

戦略的創造研究推進事業  
—さきがけ(個人型研究)—

研究領域「革新的触媒の科学と創製」

研究領域事後評価用資料

研究総括：北川 宏

2021 年 9 月



## 目 次

1. 研究領域の概要 .....	1
(1) 戦略目標 .....	1
(2) 研究領域 .....	4
(3) 研究総括 .....	5
(4) 採択研究課題・研究費.....	6
2. 研究領域および研究総括の設定について.....	9
3. 研究総括のねらい .....	11
4. 研究課題の選考について .....	13
5. 領域アドバイザーについて .....	22
6. 研究領域のマネジメントについて.....	25
7. 研究領域としての戦略目標の達成状況について.....	41
8. 総合所見 .....	49



## 1. 研究領域の概要

### (1) 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」

#### ①概要

世界では、石油に依存する化学産業が急激に変容しつつある。米国では、シェール革命を受け、安価な天然ガス原料のエタンを使用して製造するエチレンが強い競争力を持ち始めている。中国でも、石炭を用いたメタノールの合成等が行われている。一方で、天然ガスに豊富に存在するメタンや低級アルカンを効率良く活性化する画期的な触媒の創製は非常に難度が高く、実現できれば、国際的にもインパクトが非常に高い。特に、二酸化炭素排出(エネルギー投入)が少ない製造技術に期待が高まっており、極めて高い技術の醸成が急務である。

そのため、本戦略目標では、日本が誇る触媒研究の高い競争力を活かして、メタン( $\text{CH}_4$ )や、低級アルカン( $\text{C}_n\text{H}_x$ :  $n = 2, 3$ )等の多様な資源を、化成品原料やエネルギーとして活用するための革新的触媒を創製する。最先端の物質合成・計測・計算技術とデータ科学を利活用した物質探索を共通基盤として、原理解明と触媒創製を戦略的に推進し、多様な天然炭素資源を高効率に活用する社会を切り拓く。

近年進化している、計算・計測技術を駆使することで画期的な触媒を設計及び創製することができれば、新たな触媒研究の基盤を確立することができるだけでなく、ナノテクノロジー・材料研究における新たな方法論を切り拓くことも期待でき、我が国のさらなる競争力強化につながる。

#### ②達成目標

本戦略目標では、天然ガスの大半を占めるメタン( $\text{CH}_4$ )や、低級アルカン( $\text{C}_n\text{H}_x$ :  $n = 2, 3$ )等の天然炭素資源を、化成品原料やエネルギー体へと変換するための革新的触媒を創製することを目的とする。具体的には、以下の達成目標を目指す。

- (i) メタンを化成品原料やエネルギーへ変換する C1 化学を実現する触媒の創製
- (ii) 低級アルカンを化成品原料やエネルギーへ高効率に変換する触媒の創製
- (iii) 物質創製、計測・解析、理論計算、実験・計算データを利活用した物質探索の連携による、触媒反応の指導原理解明へ向けた共通基盤の確立

#### ③研究推進の際に見据えるべき将来の社会像

達成目標に記載した事項の達成を通じ、以下に挙げるような社会の実現に貢献する。

- 天然ガスに豊富に含まれるメタンや低級アルカン等、石油以外の多様な炭素資源を化成品や燃料に変換して利活用することが可能となり、我が国の根幹を支える基幹

産業が形成されている社会。

- 石油に依存しない多様な原料・エネルギー源活用型社会を構築することで資源リスクを減少するとともに、将来的にメタンハイドレードの利用が実現した場合、資源立国への道が拓けている社会。

#### ④具体的な研究例

##### (i) メタンを化成品原料やエネルギーへ変換する C1 化学を実現する触媒の創製

メタンを反応基質とし、メタノール等の高付加価値化成品への直接合成反応を実現する高活性・高選択性反応触媒を開発する。

##### (ii) 低級アルカンを化成品原料やエネルギーへ高効率に変換する触媒の創製

エタン/プロパン等を反応基質とし、エチレングリコールや酢酸、プロパノールやアクリル酸等の高付加価値化成品への反応を実現する革新的な高活性・高選択性反応触媒を開発する。

##### (iii) 物質創製、計測・解析、理論計算、実験・計算データを利活用した物質探索の連携による、触媒反応の指導原理解明へ向けた共通基盤の構築

触媒反応の実作動条件・その場での動的表面計測を実現する。大規模理論計算による触媒反応のマルチスケール、マルチフィジックス解析を実現する。マテリアルズインフォマティクスを活用による実験・計算データを利活用した物質探索を実現する。

#### ⑤国内外の研究動向

##### (国内動向)

我が国の触媒研究は国外に対して高い競争力を有しており、バイオマスからの可溶化・糖変換、化成品触媒、太陽光を使った水分解・水素生成、二酸化炭素を燃料・原料へ変換する人工光合成等については、研究開発が活発に進められている。一方で、メタン・低級アルカンを化成品原料やエネルギーとして利活用する研究は未踏の領域である。最近になり、従来の触媒研究とは異なる発想で常温アンモニア合成を可能としたエレクトライド触媒の研究(細野ら、2012)など、メタン・低級アルカンからの原料・エネルギー変換に資する可能性がある研究が次第に活発化している。これらの周辺研究領域の知見や、計測・計算・データ科学の急速な進展を取り込み、メタン・低級アルカンからの原料・エネルギー変換へ取り組む体制を早期に構築する必要がある。

##### (国外動向)

シェール革命を受けて、メタンや低級アルカンを利活用する技術開発は各国の産業競争力へ直接的な影響を及ぼすこととなったため、欧米を始めとする各国で研究開発が進められている。

例えば、露国では、亜酸化窒素を用いてメタン⇒メタノールの選択合成で 160 °Cにおいて

最大 96%を達成したとの報告がなされている。また、米国では、米エネルギー省における挑戦的な先端研究へのファンディングプログラム・ARPA-Eにおいて、2013年からメタン資化性微生物を使って、メタンを液体燃料に変換する小規模プロセスを開発するプロジェクトへの支援が行われている。加えて、ベンチャー企業が、微生物を利用したメタンからの化学品製造に取り組んでいる。

## ⑥検討の経緯

「戦略的な基礎研究の在り方に関する検討会 報告書」(平成 26 年 6 月 27 日)に基づき、以下の通り検討を行った。

### ○サイエンスマップ及び科研費 DB を用いた国内外の研究動向に関する分析資料の作成

「サイエンスマップ 2012&2010」(平成 26 年 7 月 31 日科学技術・学術政策研究所)及び科学研究費助成事業データベースにおける情報を用いて、国内外の研究動向に関する分析資料を作成した。

### ○分析資料を用いた専門家へのアンケートの実施及び注目すべき研究動向の作成

「科学技術振興機構研究開発戦略センター」や「科学技術・学術政策研究所科学技術動向研究センターの専門家ネットワークに参画している専門家」に対し、作成した分析資料を用いて今後注目すべき研究動向に関するアンケートを実施した。その後、アンケートの結果の分析等を行い、注目すべき研究動向として「エネルギー高効率変換に向けた革新的触媒の創製」を特定した。

### ○ワークショップの開催及び戦略目標の作成

注目すべき研究動向「エネルギー高効率変換に向けた革新的触媒の創製」に関係する産学の有識者が一堂に会するワークショップを開催し、特に注目すべき国内外の動向、研究や技術開発の進展が社会的・経済的に与え得るインパクトやその結果実現し得る将来の社会像、研究期間中に達成すべき目標などについて議論を行い、ワークショップにおける議論等を踏まえ、戦略目標を作成した。

## ⑦閣議決定文書等における関係記載

科学技術イノベーション総合戦略 2014(平成 26 年 6 月 24 日閣議決定)第 2 章第 1 節 I.3.(3)<1>より：

シェールガス、非在来型原油や二酸化炭素等多様な原料から効率的にエネルギー・化学品の生産を図る革新的触媒技術等及び微生物やバイオマスによるエネルギー資源の生産技術を研究開発する。

## ⑧その他(大型プロジェクト情報など)

触媒がカバーする研究領域は幅が広く、プロジェクトごとにターゲットとしている領域

が異なる。大型プロジェクトの主な対象は以下の通りである。

- ・平成 24 年度戦略目標「環境、エネルギー、創薬等の課題対応に向けた触媒による先導的な物質変換技術の創出」の下で行われている研究では主に二酸化炭素を変換する化成品触媒や太陽光を使った水分解・水素生成を対象としている。
- ・科学技術振興機構の先端的低炭素化技術開発 (ALCA) ではバイオマスからの可溶化・糖変換や、化成品触媒を対象としている。
- ・経済産業省では人工光合成化学プロセス技術研究組合 (ARPCHEM) において、太陽光と光触媒を使った水分解反応により生成した水素を用いて、二酸化炭素を原料へ変換する人工光合成へ取り組んでいる。
- ・平成 24 年度戦略目標「環境・エネルギー材料や電子材料、健康・医療用材料に革新をもたらす分子の自在設計『分子技術』の構築」、平成 25 年度戦略目標「選択的物質貯蔵・輸送・分離・変換等を実現する物質中の微細な空間空隙構造制御技術による新機能材料の創製」の下で行われている一部の研究では、バイオマスからの可溶化・糖変換や、化成品触媒を対象としている。

このように、本戦略目標で対象とするメタンや低級アルカンからの化成品原料やエネルギーへの変換は重要な領域であるにも関わらず、現在までに対象としているプロジェクトがない未踏領域であり、本戦略目標の下で行われる研究に関して、他機関とも連携した体制を構築していくことが期待される。

(文部科学省 HP より引用)

## (2) 研究領域

「革新的触媒の科学と創製」(2015 年度発足)

### 研究領域の概要

現代社会では、石油を主な炭素資源として、化成品やエネルギーへ変換可能な原料を生産している。石油に加えて、天然ガス等に豊富に含まれるメタンや低級アルカン等も化学産業の原料として効率的に活用するためには、新しい発想を用いた、極めて高度な技術の創出が重要である。

本研究領域では、メタンや低級アルカン等を、化成品原料やエネルギーへ効率的に変換するための革新的な触媒の創製に取り組む。

具体的には、メタンや低級アルカンを効率的に変換できる反応に関して、高度な触媒の設計と創製につながる研究を推進する。触媒の種類は、均一系、不均一系、微生物等、広い範囲のものを対象とし、金属、酸化物、金属錯体及び有機金属錯体、分子、タンパク質等が、ナノ粒子、ナノワイヤ、ナノシート、多孔性物質、籠型、コアシェル型等、多岐にわたる構造を形成する、物質・材料の研究を推進する。さらに、光、プラズマ、電場などの反応場を用いた研究も対象とする。

近年進化している計算科学や計測技術分野などと連携して、触媒科学のナノテクノロジー・材料研究において新たな方法論を切り拓き、新しいサイエンスの源流になり得るとともに、将来的に、化学産業を変える可能性を持つ、挑戦的・独創的な研究を推進する。

### (3) 研究総括

氏名 北川 宏 (京都大学 大学院理学研究科 教授)

## (4) 採択研究課題・研究費

(研究期間直接経費合計：千円)

採択年度	研究者	所属・役職 上段：研究終了時 下段：採択時	研究課題	研究費*
2015年度 (一期生)	天野史章	北九州市立大学 准教授 同上	光電気化学的メタンカップリング	35,450
	大洞光司	大阪大学 助教 同上	低級アルカンの物質変換を司る人工酵素の論理的開発	39,399
	鎌田慶吾	東京工業大学 准教授 同上	低級炭化水素の選択的酸化アップグレーディングを目指した金属酸化物触媒の創製	40,450
	楠本周平	東京大学 助教 同上	金属-配位子協働作用によるアルカン官能基化反応開発	34,450
	田村正純	東北大学 助教 同上	均一・不均一ハイブリッド強塩基触媒によるメタンのC-H活性化	40,450
	船津麻美	熊本大学 助教 北九州工業高等専門学校 講師	金属ナノシートを基軸とした革新的触媒の創出	45,540
	邨次 智	名古屋大学 講師 同上 助教	表面特異的なオキシ結合・欠陥とパルス電場を駆使した機能積算型メタン変換場の開発	39,750
	横井俊之	東京工業大学 准教授 同上 助教	メタンからメタノール、さらにはプロピレン、ブテン類の直接合成を可能にするゼオライト触媒の創製	44,950
2016年度 (二期生)	石塚智也	筑波大学 准教授 同上 講師	メタン酸化を指向した超分子酸化触媒の創製	42,850
	稲垣怜史	横浜国立大学 准教授 同上	電場印加触媒反応系中の半導体・絶縁体界面でのメタンの活性化とそれに続く化学品原料の選択合成	40,400
	浦川篤	デルフト工科大学 教授 カタルーニャ化学研究所	非定常操作による低級アルカンの酸化的アップグレード	36,530

		研究グループ長		
	小河脩平	高知大学 講師 早稲田大学 助教	多電子レドックス触媒による 電場中での低温メタン直接転換	36,270
	菊川雄司	金沢大学 准教授 同上 助教	環状バナデートによる特異的 な酸化剤の活性化	38,000
	熊谷 崇	フリッツ・ハーバー研究所 グループリーダー 同上	局在プラズモン励起を介した 触媒作用の微視的機構の解明	47,150
	杉本敏樹	分子科学研究所 准教授 京都大学 助教	オペランド分光計測に基づく メタンの部分酸化還元光触媒 反応場の創製と学理構築	44,050
	中山 哲	東京大学 教授 北海道大学 准教授	ナノスリット構造とハイブリ ッド化による in silico 触媒 設計	30,150
	藤枝伸宇	大阪府立大学 准教授 大阪大学 助教	メタンを水酸化するバイオ電 極触媒の開発	43,000
	松本 剛	東京工業大学 特任准教授 中央大学 助教	金属硫化物クラスター触媒に よるメタンの直接的オレフィ ン化	37,950
2017年度 (三期生)	石川敦之	物質・材料研究機構 主任研究員 同上 NIMS ポスドク研究員	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	34,450
	倉橋拓也	長崎県立大学 教授 分子科学研究所 助教	超微細気泡を反応場とするメ タン光酸化触媒の開発	48,120
	小坂谷貴典	分子科学研究所 助教 東京大学 助教	オペランド観測に基づくメタ ン転換触媒および反応場の設 計	40,700
	高鍋和広	東京大学 教授 アブドゥラ王立科学技 術大学 准教授	アルカリ熔融塩触媒による炭 化水素の転換反応	36,650
	鷹谷 絢	東京工業大学 准教授 同上	金属-金属結合の触媒機能開 拓を基盤とするメタンの精密 有機合成化学	38,950
	野内 亮	大阪府立大学 准教授	電界効果表面化学によるナノ	38,950

		同上	シート触媒能の精密制御	
	橋本綾子	物質・材料研究機構 主任研究員 同上	触媒設計に向けた In-situ TEM 観察による活性点の微 視的解明	30,150
	人見 穰	同志社大学 教授 同上	$\pi$ 空間を有する金属オキソ種 によるメタン酸化	39,800
	松本崇弘	九州大学 准教授 同上	光で駆動するメタン酸化電池 の開発	40,820
	本倉 健	東京工業大学 准教授 同上 講師	アルカンの協奏的活性化を指 向した活性点集積型 触媒の 開発	41,000
	山田泰之	名古屋大学 准教授 同上	新奇な超分子型遷移金属オキ ソ種を酸化活性種とするメタ ン直接変換触媒の創製	48,670
			総研究費	1,155,049

#### 【災害対応】

- ・船津研究者（一期生）に対して、2016年4月の熊本地震による被災に対する復旧措置として、10,790千円を増額。

#### 【異動時のスタートアップ支援】

- ・横井研究者（一期生）に対して、研究環境の整備費用として2,000千円を増額。
- ・浦川研究者（二期生）に対して、研究環境の整備費用として600千円を増額。
- ・杉本研究者（二期生）に対して、研究環境の整備費用として1,000千円を増額。
- ・藤枝研究者（二期生）に対して、研究環境の整備費用として1,500千円を増額。
- ・倉橋研究者（三期生）に対して、研究環境の整備費用として7,670千円を増額。
- ・小板谷研究者（三期生）に対して、研究環境の整備費用として2,350千円を増額。

#### 【新型コロナウイルス感染症による研究期間の延長に伴う追加予算】

- ・倉橋研究者（三期生）に対して、消耗材料費用として1,000千円を増額。
- ・小板谷研究者（三期生）に対して、消耗材料費用として200千円を増額。
- ・人見研究者（三期生）に対して、消耗材料費用として1,000千円を増額。
- ・本倉研究者（三期生）に対して、研究環境の整備費用として2,000千円を増額。
- ・山田研究者（三期生）に対して、消耗材料費用として800千円を増額。

## 2. 研究領域および研究総括の設定について

### (1) 研究領域の設定理由

本研究領域は、2015年度（平成27年度）文部科学省戦略目標「多様な天然炭素資源を活用する革新的触媒の創製」にもとづき、日本が誇る触媒研究の高い競争力を活かして、メタン( $\text{CH}_4$ )や、低級アルカン( $\text{C}_n\text{H}_x$ :  $n = 2, 3$ )等の多様な資源を、化成品原料やエネルギーとして活用するための革新的触媒の創製を目的としている。具体的には、最先端の物質合成・計測・計算技術とデータ科学を利活用した物質探索を共通基盤として、原理解明と触媒創製を戦略的に推進し、多様な天然炭素資源を高効率に活用する社会を切り拓くことを目指すものである。

