

## さきがけ「革新的触媒の科学と創製」 研究領域事後評価報告書

### 総合所見

本研究領域「革新的触媒の科学と創製」の特徴は、「安価な天然ガスに豊富に存在するメタンや低級アルカン（エタン、プロパン）などを有機炭素資源として効率的に活性化し、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」という、踏襲的な概念や方法論では容易には解決できない極めて難度の高い戦略目標「多様な天然炭素資源を活用する革新的触媒の創製」を掲げていることにある。その達成目標は以下の1)-3)であり、いずれも我が国の競争力強化とSDGsに繋がる重要な課題である。

- 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
- 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
- 3) 次世代を担う触媒科学の国際的なリーダーの輩出

この目標達成のため、採択課題の選考方針として、i) 従来延長線上の提案、改良研究や既存アイデアの組み合わせ研究を排除して大胆な挑戦的提案を重視、ii) 所属研究室のコンセプトではない個人アイデアによる新概念提唱を重視、iii) 触媒評価と計測技術、および理論との連携を重視するという、強い意志と思いついた方針の下に課題選考が実施された。その結果、固体触媒、分子触媒など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解明につながる計測技術・計算科学を基盤とする研究課題も含める形で、斬新で可能性の高い研究提案と伸び盛りの若手研究者を採択し、バランスの良い課題採択となった。なお、課題の応募件数が2015年度47件、2016年度71件、2017年度86件と年々増加したことは非常に稀であり、この現象の背景には、研究総括による多くの学会での周知徹底や幾多の大学リサーチ・アドミニストレーター(URA)へのきめ細かい応募支援依頼などの熱意と尽力に加え、エビデンスが無くとも挑戦的かつ革新的な個人独自のアイデア提案であれば採択対象としたこと等が十分考えられる。

領域アドバイザーについては熟慮を重ね13名を配置した。その分野内訳は固体触媒2名、錯体・生体触媒2名、反応プロセス1名、計測技術2名、理論・計算1名、産業界視点5名であり、企業での触媒プロセス開発経験者が約4割を占めている。この布陣構成にしたのは、未踏領域でもある非常に困難な目標への研究が、単なる挑戦に終わるのではなく、将来の技術への実装展開をも視野に入れた技術的な萌芽の創出も重視しているに他ならない。加えて研究者それぞれに領域アドバイザーをメンターとしてアサインし、研究総括はメンターと共にサイトビジットを実施(延べ57回)するなど、様々な専門分野を有する若手研究者に対して、きめ細かい対応とアドバイスをを行い、若手研究者の飛躍を図った。このように、学際的な視点と知識、見識、そして人材育成力で本研究領域を牽引し、研究マネジメントに全力投球されてきたことは非常に高く評価できる。

これまでに誰も無し得ていない極めて達成難度の高い戦略目標にあつて、本研究領域で培った研究経験は、必ずや今後の革新的触媒・反応プロセス開発の重要な契機になるはずである。その研究成果の概要は、論文 203 報、国内外の学会等での招待講演数 225 件、特許出願 13 件などである。論文発表数は少ない方ではあるが、上記したように極めて困難な課題に挑戦してきた経緯を考慮すると、この論文発表数だけをもって一概に研究成果が少ないとは言えない。ただ高インパクトファクターの化学系学術誌への掲載が多いとは言えず、国際的な視点での他の研究機関や他分野への影響・波及効果を限定的なものにしているのは確かである。

主目標であるメタンの触媒反応に関しては、現時点で実現できているとは言い難いが、そのような中において国際的水準の新奇触媒材料や触媒機能の開拓の基礎研究として十分に評価できる研究成果も結構芽吹いてきている。光、電場、そして熱を協働させた新しい触媒反応プロセスの開発、特徴的反応性を示すヘテロ金属 2 核錯体の創製、メタン酸化電池に活性な分子触媒の開発、独自のオペランド赤外分光法の開発、そして低温探針分光法の開発などであり、いずれも将来発展する期待もあり研究の萌芽が創出されていると評価できる。

