

「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発／①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発・②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発」
事後評価報告書

平成25年1月

独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構
研究評価委員会

平成25年1月

独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構
理事長 古川 一夫 殿

独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構
研究評価委員会 委員長 西村 吉雄

NEDO技術委員・技術委員会等規程第33条の規定に基づき、別添のとおり
評価結果について報告します。

目 次

はじめに	1
分科会委員名簿	2
審議経過	3
評価概要	4
研究評価委員会におけるコメント	7
研究評価委員会委員名簿	8
第1章 評価	
1. プロジェクト全体に関する評価結果	1-1
1. 1 総論	
1. 2 各論	
2. 個別テーマに関する評価結果	1-23
2. 1 高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発	
2. 2 革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発	
2. 3 革新的酸化プロセス基盤技術開発	
3. 評点結果	1-36
第2章 評価対象プロジェクト	
1. 事業原簿	2-1
2. 分科会における説明資料	2-2
参考資料1 評価の実施方法	参考資料 1-1
参考資料2 評価に係る被評価者意見	参考資料 2-1
参考資料3 分科会議事録	参考資料 3-1
参考資料4 評価結果を受けた今後の取り組み方針について	参考資料 4-1

はじめに

独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構においては、被評価プロジェクトごとに当該技術の外部専門家、有識者等によって構成される研究評価分科会を研究評価委員会によって設置し、同分科会にて被評価対象プロジェクトの研究評価を行い、評価報告書案を策定の上、研究評価委員会において確定している。

本書は、「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発／①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発・②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発」の事後評価報告書であり、第31回研究評価委員会において設置された「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発／①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発・②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発」（事後評価）研究評価分科会において評価報告書案を策定し、第34回研究評価委員会（平成25年1月15日）に諮り、確定されたものである。

平成25年1月
独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構
研究評価委員会

「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発／①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発・②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発」

事後評価分科会委員名簿

(平成24年9月現在)

	氏名	所属、役職
分科 会長	あさおか さちお 浅岡 佐知夫	北九州市立大学 国際環境工学部 特任教授
分科 会長 代理	よしだ じゅんいち 吉田 潤一	京都大学 大学院 工学研究科 合成・生物化学専攻 教授
委員	いななが じゅんじ 稲永 純二	九州大学 名誉教授
	うえやま まさき 植山 正基	一般社団法人 日本化学工業協会 産業部 兼 技術部 部長
	さつま あつし 薩摩 篤*	名古屋大学 大学院 工学研究科 物質制御工学専攻 教授
	すぎもと ひろし 杉本 裕	東京理科大学 工学部 工業化学科 准教授
	ながしま ひでお 永島 英夫	九州大学 先導物質化学研究所 分子集積化学部門 教授
	みやけ たかのり 三宅 孝典	関西大学 環境都市工学部 エネルギー・環境工学科 教授

敬称略、五十音順

注*：実施者の一部と同一大学であるが、所属が異なるため（実施者：名古屋大学大学院工学研究科化学・生物工学専攻）「NEDO 技術委員・技術評価委員規定（平成23年7月7日改正）」第34条（評価における利害関係者の排除）により、利害関係はないものとする。

審議経過

● 第1回 分科会（平成24年9月14日、21日）

公開セッション

1. 開会、分科会の設置、資料の確認
2. 分科会の公開について
3. 評価の実施方法
4. 評価報告書の構成について
5. プロジェクトの概要説明
6. プロジェクトの詳細説明

非公開セッション

6. プロジェクト詳細説明
7. 全体を通しての質疑

公開セッション

8. まとめ・講評
9. 今後の予定、その他、
10. 閉会

● 第34回研究評価委員会（平成25年1月15日）

評価概要

1. 総論

1) 総合評価

我が国の優れた基盤的化学技術をもとに GSC（グリーン・サステナブルケミカル）プロセスへの取り組みを行い、産業技術への展開を目指し、本事業を実施したことは意義深い。GSC プロセスの開発は、人類のみならず地球上の全生物に影響を与える重要な研究課題であるが、民間活動のみではインセンティブが働きにくく、NEDO がより積極的に主導すべき事業である。GSC に寄与するテーマをとりあげ、大学や公的機関の保有する技術シーズと企業のニーズをうまくマッチさせている。設定した課題に対して技術的に高い水準で成果が挙げられている。また、基盤技術開発として達成度が高いいくつかのテーマでは実用化の道筋が明確に示された。

しかしながら、優れたシーズ研究を実用化に結びつけるには、そのための具体的な技術開発、きめ細かい目標設定が必要だが、この点のマネジメント態勢には改善を要する。技術検討委員会をもっと充実させることもひとつの方策である。

2) 今後に対する提言

本事業では産業基盤技術開発に重点がおかれたので、その後の実用化・事業化をめざした具体的なフォローアップが重要と考えられる。事業参画企業だけでなく他の多くの企業に対しても NEDO が積極的にコンタクトをとり、本事業の成果の活用を進めて頂くことを期待する。また、ハードルは高く成功確率は低くなるが、年間数千トンあるいはそれ以上の製造量のあるバルク製品あるいはセミバルク製品の環境に優しい革新的製造技術の開発にも取り組んでほしい。

なお、環境調和型の触媒や合成方法論の開発は、それを具体的に重要化合物の合成に結びつけてはじめて意義のあるものになる。見出された方法論が何に使えるかという演繹的なアプローチだけでなく、これができたら凄いという社会的意義のあるアピール性の強い重要化合物を選んで、そのための具体的方法論開発をコーディネートする帰納的方法も検討してほしい。

2. 各論

1) 事業の位置付け・必要性について

製造段階における環境有害物質の使用削減は、今後さらに重要視されることが予想され、こういった環境制約の克服に着目した GSC プロセスの基盤技術開発は、我が国部材産業の付加価値向上に大きく貢献するものとする。また、

GSC の技術は従来技術の延長ではなく、新規な技術が必要であることから研究開発の難易度が高く、産官学の英知を集めて研究開発に取り組む必要があり、優れた学術基盤と実用化が期待されながら、民間の力だけでは手をだしにくく、国の関与により実用化に向けた研究が促進されたことは高く評価される。とくに、「環境負荷を与えない」プロセスは、通常の企業利益に直結しないところがあることから、国が開発を後押しする必要がある。

2) 研究開発マネジメントについて

戦略的な目標は、有害な化学物質削減、廃棄物・副生物削減として国が支援する事業の観点から立てられており妥当である。3つの研究グループのうち、実施者に企業を含む2つのグループでは、集中研方式を採用しており、リーダーと企業研究者が常に密接に連絡をとりあって研究開発を推進できる体制がとられている点も高く評価できる。技術検討委員会の助言を反映して適切な運営もなされている。

しかしながら、具体的かつ明確な開発目標を可能な限り定量的に設定するあまり、戦略的目標との関係、目標達成度を測定・判断するための適切な指標が不明確である。また、基本計画に「e-ファクターの大幅低減」を研究開発目標として掲げているのであるから、研究開発項目ごとの達成目標に「e-ファクターの低減率」を設定すべきであった。実用化の観点から化学工学的な検討をもう少し加えるべきであった。更に、世界的な状況を把握した上で、日本としてどの分野に重点的に取り組むべきかのニーズからの研究開発項目設定も必要であったと考えられる。

3) 研究開発成果について

基礎的な合成技術としては、目標値をほぼ達成している。得られた成果は、世界初あるいは世界最高水準であることは、適切に取得された知的財産権、発表された論文の質の高さに表れている。実用化できれば既存のものを凌駕するであろう。

しかしながら、転化率や選択率の目標値をどのようにして設定したのか、その根拠が妥当であれば自ずと競争力はあるはずであるが、なぜその転化率や選択率なのかについては十分な説明にはなっていなかった。また、実用化をイメージしたスケールアップ検討、プロセス設計が不十分なテーマが多数見うけられ、従来技術あるいは他の競合技術との優位性比較が不十分であった。また、成果の普及に関しては、学術論文や学会発表、特許出願がほとんどで「国民に向けて」の観点が欠落している。

4) 実用化の見通しについて

いくつかのテーマにおいては実用化イメージ・出口イメージが非常に明確になっているか、引き続き研究開発が行われる見通しが立っている。技術的波及効果や人材育成促進効果なども得られている。

しかしながら、学術的・技術的には高いレベルにあり、実用化のポテンシャルは高いテーマでも、実用化イメージ・出口イメージがまだ明確になっていないものがある。テーマにより、実用化に向けての開発のマイルストーンが立っていないものもある。これらのイメージをできるだけ早期に明確化するためのNEDOの一層のサポートが望まれる。また、実用化イメージ・出口イメージの設定自体が小さ過ぎる。もっとインパクトのある大物を具体的に狙うべきではないか。

研究評価委員会におけるコメント

第34回研究評価委員会（平成25年1月15日開催）に諮り、本評価報告書は確定された。研究評価委員会からのコメントは特になし。

研究評価委員会

委員名簿（敬称略、五十音順）

職 位	氏 名	所属、役職
委員長	西村 吉雄	技術ジャーナリスト
委員長 代理	吉原 一紘	オミクロンナノテクノロジージャパン株式会社 最高顧問
委員	安宅 龍明	元一般社団法人ナノテクノロジービジネス推進協議会 企画運営推進会議 副議長
	伊東 弘一	学校法人早稲田大学 理工学術院 総合研究所 客員教授（専任）
	稲葉 陽二	学校法人日本大学 法学部 教授
	尾形 仁士	三菱電機株式会社 社友
	小林 直人	学校法人早稲田大学 研究戦略センター 教授
	佐久間一郎	国立大学法人東京大学大学院 工学系研究科 附属医 療福祉工学開発評価研究センター センター長／教授
	佐藤 了平	国立大学法人大阪大学 大学院工学研究科 マテリア ル生産科学専攻（システムデザイン領域担当） 教授
	菅野 純夫	国立大学法人東京大学 大学院新領域創成科学研究科 メディカルゲノム専攻 教授
	宮島 篤	国立大学法人東京大学 分子細胞生物学研究所 教授
	吉川 典彦	国立大学法人名古屋大学 大学院工学研究科 マイク ロ・ナノシステム工学専攻 教授

第1章 評価

この章では、分科会の総意である評価結果を枠内に掲載している。なお、枠の下の「○」「●」「・」が付された箇条書きは、評価委員のコメントを原文のまま、参考として掲載したものである。

1. プロジェクト全体に関する評価結果

1. 1 総論

1) 総合評価

我が国の優れた基盤的化学技術をもとに GSC（グリーン・サステイナブルケミカル）プロセスへの取り組みを行い、産業技術への展開を目指し、本事業を実施したことは意義深い。GSC プロセスの開発は、人類のみならず地球上の全生物に影響を与える重要な研究課題であるが、民間活動のみではインセンティブが働きにくく、NEDO がより積極的に主導すべき事業である。GSC に寄与するテーマをとりあげ、大学や公的機関の保有する技術シーズと企業のニーズをうまくマッチさせている。設定した課題に対して技術的に高い水準で成果が挙げられている。また、基盤技術開発として達成度が高いいくつかのテーマでは実用化の道筋が明確に示された。

しかしながら、優れたシーズ研究を実用化に結びつけるには、そのための具体的な技術開発、きめ細かい目標設定が必要だが、この点のマネジメント態勢には改善を要する。技術検討委員会をもっと充実させることもひとつの方策である。

<肯定的意見>

- 我が国がもっている優れた基盤的化学技術をもとに GSC への取り組みを行い、産業技術への展開をめざして本事業を実施されたことは意義深い。GSC 技術は今後益々国際的に重要になると考えられ、本事業をもとにさらにこの分野が発展することを期待する。
- 物質合成におけるグリーンプロセスの開発は、人類のみならず地球上の全生物に影響を与える重要な研究課題であるが、民間活動のみではインセンティブが働きにくい。一方、環境への配慮を伴った種々の技術開発は日本の強みであり、また今後さらに強化すべき分野であろう。NEDO がより積極的に主導すべき事業であると考ええる。
- GSC に寄与するテーマを、大学や公的機関の保有する技術シーズと企業のニーズをうまくマッチさせ、NEDO の支援の下で多くの実用化につながる可能性のある基盤技術開発がなされている。プログラムで得られた成果は、特許で権利確保がなされ、また、論文等で一般に公表されており、投入した費用に対する効果も適切である。
- 全てのテーマが目標を達成し、いくつかのテーマにおいて実用化の道筋が明確に示された。基盤技術開発として達成度の高いプロジェクトである。
- わが国が世界に先駆けて開発した触媒技術の実用化展開プロジェクトであり、GSC の理念にもあった優れた目標を掲げている。学術寄りから実用化に近いものまでが存在するテーマ設定であったが、いずれも研究成果という意味で

は世界的に優れたものと評価される。ファインケミカルの低環境負荷型触媒合成というテーマは、企業単独では実施を検討しにくく、国の支援が必要である。今回、実用化という観点からも、出口イメージが明確で実用化への道筋を着実に歩んでいるものがあり、プロジェクト全体としては、基礎、応用ともに優れたものと考えられる。

- 従来技術との比較において成果の優位性が明らかになっていない箇所が散見されるものの、すべてのPJにおいて、開発された技術が革新的であること、または革新技術の基盤となり得ることが、十分に示されている。また、それを示すに足る実験データも豊富に取得、蓄積されている。
- 事業としては化学工業全体の環境を配慮した生産性向上をめざす基盤技術のGSC技術としてNEDOが主導すべきものである。
- 具体的内容はGSC基盤技術としては限定された範囲ではあるが、設定した課題に対して技術的に高い水準で成果が挙げられている。
- 出口イメージが明確となっているテーマが多く、実用化へ向けた明確なマイルストーンが提示されているプロジェクトもある。
- 革新的水素化反応や酸化剤としての過酸化水素の利用といった波及効果の大きいプロジェクトもあり、今後の研究開発の進展に期待が持てる。

<問題点・改善すべき点>

- 優れたシーズ研究を実用化に結びつけるには、そのための具体的な技術開発が必要だが、この点のマネジメント態勢が弱いように思われる。技術検討委員会をもっと充実させ、その実質的役割を大きくしてはどうか。
- 主として研究開発マネジメントに改善を要する。対象がファインケミカルという少量高付加価値製品であり、製品ごとに求められるスペックが異なるため、それぞれへのきめ細かな目標設定をする必要がある。また、学術のシーズを企業展開するには、様々なステージがある。端的な、企業との共同研究で実用化が達成されたか否かの評価とは異なり、まだ実用化まで時間がかかるが、企業が求める他の反応への波及効果の大きい基盤的成果や、基礎寄りの研究テーマで、具体的なイメージがやや希薄なもの、今後の展開により実用へと開花することを予感されるものもある。今回はこれら多様なステージのテーマの評価となったことから、当初の目標設定がもう少しきめ細かいものであったら、よりの確な評価が可能であったと惜しまれる。
- 多岐にわたる実験により、技術の特徴を理解できるものとなっているが、一部においては他の技術と比較して、実用化への進展に差がみられた。このような場合、すなわち出口イメージが明確ではない部分について、実用化の可否を判断することは難しく、開発された技術が無駄にならぬようにするため

には、今後の展開に選択と集中が必要となる。

- **NEDO** としての基盤技術開発の位置付けが曖昧であると感じる。この事業評価のコメント票も、実用化を目指したプロジェクトと共通になっており、基盤技術開発に対しての評価軸を必ずしも適切に反映できる項目になっていないと感じる。
- 基盤技術開発であるため、この段階で実用化の可能性あるのかどうかの判断をするのが難しい。例えば、製品中の不純物がユーザーが必要とするレベル・内容になっているのかどうか、また、精度の高いコストの見積もりが困難なため、従来技術による製品に比べコスト競争力があるのかどうか良く分からない。開発目標の根拠が正しければ、その時点で実用化できるものなのか、開発目標を設定した中身を示す必要があるのではないだろうか。
- **GSC** は学官のシーズが先行する形で進展してきているが、社会に広く利用されないと意味がない。シーズを産業界のニーズにつなげるさらなるマネジメントの工夫があってもよかったように思う。
- **PL** の視点として、事業全体の方向性でのマネージング、すなわち『学(大学、国研等)』サイドでの成果の形と出し方、波及効果などにさらに配慮する必要がある。
- 事業の成果の方向性としての化学工業全体への波及に関しては、本事業の成果のままでは実施企業に限定される可能性が大きく、問題点として存在する。
- 個々のテーマの **GSC** 効果が明確でなかった。「e-ファクターの低減率」を達成目標として設定すべきであった。
- 「実用化プロセス」の定義が曖昧であり、少量で十分であるユーザー評価用の試料検体製造を「実用化」の成果としているテーマがあった。
- 研究開発の途中での計画見直しや目標設定値の変更は、透明性の確保に留意し、外的環境の変化等の要因との時系列的な整理が必要であった。
- 出口イメージの狭く、公共性・社会的必要性が低いテーマがあった。

<その他の意見>

- ・今回取り上げられたテーマでは、対象とする化合物がファイン・スーパーファインと言ったものが多く、バルク製品は少なかった。このため、技術のインパクトが相対的に小さいように感じられた。一般的にこれらの製品群はそれぞれ個別の製造技術を要することが多いので、技術の波及性という面では継続的に技術をチューニングしていくことが必要と思われる。
- ・ **GSC** 技術は、本事業で取り上げられたものだけでなく、多種多様なものが存在する。それらについても今後必要性の高いものからとりあげていくべきであろう。

- 技術の波及性を否定するものではないが、本事業の対象となる GSC 技術は、化学工業における既存の環境保全の改良技術とは一線を画すべき戦略的技術、すなわち生産技術を主たる対象とすべきである。
- 今回の評価は「実用化の見通し」が 1 つの項目であったが、これは今回のテーマでは短期間では判定できない。定期的な追跡調査とその分析が必要である。

2) 今後に対する提言

本事業では産業基盤技術開発に重点がおかれたので、その後の実用化・事業化をめざした具体的なフォローアップが重要と考えられる。事業参画企業だけでなく他の多くの企業に対しても NEDO が積極的にコンタクトをとり、本事業の成果の活用を進めて頂くことを期待する。また、ハードルは高く成功確率は低くなるが、年間数千トンあるいはそれ以上の製造量のあるバルク製品あるいはセミバルク製品の環境に優しい革新的製造技術の開発にも取り組んでほしい。

なお、環境調和型の触媒や合成方法論の開発は、それを具体的に重要化合物の合成に結びつけてはじめて意義のあるものになる。見出された方法論が何に使えるかという演繹的なアプローチだけでなく、これができたら凄いという社会的意義のあるアピール性の強い重要化合物を選んで、そのための具体的方法論開発をコーディネートする帰納的方法も検討してほしい。

<今後に対する提言>

- 本事業では産業基盤技術開発に重点がおかれたので、その後の実用化・事業化をめざした具体的なフォローアップが重要と考えられる。事業参画企業だけでなく他の多くの企業に対しても NEDO が積極的にコンタクトをとり、本事業の成果の実用化・事業化を実現させていただきたい。
- ハードルは高く成功確率は低くなると思われるが、年間数千トンあるいはそれ以上の製造量のあるバルク製品あるいはセミバルク製品の環境に優しい革新的製造技術の開発にも取り組んでほしい。このようなチャレンジングなテーマに対しても高い成果を求められると、企業としては参加しにくくなると思われるので、評価基準に工夫をするように考えてほしい。
- 環境調和型の触媒や合成方法論の開発は、それを具体的に重要化合物の合成に結びつけてはじめて意義のあるものになる。現プロジェクトは、見出された方法論が何に使えるかという演繹的なアプローチになっている。今後のマネジメントとして大切な点は、逆に帰納的方法で、標的化合物としてこれができたら凄いという社会的意義のあるアピール性の強い重要化合物を選んで、そのための具体的方法論開発をコーディネートする方向性が必要であるように思う。評価が悪くなる可能性があっても、もし上手く行けば大成果につながるような大目標を設定し、これに挑戦できる環境を調えることが NEDO としての本来の仕事ではないのか。
- 基礎化学から始めてこのプロジェクトの期間内で実用化・事業化というのはあり得ない話で、実用化・事業家化に向けては更に開発期間を要するものである。このため実用化・事業化が視野に入っている研究テーマに関しては、

NEDO から追加的な予算的支援を行うことが望ましい。プロジェクト期間内に限った限定的な成果報告にお金を掛けるより、一つでも二つでも事業化して日本の産業力強化と税収増加に繋げるのが本来の税金の使い方だと思うし、事業化の実例が出てくるのが一番の宣伝になると思う。

- ・ 発展途上国に汎用製品の製造は移行していくことが明確な現在、日本の方向性の1つが日本でしか製造できず、かつ、世界で売れる高付加価値製品である。日本の誇る環境・省エネルギーでのもの創り技術を活用するとすれば、今回の研究テーマはよい選択である。このような学術のシーズを企業展開する後押しを国が実施することは重要と考える。プロジェクトの内容や運営に関して様々な工夫を重ね、よりよい制度を作られることを期待する。この際、適切な評価法もあわせて検討をお願いしたい。
- ・ 今後も継続して NEDO が関与すべきテーマがほとんどである。今回のプロジェクトを先導的研究開発と捉え、実証設備開発のための支援事業を立ち上げてはどうかと考える。
また、環境負荷低減は、化学産業にとって今後さらに重要性を増してくる課題であり、新たな GSC プロセスの研究開発事業の創設を要望する。
- ・ (本課題に限ることではないが)「研究のための研究」に終わることがないように、事業化実施者である民間企業側の積極的な開発への参加と密な連携を要望し、一刻も早い実用化、事業化を期待する。
- ・ 個別テーマについて、成果を先進技術の点から PL が主となって洗い直し、工業所有権に配慮しながら、NEDO が主となって直接の競争相手以外には広く利活用できるようにすべきである。
- ・ 本事業の成果を事業の戦略目標に沿って取りまとめなおすと、成果に社会に対する普遍性と波及効果が期待できる。

<その他の意見>

- ・ 基礎から実用化への流れは、大学で取り扱う研究費で見ると JSPS、JST、NEDO、民間との共同研究、という異なる制度がある。それぞれに特徴があるが、これらの間を効率的につなぐ工夫に期待する。今回のようなファインケミカル製造分野は、JSPS で研究されている学術的な成果が、民間との共同研究で実用化されるケースはあるが、一方で多くのシーズが発見されないままに終わっている。ここに JST や NEDO が、それぞれの特徴を活かして入り、よい芽を産業応用へとめざすことが重要である。このためには、省庁の壁を越えてスムーズな連携が必要であり、今後に期待したい。
- ・ NEDO が主導すべきは、リスクが大きく民間企業では手が出しにくいが実現すればとてつもなく大きな産業となる可能性のあるシード研究を官学から見

出し、これを大きく育てるべく経済的支援とマネジメントをすることであろう。

その意味では、小さな成功例の集積よりも、将来大発展の可能性のある研究課題を見出し、その研究育成→実用化への挑戦をさせることが最も大切に思う。

- 研究成果（実験結果）の多くは実験室内における最適化された条件の下でのデータであろう。今後、実用化、事業化を目指すならば、許容される条件の幅や、非最適条件下におけるデータの低下の範囲を詳細に計測し、生産工程の場が置かれている現実とのギャップを埋めていく作業が必要となる。そのためにはパイロットプラントの稼働による実証試験、段階的なスケールアップ試験などに着手することが望まれる。
- この種の事業は、計画時に産学の役割分担をはっきりさせ、成果も公共性のある学術的なものを『学（大学、国研等）』で、企業活動に利するものを『産』とすれば、社会全体への波及効果も大きくなると期待される。
- 公共性の高い『学（大学、国研等）』には、戦略的基盤技術において成果を期待すべきである。
- 実用化に対しては、従来市場の置き換えが多いように思われる。新市場創出の観点があればなおよい。

1. 2 各論

1) .事業の位置付け・必要性について

製造段階における環境有害物質の使用削減は、今後さらに重要視されることが予想され、こういった環境制約の克服に着目した GSC プロセスの基盤技術開発は、我が国部材産業の付加価値向上に大きく貢献するものと考え。また、GSC の技術は従来技術の延長ではなく、新規な技術が必要であることから研究開発の難易度が高く、産官学の英知を集めて研究開発に取り組む必要があり、優れた学術基盤と実用化が期待されながら、民間の力だけでは手をだしにくく、国の関与により実用化に向けた研究が促進されたことは高く評価される。とくに、「環境負荷を与えない」プロセスは、通常の企業利益に直結しないところがあることから、国が開発を後押しする必要がある。

<肯定的意見>

- 製造段階における環境有害物質の使用削減は、今後さらに重要視されることが予想され、こういった環境制約の克服に着目した GSC プロセスの基盤技術開発は、我が国部材産業の付加価値向上に大きく貢献するものと考え。
- GSC の取り組みは、企業にとって長期的には最重要課題の一つであるにもかかわらず、短期的な利益にはつながりにくいので、国の主導が不可欠であり、NEDO が関与すべき事業である。
また、GSC の技術は従来技術の延長ではなく、新規な技術が必要であることから研究開発の難易度が高く、産官学の英知を集めて研究開発に取り組む必要があり、この点からも NEDO が関与すべき事業である。
- 触媒は物質製造プロセスの鍵物質であり、とくに均一系触媒を用いるもの創りはわが国の強い分野である。この分野に着目してプロジェクトを実施することは、「ナノテク・部材イノベーションプログラム」の目標達成に大きく貢献している。今回評価対象となったテーマは、いずれも、優れた学術基盤と実用化が期待されながら、民間の力だけでは手をだしにくく、国の関与により実用化に向けた研究が促進されたことは高く評価される。とくに、「環境負荷を与えない」プロセスは、通常の企業利益に直結しないところがあることから、国が開発を後押しする必要がある。3つの個別テーマは、学術寄りのテーマから実用化に近いテーマまであり、予算的には、実用化に重点をおくメリハリがついている。予算額の評価については、本委員はコメントできない。化学製品の大規模生産は、発展途上国へとシフトしており、わが国が今後競争に勝ち抜くために重点を置くべき技術が高い付加価値をもつ製品の環境負荷なき製造であることを考えると、事業目的は優れていると評価できる。また、企業が実用化につながる基礎研究に割く余裕が小さくなっている現在、

アカデミアのもつシーズを、企業ニーズに展開することは、現在のわが国にとって、重要と考えられる。

- 物質合成におけるグリーンプロセスの開発は、民間活動のみではインセンティブが働きにくい。環境への配慮を伴った種々の技術開発は、今後も NEDO が積極的に主導すべき事業であろう。

現 GSC 手法が適用できる対象を探して数値目標を掲げ、これを達成した初期的成果は評価できる。

- ナノレベルの触媒設計が鍵となる研究テーマであるため、ナノテク・部材イノベーションプログラムでの事業は妥当である。また短期での投資効果が見えにくい研究テーマであるため企業レベルでの投資は難しく、NEDO のリードが不可欠な分野である。
- 個々のテーマは、GSC 基盤技術開発の目標に合致したものと言え、プログラムの目標達成に寄与していると言える。開発技術が実用化されれば、そこで製造された種々の化合物が日本の基幹産業の基礎を支えるものとなり、日本の国際競争力向上や国際的な貢献に資するものと評価できる。
- 化学工業の分野において、日本が今後も国際競争力を維持し、世界をリードし続けるためには、本課題のめざす方向性は直接的で迷いがなく、きわめて重要な部分を担当していると高く評価されてよいだろう。
- 事業目的は、実施部隊が限定されているため一定の制約は付きまとうものの、技術開発動向、国際競争力、国際貢献の可能性等から見て、事業の目的は妥当である。
- エネルギー・資源・環境領域は、「ナノテク・部材イノベーションプログラム」の目標達成には不可欠な部分であり、とりわけ本事業は重要な役割を果たしている。
- 事業が対象とする化学工業においては企業間連携が困難な技術開発事項であり、社会的必要性に鑑み NEDO が関与し、公共性の高い『学（大学、国研等）』の主導のもとに推進すべきであるので、事業は妥当である。

<問題点・改善すべき点>

- 必要経費の算定根拠や実際の支出内容が明らかにされていないため、NEDO の関与（＝公的資金の投入）が必要とされる事業であったかを評価することは難しい。費用対効果の判断基準は投じた予算に対する新規市場開拓予想額とされているが、それ以前に同じ研究成果を得るためには、本当にその予算額が必要であったかの検証がなされていない、or 明示されていない。それでは、限られた予算が適正に配分されているかを判断することはできず、本事業の透明性が疑われはしないかと不安を覚える。（評価委員は事業の研究内容

のみを評価すればよく、財務面に関する意見を言う立場にはないのであれば、この意見は撤回する。)

- 「有害な化学物質を削減できる、又は使わない」、および、「廃棄物、副生成物を削減できる」プロセスの範囲は広く、このうち、今回とりあげられた、「水、アルコールで機能する触媒」、および、「酸化反応」が占める計画全体における位置づけ、が明確でない。このため、個別の技術審査は可能でも、これらを総合しての事業の評価は、現在評価委員に与えられている情報からは判断できない。
- コストの制約や開発リスクが大きいといった点から、企業にとって GSC への取り組みはインセンティブが大きくなりにくいと考えられる。もっと、多くの企業が参画できるように事業の間口をもう少し広げてもらったのではないかと考えられる。
- ケミストリー (GSC) のレベルに止まるのだったら文科省の研究費補助で充分である。これをテクノロジー (GST) にまでつないで実用化への道を拓くのが NEDO の役割であろう。テクノロジー部分のコーディネーションが弱いように思われる。
- 事業規模・予算が限定されているため波及効果が十分でない可能性を有するので、今後の展開において、新たな産学連携・連携の組み替え等を検討すべきである。
- 難しい点ではあるが、事業実施によりもたらされる効果の予測が難しく、費用対効果の妥当性の判断は実際には困難である。
- ① 出口イメージの狭く、公共性・社会的必要性が低いテーマがあった。
② 投入予算の支出内訳と研究成果との関係の説明がほしかった。

<その他の意見>

- ・ 今回検討した中の多くのテーマでは各企業にかなり特異的な物質を対象として取り上げており、リスクの高いテーマに企業がチャレンジするのを NEDO が後押しする効果があったとはいえ、NEDO が支援することが妥当かどうかは判断が難しい。
- ・ 対象がファインケミカルであることから、技術開発動向、国際競争力、市場動向は個別技術により異なる。事業目的の妥当性は、違う評価軸が必要ではないか。エネルギー需給動向、政策動向、国際貢献は本テーマの妥当性を問う内容ではないと考えられる。
- ・ 本事後評価対象プロジェクトが平成 23 年度で終了してしまったのは残念である。化学産業にとって環境負荷低減は、今後さらに重要性を増してくる課題であるので、新たなプロジェクトの立上げを期待する。

- 本事業の費用対効果は、化学工業全体の視点からの開発技術の実用化可能性において押し量るべきであり、今後の展開による。
- ニーズ面から国内外の状況について、もう少し検討があってもよかったですのではないだろうか。
- もっぱら国内市場を想定した将来見通しが示されていたが、国際貢献という観点にたった場合の波及効果も考慮すべきではないのか。

2) 研究開発マネジメントについて

戦略的な目標は、有害な化学物質削減、廃棄物・副生物削減として国が支援する事業の観点から立てられており妥当である。3つの研究グループのうち、実施者に企業を含む2つのグループでは、集中研方式を採用しており、リーダーと企業研究者が常に密接に連絡をとりあって研究開発を推進できる体制がとられている点も高く評価できる。技術検討委員会の助言を反映して適切な運営もなされている。

しかしながら、具体的かつ明確な開発目標を可能な限り定量的に設定するあまり、戦略的目標との関係、目標達成度を測定・判断するための適切な指標が不明確である。また、基本計画に「e-ファクターの大幅低減」を研究開発目標として掲げているのであるから、研究開発項目ごとの達成目標に「e-ファクターの低減率」を設定すべきであった。実用化の観点から化学工学的な検討をもう少し加えるべきであった。更に、世界的な状況を把握した上で、日本としてどの分野に重点的に取り組むべきかのニーズからの研究開発項目設定も必要であったと考えられる。

<肯定的意見>

- 戦略的な目標は、有害な化学物質削減、廃棄物・副生物削減として国が支援する事業の観点から立てられており妥当である。
- 研究開発目標および研究開発課題は、シーズに基づいて適切に設定されている。
全体を統括するプロジェクトリーダーとして、すぐれた能力と研究実績を有する世界的に評価の極めて高い研究者が選定されている。
3つの研究グループのうち、実施者に企業を含む2つのグループでは、集中研方式を採用しており、リーダーと企業研究者が常に密接に連絡をとりあって研究開発を推進できる体制がとられている点も高く評価できる。
- 技術の面では技術検討委員会の助言を反映して適切に運営がなされている。
- 水、アルコールで作用する触媒、新概念の固定化触媒、過酸化水素酸化触媒いずれも、現在求められている技術であり、かつ、学術的に優れた基礎研究成果が存在するものであり、戦略目標として優れている。研究は3つのチームで、そのステージが異なり、より学術に寄るものから実用化に近いものまでであるが、それぞれのチームがそのステージに対しては、よい開発チームを構築し、連携もとれる体制を作っている。論文等発表、知財も順調であり、その点ではマネジメントは十分になされている。
- 年次計画はもとより、当初目標を超える新たな目標の設定など、詳細な数値目標が掲げられており、目標が明確に示されて研究が遂行されたことは好ま

しい。

- 予算（各個別研究テーマ毎の配分を含む）は、集中研を有するプロジェクトに多くなっているのは重点投資の面で妥当である。
- 開発目標は、概ね妥当と言える。事業体制については、中核技術を担う部署とそれを実用化するための技術開発を担う部署の連携は良くとれていると考えられる。
- ほとんどのプロジェクトにおいて、実用化に向けての道が明確に示されており、所期の目標が達成できている。
集中研の設置が上手く機能したように思われる。
- 集中研方式あるいは共同研究方式をとり、実用化を早期に実現することを目指した適切なフォーメーションがとられている。また研究が予定よりも早めに進んでいることは、マネジメントが良好に機能したことを示している。
- 成果の実用化につなげる知財マネジメントにおいて、特許出願・論文化・学会発表等が数的には十分なされている。
- 詳細なスケジュールを作成しており、検討項目のリストアップも充分であり、目標達成のために妥当な研究開発計画であった。
- 統括するプロジェクトリーダーが技術研究力としては妥当に選任されている。

<問題点・改善すべき点>

- 具体的かつ明確な開発目標を可能な限り定量的に設定するあまり、戦略的目標との関係、目標達成度を測定・判断するための適切な指標が不明確である。
- 基本計画書に「e-ファクターの大幅低減」を研究開発目標として掲げているので、研究開発項目ごとの達成目標に「e-ファクターの低減率」を設定すべきであった。
- 本事業では、どちらかという現在日本がもっているシーズからの研究開発項目設定であり、現在の日本のもっている基盤技術を生かすという点では重要である。しかし、GSCの分野は多岐にわたり、また、その取り組みは世界各国で行われている。世界的な状況を把握した上で、日本としてどの分野に重点的に取り組むべきかのニーズからの研究開発項目設定も必要であると考えられる。
シーズからの研究開発項目が設定されているため、成果の実用化への戦略がやや希薄の面があるように思われる。実用化の観点から化学工学的な検討をもう少し加えるべきであった。
- ファインケミカル製造という、製品毎に異なる要求度をもつ化合物の合成であるため、現行の開発マネジメントの達成目標が大雑把にすぎ、定量的評価には使えない。今回の評価は、「実用化したか否か」ではなく、「実用化の見

通し」を問うこととなっており、この分野の評価軸としては妥当であると考えられるが、その「見通し」をどのような評価項目で評価するかは示されていない。この評価項目は、テーマ毎に細かく設定する必要がある点で、困難であることは承知しているが、それを考慮しても、研究の達成度評価法の提示という点での、研究開発マネジメントとしては不十分であると考えられる。

- (1)研究開発目標の妥当性： 戦略的な目標設定の部分が一部弱いように思う。
- (2)研究開発計画の妥当性： 最初から達成可能な目標を設定しているように見える部分もある。たとえ上手く行かない可能性があっても、もし成功すれば大成果につながるような目標に挑戦して何らかの意味のある成果（知見）を得たかどうか評価するやり方が良いのではないか。
- (5)情勢変化の対応等： 研究が予想どおりに進まなかった場合の対応が付け焼き刃的に感じられる。
- 研究開発の「チーム」とは言い難いグループがあった。主たる研究者が個々の技術課題を深く追求することはよいが、研究期間中の連携はどの程度のものだったのか？ そもそも一つにグルーピングする意義はどこにあったのか？ 容易に理解することができない。
- 予算の使途が良く解らないので、妥当性が判断できない。原材料費、設備費、人件費等の使途を提示してもらいたい。成果の実用化については個別テーマによってまちまちである。既にユーザー評価が進んでいるものもあれば、課題を解決しなくてはならないテーマもあり、統括した評価は困難である。
- 予算が多くなっている集中研を有するプロジェクトにおいて、事業全体の戦略計画との関連で集中研としての基盤技術開発目標設定およびその成果としての目標達成測定がなされていないのが残念である。
- 全体を統括するプロジェクトリーダーは、技術研究力は申し分ないがプロジェクトマネジメント、技術統括力・戦略目標とのすりあわせの面では不十分である。
- 成果の実用化につなげる知財マネジメントにおいて、特許出願・論文化・学会発表等がなされているが、広く化学工業に対する実用化に繋がる技術の取りまとめ・公表、技術発表の汎用性が不明確である。
- 事業の対象外でプロジェクトの成果とならない産学共同研究が併設・存在しており、目標達成が不明確となっている。
- PL-GL 体制が、各プロジェクトにおいて縦割りになっているため、各プロジェクトとしての統括目標・成果が不明確である。
- 研究開発の途中で、計画見直しや目標設定値が変更されたテーマがあったが、その経緯が不明確。
- 当初の「実用化プロセス」の定義が曖昧であり、医薬品関係あるいは特殊材

料用途では少量で十分であるユーザー評価用の試料検体製造を「実用化」の成果としているテーマがあった。

- 「実用化プロセスの設計・開発」がスケジュール及び体制に組み込まれていないテーマがあった。
- 定量的な最終目標が設定されているが、その数値的根拠が不明確。
- 当初の計画スケジュールと実際の進捗とを比較した説明がほしかった。

<その他の意見>

- ・上記の達成度評価法を個別のテーマ毎に設定する必要がある、と言う点から考えると、このような分野への委託としては、事前準備の期間が必要ではないか、と感じる。すなわち、あるテーマ設定をして公募、採択後、実際に NEDO と研究チームの間で達成目標の精査、当該技術を利用しうる企業との技術的な協議、等を十分にすることにより、テーマ毎にこまめに設定された目標をもとに、より明確な研究方針で研究が実行できるのではないか。その意味で、例えば3年間の研究期間であれば、3年半の期間とし、半年は事前調査、その後3年研究という設定は不可能か検討が望まれる。

また、集中研究室方式をとった場合の、可能な範囲での連携と相乗効果への評価、基礎研究から実用化への時間がかかるテーマに関する追跡評価、等の充実が望まれる。

- ・実用化につなげるのであれば、分離、精製、必要エネルギー需要などのアセスメントが必要である。ただし本プロジェクトは基盤技術研究であり、まだターゲットとする化学製品が確定していない。この状態で果たして「(4)研究開発成果の実用化に向けたマネジメントの妥当性」の評価項目が適切かどうか疑問を感じる。
- ・(研究者ではなく NEDO への意見。)昨今の全世界的な経済情勢を考慮すると、革新的な技術一つをもって、100 億円規模の新規市場が突如として出現するようには思われない。新規ではなく既存市場への新規参入、既存技術への代替効果として、シェア獲得の可能性として評価されるべき部分が大きいはずだ。
- ・具体的かつ明確な開発目標を可能な限り定量的に設定されているあまり、開発目標の第2項生産量技術レベルが達成されておらず、2項合わせての目標達成度が100%を下回ると判断せざるを得ない。
- ・目標設定・見直しと具体的計画設定・見直しにおいて不一致が見られる。

3) 研究開発成果について

基礎的な合成技術としては、目標値をほぼ達成している。得られた成果は、世界初あるいは世界最高水準であることは、適切に取得された知的財産権、発表された論文の質の高さに表れている。実用化できれば既存のものを凌駕するであろう。

しかしながら、転化率や選択率の目標値をどのようにして設定したのか、その根拠が妥当であれば自ずと競争力はあるはずであるが、なぜその転化率や選択率なのかについては十分な説明にはなっていなかった。また、実用化をイメージしたスケールアップ検討、プロセス設計が不十分なテーマが多数見受けられ、従来技術あるいは他の競合技術との優位性比較が不十分であった。また、成果の普及に関しては、学術論文や学会発表、特許出願がほとんどで「国民に向けて」の観点で欠落している。

<肯定的意見>

- 基礎的な合成技術としては、目標をほぼ 100%達成しているので、戦略的観点から個別目標は十分達成している。
- 基本計画の数値目標が全て達成されている。また、その内容が世界初あるいは世界最高水準の成果であることは、適切に取得された知的財産権、発表された論文の質の高さに表れている。
- 個別テーマとしては未達のものもあるが、全体的には設定した目標値をクリアしていると評価できる。得られた成果は、世界的に見ても高水準のものであり、実用化できれば既存のものを凌駕すると思われる。必要な特許出願も行われていると推定される。また、成果の発表もおおむね妥当と評価する。
- 定性的であるが、全体としての目標達成はできている。とくに、3テーマとも優れた基礎研究に立脚していることから、実用をめざした成果の意義は大きく、ファインケミカル製造に大きなインパクトを与えられ考えられる。世界的に誇れる水準であり、汎用性も高い。特許出願、論文発表も順調におこなわれており、情報発信にも問題がない。研究開発成果については、高く評価できる。
- 当初目的を超える、未来を先取りした研究成果も多く、十分に目標を達成できているものと評価できる。目標達成度はおおむね 100%としてよいだろう。個々の成果の質には多少のばらつきはあるが、総じて市場の開拓に繋がるものと予想できる。
- 世界初・世界最高水準の成果がいくつか得られ国際的にも高い評価をうけており、広く実用化できれば社会的意義も大きい。また、他技術に適用できる可能性のものもあり、今後のさらなる展開が期待できる。

- 成果は市場の拡大或いは市場の創造につながる事が期待できる。
- 研究開発の成果は世界最高水準に達しており、新たな技術領域を開拓しつつある。
- 特許出願、研究発表の件数は充分であり、国内外に適切に行われている。
- ほとんどの研究成果が目標値をクリアしており、全体としての目標達成率は高い。
- 成果の中には、市場の拡大或いは市場の創造につながる事が期待できるものがある。また、新たな技術領域の開拓に繋がりそうなものもある。
- 成果は、世界初あるいは世界最高水準である。
- 成果は、新たな技術領域を開拓することが期待できる。
- 投入された予算に見合った成果が得られている。
- 成果は、他の競合技術と比較して優位性がある。
- 知的財産権等の取得や成果の普及は、おおむね妥当であろう。

<問題点・改善すべき点>

- 予算の用途が分からないので投入された予算に見合った成果かどうか判断できない。用途をある程度示すべきと考える。競合技術との比較は、その物質自体を製造している企業であれば可能と思われるが、その他の場合には原材料費、ユーティリティなど不明な点が多く実際にはかなり困難と考えられる。転化率や選択率の目標値をどのようにして設定したのか、その根拠が妥当であれば自ずと競争力はあるはずであるが、なぜその転化率や選択率なのかについては十分な説明にはなっていないように思う。特許については、件数は明らかにされているが、その件数・請求範囲がどの領域をカバーしているのか分からないので、評価しにくい面がある。
- 実用化をイメージしたスケールアップ検討、プロセス設計が不十分なテーマが多数見うけられた。
- 従来技術あるいは他の競合技術との優位性比較が不十分であった。
- 成果の普及に関しては、学術論文や学会発表、特許出願がほとんどで「国民に向けて」の観点が欠落している。
- 成果の目標値は、大雑把すぎて参考にならないと考える。論文発表、特許出願とスケールアップ、さらには、実用化には、コスト、安全性等様々な異なる技術的問題の克服が必要である。基礎研究に近い成果、スケールアップとサンプル供与まで展開した成果については、実用化に向けての問題点を分析することが望ましく、一方、応用に近い成果においては、個々の問題から普遍性を抽出して問題提起、分析する等の評価があってもよかったのではないか。

- 個々の研究テーマが複数の研究開発項目にまたがる場合があり、その場合に設定目標との対応が必ずしも明確でない場合があった。研究テーマが複数の研究開発項目にまたがることは、技術の進展という点からはむしろ歓迎すべきことなので、その場合には、それぞれの項目の目標に対しての達成度を併記すべきである。
- 社会に対して技術的インパクトを与える社会的実施、すなわち実用化の概念を十分に把握してなく、具体的なテーマ・目標設定において躓いているため、プロジェクトとしての目標到達が曖昧となっている。
- 実用化に対する目標・生産量は戦略的には重要度が高いにもかかわらず、不十分な結果であるので、全体としては目標を達成していないように判断される。
- 情報発信はされているが、ニーズの把握、市場規模の想定が不十分であり、普及の見通しが不明確なテーマがあった。
- 事業戦略については課題を残している。

<その他の意見>

- ・水中での有機反応は、原料や生成物の溶解性によって適用が制限をうける場合もある。工業的製造の観点から、とくに、担持型触媒を用いたフロー合成において適用範囲を明確にしておくことは、実用化、事業化をめざす上で重要である。
論文として発表すべきもの、特許として権利化すべきもの、ノウハウとして秘匿すべきもの、について、よく考えられているように思われるが、引き続き注意が必要であろう。
- ・成果は新たな「技術領域」を開拓することが期待できる内容となっている。市場の拡大あるいは市場の創造につながるものが期待できるが、電子材料等商品サイクルが速い分野への商品展開を想定している材料については、社会情勢、技術動向に強く依存する。
- ・優れた実用化技術は、むしろ特許出願（出願後、発表を一定期間控える）や論文発表が遅れることをよく経験する。その意味では、各チームとも優れた成果を発表しているが、少し発表を急ぎ、数を競いすぎるような印象がある。
- ・成果の記述に相対的な表現が使われている箇所がある。実用化、事業化を目指す場合には、スケール等の情報も重要になるので、絶対的な数値も併記すべきではないか。
- ・種々の検討の中でとくに水層－油層の二層系をうまく活用したものが多かったと思う。この領域は引き続き検討を進めていけばユニークな技術が育ってくる領域のように思う。

- 「一般に向けて広く情報発信」をという点については、例えば文科省の「大学と科学」シリーズのように、目玉となる成果については、一般人に分かり易い啓蒙的な成果発表会を開くことは意義があるように思われる。
- 成果に汎用性があるかどうかは、PLの主導もとの今後の活用次第である。
- 実用化計画において知的財産権等の取扱いが不明確である。
- 論文の発表が研究内容を踏まえ適切に行われているかどうかは不明確である。
- 成果の波及の受取手としての活用・実用化の担い手が想定されていない。
- 一般に向けて広く活用できる情報を発信しているかどうかは不明である。

4) 実用化の見通しについて

いくつかのテーマにおいては実用化イメージ・出口イメージが非常に明確になっているか、引き続き研究開発が行われる見通しが立っている。技術的波及効果や人材育成促進効果なども得られている。

しかしながら、学術的・技術的には高いレベルにあり、実用化のポテンシャルは高いテーマでも、実用化イメージ・出口イメージがまだ明確になっていないものがある。テーマにより、実用化に向けての開発のマイルストーンが立っていないものもある。これらのイメージをできるだけ早期に明確化するためのNEDOの一層のサポートが望まれる。また、実用化イメージ・出口イメージの設定自体が小さ過ぎる。もっとインパクトのある大物を具体的に狙うべきではないか。

<肯定的意見>

- いくつかのテーマにおいては実用化イメージ・出口イメージが非常に明確になっているか、引き続き研究開発が行われる見通しが立っており、関連分野への波及効果が期待できる。ターゲットとする製品が確定していないテーマにおいても、例示により商品実用化イメージを最大限明らかにしている。
- 実用化イメージ・出口イメージはそれなりに明確になっており、今後の研究開発見通しも立てられている。
技術的波及効果や人材育成促進効果なども得られている。
- 個々の技術開発テーマによって実用化の見通しは様々である。ユーザーでの評価次第といったテーマも多い。得られている成果が本当に妥当であれば、有望と思われるテーマが相当数あると思われる。
水層－油層の二層系をうまく活用する技術には汎用性があると思われるので、種々の企業で個別に技術改良がおこなわれれば波及効果が期待できる。
- 明確な実用化イメージができている研究課題もあり、それらについては実用化が十分期待できる。また、本プロジェクトの研究課題がそれ以外の技術に適用できると期待できるものもあり、それらについては、大きな波及効果が期待できる。
- 一部の成果については、実用化イメージ、出口イメージが明確であり、問題点も時間軸に沿って整理されている。技術的な波及効果においては、すべてのテーマにおいて優れていると評価できる。当該分野研究開発、人材育成についても問題がない。
- 一部を除き、明確な出口イメージのもと、着実に実用化へ進んでいると評価できる。順調に開発が進捗するのであれば、大きな波及効果も期待される。
- 半数以上のテーマにおいて、出口イメージが明確になっており、今後の開発

のマイルストーンも明確である。

- プロジェクトの実施自体が当該分野の研究開発や人材育成等を促進するなどの波及効果を生じている。
- 成果は関連分野への波及効果（技術的・経済的・社会的）を期待できる。

<問題点・改善すべき点>

- 学術的・技術的には高いレベルにあり、実用化のポテンシャルは高いと思われるテーマでも、実用化イメージ・出口イメージがまだ明確になっていないものもあった。これらのイメージをできるだけ早期に明確化するためのNEDOの一層のサポートが望まれる。
- 残念ながら多くのテーマにおいて、実用化イメージ・出口イメージが明確であるとは言いがたい。テーマにより、実用化に向けての開発のマイルストーンが立っていないものもあり、経済的、社会的波及効果は不明確である。しかしながら、これらは研究者の問題と言うよりは、研究開発マネジメントの問題と考えられ、今後、ファインケミカル分野での学術基盤の応用展開テーマでのマネジメントの改善が期待される。
- 実用化イメージ・出口イメージの設定自体が小さ過ぎるように思われる。もっとインパクトのある大物を具体的に狙うべきではないか。
- おしなべて従来技術との比較が難しい。同じ化合物を対象とする場合には、少なくとも原材料費の比較は示せると思われる。しかしながら基盤技術の開発なので、例えばユーティリティコストの詳細について精度の高い数値を出すのがそもそも難しいと思われる。
- 今後の研究開発については、民間企業側の果たすべき役割、特に事業化を念頭においた部分、に曖昧さが残る。
- 研究開発の方向性が特定の分野・製品に偏っていて、成果の波及範囲が狭いテーマが一部見うけられた。
- 実用化イメージ・出口イメージが不明確なところが多い。

<その他の意見>

- ・基盤研究に対してこの質問は適切ですか？ 様々な方向に応用力、発展性のある技術が「基盤」技術であり、その成果はアウトプットの選択肢が多く、「可能性は特定の製品だけに留まらない」状態となるはずである。この設問は方向性を絞ったかどうかに対しての問いで、基盤研究とはベクトルが異なる気がする。
- ・事業の戦略的目標に沿った実用化イメージ・出口イメージが不明確なため、引き続きの研究開発を行う見通しは立てづらいところである。

- 個々のテーマが企業独自のニーズに基づいたものが多いので、技術の直接的な波及効果はだすのが難しいかも知れない。
- 革新的水素化反応や酸化剤としての過酸化水素の利用といった波及効果の大きいターゲットについては、今後の研究開発の進展を期待する。
- 人材育成の促進に関する波及効果は判断つきかねる。

2. 個別テーマに関する評価結果

2. 1 高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発

1) 研究開発成果、実用化の見通しおよび今後に対する提言

高分子担持触媒を用いた水中カップリング反応や酸素酸化反応など世界的に評価の高い研究開発成果が得られたことは高く評価できる。触媒的エステル化やアミド合成反応も学術的には非常に高いレベルの研究であり、範囲は限定的ではあるものの、基盤技術として当初目標を大きく超える結果が得られている

しかしながら、産業界へ供給すべき製品がまだ充分定まっていないため、実用化に向けての課題についてはより一層クリアにすべきである。いずれのテーマにおいても、少なくとも原単位や生産性について従来技術との比較を行い、また、合成した化合物のユーザーでの評価を経て、成果の実用化が達成されることを期待する。共同研究企業内での企業化にとどまらず、基盤技術として実用化の事例が増すことを期待する。

<肯定的意見>

- 高分子担持触媒を用いた水中カップリング反応や酸素酸化反応など世界的に評価の高い研究開発成果が得られたことは高く評価できる。触媒的エステル化やアミド合成反応も学術的には非常に高いレベルの研究である。これらの成果を実用化に結び付けることは、今後の化学産業にとって重要であり、その意義は大きい。
- 範囲は限定的ではあるものの、当初目標を大きく超える結果が得られている点は高い評価に値する。
- 分子研チーム、名大チームが実施した 1.1~1.3 のテーマは、学術的には極めて高いレベルの研究成果であり、発表による社会への広報も着実である。NEDO の委託により、これらの潜在的に実用化が期待される研究が、実際に数値目標を定めて展開し、特許化に留まらず企業との共同研究へと展開した点は高く評価できる。
実用化の見通しについては、研究開発マネジメントの項で述べたように、この研究のステージがより学術寄りの位置から開始されたことを考えれば、学術研究から実用基盤へ展開した点では進歩であり、今後の発展の可能性を含めれば、よい試みである。
- 学術的なシーズをベースとしてターゲットとする水中機能触媒、回収利用触媒、クリーン酸化触媒、エステル化触媒において目標を十分に達成した。特に製品の量産化に直結するフロー反応装置の試験に成功したことは、実用化への展開が楽しみな成果である。
- 疎水性-親水性をうまく利用し、貴金属と組合わせてカップリング反応、酸素酸化反応を行い、種々の基質に対し高収率で目的物を得ており、おおむね

目標を達成できていると評価できる。

- テーマ 1.1、1.2 共に、それぞれ TPD 誘導体（有機 EL 素子）、アニオン性界面活性剤（PFC 代替洗浄剤）と出口イメージが明確になっている。
- 個別技術においては、基盤技術として高い水準で成果を挙げている。
- いずれのテーマも所期の目標値が達成されている。

<問題点・改善すべき点>

- 産業界へ供給すべき製品がまだ充分定まっていないため、実用化に向けての課題についてはより一層クリアにすべきである。
- 共同研究企業内での企業化にとどまらず、基盤技術としての社会的実施・実用化に対して見通しをつけるべきである。
- ファインケミカルの製造については、その付加価値と必要量は製品により異なる。基本計画の生産量 10kg/日は、目的化合物によっては必要としない。一方、製品によっては、基本計画の反応率、選択率、溶出金属量、触媒回収量についての数値目標は低く設定しすぎである。用途によっては、フロー法が抜群の威力を見せる場合もあり、多費品目少量生産を 1 つの反応容器でおこなう際は、フロー系は反応容器洗浄に難がある。酸素酸化では、安全性担保への目標が含まれていない。

これらの点は、例え研究のステージが学術寄りから開始されたとしても、NEDO という資金の位置づけからして、少なくともケーススタディで「何を目的化合物にした場合に、実用化する際の必要製造量、精製に要するコストから逆算した反応率、選択率、溶出金属量はどの程度か」を試算し、それをベースとした場合の本技術の完成度を提示する必要はあったのではないか。触媒コストや反応系に要するコストも製品の付加価値により評価が異なる。例えば、農薬の場合、医薬の場合、通常の化成品の場合、電子材料応用の場合等、場合に応じた試算までが成果に含まれていることが望ましい。

- テーマ 1.1：白熱灯、蛍光灯の代替照明との位置づけであるが、現在省エネ照明においては、LED の普及が期待されている。GHG 削減効果を評価するのであれば、LED との比較、さらには製品のライフサイクル全体での考察が必要。

テーマ 1.2：PFC 代替洗浄剤との位置づけであるが、普及量のイメージが明確でない。別途、フッ素の削減量が 8000 トン/年との提示があるが、このフッ素に代替する洗浄剤の生産量とそれを製造するための装置スケールのイメージが明確でない。

テーマ 1.3：触媒回収について未検討の部分が多く、出口イメージが明確でない。

- 1.1.のテーマに関してはスケールアップが不十分である。また、エネルギーやコスト面における考慮、さらには標的化合物の設定に具体性を欠くため、実用化の見通しを議論できるレベルに達していない。
- 1.2.のテーマについては、反応性が低い。TOF 値（時間当たりの触媒回転効率）の改善が望まれる。反応温度も下げる必要があるだろう。
- 1.3.のテーマについては、プロセスの経済的評価をとおして実用化イメージ・出口イメージをもっと明確にすることが望まれる。
- 検討課題として取り上げられているターゲット化合物の妥当性に疑問が残る。たとえば液晶モニタのシェアが有機 EL モニタに奪われたように、有機 EL 市場が現在の規模をいつまで維持できるかは見通しが立たない。これらのことを考慮すると、より一層の研究対象の拡大と、実用化観点の視野の拡大が遅れている。また個別テーマ 1.3.については、本票においても再三指摘しているように、明確な出口イメージの設定を急ぐべきであろう。
- 大学の優れた研究成果というシーズから出発した研究・開発なので、どうしても実用化の見通しが明確でない点が問題としてあげられる。また、シーズは反応という方法であるので、それをどのような具体的な化合物（製品）に適用するのかが絞ることが困難であった点も今後の課題であろう。
また、基本計画における目標がどこまで達成されたのか、もう少し具体的かつ明確に示す必要がある。
- 特異な触媒なので、触媒中に含まれる生成物の分離に要する時間も考慮した化合物の生産速度についての更なる考察が必要と思われる。

<今後に対する提言> <その他の意見>

- ・カップリング反応においては、副生するハロゲン化水素の処理の検討が今後必要と思われる。酸素酸化反応においては、貴金属の酸化と生成するカルボン酸による酸化された貴金属の溶出がバッチではなく連続法では顕在化する可能性があるため、この辺の検討が必要と思われる。ジカルボン酸の脱水反応で MS-3A あるいは MS-5A を使用する場合、共沸蒸留で水を除く際にモリキュラーシーブの構造破壊が懸念されるので、注意が必要と思われる。
従来技術の正確な評価も難しいとは思われるが、いずれの課題においても、少なくとも原単位や生産性の比較を行い、また、合成した化合物のユーザーでの評価を経て、成果の実用化が達成されることを期待する。
- ・本テーマは、優れた学術基盤に立脚しており、研究チームは学術から実用をめざす立場からすれば、よく研究を実施している。実用化の見通しについて委員会で多くの議論があったが、これは、むしろ、学術研究をファインケミカル製造用実用基盤研究へと NEDO の委託で実施する際に一般的に考えるべ

き事項にある。ファインケミカル製造は、製品により求められる要求が違い、一律に設定することができない。その点を整理せずに研究に入ったことから、成果の実用性が見通しが見えにくい説明となったものと考えられる。今後、研究チームというよりはNEDOの計画における目標設定法の改善を期待する。

- テーマ 1.1：TPD 誘導体以外にも、アリアルアミン構造を有する多くの医薬品合成などに適用が期待されるとのことであるので、当該技術について広く情報発信を行い、他の分野への波及にも注力していただきたい。

テーマ 1.2：本触媒が、試薬会社にて大量供給技術確立が進められているとのことですが、今後のフォローアップをお願いしたい。

テーマ 1.3：今後も実用化へ向けて研究を継続していただきたい。

- 開発技術の基盤技術としての普遍化を、GSC 基盤技術として公知化し適用例を増すことによって図ってほしい。
- NEDO プロジェクトとして、優れたシーズを迅速に実用化に結び付けるシステムを構築する工夫が必要ではないだろうか。
- 真の意味で革新的な技術をめざすのであれば、白金等の貴金属類の利用から脱却する技術の開発へ繋げていくことが望ましい。
- 実用化に向けての課題が明確に定まれば、基盤技術から本格的な実用化研究に移行できるであろう。
- 1.1.のテーマに関しては、具体的用途先を見据えた標的物質の設定が不可欠であり、そのための製造方法の確立と実用化に向けた検討が重要になる。

2. 2 革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発

1) 研究開発成果、実用化の見通し、今後に対する提言

水中で機能するエステル化触媒や固定化された高性能水素化触媒・酸化触媒といった大学での優れた研究成果を実用化に結びつけようという意欲的な研究である。革新的な概念を持つだけでなく、比較的規模の大きなプラント、ファインケミカル製造装置、試薬サンプル供給の検討、という質の違う目標を設定し、それに見合う成果を得ており、新しい触媒の実用基盤を構築するよい実例を提供している。

しかしながら、エステル化の実用研究については、このプロセスをプロジェクトにおいて完成させることは難しいと思われる。技術としては非常に優れた面をもっているので、他の製造プロセス技術などへの適用も今後検討していくべきではないだろうか。

なお、2.3.オスミウム触媒に関しては、オスミウムの回収率がいくら高くても使用する以上、潜在的な危険性（毒性）は避けられない。また、オスミウムの溶出が廃液処理や製品のスペックに問題を及ぼすことが懸念されるので、継続的に使用してもらえるかユーザー評価を慎重に行うことが必要である。

<肯定的意見>

- 水中で機能するエステル化触媒や固定化された高性能水素化触媒・酸化触媒といった大学での優れた研究成果を実用化に結びつけようという意欲的な研究で、十分な開発成果が得られている。
とくにエステル化触媒については、本プロジェクトでめざしたプロセスだけでなく、今後多様なプロセスに実用展開可能であることが示されたことは、大きな意義がある。
また、酸化触媒については、工業的製造の点からも画期的であり、今後の実用化が大いに期待できる。
- 東大チームの独創的な基礎研究成果を、企業とともに実用化を検討したものである。3つのテーマが、水中で脱水する、フロー法での規模の大きい水素化、有害金属触媒の固定化により安全な触媒を合成する、という革新的な概念を持つだけでなく、比較的規模の大きなプラント、ファインケミカル製造装置、試薬サンプル供給の検討、という質の違う目標を設定し、それに見合う成果を得ている。また、2.1や2.2では、目的にあった触媒の改良、プロセスや装置の改善、2.3ではサンプル供給を満たすスケールアップを実施しており、新しい触媒の実用基盤を構築するよい実例を提供している。
- オレフィンの水素化反应用触媒としては、耐久性も含めた触媒性能が高く、実用的レベルに近い開発ができていると評価できる。活性汚泥削減と酢酸回

収を目指した酢酸エチル製造プロセスの開発は極めてチャレンジングな課題であるが、平衡反応であるエステル化に油水二層系をうまく適用している。ジヒドロキシル化やアルデヒド合成用固定化触媒の開発においては、Os 以外の単元あるいは複合貴金属触媒に期待できそうなデータが見られる。

- 2.1. 実用化に向けた実質的な検討が着実になされており、基盤技術の獲得に進展があった。
- 2.2. フロー系を用いる実用性の高い二重結合還元用の触媒が開発され、その性能は目標値を上回っている。
- 2.3. 希少金属使用量、有機溶剤、廃棄物等の大幅削減が達成されており、所期の目標が十分達成されている。
- テーマ 2.1: プラント排水から酢酸を酢酸エチルとして回収するという出口イメージが明確になっている。
- テーマ 2.2: レシチン誘導体の水素化という出口イメージが明確になっている。また、ベンチスケールでの反応装置（カラムリアクター）を製作し、実用化検討も実施されている。
- 2.1、2.2 とともに波及効果が大きく今後の実用化に期待できる成果が得られている。2.3 については毒性の高い Os を固定化し溶出を最小限に抑えながらも高い活性を有する触媒を開発したことは画期的である。
- 水系における触媒技術の開発という観点において、本研究成果がもたらす効果はとても大きく、今後のさらなる開発が待たれる。
- 個別技術においては、基盤技術として高い水準で成果を挙げている。

<問題点・改善すべき点>

- エステル化の実用研究については、このプロセスをプロジェクトにおいて完成させることは難しいと思われる。技術としては非常に優れた面をもっているため、他の製造プロセス技術などへの適用も今後検討していくべきではないだろうか。
- 水素化システムについては、実用化レベルでの他の類似技術との差別化やノウハウの構築を今後どのように行うかが課題であろう。
- 希薄酢酸の回収においては、得られる酢酸エチルのコストが現行法に比べ競争力を持つのは製造スケールの違いで困難と思われる。酢酸エチル控除価格、また、活性汚泥処理コストについても評価が難しい。固定化金属触媒試薬の開発においては、オスミウムの回収率がいくら高くても使用する以上、潜在的な危険性（毒性）は避けられない。また、オスミウムの溶出が、廃液処理や製品のスペックに問題を及ぼすことが懸念されるので、継続的に使用してもらえるかユーザー評価を慎重に行うことが必要と思われる。

- 個別テーマ1と同様に、問題点はNEDOの研究開発目標が、回収技術、ファインケミカル製造、試薬合成に必ずしも合致していないため、当初設定された目標、数値目標はクリアしていても、実プロセスとしてはさらに検討すべきことが多くある。2.1については、コスト面で実用化の見通しは必ずしも明るくないとされ、2.2においては、製造コストや触媒回収技術コストまで含めた既存プロセスとの比較が報告された内容のみでは十分であるとは判断できなかった。2.3では、サンプル供給先の想定が明確でなく、用途により金属リーチング等に求められる条件が異なることを考えると、実用化の見通しについて、報告された内容からは十分な検討がなされているとは判断できなかった。
- 2.1.無機塩を用いない高収率な水中エステル化触媒システムの開発が必須である。
- 2.2.本触媒系を用いて合成すべき、より効果的な目的化合物を選択すること。触媒のコストダウンと触媒 TOF 値の向上が課題である。
- 2.3. カンプトテシンの合成に Sharpless のキラルリガンドが用いられているが、不斉収率に不満が残る。今後は、基礎研究を通して固定化触媒に有効なより優れた不斉配位子を独自に開発することが望まれる。
- テーマ 2.1：触媒が固定化触媒として反応場に存在するため、反応は物質移動律速となることが予想されるので、数十 L スケールのベンチスケール設備での検討が必要。また、プロセスの経済性評価まで実施されているが、反応終了液から触媒を分離回収する設備の評価が必要。
- テーマ 2.2：カラムリアクターでの水素化反応は、ホットスポット（局所的な異常発熱）による触媒の劣化が予想されるので、温度分布の測定及びリアクターへのジャケットからの冷却等の対策が必要。
- テーマ 2.3：6種類の触媒が開発されているが、出口イメージが明確でない。
- 適用したプロセスによっては、たとえば 2.1 はメインの製造プロセスの改変ではなく、そこから出てきた副生成物の回収技術である。2.3 はプロジェクトの範囲が製造プロセスの前の試薬製造にとどまっているので、2.2 のようなメインの製造プロセスに揃えて、プロジェクトの全体目標に沿ったものにすべきである。
- 2.3 の Os 溶出は製品によっては更なる改善が必要となる可能性があり、今後の進展に期待したい。

<今後に対する提言> <その他の意見>

- ・2.3.オスミウム触媒に関しては、回収率がいくら高くても潜在的な危険性（毒性）は避けられない。特に大量スケール合成への適用においては十分な配慮

が必要となる。将来的には抜本の見直しが必要となると思われるので、実用化に当たっては代替触媒の開発が強く望まれる。

- 希薄酢酸回収においては、本開発の特徴である水中エステル化の収率はかなり高いレベルにきていると考えられるが、触媒の耐摩耗性など長期安定性の確認が必要と思われる。プロセス全体としては、希薄な酢酸を如何に濃縮するかが残る課題と思われるので、この点の改良に期待したい。水素化反応システム開発においては、従来触媒の活性低下要因がイオウによる被毒であるならば、安価なガードカラムで硫黄分を除去すれば、繰り返し、あるいは、連続使用でき、コスト競争力に影響を及ぼす可能性があるのではないだろうか。また、付加価値の高い多くのターゲット化合物の品ぞろえが重要になってくるものと推定される。固定化触媒試薬の開発では、基質がアクセスできる空間があるということは、包摂している Os が溶出する可能性を示唆するように思う。杞憂であればいいが、更なる溶出防止対策を考えておいたらと思う。貴金属を触媒とする酸化反応においても条件によっては溶出が起こりうるので、合金化等の既知の技術との複合化が必要かも知れない。
- 本テーマは、優れた学術基盤に立脚しており、企業とともに実用化を検討した点で優れた試みである。一方、実用化の見通しについては、研究開発マネジメントの問題点が個別テーマ1と同様にあり、今後、テーマ設定時に製品に求められる条件設定をこまめにおこない、評価項目を適切に設定する必要がある。とくに、試薬としてのサンプル製造が本プロジェクトの実用化にあたるかどうか、やや疑問を感じる。また、集中研を作って研究を実施して得た相乗効果について、将来実用化によって更に明らかにされることを期待する。
- テーマ 2.1：排酢酸を酢酸エチルといった汎用化学品で回収する場合、精製コスト（蒸気代）の変動費に占める割合が大きいため、精製系のプロセス見直しも必要では。
- テーマ 2.2：水素化反応は基盤化学反応なので、本技術の波及・展開を期待します。今後のフォローアップをお願いしたい。
- テーマ 2.3：今後も実用化へ向けて研究を継続していただきたい。
- 大学の基盤技術を企業の実用化技術に迅速に展開するために、プロジェクトリーダーと企業研究者のコミュニケーションが密にとれる集中研方式は大いに有効であったと思われる。今後もこのようなシステムを積極的に利用すべきである。
- 2.1、2.2 に関しては不純物の触媒活性への影響、プロセス設計、触媒コストの低減、触媒寿命の評価を今後きちんと行うことにより、実用化をより一層現実的なものとする研究開発が望まれる。

- 成果の社会的実施・実用化に関しては、本事業の戦略的目標に沿う形で、波及性のある基盤技術として PL および所属機関の主導のもとトータライズしてほしい。
- 同一技術における貴金属類の使用量削減、卑金属による代替の可能性を探ることが望ましい。また同様技術の適用範囲の拡大もはかるべきである。
- 2.1 に関しては生産プロセスへの適用が明確になっているので、その方向で発展・実用化願いたい。

2. 3 革新的酸化プロセス基盤技術開発

1) 研究開発成果、実用化の見通し、今後に対する提言

水中の過酸化水素を酸化剤として、油層中にある基質をエポキシ化あるいは酸化して高付加価値のファイン・スーパーファイン製品を得ている。酸化により水のみが副生する触媒反応をうまく設計し、多くのテーマで目標を達成している。また、廃棄物の問題解決以外にも過酸化水素の使用が製品の品質向上に大いに貢献することが明らかになった点も意義深く、受け皿となる民間企業の顔ぶれも多岐にわたり、開発技術が限定的でないことも評価できる。

しかしながら、画期的な実用化例となりうると期待できる成果から、研究上は面白いが実用化までにはまだ乗り越えなければならない点が多く、現段階では実用化見通しがつきにくいものまで存在する。いずれのテーマにおいても、触媒の長寿命化、耐久性の向上、そして触媒システムとしてのリサイクル化が今後重要である。

<肯定的意見>

- 水中の過酸化水素を酸化剤として、油層中にある基質をエポキシ化あるいは酸化して高付加価値のファイン・スーパーファイン製品を得ている。酸化により水のみが副生する触媒反応をうまく設計し、多くのテーマで目標を達成していると評価できる。共通基盤技術を担当する部署と、個別技術を開発する部署の連携も、技術のコンタミを考慮しつつうまく進めている。
易加水分解性基質の酸化技術開発における反応方式の選択は、用いる化合物の物性をうまく活用しており高く評価する。
- 原理的に水以外の廃棄物を出さない過酸化水素を酸化剤として実用的な酸化プロセスを開発したもので、グリーンサステイナブルケミストリーの立場から大いに評価できる。また、廃棄物の問題解決以外にも過酸化水素の使用が製品の品質向上に大いに貢献することが明らかになった点も意義深い。
- 出口イメージが明確で、しかも簡便、安価な技術により、プロセスを構築している点は評価が高い。受け皿となる民間企業の顔ぶれも多岐にわたり、開発技術が限定的でないことも評価できる。
- 3つのテーマの中では、最も実用化に近い技術開発である。各テーマ毎に評価すべき項目が異なるが、3.2ではハロゲンフリーエポキシ化技術として、ハロゲンの残留を嫌う用途をもつ目的物への実用性ととともに、同様なハロゲンフリーが好ましい用途への応用性が期待される。3.3はポリマー主鎖へのエポキシ基の導入、3.4は分解しやすいピネン等のエポキシ化、3.5はバイヤービリガー酸の過酸化水素での実用化を目指しており、いずれも開発成果としては優れた内容である。3.1の本プロジェクト中での位置づけが、NEDO プロジ

エクトが実用化指向であるとすればわかりにくいですが、内容的には優れたものを含んでいる。

- 提案された過酸化水素による酸化反応技術シーズが、様々な製造プロセスの産業ニーズに対して応用可能であることを示し、また大部分の課題で実用レベルを見据えた技術開発が進められた点は高く評価できる。応用範囲が広く実用的であることを示した点が評価できる。特に 3.4 では反応工学的な工夫、3.5 では触媒の固体化の工夫など技術的なブレイクスルーをもたらした技術開発が成されたことは特筆すべきである。
- どのテーマに関しても、所期の目標値以上の成果が得られており良い。
 - 3.1. については、特に鉄触媒における今後の展開に期待がもたれる。
 - 3.3.や 3.4.については、触媒系の改良に加えて独自の装置開発をとおして実用化に近づけたことを評価したい。
- テーマ 3.2、3.3、3.4、3.5 は出口イメージが明確になっており、今後の開発のマイルストーンも明確である。
- いずれの詳細開発テーマも、基盤技術として高い水準で成果を挙げている。

<問題点・改善すべき点>

- テーマ 3.1：ユーザーからの引合有りとのことであるが、出口イメージが明確でない。
 - テーマ 3.2：波及効果拡大の意味で、半導体封止材以外の用途開発もお願いしたい。
 - テーマ 3.3：ポリ乳酸の改質剤あるいは相溶化剤としての実用化において、CO₂ 削減効果を評価する場合、反応工程、精製工程等プロセス全体のエネルギー使用量を考慮に入れる必要がある。
 - テーマ 3.4：リアクターは斬新な設計だが、スケールアップ・ファクタをつかみ切れていないところがある。
 - テーマ 3.5：精製溶剤の回収・再利用の検討が必要。
- 3 テーマのうち最も実用に近いことから、評価は実用化見通しについてを中心におこなうべきと考えるが、他のテーマと同様に、ファインケミカルプロセスの特徴である、個々の目的化合物、および、それをどこで用いるかによりスペックが異なるため、評価に幅がある。4つのテーマも、画期的な実用化例となりうると期待できる成果から、研究上は面白いが実用化までにはまだ乗り越える点が多く、現段階では実用化見通しがつきにくいものも存在する。テーマ毎に、「本テーマが考える実用化の定義」という内容の記述も見られるが、この定義については、研究開発マネジメントとしては統一したものを作る必要がある。

