouquerol, P. Townsend が海外からは加わり、国内からは竹内雍、近藤精一、堤和男 (いずれも敬称略) のご参加により、豪華な SAB が形成されました。

会議開催地の京都での準備は、京大の岡崎守男教授に色々アドバイスをいただきながら、京都ホリデインホテル (現存せず、当時、高野橋南側にあった) をほぼ借り切り状態で会議場とすることとなりました。

同伴されたご家族も楽しんでいただける見学ツアーには比叡山延暦寺訪問なども準備し、京都の町も皆様にお楽しみ頂いたものと思います。夜は希望者がいつまでも飲める部屋を準備するなど、実行に当たっては、生研の迫田章義助教授 (当時) が中心となって企画、準備に力を尽くして貰いました。

FOA 3 以降、東西の壁が崩れたこともあり、旧ソ連地域、ロシアからの若手研究者の参加など、流動的な面もありましたが、総勢 200 名を超えて、180 の論文が集まり、一週間の合宿形式で濃密な会議が持てたことが懐かしく思い起こされます。この会議の際に、国際吸着学会 (International Adsorption Society, IAS) が正式に発足し、初代会長には Alan Myers 教授を選出致しました。会長は 3 年任期とし、FOA 5 (Monterey, 1995, Douglas LeVan 教授が議長) において、私が第二代会長を仰せつかることとなりました。IAS は学会誌“Adsorption”を刊行することとなり、オハイオ州立大学の Kent Knaebel 教授に初代の編集委員長を引き受けて頂きスタートしました。会誌は vol. 1 (1995) は年 4 冊でしたが、現在は年 8 冊となっているようで、この分野の存在感を高めているのは喜ばしい限りです。

FOA の会議も 3 年周期で継続し、FOA 7、FOA 10 は日本で開催され、金子克美、宮原稔教授がそれぞれチェアマンを務められ、今日まで順調に進んでいるようです。

5. おわりに

吸着学会発足当時、吸着剤メーカー、装置エンジニアリング企業、吸着技術の応用により種々の問題解決を目指す多様な企業など、多くの民間各社のご協力を頂いたことを懐かしく思い起こします。吸着は、異相系の界面における現象で、多様な切り口による現象の発見、抽象化、一般化を経て、その現実社会における利活用に進んでいくことにより、ある段階での学としての完成形となるでありましょう。そこには、物理学、純正化学、応用化学、化学工学など現在の便宜的な学問分類に捕らわれることなく、人類を構成員とする地球生態系の持続可能な姿の構築に貢献できる総合的な

サイエンスの姿が見えると思います。

学会は、1987年にスタートし、いわば平成とともに進んできました。1990年前後は、国内外は大きく転換していく兆しを見せ、1989年にはベルリンの壁が崩壊し経済の一極化に向かい、天安門事件、湾岸戦争も起き、昭和の時代が終わり、バブルの崩壊、また、WWWの最初の公開に象徴されるIT化への予兆などが続きました。環境面では1992年にリオの国連環境開発会議でAGENDA 21が採択され、1988年に設立されたIPCCとともに、地球環境問題に対する認識が始まった頃です。

この頃から、約30年を経た今、新たな令和の時代には、どのように皆さんの意識は変わってきているのでしょうか。

世界の当面する課題、最大の課題は「持続可能性」です。有限な地球上で、この30年の間に総人口は1.4倍となり、経済活動の指標としての世界総生産（GWP）は2.5倍（実質）となっています。パンク寸前の地球にどう人類が対応するか、という問いに対しては、周知のごとく、温暖化に対するパリ協定、生存のためのSDGs(持続可能な開発目標)が、共に2015年に合意され、それぞれ2030年を一つの目標年として進もうとしています。これからの10年間で吸着グループは何を考え、何を主導するのが重要で、かつ面白いところでしょう。多様で優れた研究者、実社会

において多くの課題を抱えた関係者を包含した学会としての魅力を如何に膨らませ、結果として世界に、社会に貢献していくことが出来るかを考え続けることは、優秀な若い人々にとって第一のやりがいとなる筈です。

つい、色々と昔を懐かしんで紙数を使ってしまいました。FOA 4の折の集合写真を添付させていただきますが、ほぼ30年前の初期の吸着学会の熱気と神妙さを感じて頂ければ幸いです。この写真の内、何人かの大事な方々は既に、鬼籍に入られております。誠に残念で、この折に改めてご冥福を祈りあげます。

氏名 鈴木基之

所属 東京大学名誉教授

略歴 1968年3月 東京大学工学系博士課程修了(工博)
1969年9月 California 大学 (Davis) PD
1973年2月 東京大学生産技術研究所助教授
1984年9月 同教授 (−2001.3)
1991年11月 Veszprem 大学名誉学位 (DHC)
1995年4月 東京大学生産技術研究所所長 (−1998)
1998年4月 国際連合大学副学長 (−2003.3)
2003年4月 放送大学教授 (−2011.3)
2005年1月 中央環境審議会会長 (−2013.2)
2008年4月 東京工業大学監事 (非常勤) (−2014.3)



FOA 4 集合写真 (1992年5月20日京都ホリデイン)

学術賞受賞記念寄稿

ナノ空間内吸着分子集団の不思議

Peculiar Behavior of Molecules Confined in Nanospace

京都大学工学研究科化学工学専攻
Department of Chemical Engineering,
Kyoto University

宮原 稔
Minoru T. Miyahara

1. はじめに

大学院修士時代は、乾燥工学の権威であられた桐榮良三先生の研究室で、伝導伝熱のテーマで研究に取り組んでいた。修士修了後は、他の学生と同様に、当然のように会社に就職し、典型的な化学工学技術者として、ベンチ実験とプラント設計に取り組んでいた。吸着とは無縁だった。

しかし縁あって、桐榮先生の後を引き継がれた岡崎守男先生に、助手としての任用のお誘いを受け、そこから吸着現象とのつきあいが始まった。液相吸着の速度論と平衡論だった。これらに取り組んでいく中で、細孔内での分子集団の奇妙な振る舞いに、惹かれていった。「いったいこいつらはどんな環境にあってどんな振る舞いをしてるんだろう?」。たとえば、芳香族分子は活性炭細孔内では、分子容が吸着量増加に応じて小さくなっていくと推察できた。ナノ空間の不思議に興味を惹かれ、私の吸着研究者としてのキャリアが始まった。

なお、学生時代に私が最も苦手とした専門科目は熱力学だった。吸着現象の扱いに必須の学問。。。しかし、「何事か成らざらん」、いま、私は古典熱力学と統計熱力学の講義を担当している^_^;;)。学生諸君や若い技術者に言いたい。怖じ気づくな、若い君たちは「スポンジ」だ。必要なものをいくらでも吸収できる。いまの私には、もはや不可能なんだが。。。 (ToT)

2. 研究事例

前項でおおよそ言いたいことは言ったので、あとは適当にすっ飛ばしていただければ結構。以下には、ナノ空間内での相転移／相境界と、有機金属フレームワーク (MOF) の研究内容を概説する。

2.1 ナノ細孔内分子集団の相転移

ナノ孔での気液転移は、吸着等温線が鋭く立ち上がるため PSA 分離やヒートポンプ等に有用であり、ま

た、細孔径測定のための基礎知見である。さらに、固相への細孔内での転移現象は、吸着密度や分子の拡散速度に重大な影響を及ぼす。すなわち、これら三態相図の理解は、蒸留や晶析で相平衡 (気液平衡や溶解度) が必須であるのと同様、吸着分離操作の基礎として不可欠と思われるが、多くの因子が影響するがゆえに、その理解とモデル化は'90 年頃までは全く不十分であった¹⁻³⁾。

【相転移・相境界への取り組み】筆者が目標としたのは三相境界の解析的モデル化と検証である。しかしこれを実験との対照でなし得るか? 一般に多孔体は細孔径に分布を持ち、また、固体表面の引力エネルギーは不確定性に満ちている。かといって、これらを調節パラメータにしたのでは、どんなモデルも「合わせる」ことが可能であり、モデルの検証とはなり得ない。筆者がたどり着いた「実験」系は分子シミュレーションである。計算機に「設定」された細孔径や相互作用は厳密に既知であり、予測モデルの入力に任意性は存在しないため、双方の結果の比較がただちにモデルの可否を与える。この思想から、90 年代の早い時期から計算科学的手法を導入し、「現象を模倣する」のではなく、「解析的モデルの検証のための理想実験系」として活用しつつ、広範かつ系統的に研究を展開した。

まず、気液相転移 (毛管凝縮) の起こる臨界細孔径と蒸気圧の関係を与える Kelvin モデルが、ナノ領域では細孔径を過小評価することを、分子シミュレーションで明らかにするとともに、これを克服する新たなナノ細孔径推算モデルを構築し、理想実験系での検証に成功した⁴⁻⁸⁾。本凝縮モデルで工学的に重要かつ独創的な点は、Kelvin モデルが見落としていたナノ細孔特有の新たな「物性」とも言うべき「固体壁からの (吸着質間に比しての) 過剰ポテンシャルエネルギー」を発掘し、さらに実在系での同定手法を開発したことである。この極めて化学工学的なアプローチゆえに、種々の細孔幾何形状や物理化学的特性を持つ実在材料系に対して広範に適用可能な、工学的モデルとなし得ている。

一方、固液相転移に関する米国 Cornell 大学 (当時) の Gubbins 教授との共同研究では、それまで常識であった「細孔内で凝固点は降下する」という一般的認識⁹⁾を覆し、細孔壁の持つ親和性や幾何学的特性に応じて凝固点がバルク相より高くもなり得るという多様性があることを、世界に先駆けて実証するとともに、その機構の定量的モデル化に成功した¹⁰⁾。ここでは、前述の「過剰ポテンシャルエネルギー」という物性がもたらす「ナノ空間内分子集団の異常な高压状態」が謎を解く鍵であるという新たな概念を打ち立てている。なお、共同研究の場合に、「共同先の研究能力に依った高い成果」という利得を受けることがあり得るが、筆者の場合、それは当てはまらない。事実、筆者が凝

