

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. 研究成果の概要

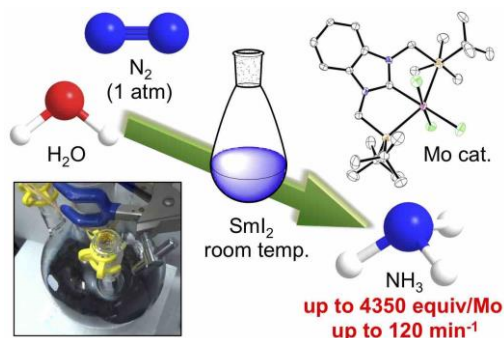
本研究ではアンモニアをエネルギーキャリアとして利用するアンモニア社会の実現を最終目標として、これまで達成されていない新しいアンモニア合成法及び関連反応の開発に取り組む。以下の3つの研究目標を中心的な研究課題として設定した。

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

研究開始四年目の年度にあたる平成 30 年度は、グループ全体での研究進捗報告会を合計 4 回と京大チーム及び日産化学チームとの個別の研究打ち合わせをそれぞれ 1 回行った。また、2 回行われた領域全体会議と平成 30 年 8 月 10 日に実施された東京大学での研究進捗報告会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及び研究目標②に関して、昨年度に続いて大きな進展が見られた。ピンサー型配位子を有するモリブデン錯体存在下、ヨウ化サマリウムと水を還元剤およびプロトン源として利用することで常温常圧の温和な反応条件下で窒素ガスからの触媒的アンモニア生成反応の開発に成功した。本研究成果については Nature 誌に速報として報告した[代表的な原著論文 1]。昨年度に報告した架橋窒素分子の切断反応を鍵段階として進行する新しい反応機構を経由する触媒的アンモニア生成反応の反応機構に関する検討に関連して、PNP 型ピンサー配位子における置換基効果について検討を行い、電子求引性基の導入により顕著な触媒活性の向上が観測できた[代表的な原著論文 2]。ポリスチレンに PNP 型ピンサー配位子を導入したモリブデン錯体の合成に成功し、触媒的アンモニア生成反応における触媒能を検証した[代表的な原著論文 3]。



#### 【代表的な原著論文】

(1) Yuya Ashida, Kazuya Arashiba, Kazunari Nakajima and Yoshiaki Nishibayashi, "Molybdenum-

catalyzed Ammonia production with samarium diiodide and alcohols or water”, Nature, vol. 568, pp.536–540, 2019.

(2) Takayuki Itabashi, Ikki Mori, Kazuya Arashiba, Aya Eizawa, Kazunari Nakajima and Yoshiaki Nishibayashi, “Effect of substituents on molybdenum triiodide complexes bearing PNP-type pincer ligands toward catalytic nitrogen fixation”, Dalton Transactions, vol. 48, pp.3182–3186, 2019.

(3) Kazuya Arashiba, Takayuki Itabashi, Kazunari Nakajima and Yoshiaki Nishibayashi, “Synthesis and catalytic reactivity of polystyrene-supported molybdenum pincer complexes toward ammonia formation”, Chem. Lett., vol. 48, doi.org/10.1246/cl.190193, 2019.

## § 2. 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 (東邦大学薬学部、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: 菊池 隆正 (日産化学(株)材料科学研究所、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