

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

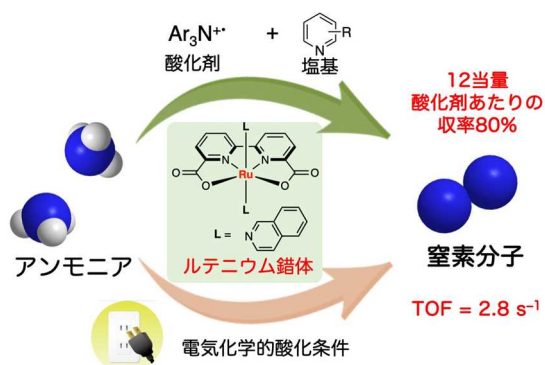
本研究ではアンモニアをエネルギーキャリアとして利用するアンモニア社会の実現を最終目標として、これまで達成されていない新しいアンモニア合成法及び関連反応の開発に取り組む。以下の3つの研究目標を中心的な研究課題として設定した。

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

研究開始五年目の年度にあたる令和元年度は、グループ全体での研究進捗報告会を合計3回と各チームとの個別の研究打ち合わせを随時行った。また、2回行われた領域全体会議と令和元年8月7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③に関連した研究内容で、大きな進展が見られた。分子触媒グループでは分子触媒であるルテニウム錯体を利用したアンモニアの触媒的酸化反応の開発に成功した。分子触媒を利用した世界で初めてのアンモニアの触媒的酸化反応の成功例である。化学量論反応の結果を踏まえて提案した推定反応機構について、理論化学ⅡグループがDFT理論計算を行い反応機構の検証を行った。本研究結果についてはNature Chemistry誌に論文として報告した[代表的な原著論文 1]。昨年度に報告した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進行する窒素ガスからの触媒的アンモニア生成反応に関連して、市販で入手容易な単座ホスフィンや二座ホスフィン有するモリブデン単核錯体が有効な触媒として働くことを明らかにした [代表的な原著論文 2]。また、触媒的アンモニア生成反応の大スケールでの反応にも成功した[代表的な原著論文 3]。



【代表的な原著論文】

- (1) Kazunari Nakajima, Hiroki Toda, Ken Sakata, and Yoshiaki Nishibayashi, “Ruthenium-Catalysed Oxidative Conversion of Ammonia into Dinitrogen”, *Nature Chemistry*, vol. 11, pp.702–709, 2019.
- (2) Yuya Ashida, Kazunari Arashiba, Hiromasa Tanaka, Akihito Egi, Kazunari Nakajima, Kazunari Yoshizawa, and Yoshiaki Nishibayashi, “Molybdenum-Catalyzed Ammonia Formation Using Simple Monodentate- and Bidentate-Phosphines as Auxiliary Ligands”, *Inorganic Chemistry*, vol. 58, pp.8927–8932, 2019.
- (3) Yuya Ashida, Shoichi Kondo, Kazuya Arashiba, Takamasa Kikuchi, Kazunari Nakajima, Seizo Kakimoto, and Yoshiaki Nishibayashi, “Practical Ammonia Synthesis from Nitrogen Gas with Samarium Diiodide and Water Catalyzed by Molybdenum-PCP Pincer Complex”, *Synthesis*, vol. 51, pp.3792–3795, 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

(6) プロセスグループ

- ① 主たる共同研究者: 靱津 典夫 (出光興産(株)次世代技術研究所、主幹研究員)
- ② 研究項目
 - ・アンモニア合成のプロセス開発に関する研究

本年度から(6)プロセスグループとして、靱津 典夫氏 (出光興産(株)次世代技術研究所、主幹研究員)が新しく参画した。