本研究領域は、メタンをはじめとする低級アルカン等の資源を化成品原料やエネルギーへ変換する反応に関して、触媒科学のナノテクノロジー・材料研究において新たな方法論を切り開き、高度な触媒の設計と創製につながる多様な独創的・挑戦的な研究を、「さきがけ」の個人型研究により推進するように設定されている。

物質科学を専門とする研究総括と産業界等で研究開発経験が豊富な領域アドバイザーを配置し、両者の指導の下で新しい発想をもった研究者が互いに切磋琢磨することで、将来の化学産業を変革させるような科学技術イノベーションの源泉を生み出すことが期待できる。

計測技術やインフォマティクスとの協働を含む多分野連携・融合による課題解決を目指すCREST研究領域「多様な天然炭素資源を活用する革新的触媒の創製」と、個人の独創的発想により触媒分野における革新的技術シーズの創出を図る本研究領域とを設定することで、当該戦略目標の達成に向けて多様なアプローチが確保されている。

また、触媒化学、材料科学、有機合成技術については、我が国は世界最高水準の研究が発達に行われている。加えてSPRING-8、J-PARCや京コンピュータなどの最先端設備の活用・連携も可能であることから、研究のブレイクスルーが大いに期待できる。以上から、優れた研究提案が多数見込まれる。

### (2) 研究総括の設定理由

研究総括 北川 宏

北川宏氏は、無機化学、機能・物性・材料、機能物質科学等の分野を中心として、低次元強相関電子系、電荷移動錯体、配位高分子、金属ナノ粒子、有機伝導体、水素吸蔵物質、超プロトン伝導体等の研究に精力的に取り組んできた。同氏は、特に、「固体プロトニクス」の学問分野を創ることを目指し、多様な性質を柔軟に設計できる分子性物質の創製や、ナノサイズに特有な新しい量子現象や新機能を数多く見出ししている。その業績は、学術的価値が高いことに加えて、環境・エネルギー問題の解決にも大きく資する研究成果であることが高く評価され、日本化学会学術賞や井上学術賞を受賞しており、本研究領域を推進する上で必

要な先見性及び洞察力を有していると認められる。

また、SPring-8 ユーザー協同体評議員、文部科学省科学技術・学術審議会ナノテクノロジー・材料科学技術委員会（第 8 期）委員を歴任していることから、関連分野の研究者から信頼され、公平な評価を行いうると認められる。

さらに、文部科学省研究振興局科学官、京都大学理事補（研究担当）を歴任していることから、研究課題の効果的・効率的な推進を目指し、適切な研究マネジメントを行う経験、能力を有していると認められる。

以上より、同氏は本研究領域の研究総括として適任であると判断される。

（JST 記載；新規研究領域の事前評価

[https://www.jst.go.jp/kisoken/evaluation/before/hyouka\\_h27.pdf](https://www.jst.go.jp/kisoken/evaluation/before/hyouka_h27.pdf) を一部改変)

### 3. 研究総括のねらい

戦略目標でも述べられているように、現代社会では石油を主な炭素資源として、基礎化学品や化成品、エネルギーへ変換可能な原料を生産しているが、将来的な資源やエネルギーマネジメントの一環として、石油に加えて、天然ガス等の多様な天然炭素資源を活用することが求められている。

一方で、天然ガス資源の中でもっとも豊富なメタンを資源として利用する既存の工業プロセスでは、合成ガス(CO+H<sub>2</sub>)を経由した間接的なものが主流で、メタンから直接的に有用な基礎化学品や化成品を得る方法は難度が高く、工業化が進んでいない。また、低級アルカンの変換はメタンよりは容易であるものの、既存の化学産業プロセスに代わるためには、より画期的な変換プロセスが必要である。

そこで、メタンや低級アルカンを、直接、有用な基礎化学品や化成品に変換できる、画期的な触媒およびプロセスの創出が強く期待されている。また、天然炭素資源に限らずとも、様々な基礎化学品を原料とする既存の工業プロセスにおける大幅な高効率を可能にする革新的触媒の創出、工業プロセスとしては未だ模索の段階にある中長期的課題、例えば身の回りに豊富に存在する空気や水を資源とする触媒の開発等、触媒技術に期待される科学的・社会的要請は増大している。つまり、天然資源の乏しい日本においては、加工貿易は今後も日本の産業競争力の源泉であり、化学産業においてその要となる触媒技術の国際競争力を維持し、高めることは喫緊の課題である。

上述の背景をもとに、本研究領域では、以下の3点を達成目標として掲げた。

#### 1) メタンや低級アルカン、およびその他原料の高効率利用を可能にする「革新的触媒の創成」（戦略目標の達成目標①、②に対応）

周知の通りメタンの高効率利用を可能にする触媒開発においては、高いC-H結合活性能、選択反応を可能にする反応場設計、など材料・プロセスとしての新たなコンセプトや高度な技術が求められる。

本研究領域では、メタンや低級アルカン等の高効率利用に資する革新的なコンセプトにもとづく独創的かつ挑戦的な触媒材料や触媒プロセスの追求を重視した。一方で、約3.5年間のさきがけ研究でメタン変換という超高難度反応に取り組み研究のコンセプトを磨き上げることで、材料設計として波及効果をもたらし、メタンや低級アルカン以外の反応においても高活性な触媒が創出されることを期待した。

#### 2) 物質創製、計測・解析、理論計算・インフォマティクスを活用した「革新的な触媒科学」の確立（戦略目標の達成目標③に対応）

本研究領域では、将来の化学産業を変える可能性をもつ挑戦的かつ独創的な研究を推進した。そのような産業応用に耐えうる触媒技術を構築するには、確かなサイエンスに裏打ちされた物質・材料、プロセス開発が求められる。つまり、従来物質・材料、プロセ

スとしての新規性の追求だけではなく、計算科学や計測技術分野などと連携して、触媒科学のナノテクノロジー・材料研究において新たな方法論を切り拓くことが重要である。

特に近年進展が著しいオペランド観測や第一原理計算を組み合わせた反応機構解明とそれによる材料・反応場設計へのフィードバックなどの方法論の開拓をめざした。

### 3) 次世代を担う触媒科学の国際的なリーダーの輩出

我が国の化学産業および触媒技術の国際競争力の向上には、触媒材料や触媒プロセスの創出だけでなく、当該分野における国際的な人材輩出も大きな目標として掲げた。昨今アカデミアの美しい触媒探索と産業界の粘り強い触媒開発との乖離が著しくなっており、本研究領域では両者の乖離を埋める人材の創出を目標とした。

さきがけ研究らしい個人のアイデアに立脚した研究を重視し、設定した目標を達成することを前提としつつ、研究人生において重要な礎になり得る研究、将来的に新しいサイエンスの源流を創り、科学技術イノベーションの源泉に発展しうる研究を奨励した。

本研究領域名称である「革新的触媒の科学と創製」は、「革新的な触媒科学」、「革新的な触媒創製」という2つの目標設定を表現したものである。

以上の目標を達成するために、以下の方針を重視した領域運営を進め、また自らも積極的に現場に赴き研究者との交流を重ね成果の最大化に尽くした。

- ・本研究領域内、CREST「革新的触媒」、関係研究領域との連携推進によるネットワーク型研究所機能の強化
- ・国際的なネットワーク構築による共同研究強化、国際的な成果発信による研究者としての認知度向上
- ・産業界アドバイザーによる指導、産業界との対話による産学連携の推進

## 4. 研究課題の選考について

### (1) 研究課題の選考方針

#### ① 選考の方針

本研究領域では、先述のねらいをもとに、斬新なアイデア・概念に基づいた革新的な触媒の設計と創製につながる研究を募った。それにより、触媒科学のナノテクノロジー・材料研究において新たな方法論を切り拓き、新しいサイエンスの源流になり得るとともに、将来的に、化学産業を変える可能性を持つ、挑戦的・独創的な研究を重視した。つまり、これまでの研究の単なる延長にあるものや、これまでの研究の原理を組み合わせただけの、既存技術の改良研究は対象としない。

本研究領域が対象とする触媒の種類や対象反応を以下に例示するが、上述の通り革新性・独創性を追求する研究であればその限りとしなない。さらに、実在系に即した計測手法や計算科学を基盤とする研究も歓迎した。

#### (i) 触媒の種類

触媒は、均一系、不均一系、微生物等、種類は問わない。金属、酸化物、金属錯体及び有機金属錯体、分子、タンパク質等の活性物質が、ナノ粒子、ナノワイヤ、ナノシート、多孔性物質、籠型、コアシェル型等、多岐にわたる構造を形成する、物質・材料の研究を期待する。

また、広い意味での触媒を対象とし、光、プラズマ、電場、微生物など、従来の化学産業では触媒として活用されていない、反応場やプロセスを用いた研究も対象とした。

将来的に、化学産業を変える可能性を持つ、独創性が高いナノテクノロジー・材料研究を特色とした研究を優先した。

#### (ii) 対象反応

提案者が取り組む反応の種類は問わないが、いまだ実現に至っていない、メタンを反応基質とし、メタノール、オレフィン、芳香族等などの有用化成品へ直接的・効率的に変換できる、画期的な触媒研究に挑戦する提案を優先した。一方で、エタンやプロパン等の低級アルカンは、メタンよりは反応性が高く、すでに多様な研究が進んでいる。そのため、エタンやプロパン等の低級アルカンを反応基質とする反応は、本研究領域の対象から除外しないものの、既知の反応と比較して革新的に高活性・高選択性であることを条件とした。

#### ② 採択の方針

メタンや低級アルカンの反応活性化について、真に革新的な、新しい切り口で挑む研究であることを重視した。そのために、国際的な研究動向を明示し、これまで行われてきた研究と比較した優位性・独創性を研究提案にて明確にすることを提案者に要請した。

評価に際しては、上述の通り独創的で挑戦的な提案を広く募ることを目的として、必ずしも予備的な実験結果を必須とはしなかった。ただし、研究提案の内容の妥当性や実施計画については深く吟味した提案を要請した。

また、さきがけの研究期間約 3.5 年の間に、設定した目標を達成することを前提として、採択する研究テーマは、さきがけ研究と呼ぶにふさわしい、提案者の研究人生において重要な礎になり得るもの、将来的に新しいサイエンスの源流を創り、科学技術イノベーションの源泉に発展しうるかどうかという観点を重視した。つまり、さきがけ研究を契機に研究者が大きく飛躍することを目指し、研究提案者が個人としてあたためてきた新概念の提示をより重視し、出身研究室や所属研究室の研究コンセプトの範疇に収まらない提案を高く評価した。

## (2) 選考結果

### ①平成 27 年度選考結果

平成 27 年度（2015 年度）は、47 件の応募があり、12 名の領域アドバイザーの協力を得て選考を進めた。47 件の書類選考と 26 件の面接選考を行い、最終的に 8 件の研究課題を採択した。選考にあたっては、利害関係にあるアドバイザーの関与を避け厳正な評価を行った。

多くの優れた提案の中から、本研究領域で求める、提案者自身が温めてきた独創的で挑戦的な研究課題を採択した。

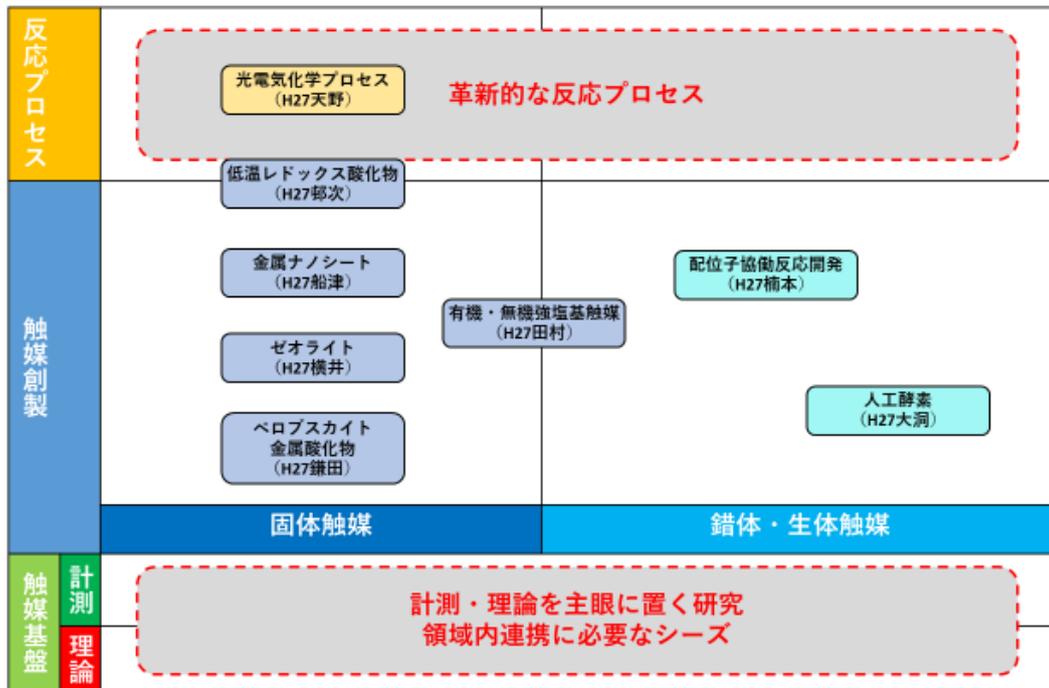
触媒の種類は、金属酸化物、ゼオライト、錯体、人工酵素、金属ナノシート、有機・無機ハイブリッド触媒など、多様な触媒を採択した。また、光をはじめとする外場を用いた反応、新たな反応機構の提案など、材料探索にとどまらない研究課題も採択した。

不採択となった研究提案の中には、新しい触媒や概念を提案した独創的なものが多数あったが、対象とする反応の熱力学的・速度論的な考察が不十分であったために採択に至らなかったものが多かった。

一方で、残念ながら他の研究者との広い連携が期待できる、計測手法や計算科学を柱とした研究課題は、採択には至らなかった。また、メタンや低級アルカンの選択酸化に寄与する革新的な反応プロセス、反応場設計に取り組む研究課題にもより多く参画してもらう必要があると考えた。

以上の課題を解決し、ネットワーク型研究所としての機能を高めるために、H28 年度公募に向けて関連する研究者コミュニティへの研究領域方針などの情報発信を CREST「革新的触媒」研究領域とともに進めた。

H27年度採択課題



②平成 28 年度採択結果

平成 28 年度（2016 年度）は、昨年度提示した基本方針に加えて、ネットワーク型研究所の機能強化を目的として、以下の選考方針を強調した。

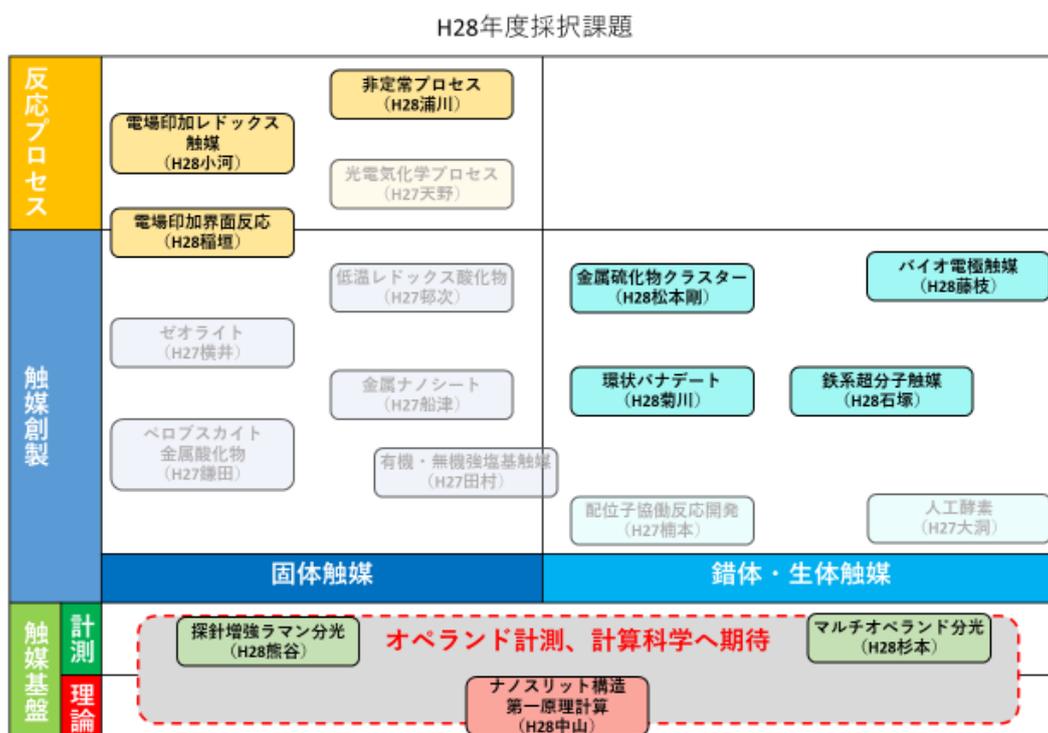
- ・革新的な反応プロセス開発、触媒反応の高効率化に資するプロセスエンジニアリングに関する研究アプローチを歓迎
- ・実在系に即した計測手法や計算科学を基盤とし、研究領域内での積極的な連携が期待できる研究提案を歓迎

