

## 研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 計算化学が先導するメタン酸化触媒の開発と触媒設計技術の創成

2. 研究代表者： 吉澤 一成 （九州大学先導物質化学研究所 教授）

3. 中間評価結果

本研究課題は、メタンの活性化機構導出やメタン反応にふさわしい触媒創出を理論計算化学の方法論で実施し、また触媒創出のためのインフォマティクス体制の構築に向けた活動を進めている。錯体触媒系、ゼオライトなどの固体触媒系、2成分金属系触媒など種々の触媒系の理解や創出に関して計算化学の側面から新提案するとともに、領域内の他チームの研究結果を計算化学で支援するなど、本領域全体のハブとしてメタン反応研究を推進する大きな貢献をしていると評価する。

連携成果として、すでに多くの学術論文、研究チーム間の共著論文などを結実しており、本計算研究チームは国際的に認知度も高い。今後も連携の中心となり、研究を推し進めて頂きたい。また、他実験研究チームの計算スキルの向上にも尽力しており、理論研究者の育成に貢献している。さらにこの活動はさきがけ研究者に対しても取り組まれており、若手研究者の育成にも大きく貢献していると評価する。協働研究対象と支援要求は広がる一方であるが、同時に、実験研究チームがこれまで以上に効果的、確実的に検証研究、開発研究が実施できるような計算科学的触媒提案、体制を推し進めて頂きたい。計算科学的な触媒提案を可能にするため、実験-計算チーム間の協力体制がより深化する方向へと進展することを期待する。