

最先端・次世代研究開発支援プログラム  
事後評価書

研究課題名	エネルギー固定型メカノ反応の開発と余剰動力の直接化学的燃料化
研究機関・部局・職名	北海道大学・大学院工学研究院・教授
氏名	伊藤 肇

## 【研究目的】

現代の文明社会では膨大な化石燃料が燃焼により消費され、二酸化炭素の増大による地球温暖化を招いている。本研究の動機は、産業革命以降続いていた化石燃料の燃焼による化学エネルギーの解放から動力の発生という流れを逆転させ、余剰動力エネルギーの化学的固定という新たな流れを生み出すことというものである。固体に対して力学的な刺激を与えて反応を促進させる手法は、メカノケミカル反応として19世紀から知られており、特に無機化合物を対象にした反応は数多くの研究がある。その中で、通常の加熱や加圧条件では達成不可能な特徴的な反応が発見されてきたが、有機化合物を対象とした研究は限定的なものであった。力学的エネルギーを化学的に変換する効率のよい方法がまったく不明であるという点がこのプロセスの最大の問題点であり、バルクの力を分子に伝達するための、分子レベルおよびナノサイズレベルの物質設計が必要と考えられるが、具体的な設計手法は知られていない。

この研究では、力学的刺激の化学的固定を目指して、(1) 力学的エネルギーを高エネルギー状態の分子構造または結晶構造として固定できるメカノ化合物の探索・発見と、より挑戦的な上位目標として、(2) 力学的エネルギーを使って低エネルギー化合物を変換し、高エネルギー物質を生産するメカノ反応の開発の二点について研究を行う。

## 【総合評価】

<input type="checkbox"/>	特に優れた成果が得られている
<input type="checkbox"/>	優れた成果が得られている
<input type="radio"/>	一定の成果が得られている
<input type="checkbox"/>	十分な成果が得られていない

## 【所見】

## ① 総合所見

力学的エネルギーを高エネルギー状態の分子構造または結晶構造として固定できるメカノ化合物については、可能性のある化合物を32種類発見することができた。また、力学的エネルギーを使って低エネルギー化合物を変換し、高エネルギー物質を

生産するメカノ反応については、これを実現するための分子結晶の作成を検討し、合理的な設計によって、反応 (Diels-Alder 反応) によるエネルギー固定の可能性をもつ結晶構造の作成が可能であることを明らかにした。

しかし、エネルギーを固定する触媒反応に関してはスクリーニングを数多く行い、固体状態である程度の反応が進行する系は見出すことができたものの、エネルギー固定化に適するような反応が効率よく進行するシステムの開発には最終的には至らなかったことは残念である。

一方、本補助事業期間に“固体結晶の分子ドミノ現象”と“無触媒ホウ素化反応”を発見した。この功績は付随的なものではあるが、大きな成果といえよう。

## ② 目的の達成状況

・ 所期の目的が

(全て達成された ・ 一部達成された ・ 達成されなかった)

有機化合物結晶内の相互作用転換を力学エネルギーで達成し、そこで蓄えられたエネルギーを、触媒作用を介して安定物質の化学変換を成し遂げようとする目的は大変価値が高い。

力学的エネルギーを高エネルギー状態の分子構造または結晶構造として固定できるメカノ化合物については、可能性のある化合物を32種類発見することができた。しかし、力学的エネルギーを使って低エネルギー化合物を変換し、高エネルギー物質を生産するメカノ反応については、これを実現するための分子結晶の作成を検討し、合理的な設計によって、反応 (Diels-Alder 反応) によるエネルギー固定の可能性をもつ結晶構造の作成が可能であることを明らかにしたものの、エネルギー固定化に適するような反応が効率よく進行するシステムの開発には最終的には至らなかった。

## ③ 研究の成果

・ これまでの研究成果により判明した事実や開発した技術等に先進性・優位性が (ある ・ ない)

・ ブレークスルーと呼べるような特筆すべき研究成果が (創出された ・ 創出されなかった)

・ 当初の目的の他に得られた成果が (ある ・ ない)

本研究課題の目的自体は先進性があり、達成されれば様々な面で技術的優位性が生まれるとともに、特徴あるものとして社会に存在することになる。なお、当初の目的にはない「分子ドミノ」現象を発見した。微小外部刺激による有機結晶の相変化の発見は特記すべきであろう。外部からの力学刺激で相変化する現象はよく知られているが、ごく微小の刺激が相変化をもたらす現象は限られる。発光性などの変化を利用してセンサーなどに応用可能であるなど、興味深い。

ホウ素化合物の合成は本研究の主目的とは全く関連しない成果であるが、固体関連で見いだされたものと推察される。高効率の合成反応として価値の高いものとして位置づけられよう。

**④ 研究成果の効果**

・研究成果は、関連する研究分野への波及効果が  
(■見込まれる ・ □見込まれない)

・社会的・経済的な課題の解決への波及効果が  
(□見込まれる ・ ■見込まれない)

機械的刺激により生じる分子ドミノ型単結晶－単結晶相転移現象の発見は、優れた成果ともいえる。この成果の発表を契機に、有機結晶工学の分野ではこのような現象の基礎研究が進展し、その応用の可能性が模索されていくと考えられる。

また、工業的な有機合成反応で多用されている有機ホウ素化合物の合成方法として、この研究課題で発見した無触媒ホウ素化反応は、従来の方法に比べてコストおよび安全面で優位にある。すでに企業から引き合いを受けていることから、工業的に適用可能であり、社会的に貢献しうる成果であると判断される。

**⑤ 研究実施マネジメントの状況**

・適切なマネジメントが (■行われた ・ □行われなかった)

2名の博士研究員と10名近くの大学院生が研究に参画しており、研究実施体制は適切であった。研究を実施しているメンバーとのディスカッションも頻繁に行われているため、適切なマネジメントが行われていた。助成金で購入した機器類はそれぞれ使用頻度が高く、研究を遂行する上で適切に活用されている。研究開始時の指摘事項については、報告書で適切に対応している。