また社会的・経済的価値の創造に直結する成果創出は少ないが、企業との研究連携 10 件、共願特許 3 件など今後のイノベーションの新たなシーズと新規技術を提供できている。今後、本研究領域を起点として生まれた研究成果の萌芽が孵化・発展できれば、社会的・経済的価値の創造につながり、将来の社会的なインパクトが十分に期待できる。

研究期間を通じて、同一戦略目標下の CREST/さきがけ「革新的触媒」の領域内共同研究が 47 件、共著論文が 30 報生まれているほか、国際的な人材育成を目的として、ドイツのフリッツハーバー研究所やオランダのデルフト工科大学との合同シンポジウムを企画・開催するなど、積極的な国際ネットワーク構築を実現し、海外研究機関との共同研究が 11 件、共著論文も 6 報生まれている。さらに、採択研究者 29 名のうち 17 名が昇任しており、日本学術振興会賞 1 名、文部科学大臣表彰若手科学者賞 8 名、触媒学会奨励賞 3 名の他、イギリスやドイツの学会からの受賞もある。さらに、12 名で 17 件の新たな研究ファンドを獲得しており、本研究領域が、個々の研究者の成長と飛躍の大きな原動力となっていることは確かである。このように多くの国際的な共同研究成果や受賞者、昇任が実現しており、研究総括の構想は、当初目標の一つである「次世代を担う触媒科学の国際的なリーダーの輩出」と照らし合わせても、若手研究者の育成に大きく実を結んでいると高く評価できる。

戦略目標の達成状況は、達成目標の水準をベースに判断すると、道半ばの感は否めないが、本研究領域が挑戦している同一研究分野における世界の研究水準をベースに据えて比較すると、今回の本研究領域の達成状況は「非常に高い水準」と評価できる。研究総括による卓越した研究マネジメントの下、将来孵化する可能性のある楽しみな先導的研究成果がいくつか生まれ、また、将来性のある多くの人材の育成・輩出を成し遂げたものとして、十分に高く評価できる。

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

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」は、多様で広範な革新的触媒の研究開発とも受け取れるが、その実体は、最も挑戦的なメタンや低級アルカン（エタン、プロパン）の高効率利用を中心に据え、その他原料も含めて、これらの有機炭素資源を有用な化成品原料やエネルギー資源に転換する「革新的触媒の創成」を主目標に置き、同時に、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」の確立と、次世代を担う触媒科学の国際的なリーダーの輩出も目標に設定した。このような目標を掲げた本研究領域は、踏襲的な概念や方法論では容易には解決できない極めて難度の高い挑戦的な研究領域である。その目標達成のために、採択課題選考の方針として、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合わせた既存技術の改良研究に相当する提案は敢えて対象とせず、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共に、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選考するなど、選考方針は“革新的触媒の科学と創製”への強い意志と確固たる姿勢で貫かれた。その課題選考では、触媒探索、触媒反応、触媒プロセス、それら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、目標達成に向けて斬新で適切な研究提案と伸び盛りの若手研究者をバランス良く採択すると共に、海外の大学・研究機関に籍を置く研究者を3名採択するなど多様性を有する研究者構成となっている。

本研究領域では、応募件数が2015年度47件→2016年度71件→2017年度86件と年々増加（採択率も年々上昇）したことは、長い「さきがけ」の歴史の中でも極めて希なケースであり、日本化学会や触媒学会など10学会以上もの各学会での周知徹底、各大学のURAへのきめ細かい案内・応募支援依頼など、研究総括自ら活発に募集活動を実施し、人材開拓が精力的に行われた。これら研究総括の篤い尽力に加え、応募時においては、エビデンスが無くとも挑戦的革新的な将来性ある研究者個人のアイデアによる実施計画であれば採択対象とした研究総括の英断も、多くの若手研究者の本研究領域への参入・挑戦に繋がっている。