- いずれのテーマにおいても、触媒の長寿命化、耐久性の向上、そして触媒システムとしてのリサイクル化が今後重要である。

3.2.については、ジエポキシ生成物の反応率および選択率のアップが課題である。

いずれのテーマにおいても、反応温度の低下と触媒の TOF 値の向上が望まれる。

- 実用化・成果を判断するにあたり、既存技術との比較が十分に出来ているのか分かり難い。既存技術の詳細は分からないとは思いますが、せめて原材料費での比較は示すべきと思う。

個別課題では、わずか2点あるいは3点のデータ点で直線や曲線が引かれているものがあり、いささか乱暴に思えるものもあった。

- 産総研の基盤技術をもとに個々の企業による実用化研究を行う際に、共通する技術開発や問題解決において、企業間の連携がもう少しできれば、さらに研究が進展したのではないだろうか。

- 指摘すべき問題点はみつからない。強いて挙げるならば、工業規模へのスケールアップ時における過酸化水素利用の安全性の確保に関し、詳細な検討を求めるところだろうか。

<今後に対する提言> <その他の意見>

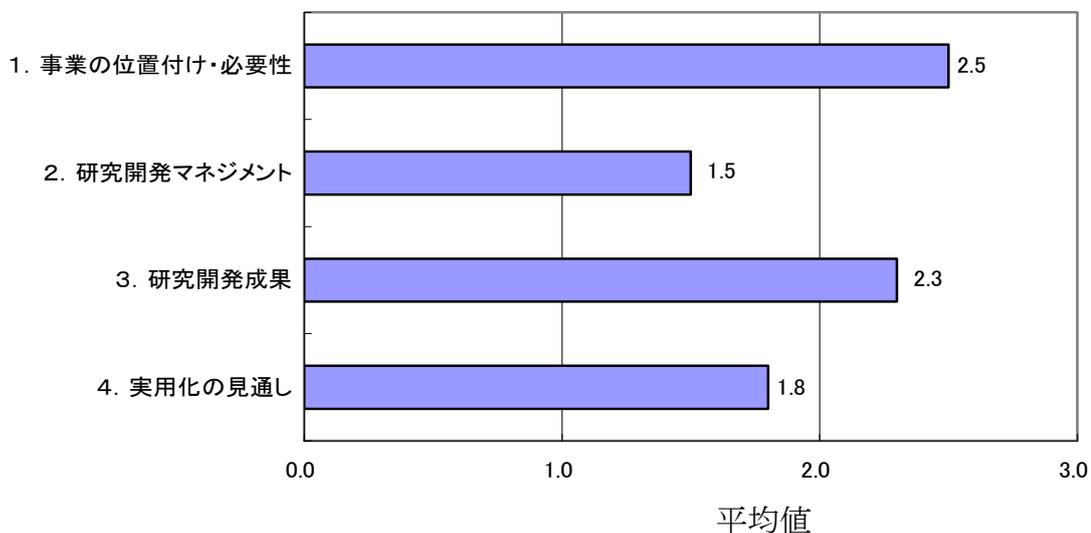
- ・企業による実用化に近い研究開発において、共通する事項について企業間の連携を効果的に行うシステムの構築は今後の課題と思われる。
- ・企業と共同研究で実用化を試行した点で同様な立脚点をもつ東大チームと比較して、産総研の基盤技術は3.1~3.5までほぼ同じであることから、むしろ、実用化見通しについては、これらを俯瞰して、共通の技術課題を分析し、産総研過酸化水素触媒プロセスとしての実用化への利点、問題点を明らかにし、可能であれば公表することが日本の科学技術の発展に利するものと考えられる。集中研方式の利点とともに、将来の開示が期待される。
- ・ファイン・スーパーファイン製品を対象としているので、過酸化水素の原単位が理論量を超えていてもコストにはあまり影響しないのかも知れないが、後処理等が必要となるのでできるだけ理論量で反応できるようにさらなる技術の向上を期待したい。
- ・製品として市場競争力のあるターゲットをどこに置くか、ターゲットなる製品に必要とされる不純物レベルなどはどの程度であり、そのための技術的な改善点はどこであるかを今後明確にする必要が出てくる。
- ・成果の社会的実施・実用化に関しては、本事業の戦略的目標に沿う形で、波及性のある基盤技術として PL および所属機関の主導のもとトータライズし

てほしい。

- 3.4.1については、テレピン油以外への適用と、酸化生成物の用途拡大が望まれる。 α -ピネンオキシドの光学純度は高いと思われるので、これを中間体とするファインケミカル分野への展開が期待される。
- 酸化剤としての過酸化水素の利用は、コンセプトが明確であり、GSCとしての波及効果も大きいので、今後の進展を期待する。不断のフォローアップをお願いしたい。
- エポキシドは活用範囲が広い有用な化合物であるので、さらなるユーザーの開拓を急ぐことが望ましい。

3. 評点結果

3. 1 プロジェクト全体



評価項目	平均値	素点 (注)							
		A	A	A	A	A	B	B	C
1. 事業の位置付け・必要性について	2.5	A	A	A	A	A	B	B	C
2. 研究開発マネジメントについて	1.5	B	B	B	C	C	B	C	C
3. 研究開発成果について	2.3	A	A	B	A	B	B	C	B
4. 実用化の見通しについて	1.8	B	B	B	B	C	B	B	C

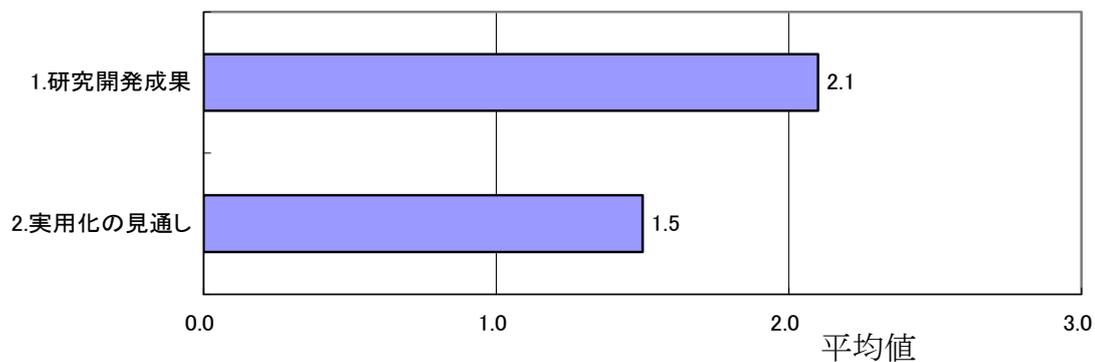
(注) A=3, B=2, C=1, D=0 として事務局が数値に換算し、平均値を算出。

〈判定基準〉

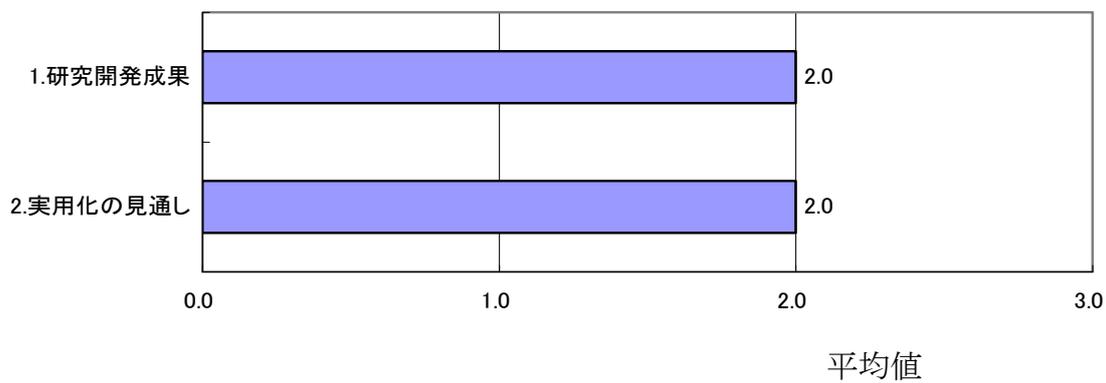
1. 事業の位置付け・必要性について	3. 研究開発成果について
・非常に重要 →A	・非常によい →A
・重要 →B	・よい →B
・概ね妥当 →C	・概ね妥当 →C
・妥当性がない、又は失われた →D	・妥当とはいえない →D
2. 研究開発マネジメントについて	4. 実用化の見通しについて
・非常によい →A	・明確 →A
・よい →B	・妥当 →B
・概ね適切 →C	・概ね妥当であるが、課題あり →C
・適切とはいえない →D	・見通しが不明 →D

3. 2 個別テーマ

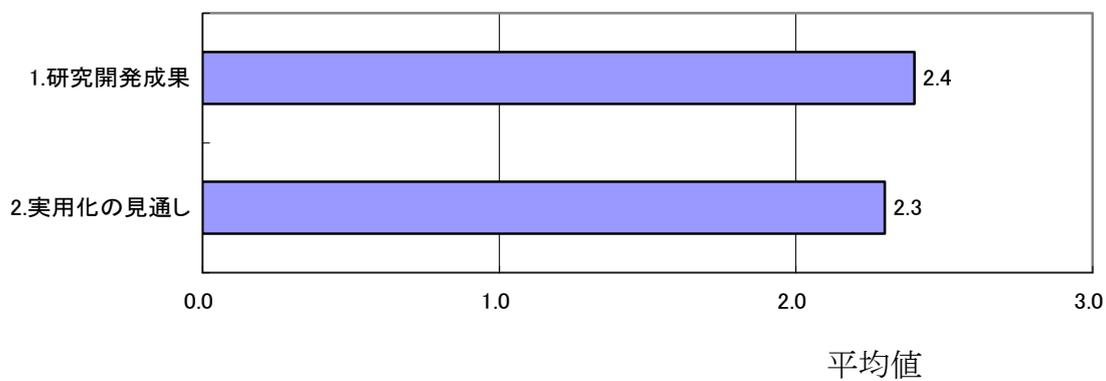
3. 2. 1 高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発



3. 2. 2 革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発



3. 2. 3 革新的酸化プロセス基盤技術開発



個別テーマ名と評価項目	平均値	素点 (注)							
3. 2. 1 高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発									
1. 研究開発成果について	2.1	A	B	B	A	B	B	C	B
2. 実用化の見通しについて	1.5	C	B	B	C	C	B	C	B
3. 2. 2 革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発									
1. 研究開発成果について	2.0	A	A	B	B	B	B	C	C
2. 実用化の見通しについて	2.0	B	A	B	B	B	B	B	C
3. 2. 3 革新的酸化プロセス基盤技術開発									
1. 研究開発成果について	2.4	A	A	B	A	B	B	B	B
2. 実用化の見通しについて	2.3	A	A	B	B	B	B	B	B

(注) A=3, B=2, C=1, D=0 として事務局が数値に換算し、平均値を算出。

〈判定基準〉

1. 研究開発成果について

- ・非常によい
- ・よい
- ・概ね適切
- ・適切とはいえない

2. 実用化の見通しについて

- A ・明確 →A
- B ・妥当 →B
- C ・概ね妥当であるが、課題あり →C
- D ・見通しが不明 →D

第2章 評価対象プロジェクト

1. 事業原簿

次ページより、当該事業の事業原簿を示す。

グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発
「有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的
プロセス及び化学品の開発」・「廃棄物、副生成物を
削減できる革新的プロセス及び化学品の開発」

事業原簿

【公開】

担当部	独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 環境部
-----	--------------------------------

目次

- ・概要 A-1
- ・用語集 B-1

I. 事業の位置付け・必要性について

- I.1 NEDOの関与の必要性・制度への適合性
 - I.1.1 NEDOが関与することの意義 I-1
 - I.1.2 実施の効果 I-9
- I.2 事業の背景・目的・位置付け

II. 研究開発マネジメントについて

- II.1 事業の目標 II- 1
- II.2 事業の計画内容 II- 3
- II.3 研究開発の運営管理 II-2 1
- II.4 研究開発成果の実用化に向けたマネジメントの妥当性 II-2 4
- II.5 情勢変化への対応 II-2 8
- II.6 評価に関する事項 II-3 1

III. 研究開発成果について

- III.1 事業全体 III. 1. 1-1
- III.2 個別テーマ
 - III.2.1 高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発 III. 2. 1. ①-1
 - III.2.1. ①錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の開発研究
 - III.2.1. ②ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究
 - III.2.1. ③エステル、アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究
 - III.2.2 革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発 III. 2. 2. ①-1
 - III.2.2. ①アクア触媒によるアセトアルデヒド製造プラント排水中の希薄酢酸回収技術
 - III.2.2. ②固定化触媒を活用する革新的水素化反応システム開発
 - III.2.2. ③グリーンプロセスのための高分子固定化金属触媒試薬の開発
 - III.2.3 革新的酸化プロセス基盤技術開発 III. 2. 3. ①-1
 - III.2.3. ①多官能性基質の酸化技術開発
 - III.2.3. ②高分子量基質の酸化技術開発
 - III.2.3. ③易加水分解性基質の酸化技術開発
 - III.2.3. ④難酸化性基質の酸化技術開発
 - III.2.3. ⑤過酸化水素を用いた反応系の基礎研究

IV. 実用化の見通しについて

- IV.1 高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発・・・IV.1-1
- IV.2 革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発・・・・・・・・・・IV.2-1
- IV.3 革新的酸化プロセス基盤技術開発・・・・・・・・・・IV.3-1

(添付資料)

- ① ナノテク・部材イノベーションプログラム基本計画
 - 1. 基本計画 H21.4.1・・・・添付資料①-1
 - 2. 基本計画 H22.4.1・・・・添付資料①-2
 - 3. イノベーションプログラムについて H21.4.27
・・・・・・・・添付資料①-3

- ② プロジェクト基本計画
 - 1. 経済産業省 H20.3・・・・添付資料②-1
 - 2. NEDO H23.7・・・・添付資料②-2

- ③ 技術戦略マップ（分野別技術ロードマップ）H22.6
・・・・・・・・添付資料③

- ④ 事前評価関連資料
 - 1. NEDO POST(2) H19.12・・・・添付資料④-1
 - 2. NEDO POST(3) H20.2・・・・添付資料④-1
 - 3. 事前評価書 H20.2.29・・・・添付資料④-2

- ⑤ 論文、学会発表、特許等のリスト
 - 1. 分子研G・・・・添付資料⑤-1
 - 2. 東大G・・・・添付資料⑤-2
 - 3. 産総研G・・・・添付資料⑤-3

概要

		作成日	平成24年8月23日	
プログラム(又は施策)名	ナノテク・部材イノベーションプログラム			
プロジェクト名	グリーン・サステナブルケミカルプロセス基盤技術開発 「有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発・廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発」	プロジェクト番号	P09010	
担当推進部/担当者	担当推進部 2009.04-2010.06 環境技術開発部 環境化学グループ 2010.07-現在 環境部 環境化学グループ 担当者 主任研究員 山下 勝 2009.04-2009.08 主査 鈴木 毅之 2009.04-2011.03 主幹 江口 弘一 2009.08-2010.04 主査 新井 唯 2009.04-2012.03 主任研究員 岩田 寛治 2010.04-現在 主査 西川 賢之 2010.05-2012.06 主査 石毛 悦子 2012.03-現在			
0. 事業の概要	<p>化学品の製造プロセスにおけるシンプル化、クリーン化、省エネ化、原材料・資源の多様化・有効利用、さらに、廃棄物の減容化、容易なりサイクル等を実現し、産業競争力強化、国際規制の先取りを図って、将来にわたっても持続的に化学品を製造するために必要な新規なグリーン・サステナブルケミカルプロセス（以下「GSCプロセス」という）の研究開発を行っている。</p> <p>研究開発課題は、①有害な化学物質を削減できる、又は使わない、②廃棄物、副生成物を削減できる、③資源生産性を向上できる、④化学品原料の転換・多様化を可能とする、等による独創的で革新的な化学プロセスを通じた開発であり、これら研究開発を通じてプロセスイノベーションやマテリアルイノベーションを早期に実現することを目的とする。これにより、わが国全体の産業競争力強化と環境負荷低減を飛躍的に促進することができ、新産業創造戦略及び世界全体をリードしたサステナブルな産業構造への貢献が期待できる。</p> <p>本事業では、特に高機能な化学品の持続的製造を可能とする基盤技術の確立を直接的な目標として、①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発、②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発、を3つの研究グループによって行った。</p>			
I. 事業の位置付け・必要性について	<p>1992年の環境と開発に関するリオ宣言を契機として持続可能な発展（Sustainable Development）のための取組みが各国で開始される中、化学産業も従来の機能等を優先させたものづくりの結果である大量消費・廃棄型プロセスから脱却し、環境負荷低減を目指す方向へシフトが求められている。</p> <p>本事業は、上記のリオ宣言を契機として化学産業が取り組んでいくこととされた持続可能な産業へ転換するという課題達成の切り札として、プロセスや製品の設計に関する指針として明確に打ち出された米国のGC、及び産業競争力の強化の観点も強調されている欧州のSCを踏まえ、OECDにおいて促進のための取組みが行われているSC/GCについて、我が国としてもGSCという理念の下に技術開発を行うものであり、国際的な取組みの一環を成すものと位置づけられる。</p> <p>即ち、GSCは、環境及び経済が両立するシステムの実現を図る具体的なものづくり技術としての役割を化学が積極的に担っていくこととするのが不可欠であった。特に、本事業は、従来の化学プロセスの延長上にはない革新的なGSCプロセスの実用化を目指したものであって、鍵となる革新的触媒技術等の技術シーズはアカデミア等が有しており、また企業にとってプロセスの実用化開発自体の難易度も極めて高いことに加えて、事業化に向けては、例えば、開発したプロセスがGSCというだけでは製品の価格で投資コストを回収することは困難であり、製品に新たな付加価値を付けるためにはユーザ側との「摺合わせ」も行っていく必要がある等極めてリスクの高い面があり、早期の事業化に向けては、それらについても実用化研究の段階から考慮していく必要があり、NEDOのマネジメント機能を活かして産学連携の下に実施することが妥当であった。</p> <p>なお、本事業は、第3期科学技術基本方針の重点推進4分野のうちのものづくり技術分野に位置づけられる。本事業は平成19年度の総合科学技術会議においてS評価（「特に重点的に実施すべき」）を受けた新規事業であり、優先的に実施すべきテーマとなってきた。</p> <p>また、本事業を含むGSC基盤技術開発事業は、経済産業省が実施しているナノテク・部材イノベーションプログラムのIV. エネルギー・資源・環境領域にグリーン・サステナブルケミカルプロセス技術として位置付けられている。</p>			

II. 研究開発マネジメントについて

事業の目標

本事業では、既存の化学品等の製造において、これまでにないシンプル化(高い原子効率)、クリーン化が実現できる革新的プロセス及び化学品の実用化のための基盤研究開発を行った。

1. 最終目標 (基本計画本文より抜粋)

① 有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発

- ・ハザードの大きな溶媒、化合物等の使用に対して大幅な削減が見込めること。
- ・ライフサイクルに亘り大幅な省エネ効果、安全性、軽量化、長寿命化等に大幅な改善が見込めること。

② 廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発

- ・e-ファクター(副生成物量(=産業廃棄物量)/目的生成物量)の大幅な低減、廃棄物、排水量等に対して大幅な削減が見込めること。
- ・ライフサイクルに亘り大幅なリサイクル率(カスケードリサイクル含む)向上、軽量化、長寿命化等の大幅な改善が見込めること。

上記目標を達成するために、以下の3つの研究開発項目を設定した。
項目別最終目標は下記のとおり。

2. 詳細な最終目標 (基本計画「別紙」より抜粋)

① 有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発

(1) 水、アルコール等で機能する触媒の高機能化、回収・再生及び製造に関する共通基盤技術

① 水、アルコール等で機能する触媒の活性・耐久性向上

- ・水、アルコール等で機能し、反応率80%以上、選択率90%以上の触媒プロセスを開発する。

② 触媒反応プロセス、分離回収・再生技術に関する実用化基盤技術

- ・生産量(処理量)10kg~数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待できる技術レベルを確立すること。

② 廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発

(1) 新規な触媒固定化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術

① 高活性、高選択性かつ再生可能な新規な固定化触媒プロセスの開発

- ・反応率80%、選択率90%、溶出金属回収率98%以上。

② 新規な固定化触媒による実用化プロセスに関する設計・開発

- ・生産量10kg~数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。

(2) 高選択酸化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術

① 高性能触媒による高活性、高選択性酸化触媒プロセスの開発

- ・オレフィン類やケトン類に対して高活性、高選択性を有する酸化触媒プロセスを開発する。なお、オレフィン類の選択酸化反応では反応率80%以上、選択率90%以上、ケトン類の選択酸化反応では反応率80%以上、選択率80%以上とする。

② 高性能触媒による実用化プロセスに関する設計・開発

- ・生産量10kg~数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待できる技術レベルを確立すること

事業の計画内容	主な実施事項	H21fy	H22fy	H23fy
	【分子研G】 高機能不均一触媒の開発と 環境調和型化学プロセスの研究開発	←		→
	【東大G】 革新的アクア・固定化触媒 プロセス技術開発	←		→
	【産総研G】 革新的酸化プロセス基盤技術開発	←		→
開発予算 (会計・勘定別に 事業費の実績 額を記載) (単位：百万円)	会計・勘定	H21fy	H22fy	H23fy
	一般会計	5 4 6	5 0 0	3 5 2
	特別会計	-	-	-
	総予算額	5 4 6	5 0 0	3 5 2
開発体制	経産省担当原課	製造産業局化学課		
	プロジェクトリーダー	【分子研G】 大学共同利用機関法人自然科学研究機構 分子科学研究所 教授 魚住 泰広 【東大G】 国立大学法人 東京大学 教授 小林 修 【産総研G】 独立行政法人 産業技術総合研究所 研究環境安全本部 本部長 島田 広道		
	委託先	【分子研G】 大学共同利用機関法人自然科学研究機構 分子科学研究所 再委託先: 国立大学法人 名古屋大学 【東大G】 国立大学法人 東京大学 昭和電工株式会社 日光ケミカルズ株式会社 和光純薬工業株式会社 再委託先: 国立大学法人 電気通信大学 東京理化器械株式会社 【産総研G】 独立行政法人産業技術総合研究所 昭和電工株式会社 電気化学工業株式会社 荒川化学工業株式会社 JNC株式会社 再委託先: 国立大学法人 東京大学 国立大学法人 東京工業大学		

<p>情勢変化への対応</p>	<p>(1)経済産業省からNEDOへの事業の継承 本プロジェクトは平成20年度に経済産業省で開始し、平成21年度からNEDOの事業として継承した。継承するにあたり、平成20年度事業成果を踏まえ、技術検討委員会で妥当性の審議を行い、継承することを了承された。</p> <p>(2)加速 プロジェクトの成果が顕著であるものの実用化を促進すべく、4度に渡り加速財源を投入した。その結果、以下の成果が得られた。 ・東大Gにおいてオスmium等の高分子カルセラド型触媒の分析に不可欠である金属量の分析が可能となり、市場供給用の触媒合成の開発が加速された。 ・産総研G開発項目①において、当初予定になかった半導体封止材用途での開発が実施でき、平成25年度末に上市予定。 ・産総研G開発項目②において、平成23年度実施予定であったベンチ設備による検討を前倒しで実施でき、サンプル供試の計画を早めることが可能に。 ・産総研G開発項目④において、平成23年度実施予定であったベンチ設備による反応を前倒しで設計することができ、大量生産を開始する予定時期を2年早めることができた。 ・分子研Gにおいて試料検体を高効率で容易にスケールアップ可能な合成条件を確立し、平成23年度内に複数回の試料提供を実現した。 ・東大Gにおいてフロー反応装置での反応スケールアップ検討が順調に展開し、平成24年中に本プロジェクトでの開発プロセスに生産切り替え予定。</p>	
<p>評価に関する事項</p>	<p>事前評価</p>	<p>平成19年12月にNEDO POST2実施 平成20年2月にNEDO POST3実施 平成20年2月29日に内部評価実施 担当部：バイオテクノロジー・医療技術開発部</p>
	<p>事後評価</p>	<p>平成24年9月14日、21日に事後評価分科会を開催 担当部：評価部</p>
<p>Ⅲ. 研究開発成果について</p>	<p>【分子研G】高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発 ①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発 1)水、アルコール等で機能する触媒の高機能化、回収・再生及び製造に関する共通基盤技術 目的の芳香族アミノ化反応、芳香族カップリングは完全水系条件にて達成している。反応率、選択率は最高96%に達している。また触媒の回収は定量的であり、その再利用実験においても単離収率(反応率×選択率)90%を超えている。また金属漏出はICP分析の検出限界以下。標的とするホール輸送剤(正孔輸送剤)ベンチスケール装置での合成プロトコルは確立されている。現段階でスケールアップは数十グラム/日に留まっているものの、これらホール輸送剤はその高機能性から年産5~10キログラムの製造によって世界トップシェアの製造プロセスとなりうる。すなわち現状の世界需要に鑑みて数十グラム/日の生産能力は特段のスケールアップ検討の必要なく、NEDOの開発目標の眼目を達成するものと判断される。</p> <p>②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発 (1)新規な触媒固定化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術 テーマ「ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究」においては、目的とするアルコール類の酸素酸化反応は完全水系条件にて達成している。反応率、選択率は99%以上。触媒回収は定量的であり、さらに進んで連続フロー反応系を確立した。(触媒コスト99%以上の低減に相当。)また、スケールアップ実験では試験サンプルの100グラムスケール合成/日を再現よく達成した。すでに同連続フロー装置の数十倍スケールの装置設計も完了しており、装置メーカーによって20~30倍スケール(2~3kg相当)の再現性が確認されている。また、フロー製造では複数のフロー装置を並列化することが効率的であり、1流路に依る数キロスケールの製造を10キロ以上に上げることは並列化によっても平易に達成可能である。開発した触媒の工業製品化が決定され、技術移転を行っている。</p> <p>テーマ「エステル、アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究」においては、目的とするジカルボン酸及びテトラカルボン酸からカルボン酸無水物への分子内脱水縮合反応は1mol%の触媒条件にて達成している。収率は95%以上。また、スケールアップ実験では100グラムスケール合成/回、200グラムスケール合成/日を達成した。特にスケールアップ上の問題が見当たらなかったことから生産量10kg~数t/日以上も十分に可能だと考えている。開発した触媒の工業製品化に向けて検討中で、技術移転を進めている。</p>	

	<p>【東大G】革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発</p> <p>①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発</p> <p>1) 水、アルコール等で機能する触媒の高機能化、回収・再生及び製造に関する共通基盤技術</p> <p>酢酸のエステル化に有効な水中で機能する触媒(アクア触媒)を検討し、目標値(反応率 80%以上、選択率 90%以上)を超える触媒プロセスを達成している。また、廃水への触媒溶出を抑えるため、触媒の水層溶け込み量を一定量以下に抑制することも達成している。触媒は反応後に分離・回収することにより容易に再使用が可能である。水中で機能する、反応後の分離・回収・再生が可能なエステル化触媒の開発を達成し、このプロセスをもとに酢酸排水処理量 300t/日以上を想定した実用化規模プロセスの概念設計を行い、経済性評価を実施し、実用化に向けた課題を確認した。</p> <p>②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発</p> <p>(1) 新規な触媒固定化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術</p> <p>テーマ「固定化触媒を活用する革新的水素化反応システム開発」においては、ポリシランを担体としてパラジウムを固定化した触媒を用いることで、高活性、高選択性かつ再生可能な新規な固定化触媒プロセスの開発を達成し、基本計画の目標である反応率 80%、選択率 90%を大きく超えており、溶出金属も検出限界以下であるなど、数値目標を大きく超えて達成した。また、実生産規模でのフロー反応容器の設計・製造を行い、実際に反応を行い、生産量 30 kg/日以上を達成した。この水素化システムは本年の実用化が既に決定しており、他の原料を用いるプロセスも今後順次実用化予定。</p> <p>テーマ「グリーンプロセスのための高分子固定化金属触媒試薬の開発」においては、PI Os 触媒を二種類開発し、モデル基質において目標である反応率 80%以上、選択率 90%以上を達成し、金属溶出の抑制の目標も達成している。実生産を想定した抗がん剤 Camptothecin 中間体のスケールアップ合成を行い、1モルスケール(反応時間 16h)での合成を達成し、工業化の可能性を示すことができた。また、各 PI 触媒についてもスケールアップ合成が可能であることを示した。</p> <p>【産総研G】革新的酸化プロセス基盤技術開発</p> <p>②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発</p> <p>(2) 高選択酸化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術</p> <p>オレフィン類の酸化プロセスは反応率 92%以上、選択率 92%以上、ケトン類をエステル類へと変換するプロセスに関しては反応率 95%以上、選択率 85%以上と最終目標を超える値を達成した。各社新規製品導入時の生産規模は、数～100kg/日と想定されることから、特段のスケールアップを必要としない、数百～数十 kg/日(流通)あるいは run(バッチ)規模のベンチスケール装置を製作・運転して成果の実証を行った。サンプルのユーザー評価は良好であり、安全性試験等を通して市場導入への準備中。</p>	
<p>Ⅲ. 研究開発成果について</p>	<p>投稿論文</p>	<p>平成 21 年度 2 4 平成 22 年度 3 3 平成 23 年度 4 3</p>
	<p>特許</p>	<p>平成 21 年度 1 3 平成 22 年度 2 4 平成 23 年度 1 5</p>
<p>Ⅳ. 実用化の見通しについて</p>		<p>【分子研G】高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発</p> <p>①錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の開発研究</p> <p>芳香族アミノ化反応、芳香族カップリング: 開発した触媒ならびに同触媒を用いた芳香族アミノ化反応は協力企業A社とともに特許出願済みである。A社はELデバイスに利用可能なホール輸送剤の自社開発はもとより、将来において見込まれる多方面からの関連分子の委託合成における競争力強化を念頭に置き事業化を想定している。今後、2～3年以内に</p>

A社研究陣による数十グラム／日の精密合成が検討確立され、EL 照明メーカーなど潜在的関連クライアントに対して受託合成が提案されることが想定されている。

②ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究

アルコール類の酸素酸化反応：本テーマに利用した触媒はすでに分子研が特許を取得済みである。この特許触媒技術に立脚して開発されたアルコール類の酸素酸化プロセスによって国内洗浄剤メーカーBの協力のもと、供給ルートを確認したカルボン酸型界面活性剤は精密電子デバイスの洗浄等に用いるPFC代替洗浄剤として期待され、すでにユーザーによる製品評価の段階にある。

また派生的に確立した連続フロー系によるPCB類縁体の還元的分解・無毒化システムは、NEDOプロジェクトで確立した酸化触媒をその逆反応である還元反応に利用することで上述のPCB類縁体の還元的分解・無毒化システムは成立しており、NEDOプロジェクトからの派生成果と言い切ることができる。

③エステル、アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究

目的とするカルボン酸の分子内脱水縮合反応は、1 mol%の触媒を用いて100グラムスケールで達成している。反応率95%以上、選択率98%以上。触媒の回収・再利用も可能であることを確認している。ただし、触媒の回収が実用的かどうかは検討の余地がある。現在、触媒の製造・販売に向けて試薬メーカーと交渉段階にある。本法が実用化されれば、ポリエステル、ポリアミド、ポリイミド樹脂の環境低負荷製造への技術革新となることが期待される。また、開発したボロン酸触媒が東京化成工業より上市(2012年7月)された。関連する企業への技術移転についての検討も行っている。

また、本プロジェクトにおいて見出したランタン触媒を用いるエステル交換反応、超原子価ヨウ素触媒を用いる α -オキシアシル化反応、Lewis酸触媒を用いるBaeyer-Villiger酸化反応についても実用化可能な技術に仕上がっている。具体的には数10gスケールでの実施に成功している。また、実施に必要な試薬はすべて市販されている等、実用化への障害は少ないと考えている。また、キラル超原子価ヨウ素触媒が、和光純薬工業より上市された。本触媒は光学活性スピロラクトン類の合成に有効な触媒であり、その評価を各企業で検討されることを期待している。

【東大G】革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発

①アクア触媒によるアセトアルデヒド製造プラント排水中の希薄酢酸回収技術開発

酢酸回収プロセスにおいて、酢酸濃縮/水中エステル化法では、酢酸に対して等量のエタノールを用いることで大幅なコストダウンに成功し、始めに開発した水中エステル化/エステル交換法に比べて用益コストを1/4にすることができた。しかしながら、なお設備償却負担が大きく、実用化に向けては触媒および反応場のさらなる改良が必要である。今後はNEDOの継続研究のスキームの下、大学と企業の連携を図りながら、大学での基礎検討を継続し、新規触媒および反応場の開発に取り組むことで目標の達成を目指す。

②固定化触媒を活用する革新的水素化反応システム開発

ポリシラン担持パラジウム触媒を用いる連続フロー式水素化システムの開発においては、薬粧品原料であるオレフィン化合物の水素化反応のスケールアップ検討が順調に進行しており、自社製品において既存の製造プロセスからプロジェクトで開発した製造プロセスへの切り替えを本年度より行っていく。各製品の事業化についてはプロジェクトで得られた結果や実用化した際の効果等を考慮して製品群に優先順位を付けて行う。本技術により、オレフィン化合物の水素化にとどまらず、様々な化合物の水素化反応が可能になると考えられ、開発プロセスが波及する産業分野も、化粧品・医薬品原料のみならず、食品・ファインケミカル、石油化学などへと広がることが予想される。

③グリーンプロセスのための高分子固定化金属触媒試薬の開発

開発した6種類の固定化金属触媒は、現在市場に供給している(供給予定も含む)。製薬企業や化学系企業からの要望、問題点に基づいて触媒のさらなる最適化を行っていく。最終的には工業レベルでの触媒のバルク合成および供給を行う。また、触媒の合成、供給だけではなく、固定化オスミウム触媒を用いたジヒドロキシル化のプロセス合成の経験を活かした医薬品中間体の特注合成等の受託合成を目指す。本プロジェクトでは、1 molスケールでのカンプトテン中間体合成を達成しており、これらの結果を製薬企業に公開することによって、医薬品中間体の特注合成を受託できると考えている。本プロジェクトで開発した触媒は、論文発表等を通じて大学等のアカデミックでは知られているものの、企業には積極的に宣伝が必要であると考えられる。PR活動を通じて、企業に対する固定化金属触媒の認知度を高めていく。

	<p>【産総研G】革新的酸化プロセス基盤技術開発</p> <p>産総研グループの革新的酸化プロセス基盤技術開発では、産総研と各社との共同研究体制により、各社が必要とする製品を原料基質から高効率かつクリーンに変換する新規触媒を開発した。引き続いて、ベンチ設備を設置したのち、ラボスケールからベンチスケールへとスケールアップし、プロセスの課題抽出、反応へのフィードバックまでを研究開発として行った。今後は、ベンチスケールでの過酸化水素酸化プロセスについてコスト面での確認を再度行い、工業規模製造へ向けて目処がついた後、ユーザーによるサンプルワークを通じての性能評価や安全性評価を進める。</p> <p>サンプルワークによって良好な評価を受けることを想定して、引き続きプロセス改良およびコスト削減を触媒反応から精製過程まで全てについて検討した後、実機での検討、上市へ進める。具体的な化学品を以下の4種類の要素技術に対応してそれぞれ示す。</p> <p>①多官能基質の酸化技術開発を通して、IC封止材を製造する。②高分子量基質の酸化技術開発を通して、新規電子材料用接着剤を製造する。続いて生分解性ポリマーの改質剤および相溶化剤の合成技術開発を進める。③易加水分解性基質の酸化技術開発を通して、透明電子材料用途のテルペンオキッドを高純度に製造する。④難酸化性基質の酸化技術を通して、光利用効率を改善する光学材料に使用するモノマー(LCDモノマー)を製造する。このうち①に関してはサンプルワークを概ね完了している。②—④に関しては、ベンチスケールでの検討までほぼ終了している。</p>	
<p>V. 基本計画に関する事項</p>	<p>作成時期</p>	<p>平成21年3月 策定。</p> <hr/> <p>平成21年12月、「明日の安心と成長のための緊急経済対策（平成21年度補正予算（第2号）」に係る研究開発項目④追加による改訂。</p> <hr/> <p>平成22年8月、加速に伴い、（別紙）研究開発計画の研究開発項目③-2の達成目標を修正。</p> <hr/> <p>平成23年1月、平成22年度補正予算第1号による研究開発項目④-4、④-5追加による改訂。</p> <hr/> <p>平成23年7月、根拠法改正に伴う改訂。</p> <hr/> <p>平成23年10月、中間評価の結果に基づき研究開発計画の研究開発項目③-1の内容を修正</p> <hr/> <p>平成24年3月、③-4追加による改訂。</p>
	<p>変更履歴</p>	

プロジェクト用語説明集（五十音順）

【分子研G】

用語	英語記載	用語の説明
アシル化	acylation	有機化合物にアシル基 RCO- を導入すること。典型的アシル化としては、アセチル化、ベンゾイル化などがある。アルコールやフェノールの O- アシル化はエステル化であり、アミンなどの N- アシル化はアミドを生成する。 C- アシル化は有機化合物の骨格構造に重要な反応である。
アダマンタン酸	adamantine acid	アダマンタンは、 $\text{C}_{10}\text{H}_{16}$ 、三環性の脂環式炭化水素。いす型構造のシクロヘキサン環4個がかご形に縮合した形の化合物。化学的に非常に安定な化合物。
アミド	amide	アンモニアあるいはアミンの水素1原子を酸基(アシル基 RCO-)で置換したものや、金属原子で置換した化合物の総称。
アミン	amine	アンモニアの水素原子の1個またはそれ以上が炭化水素残基 R で置換された化合物で、窒素原子上の置換基の数により、第一級アミン RNH_2 、第二級アミン $\text{RR}'\text{NH}$ 、第三級アミン $\text{RR}'\text{R}''\text{N}$ に分類される。これらアミノ基を有する化合物をアミノ化合物という。 R が全てアルキル基であるものを脂肪族アミンといい、 R の全てまたは一部が芳香族炭化水素残基であるものを芳香族アミンという。
イミド	imide	アンモニアの水素2原子を、アシル基で置換した化合物。一般にジカルボン酸から誘導された環状化合物をいう。ポリイミドは、主鎖中に酸イミド結合を持つ高分子物質の総称。テトラカルボン酸無水物とジアミンとから環化縮合により合成する。ポリイミドは線状高分子であるが、熱安定性が極めて高く 500°C くらいまでは分解しない。焼き付けエナメル、電線被覆エナメル、フィルム、成形材料など特殊な目的に用いられる。
エステル	ester	酸とアルコールから水を失って生成する化合物。および理論上これに相当する構造を持つ化合物をいう。カルボン酸エステル RCOOR' 、スルホン酸エステル $\text{RSO}_2\text{OR}'$ 。普通単にエステルといえば、カルボン酸エステルを指すことが多い。 <エステル交換反応> エステルのアルコキシ基やアシル基を他のアルコキシ基やアシル基と交換する反応をいう。エステルにアルコールを反応させアルコキシ基を交換させるアルコールシスはその1つ。酢酸エステルは、酢酸 CH_3COOH で、水素の1個または2個を炭化水素残基 R で置換したもの。カルバミン酸エステルは、カルバミン酸 H_2NCOOH （アミノ蟻酸）で、水素の1個を炭化水素残基 R で置換したもの。

カップリング反応	coupling reaction	二つのラジカルが結合したと考えられる反応 $A \cdot + \cdot B \rightarrow A-B$ をいい、異なる二種のラジカルが結合したときは交差カップリング (cross-coupling) という。C-Nカップリング (芳香族ハラミドとアミンとのカップリング (Buchwald-Hartwig 反応))、C-Cカップリング (芳香族ハラミドと芳香族ボロン酸とのカップリング (Suzuki-Miyaura 反応)) など。
カルボン酸	carboxylic acid	カルボキシル基 $-COOH$ を有する化合物をいう。鎖状のカルボン酸は脂肪酸ともいう。蟻酸、酢酸、プロピオン酸、酪酸は水と任意に混和するが、炭素数が9以上になると不溶になる。エタノール、エーテルなどには可溶。他の有機酸に比べ、強い酸性を示す。カルボン酸はアルカリで中和されてカルボン酸塩を形成し、種々の反応中間体として用いられ、エステル、酸塩化物、アミドへと変換される。また、アルミン酸リチウムで還元すると、第一級アルコールとなる。
縮合	condensation	官能基を持つ化合物から水、アルコール、アンモニアなどの簡単な分子が脱離して新しい結合が生じること。縮合反応ともいう。主な縮合反応を結合様式から分類すると、次のようになる。1) 炭素-炭素結合、2) 炭素-窒素結合 (アミド合成など)、3) 炭素-酸素結合 (エステル合成、酸無水物合成など) で、いずれも有機合成化学の基本となる反応である。
超原子価化合物	hypervalent compound	八隅子を超えた形式的な価電子を持つ典型元素化合物を超原子価化合物という。ケイ素・リン・硫黄などを中心原子とする第三周期以降の典型元素では、有機・無機の超原子価化合物が多数安定に存在する。
ピバル酸	pivalic acid	トリメチル酢酸、 $(CH_3)_3CCOOH$ 。
ピロメリト酸	pyromellitic acid	1,2,4,5-ベンゼンテトラカルボン酸で、芳香族カルボン酸の1種。加熱するとピロメリト酸無水物になる。ポリイミドの原料として重要。
フタル酸	phthalic acid	1,2-ベンゼンジカルボン酸で、芳香族カルボン酸の1種。大気中で加熱すると容易に脱水されて無水フタル酸を与える。
ホスフィン	phosphine	ホスフィン PH_3 の水素原子を有機酸 R で置換した化合物の総称。アミンと同様に第一級ホスフィン RPH_2 、第二級ホスフィン R_2PH 、第三級ホスフィン R_3P に分類される。一般に水に不溶で、エタノール、エーテルに易溶。空気中で酸化されやすい。金属錯体の配位子として用いられ、遷移金属と結合したホスフィン錯体は触媒として広く利用されている。

有機EL	organic electro-luminescence	<p>有機エレクトロルミネッセンスとは発光を伴う物理現象であり、その現象を利用した有機発光ダイオード（ゆうきはっこうダイオード、Organic light-emitting diode：OLED）や発光ポリマー（はっこうポリマー、Light Emitting Polymer：LEP）とも呼ばれる製品一般も指す。これらの発光素子は発光層が有機化合物から成る発光ダイオード（LED）を構成しており、有機化合物中に注入された電子と正孔の再結合によって生じた励起子（エキシトン）によって発光する。日本では慣習的に「有機EL」と呼ばれることが多い。次世代ディスプレイのほか、LED照明と同様に次世代照明技術としても期待されている。</p> <p>有機ELディスプレイは、各画素ごとに発光素子が構成されている。その発光素子は金属等の陰電極 / 電子注入層 / 電子輸送層 / 発光層 / 正孔輸送層 / 正孔注入層 / ITO等の陽電極そしてガラス板や透明のプラスチック板などの基板よりなる。</p>
両親媒性	amphiphilic	<p>水と油などの極性および無極性溶媒に同時になじむ性質を持つことをいう。この性質をもつ分子は、分子内に十分に水になじみやすい親水基と十分に油となじみやすい親油基の二つの相反する性質の部分を持つ。界面活性剤はその代表的な物質である。</p>

【東大グループ】

用語	英語記載	用語の説明
アセトアルデヒド	acetaldehyde	$\text{C}_2\text{H}_4\text{O}$ 、エチレンのワッカー酸化、あるいはエタノールの酸化により生成する。有機工業薬品の原料として用途は広く、また、合成染料・プラスチック・合成ゴムなどの中間体としても重要な化合物。
エナンチオマー	enantiomer	鏡像異性体のこと。分子の立体構造が重ね合わすことの出来ない像と、鏡像の関係にある異性体を鏡像異性体または鏡像体という。このような立体的関係は、ちょうど右手と左手の関係と同じであるので、鏡像異性体どうしを対掌体と呼ぶことがある。
カンプトテシン	Camptothecin	DNAトポイソメラーゼIを阻害する細胞毒性のあるキノリンアルカロイドであり、類縁体であるトポテカンとイリノテカンは実際のがん治療に用いられている。
活性汚泥	activated sludge	排水を通気状態で長時間処理したときに生ずる綿状の塊をいい、それは排水中の浮遊物、細菌および原生動物などから構成されている。活性汚泥により排水中の有機物を分解し、BODを低下させることを排水の活性汚泥処理という。
キラル	chiral	実像と鏡像の重ね合わすことのできない形を、キラルであるという。または、回映対称を持たない形をキラルな形という。 <キラル配位子> キラルな構造を有する配位子のこと。配位子は孤立電子対を有しており、金属に結合することができる。キラル配位子は、金属に結合することでキラルな触媒を形成する。
高分子カルセランド化法		架橋性官能基を有する非架橋型高分子担体に触媒を包み込んだ後（マイクロカプセル化）、無溶媒条件下で高分子を加熱架橋させて構造を安定化する手法である。触媒が高分子中に閉じ込められた状態が、Cramらが見出した「カルセランド」と呼ばれるホスト-ゲスト複合体に類似していることから命名している。この手法により、パラジウムをはじめとする様々な金属触媒の固定化に成功している。
酢酸エチル	ethyl acetate	$\text{CH}_3\text{COOCH}_2\text{CH}_3$ 、カルボン酸エステル RCOOR の「一つ。パイナップル、酒などの揮発性芳香成分である。実験室レベルでは、硫酸の存在下、酢酸とエタノールを反応させて得る。試薬としても有用で、塗料や接着剤溶剤、果実エッセンスに用いられる。
ジオール	diol	二価アルコールのこと。炭化水素の2個の水素原子をヒドロキシル基で置換したアルコール類の総称。実用上重要な二価アルコールとしては、エチレングリコール、1,4-ブタンジオールなどがある。 <ジオール化合物> 二価アルコール構造を有する化合物のこと。

シラン	silane	<p>モノシラン、シリコメタン、水素化ケイ素。普通にはモノシラン SiH_4 を指す。広い意味で $\text{Si}_n\text{H}_{2n+2}$ の組成の水素化ケイ素をいう場合もある。</p> <p><ポリシラン></p> <p>主鎖がケイ素のみから構成される高分子。</p> <p><ポリシラン担持触媒></p> <p>ポリシランを担体として金属等の触媒種を担持させたもの。</p>
水素化	hydrogenation	<p>一般に不飽和化合物に水素を付加させる反応をいい、水素添加または水添ともいう。化学的還元方法による場合もあるが、通常は分子状水素を用いる付加反応を指し、この場合には何らかの触媒（水素化触媒）が用いられ、接触水素化と同義である。広義には水素による結合の切断を伴う反応（水素化分解）も含まれる。</p>
スルホン酸	sulfonic acid	<p>水素がスルホ基 $-\text{SO}_3\text{H}$ で置換された有機化合物。天然では、タウリン、システイン酸などが存在する。芳香族スルホン酸に重要な化合物が多く、界面活性剤、エステル化などの触媒として用いられる。</p>
バイメタル触媒	bimetal catalyst	<p>同一粒子内に二種類の金属を含む触媒で、コアシェル構造やアロイ構造等を有する。</p>
パラジウム触媒	palladium catalyst	<p>白金と共に古くからその触媒作用が研究され、水素化、酸化、脱水素、カップリング反応などの触媒として広く使用されている。高分子のほか、活性炭、シリカ、アルミナ、硫酸バリウム、炭酸カルシウムなどに担持されて使用される。</p>
ヒドロキシル化	hydroxylation	<p>有機化合物にヒドロキシル基 $-\text{OH}$ を導入すること。<ジヒドロキシル化></p> <p>有機化合物に2つのヒドロキシル基 $-\text{OH}$ を導入すること。</p> <p><不斉ジヒドロキシル化> 光学活性なジオールを得るために、キラルな触媒あるいは試薬を用いてジヒドロキシル化を行う反応方法。</p>
不斉	asymmetric	<p>対称でないことを表す用語であるが、形容詞として用いられ、用法によって意味が異なる。不斉炭素原子、不斉中心の場合はキラル、不斉合成法の場合は光学活性物質という意味に用いられる。</p> <p><不斉合成法></p> <p>光学活性物質を化学合成する方法。この方法にはエナンチオ区別反応過程を用いる方法と、ジアステレオ区別反応過程を用いる方法がある。</p>

ブレンステッド酸	Brönsted acid	<p><ブレンステッド-ローリー酸塩基説></p> <p>ブレンステッドとローリーがプロトンの授受に着目して定義した酸塩基説。プロトン説と呼ばれることもある。1923年に Brönsted と Lowry は、他の物質にプロトンを与えることの出来る物質、すなわちプロトン供与体を酸と、他の物質からプロトンを受け取る事の出来る物質、すなわちプロトン受容体を塩基と定義した。</p>
リアクター	reactor	<p>その中で化学反応を起こさせる容器。</p> <p><フローリアクター>原料を連続的に添加して内部を通過させることにより反応を行うリアクター。連続生産システムに用いられる。</p> <p><マイクロリアクター>マイクロ空間を活用することにより反応を行うリアクター。反応の精密制御が可能であり、安全に反応を行うことができる。</p>
ルイス酸	Lewis acid	<p><ルイス酸塩基説></p> <p>1923年に G. N. Lewis が非共有電子対の授受に着目して提出した酸塩基の概念。Lewis は、少なくとも1つの電子対を受け取ることの出来る空の軌道を持った物質、すなわち電子対受容体を酸と、共有されていない少なくとも1つの電子対を持った物質、すなわち電子対供与体を塩基と定義した。</p> <p><ルイス酸触媒></p> <p>ルイス酸は反応する相手から電子対を受容する。ルイス酸がこの作用により触媒として機能するとき、それをルイス酸触媒という。</p>

【産総研グループ】

用語	英語記載	用語の説明
i-Messe	impact Metrics for environmental, safety and socio-economic	i-Messeは、3つの4軸レーダーチャートによって、GSCの観点である環境負荷、安全影響、社会性・経済性について、既存技術との相対評価を示すものである。
アニオン重合	anionic polymerization	成長活性種がアニオンであるイオン重合の一種。開始剤から生じるカルボニイオン、アルコキシドアニオンなどが単量体に付加するか、開始剤から単量体へ電子移動して単量体をアニオン化することにより、重合が開始する。全重合反応の活性化エネルギーが小さいため、低温でも重合速度が大きく高重合体を与える。副反応が無視できれば、停止反応がないのでリビングポリマーを生成する。アニオン重合する単量体には、アクリロニトリル、アクリル酸メチルなどの電子吸引基を有するビニル化合物や、ブタジエン、エポキシド、ラクトンなどがある。
アビエチン酸	abietic acid	ロジンをそのまま、あるいは塩酸を加えて加熱異性化して得られる、代表的ジテルペンの1つ。エステル類はラッカーやワニスの主原料として用いられ、金属塩はセッケン、プラスチックなどに用いられる。
アリル化	allylation	有機化合物にアリル基 $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2$ を導入すること。アリル酢酸は、 $\text{C}_5\text{H}_8\text{O}_2$ 、分子量100、 $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2-\text{CH}_2\text{COOH}$ 、脂肪酸の酸化防止剤に用いられる。 <アリルアルコール> 有機化合物のアルコールの一種。IUPAC名は2-プロペン-1-オール(2-propen-1-ol)、示性式は $\text{CH}_2=\text{CHCH}_2\text{OH}$ 。アリル化合物のひとつであり、安定な不飽和アルコールの中で最も単純な構造を持つ。第三級アリルアルコールは、ヒドロキシル基が結合している炭素原子に結合しているアルキル基の数が3つであり、酸化されにくい。
アルデヒド	aldehyde	分子内にカルボニル炭素に水素原子が一つ置換した構造を有する有機化合物の総称である。カルボニル基とその炭素原子に結合した水素原子および任意の基(-R)から構成されるため、一般式は R-CHO で表される。

α-ピネン	α-pinene	C ₁₀ H ₁₆ 、テレピン油は 58～65%の α-ピネンと 30%の β-ピネンからなる。α は、脂環式化合物において、環につく置換基の立体配置を示す語。
異性体	isomer	分子式が同じで構造がことなる化合物のこと。構造が異なるためおのおの物理的・化学的性質が相違する。有機化合物における異性体は一般に次のように分類される。1) 構造異性体、2) 立体異性体 (①幾何異性体、②鏡像異性体、③立体配座異性体)。
エキソメチレン	exomethylene	環を構成する 1 個の炭素原子に二重結合によって結合したメチレン基 =CH ₂ のこと。
エステル	ester	酸とアルコールとから水を失って生成する化合物、および理論上これに相当する構造を持つ化合物をいう。ふつう単にエステルといえ、カルボン酸エステル RCOOR' を指すことが多い。カルボン酸に含まれる -COOR' は、アルコキシルとカルボニルの結合した原子団で、アルコキシルカルボニルと呼ばれる。
m-C P B A	meta-chloroperoxybenzoic acid	m-クロロ過安息香酸の略。反応性の高い過酸として種々の酸化反応に用いられる。オレフィンの酸化によるエポキシ化合物の合成、バイヤービリガー酸化によるケトンのエステルへの変換などである。
L C A 評価	Life Cycle Assessment	GSC ネットワークの評価尺度ワーキンググループ (座長: 安井至氏) では、昨年度報告書に記載されている「四軸法による簡易型レーダーチャート」の実用化を検討している。この方法は、ある製品やプロセスなどについて、全ライフサイクルにおける地球に対する入出力を「①エネルギー消費量、②資源消費量、③排出物量 (NO _x , SO _x , BOD, COD 程度)、④固形廃棄物最終処分量」と分類して求め、全ての量を相対値に換算して 4 軸レーダーチャートに表現するものである。
オレフィン	olefin	化学式 C _n H _{2n} (n ≥ 2) で表される有機化合物で、炭素二重結合を 1 つ以上持つ不飽和炭化水素はオレフィン炭化水素と呼ばれ、単にアルケンと呼ばれたりエチレン系炭化水素とも呼ばれたりする。 <脂環オレフィン> 脂環式化合物とは、炭素原子が環状に結合した構造を持つ炭素環式化合物のうち、芳香族化合物を除くもの。
過蟻酸	performic acid	ペルオキシメタン酸、ペルオキシ蟻酸、ホルミルヒドロペルオキシド。強い酸化剤。蟻酸、過酸化水素、硫酸の混合物から蒸留し、90%水溶液として得る。

架橋結合	bridged bond	橋かけ結合ともいう。鎖状に結合した原子からなる分子のうち任意の2原子間に橋を架けるようにして形成された結合をいう。この場合の結合は、同一分子内でも他分子間でもよい。同一分子内の例では、エポキシド環のように炭素の連鎖に対する酸素の橋掛け結合がある。分子間の橋掛け結合の代表例は、不飽和高分子間を硫黄によって橋掛けするもので、この結合により天然ゴムや合成ゴムなどが実用に供されるものとなる。橋掛け結合は、主に共有結合であるが、場合によっては、イオン結合、水素結合なども含まれることがある。
基質	substrate	反応する物質を反応物あるいは基質、反応によって生ずる物質を生成物と呼ぶ。
極性溶媒	polar solvent	極性媒体ともいう。双極子モーメントを持つ分子からなる溶媒で、大きな誘電率を持つ溶媒である。無機塩などをイオン化させ、イオンをよく溶媒和して溶解させる能力が大きい。代表的な水やエタノールは両性溶媒で、カチオンとアニオンの両者を溶媒和できる。
キレート	chelate	金属キレートともいう。2個以上の配位原子を持つ配位子が環を形成して中心金属に結合した錯体のこと。この錯体はまた、キレート化合物、キレート錯体とも呼ばれる。
ケトン	ketone	$\text{R} \begin{array}{l} \diagup \\ \diagdown \end{array} \text{C}=\text{O}$ に示した一般式で表される化合物の総称。R、R'がともにアルキル基の脂肪族ケトン、どちらか一方がアリール基の芳香族ケトンに大別されるが、その他複素環を有するもの、カルボニル基が環の中に含まれる環状ケトンなどがある。カルボニル基の数により、モノケトン、ジケトン、トリケトンと呼ばれる。
錯体	Complex	錯体もしくは錯塩 (complex salt) とは、広義には、配位結合や水素結合によって形成された分子の総称である。狭義には、金属と非金属の原子が結合した構造を持つ化合物 (金属錯体) を指す。この非金属原子は配位子である。 金属が鉄からなるものを鉄錯体と言い、シアノ錯体 - ヘキサシアノ鉄錯体 $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$, $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$ 、ハロゲン錯体 - テトラクロロ鉄錯体 $[\text{FeCl}_4]^-$ 等がある。
三元系触媒		アルコール酸化の触媒系 (タングステン酸ナトリウムと硫酸水素メチルトリオクチルアンモニウム (第四級アンモニウム塩)) にアミノメチルホスホン酸を添加し、過酸化水素を用いるオレフィンのエポキシ化に対する活性を著しく向上させたもの。
酸性白土	acid clay	モンモリロン石を主とし、クリストバル石などを含む白色粘土。ベントナイトと異なり、粘土粒子自身の塩基未飽和による酸性を示す。強

		い吸着能と触媒能があり、活性白土に似る。
G S C N	Green & Sustainable Chemistry Network, Japan	G S Cネットワークは、日本における グリーン・サステイナブル ケミストリー の活動を効果的かつ強力に推進するために、化学系の学会・団体および国立研究所により、2000年3月に任意団体として設立されました。2011年4月より、社団法人新化学技術推進協会の中で活動することになりました。
ジエン	diene	ジオレフィン、アルカジエンともいう。分子内に2個の二重結合をもつ化合物の総称。2個の二重結合の分子内での相互の位置関係から、累積二重結合 C=C=C を含む累積ジエン、共役二重結合 C=C-C=C を含む共役ジエン（ブタジエンなど）、相互の二重結合が孤立している孤立ジエンの3種に分類される。
シクロヘキサン	cyclohexane	C ₆ H ₁₂ 、六員環状のシクロアルカン。ナフサの分留によっても得られるが、高純度のものはベンゼンを水素添加して合成される。溶剤として広く用いられる。
収率	yield	ある物質を得るためのプロセスにおいて、理論上得ることが可能なその物質の最大量(理論収量)に対する実際に得られた物質の量(収量)の比率である。収率はそのプロセスがすぐれているかどうかの指標の一つとされる。
触媒活性	catalytic activity	反応速度を増大させる触媒作用の尺度。触媒が存在しないときの反応速度は小さい場合が多いから、触媒存在下における反応速度を触媒活性とよぶ。
触媒毒	catalytic poison	触媒反応系に添加すると触媒活性を減少させるか、または全く失わせる物質をいう。触媒との結合の強さに応じて、触媒活性が回復する一時的な触媒毒から、そうでない半永久的な触媒毒までいろいろある。
スチレン	styrene	化学式 C ₆ H ₅ C ₂ H ₃ 、分子量 104 の芳香族炭化水素である。熱可塑性樹脂製造における重要なモノマーであり、ポリスチレン、スチレン-ブタジエンゴム、ABS樹脂などの製造に用いられる。
選択性	selectivity	副反応に対する触媒活性は触媒により異なるため、生成物の組成に差を生じる。これを触媒の選択性とよび、ときには活性以上に重要視されることがある。
相間移動触媒	phase transfer catalyst	求核剤としての塩を溶解する水と、有機塩基を溶かした疎水性有機溶媒の二つの液相が接した系に、両相に可溶のカチオンQ ⁺ を含む塩を添加すると、まず水の相でアニオン交換が起こり、続いて有機溶媒相で次のアニオン交換を起こす結果、有機溶媒相で生成物を作り、QXは再び水相に再帰する。このようにQXは二相間を往復することによ

		り反応を促進するので、相間移動触媒と呼ばれる。
相溶化剤		2種類の高分子の共重合体を形成するための添加剤のこと。2種類の高分子材料を混合した樹脂（ポリマアロイ）を作ろうとした時、高分子同士が相分離を起こして、均一に混ざり合わないことがある。相溶化剤を添加して共重合体を形成することにより、均一に分散した状態が作れる。
多官能性基質		1分子内に官能基を複数含む物質。官能基とは、有機化合物の分子内に存在し、その化合物の特徴的な反応性の原因となるような原子または原子団。例えば、ヒドロキシル基(-OH)、カルボキシル基(-COOH)、カルボニル基(>C=O)などがこれに当たり、炭素-炭素二重結合や三重結合も官能基である。
置換基	substituent	最も基本的な有機化合物である炭化水素の水素原子を他の原子あるいは原子団に置き換えた化合物をその炭化水素の置換体というが、このとき水素原子の代わりに導入された原子または原子団を置換基という。たとえば、メタノールの-OH基はメタンに導入された置換基である。
tB u O H		ターシャリーブチルアルコール、3級アルコール、ブチルアルコールの異性体
テルペン	terpene	テルペノイド、イソプレノイドなどともいう。テルペンは天然に最も広く分布する天然有機化合物で、その種類も多く6000以上の化合物が知られている。テルペンは原則的にはイソプレン単位(C5と略す)が複数個結合して生合成されたものをいう。
テレピン油	turpentine oil	クロマツやアカマツおよび同族植物から得たバルサム(テレピンチナ)を水蒸気蒸留して得られる精油。空気や光により樹脂化する。主成分は α -ピネンおよび β -ピネンで、その他リモネン、ジペンテンを含む。
転位	rearrangement	分子内の原子の並び方が熱、酸、アルカリなど何らかの影響で変化することを転位という。たとえば、クライゼン転位、ベンジジン転位、フリース転位などがその典型的なものといえる。転位には、転位する基が分子から一度離れる分子間転位と、転位する基が分子から離れることなしに移動する分子間転位とがある。
ナイロン	nylon	ナイロン(Nylon)は、ポリアミド合成繊維の種類である。世界初の合成繊維のナイロン6,6(6,6-ナイロンなどとも)が含まれる。
配位子	ligand	配位子とは、金属に配位する化合物をいう。配位子は孤立電子対を持つ基を有しており、この基が金属と配位結合し、錯体を形成する。配位する基としてはアミノ基、フォスフィノ基、カルボキシル基、チオール基などがあり、その配位原子は主に窒素、リン、酸素および硫黄

		である。また、一酸化炭素やカルベンのような炭素原子を配位元素とする配位子も存在する。
バイオプラスチック	bioplastics	生物資源から作られたプラスチック。化石資源由来と比べて二酸化炭素の排出量が抑制できることが利点と考えられる。
バイヤービリガー酸化	Baeyer-Villiger oxidation	バイヤービリガー反応、バイヤービリガー転位ともよばれ、ケトンの過酸による酸化でエステルを生成する反応。ケトンにペルオキシ酢酸などの有機過酸を作用させると、酸化と同時に転位を起こしてカルボン酸エステルを生成する。
ポリエステル	polyester	主鎖にエステル結合-COO-を持つ高分子物質の名称。ポリテレフタル酸エチレン(PET)、ポリテレフタル酸ブチレン、不飽和ポリエステル樹脂(熱硬化性樹脂)、アルキド樹脂、線状ポリエステルなどが含まれる。
ポリエチレンテレフタレート	polyethylene terephthalate	ポリテレフタル酸エチレンのこと。エチレングリコールとテレフタル酸とから重縮合によって得られるポリエステル。録音テープ、ビデオテープ、電気絶縁テープなどフィルム材、瓶類などに用いられる。
ポリ乳酸	polylactic acid	ポリ乳酸は、環境適性の高いバイオプラスチックとして需要が期待される。
ポリブチレンテレフタレート	polybutylene terephthalate	熱可塑性で結晶性のポリエステル系プラスチックで、5大汎用エンブレの一つである。製法は、テレフタル酸(TPA)またはテレフタル酸ジメチル(DMT)と1,4-ブタンジオールを重縮合して合成したポリマーをベースとして、各種の添加剤をコンパウンドして得られる。非強化系と強化系のグレードに大別される。最も一般的なグレードはガラス繊維で強化したもの。耐熱性、耐薬品性、電気特性、寸法安定性、成形性に優れ、難燃性も持たせやすいという特徴があり、電気・電子、自動車分野を中心に広く普及している。国内市場は10万t/年を超える。
リモネン	limonene	C ₁₀ H ₁₆ 、単環式モノテルペン。d体は、オレンジ油の主成分でミカン果皮様香気を有する。
レジン(樹脂)	resin	プラスチックとは熱や圧力を加えることによって塑性流動性を持たせて目的とする形に成形できる高分子可塑性物質である。合成樹脂と天然樹脂を合わせてプラスチックまたは樹脂(レジン)と呼んでいる。
ワニス	varnish	一般的には乾性油と樹脂に鉱物由来の有機溶剤、或いは、テレピン油などの溶剤を混合したものである。ワニスで被覆された表面は光沢を持つことが多い。

I. 事業の位置付け・必要性について

I.1 NEDOの関与の必要性・制度への適合性

I.1.1 NEDOが関与することの意義

(1) 化学産業とGSC（グリーン・サステイナブルケミストリー）

化学産業は、他の産業分野への素材、部材供給等を通じて幅広く貢献している基幹産業である。我が国の化学産業をみると、高い技術力と競争力を有しており、2009年の出荷額ではアメリカ、中国に次ぐ世界第3位である（米国化学工業協会）。また、国内の製造業と比較すると、2010年の出荷額は輸送機器製造業に次ぐ第2位、付加価値額は第1位となっており、我が国の経済においても非常に重要な産業である（経済産業省工業統計）。反面、化学産業は「エネルギー多消費」、「産業廃棄物大量排出」型であることも事実である。実際、我が国の場合、二酸化炭素排出量は製造業全体の16%で2番目に多く（2010年、環境省）、産業廃棄物排出量も13%で3番目となっている（2009年、環境省）。

国際的にも1992年の環境と開発に関するリオ宣言を契機として持続可能な発展（Sustainable Development）のための取組みが各国で開始される中、化学産業も従来の機能等を優先させたものづくりの結果である大量消費・廃棄型プロセスから脱却し、環境負荷低減を目指す方向へシフトしている。特に、化学産業の場合、国際的に益々強化されている化学品の規制への対応に要するコストが、ものづくり産業としての存続への懸念要因となっている。

このような動向の中、上述の1992年のリオ宣言に基づく行動計画である「アジェンダ21」の中でレスポンシブル・ケアを企業に奨励、進展させることが明示され、1995年には、我が国の化学産業界も、日本レスポンシブル・ケア協議会（J R C C）を設立し、それまで各企業が独自に行っていた、環境・安全対策の実行、改善を図っていく自主管理活動であるレスポンシブル・ケアを統一・活発化させて社会の理解を深めていく取組みを行っている。レスポンシブル・ケアは、化学物質を製造、あるいは取扱う事業者が、化学物質の開発から製造、流通、使用、最終消費を経て廃棄に至る全ライフサイクルにわたり、保安防災までも含む日常的取組みと位置づけられるが、より技術革新によるアプローチに焦点を絞った動きとして、2000年、グリーン・サステイナブルケミストリー（G S C）の概念が化学系の学会・団体および国立研究機関（当時）等産学により提案された。G S Cは、製品設計、原料選択、製造方法、使用方法、リサイクルなど製品の全ライフサイクルを見通した技術革新により、「人と環境にやさしく、持続可能な社会の発展を支える化学及び化学技術」と定義され、資源利用効率及びエネルギー利用効率の限界を達成し、化学品による環境への悪影響を極限まで低減する革新的な化学技術の開発を目標とすることにより、環境及び経済が両立するシステムの実現を図る具体的なものづくり技術としての役割を化学が積極的に担っていこうとするものである。言い換えれば、環境に優しいものづくりを、むしろ化学品の付加価値に結びつけることにより競争力強化を図り、利益を上げていく戦略を慫慂するものといえる。

また、同年3月、G S Cを産学官連携の下、組織的に普及・推進するためG S Cネットワーク（G S C N）が設立（当初は事務局を財団法人化学技術戦略推進機構（JCII）が担当したが、2011年、社団法人新化学技術推進協会（JACI）が設立された際に、JACIの中での活動に移行した。）され、G S Cの推進に大きく貢献した化学技術関連分野の独創的な研究開発等の業績を表彰するG S C賞の創設をはじめ、国内シンポジウムの開催、ニューズレターの発行等情報提供、国際会議の開催・支援等の活動に取り組んでおり、オブザーバーとして経済産業省、N E D Oも関与している。

なお、我が国に先立ち米国では、1995年、環境保護庁（EPA）が、「有害な物質の使用と生成を削減、除去するような製品とプロセスの設計」というグリーン・ケミストリー（G C）の概念を提案、「当量反応に替えて触媒反応の採用による廃棄物の削減」、「官能基保護のための一時的な修飾を避けて廃棄物を削減」、「元素収率の最大化」、「安全な溶媒と反応条件の採用」等からなるG C 1 2ヶ条を打ち出した。また、G C大統領賞が創設され、1996年以降、毎年G Cに基づいた化学品の設計、合成、使用に関わる優れた化学技術に対して贈られている。

欧州でもほぼ同時期に、産業界主体で国際競争力強化を強く指向したサステイナブルケミストリー（S C）の推進が開始された。即ち、1994年、欧州化学工業連盟（CEFIC）がSusTechプログラムを設け、S Cに関わる技術開発への支援を開始した。また、「環境により優しく、より効率的、効果的、安全な化学製品、化学プロセスを設計・製造・使用する」というS Cが提唱され、1998年にはOECDでSustainable Chemistry（SC）に係る活動が開始され、日米欧が中心となって、専門チームの下、研究開発のガイダンス作成や情報交換、新たな展開のレビュー等のためのネットワークの設置等が行われてきている。並行して、2004年には、CEFICや欧州バイオ産業協会（EuropaBio）等によりSusChem（The European Technology Platform for Sustainable Chemistry）が設立され、技術開発のプラットフォームとして、2007年以降のEUの科学技術5カ年計画（FP7）の重点技術分野を策定することとなった。SusChemは、欧州の化学産業が日米やアジアの脅威にさらされているとの危機感の下、マテリアルテクノロジー、反応・プロセス設計、工業バイオテクノロジー、革新の枠組みと経済的成果、という4分野について、目指すべき方向性を示すと共に、具体的技術開発項目を列挙したStrategic Research Agenda（SRA）2005を策定した。現在、SusChemはCEFICにドイツ化学会、英国化学会等の学会も加わり、産学6団体が中心となって運営されている。

(10 億米ドル)

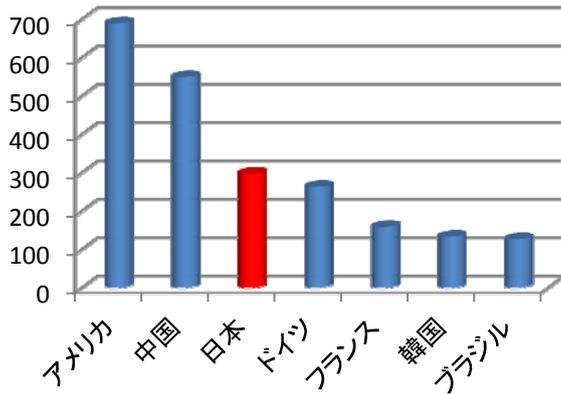
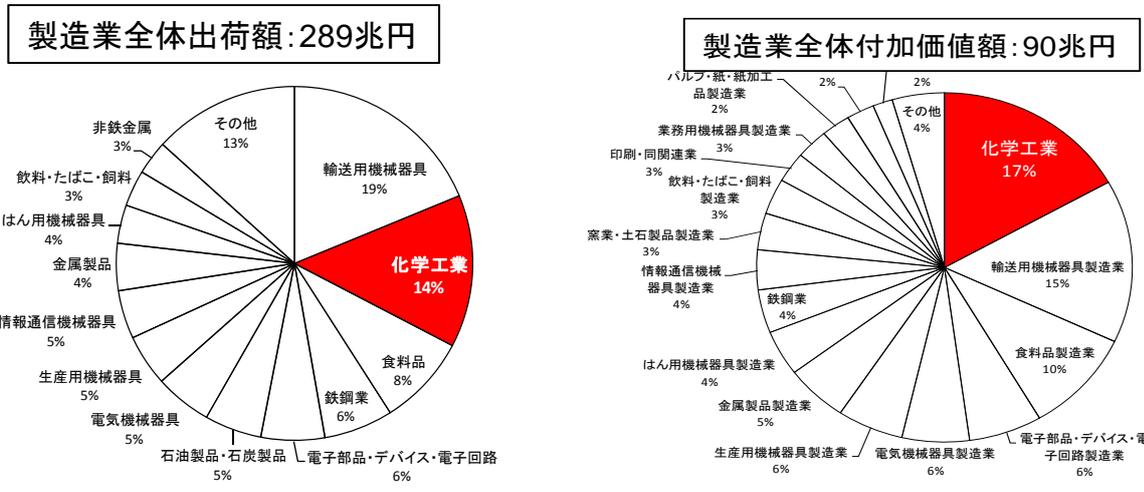


図 I-1 世界の化学工業出荷額比較 (2009 年)

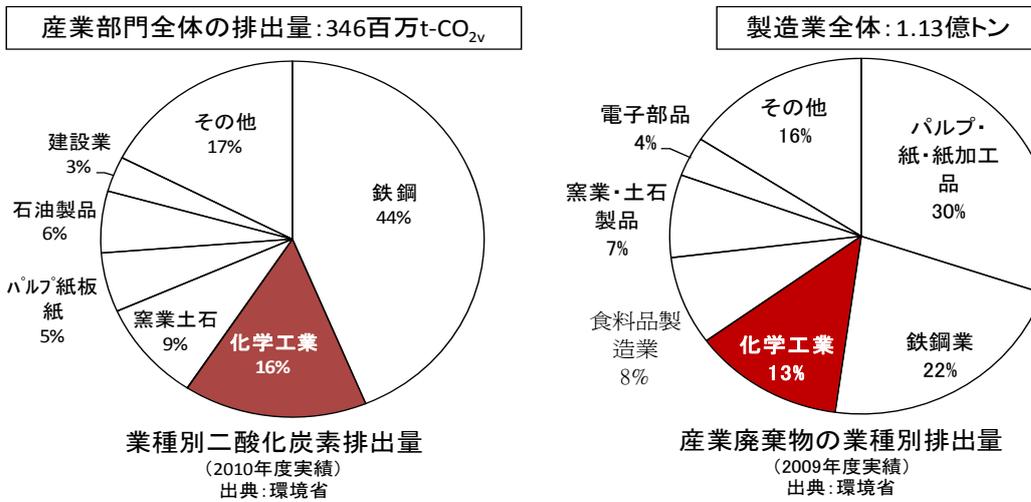
出典：米国化学工業協会



※化学工業にはプラスチック製品・ゴム製品を含む

図 I-2 製造業における出荷額および付加価値額の内訳 (2010 年)

出典：2012 年経済産業省工業統計



※化学工業にはプラスチック製品・ゴム製品を含む

図 I-3 製造業における二酸化炭素、及び産業廃棄物排出量の内訳 (2010 年)

(2) 本事業に関連する経済産業政策

本事業は、第3期科学技術基本方針の重点推進4分野のうちのものづくり技術分野に位置づけられる。また、同基本方針の中で、目指すべき国の姿として「国際競争力があり持続的発展ができる国」と示されており、本事業の目的はこれと合致する。さらに、本事業は平成19年度の総合科学技術会議においてS評価（「特に重点的に実施すべき」）を受けた新規事業であり、優先的に実施すべきテーマとなってきた。

