

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（2020年度事後評価時）：

A+ 非常に優れている

○総合評価コメント：

（以下、2020年度課題事後評価時のコメント）

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。

（2021年9月追記）

本課題では、新型コロナウイルスの影響を受け、6ヶ月間期間を延長し、本領域内の他の研究チームとの連携研究を完遂させ、新展開につながる取り組みを進めた。その結果、窒素一酸素錯体触媒系、貴金属ポリオキソメタレート触媒系、金属ナノクラスター触媒系で、メタンなどが持つ強いC-H結合を活性化する新しい機構を計算科学から導き、今後の触媒開発に向けた新たな方向性を示すに至った。

（2022年2月追記）

本課題は、期間を1年間延長し、中核的研究の一つである計算科学から提案されたメタン反応のための新触媒の実証研究を広範な角度から実験科学的に進め、確実な検証を実施した。その結果、提案された物質状態が異なる3種類の固体触媒のいずれにおいても、それぞれに計算から要求された特徴が成立するときにおいてのみ明確なメタン反応触媒能を持つことを実験科学的に実証し終えた。計算科学から提案された物質を実物質へと実現する難しさを克服した結果であり、今後のこの方法論の契機となろう。