

天然ゴム (RSS) の臭気を軽減する触媒の開発

研究・開発機関 : [兵庫県立工業技術センター](#)
 利用施設 : FOCUSスパコン、
 所内計算化学用マシン (AMD Ryzen threadripper 3970x)
 計算規模 : FOCUSスパコン利用で計算時間は1週間程度
 利用ソフトウェア : Gaussian 16 (FOCUSスパコン)、NWChem (保有コンピュータ)

Before

- 天然ゴム (燻煙処理済: RSS) の臭気は独特で、ゴム製造現場の環境を悪化させ、消費者からも敬遠されています。
- 臭気成分の特定や消臭の評価は実験的に可能ですが、消臭のメカニズムは解明できていませんでした。

After

- 触媒をRSSに混練した時に起こりうる臭気成分の化学反応を計算で確認することが可能になり、消臭メカニズムが解明できました。
- 様々な触媒に対する臭気への影響度を計算により把握することが可能になり、臭気軽減に適した触媒を選定しやすくなりました。

背景と目的

天然ゴムは、ゴムノキの樹液 (図1a) から始まり、様々な処理工程を経てゴム製造業者に輸送されます。その中でも、樹液をギ酸等で固めてから不純物を除去してシート状に成形して吊し (図1bおよびc)、燻煙室で1週間ほど放置された天然ゴムはRibbed Smoked Sheet (RSS) (図1d) と呼ばれます。

この工程では、ゴムノキの老木を加熱して燻煙するため独特の臭気が発生します。兵庫県内の中小ゴム製造業ではRSSを最も多く取り扱っており、この臭気がゴム製造現場の環境を悪化させ、消費者からも敬遠されています。

RSSの主な臭気成分は2,6-dimethoxyphenolなどのフェノール類であることが分析結果で明らかになり、当機関では、図2の触媒 (Co (II)-salen錯体) によるフェノールの酸化反応をRSSの臭気軽減に応用することを試み、触媒を二軸ロール機に巻き付けたRSSに混練することで臭気を軽減することに成功しました。

しかし、図2の触媒の金属はゴム劣化につながる要因を持つコバルト (Co) です。ゴム業界では利用を敬遠されるため、他の触媒も検討しなければなりません。ただし、金属種によっては酸化反応を起こさないものもあるため、他の反応過程も含めての計算が必要になります。



図1 RSSの処理工程
(W. Phairuang et al. Atmospheric Pollut. Res. 2019, 10(2), 642-650引用)

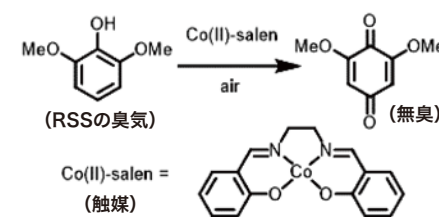


図2 触媒による2,6-dimethoxyphenolの酸化反応

利用成果

様々な触媒をRSSに混練する前に、触媒の候補選定を行います。文献調査によると、アルミニウム (Al) を金属種とした触媒はフェノールに対しては吸着反応を示しており (図3a)、Co触媒では、当機関の先行研究によると図2で得られる生成物が臭気分析で検出されていないことから、この触媒が酸素と結合してフェノールの水素原子を引き抜くことにより、ラジカル種が発生し臭い成分が分解したと考察しました (図3b)。ここでは、このAlとCoを金属種とした触媒について述べます。

化学反応においては、反応の過程で中間状態の構造 (遷移状態) が形成されます (図4)。反応前と遷移状態の間のエネルギーギャップを活性化エネルギー (単位はkcal/mol) と呼び、この数値が高ければ高いほど反応が進行しにくくなります。触媒はこのエネルギーギャップを下げる性質があります。そこで、図3の反応の構造の数学モデルを作成し、活性化エネルギーの計算を実行しました。

