

第 4 章 募集対象となる研究領域

○ 戦略目標「多様な天然炭素資源を活用する革新的触媒の創製」(123 ページ)の下の研究領域

4.1.3 多様な天然炭素資源の活用に資する革新的触媒と創出技術

研究総括：上田 渉(神奈川大学 工学部物質生命化学科 教授)

研究領域の概要

本研究領域は、多様な天然炭素資源をバランスよく活用できる将来の産業基盤の確立に向けて、その根幹をなすメタンをはじめとするアルカンガス資源を従来にはない形で有用な化成品・エネルギーに変換するための革新的な触媒の創出を推進します。

埋蔵量が豊富な天然ガス等に含まれるメタンをはじめとするアルカンガス資源からこれまでにない技術で化成品やエネルギーへの変換が容易にできるようになれば、現代社会が直面する石油依存という問題からの脱却や二酸化炭素排出低減も可能になります。しかし、メタンなどのアルカンガス資源を直接化成品などに変換するプロセスは難度が高く、メタンの改質によって生成する合成ガス($\text{CO}+\text{H}_2$)を経由するなどの間接的なプロセスを利用しているのが現状です。

この高難度な課題を克服することが本研究領域の主眼であり、高度な触媒技術を生み出す新しい取り組みを推進します。そのためには、近年進化しているデータ科学、計算科学、計測技術などと連携することによって、これまでに蓄積された触媒に関する経験知を非連続的に飛躍させることが重要です。

本研究領域では、特に難度が高いメタンを反応基質とする研究を基軸に据えます。エタンやプロパン等の低級アルカンを反応基質とする反応については、既知の手法に比較して圧倒的に高活性・高選択性を目指す革新的な触媒研究を対象とします。

将来的に、化学産業における天然ガス等の資源の新たな活用を切り開き、ひいては新たな産業基盤の確立につながる、本格的にして世界をリードできる触媒研究を推進します。

募集・選考・研究領域運営にあたっての研究総括の方針

1. 募集・選考にあたっての方針

(背景)

近い将来、様々な炭素資源利用をバランスよく活用する新しい資源構造が到来すると予想され、その中心となる可能性があるのはメタンなどのアルカンガス資源です。日本は、近海にメタンハイドレート、隣国のロシアや中国には天然ガスやシェールガスが豊富に存在している立地にあり

第 4 章 募集対象となる研究領域

ますが、これらの資源活用には現時点では技術的に様々な制限があります。もしアルカンガス資源が石油と同等に利用できるようになれば、現在の日本の偏重した炭素資源依存からの脱却も可能になり、新しい炭素資源バランス構造に戦略的に対応できる状況になります。また、新しい化学産業を可能にし、例えばメタン直接燃料電池や将来の水素利用など、環境問題への対応も従来と異なるレベルで進められると期待できます。

従って、アルカンガス資源利用を中心とした新しい炭素資源バランス構造の達成は極めて重要です。そして、このバランス構造にシフトするために必要な化学技術を可能にする鍵が触媒であると考えます。膨大なアルカンガス資源を利用する化学プロセスを成立させる上で、触媒は欠かせないものであるからです。しかし、従来のエネルギー消費型のプロセス(例えばメタンの水蒸気改質)を踏襲するだけでは新しい時代に対応したとは言えません。旧来技術から脱却する更なる鍵として、アルカンガス資源を最大効率で利用するプロセス(例えばエネルギー併産型の触媒酸化による化成品合成)を達成することや、これまでにない方向の反応(例えばメタンからメタノール)を達成することが必要です。そのため、求める触媒は極めて高度であると言えます。さらに、アルカンガス資源は石油などと比べて反応性が極めて低いため、従来の石油化学の触媒技術にとられない、圧倒的に革新的な触媒化学と技術の発展が必要です。

現在発展中のナノ集積や超空間構造などから生まれる新しい物質状態を構築する方法論は、新しい機能を持った触媒の開発に繋がり、大変重要です。一方で、構造的には単純であっても新物質が生み出す従来にない触媒機能に着目する取り組みも重要です。その理由は、物質世界にはまだまだ触媒として未検討の物質が多く存在しているからです。これら未検討物質を触媒として着目してこなかったのは、旧来の触媒化学における触媒開発の方法論や常識がこれを阻んでいたためと言えます。難度の高いメタンの触媒反応を達成する上ではいかなる常識にもとられない取り組みが必要不可欠です。すなわち、近年進化しているデータ科学、計算科学、計測技術などと連携することによって、これまでに蓄積された触媒に関する経験知を不連続的に飛躍させる新時代の触媒開発研究が必要と考えます。

本研究領域では、以下に例示した四つの取り組みの方向性を参考に、従来にない触媒機能領域に到達する斬新な研究構想展開を推奨します。

例 1. 未検討物質をベースとした新規触媒物質探索

従来の触媒形態を踏襲しながら広い範囲で絨毯爆撃的に物質探索するこれまでの方式から脱却し、革新的な触媒の創出技術の発展を目指します。具体的にはこれまでに多くの研究分野で蓄積されてきたすべての物質、材料の中から、既に触媒として研究されてきた系を除外し、残った未検討の物質、材料の中から新規触媒物質を探索します。すなわち既知に基づく連続的展開を排除します。

第 4 章 募集対象となる研究領域

この膨大な物質群の中から触媒目的にあった新規触媒物質の探索を効率的に行うためには、旧来の触媒化学における研究方法にとらわれない、画期的な研究手法の確立が必須であると考えます。例えば、近年進化している計測技術やマテリアルズインフォマティクスなどが革新的な触媒の創出を先導する研究提案を推奨します。

