

環境研究総合推進費 研究概要・概要図

研究区分	革新型研究開発（若手枠B）
研究期間	2026年度（令和8年度）～2026年度（令和8年度）
研究課題番号	1RB-2602
体系的番号	JPMEERF20261RB2
研究課題名	サブナノ触媒の特異dバンド構造と原子ダイナミクスによって駆動するアンモニアクラッキング反応と水素製造
Project Title	Ammonia cracking and hydrogen production driven by the specific d-band structure and atomic dynamics of subnanocatalysts
研究代表機関	東京科学大学
研究代表者	森合 達也
研究領域	統合領域
研究キーワード	ナノマテリアル，卑金属，水素キャリア，dバンド，ボルケーノ相関

2026（令和8）年4月



環境研究総合推進費
Environment Research and Technology Development Fund



独立行政法人
環境再生保全機構
ERCA Environmental Restoration and Conservation Agency

研究の概要

地球温暖化対策とエネルギー安全保障の両面から、水素の社会実装が急務となっている。水素キャリアとして注目されるアンモニアは既存の製造・流通基盤を活用できる利点を持つが、分解（クラッキング）反応における高効率触媒の開発が技術的ボトルネックとなっている。現在、Ru等の貴金属触媒が高活性を示す一方で、希少性やコストの観点から広範な利用は困難であり、卑金属触媒による代替技術の確立が国際的に強く求められている。

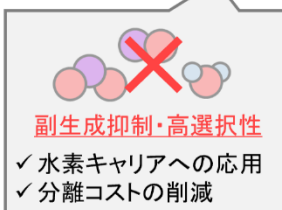
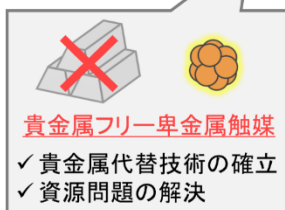
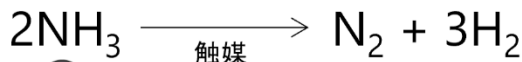
アンモニアクラッキング反応では、 NH_3 吸着とN-H結合切断、またはN-N結合形成と N_2 脱離のいずれかが律速段階となることが知られており、支配過程はN原子-金属(M)原子間の吸着力に依存するとされてきた。そのため両過程はトレードオフの関係にあり、N-M吸着力と触媒活性の間にはボルケーノ型の相関が見られる。様々な元素の中でとくにRuは、N原子との結合に適した位置にdバンドセンターを持ち、このボルケーノのトップに近いN-M吸着力を有するために本反応で高活性を示す一方、その希少性とコストが懸念されている。

本研究では、Fe、Co、Niで構成される卑金属サブナノ粒子（粒径約1 nm）を核数精度でデザインすることで、この限界を突破する新触媒を創出する。サブナノ粒子は、核数に依存して電子状態（dバンド構造）が大きく変化し、さらに粒子内で原子が流動的に移動する原子ダイナミクスを発現する。本研究では、これらサブナノに特有なdバンド構造や原子ダイナミクスこそが従来の活性限界を打破するキーファクターになるという着想に基づき、高機能アンモニアクラッキング卑金属触媒を創出する。この取り組みは未燃アンモニアの排出抑制や持続可能な水素社会の実現に繋がる。

研究の全体概要図

サブナノ触媒の**特異dバンド構造**と**原子ダイナミクス**によって駆動するアンモニアクラッキング反応と水素製造

アンモニアクラッキング反応



- カーボンニュートラル社会（ネット・ゼロ）と資源循環型経済の構築に貢献
- 持続可能な窒素管理の推進や生態系との調和（ネイチャーポジティブ）に寄与
- 未燃アンモニアの排出抑制や持続可能な水素社会の実現