71 件の応募に対し、13 名の領域アドバイザーの協力を得て選考を実施した。面接対象研究提案 31 件を選考し、面接選考を経て 10 件の研究課題を採択した。昨年度同様、対象とする反応や触媒の種類について多岐にわたる課題を採択した。

触媒の種類は昨年度同様、固体触媒、錯体触媒、生体触媒など多岐にわたった。ねらいの通り、電場を駆動力とした低温触媒プロセス、非定常的プロセスによる反応場制御などプロセス関連の研究課題も数件採択することができた。また、実在系に即した計測手法や第一原理計算・インフォマティクスを基盤とした研究課題も数件採択した。さらに、メタンや低級アルカンとともに硫黄や臭素を反応基質とした特異な触媒系に取り組む独創的な課題も採択した。

欧州の研究機関で PI として活躍する研究者 2 名を採択したことも特筆すべき点である。国によって触媒研究のスタイルには違いがあり、欧米標準の研究文化を領域内にもたらし、ことは本研究領域の活性化につながることを期待した。

一方、次年度の応募については、引き続き計測手法、計算科学を基盤とする提案に期待した。特に、高温・常圧条件下での電子顕微鏡や放射光を用いたオペランド観測など欧米で進展が著しい革新的な計測技術を、さらに凌駕するような挑戦的な提案に期待し、各種施策に取り組んだ。



### ③平成 29 年度採択結果

平成 29 年度も、平成 28 年度同様に領域の基本方針に加えて、計測技術・計算科学を基盤とした提案などを強調した。具体的には、以下の研究課題を募った。

- ・メタンを直接触媒反応させて水素を生成し副生成物である芳香族化合物を回収するメタン直接改質や、より低温で水蒸気から水素を効率的に製造する水蒸気メタン改質など、難易度の高い触媒研究に挑戦する提案
- ・放射光を用いたオペランド XPS や高温・高圧 XAFS 観測などの実在系に即した計測手法に立脚した触媒創出
- ・反応速度論や第一原理計算にもとづく高度なシミュレーションやインフォマティクス技術にもとづく触媒機能予測
- ・分離技術などの平衡回避技術やプロセスエンジニアリングにもとづく革新的な

## 反応システム提案

86 件の応募に対し、13 名の領域アドバイザーの協力を得て選考を実施した。面接対象研究提案 31 件を選考し、面接選考を経て 11 件の研究課題を採択した。昨年度同様、対象とする反応や触媒の種類について多岐にわたる課題を採択した。

触媒の種類は昨年度同様、固体触媒、有機-無機ハイブリッド触媒、酵素インスパイアド錯体触媒、など多岐にわたった。ねらいの通り、準大気圧 XPS や準大気圧 TEM など実反応環境をモデリング可能な計測手法の開発や第一原理計算・インフォマティクスを基盤とした研究課題も数件採択した。また、今年度も海外で活躍する研究者を 1 名採択した。

H29年度採択課題

反応プロセス	FET反応制御 (H29野内)	非定常プロセス (H28浦川)	微細気泡反応場 (H29倉橋)	メタン酸化電池 (H29松本崇弘)
	電場印加レドックス触媒 (H28小河)	光電気化学プロセス (H27天野)		
触媒創製	電場印加界面反応 (H28稲垣)	低温レドックス酸化物 (H27郵次)	金属硫化物クラスター (H28松本剛)	バイオ電極触媒 (H28藤枝)
	アルカリ溶融塩 (H29高鍋)	金属ナノシート (H27船津)	超分子会合体 (H29山田)	
	ゼオライト (H27横井)	有機・無機強塩基触媒 (H27田村)	環状バナデート (H28菊川)	鉄系超分子触媒 (H28石塚)
	ペロブスカイト金属酸化物 (H27鎌田)	有機・無機協奏活性化 (H29本倉)	複核金属協働触媒 (H29鷹谷)	n空間鉄オキソ錯体 (H29人見)
			配位子協働反応開発 (H27橋本)	人工酵素 (H27大淵)
	固体触媒		錯体・生体触媒	
触媒基盤	探針増強ラマン分光 (H28熊谷)	マルチオベラント分光 (H28杉本)	準大気圧XPS (H29小坂谷)	In situ TEM (H29橋本)
	速度論+第一原理 (H29石川)		ナノスリット構造第一原理計算 (H28中山)	

### (3) 応募数増加・領域内シーズの多様化に向けた取り組み

本研究領域では、研究者が温めてきた独創的なアイデアにもとづいてメタンや低級アルカン等の効率的な物質変換に資する、あるいはその波及効果によってもたらされる各種反応における革新的な触媒創出を目標に掲げている。そのためには、より多くの研究者に本研究領域に関心を持っていただき、そのアイデアを提案していただくことがもっとも重要である。

一方で、応募数については触媒科学コミュニティ及び関連する研究コミュニティの大きさを考えると十分ではなかった。また、ネットワーク型研究所としての機能を高めるた

めに必要な計測技術、計算科学に基盤を置いた研究提案も十分ではなかったと感じている。原因としては、例えば以下のようなことが、採択研究者や研究者コミュニティへのヒアリング等を通じて挙げられた。

- ・平成 27 年度に関しては、メタン変換触媒という超高難度な課題に対して十分な準備期間がなかった。
- ・メタンや低級アルカン等の効率的変換を重視しながらも様々な化学反応にも展開可能な「革新的なコンセプト」が重視されるという研究領域のメッセージが十分に認知されていなかった。つまり、従来の触媒コミュニティだけではなく、幅広い材料研究者、化学研究者などが対象となりうることが認知されていなかった。
- ・先端的な計測技術や理論・計算的なアプローチの重要性が関連コミュニティに十分に認知されていなかった。

そこで本研究領域では、各年次において応募状況や技術テーマを整理し、応募数の増加や期待する研究シーズ群からの提案を募るための広報活動を JST 事務局と協力して積極的に行った。

その結果、応募件数は、平成 27 年度 47 件、平成 28 年度 71 件、平成 29 年度 86 件と年を経るごとに増加していった。通常さきがけの研究領域は年次を経るにつれて応募数が減少していくのが一般的であり、本研究領域のように増加し続けることは長いさきがけの歴史の中でも“唯一”である。

また、計測技術、理論・計算をシーズとする応募についても、平成 27 年度は合わせて数件しかなかったが、平成 28 年度、平成 29 年度については合わせて十数件程度に上昇し、採択課題の多様化につながった。

以下、本研究領域及び CREST「革新的触媒」での具体的な取り組みを記載する。

#### (i) 関連学協会での広報活動

本研究領域の趣旨やメッセージを広く認知していただくために、関連する学協会に対して以下の広報活動を行った。一見触媒科学とは関係性が低い学協会に対しても広報活動を行うことで、広く研究領域の周知をできたと考える。

#### 【主要な対象学会】

触媒関連： 日本化学会、触媒学会、石油学会、化学工学会

材料関連： 高分子学会、ナノ学会、日本金属学会、日本セラミックス協会

理論・計算関連： 日本物理学会、応用物理学会

計測関連： 日本分光学会、日本放射光学会

#### 【活動内容】

- ・学協会 HP からの領域紹介 HP へのリンク依頼
- ・会員への領域紹介 ML 配信依頼
- ・学協会年次大会でのポスター展示やフライヤー配布

例えば、平成 28 年春の触媒討論会（2016/3/21-22、大阪府立大学開催）においては、以下のようなポスター展示を行い、関連研究者に対して直接研究領域の紹介を行った。

**革新的触媒技術を創出せよ！**

次日本を見据えて

**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」**

研究総括：上田 涉 (神奈川大学 工学部物質生命化学科 教授)

研究総括：北川 宏 (京都大学 大学院工学研究科 教授)

領域アドバイザー

氏名	所属
伊藤 真	北海道大学 工学部化学系 准教授
高橋 誠	京都大学 工学部 物質生命化学系 准教授
加藤 誠	京都大学 工学部 物質生命化学系 准教授
川口 貴	京都大学 工学部 物質生命化学系 准教授
小川 亮	京都大学 工学部 物質生命化学系 准教授
佐藤 智	京都大学 工学部 物質生命化学系 准教授
藤田 山	京都大学 工学部 物質生命化学系 准教授
藤原 洋	京都大学 工学部 物質生命化学系 准教授
三浦 弘	京都大学 工学部 物質生命化学系 准教授
藤澤 洋	京都大学 工学部 物質生命化学系 准教授

**JSTの「革新的触媒」への取り組み**

平成27年度戦略目標：多様な天然炭素資源を活用する革新的触媒の創製

【CREST】「多様な天然炭素資源を活用する革新的触媒の創製」(H27-34年度)

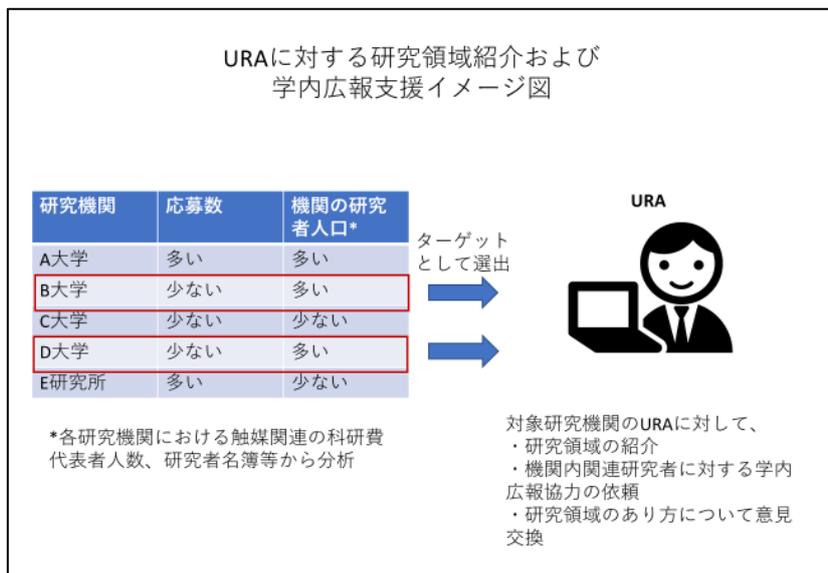
【さきがけ】「革新的触媒の科学と創製」(H27-32年度)

H27研究課題

- 「高効率メタン転換へのアプローチ」 阿部 英樹 (物質・材料研究機構)
- 「合成生物学によるメタン脱炭素の創製」 阪井 康樹 (京都大学)
- 「生体触媒の活性化状態を利用するメタンの直接メタノール変換」 荻 司 長 (名古屋大学)
- 「反応場分離を利用したメタン資源化触媒の創製」 山中 一郎 (東京工業大学)
- 「計算化学が先導するメタン脱炭素触媒の開発」 吉澤 一成 (九州大学)

(ii) URA に対する領域紹介および学内広報支援依頼

全国の大学等からの応募状況を分析すると、関連コミュニティの研究者が多く所属しているにもかかわらず応募数が少ない研究機関が多いことが判明した。そこで、そのような研究機関からの積極的な応募を喚起することを目的として、URA への研究領域紹介を行い、URA を経由した機関内の研究者への情報展開や応募勧奨を行った。近年外部資金獲得に積極的な URA が多いこともあり、募集前期に応募の少なかった研究機関の応募数増加など一定の効果が得られた。また、ナノテクプラットフォーム実施機関なども対象とすることにより、計測関連の応募数増加にもつながった。

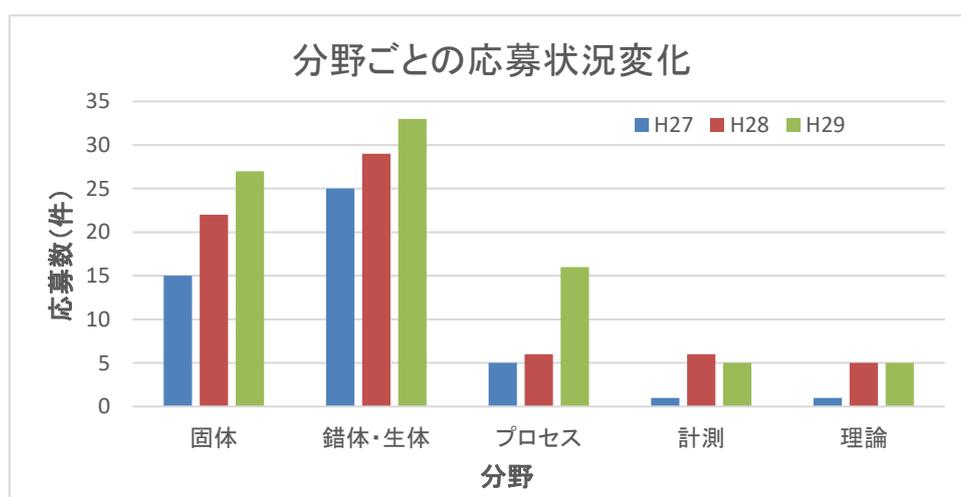


(iii) 研究総括・領域アドバイザーによる関連コミュニティへの情報発信

(i)の学会活動への広報活動、(ii)の研究機関の働きかけではキャッチアップできない研究者コミュニティへの周知を目的として、研究総括および領域アドバイザーから各種研究会等への情報発信を行った。

(iv) 広報活動の成果

以下の図に示すように、応募年次を経るごとに応募数全体が増えていることはもとより、初年度に応募が少なかったプロセス関連、計測関連、理論・計算関連の応募数が増加していることが見てとれる。



これらの応募時の分野の多様化は広報活動の成果であり、ネットワーク型研究所のシーズ多様化や連携体制構築に大きく貢献したと考えている。

#### (4) 選考結果のまとめ

応募総数 204 名に対して、29 名（内、女性 2 名、海外研究者 3 名）を採択し、採択率 14.2% であった。固体触媒、錯体・生体触媒等の材料創出に関する研究課題を主軸に置きつつも、革新的なプロセス開発や反応メカニズム理解につながる計測技術・計算科学を基盤とする研究課題もバランス良く採択した。

また、固体触媒と錯体・生体触媒の研究者が交わる機会は既存の学会等でほとんどなく、そのようなバックグラウンドを持つ研究者同士が交流・切磋琢磨することで本研究領域内での共同研究や新たなアイデアが創出されることを期待した。

採択課題一覧

#### 固体触媒と錯体・生体触媒をバランス良く採択

反応プロセス	FET反応制御 (H29野内)	非定常プロセス (H28浦川)	微細気泡反応場 (H29倉橋)	メタン酸化電池 (H29松本崇弘)
	電場印加レドックス触媒 (H28小河)	光電気化学プロセス (H27天野)		
触媒創製	電場印加界面反応 (H28稲垣)	低温レドックス酸化物 (H27部次)	金属硫化物クラスター (H28松本剛)	バイオ電極触媒 (H28藤枝)
	アルカリ熔融塩 (H29高鍋)	金属ナノシート (H27船津)	超分子会合体 (H29山田)	
	ゼオライト (H27横井)	有機・無機強塩基触媒 (H27田村)	環状バナデート (H28菊川)	鉄系超分子触媒 (H28石塚)
	ペロブスカイト金属酸化物 (H27鎌田)	有機・無機協奏活性化 (H29本倉)	複核金属協働触媒 (H29鷹谷)	π空間鉄オキソ錯体 (H29人見)
			配位子協働反応開発 (H27楠本)	人工酵素 (H27大洞)
	固体触媒		錯体・生体触媒	
触媒基盤	探針増強ラマン分光 (H28熊谷)	マルチオベラント分光 (H28杉本)	準大気圧XPS (H29小板谷)	In situ TEM (H29橋本)
			ナノスリット構造第一原理計算 (H28中山)	
	速度論+第一原理 (H29石川)			

## 5. 領域アドバイザーについて

以下に領域アドバイザーのリストを示す。

領域アドバイザー名 (専門分野)	終了時の所属	役職	任期
秋鹿 研一 (C1 化学、固体触媒)	東京工業大学	名誉教授	2015年7月～ 2021年3月
上田 渉 (固体触媒)	神奈川大学 工学部	教授	2015年7月～ 2021年3月
魚谷 信夫 (触媒プロセス、 高分子材料)	元京都大学 iCeMS/ChEM-OIL	特任教授	2015年7月～ 2021年3月
岡部 晃博 (触媒プロセス、 機能性材料)	三井化学(株) 生産技術研究所 プロセス基盤技術G	主席研究員	2015年7月～ 2021年3月
奥村 吉邦 (触媒プロセス、 石油化学)	昭和電工(株) 大分コンビナート 技術開発部	部長	2016年1月～ 2021年3月
鈴木 賢 (触媒プロセス、 固体触媒)	旭化成(株) 研究・開発本部 化学・プロセス研究所	所長/プリン シパルエキス パート	2015年7月～ 2021年3月
関根 泰 (固体触媒、 新規プロセス)	早稲田大学 先進理工学研究科	教授	2015年7月～ 2021年3月
館山 佳尚 (計算化学、 電極触媒)	物質・材料研究機構 エネルギー・環境材料研究拠点 界面計算科学グループ	グループリー ダー	2015年7月～ 2021年3月
常木 英昭 (触媒プロセス、 固体触媒)	早稲田大学 理工学術院総合研究所	客員上級研究 員	2015年7月～ 2021年3月
野崎 京子 (有機金属化学、 均一系触媒)	東京大学 大学院工学系研究科	教授	2015年7月～ 2021年3月
野村 淳子 (固体触媒、 計測・分析)	東京工業大学 科学技術創成研究院	准教授	2015年7月～ 2021年3月