例 2. 新しい物質状態の構築による革新的触媒の創出

すでに触媒として存在している物質(元素種やその構成)に新しい物質状態(不安定な価数、原子の立体配置、複雑構造体、多元的な組織体など)を導入し、メタンをはじめとするアルカンガスの触媒反応の達成に導く、新しい物質合成法や触媒機能付与の方法論の展開を目指します。これは革新的触媒の創出にとって最も重要な取り組みであり、研究者のオリジナリティーが触媒機能創出へ強く反映されることを望みます。

このような触媒目的にあった元素レベルの局所的環境を精緻に制御できる方法論の展開には、多様な分野の物質研究で得られる知見の活用が有効と考えます。従って、触媒分野以外の研究者の中心的参画も望ましい姿です。また、ここでの取り組みは例 1 で得られる新規触媒物質の更なる発展を促すという波及効果も期待できます。

例 3. 触媒反応の「ダイナミズム」の理解と、それに基づく触媒の革新化

触媒物質は、反応物や生成物が関与して動的に変化する、すなわちダイナミズムを必ず持つもので、触媒以外の物質研究では普通なじみがない現象が伴います。特に触媒酸化反応はこの現象の影響を強く受ける一例です。このダイナミズムの制御が触媒を生み出す上で最も難関であり、新しい物質を触媒として検討してもすぐに結果につながらない理由の一つでもあります。この重要な点を強く意識して触媒物質を選択した研究を進める必要がありますが、意識だけではこの難しい命題を達成することはできません。必要なのはダイナミズムを担保する物質構造を明快にする学術展開です。それはダイナミズムの計算科学であり、ダイナミズムのその場観察、計測であり、そして触媒物質構造-ダイナミズム相関の確立です。さらに進んで、メタン触媒化学を明確にターゲットにした上述のような計算科学や計測技術の取り組みが必要になるでしょう。ここでの情報を他の研究、例えば新しい物質状態構築の研究にフィードバックすることで他のグループとの連携を進め、それぞれの触媒の具体化や革新化への貢献を期待します。

例 4. 優れた機能を持つ分子集合触媒の創製

分子集合触媒の創製にあたっては、メタンモノオキシゲナーゼなどの自然酵素系や酵素を模倣する分子性触媒がベースになると考えられますが、膨大なアルカンガス資源を利用する化学プロセスを成立させるためには、酵素の機能(反応量、反応速度 等)を凌駕する触媒の成立が必要に

第 4 章 募集対象となる研究領域

なります。そのためには、従来検討されてきた活性化機能に加えて、反応を促進する場の構築等、「多点相互作用領域」を形成する新しい分子集合触媒創製が有望であると考えます。

本事例においても、多分野の研究者の知の共有によって、従来の分子性触媒の進化を飛躍的に加速し、新しい物質状態へと発展させることが期待できます。

(本年度の方針)

本研究領域では、以上のような研究構想を参考に、アルカンガス資源の化学変換のための触媒機能についての的確でかつ新しい視点を持ち、果敢に分野間の協働を設計し、革新的な触媒を生み出す研究を募集します。そして本年度は、計測や計算手法を用いた触媒機能の高度解析・予測を主眼に置く研究提案の単独応募も可能とします。採択された研究課題の成果は、研究領域共通の基盤技術として活用することを目指し、他の研究チームとの連携を推奨、支援します。

また、関連の CREST・さきがけ研究領域等との連携も視野に入れた領域運営を行いますので、チーム形成においては、その点を留意して応募してください。

対象とする反応は特に定めませんが、メタンを反応基質とする研究に主眼を置きます。メタン以外の、エタンやプロパン等を反応基質とする反応については、既知の手法より圧倒的に高活性・高選択性である触媒の創製を目指す革新的な研究を推進します。

2. 領域運営方針

研究領域全体としては、研究代表者のリーダーシップのもと将来的な産業界との連携を見据えた高水準な研究を推進します。研究期間途中でも、アルカンガス資源を有用な化成品・エネルギーに変換可能な触媒の創出につながる研究成果については、産業界との共同研究等を推奨します。

本研究領域の運営においては、国際的な研究開発のベンチマーキングを踏まえ、各研究課題に関して、研究費配分、研究チーム構成などを通じて、研究計画の最適化を図る方針です。

また、同時期に発足し、メタンをはじめとするアルカンガス資源の革新的触媒創製に取り組むさきがけ「革新的触媒の物質科学と創製」と、理論やデータ科学に基づく計算を主眼として物質研究に取り組むさきがけ「理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的マテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築」とは、連携を可能にするための合同会議の開催や支援策を検討します。

さらに、研究の進展に応じて、文部科学省ナノテクノロジープラットフォームをはじめとする、全国の研究機関や枠組みとの連携や協働を促進します。

【留意事項】

本研究領域では、研究費総額の上限を 1 課題あたり 3 億円として提案を募集します。

第 4 章 募集対象となる研究領域

※ 本研究領域の募集説明会を下記日程で開催します。ご関心のある多くの方々の参加をお待ちしております。

	日時	場所
関東	7月1日(水) 15:00~16:30	JST 東京本部 B1大会議室(東京都千代田区四番町5-3 サイエンスプラザ)
関西	7月2日(木) 10:00~11:00	キャンパスプラザ京都 4階第3講義室(京都市下京区西洞院通塩小路下る東塩小路町939)

詳細については、<http://www.senryaku.jst.go.jp/teian.html>をご参照ください。