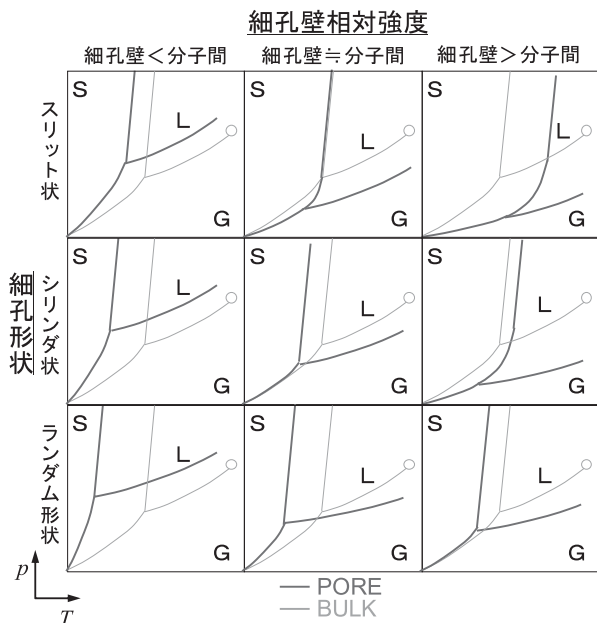


図1 バルク相図に重ねて表したナノ細孔内で生じる様々な相境界のp-T図。細孔壁の引力強度と細孔の幾何形状に依存しての多様性が俯瞰できる。

固点上昇の結果を示した際、Gubbins教授は、本人が何度か国際会議の講演で述べてくれたとおり、当初これを信じなかった。メカニズム解明とモデル構築・検証を以て、彼を納得せしめたのは筆者自身である。

その後、「飽和蒸気圧以下の細孔内負圧効果による凝固点降下¹¹⁾」「シリンダ状細孔内での幾何学的な凝固阻害¹²⁾」「細孔内三重点¹³⁾」および「気固転移(昇華)現象¹⁴⁾」と歩を進め、重要な鍵因子をそれぞれ単独でえぐり出し、解析することで、現象解明とモデル化を系統的に展開し、最終的に、三態相図のすべての相境界について、解析的モデルを理想実験系により検証することで、シミュレーションに依らない予測を可能とした。概念的にこれを示したのが図1であり、三態境界をすべて俯瞰できる。

まず上段のスリット状細孔では、壁引力が強いほど、気液境界は低压(下)へ、固液境界は高温(右)へシフトするとともに、吸着分子間と同等かそれより強い壁引力強度では負圧効果による曲がった固液境界線部分が発現する。一方、シリンダ細孔では、スリットと比して、気液境界はほぼ変化しない(「液体」に対しては幾何阻害は無視できるため)ものの、固液境界は幾何阻害により低温側へシフトする。秩序性がさらに失われたランダム形状空間では固液境界の低温シフトはより顕著となり、各々の細孔強度に対応して、下段のような相図となるであろうことが予想される。

2.2 MOFの吸着誘起ナノ構造転移

新規なナノ材料である多孔性配位高分子(PCP: Porous Coordination Polymer) [または有機金属フ

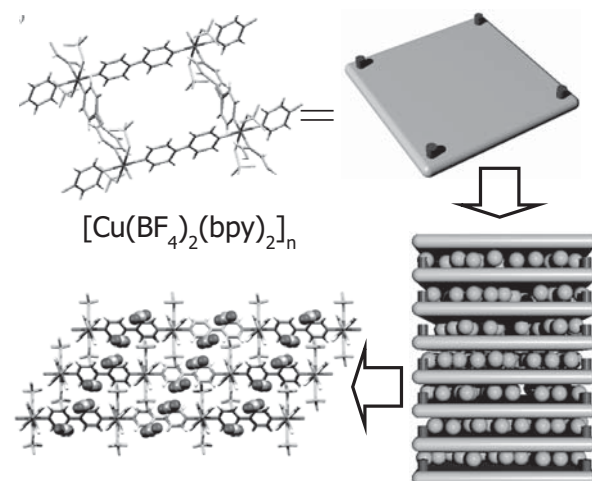


図2 MOFモデル化の概念: ELM-11での一例。まず原子構造をsmearした単純モデルで、転移機構と鍵物性を見出し、それに立脚してAtomistic系での現象解析や機構の検討・検証に進む。

レームワーク (MOF: Metal Organic Framework)] に関する研究も展開してきた。特に、ある気相圧において、結晶骨格に構造転移を生じて空間が生成することでゼロ吸着から飽和量近くまで等温線が立ち上がるという、分離・吸蔵操作に有望な現象に筆者は着目した。再び分子シミュレーションを理想実験系とし、独創的な経路積分に基づく自由エネルギー解析により、構造転移の鍵が「骨格構造変化のペナルティ (自由エネルギー増加)」と「ゲスト分子吸着の安定化度 (同減少)」という2つの「物性」であって、これらのバランスにより構造転移の生じるバルク気相圧が決定づけられるという機構の解明に成功している。この際に筆者がとった戦略は、図2のように、①まず必要最小

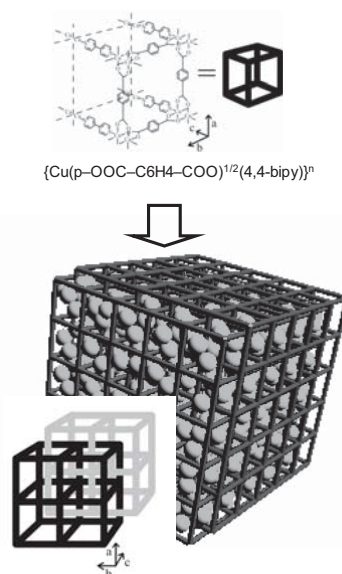


図3 相互貫入型ジャングルジム多孔体のユニットセルと吸着スナップショット (左下: 相互貫入のイメージ図)。

限の物理を包含する「単純モデル」によって転移機構と鍵物性を見出し、それに立脚して、②詳細な Atomistic モデルでの検討・検証を行う、という流れである。未知の現象ゆえに、いきなり②に取り組んでも徒労に終わりがかねない。メカニズムを見出して初めて②に進むことができよう。

2.2.1 機構解明へのアプローチ

この課題に対し著者ら¹⁵⁾はまず、典型的な第三世代骨格の一つであり、図3に示すような「相互貫入ジャングリズム (JG)」型の MOF7) を題材に、分子シミュレーションを活用した自由エネルギー解析により、吸着誘起構造転移の機構解明を行った。

ここで目指したものは、カチオンや配位子の詳細なモデル化による実験結果の mimic ではない。Atomistic な分子シミュレーションを持ってしても、現状の力場パラメータの不十分さにあっては、「実験と合いました／合わせました」程度に留るような、工学的には価値のない結果を得るのみであろう。ナノ柔軟空間の本質的な特徴を見出し「予測手法」への展開を図るには、骨格の詳細な原子構造には拘泥せずに(むしろ捨て去り)、現実系の特徴を有しつつもできるだけ単純化したナノ空間モデルによって、本質的機構とその支配因子を抽出することが重要と考える。

上記の観点から、図3の例では「柱」を 12-6 型 Lennard-Jones (LJ) 分子からなる一本鎖として、またゲスト分子も LJ でモデル化している。なお、骨格とゲスト分子は、その運動の時間スケールがはるかに異なるため、双方の運動を直接に取り扱うような試みは破綻する。我々はこの困難を、一種の熱力学的経路積分法に基づき、大正準系の自由エネルギー (Grand Potential) $\Delta\Omega$ を JG の相対位置 (ずれの度合い) に対するマップとして得ることで克服した。

すなわち、ある気相圧下で、種々の JG の相対位置に対して各々 Grand canonical Monte Carlo (GCMC) シミュレーションを行い、それらの経路積分により自由エネルギーマップが定まる。これを種々の相対圧下で行った結果が図4である。低圧下では、吸着分子が入れない相対位置 (JG が相互に「ゆったり」接して

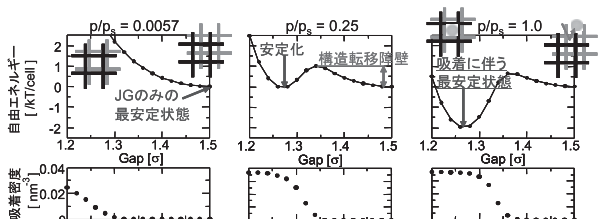


図4 二つの JG 間のずれ (Gap) に対する自由エネルギープロフィール。Gap=1.5 は中央 (対称) 配置を意味する。下段は各 Gap における吸着密度。相対圧増加に伴い最安定位置が入れ替わることで構造転移が生じる。

いる状態) が最安定だが、圧力の上昇に伴い、ゲスト分子を受け入れ可能な相対位置が、JG 骨格同士の接触斥力で不安定であるもののゲスト吸着による安定化の利得を得て第二極小を生じ、さらに高圧では bi-stable 状態 (すなわち熱力学的平衡点) を経て、ついに極小値の大小が逆転し、吸着空間を生み出す構造転移を発生し得ること、すなわちゲート効果が発現することがこれらの自由エネルギーマップから証明された。また、極小間には熱的に有意な高さのエネルギー障壁が存在しており、これがゲート効果に伴う顕著なヒステリシス現象の起源であることも示されている。したがって、観測される等温線は例えば図5のようになる。さらに、柱の太さ、細孔径、相互作用強度などの主要因子が与える転移挙動への効果を多く見だし、転移機構モデル化に向けての貴重な知見を蓄積した上で、解析的予測モデルの構築にも成功した。

すなわち、これら多くのシミュレーション結果は、全て空間の特性値から理解及び予測が可能であり、本成果は、ナノ多孔性 MOF への吸着における格子構造転移と低圧吸着ヒステリシスに向けて、独創的理解を与える機軸となり得ると考えている。

以上の検討に引き続き、筆者らは、ゲート効果を示す MOF のうち、二次元的なレイヤーが積層した「スタックレイヤー」型を対象とした単純化構造モデルの構築と構造転移挙動の解析を試みた。詳細を以下に述べる。