経済産業省が実施している研究開発プロジェクトは7つの政策目標のもとにまとめられ、市場化に必要な関連施策（規制改革、標準化等）と一体となった施策パッケージである[イノベーションプログラム]（平成21年4月1日制定）として推進されている。

平成21年度にNEDOが開始した本事業を含むGSC基盤技術開発事業は、同プログラムの2. ナノテク・部材イノベーションプログラムのIV. エネルギー・資源・環境領域にグリーン・サステイナブルケミカルプロセス技術として位置付けられている。

また、「グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術戦略マップ」の「グリーン・サステイナブルケミストリー分野の導入シナリオ」において、実施すべき研究開発として本事業である2テーマを含む4テーマから成るグリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発が掲げられている。

参考に、平成21年4月27日作成のイノベーションプログラムの概要、2. ナノテク・部材イノベーションプログラム及び平成21年4月30日発表の「グリーン・サステイナブルケミストリー分野の導入シナリオ」を図I-4、I-5、I-6に示す。

イノベーションプログラムの概要

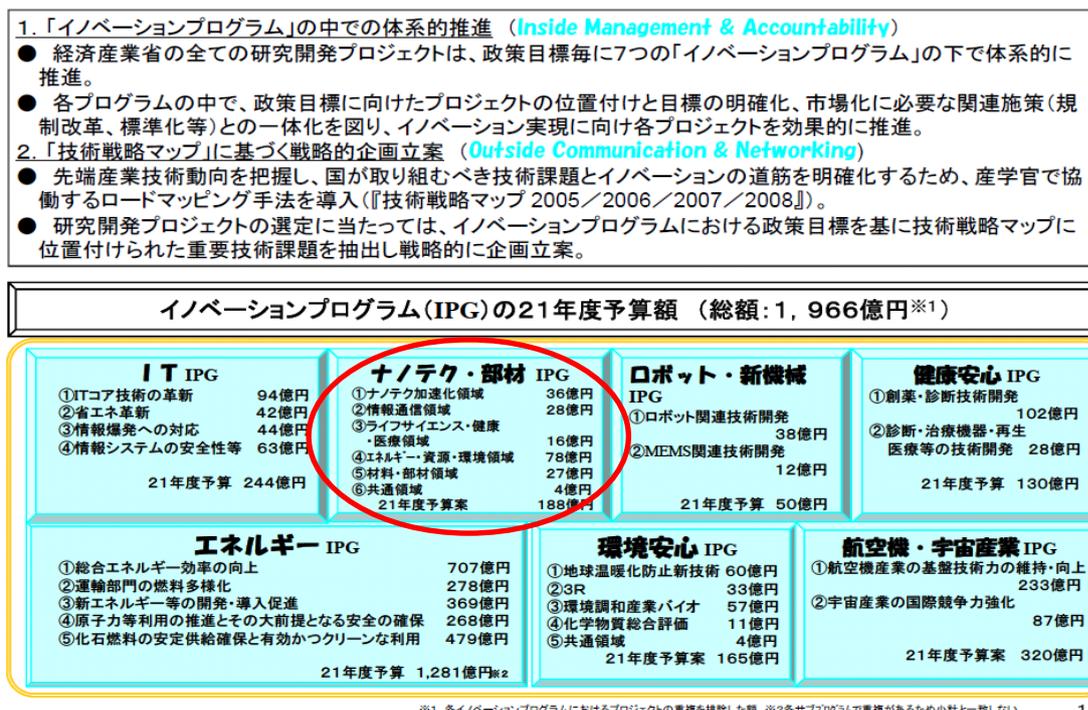


図 I - 4 イノベーションプログラムの概要

2. ナノテク・部材イノベーションプログラム

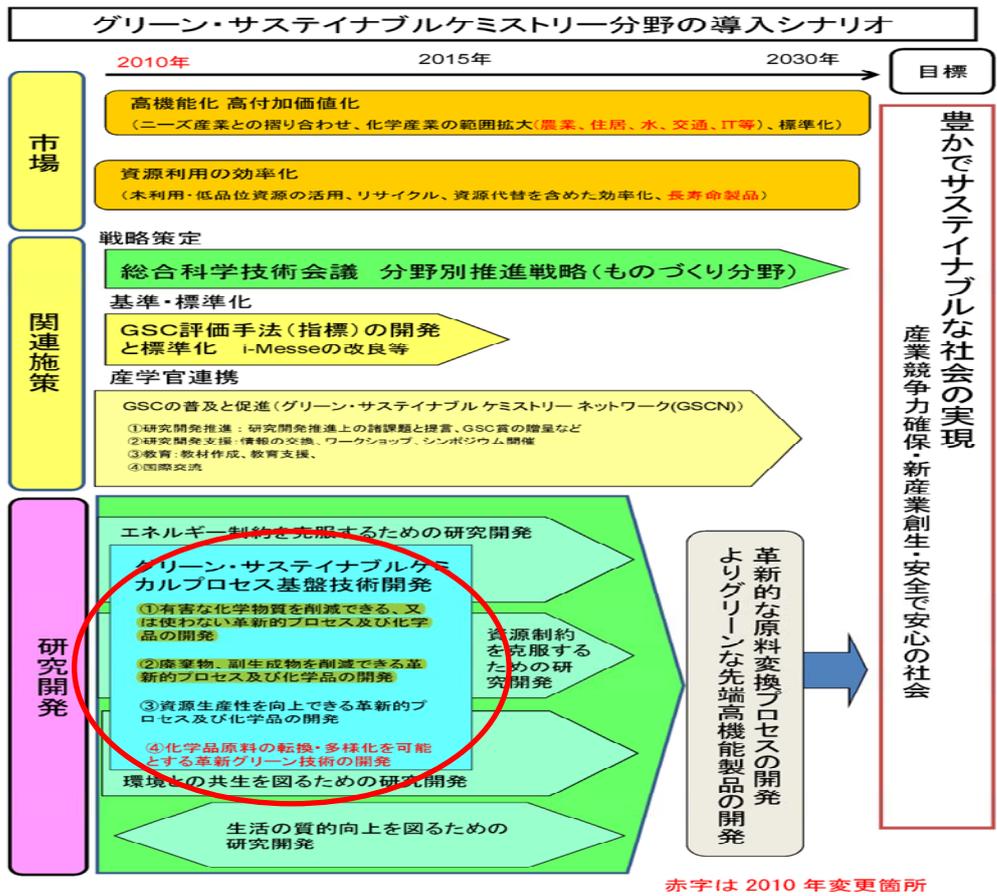
【平成21年度予算額：188億円】

※各プロジェクト毎の予算額は21年度予算(20年度予算)【20年度補正予算】

○あらゆる分野に対して高度化・不連続な革新をもたらすナノテクノロジー・革新的部材技術を確立する。
 ○我が国産業の国際競争力の維持・強化や解決困難な社会的課題の克服を可能とする。



図 I - 5 ナノテク・部材イノベーションプログラム



赤字は 2010 年変更箇所

図 I - 6 グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術戦略マップ

(3) 先行するNEDO事業との関係

NEDOにおいては、平成9年度から平成15年度に省エネルギーと環境リスクの低減を基軸とした「次世代化学プロセス技術開発」（投入予算：39.4億円）を実施している。これは、既存の化学プロセスに対して大幅な省エネルギー効果が期待できる、①飽和炭化水素の選択酸化反応技術、及び②ノンハロゲン化学プロセス技術、並びに有害な溶媒等を利用せずリスクを効率的に削減することが期待できる、③多相系触媒反応プロセス技術、及び④新固体酸触媒プロセス技術を開発し、将来、地球環境に優しい化学プロセスを開発、効率的な導入・普及を図るために必要な共通基盤技術を確立することを目指したもので、技術のブレークスルーが必須であったため、大学、公立研究所の参加とそれぞれ得意技術を持つ多くの企業の参加の下、網羅的に多くの革新的なテーマについて取り組み、現在からみればGSC基盤技術研究開発の先駆をなすものであった。しかし、新規触媒等多くの基礎的成果を挙げたものの、実用化を目指す観点からは、多くのテーマで目標値は収率(活性や選択性)を重視したものであり、製品コストやリスク削減等の観点を含め、実用化プロセスを目指すレベルを達成しているかどうかの検証が不明確であった、との事後評価を受けている。

次いで、平成16年度から平成20年度には有害な揮発性有機化合物(VOC)の排出削減を目的とした「有害化学物質リスク削減基盤技術開発」（投入予算：22.7億円）において、工場等における工程で使用するVOCを環境中に排出しない、いわゆるエンド・オブ・パイプ技術と並んで、初めからVOCを使用しない、発生させないといういわゆるイン・プラント技術の開発を行ったが、後者の中には、GSCの考え方に基づくテーマが含まれていた。

本事業は、これら2つの先行プロジェクトにおける技術開発の方向を一層徹底し、更に従来の化学プロセスの延長上にはない革新的な化学プロセスの比較的短期間における実用化を指向した我が国初の本格的なGSCプロジェクトと言える。

なお、本事業に先立つ平成17年度のNEDO「化学産業における革新的技術戦略とロードマップ作成に関する先導調査－次世代グリーン・サステナブルケミストリー(GSC)技術開発－」においては、将来、国内の化学産業が持続的に高品位な化学製品を安定的に供給するためには、1)環境対応、2)規制の先取り、3)資源の枯渇、4)未利用資源、原料の多様化に対応した、安定供給、省資源・省エネルギー等が実現できる革新的な化学プロセスへの変革が求められていると提言されている。

さらに、平成19年度のNEDO「グリーン・サステナブルケミストリープロセスの体系化に関する戦略調査」では、グリーン・サステナブルケミストリー技術の最新動向調査を行い、今後、経済産業省、NEDOが取り組むべき技術開発の方向性を示すGSC分野の技術戦略ロードマップを作成した。

(4) NEDOの事業としての妥当性

本事業は、1992年のリオ宣言に基づく行動計画である「アジェンダ21」に源を発し、2002年のヨハネスブルグ宣言に基づく実行計画中の「化学物質が、人の健康や環境への影

響を最小化する方法で使用、生産されることを2020年までに達成する」という目標に向けた世界的取組みの一環と位置づけられるが、環境にやさしいというだけでは製品の差別化は不十分なため、民間のみではインセンティブが働きにくく、官主導の下に推進することが不可欠であった。

特に、本事業は、従来の化学プロセスの延長上にはない革新的なG S Cプロセスの実用化を目指したものであって、鍵となる革新的触媒技術等の技術シーズはアカデミア等が有しており、また企業にとってプロセスの実用化開発自体の難易度も極めて高ことに加えて、事業化に向けては、例えば、開発したプロセスがG S Cというだけでは製品の価格で投資コストを回収することは困難であり、製品に新たな付加価値を付けるためにはユーザ側の「摺合わせ」も行っていく必要がある等極めてリスクの高い面があり、早期の事業化に向けては、それらについても実用化研究の段階から考慮していく必要があり、N E D O のマネジメント機能を活かして産学連携の下に実施することが妥当であった。

(5) 基本計画における本事業の位置付けと個別テーマ

本事業を含むG S C基盤技術開発においては、共通の基本計画の下、「グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術戦略ロードマップ」を勘案して経済産業省及びN E D O が協議し、政策的に重要と判断した研究開発テーマを優先的に実施している。具体的には、化学品プロセスの中でシンプル化、クリーン化、省エネ化、原材料・資源の多様化・有効利用、廃棄物の減容化、容易なリサイクル等の観点から、図 I - 7 に示す、①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発、②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発、③資源生産性を向上できる革新的プロセス及び化学品の開発、④化学品原料の転換・多様化を可能とする革新グリーン技術の開発を、委託により実施しており、本事業はこのうち①及び②に該当する。

本事業は、上記の①及び②について、図 I - 8 に示す 3 つの実施主体より取り組まれた。

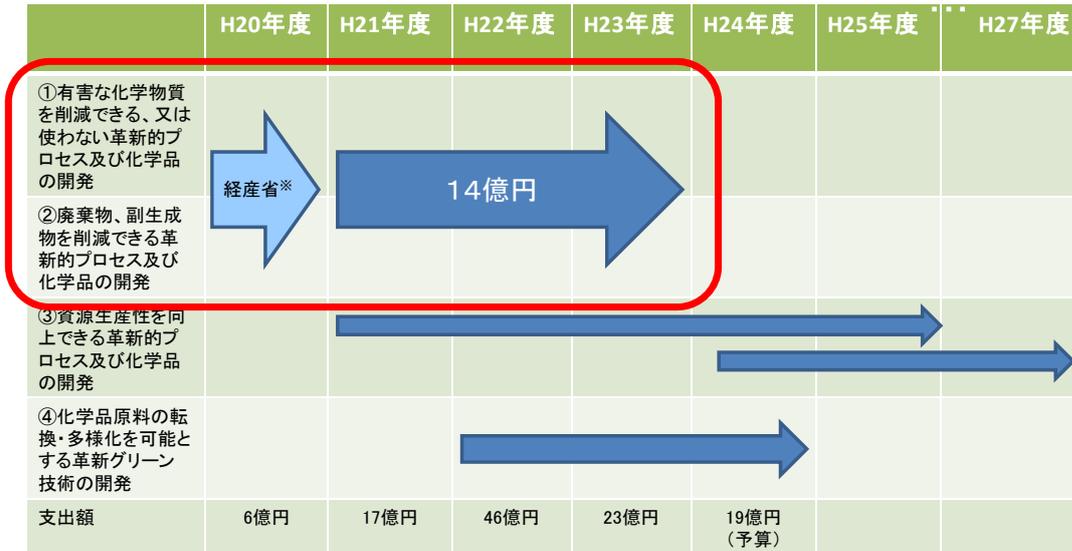


図 I - 7 G S C 基盤技術開発の研究開発項目

基本計画	①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発	②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発	
	(1)水、アルコール等で機能する触媒の高機能化、回収・再生及び製造に関する共通基盤技術	(1)新規な触媒固定化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術	(2)高選択酸化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術
個別テーマ	東大G: 革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発 ①アクア触媒によるアセトアルデヒド製造プラント排水中の希薄酢酸回収技術 ②固定化触媒を活用する革新的水素化反応システム開発 ③グリーンプロセスのための高分子固定化金属触媒試薬の開発		産総研G: 革新的酸化プロセス基盤技術開発 ①多官能性基質の酸化技術開発 ②高分子量基質の酸化技術開発 ③易加水分解性基質の酸化技術開発 ④難酸化性基質の酸化技術開発 ⑤過酸化水素を用いた反応系の基礎研究
	分子研G: 高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発 ①錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の研究開発 ②ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究 ③エステル・アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究		

図 I - 8 個別開発テーマ

I.1.2 実施の効果（費用対効果）

（1）事業費

事業費の支出額推移を以下に示す。

表 I - 1 事業の支出額の推移 (単位：百万円)

	21 年度	22 年度	23 年度	計
東大G	360	282	200	842
(内加速)	(85)	(83)		
分子研G	37	37	29	102
(内加速)		(8)		
産総研G	149	181	123	453
(内加速)		(57)		
計	546	500	352	1,398

（2）効果

◆高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発（分子研G）

分子科学研究所が実施する3つの研究項目に投じた予算は総額102百万である。

①錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の研究開発（費用：40百万）

ここでは、触媒のカップリング反応を駆動する水中機能性不均一触媒の開発と、同方法論を利用する、TPD類縁体類の合成を眼目とした。

EU、日本など2012年までに白熱電球の製造全廃を計画している企業が多い。例えば平成22年3月、東芝（国内シェア約3割）が白熱電球の製造を取りやめたことで43万トン-CO₂の削減効果が見込まれている。しかし、その代替となる蛍光灯はリン酸水銀を5mg(直型1本あたり)含んでおり環境負荷が大きい。環境負荷無く、安全に白熱電球を大幅削減するためにもELデバイスの安価供給は急務であり、TPD類縁体類の実用化は間接的ながらCO₂削減に本質的に寄与する。

これを温暖化ガス排出量取引の実勢相場（15千円／トン）に換算すると、白熱電球全廃の経済効果は約65億円。さらに国内に限定しても蛍光等に使用されている水銀総量3225キログラムである（第170回国会（臨時会）参議院議員質問第110号より引用）。水銀自体は比較的安価な金属種であるが、その環境負荷は大きく、定量できないまでも歴史上の水銀由来公害問題などを考慮すれば重大性は自明である。すなわち、EL照明デバイス供給の根幹技術となり得る本研究成果の経済効果は温暖化ガス換算での大きさに加え、水銀による環境負荷を根絶する上でも十分に大きなものと考えられる。

②ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究（費用：40百万）

ここでは、難度の高い不活性型アルコールの水中での触媒的酸素酸化反応の開発と、同方法を利用した高機能カルボン酸型界面活性剤合成プロセスの開発に注力した。

目的とする高機能カルボン酸型界面活性剤はPFC代替洗浄剤として期待され、潜在的ニーズが大きい。平成19年日本でのPFC等代替フロン排出に伴う温室ガス効果は16.6百万トン-CO₂であり、またこれら代替フロンには輸入制限がなく、さらには第3国での使用は規制困難である。高品質アニオン性界面活性剤の安定供給がPFC洗浄剤の減少を促し、その1割程度を削減するだけでも1～2百万トン-CO₂に相当する。（参考：環境省「代替フロン等3ガス分野の対策について」（平成19年7月6日）

③エステル・アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究（費用：22百万）

従来のエステル・アミドの合成は、対応する酸塩化物を経由する変換工程が主力であった。本研究項目は限定した標的化合物の設定とプロセス化よりもむしろ酸塩化物を経由しないエステル・アミド合成の基盤技術確立を目指したものである。例えば、芳香族ポリイミド、芳香族ポリアミド酸等の有機材料、医薬品中間体としてのカルボン酸無水物などが標的物質の候補として挙げられる。しかし、現時点で特定した標的を設定していないため定量的な費用対効果は算出しにくいものの、酸塩化物の有毒性は顕著であり、塩素種の温暖化ガス効果も大きい。これらのことから、極めて有効な触媒的エステル・アミド合成触媒開発の成功は、十分な費用対効果があったと考えている。

◆ 革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発（東大グループ）

本成果における革新的触媒技術は化学プロセスに対する汎用性の高いものであり、今回のプロジェクトにおいて直接ターゲットとしたプロセス以外の化学品生産プロセスに対しての波及効果が十分に見込める。特に水を溶媒とする触媒プロセスの廃水処理プラントや、触媒プロセスによる医薬品や電子材料等の生産の市場への波及効果が見込める。これら技術開発を行うために投じた予算8億4200万円に対し、2020年頃までに約140億円/年の市場拡大に寄与でき、本テーマ全体として十分に費用対効果が得られると期待できる。

費用対効果の試算は以下のとおりである。工場廃水中の希薄酢酸回収プロセスに関しては、自社でのアセトアルデヒドプラント（生産能力16万トン）の酢酸回収に適用した場合に、主として汚泥処理負担の低減化により1億円/年のコストダウンの効果が見込める。さらに回収技術が他社のアセトアルデヒド（世界生産量約100万t）プラントを始めとする様々なプラントにおける酢酸回収プロセスや、エステル生産プロセスへのライセンス等を通じた波及により、実際の効果はさらに大きくなる可能性がある。

ポリシラン担持パラジウム触媒を用いた水素化反応に関しては、水素化反応が主要な化学プロセスの一つであることから波及効果が非常に大きいことが予想され、その中の特にパラジウム触媒による水素化プロセスの市場の拡大を中心に寄与することが見込まれる。自社で最初に実用化する製品の市場規模及び市場拡大予想（2億/年）から見積もった場合、

水素化プロセスの適用可能な他の製品市場への波及効果において少なくとも 40 億/年以上の市場拡大効果を見込める。

また、様々な金属を固定化したリサイクル可能な PI 触媒は、不斉ジヒドロキシル化反応や酸化反応・カップリング反応等の様々な化学品合成プロセスへの適用が見込め、環境負荷低減型の金属触媒が普及することで大きな経済効果が期待できる。医薬品全体の市場規模 70-80 兆円のうち、本技術が適用できる製品群の市場規模は～1 兆円と予想され、年間約 5%の市場拡大の 2 割に貢献できるとして、2020 年頃までに 100 億円/年の効果が期待できる。

定量化が困難な範囲を含めると実際はさらに大きい効果が得られる可能性があるとして期待される。

さらに本成果は、プロジェクトの目的である GSC の効果においても、革新的触媒技術により有害な金属廃棄物を出さない水素化反応プロセスが実用化段階まで来ていることから、プロジェクトの効果は十分に得られていると考えられる。

◆ 革新的酸化プロセス基盤技術開発（産総研グループ）

本開発技術により、各材料の製造プロセスにおいて、酸化剤のクリーン化による廃棄物の削減はもとより、反応速度の向上によるエネルギー・電力量の削減、それに伴う CO₂ の排出量削減などを含め、環境負荷を大幅に低減することが可能になった。同時に、不純物の混入をほぼゼロにしたため、本技術による製品は低環境負荷かつ安価に製造できるだけでなく、従来製品をはるかに上回る性能を示した。これら技術開発を行うために投じた予算 4 億 5300 万円に対し、新規技術創出による市場への新規参入に伴う市場規模の大幅な拡大が期待される。半導体封止材や高性能電子材料など機能性化学品の分野に関しては、最先端用途で性能の優位性を武器に市場導入後実績を積んでゆくことで、120 億円（企業による試算）の市場規模拡大を見込んでいる。バイオプラスチック材料分野など高分子量基質の新材料創出による市場規模は 100 億円規模（企業による試算）に上ると期待される。その他開発製品の市場への新規参入による市場規模拡大効果も含めると総額では 250 億円（企業による試算）に上ると推定している。

また、本技術による製品の提供により川下企業のハイエンド品開発に寄与することが可能であると考えており、産業界への波及効果は大きいと推定される。

I.2 事業の背景・目的・位置付け

I.2.1 背景

本事業では、特に高機能な化学品の持続的製造を可能とする基盤技術の確立を直接的な目標として、①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発、②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発、を行った。それぞれの背景について以下に記載する。

①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発

安全性が高い溶媒(水、アルコール等)で機能する触媒反応や無溶媒反応は、従来有機溶媒中で行われてきた化学品製造プロセスを代替することで、有害な有機溶媒の使用量を抜本的に改善することが期待できる技術である。しかしながら、これら新規反応の多くは、ラボスケールの研究開発段階にあり、工業プロセス化を進めるためには、水、アルコール等での触媒活性、選択性の更なる向上、触媒寿命・耐久性の向上、生成物と触媒との分離・精製技術及びスケールアップ等の生産システム化に向けた基盤技術の開発が必要であった。

②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発

高機能な化学品を製造する有機合成反応では、無害化処理コストの製品価格への転嫁が比較的許容されやすいこともあり、e-ファクター(副生成物量(=産業廃棄物量)/目的生成物量)が10~100以上と、多段プロセスや多種類の添加剤使用に伴う大量の廃棄物を排出している。数多くの化学量論的有機試薬反応を触媒反応に置き換えることが出来れば、これまでの大量の廃棄物を大幅に削減することが可能となる。しかし、そのような場合、今後ますます高まるであろう環境規制の強化に対応するためにも、より安定性、耐久性(長寿命)に優れ、かつ高活性、高選択性を有する触媒とその固定化技術及び新規な固定化触媒を用いて高付加価値生産に寄与できるプロセス技術の開発が必要である。

一方、化学産業における重要な基幹プロセスである酸化プロセスは、十分な酸化力を得るためハロゲン等を含む有害な廃棄物を大量に排出するプロセスとなっている。従って、オレフィン類やケトン類を含む基質化合物中の特定の官能基を選択的に酸化するといった難易度の高い有機合成において、有害な廃棄物を副生しないクリーンな酸化剤の適用を可能とする高選択酸化触媒が開発されれば、精密化学品や電子材料等向けに益々需要が見込まれる、高付加価値機能性化学品が合成できるばかりでなく、廃棄物の大幅な削減を実現できる。しかしながら、これらの高性能触媒による工業プロセス化に向けては、新規な高性能触媒の開発のみならず、触媒回収・再生技術やスケールアップなど生産プロセスに関する基盤技術の確立も重要となる。

I.2.2 目的

本事業は、上述の背景を受けて、水、アルコール等で機能する触媒を利用することでハザードの大きい有機溶媒等を使用しないクリーンな生産システム、および新規な触媒固定化技術・高選択酸化触媒反応による廃棄物、副生成物の抜本的な削減を実現するための共通基盤技術の開発を行うものであったが、特に、事業期間内に開発された共通基盤技術が、実用化技術として早期に市場導入され事業化されることを目的として、触媒や触媒プロセス自体の開発のみに留まらず、生産量10kg~数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行うことを

基本計画の最終目標に掲げた。

このため、各テーマにおいて、初期の段階から、開発する実用化規模プロセスが上市ターゲットとする機能性化学品を設定して、対象市場やそのためのコスト面の検討等を併せて行っていくことを原則とした。

I.2.3 国際的な取組み及び国内外の研究開発動向における事業の位置づけ

本事業は、1992年のリオ宣言を契機として化学産業が取り組んでいくこととされた持続可能な産業へ転換するという課題達成の切り札として、プロセスや製品の設計に関する指針として明確に打ち出された米国のGC、及び産業競争力の強化の観点も強調されている欧州のSCを踏まえ、OECDにおいて促進のための取組みが行われているSC/GCについて、我が国としてもGSCという理念の下に革新的技術開発を行うものであり、国際的な取組みの一環を成すものである。

また、本事業は、有害な有機溶媒を用いない、及び廃棄物を生成しない革新的な化学プロセスを実用化するための研究開発であり、EPAの提案したGC12ヶ条で見れば、第5条（安全な溶媒と添加剤）、第8条（副生物の削減）、第9条（触媒反応）等に対応し、また、欧州のSCのSRA2005中、反応・プロセス設計に係る研究領域で優先度が高いものと位置づけられている、「有機溶媒の水等への転換」、「低負荷で取扱い容易な過酸化水素、酸素の利用拡大」等に該当する等、国内外の優先研究開発課題と一致するものであった。

II. 研究開発マネジメントについて

II.1 事業の目標

本事業では、既存の化学品等の製造に比較し、これまでにないシンプル化(高い原子効率)、クリーン化が実現できる革新的プロセス及び化学品の実用化のための基盤研究開発を行った。

II.1.1 最終目標

(1) G S C 基盤技術開発の研究開発目標 (基本計画本文より抜粋)

①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発

- ・ハザードの大きな溶媒、化合物等の使用に対して大幅な削減が見込めること。
- ・ライフサイクルに亘り大幅な省エネ効果、安全性、軽量化、長寿命化等に大幅な改善が見込めること。

②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発

- ・e-ファクター(副生成物量(=産業廃棄物量)/目的生成物量)の大幅な低減、廃棄物、排水量等に対して大幅な削減が見込めること。
- ・ライフサイクルに亘り大幅なリサイクル率(カスケードリサイクル含む)向上、軽量化、長寿命化等の大幅な改善が見込めること。

(2) 本事業①、②の最終目標 (基本計画「別紙」より抜粋)

①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発

(1) 水、アルコール等で機能する触媒の高機能化、回収・再生及び製造に関する共通基盤技術

① 水、アルコール等で機能する触媒の活性・耐久性向上

- ・水、アルコール等で機能し、反応率80%以上、選択率90%以上の触媒プロセスを開発する。

② 触媒反応プロセス、分離回収・再生技術に関する実用化基盤技術

- ・生産量(処理量)10kg~数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待できる技術レベルを確立すること。

②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発

(1) 新規な触媒固定化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術

①高活性、高選択性かつ再生可能な新規な固定化触媒プロセスの開発

- ・反応率80%、選択率90%、溶出金属回収率98%以上。

③ 新規な固定化触媒による実用化プロセスに関する設計・開発

- ・生産量10kg~数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロ

セスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待できる技術レベルを確立すること。

(2) 高選択酸化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術

① 高性能触媒による高活性、高選択性酸化触媒プロセスの開発

- ・オレフィン類やケトン類に対して高活性、高選択性を有する酸化触媒プロセスを開発する。なお、オレフィン類の選択酸化反応では反応率80%以上、選択率90%以上、ケトン類の選択酸化反応では反応率80%以上、選択率80%以上とする。

② 高性能触媒による実用化プロセスに関する設計・開発

- ・生産量 10kg～数 t /日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待できる技術レベルを確立すること。

II.2 事業の計画内容

II.2.1 研究開発の内容

(1) 本事業①、②の研究開発項目（基本計画本文より抜粋）

①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発
 ハザードの大きな溶媒等を削減又は使わないクリーンプロセス及び有害物質を含まない化学品を開発するために必要な水溶性触媒、無溶媒、親水性溶媒、相間移動触媒、有機合成の触媒化等を利用した革新的な技術を開発する。

(1) 水、アルコール等で機能する触媒の高機能化、回収・再生及び製造に関する共通基盤技術

②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発

副原材料、廃棄物を大幅に削減できるクリーンプロセス又はシンプルプロセスを利用した化学品を開発するために必要な酸化反応、エステル化等に利用できる新規触媒による革新的な技術を開発する。

(1) 新規な触媒固定化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術

(2) 高選択酸化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術

本事業では、上記の①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発、及び、②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発、を図II-1に示す3つのグループで取り組んだ。

基本計画	①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発	②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発	
	(1)水、アルコール等で機能する触媒の高機能化、回収・再生及び製造に関する共通基盤技術	(1)新規な触媒固定化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術	(2)高選択酸化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術
個別テーマ	東大G: 革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発 ①アクア触媒によるアセトアルデヒド製造プラント排水中の希薄酢酸回収技術 ②固定化触媒を活用する革新的水素化反応システム開発 ③グリーンプロセスのための高分子固定化金属触媒試薬の開発	産総研G: 革新的酸化プロセス基盤技術開発 ①多官能性基質の酸化技術開発 ②高分子量基質の酸化技術開発 ③易加水分解性基質の酸化技術開発 ④難酸化性基質の酸化技術開発 ⑤過酸化水素を用いた反応系の基礎研究	
	分子研G: 高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発 ①錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の研究開発 ②ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究 ③エステル・アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究		

図II-1. 基本計画に対する本事業の位置付けと個別テーマ

表 II -1. 個別テーマ内容の比較表

		触媒	反応	製品、用途	効果
分子研		水中機能的な高分子担持パラジウム錯体触媒	水中での炭素-炭素、炭素-窒素カップリング反応	TPD (有機ELホール輸送剤)	金属混入ゼロの製品 有機溶剤ゼロ
		水中機能的な高分子担持白金ナノ触媒	アルコールの水中酸素酸化	アルキル・ポリ(オキシエチレン)カルボン酸(電子デバイス等洗浄剤)	代替フロン系洗浄剤の根絶 有機溶剤ゼロ
		高活性ボロン酸触媒、高活性ランタン触媒、超原子価ヨウ素触媒	カルボン酸脱水縮合、イミド化、エステル化、アミド化 有機溶剤中	ポリイミド、光学異性体、アクリル酸エステル(樹脂、医薬品、香料)	省エネ 有害有機廃棄物削減
東大グループ		アクア触媒 (アミン塩触媒、固定化スルホン酸触媒)	工場廃水中希薄酢酸の水中エステル化 エステル交換反応	酢酸エチル(化学品)	汚泥減容 廃液中の有価物回収 有機溶剤を用いないアクアプロセス
		ポリシラン固定化パラジウム触媒	化粧品原料溶液+水素ガス、水素化反応(連続フローシステム)	化粧品原料等(化粧品、医薬品)	金属廃棄物無し 革新的フローシステム 高耐久性ポリシラン触媒
		高分子カルセランド型触媒	高分子固定化Pd、Pt、Au触媒の合成水・アルコール中1段階ジオール化反応	医薬品中間体、触媒(試薬)	廃棄物削減 リサイクル可能な高分子固定化金属触媒 工業化可能なジオール反応
産総研グループ	①、⑤	3元系触媒(金属錯体、4級アンモニウム硫酸水素塩、ホスホン酸類)	多官能基質のエポキシ化、水中	TMBDG(半導体封止剤)	無溶媒化 塩素フリー化による耐湿信頼性向上
	②、⑤		高分子量基質のエポキシ化、共溶媒中	エポキシ化オレフィン系ポリマー(改質剤、相溶化剤、接着剤)	力学強度向上、接着性向上、 過酸、廃水、廃棄物、CO2削減
	③、⑤		易加水分解性基質のエポキシ化、有機相+水相混合系	ピネンオキサイド(香料・医薬品原料)	副生物、廃棄物、CO2削減
	④、⑤		難酸化性基質のエポキシ化、非ハロゲン系溶媒	ジエポキシド(LCD光学フィルム用ワニス)	廃水、CO2削減

表 II -2. 全体スケジュール

(単位：億円)

		平成21年度	平成22年度	平成23年度	支出額
東大G	触媒開発	←		→	8.4
	プロセス検討	←	→		
	スケールアップ/試薬化	←		→	
	コスト試算/パイロットプラント設計		←	→	
分子研G	基本性能確認	←	→		1.0
	条件確立	←		→	
	スケールアップ		←	→	
産総研G	触媒開発	←		→	4.5
	プロセス検討/スケールアップ	←		→	
	ベンチ準備/安全性評価		←	→	
支出額		5.5	5.0	3.5	14.0

(2) 本事業①、②の詳細な研究開発内容（実施計画書より抜粋）

◆高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発（分子研G）

本事業は、高機能不均一触媒の開発と、それら触媒を利用し環境調和型化学プロセスを確立することにより、①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発及びに②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発を実現することを目的とする。

上記目的達成のため、①錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の開発研究、②ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究、③エステル、アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究の3課題に取り組む。

①錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の開発研究（分子研）

化学結合形成は化学合成の根幹となる工程である。特に炭素-炭素結合、炭素-窒素結合、炭素-酸素結合の形成工程は、その中核に位置しており、そのグリーン化が重要な研究課題であることは論を俟たない。さらに化学製品に求められる物質スペックは近年ますます高度化しており、化学工程の精密化もまた重要研究課題である。水中で機能し、回収再利用可能な触媒によりこれら結合形成工程の精密な駆動・制御が可能となれば、その技術は化学工程のグリーン・サステナブル化の基盤となりうる。そのための研究開発内容として「錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の開発研究」に取り組む。

【スケジュール】

事業項目	21年度				22年度				23年度			
	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期
①-a「錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の開発研究」												
高分子固定化触媒の設計調製と水中触媒機能の基本性能確認(カップリング反応)												
触媒金属種の水中への漏出の確認, 回収, 再利用プロトコルの確立												
電子材料となるピアリアル類の水中カップリング実施, 試験合成(100グラム・スケール)と製品試験評価												
高分子固定化触媒の安定性と反応性の向上, コスト低減のための反応条件の確立												
実用化移行を眼目としたスケールアップと製品評価												

【最終目標】

電子材料としての特定の機能性化学物質に特化したプロセスで、下記の目標達成及び、目的化合物の10kg以上のスケールを想定したプロセスを確立し、サンプル製造を実施する。

最終目標：反応率 80%以上、選択率 90%以上、金属漏出 2ppm 以下、触媒回収 80%以上

【予算】

(単位：百万円)

	H 2 1 年度	H 2 2 年度	H 2 3 年度	総額
分子研	1 4	1 5	1 2	4 0

②ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究（分子研）

酸化反応は化学合成の根幹となる工程でありながら、実践的な方法論開発が著しく遅れており、とくにアルコールの酸化工程に関する既知反応条件では化学量論量の重金属や有毒有機試薬を用い大量の有害廃棄物を共生成することが一般的である。水中で機能し、回収再利用可能な触媒により、酸素ガスを酸化剤としたアルコール酸化工程が可能となれば、その技術は化学工程のグリーン・サステイナブル化の基盤となりうる。そのための研究開発内容として「ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究」に取り組む。

【スケジュール】

事業項目	21年度				22年度				23年度						
	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期			
②-a「ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究」															
高分子固定化ナノ金属触媒の設計、調製と水中触媒機能の基本性能確認(水中でのアルコール酸素酸化反応)	←				→										
触媒金属種の水中への漏出の確認、回収、再利用プロトコルの確立	←				→				→						
アルキルポリ(オキシエチレン)カルボン酸を標的とした酸素酸化反応の水中実施、試験合成(100グラム・スケール)と電子デバイス洗浄剤としての製品評価試験				←				→							
高分子固定化触媒の安定性と反応性の向上。コスト低減。反応性向上のための酸素圧の条件確立								←				→			
大スケールへの移行を想定した反応システムの試験開発								←				→			

【最終目標】

目的化合物の 10kg 以上のスケールを想定したプロセスを確立しサンプル製造を実施する。

平成 2 3 年度研究開発目標：反応率98%以上、選択率95%以上、金属漏出 1 ppm以下、触媒回収98%以上、触媒コストの90%低減（一桁ダウン）。

なお触媒回収においては触媒工程のフロープロセス展開並びに、そのための触媒カートリッジ化を達成することも目標となる。

【予算】

(単位：百万円)

	H 2 1 年度	H 2 2 年度	H 2 3 年度	総額
分子研	1 4	1 5	1 2	4 0

③エステル、アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究(分子研、再委託：名古屋大)

エステル化反応に代表される脱水的化学合成は、有害性の高い酸塩化物を出発原料とすることが一般的に知られている。酸無水物法は塩化物を経由しないクリーン工程ではあるものの、その酸無水物合成に大きなエネルギー負荷(熱条件)が生じ、また有害有機廃棄物の生成を伴う場合も多い。安全性の高い触媒による酸無水物合成が実現すれば、その技術は化学工程のグリーン・サステイナブル化の基盤となり「エステル、アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究」の実現に繋がる。

【スケジュール】

事業項目	21年度				22年度				23年度							
	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期				
②-b「エステル、アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究」																
高活性選択性触媒の開発	←				→											
芳香族ジカルボン酸無水物の合成条件確立	←				→											
脂肪酸ジカルボン酸無水物の合成条件確立		←				→										
テトラカルボン酸無水物の合成条件確立			←				→									
モノカルボン酸無水物の合成条件確立				←				→								
スケールアップ(>1 g)			←→													
エステルの合成条件確立					←				→							
アミドの合成条件確立						←				→						
イミドの合成条件確立							←				→					
スケールアップ(>10 g)							←				→					
触媒合成法のブラッシュアップ								←				→				
触媒の回収・再利用の条件確立									←				→			
スケールアップ(>100 g)												←		→		

【最終目標】

生産スケール 100g 以上、反応率 80%以上、選択率 90%以上、反応温度 170℃以下、
反応時間 24 時間以内、触媒量 5mol%以下または触媒の回収 98%以上

【予算】

(単位：百万円)

	H 2 1 年度	H 2 2 年度	H 2 3 年度	総額
名古屋大学（再委託）	1 0	7	5	2 2

◆ 革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発（東大グループ）

本テーマでは、東京大学で開発されたオリジナル技術である、アクア触媒による水溶媒プロセス技術およびリサイクル可能な高分子固定化金属触媒プロセス技術をシーズ技術として、以下の三つのサブテーマにおいて GSC プロセスの開発を行った。①アクア触媒によるアセトアルデヒド製造プラント排水中の希薄酢酸回収技術開発、②固定化触媒を活用する革新的水素化反応システム開発、③グリーンプロセスのための高分子固定化金属触媒試薬の開発

①アクア触媒によるアセトアルデヒド製造プラント排水中の希薄酢酸回収技術開発（昭和電工、東京大学）

アセトアルデヒド製造プラント排水中の希薄酢酸回収プロセス開発に向けて、新規触媒とそのプロセス開発を行う。平成 2 0、2 1 年度で、水層溶け込み量 1% 以下の高活性触媒の開発と、エステル化／エステル交換反応ルートの連続プロセスを構築し、その経済性評価により判断を行う（中間評価）。経済性が確保できれば平成 2 2、2 3 年度で、水層溶け込み量 0.1% 以下の更なる高活性触媒の開発と、ベンチ設備の設計・建設・運転と排水実液評価により、実用的なプロセスとして確立を目指す。経済性が確保できなければ全体計画の見直しを行い、希薄酢酸の回収方法について、エステル化／エステル交換法以外の経済的な方法についての検討を行う。東京大学から電気通信大学に触媒開発の一部を再委託する。

【スケジュール】

事業項目	21年度				22年度				23年度			
	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期
①「アクア触媒によるアセトアルデヒド製造プラント排水中の希薄酢酸回収技術開発」												
東京大学集中研												
エステル化/エステル交換法												
エステル化触媒開発	→	→	→	→								
エステル交換触媒開発	→	→	→	→								
酢酸濃縮/水中エステル化法												
酢酸濃縮法開発					→	→	→	→				
水中エステル化法開発					→	→	→	→	→	→	→	→
昭和電工分担研												
エステル化/エステル交換法												
エステル化プロセス検討	→	→	→	→								
エステル交換プロセス検討	→	→	→	→								
排水実液試験	→	→	→	→								
経済性評価	→	→	→	→								
酢酸濃縮/水中エステル化法												
酢酸濃縮プロセス検討		→	→	→	→	→	→	→				
経済性評価		→	→	→	→	→	→	→	→	→	→	→

【最終目標】

触媒開発は、水層に溶け込む触媒量で0.1%以下を目指して、親水性／疎水性を制御した触媒開発を継続し、水中エステル化反応にてエステル化収率90%以上を目指す。希薄酢酸濃縮/水中エステル化プロセスのプロセス試算を実施し、プロセスフロー作成とコスト試算を行い、新触媒開発に基づく希薄酢酸回収プロセスの実用性を評価する。

【予算】

(単位：百万円)

	H 2 1 年度	H 2 2 年度	H 2 3 年度	総額
昭和電工+東大 (うち加速)	1 1 8 (2 8)	9 2 (2 8)	6 4	2 7 3
電気通信大学 再委託	8	8	—	1 6

②固定化触媒を活用する革新的水素化反応システム開発（日光ケミカルズ、東京大学）

環境調和型で、生産効率が高い革新的連続フロー水素化反応プロセスを開発する。薬粧品原料をモデル物質として、そのために必要な固定化触媒と連続フローリアクターの開発をおこない、プロセスの革新性を検証すると同時に、連続フローリアクターを実用化規模までスケールアップする。さらに、モデル物質のオレフィン化合物以外の水素化反応、薬粧品原料以外の産業分野への適応性を検討する。東京大学から東京理化工械にフローシステム開発の一部を再委託する。

【スケジュール】

事業項目	21年度				22年度				23年度				
	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	
①「固定化触媒を活用する革新的水素化反応システム開発」													
東京大学集中研													
水素化用触媒開発	→												
連続フローリアクター開発	→												
日光ケミカルズ分担研													
連続フローリアクターでの触媒評価	→												
開発触媒の大量調製方法の確立			→										
連続フローリアクターのスケールアップ	→												
開発水素化プロセスの適用性の拡張	→												
試作品(生成物)評価	→												
コスト試算	→												
パイロットプラント設計	→												

【最終目標】

平成 23 年度は、連続フローリアクター(内径 100mm)により、水素化反応試験における化合物の適用性拡大を検討する。反応例もオレフィン化合物の水素化以外の反応への適用性を評価する。また、連続フローリアクターの実用化に関しては、200mm のパイロットプラントでの水素化を開始する計画になっている。

開発目標値：金属漏出 0.1%以下(製品への金属混入 1ppm 以下)、触媒回転数：5 万回以上、触媒価格 ¥50,000/kg 以下

【予算】

(単位：百万円)

	H 2 1 年度	H 2 2 年度	H 2 3 年度	総額
日光ケミカルズ + 東大 (うち加速)	1 1 3 (2 8)	8 7 (2 8)	6 4	2 6 3
東京理化工械 再委託	1 0	1 0	1 0	3 0

③グリーンプロセスのための高分子固定化金属触媒試薬の開発（和光純薬、東京大学）

③－a「架橋型高分子を用いた固定化技術による高分子固定化オスミウム触媒の開発と大量合成方法の確立」

高分子固定化オスミウム（Os）触媒の機能最適化を行い、大量製法を確立し、本触媒を用いる代表的反応であるジヒドロキシル化反応の工業的実用化を、実際の医薬品中間体を合成することにより検証する。また、触媒コストを製法面から多角的に見直し、最大 1/5 までのコストダウンを図り、工業プロセスとしての試設計を行い顧客別触媒の最適化を目指す。

【最終目標】

平成 23 年度は、継続して触媒の安価な大量製法の検討、及び本触媒による工業プロセスとして試設計を実施する。顧客別触媒の最適化、触媒の安定供給を目指し、100 グラム～10 キログラムでの生産法を確立し、サンプル供給を実施する。

顧客別触媒の最適化では、顧客の反応基質に対応した最適な高分子固定化 Os 触媒の性能の向上を目標とする。また、触媒の安定供給を目指し製造法を改良する。

開発目標値：金属漏出 1%以下、反応率 85%、選択率 95%

③－b「新規開発ポリマーを用いた、Os 以外の汎用金属(Pd、Pt、Au など)触媒への適用と試薬での一般市場への供給と大量合成への適用」

高分子固定化 Os 触媒での知見を生かし、Os 以外の汎用貴金属(Pt、Pd、Au)への応用検討を行う。Os 触媒同様、繰り返し使用回数の上昇、触媒活性能力の向上、金属流出量の抑制など、触媒機能の最適化を行い、大量合成法の設計と試作生産、実用プラントに向けたデータ習得を行い、本触媒による工業プロセスとして試設計を実施する。

【最終目標】

平成 23 年度は、継続して安価な大量製法の検討、及び本触媒による工業プロセスとして試設計を実施する。実用プラントに向けたデータ習得を行い、リスクアセスメントを実施して、50 グラム～10 キログラムでの生産法を確立し、サンプル供給を実施する。

引き続き、Pd 及び Pt 触媒では実用プラントに向けたデータ習得およびリスクアセスメントを実施する。

開発目標値：金属漏出 2%以下、反応率 80%

【スケジュール】

事業項目	21年度				22年度				23年度			
	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期
①「グリーンプロセスのための高分子固定化金属触媒試薬の開発」 東京大学集中研												
PI/CB-Au触媒開発												
PI Pt/Au触媒開発												
PI Pt触媒開発												
PI/CB-Au/Pt, Au/Pd触媒開発												
PI/CB-Au/Co触媒開発												
和光純薬工業分担研												
PI Os触媒試薬化												
PI Os II型触媒開発および試薬化												
PI/CB-Au触媒試薬化												
PI Pt/Au触媒試薬化												
PI Pt触媒試薬化												
PMI/CB-Pd触媒開発および試薬化												
Camptothecin中間体合成におけるPI Osの評価												
キラル配位子担持固定化Os触媒の開発												

【予算】

(単位：百万円)

	H 2 1 年度	H 2 2 年度	H 2 3 年度	総額
和光純薬＋東大 (うち加速)	1 1 2 (2 8)	8 6 (2 8)	6 3	2 6 0

◆ 革新的酸化プロセス基盤技術開発 (産総研グループ)

「廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発」(革新的酸化プロセス基盤技術開発)は、全化学プロセスの30%を超えと言われ、工業的に最重要であるが、環境を最も汚染する酸化プロセスの革新を目指す。具体的には、ハロゲンや重金属酸化剤を使用せず、しかも環境への負荷を大幅に低減できる可能性を持つ過酸化水素を酸化剤とする酸化プロセスの基盤技術を確立することにより、廃棄物、副生成物を削減できる革新的酸化プロセス及び化学品の開発を目的とする。

① 多官能性基質の酸化技術開発 (昭和電工株式会社、産業技術総合研究所)

半導体封止剤に用いられる樹脂には、耐光性、耐熱性、絶縁特性という硬化後の特性に加え、封止する際に低粘度であり、かつ硬化収縮も小さいという特性も求められている。このような性質を持つ樹脂としては、シリコン樹脂またはエポキシ樹脂が候補であるが、シリコン樹脂は高価である上に、水蒸気ガス透過率が高く絶縁特性が不十分である。そこでエポキシ樹脂の絶縁特性を改善するためにハロゲンフリーで合成するとともに、前記特性を実現するために精緻に分子設計された内部骨格と、多官能化された架橋系を分子内に組み込んでいく必要がある。このような背景のもとに、内部骨格で高性能を実現した複数の二重結合を持つ化合物を酸化して多官能エポキシ化合物を製造する技術の確立をめざす。生成物として得られる多官能エポキシ化合物は加水分解を受ける機会も多く、開環生成物が副生成物として生成し易い。そこで、加水分解反応を抑えつつ、高収率でエポキシ化合物を与える反応系を開発する必要がある。

【スケジュール】

事業項目	21年度				22年度				23年度			
	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期
①「多官能性基質の酸化技術開発」												
・触媒スクリーニング	→											
・工業的最適酸化剤の決定	→											
・コスト削減、スケールアップ												→
・触媒改良												→
・安全性評価(毒性評価等)												→

【最終目標】

研究開発目標として、反応率 80%以上、選択率 90%以上、用途面としては半導体封止剤としてユーザー配布可能なレベルを目標とする。

【予算】

(単位:百万円)

	H 2 1 年度	H 2 2 年度	H 2 3 年度	総額
昭和電工	2 4	6 3	3 0	1 1 7
(うち加速)		(4 3)		(4 3)

② 高分子量基質の酸化技術開発（電気化学工業株式会社、産業技術総合研究所）

高分子量基質（ポリマー）の高活性酸化技術開発のため過酸化水素を酸化剤に用いる反応条件の絞り込みおよび新規触媒開拓による実践的酸化プロセス基盤技術開発を行う。エポキシ化されたポリマーは2種類の用途に向けて開発する。分子量が大きく（5-20万）、オレフィンが比較的多めに残っているエポキシ化ポリマーはポリマー改質剤として、分子量が小さめ（1-4万）でオレフィンが比較的少ないポリマーは次世代粘・接着剤としての用途が見込まれる。しかし、ポリマーは高粘度であり分子同士が複雑に絡み合っていることから過酸化水素を酸化剤とする2相系の反応では従来知られているモノマーのエポキシ化反応の場合と全く異なる挙動を示す。ポリマーのエポキシ化反応性を向上させつつ適切に制御するためには理論的経験的に多くの知見を得る必要がある。

【スケジュール】

事業項目	21年度				22年度				23年度			
	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期
②「高分子量基質の酸化技術開発」												
・触媒開発・最適化	→											
・最適プロセス検討												→
・開発材料最適化												→
・ベンチ準備・実証												→

【最終目標】

研究開発目標として、ポリマー改質剤の場合には分子量 10 万のポリマーへのエポキシ基 30%導入、及び粘・接着剤の場合には分子量 2 万のポリマーへのエポキシ基 60%導入について、反応率 80%以上、選択率 90%以上とする。

【予算】

(単位:百万円)

	H 2 1 年度	H 2 2 年度	H 2 3 年度	総額
電気化学 (うち加速)	2 0	2 2 (6)	1 4	5 5 (6)

③ 易加水分解性基質の酸化技術開発 (荒川化学工業株式会社、産業技術総合研究所)

植物由来の基質であるテルペン類のエポキシ化では、生成物であるテルペンエポキシドの不安定性により、発生する反応熱によって生成物の逐次的酸化反応が起こってしまい、特に酸性条件下ではテルペン類に特有な骨格転位反応が起こりやすい。そこで過酸化水素を用いるクリーンな酸化法で植物由来原料の高選択的酸化を行う触媒系を開発する。テルペンは天然に幅広く存在するためその化学的変換技術開発は大きな波及効果を持つ。従来法では、加水分解性の高いエポキシドの合成にあたっては、エポキシドが水層と接触して分解しないように有機溶媒を用いる。本研究課題では有機溶媒フリーな条件下でも選択的にオレフィンのエポキシ化により対応するエポキシドを得る高選択的酸化技術開発を行う。本技術を達成するためには、エポキシドの加水分解が起こりにくい中性に近い条件でも高活性にオレフィンをエポキシ化する触媒の開発が必要となる。

【スケジュール】

事業項目	21年度				22年度				23年度			
	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期
③「易加水分解性基質の酸化技術開発」												
・触媒開発・改良	→											
・スケールアップ・実用化研究	→											
・サンプル実証・工業的評価									→			

【最終目標】

研究開発目標として、テルペン類のエポキシ化において、反応率 80%以上、選択率 90%以上、1 トン/年スケールの生産が可能なレベルの実証を行う。

【予算】

(単位:百万円)

	H 2 1 年度	H 2 2 年度	H 2 3 年度	総額
荒川化学	1 7	1 4	1 1	4 3

④ 難酸化性基質の酸化技術開発 (JNC株式会社、産業技術総合研究所)

LCD の光学材料はさらなる高機能化、低コスト化、省エネ化が望まれている。本研究課題では光利用効率を改善する光学材料に使用するモノマー (LCD モノマー) をターゲットとしている。LCD モノマーは、分子内に液晶性を有する化合物に二官能エポキシドが付加した構造で、ケトン類の酸素付与反応 (バイヤービリガー酸化)、エポキシ化反応により合成される。LCD モノマーの合成には、難酸化性の基質であるジケトン体、ジオレフィン体の酸化技術が必須であり、過酸化水素を用いた触媒的酸化技術を開発する。

【スケジュール】

事業項目	21年度				22年度				23年度			
	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期
④「難酸化性基質の酸化技術開発」												
・触媒開発	→											
・LCD光学材料の開発									→			
・スケールアップ									→			

【最終目標】

研究目標として、ケトン類の酸素付加反応で反応率 80%以上、選択率 80%以上、固定化触媒によるエポキシ化反応で反応率 80%以上、選択率 90%以上、いずれの反応に対しても金属溶出回収率 90%とする。

【予算】

(単位:百万円)

	H 2 1 年度	H 2 2 年度	H 2 3 年度	総額
J N C (うち加速)	1 8	2 3 (8)	1 4	5 5 (8)

⑤過酸化水素を用いた反応系の基礎研究(産業技術総合研究所、再委託先—東京大学、東京工業大学)

過酸化水素を酸化剤とし、タングステン錯体、四級アンモニウム塩類、及びアミノメチルホスホン酸からなる三元系分子触媒を用いることで、有機溶媒不要かつハロゲンフリーな高選択酸化技術を産業技術総合研究所は世界に先駆けて開発した。この酸化技術は、ファインケミカルズ等の現行製造プロセスをクリーン酸化プロセスへ転換しうる可能性を拓くものであるが、多官能性基質への適用、高分子量基質への適用、易加水分解性基質への適用、難酸化性基質への適用の点で改良が必要である。また、再委託先の東京大学、東京工業大学は触媒構造の最適化と触媒回収再使用性に関する基礎的な知見を有している。これらを体系化・融合化することで、過酸化水素を用いる酸化技術の適用範囲を飛躍的に拡大すると共に、基盤技術を確立する。

【スケジュール】

事業項目	21年度				22年度				23年度			
	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期	第1 四半期	第2 四半期	第3 四半期	第4 四半期
⑤「過酸化水素を用いた反応系の基礎研究」												
・触媒の設計指針の確立	→											
・体系化・融合化									→			
・ポリオキシメレート触媒の開発	→											
・新規メソポーラスシリカ触媒開発	→											

【最終目標】

平成 23 年度は、22 年度までに得られた知見を体系化・融合化し、より高い汎用性を持つ過酸化水素酸化技術として確立する。それを実証するために、多官能かつ高分子量基質

や多官能かつ易加水分解性基質など、複雑で難易度の高い基質の酸化について触媒を設計し、反応率 80%以上、選択率 90%以上の目標を達成する。再委託先の東京大学、東京工業大学はそれぞれ、ポリオキソメタレート触媒の作成、新規メソポーラスシリカ触媒の作成を通してプロセスに有効な技術として確立させる。併行して、昨年度得られた過酸化水素を用いる画期的な成果 (α , β -不飽和アルデヒドから α , β -不飽和カルボン酸への高選択的酸化反応、転位を伴い 1 触媒成分で 2 段の反応を一度に行い複雑な生成物を与える転位酸化反応、および鉄錯体を触媒に用いるオレフィンの選択的エポキシ化反応) に関し、基質適用範囲の探索、反応条件の限界見極めおよび推定しうる他の反応系への適応性について検討し、基盤技術として定着させる。

【予算】

(単位:百万円)

	H 2 1 年度	H 2 2 年度	H 2 3 年度	総額
産総研	6 0	5 0	4 8	1 5 9
東京工業大学 再委託	5	4	4	1 3
東京大学 再委託	5	4	4	1 3
合計	7 1	5 9	5 5	1 8 5

II.2.2 研究開発の実施体制

(1) 実施者の選定

本事業である基本計画の研究開発項目①及び②は、経済産業省が実施した平成20年3月24日～5月13日の公募に対し、企業、大学等（委託先から再委託された研究開発実施者を含む。）からの5件の応募があり、外部有識者からなる採択審査委員会を経て3件の事業を採択し、平成20年度より委託により実施している。平成21年度よりNEDOが本事業を運営・管理するに当たっては、平成20年度の進捗状況を踏まえた研究開発内容・計画及び実施体制の妥当性について、外部有識者による技術検討委員会(別添1)において、NEDOへの事業継承について審議した結果、当該事業はNEDOで実施する事業として妥当であること、また、実施体制は目標を達成し得る妥当なものであることから、1) 国立大学法人東京大学、昭和電工株式会社、和光純薬工業株式会社、日光ケミカルズ株式会社、2) 自然科学研究機構分子科学研究所、3) 独立行政法人 産業技術総合研究所、昭和電工株式会社、電気化学工業株式会社、荒川化学工業株式会社、JNC株式会社（当時チッソ株式会社）が委託予定先として、再度、了承されたため、委託して実施した。

なお、経済産業省による公募にあたっては外部専門家からなる技術審査委員会をNEDO内に組織する等、委託先候補選定、運営管理等において経済産業省に助言、協力した。

(2) プロジェクトリーダー

本研究開発を実施する各研究開発グループの有するポテンシャルを最大限に活用することにより効率的に研究開発推進を図る観点から、委託先決定後にNEDOが指名する研究開発責任者（プロジェクトリーダー）を研究体に置き、その下に研究者を可能な限り結集して効率的な研究開発を実施することとなっている。

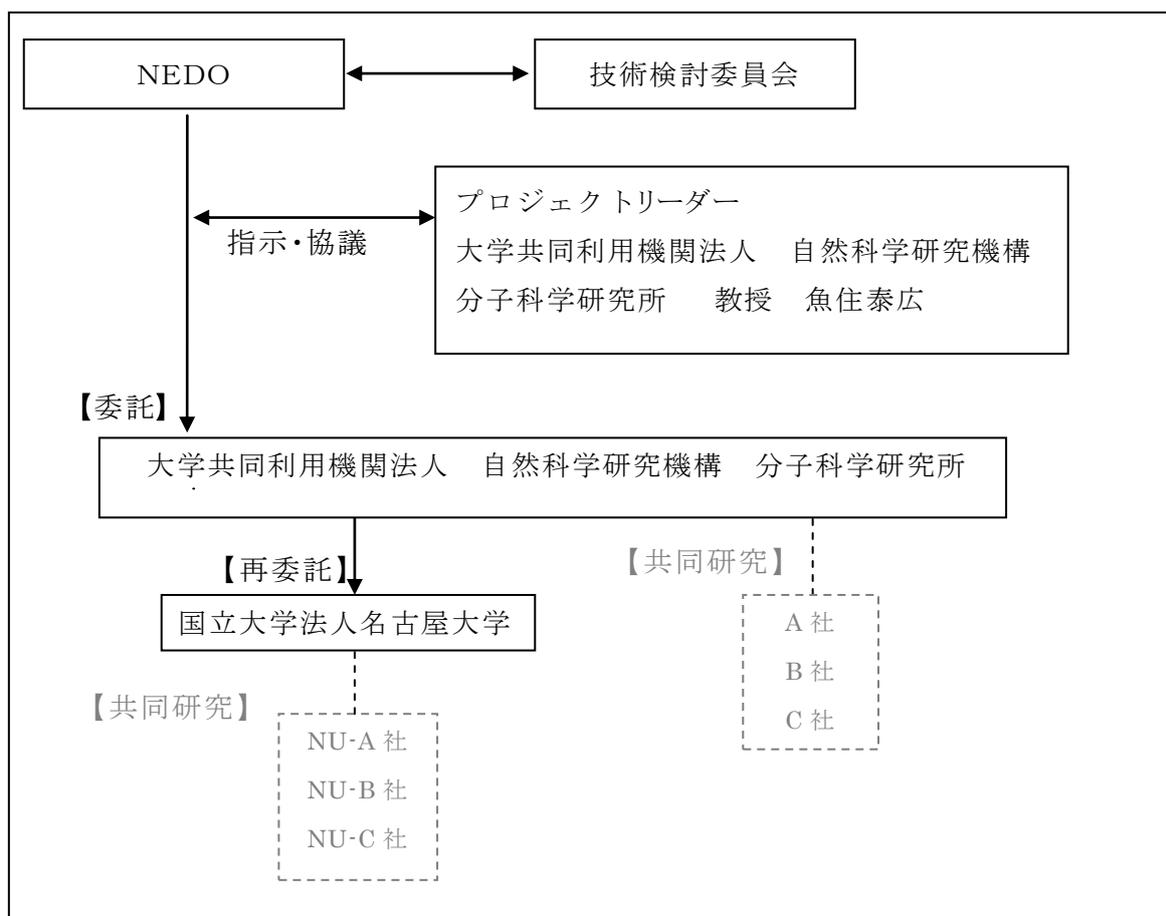
このため、「高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発」では大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 分子科学研究所 教授 魚住泰広氏を、「革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発」では国立大学法人 東京大学 教授 小林修氏を、「革新的酸化プロセス基盤技術開発」では独立行政法人産業技術総合研究所 研究環境安全本部 本部長 島田広道氏をプロジェクトリーダーとした。

(3) 個別プロジェクトの実施体制

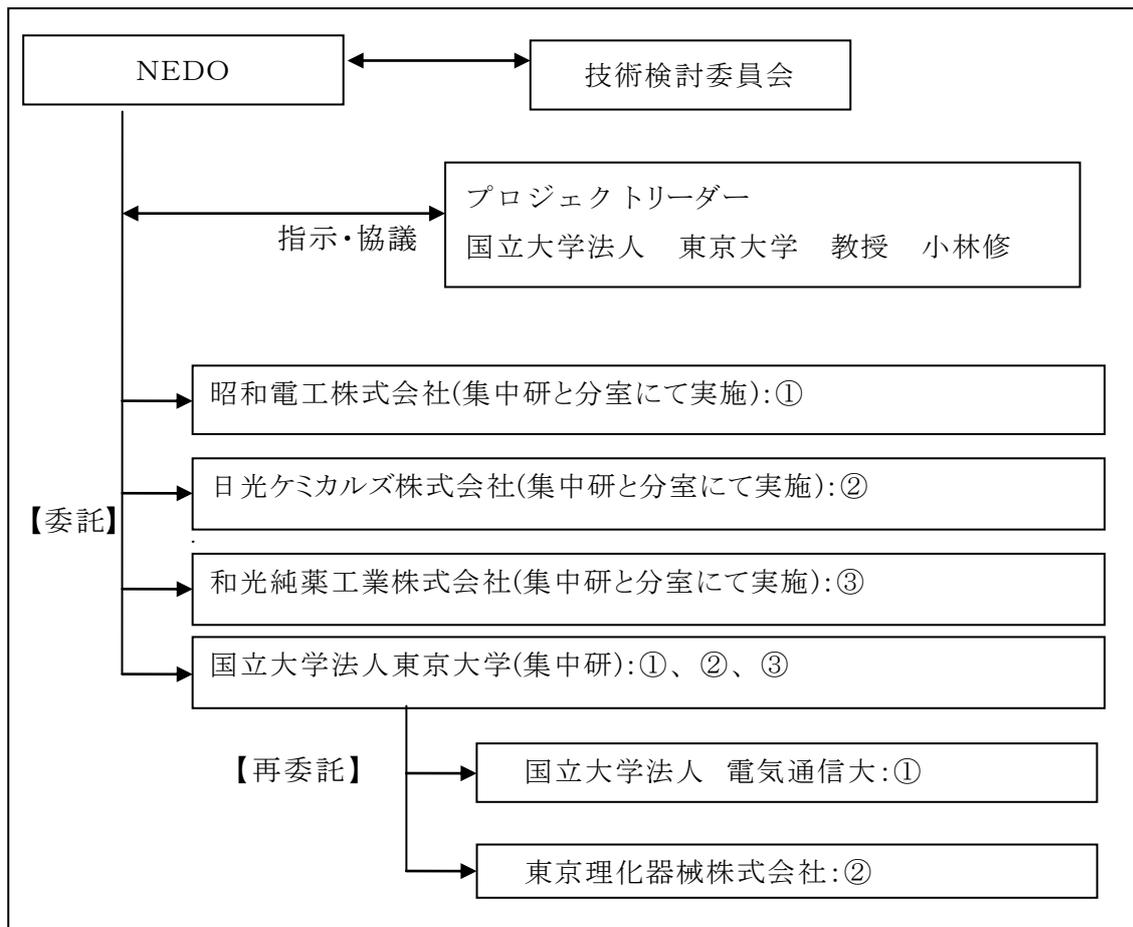
実施体制図を以下に示す。

東大G、産総研Gにおいては研究者、技術者の相互交流の活発化、研究投資（経費と人材）の集中化を図るため、集中研究室の体制をとった。

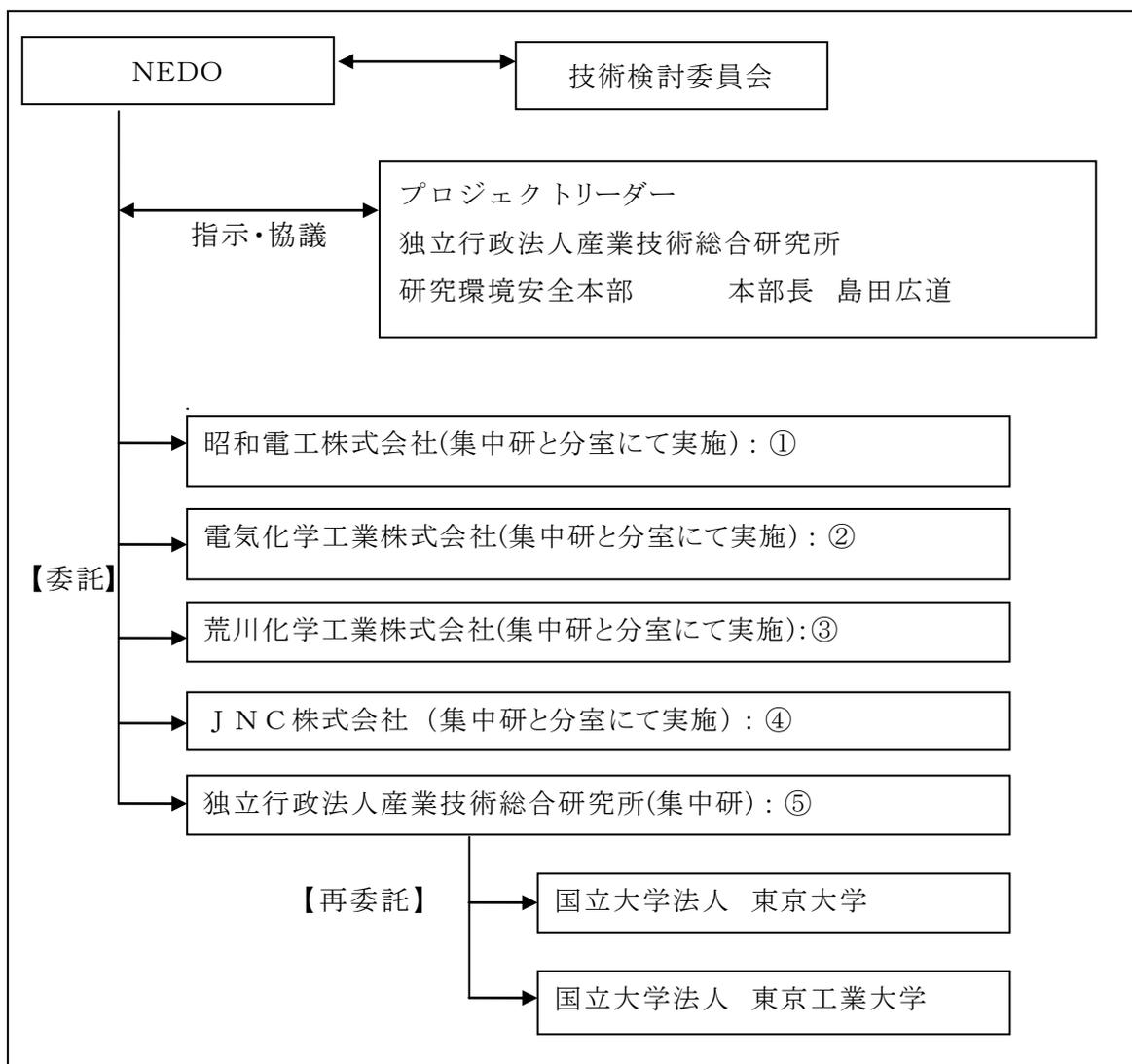
◆ 高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発（分子研G）



◆ 革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発（東大グループ）



◆ 革新的酸化プロセス基盤技術開発（産総研グループ）



II.3 研究開発の運営管理

本事業の管理・執行に責任を有するNEDOは、経済産業省及びプロジェクトリーダーと密接に連携を取りつつ、本事業の目的及び目標に照らして適切な運営管理を実施した。具体的には、プロジェクトリーダー、委託先等からの随時のヒアリングにより、開発目標に対する成果状況などの報告を受けた他、定期的に開催した技術検討委員会の場を活用して、外部有識者の意見を運営管理に反映させた。また、優れた研究成果を上げている研究体に対しては、研究加速のため予算の効果的配分を行い、実用化に資する実質的な研究成果の確保に努めた。

(1) 集中研究室の設置

東大G、産総研Gに集中研究室の体制をとり、研究者、技術者の相互交流を活発化させた。集中研究室体制により、研究投資（経費と人材）の集中化を図った。

(2) 技術検討委員会

本事業ではNEDOとして研究開発計画の確実な実施のためにアドバイス等を行うため、有識者6名からなる技術検討委員会を設置した。

委員のリストを以下に示す。

委員名	所属等	専門
御園生 誠（委員長）	東京大学名誉教授	触媒化学、化学環境学
野尻 直弘	元三菱化学 理事	工業化学
北島 昌夫	早稲田大学 招聘研究員	材料化学
染宮 昭義	神鋼リサーチ 主席研究員	高分子化学
沼口 徹	日本ポール Director	化学工学
室井 高城	アイシーラボ 代表	触媒化学

委員会は年度毎に原則2回開催とし、このうち1回は研究開発場所にて実施し、装置等も確認しながら現場の研究者らとの意見交換やアドバイスも行った。

(3) 技術検討委員会開催履歴

<平成20年度>経済産業省の直執行期間

開催日	場所	参加者	主な指摘事項、コメント
H20.12.9	NEDO 日 比谷	委員：5名 METI：4名 NEDO：3名 委託先：全委託先	企業のコミットメント、知財等の成果の扱い、基本計画との数値目標の整合については、来年度NEDO事業に移行する際に修正、明確化すること。

<平成21年度>

開催日	場所	参加者	主な指摘事項、コメント
H21.7.30	産総研 つくば	委員：6名 METI：1名 NEDO：3名 委託先：産総研G	各社事業部の実用化についての意向を確認し、実用化に向けた課題を早期に明確化すること。
H21.8.12	分子研	委員：4名 METI：1名 NEDO：3名 委託先：分子研G	新規触媒を広く展開できるように、実用化に向けて（委託外協力関係にある）企業に任せる課題、研究体制の整理をすること。
H21.9.3	東大	委員：6名 METI：3名 NEDO：3名 委託先：東大G	基礎データの充実だけでなく、エンジニアリングに関するデータの収集も行い、実用化に向けたプロセス設計を行うこと。
H22.2.22	NEDO 日 比谷	委員：6名 METI：1名 NEDO：4名 委託先：全委託先	分子研G：コスト、マーケットの大きさ等を考慮して、全体のFSをしっかりと見直すこと。 東大G：開発しているプロセスと実用化が乖離し始めている委託先がある。 産総研G：各社事業部との連携を強め、事業化に向けてより加速すること。

<平成22年度>

開催日	場所	参加者	主な指摘事項、コメント
H22.9.7	NEDO 日 比谷	委員：6名 METI：3名 NEDO：4名 委託先：分子研G	出口の明確化や洗浄剤以外へ広げていくためにも、NEDOが（委託外協力関係にある）企業との関係も含めガイドをしていくこと。
H22.9.10	昭和電 工	委員：6名 METI：0名 NEDO：5名 委託先：産総研G	各社で温度差はあったものの、事業部による事業化の説明により、先が見えてきた。
H22.10.2 2	東大	委員：6名 METI：2名 NEDO：4名 委託先：東大G	1社は成果の打出し方を工夫すべきであり、他の2社の課題は、触媒の改善等よりもむしろ上市方法にある。

H23. 4. 26 震災により開催ずれ込み	T K P 京橋	委員：6名 METI：2名 NEDO：5名 委託先：全委託先	分子研G：基礎研究は出口も見えかかってきたが、用途先探索と高圧での接触酸化の安全性が課題。 東大G：実用化したときの問題点を事前に洗い出して、きちんと改良していくべき。 産総研G：基盤技術担当の産総研がもう一踏ん張りして、ベンチ試験で発生した問題点解決のフォローをすることが必要。
---------------------------	-------------	---	--

<平成23年度>

開催日	場所	参加者	主な指摘事項、コメント
H23. 10. 12	J N C	委員：6名 METI：1名 NEDO：3名 委託先：産総研G	実プロセスで課題が出てきており、それらを残したままで実用化の障害にならないように、基盤技術担当の産総研で課題を整理し対応すること。
H23. 10. 14	分子研	委員：5名 METI：1名 NEDO：2名 委託先：分子研G	コスト低減のために担体を色々変えた場合の比較データをまとめ、構造・機能等の違いを明らかにした上で、工業化のために必要な残された検討項目を完結させること。
H23. 10. 20	東大	委員：6名 METI：1名 NEDO：4名 委託先：東大G	東大基盤研は各企業の実用化に向けたバックアップをきっちりと行うこと。最終的なまとめ方の工夫を必要とするテーマもある。
H24. 2. 7	NEDO 川崎	委員：6名 METI：1名 NEDO：6名 委託先：産総研G	本プロジェクトは反応を中心に良く行われた成功事例である。最終的には、事業化にまでつなげた成功例になるように尽力して欲しい。
H24. 2. 17	NEDO 川崎	委員：6名 METI：1名 NEDO：8名 委託先：分子研G	今後は基礎研究を発展させること、応用面をどうやって物にするかだ。得られた成果を広く産業界に伝えるようにして欲しい。
H24. 2. 28	NEDO 霞ヶ関	委員：5名 METI：1名 NEDO：7名 委託先：東大G	全体としては良い成果が出た。P Lのリーダーシップで東大基盤研と企業が良く連携できていた。N E D Oの継続研究の話もあり、今後さらなる発展を望む。