林 高史 (生体触媒、 均一系触媒)	大阪大学 大学院工学研究科	教授	2015年7月～ 2021年3月
吉信 淳 (表面科学、 計測・分析)	東京大学 物性研究所	教授	2015年7月～ 2021年3月

#### \*人選にあたっての考え方

本研究領域では、触媒科学という極めて学際的な学問領域かつ産業に直結した技術領域であることを鑑みて、学术界および産業界から多様な分野の専門家に参画をお願いした。

#### (1)学術的視点

アカデミアからは本研究領域で扱う広範な材料系、プロセス、計測技術、理論・計算の研究シーズに対して十分な選考、採択後のアドバイスを行えるよう、専門性を考慮して以下のメンバーを選出した。

##### ・固体触媒：

秋鹿研一（東京工業大学） C1 ケミストリー、アンモニア合成  
上田 渉（神奈川大学） 金属酸化物材料、グリーンケミストリー

##### ・錯体・生体触媒：

野崎京子（東京大学） 有機金属化学、高分子材料  
林 高史（大阪大学） 生物無機化学、生体材料

##### ・反応プロセス

関根 泰（早稲田大学） プラズマ場触媒プロセス、C1 ケミストリー

##### ・計測技術

野村淳子（東京工業大学） 分光分析、多孔性材料  
吉信 淳（東京大学） 表面分光、表面・界面ダイナミクス

##### ・理論・計算

館山佳尚（物質・材料研究機構） 第一原理計算、二次電池・燃料電池

#### (2)産業的視点

触媒科学という産業に直結した技術領域であることを鑑みて、企業在籍者および企業経験者 5 名に参画要請をした。各人とも工業触媒として触媒プロセス開発で大きな功績を残しながらも自身も一流化学誌に論文投稿するなど、基礎科学としての触媒科学に造詣の深い方を選出した。また、研究開発および技術開発の最前線で現在も活躍する若い方にも積極的に参画をお願いした。さらに、常木氏と鈴木氏は触媒設計から製造プラントまでの立ち上

げを経験した数少ない日本の企業触媒研究者である。

氏名	受賞歴や特筆すべき経歴
魚谷 信夫	NEDO 等の大型研究プロジェクト推進を歴任
岡部 晃博	平成 30 年度日本化学会科学技術賞等多数
奥村 吉邦	NEDO 等の大型研究プロジェクト推進を歴任
鈴木 賢	平成 31 年度文部科学大臣表彰科学技術賞（開発部門）等多数
常木 英昭	平成 23 年度文部科学大臣表彰科学技術賞（開発部門）等多数

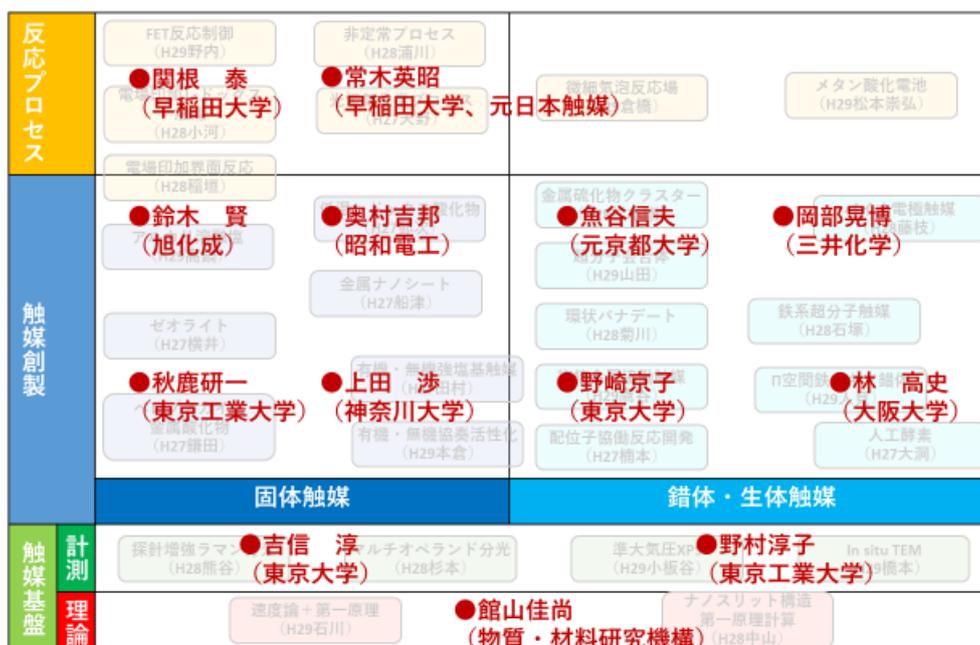
なお、領域会議では企業所属アドバイザーの協力のもと、触媒プラント、石油化学コンビナートの見学などを実施した。

### (3) その他の視点

若い第一線の研究者と触媒の神髄を知るシニア研究者にバランス良く参画してもらった。

CREST「革新的触媒」領域の研究総括上田渉（神奈川大学）氏にアドバイザーを務めてもらうと同時に、北川も CREST「革新的触媒」領域のアドバイザーとなり、さきがけ・CRESTの連携体制を構築した。

採択課題俯瞰図におけるアドバイザーの位置づけ



## 6. 研究領域のマネジメントについて

### (1) 研究領域運営方針やマネジメント

第3章の「総括のねらい」で述べたように、本研究領域では以下の3つの目標を掲げた。

- (i) メタンや低級アルカン、およびその他の原料の高効率利用を可能にする「革新的触媒の創製」
- (ii) 物質創製、計測・解析、理論計算・インフォマティクスを活用した「革新的な触媒科学」の確立
- (iii) 次世代をになう触媒科学の国際的なリーダーの輩出

これらの目標を達成するために、第一義には、さきがけらしい採択研究者の挑戦的かつ独創的なアイデアにもとづく研究を奨励した。言うまでもなく研究者達の狙う超高難度反応に対する触媒材料開発や計測および理論・計算手法の開拓は極めて難しいテーマであり、研究期間中の数々の失敗や困難にも負けず当初のコンセプトを貫くことを研究総括・領域アドバイザー一丸となって支援した。一方で、個々の目標追求のなかで生まれた派生的な研究成果や展開については追加の予算措置を積極的に行い、そのコンセプトがさきがけ研究として研究者人生の礎となるサイエンスとして広げていくことを奨励した。

また、研究者全員がアプローチは異なるもののメタン変換という共通の目標を掲げており、研究者同士の相互交流や共同研究を強く奨励した。特に、対象反応に対して高度に設計された物質創製、新規反応プロセスを目指す研究者、それらの触媒メカニズムの理解に資する計測・解析技術や理論・計算手法の開発を目指す研究者らが協働することで深いサイエンスに根付いた触媒材料の創製を推進した。また、材料系研究者同士でも固体触媒系研究者と錯体・生体触媒系研究者の間でのコンセプトの共有、アイデアの交換など通常の学会等のコミュニティでは喚起しづらい相互交流を奨励した。さらに、本さきがけ研究領域内に閉じず、同一戦略目標下に発足したCREST「革新的触媒」研究領域、発足年度が近いさきがけ「マテリアルズインフォマティクス」研究領域、さきがけ「反応制御」研究領域など関連性の強い研究領域との積極的な交流も進めた。

それらの結果として、領域内外の連携の成果として49件の共同研究が進み、30報以上の共著論文を発表している。

本研究領域では、将来国際的にリーダーシップを発揮する人材の輩出を目標として、国際的な領域活動や連携支援を進めてきた。特に化学産業、触媒科学で高い競争力を持つドイツをはじめとするEU諸国との連携を狙う国際活動を数多く実施した。これらの活動は以下のような成果を期待してのものである。

- ・ トップクラス海外研究者とのネットワーク構築
- ・ さきがけ研究成果の最大化（共著論文、共同研究等）

- ・ 国際的な成果発信による国際的な認知度の向上
- ・ 国際経験の少ない研究者のプレゼンテーション・ディベート力の向上

これらの国際的な活動を通じて、11 件の国際共同研究が進み、6 報の国際共著論文を発表している。また、何よりも研究者の自発的な国際会議のオーガナイズなど国際ネットワークの構築に貢献しており、今後のさらなる交流深化が期待される。

触媒科学という産業に近い技術領域であることに鑑みて、産業界との相互交流や共同研究への発展を進めるため連携イベントや成果発信を積極的に進めた。その結果として、工業触媒に近い固体触媒系研究者を中心に 10 件超の共同研究、3 件の共願特許を発表している。

研究課題の進捗管理、指導については、採択直後や進捗状況に応じて随時、研究総括や領域アドバイザーが所属研究室を訪問するサイトビジットを行い、具体的な研究計画について議論を行い、達成目標や方向性の明確化を行った。

## (2) 研究課題の進捗状況の把握と指導

### ① 研究総括および担当アドバイザー（メンター）によるサイトビジット

採択初年度に研究総括および JST 領域担当が研究者の研究室を訪問するサイトビジットを行い、研究実施環境の把握および具体的な研究計画に関する議論を行った。また、進捗の芳しくない研究課題やシーズの知財化や、さらなる発展が期待される加速的なフェーズにある研究課題に対しては、必要に応じて随時追加のサイトビジット・個別面談を実施した。サイトビジットは総計 57 回にも及び、研究総括自らが頻繁に研究者と議論・交流の機会を持つことで、研究方針の綿密な議論や課題解決への助言が図られた。

本研究領域では、各研究者および研究課題に対して関係性の深い専門性を持つ領域アドバイザーが研究進捗把握や課題解決把握のアドバイスをを行う担当アドバイザー（メンター）制を導入しており、サイトビジットにも延べ 50 回積極的に参加ご協力いただいた。

各研究者に対応する担当アドバイザーの一覧 (敬称略)					
一期生		二期生		三期生	
天野	鈴木、関根	石塚	岡部、野崎	石川	常木
大洞	野村	稲垣	秋鹿、奥村	倉橋	魚谷、関根
鎌田	秋鹿、常木	浦川	関根、常木	小板谷	野村
楠本	林	小河	魚谷	高鍋	常木
田村	常木、野崎	菊川	鈴木、野崎	鷹谷	林
船津	鈴木、館山	熊谷	吉信	野内	岡部、関根
邨次	魚谷、関根	杉本	館山、吉信	橋本	秋鹿、吉信
横井	岡部、吉信	中山	館山	人見	野崎
		藤枝	林	松本崇	鈴木
		松本剛	奥村、野村	本倉	奥村
				山田	林

なお、2020 年度は新型コロナウイルスの感染拡大の影響により、全体の領域会議などの開催に影響が生じたことを鑑みて、終了年次である三期生全員を対象にオンラインでの研究面談を行った。

## ②領域会議

領域会議は11回（年2回）実施した。（下方の表を参照）出席者は、研究総括、領域アドバイザー、さきがけ研究者、JST 関係者であり、集中的な研究交流や議論のため合宿形式で行った。CREST「革新的触媒」研究領域との相互交流を促進するため、理論・計算化学を研究テーマに掲げる九州大学吉澤チーム、先端計測を研究テーマにする九州大学松村チームにも毎回参加いただき、話題提供やさきがけ研究者との共同研究の可能性について議論を行った。また、領域内共同研究の発展を促進するため、さきがけ研究終了者にも積極的な参加を促した。

さらに、JST 知財部をオブザーバーとして招聘し、各研究課題の研究成果の知財化を積極的に支援・推進した。

	日程	地域	特別講演・交流企画ほか
第1回	2016年1月19日	東京都	なし
第2回	2016年 5月29日～30日	静岡県	・ナノテクプラットフォーム事業紹介 ・秋鹿 AD、常木 AD 特別講演 ・話題提供：CREST 吉澤チーム
第3回	2016年 12月8日～10日	神奈川県	・ <u>さきがけ「マテインフォ」領域と合同セッション開催</u> ・鈴木 AD、館山 AD 特別講演
第4回	2017年 5月21日～23日	兵庫県	・ <u>(株) 日本触媒姫路事業所見学</u> ・話題提供：CREST 吉澤チーム
第5回	2017年 11月19日～21日	千葉県	・話題提供：CREST 松村チーム、吉澤チーム、JST-CRDS フェロー講演
第6回	2018年 5月13日～15日	大分県	・ <u>昭和電工(株) 大分コンビナート見学</u> ・話題提供：CREST 松村チーム、吉澤チーム
第7回	2018年 12月18日～20日	東京都	・一期生課題事後評価会 ・話題提供：CREST 松村チーム、吉澤チーム
第8回	2019年 5月22日～24日	岡山県	・ <u>旭化成(株) 水島製造所見学</u> ・話題提供：CREST 松村チーム、吉澤チーム

第9回	2019年 12月7日～8日	千葉県	・二期生課題事後評価会 ・岡部 AD 特別講演
第10回	2020年9月14日	オンライン	なし
第11回	2020年 12月5日&8日	オンライン	・三期生課題事後評価会



さきがけ「マテインフォ」領域との合同ポスターセッション



領域会議集合写真

領域会議に付随した活動として、工業触媒の技術開発やプラントの現場に触れることを目的として、産業界アドバイザーのご協力のもと、所属企業の製造所やコンビナートの見学会を開催した。実触媒を開発する技術者との意見交換の機会なども設けられ、社会実装を意識した基礎研究のあり方などを啓蒙する有効な機会となった。

また、半年ごとの領域会議（通常5月、12月頃）と併せて研究者から半期報告書（通常3月、9月）の提出を義務づけており、タイムリーな研究進捗把握に努めた。

### ③課題事後評価会

さきがけ研究成果の更なる発展と今後のさきがけ研究の方向性について議論を深めることとし、研究終了年次に課題事後評価会を開催した。研究者1名ずつプレゼンテーションと議論を行った。なお、課題事後評価会での結果を受けて、各アドバイザーからのコメント（研究課題に対するアドバイスに加えて、研究者として大きく成長するための視点を含めたアドバイス）を集約し、研究者一人一人にフィードバックした。

### (3) 研究課題間の連携促進施策

領域内およびCREST「革新的触媒」研究領域との相互交流・共同研究を促進し、ネットワーク型研究所としての機能を高めることを大きな運営方針として掲げている。交流・議論の場としては、上述の領域会議が最も重要な役割を果たした。