2.2.2 スタックレイヤー型の解析

スタックレイヤー型は北川らの合成する CID、CPL シリーズ¹⁶⁾や金子らの ELM シリーズ¹⁷⁾など種類が多く、また相互貫入系と比べ大きな拡散速度と吸着量が期待され、その挙動解析には工学的意義が高い。また、その構造転移時には、相互貫入系では生じなかった結晶体積の変動が伴う。実在系では、MIL-53 を代表例とするブリージング型¹⁸⁾も含めて体積変動が伴う

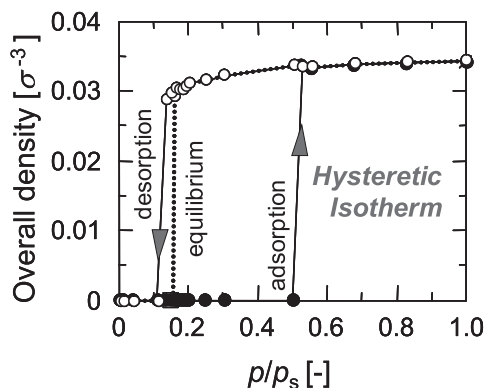


図5 自由エネルギー変化から求められた吸着等温線。平衡位置は自由エネルギーマップの双安定条件で決まるが、構造転移に障壁が存在するため、ヒステリシスを伴うゲート効果が現れている

MOF が多く、この様式の構造転移解析のための自由エネルギー解析手法を構築することが重要と考えた。

2.2.3 シミュレーションモデルと自由エネルギー解析^{19,20)}

スタックレイヤー型 MOF の中で単純な構造を有する ELM-11¹⁷⁾ をベースにモデルを構築した。先の図 2 に示したように、二次元の骨格構造を一様な平板とし、レイヤーから突出したアニオンをピラーとして表現した。この平板を多数積層した構造転移前の最近接レイヤー間隔 h_{close} はピラーの高さによって決定され、後述の通り、転移圧を変動させ得る重要なパラメータである。

積層構造転移のタイムスケールは吸着分子の運動よりも遥かに長く、そのダイナミクスの直接シミュレーションは困難である。そこで本研究では相互貫入 JG 系で開発した自由エネルギー解析法を、体積変動系に拡張して用いた。これは自由エネルギーを決定づける主要な二つの状態量であるレイヤー間隔 h と化学ポテンシャル μ との種々の設定のもとで、対応する各吸着状態を GCMC 法でシミュレートし、 h や μ やの変分に対する定積変動系での自由エネルギーの変化量 $\Delta\Omega_{\text{OS}}$ を求める熱力学的積分法の一つである。

本系では、JG 系と同様に、ある μ 系のもとでの種々の h に対するシミュレーション結果から、(1) 式により式 $\Delta\Omega_{\text{OS}}$ 対 h のマップが得られる。

$$\Delta\Omega^{\text{OS}}(h; \mu) = - \int_{h_{\text{close}}}^h f \, dh \quad (1)$$

ただし、上式中の膨潤応力 f は、体積変動があるため、f-s 間と s-s 間の二つの作用力 F のみからなる JG 系に加えて、f-f 間の寄与と平衡気相圧 p^{bulk} を含む次式によらねばならない。

$$f = \frac{\langle F_z^{\text{fs}} \rangle}{A} + \frac{\langle F_z^{\text{ff}} \rangle}{A} + \frac{F_z^{\text{ss}}}{A} - p^{\text{bulk}} \quad (2)$$

詳細は省略するが、 f の定義に基づけば他にも、f-f 間と f-s 間のポリアルから、あるいは吸着分子密度分布を用いても決定可能であるが、これらが同一の結果

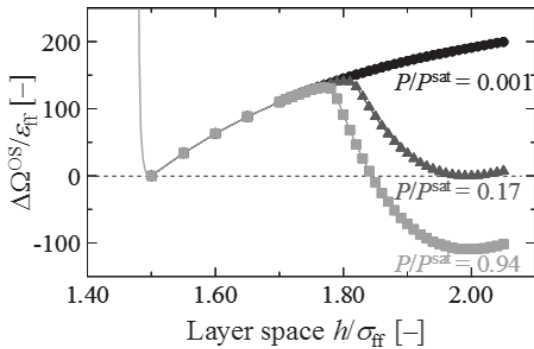


図6 数種の相対圧についての、層間距離に対するグランド自由エネルギーマップ： $h_{\text{close}} = 1.50 \sigma_{\text{ff}}$ at $T^* = 0.8$

を与えることは、我々によって詳細に確認済みである。

上記の方法は正当ではあるものの、種々の μ 値×種々の h 値という、膨大な数の分子シミュレーションを実行せねばならず、計算コストが非常に高い。一方、もしも転移後のレイヤー間隔 h がおよそ予測可能であれば、その h における $\Delta\Omega_{\text{OS}}$ 対 μ の変化から、すなわち、一本の吸着等温線に相当する比較的少ない数の GCMC 結果に基づいて、次式により、相転移挙動を簡便に解析可能である。

$$\Delta\Omega^{\text{OS}}(\mu; h) = \Delta F_{\text{host}} + p^{\text{bulk}} V - \int_{-\infty}^{\mu} N(\mu) \, d\mu \quad (3)$$

ここで ΔF_{host} は、 $\mu = -\infty$ すなわち $p^{\text{bulk}} = 0$ においてレイヤー間隔を開くに要する仕事であり、 h が既知ならば s-s 間相互作用からただちに定まる。なお、本法が(1)式によるものと同一の結果を与えることも、すでに検証済みである。

2.2.4 膨潤型構造転移とヒステリシスの解析結果

温度 $T^* = 0.8$ 、 $h_{\text{close}} = 1.50 \sigma_{\text{ff}}$ の条件下で(1)、(2)式により求めた $\Delta\Omega_{\text{OS}}$ 対 h のマップが図6である。層間に作用する引力により、各層はピラーと接触する距離で安定化する ($h = 1.50 \sigma_{\text{ff}}$)。この層間距離は、層自体の厚みを除いた実質的な空間としてはおよそ $0.5 \sigma_{\text{ff}}$ にしかならないので、どのような気相圧でもゲストは受け入れられない。しかし、およそ1分子ほどの実質空間を提供できる $h \approx 2 \sigma_{\text{ff}}$ 近傍で、圧力により以下の顕著な変化が生じる。

低相対圧の時には、s-s 間引力に逆らってレイヤーを開いたとしても吸着量が極めて少ないため、系は不安定化するのみだが、圧が上がれば分子吸着による安定化ゆえに第二極小を生じ、 $P/P_{\text{sat}} = 0.17$ において、閉じた状態と自由エネルギーが等しい bi-stable 状態、すなわち熱力学的平衡状態になることが分かった。さらに圧力を上げるとレイヤーを開いた場合のほうが安定となる。すなわち、平衡論的には、本系は低相対

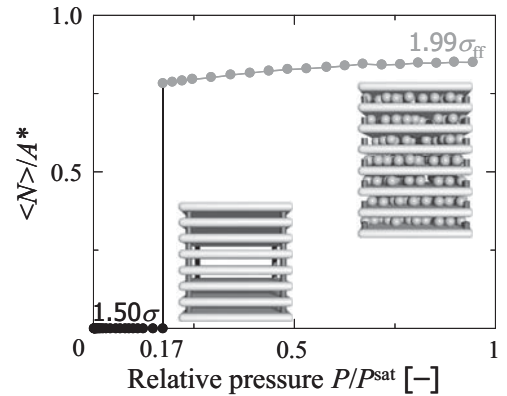


図7 自由エネルギー解析から定まったゲート型吸着等温線：bi-stable な自由エネルギーを与える相対圧でステップ変化が生じる

圧条件下では $h = h_{\text{close}}$ に留まる一方、 $P/P_{\text{sat}} = 0.17$ において $h = 2.0 \sigma_F$ の状態へと変化することが明らかとなった。これに対応する吸着等温線は図7となり、典型的なゲート効果を表現している。

以上の結果より、スタックレイヤー系でのゲート効果が、JG系と（見かけは異なるものの）本質的には類似であって、骨格の構造不安定化と分子吸着による安定化のバランスとして発現することが明らかとなり、また吸着量に不連続点が生じることからも、ゲート効果が、連続的に進行する過程ではなく、一次の相転移であることが明らかとなった。

実在系 MOF の吸着等温線はしばしばヒステリシスを伴っており、これは図6に現れているエネルギー障壁に起因するものと考えられる。この高さは構造転移の活性化エネルギーと捉えることができる。すなわち、有限の時間で、もしこの高さを越えられないならば、構造転移はこの平衡点では生じないこととなる。一方、圧力を上げると吸着／ゲート open の活性化エネルギーは小さくなり、逆に圧力を下げると脱着の活性化エネルギーが小さくなる。このようなヒステリシスの議論はここでは省略するが、既発表論文^{19, 20)}を参照いただければ有り難い。

2.2.5 主要な支配因子による転移様式の俯瞰

スタックレイヤー型 MOF は、レイヤーを構成する金属カチオンと有機配位子、そしてレイヤーから突出したアニオンの三種の要素から構成され、これらの要素をチューニングすることによって構造転移挙動を様々に変化させ得るが、そのチューニングと挙動変化の相関は明らかでない。

構成要素のチューニングによる変化は、吸着空間のポテンシャル場変化とゲート吸着前後の構造変化に寄与するはずで、複雑である。しかし大括りに考えれば、アニオンのチューニングで初期レイヤー間距離を変えることができ、レイヤー中の有機配位子によって相互作用を変えることができる。本モデルにおいて構造を指定する変数はレイヤー間隔 h_{close} と相互作用パラメータと ϵ_{ss} であり、それぞれアニオンと有機配位子のチューニングを近似的に表現するものと理解できよう。残る要素である金属カチオンはレイヤー内結合の「硬さ」の変化を担い、ゲスト分子包摂時の構造を変化させると捉えられるが、シンプルさ故に本モデルでは金属カチオン変化に対応付けられる因子はなく検討は及んでいない。しかし、このようなシンプルモデルは、単純がゆえに、多孔体構造と構造転移圧の関係に多くの示唆を与え得たと考える。

