


【学術変革領域研究 (B)】

分子触媒・反応場・反応解析法の革新と協奏：CO₂光多電子還元の学理構築

	領域代表者	京都大学・工学研究科・講師 中田 明伸 (なかだ あきのぶ) 研究者番号:20845531
	研究領域情報	領域番号：23B208 研究期間：2023年度～2025年度 キーワード：光触媒、二酸化炭素還元、分子触媒、反応場、反応解析

なぜこの研究を行おうと思ったのか (研究の背景・目的)

●研究の全体像

カーボンニュートラル達成に向けた科学技術の中でも、革新的なブレークスルーが熟望される技術の1つに“太陽光エネルギー”と“光触媒”を用いた二酸化炭素(CO₂)の再資源化反応『人工光合成』が挙げられる。従来のCO₂還元反応を駆動する分子性の光触媒系の大半は、CO₂の2電子還元反応が選択的に進行し、一酸化炭素(CO)やギ酸が生成される。特にCOは、すでに実用化されている合成燃料の原料であり、経済産業省のカーボンサイクル技術ロードマップにおける基幹物質にも指定されている。

一方で多様な産業を持続的に支えるためには、COだけでなく様々な炭素化合物を恒常的に獲得する必要がある。例えば、メタノール(基幹物質)、メタン(ガス燃料)、オレフィン(プラスチック等基礎化学品原料)、エタノール・エチレングリコール等の含酸素化合物(機能性化学品)等の多岐に渡る炭素化合物がロードマップに挙げられている。これらの化合物の合成には、6電子以上の多電子還元(メタノール:6電子、メタン:8電子)、もしくはC-C結合形成が必要になる。このように多様なCO₂還元生成物を獲得するための学理の構築・革新的なブレークスルーの創出は、人工光合成の研究分野が長年達成できていない最重要課題である。人工光合成をカーボンニュートラル社会に資する技術へと変革するために、還元生成物の選択性を大幅に拡大し、従来の2電子還元系を凌駕する、より大きな学術体系を構築することが急務と考えられる。

6電子以上の多電子還元、C-C結合形成反応を選択的に起こすためには、①多数の中間体それぞれの性質・反応性を正確に把握し、②分子軌道レベルで構造を変調すると同時に、③電子・プロトン供給速度や触媒間の距離を制御する必要がある。これは、触媒創製・反応場設計・反応解析の全てを高いレベルで同時に実施しなければ達成できない極めて複雑な相互関連課題と言え、長年到達できなかった主たる理由である。本領域では、触媒創製技術・反応場設計技術・反応解析技術の3方向の「技術革新」を行うと同時に、これらを協奏的に連動させた領域研究を推進することで、従来の独立研究では困難であった高難易度CO₂光変換の実現につながる人工光合成の学理構築を目的としている。

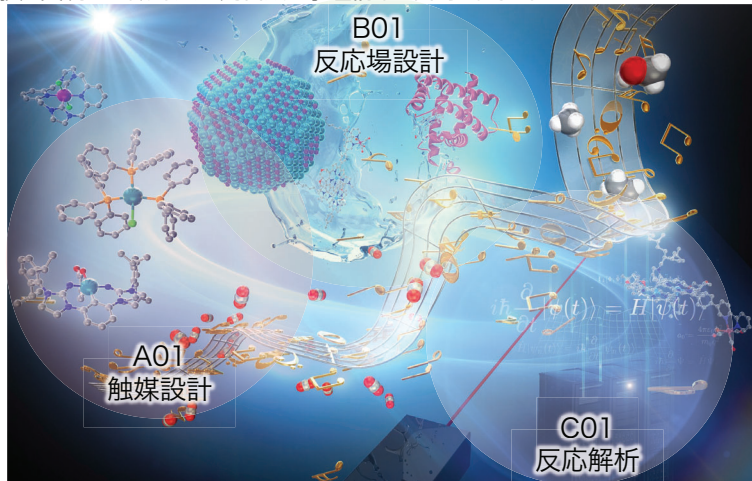


図1 本領域のイメージ図

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

本領域では、①CO₂から自在な炭化水素へ変換できる触媒創製技術(A01班)、②触媒に合わせて形状や性能を変調して触媒性能を飛躍的に上昇させる反応場設計技術(B01班)、③多光子・多電子反応の追跡を可能にする新規反応解析技術(C01班)、という3つの革新的技術を創出し、従来系では得られなかった多電子還元生成物・多炭素生成物を選択的に与える新しい人工光合成の学術領域を進展させる。

●A01 CO₂を多様な炭化水素へと変換する分子光触媒の創成

代表：村田 慧 東京大学 生産技術研究所 助教
 分担：山内 幸正 九州大学 大学院理学研究院 助教
 分担：中野 遼 名古屋大学 大学院工学研究科 助教

「CO₂の還元生成物」を触媒内に取り込んで活性化するアプローチにより、従来系では得られなかった炭素化合物を選択的に与える触媒の創成を目指す。C班との協業により各反応系における中間体の反応性を速度論・平衡論の両面から理解し、中間体の性能まで考慮した適切な反応場をB班との協業により構築する。

●B01 多電子CO₂変換を実現する複合光反応場の開発

代表：中田 明伸 京都大学 大学院工学研究科 講師
 分担：山崎 康臣 東京大学 大学院工学系研究科 助教
 分担：大洞 光司 大阪大学 大学院工学研究科 准教授

触媒の能力を引き出す「光反応場を設計する」という新しい概念で研究を推進する。A班の開発する触媒に対し基質を与える位置や速度を制御可能な反応場を設計し、C班との協業により、反応場がCO₂光変換反応の動作機構に与える影響を分子レベルで理解することで、光分子変換反応場の学理を構築する。

●C01 CO₂の多段階光還元過程を解析する多重励起過渡分光法の開拓

代表：宮田 潔志 九州大学 大学院理学研究院 准教授
 分担：倉持 悠輔 東京理科大学 理学部 講師
 分担：岩佐 豪 北海道大学 大学院理学研究院 助教

これまで本質的に不可能であった、多光子・多電子反応を解明する革新的な分析手法を開発する。A班の錯体触媒、及びB班の光反応場に対して協業により原理検証を進め、多くの中間体が存在する難解で複雑なCO₂の光多電子変換を紐解くことで、真に優れた触媒・反応場の設計指針を打ち立てる。

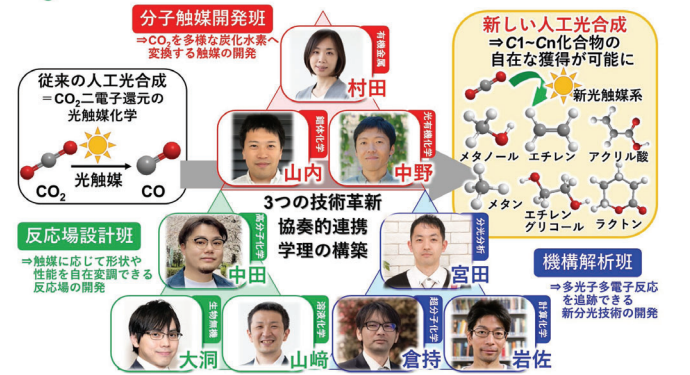


図2 本領域の研究体制

ホームページ

X (旧Twitter): 光触媒協奏学 @ConcertoPhoto
 HP(仮): <https://sites.google.com/view/akinobunakada-web/concerto-photocatalysis?authuser=0>