

○ 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」(271 ページ)の下の研究領域

6.1.10 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(CO+H₂)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ガス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、様々な炭素資源をバランスよく活用する新しい資源利用体制が到来すると予想され、その中心的な位置づけになりうるのが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がありますが、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おなじように高度利用できる効率的な技術ができれば、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、また新しい炭素資源バランス構造に戦略的に対応できるようになります。さらに、新しい化学産業を可能にし、メタン直接燃料電池や将来の水素利用などにより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。

今求められるのはアルカンガス資源を最大限に利用するために必要な新しい化学技術です。そしてそれを可能にする鍵が触媒であると考えます。反応性の低いアルカンガス資源を膨大に利用する化学プロセスには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。これらをはるかに凌駕することが求められます。旧来技術から脱却するにはアルカンガス資源を最大効率で利用した環境負荷の低いプロセスを達成したり、これまでにない方向の反応(例えば、低温活性化によるメタンからの直接メタノール合成など)を達成したりするような、極めて高度で、革新的な触媒が求められます。従来の石油化学の触媒技術展開にとらわれない、触媒の化学と技術の集積が必要となるでしょう。

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固体や分子性の触媒の開発に繋がる大きな可能性をもっており、メタン利用の触媒化学技術に革新をもたらすと期待されます。特にメタンの反応では、酵素を用いた研究例からも分かるとおり、触媒活性の点としての領域を越え、分子を特異的に活性化する広がりのある反応場の空間構築、さらには望むものだけを生成させる反応場導入が重要です。よって、人工触媒で反応場構築を成立させる果敢な取り組みが必要であり、その中では革新的な反応プロセス工学を盛り込むことも重要な取り組みとなります。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。この取り組みには、近年進化しているデータ科学、計算科学、計測技術などと緊密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可能になると考えます。

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。いずれにしても、メタンを主役に、その特性を十分に織り込んだ上でポテンシャルの高い触媒設計概念を提示し、実施することが不可欠です。概念の革新性を実証する上で初期的にエタンやプロパンなどのアルカンガス資源をターゲットにすることは有意義ですが、メタン反応の展望が見える必要があります。

例 1. 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、ゼオライトや錯体などの構造体)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を達成します。新しい物質合成法や触媒機能付与の方法論の展開も含まれます。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るため、研究者のオリジナルな触媒設計概念のもと、触媒機能創出にむけて強く挑戦されることを望みます。

例 2. 優れた機能を持つ分子集合触媒の創製

錯体やクラスターなどの分子集合触媒の創製にあたり、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、生体酵素の機能を学びつつもこれを凌駕する人工触媒の成立が必要になります。そのためには、従来検討されてきた分子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。

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-ダイナミズム関連の確立です。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. 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。

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。

以上のような元素レベル、空間レベルの局所的環境を精緻に制御できる触媒構築方法論の展開には、多様な分野の物質研究の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積極的な参画あるいは中心的な実施も望ましいと考えます。

第 6 章 募集対象となる研究領域

(本年度の方針)

本研究領域では、上述の研究構想のもと、メタンに代表されるアルカンガス資源を化学変換するための革新的な触媒を生み出す研究を募集します。すでに酵素系で 2 件と錯体系 1 件の新しい取り組みと 4 件の固体系触媒による革新的な触媒創出の研究、および本研究領域とさきがけ領域にまたがり計算化学の視点から研究を横断的に支援する取り組みを 1 件採択し、組織展開を期した体制を発足させています。

本年度の募集にあたっては、本領域課題であるメタン利用研究の拡張を継続的に図りつつ、より新触媒創出、およびその方法論に指向した触媒開発研究を推進する方針とします。すなわち錯体基盤物質、ゼオライト機能物質、MOF などの機能細孔物質、複合酸化物、ハイブリッド構造体、クラスター物質など広い視点での触媒物質研究、そして反応分子を新しい方法で活性化して反応を誘起し、生成物を効果的に物質移動させ、再び必要な電子やイオンを供給するなどの反応場を構築する反応システム研究、またマテリアルズインフォマティクスを展開するなどして触媒インフォマティクスを構築し新触媒を創出する研究を募集します。さらに、環境 TEM や放射光などを用いたその場観察計測をベースとして、実触媒に近い環境下での触媒機能のダイナミズムの理解、高度解析・予測を主題にした革新的触媒創出法の研究提案を募集します。なお、当該提案においては、「触媒計測・評価チーム」として、本研究領域およびさきがけ領域にまたがり計測・評価の視点から研究を横断的に支援することが可能なチーム編成を期待します。

触媒分野に限らず、様々な分野の応募者がこれまでに培ってきたポテンシャルのある学術・技術を入念な研究戦略のもとで発展、展開し、革新的触媒を生み出す、独創的な研究を歓迎します。また、応募者には、果敢に分野間の協働を設計すること、研究の困難をものともせず挑戦し続ける強い研究力を持つことを望みます。

本研究領域はメタンを反応基質とする研究に主眼を置きます。エタンやプロパン等を反応基質とする場合には、メタン反応の可能性が展望できる学理と目標を明示して研究計画を設定してください。

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。

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

第 6 章 募集対象となる研究領域

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。

※ 本年度は募集説明会を開催しません。過年度の募集説明会の資料・動画を研究提案募集ウェブサイトに掲載しておりますので、そちらもご覧ください。

研究提案募集ウェブサイト <http://www.senryaku.jst.go.jp/teian.html>