一方で、領域内での専門分野ごとの議論の深化、さきがけ・CRESTをまたぐ若手研究者同士の交流を促すため以下の施策を実施した。

#### ①分子・生体触媒研究会（分野内深化）

□日時： 2018年9月11日～12日

□場所： 名古屋大学工学部（ホスト：CREST「革新的触媒」山下チーム）

□参加者： 研究総括、林AD、さきがけ研究者10名、CREST「革新的触媒」荘司チーム  
山下チーム）



## ②触媒インフォマティクス研究会（分野内深化）

□日時： 2018年4月22日～23日

□場所： 新潟駅近郊会議室（ホスト：CREST「革新的触媒」吉澤チーム）

□参加者： さきがけ研究者2名、CREST「革新的触媒」理論系関係者

## ③CREST「革新的触媒」全体チーム会議（CREST若手・さきがけ交流）

第1回： 2016年10月18日 CREST 荘司チーム主催

第2回： 2017年10月14日～15日 CREST 山中チーム主催

第3回： 2019年10月12日～13日 CREST 吉澤チーム主催

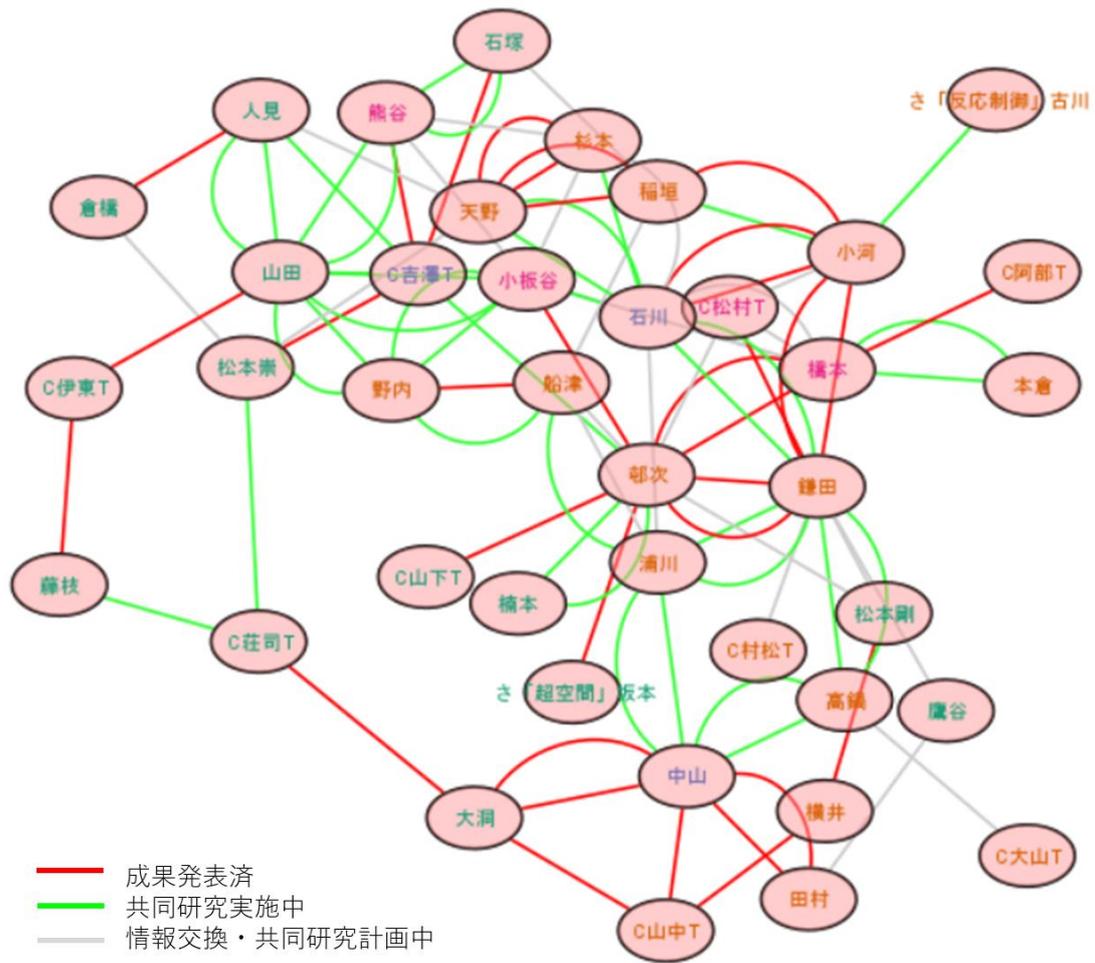
### 【領域内外での連携実績】

これらの施策を通じて得られた領域内外で多くの連携が生まれ共同研究に発展した。具体的には、次頁に示すように、理論・計算系の研究者（紫色）、計測系の研究者（ピンク色）をハブとして、多様な研究交流が生じている様子が見てとれる。

次頁左部のような分子系触媒（緑色）の共同研究ネットワークや、次頁右部のような固体触媒（茶色）の共同研究ネットワークが存在しており、研究分野ごとでの深掘りが進んでいることがみてとれる。さらに、理論・計算系（紫色）、計測系（ピンク色）、材料系（緑色または茶色）を結ぶ共同研究関係が多数生じていることは、本研究領域が狙いとしていた原理解明にもとづく触媒材料開発が進んでいる証左であるととらえている。

その結果、領域内共同研究の結果として、47件の共同研究が生じ、30件以上の外部発表が生まれている。

たとえば、“Ambient-temperature Oxidative Coupling of Methane in an Electric Field by a Cerium Phosphate Nanorod Catalyst”, Chemical Communications, 2019, 55, 4019-4022 においては、鎌田研究者（一期生）が開発した金属ホスフェート触媒を小河研究者（二期生）が有する電場駆動プロセスに応用して高い低温活性を得ることに成功し、さらに、CREST 松村チームが有する超高解像度 TEM を駆使して触媒メカニズムや材料特性理解も深めることによりサイエンスとしてインパクトある成果も生まれている（バックカバーに選出）。

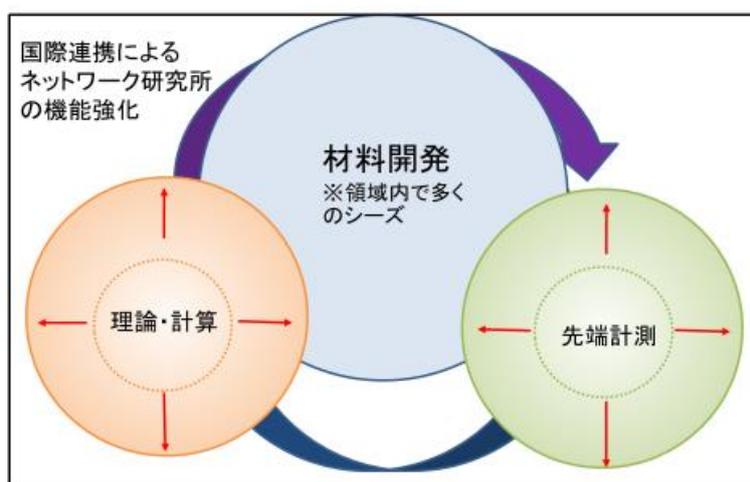


#### (4) 国際連携および成果発信

さきがけ研究者の国際ネットワークの構築、国際共同研究への発展、成果発信による国際的なプレゼンスの向上を期待し、国際活動を研究者に啓蒙し、また研究領域としても重点的にその機会を提供した。特に本研究領域で目標とする、先端計測や理論・計算にもとづく原理解明とそれによる材料設計・創出という新たな触媒科学の構築という観点から、先端計測技術や理論に強い欧州を中心とした国際ネットワークの構築に励んだ。

#### 国際連携施策のねらい

- 若手研究者の国際ネットワークの構築
- 国際共同研究による「革新的な触媒科学」の創出
- 若手研究者の国際的なプレゼンスの向上



#### ①フリッツ・ハーバー研究所（ドイツ）との合同ワークショップ

ドイツのマックス・プランク協会フリッツ・ハーバー研究所(Fritz-Haber Institute:FHI)との合同ワークショップを JST・FHI 共催で開催した。FHI はハーバー-ボッシュ法のフリッツ・ハーバーの名を冠していることからわかるとおり、触媒化学に強く、また近年では表面科学、物理化学的分野の理論・先端計測で独創的な研究を進めるドイツ随一の国立研究機関である。本ワークショップは研究総括のリーダーシップのもと、研究領域として開催を主導したものである。

ワークショップでは、FHI を中心としたドイツ国内および欧州の有力な若手研究者との国際ネットワークの構築および国際共同研究への発展を目的とした。特に理論・計算、先端計測分野との効果的な連携が図られることを期待した。

□日時： 2018年10月31日～11月2日

□場所： フリッツ・ハーバー研究所

□参加者： 100名程度

(日本側) 北川研究総括、上田 CREST「革新的触媒」研究総括、領域 AD 数名

さきがけ研究者全員、CREST「革新的触媒」研究者数名  
(欧州側) FHIをはじめとするドイツ研究者、欧州研究者 60名程度



日本側からはさきがけ研究者 29 名全員および CREST「革新的触媒」研究者、研究総括・関連領域アドバイザーが参加し、欧州側の参加者も含めると 100 名規模のワークショップとなった。口頭発表、ポスター発表に合わせて、本研究領域の研究者であり、FHI で PI を務める熊谷崇氏のホストのもと、研究所見学も実施した。最先端計測装置の充実ぶりはもちろんのこと、その運用をサポートする技術者などの人的体制整備の充実に多くの参加者が刺激を受けており、効果的な研究開発のあり方を考える機会にもなった。

## ②ミュンヘン工科大学触媒研究センター（ドイツ）とのオンラインワークショップ

ドイツのミュンヘン工科大学触媒研究センター（Catalysis Research Center, Technische Universität München; CRC-TUM）との合同ワークショップを JST・CRC 共催で開催した。CRC は材料創出、計測、理論・計算の研究部門を幅広く保有し学際的な触媒科学を推進しており、欧州の触媒研究のハブとしてのミッションを掲げる重要な触媒研究拠点である。触媒科学の学際性および新たな方法論の開拓という観点で、本研究領域と目標を共有しているため合同ワークショップを開催するにいたった。また、本ワークショップは研究総括のリーダーシップのもと研究領域として開催を主導したものである。

□日時： 2020 年 7 月 27 日～28 日 16:00～18:00（日本標準時）

□開催形式： オンライン

□参加者： 50 名程度

(日本側) 北川研究総括、さきがけ研究者 15 名、CREST「革新的触媒」研究者数名

(欧州側) CRCをはじめとするドイツ研究者、欧州研究者 20 名程度

当初 CRC での現地開催を計画していたが、新型コロナウイルスの影響によりオンラインでの開催に変更となった。欧州側の参加者は新進気鋭の若手研究者が集まり、「Catalysis Science - Quo Vadis? (触媒科学はどこへ行くのか?)」というタイトルで新たな触媒科学

の展望、共同研究の可能性などを議論した。

オンライン開催にあたっては、事前に専門性の観点からペアリングされたチームが互いの研究を紹介し合う、共同研究の可能性などを発表するタンデムプレゼンテーション形式を採用した。時差で会議時間に制約があり、リアルでの議論が叶わない中で、各チーム内で事前の情報交換や議論に準備を重ねてもらうことで、効果的な交流を促進した。

### ③研究者主催の国際ワークショップ

FHI との合同ワークショップを契機として、さらに領域の国際活動を活性化させるべく研究者自らが企画する国際活動を支援した。これらの活動に対しては予算面・運営面でのサポートを領域として行ったものの、研究者からの自発的なアイデアを重視した。

#### (i) 分子研-FHI-JST 合同ワークショップ

二期生杉本研究者（分子科学研究所）および二期生熊谷研究者（FHI）を中心として、①で記載した JST-FHI 合同ワークショップをさらに展開したいという目的で開催された。

- 名称： IMS-FHI-JST joint international workshop  
“Forefront of Measurement Technologies for Surface Chemistry and Physics in Real-Space, k-Space, and Real-Time”
- 日時： 2019年12月2日～4日
- 場所： 愛知県
- 参加者： 80名程度

ワークショップでは、物質表面の構造や物性、化学的機能を原子・分子レベルで調べることのできる表面観測手法・分光法を中心的なテーマに掲げ、集中的な議論を行った。とりわけ若手・中堅研究者の密な研究交流と長期的な研究協力の芽となる機会を作り出すという当初目標は大いに達成されている。

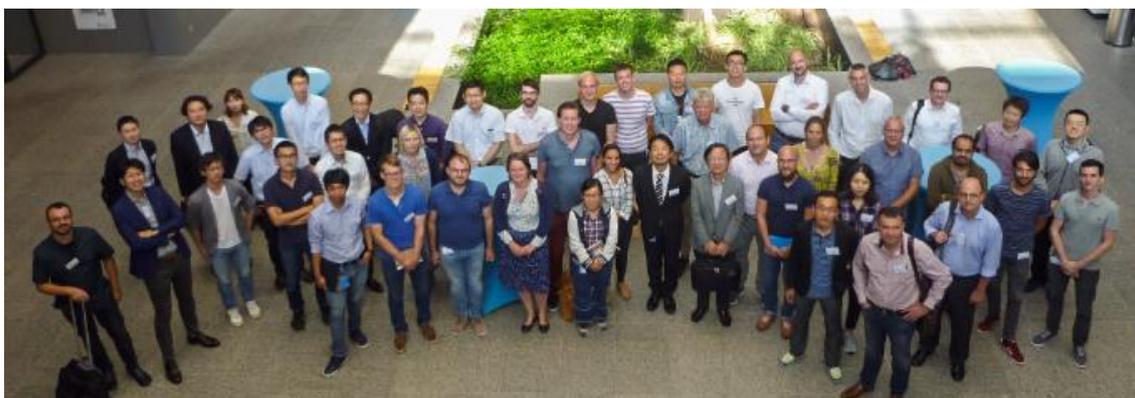
また、研究総括としては、①の JST-FHI 合同ワークショップの後継活動が自発的に生じたことも、合同ワークショップの大きな成果であったととらえ、今後のさらなる発展に期待している。

#### (ii) デルフト工科大学-JST 合同ワークショップ

二期生浦川研究者（デルフト工科大学）を中心として、日欧の若手研究者を中心とするワークショップを開催した。触媒開発の加速および新たなパラダイム創出には、国際協力が重要であるという浦川研究者の熱い思いから生じた企画で、今回のシンポジウムは、触媒化学・化学工学分野で世界有数の研究機関であるデルフト工科大学をはじめとする EU 諸国との国際的な連携を企図としたワークショップである。

- 名称： “Innovating Methodologies in Catalysis”
- 日時： 2019年8月26日～27日
- 場所： デルフト工科大学
- 参加者： 60名程度
  - (日本側) 上田 CREST 研究総括、さきがけ・CREST 関係者 10名
  - (欧州側) デルフト工科大学関係者、欧州招待講演者併せ 50名程度

個別の技術に関する知見交換だけでなく、低炭素社会に向けた触媒の役割、触媒創出を加速するための情報科学的アプローチ、国際協働のあり方など、俯瞰的な議論も活発に行われた。併せてラボツアーも企画され、超高圧反応装置を複数有する実験棟など日本の大学には見られない施設を披露いただいた。なお、北川研究総括は右足の骨折のために直前で不参加となった。



#### ④その他の国際成果発信

(i) TOCAT8-ZMPC2018 (2018) コラボレーション企画 Methane conversion session

□日時： 2018年8月6日(月)～8月7日(火)

□場所： パシフィコ横浜 S会場

本会議はCREST「革新的触媒」研究領域の主導のもと、JST国際支援の一環を利用しており、海外から5名の著名な研究者を招聘した。さきがけ研究者も数名参加しており、会議終了後には、海外研究者とCREST研究代表者との研究動向についての議論の場を設け、計算、実験、計測と連携した新規メタン転換触媒を開発する新しい切り口について積極的に議論し、国際的な研究、領域の認知度向上を図った。

#### 【国際連携実績】

本さきがけ研究を通じて生まれた国際共同研究を以下の表に示した。領域主導の国際活動を本格化させたのは三期生採択が終わり全研究者の揃った2018年からのことであり、そ

これらのネットワークが共同研究として具体化するのはまだまだこれからのことであると考ええる。

一方で、FHI や TUM との合同ワークショップの中で生まれた共同研究の芽が生じつつあり、これらは最先端計測と触媒化学とを融合した新興領域を切り拓こうとする研究の芽が生じつつある。研究領域終了後もこれらの活動が顕在化していくことを期待している。

No	研究者	研究連携研究者	連携概要
1	大洞光司	Prof. Nicolai Lehnert (ミシガン大)	触媒反応評価技術 (1 報)
2	邨次智	Prof. Frank Glorius (ミュンスター大)	有機配位子複合化と触媒作用 (4 報)
3	邨次智	Prof. Bart Jan Ravoo (ミュンスター大)	配位子複合化とナノ材料化 (1 報)
4	鎌田慶吾	A. Prof. Yu-ChuanLin (成功大)	in situ 測定技術
5	菊川雄二	Prif. Carsten Streb (Ulm 大)	酸化物クラスター触媒
6	中山哲	Prof. Nisanth Nair (インド工科大)	自由エネルギー解析技術
7	高鍋和広	Prof. Dimosthenis Sokaras (SLAC)	放射光を用いた解析技術
8	高鍋和広	Dr. Luigi Cavallo (KAUST)	触媒反応の計算化学
9	鷹谷絢	Prof. Tüysüz, Harun (Max Planck)	OEC 触媒に関する技術
10	野内亮	Prof. Mariana Rossi (FHI)	吸着分子の理論計算
11	人見譲	Dr. Juan. J. Velasco-Vélez (Max Planck)	鉄オキシ種の X 線分光光学技術

## (5) 産業界および学術コミュニティとの連携

触媒化学という産業界と直結している科学技術を扱っており、産業界との研究交流や意見交換の機会を積極的に設けた。

### (i) 酸化反応討論会第 50 回(2017) 50 周年記念企画シンポジウム

CREST&さきがけ「革新的触媒」研究領域合同シンポジウム-メタン資源利用に向けて-

□日時： 2017 年 11 月 10 日(金)

□場所： 神奈川大学横浜キャンパス 3 号館 3-305 号室

□参加者： 領域関係者、アカデミア・産業界 200 名程度

### (ii) JACI/JST 交流セミナー

「革新的触媒」(さきがけ) & 「先導的物質変換領域」(ACT-C) 研究者との集い

□日時： 2018 年 3 月 8 日

□場所： 新化学技術推進協会 (JACI)

□参加者： 領域関係者、産業界 50 名程度

新化学技術推進協会 (JACI) と JST さきがけ「革新的触媒」「ACT-C」研究者の交流を目的とした会合を開催した。触媒化学、材料化学、有機合成化学を担う気鋭の研究者と JACI 会員企業の若手研究者・リーダーとの間での積極的な意見交換を行った。

