

## 研究室紹介

関西学院大学 工学部  
反応プロセス設計研究室  
小倉鉄平

### 1. 研究室の概要

関西学院大学は、兵庫県と大阪府にキャンパスを持ち、神学部から建築学部まで多彩な学部・大学院を有する、キリスト教主義教育の理念・目的に基づいた総合私立大学です。校舎は赤い瓦屋根・クリーム色の壁の「スパニッシュ・ミッション・スタイル」で統一されており、日本有数の美しいキャンパスとして知られています。関西学院のスクールモットー“Mastery for Service”は、「奉仕のための練達」と訳され、隣人・社会・世界に仕えるため、自らを鍛えるという関学人の在り方を示しています。関西学院大学の歴史は古く、今年で創立134年を迎えました。2021年には、理工学部が改組され、理学部、工学部、生命環境学部、建築学部の4つの理系学部が兵庫県三田キャンパスに新たに誕生しました。工学部は全国でも珍しい課程制を導入しており、電気電子応用工学課程、物質工学課程、情報工学課程、知能・機械工学課程の4つの課程があります。教員は学部にも所属し複数の課程の学生を教える一方で、学生側も複専攻制度により2つの分野を行き来しながら学ぶことができます。小倉研究室は2014年に私の関西学院大学着任と共に誕生し、今年度で9年目を迎えました。これまでに博士研究員2名、博士後期課程1名、博士前期(修士)課程11名、学部生44名が卒業・異動していき、今年度は学部生3名でこぢんまりと研究室を営んでいます。

### 2. 研究の内容

「計算化学の力で“ものづくり”に貢献する」を合言葉に、コンピュータを用いた分子レベルの観点からの実際の現象に対する計算解析や、完全に理論だけに基づいて実際のスケールや時間に対応した反応プロセスを再現することに取り組んでいます。

#### 2.1 量子化学計算を用いた表面反応機構解析

主にメタン水蒸気改質やCO<sub>2</sub>メタネーションなどの触媒反応系を対象に、量子化学計算を用いて様々な表面素反応解析をおこなっています。特に、活性の高い特異サイトにおける表面反応や、触媒・担体・気相の三相界面における



図 研究室メンバー(2014年小倉研究室発足当時)

反応、触媒反応の電場印加効果などに興味を持って研究を実施しています。近年では2022年度よりNEDOのグリーンイノベーション基金事業の再委託先として、大阪ガス(株)および(国研)産業技術総合研究所と共に、SOECメタネーション触媒の開発に取り組んでいます。

#### 2.2 詳細表面反応機構の自動生成

前述の量子化学計算による素反応解析を実際の反応プロセス設計に対応させるには、詳細表面反応機構による反応シミュレーションが必要になります。私の研究室では、自前の反応シミュレーションコードを用いて、量子化学計算で得られた反応パラメータを基に転化率・温度分布などの予測をおこなっています。更に、触媒材料・反応物などを指定すれば詳細表面反応機構そのものを自動で生成するプログラムを開発しており、既に軽炭素系には適応可能な所まで来ました。

#### 2.3 流体・反応連成による反応器設計

より実スケールでの反応プロセス設計として、実験系研究者と協力しながら、流体力学計算と反応を組み合わせた反応器シミュレーション解析をおこなっています。残念ながら時間スケールの関係上、詳細反応機構と組み合わせることは未だ難しいですが、3次元の温度分布等を予測することで温度管理に最適な反応器形状の設計等をおこなっています。

#### 2.4 触媒材料製造プロセスの解析・設計

主に炭素材料などの製造プロセスを対象に、反応力場を用いた分子動力学計算による可視化・解析をおこなっています。反応力場はまだ改良の余地が多く、量子化学計算と組み合わせる反応力場そのものの開発等も手掛けています。これは比較的最近始めた研究なのですが、将来的には材料製造プロセス自体の設計に繋げていきたいと考えています。