II.4 研究開発成果の実用化に向けたマネジメントの妥当性

II.4.1 実用化につなげる戦略

◆高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発（分子研G）

錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の研究開発では、TPD 誘導体の効率供給がEL照明の低コスト大量生産に繋がり、将来における蛍光灯代替照明となりうることを期待する委託外協力企業との連携の下、TPD 誘導体に代表される光電子機能有機分子の柔軟かつ簡便な合成をめざし、委託外協力企業の自社開発分子はもとより、将来において見込まれる多方面からの受託合成における競争力強化のための低コスト合成法の実用化を念頭に置いて実施した。

ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究では、電子部品用新規洗浄剤の低コスト大量生産に繋がることを期待する委託外協力企業との連携の下に実施した結果、製品候補としてのカルボン酸型界面活性剤はユーザーによる製品評価を依頼できる段階にあり、すでに一旦研究者の手から離れ市場ニーズとの擦り合わせを進めつつある。なお、ユーザー候補に対する製品評価の依頼においては依頼先の斡旋にNEDOが積極的に関与し、日本産業洗浄協議会（出席企業5社）、他企業4社へNEDOが製品の特徴等に関するプレゼンを実施している。

今後ユーザー、ユーティリティーが絞られ次第、そのニーズに特化した更なる工程の最適化が求められることが想定されるが、これについては委託外協力企業の研究陣と技術ノウハウの共有等十分な協働体制が組まれている。

更に、開発した白金ナノ触媒自体についても潜在的利用者が見込まれることから、国内試薬会社による製品化が決定し、現在技術移転を進めつつある。同試薬会社では別の国内実験装置メーカーとのタイアップによる連続フロー酸化システムの製品化もあわせて検討している。

以上から、本研究項目では初期の設定目標を達成するに留まらず、最終製品のユーザーによる製品評価の前段階にあること、開発した触媒の製品化の決定など、すでに一部製品化に到達したと考えている。

エステル・アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究では、ホウ酸触媒の成果は、ポリイミド、ポリアミドカルボン酸の環境調和型合成に応用できるものと期待される。まずは触媒の試薬化を検討しつつある。また、ランタン触媒は特に嵩高いアルコールのエステル合成に有効であり、医薬系及び化学系企業との共同研究へと展開できれば、と考えている。更に超原子価ヨウ素触媒は光学活性スピロラクトン類の合成に有効な触媒であり、和光純薬工業より試薬化が決定、上市に至っている。

◆革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発（東大グループ）

①アクア触媒によるアセトアルデヒド製造プラント排水中の希薄酢酸回収技術

アクア触媒による工場廃液からの希薄酢酸の回収プロセスの研究開発においては、開発したプロセスを昭和電工が自社工場の廃水処理プラントにおいて実用化することを想定し、緻密に設定し

たコスト目標を達成できるか否かを常に厳格に検証しつつ実施した。このため、技術的には当初開発した触媒により高い収率で水中エステル化が進行するプロセスが開発でき、また、当初問題であった触媒の水層への溶解も触媒構造の再設計により解決されたものの、実用化に向けて当該コスト目標を達成するためには、依然触媒および反応場のさらなる改良が必要となっており、本事業終了後もNEDOの継続研究のスキームにより、東京大学と昭和電工が密接に連携を図りながら、大学(基盤研)における基礎検討を継続し、新規触媒および反応場の開発に取り組むことで当初目標の達成を目指すこととなった。

②固定化触媒を活用する革新的水素化反応システム開発

固定化触媒を活用する革新的水素化反応システム開発においては、触媒の長時間使用が可能であり、再生コストやそれに伴う廃棄物の大幅な削減が可能であること、また従来法に比べて反応温度や圧力を下げられる場合が多く、省エネのみならず副反応の抑制や安全性の向上も期待できること、さらに同等規模のバッチ方式に比べて装置が小型な省スペース型システムであり、安全性がバッチ方式装置と比較して高い反応装置といえることから、得られる結果や実用化した際の効果等を考慮して実用化対象とする薬粧品原料製品に優先順位を付けており、最初の製品(薬粧品原料)での水素化フローシステムの実用化は日光ケミカルズにおいて本年実施する計画である。さらに引き続いてその他の製品の水素化フローシステムを実用化に向けて進める計画となっている。反応例もオレフィン化合物の水素化にとどまらず、様々な化合物の水素化反応が可能になると考えられ、開発プロセスが波及する産業分野も、化粧品・医薬品原料のみならず、食品・ファインケミカル、石油化学などへと広がることが期待される。

③グリーンプロセスのための高分子固定化金属触媒試薬の開発

グリーンプロセスを指向した高分子固定化金属触媒試薬の開発においては、和光純薬工業による高分子固定化金属触媒の試薬化という実用化戦略が順調に進んでいる。即ち本プロジェクトで開発した6種類の固定化金属触媒(PI オスミウム触媒、PI オスミウムII型触媒、PI カーボンブラック金触媒、PI 白金/金触媒、PI 白金触媒、PMI カーボンブラックパラジウム触媒)は、既に市場への供給を順次行っており、ユーザーである製薬企業や化学系企業からの要望、問題点に基づいて触媒のさらなる最適化を行う予定である。最終的には、触媒をプロセス合成に適用するレベルまで開発を進め、工業レベルでの触媒のバルク合成および供給を行う。また、触媒の合成、供給のみならず、固定化オスミウム触媒を用いたジヒドロキシル化プロセス合成の経験を活かした医薬品中間体等の受託合成を目指す。本プロジェクトでは、1 mol スケールでの抗ガン剤カンプトテシンの中間体合成を達成しており、これらの結果を製薬企業に公開することによって、医薬品中間体の特注合成を受託できると考えている。これらを達成するために、企業への積極的なPR活動を通じて、固定化金属触媒の認知度を高めていく。

なお、プロジェクトリーダーは各共同研究先企業幹部とプロジェクトの開始時より月1回のペースで会談し、プロジェクトの進捗状況について話し合い、事業化決定の後押しを行った。

◆ 革新的酸化プロセス基盤技術開発（産総研グループ）

産総研グループの革新的酸化プロセス基盤技術開発では、産総研と各社との共同研究体制により、各社が必要とする製品を原料基質から高効率かつクリーンに変換する新規触媒プロセスを開発した。引き続いて、ベンチ設備を各社が設置したのち、ラボスケールからベンチスケールへとスケールアップし、プロセスの課題抽出、反応へのフィードバックまでを研究開発として行った。特に、技術的目処をつけた以降は、各社とも事業部門を関与させて事業化計画を検討することにより、より明確な事業化見通しの下、明確な開発目標を設定して研究開発が進められた。本事業終了後は、ベンチスケールでの過酸化水素酸化プロセスについてコスト面での確認を再度行い、工業規模製造へ向けて目処がついた後、ユーザーによるサンプルワークを通じての性能評価や安全性評価を進める。

サンプルワークによって良好な評価を受けることを想定して、引き続きプロセス改良およびコスト削減を触媒反応から精製過程まで全てについて検討した後、実機での検討、上市へ進める。具体的な化学品を以下の4種類の要素技術に対応してそれぞれ示す。

①多官能基質の酸化技術開発を通して、IC封止材を製造する。②高分子量基質の酸化技術開発を通して、新規電子材料用接着剤を製造する。続いて生分解性ポリマーの改質剤および相溶化剤の合成技術開発を進める。③易加水分解性基質の酸化技術開発を通して、透明電子材料用途のテルペンオキシドを高純度に製造する。④難酸化性基質の酸化技術を通して、光利用効率を改善する光学材料に使用するモノマー（LCDモノマー）を製造する。このうち①に関してはサンプルワークを概ね完了している。②から④に関しては、ベンチスケールでの検討までほぼ終了している。

なお、平成22年度にプロジェクトリーダーは各共同研究先企業4社の進捗に応じて、幹部と会談し、プロジェクトの進捗状況について話し合い、事業化決定の後押しを行った。

II.4.2 実用化につなげる知財マネジメント

◆高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発（分子研G）

- ①錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の研究開発では、NEDO 研究開始に先立ち、既に分子科学研究所が特許を申請済みであり、その基盤技術を利用する形で本 NEDO 研究が展開されているため、知財は十分に管理されている。また特に本 NEDO 研究期間内に共同研究企業（委託外）A社と共同開発した芳香族アミノ化触媒については、分子研：企業の持ち分 50：50として共同出願している。
- ②ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究では、NEDO 研究開始に先立ち、既に分子科学研究所が特許を申請済みであり、その基盤技術を利用する形で本 NEDO 研究が展開されているため、知財は十分に管理されている。
- ③エステル・アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究では、NEDO 研究によって見いだされた新知見を既に名古屋大学が特許申請済みであり、知財は十分に管理されている。

◆革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発（東大グループ）

知財の取扱いに関しては、下記の通り実行した。

- ①基礎特許は東京大学または東京大学と企業の共同において出願済みである。なお、東京大学においては本技術に関する基礎技術の特許を数多く有している。
- ②本プロジェクトでの新技术開発の際は、出願に関する打ち合わせを東京大学と企業において行い、その結果に基づき随時出願を行った。
- ③本プロジェクトにおいて、東京大学と昭和電工で共同出願を行い持ち分は 50：50とした。また、東京大学と和光純薬工業で共同出願を行い持ち分は 50：50とした。

◆革新的酸化プロセス基盤技術開発（産総研グループ）

知財の取扱いに関しては、プロジェクト開始時から下記の通り定め、実行した。

- ①産総研と各企業との共同研究による触媒開発成果に関しては、産総研：企業の持ち分を 50：50として、発明が発生する毎に随時特許を出願する。
- ②最終製品および酸化技術以外の企業が主に開発した技術については、企業が持ち分 100%で特許出願を行う。
- ③産総研が独自に開発した触媒技術の基盤成果に関しては、産総研の単願で特許出願を行う。
- ④それぞれ出願の際には、簡単な要旨を各社間で回覧し、了解を得る。これにより、知財に関する摩擦が無いようにするとともに、NEDOへの届出を行う。

II.5 情勢変化への対応

(1) 経済産業省からNEDOへの事業の継承

平成21年度に経済産業省から当機構の事業として継承するにあたり、平成20年度事業成果を踏まえ、基本計画(案)及び実施体制(案)の妥当性について、平成21年2月19日の技術検討委員会(別添1)において、NEDOへの事業継承について審議した。その結果、当該事業はNEDOで実施する事業として妥当であること、また、実施体制(案)は目標を達成し得る妥当なものであることから、1) 国立大学法人東京大学、昭和電工株式会社、和光純薬工業株式会社、日光ケミカルズ株式会社、2) 自然科学研究機構分子科学研究所、3) 独立行政法人 産業技術総合研究所、昭和電工株式会社、電気化学工業株式会社、荒川化学工業株式会社、JNC株式会社(当時チッソ株式会社)が委託予定先として、再度、了承された。

(2) 加速

プロジェクトの成果が顕著であるものの実用化を促進すべく、4度に渡り加速財源を投入した。

時期	金額 (百万円)	目的及び概要	主な成果
平成22年2月	85.0	【東大G】 高分子固定化金属触媒の構造解析研究を加速するため、高分子内に取り込まれた金属量の分析装置と金属錯体などの不安定化学種の質量分析装置を導入した。	触媒のキャラクタリゼーションが大きく改善され、触媒構造に関する情報が精密かつ迅速に得られるようになり、触媒開発が大きく加速された。特にオスミウム等の高分子カルセランド型触媒(PI触媒)の分析に金属量の分析装置は不可欠であり、市場供給用の触媒合成から工業化スケール実験まで達成している。
平成22年8月	15.0	【産総研G①昭和電工】 ①官能基質の酸化技術開発の中では、需要の変化にあわせて当初の予定であったLED封止材から、半導体(IC)封止材へとターゲットを変更し、半導体封止材用途での開発を加速するため、製造工程のより詳細な評価、生成物の実用評価(社内評価)等を行った。なお、触媒開発部分は両材料に共通の為、計画に大幅な変更は生じなかった。	開発したIC用封止材はユーザー評価良好であり、平成25年度末に上市予定。
	6.5	【産総研G②電気化学】 ②高分子量基質の酸化技術開発の	反応器の攪拌装置の改良検討が可能になり、

		<p>中では、バイオポリマーへの注目度が高まったことから、これまで行ってきたポリマー改質剤および新規接着剤の開発に加えて、相溶化剤の開発を開始した。また、反応器の攪拌装置の改良検討をおこなって新規攪拌様式を決めるとともに、実用評価（社内評価）にむけたサンプル合成を行った。</p>	<p>H23 年度に行う予定であったベンチ設備によるポリマー酸化反応の検討を前倒しで実施した。</p> <p>その結果、新規に開始した相溶化剤開発も含めてスケールアップ研究を早期に実施できたため、サンプル供試の計画を早めることが出来た。</p>
	8. 0	<p>【産総研G④JNC】</p> <p>④難酸化性基質の酸化技術開発の中では、LCD 光学フィルム用途の開発を加速するため、プロセスリアクターを購入して詳細な熱データ測定を行い、反応器の新規除熱設計を行った。</p>	<p>反応時の除熱設計が可能となったことより、H23 年度に行う予定であったベンチ設備による反応を前倒しで設計することができ、スケールアップの研究を早期に実施することができた。その結果、大量生産を開始する予定時期を2年早めることができた。</p>
平成22年11月	28. 0	<p>【産総研G①昭和電工】</p> <p>①多官能基質の酸化技術開発の中では、ユーザー評価を促進するため外注による試験を実施した。</p>	<p>エポキシ樹脂にユーザー評価実施上の問題がないことを確認して、平成24年度に見込んでいたユーザー評価を平成23年度に実現し、早期実用化につなげた。</p>
平成23年3月	82. 5	<p>【東大G】</p> <p>前年加速の成果もあり、当初予想より前倒しでスケールアップ開発の目処が立ったため、大型フロー反応装置および実用化の土台となる種々解析用の装置を前倒しで導入した。</p>	<p>フロー反応装置での反応スケールアップ検討が順調に展開し、平成24年中に本プロジェクトでの開発プロセスに生産切り替え予定。</p>
	8. 0	<p>【分子研G②】</p> <p>スケールアップにおいて課題となる反応条件を早期に決定するため、反応温度と反応圧力を多様な組み合わせで制御できる固体触媒反応装置を導入した。</p>	<p>ユーザー評価に供する試料検体を高効率にて100グラムスケールで再現性よく与える容易にスケールアップ可能な合成条件を確立し、平成23年度内に複数回の試料提供を実現した。</p>

(3) 研究体制

時期	変更内容	理由
平成23 年3月	東大G 再委託先の電気通信大学との契約 終了。	当初設定していた計画が前倒しで 進行し、実施内容が終了した。

II.6 評価に関する事項

II.6.1 事前評価

本事業は、経済産業省が平成20年3月24日～5月13日の公募に対し5件の応募から3件の事業を採択し、平成20年度より委託により実施したが、この公募にあたってはNEDO POSTの設置、外部専門家からなる技術審査委員会をNEDO内に組織する等、委託先候補選定、運営管理等において経済産業省に助言、協力した。

また、平成21年度よりNEDOが本事業を運営・管理するに当たっては、平成20年度の進捗状況を踏まえた研究開発内容・計画及び実施体制の妥当性について、外部有識者による技術検討委員会(別添1)において、NEDOへの事業継承について審議した。

(1) NEDO POST 2

- ・実施時期：平成19年12月27日～平成20年1月15日

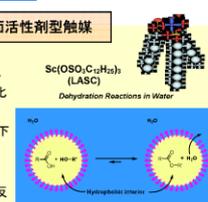
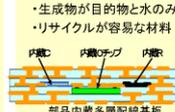
(2) NEDO POST 3

- ・実施時期：平成20年2月27日～平成20年3月13日

NEDO POST 3 20年度新規研究開発プロジェクト(案) 概要



研究テーマ名「グリーン・サステナブル・ケミカルプロセス創造的基盤技術開発」

研究目的	研究内容
<p>背景、目的、必要性(政策的位置付け、市場ニーズ、技術ニーズ)</p> <p>①背景：地球温暖化問題、資源枯渇問題が現実化しつつある中、地球及び人類のサステナビリティ(持続性)を如何に確保しながら、将来も永続的に高機能な素材、部材を生産、供給できるかが製造産業の喫緊の課題となっている。</p> <p>②市場ニーズ(目的)：今後も持続的にわが国の全製造業を支えるためには、これまでにない高機能な素材、部材を、未利用な資源等を利用して製造するクリーンで独創的な化学プロセスの開発が急がれている。</p> <p>③技術ニーズ：高機能な素材、部材をクリーンで持続的に製造する技術ニーズとして、(1)有害な化学物質の削減、(2)廃棄物、副生成物の削減、(3)リサイクル容易、(4)ライフサイクルにおける消費エネルギー削減、(5)希少資源の代替、(6)未利用/低品位資源の利用を実現する独創的で革新的な化学プロセスの技術開発が求められている。</p>	<p>○研究開発課題(目的達成のための技術課題)</p> <p>持続的に高機能な素材・部材を製造するためのプロセスのクリーン化を実現するため、下記の①～③の技術課題を解決できる、独創的で革新的な化学プロセスの技術開発を行う。</p> <p>①有害な化学物質を削減、使わない革新的プロセス及び化学品の開発、②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発、③その他：①～②以外の研究開発テーマで、社会状況等の緊急性を勘案して、産業競争力強化、大きな波及効果が期待できる革新的なプロセス及び化学品に関する技術</p> <p>○キーテクノロジー、ブレークスルーのポイント、オリジナリティ</p> <p>上記の研究開発課題を早期に実現するため、新規な触媒、溶媒、加熱方法等を開発し、持続的にクリーンな製造が実現できる独創的なプロセスを開発する。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・水、イオン性流体、CO₂中で高選択性、高収率を示す触媒、及びプロセスの開発等 ・ハロゲン、酸・塩基、重金属を用いない、排出しないプロセス、素材、部材の開発 ・低品位原料等を用いたシンプルで、有害物質ができないプロセス、素材、部材の開発 <p>○目標値(技術水準)とその条件及び設定理由(根拠)</p> <p>目標：①使用溶媒、使用化合物を50%以上削減、及びライフサイクルに亘り30%以上の省エネ効果、又は安全性、軽量化、超寿命化の大幅な改善、②c-ファクターの大幅な低減、又は廃棄物、排水量等の50%以上削減、及びライフサイクルに亘り30%以上の廃棄物削減、又はリサイクル率、軽量化、超寿命化の大幅な改善、③①、②の目標と同等以上で、顕著な効果(副生成物削減、省エネ効果、超寿命化、軽量化、リサイクル率等)の数値目標を設定。</p>
<p>プロジェクトの規模</p> <p>○事業費と研究開発期間(目安として)</p> <p>20年度事業費(未定)6億円、研究開発期間：8年 事業期間中に複数回の公募を想定</p>	<p>技術戦略マップ上の位置付け</p> <p>本年度から化学プロセス、素材・部材のプロセスイノベーション、マテリアルイノベーションを実現するために「グリーン・サステナブルケミストリー」に関する技術戦略マップを新たに作成中</p>
<p>その他関連図表</p> <div style="display: flex; justify-content: space-between;"> <div style="width: 30%;"> <p>水中で機能する界面活性剤型触媒</p> <p>種々の有機合成反応(アルドール縮合、ヒドロキシメチル化、脱水エステル化反応)を促進する。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・水による触媒活性の低下がない ・高選択性(光学活性) ・水中で高活性(TON)な反応場を形成  </div> <div style="width: 30%;"> <p>過酸化水素酸化によるノンハロ材料製造</p> <ul style="list-style-type: none"> ・過酸化水素による選択的新酸化法により有害なハロゲン、重金属等を用いないで、これまでにないクリーン材料製造 ・生成物が目的物と水のみ ・リサイクルが容易な材料  </div> <div style="width: 30%;"> <p>高分子固定化触媒によるグリーン化</p> <ul style="list-style-type: none"> ・パラジウム、オスmium、ルテニウム、金、白金等貴金属の繰り返し利用が可能 ・水素化反応、カップリング反応、アリル化など汎用的な製品製造への展開が可能 ・金属の漏出の抑制による廃棄物削減及び回収・再使用可能なプロセスの実現  </div> </div>	

(3) 事前評価

- ・実施時期：平成20年2月29日
- ・評価手法：内部評価
- ・評価事務局：バイオテクノロジー・医療技術開発部

II.6.2 事後評価

- ・実施時期 : 分科会 (平成24年9月14日、21日)
- ・評価手法 : 外部有識者による
- ・評価事務局 : 評価部
- ・評価項目、基準: 基礎基盤タイプ評価項目・評価基準に基づく

NEDOは、技術的及び政策的観点から、研究開発の意義、目標達成度、成果の技術的意義並びに将来の産業への波及効果について、外部有識者による研究開発の事後評価を平成24年度に実施する。

	氏名	所属、役職
分科会長	アサオカ サチオ 浅岡 佐知夫	北九州市立大学 国際環境工学部 特任教授
分科会長代理	ヨシダ ジュンイチ 吉田 潤一	京都大学 大学院 工学研究科 生物・合成化学専攻 教授
委員	イナナガ ジュンジ 稲永 純二	九州大学 名誉教授
	ウエヤマ マサキ 植山 正基	一般社団法人 日本化学工業協会 産業部 兼 技術部 部長
	サツマ アツシ 薩摩 篤	名古屋大学 大学院 工学研究科 物質制御工学専攻 教授
	スギモト ヒロシ 杉本 裕	東京理科大学 工学部 工業化学科 准教授
	ナガシマ ヒデオ 永島 英夫	九州大学 先導物質化学研究所 分子集積化学部門 教授
	ミヤケ タカノリ 三宅 孝典	関西大学 環境都市工学部 エネルギー・環境工学科 教授

図II-1 評価委員 (リスト)

Ⅲ. 研究開発成果について

Ⅲ.1 事業全体の成果

Ⅲ.1.1 最終目標達成状況

(1) ◆高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発 (分子研G)

基本計画① (1)

①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発

(1) 水、アルコール等で機能する触媒の高機能化、回収・再生及び製造に関する共通基盤技術

最終目標 (基本計画「別紙」より抜粋)	達成状況	達成度
<p>①水、アルコール等で機能する触媒の活性・耐久性向上</p> <ul style="list-style-type: none"> 水、アルコール等で機能し、反応率80%以上、選択率90%以上の触媒プロセスを開発する。 <p>②触媒反応プロセス、分離回収・再生技術に関する実用化基盤技術</p> <ul style="list-style-type: none"> 生産量(処理量) 10kg～数 t /日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待できる技術レベルを確立すること。 	<p>①目的の芳香族アミノ化反応、芳香族カップリング、は完全水系条件にて達成している。</p> <p>反応率、選択率は最高96%に達している。また触媒の回収は定量的であり、その再利用実験においても単離収率(反応率×選択率) 90%を超えている。また金属漏出はICP分析の検出限界以下。</p> <p>②標的とするホール輸送剤(正孔輸送剤) ベンチスケール装置での合成プロトコルは確立されている。現段階でスケールアップは数十グラム/日に留まっているものの、これらホール輸送剤はその高機能性から年産5～10キログラムの製造によって世界トップシェアーの製造プロセスとなりうる(本 NEDO プロジェクトの生産量数値目標は一般的化学物質を想定)。すなわち現状の世界需要に鑑みて数十グラム/日の生産能力は特段のスケールアップ検討の必要なく、実用化規模のプロセス概念の確立を目指した NEDO の開発目標の眼目を達成するものと判断される。</p>	◎

達成度 (◎ : 大幅達成、○ : 達成、△ : 達成見込み、× : 未達)

基本計画②（１）

②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発

（１）新規な触媒固定化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術

最終目標（基本計画「別紙」より抜粋）	達成状況	達成度
<p>①高活性、高選択性かつ再生可能な新規な固定化触媒プロセスの開発</p> <ul style="list-style-type: none"> ・反応率80%、選択率90%、溶出金属回収率98%以上。 <p>②新規な固定化触媒による実用化プロセスに関する設計・開発</p> <ul style="list-style-type: none"> ・生産量10kg～数 t /日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待できる技術レベルを確立すること。 	<p>テーマ「ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究」においては①目的とするアルコール類の酸素酸化反応は完全水系条件にて達成している。反応率、選択率は99%以上。触媒回収は定量的であり、さらに進んで連続フロー反応系を確立した。検討初期段階でバッチ（フラスコ）反応で触媒回転数が10～20回であったが、フロー反応系では2000-2500回に達し、すなわち触媒使用量が1/100以下であった。このことは触媒コスト99%以上の低減に相当する。</p> <p>②スケールアップ実験では、卓上の小型連続フロー反応装置によってすでに試験サンプルの100グラムスケール合成／日を再現よく達成した。すでに同連続フロー装置の数十倍スケールの装置設計も完了しており、装置メーカーであるハンガリー・タレス社によって20-30倍スケール（2～3kg相当）の再現性が確認されている。新規製品導入時の想定される生産規模（数キロ～100キロ／日程度）を考慮すると特段のスケールアップ検討を要しない製造スケールである。また、フロー製造では製造工程を大型化するのではなく、複数のフロー装置を並列化することが効率的であり、1流路に依る数キロスケールの</p>	<p>◎</p>

	<p>製造を10キロ以上に上げることは並列化によっても平易に達成可能である。以上から、実用化規模のプロセス概念の確立を目指した NEDO 開発目標の眼目を達成するものである。開発した触媒の工業製品化が決定され、技術移転を行っている。</p> <p>テーマ「エステル、アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究」においては①目的とするジカルボン酸及びテトラカルボン酸からカルボン酸無水物への分子内脱水縮合反応は1 mol%の触媒条件にて達成している。反応率90%以上、選択率90%以上、回収率98%以上を達成している。</p> <p>②スケールアップ実験では100グラムスケール合成/回、200グラムスケール合成/日を達成した。特にスケールアップ上の問題が見当たらなかったことから生産量10kg～数t/日以上も十分に可能だと考えている。開発した触媒の工業製品化に向けて検討中で、技術移転を進めている。</p> <p>他にも、①ランタン触媒を用いるエステル交換反応、酸化触媒を用いるα-アシルオキシカルボニル化合物の合成、酸化触媒を用いるケトンの Bayer-Villiger 酸化反応によるエステル及びラクトン合成に関しても1 mol%の触媒量で50 g グラムスケール合成/回、100グラムスケール合成/日に成功し、反応率 90%以上、選択率 90%</p>
--	---

	<p>以上を達成している（触媒の回収検討はしていない）。②特にスケールアップ上の問題が見当たらなかったことから生産量 10kg～数 t /日以上も十分に可能だと考えている。</p> <p>これらの技術についても化学系企業への技術移転に向けた共同研究を継続中である。</p>	
--	--	--

達成度（◎：大幅達成、○：達成、△：達成見込み、×：未達）

（２）革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発（東大グループ）

基本計画①（１）

①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発

（１）水、アルコール等で機能する触媒の高機能化、回収・再生及び製造に関する共通基盤技術

最終目標（基本計画「別紙」より抜粋）	達成状況	達成度
<p>①水、アルコール等で機能する触媒の活性・耐久性向上</p> <ul style="list-style-type: none"> 水、アルコール等で機能し、反応率80%以上、選択率90%以上の触媒プロセスを開発する。 <p>②触媒反応プロセス、分離回収・再生技術に関する実用化基盤技術</p> <ul style="list-style-type: none"> 生産量（処理量）10kg～数 t /日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待できる技術レベルを確立すること。 	<p>①酢酸のエステル化に有効な水中で機能する触媒（アクア触媒）を検討し、目標値（反応率 80%以上、選択率 90%以上）を超える触媒プロセスを達成している。また、廃水への触媒溶出を抑えるため、触媒の水層溶け込み量を一定量以下に抑制することも達成している。触媒は反応後に分離・回収することにより容易に再使用が可能である。</p> <p>②水中で機能する、反応後の分離・回収・再生が可能なエステル化触媒の開発を達成し、このプロセスをもとに酢酸排水処理量 300 t /日以上を想定した実用化規模プロセスの概念設計を行い、経済性評価を実施し、実用化に向けた課題を確認した。</p>	○

達成度（◎：大幅達成、○：達成、△：達成見込み、×：未達）

基本計画②（１）

②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発

（１）新規な触媒固定化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術

最終目標（基本計画「別紙」より抜粋）	達成状況	達成度
<p>①高活性、高選択性かつ再生可能な新規な固定化触媒プロセスの開発</p> <ul style="list-style-type: none"> ・反応率80%、選択率90%、溶出金属回収率98%以上。 <p>②新規な固定化触媒による実用化プロセスに関する設計・開発</p> <ul style="list-style-type: none"> ・生産量10kg～数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待できる技術レベルを確立すること。 	<p>テーマ「固定化触媒を活用する革新的水素化反応システム開発」においては、①ポリシランを担体としてパラジウムを固定化した触媒を用いることで、高活性、高選択性かつ再生可能な新規な固定化触媒プロセスの開発を達成し、基本計画の目標である反応率80%、選択率90%を大きく超えており、溶出金属も検出限界以下であるなど、数値目標を大きく超えて達成した。また、②実生産規模でのフロー反応容器の設計・製造を行い、実際に反応を行い、生産量30kg/日以上を達成した。この水素化システムは本年の実用化が既に決定しており、他の原料を用いるプロセスも今後順次実用化予定。</p> <p>テーマ「グリーンプロセスのための高分子固定化金属触媒試薬の開発」においては、①PI0s触媒を二種類開発し、モデル基質において目標である反応率80%以上、選択率90%以上を達成し、金属溶出の抑制の目標も達成している。②実生産を想定</p>	<p>◎</p>

	<p>した抗がん剤 Camptothecin 中間体のスケールアップ合成を行い、1モルスケール（反応時間 16h）での合成を達成し、工業化の可能性を示すことができた。また、各PI触媒についてもスケールアップ合成が可能であることを示した。</p>	
--	--	--

達成度（◎：大幅達成、○：達成、△：達成見込み、×：未達）

(3) 革新的酸化プロセス基盤技術開発 (産総研グループ)

基本計画② (2)

②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発

(2) 高選択酸化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術

最終目標 (基本計画「別紙」より抜粋)	達成状況	達成度
<p>①高性能触媒による高活性、高選択性酸化触媒プロセスの開発</p> <ul style="list-style-type: none"> ・オレフィン類やケトン類に対して高活性、高選択性を有する酸化触媒プロセスを開発する。なお、オレフィン類の選択酸化反応では反応率80%以上、選択率90%以上、ケトン類の選択酸化反応では反応率80%以上、選択率80%以上とする。 <p>②高性能触媒による実用化プロセスに関する設計・開発</p> <ul style="list-style-type: none"> ・生産量 10kg～数 t /日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待できる技術レベルを確立すること。 	<p>①オレフィン類の酸化プロセスは反応率 92%以上、選択率 92%以上、ケトン類をエステル類へと変換するプロセスに関しては反応率 95%以上、選択率 85%以上と最終目標を超える値を達成した。</p> <p>② 各社新規製品導入時の生産規模は、数～100kg/日と想定されることから、特段のスケールアップを必要としない、数百～数十 kg/日 (流通) あるいは run (バッチ) 規模のベンチスケール装置を製作・運転して成果の実証を行った。サンプルのユーザー評価は良好であり、安全性試験等を通して市場導入への準備中。</p>	<p>◎</p>

達成度 (◎ : 大幅達成、○ : 達成、△ : 達成見込み、× : 未達)

Ⅲ.1.3 成果の意義

◆高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発（分子研G）

水中機能性触媒によるカップリングは世界初の水中不斉Suzuki反応に展開され（アンゲバンテ・ヘミー誌 hot paper）、新たな技術領域の開拓に資することを明確に示した（ノーベル受賞者である鈴木教授からも直接の祝福を受けた。）

触媒的脱水縮合によるカルボン酸無水物の合成に初めて成功し、これを中間体とするエステルやアミド合成のポテンシャルを著しく下げた。

◆革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発（東大グループ）

東京大学のアクア・固定化触媒技術をもとに従来技術では困難な GSC プロセスを開発した。①アクア触媒の技術を活用することにより、希薄な酢酸水溶液から触媒的エステル化により酢酸を回収するプロセスを開発した。本技術は有機酸を始めとする廃水からの有機化合物回収プロセスへの適用のほか、水溶性物質を原料とする様々な新規アクアプロセスへの応用が期待できる。また、②ポリシラン固定化金属触媒技術により、従来技術では困難な、パラジウム触媒をフローシステムで長時間連続使用できる気相-液相-固相の三相系水素化プロセスを開発した。水素化プロセスは最も頻用されるプロセスの一つであり、化成品・医薬品製造等のための様々な水素化プロセスへの適用が期待できる。さらに、③高分子カルセランド法(PI 法)によりキラルオスミウム触媒を高分子に固定化した触媒は、これまでにない安全かつリサイクル可能なオスミウム触媒プロセスを可能にした。本プロセスはオレフィンのジヒドロキシル化を一段階で実施できることから、化成品や医薬品製造において高効率かつ GSC 効果の高い不斉ジヒドロキシル化プロセスへの適用が期待できる。金、白金等を PI 法により固定化した触媒もまたリサイクル可能であり、化成品や医薬品製造における酸化反応プロセスやカップリング反応プロセス等に適用可能である。

これら開発プロセスの基盤技術であるアクア・固定化触媒技術はいずれもの独自に開発した世界初のオリジナル技術であり、今後の触媒技術としての発展やプロセス応用の発展が見込めると同時に、経済効果として約 140 億円/年の市場の拡大が期待できる。

◆革新的酸化プロセス基盤技術開発（産総研グループ）

産総研が高いポテンシャルを有する過酸化水素酸化技術を基盤として、従来技術では達成出来ていなかった、①多官能基質、②高分子量基質、③易加水分解性基質、④難酸化性基質を高選択的かつ高効率で酸化する新規触媒を開発した。これにより、副生成物は水のみ、塩素などハロゲンを一切使用せず、従来よりも廃棄物の量を大幅に削減するプロセス開発に成功した。開発技術を用いて、それぞれ① IC 封止材、②電子材料用接着剤、ポリマー改質剤・相溶化剤、③高機能電子材料用テルペンオキシド、④LCD 光学フィルム原料をクリーンに製造するベンチスケール装置を設計・製作し、ベンチスケール規模での製造実証を完了。サンプルワークを通して上市の準備中である。

これら新規技術創出による市場規模の拡大効果は 4 社の新規参入を考慮し 250 億円を想

定している。本開発技術により、製造プロセスにおいて、廃棄物を大幅に削減、不純物の混入をほぼゼロにしたため、最終製品は安価かつ既存品をはるかに上回る性能を示した。酸化反応は化学産業における重要基盤技術であり、上記製品に限定されることなく、より高性能化が求められている機能性化学品、例えば電池材料やフレキシブル基盤等にも適用しうる。

Ⅲ.1.4 知的財産権の取得

知的財産権の出願は成果の発生と共に速やかに行った。

分子研Gでは分子科学研究所によって2件、また名古屋大学から5件の国内特許、および外国特許7件の出願を行っている。

東大Gでは、知財戦略に沿って、国内特許7件を出願している。

産総研Gでは事業の競合他者、原料の調達国などとの関連も考慮して、国内特許21件、PCT4件、PCTからアメリカ、中国、台湾へ出願している。

Ⅲ.1.5 成果の普及

(1) 平成21年度「グリーン・サステナブルケミストリー(GSC)創造的基盤技術開発」に関するワークショップの開催

・目的：

- ①. 国内外のグリーン・サステナブルケミストリーの現状に関する講演
- ②. H21年度からスタートする「新規触媒による未利用／低品位資源の接触分解プロセスに関する実用化基盤技術、規則性ナノ多孔体膜分離膜プロセス、低濃度副生ガス分離・精製及び高効率化学品転換技術の開発」に関する新規プロジェクト概要説明

・日時：平成21年1月30日（金）15:00～17:00

・場所：NEDO日比谷オフィス

・来場者数：60人程度

(2) 平成21年度「GSCセミナー ―持続的社会的のための環境共生化学―」

・目的：

- ①. 国内外のグリーン・サステナブルケミストリーの現状に関する講演
- ②. NEDOにおけるGSCの取り組みに関して最新の情報の提供
- ③. 本プロジェクト「高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発」と「革新的酸化プロセス基盤技術開発」の概要説明

・日時：平成21年3月5日（金）9:30～11:30

・場所：学術総合センター・一橋記念講堂（東京）

(3) プレス発表「テルペンを安全かつ高効率にエポキシ化する技術を開発
 —環境負荷の少ない過酸化水素を用いた酸化技術—」

(産総研Gの成果として、産総研・荒川化学の共同で発表)

・発表日：2012年5月29日

(参考)「2011 G S C Workshop ～環境と共に生きる化学～」の開催計画 (震災発生により中止)

・目的：

- ①. G S Cプロセス基盤技術開発における取り組みや成果を、広く国民に理解していただく
- ②. 海外からを含む招待講演を通して、我が国や世界的なG S Cに関する取り組み、環境共生を目指した我が国化学産業の努力に関して、国民に知っていただく

・開催日：平成23年3月17日(木)～3月18日(金)

・場所：東京都心部

・予定来場者数：500人以上

・構成：以下の①～④のとおり。

- ①. G S Cプロセス基盤技術開発の成果発表
- ②. ポスターセッション
- ③. 招待講演
- ④. パネルディスカッション

Ⅲ.1.6 成果物

年度	開発項目	特許出願		論文 (査読有り)	外部発表	受賞実績	新聞・雑誌 等への掲載
		国内	外国				
H21	分子研G	2件	1件	15件 (15件)	25件	2件	0件
	東大G	3件	0件	0件 (0件)	11件	0件	0件
	産総研G	7件	0件	9件 (8件)	27件	0件	1件
H22	分子研G	4件	4件	20件 (20件)	34件	1件	0件
	東大G	1件	0件	6件 (6件)	20件	0件	3件
	産総研G	9件	6件	7件 (6件)	24件	1件	0件
H23	分子研G	1件	2件	23件 (23件)	71件	5件	4件
	東大G	3件	0件	11件 (11件)	27件	0件	4件
	産総研G	7件	2件	9件 (8件)	40件	1件	3件
通年	分子研G	7件	7件	58件 (58件)	130件	8件	4件
	東大G	7件	0件	17件 (17件)	58件	0件	7件
	産総研G	23件	8件	25件 (22件)	91件	2件	4件
計	0	37件	15件	100件 (97件)	279件	10件	15件

※外部発表には研究発表、講演、展示会への出展を含む

III.2 個別テーマの成果

III.2.1 高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発（分子研G）

III.2.1. ①錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の開発研究（分子研）

（1）最終目標達成状況

最終目標（実施計画書）	達成状況	達成度
<p>電子材料としての特定の機能性化学物質に特化したプロセスで、下記の商品達成及び、目的化合物の 10kg 以上のスケールを想定したプロセスを確立し、サンプル製造を実施する。</p> <p>最終目標：反応率 80%以上、選択率 90%以上、金属漏出 2ppm 以下、触媒回収 80%以上</p>	<p>目的の芳香族アミノ化反応、芳香族カップリング、は完全水系条件にて達成している。反応率、選択率最高96%に達している。また触媒の回収は定量的であり、その再利用実験においても単離収率（反応率×選択性）90%を越えている。</p> <p>また金属漏出はICP分析の検出限界以下。ベンチスケール装置での概念は確立されているが、スケールアップは数十グラムに留まっている。</p>	◎

達成度（◎：大幅達成、○：達成、△：達成見込み、×：未達）・・・以下同様

（2）成果の詳細

（a）研究背景

分子科学研究所・魚住グループでは NEDO によって設定された課題である「水、アルコール等で機能する触媒の高機能化、回収・再生」に対し、すでに 1996 年頃より先導的な基礎研究を推進しつつあった。特に幾つかの代表的な遷移金属錯体触媒有機分子変換反応に関しては、両親媒性高分子担体に固定化した錯体触媒を用いることで、水中での反応実施、ならびに固定化触媒の簡便な回収再利用をラボレベルながら一挙に実現していた。これらの成果は水中機能性固定化触媒の開発としては国際的にも極めて初期の成功例であり、幾つかの触媒反応系において世界初の水中不均一触媒を達成している。初期の反応例の幾つかを紹介する。これら事前の研究成果で確立した水中不均一での反応駆動概念は本研究開発課題の遂行上の鍵となるものである。

すなわち、本研究開発課題提案の数年前の水中での有機分子変換工程の開発は大きな注目を集めつつあった。水は引火性、爆発性、毒性、腐食性もなく、入手容易であり、次世代の環境調和型化学反応の媒体として最適といえる。一方、不均一触媒系は均一触媒に比較して圧倒的に実用性に富んでいる。20 世紀後半に特に精密有機合成手法として目覚ましい発展をとげた均一系遷移金属錯体触媒を固定化することができれば、工業的実用性やハイスループット合成への適用性などにおいて大きな意義を持つであろう。遷移金属錯体触媒、なかでもパラジウム-ホスフィン錯体やロジウム-ホスフィン錯体は種々の有機変換反応において広範に利用されている。これら汎用性に富む錯体触媒が固定化され、同時に水中での十分な触媒活性を示すならば理想的な次世代型環境調和型触媒的

有機分子変換が実現されよう。そこで、我々が本研究開発課題に取り組む以前に開発してきた両親

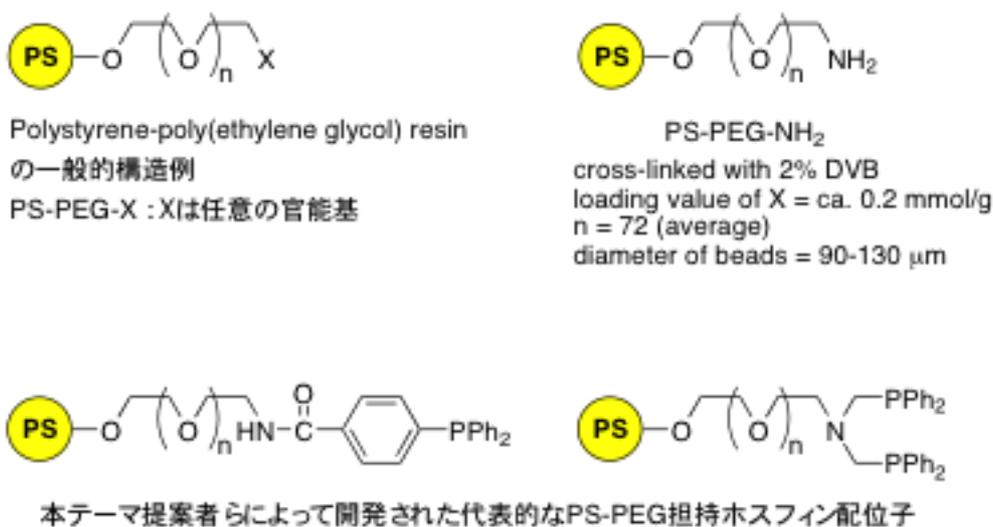


図 1-0 1 : 本項で用いた代表的高分子担体および同担持リン配位子

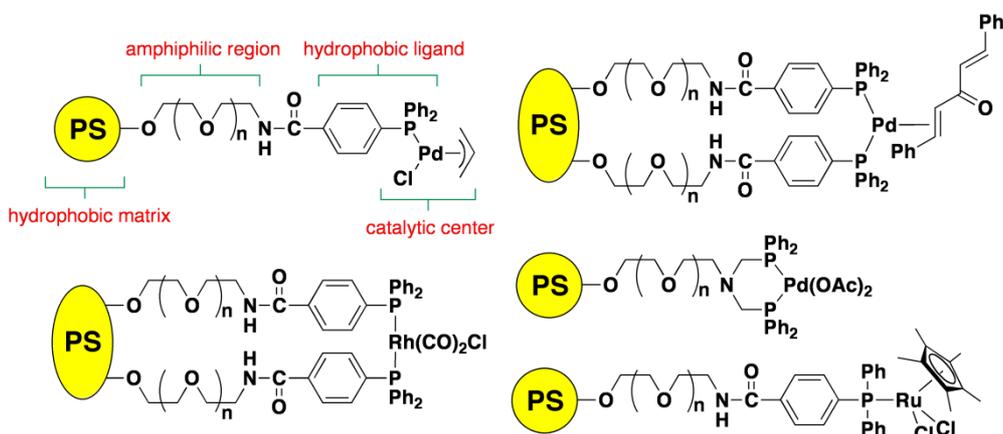


図 1-0 2 : 本テーマの提案者らが報告した代表的高分子担持遷移金属錯体触媒

媒性高分子担持遷移金属錯体触媒についてパラジウム錯体触媒を中心に紹介する。尚、本研究では PS-PEG 担体はジビニルベンゼン 2% 架橋、平均オキシエチレンユニット数 72、末端官能基 0.2 mmol/g、直径 90-130 ミクロンのものを用いて遂行された。

固相上での有機合成工程に最も一般的に供される担体の一つにポリスチレン-ポリエチレングリコール共重合レジンビーズ (PS-PEG) がある。典型的な分子構造例を図 1-0 1 に示す。PS-PEG はトルエンから水にいたる幅広い溶媒に対して比較的一様な膨潤特性を示す。この両親媒性から我々は水中で有機分子変換を遂行する反応場として PS-PEG を選択することとした。すなわち例えば、PS-PEG にパラジウム-ホスフィン錯体を固定化するならば、均一触媒系で示されてきた同錯体の豊かな反応性が水中不均一系で得られるものと期待された。そこで我々は PS-PEG 担持パラジウム錯体を、PEG 鎖末端にアミノ残基を有する PS-PEG-NH₂ レジンを手掛かりとし調製した。これら

PS-PEG 担持パラジウム錯体はパラジウム錯体触媒有機分子変換工程を水中で効率よく触媒することが確認された。その適用範囲は広範であり、代表的反応として Tsuji-Trost 反応（アリル位置換反応；炭素-炭素結合形成、炭素-窒素結合形成、炭素-酸素結合形成、炭素-硫黄結合形成等）、Heck 反応、交差カップリング反応（Suzuki-Miyaura 反応、Sonogashira 反応など）、カルボニル化（一酸化炭素挿入）反応、があげられる。またこれら両親水性 PS-PEG 担持錯体触媒の触媒活性は、しばしば対応する均一触媒系よりも優れており注目すべき特徴といえる。この反応性に関しては以下のように考察している：本反応系では有機基質は水に難溶（ほとんど不溶）であり疎水性に富むポリスチレンのマトリクス内に迅速に拡散する。すなわち基質分子が自ずから有する疎水的性質によって自発的濃縮効果が現れたことになる。この効果を我々は「雨宿り効果」と呼称している。また、このように系中で形成された高濃度反応場にはパラジウム錯体触媒が固定化されており、またポリエチレングリコール鎖部位は水溶性に富むイオン性試薬（アルカリなど）などとの反応インターフェイスとして重要な役割を担っている。

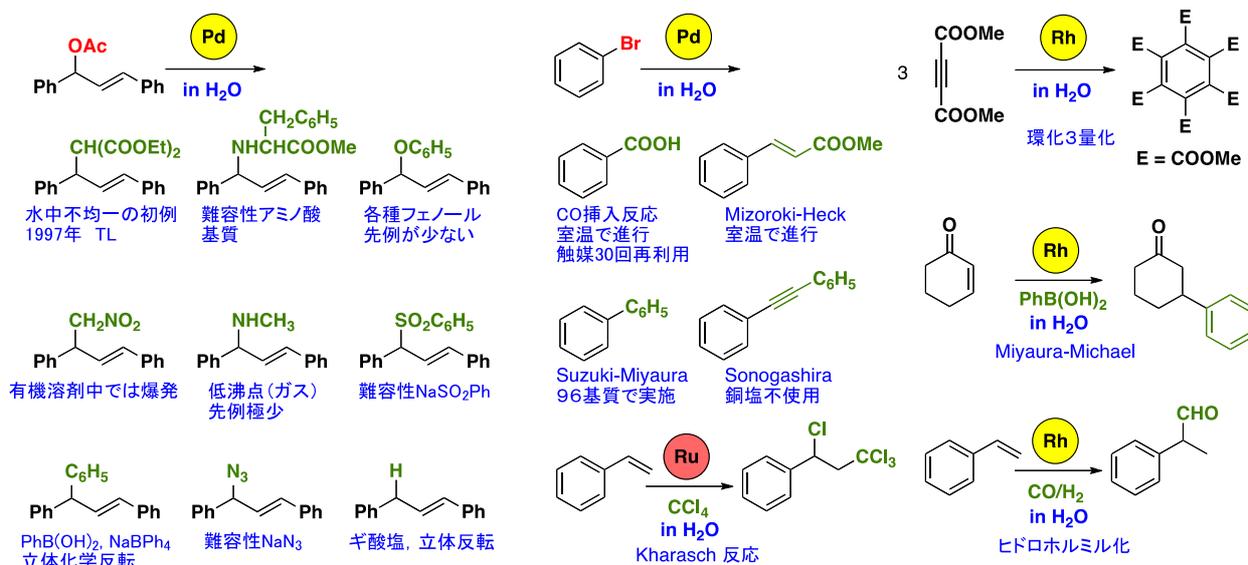


図 1-0-3：本テーマの提案者らが報告した代表的水中不均一有機分子変換反応の反応パターンと各反応を特徴づけるキーワード

(b) 研究計画

上述の先行データに立脚し、我々はN,N,N',N'-tetraaryl-1,1'-biphenyl-4,4'-diamines (TPDs)を標的分子とし、TPD化合物を高純度かつ十分量供給可能なグリーン・サステイナブル合成方法論の開発に取り組んだ。一連のTPD化合物は有機ELデバイスにおけるホール（正孔）輸送剤として利用され、その付加価値は高い。有機ELデバイスは、EL機能分子、ホール輸送分子の構造設計によって、塗布による照明器具製造に発展し得る。省エネルギーの観点から古典的な白熱電球照明が過去のものとなりつつある中、蛍光灯照明が大きな世界的シェアを持っているが、蛍光灯照明には水銀の使用が避けられず、環境調和型照明とは言えない。すなわち有機EL照明の大量供給方法論の確立は未来における

照明器具のパラダイムシフトを支える根幹技術となり得る。その中でホール輸送剤であるTPD化合物の現在の市場価格は1,000千円／グラムを越えるものである。これはTPD化合物の高純度精製が昇華法に依存していることが一因とされている。

担持型触媒によるTPD化合物合成が実現されれば、用いた触媒は濾過などの簡便な後処理で除去可能である。従来型均一反応法では、得られる粗生成物に用いた試薬、触媒などが全て混入した状態からの精製が必要であるが、担持触媒によるTPD合成では粗生成物に触媒などが混入しないため、高純度精製にいたる工程が劇的に省力化できる。すなわち水中機能性固定化触媒では、危険（毒性、引火性、爆発性）のある化石資源由来の有機溶剤を用いず、触媒が簡便に回収再利用できるというグリーン・サステイナブル合成であるのみならず、得られる生成物の純度も格段に向上させ後処理工程のグリーン・サステイナブル化をも実現する。

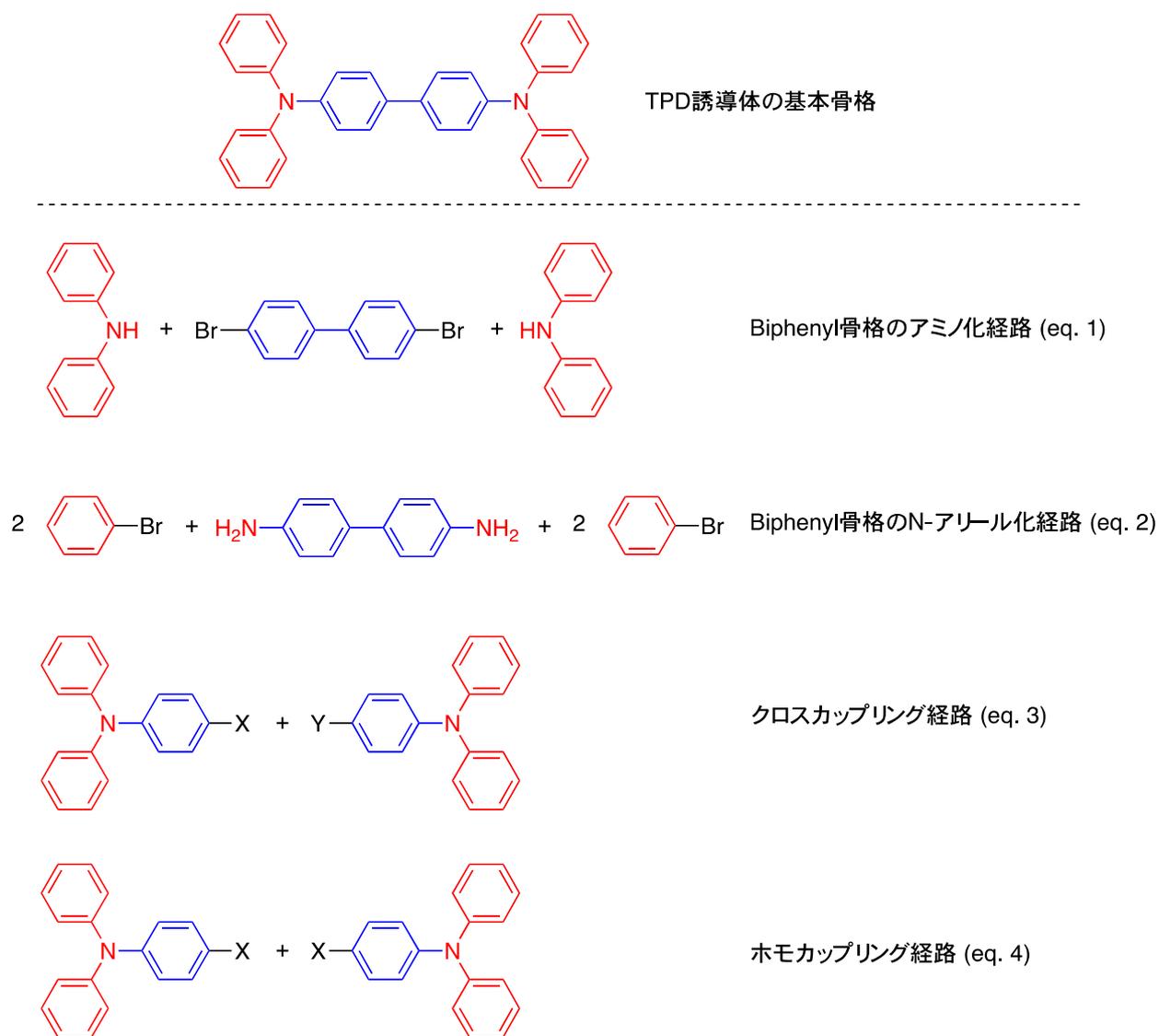


図 1-0 4 : TPD誘導体の合成戦略

TPD分子骨格の合成には1,1'-biphenyl-4,4'-dihalideのハロゲン基を手がかりとしたdiarylamine の導入（ハロゲン置換反応：図 1-0 4 (eq. 1)）、1,1'-biphenyl-4,4'-diamineへの N-aryll化反応（図 1-0 4 (eq. 2)）、triarylamineユニットの2量化（クロスカップリング、ホモカップリング：図 1-0 4 (eqs. 3 and 4)）を試みることにした。前2式は炭素-窒素結合形成工程であり、後2式は炭素-炭素結合形成である。

(c) 研究開発結果

i) PS-PEG 担持パラジウムアルキルホスフィン錯体触媒による TPD誘導体合成

芳香族アミンへの N-アリール化と芳香族ハライドへのアリールアミン導入は原理的には、ほぼ同様の炭素-窒素結合形成工程を利用可能である。このような芳香族上へのアミノ基導入工程はパラジウムによって触媒されることが報告されており、一般に Buchwald-Hartwig反応と呼ばれている。

Buchwald-Hartwig反応は一般に立体的に嵩高く塩基性の高いアルキルホスフィン配位子とするパラジウム錯体によって、アルコキシド塩基などの強塩基存在下進行する。しかし、報告実施例が豊富な均一触媒系でさえトリアリールアミン合成に適用した例は極めて限定的である。我々はこの工程を水中不均一条件で達成すべく、従来より利用してきたPS-PEG担持トリアリールホスフィン配位子に加え、嵩高いアルキル基を持ったPS-PEG担持アルキルホスフィンの調製も実施した。

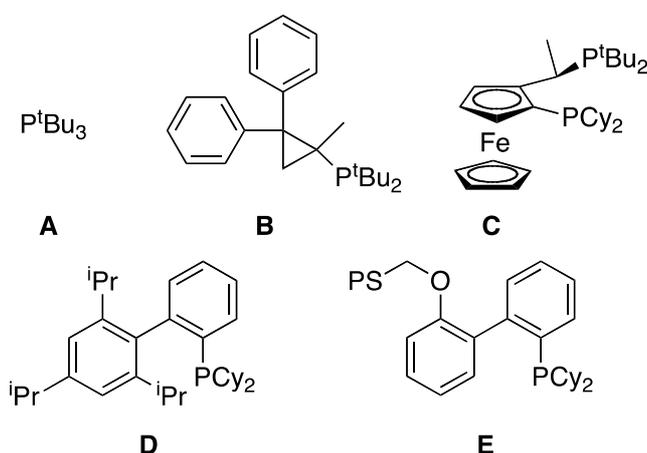


図 1-05 : パラジウム触媒芳香族ハライドのアミノ化反応に利用された配位子の先行報告例
(文献 : Hirai, Y.; Uozumi, Y. *Chem. Asian J.* **2010**, *5*, 1788-1795 および同論文内の引用文献を参照)

嵩高いアルキル基を持ったPS-PEG担持アルキルホスフィン配位子は末端にブロム基を有する PS-PEGレジンとジアルキルホスファイドとの反応で1段階で調製された。すなわちブromoレジン(tert-ブチル)ホスファイドおよびリチウムジ(シクロヘキシル)ホスファイドと各々THF(テトラヒドロフラン)中反応しPEG鎖末端にエチレンジ(tert-ブチル)ホスフィノ基およびエチレンジ(シクロヘキシル)ホスフィノ基を有するPS-PEGホスフィンを与えた。これら高分子担持ホスフィン配位子に対してパラジウムが P/Pd = 1/1 あるいは P/Pd = 2/1となるようにパラジウム(π -アリル)塩化物2量体 $[\text{PdCl}(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5)]_2$ と反応させ $[\text{PdCl}(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5)(\text{phosphine})]$ (P/Pd=1:1) および $[\text{Pd}(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5)(\text{phosphine})_2]\text{Cl}$ (P/Pd=2:1) を各々得た。これらPS-PEG担持錯体を用いて芳香族ハライドとアミンとのカップリング反応(ハライド-アミン置換反応)を試みた。従来、同様の反応

(Buchwald-Hartwig反応)は有機媒体中、均一系錯体触媒を用い、ナトリウムアルコキシドなどの極めて強い塩基性条件下で実施されてきた。一方、本テーマで開発した PS-PEG担持錯体触媒は前述のようにPS-PEGの両親媒性に立脚し水中での触媒反応実施を可能とする。水を反応媒体とするならば有機溶剤中では難溶～不溶のため利用できなかった無機塩基を用いることができる。すなわち水中反応実施はGSC的な優位性のみならず、従来とは異なる反応条件の選択肢を与える点で科学的にもユニークである。

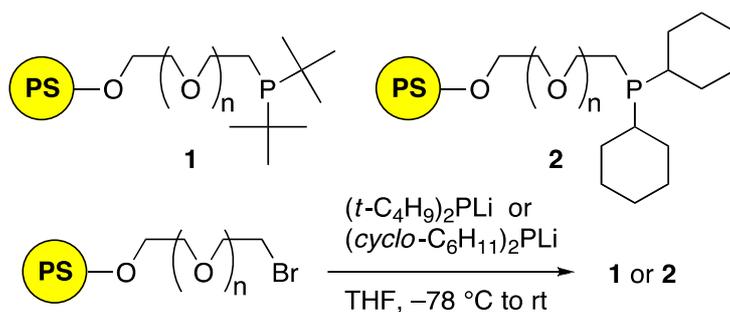


図 1-0 6 : 嵩高く塩基性に富む両親媒性高分子担体 PS-PEG 担持ジアルキルホスフィン : 標的分子構造と合成法

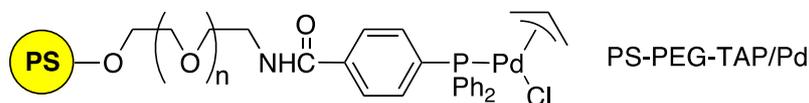
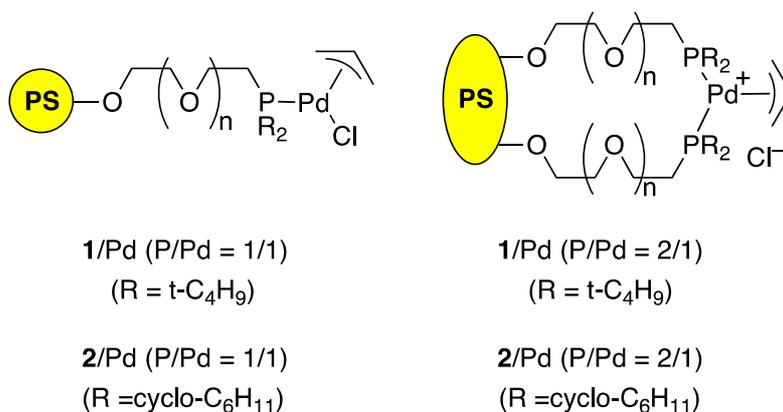
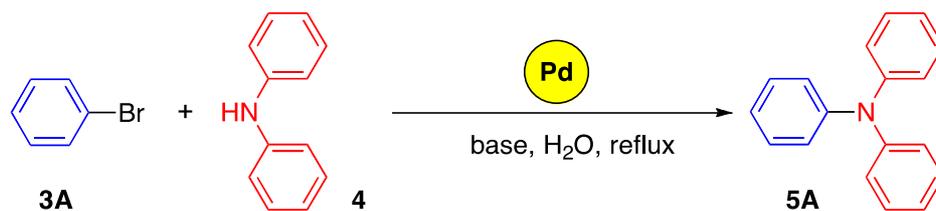


図 1-0 7 : 触媒候補として調製した PS-PEG 担持パラジウム錯体の構造

TPD 誘導体の自在なグリーン・サステイナブルケミカル (GSC) 合成法開発を眼目としビフェニル骨格へのアミノ基の導入 (図 1-0 4 ; eq. 1)、あるいはビフェニルジアミンへのアリアル基の導入 (図 1-0 4 ; eq. 2) を検討することとした。初期的検討として両合成経路において共通の鍵工程と想定される芳香族ハライドとアミンとのカップリング反応 (Buchwald-Hartwig 反応) を PS-PEG 担持パラジウム錯体触媒を用い、水中不均一条件下で実施した。代表的検討結果を 表 1 に示す。

その結果、リン上に t-ブチル基を持つ高分子配位子 1 のパラジウム錯体が KOH 水溶液還流条件下良好な触媒機能を示した。すなわちエントリー 1~9 から読み取れるように、リン上のアルキル基がシクロヘキシル基の配位子 2 のパラジウム錯体は同一条件下低い収率でしか目的生成物トリアリールアミンを与えないのに対し、t-ブチル基を持つ高分子配位子 1 のパラジウム錯体は 90% を越える単離収率で目的物を与える。このときパラジウム源として酢酸パラジウムはパラジウム dba 錯体から調製した 1/Pd 錯体も有効な触媒活性を示したが、反応実施における取り扱いと構造解析の容易さを勘案し [PdCl($\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5$)]₂ からの錯体触媒調製を基本操作とした。

表 1. 臭化ベンゼンとジフェニルアミンとの高分子パラジウム触媒反応による水中トリフェニルアミン合成反応条件の検討



entry	Pd source (mol% of Pd)	Polymeric phosphine	P/Pd	base	yield (%) ^[b]
1	$[\text{PdCl}(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5)]_2$ (5.0)	1	1/1	KOH	87
2	$[\text{PdCl}(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5)]_2$ (5.0)	2	1/1	KOH	3
3	$[\text{PdCl}(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5)]_2$ (5.0)	1	1/1	KOH	57
4	$[\text{PdCl}(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5)]_2$ (2.5)	1	1/1	KOH	51
5	$\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (5.0)	1	1/1	KOH	82
6 ^[c]	$\text{Pd}(\text{dba})_2$ (5.0)	1	1/1	KOH	96
7	$[\text{PdCl}(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5)]_2$ (5.0)	1	2/1	KOH	87
8 ^[d]	$[\text{PdCl}(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5)]_2$ (5.0)	1	2/1	KOH	92
9	$[\text{PdCl}(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5)]_2$ (5.0)	2	2/1	KOH	<2
10 ^[d]	recycled catalyst beads from entry 1 (3rd reuse)			KOH	74
11 ^[d]	recycled catalyst beads from entry 7 (3rd reuse)			KOH	90
12 ^[d]	recycled catalyst beads from entry 11 (5th reuse)			KOH	91
13	$[\text{PdCl}(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5)]_2$ (5.0)	PS-PEG-TAP	1/1	KOH	<3
14	$[\text{PdCl}(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5)]_2$ (5.0)	1	2/1	K_2CO_3	<3

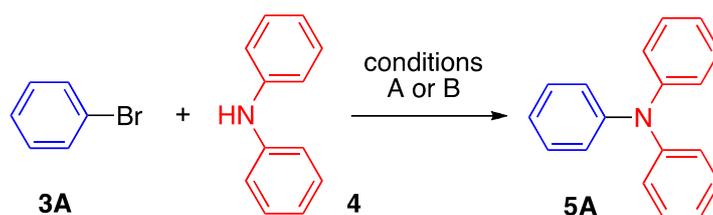
15	$[\text{PdCl}(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5)]_2$ (5.0)	1	2/1	NaOH	47
16	$[\text{PdCl}(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5)]_2$ (5.0)	1	2/1	Et ₃ N	<3
17	$[\text{PdCl}(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5)]_2$ (5.0)	1	2/1	pyridine	<3
18	$[\text{PdCl}(\eta^3\text{-C}_3\text{H}_5)]_2$ (5.0)	1	2/1	none	<3

[a] All reactions were carried out in refluxing aqueous KOH (20 M) unless otherwise noted. The ratio of **3A** (mol)/**4** (mol)/H₂O (L) = 1.0/1.5/2.0, unless otherwise noted. [b] Isolated yields based on **3A** (entries 1-7, and 9) or **4** (entries 8, and 10-12). [c] During the reaction, the polymeric palladium complex decomposed (palladium black precipitated out inside the polymer matrix). [d] The ratio of **3A** (mol)/**4** (mol)/H₂O (L) = 1.5/1.0/2.0.

また反応の収率は P/Pd = 1/1 の錯体を用いた場合に若干の向上が認められたものの、この活性種錯体の安定性が十分ではなく回収再利用時に活性低下が見られた（エントリー 10）。一方 P/Pd = 2/1 の錯体では回収再利用が容易である。またリン配位子部分がトリアリールホスフィンとなっている PS-PEG-TAP のパラジウム錯体は触媒活性を示さなかった。また KOH 以外の塩基では NaOH が中庸な結果を与えたものの、他の有機および無機塩基では殆ど反応の進行は見られなかった。

次に、得られた C-N 結合形成カップリング生成物の純度について検証した。典型的均一系触媒反応との比較を表 2 にまとめた。その結果、均一および不均一触媒条件におけるパラジウム触媒 Buchwald-Hartwig 反応を経たトリフェニルアミン合成では、得られた目的生成物を反応組成物からの結晶化で取り出した場合で、均一条件で得られた生成物に少なくとも 7 倍以上のパラジウム残渣混入が見られた（ICP-AES 分析）。このことから、用いた金属種の生成物への混入について高分子固定化錯体触媒の濾別が単純、簡便、かつ原理的に優位である。なお、反応に無機塩基を用いることが可能となったことで、単純な水洗で塩基由来の共生成物や過剰の塩基残渣を根本的に除去することができた。

表 2. 均一触媒および不均一触媒条件における 3A と 4 の芳香族アミノ化反応の比較検討



	conditions A ^[a] (Table 1, entry 8)	conditions B ^[b] (homogeneous conditions)
isolated yield (%) of 1st crop crystals ^[c]	74	73
chemical purity (%) ^[d]	>99	97
contaminating value (%) of Pd ^[e]	<0.01	0.071

[a] Conditions A: According to the conditions employed in Table 1, entry 8. The reaction scale = 5.2 mmol (Ph₂NH). [b] Conditions B: The reaction was carried out with Pd(dba)₂ (5 mol% Pd), *t*-Bu₃P (10 mol%), and *t*-BuONa (1.1 equiv) in 1,4-dioxane at 100 °C for 3 h (100% conversion). The reaction scale = 5.2 mmol (Ph₂NH). The ratio of 3A (mol)/4 (mol)/solvent (L) = 1.5/1.0/2.0. [c] Recrystallized from EtOAc/Hexane. [d] Determined by GC titration with (4-CH₃C₆H₄)₃N as an internal standard. [e] Determined by ICP-AES analysis.

