

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」
研究領域事後評価報告書

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を代表とするアルカンガスを利用する革新的触媒の開発を目指すものであり、メタン変換という高難度な課題に対して、触媒の種類、反応場、反応解析の観点から挑戦的で意欲溢れる研究者を選抜している。そして、固体触媒、錯体触媒ならびに酵素触媒を用いる研究課題とそれらの研究範囲に跨がる触媒のダイナミクス解析および計算科学・触媒インフォマティクスに関する多様な研究課題がバランス良く採択されている。領域アドバイザーの構成もこれに対応して適切なアドバイスが行えるよう広い分野の研究者から構成され、産業利用の視点を導入するため産業界からのアドバイザーも加えられており妥当と判断できる。

研究総括はバーチャルネットワーク型研究所の所長であると位置づけし、毎年の領域会議に加えサイトビジットを頻繁に行ったほか、個別ミーティング、研究進捗報告会、合同チーム会議なども別途行い、その場で研究の進捗状況の確認や研究の方向性の議論がなされており、挑戦的な研究の推進を後押しするその実行力は卓越したものと評価できる。またこれらの活動を通じて把握した各研究課題の状況によってはチームの再編を行うなど、強力な指導力を発揮し、適切な運営を行っている。国内外の他の研究機関や異分野との連携の推進などは十分に促進されたとは言い難い部分もあるが、研究チーム間の連携を活発化させるために様々な連携チームが編成され、実験チームと計算科学や反応解析チームとの間の共同研究では研究成果も挙がっている。また若手研究者の発表会や「計算予測実証チャレンジ」を実施し、若手研究者の育成についても成果を挙げているほか、対外的な認知度の向上を目指した公開シンポジウムなども実施している。

研究経費の配分に関しても、研究総括裁量経費からの追加配分により研究が明確に増進すると判断された時に重点的に行われており、また上述の「計算予測実証チャレンジ」の実施にも配分されるなど工夫がなされている。

以上を総合的に判断して、本研究領域の研究マネジメントは高く評価できる。

(2) 研究領域としての戦略目標の達成状況

本研究領域はメタン変換のための革新的触媒の創出を第一目標としており、課題の難易度が高いこと、そして関連研究の現状を踏まえ、本研究領域は実装を視野に置いてはいるものの、基礎科学としてゼロから一を生み出す挑戦性を重視しており、触媒や触媒システムの科学としての新規性に主眼を置き、学術的なインパクトを追求している。その結果、根溜触媒の創出や光エネルギーを利用するメタンドライリフォーミング反応の実現、金属超微粒

子を担持したゼオライト触媒によるメタンの変換反応、酵素触媒を利用するメタンの水酸化、高度に設計した錯体触媒を用いるメタノール合成など、固体触媒の合成的制御、錯体触媒の高度化、生体触媒の高機能化を通じたメタン反応の実現や触媒インフォマティクスの構築などを達成している。総じて参加した多くの研究グループは、ゼロから一を生み出したと言える優れた独自性の高い研究成果を挙げたものと評価できる。またいくつかの研究成果が、研究統括のリーダーシップのもとチーム間連携を積極的に推進したことによるものであることは特筆すべきことである。これらの研究成果は国際的にも高い水準にあり、本研究領域の目指した研究レベルは達成されていると評価できる。

さらに主要テーマの「メタンを活用する触媒」とどまらない、周辺への影響力の大きいシステム等の構築として、“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「CADS」の開発”、“オペランドTEM解析、元素解析システムの構築”などが挙げられる。特に前者は現在世界中で利用されており、データ科学との融合による効率的な研究手法として社会から高く評価されている。

その一方で、社会的・経済的な観点からの直接的な貢献に関しては、今後の展開が期待できる研究成果が多くの研究者から挙がってきており、根溜触媒のように国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の研究に結びついたものもあるが、現時点では直接実装化に結びつく研究成果は十分ではないことも事実である。国内特許は21件出願されているものの、国際特許出願は1件に留まっており、今後本研究領域の研究成果が国際的にも貢献できるようになることを期待したい。その中で、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「CADS」が速やかに構築され、国内外の研究者が利用できる状況になったことは意義深い。本研究領域で得られた結果が将来的に発展し、社会的にも貢献することを期待したい。

以上より、本研究領域は戦略目標の達成に資する成果の創出に十分に貢献をしたと評価できる。

以上