

CREST「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」
研究領域中間評価報告書

総合所見

本研究領域は、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」の下に、メタン及び低級アルカンの化成品原料、エネルギー体への変換を可能とする新触媒創出を目指している。この達成に向けて、対象とする触媒の種類、及び反応場の創出・制御の視点から研究課題を採択し、これに触媒解析、触媒インフォマティクスの研究課題を加え、本研究領域を推進する上で非常にバランスの良い構成となっている。また、領域アドバイザーにも企業研究者を加え、専門分野や所属等を含め適切に構成されている。研究総括は、領域会議に加え、多数のサイトビジット、個別ミーティング、チーム会議を実施するなど、全体の研究領域の状況の把握と評価、並びに指導を精力的に行っている。さらに、研究領域全体としての研究推進を強く意識しており、各研究課題間での共同研究や連携、情報共有を積極的に進めている。触媒インフォマティクスのための統合データプラットフォームや計算予測実証チャレンジは、研究領域全体の研究のレベルアップ、あるいは革新的研究成果を創出する上で注目すべき取り組みと言える。また、対外的な発信も積極的に行っており、研究マネジメントは非常に優れている。

本研究領域の研究課題は社会的に非常に重要性の高い課題であるが、その難易度も極めて高く基礎段階からのいろいろな試みが必要である。従って、既存技術の改良によりいたずらに触媒性能を追いかけることはせずに、物質やシステムの新規性を重要視するという研究総括の方針は適切と考える。その中で、ナノコンポジット型触媒の創成、人工メタン酸化触媒の創成、オキシラジカル錯体の合成は、コンセプトも新しく、かつメタンの変換に成功しており、注目すべき研究成果である。また、生体反応場、ゼオライト反応場、金属超微粒子を担持した複合酸化物などに関連する独創性の高い反応系での研究や、理論科学の手法に基づいた触媒の提案についても、順調に研究は進展しており、今後のメタンの変換に向けた研究成果が期待される。さらに、触媒インフォマティクスによる新規触媒探索は新しい取り組みであり、今後の展開に注目したい。これら各研究チームの現時点での研究成果は、総じて科学的・技術的な観点から国際的に見て高い水準であり、今後の研究が順調に進展すれば大きなインパクトが期待できる。

その一方で、この難易度の高い課題に対し、社会的・経済的な観点からの貢献について現段階で評価することは容易ではなく、もう少し経過を待ちたい。しかし、本研究領域での研究成果が将来のメタンの有効利用研究の礎となることは間違いないものと考えられ、また、本研究領域で期待される革新的な触媒の創出に関する研究成果は、広くさまざまな物質合成に対して大きなインパクトを及ぼすと期待できる。

以上を総括し、本研究領域は総合的に優れていると評価できる。

1. 研究領域としての成果について

(1) 研究領域としての研究マネジメントの状況

本研究領域は、メタン及び低級アルカンの化成品原料、エネルギー体への変換を可能とする新触媒創出を目指しており、社会的・経済的ニーズが強い反面、研究の難易度が非常に高く、また対象研究の範囲が比較的狭いという特殊性がある。この研究課題に対し研究総括は、一貫して物質やシステムの新規性を重要視するという立場から研究領域の運営を行っており、適切な方針と評価できる。

この難易度の高い目的を達成するため、対象とする触媒として、酵素触媒、錯体触媒、固体触媒の三つに絞り、それぞれについて新触媒の創出及び触媒反応場制御の二つの視点から優れた研究課題を採択し、さらに、触媒解析、計算科学、触媒インフォマティクスの研究課題を加えた構成となっている。これらは本研究課題を推進するためにバランスの良い構成となっており、研究者の専門性等も含め、選考方針は適切である。

領域アドバイザーも、上記の選考方針に呼応する形で広く触媒化学に精通したエキスパートが選ばれている。特に本研究領域は産業利用の側面からのアドバイスが重要であることが意識され、人数的に十分であるかという懸念は残るものの、高い見識を持つ企業からの研究者も選出されており、専門分野、所属等も含め適切に構成されている。

研究総括は、年1回の領域会議に加え、これまでに計26回のサイトビジット、15回の個別ミーティング、8回の領域アドバイザー参加のチーム会議を実施するなど、精力的に本研究領域の運営を行っている。特に数多くのサイトビジットを実施し、また個別のミーティングや研究進捗報告会などにも積極的に参加しており、全体の研究領域の状況をリアルタイムに近い形で把握しながら、その評価、並びに指導を意欲的に行っている。

特記すべき点として、研究総括は、研究領域全体としての研究推進を強く意識した運営を行っており、各研究課題間での共同研究や連携、情報共有を積極的に進めるようにしている。合同チーム会議の実施はその一つの現れであるが、後半に向けて無理のない範囲で、実験化学者を巻き込んだ連携、協力を推進してほしい。触媒インフォマティクスのための統合データプラットフォームは興味深い取り組みであり、将来的な触媒研究開発に寄与する触媒インフォマティクスを実用的な方法論として確立するという目標は、今後より難度が高くなる触媒開発にとって非常に重要と考えられる。この部分についての目に見える研究成果はまだ得られていないものの、今後どのような進展があるか、後半における発展が楽しみである。

