

○ 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

### 6.2.11 革新的触媒の科学と創製

研究総括：北川 宏(京都大学大学院 理学研究科 教授)

#### 研究領域の概要

現代社会では、石油を主な炭素資源として、化成品やエネルギーへ変換可能な原料を生産しています。石油に加えて、天然ガス等に豊富に含まれるメタンや低級アルカン等も化学産業の原料として効率的に活用するためには、新しい発想を用いた、極めて高度な技術の創出が重要です。

本研究領域では、メタンや低級アルカン等を、化成品原料やエネルギーへ効率的に変換するための革新的な触媒の創製に取り組みます。

具体的には、メタンや低級アルカンを効率的に変換できる反応に関して、高度な触媒の設計と創製につながる研究を推進します。触媒の種類は、均一系、不均一系、微生物等、広い範囲のものを対象とし、金属、酸化物、金属錯体及び有機金属錯体、分子、タンパク質等が、ナノ粒子、ナノワイヤ、ナノシート、多孔性物質、籠型、コアシェル型等、多岐にわたる構造を形成する、物質・材料の研究を推進します。さらに、光、プラズマ、電場などの反応場を用いた研究も対象とします。

近年進化している計算科学や計測技術分野などと連携して、触媒科学のナノテクノロジー・材料研究において新たな方法論を切り拓き、新しいサイエンスの源流になり得るとともに、将来的に、化学産業を変える可能性を持つ、挑戦的・独創的な研究を推進します。

#### 募集・選考・研究領域運営にあたっての研究総括の方針

##### 1. 背景

現代社会では、石油を主な炭素資源として、基礎化学品や化成品、エネルギーへ変換可能な原料を生産していますが、資源やエネルギーマネジメントの一環として、石油に加えて、天然ガス等の安価な資源を基礎化学品や化成品、エネルギーへ変換可能な原料を生産するために活用することが求められています。

一方で、天然ガス資源の中でもっとも豊富なメタンを資源として利用する既存の工業プロセスでは、合成ガス( $\text{CO} + \text{H}_2$ )を経由した間接的なものが主流で、メタンから直接的に有用な基礎化学品や化成品を得る方法は難度が高く、工業化が進んでいません。また、低級アルカンの変換はメタンよりは容易ですが、既存の化学産業プロセスに代わるためには、より画期的な変換プロセスが必要です。海外でも、

「Valorization of low value carbon(炭素資源の高価値化)」という旗印の下、新しいプロセスの研究

開発が盛んです。そこで、メタンや低級アルカンを、直接、有用な基礎化学品に変換できる、画期的な触媒・プロセスが実現できれば、かつてアンモニアの合成を実現したハーバー・ボッシュ法が窒素の固定化を実現し、オレフィン重合チグラマー・ナッタ触媒が石油産業を押し上げたように、天然ガス資源を用いた「ガス化学工業」の幕開けにつながることを期待でき、国際的にも非常に高いインパクトが見込めますが、そのためには、極めて高い技術の創出が必要とされています。また、様々な基礎化学品を原料とする既存の工業プロセスにおいても、大幅なエネルギーの削減が可能な革新的触媒の開発にも期待がかかっています。さらに、天然炭素資源に限らずとも、工業プロセスとしては未だ模索の段階にある中長期的課題、例えば身の回りに豊富に存在する空気や水を資源として基礎化学品に転換する触媒技術の開発等、にも広く社会から期待されています。

### 2. 募集・選考の方針

本研究領域では、これまでの研究の単なる延長にあるものや、これまでの研究の原理を組み合わせただけの、既存技術の改良研究は対象としません。上記背景を念頭に置きつつ、メタンや低級アルカンを原料とし、より高付加価値の基礎化学品や化成品やエネルギーへ効率的に変換するための反応に関して、斬新なアイデア・概念に基づいた革新的な触媒の設計と創製につながる研究を推進します。また、広く汎用性が期待され、将来的に低級アルカン等への応用が見込まれる画期的な技術革新については、低級アルカン以外の物質を原料として、基礎化学品に転換する提案も歓迎します。それにより、触媒科学のナノテクノロジー・材料研究において新たな方法論を切り拓き、新しいサイエンスの源流になり得るとともに、将来的に、化学産業を変える可能性を持つ、挑戦的・独創的な研究を推進します。

本研究領域が対象とする触媒の種類や対象反応を以下に掲げますが、既存の触媒性能を遙かに凌駕する革新的触媒の創製へ貢献することが期待される提案については、以下の触媒の種類や対象反応に限らない研究提案も広く募集します。さらに、実在系に即した計測手法や計算科学を基盤とする研究も歓迎いたします。

#### 1) 触媒の種類

本募集において提案者が取り組む触媒は、均一系、不均一系、微生物等、種類は問いません。金属、酸化物、金属錯体及び有機金属錯体、分子、タンパク質等の活性物質が、ナノ粒子、ナノワイヤ、ナノシート、多孔性物質、籠型、コアシェル型等、多岐にわたる構造を形成する、物質・材料の研究を推進します。

また、広い意味での触媒を対象とし、光、プラズマ、電場、微生物など、従来の化学産業では触媒として活用されていない、反応場やプロセスを用いた研究も対象とします。さらに触媒反応の高効率化に資する、プロセスエンジニアリングに関する研究アプローチも歓迎します。