研究総括が拘ったひとつに、13名の領域アドバイザーの配置がある。その専門分野と人材構成の内訳は、固体触媒2名、錯体・生体触媒2名、反応プロセス1名、計測技術2名、理論・計算1名、産業界視点5名であり、基礎科学に造詣が深く企業での触媒プロセス開発経験者が5名（約4割）も入っており、戦略目標の達成は勿論であるが、困難な戦略目標へ向けての研究が単なる挑戦に終わるのでなく、将来の技術への実装展開も視野に入れた技術的な萌芽の創出も重視した体制と認識される。

採択された研究者それぞれに1~2名の領域アドバイザーをメンターとしてアサインし、研究総括はメンターと共に研究の分岐点を見定めタイムリーなサイトビジットを延べ57回実施して、異なったバックグラウンドを有する様々な分野の若手研究者それぞれに対して進捗状況の確認・把握と研究方針・遂行に対するアドバイスをを行い、若手研究者の飛躍を適

切に図っている。また、研究が遅れている研究者にはサイトビジットにて直接アドバイスや論文執筆指導も行うなど、実にきめ細かく対応している。合宿形式の領域会議、他研究領域との合同研究発表会、触媒関連企業数社の工場見学、そしてアドバイザーによる経験談講演など、本研究領域・分野に限らず蛸壺化が指摘・危惧されている昨今の若手研究者の視野を広げる工夫も十分行っている。領域会議では、JST 知財部の専門家をオブザーバーとして招聘して、研究成果の知財化を積極的に推進した。また国際的な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実施し参加・発表を奨励した。このような熱のこもったマネジメントの結果、同じ戦略目標である CREST/さきがけ「革新的触媒」領域内において、分子系触媒研究者と固体触媒研究者の相互交流を通じて共同研究 47 件／共著論文 30 報が生まれた。さらにドイツのフリッツハーバー研究所やミュンヘン工科大学、そしてオランダのデルフト工科大学との合同シンポジウム開催など海外研究機関との積極的なネットワーク構築が功を奏し、海外研究機関との共同研究も 11 件、共著論文も 6 報生まれている。加えて企業との共同研究 10 件／特許出願（共願）3 件の共同研究成果も生まれ、多くの若手研究者の研究遂行は勿論のこと、彼等の成長に大きな影響を与えたと高く評価できる。

実際、研究総括のマネジメントの影響は、多くの採択研究者のキャリアアップにも表れており、半数以上の 17 名が昇任している。加えて日本学術振興会賞 1 名、文部科学大臣表彰若手科学者賞 8 名、触媒学会奨励賞 3 名に加え、英国王立化学会やドイツ物理学会からの国際的な賞も受賞 をしている。またこの研究期間中に、12 名の研究者が JST 関連、NEDO 関連を含むのべ 17 件のファンドを獲得しており、さきがけ研究者の大きな飛躍の原動力と成果を生んでいる。このことは、研究総括の精力的なマネジメントと同時に、伸び盛りの優れた若手研究者が採択されたことの証左でもある。さらに、研究領域内での共同研究を促進するための共同フィージビリティスタディ 15 件、異動に伴う環境整備スタートアップ支援 5 件を行い、研究成果の最大化に努めたほか、2016 年 4 月に発生した熊本地震への早い災害対策も的確に実施している。一方で、この研究領域の目指す到達点が極めて困難であることから、採択時の研究課題で掲げたターゲットとは異なる方向に研究を進めた研究者も少なくないが、多くの国内外の研究機関との共同研究成果や受賞、昇任が上記の通り実現しているのは研究総括のマネジメントの賜物と非常に高く評価できる。

3 期生のうち 9 名は、新型コロナウイルス感染拡大禍の影響を受け当初予定の研究遂行に支障が出たため、JST の理解と了解の下、研究者それぞれの状況に対応し適正な予算増額を行い、3～6 ヶ月間の研究期間延長を行った。その結果、いずれの研究者においても今後のイノベーションに向けた展開を後押しする成果を出すことができたことは、研究進捗の的確な理解と見通しの上に本研究領域全体の研究成果最大化を図った研究総括のマネジメントによるところであり非常に高く評価できる。

