

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 27 年度採択研究代表者

H29 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)「西林」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)「吉澤」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)「山本」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)「坂田」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)「的場」グループ

① 主たる共同研究者: 的場 一隆 (日産化学工業(株)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するアンモニア社会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

研究開始三年目の年度にあたる平成 29 年度は、グループ全体での研究打ち合わせを合計 5 回と京大チームとの個別の研究打ち合わせを2回行った。また、2 回行われた領域全体会議と平成 29 年 6 月 7 日に実施された東京大学でのサイトビジットでは研究総括である江口先生と秋鹿先生をはじめとする領域アドバイザーの方々に研究進捗を報告すると共に、研究進捗に関する情報交換を行った。達成した研究成果としては、研究目標①について、昨年度に続いて大きな進展が見られた。窒素分子の窒素-窒素三重結合を直接切断して生成するニトリド錯体を經由する新しい触媒的窒素固定反応を開発することに成功した。この新しい反応経路を經由することで、飛躍的な触媒活性の向上を達成した。本文に関しては日本化学会 BCSJ 賞を受賞した [発表論文 1]。また鍵段階である窒素分子の切断反応について理論計算を行うことで、反応機構の解明にも成功した。更に理論計算の検討結果を踏まえて、反応活性種について実験的な検証を行うことで、より詳細な反応機構を明らかにすることができた。アニオン性 PNP 型ピンサー配位子を有するバナジウム窒素錯体を設計・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]。光誘起電子移動反応を利用することで、水をプロトン源として用いた触媒的アンモニア合成反応の開発に成功した [発表論文 3]。

[発表論文 1] Catalytic Nitrogen Fixation via Direct Cleavage of Nitrogen–Nitrogen Triple Bond of Molecular Dinitrogen under Ambient Reaction Conditions, K. Arashiba, A. Eizawa, H. Tanaka, K. Nakajima, K. Yoshizawa, and Y. Nishibayashi, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 90, 1111–1118 (2017).

[発表論文 2] Catalytic Reduction of Molecular Dinitrogen into Ammonia and Hydrazine Using Vanadium Complexes, Y. Sekiguchi, K. Arashiba, H. Tanaka, A. Eizawa, K. Nakajima, K. Yoshizawa, and Y. Nishibayashi, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 57, in press (2018) [DOI: 10.1002/anie.201802310].

[発表論文 3] Catalytic Conversion of Dinitrogen into Ammonia under Ambient Reaction Conditions by Using Proton Source from Water, Y. Tanabe, K. Arashiba, K. Nakajima, and Y. Nishibayashi, *Chem. Asian J.*, 12, 2544–2548 (2017).

