

## 研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 二酸化炭素活性化機構の学理に基づくメタノール室温合成触媒の創成

2. 研究代表者： 中村 潤児（筑波大学数理物質系 教授）

共同研究者： 吉信 淳（東京大学物性研究所 教授）

森川 良忠（大阪大学大学院工学研究科 教授）

3. 事後評価結果

○評点:

**B** 成果がやや不足している

○総合評価コメント:

本研究課題は、表面科学・計算科学・触媒設計の融合によって、CO<sub>2</sub>活性化の学理を構築し、室温でメタノールを合成する方法を提示することを目的に研究を実施した。研究は2つの柱からなり、第一の柱は、表面科学に基づく反応素過程のダイナミクスおよびキネティクスの詳細な情報を基にメタノール合成の高効率化を目指すものであり、第二の柱は、ナノカーボン、特にグラフェンの触媒利用の確立を目指すものであった。

その結果、第一の柱では、CO<sub>2</sub>と水素からメタノールを合成する最初の素過程であるホルメート生成がEley-Rideal 機構であることを提案し、その証拠となる実験事実をいくつか得ることに成功した。一例としては、固体表面に吸着したホルメートが分解脱離する（ホルメート合成反応の逆反応過程）際に生じるCO<sub>2</sub>の熱的非平衡反応過程を実験的に示し、学術論文誌に掲載した。しかしながら、Eley-Rideal 型反応機構の実験的立証という点では、第一の論点であるCO<sub>2</sub>活性化モードに関し、未だ学術論文として受理されるに至っていない。一方第二の柱については、グラフェンによるPd イオンの自発的還元によるPd ナノ粒子の生成や、Pt-Cu 担持窒素ドーピンググラフェンにより微量のエタノール生成など、系統的研究とまでは言いがたいものの幾つかの興味ある現象を見つけている。

第一の柱、第二の柱ともに、学術的な視点からは重要な知見であると認められるものの、室温メタノール合成の方法論を提示するという採択当初の目的からすると、その道筋を明確にする方向での研究が着実に推進・達成されたとは認めがたい。また、共同研究者は表面科学並びに計算機科学の手法を駆使して、CO<sub>2</sub>の表面吸着に関する興味ある成果を得て論文発表等の成果を挙げてきているが、研究代表者の研究との連携、融合が十分になされているとは言いがたい。以上を総合した結果、成果がやや不足しているものと判断した。今後への期待としては、まず第一の柱については、上記したCO<sub>2</sub>活性化モードに関する論文の学術誌への掲載を早期に実現することが強く望まれる。一方第二の柱については、グラフェン触媒のポテンシャルをより具体的に示してもらいたい。これらの取組を通じて、室温メタノール合成に対してどのアプローチが有効であるのかを基礎研究の立場から示してもらいたい。