なお、本研究に引き続き、ELM-11 について、X線解析に基づく Atomistic モデルを構築し、吸着特性の原理解明や応用について顕著な成果を得ており、報告論文²¹⁻²³⁾を参照いただければ有り難く拝する。

3. おわりに

計算科学はもはや「汎用ツール」だが、例えば等温線が「合う／合わない」といった「実験結果の説明」に留まる論文が見られる。筆者のアプローチは全く異なり、シミュレーション結果の解析を基に、鍵となる「未知の物性」を見出し、汎用性のある「解析的モデル」を構築してきており、工学の精神に則したものと考えている。

また、第三世代 MOF が示す吸着誘起構造転移の機構解明と設計指針への展開には「骨格の構造不安定化と分子吸着による安定化のバランス」という視座が重要であることを、我々が開発・発展させた手法—分子シミュレーションに基づく自由エネルギー解析—によって示してきた。強調したいのは、非常に単純な相互作用系と構造系において、吸着誘起構造転移が生じ得るという事実である。

近年、この類の MOF 材料開発は極めて活発で、配位カチオン、配位リガンド、カウンターアニオン、構造構成態様、等々、極めて多数にわたる検討の報告があり、個性のみを重視して競うかのように見える。たしかに、これまでに無い組み合わせで新種の構造体を作り出す試みは大切であろう。しかし、我々も同様に「個性」に注目していたのでは「Chemistry」の域を出ず、我々の目的たる「Engineering」には達し得ない。Engineering で必要なのは、違って見える物質・事象の中に何らかの共通性を見出し、できるだけ適用範囲が広くて、少なくとも半定量的な、望むらくは定量的なモデルを構築し、併せて、物質ごとの個性を適切に表現する主要な支配因子を抽出して、予測・設計手法へと昇華させることであろう。

我々はこの視点から、あえて現実系から離れ、単純なシステムでの検討を行い、基礎的機構と重要な支配因子のいくつかは少なくとも見出してきた。さらにそれを踏まえ、Atomistic な分子シミュレーションの活用を展開しており、複雑な構造を持つ柔軟 MOF の構造転移挙動について、単純系の理解に立った支配因子の抽出法—いわば、「個性」の定量的同定手法—を模索しつつ、予測モデル構築を経て、所望の機能を発現する柔軟 MOF の合理的な設計指針の構築を目指している。

【補遺：いまと近未来】従来の吸着剤にない MOF の特異性を活用すれば、選択的分子分離、大容量の分子分離や貯蔵、高速操作などが可能と予想されるが、ステップ的あるいは S 字型の等温線ゆえに、凸型を前提とした従前の操作論や設計論では歯が立たない場面も多々あり得る（例えば定型濃度分布は成立するのだろうか？）。これらを解決し工業的応用を図るべく、また、MOF 関連に限らず、実用技術が望まれる領域の活性化のために、日本吸着学会内で「実用化技術 PJ

委員会」が立ち上がった。現在は具体的な研究領域を検討する段階であるが、いくつかの領域が定まれば、ぜひ何らかの Fund を得ての、学会ベースの共同研究を目指している。中堅・若手の活躍を期待し、また、興味のある会員各位には、年齢・経歴を問わず、ぜひ参画を願いたい。

【謝辞】共に研究した各位（敬称略）に深謝いたします。

●博士学生（多くの修士・学部生も無論ながら）：岩崎訓、吉岡朋久、神田英輝、渡邊哲（現スタッフ）、杉山隼人、山本大吾、三野泰志、沼口遼平、大崎修司、平塚龍将、平出翔太郎（現スタッフ）、新井希、藤原篤史、坂中勇太。

●スタッフ：田中秀樹。

●留学ホスト：Keith E. Gubbins。

●恩師：桐榮良三先生、岡崎守男先生、東谷公先生。

【参考文献】

- 1) P.B. Balbuena and K.E. Gubbins, *Fluid Phase Equilib.*, **76**, 21(1992).
- 2) S. Jiang, C.L. Rhykerd and K.E. Gubbins, *Mol. Phys.*, **79**, 373 (1993).
- 3) C. Lastoskie, K.E. Gubbins and N. Quirke, *J. Phys. Chem.*, **97**, 4786 (1993).
- 4) T. Yoshioka, M. Miyahara and M. Okazaki, *J. Chem. Eng. Japan*, **30**, 274 (1997).
- 5) M. Miyahara, T. Yoshioka and M. Okazaki, *J. Chem. Phys.*, **106**, 8124 (1997).
- 6) M. Miyahara, H. Kanda, T. Yoshioka and M. Okazaki, *Langmuir*, **16**, 4293 (2000).
- 7) M. Miyahara, T. Yoshioka, J. Nakamura and M. Okazaki, *J. Chem. Eng. Japan*, **33**, 103 (2000).
- 8) H. Kanda, M. Miyahara, T. Yoshioka and M. Okazaki, *Langmuir*, **16**, 6622 (2000).
- 9) 例えば J.A. Duffy, N.J. Wilkinson, H.M. Fretwell, M.A. Alam and R. Evans, *J. Phys. Cond. Matter*, **7**, L713 (1995)；古くは W.A. Patrick and W.A. Kemper, *J. Chem. Phys.*, **42**, 369 (1938)など。
- 10) M. Miyahara and K.E. Gubbins, *J. Chem. Phys.* **106**, 2865 (1997)
- 11) M. Miyahara, H. Kanda, M. Shibao and K. Higashitani, *J. Chem. Phys.*, **112**, 9909 (2000).
- 12) H. Kanda, M. Miyahara and K. Higashitani, *Langmuir*, **16**, 8529 (2000).
- 13) H. Kanda, M. Miyahara and K. Higashitani, *J. Chem. Phys.*, **120**, 6173 (2004).
- 14) H. Kanda and M. Miyahara, *J. Chem. Phys.*, **126**, 054703 (2007).
- 15) S. Watanabe, H. Sugiyama, H. Adachi, H. Tanaka, M.T. Miyahara, *J. Chem. Phys.*, **130**, 164707 (2009)
- 16) S. Horike, D. Tanaka, K. Nakagawa, S. Kitagawa, *Chem. Commun.*, 3395 (2007)
- 17) H. Kanoh, A. Kondo, H. Noguchi, H. Kajiro, A. Tohdoh, Y. Hattori, W.-C. Xu, M. Inoue, T. Sugiura, K. Morita, H. Tanaka, T. Ohba, K. Kaneko, *J. Colloid Interface Sci.*, **334**, 1 (2009)
- 18) C. Serre, F. Millange, C. Thouvenot, M. Noguès, G. Marsolier, D. Louër, G. Férey, *J. Am. Chem. Soc.*, **124**, 13519 (2002)
- 19) R. Numaguchi, H. Tanaka, S. Watanabe, M. Miyahara, *J. Chem. Phys.*, **138**, 054708 (2013).
- 20) R. Numaguchi, H. Tanaka, S. Watanabe, M. Miyahara, *J. Chem. Phys.*, **140**, 044707 (2014).
- 21) H. Tanaka, S. Hiraide, A. Kondo, M. T. Miyahara, *J. Phys. Chem. C*, **119**, 11533 (2015)
- 22) S. Hiraide, H. Tanaka, M. T. Miyahara, *Dalton Trans.*, **45**, 4193 (2016)
- 23) S. Hiraide, H. Tanaka, N. Ishikawa, M. T. Miyahara, *ACS Appl. Mat. Interfaces*, **9**, 41066 (2017)



宮原 稔
京都大学
工学研究科 化学工学専攻

1985 年 3 月 京都大学大学院工学研究科修士課程化学工学専攻修了（在学中 83／8－84／7 文部省派遣留学生：米国 Wisconsin 大学化学工学専攻）
1985 年 4 月 住友化学工業
1987 年 1 月 京都大学工学部助手（95／8－96／7 文部省在外研究員：米国 Cornell 大学化学工学専攻）
1997 年 12 月 京都大学工学研究科助教授
2004 年 10 月 京都大学工学研究科教授 現在に至るこの間
2011 年 4 月 化学工学会材料・界面部会長
2013 年 5 月 国際吸着学会会長
2014 年 8 月 日本吸着学会会長
2015 年 4 月 化学工学会関西支部長 など

ホットピックス

プロピレン/プロパン分離を対象とした 蒸留・膜分離・吸着分離のプロセス特性

Process Characteristics of Distillation, Membrane Separation, and Adsorption Separation for Propylene/Propane Separation

産業技術総合研究所 化学プロセス研究部門
Research Institute for Chemical Process Technology,
AIST

山木 雄大
Takehiro Yamaki

1. はじめに

COP25 に代表されるように二酸化炭素排出量の削減が喫緊の課題であり、産業分野においてもより一層の対策が求められている。我が国の産業分野における二酸化炭素排出量に着目すると、鉄鋼業から最も多く、その次に多いのは化学産業である。この化学産業では、約 40% が分離プロセスから排出されているとの報告もある^{1,2)}。分離手法としては、蒸留が数多く用いられている。蒸留は混合物を分離するために加熱と冷却の操作が必要であり、加熱や冷却のユーティリティの生成にともない二酸化炭素が排出される。二酸化炭素排出量削減のためには、蒸留プロセスのエネルギー消費量の削減が重要である。

化学産業においては、石油のみならず、天然ガスや石炭、バイオマスなどを原料とした化学品製造への展開も進められている。例えば、基幹化学品の一つであるプロピレンの製造プロセスに着目すると、現在主流のナフサの熱分解反応や、メタノールからプロピレンを合成する Methanol to olefin (MTO) 反応、そして、プロパン脱水素反応などが提案されている。現状では MTO 反応やプロパン脱水素反応で得られるプロピレン濃度は、ナフサの熱分解反応で得られるプロピレン濃度よりも低いケースが多い。混合物中のプロピレン濃度の低下は、蒸留プロセスのエネルギー消費量の増加につながる。そのため、蒸留プロセスのさらなる改良やエネルギー消費量が少ない新規な分離プロセスの構築が必要である³⁾。