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たと評価できる。

## (2) 研究領域としての戦略目標の達成状況

### ① 研究成果の独創性・挑戦性・先駆性

本研究領域は、未踏の難度の高いメタンやC2低級炭化水素などの有用変換を実現する革新触媒の科学と創製を目指すものであり、多くの研究者は、極めて高い目標へ向かって研究を推進した。その目標の高さゆえ、壁を越えられなかったことが主な原因かもしれないが、国際誌に発表された論文数は188報であり、29名の研究者数からみると若干少ないと思われる。しかし研究のターゲットの困難さを基準に考えると健闘しているとみることもできる。また招待講演は国内116件、国際109件実施されており多くの成果が国内外で高く評価されている。

このような研究状況の中において、光、電場、熱を併用した触媒反応プロセス開発(天野史章と小河脩平)、特徴的反応性を示すヘテロ金属2核錯体合成(鷹谷絢)、光駆動型メタン酸化電池の開発(松本崇弘)、紫外光強度変調オパランド赤外分光法の開発(杉本敏樹)、低温プラズマニック探針増強共鳴ラマン分光法の開発(熊谷崇)などは独創的で優れた研究成果と認められる。現段階では本研究領域の主たる目標であるメタンの触媒反応が実現・確立している状況にはないが、将来にいたる研究の萌芽として今後の発展が期待される。

3期生の多くは新型コロナウイルス感染拡大禍の影響を受けて3~6ヶ月間の研究期間延長を行い、依然としてコロナ禍の制約された研究環境であったにも関わらず真摯な研究姿勢と挑戦により、可能な限り研究推進を図った結果、メタンやC2低級炭化水素などの触媒反応を直接対象としたものでないが幾つかの新しい知見をもたらし、今後の触媒科学を切り拓く足掛かりに繋がるものと認められる。

本研究領域の研究水準は、関係する研究分野における海外の研究水準と比べると国際的に非常に高い水準にあり、少なくとも国内的にはこの触媒化学分野を先導していると認められる。JSTのさきがけ研究という優れたプログラムへの採択・参画、集中研究・討論の経験は、採択された研究者の今後の研究発展の礎となり、我が国における当該領域の国際的に高い水準の発展に繋がると確信する。

一方で、ハードルの高さゆえに、目標を達成できなかったと自己評価している一定数の研究者もいることも事実である。しかし目標達成に向けて研究総括からは継続的に指導や激励がなされた結果、目標達成に対する研究者の意欲は維持されて、周辺領域や前段階での問題が解決されるなど目標達成に資する成果が得られていることが多い。また、概念は必ずしも独創的とは言えず、また踏襲的な方法論ではあるが、六方晶ペロブスカイト(鎌田慶吾)、新規セリア系複合酸化物(邨次智)など興味深い触媒材料の開発に成功している例も幾つか見られる。これまで多くの研究者が成し遂げられなかったような困難な課題を対象にした研究領域であることを考慮すると、研究成果の発信は少ないとは言えない。しかし、全体的には高インパクトファクターの化学系専門学術誌への掲載が多いとは言えず、結果的に他研究・他分野への影響や波及効果を限定的なものにしている。本研究領域の研究成果については、メタンの触媒反応は実現できているとは言いが、その一方で新規触媒材料や触媒

