

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 第一原理計算と反応速度論を基礎とした汎用触媒活性手法の開発とメタン転換反応への応用

2. 個人研究者名

石川 敦之（物質・材料研究機構エネルギー・環境材料研究拠点 主任研究員）

3. 事後評価結果

第一原理計算と反応速度論を組合せ収率等の反応特性を予測する化学工学的なアプローチによって、既存の化学工学計算プログラムにない特徴を有した計算手法の提唱とその検証に成功しており、当初の目標を達成しています。特に、多数の素反応からなるメタンの酸化カップリング反応に果敢に挑戦して、触媒反応解析法としての計算科学手法の基盤を構築した点は大きな成果であり、高く評価します。加えて、メタン活性化反応メカニズムについては基本的な触媒モデル（Li-MgO）に対しハイブリッド汎関数等を活用した検討を進め、真の活性化サイトを特定できる手法にまで発展させました。この成果は今後の触媒反応解析に対しても有用であると思われる、今後の展開に期待しています。

研究の進め方について、領域内での研究連携により自身の仮説検証を含めて論文発表を行っています。今後、有限要素法による反応器シミュレーションと機械学習に関するテーマに関しても、研究の進捗を期待しています。また、今回得られた研究成果であるソースコードの一般公開も今後の研究発展に繋がるものと思います。プログラムの開発・計算は基本的に個人での研究推進ですが、これまで開発した幅広い触媒表面、触媒反応に展開する上で研究チームを構成して進めることも検討ください。

計算科学の新進気鋭の若手研究者が触媒化学の難課題に挑戦し、さきがけ領域内の共同研究等により自身の研究の幅を大きく広げ、一見保守的な研究スタイルから革新的な研究スタイルに大きく飛躍しました。今後の活躍に期待しています。