2024 年度

**創発的研究支援事業　年次報告書【公開版】**

| | |
|---|---|
| 研究担当者 | 北野 政明 |
| 研究機関名 | 東京科学大学 |
| 所属部署名 | 総合研究院　元素戦略 MDX 研究センター |
| 役職名 | 教授 |
| 研究課題名 | ヘテロアニオンサイトを反応場とする新規固体触媒の創出 |
| 研究実施期間 | 2024 年 4 月 1 日～2025 年 3 月 31 日 |

**研究成果の概要**

本年度は、ヘテロアニオンサイトを反応場とする触媒開発を行う中で以下の成果が得られた。大気中安定な $SrCN_2$ がアンモニア合成反応中に $CN_2$ 欠陥が生じることで低仕事関数表面が形成され、担持 Co 触媒を大幅に促進できることを明らかにした。$Co/SrCN_2$ は、大気暴露によって失活せず、一週間以上安定に作動した(ACS Catal. 2024, 14, 6349)。メカノケミカル法を用いることでペロブスカイト型酸水素化物を室温で合成できることを見いだした。例えば、1000℃以上、数 GPa の超高温高圧条件でのみ合成されていた $BaScO_2H$ や通常の熱的プロセスでは合成できなかった $BaYO_2H$ などの酸水素化物が常温常圧で合成できた。さらに、これらに Ru を担持すると同じ結晶構造を有する酸化物を担体とした場合よりも、遙かに高いアンモニア合成活性が得られた(Adv. Energy Mater. 2024, 14, 2402353)。2 元系窒化物および酸窒化物を担体とするアンモニア分解触媒において、窒素欠陥が活性点となり、窒素欠陥を容易に形成する材料ほど高い触媒活性を示すことを明らかにした(Chem. Commun. 2024, 60, 6447; NPG Asia Mater. 2024, 16. 54)。$Ba(NH_2)_2$ と $SiO_2$ の固相合成により新規なオルトケイ酸塩酸窒素水素化物である $Ba_3SiO_{5-x}N_yH_z$ の合成に成功した。$Ba_3SiO_{5-x}N_yH_z$ は、アニオン欠陥サイトの形成および格子 $H^-$ および $N^{3-}$ の再生を繰り返しながらアンモニアを合成するユニークなメカニズムにより、遷移金属サイトが無くてもアンモニア合成反応を促進でき、遷移金属触媒の中で最も高活性な Ru 触媒よりも高いことを示した(Nat. Chem. 2025, 17, 679)。