将来的に、化学産業を変える可能性を持つ、独創性が高いナノテクノロジー・材料研究を特色とした研究を優先します。

### 2) 対象反応

本募集において提案者が取り組む反応の種類は問いませんが、いまだ実現に至っていない、メタンを反応基質とし、メタノール、オレフィン、芳香族等などの有用な基礎化学品や化成品へ直接的・効率的に変換できる、画期的な触媒研究に挑戦する提案を歓迎します。一方で、エタンやプロパン等の低級アルカンは、メタンよりは反応性が高く、すでに多様な研究が進んでいます。そのため、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は、既知の反応と比較して革新的に高活性・高選択性であることを条件とします。また、既存の概念や技術を越える画期的な提案であり、広く汎用性が期待され将来的に低級アルカン等への応用が見込まれることを前提として、低級アルカン以外の物質を原料とする化学反応も対象とします。

### 3. 採択の方針

本研究領域ではこれまでの研究の単なる延長にあるものやこれまでの研究の原理を組み合わせただけの、既存技術の改良研究は対象としません。メタンや低級アルカンの反応活性化について、真に革新的な、新しい切り口で挑んでいただきたいと思います。そのためには、国際的な研究動向を明示し、これまで行われてきた研究と比較した優位性・独創性を研究提案にて明確にしてください。

さきがけの研究期間約 3 年の間に、設定した目標を達成することを前提としつつ、採択する研究テーマは、さきがけ研究と呼ぶにふさわしい、提案者の研究人生において重要な礎になり得るもの、将来的に新しいサイエンスの源流を創り、科学技術イノベーションの源泉に発展しうるものを募集します。さきがけ研究を契機に研究者が大きく飛躍することを目指し、さきがけ制度の趣旨を強く意識した採択方針を掲げます。すなわち、研究提案者自身が個人としてあたためてきた新しい概念を本さきがけ研究で提案し、出身研究室や所属研究室の研究や枠を越えて展開することを期待します。

平成 28 年度は、上述の募集や採択の方針にもとづき、触媒の種類や反応機構について多岐にわたる提案を採択することができました。特に、実在系に即した計測手法や計算科学、プロセスエンジニアリングを基盤とした提案を数件採択することができ、領域内での技術連携の礎を構築することができました。

平成 29 年度も引き続き、幅広く独創的で挑戦的な提案を期待していますが、特に以下の触媒反応や技術に関する提案を歓迎します。

- メタンを直接触媒反応させて水素を生成し副生成物である芳香族化合物を回収するメタン直接改質や、より低温で水蒸気から水素を効率的に製造する水蒸気メタン改質など、難易度の高い触媒研究に挑戦する提案
- 放射光を用いたオペランド XPS や高温・高圧 XAFS 観測などの実在系に即した計測手法に立脚した触媒創出

- 反応速度論や第一原理計算にもとづく高度なシミュレーションやインフォマティクス技術にもとづく触媒機能予測
- 分離技術などの平衡回避技術やプロセスエンジニアリングにもとづく革新的な反応システム提案

触媒として新規の物質・材料を採用する研究提案においては、予備的な実験結果を示すことが望ましいですが、現段階で着想段階に留まっているものについては、研究提案の内容の妥当性と、本研究領域の趣旨にいかにか致するかをより明確に示してほしいと思います。たとえば、対象反応に対する熱力学的・速度論的な考察や反応機構にもとづいた提案を期待しています。加えて、研究対象の物質・材料が、ねらいの触媒機能を示すことを検証する方法・時期を研究提案に明記してください。なお、研究者自身が検証を行うことが困難な場合は、他者との協働等によって検証を行うことも可能としますが、個人型研究の趣旨を踏まえ、提案者自身が研究を主導的に進めることが条件となります。

本研究領域では、研究成果の最大化を目指した、外部研究者との連携を推奨しますので、研究提案に連携先、連携内容と期待できる効果を明記してください。なお、連携を行う場合でも、個人型研究としての実施が前提ですので、外部連携先への研究費の配分はありません。

触媒反応のデータ科学や理論計算、計測手法等を用いて触媒機能の解析・予測手法の開発に主眼を置く研究提案においては、個人型研究として確立したものであるとともに、採択後には、本研究領域の基盤的な技術として、他の研究課題と積極的な連携を行うことを求めます。

本研究領域で採択された研究者は、物質のデータ科学の推進を目指す、同時期に発足するさきがけ研究領域「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」に採択された研究者との意見交換会の場を積極的に設け、研究者間の連携のための支援を検討します。また、同じ戦略目標の下に実施する CREST 研究領域「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」との積極的な連携も推進します。

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。

### 4. 領域運営の方針、人材育成

本研究領域で採択する研究者は、研究の社会的な背景等をしっかり理解しつつ、自身のさきがけ研究を切り拓き、将来的には産業界との連携を支えられるような人材に成長することを期待します。そのため、本研究領域に参画する研究者は、研究期間中、知財権取得に関する検討を積極的に行っていただきます。

また、研究領域が継続する 6 年間にわたって、研究領域内の研究者、関連するさきがけや CREST 研究領域に参画する研究者との議論や連携を通じて、自身の研究を大きく飛躍させるとともに、本研究領域の発展に貢献していただきたいと思います。

## 第 6 章 募集対象となる研究領域

※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  
( <http://www.senryaku.jst.go.jp/teian.html> ) 。