蒸留とは異なる分離方法として、膜分離や吸着分離

がある¹⁾。膜分離は各成分の膜の透過速度差を利用した速度差分離であり、化学プロセスに適用可能な耐久性と高い分離性能を有する分離膜の開発が進められている。吸着分離は吸着材への物質の吸着量や吸着速度の差を利用した方法である。混合物から目的成分を選択的に分離できる吸着材が開発されており、水処理や溶剤回収、酸素／窒素分離、アルコールの脱水などに適用されている⁴⁻⁶⁾。プロピレンのような基幹化学品の製造プロセスへの膜分離や吸着分離の適用も検討が行われているが、全ての蒸留プロセスを代替するには分離材のさらなる性能向上が必要である。また、膜分離や吸着分離はスケールメリットが得づらいことから大量処理が必要なプロセスの代替は不向きである。そこで、蒸留プロセスの特徴は活かしつつ苦手とする部分を膜分離や吸着分離でアシストすることで、プロセス全体での高効率化を図ることが重要である。複数の分離手法を組み合わせたプロセスはハイブリッドプロセスと呼ばれており、近年では、膜分離と蒸留のハイブリッドプロセスに関する研究などが進められている⁷⁾。化学産業に適用可能な分離手法の選択肢が増えることで、様々な分離の条件に応じた省エネルギー分離プロセスの設計が期待できる。しかしながら、現状では個別の分離プロセスの省エネルギー性の議論はされているが、蒸留・膜分離・吸着分離のエネルギー消費量を網羅的に比較した検討はほとんどない。各分離手法がどのような条件でどの程度の省エネルギー化が図れるのか明らかにできれば、プロセス設計だけでなく分離材開発の指針になると考えられる。そこで本稿では、プロピレン／プロパン混合物の分離を対象として、蒸留・膜分離・吸着分離のプロセス特性についてプロセスシミュレーションにより検討を行い、各分離手法の省エネルギー化のポテンシャルを明らかにする。

2. モデリング

2.1 前提条件

プロピレンの合成方法として、ナフサの熱分解反応、MTO 反応、プロパンの脱水素反応を対象とした。それぞれの反応により得られるプロピレン濃度は次の 4通りとした：98 mol%（熱分解反応を想定）、90 mol%（MTO 反応を想定）、60 と 30 mol%（脱水素反応を想定）。混合物中のプロピレン流量は一定として、上記のプロピレン濃度になるようにプロパン流量を変更した。製品規格として、生産量は 1430 kmol/h、プロピレン濃度は 99.5% 以上（ポリマーグレード）、回

収率は99.5%以上とした。また、混合物の供給圧力は2040 kPaとして、製品プロピレンは1850 kPaで回収するとした。これは、現行のエチレンセンターにおけるプロピレンの製造プロセスの条件を想定したものである。

2.2 蒸留プロセス

図1に、蒸留プロセスの概略を示す。ここでは、従来の蒸留塔と蒸気再圧縮型蒸留塔（Vapor Recompression Column: VRC）を対象とした。

従来の蒸留塔においては、混合物が蒸留塔の中間段に供給され、塔頂からプロピレン、塔底からプロパンが回収される。製品規格を満たすために、混合物中のプロピレン濃度に応じて、混合物の供給段、還流比（コンデンサで凝縮させた液のうち、蒸留塔に戻す流量と留出液として抜き出す流量の割合）、リボイラ（蒸留塔の塔底で蒸気を生成するための加熱器）の加熱量を調整した。

一方、VRCにおいても、混合物の供給方法とプロピレンとプロパンの回収方法は、従来の蒸留塔と同じである。VRCはリボイラの加熱の熱源として蒸留塔の塔頂から排出される蒸気の蒸発潜熱を利用する。蒸留塔内の温度は、一般的に、塔底よりも塔頂の方が低いため、塔頂蒸気をそのまま加熱の熱源として利用することはできない。そこで、ヒートポンプの原理を応用して、圧縮機を用いて塔頂蒸気の温度を塔底よりも高温にしている。VRCにおいては、製品規格を満たすために、混合物中のプロピレン濃度に応じて、混合物の供給段、還流比、圧縮機動力を調整した。

設計条件として蒸留塔内の段数はいずれの条件においても230段（一定）とした。なお、後述するハイブリッドプロセスにおいても同じ段数を適用した。蒸留プロセスの計算の一部は、汎用プロセスシミュレータPro/II（Ver 9.4）を用いて行なった。

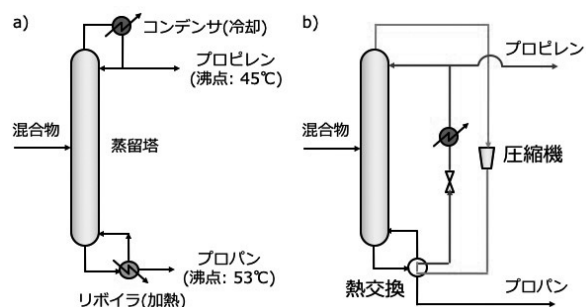


図1 蒸留プロセスの概略：a) 従来の蒸留塔、b) 蒸気再圧縮型蒸留塔

2.3 膜分離プロセス

図2に、プロピレン／プロパン分離を対象とした無機膜の透過度と分離係数の一例を示す。ここでは、プロピレンを選択的に透過する分離膜を取り上げている。分離膜の材料やその製造方法により性能が異なり、分離係数（プロピレンとプロパンの透過度の比）が100に近い性能を有する材料も報告されている⁸⁾。成膜技術の改良により、さらなる分離性能の向上が期待される。

上記を踏まえて、膜分離プロセスのモデリングを行なった。図3に、膜分離プロセスの概略を示す。ここでは、膜分離1段と2段を対象とした。膜分離1段においては、プロピレンは透過流れから回収される。一方、膜分離2段においては、1段目の膜の透過流れが2段目の膜に供給される。膜分離の透過側圧力は供給側圧力よりも低圧で操作されるため、未透過流れは圧縮機により昇圧される。2段目の膜の透過流れからプロピレンが回収され、未透過流れは1段目の膜にリサイクルされる。

膜分離プロセスの計算を行う上で、膜分離は等温、圧力損失は無いものと仮定した。また、膜の分離性能の濃度依存性も無視できるとした。膜の分離係数は100とした。操作条件として、透過側圧力と供給側圧力の比は0.098一定とした。なお、後述するハイブリッドプロセスにおいても同じ条件を適用した。

2.4 吸着分離プロセス

オレフィン／パラフィン分離を対象とした吸着材として、M-MOF-74やZIP-8などが提案されている⁹⁾。これらの吸着材において興味深い点は、吸着質が異なることである。破過曲線において、M-MOF-74を用いた場合はプロパンが先に流出し、一方、ZIF-8を用

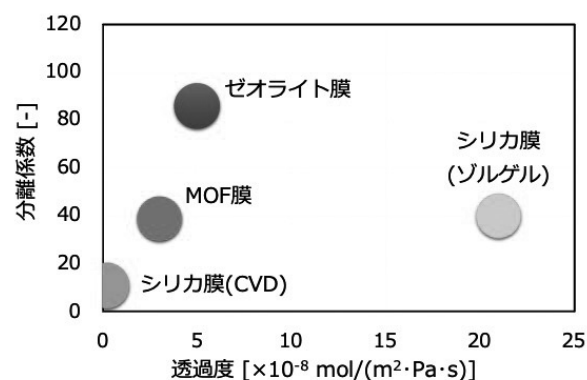


図2 プロピレン／プロパン分離を対象とした無機膜の透過度と分離係数

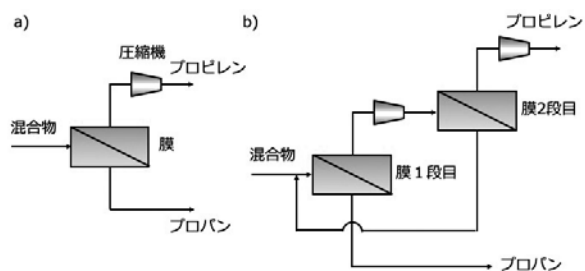


図3 膜分離プロセスの概略：a) 膜分離1段、b) 膜分離2段

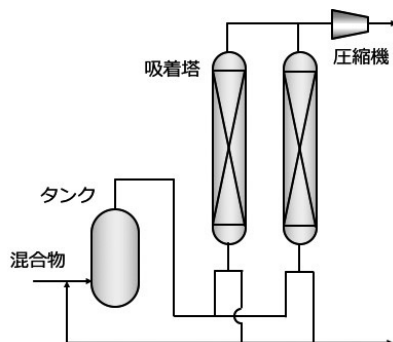


図4 吸着分離プロセスの概略

いた場合はプロピレンが先に流出することが報告されている。これは、プロセス設計の選択肢を増やせることを示唆している。

上記を踏まえて、吸着分離プロセスのモデリングを行なった。図4に、吸着分離プロセスの概略を示す。ここでは、流通式での分離を想定し、2塔の吸着塔で構成される。一方の吸着塔で吸着分離し、他方の吸着塔で吸着材の再生を行うとした。

吸着分離プロセスの計算を行う上で、プロピレン吸着材 (M-MOF-74 を想定) の分離係数 (プロピレンとプロパンの吸着量の比) は 1.7、プロパン吸着材 (ZIF-8 を想定) の分離係数は 0.7 とした。分離係数は破過曲線に基づいて算出した値である。また、参考にした吸着材の分離性能は 100 kPa で評価されたものである。そこで、吸着塔も 100 kPa で操作されとした。そのため、製品プロピレンの圧力を満たすために圧縮機を用いて昇圧している。吸着材の再生方法としては、圧力変動、温度変動、そして、圧力と温度の両方を変動させる方法がある。ここでは、温度変動での再生を仮定した。吸着材の再生エネルギー量は、M-MOF-74 のプロピレンおよびプロパンの吸着熱 (それぞれ 33.9 と 60.5 kJ/mol)¹⁰⁾ の 1.5 倍として推算した。

