

研究課題別事後評価結果

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. 研究代表者名及び主たる研究参加者名（研究機関名・職名は研究参加期間終了時点）

研究代表者

吉澤 一成（九州大学先導物質化学研究所 教授）

主たる共同研究者

蒲池 高志（福岡工業大学工学部 教授）

3. 事後評価結果

○評点：

A+ 非常に優れている

○総合評価コメント：

本研究では、理論計算化学の方法論で、メタンの活性化機構や反応機構を導出し、メタン反応を可能にする触媒状態を提案する事を目的にした。また、従来にない触媒創出を可能にする触媒インフォマティクス体制の構築支援も目指した。錯体触媒系、ゼオライトなどの固体酸化物触媒系、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メタン反応研究結果の理解と説明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役割を果たしたと高く評価する。

連携成果として多くの学術論文、研究チーム間の共著論文などを発表しており、本計算研究チームの国際的な認知度も高い。同時に他の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た。さらにこの活動はさきがけ研究者に対しても広げ、若手研究者の育成にも大きく貢献した。これらの取り組みを高く評価する。今後も連携の中心となり、研究と支援を継続して推し進めて頂きたい。

また、メタン反応のための計算科学的触媒提案とその実証研究も推し進めた。これは従来の実験結果から理論計算を行う流れと逆の理論予測から実験実証する流れの研究実施である。当領域内の若手実験研究者が計算化学の触媒仮説を実験実証する体制を組織し、複数課題に取り組み、全く新しい触媒系を見出す成果を出した。本領域の主題である難度の高いメタン反応を意識した新しい挑戦的な取り組みであり、展開の広がりも期待されることから高く評価する。