

再生可能エネルギーからのエネルギーキャリアの製造とその利用のための
革新的基盤技術の創出

平成 26 年度採択研究代表者

H28 年度 実績報告書

西林 仁昭

東京大学大学院工学系研究科
教授

分子触媒を利用した革新的アンモニア合成及び関連反応の開発

§ 1. 研究実施体制

(1)「分子触媒」グループ

- ① 研究代表者: 西林 仁昭 (東京大学 大学院工学系研究科、教授)
- ② 研究項目
 - ・分子触媒を用いたアンモニア合成反応の開発

(2)「理論化学 I」グループ

- ① 主たる共同研究者: 吉澤 一成 (九州大学 先導物質化学研究所、教授)
- ② 研究項目
 - ・理論化学によるアンモニア合成反応に関する研究

(3)「不均一触媒」グループ

- ① 主たる共同研究者: 山本 旭 (京都大学 大学院人間・環境学研究科、助教)
- ② 研究項目
 - ・不均一系触媒を用いたアンモニア合成に関する研究

(4)「理論化学 II」グループ

- ① 主たる共同研究者: 坂田 健 (星薬科大学 薬学部、准教授)
- ② 研究項目
 - ・理論化学による水素分解反応に関する研究

(5)「合成」グループ

① 主たる共同研究者: 的場 一隆 (日産化学工業株式会社 物質科学研究所、主任研究員)

② 研究項目

・アンモニア合成の実用化に関する研究

§ 2. 研究実施の概要

本研究ではアンモニアをエネルギーキャリアとして利用の実現を最終目標として、これまで達成されていない新しいアンモニア合成法及び関連反応の開発に取り組む。以下の3つの研究目標を中心的な研究課題として設定した。

研究目標①：実用化を見据えた高効率なアンモニア合成法の開発

研究目標②：空気、水、太陽光からのアンモニア合成法の開発

研究目標③：アンモニア合成を指向した水素分解反応の開発

工業的なアンモニア合成法であるハーバー・ボッシュ法は人類を食糧危機から救済した20世紀最大の発明である。しかし、このハーバー・ボッシュ法は大きな欠点を有している。ハーバー・ボッシュ法に必要な水素ガスは天然ガス、石油、石炭などの化石燃料を原料とするエネルギー多消費型プロセスで供給されている。本研究課題では、実用化を見据えた高効率なアンモニア合成法の開発及び化石燃料由来の水素ガスを利用せずに、空気中の窒素ガス、水、太陽光を原料とする革新的なアンモニア合成法の開発に取り組む。一方で、ハーバー・ボッシュ法は、高温高压の極めて厳しい反応条件が必要な工業プロセスであり、大規模なプラントを必要としている。このアンモニア合成を常温常圧に近い穏和な反応条件で行うことができれば、より簡便な方法でアンモニア合成が可能になる。このような穏和な反応条件下で進行するアンモニア合成法の実現する為に必要な、水素分子をプロトンと電子とへ分解する反応開発にも併せて取り組む。以上の研究目標を検討する過程で達成した知見を踏まえて、工業化を見据えたエネルギーの効率的利用の観点からの検討も行う予定である。上述した研究目標を達成出来れば、日本発の新しい科学技術イノベーションを世界に向けて発信することが可能となる画期的な研究成果となる。

達成した研究成果としては、特に研究目標①について、大きな進展が見られた。昨年度までに達成した知見を踏まえて、新しいPCP型ピンサー配位子を設計・合成し、これを有するモリブデン窒素錯体の合成に成功した。更に、この新規なモリブデン窒素錯体が触媒的アンモニア反応において、極めて有効な触媒として働くことを明らかにした[発表論文 1]。また、理論計算を行うことで、反応機構の解明にも成功すると共に、新しいPCP型ピンサー配位子が有する特異な機能について詳細を明らかにすることに成功した。また、アニオン性PNP型ピンサー配位子を有する鉄及びコバルト窒素錯体を設計・合成し、これらの窒素錯体が触媒的窒素固定反応において有効な触媒として働くことを明らかにした[発表論文 2,3]。これら一連の研究成果は論文として発表済である。

[発表論文 1] A. Eizawa, K. Arashiba, H. Tanaka, S. Kuriyama, Y. Matsuo, K. Nakajima, K. Yoshizawa, and Y. Nishibayashi, *Nature Communications*, **8**, 14874 (2017).

[発表論文 2] S. Kuriyama, K. Arashiba, K. Nakajima, Y. Matsuo, H. Tanaka, K. Ishii, K. Yoshizawa, and Y. Nishibayashi, *Nature Communications*, **7**, 12181 (2016).

[発表論文 3] S. Kuriyama, K. Arashiba, H. Tanaka, Y. Matsuo, K. Nakajima, K. Yoshizawa, and Y. Nishibayashi, *Angew. Chem. Int. Ed.* **55**, 14291–14295 (2016).