2.5 ハイブリッドプロセス

前述した蒸留、膜分離、吸着分離に加えて、膜分離

と蒸留および吸着分離と蒸留のハイブリッドプロセスについてもモデリングを行なった。ハイブリッドプロセスの設計においては、組み合わせる分離手法の選択に加え、分離手法の配置と分離の順番、つまりプロセスの構成がポイントとなる。図5に、膜分離あるいは吸着分離と蒸留のハイブリッドプロセスの構成例を示す。ここでは、3つの構成例を挙げた。1つ目は、蒸留塔の前段に膜分離あるいは吸着分離を導入する構成である。2つ目は、蒸留塔の塔頂蒸気を膜分離あるいは吸着分離に供給する構成である。3つ目は、蒸留塔のリボイラからの蒸気を膜分離あるいは吸着分離に供給する構成である。

本稿では、膜分離においてはプロピレン透過膜、吸着分離においてはプロピレン吸着材とプロパン吸着材の適用について検討した。ハイブリッドプロセスの計算条件は、蒸留、膜分離、吸着分離のそれぞれの条件と同じとした。

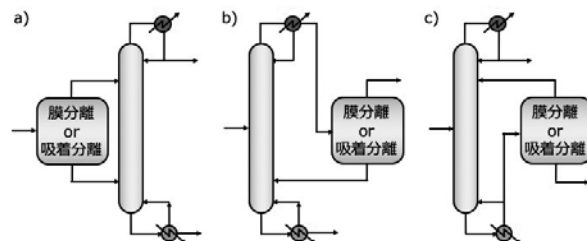


図5 ハイブリッドプロセスの構成例

3. 計算結果と考察

3.1 蒸留、膜分離、吸着分離のプロセス特性

プロピレン/プロパン混合物の分離における蒸留、膜分離、吸着分離のプロセス特性について検討した。図6に、各分離プロセスのエネルギー消費量の計算結果を示す。ここで、各分離プロセスのエネルギー消費量の内訳は、従来の蒸留塔はリボイラ負荷、VRC および膜分離は圧縮機動力 (一次エネルギーに換算)、吸着分離は圧縮機動力 (一次エネルギーに換算) と吸着材の再生エネルギーの合計である。

まず、蒸留プロセスにおいて、混合物中のプロピレン濃度の低下にともない従来の蒸留塔のエネルギー消費量は増加した。これは、混合物中のプロピレン濃度の低下にともない、製品規格を満たすために還流比を大きくしたためである。この傾向は、VRC においても同様であるが、エネルギー消費量の絶対値は従来の蒸留塔よりも少なくなった。これは、プロピレンとプロパンは沸点差が小さいため、塔頂蒸気の圧縮比を小

さくできたことが要因である。プロピレンとプロパンの混合物は沸点差が小さく蒸留での分離が困難な代表例であるが、沸点が近いことを利用してヒートポンプ技術を適切に組み合わせることで大幅な省エネルギー化が図れる可能性がある。

次に、膜分離プロセスにおいては、混合物中のプロピレン濃度が98 mol%の場合のみ、膜分離1段で製品規格を満たすことが可能であった。膜分離1段の場合、膜面積が小さければ透過流量が少なくなり（回収率が達成できない）、膜面積を大きくしすぎると透過流れ中のプロパンが増加する（製品濃度が達成できない）。このように、膜分離1段では製品規格を満たせる設計および操作の範囲は狭いが、エネルギー消費量はVRCよりも低くなる可能性が示唆された。一方、混合物中のプロピレン濃度が90 mol%より低い条件においては、膜分離2段で製品規格を満たすことが可能であった。混合物中のプロピレン濃度が90 mol%の場合はVRCと同等のエネルギー消費量となった。混合物中のプロピレン濃度が60や30 mol%の条件では、リサイクル流量をさらに増やす必要がありエネルギー消費量も増加した。混合物中のプロピレン濃度が60 mol%よりも低い場合は、従来の蒸留塔よりも膜分離2段のエネルギー消費量は少なくなるものの、VRCよりはエネルギー消費量が多くなった。

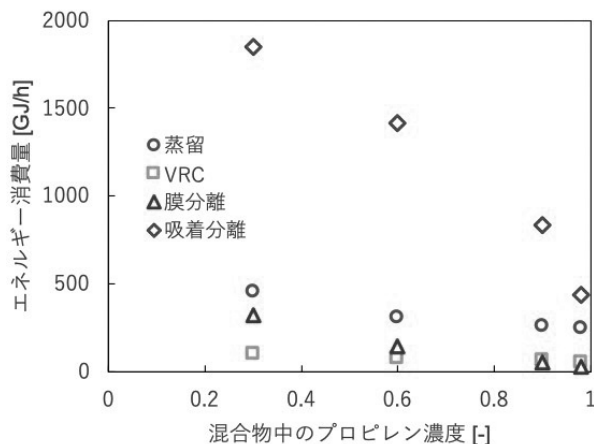


図6 分離プロセス単独でのエネルギー消費量

吸着分離プロセスにおいては、プロピレン吸着材およびプロパン吸着材のいずれを用いた場合においても、図4に示した吸着分離1回では製品規格を満たすことはできなかった。そこで、図4に示した吸着分離プロセスを1ユニットと捉えて、このユニットを直列に接続した場合について検討した。プロピレン吸着材を用いる場合、混合物中のプロピレン濃度が98、90、60、

30 mol%の分離に必要なユニット数は、それぞれ、3、6、10、12であった。一方で、プロパン吸着材を用いる場合、ユニットを直列に接続しても製品規格を満たすのは困難であった。これは、プロパン吸着材にプロピレンも吸着するため、回収率を達成できないためである。

この検討結果を踏まえて、プロピレン吸着材を用いた吸着分離プロセスのエネルギー消費量を試算した。混合物中のプロピレン濃度がいずれの場合においても、蒸留プロセスよりも吸着分離プロセスのエネルギー消費量は多くなった。これは、吸着分離のユニットの数だけ、吸着材の再生エネルギーが必要となるためである。

3.2 ハイブリッドプロセスの特性

膜分離と蒸留および吸着分離と蒸留のハイブリッドプロセスのプロセス特性について検討した。図7に、各ハイブリッドプロセスのエネルギー消費量を示す。なお、混合物中のプロピレン濃度98 mol%においては、膜分離1段で省エネルギー化が図れることから、ここでは混合物中のプロピレン濃度90、60、30 mol%の場合について検討した。

膜分離と蒸留のハイブリッドプロセスにおいては、膜分離の透過流れと未透過流れを蒸留塔に供給する構成、もしくは、蒸留塔の塔頂蒸気を膜分離に供給する構成において、同程度のエネルギー消費量の削減が可能であった。これは、膜分離の高い分離係数を効果的に利用できていることを示している。一方で、混合物中のプロピレン濃度が低くなると膜分離の効果が得づらくなることもわかる。混合物中のプロピレン濃度が60や30 mol%の場合は、膜分離2段と蒸留のハイブリッドプロセスで省エネルギー化が図れた。なお、リボイラからの蒸気の一部を膜分離に供給する構成においては、蒸気中のプロピレン濃度が低いため、前述したように膜分離の特徴が活かせず、省エネルギー化は困難であった。

次に、吸着分離と蒸留のハイブリッドプロセスにおいて、プロピレン吸着材とプロパン吸着材を用いた場合のプロセス特性について検討した。まず、プロピレン吸着材を用いた吸着分離と蒸留のハイブリッドプロセスの特徴について検討した。吸着塔で吸着された成分を蒸留塔で分離する構成では、蒸留塔に供給されるプロピレン濃度が増加するため、蒸留の負荷を削減できる可能性がある。吸着分離に要するエネルギー消費

量よりも蒸留プロセスのエネルギー消費量の削減が大きければ省エネルギー化が図れる。そこで、吸着材の再生エネルギーと圧縮機動力を試算したところ約 75 GJ/h であった。これは、図 6 に示した混合物中のプロピレン濃度に対する既存の蒸留塔のエネルギー消費量と比較すると、既存の蒸留塔のエネルギー消費量の削減量よりも大きいことがわかる。また、蒸留塔の塔頂蒸気を吸着塔に供給する構成においては、蒸留においてプロピレンを約 99.2 mol% まで濃縮する必要があった。製品濃度近傍まで蒸留分離する必要があるため、エネルギー消費量の削減量は少なくなった。蒸留塔のリボイラからの蒸気を吸着塔に供給する構成では、蒸留塔の塔底から排出されるプロピレンを吸着するため吸着塔の負荷は小さくなる。しかしながら、吸着塔ではプロパンも吸着されるため、脱着した混合物を蒸留塔にリサイクルする必要がある。リサイクル流量が増えるため、プロセス全体でのエネルギー消費量の削減は困難であった。

次に、プロパン吸着材を用いた吸着分離と蒸留のハイブリッドプロセスについて検討した。吸着塔で吸着された成分を蒸留塔で分離する構成では、蒸留塔に供給されるプロピレン濃度は低下するものの、混合物の供給量を減らせることができる。そのため、蒸留塔の負荷を削減できる可能性がある。一方、蒸留塔の塔頂蒸気を吸着塔に供給する構成では、吸着塔においてプロピレンも吸着されるため、脱着した混合物を蒸留塔にリサイクルする必要がある。吸着材の分離係数が低い場合はリサイクル流量が多くなり、蒸留塔の負荷削減は困難となる。蒸留塔のリボイラの蒸気を吸着塔に供給する構成では、プロパンが多く含まれる混合物からプロパンを吸着分離することとなり、吸着分離の負荷が大きくなる。

以上の検討より、吸着分離と蒸留のハイブリッドプロセスにおいては、プロパン吸着材を用いて、蒸留塔の前段に吸着分離を導入した構成が効果的であると考えられる。そこで、この吸着分離と蒸留のハイブリッドプロセスのエネルギー消費量を試算した。ここで、吸着ユニットの数は 1 つとした。その結果、図 7 に示したように、吸着分離と蒸留のハイブリッドプロセスのエネルギー消費量は既存の蒸留塔のエネルギー消費量と同程度であった。これは、吸着塔の導入により蒸留塔のエネルギー消費量の削減されるものの、同程度の吸着材の再生エネルギーが必要なためである。

