

未来社会創造事業 探索加速型  
「地球規模課題である低炭素社会の実現」領域  
年次報告書(探索研究期間)

令和3年度 研究開発年次報告書
--------------------

令和3年度採択研究開発代表者

[研究開発代表者名：細野 秀雄]

[東京工業大学 元素戦略研究センター・特命教授]

[研究開発課題名：グリーンアンモニアおよび尿素とその誘導体合成のための  
特異電子系触媒の開発]

実施期間：令和3年10月1日～令和4年3月31日

## §1. 研究開発実施体制

### (1)「研究代表」グループ(東京工業大学)

① 研究開発代表者:細野秀雄 (東京工業大学元素戦略研究センター、特命教授)

#### ② 研究項目

- ・C12A7 系触媒の改良
- ・Ru/Ba-Ca(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub> 触媒への大気中安定性の付与
- ・LaN 系触媒の改良、および酸素素水素化物触媒への大気中安定性の付与
- ・Bi 系のトポロジカル絶縁体物質による尿素誘導体合成の基礎検討

### (2)「共同研究」グループ(つばめ BHB)

① 主たる共同研究者:横山 壽治 (東京工業大学特任教授)

#### ② 研究項目

- ・グリーンアンモニア製造設備のプロセスシミュレーションの実施
- ・新規電子化物系触媒の工業化のための基礎検討

## §2. 研究開発成果の概要

材料の表面のみをエレクトライド化(表面エレクトライド化)するコンセプトで、Ru 担持 C12A7 エレクトライドと同等の触媒性能を有する触媒材料開発を行い、加圧条件下長時間にわたり安定な触媒活性を有する触媒材料の開発に成功した。また、これまで当グループで最高性能を有する触媒材料である Ru/Ba-Ca(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub> 触媒への大気中安定性の付与の検討を行う中で、CaCN<sub>2</sub> が大気中安定であり、表面エレクトライド化により性能が大きく向上することを見出している。現在、高表面積化など改良を行っている。また、Ru 系触媒の最適な活性点構造を金属間化合物 LaRuSi を使って理論および実験の両方から調べ、Ru への電子供与だけでなく、Ru 近傍に La サイトを形成することが、中間体の NH<sub>x</sub> 種(この生成が全体の律速)を安定化させる上で重要であることを解明した。さらに、尿素誘導体合成の基礎検討を開始し Bi 系のトポロジカル絶縁体物質が優れた触媒性能を示すことを明らかにした。共同研究機関のつばめ BHB(株)では、グリーンアンモニア製造設備のプロセスシミュレーションを実施するために新たに CO<sub>2</sub> 排出量のシミュレーションを行うことが可能なシミュレーターの導入を完了させた。初期段階のモデル組み上げテスト・動作確認まで終了している。また、5~10 MPa の高圧反応器の機器の調整と試運転の実施まで完了している。

### 【代表的な原著論文情報】

1. Y. Gong, H. Li, C. Li, X. Yang, J. Wang, H. Hosono, LaRuSi Electride Disrupts the Scaling Relations for Ammonia Synthesis, Chem. Mater. 2022, 34, 1677-1685.