機能の開拓に関して国際的な水準で俯瞰したときには、基礎研究としては独創的で先駆的であったと、非常に高い水準にあると評価できる。

## ② 社会的・経済的価値の創造につながる先駆的な成果創出と萌芽

全体的には、社会的・経済的価値の創造につながる先駆的で国際的にも高い水準の成果創出は多いとは言えない。しかしそのような中において、天野の「光電気化学的メタンカップリング」の事例は、光と電場印加状態（例えば、1 V 印加：約 1 万度の温度相当のエネルギー入力）での触媒反応加速現象を利用したメタン変換プロセスであり、現在は収率が十分でなく、生成物がエタン、エチレン（シェールガスから安価に生産されている）ということもあり、これが実装プロセスに繋がるかどうかは今後のブレイクスルーが必要である。また小河の「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」の事例は、電場印可状態での触媒反応プロセスを開発したものであり、天野と小河両研究者の研究成果はいずれも先駆的な成果創出であり、将来の社会的・経済的価値の創造につながることを期待される研究成果の萌芽と認められる。加えて鷹谷の「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」の事例は、錯体配位子を工夫し自在有機合成化学を拓いたもので、研究領域課題であるメタンの触媒反応は実現できていないが、触媒機能の開拓の基礎研究としては国際的に評価できる。松本の「光で駆動するメタン酸化電池の開発」に関する事例は、燃料電池の両電極用分子触媒の開発と両電極への光照射によりメタン酸化電池を開発した独創的、かつ先駆的な研究成果である。杉本の「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」に関する事例や、熊谷の「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」に関する事例はいずれも、メタンの有効変換による革新触媒科学への挑戦というより、既知のメタン水蒸気改質反応の吸着種の観察や極低温での吸着メタン分子の STM 観察であるが、その計測法・技法は国際的に先駆的な成果である。この種のアプローチが社会的・経済的価値の創造につながるかどうかは、触媒作用の本質に関わる表面化学反応の微視的機構の解明の一層の展開にかかっている。本研究領域は、社会・経済に大きく貢献する基礎から応用に跨る分野であり、世界一流レベルになり得る潜在的研究は多々存在する。上述したように、多くの研究課題は未踏の難度の高いメタンや C2 低級炭化水素などの変換を実現する革新触媒の科学と創製へ挑戦したものであり、今後の展開により社会的・経済的価値の創造が期待される幾つもの研究の萌芽が創出されている。

## ③ 波及効果と社会的なインパクト

企業との研究連携 10 件、共願特許 3 件など今後のイノベーションの新たなシーズを提供できている。ただ、論文数が若干少ないことと連動して特許出願も 13 件（国際特許出願 2 件）で、少ない水準であると言わざるを得ない。その中で、メタンから反応生成物を得る光電極反応装置、メタン酸化カップリング反応触媒の製造方法および反応装置、メタンをメタノールに変換する光駆動型燃料電池といった新規技術をそれぞれ特許出願しており、今後、社会的・経済的価値の創造につながる優れた技術開発が期待できる。現段階での研究成果は

必ずしも波及効果は大きくないが、革新的触媒を課題にして生まれた研究の萌芽が孵化・発展できれば、将来を展望して社会的なインパクトが十分に期待できる。

特に本研究領域の「革新触媒の科学と創製」のように困難で挑戦的な課題の研究成果は短期間で成果が出るというものではなく、現在既に出ている研究成果に加えて、芽生えた技術、学んだ思考などの発展に加えて、本研究領域の技術と他の技術との融合により新たな技術革新を行い用途を開拓するなど、本研究領域を通じて芽生えた技術が実装に向けて継続的に発展して行っているのか、あるいは逆に、困難な課題を止めて別のテーマに変更してしまったのか、今後の追跡調査などにより、成果展開の実像をしっかりと把握して行くことも重要である。実際、さきがけ終了者の4名が科研費若手A、3名が他のさきがけ、NEDOやSIPに参画した者もあり、これらの研究課題と本研究領域の課題・成果の関連も追跡調査の対象にすることで、成果がより大きく発展しているのか、知財登録が進んでいるのか、あるいは予算獲得をしやすい研究課題に研究者自身の興味を変えてしまっているのかが明確になり、本研究領域の波及効果と社会的なインパクトのよりの確な位置付けが判明する。

基礎研究力と課題解決力を強化して我が国の産業基盤の中核的な化学産業へのシーズ提供と連携強化への貢献のために、優れた若手研究者のアイデアを存分に展開でき、突出した人材と研究領域を育む JST さきがけの研究プログラムは、CREST、ERATO などと並び、今後益々、重要な位置づけとなっている。このプログラムは科学技術への貢献を果たし、社会的・経済的価値の創造につながり、波及効果の観点からも社会的インパクトが期待できる重要なプログラムである。

以上により、本研究領域の戦略目標の達成状況は高い水準にあると評価できる。