

世界の人口は今後さらに増加し、2050年までに90億人を超えるとも言われている。これだけの人数分の食料を安定に確保する上で、肥料の原料となるアンモニアは欠かせない物質である。しかしアンモニアは現在、莫大なエネルギー消費（全世界のエネルギー消費量の1~2%相当）によって製造されている。そのエネルギーが天然ガスを中心に化石燃料から捻出されていることも見過ごせない。解決策として、低エネルギーでアンモニアをつくり出す窒素固定酵素の働きを模倣した錯体触媒系が提案されている。ただし成功例は限られており、活性も実用化には程遠い。

以上の背景より研究代表者は、ビスインドリル配位4族遷移金属錯体触媒を用いる新規アンモニア合成法の開発をめざしている。本助成研究実施期間中には、左下に示すチタンジアミド錯体とジクロロジメチルシランとの反応から、触媒となりうるジクロリド錯体を合成することに成功した。また得られたジクロリド錯体が、THF中、還元剤として働く粉末マグネシウムと反応して、窒素分子の捕捉・活性化に必須な配位不飽和低原子価種を与えることも明らかにした。実際、この還元反応を窒素雰囲気下で行なったところ、窒素分子の捕捉・活性化を示唆する結果を得た。関連して、チタンと同族のジルコニウムジアミド錯体を得ることもできた。

前段落の研究を進めていく中で、①ビスインドリル配位子に含まれる2つのインドリル基の一方が、一般的な平面構造ではなくピラミダルな構造をとること（単結晶X線構造解析より）②ビスインドリル配位子が溶液中で動的な挙動を示すこと（NMRより）を見出した。これらの知見は、ビスインドリル配位子が中心金属の立体的・電子的環境に対応して、その配位形式を柔軟に変更できることを示す。窒素分子のアンモニアへの変換は、逐次的な還元とプロトン化のプロセスであり、この過程には数多くの中間体が存在する。中間体ごとに金属周りの環境はさまざまであることから、柔軟性の高いビスインドリル配位子ならば、多様な中間体の適度な安定化が期待できる。

研究代表者は将来的に、風力や太陽光等による発電を得意とする青森県の風土を生かし、青森県由来の再生可能エネルギーをマグネシウムに蓄えてアンモニア製造に活用することを思い描いている（右下図）。そのための現状調査を青森県内企業と共同で実施し、青森県より供給される再生可能エネルギー（約70億kWh, 2030年試算）からどの程度使用すれば、この構想を実現できるのか、大まかに算出した。