### (iii) 日本化学会長期プログラム「革新的触媒」

日本化学会の第 98 回春季年会 (2018 年) から中長期企画として「革新的触媒の創製」がスタートしている。本研究領域からも以下のメンバーが招待講演者として登壇している。CREST「革新的触媒」研究者とも併せ、アカデミア・産業界への成果発信として大いに有効な機会となった。

- ・第 99 回「炭素-水素結合の活性化」

さきがけ登壇者： 二期生・小河脩平、一期生・鎌田慶吾

- ・第 100 回「電気・光などを用いた触媒反応」

さきがけ登壇者： 一期生・天野史章

### (iv) JST・触媒学会共催オンライン公開シンポジウム ～革新的触媒と反応制御の今後～

□日時： 2020 年 5 月 22 日

□形式： オンライン

□参加者： 領域関係者、アカデミア・産業界 700 名超

コロナ禍における研究の外部発信および議論の停滞を防ぐため、触媒学会およびさきがけ「反応制御」領域との共催で公開シンポジウムを開催した。本領域からは三期生の鷹谷研究者、松本研究者、本倉研究者が講演を行った。アカデミア、産業界への成果発信だけでなく

く、さきがけ他領域との研究交流の機会ともなった。

#### 【産学連携の実績】

産業界との共同研究実績としては、10 件超の研究が進んでいる。特に固体触媒系のシーズを中心として高性能化、スケールアップの可能性等の検討が進んでいる。また、産学連携を促すため、積極的な知財取得を呼びかけており、領域会議などには JST 知財部を招聘してその芽を見出す工夫を実施した。特に触媒材料の新規性だけでなく、反応プロセス・反応セルの新規性を伴う研究課題については積極的な知財化を支援し、例えば三期生の松本崇弘（九州大学）研究者は JST 出願を行った。特にこの出願には、知財に詳しい領域担当者と JST 知財部が手厚い支援を行った。

#### (6) 予算配分

以下の観点を重視して、追加の予算措置を行った。

- ・領域内の共同研究を促進するための共同フェージビリティ・スタディ(100 万円前後)
- ・異動に伴う環境整備費の支援（スタートアップ支援）

具体的には、共同 FS への支援 15 件、スタートアップ支援 5 件を行い、領域内共同研究の加速および異動に伴う研究遅延の最小化を図り、研究成果の最大化に努めた。

#### (7) 人材の輩出・成長の状況

##### ①昇任【採択時→2020 年 12 月 15 日現在】

###### ○助教・准教授→教授（4 名）

- 浦川 篤（ICIQ→デルフト工科大学）
- 中山 哲（北海道大学→東京大学）
- 倉橋拓也（分子科学研究所→長崎県立大学）
- 高鍋和広（KAUST→東京大学）

###### ○助教・講師→准教授（11 名）

- 大洞光司（大阪大学）
- 田村正純（東北大学→大阪市立大学）
- 横井俊之（東京工業大学）
- 石塚智也（筑波大学）
- 菊川雄司（金沢大学）
- 杉本敏樹（京都大学→分子科学研究所）
- 藤枝伸宇（大阪大学→大阪府立大学）
- 松本 剛（中央大学→東京工業大学）
- 石川敦之（物質・材料研究機構）

本倉 健（東京工業大学）※2021年4月からは教授に昇任予定。

船津麻美（熊本大学→長岡技術科学大学）※2021年3月予定。

○助教→講師（2名）

邨次 智（名古屋大学）

小河脩平（早稲田大学→高知大学）

2021年3月、4月での昇任予定者も含めると、**採択研究者29名のうち17名が昇任**しており、さきがけを通じた研究者の飛躍および日本をリードする人材の輩出に大きく貢献した。

## ② 主な表彰・受賞

主な受賞歴の中から、触媒科学に関連性の高い賞、若手研究者を対象とした中で特に荣誉ある賞と評されるもの等を以下に抜粋する。

○日本学術振興会賞：

浦川篤（2020）

○文部科学大臣表彰若手科学者賞（8名）：

天野史章（2017）、鎌田慶吾（2018）、田村正純（2018）、小河脩平（2020）、

菊川雄司（2019）、熊谷崇（2020）、松本崇弘（2018）、本倉健（2019）

○PCCP Prize（3名）：

大洞光司（2019）、邨次智（2016）、杉本敏樹（2018）

○触媒学会奨励賞（3名）：

天野史章（2017）、田村正純（2017）、小河脩平（2020）

○石油学会奨励賞（2名）：

田村正純（2018）、小河脩平（2019）

○新化学推進協会関連

新化学技術研究奨励賞： 鎌田慶吾（2018）

グリーン・サステイナブルケミストリー奨励賞： 本倉健（2020）

○Gaede Prize（※ドイツの表面科学分野で権威ある若手賞）：

熊谷崇（2020）[※日本人として初選出]

## ③ さきがけ終了後の展開

多くの研究者がさきがけ研究期間中および研究終了後に若手科学者を対象とした外部資金を獲得している。例えば、科研費若手Aの研究代表者4名、JST さきがけ制度3名の採択など、さきがけ研究のコンセプトを展開し新たな基礎研究へと広がりを見せている。また、NEDO、SIPなどの実用化をめざしたプロジェクトにも採択されており、応用研究も進行している。

また、CREST「革新的触媒」領域との連携として、さきがけ終了後さらに本格的なメタン変換触媒としての成果創出が期待される研究者・研究課題については、親和性のあるCRESTチームへと主たる共同研究者として参画し、研究を継続させている。具体的には、鎌田研究者（一期生）、横井研究者（一期生）が、CREST「革新的触媒」村松チームへと参画し、金属リン酸塩触媒、ゼオライト触媒の研究を発展させている。

## 7. 研究領域としての戦略目標の達成状況について

本研究領域では、1期生8名、2期生10名、3期生11名の合計29名の研究者を採択し、メタンをはじめとする低級アルカン等の資源を化成品原料やエネルギーへ高効率に変換する革新的触媒の創製を目指した。これを実現するために、研究領域内での材料創製、プロセス研究、計測・理論等の様々な学理や分野を融合し、革新的な触媒科学の構築をめざした。これらの連携によって、CREST「革新的触媒」領域も含め領域内外での多くの共同研究に発展し、多くの研究成果が創出された。国際連携についても重視しており、長期的な視点での国際ネットワークの構築を図り、国際共同研究へと発展している。

### (1) 研究成果の達成状況

本研究領域全体での成果は、論文179報、学会等での招待講演件数216件（口頭発表総数469件）、特許出願13件と、非常にハイレベルな研究目標を設定した本研究領域としては多くの研究成果を発信することができたと考えている。

本研究領域で、特徴的、かつ重要であると思われる研究成果について以下に紹介する。

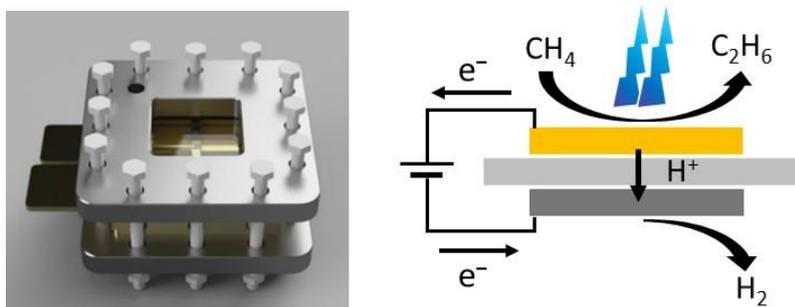
#### ① 研究領域全体としての特筆すべき研究成果

(固体触媒事例1) 天野史章 研究者 (1期)

「光電気化学的メタンカップリング」

高温での光電気化学プロセスにおける転化率と生成物選択率のトレードオフを打破するため、低温域（室温レベル）での光電気化学プロセスに着目し、電場印加状態で生成させた長寿命な正孔を利用したメタンの一電子酸化反応による $\cdot\text{CH}_3$ の生成に成功した。さらに、可視光照射が可能な固体高分子形燃料電池型プロトン交換膜反応器の設計・製作、新規なナノ粒子電極の開発を行い、高活性と高選択性を両立する世界トップレベルの低温メタン酸化カップリング反応を実証した。

省エネルギーの可視光を使ってメタンを活性化し、室温においてメタンを水素とエタンに転換できる新しい合成プロセスへの目処を立てた。



上左：固体高分子形燃料電池型プロトン交換膜反応器の外観写真

上右：光電気化学プロセスを応用する低温メタン酸化カップリング反応の概念図

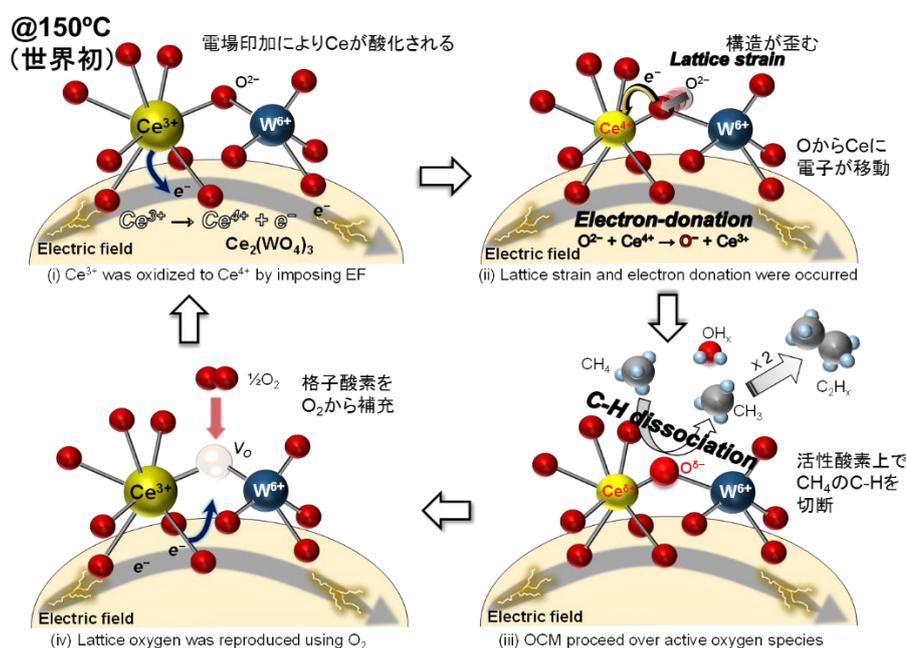
これらの成果によって、2017年度触媒学会学術奨励賞、2018年度科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞など多くの受賞実績を得るに至っている。また、さきがけ領域内での共同研究を積極的に進め（共著2報）、これらの研究成果を更に発展させ、2018年度さきがけ「反応制御」（関根泰研究総括）「電解還元法による酸素酸化反応プロセスの構築」の採択に繋がった。研究成果の関連論文の一つとして、ACS Energy Letters, 4, 502-507 (2019). [被引用数 8]がある。

(固体触媒事例2) **小河脩平 研究者** (2期)

「多電子レドックス触媒による電場中での低温メタン直接転換」

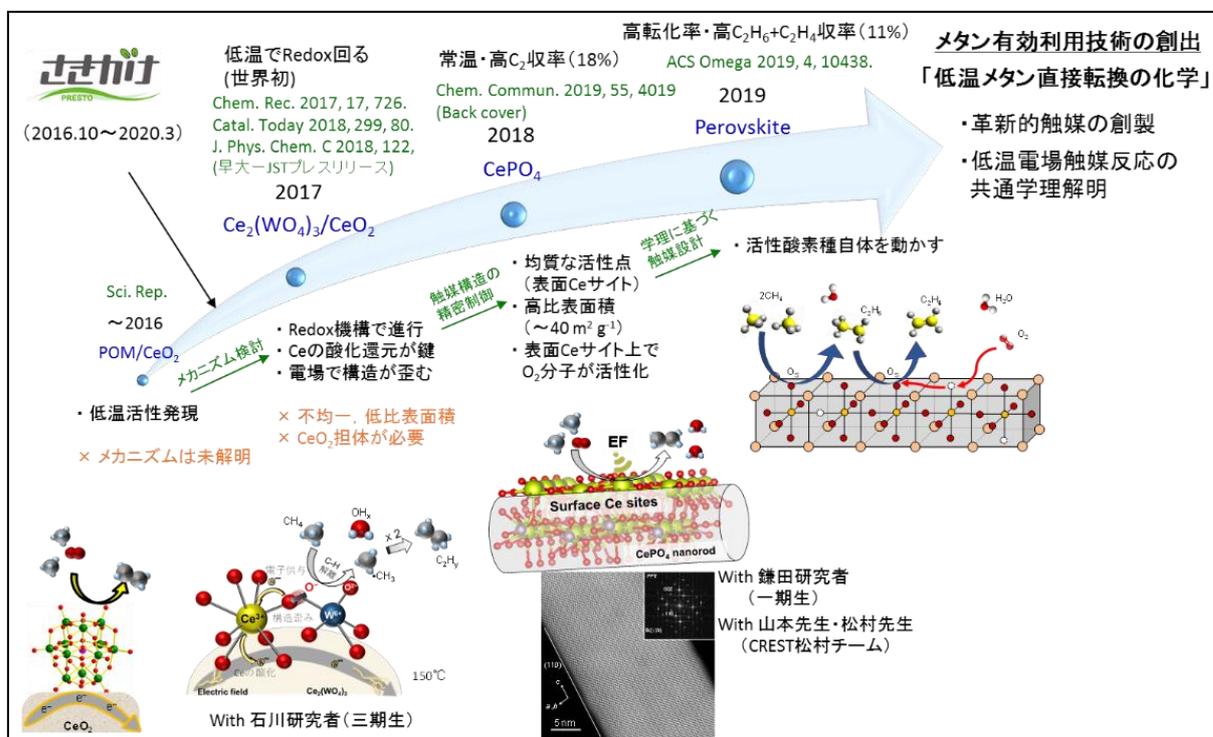
多電子レドックス触媒と電場触媒反応のシナジー効果により、150°Cの低温領域において、従来触媒の800°Cにおける性能に匹敵するメタンの直接転換による低級オレフィンの選択的合成に成功した。さらに、新規なナノロッド触媒の開発、電場印加状態でのオペランド分光測定、第一原理計算を用いた多面的な解析により、反応メカニズムを初めて解明した。

省電力で高活性・高選択性・高安定性を達成する革新的な低温メタン変換反応システムの技術構築を大きく前進させた。



これらの成果は、米国化学会系列誌を始めインパクトの高い論文での発表、プレスリリースなどにより成果発信を行っており、さらに、さきがけ研究期間中に、2018年度石油学会奨励賞、2019年度触媒学会奨励賞、2020年度科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞など関連分野での栄誉ある賞に繋がり、当該分野のリーダーとして成長している。研究成果の関連論文の一つとして、J. Phys. Chem. C, 122 (2018) 2089-2096. [被引用数 9]があ

る。また、研究成果の概要イメージを以下に示す。



## 【 研究成果の概要 】

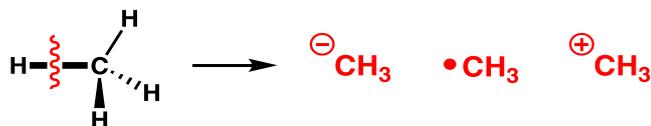
(分子触媒事例1) **鷹谷 絢 研究者** (3期)

「金属-金属結合の触媒機能開拓を基盤とするメタンの精密有機合成化学」

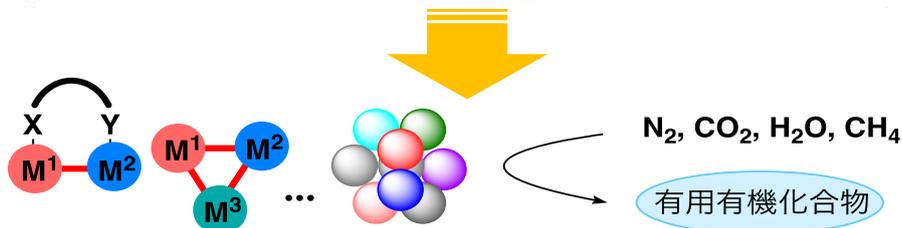
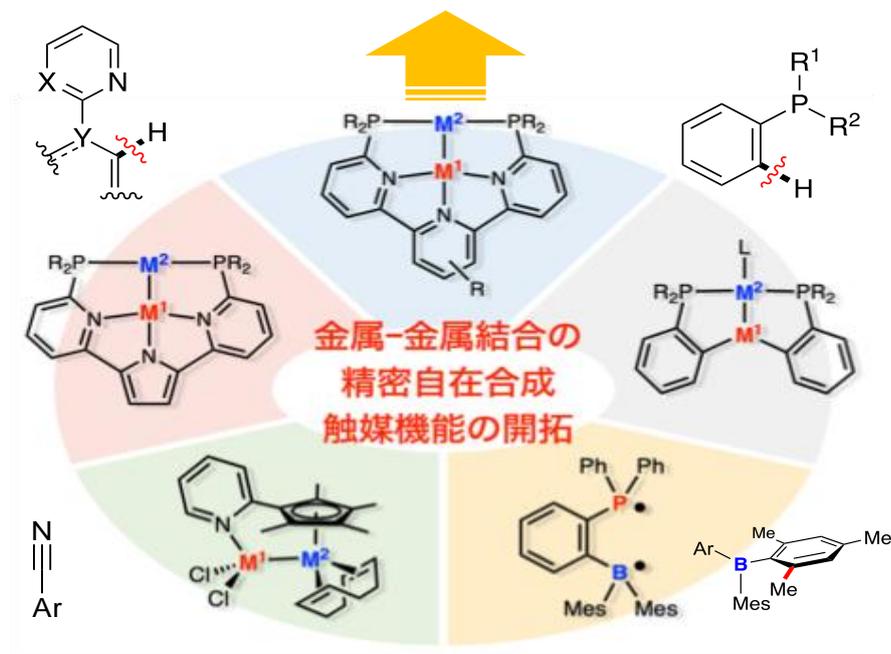
金属-金属結合を有する異種金属二核錯体による、メタンをC1源とする精密有機合成化学を構築した。