有効な触媒反応条件が見いだされたので、続いて本反応条件の適用範囲を精査した。各種芳香族ハライドとジフェニルアミンとの反応を図 1-0 8 にまとめる。さらに図 1-0 9 にはアニリンの窒素上に一挙に 2 つのフェニル基を導入する反応についてまとめる。ジフェニルアミノ化反応 (図 1-0 8) では芳香族ハライドの芳香環上置換基のスコープは十分に広く、電子供与性および電子求引性置換基を有する芳香族ハライドにおいて良好な反応性が認められる。さらには、立体的に不利となるオルト置換芳香族ハライドにおいては若干の反応性の低下が見られ同一条件下では中庸な化学収率にとどまるものの、メタ、パラ位の置換基が適用可能である。

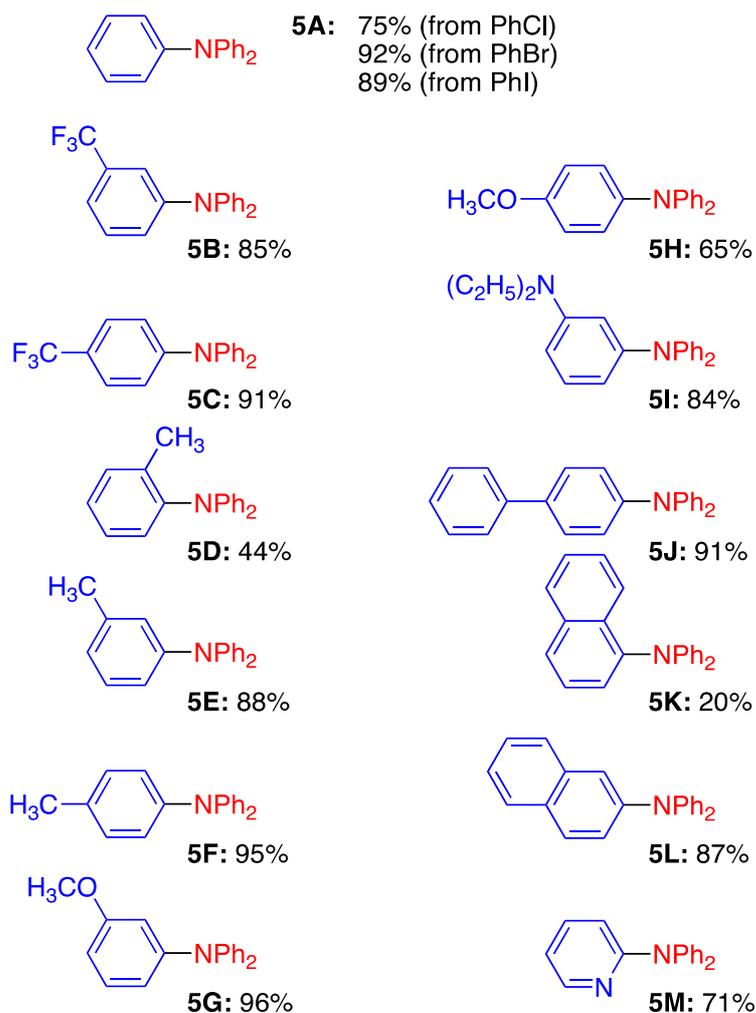
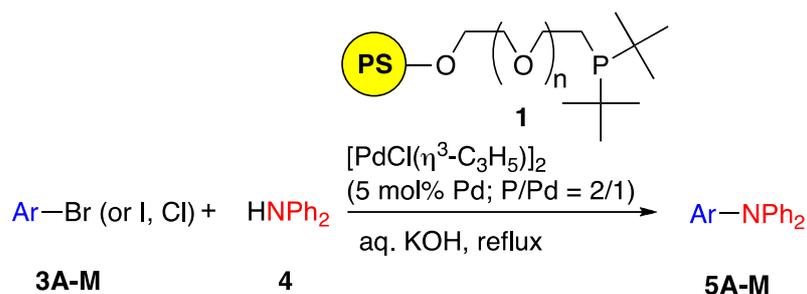


図 1-08 : 芳香族ハライドのジフェニルアミノ化

アニリンの N-アリール化 (図 1-09) も同様であり、アニリン芳香環のオルト、メタ、パラ位に広範な置換基が適用可能である。反応条件はいずれも共通である。この N-アリール化によるトリアリールアミン合成は第一段階としてアニリン窒素上に 1 分子の芳香族ハライドが反応し 2 級ジアリールアミンを与え、その系中で得られた 2 級ジアリールアミンがさらにもう 1 分子の芳香族ハライドと反応してトリアリールアミンを与えている。

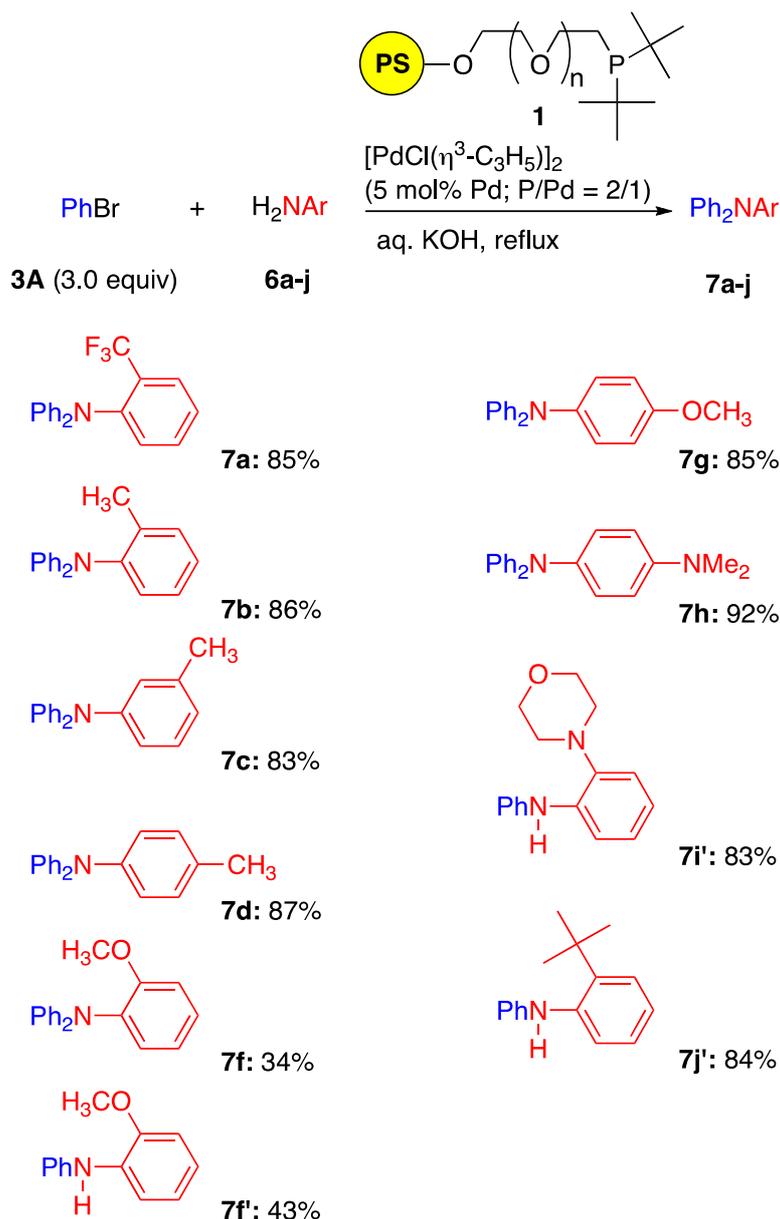


図 1-09 : アニリンの水中不均一触媒 N,N-ダブルアリール化

オルト位に嵩高い置換基を有する基質では 1 段階目の N-アリール化生成物（2 級ジアリールアミン）がしばしば高収率で得られている。

1 段階目の N-アリール化に比して 2 段階目の N-アリール化が遅いことを利用し、アニリン窒素上に段階的に異なった 2 種の芳香族置換基を導入することも可能であった。すなわち、図 1-10 に示すようにアニリンにビフェニル基を導入後、プロモトルエンを加えることで 1 ポットで N 上に 3 種の異なったアリール基をもつトリアリールアミンが合成可能であった。

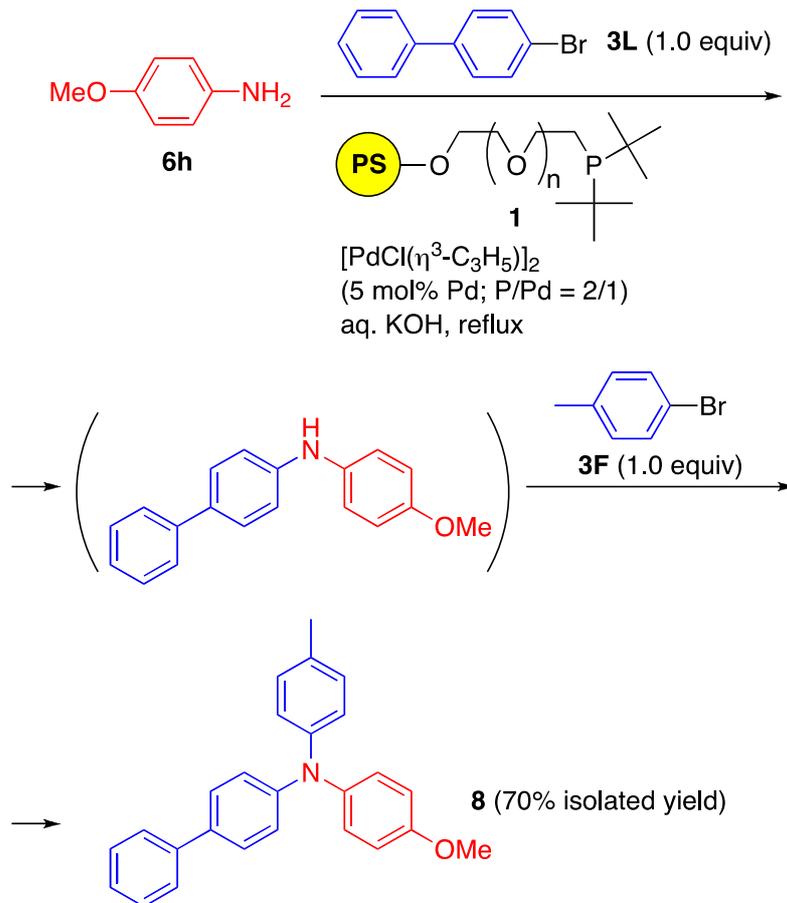


図 1-10 : ArAr' Ar'' N の 1ポット合成

有効なトリアリールアミン合成手法が確立できたので、次に TPD 誘導体合成の最終モデルとして、分子内に二つのトリアリールアミン基を有する 1,4-ビス（ジアリールアミノ）ベンゼンの合成を試みた。これまでの検討に立脚し、芳香族ハライドへのジフェニルアミノ基導入、ならびに 1,4-ジアミノベンゼンへの 4つの N-アリール基導入を試みた（図 1-11 参照）。いずれも良好に目的物を与え、とくに 1,4-ジアミノベンゼンへの 4つの N-アリール基導入では工程内に 4度の触媒的 C-N カップリングを含んでいるが、その 1ポット 4工程後の目的物収率は 75% に達している。

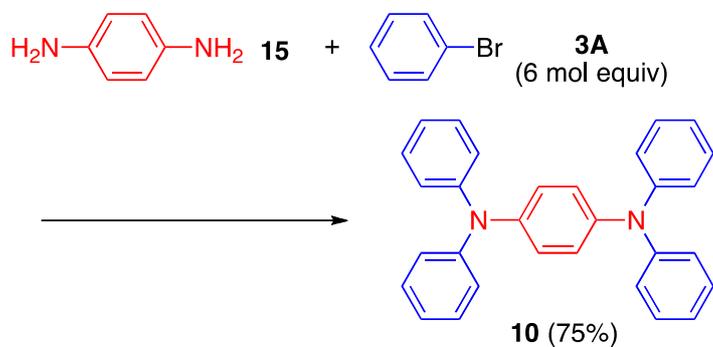
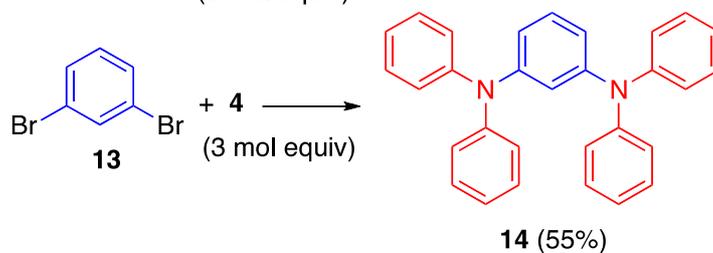
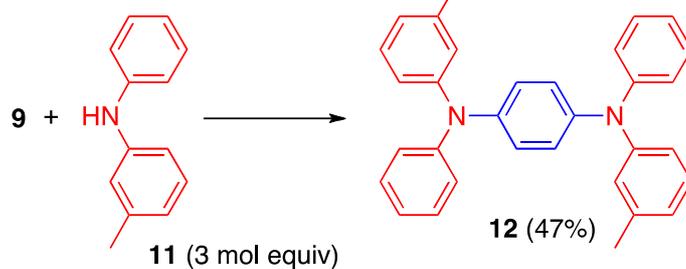
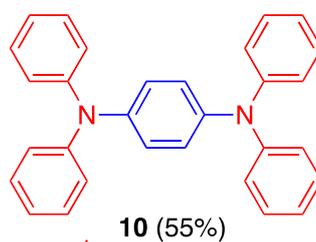
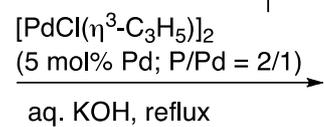
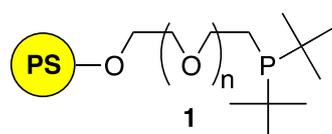
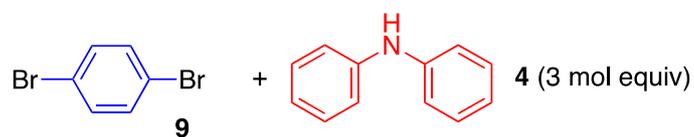
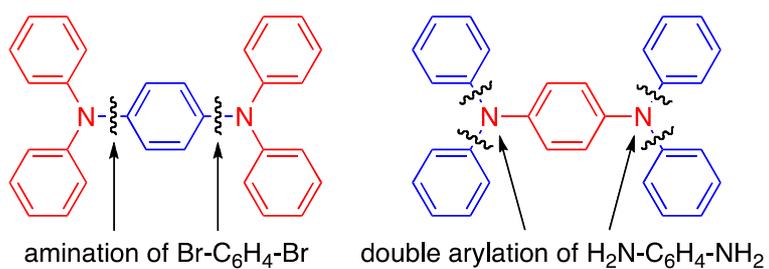


図 1-11 : ビス (N-ジアリール) アミノベンゼン類の合成

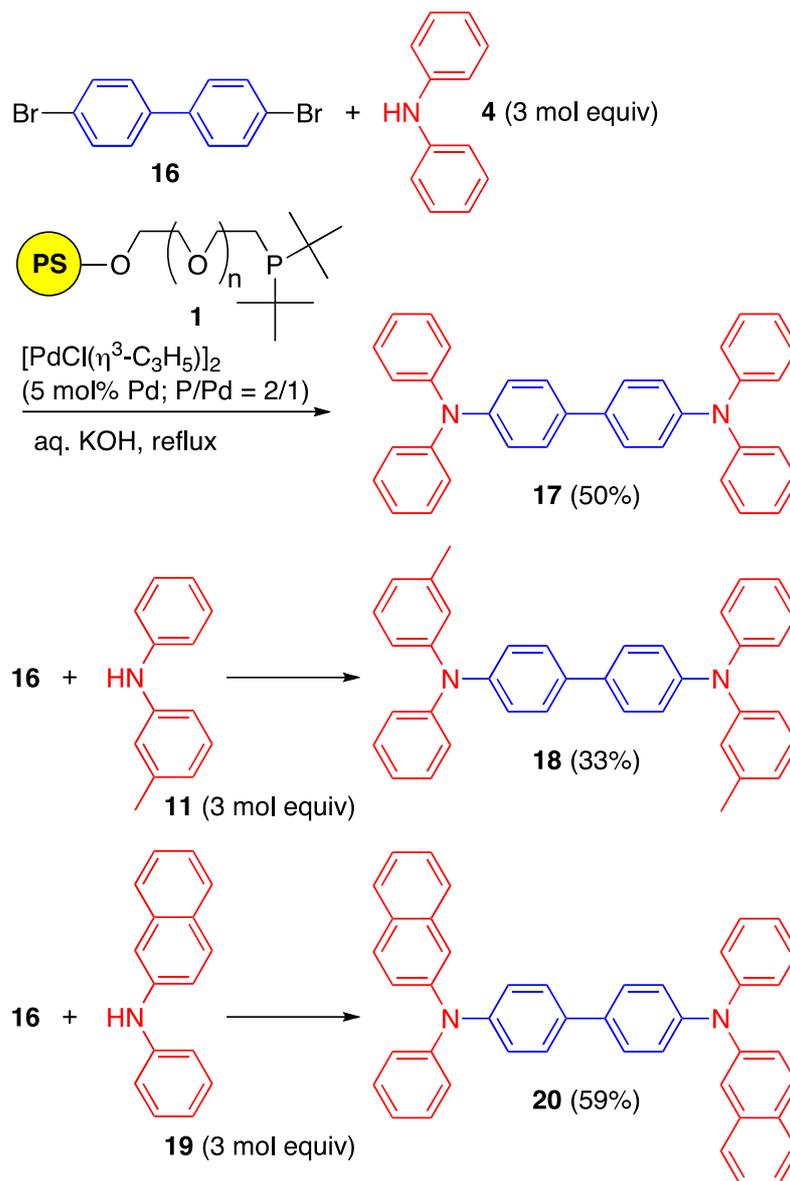


図 1-1 2 : TPD 誘導体合成

これらの検討結果を踏まえ、後述のトリアリールアミン合成の手法を最終目的構造である TPD 誘導体合成へと適用した入手容易な 4,4'-ジブロモビフェニルを出発原料とし 2 つのジアリールアミンを 4,4' 位に一挙に導入する反応を試みたところジフェニルアミノ基導入は 1 ポット 2 工程 50% 収率、フェニルトリルアミンとの反応では 33%、フェニルナフチルアミノ基導入工程では 59% の収率で各々目的の TPD 誘導体を得ることに成功した (図 1-1 2)。またジアリールアミノ基を一挙に 3 つ導入する工程 (図 1-1 3) も進行し 25% の単離収率でトリス (ジフェニルアミノ) ベンゼンを得ている。

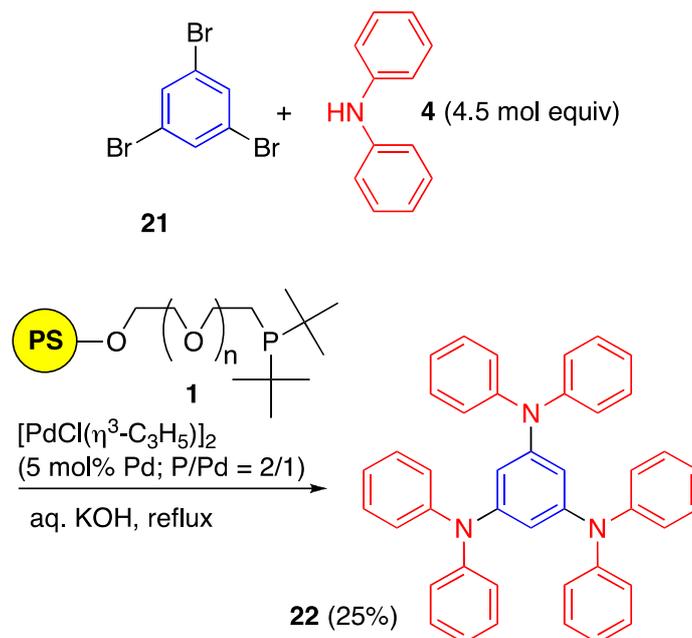


図 1-13 : 1ポットでのトリアミノ化工程

ここまで述べたアミノ化反応では、アミノ化触媒工程の反応効率は多くの系で80%を越え、また反応選択性は95%以上（他の生成物は検知されない）、触媒の回収は100%（単純濾過による）、再利用性も確認され、また触媒金属種の漏出は ICP 分析レベルでは検知されていない。

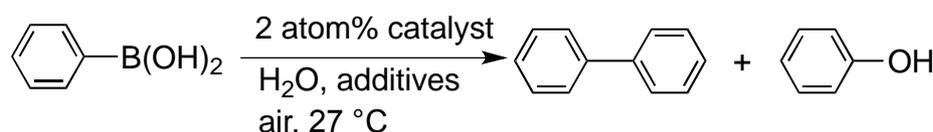
ii) ポリビニルピロリドン (PVP) で保護した金ナノクラスター触媒による TPD 誘導体合成を念頭に置いたアリール化合物のホモカップリングによるビフェニル骨格構築

より安価な触媒を用いた炭素-炭素結合形成を経た TPD 誘導体合成を念頭に、アリール化合物のホモカップリングによるビフェニル骨格構築についても検討した (図 1-04 ; eq. 3, eq. 4)。

ホモカップリングには、有機金属種を出発点とする酸化的手法と、有機ハロゲン化合物を出発点とする還元的手法があり、反応基質や条件によってそれぞれ最適な手法を選択することになるが、今回、その双方の反応が金クラスターをベースとした簡便に調製される触媒で実現可能であることを明らかにした。

有機金属化合物のうち、有機ボロン酸誘導体は、その空気や水に対する安定性、取り扱いの容易さ、市販品の多様さなどから最も有用な化合物であり、有機ボロン酸からの直接のホモカップリング反応が開発できれば極めて利用価値が高い。さらに、本ホモカップリングには化学量論量の酸化剤を必要とするが、酸化剤として分子状酸素、特に空気中の酸素をそのまま使用することができれば、特殊な酸化剤を使用することなく、また副生成物は水だけであるので、極めて環境負荷の少ないプロセスとなり得る。これまでもパラジウムなどの貴金属錯体を用いた例はいくつか報告されているが、必ずしも効率の良い反応はなく、また、Suzuki-Miyaura 反

応などとの競争となる場合が多かった。既に我々は水溶性高分子であるポリビニルピロリドン (PVP) で保護した金ナノクラスターが、有機ボロン酸のホモカップリングを塩基性水溶液中、空気雰囲気下、室温で触媒することを見出していたが、同時に直接酸化反応であるフェノールの副生が問題となっていた。今回、PVP に代え、天然由来高分子であるキトサンを保護高分子として用いると、弱酸性水溶液中、反応性、選択性とも著しく向上することを見出した。さらに、金属として金に対し 20%程度のパラジウムを添加した Au/Pd 合金を用いると、反応性は更に向上し、フェニルボロン酸の場合、わずか3時間以内でほぼ定量的に反応が完結する (図 1-14)。キトサン保護クラスター触媒の場合、生成物であるビアリール化合物は昇華、あるいはろ過といった単純操作で回収することができ、また、操作終了後水溶液を中和することにより、触媒は容易に沈殿し、ろ過のみで回収、再利用することができるため、原理的に有機溶剤を使用せずに実施できる。今後のプロセス開発により、実用的な酸化的ホモカップリング反応の開発に展開できることが期待される。



Au:PVP (24 h)	72%	23%
Au:Chitosan (9 h)	93%	7%
Au _{0.8} Pd _{0.2} :Chitosan (3 h)	>99%	nd

図 1-14 : 金クラスター触媒を用いた有機ボロン酸のホモカップリング反応

一方、有機ハロゲン化物の還元的ホモカップリングである Ullmann 反応も極めて重要である。特に安価で容易に入手可能な塩素化物を用いることができれば、その利用価値は極めて高い。しかしながら、Ullmann 反応にはひとつの触媒サイクルに酸化的付加過程が2段階あるため、通常反応性の著しく乏しい炭素-塩素結合活性化は困難であり、これまで室温条件で塩素化物の Ullmann 反応を実現した例はなかった。また、化学量論量の還元剤を必要とするため、環境負荷の少ない還元剤を選択する必要がある。今回我々は PVP 保護 Au/Pd 合金クラスターを用い、水との共溶剤として用いる DMF を同時に還元剤としても使用することで、環境負荷を最小限にしつつ、世界で初めての室温領域での Ullmann 反応に成功した (図 1-15)。本反応は、単独の金、あるいはパラジウム触媒では全く進行せず、合金の時のみに進行する点がユニークである。また極めて広範な基質に適用でき、様々な対称ビアリール、ビピリジル化合物などに適用できる。

尚、本 NEDO 課題終了後も上述のホモカップリング反応によるビアリール合成を鍵段階とする TPD 誘導体合成を継続的に検討しつつあり、より有効な合成工程へと成熟しつつある (図 1-16)。

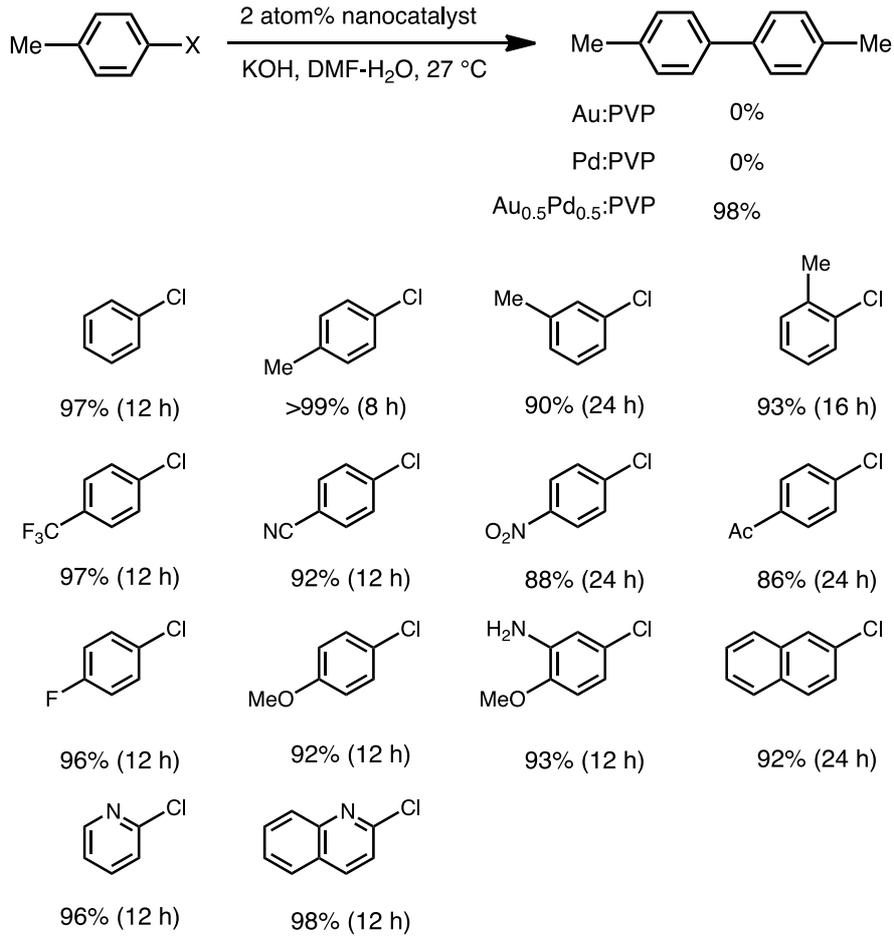


図 1-15 : Au/Pd 合金クラスターを用いた芳香族塩素化物のホモカップリング

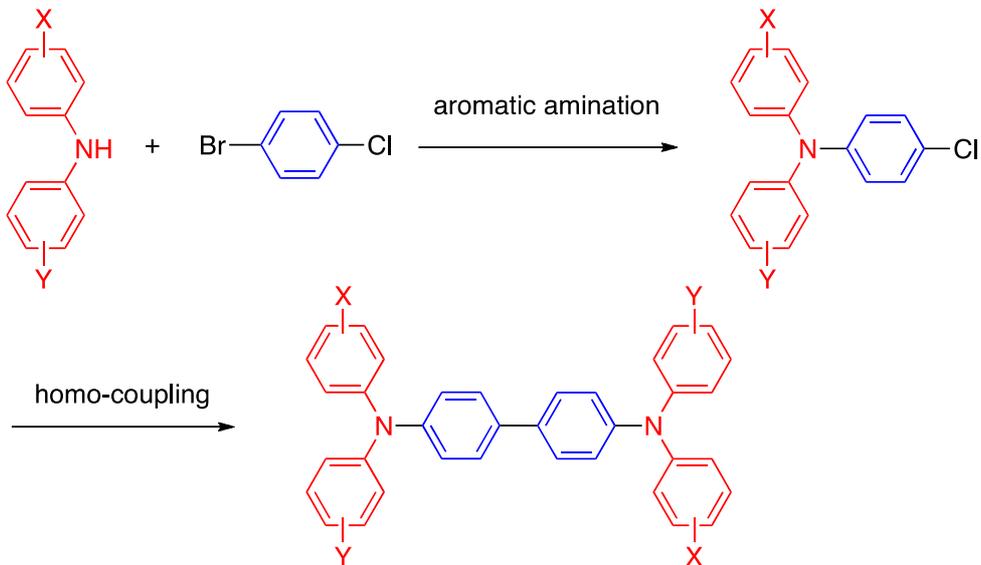


図 1-16 : 高効率 TPD 誘導体合成経路

Ⅲ. 2. 1. ②ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究（分子研）

（1）実施計画書の最終目標達成状況

最終目標	達成状況	達成度
<p>目的化合物の10kg以上のスケールを想定したプロセスを確立しサンプル製造を実施する。</p> <p>平成23年度研究開発目標：反応率98%以上、選択率95%以上、金属漏出1ppm以下、触媒回収98%以上、触媒コストの90%低減。</p> <p>なお触媒回収においては触媒工程のフロープロセス（流通式）展開ならびに、そのための触媒カートリッジ化を達成することも目標となる。</p>	<p>目的とするアルコール類の酸素酸化反応は完全水系条件にて達成している。</p> <p>反応率、選択性は99%以上。触媒回収は定量的であり、さらに進んで連続フロー反応系を確立した。検討初期段階でバッチ（フラスコ）反応で触媒回転数が10～20回であったが、フロー反応系では2000-2500回に達し、すなわち触媒使用量が1/100以下であった。このことは触媒コスト99%以上の低減に相当する。</p> <p>スケールアップ実験では、卓上の小型連続フロー反応装置によってすでに試験サンプルの100グラムスケール合成を再現よく達成した。</p> <p>同連続フロー装置の数十倍スケールの装置設計も完了している。</p> <p>開発した触媒の工業製品化が決定され、技術移転を行っている。</p>	◎

（2）成果の詳細

（a）研究背景

アルコール類を対応するカルボニル化合物に変換する酸化工程は有機分子変換の根幹的変換工程であり、初学者用のものから上級の専門書に至るあらゆる有機化学の教科書に幾つかの方法論が紹介されている。しかし、根幹的分子変換であるにも関わらず、本工程は十分に完成された成熟した工程とは言いがたいものであった。すなわち、一般にアルコール類の酸化反応は化学量論量の酸化剤を用いて実施されている。また、その酸化剤もクロム酸、超原子価ヨウ素、アルコール活性化剤（オキザリルクロリド等）とDMSOの組み合わせ（量論量のジメチルスルフィドを共生成する）などに代表され、それらは安全性や環境調和性に著しく問題を残している。酸素ガスを酸化剤とする触媒的酸化工程、なかでも固体触媒を用いる接触酸化プロセスは原理的に上述の問題を解決し得る方法論であるが、酸化反応系中での有機過酸化物など、爆発性をもつ有機分子が発生する反応であるが故に、安全性の観点から実用に適さないものであった。

分子科学研究所・魚住グループでは前項でも述べた両親媒性高分子担持遷移金属錯体触媒開発の過

程において、担持された金属錯体を取って分解し、高分子担体マトリクス内で金属ナノ粒子を発生させる手法を見だし、また両親媒性 PS-PEG 担体内で発生、固定化されたパラジウムおよび白金ナノ粒子が、両親媒性担体の特性に立脚し、水中でアルコール類の酸素酸化反応を触媒することを見だしていた。特に、その初期報告（2003年, Angew. Chem. Int. Ed.）は固定化触媒によるアルコール類の水中酸素酸化の極めて初期の成功例である。特に我々が見いだした水中酸素酸化工程では、反応性が高く検討報告例が散見されるベンジルアルコール、アリルアルコールにとどまらず、反応性に劣る脂肪族アルコール、脂環式アルコールをも酸化することが見いだされてきた。

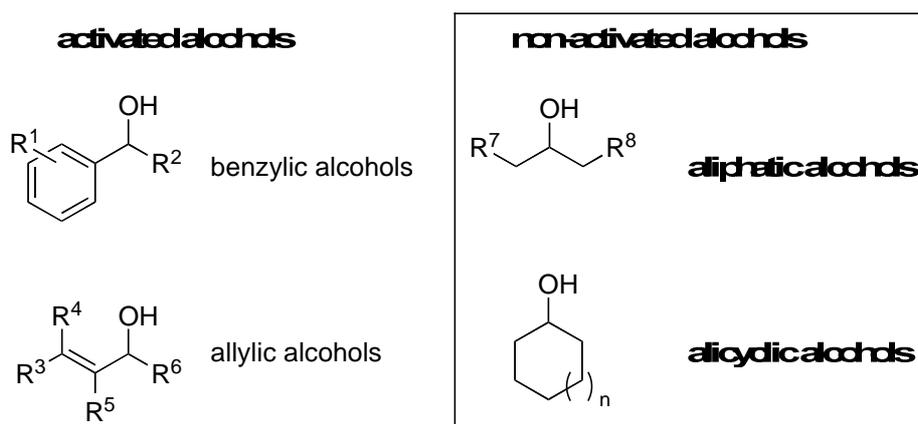


図 2-0 1 : アルコール類の反応性

この触媒的酸素酸化工程は水中で実施されるため、爆発の危険は皆無であり、また過酸化水素が発生したとしても金属触媒によって速やかに酸素の発生を伴う分解反応によって消費される（水と酸素を与える）ため、危険性は無い。

(b) 研究計画

GSC プロジェクトの眼目を考慮したとき、上述の水中機能性ナノ触媒によるアルコール類の酸素酸化反応はまさに最良の解答と考えられる。そこで我々は、特に活性の高い白金ナノ粒子触媒による水中酸素酸化工程の確立を目指した。初期検討として、触媒調製の手法確立、アルコール酸化の一般性、触媒の回収再利用性を確認後、最終的にはアニオン性界面活性剤として知られるアルキルオリゴ（オキシエチレン）カルボン酸の高純度化に展開する。高純度アルキルオリゴ（オキシエチレン）カルボン酸は精密電子デバイスの洗浄剤として期待される界面活性剤である。とくに一部精密洗浄工程は現在もなおパーフルオロカーボン（PFC）を用いているが、その温室効果は極端に高く、大きな環境負荷をもたらしている。しかし従来法では高純度アルキルオリゴ（オキシエチレン）カルボン酸の供給が困難であったため、必要悪として PFC に依存せざるをえなかった。すなわち従来アルキルオリゴ（オキシエチレン）カルボン酸は対応するアルキルオリゴ（オキシエチレン）アルコールとクロロ酢酸をアルカリ金属塩基存在化で反応させ（Williamson エーテル合成法）エチレンオキシ部分の 1 ユニット伸長を伴って調製されてきたが、この方法では化学量論量のアルカリ金属塩の共生成は不可避

である。アルキルオリゴ（オキシエチレン）カルボン酸へのアルカリ金属塩の混入は精密電子デバイス洗浄では致命的である。アルカリ金属を全く用いない方法でアルキルオリゴ（オキシエチレン）カルボン酸が得られるならば、環境負荷が大きい PFC の代替となりうることから、その方法論開発は重要な検討課題である。すなわち、水中酸素酸化工程の開発・確立は方法論としてチャレンジングであるとともに、標的化合物であるアルキルオリゴ（オキシエチレン）カルボン酸は、そのユーティリティにおいても GSC の要請に見合ったものと言える。

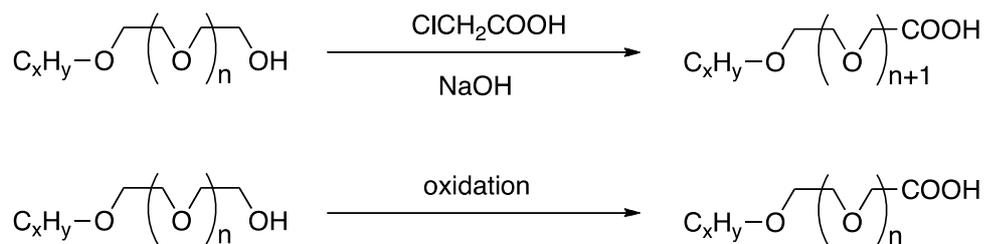


図 2-0 2 : 標的化合物アルキルオリゴ（オキシエチレン）カルボン酸

(c) 研究開発結果

初めに、両親媒性ポリスチレン-ポリエチレングリコール共重合体レジン (PS-PEG) マトリクス内での白金ナノ粒子の発生方法の開発・確立に注力した。末端にアミノ基を有する PS-PEG レジンに Zeise 塩 ($K[PtCl_3(CH_2CH_2)]$) を水中で反応させ錯体形成を行った。得られた白金アミン錯体を還元条件に付したところ、安定な 2 価白金が 0 価となり不安定化し、白金種がアミノ基から解離し、さらに高分子マトリクス内で凝集することでナノ粒子が形成された。以下、調製した両親媒性高分子担持白金ナノ粒子 (Amphiphilic Resin-dispersion of nano Particles of Platinum) を ARP-Pt と表記する。白金ナノ粒子が発生、分散、固定化されたことで、それ自体では淡黄色半透明のレジンビーズは黒色に変化した。約 100 ミクロンの直径を持つレジンビーズの光学顕微鏡像を示す(図 2-0 4)。

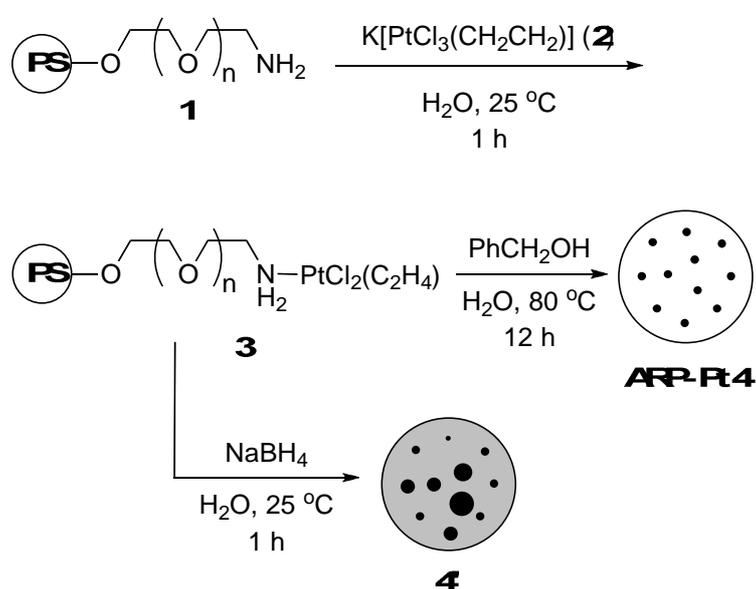


図 2-0 3 : 高分子担持ナノ白金触媒の調製

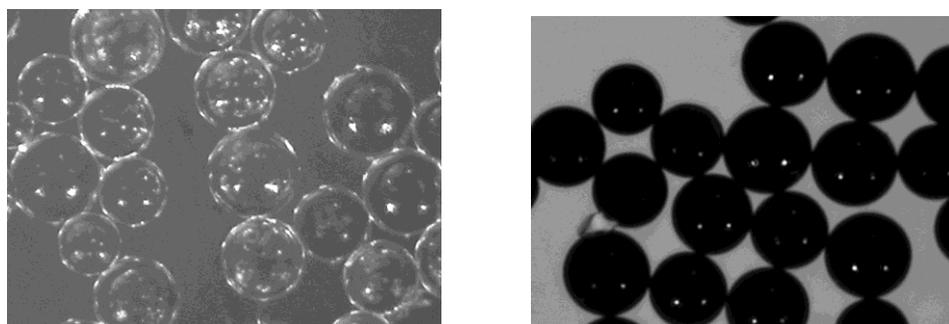
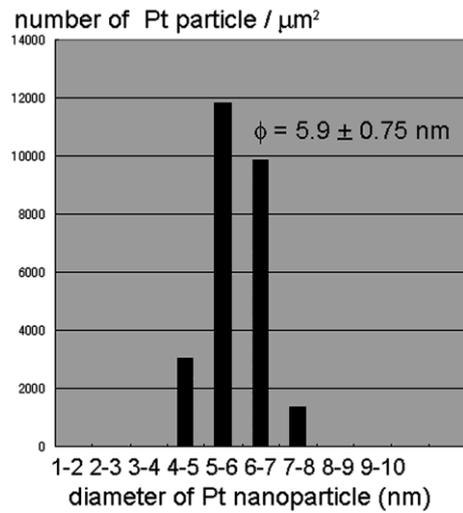
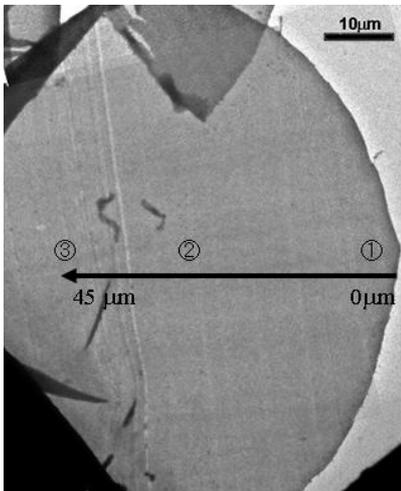


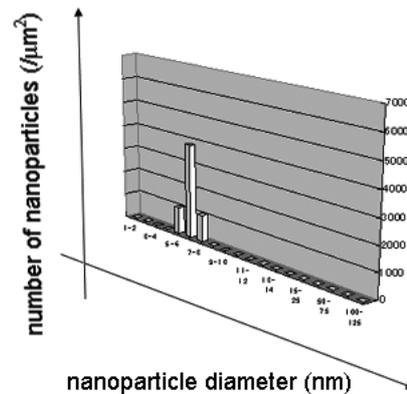
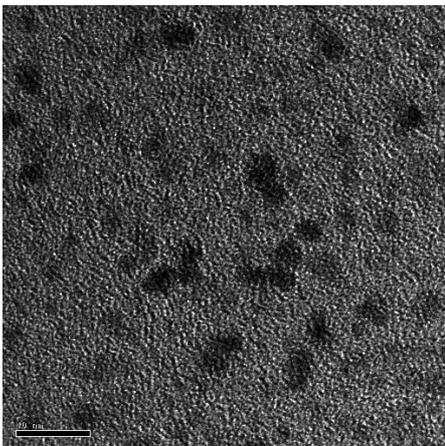
図 2-0 4 : PS-PEG アミノレジンおよび高分子担持ナノ白金触媒の光学顕微鏡像

上述の還元的錯体分解を経るナノ粒子発生過程において還元剤、還元条件の選択が再現性よく一定の粒径分布の整った白金ナノ粒子調製に重要であることが見いだされた。すなわち白金アミン錯体を水中加熱還流条件でベンジルアルコールと反応させた場合、担体レジンのほぼ全ての領域に於いて一定の粒子径を持ったナノ粒子が発生・固定化されるのに対し、水素化ホウ素ナトリウムを還元剤とした場合にはナノ粒子サイズのばらつきが大きく、またレジン担体の中心部と外周付近ではナノ粒子サイズが大きく異なっていた。図2-05にベンジルアルコールを用いた還元工程を経て調製されたARP-Ptの電子顕微鏡観察像を示す。透過電子顕微鏡観察はARP-Ptの薄膜切片をマイクロームによって切り出し、外周部から中心部にかけての3点で実施した。切片全体の粒径分布、各観察箇所での粒径分布、ビーズ外観のSEM/EDS測定の結果を示している。また、それに引き続き、水素化ホウ素ナトリウム還元を経て調製されたARP-Ptについても同様の観察結果を示す。

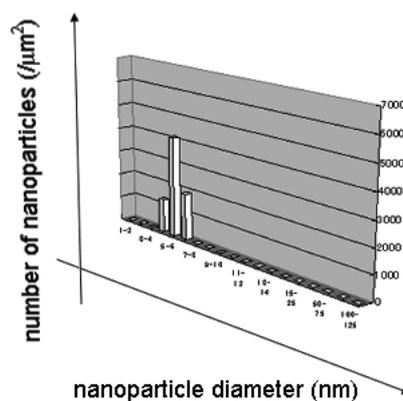
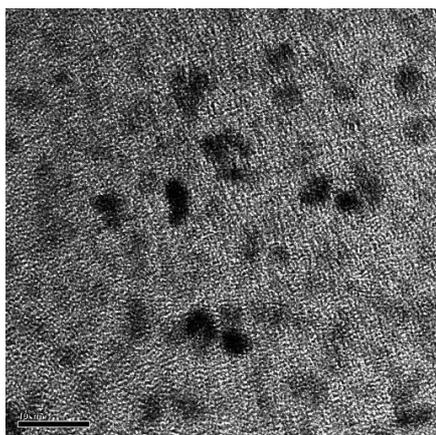
(A)



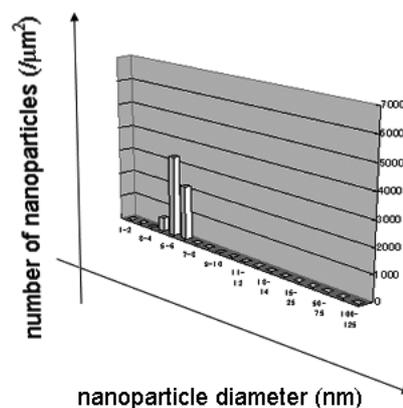
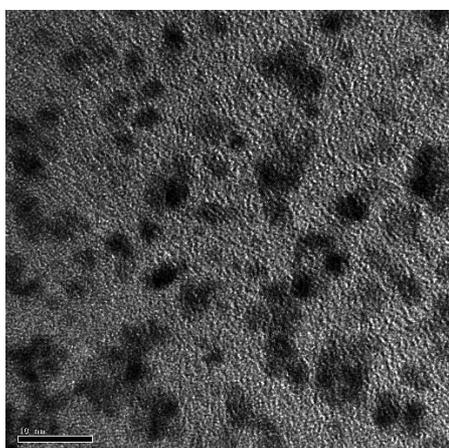
(B)



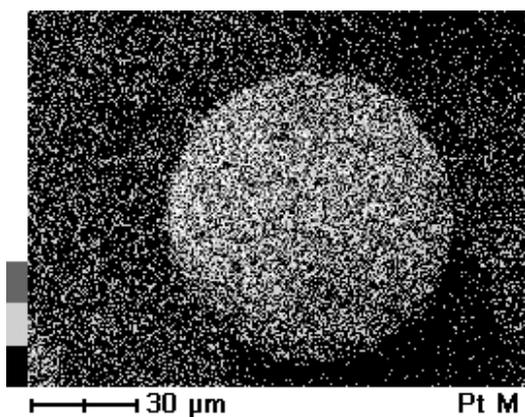
(C)



(D)



(E)



(F)

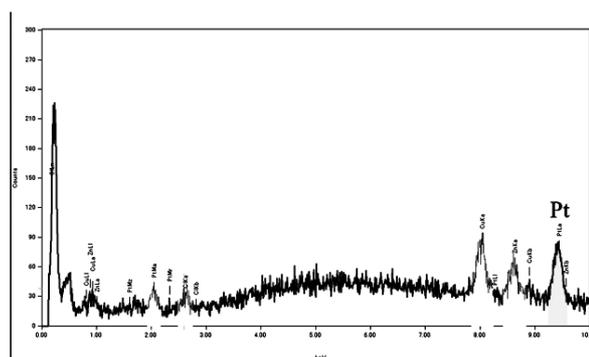
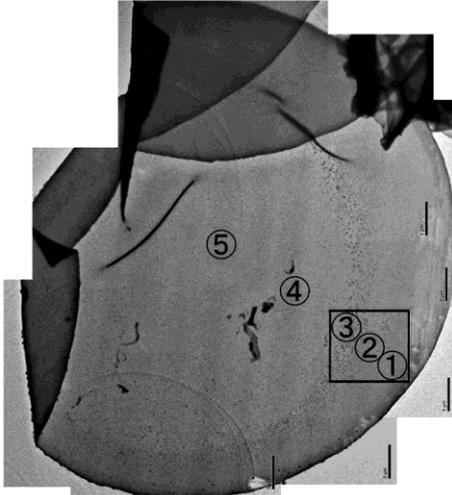


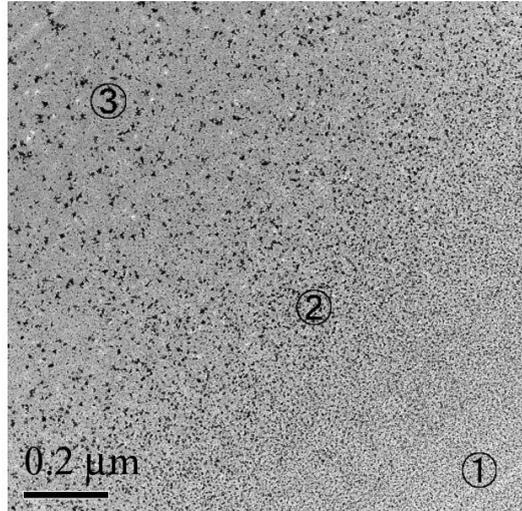
図 2-0 5 : ARP-Pt 触媒の創製(ベンジルアルコール還元条件における高分子マトリクス中でのナノ白金粒子の発生)

(A) a TEM image of a section of 4; and a histogram of the size distribution of Pt particles in 4 (x axis: diameter of Pt nanoparticles (nm); y axis: numbers of Pt nanoparticles (μm^2)); (B) a TEM image of 4 at the (1) position, and a histogram of the size distribution of Pt particles (bar: 10 nm); (C) a TEM image of 4 at the (2) position, and a histogram of the size distribution of Pt particles (bar: 10 nm); (D) a TEM image of 4 at the (3) position, and a histogram of the size distribution of Pt particles (bar: 10 nm); (E) a SEM image of 4; (F) EDS/SEM images of Pt in 4

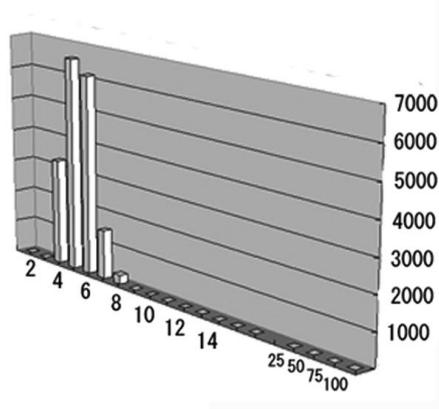
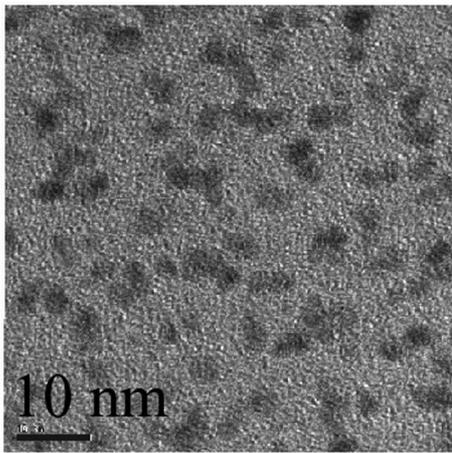
(A)



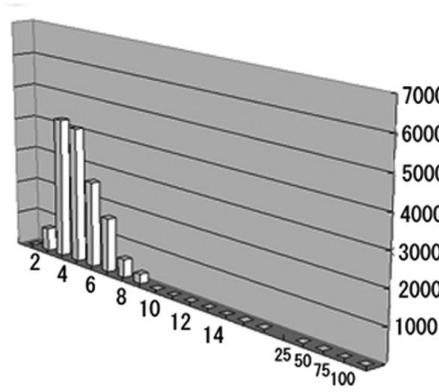
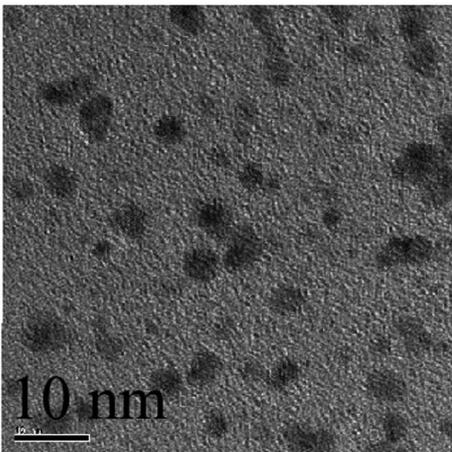
(B)



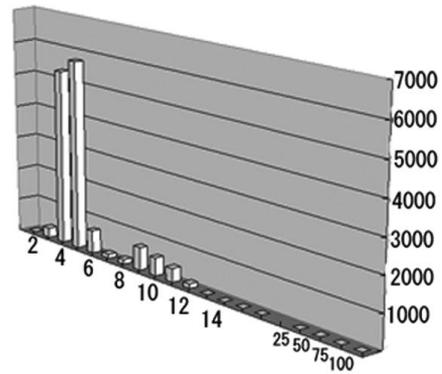
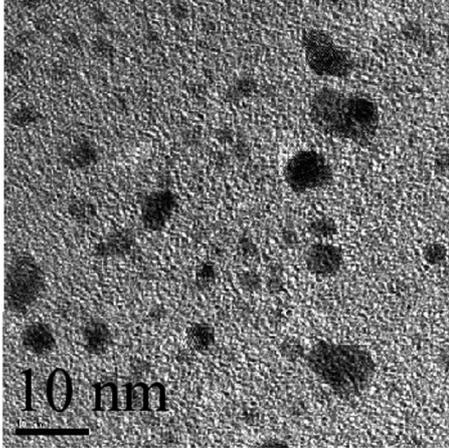
(C)-(1)



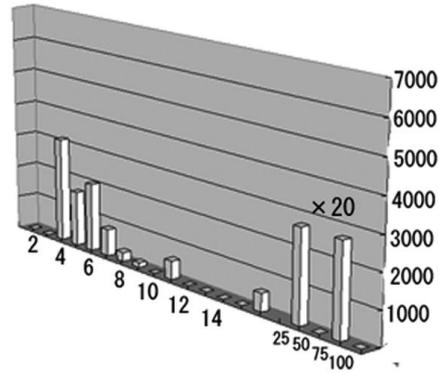
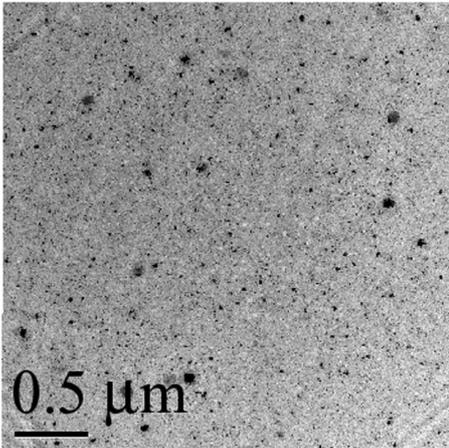
(C)-(2)



(C)-(3)



(C)-(4)



(C)-(5)

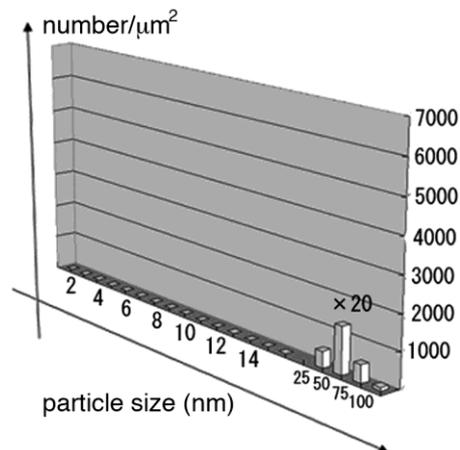
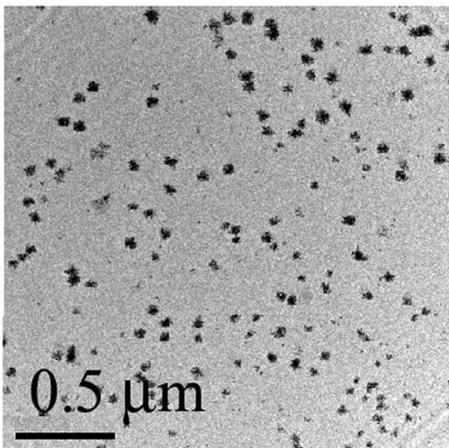


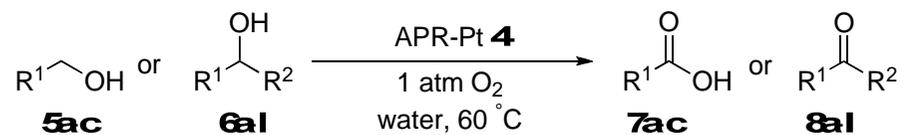
図2-06 : ARP-Pt 触媒の創製(水素化ホウ素ナトリウム還元条件における高分子マトリクス中でのナノ白金粒子の発生)

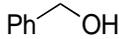
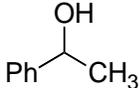
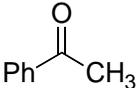
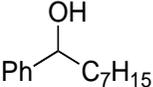
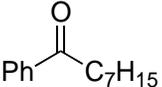
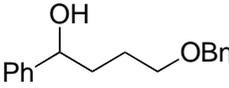
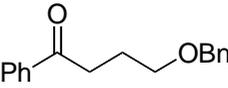
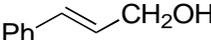
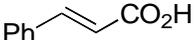
(A) a TEM image of a section of 4'; (B) a TEM image of 4' at (1)-(3) positions; (C) TEM images and histograms of 4' at (1)-(5) positions; (x axis: diameter of Pt nanoparticles (nm); y axis: numbers of Pt nanoparticles (μm^2)).

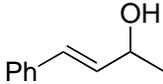
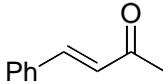
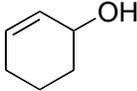
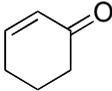
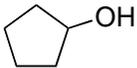
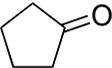
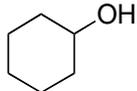
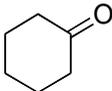
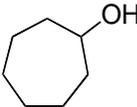
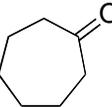
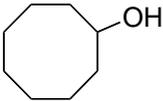
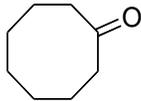
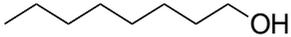
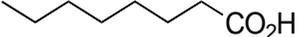
続いて、得られた ARP-Pt 触媒を用いて各種アルコール類の水中での酸素酸化反応を検討した。主な結果を表 1 にまとめる。反応は全て水中、1 気圧の酸素雰囲気下、60℃にて実施した。

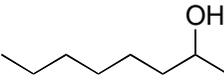
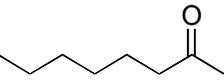
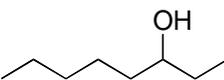
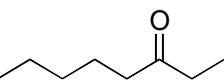
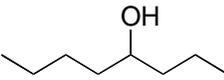
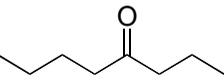
高い反応性が知られているベンジリックおよびアリリックなアルコール類（表 1 中 entries 1-8）は 83～99%の転換率と 99～100%の化学選択性を示し、目的カルボニル化合物の単離収率も 80～99%と良好であった。一般に反応性が低い脂肪族アルコール（脂環式アルコールを含む。）についても表 1 中 entries 9～19 に示す通り十分な反応性が見られ、転換率 85～100%、選択性 95～100%、単離収率も 80～95%であった。また、本酸化触媒系の特徴として、1 級アルコールの酸化ではアルデヒド段階で反応が止まることなく、一挙に対応するカルボン酸が得られる。1 級アルコールの 1 段階でのカルボン酸への誘導を高効率で達成するには通常は Jones 酸化試薬の様な反応性の高い酸化剤、強い酸化条件が必要となるが、本触媒系では中性条件下穏和な条件でのカルボン酸生成が可能であった。なお、表には同様に調製されたパラジウム触媒 ARP-Pd を用いた反応結果を比較として同掲した（表 1 中 entries 10, 12, 17）。いずれの基質においても白金触媒 ARP-Pt の優位性が確認された。

表 1 : ARP-Pt 触媒を用いたアルコール類の水中酸素酸化



entry	substrate	4 (mol%)	time (h)	product	conversion (%)	yield (%)		
1 ^b		5a	1	24	PhCO ₂ H	7a	99	99
2 ^b			5	8			99	97
3		6a	5	24		8a	87	82
4		6b	10	36		8b	83	80
5		6c	20	36		8c	85	82
6 ^b		5b	10	18		7b	99	93

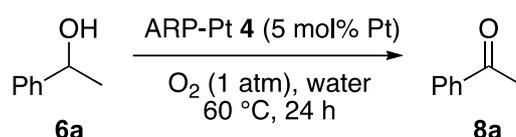
7		6d	5	15		8d	88	87
8		6e	5	36		8e	99	72
9		6f	5	12		8f	91	80
10		6f	5	20			< 2	
11		6g	5	12		8g	85	81
12	ARP-Pd, 100 °C		5	20			< 2	
13		6h	5	12		8h	99	93
14		6i	5	12		8i	99	87
15 ^b		5c	10	10		7c	99	95

16		6j	5	15		8j	94	85
17	ARP-Pd, 100 °C		5	20		--		29
18		6k	10	30		8k	99	84
19		6l	10	36		8l	99	81

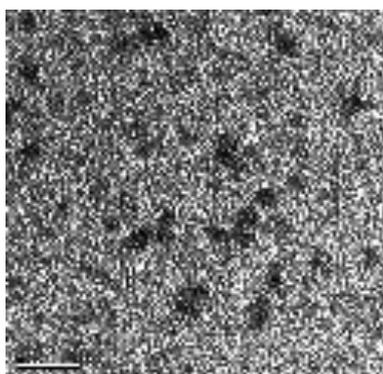
[a] All the reactions were carried out with **4** at 60 °C in water under atmospheric oxygen unless otherwise noted.

[b] One mol equiv of K₂CO₃ was added.

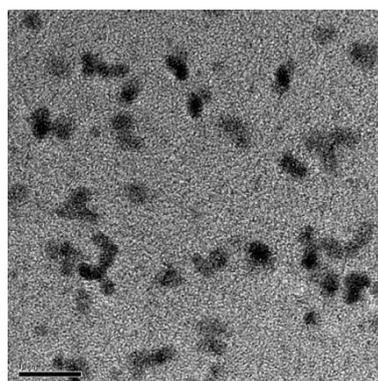
フェネチルアルコールの酸化反応において、両親媒性高分子担持白金ナノ粒子触媒の回収再利用性について検討した。反応は水中、60℃、1気圧酸素、24時間にて実施し、反応終了後に反応液を濾過し触媒を回収、触媒ビーズを温水で洗浄することで目的物を抽出し、得られた濾液および洗浄液は合わせて凍結乾燥することで目的物を得た。粗生成物はNMRおよびガスクロマトグラフ質量分析(GC-MS)によって純度および生成物の構造確認を行った。その結果、特段のクロマトグラフ精製を経ずともすでに粗生成物の段階でNMRおよびGC-MSでは目的のアセトフェノン(8a)以外のものは検知されなかった。回収した触媒はそのまま次の同反応に利用した。その結果、図2-07に示す通り、5回の再利用実験にて触媒活性の低下・失活は見られなかった。またその間、生成物への白金金属種の漏出はICP分析レベルでは全く検知されなかった。触媒反応前の触媒 ARP-Pt と5回の回収再利用後の同触媒は、一部薄膜切片を切り出し透過電子顕微鏡観察したが、本質的な触媒白金ナノ粒子の形状およびサイズ分布変化は観察されなかった。一方、水素化ホウ素ナトリウム還元で調製した触媒は回収再利用実験での活性低下が観察され、また回収後の触媒白金ナノ粒子形状に変化が見られたことから、触媒の構造および機能の安定性の面で劣っていることが確認された。



1st use: 82%, 2nd use: 81%, 3rd use: 84%, 4th use: 92%, 5th use: 90%
 No Pt leaching (< 1 ppm) was observed (ICP-AES analysis)



before



after 5th use

(reuse of **4'** (prepared via NaBH₄ reduction)
 1st use: 93%, 2nd use: 89%, 3rd use: 88%, 4th use: 79%, 5th use: 68%
 0.41% of Pt leaching was observed.)

図2-07 : ARP-Pt 触媒(4 および 4')の再利用実験

ここまで、我々はビーズ直径が90ミクロン程度のPS-PEG担体を用いて検討を進めて

きた。しかし反応が固定化触媒担体の表面あるいは外縁領域で主に進んでいるのであれば、ビーズ担体の表面積が重要な意味を持つこととなる。そこで、同じ組成を持つ PS-PEG レジンのビーズ直径の異なるものを用いて酸化触媒反応を試みた。

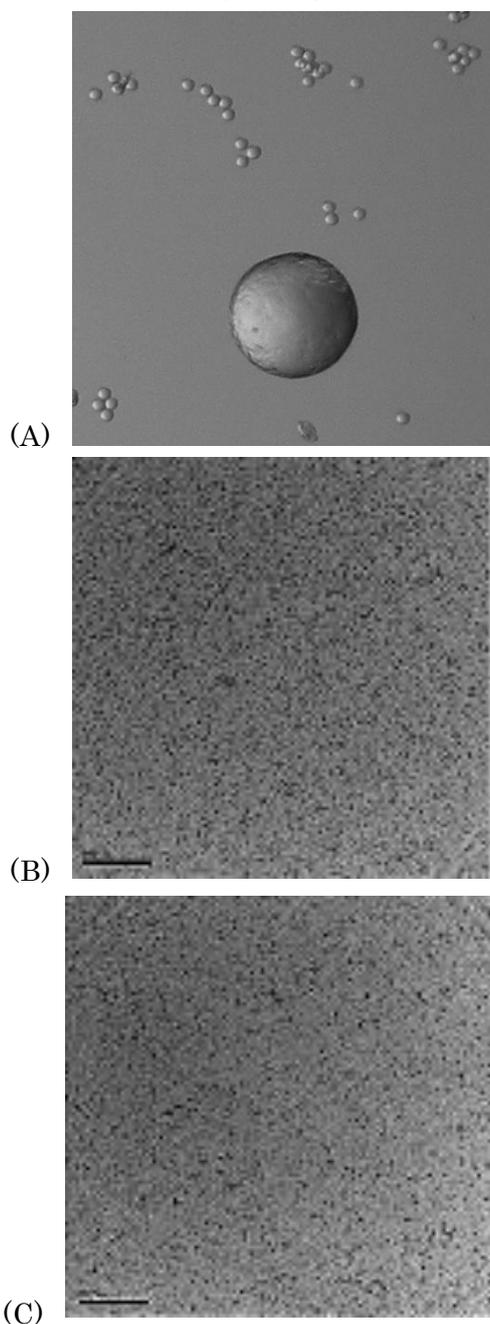


図 2-0 8 : 粒径の異なる高分子担体を用いた ARP-Pt 触媒:電子顕微鏡観察
(A) A microscopic image of the resins of ϕ 90 μm and ϕ 10 μm . (B) and (C) TEM images of 4 (B: ϕ 90 μm and C: ϕ 10 μm , bar 100 nm)

図 2-0 8 (A)において大きなビーズがこれまで用いてきた 90~100 ミクロン径の PS-PEG ビーズ。その周辺の小さな「粒」が直径 10 ミクロンのビーズである。図 2-0 8 (B), (C)では、サイズの異なる PS-PEG 担体内に発生させた白金ナノ粒子である。これら

の観察から、ARP-Pt 触媒調製は担体のビーズ形状に依存しないことが確認された。続いて、このサイズ違いの ARP-Pt 触媒の触媒機能確認実験を試みた。その結果、反応性においてもビーズ担体のサイズ径は影響ないことが判った。これはビーズマトリクス内への原料有機基質の取込み、疎水性相互作用に基づく拡散が触媒反応工程よりも十分に早いことを意味している。

ϕ (resin)	90 μm	10 μm
surface area (m^2/g)	3.05×10^{-2}	2.47
Pt loading (mmol/g)	0.21	0.21
yield (10 h)	46%	46%
yield (24 h)	81%	86%

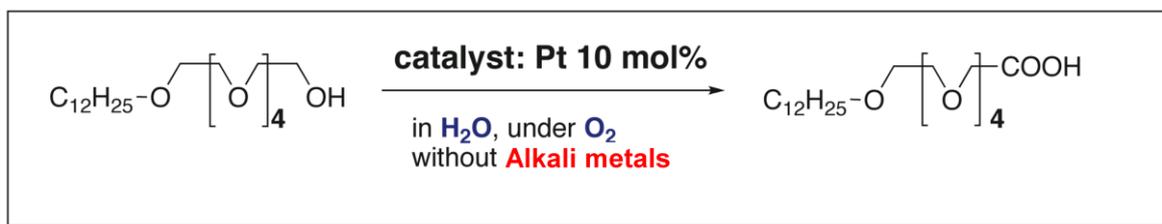
図 2-09 : 粒径の異なる高分子担体を用いた ARP-Pt 触媒:触媒機能の検証

[a] All the reactions were carried out with **4** at 60 °C in water under atmospheric oxygen.

同様に直鎖ポリスチレン、架橋型ポリスチレン、ABS樹脂、MeOPEGなどを担体とした実験も行い、検討を重ねてきた PS-PEG 担体との比較実験を行ったが、いずれも PS-PEG よりも顕著に低い活性や回収再利用性を示した。

これらのことから、我々は操作性に優れた直径 90 ミクロン程度の PS-PEG 樹脂ビーズが検討した担体中で最適の高分子担体であると結論した。

以上の検討結果を踏まえ、アルキルオリゴ(オキシエチレン)アルコールの酸化による、標的化合物であるアルキルオリゴ(オキシエチレン)カルボン酸合成に本触媒反応工程を適用展開した。ドデシルテトラ(オキシエチレン)エタノールを用いた検討結果を図 2-10 に示す。



触媒利用回数	変換率%	収率%
1	99	90
2	99	85
3	99	94
4	99	84
5	99	90

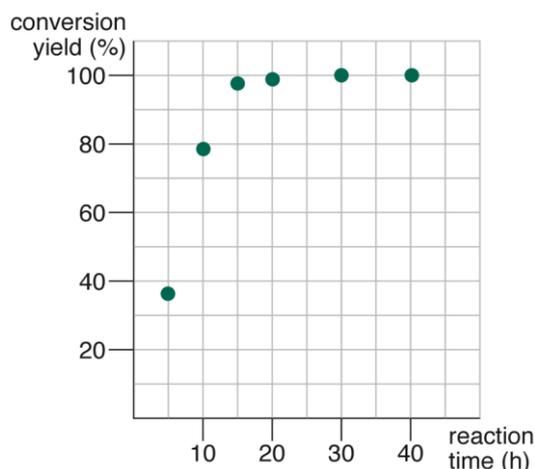


図 2-10 : アルキルオリゴ (オキシエチレン) カルボン酸合成

図 2-10 に示したようにドデシル (オキシエチレン) エタノールの酸化反応は水中で 1 気圧の酸素雰囲気下、十分な基質変換率と化学選択性をもって進行し、また触媒の回収再利用性も十分であり高純度の標的カルボン酸を与えることが見いだされた。

すなわち、生成物解析を単純化するためエチレングリコールのユニット数を 4 に限定したサンプルを用いた初歩的検討において、ドデシル (オキシエチレン) エタノールは基質変換率 (反応率、NMR 定量) 90-95% で目的カルボン酸に変換され、その単離収率は 85-95% であった。このとき高分子担持 Pt 触媒は反応前に 80°C 温水洗浄 (2-4 時間) したのち触媒反応に供した。反応混合物 (水性溶液) は活性炭で濾過後、溶媒 (水) を除去することで得られた。また反応混合物中の漏出 Pt は検出限界以下 (ICP-AES、検出限界=約 0.05 ppm) であった。

このような良好な初期検討結果を得、触媒の経済性などを考慮するならば、本反応を連続フロー型反応工程に展開することが有利であると考えた。そこで図 2-11 に示す様なフロー反応装置にて連続系酸素酸化反応の検討を実施した。

用いた市販の反応装置 (X-Cube™ Reactor) は送液ポンプで反応基質の溶液を導入しつつ、その流路内にナノフリットを介して加圧ガスをナノバブルとして気液混入させ、同混合物が触媒カートリッジを通過する。加圧ガスは背圧をモニターしつつコンピューター制御され、また送液流量の調節によって触媒との接触時間 (反応時間)、触媒カートリッジ部分の温度調整によって反応温度が制御可能である。

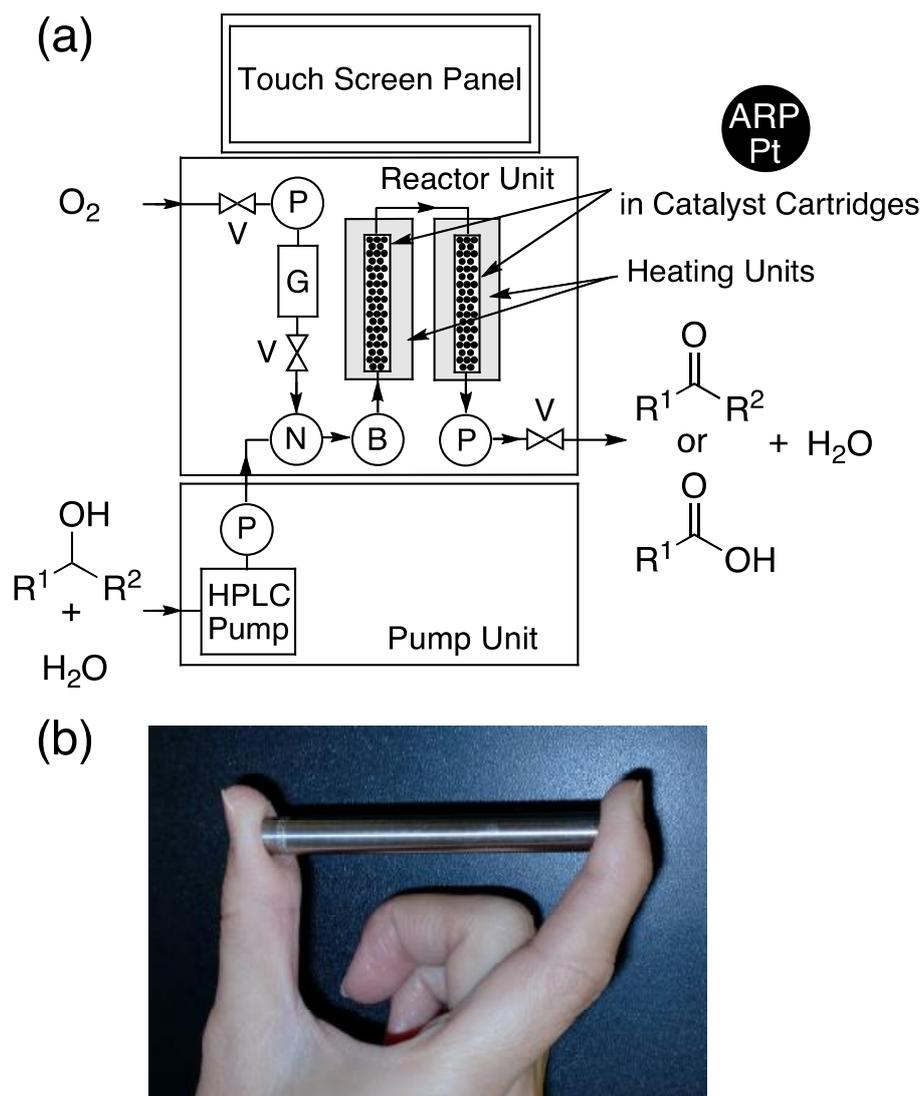


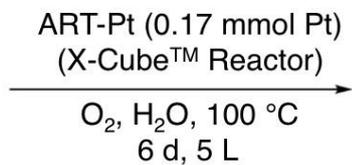
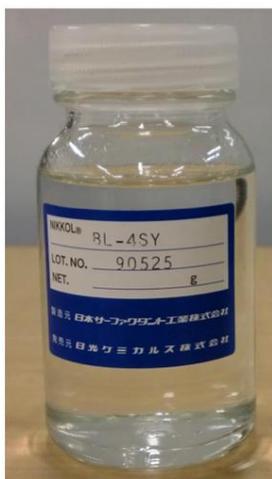
図 2-1 1 : 連続フロー反応装置の概要スキーム

(a) Schematic diagram of the flow-oxidation reactor. P: pressure sensor, G: gas buffer area, V: valve, N: nanobubble generator, B: bubble detector.

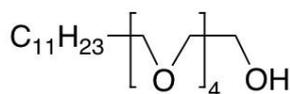
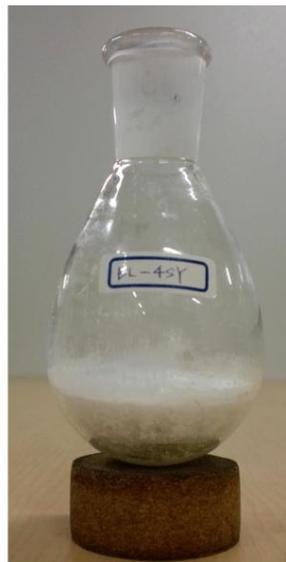
(b) View of the catalyst cartridge.

