

「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」

H25 年度  
実績報告

平成 25 年度採択研究代表者

永岡 勝俊

国立大学法人 大分大学 工学部応用化学科  
准教授

エネルギーキャリアとしてのアンモニアを合成・分解する特殊反応場の構築に関する  
基盤技術の創成

## §1. 研究実施体制

### (1)「永岡」グループ

- ① 研究代表者:永岡 勝俊 (大分大学工学部応用化学科、准教授)
- ② 研究項目
  - ・アンモニア分解プロセスの創成
  - ・アンモニア合成プロセスの創成

### (2)「杉本」グループ

- ① 主たる共同研究者:杉本 学 (熊本大学大学院自然科学研究科、准教授)
- ② 研究項目
  - ・アンモニア分解・合成触媒に関する理論解析と触媒設計

## § 2. 研究実施の概要

21世紀、世界は途上国・新興国の経済発展による1) 人口の増加、2) エネルギー不足、3) 資源不足、4) 水不足、5) 食料不足、の課題を有している。化石資源を保有しないわが国では2)、3)が深刻な課題であるため、技術革新により代替資源の利用、省エネルギー化を推進することが急務である。また、2011年3月の東日本大震災以来、98%の電力を火力発電でまかなっている状態であり、安全保障上、エネルギーの多様化が求められている。一方、地球温暖化に伴う異常気象により、日本をはじめ世界各地で大きな災害が発生している。そのため、CO<sub>2</sub>削減に関連する技術開発が近々の課題であり、クリーンエネルギーへの転換の必要性が高まっている。このような状況の下、我が国の総エネルギー需要(22×10<sup>18</sup> J/年)の10%程度を太陽光や風力などの再生可能エネルギーに移行できれば、エネルギーの多様化、大幅な省エネルギー化やCO<sub>2</sub>の削減が可能となる。しかし、我が国の日照量や風力は充分ではない。そのため、海外で再生可能エネルギーによって生成した電力や水素を何らかの化学物質に蓄え、日本まで運搬した後に、消費地で高効率な分散型電源である燃料電池により発電することが期待されている。そこで、本研究では、水素含有量やエネルギー密度が高くエネルギーキャリアとして有望なアンモニアを研究対象とし、非常に温和な条件でアンモニアを分解し水素を取り出す革新的な技術の開発を核とし、温和な条件でアンモニアを合成する触媒の研究開発も行っている。

H25年度には、研究開始初年度ということで、アンモニア分解、アンモニア合成の触媒活性の評価装置を制作し触媒のスクリーニングを開始した。また、触媒のバルク構造を評価するための粉末X線回折装置を導入するとともに、H26年度から本格的に研究を推進する上で、必要な研究員2名を確保した。具体的な研究成果は下記の通りである。アンモニア分解プロセスの創成では、室温でアンモニア、酸素、不活性ガスの混合ガスを流すだけで、アンモニアを分解し水素を製造可能ないくつかの担持Ru系触媒を見出した。これらの触媒系では反応ガス供給直後に無加熱であるにもかかわらず、触媒層の入り口が赤熱し、30sec以内に多量の水素の生成が見られ、アンモニアの酸化分解による水素生成反応( $\text{NH}_3 + 0.25\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2 + 0.5\text{N}_2 + 0.5\text{H}_2\text{O}$ )が無加熱、瞬時に常温から駆動されることが明らかとなった。アンモニア合成プロセスの創成では、当研究室で見出した高活性触媒であるRu/Pr<sub>6</sub>O<sub>11</sub>に対して、化合物をプロモーターとして添加することで、0.1、0.9MPa下での触媒活性が大幅に向上することを見出した。

アンモニア分解反応の理論解析については、第一原理計算ソフトウェアと計算機システムを導入し電子状態を理論的に解析するシステムを構築して、計算条件の絞り込みと計算する分子系(モデル系)の構築、および計算資源利用法の検討などを行った。具体的な検討対象としては、アンモニア分子およびその分解生成物であるN<sub>2</sub>分子やH<sub>2</sub>分子、Ru単結晶、Ru(0001)表面のモデル系、微粒子のモデルとなる球状のRuクラスター、Ru(0001)表面へのNH<sub>3</sub>分子の分子状吸着状態およびN-H結合切断を伴う解離吸着状態、アンモニア分解反応の触媒担体として実験的に検討されているγ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>、γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>の(110)面へのRuクラスターの担持、およびγ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>担持RuクラスターへのNH<sub>3</sub>の分子状吸着について、テスト計算を行った。計算は主に定常状態について行ったが、第一原理分子動力学法も一部の計算に応用した。電子状態データベースシステムの開発については、電子状態計算の結果を登録する計算機システムを構築し、電子状態の類似性を判

定するソフトウェアを開発した。実験的な物性と電子状態の各種パラメーターの相関を自動的に解析するデータ解析アルゴリズムも新たに開発し、プログラムへの実装を行った。

### § 3. 成果発表等

(3-1) 原著論文発表

(3-2) 知財出願