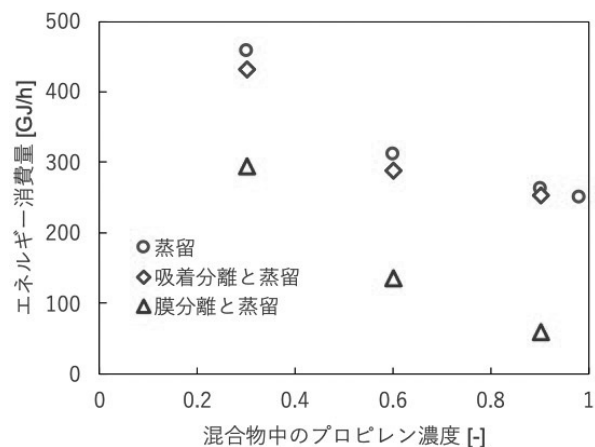


図 7 ハイブリッドプロセスのエネルギー消費量

3.3 吸着分離およびそのハイブリッドプロセスの可能性

上述の検討より、本研究の計算範囲内では、吸着分離プロセスへの代替あるいは吸着分離と蒸留のハイブリッドプロセスの適用による大幅な省エネルギー化は難しい結果となった。この原因としては、吸着材の分離性能が低いこと（プロピレン吸着材は 1.7、プロパン吸着材は 0.7）、プロピレンとプロパンの吸着熱が大きいことがあげられる。したがって、吸着分離プロセスあるいは吸着分離と蒸留のハイブリッドプロセスにより省エネルギー化を図るためには、高性能な（分離係数が高く、吸着熱が小さい）吸着材の開発が望まれる。そこで、吸着材の分離性能がエネルギー消費量に及ぼす影響について検討した。

図 8 に、吸着分離プロセスを対象として、吸着材の分離性能がエネルギー消費量に及ぼす影響を示す。ここでは、前述の検討を踏まえて、プロピレン吸着材の適用を想定している。プロピレン吸着材の分離係数を 5 まで向上できれば、混合物中のプロピレン濃度が 98 mol% の場合においては、蒸留プロセスよりも吸着分離プロセスのエネルギー消費量は少なくなることがわかる。吸着分離プロセスにおいてエネルギー消費量が削減できた要因は、吸着材の分離係数の向上により吸着の回数（ユニット数）が減ったためである。ここでは、プロピレンとプロパンの吸着熱は前述した条件（それぞれ 33.9 と 60.5 kJ/mol の 1.5 倍）で評価したが、吸着熱も小さくできれば VRC や膜分離と同程度の省エネルギー化も期待できる。また、プロピレン吸着材の分離係数が 5 まで向上できれば、混合物中のプロピレン濃度が 90 mol% の場合においては、蒸留プロセスと吸着分離プロセスのエネルギー消費量が同

程度になった。一方で、混合物中のプロピレン濃度が 30 や 60 mol% の場合においては、プロピレン吸着材の分離性能を 5 まで向上しても、吸着分離プロセスの省エネルギー化は難しいこともわかった。

図 9 に、吸着材の分離性能が吸着分離と蒸留のハイブリッドプロセスのエネルギー消費量に及ぼす影響を示す。ここでは、プロパン吸着材を用いるとし、蒸留との前段に吸着塔を導入した構成を想定している。また、プロセス設計の観点から、吸着材の再生エネルギーはリボイラで利用したスチームで賄う、すなわちプロセス内で熱統合したと仮定して計算を行った。熱統合を行うことで、現状の分離性能（分離係数 0.7）においても、約 14 から 19% の省エネルギー化が可能である。一方で、プロパン吸着材の分離係数を 0.2 まで向上できれば、吸着分離と蒸留のハイブリッドプロセスのエネルギー消費量はさらに少なくなり、29 から 63% の省エネルギー化が図れる可能性があることが分かった。混合物中のプロピレン濃度が 90 mol% の条件に

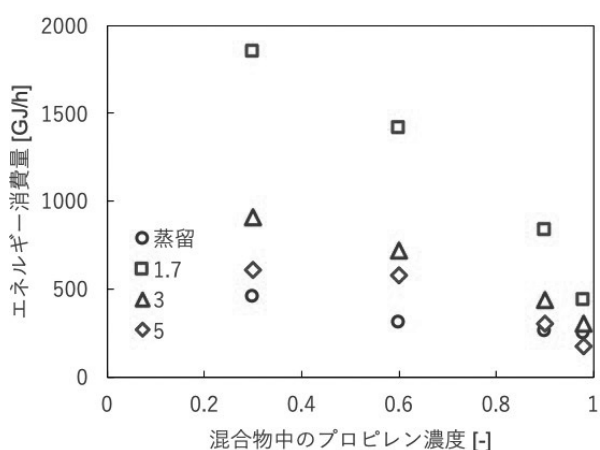


図 8 吸着材の分離性能が吸着分離プロセスのエネルギー消費量に及ぼす影響

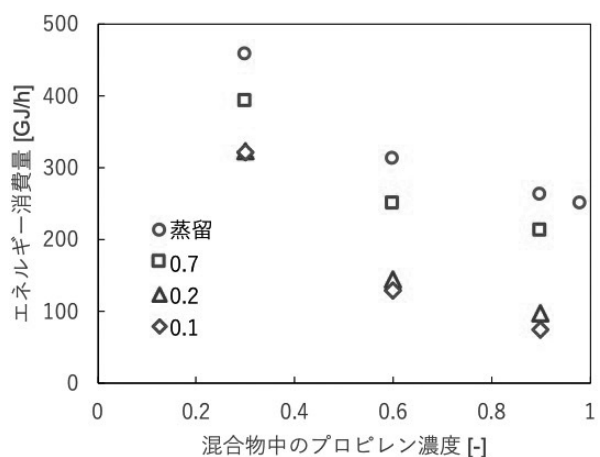


図 9 吸着材の分離性能が吸着分離と蒸留のハイブリッドプロセスのエネルギー消費量に及ぼす影響

おいては、VRC や膜分離と蒸留のハイブリッドプロセスと同程度の省エネルギー化が期待できる。ここで、プロパン吸着材の分離係数が 0.2 と 0.1 の結果を比較すると、吸着分離と蒸留のハイブリッドプロセスのエネルギー消費量は同程度となった。これは、プロパン吸着材の分離性能を高くしすぎてもエネルギー消費量の削減への影響は小さいことを示唆している。したがって、エネルギー消費量の観点から吸着分離と蒸留のハイブリッドプロセスにおいて要求されるプロパン吸着材の分離係数は 0.1 が目安になると考えられる。

4. おわりに

本稿では、プロピレン／プロパン混合物の分離を対象として、蒸留、膜分離、吸着分離についてエネルギー消費量をプロセスシミュレーションで評価し、省エネルギー化のポテンシャルを検討した。分離膜や吸着材についてはさらなる性能向上が必要な部分もあるものの、概ね次のような指針が得られた：混合物中のプロピレン濃度 98 mol% の場合は膜分離プロセスや吸着分離プロセス、混合物中のプロピレン濃度 90 mol% の場合は膜分離と蒸留あるいは吸着分離と蒸留のハイブリッドプロセス、混合物中のプロピレン濃度 30 と 60 mol% の場合は VRC。本研究の計算範囲内では、混合物中のプロピレン濃度が比較的高い条件に膜分離や吸着分離を適用することで、大幅な省エネルギー化が図れることを明らかにした。

本稿ではエネルギー消費量を基準に比較検討を行ってきたが、最適な分離プロセスの決定のためには、装置サイズや経済性、ライフサイクルアセスメント（LCA）を考慮した二酸化炭素排出量の評価も重要である。さらに、分離膜や吸着材の性能の経時変化を踏まえた運転・制御の方法も検討する必要がある。また、現状では 2 成分系分離を対象とした検討が数多く報告されているが、境界条件を広げてプラント全体で最適なプロセス構成を特定できる方法論の構築も望まれる。材料開発とプロセス設計を相互に考慮した研究開発が進展し、高効率な分離プロセスが開発されることに期待する。

謝辞

本研究の一部は、NEDO 平成 27 年度エネルギー・環境新技術先導プログラム「革新的分離技術の導入による省エネ型基幹化学品製造プロセスの研究開発」により行われた。

[参考文献]

- 1) NEDO 技術戦略研究センターレポート, 化学品製造プロセスの技術戦略策定に向けて, TSC Foresight vol. 14, (2016)
- 2) Matsukata, M., 化学工学, 80(9), 526-529(2016)
- 3) JST 研究開発戦略センター, 戦略プロポーザル「分離工学イノベーション」
- 4) 化学工学会編, 化学工学便覧 改定7, pp. 559-578, 丸善出版 (2011)
- 5) 化学工学会編, 最近の化学工学 50 吸着, pp. 74-105, 化学工業社 (1998)
- 6) Yamamoto, T., 吸着材・吸着プロセスの開発動向, pp. 211-222, シーエムシー出版 (2014)
- 7) Yamaki, T. *et al.*, *J. Jpn. Petrol. Inst.*, **62**, 80-86 (2019)
- 8) Matsukata, M., 高性能膜分離プロセスの最新動向と将来展望, 平成 28 年度 NEDO「TSC Foresight」セミナー (第 2 回) 資料
- 9) Ulrike, B. *et al.*, *Langmuir*, **29**, 8592-8600 (2013)
- 10) Zongbi, B. *et al.*, *Langmuir*, **27**, 13554-13562 (2011)



山木 雄大
産業技術総合研究所
化学プロセス研究部門
研究員

2014 年 9 月 山形大学大学院理工学研究科博士後期
課程有機材料工学専攻 博士 (工学)
2014 年10月 日本学術振興会 特別研究員 (PD)
2015 年 3 月 産業技術総合研究所 化学プロセス研究
部門 研究員