図5はCoの触媒の反応前の構造と遷移状態の構造を示しています。振動解析の計算を行ったところ、点線で囲った箇所コバルトの触媒に結合している酸素分子がフェノールの水素を引き抜く運動が確認されました。さらに、Alの触媒の活性化エネルギーが0.005 kcal/molであるのに対し、Coの触媒の活性化エネルギーは13.38 kcal/molという数値が得られました。これらの結果から、RSSの臭気軽減に関してはCoの酸化反応よりもAlの吸着反応の方が進行しやすいと考えられます。これらの計算結果を参考にして実際にRSSに混練すると、Alを金属種とした触媒が最も臭気量を減らすことがわかり、計算結果とよい一致を示しました。また、Al触媒を用いることで人体に悪影響を及ぼさないことも期待されます。様々な触媒を用いたRSSの臭気軽減の影響については2022年8月末に開催された第35回におい・かおり環境学会で発表しました。

本研究の反応は複雑な構造をとっているため、所内で組み立てた計算化学用マシンでこのような計算を行うと完了するまでに1カ月はかかりますが、FOCUSスパコンを使用すると約1週間で完了し、エネルギーの数値や分子の構造から材料設計の検討につなげることが可能となります。実験の場合、様々な数をこなして最適解を試さなければなりません。FOCUSスパコンを用いることにより材料の数を絞ってから材料開発に取り組むことができるため、効率性の向上につながりました。

出典: 兵庫県立工業技術センター 研究報告書第32号 (2023)

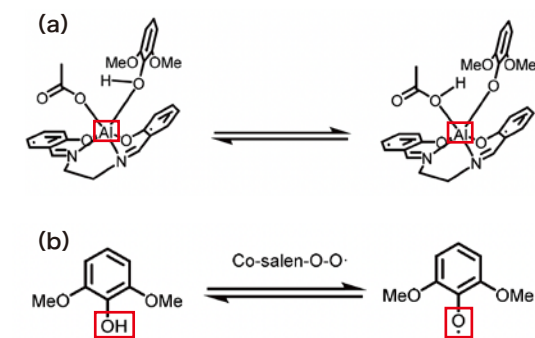


図3 想定される化学反応
(a) Al触媒 (吸着反応)
(b) Co触媒 (酸化反応)

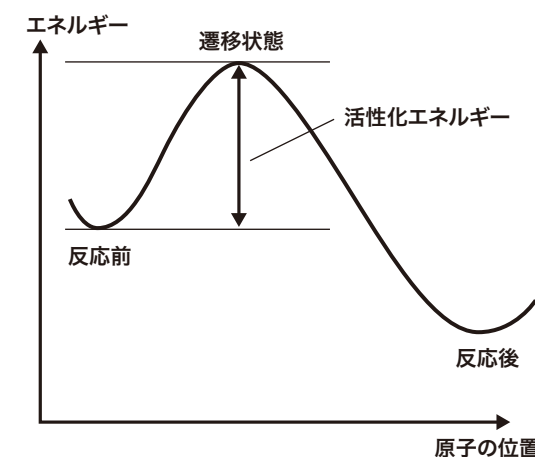


図4 化学反応のエネルギー図

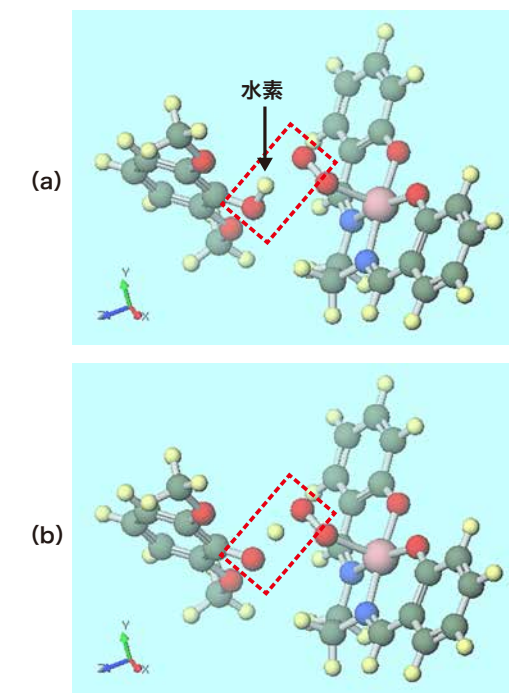


図5 コバルト触媒による反応の過程
(a) 反応前の構造 (水素が引き抜かれる前)
(b) 遷移状態の構造 (水素が引き抜かれる途中)

文責 兵庫県立工業技術センター 阿知良 浩人