

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 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
2. 研究代表者名及び主たる研究参加者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

研究代表者

西林 仁昭（東京大学大学院工学系研究科 教授）

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）

山本 旭（京都大学大学院人間・環境学研究科 助教）

坂田 健（東邦大学薬学部 教授）

志賀 紀仁（日産化学（株）材料科学研究所 主任研究員）

靱津 典夫（出光興産（株）次世代技術研究所 主幹研究員）

3. 事後評価結果

○評点：

A+ 非常に優れている

○総合評価コメント

本研究では、基礎的な研究レベルにある錯体触媒を用いて、これまでに達成されていない画期的なアンモニア合成及び分解反応による水素製造に向けて検討を開始し、中間評価段階で戦略目標を大きく上まわる、触媒性能を既に達成した。

その後の検討で、N-ヘテロサイクリックカルベン骨格を含むピンサー配位子を持つ、窒素架橋二核モリブデン錯体により、常温常圧で飛躍的に高い、アンモニアの生成を達成することに成功した。さらに、従来は窒素と水素との反応であったが、窒素と水から直接にアンモニアを合成できることを初めて見出した。還元剤としてヨウ化サマリウム、水をプロトン源として利用することで、使用原料の一般性を高め、アンモニアの生成量を錯体触媒を用いた反応として世界最高に達成させることに成功した。企業との連携により、錯体触媒の合成及び反応のラボスケールアップにも成功した。本研究開始前の錯体触媒系のアンモニア生成量を2桁以上向上させ、錯体触媒系による室温での窒素分子の活性化と高いアンモニア生成速度実現したことは画期的である。

アンモニアを酸化的に分解して窒素とプロトン、電子に変換する反応にも、高活性な Ru 錯体を開発した。このように、錯体触媒の有効性を次々に明らかにしたことは国際的にも高く評価されており、学術的にも重要で、著名な学術雑誌に多く掲載される結果となった。

極めて安定な窒素結合の室温活性化に成功したことは、将来エネルギーキャリアとしての利用にも展開される可能性がある。現状では特殊な還元剤の使用など、未だ実用化の段階にはないが、本研究で見出した反応が汎用性の高いものとして将来に発展していく基盤を確立した意義は大きい。

(2021年9月追記)

本課題は新型コロナウイルスの影響を受け、6ヶ月間期間を延長し、鍵中間体の一つであるモリブデン-ニトリド錯体の精製・同定や反応性、関連する反応の検討を行った。

その結果、アンモニア生成反応における新しい反応機構、二ヨウ化サマリウム-水錯体の構造と反応性について、分子触媒を用いた電気化学的還元手法、アンモニア分解反応について、実験と理論計算を行った結果、アンモニア生成、分解の両反応において機構、反応の有効性と将来展開について明らかにすることができた。延長により、今後の錯体触媒を用いたアンモニア合成、分解の両

反応においてイノベーションに向けた展開をより一層後押しする成果が得られた。