具体的には、金属-金属間結合における多電子移動、協働作用を触媒機能に最適化することで、不活性分子であるメタンを求電子的・求核的・ラジカル的な“メチル化剤”として利用する分子変換手法を開発した。独自に設計・開発した有機元素ハイブリッド型鑄型配位子は金属-金属結合の効率的合成、安定化、高度な触媒機能の3要素を兼ね備え、メタンに限らず様々な不活性分子の効率的分子変換反応へと展開することで、次世代の物質合成法開発を先導する新しい金属触媒化学を切り拓くことが期待できる。

これら研究成果を含め2020年9月に王立化学会 (Royal Society of Chemistry) から総説 (Catalysis of Transition Metal Complexes Featuring Main Group Metal and Metalloid Compounds as Supporting Ligands, Chem. Sci., Advanced Article) を発表し、本研究領域のリーダーとして活躍が期待される。また、研究成果の関連論文の一つとして、Angew. Chem., Int. Ed., 2019, 58, 17251-17254. が挙げられる。以下に本研究の概要を示す。



### 高難度分子変換反応の開発



金属の種類・数・位置を完全制御した多核金属の精密自在合成  
均一系/不均一系金属触媒の境界領域へ

#### 【本研究の概要】

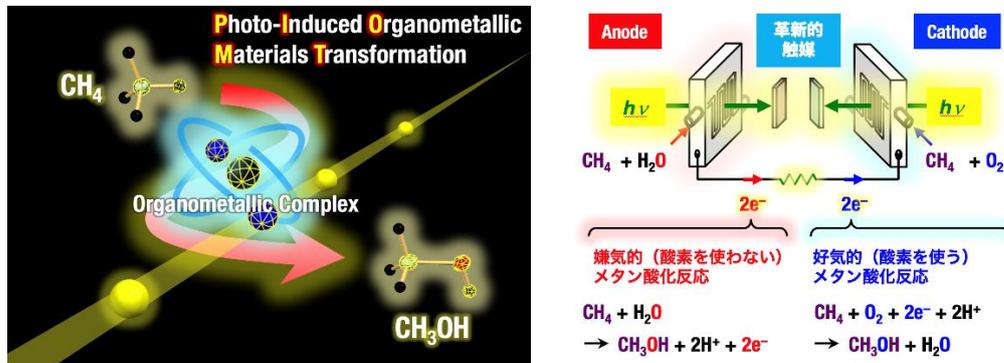
(分子触媒事例 2) 松本崇弘 研究者 (3 期)

「光で駆動するメタン酸化電池の開発」

光エネルギーと有機金属錯体を用いる革新的方法で、バイオマス等から製造可能なメタンの革新的な変換反応の開発に成功した。具体的には、固体高分子形燃料電池において、独自のアノード/カソード触媒の開発、光透過型膜-電極接合体 (MEA) /燃料電池の設計・製作を実行し、両電極への照射により有機金属触媒を介したメタン酸化を行い、系全体として発電しながらメタンからメタノールを合成した。触媒分子デザインにより金属中心と配位子との電荷移動吸収を制御することによって合目的に励起状態を創り出し、狙った反応性

を発現させたものである。

課題解決型基礎研究がビジネスベースで社会・経済に貢献できる可能性を示した好例であり、同時に学術的観点からは、光励起状態の化学反応へ適応・展開を示したものである。



【本研究の概念図】

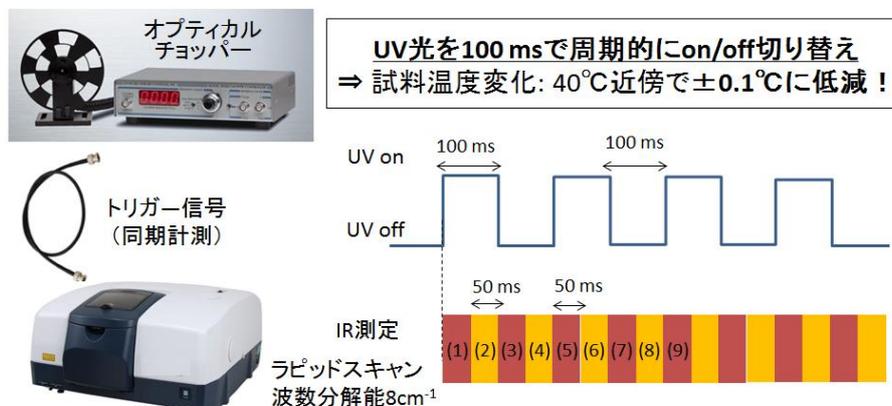
これらの成果は、産業的な展開を視野に、新規な光駆動型燃料電池の構成要件（触媒系、MEA、燃料電池）ならびにメタン変換技術に関する基本特許として JST から出願済みである。

また、JST 国際強化支援を活用した国際連携において、2018 年度 Fritz-Haber Institute、2019 年度 Delft University of Technology、2020 年度 TUM Catalysis Research Center (CRC) や触媒学会等で積極的な研究成果の発信を行った。2018 年度には科学技術分野の文部科学大臣表彰若手科学者賞を受賞した。

(計測系事例 1) 杉本敏樹 研究者 (2 期)

「オペランド分光計測に基づくメタンの部分酸化還元光触媒反応場の創製と学理構築」

独自に開発した紫外光強度変調オペランド赤外分光技術や新規な評価技術を構築・駆使することにより、光触媒を用いる低温メタン水蒸気改質反応メカニズムを解明し、光触媒系反応が本質的に「常温・低圧」で性能を発揮できるアドバンテージを立証にした。



【紫外光強度変調オペランド赤外分光法の概念図】

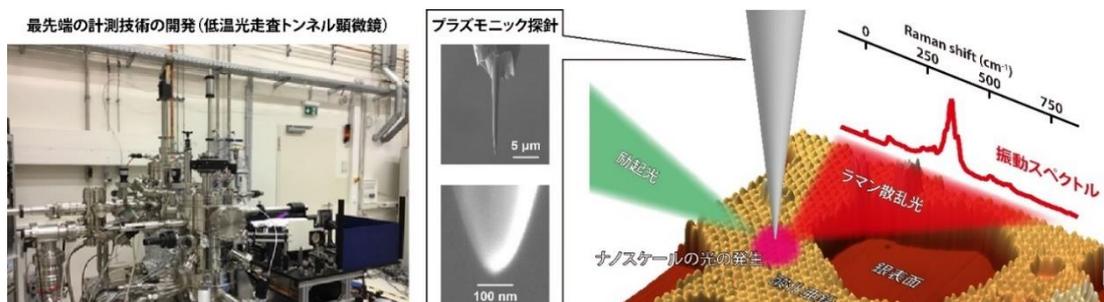
実反応中の活性種に関する情報の取得は、触媒反応に有利な表面反応場のデザイン・エンジニアリングをサポートするものであり、反応活性に直接関与する分子種や光誘起電荷を分光計測する方法論として、また、汎用性の高いオペランド評価技術として期待される。

これらの成果によって、PCCP Prize 2018、2018年度日本分光学会奨励賞、2019年度日本物理学会若手奨励賞、2019年度分子科学会奨励賞等の受賞に繋がった。さらに、2019年度さきがけ「革新光」(田中耕一郎研究総括)「原子スケール極微分光計測法の開発と界面水分子の局所配向イメージングへの応用展開」の採択にも繋がった。研究成果の関連論文の一つとして、Phys. Chem. Chem. Phys. 29, 16435 - 17012 (2020) が発表されている。

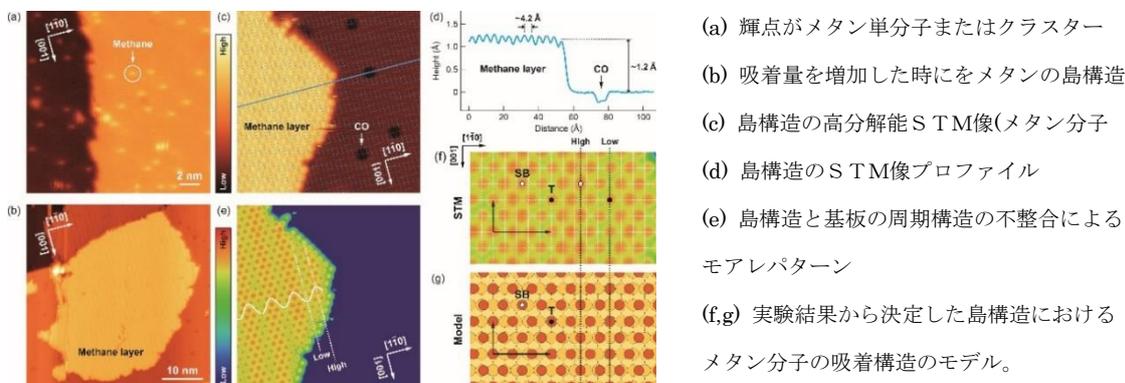
(計測系事例2) **熊谷崇 研究者** (2期)

「局在プラズモン励起を介した触媒作用の微視的機構の解明」

低温走査トンネル顕微鏡とレーザー技術、さらにナノスケールでの振動分光技術を組み合わせた探針増強共鳴ラマン分光装置を独自開発し、単一分子レベルでの化学反応の直接観察と1nmレベルの空間分解能での振動分光解析に成功した。特に、金属表面に吸着したメタンの低次元構造を実空間で観測した例としては本研究が初めてである。



【ナノスケールの光を使った最先端の計測技術 (探針増強共鳴ラマン分光)】



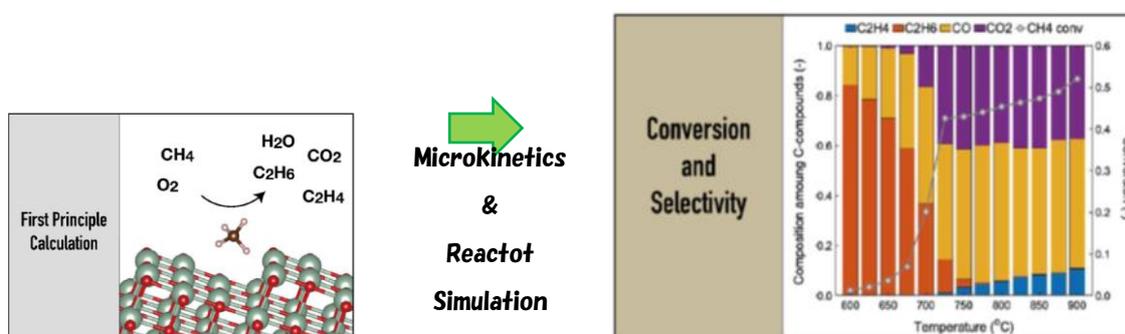
不均一触媒反応で決定的な役割を果たしている局所的な活性サイトの構造やそこでの化学反応を直接観察することのできる手法として期待され、今後複雑な表面化学反応の微視的機構の理解に役立てることが期待できる。

実験、理論研究者との連携、日独合同シンポジウムの開催など学術コミュニティーの活性化をはじめ、企業技術者からの問い合わせなど本研究・技術分野への波及効果があった。これらの研究成果を受けて、2020年度 Gaede-Prize 賞（ドイツ物理学若手賞）を日本人として初めて受賞し、2020年度文部科学大臣表彰若手科学者賞、2020年度 Heinrich Rohrer Medal 等の受賞に繋がった。研究成果の関連論文の一つとして、Nano Letters 19, 5725-5731 (2019). [被引用数 15] が挙げられる。

(理論系事例1) **石川敦之 研究者** (3期)

「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」

物質の構造情報から反応速度論的情報が得られる第一原理計算と反応速度論、さらには化学工学シミュレーションの融合により、活性サイトおよび反応メカニズムの特定、活性サイトに基づく第一原理計算をベースとした微視的反応速度論を構築し、可能な範囲実験データを使わず触媒反応の転化率・選択率等を理論的に予測する方法を開発した。メタン活性化触媒設計指針の提示、さらには表面科学や速度論的な考察が十分に行われていない新たな触媒候補の理論先導による提案など、その展開が期待される。



左図：メタン酸化カップリング反応（OCM 反応）の概念図

右図：転化率と選択率の温度依存性（一般的実験結果と一致）

実験系の領域内研究者との連携を積極的に行い、実験と理論が協力した共同研究を展開することで本研究領域の活性化に貢献した。さらに研究成果であるプログラムコード（ソフトウェア:ハイスループット第一原理計算と微視的反応速度論のための python プログラム）は本研究分野への貢献を視野に入れフリー公開している。研究成果の関連論文の一つとして、J. Phys. Chem. C, 124, 6054-6062 (2020) がある。

## ②さきがけ「革新的触媒」領域内共同研究の実績

研究連携を意識した領域会議の実施、また、積極的な研究分科会の開催などを通して、活発なさきがけ領域内、CREST「革新的触媒」領域との共同研究を開始し、共著論文、共同出願などの成果に繋がった。

- (i) 共同研究の開始 (47 件)
- (ii) 共著論文 (30 報以上)

## ③さきがけ「革新的触媒」領域外（他領域を含む国内外の研究機関）共同研究の実績

さきがけ研究者の国際ネットワークの構築、国際共同研究への発展、成果発信による国際的なプレゼンスの向上を期待し、国際活動を研究者に啓蒙し、また研究領域としても重点的にその機会を提供した。その結果、共同研究、共著論文などの成果創出につながった。

- (i) 共同研究の開始 (海外：11 件) ※詳細は 6. (4)④その他の国際成果発信参照
- (ii) 共著論文 (海外：6 報)

- J.Am.Chem.Soc., 139, 17265-17268, 2017
- J.Am.Chem.Soc., 2016, 138, 10718-10721.
- J.Am.Chem.Soc., 2017, 139, 9144-9147.
- Chem.Eur.J. 2018, 24, 18682-18688.
- ACS Catal. 2020, 10, 6309-6317.
- Chem.Eur.J. 2018, 24, 18682-18688.

