

○戦略目標「持続可能な社会の実現に資する新たな生産プロセス構築のための革新的反応技術の創出」の下の研究領域

電子やイオン等の能動的制御と反応

研究総括：関根 泰（早稲田大学 理工学術院 教授）

研究領域の概要

本研究領域では、電気や光などを用いて電子やイオンの能動的な制御を狙い、革新的な化学反応技術を創出することを目的とします。これによって、従来にない物質生産プロセスを実現させ、既存技術における反応制御の難しさ、収率や選択性の低さ、高い反応温度、平衡制約などから脱却できる新たな化学反応の体系を確立することを狙います。

具体的には、電気化学や光化学、非在来型プロセスなどを単独あるいは組み合わせることにより、電子やイオンを能動的に制御し、これによって化学反応の選択性向上、平衡制約からの脱却といった次世代反応場の開拓を狙います。高効率な物質合成に資する化学反応プロセスのみならず、反応プロセスを構築するための新規材料開発、例えば従来にない中温域で作動しうる新規イオン伝導材料の開発やこれら反応・材料の新規評価方法の確立、そのために必要となる理論化学の援用によるモデル化と実験系へのフィードバックなども研究対象に含めます。

化学（電気や光など）、反応プロセス（フローリアクターなど）、材料（電極材料、固体イオニクス材料、触媒など）、計測、理論の融合からなる次世代反応プロセスの創出により、持続可能な社会の実現を目指します。

募集・選考・領域運営にあたっての研究総括の方針

1. 背景

パリ協定の本格実施を踏まえ、化石資源に極力依存しないエネルギー利用社会づくりと化石資源消費を大幅に削減しうるものづくりプロセスが期待されています。

地球は宇宙から見ると、物質系としては閉じた殻になります。これまでは、この閉じた殻の中で、化石資源という地球 40 億年の遺産を用い、エネルギーや物質づくりに使用してきました。しかしながら、地球の持続性を考えると、今後はなるべく化石資源に依存せず、エネルギー源としては太陽の恵みを活かし、物質としては地表と大気に存在する化合物のみを使ってものづくりをすることが望まれます。また、化石資源からの脱却の過程では、橋渡し技術として天然ガス利用も重要になります。このような環境において、使うことが出来るのは、太陽光由来の再生可能エネルギー（電力や比較的低位の熱）、植物資源、水や二酸化

炭素、そして橋渡しの天然ガスとなります。これらを用いて、従来にないエネルギー変換、物質変換を生み出すのがこの領域です。

そのために、電気や光などの外力を用いて、電子やイオンを能動的に制御し、化学反応を選択的に進め、付加価値の高い物質を創り出す技術やエネルギー源として価値ある物質を創り出す技術、新しいルートで進める化学反応を求めています。また、そのような新しい化学反応において、その反応機構解明をオペランド計測や理論化学などの手法で明らかにすることも重要です。さらには、その際に必要となるイオン伝導体・メディエーターなどに用いる新材料の開発も期待されます。これらを組み合わせることで、地球上に普遍的に存在する物質から、付加価値の高い物質、エネルギー源を創り出す反応プロセスを生み出されることが期待されます。

これまで、光触媒、人工光合成、燃料電池、電解合成など、個別の研究はなされてきましたが、上記のような分野を横断した新しい化学反応体系を作り出していくことを望んでいます。

2. 募集選考と方針

選択の基準は、従来技術の延長でないこと、従来技術の組み合わせや網羅的研究でないこととなります。研究者には、各自の持つシーズをもとに、独創性のある提案が求められます。具体的な研究例としては、

1. 電気や光などにより、電子やイオンを能動的に制御する化学反応の機構解明と新反応ルートの開拓
2. 電気や光などを用いた革新的反応プロセス構築のための新規材料の創製
3. 電気や光などを用いた革新的反応プロセスの構築

の3つが挙げられます。

1. については、化学反応を外部からの波長制御、電位制御などによって、能動的に制御できる新たな反応系、新たな反応ルートの開拓と、それによって実現される高い選択性と収率が期待されています。また、それらを解析するためのオペランド計測技術や理論化学に関する提案も望まれます。オペランド計測は、電子やイオンの動きをダイレクトに評価しうる手法の提案を歓迎します。理論化学は、新たなプロセスや物質開発の予想に繋がるものを期待します。

2. については、電子やイオンの動きを制御するために必要な新たな材料群、とりわけ中低温域で高い性能を発現しうるイオン伝導体、固体イオニクス材料の創製などが期待されます。

3. については、電気や光などを用いた新しい反応プロセスを用いて、能動的に制御された化学プロセスの実現と、それによる高付加価値物質の創出が期待されます。例えば、燃料電池・二次電池開発や人工光合成、マイクロリアクター・フロー合成などで培われた要素技術・デバイス技術を積極的に適用した高効率な反応プロセスにより二次エネルギー源、や高

付加価値の化合物（ファインケミカルや医薬品など）の合成を進めることを期待します。

上記に加え、今年度は特に以下のような提案を期待しています。

- ・新たな反応・プロセスや物質開発を自らが先導していく理論化学（計算）の提案
- ・これらを活かしたまま解析するオペランド計測に関わる提案
- ・化学反応に物理現象等の新しい概念を適応した異分野融合の新規性、独創性に富んだ提案、特に新進気鋭の若手研究者による大胆な発想や独創的な研究構想のフレッシュでユニークな提案

予備的な検討により、実現可能性を示すデータを得た上で、挑戦してほしいと思います。

（本領域では、反応を伴わないデバイスの開発や微小なエネルギーを用いた生体プロセスは対象としていません。）

3. 領域運営と方針

本研究領域においては、個人研究者の独創的な研究を推進するのみならず、研究者間での分野の垣根を超えた共同研究を強くサポートしていきます。将来的に、世界一となっていくような「力強い集団」の形成を期待します。そのためには、3年半の研究期間に、研究者ごとに複数の領域内共同研究を行うことを必須とします。また、同領域のCREST研究領域等とも、ワークショップやシンポジウムなどを行い、交流を深めてもらいます。これらによって、本さきがけ研究が、採択された研究者にとって飛躍的なステップアップとなる場を創り出していきたいと考えています。

一例として、新反応ルートの開拓者とそれを独創的にオペランド計測で機構解析する研究者、さらにはその理論を密度汎関数法で解き明かし、さらなるPDCAにつながる予測を打ち立てる研究者、そのために必要となる新規材料（電極材料、固体イオニクス材料、触媒等）創製の研究者、これらを組み込み、新規で有用な合成を行う反応プロセスの研究者がタッグを組めば、我が国発の新たな化学を確立することが期待出来ます。

そのために、研究総括、領域アドバイザーが一丸となって、ネットワーク型研究所としての「さきがけ」を活用して、とことん研究者をサポートしていきます。