様々な反応条件を連続的に変えながら、出口から反応生成物をスナップショットで抜き取り反応の様子を見ることが出来るため、通常では反応の至適条件設定にオートクレーブ反応の繰り返しが必要となる固体触媒を用いた気液反応（気／液／固の3相反応）の条件出しに最適である。

その結果、実験室レベルの検討で数日中に100～200グラムの目的反応の遂行が容易に達成できるようになり、図2-12に示すように、目的とする界面活性剤分子の安定供給が達成された。

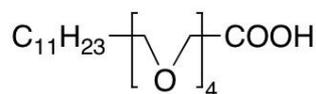


System Pressure: 60 bar
Flow Rate: 0.6 mL/min
Contact Time: 75 sec

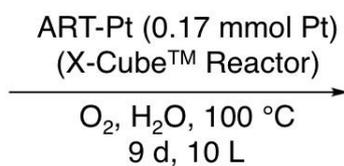
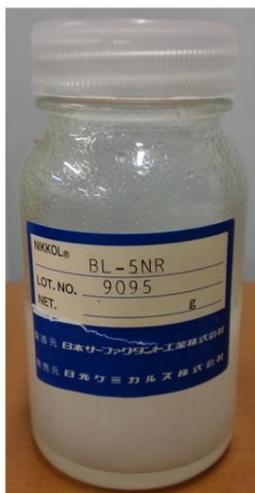


BL-4SY
0.05 M in H₂O

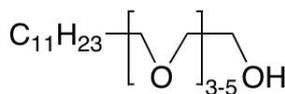
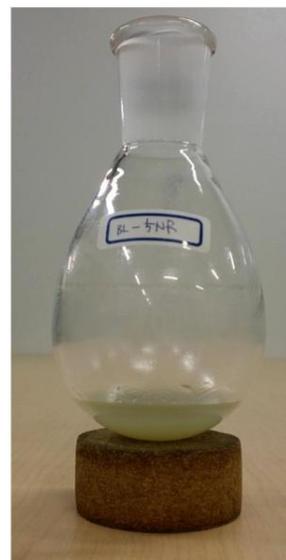
TON = 2.5K



100% conv. (160 g)

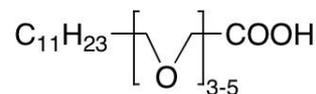


System Pressure: 60 bar
Flow Rate: 0.8 mL/min
Contact Time: 55 sec



BL-5NR
0.025 M
in H₂O/acetone (3:1)

TON = 2K



100% conv. (120 g)

図 2-1 2 : 連続フロー反応装置によるドデシルオリゴ(オキシエチレン)カルボン酸の合成

Ⅲ. 2. 1. ③エステル、アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究（分子研、再委託：名古屋大）

（1）最終目標達成状況

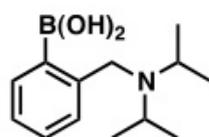
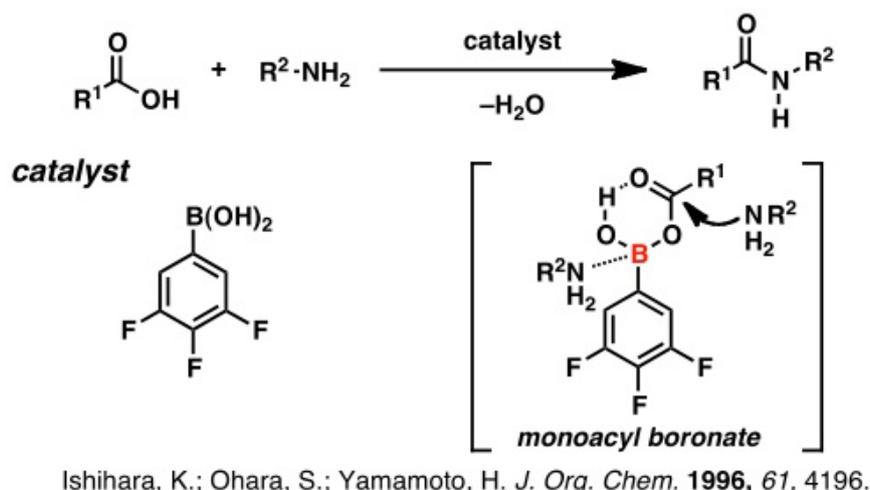
最終目標	達成状況	達成度
<p>平成 23 年度はキログラムスケールでの製造を想定し 10g 以上スケールでの試験的なカルボン酸無水物、エステル、アミド類を製造し、また同プロセスによって実際に製造した製品評価を実施するとともに、工業化生産開発にフィードバックし最適化を図る。</p> <p>平成 23 年度研究開発目標：生産スケール 100g 以上、反応率 80%以上、選択率 90%以上、反応温度 170℃以下、反応時間 24 時間以内、触媒量 5mol%以下または触媒の回収 98%以上</p>	<p>目的とするジカルボン酸及びテトラカルボン酸からカルボン酸無水物への分子内脱水縮合反応は 1 mol%の触媒条件にて達成している。収率は 95%以上。スケールアップ実験では 100 グラムスケール合成を達成した。開発した触媒の工業製品化に向けて検討中で、技術移転を進めている。</p> <p>他にも、ランタン触媒を用いるエステル交換反応，酸化触媒を用いる α-アシルオキシカルボニル化合物の合成，酸化触媒を用いるケトンの Baeyer-Villiger酸化反応によるエステル及びラクトン合成に関しても 1 mol%の触媒量でグラムスケール合成に成功し，95%以上の収率を達成している。これらの技術についても化学系企業への技術移転に向けた共同研究を継続中である。</p>	<p>◎</p>

（2）成果の詳細

(a) 研究背景

エステル化合物およびアミド化合物はカルボン酸とアルコール、アミンとの脱水縮合によって形成されるエステル結合、アミド結合を鍵官能基として有する大きな化合物群である。エステル結合、アミド結合は有機分子のもっとも根幹的な官能基とすることができる。本研究項目ではこれら結合形成反応を触媒する新しいグリーン・サステイナブル化学手法の確立を目指している。本研究はこれら結合形成触媒の開発において、世界を先導する成果を上げている名古屋大学（大学院工学研究科・石原一彰教授）に再委託することで推進した。

アミド縮合は有機合成において最も基本的な反応の一つである。近年、カルボン酸とアミンとの脱水縮合反応に有効なアリアルボロン酸触媒がいくつか報告されている。例えば、1996 年に山本、石原らにより開発された電子求引性基をもつ 3,4,5-トリフルオロフェニルボロン酸は様々なカルボン酸のアミド縮合に対して高活性を示す。また、2006 年に Whiting らにより開発されたジイソプロピルアミノメチル基をもつアリアルボロン酸触媒は安息香酸類のアミド縮合に対して高い活性を示す。しかし、本触媒のジイソプロピルアミノメチル基の役割は明らかになっていない。



Arnold, K.; Davies, B.; Giles, R. L.;
Grosjean, C.; Smith, G. E.; Whiting, A.
Adv. Synth. Catal. **2006**, *348*, 813.

図 3-0 1 : ホウ酸触媒アミド結合形成反応の背景

またグリーンケミストリーや原子効率の観点から、化学量論量の活性化剤や縮合剤を用いない、安価で毒性の低い高活性触媒を用いるエステル合成法の開発が求められている。特に、エステル交換反応は金属塩触媒によって温和な条件で促進されるため、工業的にも利用可能である。金属塩触媒の金属としては、主にスズ、アンチモン、チタン等が用いられるが、毒性や生成物の着色という問題がある。一方我々は、ランタンイソプロポキシドとジエチレングリコールモノメチルエーテルから系中で調製する高活性ランタン触媒を開発した。

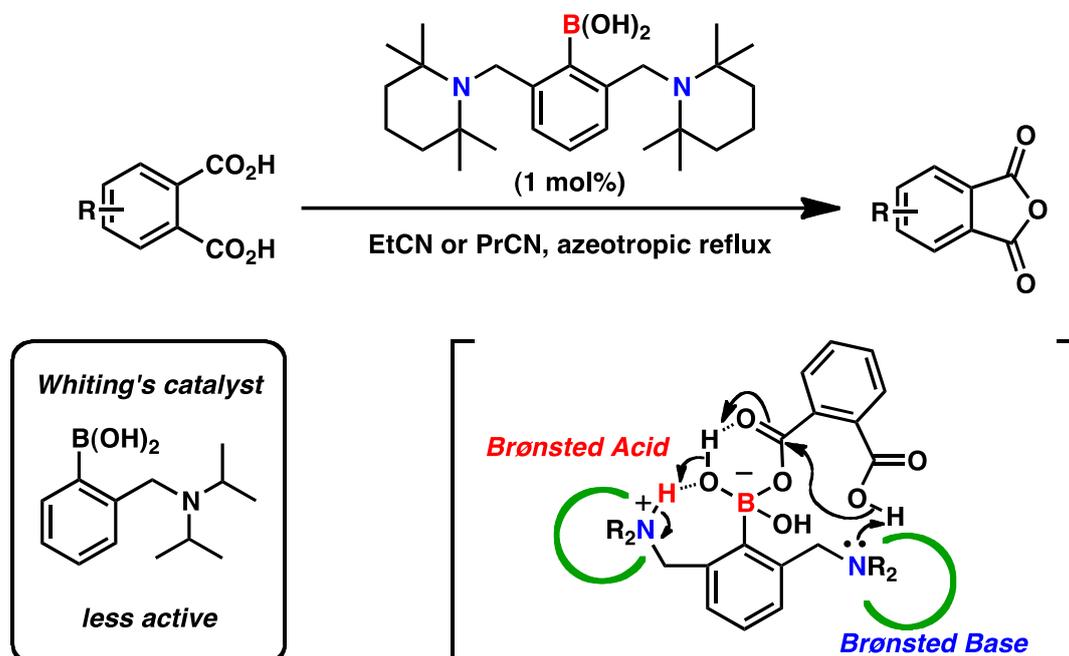
以下、アミド結合形成触媒、エステル結合形成触媒の開発研究について報告する。

(b) 研究計画

・アミド結合形成：我々はこれまでにジカルボン酸の分子内脱水縮合反応に有効な Brønsted 塩基複合型ボロン酸触媒の開発に成功している（1 グラムスケール）。2 つの嵩高いアミノ基がそれぞれ Brønsted 塩基及び Brønsted 酸として協同的に働くことにより、ジカルボン酸の分子内脱水縮合反応を効率良く促進し、カルボン酸無水物を定量的に与える。これに対して Whiting 触媒は本反応に対して極めて活性が低い。本研究項目ではジカルボン酸又はテトラカルボン酸の触媒的分子内脱水縮合反応に有効なジアミノボロン酸触媒の触媒作用機構を明らかにすると共に、カルボン酸無水物及びその誘導体のクリーンな製造プロセスへの実用化を視野に入れた 100 g グラムスケールまでのスケールアップを検討し、問題なく反応が進行することを確認した。また、このボロン酸触媒を用いてワンポットでテトラカルボン酸とアニリンから、カルボン酸無水物中間体を經由して、ジイミドへ変換できることを示した。さらに、反応後は生成する固体のジイミドを濾過によって分離し、触媒を含む濾液を用いて繰り返し脱水縮合反応を行うことができるこ

とを示した。

このような背景のもと、この嵩高い Brønsted 塩基複合型ボロン酸触媒がカルボン酸とアミンとのアミド脱水縮合にも有効ではないかと考え、検討を行った。



Sakakura, A.; Ohkubo, T.; Yamashita, R.; Akakura, M.; Ishihara, K. *Org. Lett.* **2011**, *13*, 892.
Sakakura, A.; Yamashita, R.; Ohkubo, T.; Akakura, M.; Ishihara, K. *Aust. J. Chem.* **2011**, *64*, 1458.

図 3-0 2 : 名古屋大学におけるこれまでの報告

・エステル結合形成 (1) : これまでに開発した触媒は酸・塩基複合触媒として機能し、その結果、カルボン酸エステル、炭酸ジメチル、カルバミン酸メチルと第1~3級アルコールとのエステル交換反応を効率的に進行させることに成功した。しかし、ランタンイソプロポキシドは比較的高価で大量に入手しづらいうえ、湿気に不安定で、取り扱いが難しい問題がある。

このようなランタンイソプロポキシドの問題は、他の有機合成反応においても共通の課題である。柴崎ら[文献 Mashiko, T.; Kumagai, N.; Shibasaki, M. *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 14990]は、不斉アミノ化反応において、硝酸ランタン触媒をランタンイソプロポキシドの代替としている。硝酸ランタンは、ランタンイソプロポキシドと比べ 100 倍以上安価で、高純度のものが大量に入手でき、水にも化学的に安定で取り扱いやすい触媒である。しかし、ランタンイソプロポキシドは塩基性が強いのにに対して硝酸ランタンはルイス酸性が強く、性質が全く異なるため、単純に触媒を代えるだけでは目的の反応に適用できない。そこで我々は、硝酸ランタンに適切な添加剤を加えることで、ランタンイソプロポキシドに代わる高活性硝酸ランタン触媒の創製を目指した。

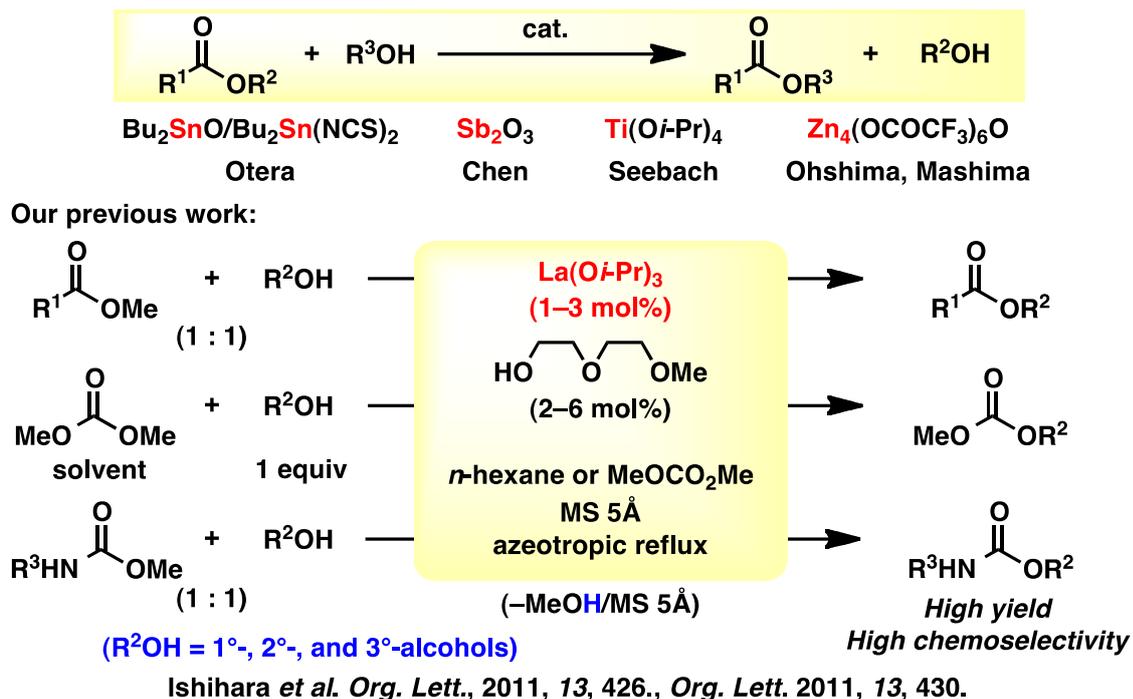
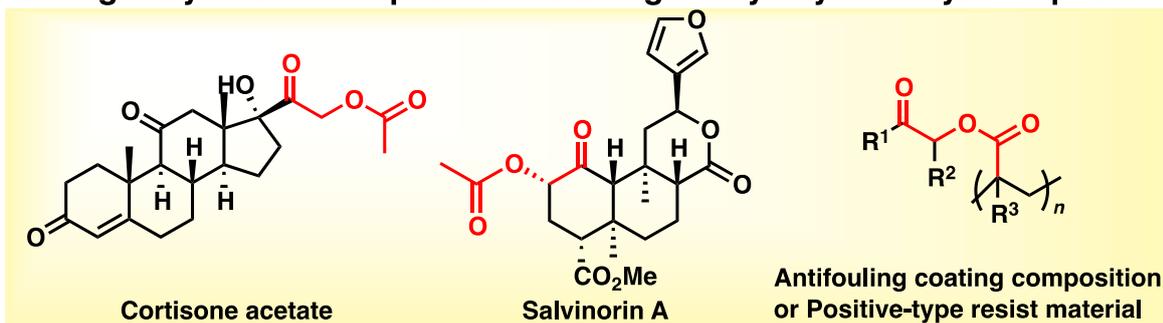


図 3-03 : ランタン触媒エステル結合形成反応の背景

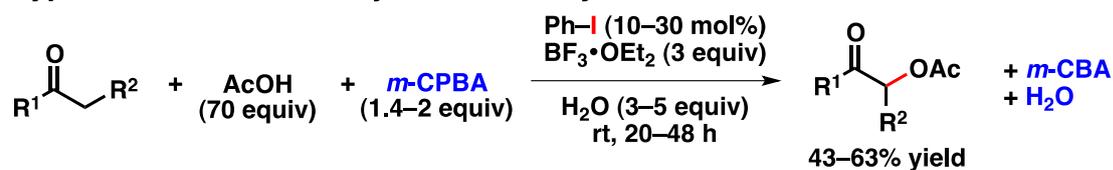
・エステル結合形成 (2) : ケトンとカルボン酸の酸化カップリング反応により α-オキシシアシルケトン合成する方法が知られている。古くは毒性の強い重金属酢酸塩を反応剤にオキシアセチル化する方法が使われていたが、最近、重金属の代わりにハロゲンを用いる方法が開発されるようになってきた。しかし、カルボン酸は酢酸に限られ、過剰の添加剤を用いる必要がある等、実用化するには様々な問題を抱えている。

Biologically Active Compounds Including α -Acyloxycarbonyl Compounds



Previous Methods for α -Oxyacetylation of Carbonyl Compounds

Hypervalent Iodine-Catalyzed α -Acetoxylation: Ochiai, et al. *JACS* 2005, 127, 12244.



Bromine-Catalyzed α -Acetoxylation: Hayashi et al. *Chem. Lett.* 2010, 39, 929.

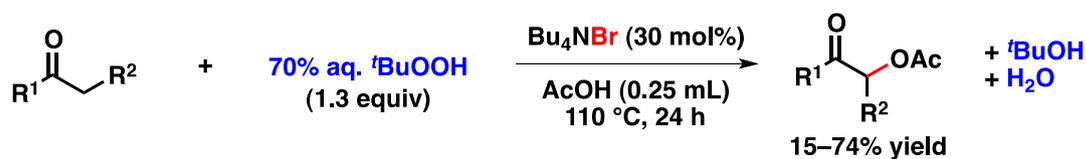
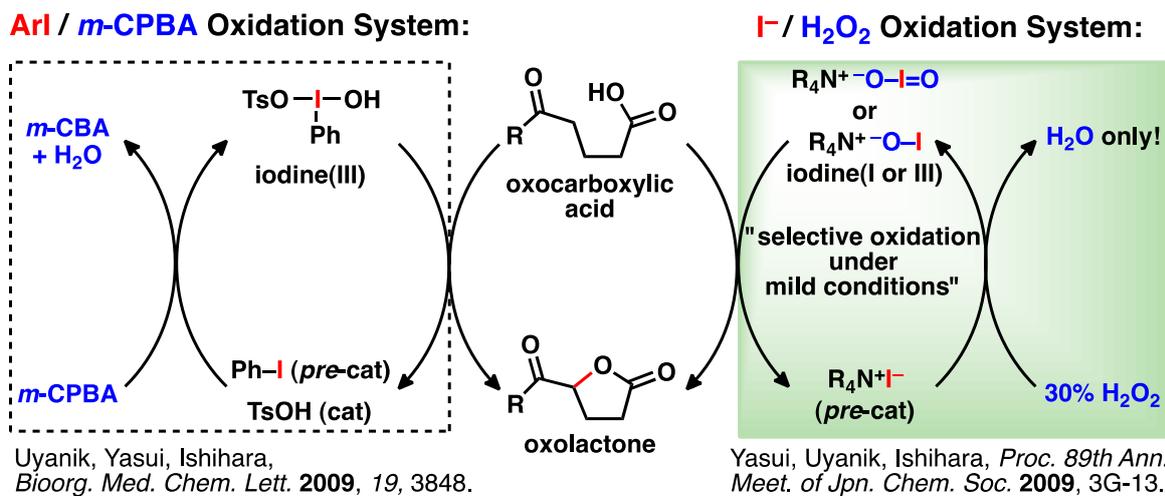


図 3-0 4 : オキシアシル化反応の背景

一方、石原グループは触媒量のテトラブチルアンモニウムヨードと化学量論量の過酸化水素を用いるとオキシラクトン化反応が進行することを見出した。この反応は言わば分子内オキシアシル化反応である。そこで、同様な条件下で分子間オキシアシル化反応も進行するのではないかと考え研究を遂行した。

Oxylactonization of Oxocarboxylic Acid



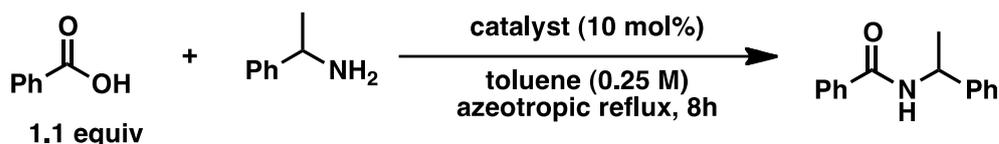
α -Oxyacylation of Carbonyl Compounds (Intermolecular Oxidative Coupling)



図 3-05 : ヨウ素触媒を用いるオキシラクトン化反応

(c) 研究開発結果

・アミド結合形成：まず、嵩高いアミノ基をもつアリアルボロン酸触媒を用いて安息香酸のアミド化反応を行った。その結果、中程度の収率で目的とするアミド化合物を得ることが出来た。しかし、嵩高いアミノ基を持つアリアルボロン酸触媒は既存の触媒よりも高い活性を示さなかった。ここで、カルボン酸とボロン酸触媒から生成するモノアシルボロネート中間体は一般に不安定であることに注目した。単純なカルボン酸の代わりに α -ヒドロキシカルボン酸を基質として用いれば、比較的安定な5員環ホウ素エステル中間体が活性種として生成すると考えられる。この中間体であれば、触媒分子内の嵩高いアミノ基は有効に働くのではないかと考えた。



catalyst, yield of amide

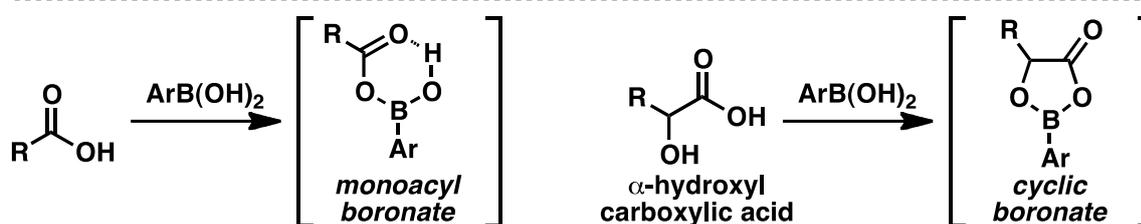
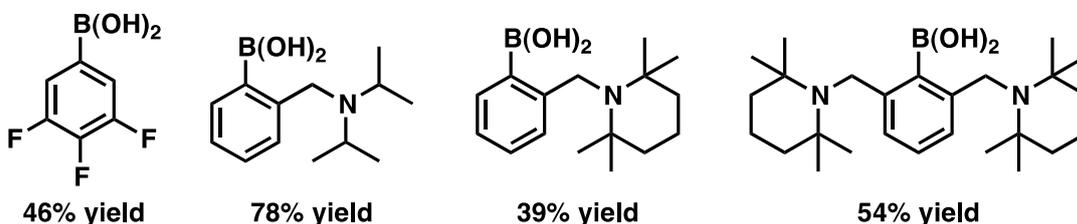
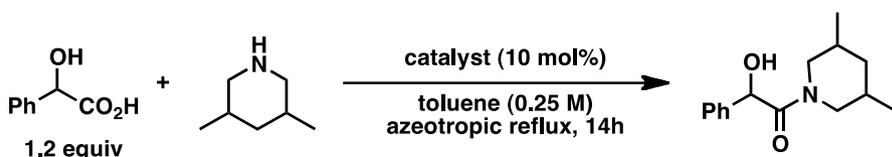


図 3-0 6 : 嵩高いアミノ基をもつアリールボロン酸触媒

そこで、次に α -ヒドロキシカルボン酸のアミド化反応の検討を行った。ここに、マンデル酸と3,5-ジメチルピペリジンとのアミド縮合における様々なアリールボロン酸触媒の活性を図 3-0 7 に示す。検討の結果、ここに示すオルソ位にテトラメチルピペリジニル基を1つもつアリールボロン酸触媒が良好な活性を示すことを見出した。一方、アミド化や β -カルボン酸の分子内脱水縮合反応に有効なこれらの触媒は、ほとんど触媒活性を示さなかった。このように、本ボロン酸触媒は、マンデル酸のアミド縮合に対して特異的に優れた活性を示すが、反応条件下で不安定で、反応の進行と共に分解が一部起こるためにアミドの収率が中程度に留まってしまうことが分かった。一方、カルボン酸無水物合成においては触媒が分解しなかったことから、基質のアミンが触媒のホウ素部位に求核攻撃し分解を引き起こしたものと考えられる。



catalyst, yield of amide

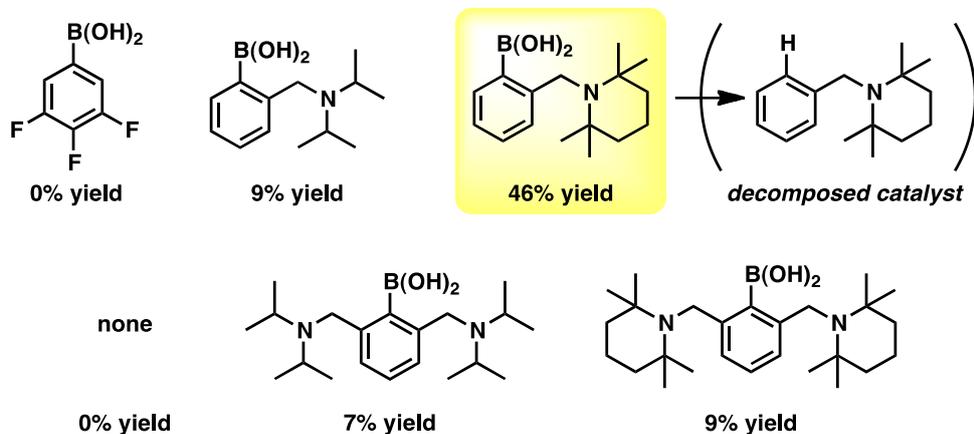
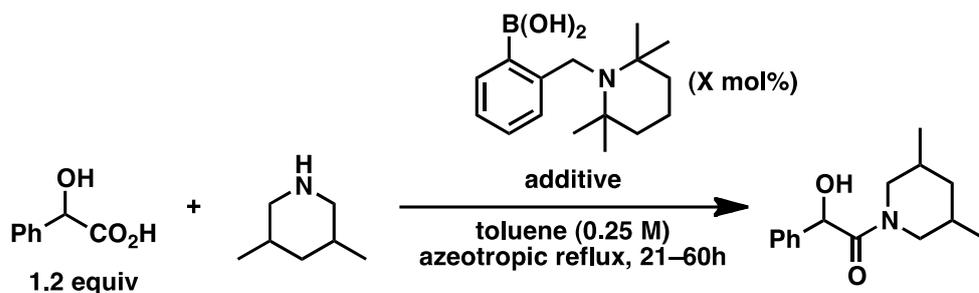


図 3-07 : 嵩高いアミノ基をもつアリールボロン酸触媒

そこで、Brønsted酸を系中に添加して基質のアミンの塩基性を抑えることにより、触媒の分解を抑えることが出来ると考え、検討を行った。その結果、安息香酸を添加することにより触媒の分解が抑えられ、目的とするアミドを高収率で得ることができた。また、安息香酸の添加量を10 mol%に減らしても優れた反応性を示すことを見出した。更に、安息香酸の添加量を50 mol%にすることで、触媒量を1 mol%まで減らすことに成功した。



catalyst (X mol%)	additive	yield (%)	isolated yield of broken catalyst (%)
10	none	46	39
10	PhCO ₂ H (100 mol%)	>99	0
10	PhCO ₂ H (10 mol%)	85	trace
1	PhCO ₂ H (50 mol%)	96	trace

図 3-08 : Brønsted酸の添加効果

ここで、これまでに得られた実験結果を基に、本アリールボロン酸触媒がヒドロキシカルボン酸のアミド化に対して有効な理由を説明するために反応機構について考察する。まず、ボロン酸とヒドロキシカルボン酸は速やかに5員環ホウ素エステル中間体を形成する。このとき、ホウ素原子に水が配位しており、ジイソプロアミノ基の場合には塩基性が弱くこの状態で安定化し止まってしまう。これに対して、嵩高いアミノ基の場合には塩基性が強いいため、ホウ素原子に配位した水分子のプロトンを引き抜く。続いて、触媒の周りに多く存在するカルボン酸からプロトンを奪いながら水分子がカルボン酸と置換する。このようにして、生成した活性種はホウ素原子のLewis酸性が強いため、効率的にアミド化が促進されたと考えられる。

以上より、我々は α -ヒドロキシカルボン酸のアミド縮合反応に対して、2位に嵩高い(ジアルキルアミノ)メチル基をもつアリールボロン酸触媒が最も高い活性を示すことを見出した。本反応は、嵩高く反応性の低い2級アミンとのアミドも高収率で合成できるのが特長である。

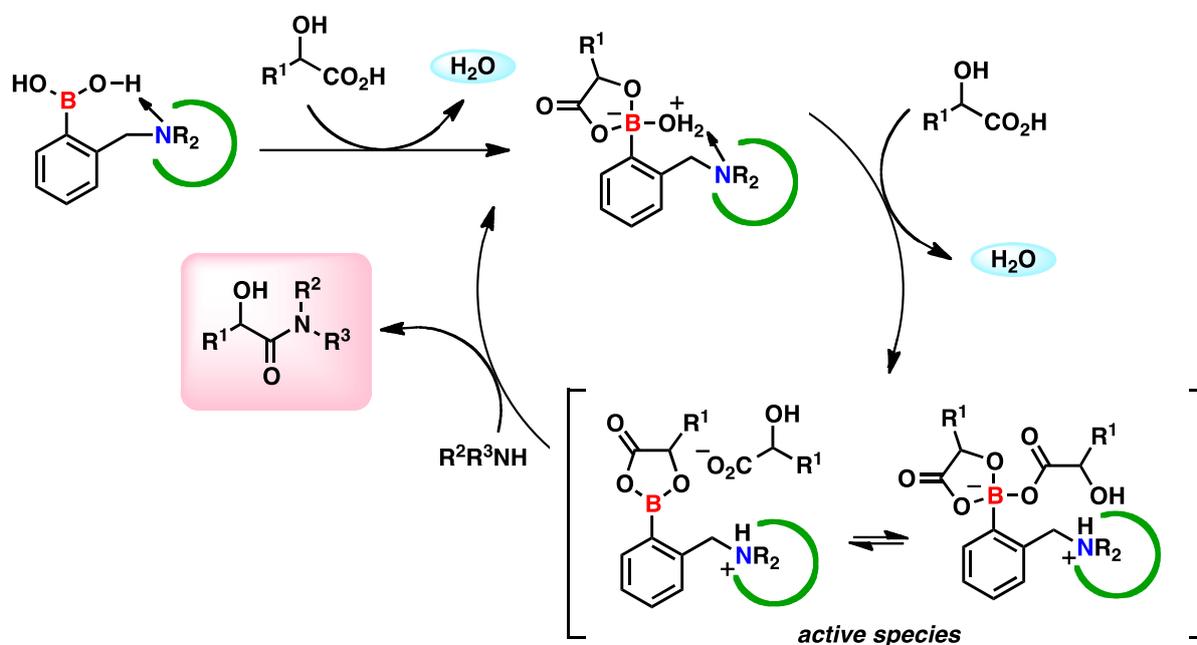


図 3-09 : 反応の概要

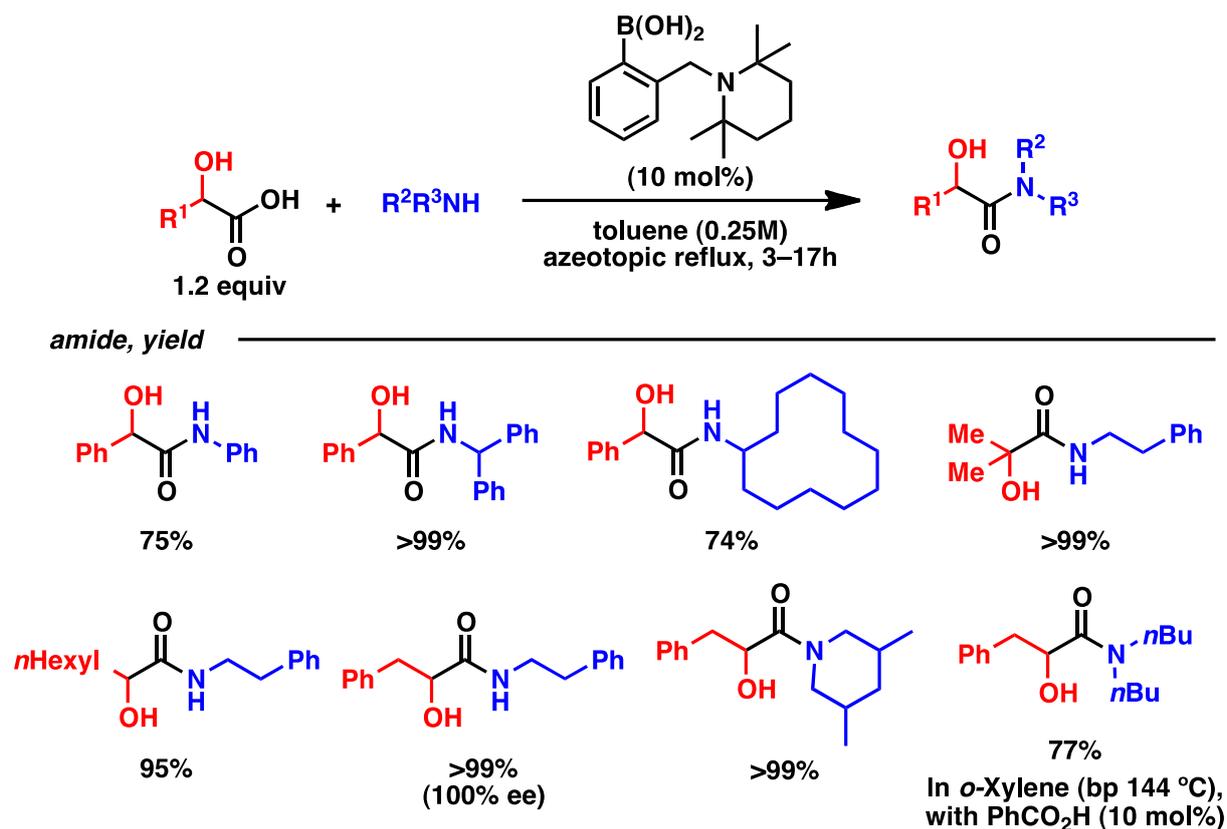


図 3-10 : 基質適用範囲の拡充

・エステル結合形成 (1) : まず、溶解性の悪い硝酸ランタンを用いるにあたり、極性の高い炭酸ジメチルを溶媒として用いるエステル交換反応で、添加剤の検討を行うことにした。反応は炭酸ジメチル溶媒中、硝酸ランタン(3 mol%)に種々の添加剤(6 mol%)とアルコールを加えて、MS 5Å存在下で脱メタノールしながら加熱還流した。添加剤なしの場合は38%収率だった。触媒の溶解性を改善するため様々な添加剤を検討した結果、トリオクチルホスフィンを加えると生成物が定量的に得られることがわかった。また、湿気に不安定なランタンイソプロポキシド触媒では困難であったグラムスケールの反応においても、95%収率で生成物が得られた。さらに、触媒を回収再利用することで2回目以降も定量的に生成物が得られた。

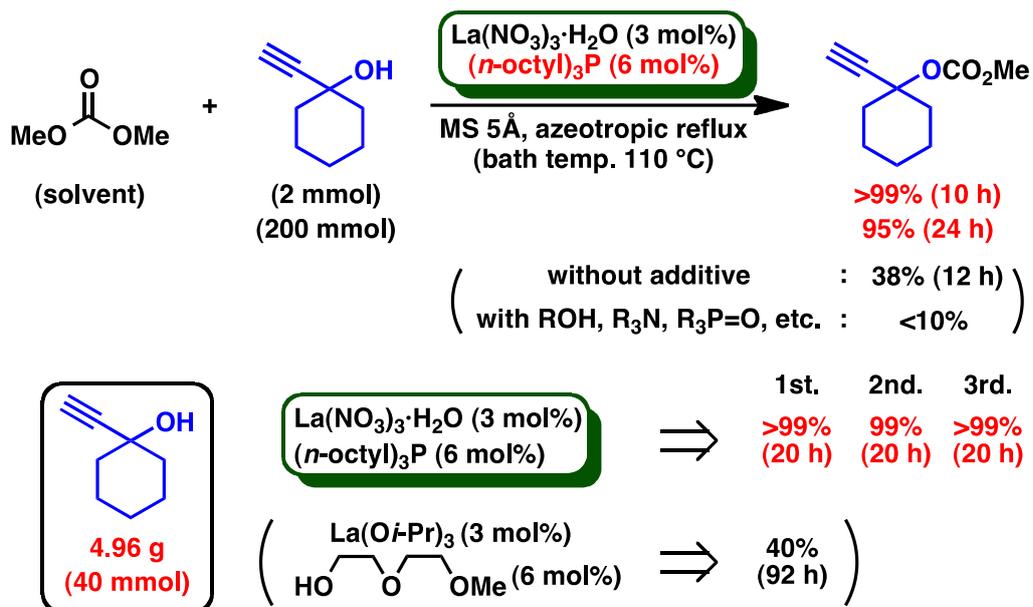
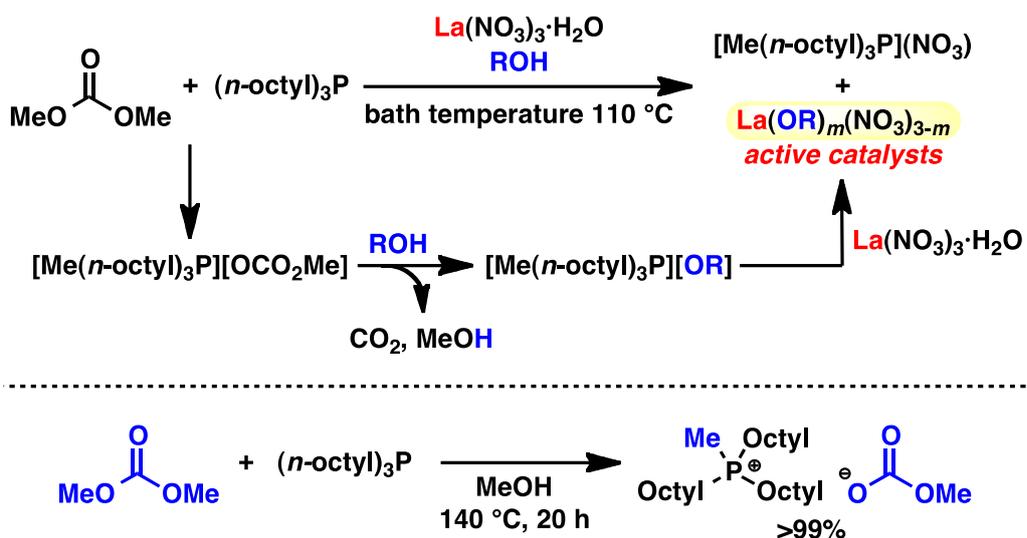


図 3-1 1 : ランタン触媒エステル結合形成

ここで、ホスフィンの効果について考えた。炭酸メチルトリオクチルメチルホスホニウムは炭酸ジメチルとホスフィンを経メタノール溶液中140℃で加熱することで合成できることが報告されている。このことから、本エステル交換反応条件においても、このホスホニウム塩が系中で生じていると推定される。系中で生じたホスホニウム塩はアルコールと反応し不可逆的にホスホニウムアルコキシドとなり、さらに硝酸ランタンと対イオン交換をすることで高活性ランタンアルコキシド触媒を形成していると考えられる。



Perosa, A. et al. *Chem. Eur. J.* 2009, 15, 12273.

図 3-1 2 : ランタン触媒エステル結合形成-ホスフィンの効果

そこで、別途調製したホスホニウム塩と硝酸ランタンによるエステル交換反応を行った。その結果、予想通り反応は円滑に進行し、対応する炭酸エステルを高収率で得た。一方、

同様に別途調製したアンモニウム塩を用いた場合には反応性は低かった。

これらの結果より触媒活性種の考察をする。反応系中では、高活性ランタンアルコキシドが形成する際に硝酸オニウム塩が副生する。この副生する塩がランタンアルコキシド触媒と錯体化することで、ルイス酸性のないアート型錯体となり、触媒活性は低下すると考えられる。アンモニウム塩を用いた場合にはこの低活性種の生成により反応性が低い、ホスホニウム塩は5つの結合を持つホスホラン型の構造をとることができ、硝酸アニオンと強く配位しているため、低活性のアート型錯体になりにくく、高い触媒活性を示したと考えられる。

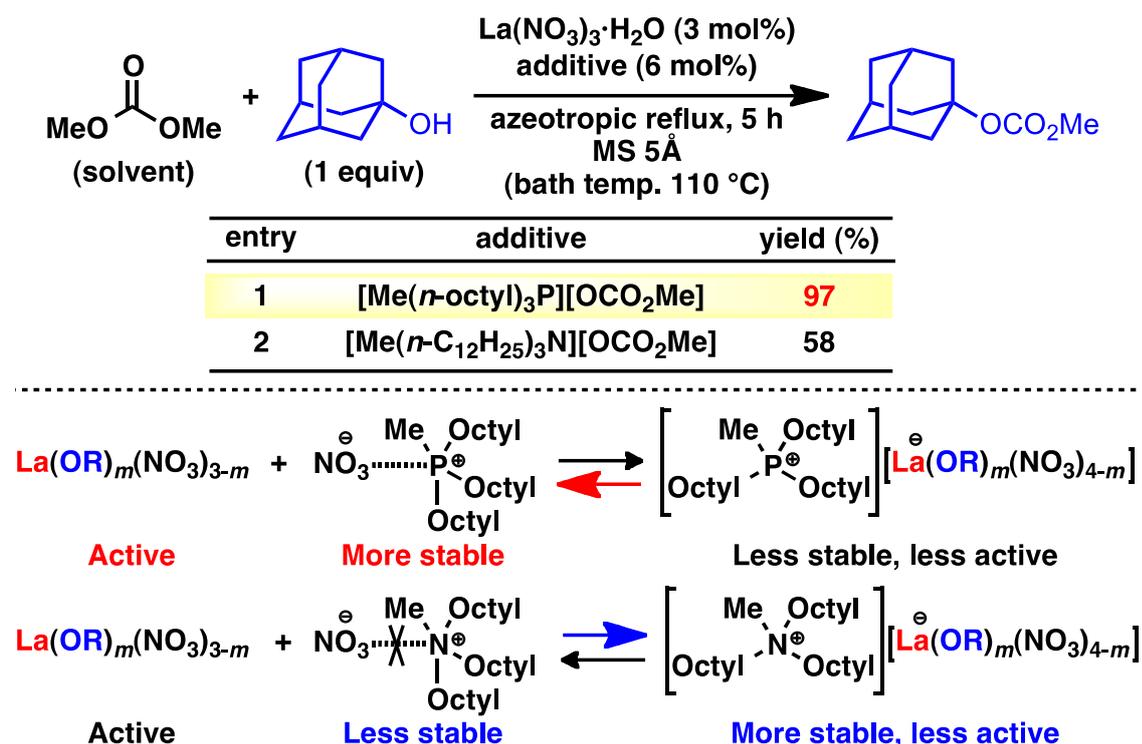


図 3-1 3 : 硝酸ランタン／ホスフィン触媒エステル結合形成

最適化された硝酸ランタンとホスホニウム塩を用いる触媒システムで炭酸ジメチルと種々のアルコールとのエステル交換反応を検討した。その結果、第1～3級アルコールにおいて反応は円滑に進行し、対応する炭酸エステルが高収率で得られた。また、より反応性の低い炭酸ジエチルを溶媒として用いるエステル交換反応にも適用可能であった。次に、ヘキサンを溶媒として用いるカルボン酸エステルとアルコールのエステル交換反応を検討した。その結果、いずれも反応は円滑に進行し、嵩高い鎖状第2級アルコールにおいても90%以上の収率で生成物が得られた。さらに、安価で簡便なアセチル源となる酢酸エチルを溶媒として用いるエステル交換反応では、第1～3級アルコールに適用できた。

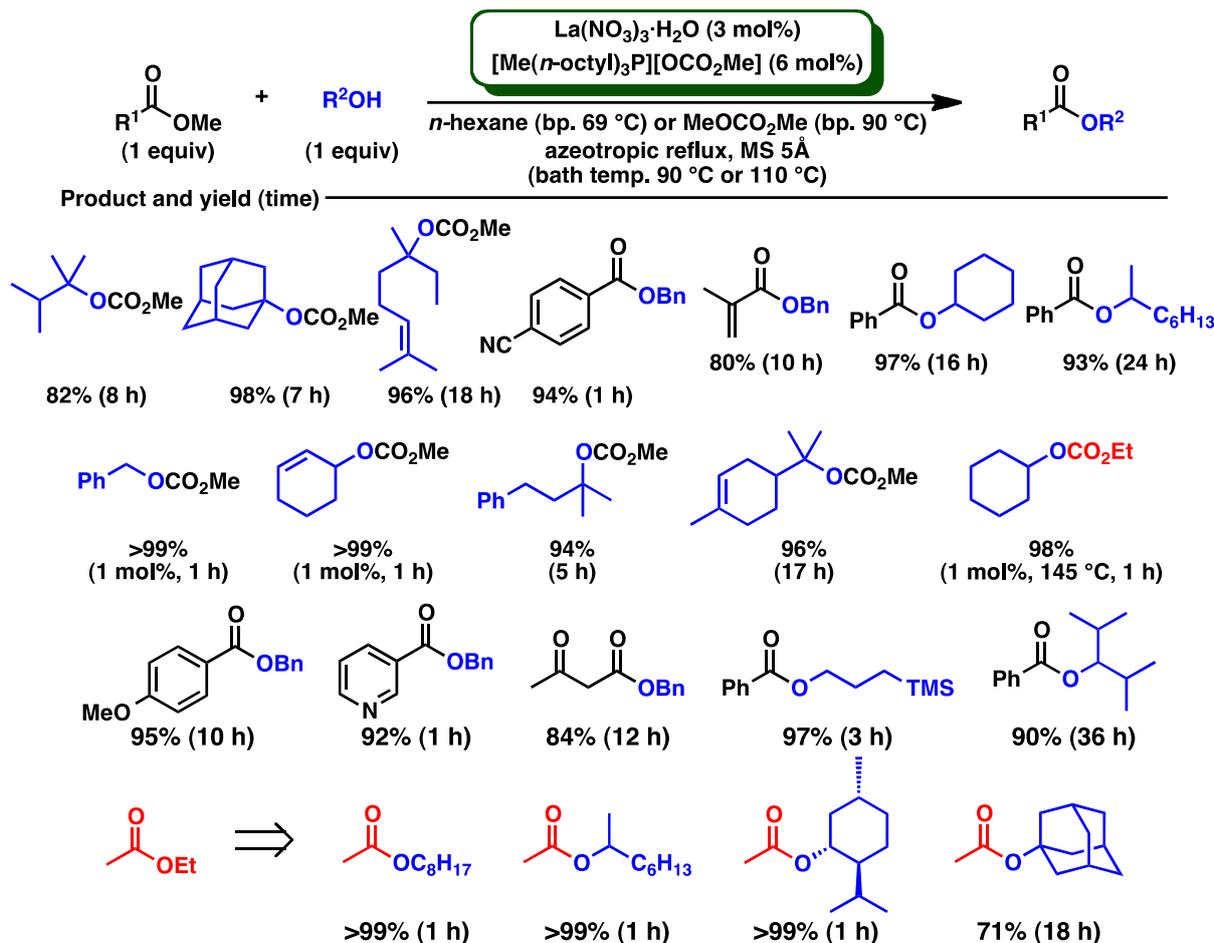
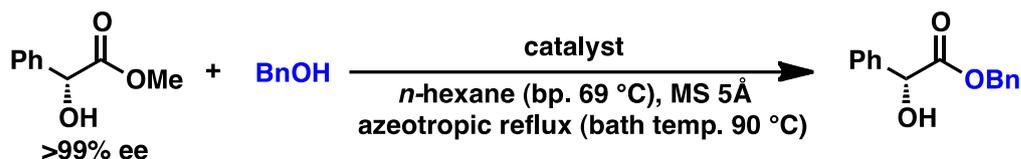


図 3-14 : ランタン触媒エステル結合形成の基質展開

最後に、高温・塩基条件で容易にエピ化する光学活性エステルを用いるエステル交換反応を検討した。以前に我々が開発したランタンイソプロポキシド触媒では、触媒の強い Brønsted 塩基性により、完全にラセミ化した。対照的に、今回の硝酸ランタン触媒では光学純度を全く損なうことなく対応する生成物（マンデル酸ベンジル）を 91% 収率で得ることに成功した。この結果から、硝酸ランタン触媒は塩基性が低く、中性に近い触媒であると考えられる。さらに、一般性を調べるため、種々の光学活性エステルを用いるエステル交換反応を検討した。その結果、反応条件を工夫することで光学純度を損なうことなく生成物が得られた。

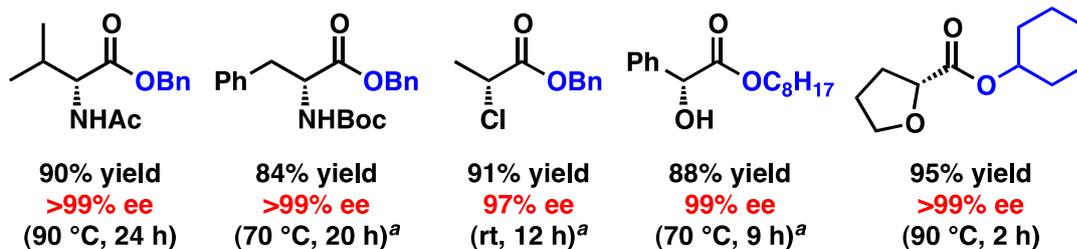
以上我々は、エステル交換反応に有効な高活性硝酸ランタン-ホスホニウム塩複合触媒の開発に成功した。今回の結果は、硝酸ランタン-ホスホニウム塩複合触媒がランタンアルコキシドの代替として機能することを示した。



$\text{La}(\text{NO}_3)_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (3 mol%) / $[\text{Me}(\textit{n}\text{-octyl})_3\text{P}][\text{OCO}_2\text{Me}]$ (6 mol%) : 91% (3 h), >99% ee

$\text{La}(\textit{O}\text{-Pr})_3$ (3 mol%) / $\text{H}(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_2\text{OME}$ (6 mol%) : 87% (3 h), 0% ee

Product, yield, and ee (time)



^a 3 mol% of phosphonium salt was used.

図 3-15 : 光学活性エステル

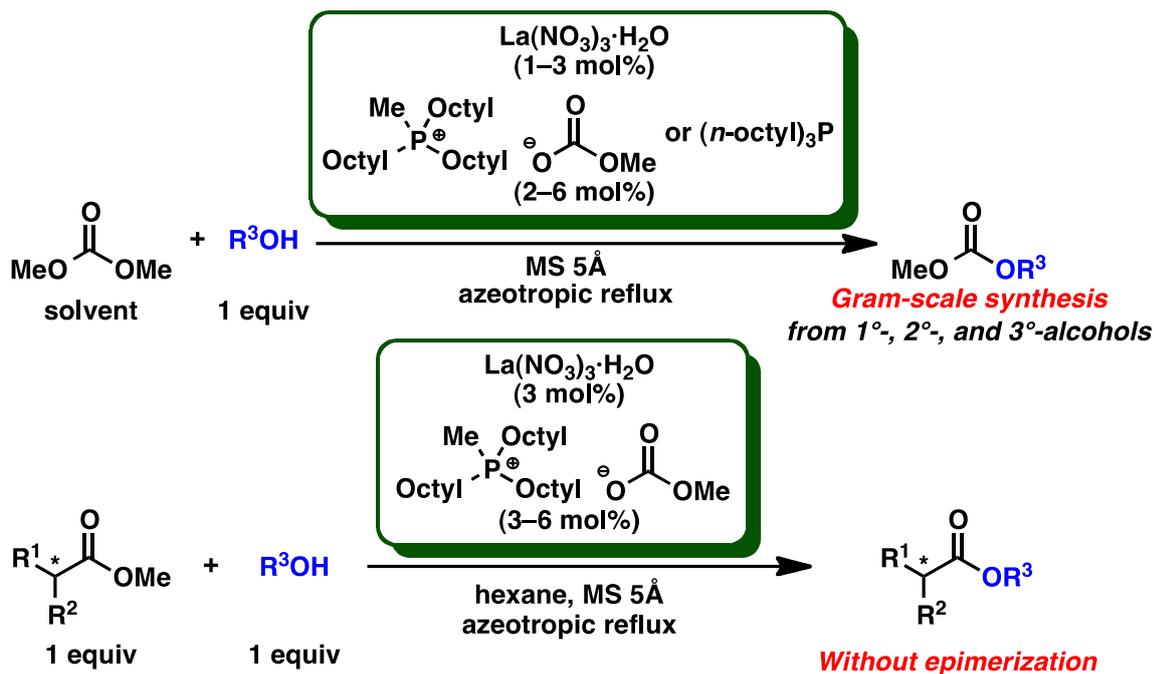


図 3-16 : まとめ

・エステル結合形成 (2) : カルボン酸に対し 1 当量のケトン混ぜ、触媒量のテトラブチルアンモニウムヨードと化学量論量の *t*-BuOOH を用いて 75 °C に加熱すると所望の α -オキシアシルケトンを取率よく合成できることがわかった。*t*-BuOOH の代わりに 30% 過酸化水素水を用いても反応は十分に進行しなかった。また、反応性をさらに向上させるためにはケトンに 2 当量加えることが有効であった。

Direct Oxidative Coupling of Ketones and Carboxylic Acids

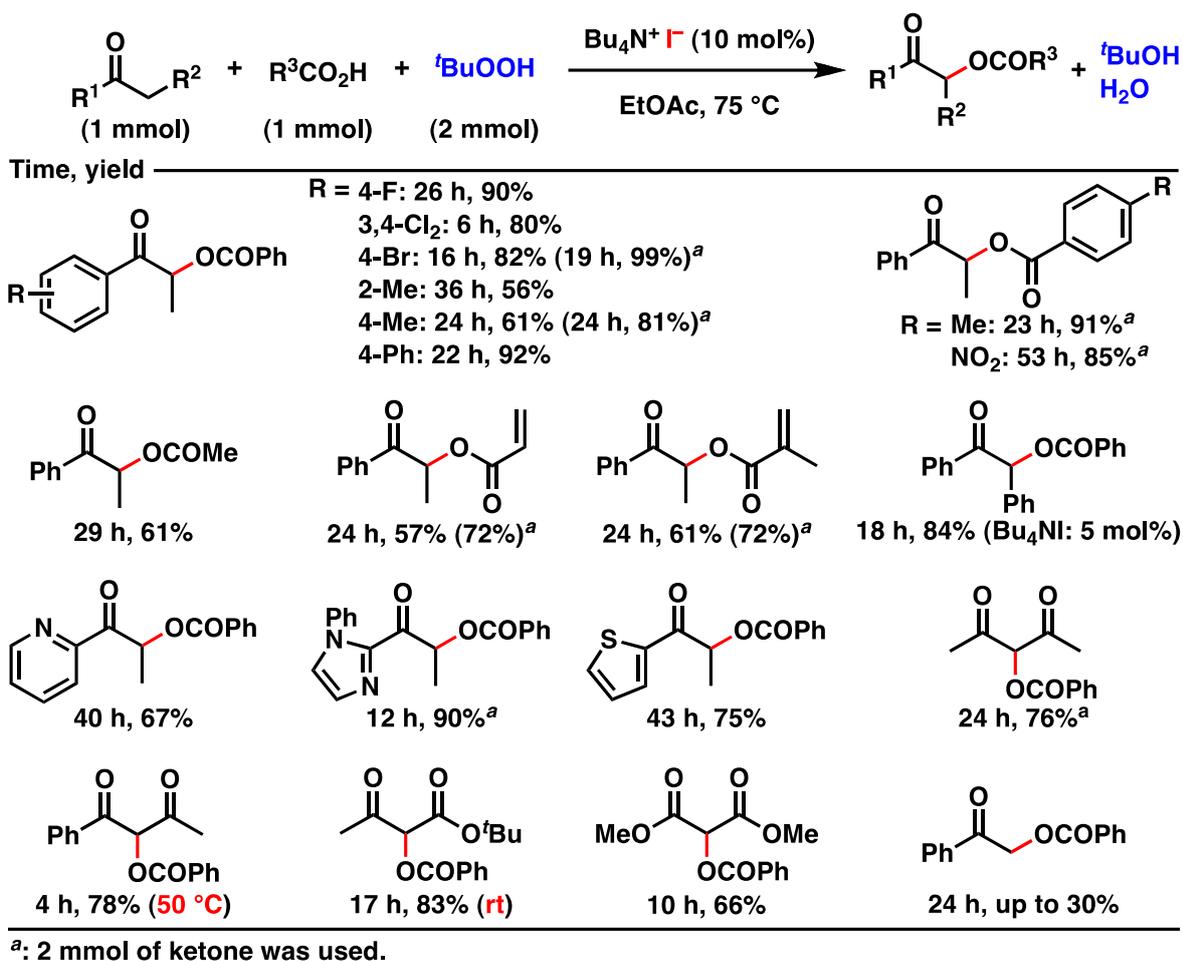


図 3-17 : ケトンのオキシアシル化反応

さらにケトンの代わりに反応性の低いアルデヒドを用いてオキシアシル化反応の検討を行った。その結果、助触媒としてピペリジンを添加すると反応性が向上することがわかった。ピペリジンはアルデヒドと反応し、活性なエナミン中間体を与えると考えられる。エナミン中間体はカルボン酸とオキシアシル化反応し、その後、アミンが脱離することで α -アシロキシアルデヒドが生成すると予想される。

Oxidative Coupling of Aldehydes and Carboxylic Acids

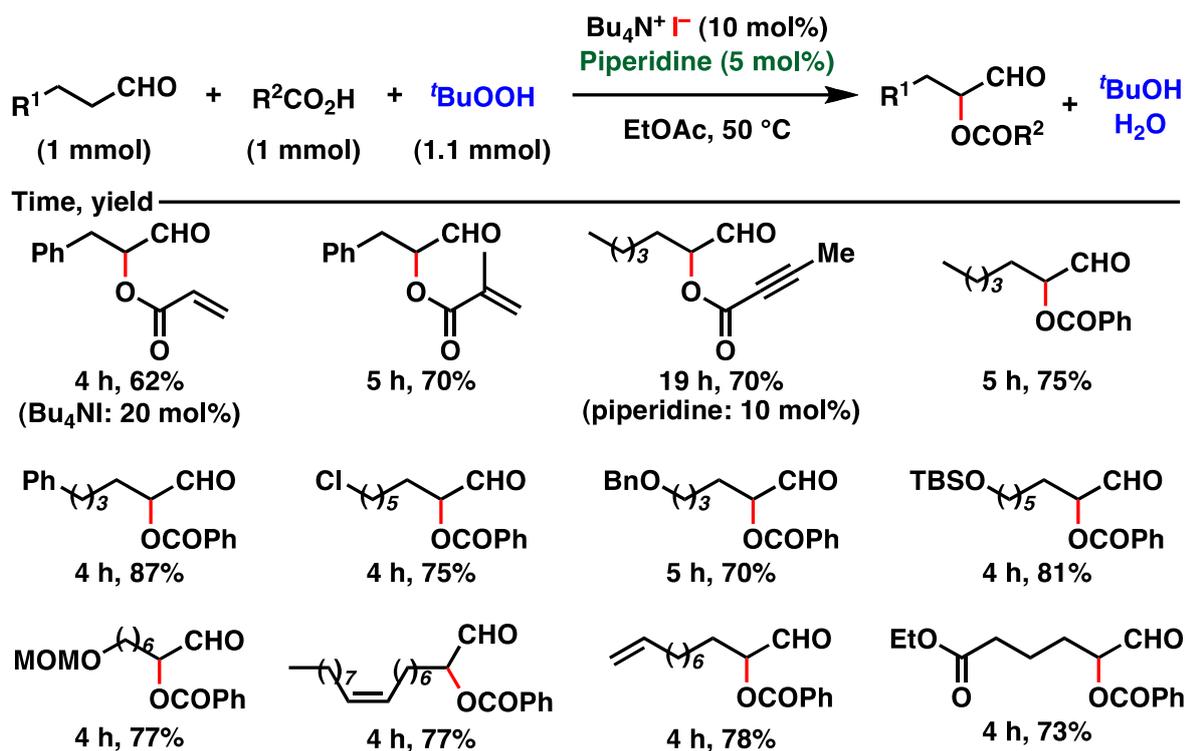
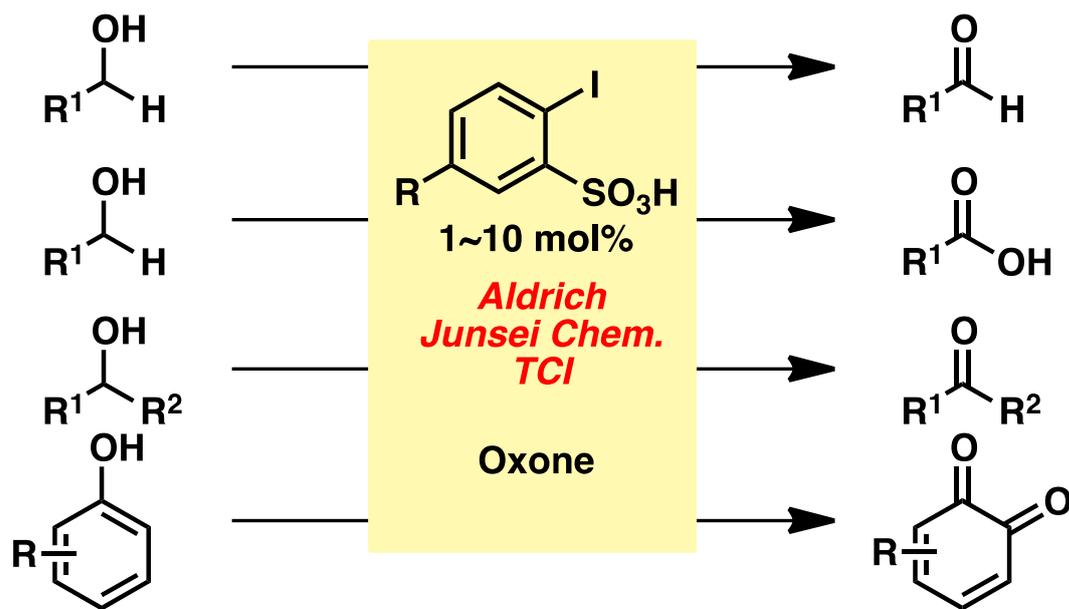
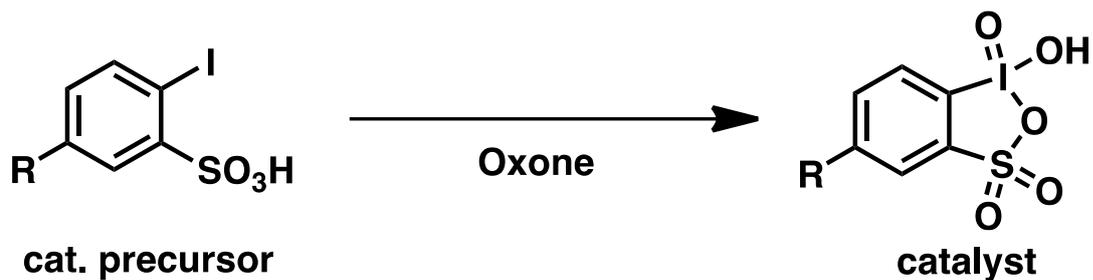


図 3-18 : アルデヒドのオキシアシル化反応

最後に、触媒量の 2-ヨードキシベンゼンスルホン酸 (IBS) と化学量論量のオキシソンをを用いるアルコールの酸化反応のスケールアップ検討についても付記しておく。本触媒反応については NEDO プロジェクト採択前に開発済みであったので、実用化に向けてスケールアップ検討を実施した。固体のオキシソンを共酸化剤として使用するが、反応溶媒に溶けない。ラボスケールでは、予めオキシソンを乳鉢ですり潰して粉状にし、活性表面積を広げることで反応性を上げていた。しかし、スケールアップした場合、オキシソンをどのようにすり潰すかが問題となった。様々な検討をした結果、羽根状の攪拌器で激しく攪拌することでオキシソンと反応溶液間の接触効率を上げることで市販のオキシソンをそのまま使用することが可能であることがわかった。こうして、最終的に >100 グラムスケールでの酸化反応に成功した。



Uyanik, M.; Ishihara, K. *Aldrichim. Acta* **2010**, *43*, 83–91.

Uyanik, M.; Mutsuga, T.; Ishihara, K. *Molecules* **2012**, *17*, 8604–8616.

図 3-19 : まとめ

Ⅲ.2.2 革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発

Ⅲ.2.2 ①アクア触媒によるアセトアルデヒド製造プラント排水中の希薄酢酸回収技術 (昭和電工、東京大学)

(1) 実施計画書の最終目標達成状況

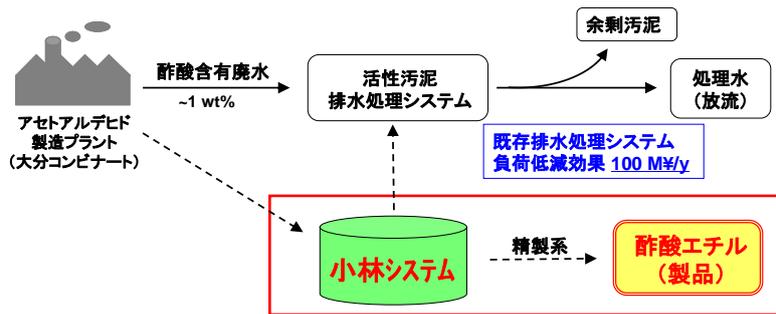
最終目標	達成状況	達成度
(1) 水層溶け込み量 0.1%以下の高活性触媒の開発	(1) 触媒構造の改良により高活性かつ溶け込み量 0.1%以下の触媒の開発を達成	○
(2) 水中エステル化反応の収率 90%以上	(2) 触媒およびプロセスの改良により、平衡収率 90%以上を達成	○
(3) プロセスのコスト試算を実施し、実用性を評価	(3) プロセスの経済性評価を実施し、実用化に向けた課題を確認	○

(2) 成果の詳細

1. テーマ背景

化学品製造プラントから排出される産業廃水中には、製品、原料、副生物等の様々な有機化合物が含まれている。これらの中には、有価物として利用可能な成分も多いが、低濃度であるがゆえに回収コストが高く、一般的には微生物を用いた活性汚泥法で分解処理されている。活性汚泥法による排水処理の問題点として、余剰汚泥の発生が挙げられる。活性汚泥法では、微生物が廃水中の有機物を分解しながら増殖することで、水を浄化しているが、この際に増殖した微生物は余剰汚泥として抜き取られ、最終的に産業廃棄物として焼却処分されている。これら一連の排水処理に伴うエネルギー消費および二酸化炭素の排出は、環境への大きな負荷となっており、余剰汚泥の削減は長年の懸案事項である。

本研究の目的は、アセトアルデヒド製造プラント廃水中に含まれる希薄な酢酸の回収方法を開発することである。その回収方法としてアクア触媒（水中で機能する触媒）を用いた化学反応により、酢酸を酢酸エチルに変換した上で回収する方法を想定した。本酢酸回収プロセス（小林システム）の開発により、有価物の回収再使用、余剰汚泥の削減および二酸化炭素排出削減が可能となり、既存排水処理システムの負荷低減効果として1億円のコストメリットが得られると試算した。酢酸の目標回収率は、適用を想定している工場内の排水バランスを考慮して便宜上50%と設定し、小林システムと既存の活性汚泥処理との併用系で排水処理システム全体の最適化を目指す。



ALD製造プラント排水から酢酸を50%回収
小林システム／従来システム併用でコンビナート排水バランス維持

図1 酢酸回収プロセス(小林システム)の位置付け

具体的な酢酸回収方法としては、アクア触媒を用いた水中でのエステル化反応技術をベースとして、①エステル化/エステル交換法、②酢酸濃縮/水中エステル化法の二つのプロセスについて検討した。図2にプロジェクトの開発推移を示す。当初の提案プロセスである①エステル化/エステル交換法の開発においては、エステル化工程の触媒開発に進展があり、当初の目標をほぼ達成したものの、エステル交換工程において過剰量のエタノールを用いたことが生産コスト上の問題となった。エステル交換工程において十分な反応速度を得るためにはエタノールを過剰量用いる必要があったが、反応後に得られたエタノール溶液中から低濃度の酢酸エチルを分離するためには、複雑な精製工程が必要であり、コスト試算の結果、大幅なマイナスになることが分かった。そこで、プロジェクト後半からは新たな酢酸回収プロセスとして、②酢酸濃縮/水中エステル化法の開発に注力した。酢酸濃縮/水中エステル化法では、酢酸と等量のエタノールを用いることで、エステル化/エステル交換法で問題となった精製コストを大幅に低減できる。

	2008	2009	2010	2011	2012
エステル化 $HOAc + ODN \rightarrow ODA + H_2O$		ALPS触媒 アミン塩触媒	収率&溶出抑制両立		
エステル交換反応 $ODA + EtOH \rightarrow EtOAc + ODN$		エステル交換反応検討	過剰EtOHが必要		
プロセス検討	バッチ	フロー	プロセス試算	精製工程コスト高	
希薄酢酸濃縮 $1wt\% \rightarrow 50wt\% : HOAc(aq.)$			アミン/ROH系	基本系確立	
水中エステル化 $HOAc + EtOH \rightarrow EtOAc + H_2O$			触媒開発	平衡収率&速度向上	
プロセス検討			プロセス試算		

図2 プロジェクトの開発推移

プロジェクトの最終目標は、酢酸濃縮/水中エステル化法における目標として図3のよう

に設定した。第一の目標である触媒の水層への溶出を抑制は、本プロジェクト全体を通じた重要な課題である。触媒が水層へ溶出すると、触媒コストが大きくなるだけでなく、溶出した触媒を現行排水処理システムで処理することになるため、酢酸回収による負荷低減効果を打ち消してしまう。経済性あるプロセス構築を可能にするためには、触媒の溶出量を 0.1%以下に抑えることが必要である。第二の目標である水中エステル化反応の収率においては、未反応エタノールの残存量を減らして、酢酸エチルの精製コストを低減する必要があることから、酢酸と等量のエタノールを用いて収率 90%以上と設定した。最後に、開発した酢酸回収プロセスについて、プロセス試算を行った上で、生産コストを算出し、経済性評価を実施する。これら目標を達成することで、現行排水処理システムを上回るコスト優位性の実現を目指す。

	最終目標
1) 触媒開発	水層溶け込み量0.1%以下の高活性触媒の開発
2) プロセス開発	水中エステル化反応の収率90%以上
3) 経済性評価	プロセスのコスト試算を実施し、実用性を評価

図3 プロジェクトの最終目標

2. エステル化/エステル交換法の開発

2-1. はじめに

エステル化/エステル交換法の概要を図4に示す。第一段階のエステル化工程では、触媒存在下、酢酸含有廃水を油層である高級アルコールと接触させ、酢酸を高級アルコールエステルとして油層に取り込む。油水分離後、第二段階のエステル交換工程において、油層側にエタノールを加えて酢酸エチルに変換した上で回収し、高級アルコールは、系内で循環再使用される。酢酸回収後の水層は、既存の活性汚泥システムにより処理される。

本プロセスで用いる高級アルコールは、水層に溶出しない高い疎水性を有し、使用温度において液体であることが必須である。そのため比較的融点の低い分岐アルコールが適しており、工業的に入手可能なアルコールである 2-オクチル-1-ドデカノール (ODN) をモデル化合物として選択した。廃水中の酢酸は、触媒存在下、過剰量の ODN と接触させることで、2-オクチル-1-ドデシルアセテート (ODA) に変換後、有機層を分離し、エタノールを加えながら反応蒸留を行うことで酢酸エチルに変換する。

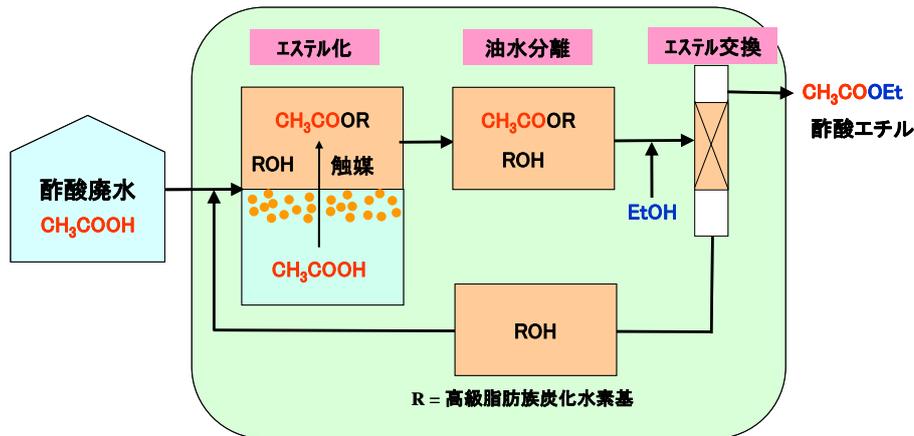


図4 エステル化/エステル交換法の概要

2-2. エステル化工程の開発

エステル化工程では、0.2~1.0 wt%程度の希薄水溶液に対して、水層と同量程度の ODN を接触させて、油水二相系でエステル化反応を行うことを想定した。一般的に、酢酸を多量の水存在下でエステル化することは困難であるが、大過剰の高級アルコールを用いることで効率よく反応が進行する。触媒開発では、触媒の水層への溶出低減が重要であり、触媒活性との両立が求められる。また、エステル化工程は、連続的に流れてくる大量の廃水を処理する必要性があり、設備コスト低減のために連続プロセス化が必須である。

2-2-1. DBSA による連続流通反応検討

界面活性剤型の水中エステル化触媒であるドデシルベンゼンスルホン酸 (DBSA) ^{a)}を用いて、対向流接触の連続流通反応への適用を検討した。反応装置の概略を図5に示す。温水ジャケットを備えたガラス製反応管に対し、水層 (酢酸水溶液) は上部から、油層 (DBSA/ODN 溶液) は下部から、それぞれ反応管に導入して、対向流で油水を接触させた後、水層と油層をそれぞれ下部と上部の出口から抜き出す。反応管内には、ステンレス製充填物を詰めて、油水の接触効率が高まるようにし、充填物部分の体積を液流速で除することにより滞留時間 (反応時間) を算出した。

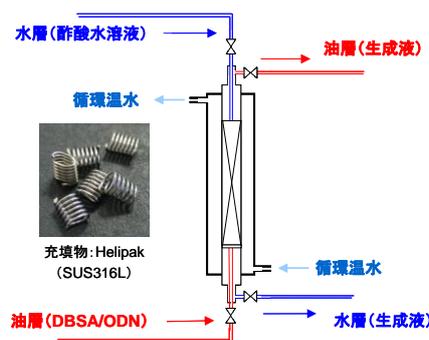


図5 連続流通反応装置

触媒濃度の影響を検討したところ、触媒濃度が高くなるほど、収率は向上し、濃度 8.0 wt%で収率 44%であった（図 6）。滞留時間を考慮すれば、バッチと連続ではほぼ同等の収率となっており、バッチ成績を連続反応系で実現できた。しかしながら、この場合、触媒として用いた DBSA の水層への溶出が問題となった。DBSA は、高活性な触媒であったが、水層への溶出量が多く、本プロセスへの適用は困難であった。

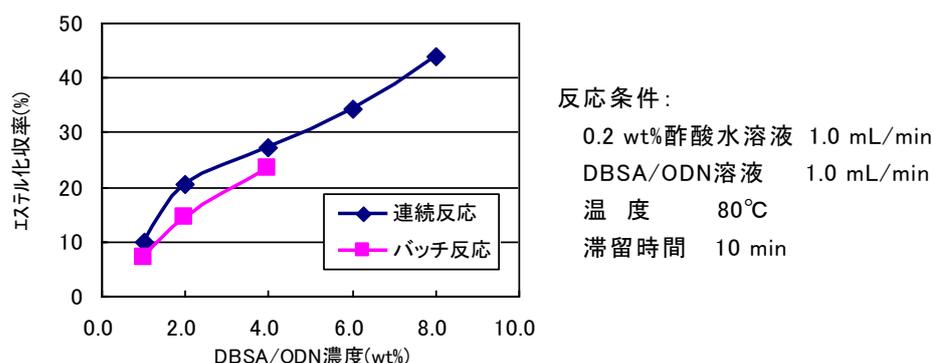


図 6 連続式とバッチ式による収率の比較

a) Manabe, K., Sun, X.-M., Kobayashi, S.; *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, *123*, 10101.

