

ALCA-Next

「エネルギー変換・蓄エネルギー」領域

2024 年度 年次報告書

2024 年度採択

[研究開発代表者名:北野 政明]

[東京科学大学総合研究院 教授
(東京工業大学国際先駆研究機構 教授)]

[研究開発課題名:欠陥を反応場とする革新的アンモニアクラッキング]

主たる共同研究者:

[中村 公治 (つばめ BHB 株式会社 代表取締役 CEO)]

[椿 俊太郎 (九州大学大学院農学研究院 准教授)]

実施期間 : 2024 年 9 月 2 日～2025 年 3 月 31 日

§1. 研究開発成果の概要

本研究開発では、窒化物材料の欠陥サイトを反応場とする貴金属フリーかつ高性能な触媒を創出し、熱またはマイクロ波による省エネルギーなアンモニアクラッキングシステムの創出を目指している。熱を使ったプロセスでは、六方晶構造を有する $\text{BaTiO}_{3-x}\text{N}_y$ に Ni を固定した触媒が、酸化物に Ni を担持した触媒よりも $100\sim 150^\circ\text{C}$ 低温で作動することをこれまでに見出している。本年度は、活性点となる窒素欠陥サイトを形成しやすいペロブスカイト型酸窒化物を探索する中で、 $\text{BaZrO}_{3-x}\text{N}_y$ が他の酸窒化物よりも窒素欠陥形成エネルギーが半分以下となることを DFT 計算により明らかにした。実際に、酸水素化物を経由する合成手法により、 $\text{BaZrO}_{3-x}\text{N}_y$ の合成にも成功した。Ni を固定した $\text{BaZrO}_{3-x}\text{N}_y$ 触媒は、 Ni/BaZrO_3 よりも 100°C 以上低温で作動し、 $\text{Ni/BaTiO}_{3-x}\text{N}_y$ よりも低温で高効率に作動する。さらに、Ru を担持した BaZrO_3 よりも高い触媒活性となることを見出した。本触媒は、大気暴露しても活性が低下することなく長時間安定に触媒として作動する。また、各種分光分析や DFT 計算により窒素欠陥サイトが、反応場として働くことで活性化エネルギーが大きく減少することも明らかにした。また、マイクロ波を利用したプロセスにおいても、酸化物担持 Ni 触媒よりも窒化物材料に Ni を担持した触媒が、高効率にアンモニアを分解できることを見出した。

【代表的な原著論文情報】

なし