会 告

第 34 回日本吸着学会研究発表会のお知らせ

日本吸着学会研究発表会は、吸着の基礎科学から応用技術にわたる最新の研究成果が討論される年に一度の大会です。多数の皆様のご参加をお願い申し上げます。

主 催：日本吸着学会

会 期：2020 年 11 月 12 日(木)、13 日(金)

会 場：金沢商工会議所会館（石川県金沢市尾山町 9 番 13 号）

交通アクセス（<http://www.kanazawa-cci.or.jp/rooms/access.html>）

詳細につきましては、ホームページをご参照ください。

宿 泊：各自で手配をお願いします。

講演会場：金沢商工会議所会館

発表要領：口頭発表：講演 12 分、質疑 7 分、交代 1 分。プロジェクターでの発表をお願いします。

ポスター発表：発表時間 1 時間 30 分（予定）。

懇 親 会：2020 年 11 月 12 日(木) KKR ホテル金沢（予定）

発表申込、参加登録方法についてはあらためてご案内します。

発表申込締切：2020 年 9 月 4 日(金) 予定

要旨原稿締切：2020 年 9 月 25 日(金) 予定

参加予約締切：2020 年 9 月 25 日(金) 予定

実行委員会（問い合わせ・連絡先）：

〒920-1192 石川県金沢市角間町

金沢大学理工研究域機械工学系

児玉 昭雄

E-mail：annualmeeting@j-ad.org / TEL：076-264-6472

第 30 回吸着シンポジウム（吸着夏の学校）開催のお知らせ

第 30 回吸着シンポジウム（吸着夏の学校）を京都洛北・修学院にて開催いたします。吸着分野に携わる学生、教員、研究機関および企業の研究者、技術者が一堂に会し、1 泊 2 日の合宿形式で活発に意見と経験を交換し合い、研究者同士の関わりと専門知識を深め、吸着の科学と技術のさらなる発展のために議論を行う場にしたいと考えています。基礎技術講習、研究トピック講演では、研究の第一線でご活躍の講師陣に吸着関連の基礎から応用展開まで初学者にもわかりやすく解説していただく予定です。本シンポジウムは吸着分野を専門とする若手研究者・技術者を主な対象としていますが、所属学会や専門分野、役職を問わず、様々な方々にご参加いただける会となっています。ポスター発表も企画しますので、多くの皆様のご参加をお待ちしております。

会期：2020 年 9 月 8 日(火)～9 月 9 日(水)

会場：関西セミナーハウス・修学院さらら山荘（京都府京都市左京区一乗寺竹ノ内町 23）

交通アクセス：詳細につきましては会場施設の HP（<https://www.kansai-seminarhouse.com/access/>）をご参照ください。

スケジュール（予定）：

【1日目】 9月8日(火) 13：30 集合

基礎技術講習 「核磁気共鳴分光法の基礎と吸着系への応用」
大阪大学 上田 貴洋 先生

研究トピック講演 「ナノ空間材料としての分子ナノカーボンの基礎・開発・応用」
名古屋大学 坂本 裕俊 先生

研究トピック講演 「炭素表面における蒸気吸着に関する基礎的研究」
徳島大学 堀河 俊英 先生

若手研究発表（ポスター発表）

懇親会

【2日目】 9月9日(水)

基礎技術講習 「水吸着材料の基礎・開発・応用」
東京大学 大宮司 啓文 先生

研究トピック講演 「吸着プロセスのモデリングと最適化」
名古屋大学 川尻 喜章 先生

参加費（宿泊費・食費込み）：学生（吸着学会会員・非会員不問）5,000 円

一般（吸着学会会員、維持会員企業の方）15,000 円

一般（非会員）20,000 円

定員：40 名

宿泊は、基本的に男女別の相部屋です。個室をご希望の場合はご相談ください。

若手研究発表（ポスター発表）：10 件程度。大学院生、ポスドクを含む大学、研究機関、企業の主に 20～30 代の方々によるポスタープレゼンテーションを募集します。学会ではありませんので、研究成果だけでなく、行き当たっている問題や解釈の難しい結果など、自由に発表・議論していただいても結構です。なお、発表者につきましては、参加者からの発表希望をもとに実行委員長が決定いたしますのでご了承ください。

参加申込方法：ホームページ（<https://www-j-ad.org/>）でご確認ください。

参加申込締切：7 月 31 日(金) 予定

問い合わせ先：世話人 田中 俊輔（関西大学）Email：shun_tnk@kansai-u.ac.jp

関連学会のお知らせ

触媒学会 第31回キャタリシススクール 記載内容は変更となる可能性があります。

主催：一般社団法人 触媒学会

共催（順不同）：アントンパール・ジャパン、島津サイエンス東日本、島津製作所、ダッソー・システムズ・バイオビア、日本電子、日本分光、日立ハイテクノロジーズ、マイクロトラック・ベル、リガク

協賛（予定、順不同）：日本化学会、高分子学会、化学工学会、電気化学会、石油学会、自動車技術会、日本機械学会、有機合成化学協会、日本表面真空学会、色材協会、日本イオン交換学会、日本エネルギー学会、日本吸着学会、日本ゼオライト学会、日本膜学会、粉体工学会

会期：2020年6月24日(水)～26日(金)

会場：スクーリングは東京大学（浅野キャンパス）武田先端知ホール

参加申込締切：5月11日(月) 締切（定員（60名）になり次第、期日より前に締め切ることがあります）

6月24日(水)

- | | |
|-------------------------|---------------|
| 1. キャタリシススクールへようこそ | (東工大) 山中一郎 校長 |
| 2. 吸着と反応速度 | (東北大) 富重圭一 先生 |
| 3. キャラクターゼーション：担持金属触媒 | (岩手大) 白井誠之 先生 |
| 4. 触媒反応工学 | (静岡大) 福原長寿 先生 |
| 5. キャラクターゼーション：固体酸・塩基触媒 | (東工大) 野村淳子 先生 |

6月25日(木)

共催分析機器メーカーでの分析実習

6月26日(金)

- | | |
|------------|------------------|
| 1. 環境触媒 | (東京大) 小倉 賢 先生 |
| 2. 酸化触媒 | (東工大) 山中一郎 先生 |
| 3. 工業触媒 | (アイシーラボ) 室井高城 先生 |
| 4. 触媒調製 | (千葉大) 佐藤智司 先生 |
| 5. 触媒劣化 | (成蹊大) 里川重夫 先生 |
| 6. 実用触媒の開発 | (ビック情報) 山松節男 先生 |
- 卒業式・卒業証書授与

参加費：40,000円（主催／協賛学協会会員）、50,000円（一般）、20,000円（学生）

参加せずテキスト販売のみの場合は10,000円

申込方法：以下の申込専用Webサイトからお申込みください。

<https://www.sec-information.com/catalyschool2020/>

問合先：稲垣怜史（第31回キャタリシススクール運営委員長）

E-mail: catalyschool2020@ynu.ac.jp（参加者向け専用メールアドレス）

〒240-8501 横浜市保土ヶ谷区常盤台79-5 横浜国立大学 理工学部化学棟504

維持会員一覧

維持会員として、以下の企業各社にご協力を頂いております。

(令和2年4月現在、50音順)

株式会社アドール	株式会社アントンパール・ジャパン
エア・ウォーター株式会社	MHI ソリューションテクノロジーズ株式会社
大阪ガス株式会社	大阪ガスケミカル株式会社
オルガノ株式会社	関西熱化学株式会社
株式会社キャタラー	株式会社クラレ
栗田工業株式会社	興研株式会社
株式会社重松製作所	システムエンジニアリング株式会社
株式会社島津製作所	水ing株式会社
株式会社西部技研	大陽日酸株式会社
株式会社タカギ	月島環境エンジニアリング株式会社
帝人ファーマ株式会社	東ソー株式会社
東洋紡株式会社	ニチアス株式会社
富士シリシア化学株式会社	フタムラ化学株式会社
マイクロトラック・ベル株式会社	ユニオン昭和株式会社
ローム・アンド・ハース・ジャパン株式会社	

編 集 委 員

委員長 児玉 昭雄 (金沢大学)

委 員 大坂 侑吾 (金沢大学)

上村 佳大 (産業技術総合研究所)

田中 俊輔 (関西大学)

宮崎 隆彦 (九州大学)

余語 克則 (RITE)

加藤 雅裕 (徳島大学)

近藤 篤 (大分大学)

飛弾野龍也 (太陽日酸株式会社)

山根 康之 (大阪ガスケミカル株式会社)

(五十音順)

Adsorption News Vol.34 No.1 (2020) 通巻 No.132 2020 年 4 月 24 日発行

事務局 〒162-0801 東京都新宿区山吹町 358-5 アカデミーセンター

Tel : 03-6824-9370 Fax : 03-5227-8631 E-mail : info@j-ad.org

編 集 大坂 侑吾 (金沢大学)

Tel : 076-264-6475 Fax : 076-264-6475 E-mail : y-osaka@se.kanazawa-u.ac.jp

日本吸着学会ホームページ <https://www.j-ad.org/>

印 刷 〒850-0875 長崎県長崎市栄町 6-23 株式会社昭和堂

Tel : 095-821-1234 Fax : 095-823-8740

General Secretary

THE JAPAN SOCIETY ON ADSORPTION (JSAD)

Academic Center, 358-5, Yamabuki, Shinjuku, Tokyo, 162-0801, JAPAN

Tel : 03-6824-9370 Fax : 03-5227-8631 E-mail : info@j-ad.org

Editorial Chairman

Professor Akio KODAMA

Institute of Science and Engineering, Kanazawa University

Kakuma, Kanazawa, Ishikawa 920-1192, JAPAN

Tel : +81-76-264-6472 E-mail : akodama@se.kanazawa-u.ac.jp

Editor

Yugo OSAKA, Kanazawa University

Tel : +81-76-264-6475 E-mail : y-osaka@se.kanazawa-u.ac.jp

Home Page of JSAd: <https://www.j-ad.org/>

本誌に記載された著作物を許可なく複製・公開することを禁ずる。

©2020 The Japan Society on Adsorption