## (2) 科学技術イノベーションに寄与する成果の見通し（企業との連携）

研究のステージに合わせて、成果報告会等の対外的な PR 活動を行い、企業との連携を積極的に図った。成果を以下に示す。

※詳細は、本資料「6 章(3)⑨ 領域外の研究連携」を参照

- (i) 共同研究の開始 10 件
- (ii) 特許出願実績 3 件（共願特許）
- (iii) ファンド獲得 8 件（JST:A-STEP 採択、NEDO プログラム採択）

## 8. 総合所見

### (1) 研究領域のマネジメント

さきがけ研究課題の選考にあたっては、メタンや低級アルカンなどの多様な資源を化成品原料やエネルギーに変換するための革新的な触媒材料、反応プロセスの創製と言う極めてレベルの高い研究目標であったが、これまでの研究の単なる延長にあるものや従来研究の原理を組み合わせた既存技術の改良研究に相当する提案は対象とせず、研究者独自のアイデアや概念に基づいた新しいサイエンスの源流になり得るとともに、将来的に化学産業を変える可能性を持つ、挑戦的・独創的な提案を重視して領域アドバイザーの協力を得て選考した。その結果、触媒の種類や対象とする触媒反応、さらに触媒材料・プロセス研究を支える理論や計算科学、計測・解析・評価技術の各分野から斬新で可能性の高い研究提案を、海外研究者3名を含めて、バランス良く採択することができ、本研究領域を力強く推進する体制を築くことができたと考えている。

研究領域の運営においては、メタン・低級アルカンの変換という共通目標に対する「革新的触媒の創製」「革新的触媒科学の確立」に向けて、それぞれアプローチの異なるさきがけ・CREST研究者との相互交流や共同研究、加えて、本研究分野で国際的にリーダーシップを發揮できる人材の育成を目的として海外研究機関・研究者との連携（国際シンポジウム）を強く奨励・実施した。その結果、多くの共同研究、海外研究機関との連携に繋がったことは本研究領域の特徴であり、大きな領域成果である。年2回実施した合宿形式の領域会議では、CREST「革新的触媒」の参加をはじめ、他研究領域との合同研究発表会、触媒関連企業訪問（工場見学会）、アドバイザーによる経験談の講演など、研究者としての視野を広げるための工夫も盛り込んだ。

メンター制の導入も領域マネジメントに大きな成果をもたらした。さきがけ研究者それぞれに対して1, 2名のアドバイザーにメンターをお願いし、必要に応じて研究総括と共に研究者を訪問、研究方針に対するアドバイスなどを中心に行い、研究推進に務めた。研究の分岐点でのタイムリーなサイトビジットは極めて重要で、のべ50回以上にのぼるサイトビジットは多くのさきがけ研究者が飛躍するきっかけとなった。メンターの方々は献身的に若手研究者と連携をとっていただき、領域アドバイザーに期待される役割以上のご貢献をしてもらった。

### (2) 研究領域としての戦略目標の達成状況

本資料に示すように、達成難度の高い戦略目標にあって、従来の枠を超える独自のアイデアに基づく研究成果を発表することができた。これらは、メタン、低級アルカンにとどまらず、幅広い反応に対して適応が期待される革新的触媒・反応プロセス開発の新しいきっかけとなり、今後我が国におけるエネルギー高効率変換に向けた革新的触媒の創製に繋がるものと確信している。

研究成果は、論文203報、学会等での招待講演件数225件（口頭発表総数494件）、特許

出願 13 件であり、本研究分野において多くの研究成果を発信することができたと考えている。さらに、革新的触媒領域内の共同研究 55 件／共著論文 37 報、海外研究機関との共同研究 11 件／共著論文 3 報、企業との共同研究 10 件／特許出願（共願）3 件、ファンド獲得 8 件、加えて対外的なプレスリリース（JST 合同発表）8 件であり、これらの実績を見てもさきがけ研究者の今後の研究発展が十分期待できると考える。

研究成果に加えて、さきがけ研究者の著しい成長も大きな成果である。それぞれの研究機関内外での昇任 17 名、文部科学大臣表彰若手科学者賞 8 名、日本化学会進歩賞 4 名、日本学術振興会賞 1 名を数えるなど研究者として大きな飛躍に繋がっている。

### (3) 本研究領域を設定したことの意義

シェールガス革命を受け、天然ガスに豊富に存在するメタンや低級アルカンを原料として、高効率、省エネルギーで活性化し、化学品等の製造法に利用することは、二酸化炭素の排出も少なくその技術確立は急務であった。しかしながら、安定性の極めて高いメタンを低温・高効率で変換する技術は難度が高く、実用レベルでの利用には超えなければいけない多くのハードルがあった。そのような状況下、日本がお家芸とする触媒研究の高い競争力、加えて、最先端の物質合成・計測・計算技術とデータ科学を共通基盤として、この難題に正面から取り組む、さきがけ「革新的触媒の科学と創成」研究領域が発足した意義は大きい。本研究領域は本年度をもって終了となるが、これまでに蓄積された研究成果は、すべてメタン、低級アルカンの前に立ち塞がる多くのハードルを乗り越えるきっかけとなるものである。一人のアイデアや概念では達成できなかった目標も領域内外の研究者、さらには国際的な研究連携により突破口を見出し始めている。すぐに実用化、社会実装できるとは考えてはいないが、本研究領域のさきがけ研究者がメタンの活性化をより身近に現実的に考えられるようになったことは、我が国における独自の触媒創製、触媒科学の感覚を醸成する上で極めて有効であったと考える。

その意味から「革新的触媒の科学と創成」に関わる基礎科学と応用の今後の展開において、研究成果、人材育成の両面において有効に機能したことを確信させる意義深い領域設定であったと判断する。

### (4) 科学技術イノベーション創出に向けた今後への期待、展望、課題

イノベーションは単独のアイデアで達成されるものではなく、いくつかの優れた基礎研究の原石が集まり、さらにその相乗効果で光り輝くものである。例えば、優れた革新的触媒を開発できたとしても、それを使いこなす合理的な触媒反応プロセス、それらの基盤となる理論的裏付けや解析・評価技術、それらが組み合わせられ相乗効果として一段高い基礎研究レベルに到達できるものであり、その意味において、さきがけ「革新的触媒」は各々が触媒科学に精通した合成研究者やプロセス研究者、評価・計測研究者、理論・計算研究者の集まりでありイノベーションへの大きな可能性を秘めている。

一方、基礎研究が発展し応用研究に展開されイノベーションに繋がるまでには長い時間を要する。基礎研究が一定のレベルに到達した時点で企業との連携も必要になってくるであろう。さきがけ研究期間内でそのレベルに到達することは難しいと思われるが、企業との研究連携が10件開始され、共同出願3件、JST A-STEP、NEDOプログラムへの採択など、特筆すべき点であると考えられる。

まだ、メタン、低級アルカンに着目し有効活用する研究はスタートを切ったばかりである。さきがけ研究者たちの10年後の姿に大いに期待している。

## (5) 所感、その他

ノーベル化学賞を日本人として初めて受賞した故 福井謙一教授の担当講座名が「炭化水素物理化学講座」だったことを知る人は少ない。1952年にフロンティア軌道理論 (frontier orbital theory) を発表し、1981年にノーベル化学賞を受賞した。受賞まで実に30年かかっている。その弟子である吉澤一成九州大学教授はメタン活性化理論では世界的に第一人者である。福井謙一博士の1952年のフロンティア軌道理論の発表から70年も経とうとしているのに、未だにアルカンのC-H結合活性化は簡単のようであり全くの未踏領域である。真にハイリスクな研究 (挑戦的な研究) とは、誰もやっていない極めて独創性の高い研究のことと、常日頃思っている。顕在化している課題を解決する研究、あるいは、ハードルが高いとは言え既に多くの研究者が取り組んでいるポピュラーサイエンスのことを意味するのではない。課題解決型の研究も重要であるが、0を1にするような基礎研究を育てることこそが今の日本に必要である。残念なことに、今の日本は出口志向に偏り過ぎていて、多くの研究がニーズ・オリエンテッドになっている。「リスクが高く企業が取り組むことができない課題を大学は研究すべき」という考えは理解できるし、企業が行う実用化研究を大学でやっても仕方ない。しかしながら、国全体が企業ニーズに寄りすぎるのも困る。誰もやっていない極めて独創性の高い挑戦的な研究の芽を摘みかねないからである。時代の潮流に逆らい、誰もがやっていない新しい分野に挑戦する気骨のある若手研究者は今の日本にどれくらいいるのだろうか？

今から6年前に立ち上がった本さきがけ研究「革新的触媒の科学と創製」の背景には、日本の化学産業がナフサに強く依存する構造から脱却するために天然ガス資源を有効活用したいという産業界のニーズがあった。その一方で、当時、国内外でメタンの化学プロセスにおける有効利用はほとんど誰もやっていない課題であった。研究実施における可燃性ガスに対する安全性の確保の難しさに加えて、極めてハイリスクな挑戦性の高いテーマであり、比較的短期間で論文成果も見込めないために、アカデミアの若手研究者は手を出さない課題であった。人工光合成や光触媒による水素発生、多孔性金属錯体の吸着機能など、多くの研究者が取り組んでいるポピュラーサイエンスの潮流に逆らって、誰もが取り組んでいない戦略目標設定が国によってなされた。極めて異例なことである。JSTから幾度かこの戦略目標に関するヒアリングがあり、最後には研究総括への就任依頼があり、大いに悩んだが、

最終的には ①課題の挑戦性の高さ、②当該分野における人材育成の重要性、③触媒素人の自分（北川）の方が新しい視点で当該領域運営に取り組める可能性を感じて、お引き受けした。

領域の立ち上げでは、当時、もはや大学には石油化学科は存在せず、石油プロセス化学や天然ガスパロセス化学の研究者も不足している背景から、公募に関わる領域設定コンセプトは重要であった。触媒は歴史的には独国と日本が元々先導し、石油化学工業へと発展してきたが、独国は今なおリードしており、最近では米国が強く、新しい概念や発想に基づく触媒研究の取り組みが多い。その一方で、日本では今なお分子触媒（鈴木カップリングなど）は強いが、固体触媒分野は弱体化している。企業の現場感覚の強い研究開発と大学の一見綺麗に見えるサイエンスが解離しており、これは大学において、オーソドックスで実務的要素の多い研究（石油プロセス化学）から華やかな研究分野（燃料電池や LIB）へ人材シフトしていることが原因と思われる。従って、目標達成に先だって、当該分野の人材育成が急務の課題であり、人材育成には産学協働が重要である。

公募の方針は、1) これまでの取組延長線上での提案や既存技術の改良研究、既存の論文・特許のアイデアとの組み合わせ研究、などの提案を排除した。0 を 1 にするような大胆な挑戦的提案を重視した。2) さきがけ研究なので、研究者個人がアンダーグラウンドであたためているアイデアを重視した。つまり、所属研究室の研究コンセプトの範疇でない個人アイデアを重視した。3) エビデンスは重視し過ぎず、新概念提唱を重視した。4) 新物質開発の提案は重視するが、その一方で触媒評価の道筋を提示することを条件とした。5) 理論や計測との連携を重視した。個人研究とはいえども、触媒開発は連携無しでは難しい。提案書で枠組み提示することを推奨した。6) 当初はプラントエンジニアリングを重視しなかったが、プラントエンジニアリング無しでは実現出来ないことが多々なので、2 期目公募以降は評価対象とした。

次に拘ったのが領域アドバイザー（領域 AD）の人選である。常日頃、人を動かすのはシステムではなく人であると考えている。人事が成否の鍵を握る。互いにシンパであり、かつ、おかしいことはおかしいとハッキリ言える方を人選した。私からの多くの無理難題を領域 AD の先生方は快く引き受けて下さり、情熱と愛情を持ってさきがけ研究者と接し、育成指導してくれた。研究には厳しく、人には優しく（育てる）の実践である。また、大御所の秋鹿氏と常木氏の領域 AD への起用は成功であった。大所高所からのアドバイスで、実に示唆に富むものであった。自分が当初想定していた以上に、企業の触媒研究者を領域 AD に登用したのも、触媒開発は実学でもあり、プロセス次第で触媒反応効率も向上するので、触媒プロセスに造詣の深い領域 AD の必要性からである。但し、学識の高いアカデミックな雰囲気漂う企業研究者（常木（日本触媒(株))、岡部（三井化学(株))、鈴木（旭化成(株))、奥村・魚谷（昭和電工(株)））をお願いした。いずれも各企業における触媒の開発責任者であるが、大学の教授であつてもおかしくない学識を兼ね備えている。さらに、立ち上げ時に注力したのは、分子触媒（均一系触媒）分野と固体触媒（不均一系触媒）分野のギャップを埋めるこ

とであった。村井眞二先生や玉尾皓平先生に訊くと、以前は両者同じ討論会で一堂に会していたそうであるが、今では別々の学会や研究会で活動を行っているようである。分子触媒系からは野崎氏と林氏に領域 AD として起用した。有機金属触媒から生体系触媒までカバー出来た。理論や計測技術に関する領域 AD も起用した（館山、吉信、野村の各氏）。

採択審査で拘ったことが幾つかある。まずは、分野バランスである。分子触媒分野と固体触媒分野のギャップを埋めたいと思っていたので、採択者の割合が概ね、分子系触媒研究者が 4 割、固体系触媒研究者が 4 割、理論・計測系が 2 割と考えていた。また、物理分野の研究者（熊谷、杉本、小板谷、野内）の採用も積極的に図った。これにより、対象物質やテーマが大きく異なる研究者を一堂に集めて、広い触媒分野での異分野交流・連携が図れたものと考えている。さらに長らく海外で PI として活躍している研究者 3 名（熊谷、浦川、高鍋）を採用した結果、国内のさきがけ研究者に多大な刺激を与えてくれたものと確信している。突出した人材は将来大きな研究ピークを作り、それが多方面に波及・展開するからだ。次に、審査評価時に、エビデンスを重視しないように領域 AD をお願いした。エビデンスがあり出口が見えている課題を採択するのは容易い。エビデンスはないが将来大化けするかもしれない挑戦的な提案を採択するのは大変難しく、優秀な目利きが必要となる。私自身もさきがけ研究を行ったが、当時、応募書類やヒアリング審査でエビデンスを強く求められることはなく、提案書に論文リストを記載する欄も無かった。「研究者個人がアンダーグラウンドであたためてきたアイデアを重視する」と募集要項に明記されていた。この精神は今や薄れつつある。評価者にはより幅広に目利きの増強が求められよう。さらに、研究総括としての独断や一方的なトップダウンは行わなかった。権限はあるとしても、領域 AD の意に反して一方的にトップダウンで特定の研究者を採択したら、その後の領域運営で非協力的になってしまう可能性があるからである。採択・不採択の議論に関しては全員一致の結論を前提とした。御陰で、全員の領域 AD が最後まで運営に関して身を粉にして協力して下さった。

1 期生の採択後、領域運営や活動で心がけたことを以下に列挙する。

- 1) 個々のさきがけ研究者と研究総括のマン・ツー・マンのコミュニケーションを大事にするために、サイトビジットを重視し、他領域よりも多くのサイトビジット（50 回以上）を行った。担当領域 AD にもしばしば同行をお願いした。特に進捗の芳しくない研究者には年に 1 回以上のサイトビジットを実施した。場合によっては、サイトビジット時に論文執筆指導も行った。
- 2) その一方で、挑戦的な「個」を如何に育て、逸出した個と個を如何に繋げていくかが、科学技術立国を標榜する我が国の復活・再生への鍵を握ると考えていることから、領域会議でのさきがけ研究者同士の議論、交流を重視した。さきがけ研究者同士の共同研究や CREST 研究者との共同研究、国際共同研究は勿論のこと、領域会議終了後には自由参加・個人負担での意見交換会を実施し、研究総括や領域担当が朝まで研究者と議論を重ねることもしばしばあったくらいである。
- 3) 国際交流試合の位置づけとして、触媒科学分野で世界トップクラスのフリッツハーバー

研究所およびミュンヘン工科大学触媒研究センターを核としたシンポジウムを開催した。多くの刺激を与えると共に、新たな国際共同研究の芽を作ることが出来た。

4) さきがけ研究者には、提案したテーマのコンセプトを大事にしてもらった。途中でテーマを大きく変えるという事はほとんど無く、初志貫徹で課題に取り組んでももらった。ハイリスクな課題を承知で提案し採択されたわけで、逃げないという姿勢を貫いてもらった。

5) 困難なテーマに関しては、課題共有や対処手法共有のために、テーマ毎の勉強会も行った。時にはCRESTの研究代表者にも参加してもらった。

6) 他領域に比べてハイリスクな課題に取り組んでいる領域なので、論文化は困難をとまなう。だからこそ、論文を書くことを強く推奨した。「絵を描かない画家は画家ではない。いつか素晴らしい小説を書くと言って全然書こうとしない自称小説家は小説家ではない。」としばしばさきがけ研究者に言い聞かせた。研究というものは、予想通りの結果が出なくとも、藻掻いているうちに予期せぬ発見や結果が出て来ることも多く、新しい発見や事実を纏めて論文化することを強く推奨した。論文発表は、税金によって賄われている研究者にとっては、社会への最終納品であり、研究活動の最後の形である。また、論文を出し続けることによって昇進があり得る、逆に書かないとあり得ないということを知徹底した。

7) 研究立案時から論文構想を行うことの重要性を説いた。領域会議では毎回論文構想についても言及してもらった。

8) 触媒は社会や産業界で使われて初めて貢献出来るということを知ってもらうために、領域ADの計らいで、触媒プラント見学を数回行った。また領域AD講話も、企業研究者やシニア研究者の生き様を知る切っ掛けとなり、さきがけ研究者にとって大きな刺激となった。

9) 研究総括のミッションを逸脱しているかもしれないが、さきがけ研究者数名に対して人事面接プレゼンテーションの直接的な個別指導を行った。

10) 領域としての研究成果を出すことは重要であるが、時間と労力がかかる課題であるために、テーマ育成と人材育成に心がけた。さきがけ研究者が育ち、近い将来に教授として研究室を構えれば、そこから多くの学生が育ち、遠くない将来、メタンを有効活用できる時代がやってくるものと考えている。

メタンや低級アルカン等を、化成品原料やエネルギーへ効率的に変換する革新的な触媒が次々と出せたかということ、未だ道半ばではあるが、多くの研究者がさきがけ研究期間内に確実に成長し、その大半が昇進したことは研究総括にとっても大きな喜びであり、充実感は少なからずある。その一方で、極めて僅かではあるがさきがけ研究期間内に論文まで到達できなかった研究者もいて、私の目利きがなかったと言わざるを得ない事案もあり、大変心残りである。最初から提案内容が優れレベルの高い研究者を採択するのは、その後は研究総括として楽であろう。提案内容は大変興味深く将来大化けするかもしれないが、研究遂行能力が突出して高くはないと思われる研究者を採択し育成するのは、同じ研究室に所属するわけではない研究総括には並大抵の努力では達成出来ない。この6年間でこのことを一番痛感した。

なお、3期生の9名は、新型コロナウイルスの影響を受けて3～6ヶ月間の研究期間延長を行い、いずれの研究者においても今後の展開を後押しする成果を出すことができた。

最後に、領域運営に絶え間ないご協力を頂いた、領域アドバイザーの先生方、上田渉 CREST 研究総括、吉澤一成 CREST 研究代表、松村晶 CREST 研究代表、JST 関係者の方々に心から感謝申し上げます。

以上