2-2-2. アミン塩触媒の開発

触媒の水層への溶出を抑制するため、高脂溶性の均一系触媒の開発を試みた。新たなエステル化触媒として、DBSA とアミンからなる塩に着目した。DBSA をアミンと 1 : 1 で塩形成させることで、大幅な脂溶性向上が期待されるが、同時にスルホン酸を塩基で中和することになるため、触媒活性の低下が予想された。塩基の構造を適切に設計することで、触媒活性を維持しながら、脂溶性の向上を目指した。表 1 に示すような各種脂溶性触媒を用いてエステル化検討を行った。DBSA とアルキルアミンとの塩は、アミンの塩基性が強すぎるために低活性であったのに対して、ジフェニルアミンとの塩は、DBSA に匹敵する高い活性を示した(Entry 7, 8)。

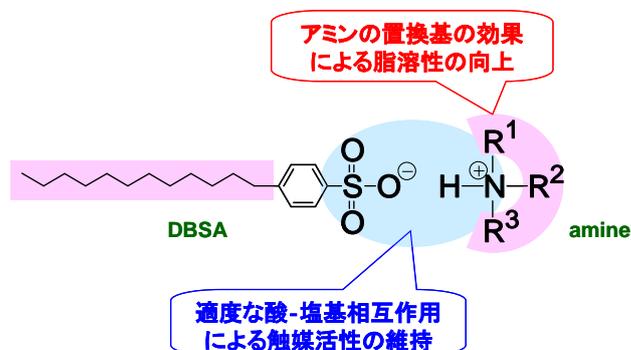
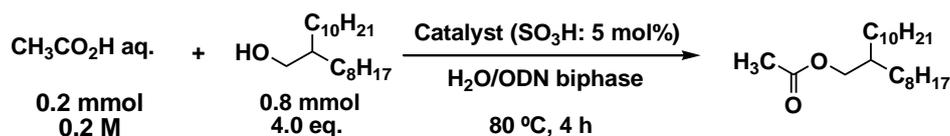


図 7 DBSA · amine 塩触媒の設計コンセプト

表 1 各種脂溶性触媒の検討



Entry	Catalyst	Yield/%
1	DBSA	33
2	C ₁₆ H ₃₃ SO ₃ H	11
3	C ₈ F ₁₇ SO ₃ H	14
4	DBSA/N(C ₁₂ H ₂₅) ₃	0
5	DBSA/HN(C ₁₂ H ₂₅) ₂	6
6	DBSA/HNPh(C ₁₈ H ₃₇)	4
7	DBSA/HNPh ₂	25
8	DBSA/NPh ₂ (C ₁₈ H ₃₇)	28

アミン構造の最適化を図ったところ、^tBu 基を有するジフェニルアミン誘導体を用いたときに最も水層への溶出を低減できたことから、連続流通反応への適用を試みた。表 2 に示すように DBSA を用いた場合には、加えた DBSA のうち 3.7% が水層へ溶出したのに対し、DBSA/ビス(4-tert-ブチルフェニル)アミン触媒を用いたところ、水層への溶出は 4.3% であった (Entry1)。さらに反応条件の最適化により、収率を 40% まで高めながら、触媒溶出を 2.3% まで抑制できた (Entry 2)。

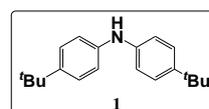
以上のようにアミンの構造と置換基とを最適化することにより、従来の触媒では困難であった触媒の水層への溶出を大幅に抑制しながらも、触媒活性を DBSA と同等レベルに維持することに成功した。また、連続流通反応へ適用可能であることを実証し、本触媒の幅広い有用性を示した。

表 2. DBSA/ジフェニルアミン塩触媒を用いた連続流通反応評価

触媒	触媒濃度 (wt%) ^a	滞留時間 (min)	エステル収率 (%)	水層中触媒分配率 (%) ^a	水層中 ODN濃度 (wtppm)
1 DBSA・1	8.0	10	24	4.3	<20
2 DBSA・1	4.0	30	41	2.3	<20
3 DBSA	8.0	10	30	37.0	180

反応条件: 水層 1.0 wt% 酢酸水溶液、油層 触媒/ODN溶液、温度 80°C

^aDBSA 基準



2-3. エステル交換工程の開発

後段のエステル交換工程は、ODA/ODN 溶液にエタノールを加えて、酢酸エチルを生成する工程であり、エタノールを連続的に追添しながらの反応蒸留方式で検討を行った。使用する触媒は、エステル化工程の触媒をそのままエステル交換工程にも適用することを想定している。エステル化工程の触媒開発の結果、DBSA 相当の触媒活性を有するアミン塩触媒が得られたが、エステル交換工程の実験では、簡便のため DBSA を用いた。エステル交換工程では、留出液中の酢酸エチル濃度を高くすることが重要であり、その後のエタノールとの分離のための精製コストに直結する。前段のエステル化工程において、1 wt%酢酸水溶液を用いて、エステル化収率 50%を仮定した場合のエステル化反応後の ODN 中 ODA 濃度は、2.8 wt%である。この組成の模擬液を用いてエステル交換反応を試みたところ、十分な反応速度を得るためにはエタノールを ODA に対して過剰量（約 60 当量）必要であり、留出液中の酢酸エチル濃度は、4.9 wt%と非常に低濃度であることが分かった。

2-4. プロセス設計、経済性評価

エステル化/エステル交換プロセスの検討により取得した実験データをもとにして、プロセス試算およびコスト試算を行い、経済性を評価した。現状の反応成績の場合の各工程の用役費を試算したところ、未反応エタノールを回収する回収工程およびエタノールと酢酸エチルの分離を行う精製工程のスチームコストが高く、既存排水処理システムの負荷低減効果から試算したメリットを上回ることが分かった。スチームコストが高い理由として、第一に現状のエステル交換工程では、平衡を有利にするためにエタノールを ODA よりも過剰に用いているため、反応後に高級アルコール回収塔でその余剰分のエタノールを除去する必要があること、第二に反応蒸留により得られるエステル交換反応の塔頂液はエタノールが過剰な酢酸エチル混合液であるため、その分離に煩雑な精製操作が必要であることである。

現状の反応成績の場合およびエステル交換工程の改良がさらに進展した場合のそれぞれについて、さらに詳細なコスト試算を行った。その結果、現状の反応成績では大幅なマイナスとなっており、高級アルコールから未反応エタノールを分離する工程（回収工程）や過剰なエタノールを含む液からの酢酸エチル精製工程が必要なプロセスは、成り立たないことが分かった。経済的に成り立つプロセスを構築するためには、エステル交換工程においてエタノールの使用量を ODA に対して1 当量とする必要があるが、反応を追い込むために反応温度を高くすると、より高温のスチームが必要となる。反応蒸留なしでほぼ定量的に反応が進行した場合に初めていくらかプラスとなることが分かった。

2-5. まとめ

エステル化工程の検討において、バッチ反応と同等の反応成績を単純対向流接触型の連続フロー反応で実現できた。界面活性剤型触媒の DBSA は、高活性ながら水層への溶出が問題となったことから、新規触媒としてアミン塩触媒の開発を行った。アミン構造のスクリーニングを行うことで、DBSA と同等レベルの触媒活性を維持しながら、飛躍的に水層

への溶出を抑制した DBSA/ジフェニルアミン塩触媒を開発できた。また、DBSA/ジフェニルアミン塩触媒は、単純対向流接触型の連続フロー反応に適用可能であることを実証した。

エステル交換工程の検討において、エタノールを連続的に追添しながらの反応蒸留検討を行ったところ、エタノールが ODA に対して大過剰必要であり、エタノール使用量の低減が課題であることが分かった。

各反応工程の検討結果を基に、プロセス試算を実施し、希薄酢酸水溶液から酢酸を回収して純粋な酢酸エチルを取得できるプロセスを構築できた。

プロセス全体のコスト試算を実施したところ、精製工程と回収工程のスチームコストが非常に大きく、経済性が成り立たないことが分かった。特に、エタノールを ODA より過剰に使用せざるを得ない点が、プロセス全体の経済性のネックになっていた。

今後の課題は、エステル交換工程のプロセス開発であり、ODA に対して等量のエタノールで反応可能な触媒を開発できれば、大幅なコストダウンが見込まれ、経済的に成り立つプロセス設計が可能になると考えられる。

3. 酢酸濃縮/水中エステル化法の開発

3-1. はじめに

エステル化/エステル交換法においては、現状の反応成績では経済性が成り立たず、エステル交換工程のプロセス開発が課題であった。そこで、酢酸回収方法の別法として、新たに酢酸濃縮/水中エステル化法の開発に取り組むことにした。エステル化/エステル交換法では、エステル交換反応で過剰量のエタノールが必要であり、そのために精製コスト、回収コストの負担が大きくなっていた。前段のエステル化工程では、酢酸に対して過剰量 ODN を用いる必要があったが、このことが後段のエステル交換工程で過剰量のエタノールが必要となる本質的な原因である。そこで、新プロセスでは、ODN を使わずに直接水中で酢酸をエタノールと 1 : 1 で反応させることを想定した。エステル化反応の収率を高めることで、エタノールと酢酸エチルの共沸組成よりも高濃度の酢酸エチル溶液を得ることにより、精製工程のコスト低減を図る。しかしながら、事前検討において、1 wt% 以下の希薄酢酸とエタノールの直接エステル化反応は、ほとんど進行しないことが分かった。そこで、この問題の解決のために、水中エステル化反応の前工程として酢酸濃縮を行い、50%程度まで濃縮した上でエステル化反応を行うことにした。本プロセスの開発の鍵は、酢酸 : エタノール = 1 : 1 (モル比) の条件で、90%以上の収率を実現できる触媒および反応場の開発である。

以下、新プロセスの酢酸濃縮/水中エステル化法についてまとめる。1%以下の希薄酢酸を、まず 50%程度に濃縮し、エタノールとの水中エステル化反応、精製工程を経て、酢酸エチルとする。水中エステル化反応後の酢酸エチル組成は、共沸組成以上にし、蒸留塔の塔底から酢酸エチルを抜き出すことで精製コストの抑制を図る。

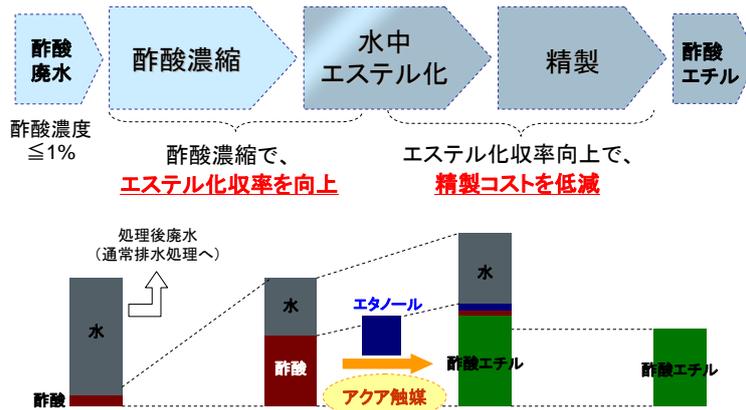


図8 酢酸濃縮/水中エステル化法の概要

3-2. 酢酸濃縮工程の開発

水中でのエステル化反応を有利にするため、まず希薄酢酸溶液を有機合成的に実用的な濃度である数十%にまで高める。過去の酢酸濃縮に関する文献調査により、酢酸を抽出剤で抽出した後、分解蒸留により分離する方法が有用であることが分かった。既存技術をさらに改良して高効率な酢酸濃縮工程の開発を目指した。

抽出液組成の詳細検討を行った結果、アミン/高級アルコールの組み合わせが最も高い酢酸抽出率を与えることが分かった。そこで実際に、最適化した抽出条件において酢酸の抽出検討を行った後、分解蒸留による酢酸の回収を試みた。その結果、酢酸の抽出率で60%、分解蒸留により濃度50wt%以上の濃縮酢酸をほぼ定量的に取得できることを確認した。

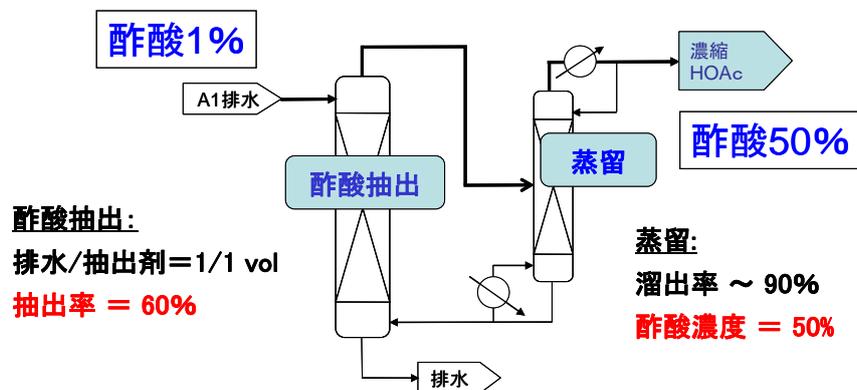


図9 酢酸濃縮工程の概要

3-3. 水中エステル化工程の開発

水中エステル化工程では、酢酸濃縮工程の検討結果から50wt%の酢酸水溶液を原料として用い、酢酸に対して1当量のエタノールと反応させて、収率90%以上を目標とした。無溶媒条件下においても、酢酸とエタノールの平衡収率は、65%であることから、収率90%以上の達成には触媒および反応場両面からの開発が必要であるが、それぞれについて詳細な検討を行うことにより、上記目標を達成することができた。また、触媒の水層への溶け込み量の抑制についても、目標を達成した。

3-4. プロセス設計、経済性評価

酢酸濃縮/水中エステル化プロセスの検討により取得した実験データを基に、コスト試算を行ってプロセスの経済性を評価した。酢酸濃縮/水中エステル化法は、酢酸濃縮工程・水中エステル化工程・精製工程の三工程からなる。プロセス全体の生産コストを、水中エステル化反応の開発の進展レベルにより、3つの場合に分けて試算した。その結果、現状の反応成績では、既存排水処理システムの負荷低減効果から試算したメリットを大幅に超過し、もっとも進展レベルの高い場合に、いくらかプラスとなることが分かった。したがって、本プロセスの実用化に向けては、生産コスト削減のため水中エステル化反応の触媒および反応場開発のさらなる進展が求められる。

3-5. まとめ

酢酸回収方法の別法として、新たに酢酸濃縮/水中エステル化法の開発に取り組んだ。エステル化/エステル交換で問題となった過剰量の反応基質の使用を回避し、水中で直接酢酸とエタノールを1:1で反応させることを目指した。

酢酸濃縮工程において、アミンを用いた抽出とその後の分解蒸留の組み合わせにより、抽出率約60%で50 wt%以上の濃縮酢酸水溶液を取得可能であることを確認できた。

水中エステル化工程の検討においては、触媒および反応場それぞれについて詳細な検討を行うことにより、収率90%以上の目標を達成することができた。

各反応工程の検討結果を基に、プロセス全体のコスト試算を実施したところ、水中エステル化反応における技術進展の結果、当初の想定よりも大幅なコストダウンが図れることを示せた。しかしながら、いまだ設備償却負担が大きく、より低コストな条件において平衡収率を向上できる新規触媒の開発が望まれる。

Ⅲ.2.2 ②固定化触媒を活用する革新的水素化反応システム開発（日光ケミカルズ、東京大学）

（1）実施計画書の最終目標達成状況

最終目標	達成状況	達成度
以下の条件を満たした触媒の開発 ・ 金属漏出 0.1%以下（製品への金属混入 1ppm 以下） ・ 触媒回転数：5 万回以上 ・ 触媒価格 ¥50,000/kg 以下 さらに、開発触媒を用いたリアクター内径 200mm のフローリアクターを設置し、実用化を目指す基質類での水素化反応を実施する。	最終目標である開発触媒の金属漏出 0.1%以下、触媒回転数：5 万回以上を達成し、触媒価格も ¥50,000/kg に近い価格での大量調製を実現した。さらに、その開発触媒を用いたリアクター内径 200mm のフローリアクターを設置し、実用化を目指す基質類での水素化反応を実施した。	◎

（2）成果の詳細

1. 背景

水素化反応プロセスは、化学品の生産に最も頻繁に用いられるプロセスの一つであり、革新的な技術による水素化反応プロセスのグリーン化や経済性の向上は極めて重要な課題である。化粧品・医薬品の原料の製造においては、着色や異臭の原因となる不飽和結合の酸化の防止や、色・におい・融点などの改良などの目的のため、不飽和結合の水素化が行われる。水素化された製品は乳化剤や配合剤等として提供される。水素化反応は触媒反応であることから触媒の役割は極めて重要であり、用いる触媒には十分な活性や耐久性が求められる。しかしながら、現状ではこれらの触媒性能が不十分であるため、製造される製品においても残存不飽和による不十分な酸化安定性や純度低下の問題がある。また、多くの化粧品・医薬品の製造において天然物原料が用いられるが、原料に含まれる種々の成分により触媒の失活が起りやすい。そのため水素化用触媒の繰り返し使用が出来ず、触媒メーカーでの金属の採り出し・触媒再製造が必要であり、その触媒再生工程では多くのエネルギー・コストが必要となっている。

本テーマにおいては、これらの問題を解決する革新的水素化反応プロセスを開発し、現在の製造方式から GSC 効果の伴った開発プロセスでの生産へ移行することにより、省資源・省エネルギー・廃棄物削減を達成することを目的とする。同時に、製造する水素化製品に品質向上・価格低減などの付加価値を与えることで販売量やシェアの拡大を目指している。

本テーマのキーテクノロジーは、水素化用高分子固定化触媒と触媒充填型連続フローリアクターである。遷移金属の担体にポリシランを用いた触媒は、従来の触媒の欠点を補うことが期待され、その水素化用高分子固定化触媒をカラム状リアクターに充填した触媒充填型連続フローリアクターは、GSC 効果の伴った高い生産性の装置になることが期待され

る。

この水素化用高分子固定化触媒と触媒充填型連続フローリアクターを開発するため、研究開発の項目・研究開発項目を以下のように設定した。

研究開発項目	研究開発目標	根拠
I. 水素化用触媒開発	<ul style="list-style-type: none"> ・薬粧品原料の水素化に適した触媒の開発 ・金属漏出 0.1%以下(製品への金属混入 1ppm 以下) ・触媒回転数：5 万回以上 ・触媒価格 ¥50,000/kg 以下 	<ul style="list-style-type: none"> ・触媒の構造及び機能の解析→再設計→合成→評価の実施 ・触媒の新規固定化方法の検討 ・連続フローリアクターを指向した高分子固定化触媒の開発 ・ポリシラン構造の最適化以上の課題解決が必要である。
II. 連続フローリアクター開発	<ul style="list-style-type: none"> ・リアクター内径 100mm のフローリアクターでの水素化試験 ・リアクター内径 200mm のパイロットプラント設置 	製品生産量を増やすためには、リアクターのナンバリングアップが必要であるが、その際のコストを考慮して、内径 200mm までのスケールアップを計画した。
III. 適用化合物の拡大	種々の薬粧品原料の水素化反応試験を連続フローリアクターで実施	広い分野での実用化のために、適用化合物の拡大は不可欠である。

2. 水素化用触媒開発

東京大学では、高分子固定化金属触媒の開発研究において、ポリスチレンのマイクロカプセル中にナノサイズ金属クラスターを固定する手法(マイクロカプセル化(MC)法)、及びMC 触媒を構成する高分子を加熱架橋により不溶化させた高分子カルセランド型(PI)触媒を見出し、これらの触媒が様々な有機合成反応に有効に機能することを示している。中でも架橋ポリスチレンにパラジウムを固定した触媒は安定なサブナノサイズのクラスターを有し、きわめて高い触媒活性が得られている。

一方、ポリシランは σ 共役したケイ素-ケイ素結合を主鎖に有することが大きな特徴であり、これを金属クラスターの担体とした場合、その高分子構造に由来してポリスチレン担体の触媒とは異なる触媒構造および触媒機能を有することが期待できる。そこでMC法およびPI法を活用することでパラジウムクラスターのポリシランへの固定を検討した。

ポリシランのトルエン溶液に氷冷下で酢酸パラジウムを加えると速やかにパラジウム塩

が還元され、生成したパラジウムクラスターにより溶液は黒変した。ここにポリシランの貧溶媒であるメタノールを滴下したところ、MC ポリシラン担持パラジウム (MC Pd/PSi) が析出した。この MC Pd/PSi は加熱により架橋したが、ポリシランの良溶媒中では膨潤によるろ過性の低下やパラジウムの漏出が生じた。そこで安定性・汎用性の向上を目的として金属酸化物との複合担体を検討した結果、MC Pd/PSi をアルミナと加熱することにより安定でろ過性が高いパラジウム触媒が得られた。

開発された Pd/(PSi-Al₂O₃) を製品の大量生産に適用するため、開発触媒の大量調製方法の確立は不可欠である。そこで、触媒メーカーでの 1 バッチ 15kg 程度の大量調製方法の検討を実施した。まず触媒の調製方法を 1kg スケールにおいて以下のように変更した。マイクロカプセル化法によって得られた触媒を最初はデカン中で熱架橋をおこなっていたが、このデカンの除去に長時間を要していた。そこでこのデカンでの熱架橋工程を減圧乾燥器中で行うことで製造工程が約 1/2 になった。その結果、触媒価格も 1/2 へと低減されて、ほぼ目標価格での触媒調製が可能になる調製方法となった。図 1 にその工程を示す。

Pd/(PSi-Al₂O₃) 1kgスケール

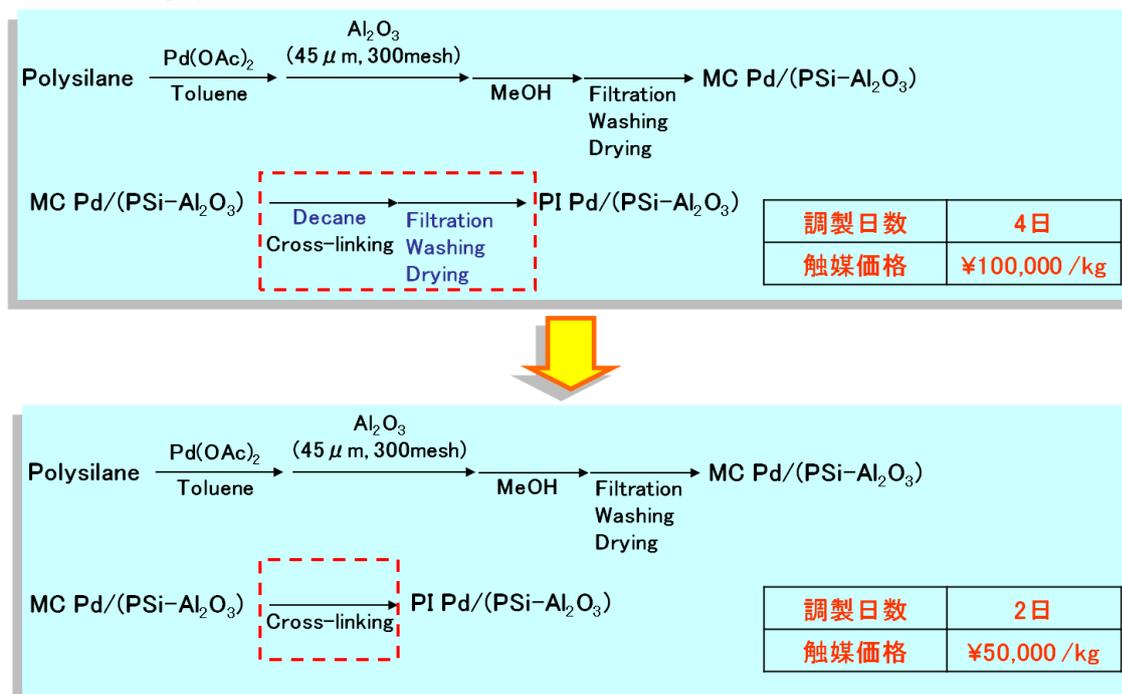


図 1 触媒調製方法の検討

さらに、異なる化学構造を有するポリシラン（以下、ポリシラン誘導体）を用いた触媒調製の検討を実施し、この調製方法で触媒メーカーにおいて 1 バッチ 15kg スケールの大量調製を検討した結果、当初のポリシランを用いた触媒では 11 バッチ、160kg の製造、構造の単純なポリシランを用いた触媒では 1 バッチ、15kg の製造を実施して十分な性能を持った触媒供給が可能となった。触媒価格はパラジウム金属の相場により大きな影響を受けるが、ほぼ目標価格である 50,000 円/kg に近い価格を達成した。

さらに開発触媒と一般的な水素化用触媒である活性炭担持パラジウム触媒とをターゲット

ト基質のバッチ反応での水素化で比較したところ、活性炭担持パラジウム触媒に対して、開発触媒の優位性が確認された。

また、両ポリシランを比較した場合に、基質によってはポリシラン誘導体を用いた触媒の方が優位な結果が得られた。

大量調製した開発触媒の水素化活性や電子顕微鏡によるクラスターサイズの測定結果などから、その性能が十分なものであることが確認できた。そのことにより、開発水素化プロセスを実用化するにあたり、触媒供給が可能となった。パラジウムの含有量も $15 \mu\text{mol/g}$ ~ $45 \mu\text{mol/g}$ と数種類の触媒を大量調製したが、以下の写真のようにほぼ均一のパラジウムクラスターが確認され、調製が成功していることを確認した。

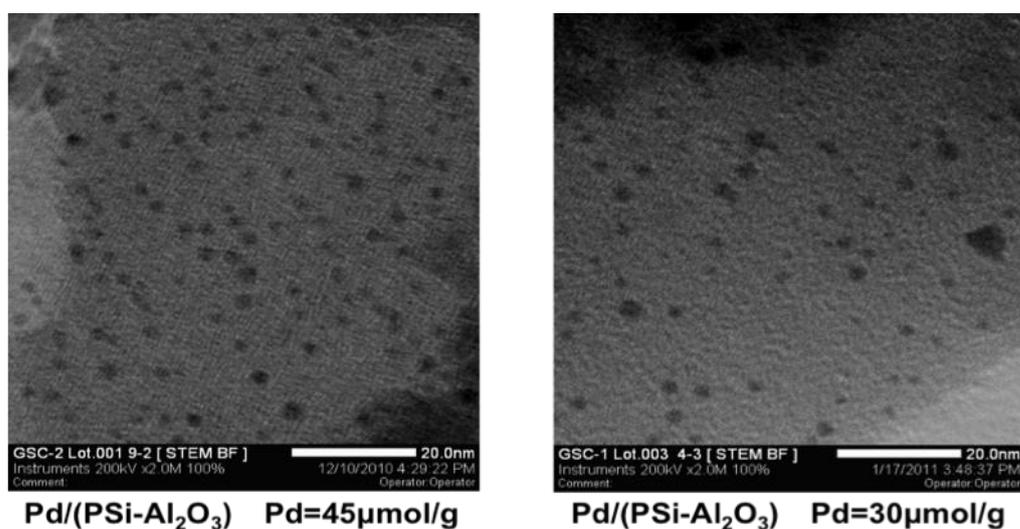


図2 パラジウムクラスターの電子顕微鏡による観察

さらに開発触媒は発火性がみられず、ろ過性が非常に高いという特徴を持っており、高活性である特徴と合わせて、連続フローリアクターに非常に適した高分子固定化触媒が開発されたと考えられる。

3. 連続フローリアクター開発

開発した高分子固定化触媒の良好なる過性と繰り返し使用しても活性が低下しない性質は、触媒を充填したカラムに被還元物質と水素ガスを導入するフロー式水素化反応に適している。フロー式の反応は、製品の連続生産が可能であり、また省エネや省スペースを実現する優れた方法である。そこで図3のような触媒充填型連続フローリアクターを作製して、水素化反応の検討を行った。

基質溶液はポンプで流量調節を行うことでカラムリアクターへ供給し、水素ガスはガスボンベを用いマスフローコントローラーで流量を調整して供給した。触媒を充填したカラムリアクター部分はウォーターバスやオイルバスにより温度制御を行った。反応物は余剰の水素とともにカラムリアクターから排出され、反応物回収容器で水素と分離される。

アップフローとダウンフローの差について検討した結果、ダウンフローにおいて水素ガ

スを効率良く消費出来ることが確認され、以後ダウンフローでの実用化を検討することとした。また、リアクター注入部での気液混合は、フィルターを入れることにより効率良く混合されてから充填触媒中に流入されることが確認された。

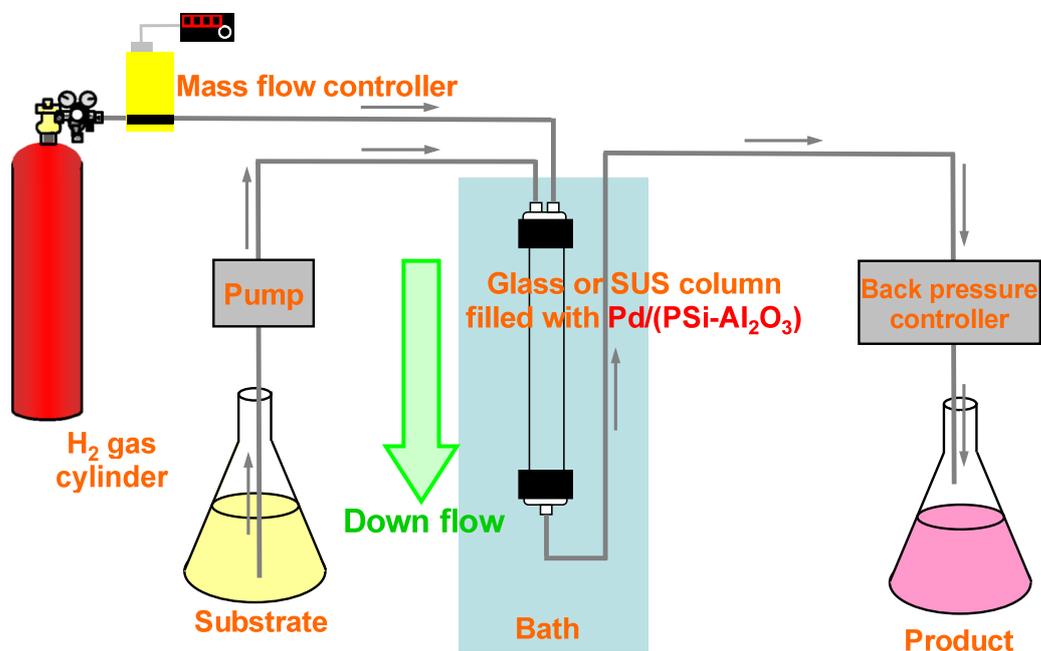
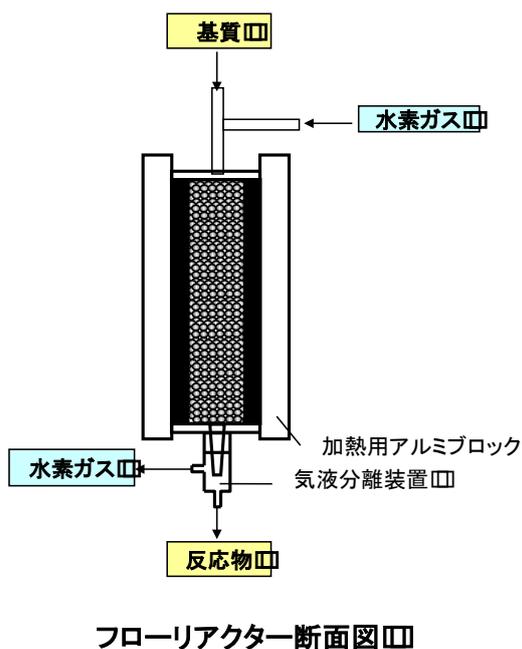


図3 連続フローリアクターの模式図

触媒：Pd/(PSi-Al₂O₃)、カラムサイズ 10φ×100 mm のフローリアクターでの水素化反応を本プロジェクトの実用化を目指す基質類に適用したところ、いずれの場合も目的とする収率・純度・生産性を得るための反応条件検討により、フローリアクターが使用に適していることが確認された。触媒の金属漏出は 0.1%以下であった。さらに触媒の耐久性試験においては、主な基質の水素化において触媒回転数 5 万回以上、反応時間 920 時間を越える結果が得られ、その後も活性が維持されることが確認された。

内径 10mm のフローリアクターでの触媒性能・収率・純度・生産性を評価した後に、実用化に向けたフローリアクターのスケールアップ検討を行った。まず内径 50mm までスケールアップを行うための温度・基質溶液・水素ガスをコントロールできるフローリアクターを製作した。カラムの温度コントロールも加熱用のアルミブロックを用いており、内径 10mm から内径 50mm まで対応できるような形状になっている。



上写真
内径20Φ～50Φmmフロー
リアクター全体図
左写真
左:50Φ×300mm
右:10Φ×300mm

図4 フローリアクターのスケールアップ

フローリアクターのスケールアップは、内径10mmから、内径20mm、内径50mmへと順に実施したが、内径50mmへのスケールアップにおいては外部からの加熱が不十分のため十分な収率が得られないことがわかった。

この問題に対しては、基質溶液をカラムリアクターに入るまでに配管中であらかじめ加熱を行うことによって解決した。具体的には、基質溶液の配管に温度調節可能なヒーターを設置して、基質がポンプからカラムリアクターに導入されるまでに加熱する方法を採用した。なお、内径50mm以上のフローリアクターでは、内部に温度計を設置することにより、触媒中の反応温度を直に測定出来る。

また、別の基質においては反応熱に起因する触媒の劣化がみられた。触媒成分が生成物に混入することによる生成物品質の低下、及び触媒活性の低下が起り、長時間の連続使用が困難になった。この問題は、パラジウム含有量の異なる触媒を別々の二本のカラムリアクターに充填し、カラムリアクターを直列に接続して反応熱を抑制する手法により解決した。

さらに実機により近いサイズである100Φ×1000mmのフローリアクターを検討することとした。基質を加熱した後にカラムリアクターへ送る構造となっている。

100Φ×1000mmのフローリアクターで良好な結果が得られたため、実用化を計画しているリアクターサイズである200Φ×1000mmのフローリアクターの設計も実施した。長さは触媒充填量などを考慮して1000mmのままとし内径のみのスケールアップを行った。また、基質流量も大きく増大されるため、基質の加熱が十分できるように大型の熱交換器を設置した。

続いてスケールアップでの反応検討について記載する。

装置の自動化を実施してのフローリアクターのスケールアップ検討を進めた結果、内径 200φ×1000 mm のカラムリアクターを用いた場合に、パラジウム炭素触媒を用いる現行のバッチ方式を上回る生産性を達成し、同等以上の純度の目的物を得ることが出来た。内径 10mm から水素化検討を始めたが、どのサイズにおいても一定時間水素化反応を継続して行くと、生成物の還元率が少しずつ低下する現象がおこった。この原因は不明だが、触媒の有機溶剤での洗浄を検討することにより、いくつかの有機溶剤において活性を回復させることが可能だとわかった。さらにフローリアクター内の触媒洗浄は、有機溶剤を下方から上方へとアップフローで行う方がダウンフローで行うよりも効率が良いことが確認された。

種々の製品について検討を行い、条件を検討することにより収率の目標値（95%以上）を達成している。これらの検討結果や市場動向より、実用化の優先順位を決定し、スケールアップは最優先の基質を中心に実施した。

また、ターゲット基質以外への適用性を確認するため、自社製品を中心にいくつかの化合物水素化試験をおこない、いずれも満足のいく結果が得られている。

4.まとめ

ポリシランを担体としてパラジウムを固定化した触媒を用いた水素化反応システムの開発を行い、最終目標である開発触媒の金属漏出 0.1%以下、触媒回転数：5 万回以上を達成し、触媒価格も ¥50,000/kg に近い価格での大量調製を実現した。さらに、その開発触媒を用いたリアクター内径 200mm のフローリアクターを設置し、実用化を目指す基質類での水素化反応を実施し、生産量 30 kg/日以上を達成した。

基本計画の目標である反応率 80%、選択性 90%はいずれも大きく超えており、溶出金属も検出限界以下であるなど、数値目標は十分達成している。この水素化システムは本年の実用化が既に決定しており、他の原料を用いるプロセスも今後順次実用化予定である。

今後の課題は、カラムリアクターのナンバリングアップ方法の検討、大量生産機の安全性（防爆方法の検討）、内径 200 mmスケールでの触媒耐久性の確認、余剰水素ガスの再利用の検討（コスト試算による再利用の検討）、劣化した触媒からのパラジウム回収・再利用の検討などである。

- 生産リアクターのナンバーリングアップ方法の検討
- 大量生産機の安全性(防爆方法の検討)
- 内径200mmスケールでの触媒耐久性の確認
- 余剰水素ガスの再利用の検討
- 触媒からのPd回収・再利用の検討

リアクターのナンバーリングアップイメージ

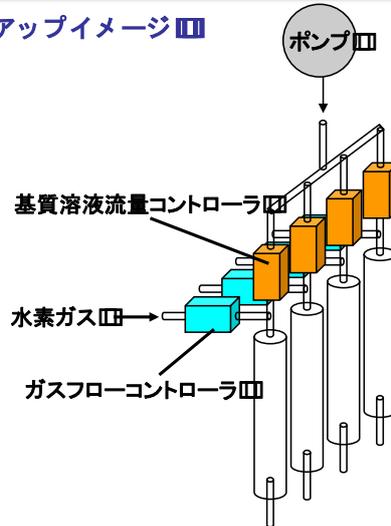


図 5 今後の課題

Ⅲ.2.2 ③グリーンプロセスのための高分子固定化金属触媒試薬の開発（和光純薬工業、東京大学）

（1）実施計画書の最終目標達成状況

最終目標	達成状況	達成度
<p>（1）オスミウム触媒の 100 グラム～10 キログラムでの生産法を確立し、サンプル供給を実施</p> <p>（2）反応基質に対応した高分子固定化 Os 触媒により金属漏出 1%以下、反応率 85%、選択率 95%</p> <p>（3）オスミウム以外の金属触媒において 50 グラム～10 キログラムでの生産法を確立、サンプル供給を実施</p> <p>（4）実用プラントに向けたデータ習得およびリスクアセスメントの実施 金属漏出 2%以下、反応率 80%</p>	<p>（1）PI オスミウム触媒のスケールアップ合成（100 グラム）を達成し、サンプル供給を実施した。</p> <p>（2）PI オスミウム触媒によりスチレン誘導体の不斉ジヒドロキシル化反応において、金属漏出 1%以下、反応率 85%、選択率 95%を達成</p> <p>（3）PI カーボンブラック金触媒、PI 白金/金触媒、PI 白金触媒の 100 グラムでの生産法、PMI カーボンブラックパラジウム触媒の 50 グラムでの生産法を確立、サンプル供給を実施</p> <p>（4）実用プラントを想定し、カンプトテシン中間体 1 モルスケールの合成検討を行い、金属漏出 2%以下、反応率 80%以上を達成。本プロセスのリスクアセスメントを実施した。</p>	◎

（2）成果の詳細

1. 背景

2010 年に鈴木章及び根岸英一両教授がパラジウムを触媒とするクロスカップリング反応でノーベル化学賞を受賞されたことに象徴されるように、遷移金属を触媒とする有機合成反応は現代社会において必要不可欠な技術であり、この技術で製造された医薬品や電子材料を始めとする化学製品は我々の社会の発展に多大な貢献をしている。しかしながら金属触媒を用いる反応における課題として、遷移金属の埋蔵量が少ないこと、反応後の金属回収が困難なこと、製品に対する金属汚染、金属廃棄物の発生等が挙げられ、これらの触媒を容易に回収、再使用できる持続可能な化学プロセスを構築する必要性に迫られている。触媒を回収、再使用する方法として、固体担体に金属を固定化させた不均一系金属触媒の使用が有効であるが、その中で東京大学大学院理学系研究科の小林修教授によって開発された高分子固定化金属触媒に着目した(図 1)。この触媒は、エポキシドとアルコールを有するポリマーに対して金属を固定化し(マイクロカプセル化)、高温で加熱することでエポキシドとアルコールが反応し、エーテル結合による架橋を形成することによって合成できる。得られた触媒は、金属を高分子中に閉じ込めた状態が Cram らによって見出された包

接化合物「カルセランド」(Cram, D. J. *Science*, **1983**, 219, 1177.)に似ていることから、高分子カルセランド型触媒(Polymer Incarcerated Catalyst: PI 触媒)と呼ばれている。それらの触媒の特徴は、ほとんどの有機溶媒に不溶であり、ポリスチレンのベンゼン環の π 電子と金属の空軌道との電子的相互作用と架橋による物理的相互作用で金属を保持していることである。

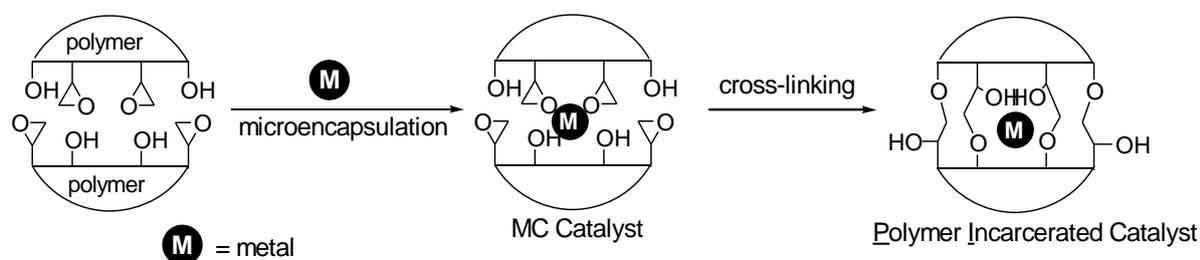


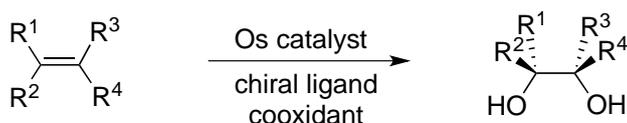
図1 高分子固定化金属触媒(PI 触媒)の概略図

本テーマは、プロジェクトの基本計画である「廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発」を指向し、工業的に利用可能な高分子固定化触媒を開発することを目的とした。具体的には、高分子カルセランド型触媒の技術を応用した 1) 高分子固定化オスミウム触媒の開発、2) 高分子固定化金、白金、およびパラジウム触媒の開発、の2つのテーマを検討した。

2. 高分子固定化オスミウム触媒の開発

オレフィンから光学活性なジオールを合成する方法として、オスミウムを触媒として用いて1段階で合成する方法と、サレン錯体を触媒として用いて2段階で合成する方法がある(図2)。工業レベルでサレン錯体を用いる方法を適用した場合、サレン錯体の大量合成の困難さと高価という点で問題がある。一方オスミウムを用いる方法は、高収率、高エナンチオ選択的にジオールを与えるが、オスミウム触媒として用いられる四酸化オスミウムは、1) 昇華性がある(蒸気圧 1.5 kPa/27 °C)、2) 吸入毒性が強い(許容濃度 0.0016 mg/m³)、3) 高価である、4) 回収が困難である、という問題点を抱えている。

Osmium Catalyzed Dihydroxylation



Salen Complex Catalyzed Epoxidation

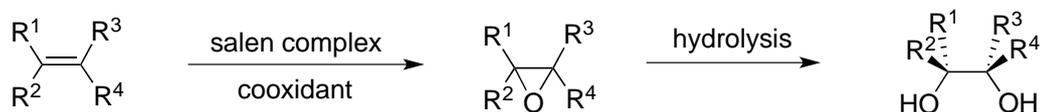


図2 光学活性ジオールの合成法

我々は、一段階で光学活性なジオールを合成できるオスミウム触媒に着目し、工業レベルで使用可能なオスミウム触媒の開発をこれまで行ってきた。その検討段階で、四酸化オスミウムの問題点を解決する方法として、四酸化オスミウムを高分子に固定化する方法を見出した。ポリマーに四酸化オスミウムを担持しマイクロカプセル化を施した触媒(MC OsO₄)は、四酸化オスミウムの昇華性を抑制し長期間の保存が可能である(図3)。しかしながら、MC OsO₄ は一部の溶媒に溶解するため、反応中にオスミウムが溶出する場合がある。そこで触媒の更なる改良を目指し、背景で述べた高分子カルセランド型触媒の技術を応用し、新規固定化オスミウム触媒の開発検討を行った。また、開発したオスミウム触媒を用いて、工業的実用化の実証を行った。具体的には、医薬品であるカンプトテシン中間体の1モル合成を検討した。

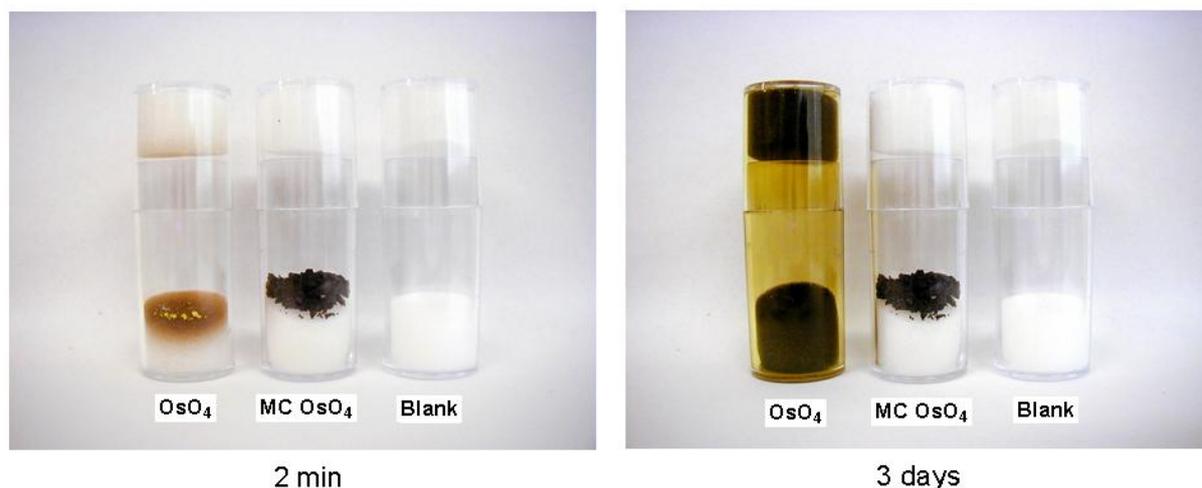


図3 四酸化オスミウムと高分子固定化オスミウム触媒(MC OsO₄)の昇華性の違い

2-1. PI オスミウム触媒

始めに、オスミウムを担持させるポリマーの合成を行った(図4)。0.7 mol%の V-70 存在下、スチレン 323 g、エポキシドを有するスチレン 38 g、テトラエチレングリコール(以下 TEG と省略する)を有するスチレン 120 g をクロロホルム中、室温、72 時間反応を行うこ

とで、収量 241 g、収率 47%で目的のポリマーが得られた。得られたポリマーの物性を GPC で測定したところ、質量平均分子量(Mw)33400、数平均分子量(Mn)24500、分散度(Mw/Mn)1.37 であった。

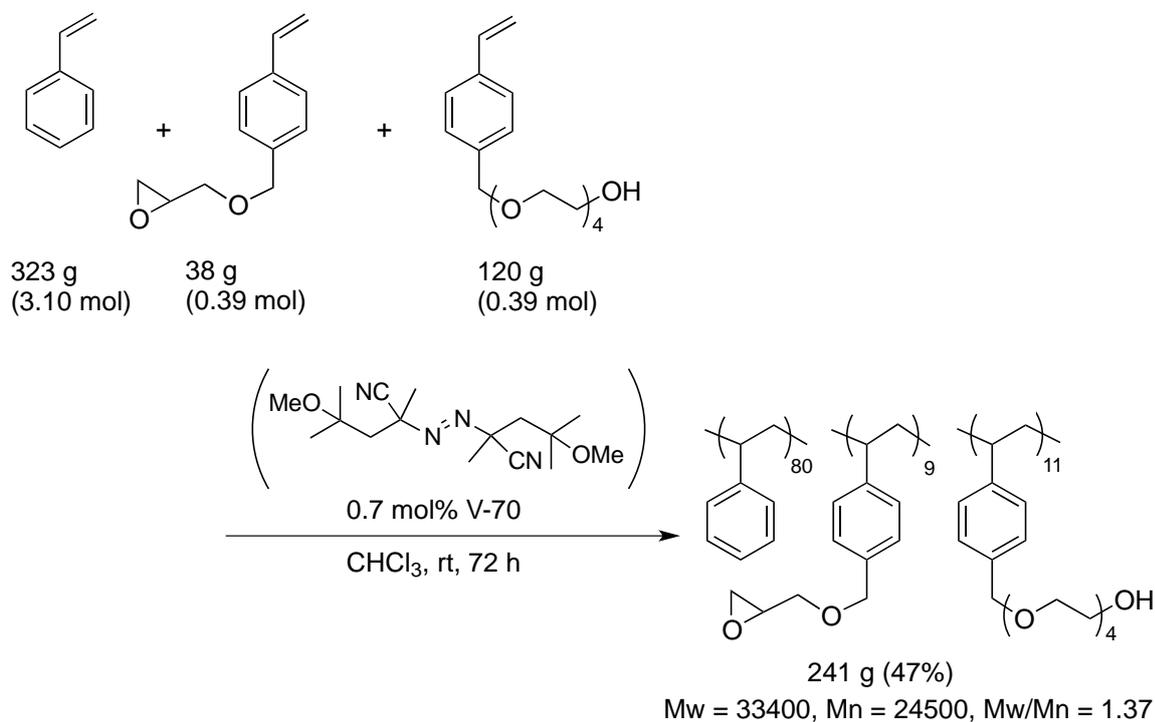


図4 ポリマーの合成①

合成したポリマーを用いて、PI オスミウム触媒の 100 g 合成を行った(図5)。ポリマー 100 g に対して、四酸化オスミウム 19.6 g を加え、THF (テトラヒドロフラン) /メタノール中、室温、72 時間攪拌した。ヘキサンを滴下することでオスミウム触媒を沈殿させ(コアセルベート化)、一晩攪拌後、ろ過で触媒を回収し、洗浄、乾燥を行い、収量 108 g で MC オスミウム触媒を合成した。得られた MC オスミウム触媒を 150℃、5.5 時間架橋反応を行い、洗浄、乾燥を行うことによって、収量 102 g で目的の PI オスミウム触媒を合成した。この反応で用いた四酸化オスミウムは、ポリマーにほとんど固定化されており、触媒 1 g あたり 0.754 mmol のオスミウムが担持されている。

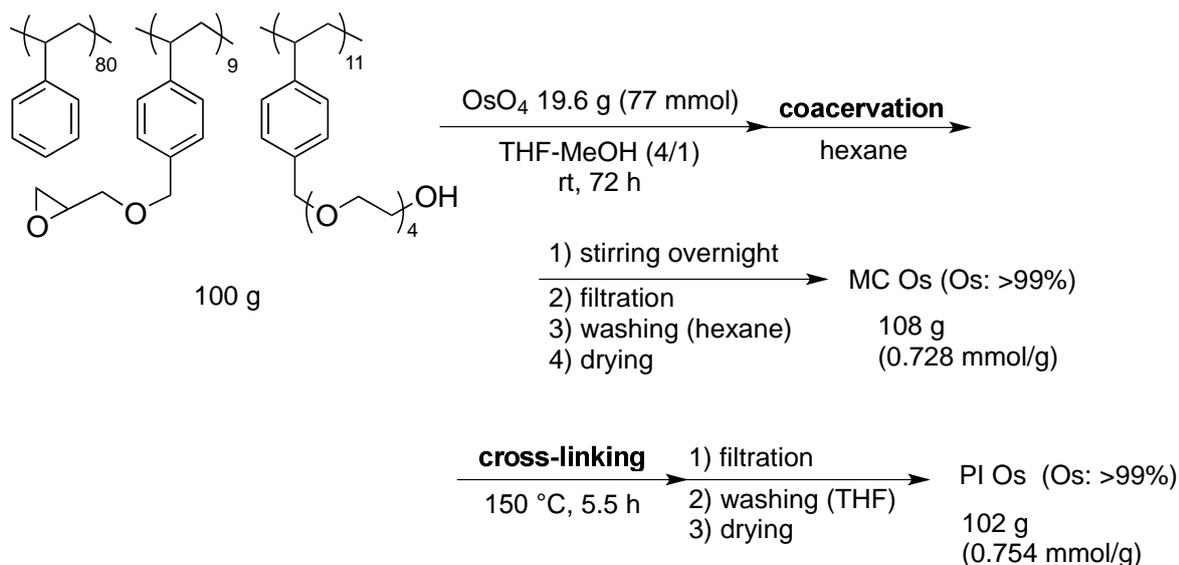


図5 PI オスミウム触媒の 100 g 合成

合成した PI オスミウム触媒を用いて、様々なオレフィンの不斉ジヒドロキシル化反応を行った(図6)。5 mol%の PI オスミウム触媒存在下、キラル配位子として四酸化オスミウムを触媒とする不斉ジヒドロキシル化反応で高い立体選択性を示す(DHQD)₂PHAL 5 mol%、再酸化剤としてフェリシアン化カリウム 3 当量を用い、2-プロパノール/水中、2 mmol のオレフィンを反応させた。用いるオレフィンによっては、反応促進剤としてメタンシルホンアミド 1 当量を添加した。オレフィンとして、芳香族化合物であるスチレン、 α -メチルスチレン、 β -メチルスチレン、*trans*-スチルベン、2-プロペニルオキシベンゼンを用いた場合、2%以下のオスミウムの溶出で、高収率、高エナンチオ選択的に対応するジオールを与えた(*trans*-スチルベンで金属溶出<1%、変換率>85%、エナンチオ選択性>95%)。またオレフィンとして、脂肪族化合物である *trans*-5-デセンを用いた場合も、1%のオスミウムの溶出で、高収率、高エナンチオ選択的に対応するジオールを与えた。さらに、 α -メチルスチレンにおいて触媒の回収、再使用を検討したところ、収率、不斉収率を損なうことなく 2 回の再使用が可能であることが明らかとなった。

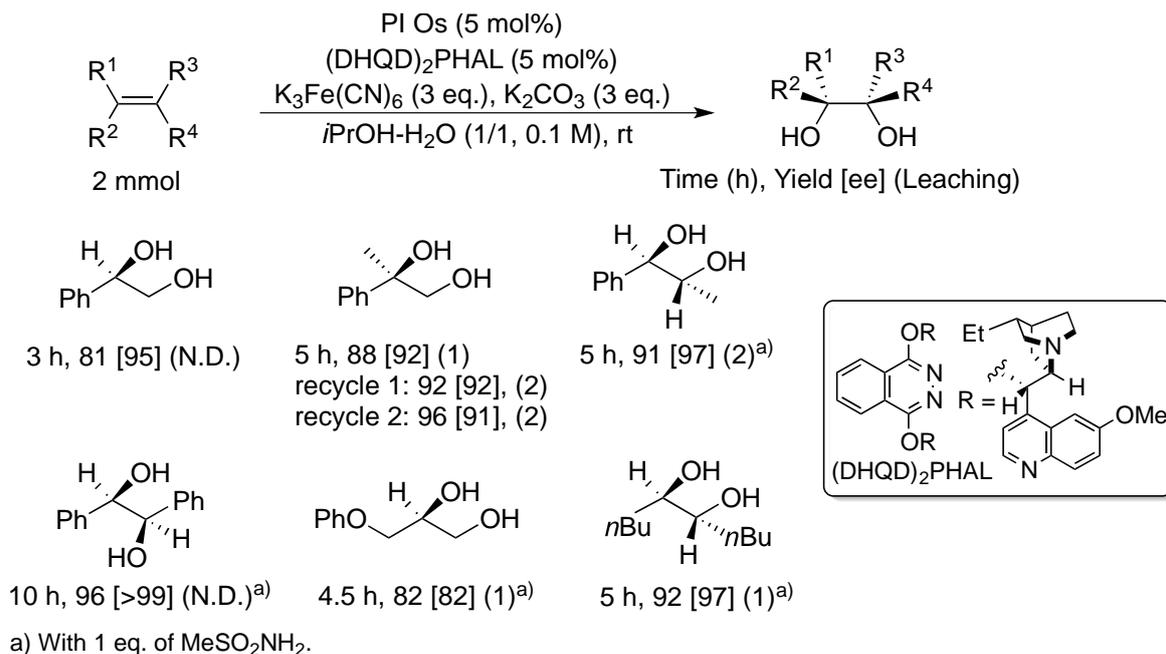


図6 PI オスミウム触媒を用いた不斉ジヒドロキシル化反応

2-2. PI オスミウム II 型触媒

PI オスミウム触媒は、様々なオレフィンに対して高収率、高エナンチオ選択的に対応するジオールを与えるが、オスミウムの溶出に関して、一部のオレフィンで 2% 観測される場合がある。そこで、ほとんどのオレフィンでオスミウムの溶出を 1% 以下に抑えた PI オスミウム触媒を検討することにした。

PI オスミウム触媒で用いている架橋ポリマーは分子量が約 3 万であり、溶媒耐性の面で若干の問題点を残していた。架橋ポリマーの分子量を上げることで、オスミウムの溶出をさらに抑えることができると考え、架橋ポリマーの改良を検討した。これまで、スチレン、エポキシモノマー、TEG モノマーの 3 種類を重合していたが、エポキシモノマーと TEG モノマーを分けて、それぞれスチレンと重合させることにした(図 7)。0.7 mol% の V-601 存在下、スチレン 59 g、エポキシドを有するスチレン 19 g をトルエン中、80°C、7 時間反応を行うことで、収量 54.7 g、収率 70% で目的のポリマーが得られた。得られたポリマーの物性を GPC で測定したところ、質量平均分子量(Mw)58400、数平均分子量(Mn)43900、分散度(Mw/Mn) 1.33 であった。重量平均分子量が約 6 万になり、これまで用いていた架橋ポリマーの約 2 倍の分子量を有するポリマーを合成することができた。同様の方法で、スチレン 53.1 g と TEG を有するスチレン 27.9 g を重合したところ、収量 55.1 g、収率 68% で目的のポリマーが得られた。得られたポリマーの質量平均分子量(Mw)は 61000 となり、このポリマーもこれまで用いていた架橋ポリマーの約 2 倍の分子量を有していることがわかった。

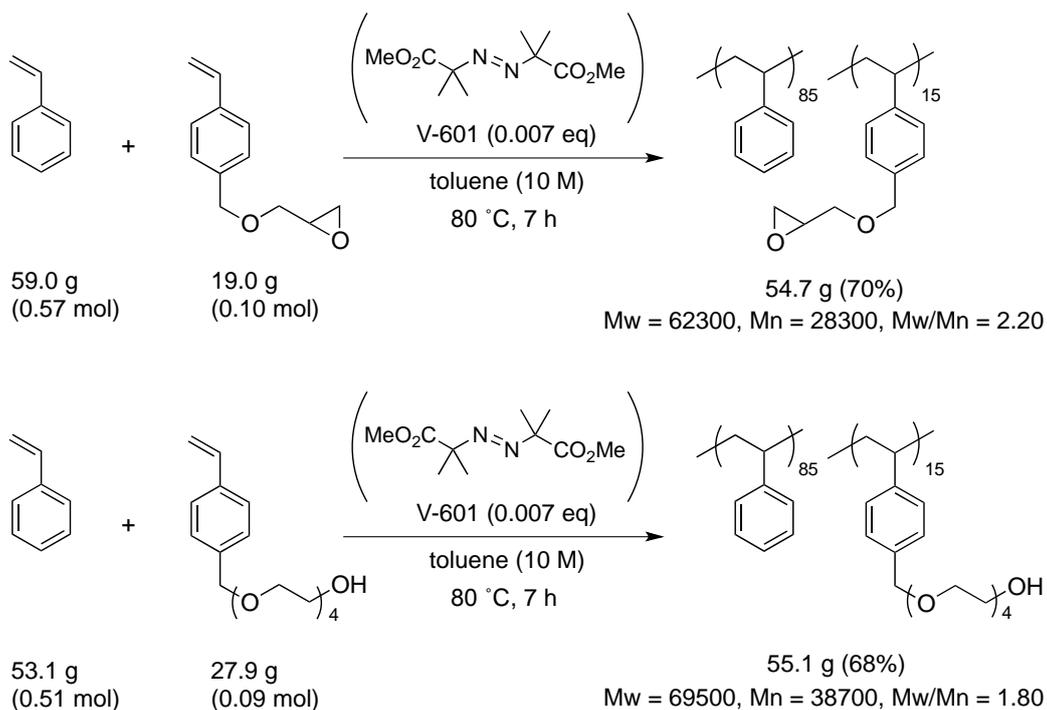


図7 ポリマーの合成②

合成したポリマーを用いて、PI オスミウム II 型触媒の 100 g 合成を行った(図 8)。エポキシポリマー 55 g に対して、四酸化オスミウム 10.5 g を入れ、THF/メタノール中、室温、72 時間攪拌した。ヘキサンを滴下することでコアセルベート化を行い、一晩攪拌後、ろ過で触媒を回収し、洗浄、乾燥することによって、収量 54.8 g で MC オスミウム触媒を合成した。同様の方法で、TEG ポリマー 55 g に対して、四酸化オスミウム 10.8 g を用いることによって、収量 58.1 g で MC オスミウム触媒を合成した。得られた 2 種類の MC オスミウム触媒を混ぜて、150°C、5 時間の条件で 1 回目の架橋反応を行い、さらに 150°C、2 時間の条件で 2 回目の架橋反応を行うことによって、収量 101 g で目的の PI オスミウム II 型触媒を合成した。この反応で用いた四酸化オスミウムは、ポリマーにほとんど固定化されており、触媒 1 g あたり 0.829 mmol のオスミウムが担持されている。

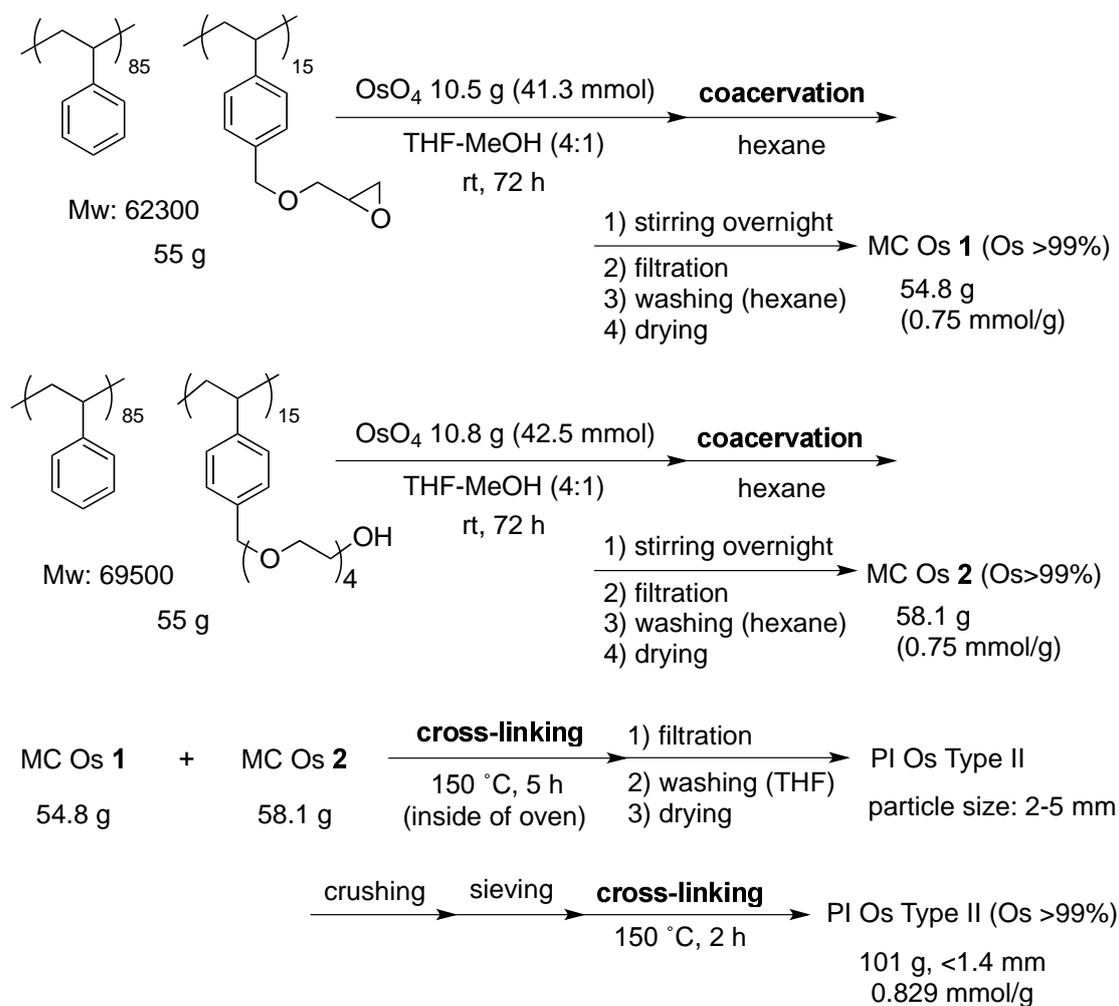


図8 PI Os II型の100 g合成

合成したPIオスミウムII型触媒を用いて、様々なオレフィンの不斉ジヒドロキシル化反応を行った(図9)。5 mol%のPIオスミウムII型触媒存在下、キラル配位子として(DHQD)₂PHAL 5 mol%、再酸化剤としてフェリシアン化カリウム3当量を用い、t-ブタノール/水中、2 mmolのオレフィンを反応させた。PIオスミウム触媒と比較して反応時間が長くなるものの、用いたすべてのオレフィンにおいて高収率、高エナンチオ選択的に対応するジオールを与え、オスミウムの溶出を1%以下に抑えることができた(*p*-クロロスチレンで金属溶出<1%、変換率>85%、エナンチオ選択性>95%)。特に、PIオスミウム触媒を用いた場合2%のオスミウムの溶出が見られた α および β -メチルスチレンにおいて、1%以下に抑えることができたことは注目に値する。また、 α -メチルスチレンにおいて触媒の回収、再使用を検討したところ、オスミウムの溶出を1%以下に抑え、収率、不斉収率を損なうことなく、4回の再使用が可能であることがわかった。

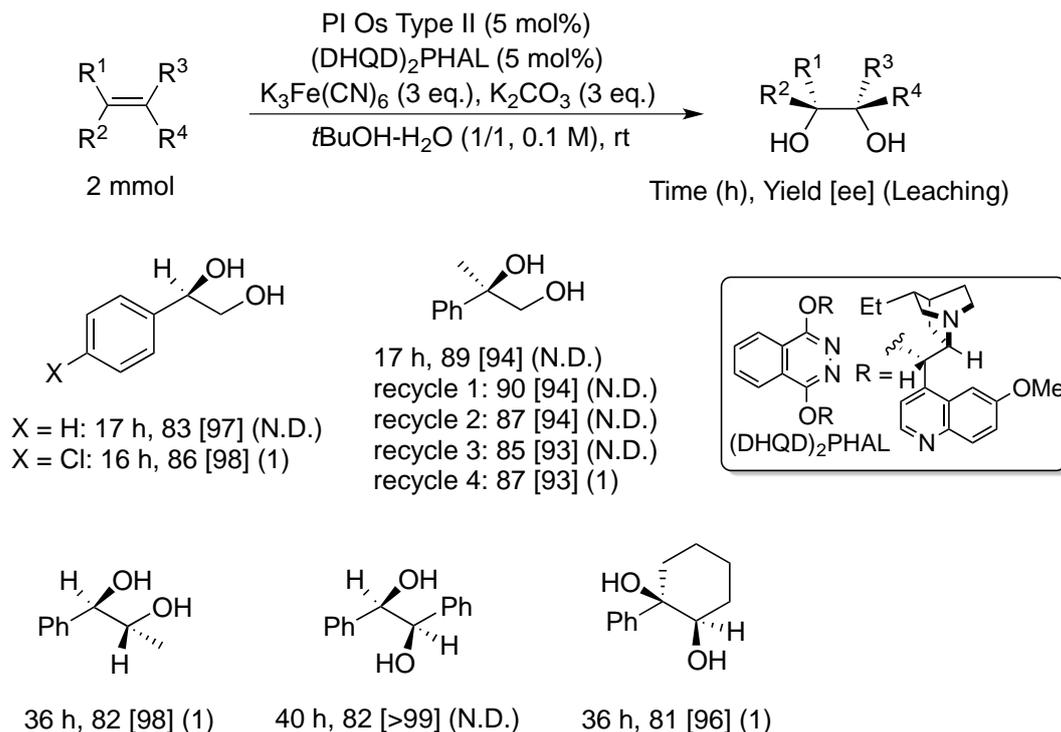


図9 PI Os II 型触媒を用いた不斉ジヒドロキシル化反応

2-3. 工業的実用化の実証—カンプトテシン中間体の合成

これまで開発してきたオスミウム触媒は、不斉ジヒドロキシル化反応において単純なオレフィンに対して系中のオスミウムの溶出を抑え、高収率、高エナンチオ選択的に対応するジオールを与えた。しかしながら、一般的に医薬品中間体は複雑な構造を有している場合がほとんどであり、複雑な構造のオレフィンに対しても同様な結果を与えるかを検証する必要がある。また、これまでの検討における不斉ジヒドロキシル化反応のスケールは 2 mmol であり、実際の工業プロセスと比較して小さい。そこで、開発したオスミウム触媒の工業化における適用可能性を確認するために、オスミウム触媒を用いて実際の医薬品中間体を合成することにした。その医薬品中間体として、カンプトテシン中間体に着目した(図10)。カンプトテシンは、中国原生のカンレンボクの樹皮および幹から単離された化合物であり、強い抗がん作用を有している。しかし、カンプトテシンは、溶解性が低く有害な副作用を引き起こすという問題点があった。これらの問題点を解決するために、さまざまなカンプトテシン誘導体が合成されており、例えばグラクソ・スミスクラインのトポテカンや第一三共のイリノテカンがある。これらカンプトテシン誘導体の共通の構成因子であるジオール体の合成を、開発した固定化オスミウム触媒を用いて検討した。

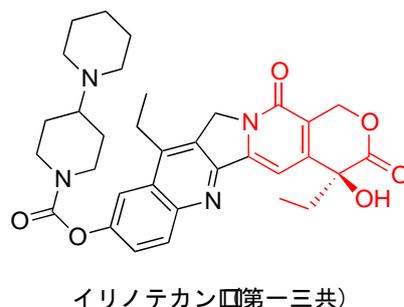
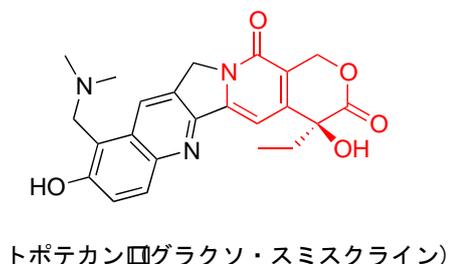
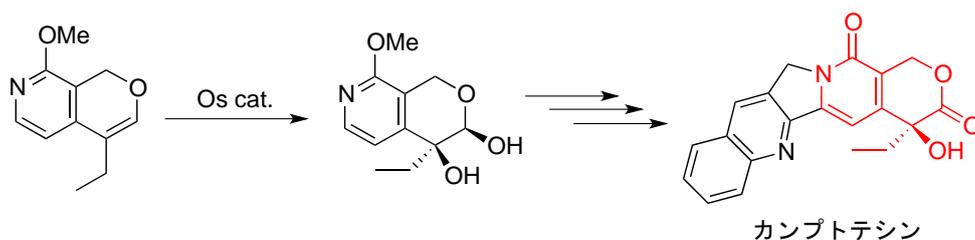


図 1 0 カンプトテシン中間体合成

始めに、PI オスミウム触媒を用いて 10 mmol スケールでカンプトテシン中間体合成を検討した(図 1 1)。5 mol%の PI オスミウム触媒存在下、キラル配位子として(DHQD)₂PYR 5 mol%、再酸化剤としてフェリシアン化カリウム 3 当量、反応促進剤としてメタンスルホンアミド 1 当量を用い、t-ブタノール/水中、10 mmol のオレフィンを反応させた。その結果、収率 92%で目的のジオール体を与え、オスミウムの溶出は 1%であった。また、TEMPO でアルコールの酸化を行い、得られた化合物のエナンチオ選択性を測定したところ、86%であった。この値は、四酸化オスミウムを用いたときとほぼ同じ値であった。以上の結果から、PI オスミウム触媒は、カンプトテシン中間体合成においてオスミウムの溶出を 1%に抑え、四酸化オスミウムと同程度の収率、エナンチオ選択性で対応するジオール体を与えることがわかった。さらに、オスミウム触媒の回収、再使用を検討したところ、収率、不斉収率を損なうことなく 2 回の再使用が可能であることが明らかとなった。

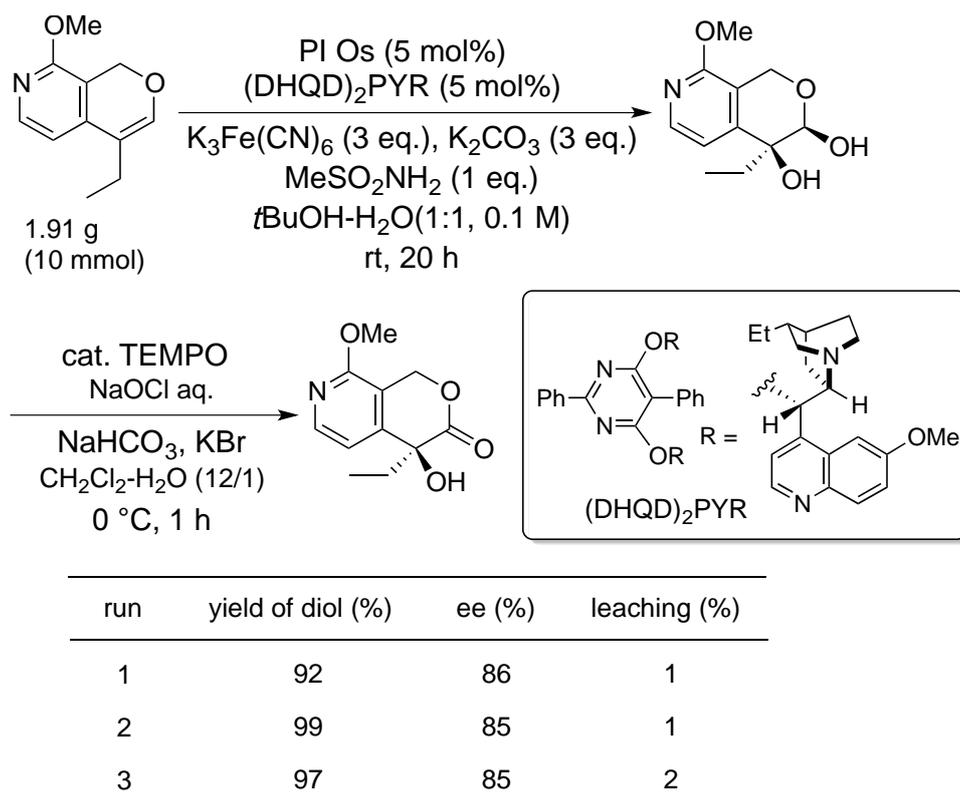


図 1 1 PI オスミウム触媒を用いたカンプトテシン中間体合成(10 mmol)