関連するさきがけ研究者との協力体制も築いている他、連携、人材育成の一環として、計算予測実証チャレンジを実施しており、研究領域全体の研究のレベルアップ、あるいは革新的研究成果を創出する上で注目すべき取り組みと言える。また、関連学会でのシンポジウムの実施やコラボレーション企画、座談会なども企画・実施しており、対外的な発信も積極的に行っている。

以上により、本研究領域の研究マネジメントは特に優れていると評価できる。

(2) 研究領域としての戦略目標の達成に向けた状況

① 研究成果の科学的・技術的な観点からの貢献

本研究領域が取り組む研究課題は社会的に非常に重要性の高い課題であるが、その難易度も極めて高い。従って本研究領域では、メタン及び低級アルカンの有用化合物への実用的変換という目標は維持しつつ、その研究の過程で生まれる新しい革新的な触媒の創出、並びに反応場構築に関する知見を、物質合成全般に対し科学的に大きなインパクトを与えるものとして重視している。

このような観点から見て、初年度採択された阿部チームによるニッケル金属と酸化イットリウムからなるナノコンポジット型触媒の創成、並びに光固体触媒の創出、また阪井チームによる人工メタン酸化触媒の創成は、コンセプトも新しく、かつメタンの変換に成功しており、注目すべき研究成果である。これらについては、さらなる高活性化が求められる。荘司チーム並びに山中チームもそれぞれ、生体反応場、ゼオライト反応場に関連する独創性の高い反応系での研究を実施し、これをメタンに拡張しようとしており、これからの研究成果を期待できる。また、吉澤チームの理論科学の手法に基づいた触媒の提案は面白い取り組みであり、研究成果に繋がる展開が望まれる。二年目に採択された、伊東チームによる各種のオキシラジカル錯体の合成とこれを利用したアルカンの酸化は、メタンの酸化を実証した独創性の高い研究成果であり、今後の発展が一層期待される。大山チームによる酸素原子シヤトルによるメタン選択酸化プロセスについては、当初の系の問題点が明確になったので、新しい系での展開が求められる。また、村松チームによる金属超微粒子を担持した複合酸化物触媒材料も学術的に興味深い取り組みであり、今後の進展が待たれる。三年目に採択されたチームについては、これから研究成果が産み出される場所であるが、特に高橋チームによるキャタリストインフォマティクスによる新しい触媒探索、反応機構解明技術の創出は新しい取り組みであり、すでに研究成果もあがり始めており、今後の展開が期待される。

これら各研究チームの現時点での研究成果は、総じて科学的・技術的な観点から国際的に見ても高い水準であり、今後の研究が順調に進展すれば大きなインパクトが期待できる。また、研究領域全体的にみて、活発に論文発表、学会・会議における発表を行っており、技術の独創性・先行性・優位性等も高いと判断される。研究成果をまとめた論文は、著名な学術誌を含め、国際誌に 243 報、国内誌に 35 報、計 278 報掲載されている。国際会議での招待講演が 176 件、さらに、触媒学会 学会賞、錯体化学会 学術賞および貢献賞、日本化学会進歩賞、石油学会奨励賞などの受賞は 12 件に達している。

さらに高い研究成果の創出のためには、メタンの変換に関連する研究で優れた成果を挙げている海外チームと連携することも重要であり、可能ならば、今後、海外研究機関との共同研究を検討することも良いと考える。

以上により、研究成果の科学技術への貢献については、高い水準が期待できると評価できる。

②研究成果の社会的・経済的な観点からの貢献

本研究領域の研究課題は、社会的に非常に重要性の高い課題である。米国のシェールガス革命、日本近海メタンハイドレートの開発により天然ガスの可採年数は大幅に増加しており、有効なメタン変換技術の開発は間違いなく社会的・経済的なインパクトが大きい。しかし、この課題はその難易度も極めて高く、基礎的な段階から新しいチャレンジを試みることが重要であり、現時点で社会的・経済的な観点からの貢献について言及することは時期尚早の感がある。その一方で、本研究領域での研究成果が、将来のメタンの有効利用研究の礎となることは間違いのないものと確信している。

また、これまでの項でも述べたように、各チームで革新的な取り組みが行われ、新しい試みが幾つか芽を出しており、実際、1期生が11件、2期生が12件、それぞれ特許を出願している。研究領域としての方向性も確かなものであるため、将来的に工業・産業へ多大な貢献をもたらすことが十分に期待できる。ただし、特許出願を行っている研究チームに偏りがあり、半数の研究チームが出願できていないことも事実である。科学的・技術的に優れた研究が推進されているだけに、今後研究領域としての知的財産等に関する強化策を検討し、さらには研究成果の社会実装を見通していただきたい。併せて非常に難易度の高い挑戦的な課題に対して、その難しさを意識した運営を今後も継続して頂くとともに、科学的・技術的なイノベーションの推進と、社会的・経済的な貢献のバランスをうまく取った運営をお願いしたい。

以上により、研究成果の社会的・経済的な観点からの貢献については、高い水準が期待できると評価できる。