10 mmol スケールの検討結果を参考に、PI オスミウム触媒を用いたカンプトテシン中間体 1 mol スケール合成を検討した(図 1 2)。オレフィン 190 g に対して、10 mmol スケールと同じ反応条件で不斉ジヒドロキシル化反応を行ったところ、収率 97%、収量 234 g、不斉収率 85%で対応するジオール体が得られた。オスミウムの溶出は 1%であり、PI オスミウム触媒が 97%回収された。以上の結果から、1 mol スケールまでスケールアップを行っても、10 mmol スケールと同程度の結果を与えることがわかった。このことから、PI オスミウム触媒は実際の工業的プロセスにも応用が可能であると考えられる。また、本反応のリスクアセスメントを行い、環境影響評価、製造プロセス毎の安全性評価、関連法規の確認を実施した。

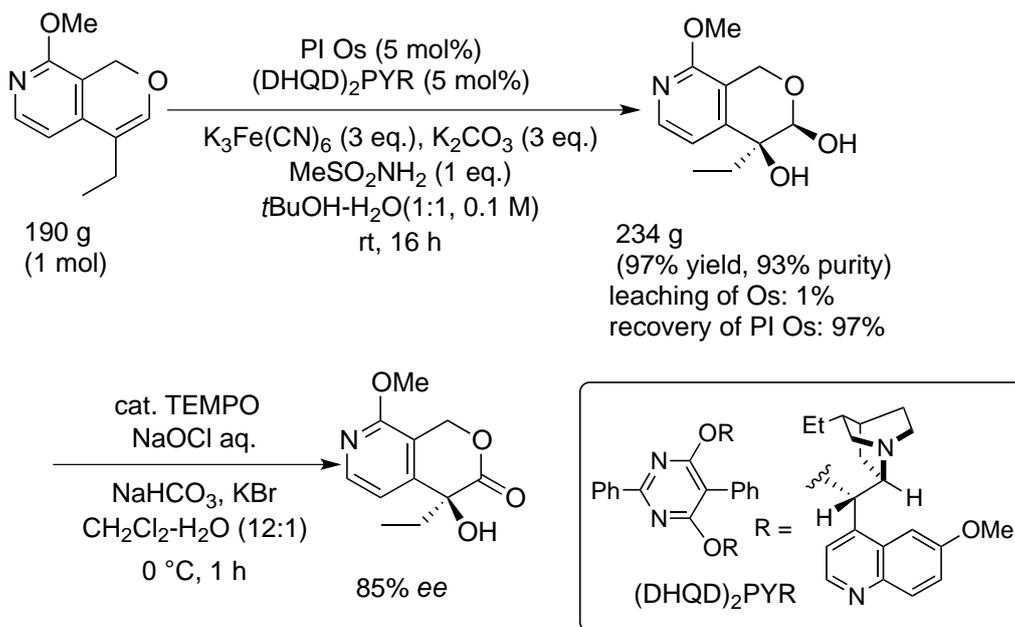


図 12 PI オスミウム触媒を用いたカンプトテシン中間体合成(1 mol スケール)

固定化オスミウム触媒は、触媒の合成に要する費用が大きくなるため、四酸化オスミウムと比較して使用時の合成コストが高くなるが、3 回以上再使用することで固定化オスミウム触媒は四酸化オスミウムを用いたときより低コストになることがわかっている。さらに、固定化オスミウム触媒は以下に挙げる長所を有している。

- ① 固定化オスミウム触媒ではオスミウムの揮発性が抑制されるため、四酸化オスミウムより取り扱いが容易である。このことは、反応スケールが大きくなればなるほど、有意性が高まる。
- ② サレン触媒を用いたエポキシ化反応経路でジオールを合成した場合、E-ファクターは 450 になる。一方、固定化オスミウム触媒を用いたジヒドロキシル化反応経路でジオールを合成した場合の E-ファクターは 200 となり、サレン触媒を用いた場合と比較して E-ファクターを低減できる。

3. 高分子固定化金、白金およびパラジウム触媒の開発

3-1. PI カーボンブラック金触媒

アルコールの酸化反応は、化成品や医薬品合成をはじめとする有機合成において最も重要な反応の一つである。しかしながら、従来のアルコールの酸化反応は、酸化剤として金属試薬（酸化クロムなど）を量論以上必要とすることから、グリーンな反応プロセスとは言えない。理想的な酸化剤は、大気中に豊富に存在する空気や酸素である。空気や酸素を用いると、反応後の副生成物が水のみであるため、非常にグリーンな酸化剤である。

ナノサイズまで微小化した金触媒は、酸素雰囲気下で酸化反応に対して高い触媒活性を示すことが知られている (Ishida, T.; Haruta, M. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, *46*, 715 4.). 小林

教授のグループらは、架橋部位を有するポリスチレンに金を担持させたところ、金がナノクラスターの状態でポリマー中に安定に存在し、担持された金(PI 金触媒)は酸素雰囲気下でアルコールの酸化を効率的に進行させることを見出している(Miyamura, H.; Matsubara, R.; Miyazaki, Y.; Kobayashi, S. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, *46*, 4151.). さらに、触媒活性を向上させるため、従来のポリマーに活性炭を加えることによって、金の凝集による触媒活性の低下を防いで担持量を増やした PI カーボンブラック金触媒が開発されている(Lucchesi, C.; Inasaki, T.; Miyamura, H.; Matsubara, R.; Kobayashi, S. *Adv. Synth. Catal.* **2008**, *350*, 1996.). しかしながら、この有用な酸化触媒はこれまで少量スケールでしか合成されていない。そこで、PI カーボンブラック金触媒の 100 g 合成を検討した。

PI カーボンブラック金触媒の合成スキームを図 1 3 に示す。図 4 に示した方法で、スチレン、エポキシドを有するスチレン、および TEG を有するスチレンの比が 1 : 1 : 1 で重合したポリマーを合成し、ポリマーと活性炭(CB)をジグリム(ジエチレングリコールジメチルエーテル)中で混合し、0°C下で水素化ホウ素ナトリウム、クロロトリフェニルホスフィン金の順に加え、室温に昇温して 3 時間攪拌した。攪拌後、ジエチルエーテルを滴下することでコアセルベート化を行い、ろ過で触媒を回収し、洗浄、乾燥することによって、MCカーボンブラック金触媒を合成した。得られた MCカーボンブラック金触媒を 140°C、3 時間架橋反応を行い、洗浄、乾燥、粉碎を行うことで目的の PI カーボンブラック金を合成した。触媒に対する金の担持量は 0.23 mmol/g であり、活性炭を含まない PI 金触媒と比較して約 3 倍の担持量であった。STEM(走査透過型電子顕微鏡)による PI カーボンブラック金触媒の写真を見ると、金粒子がナノサイズでポリマー中に拡散している様子がわかる(図 1 4)。

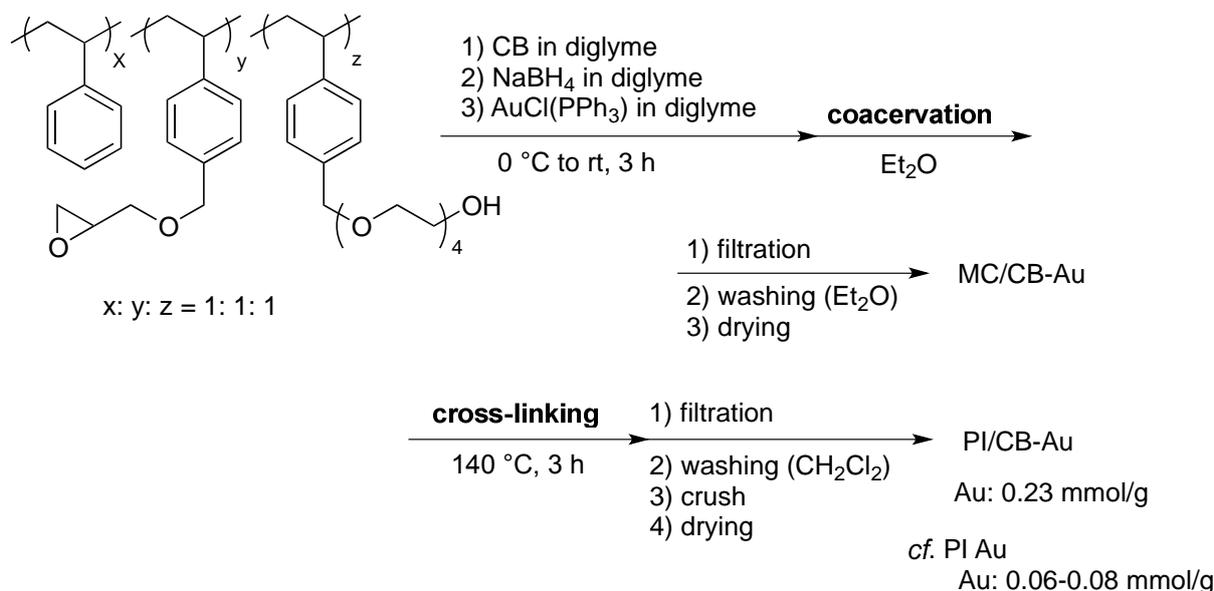


図 1 3 PI カーボンブラック金触媒の合成

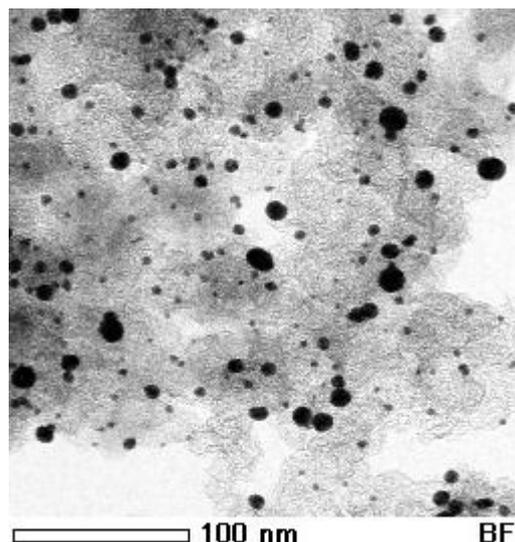


図 1 4 STEM による PI カーボンブラック金触媒の写真

合成した PI カーボンブラック金触媒を用いて、実用試験として 1-フェニルエタノールの酸化反応を行った(図 1 5)。1 mol%の PI カーボンブラック金触媒存在下、0.50 mmol の 1-フェニルエタノールに対して、塩基として炭酸カリウム 3 当量を用い、水/BTF(ベンゾトリフルオリド) 中、1 気圧の酸素雰囲気下、30°C、15 時間攪拌した。その結果、原料のアルコールは完全に消費され、収率 89%で対応するアセトフェノンが得られた。

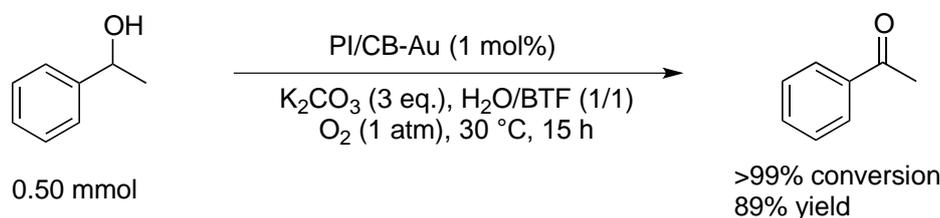


図 1 5 合成した PI カーボンブラック金触媒の実用試験

3-2. PI 白金/金触媒

PI カーボンブラック金触媒の開発に引き続き、アルコールの酸化に有効な固定化金触媒として、PI 白金/金触媒が小林教授のグループで開発されている(Miyamura, H.; Matsubara, R.; Kobayashi, S. *Chem. Commun.* **2008**, 2031.)。酸化反応に PI カーボンブラック金触媒を用いる際、塩基を加える必要がある。この塩基の添加は、第一級アルコールから選択的にアルデヒドを合成する際の妨げになる場合がある。PI 白金/金触媒は、2 種類の金属による協働効果によって、塩基を添加することなく酸化反応が進行し、第二級アルコールからケトンを合成できるだけでなく、第一級アルコールから選択的にアルデヒドを合成することができる。

触媒合成のスケールアップについて実証するため、PI 白金/金触媒の 100 g 合成を検討した。その合成スキームを図 1 6 に示す。PI カーボンブラック金触媒で用いた、スチレン、エポキシドを有するスチレン、および TEG を有するスチレンの比が 1 : 1 : 1 のポリマー

をジグリム中に溶かし、室温下で水素化ホウ素ナトリウム、およびクロトリフェニルホスフィンとヘキサクロロ白金酸ナトリウムの混合物を入れ、室温下 16 時間攪拌した。攪拌後、ジエチルエーテルを滴下することでコアセルベート化を行い、ろ過で触媒を回収し、洗浄、乾燥することによって、MC 白金/金触媒を合成した。得られた MC 白金/金触媒を 130℃、5 時間架橋反応を行い、洗浄、乾燥、粉碎後、さらに 140℃、5 時間加熱を行うことで目的の PI 白金/金触媒を合成した。触媒に対する金および白金の担持量は、それぞれ 0.04 mmol/g、0.05 mmol/g であった。

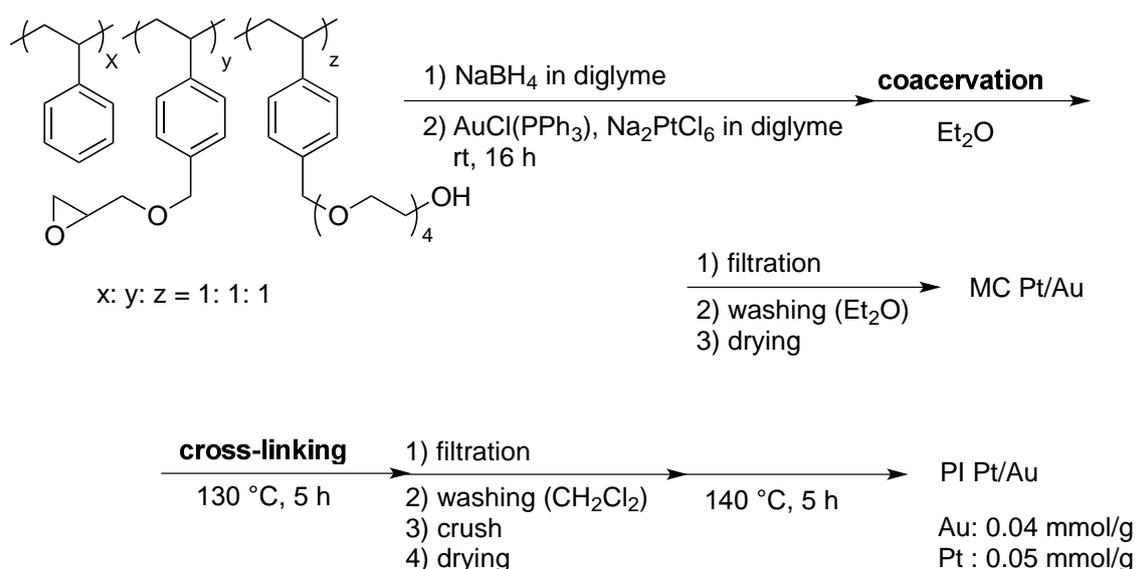


図 1 6 PI 白金/金触媒の合成

合成した PI 白金/金触媒を用いて、実用試験として 1-フェニルエタノールの酸化反応を行った(図 1 7)。2 mol% の PI 白金/金触媒存在下、0.25 mmol の 1-フェニルエタノールに対して、水/BTF 中、1 気圧の酸素雰囲気下、30℃、15 時間攪拌した。その結果、原料のアルコールは完全に消費され、収率 86% で対応するアセトフェノンが得られた。

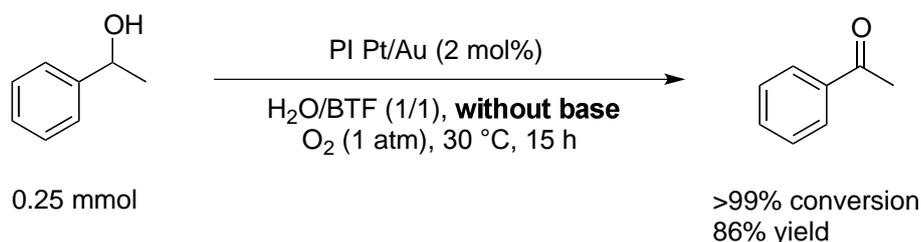


図 1 7 合成した PI 白金/金触媒の実用試験

3-3. PI 白金触媒

キノンは、生化学および有機化学において重要な構成因子の一つである(図 1 8)。例えば、補酵素の一つであるコエンザイム Q10 は、エネルギー代謝において重要な役割を果たし、最近では老化防止の健康食品として注目を集めている。また、DDQ は酸化反応、あるいは脱水素反応によく使われる有機反応試薬である。キノンを合成するのに最も簡便な

方法は、対応するヒドロキノンを酸化することである。この酸化反応に有効な触媒として、小林教授らのグループは PI 白金触媒を開発した(Miyamura, H.; Shiramizu, M.; Matsubara, R.; Kobayashi, S. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, *47*, 8093.)。この触媒は、酸素雰囲気下で様々なヒドロキノンあるいはカテコールを、*p*-キノン、*o*-キノンへとそれぞれ変換することができる。

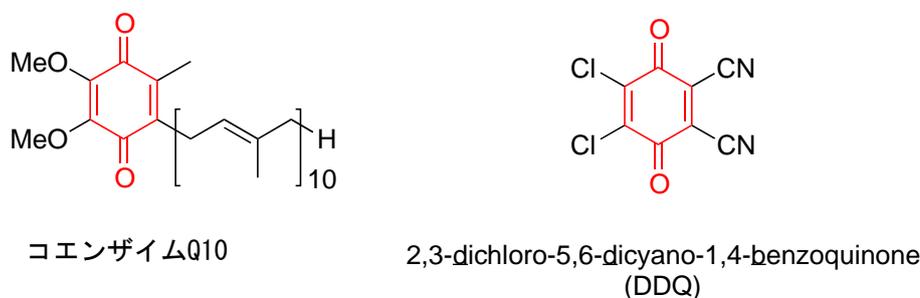


図 1 8 キノン構造を有する補酵素および有機試薬

触媒合成のスケールアップについて実証するため、PI 白金触媒の 100 g 合成を検討した。その合成スキームを図 1 9 に示す。スチレン、エポキシドを有するスチレン、および TEG を有するスチレンの比が 1 : 1 : 1 で合成されたポリマー 104 g をジグライムに溶解させ、室温下で水素化ホウ素ナトリウム 2.8 g、およびヘキサクロロ白金酸ナトリウム 4.1 g の THF 溶液を滴下した。これらの操作をもう一度繰り返し、ジエチルエーテルを滴下することでコアセルベート化を行った。ろ過で触媒を回収し、洗浄、乾燥することによって、MC 白金触媒を合成した。得られた MC 白金触媒を 130°C、5 時間架橋反応を行い、洗浄、乾燥、粉碎後、さらに 140°C、5 時間加熱を行うことで目的の PI 白金触媒を合成した(収量: 108 g)。触媒に対する白金の担持量は、0.111 mmol/g であった。

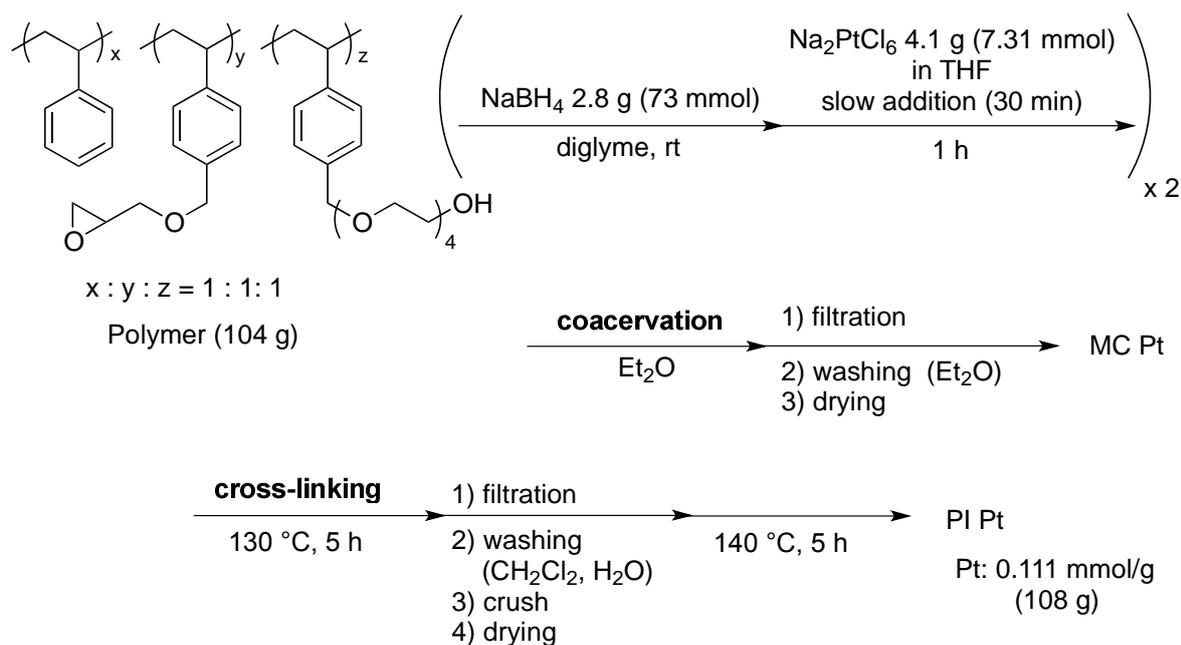
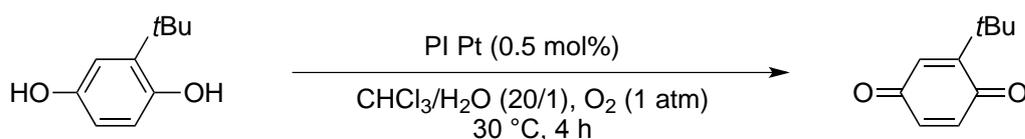


図 1 9 PI 白金触媒の 100 g 合成

合成した PI 白金触媒を用いて、実用試験として *t*-ブチルヒドロキノンの酸化反応を行った(表 2)。0.5 mol%の PI 白金触媒存在下、0.25 mmol の *t*-ブチルヒドロキノンに対して、水/クロロホルム中、1 気圧の酸素雰囲気下、30°C、4 時間攪拌した。その結果、原料のヒドロキノン は完全に消費され、収率 95%で対応するベンゾキノンが得られた。触媒は 92%回収され、白金の溶出は 0.29%と非常に低い値であった。また、触媒の回収、再使用を検討したところ、84%以上の触媒の回収率で、収率を損なうことなく 4 回の再使用が可能であった。

表 2. 合成した PI 白金触媒の実用試験



run	scale (mmol)	conversion (%)	yield (%)	recovery of cat. (%)	leaching (%)
1	0.250	>99	95	92	0.29
2	0.230	>99	95	85	0.31
3	0.195	>99	93	quant	0.38
4	0.195	>99	97	84	0.33
5	0.164	>99	92	86	0.45

3-4. PMI カーボンブラックパラジウム触媒

溝呂木-Heck 反応は、パラジウムを触媒とする炭素-炭素結合生成反応において鈴木-宮浦カップリング反応に次いで重要なカップリング反応である。一方、固定化パラジウム触媒はこれまで様々な固体担体を用いて数多く合成されているが、そのほとんどは鈴木-宮浦カップリング反応に応用されており、溝呂木-Heck 反応に応用されている例は少ない。そこで、溝呂木-Heck 反応に応用可能な固定化パラジウム触媒として、小林教授のグループで PMI(Polymer-Micelle Incarcerated)カーボンブラックパラジウム触媒が開発された。PMI カーボンブラックパラジウム触媒は、溝呂木-Heck 反応において従来の PI パラジウム触媒では達成できなかった、パラジウムの溶出を抑えることができる触媒である。PMI 触媒の概略図を図 20 に示す。ポリマー主鎖に対して疎水性部位(ベンゼン)と親水性部位(エポキシドと TEG)が分かれたポリマーを用いることで高分子ミセルを形成し、さらに金属を導入すると金属は疎水性であるミセル内部に取り込まれ安定化される。続いて、この高分子ミセルを加熱架橋することで PMI 触媒が合成される。また、活性炭を添加することによってパラジウムの担持量が増加し、従来の PI パラジウム触媒より触媒活性が高くなっている。

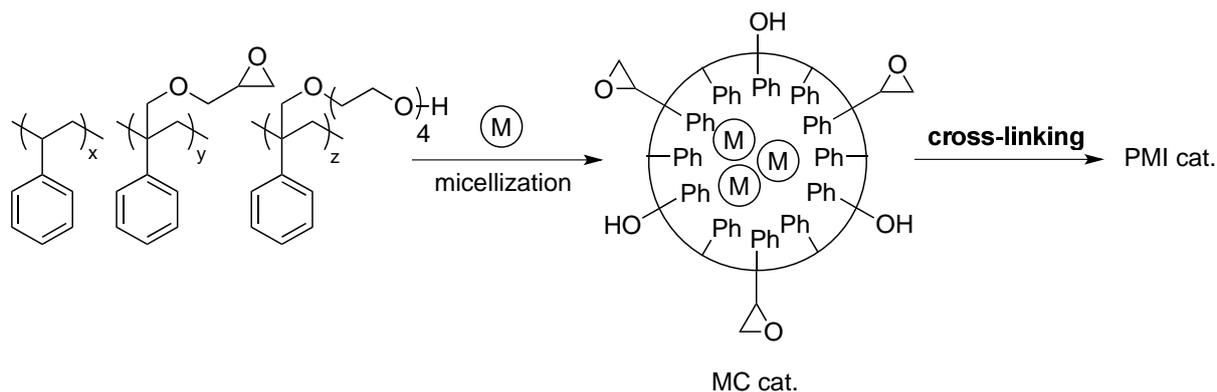


図 2 0 架橋高分子ミセル型触媒(PMI 触媒)の概略図

触媒合成のスケールアップについて実証するため、PMI カーボンブラックパラジウム触媒の 50 g 合成を検討した。その合成スキームを図 2 1 に示す。スチレン、エポキシドを有するスチレン、および TEG を有するスチレンの比が 85 : 9 : 6 で合成されたポリマー 25 g と活性炭 25 g を塩化メチレン中に混合し、酢酸パラジウム 5.0 g を入れ室温中 24 時間攪拌した。メタノールを滴下することでコアセルベート化を行い、ろ過で触媒を回収し、洗浄、乾燥することによって、収量 51.6 g で MC カーボンブラックパラジウム触媒を合成した。得られた MC カーボンブラックパラジウム触媒を 130°C、5 時間架橋反応を行い、洗浄、乾燥後、*N*-メチル-2-ピロリジノン(NMP)中 90°C、5 時間加熱を行うことで目的の PMI カーボンブラックパラジウム触媒を合成した(収量: 49.9 g)。触媒に対するパラジウムの担持量は、0.427 mmol/g であった。

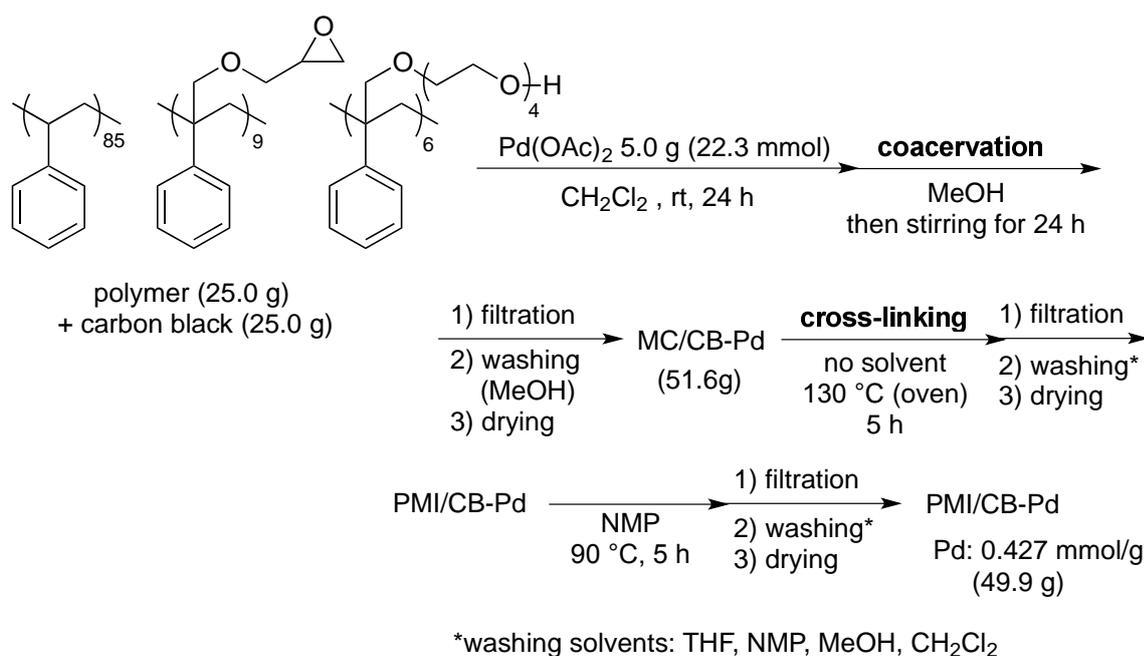


図 2 1 PMI カーボンブラックパラジウム触媒の 50 g 合成

合成した PMI カーボンブラックパラジウム触媒を用いて、実用試験としてヨードベンゼンとアクリル酸エチルとの溝呂木-Heck 反応を行った(図 2 2)。5 mol%の PMI カーボンブラックパラジウム触媒存在下、0.5 mmol のヨードベンゼンに対して、塩基としてトリエチルアミンを 2 当量、アクリル酸エチルを 1.5 当量入れ、NMP 中、100°C、24 時間攪拌した。その結果、収率 96%で対応するけい皮酸エチルが得られ、パラジウムの溶出は 1%と低い値であった。これらの結果は、20 g スケールで合成した触媒を用いたときとほぼ同じ結果であることから、50 g スケールでも小スケールるときと同等の触媒活性を有する触媒が合成できることがわかった。

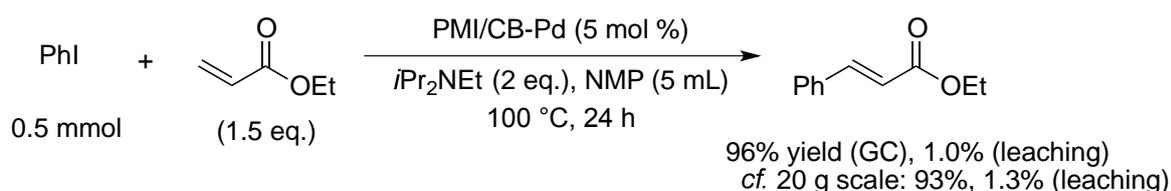


図 2 2 合成した PMI カーボンブラックパラジウム触媒の実用試験

4. その他の PI 触媒プロセス開発

PI 触媒による上記のグリーンプロセス開発を進める過程において、実用化の見込める以下の新規 PI 触媒プロセスを開発することができた。実用化に向けて今後さらなる研究開発を進めていく。

4-1. PI バイメタル触媒による選択的酸化反応プロセス

PI 触媒を活用することで、酸素を酸化剤として用いる酸化反応の選択性を高度に制御し、欲しい化合物を選択的に得ることを達成した。固定化する金属を二種類（バイメタル）とした場合に、金属の組み合わせの種類により、同じ一気圧の酸素雰囲気条件において同じ出発原料のアルコールからアルデヒドとエステルを作り分けられるプロセスを開発した。

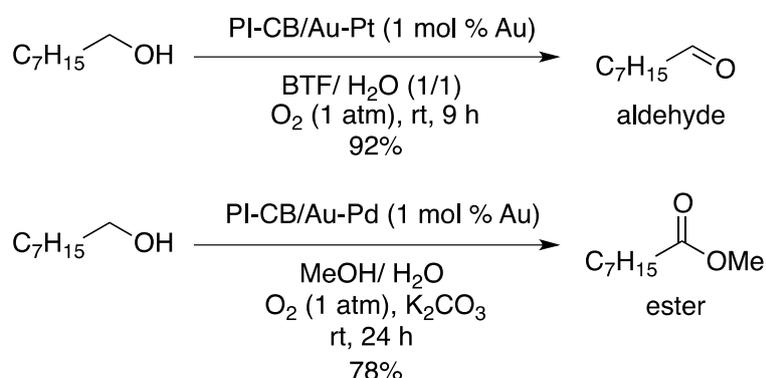


図 2 3 バイメタルの種類による酸化反応の選択性の制御

図23に示すように、バイメタルとして金と白金を組み合わせた場合と、金とパラジウムを組み合わせた場合において、同一のアルコールを原料として用いた場合であっても、前者ではアルデヒドが、後者ではエステルが選択的に得られた。また、金と白金の組み合わせの場合、添加剤として塩基を加えることでアルデヒドの代わりにカルボン酸を選択的に得ることもできた。これらの結果は、バイメタルの種類によって、たとえ一方の金属が同じ金であっても反応経路が変わり、異なる生成物が得られることを示している。金を含むバイメタルを用いる酸素酸化反応において、反応経路のコントロールが可能になったのは本成果が初めてである。また、アルコールから直接エステルの合成に成功した例は少なく、本手法の適用が期待される。

一方、これらの触媒を電子顕微鏡で観察したところ、触媒であるクラスターの平均サイズは、金と白金のクラスター及び金とパラジウムのクラスターいずれも約2ナノメートルとほぼ同じサイズであったが、二種類の原子の数の比率はそれぞれ異なっていることが明らかになった。この比率が反応経路の選択性の鍵である可能性が考えられる。

本反応は水系溶媒中で進行し、また、酸素分子を酸化剤とすることからグリーンな酸化プロセスであり、触媒はリサイクルが可能である。本プロセスは、アクア技術と固定化触媒技術が融合した、よりグリーン度の高いプロセスであると言える。類似の性質を有すると思われる白金とパラジウムにおいて選択性が切り替わることは極めて興味深い知見であり、酸化反応以外にも含めて様々な反応の反応経路の精密なコントロールを実現する可能性があると考えられ、環境にやさしい革新的な技術として今後の発展が期待される。

4-2. PI触媒を用いる二段連続反応の開発

ワンポットでの多段階連続反応は、単離精製の回数を少なくすることが可能であるためグリーンなプロセスである。PI触媒は、リサイクル可能なグリーン触媒であるが、これを多段階連続反応に用いることができれば、さらにグリーン度の高いプロセスを実現できることになる。そこで高分子担体の内部に複数の触媒を固定化し、二種類の反応を連続して行う反応を開発した。図24に示すように、金・パラジウム・ホウ素を固定化した高分子カルセランド型(PI)触媒(二次担体としてカーボンブラック(CB)を用いる)を開発し、酸化反応・Michael反応の連続反応を行ったところ、1気圧の酸素雰囲気下、30度という穏やかな反応条件で反応が高収率(>95%)で進行することが明らかになった。一段階目の酸化反応は、有毒な金属酸化剤ではなく分子状酸素を酸化剤として用いる環境にやさしい酸化反応である。また、この触媒も水系溶媒中で使用が可能であり、アクア触媒と固定化触媒両方の利点を有するものである。

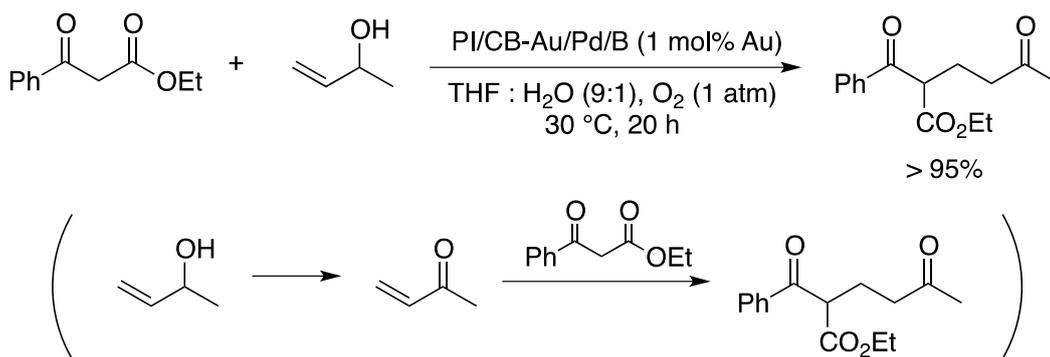


図 2 4 PI 法による二段階連続反応

4-3. PI 触媒を用いるアミド結合生成反応

一方、同じく PI 法を用いて、水系溶媒中においてアルコールとアミンから三段階の反応を経てワンポットでアミド結合生成反応が可能であることを見いだした。アミド結合は、生体内のタンパク質やナイロン等の化学繊維に含まれる最も重要な結合の一つである。タンパク質の構成成分はアミノ酸であり、小さなアミノ酸の分子同士がアミド結合を生成することで、巨大分子であるタンパク質の構造が組み上がる。ナイロンはポリアミド合成繊維で、構成成分が全てアミド結合により連結した構造を有している。このアミド結合を人工的に構築する場合、原料であるカルボン酸とアミンから縮合剤を用いて合成する方法が一般的である。しかしながらこの方法では縮合剤由来の大量の廃棄物が発生するため、より環境にやさしいアミド結合の構築方法の開発が望まれている。このような取り組みはこれまでも行われているものの、触媒活性や選択性が低い問題があり満足な手法は開発されていなかった。

今回、金ナノ触媒あるいはこれと鉄、ニッケル、コバルトのナノ粒子を組み合わせることで、アルコールとアミンからアミド結合を生成する強力な手法となることを見いだした (図 2 5)。

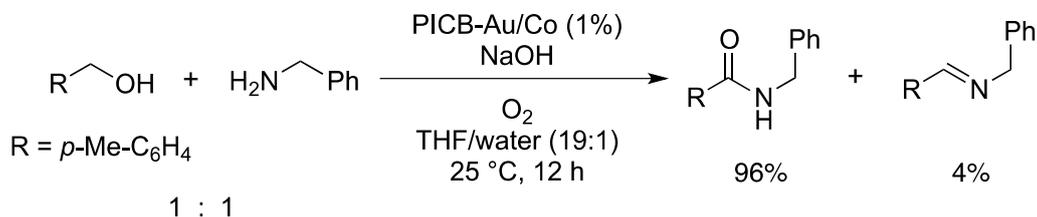


図 2 5 アルコールとアミンを原料とするアミド生成反応

通常のアミド結合の構築法ではカルボン酸とアミンを原料として用いるが、本方法ではカルボン酸の代わりにアルコールを原料として用いることができる。アルコールは入手容易な汎用原料であり、本反応系ではこれを用いて反応系内で酸化とアミド結合生成を一度に行うことができる。金とコバルトのナノ粒子を担体である PI/CB に取り込ませ、一気圧

の酸素もしくは空気を用いて、アルコールの一種である 4-メチルベンジルアルコールとアミンの一種であるベンジルアミンを図に示す反応条件で混合すると、96%と高い収率で反応が進行し、アミド化合物が生成した。予想された副反応もほとんど起こらず、目的物への選択性が高い反応であることがわかった（図 2 6）。反応温度は 25 度と温和であり、触媒量も基質に対してわずか 1%で十分であり、しかも触媒のリサイクルが可能であることから、本方法は強力であると同時に環境にやさしい合成方法でもある。また、コバルトの代わりに鉄やニッケルを用いても同様の効果を得ることも明らかとなった。一方で、これまでの本反応における触媒開発において問題であった、触媒活性と選択性の低さを克服することができた。さらに本手法は基質一般性が高く、多種類のアルコールやアミンに適用できることも明らかになった。例えば市販のアンモニア水中のアンモニアが直接使用できるのも本手法の大きな特長である。

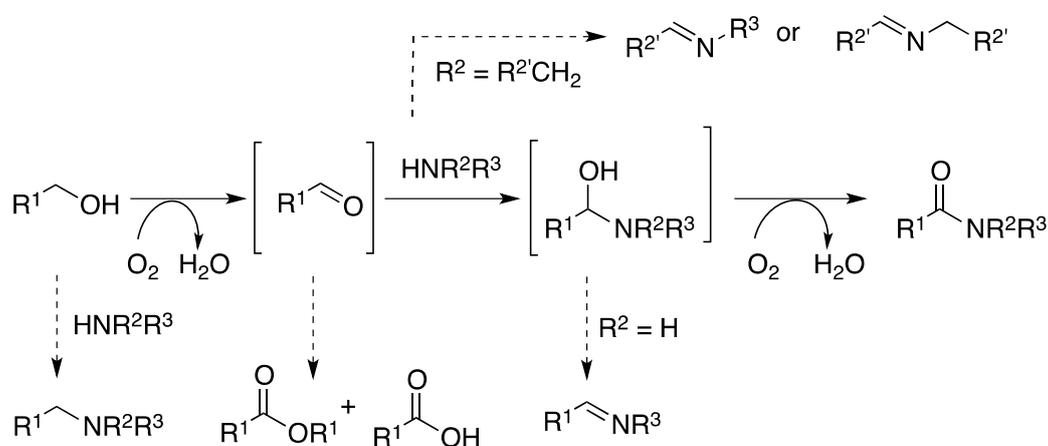


図 2 6 アミド結合の生成経路

本成果は、金とコバルト、鉄、ニッケルというナノ粒子の新しい組み合わせによって新たな触媒活性を見いだすことが出来た点において、有機合成化学・ナノテクノロジー・触媒の分野に新しい知見を与えたのみならず、アミド結合という基本的な結合の形成において長年行われてきた手法から新しい方法への転換の可能性を大きく広げたことで重要な意義があると考えられる。また、コバルト、鉄、ニッケルのような安価な金属との組み合わせが可能という点については実用化の面から非常に興味を持たれる。本技術は、環境にやさしい革新的な技術として今後の発展が期待される。

5. 結論

以上、本テーマは工業的に利用可能な高分子固定化触媒を開発することを目的として、高分子カルセランド型触媒の技術を応用した固定化オスミウム、金、白金、およびパラジウム触媒の開発およびスケールアップ合成を行った。さらに今後の実用化の見込める新規 PI 触媒の開発を行った。成果をまとめると、以下のようになる。

固定化オスミウム触媒について

- (1) 揮発性を抑え、取り扱いが容易な PI オスミウム触媒を開発し、スケールアップとして触媒を 100 g 合成した。
- (2) 耐溶剤性を強化し、PI オスミウム触媒よりオスミウムの溶出を抑えた PI オスミウム II 型触媒を開発し、スケールアップとして触媒を 100 g 合成した。
- (3) 工業的実用化の実証として、PI オスミウム触媒を用いて医薬品であるカンプトテシン中間体の 1 mol 合成を検討し、オスミウムの溶出を 1% に抑え、高収率でカンプトテシン中間体を与えた。

固定化金、白金、およびパラジウム触媒について

- (1) 従来の PI 金触媒に活性炭を加えることで、金の担持量を増やし、触媒活性が増加した PI カーボンブラック金触媒をスケールアップし、100 g 合成した
- (2) 金属間の協働効果で、酸化反応に必要な塩基を加えることなく反応が進行する PI 白金/金触媒をスケールアップし、100 g 合成した。
- (3) ヒドロキノンから有用性の高いキノンを合成できる酸化試薬である PI 白金触媒をスケールアップし、100 g 合成した。
- (4) 炭素-炭素結合形成反応として有用な溝呂木-Heck 反応を進行させる PMI カーボンブラックパラジウム触媒を開発し、スケールアップとして触媒を 50 g 合成した。

新規 PI 触媒について

- (1) 金を用いるバイメタル触媒において、金属の組み合わせの種類により、同じ出発原料のアルコールからアルデヒドとエステルを作り分けられるプロセスを開発した。
- (2) 金・パラジウム・ホウ素を固定化した PI 触媒を開発し、酸化反応・Michael 反応の二段階連続ワンポット反応を高収率において達成した。
- (3) 金ナノ粒子と鉄、ニッケル、コバルトのナノ粒子を組み合わせることで、アルコールとアミンからアミド結合を生成するプロセス開発を達成した。

Ⅲ.2 個別テーマの成果

Ⅲ.2.3 革新的酸化プロセス基盤技術開発（産総研G）

Ⅲ.2.3.①多官能性基質の酸化技術開発（昭和電工、産総研）

（1）最終目標達成状況

最終目標	達成状況	達成度
研究開発目標として、反応率 80%以上、選択率 90%以上、用途面としては半導体封止材としてユーザー配布可能なレベルを目標とする。	反応率、選択率とも目標である 80%以上は達成でき、精製時の溶媒留去後に、反応基質へのタングステン等の金属分の混入 0.1wt%以下は達成することが出来た。安全面はキレート処理、精製面は吸着剤処理等により、純度、収率を両立できる工業的製造法を確立し、実際に 1000 リットルスケールでの試作品について、ユーザーへのサンプル配布を行うレベルにまで仕上げる事が出来た。	◎

(2) 成果の詳細

①多官能性基質の酸化技術開発（昭和電工、産総研）

1 目的に照らした達成状況

半導体封止材に用いられる樹脂として、耐光性、耐熱性、絶縁特性という硬化後の特性に加え、封止する際に低粘度であり、かつ硬化収縮も小さいという特性も求められている。この物性を達成するために、IC 封止材としてバランスが優れているといわれている 3,3',5,5'-テトラメチルビフェノール-4,4'-ジグリシジルエーテルをターゲット化合物として選定した。この化合物を合成するために、対応する 3,3',5,5'-テトラメチル-4,4'-ビフェノールを原料にして、酢酸アシルを用いて貴金属触媒によりアシルエーテル化した後、本プロジェクトで絞込みを行った金属（タングステン）触媒-添加剤-四級アンモニウム塩の三元系分子触媒を用いてエポキシ化を行う技術を確認することが出来た。

ビフェニル骨格を持つことにより、精製を再結晶により行うことが出来、金属触媒との分離、原料、中間体の分離回収も容易であり、複数回のリサイクル実験を通して本プロジェクトで目標とした反応率 80%以上、選択率 80%以上についてクリアすることが出来た。

更に工業的な製造法の検討を行うために、2000L での外部試作器を用いてスケールアップ試験を行った。第一回目の試作では触媒活性化時に過酸化水素の異常分解による酸素濃度が上昇したことと、四級アンモニウム塩との分離がうまくいかず、加熱時の変色が大きいという品質上の問題が起きた。このため、ラボでの検討に戻り触媒の調製条件、過酸化水素の投入方法、吸着剤の処理方法を最適化することにより、反応時の安全面、製品としての品質上問題ないレベルまで向上させることが出来た。

この処方により、実際に 2000L の試作も成功し、得られたサンプルについて封止材用樹脂としての評価を進め、エピクロロヒドリンを原料に用いた現行法の樹脂と比較して、外部機関での評価で使用時の使い勝手、機械物性、短期電気絶縁特性において、同等という確認を行うことが出来た。

更に、複数のユーザーでの長期絶縁信頼性試験において、現行品よりも高い評価結果を得ることが出来た。

三官能性以上の基質についても、反応転化率、触媒との分離についても検討を進め、ラボでの検討評価についてはある程度の目処をつけることが出来た。

製造コストについては更なるコストダウンが必要ではあるものの、外部での性能評価が良好であり、本成果は本研究開発の目的である、化学品等の製造プロセスにおけるシンプル化、クリーン化、原材料・資源の多様化、さらに、廃棄物の減容化、容易なりサイクル等を実現し、産業競争力強化、国際規制の先取りを図って、将来にわたっても持続的に化学品等を製造する技術開発を達成できたと考えている。

2 研究の背景、目的

半導体封止材に用いられる樹脂には、耐光性、耐熱性、絶縁特性という硬化後の特性に加え、封止する際に低粘度であり、かつ硬化収縮も小さいという特性も求められている。このような性質を持つ樹脂としては、透明性が必要とされる LED 封止材に一部シリコン樹脂が用いられているが、それ以外はエポキシ樹脂が用いられている。特に半導体封止分野では無機フィラーを高充填するために、無機フィラーとの密着性が問題となり、脂環式エポキシ樹脂ではなくグリシジルエーテル型のエポキシ樹脂が一般に使用されている。

グリシジル型のエポキシ樹脂の工業的製造方法は、エピクロロヒドリンを原料として製造されており、フェノールまたはアルコール性水酸基にエピクロロヒドリンを付加させて製造する方法であるが、この方法では、水酸基が β 位に付加する反応の比率が高いという問題がある。特に脂肪族アルコールの場合には生成する水酸基と原料が同じアルコール性水酸基であり、両者の反応性の差が少ないことから、更にエピクロロヒドリンとの反応が起こり、前述のように塩素系の不純物が非常に多く混入した生成物しか得ることが出来ない。

エピクロロヒドリンを原料に用いた場合には塩素化合物の副生物の生成は避けられないが、反応時、脱塩酸時に極性溶剤を使用して付加時の選択性、脱離反応速度を上げて副生物の生成を抑えるだけでは十分でなく、分子量が低い液状エポキシ樹脂で蒸留により精製を行っている。このため構造に著しく制限を受けるのと、更にエポキシ化合物の二量化を避けるために過剰のエピクロロヒドリンを用いる必要があり、リサイクル時の安全面や製造コスト等の問題が出てくる。

このようなエポキシ樹脂中に含まれる塩素不純物は、無機の加水分解性塩素は無論のこと、有機塩素であっても高温・高湿下で脱離し、無機塩素を生成する。有機塩素からの無機塩素の生成は硬化促進剤にも影響され、イミダゾール系促進剤は塩素が脱離し易く、リン系促進剤は塩素が脱離し難いということがあり、配合によって性能に影響を与える。また、塩素イオンを捕捉するイオン捕捉剤が開発されてはいるが、配合系が必要以上に複雑になり、新たな問題点を引き起こす場合もある。

そこでエポキシ樹脂の絶縁特性を改善するためにハロゲンフリーで合成するとともに、それ以外に必要な特性を実現するために精緻に分子設計された内部骨格と、多官能化された架橋系を分子内に組み込んでいく必要がある。このような背景のもとに、内部骨格で高性能を実現した複数の二重結合を持つ化合物を酸化して多官能エポキシ化合物を製造する技術開発の確立をめざした。生成物として得られる多官能エポキシ化合物は加水分解を受ける機会も多く、開環生成物が副生成物として生成し易い。そこで、加水分解反応を抑えつつ、高収率でエポキシ化合物を与える反応系を開発する必要があり、今回のプロジェクトではこれに対応したプロセス開発を行なった。

Ⅲ.2.3.②高分子量基質の酸化技術開発（電気化学、産総研）

1. 本開発の目的

新規触媒技術に基づく過酸化水素による酸化反応を用いて、“高分子量基質（ポリマー）の酸化技術”の開発（オレフィン性二重結合を有するポリマーへの官能基（エポキシ基）導入）及びそのプロセス開発を進めた。

更に、その技術を応用することでポリマー改質剤及び粘・接着剤等の開発を行い、実用化への展開を図った。ポリマー改質剤は、エンジニアリングプラスチック、バイオプラスチック等の特性改質に、また粘・接着剤は、電子材料等への応用が期待される。

尚、当社では、ポリマー合成、ポリマー反応に関する基盤事業・技術及びポリマーの加工技術を保有しているため、原料からエポキシ化ポリマー（1次製品）、加工製品（2次製品）までの一貫した工程での事業展開が期待できる。

以上の内容は、図1にまとめた。

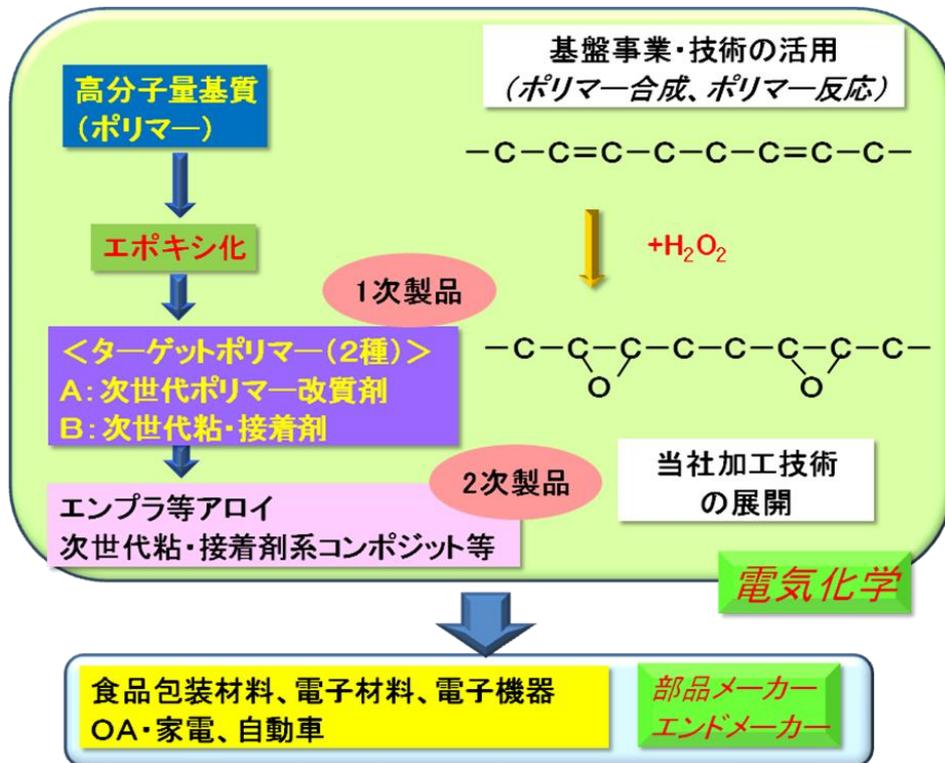


図1.ターゲットポリマーと事業展開

2. 目標及び達成状況

目標及び達成状況を表 2 に示す。触媒開発・最適化については、エポキシ化反応の反応率 80%、選択率 90%を達成し、反応の基本処方を確立した。最適プロセス検討においては、ベンチ合成に向けたプロセスを確立した。開発材料最適化については、ポリマー構造を最適化し、市場開発として社内ユーザーにて評価を行った。ベンチ準備・実証としては、接着剤の大量合成を行い、ベンチスケールでの処方を確立した。

表 2. 目標及び達成状況

(1) 個別研究開発項目の目標と達成状況

	目標	成果	達成度	今後の課題
1) 触媒開発 ・最適化	反応率80% 選択率90%	・左記数値達成 ・基本処方確立	◎	
2) 最適プロセス 検討	ベンチ合成に 向けた プロセス確立	高分子量 基質に適した プロセス確立	◎	
3) 開発材料 最適化	構造最適化、 市場開発	構造最適化、 社内ユーザー 評価確認	○	社内以外の ユーザー評価
4) ベンチ準備 ・実証	ベンチでの 大量合成	接着剤 合成法確立	○	改質剤の 合成法確立

◎ 大幅達成、○達成、△達成見込み、×未達

3. 開発の成果

図2に示す通り、触媒開発、材料開発、プロセス開発を行った。

3-1. 触媒開発

高反応率、高選択率で目的とするエポキシ化ポリマーを得る技術を開発することに成功した。

3-2. 実用特性評価、市場開発

得られたエポキシ化ポリマーの改質剤・接着剤等としての効果を確認することが出来た。相溶化剤、接着剤について、ポリマー構造の最適化(組成、分子量、その他分子構造等)を達成した。

ベンチ設備運転による接着剤のサンプル合成を行い、社内ユーザー評価として、ラボスケール合成品と同等の実用特性が発現することを確認できた。相溶化剤としては、HIPSとバイオプラスチックとのアロイ化に対して、エポキシ化ポリマーの適用に可能性があることが示された。

3-3. プロセス開発

ラボ試験で得た知見を基にし、反応条件を化学工学的視点から検討してプロセスデータ収集を行い、高分子基質反応に適したベンチ設備を建設した。

ベンチ設備を用いて、エンジニアリングデータの収集を行った。接着剤用ポリマーのエポキシ化について、所望のサンプルが得られ、また、反応条件を最適化出来た。

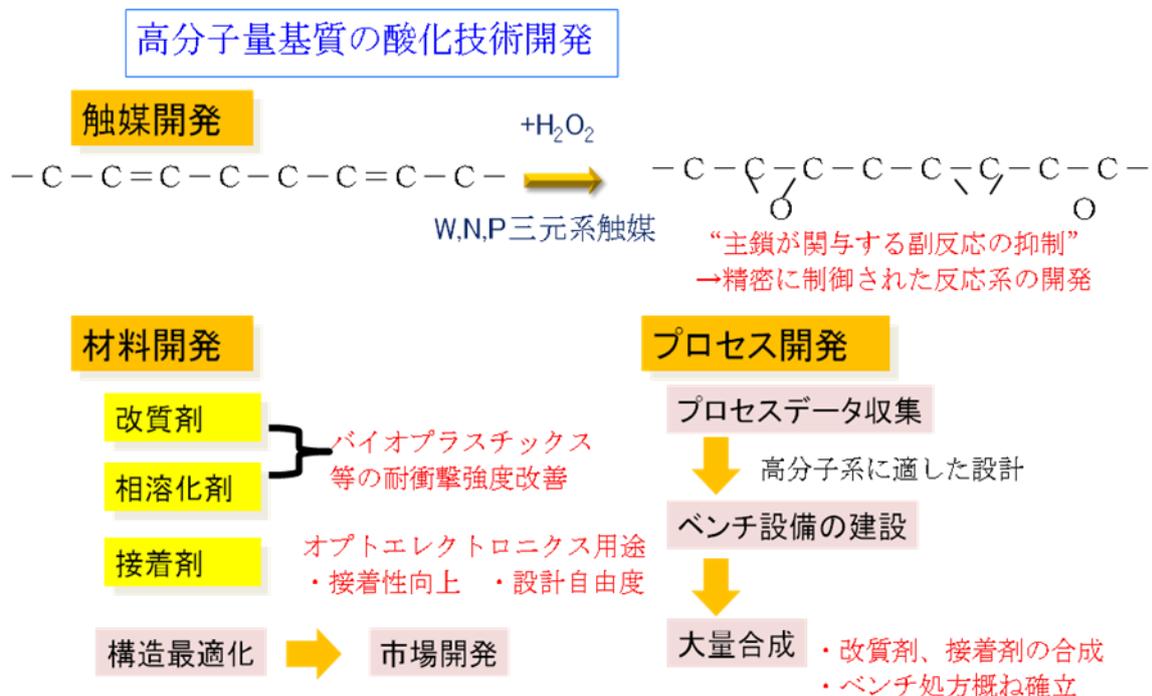


図2. 触媒開発、材料開発、プロセス開発の概要

III. 2. 3. ③易加水分解性基質の酸化技術開発（荒川化学、産総研）

弊社は長年にわたり松脂から蒸留によって得られるロジンから合成、変性、配合といった技術を駆使して、製紙用サイズ剤（紙のにじみ止め）、インキ用樹脂、粘着付与剤、合成ゴムの乳化剤、はんだフラックスなど多種多様な産業分野において展開を広げており、当社の環境対応製品群は全体の製品の40%を超えている（図1）。これら培ってきたロジンケミカル技術を石化原料へも応用し、身の回りの暮らしに必要な製品を作り続け、社会に大きく貢献している。また海外にも積極的にネットワークを広げており、欧米、中国などグローバル展開に向けて事業を拡大中である。

本プロジェクトでは、これまで当社で未活用資源であった松脂の低沸点成分である脂環骨格とオレフィンを有するテレピン油を機能化・高付加価値化することで新規なビジネス展開し、植物由来原料の多様化を目指すためにテルペン類のエポキシ化を実施する。

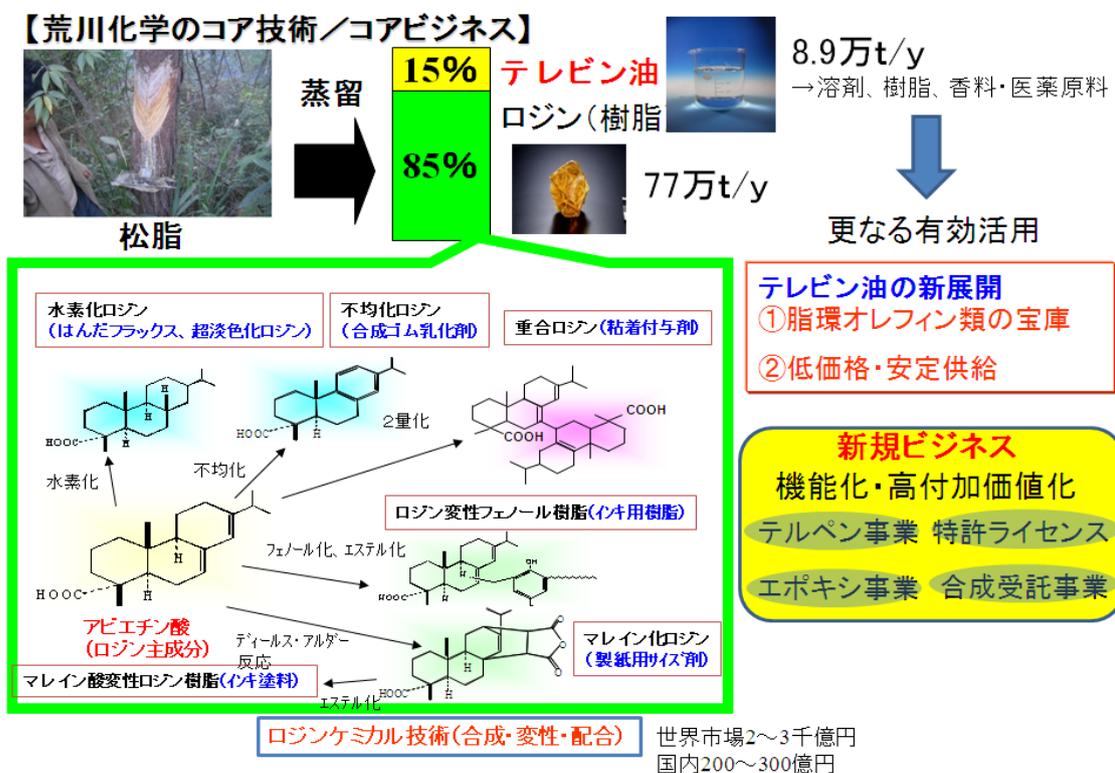


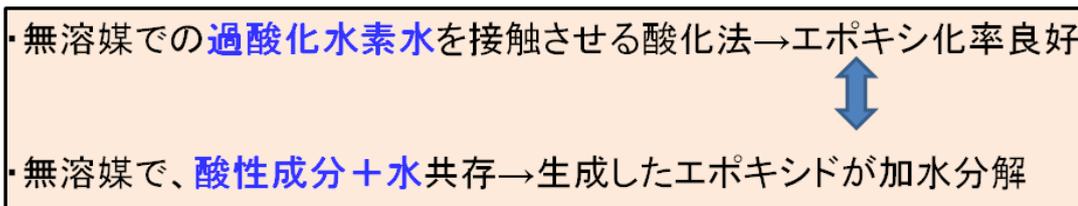
図 1. 当社のコア技術、コアビジネス

また電子材料分野において脂環エポキシ材料は透明性、耐水性、電気絶縁性などに優れ、塗料やコーティングだけでなく、封止剤など光学用途で多く使用されている。環境調和かつ競争力のある過酸化水素酸化技術・プロセスを開発することができれば日本の産業競争力を支える技術として化学産業界への貢献は多大なものとなる。原料面及び技術面から環境負荷を最小に抑えながら、様々なニーズに対応できるエポキシ材料を供給することが産業競争力の総合的強化につながることは間違いなく、「過酸化水素を用いるオレフィンの直接酸化技術」の早期の開発が期待されている。

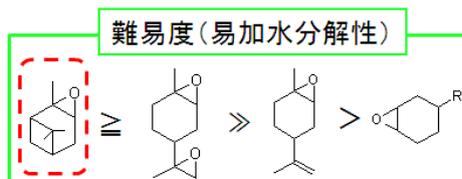
我々の過酸化水素酸化プロセスの目的はテレピン油の主成分である α -ピネン、リモネンをエポキ

シ化する実践的な触媒を開発し、安価で安全に製造できる工業化プロセスの開発につなげることである。しかし、テレピン油の主成分である α -ピネンのオキサイドは構造的にオキサイドの開環時に生じる3級カチオンが安定化されるだけでなく、隣接する4員環の歪が大きく、一般的な脂環式オキサイドに比べて酸・加熱条件でなくても室温で水と攪拌するだけで加水分解を受けやすく、骨格転位なども生じ非常にナイーブな構造特性を有する(図2)。

α -ピネン、リモネンをエポキシ化する実践的触媒の開発
 ⇒工業化プロセス開発へ(現行品よりもコスト安く、安全に製造)



目的物が**水のみでも壊れる**という、
 他のエポキシ化開発技術と異なる、“易加水分解性基質”特有の問題



α -ピネン:テレピン油の主成分、且つ難易度は最も高い

図2. 反応の難易度

このような課題に対して、当社は触媒開発と装置開発の2つのブレイクスルーにより目標値を達成できた。表1に各研究開発項目に対する成果と目標の達成度及び今後の課題を示した。本プロジェクトは過酸化水素酸化反応プロセス基盤技術開発に重きが置かれており、アンダーライン部分が必達すべき目標である。

表 1：目標と達成状況

目的と達成状況	目標	成果	達成度	今後の課題
触媒開発・改良	<u>(中間目標)</u> <u>反応率70%、選択率70%</u>	高効率添加剤の発見 反応率82% 選択率90%	◎	—
	特許出願	出願4件、国際出願1件	◎	権利化手続き
	コスト検証	コスト要因分析、安価	○	生産量及び 設備投資額
	探索的 製品性能評価	既存品より高純度品	△	サンプル提出 平成24年度中
	技術水平展開	他の易加水分解性基質へ適用 可	○	最適化条件 探索
	材料用途展開	石油由来より弾性率高い	△	用途開発 平成25年度中
スケールアップ 実用化研究	<u>(最終目標)</u> <u>反応率80%、選択率90%</u>	触媒開発+装置開発の 2つのブレイクスルー 反応率94%、選択率95%	◎	パイロット 設備設置
	<u>1トン/年の生産実証</u>	2トン以上/年可能	◎	
	除熱・攪拌 ベンチ装置の設計	反応の再現性、安全性を 備えた装置設計	◎	
	安全性評価	過酸化水素触媒系での 分解データ収集	○	各条件に応じて リスク評価
サンプル実証 工業的評価	工業品での反応性評価 最適化	異性体の反応性への影響を 解明	◎	各種エポキシド への適用最適化
	工業的製法の改善追求	操作性、安全性、高効率化	○	
	ベンチ試験	安全かつ再現性良好で実施可	◎	

◎大幅達成、○達成、△達成見込み、×未達

今後は実用化に向けて検討を進めていく。当社が考える実用化の定義は過酸化水素酸化技術で様々な基質を酸化でき、精製工程の簡略化の確立である。市場としては実現リスクと競争リスクを考え、少量多品種生産プロセスを考えている。このプロジェクトで触媒開発と装置開発の2つの技術を確立することができたが、少量多品種生産を目指すに当たり、精製技術の確立が必要となる。低沸点化合物は蒸留にて精製が可能であるが、蒸留困難な化合物は精製技術の確立が必要となるため、この精製技術の開発を検討していく。

III. 2. 3. ④難酸化性基質の酸化技術開発（JNC、産総研）

1. 研究成果について 目標の達成度

	目標	成果	達成度	今後の課題
1) 触媒・反応系開発	①エポキシ化固定化触媒: 反応率80%, 選択率90% 金属回収率90% ②ケトン類の酸化付加: 反応率80%, 選択率30%	①シリコン系固定化触媒: 反応率100%, 選択率90% 金属回収率90%以上を達成 ②反応系A; 反応率100%, 選択率90%以上を達成	◎	①生産性の改善 ②反応時間の短縮 酸化剤の使用量低減
2) LCD光学材料の開発	①実化合物のジエポキシド、 ジエステルの合成 ②プロトタイプサンプル ワーク	①固定化触媒、反応系Aを用 いて実化合物を合成・確認 ②品質評価、過酸化水素法 の優位性を確認	◎	他の実化合物への 応用
3) スケールアップ	①工学・安全性データの 収集 ②ベンチ設備による反応 生産量1~5kg/日	①工学・安全性データの収集 ②50Lベンチ設備による目標 反応成績、生産性の確認	○	実機スケールへの 対応

◎ 大幅達成、○達成、△達成見込み、×未達

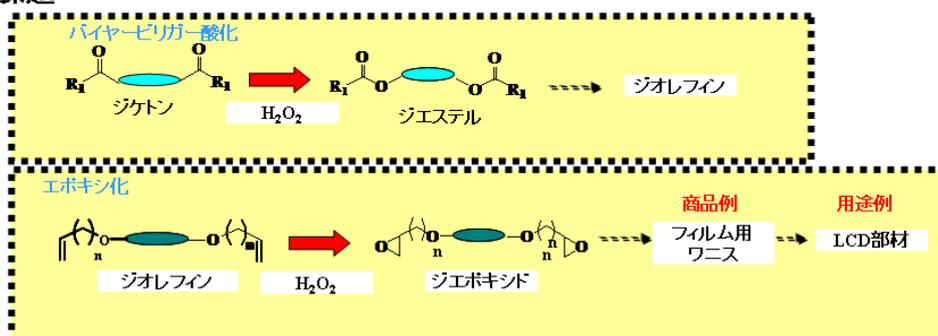
表.1 目標の達成度

研究目標

LCD 光学材料の開発において、従来の酸化技術に替わる環境に優しく、高品質材料の取得が期待できる過酸化水素酸化について、以下の2つを開発テーマとした。1. 「バイヤービリガー酸化技術の開発」では、芳香族ケトンの酸化によるLCD光学材料用中間体のジエステルを得る反応系の開発を行い、ラボからベンチにて安全性を確保しながらスケールアップを行い、最終目標の反応成績と生産量を達成した。2. 「LCD光学材料開発」では、LCD光学材料用ジエポキシドモノマーを得る反応で、シリコン系化合物を用いた固定化触媒を開発し、ラボからベンチにて安全を確保しながらスケールアップを行い、最終目標の反応成績と生産量を達成した。

2. 個別テーマ概要 研究課題、実用化の課題点

研究課題



実用化の課題点

- ・バイヤービリガー酸化
従来法: 過燐酸、暴走反応の危険=スケールアップが困難
- ・エポキシ化
従来法: m-CPBA法、大量の廃水・廃油が発生、工程が煩雑、操作時間が長い



過酸化水素を用いたグリーン酸化プロセスへ転換

研究課題

化学品製造プロセスのグリーン度（環境調和度）を示すe-ファクターは、目的の化学品の単位生産量に対する副生成物量および廃棄物量の比と定義されている。基礎化学品のe-ファクターが1桁以下であるのに対して、ファインケミカルは25～50、医薬品、電子材料用の精密化学品では100以上となっており、一部のLCD用材料に至っては500程度であることが知られている。

精密化学品は一品毎の生産量は少量であるが品数が多く、精製工程を含め多段階の工程により製造される場合が多いため、製造の際には廃棄物の積算量は増え、使用エネルギー量も結果的に多いものとなる。酸化反応は、原料化合物から官能基の導入において工業的に重要な反応であるが、これまでの従来法ではハロゲンを含む酸化剤や重金属酸化剤を使用する大きな環境負荷を生じさせる方法が用いられている。

本プロジェクトでは、過酸化水素水を用いた高選択的酸化反応の技術開発を目指し、プロセスへ転換によって廃棄物の大幅な削減を検討した。

3. 研究開発成果について バイヤービリガー酸化技術の開発

「バイヤービリガー酸化技術の開発」では、先ず LCD 材料用のモデル基質を用いて酸化反応系の開発を行なった。

反応系の開発では、各種添加剤、酸化剤をスクリーニングし、高活性かつ高選択率が得られるいくつかの反応系を見出した。モデル基質から LCD 用の実化合物を得る反応へ検討を移し、反応系 A が最も高反応率、高選択率であることを確認した。更に、温度、添加剤量の組成比および反応条件のブラッシュアップを行い、反応率 98%、選択率 92%と高反応率かつ高選択性が得られる反応条件を見出した。

ベンチスケールアップに向けて、反応熱量、発生酸素量等の工業的安全性を確認するデータを収集しながら、50L スケールまでスケールアップを段階的に実施した。ベンチスケールアップにおいては、安全性を最優先し、発生酸素量の抑制対策として反応剤を分割法で投入する方法を開発し、ベンチ設備で実施した。その結果、反応率 95%、選択率 83%の反応成績と、生産量能力として 1kg 以上/日を確認した。この結果、本研究開発における最終目標値（反応率 80%以上、選択率 80%以上）、生産能力 1kg/日以上を達成した。

本反応系を用いて得た LCD 材料向けのジエステルを中間体としての品質評価を行った。反応剤などに由来する不純物の影響がなく、高品質の中間体を得る方法として有効であることが分かった。

e-ファクター及び i-Messe 評価により、従来法の過蟻酸法と本反応系 A 法の環境負荷を比較した。その結果、廃水の大幅な削減を可能にし、従来法と比較して環境負荷が極めて低いことが示された。すなわち、廃水の e-ファクターにおいては約 10 であり、従来法に比べ 80%程度削減する事を可能とした。

以上の検討結果から、本反応系は LCD 材料基質のバイヤービリガー酸化反応に対して、環境負荷を低減させる有用な反応系を構築できた。

4. 研究開発成果について LCD 光学材料の開発

「LCD 光学材料の開発」においては、LCD 光学材料モノマーであるジエポキシドをターゲットに末端オレフィンの酸化エポキシ化反応技術の開発を行った。

エポキシ化反応の触媒として、高活性かつ高選択率が得られる回収可能なシリコン系化合物を担体とした固定化触媒を設計し、検討を行った。その結果、回収率 89% の高活性固定化触媒の得ることが出来た。

エポキシ化反応においては、触媒量、過酸化水素当量、反応温度、攪拌速度などの各種反応条件の適正化を検討し、LCD 光学材料用のジエポキシドを得る反応において、反応率 100%、選択率 90% 以上の反応成績が得られる方法を確立した。

実用化のステップとして、スケールアップのため安全性の確認のため各種データを採取し、50L スケールでのエポキシ化反応を実施した。その結果、反応率 100%、選択率 90% 生産量においても 1kg/日以上を確認した。この結果、本研究開発における最終目標値（反応率 80% 以上、選択率 90% 以上、生産能力 1kg/日以上を達成した。

本検討で得たジエポキシドを用い、最終目的となる LCD 材料製品の品質評価を行った。その結果、従来法である m-CPBA 法から得た製品と同等以上の優れた品質を確認した。特に 3 つの品質項目が優れており、本過酸化水素法は副生成物が少ないという特徴に優位性があるが証明された。e-ファクター及び i-Messe により、従来法である m-CPBA 法と本過酸化水素法の環境負荷を比較した。その結果、ハロゲン系溶媒を使用しない点、酸化剤の副生成物が水である点、さらに廃水量が極めて少なくなった点が、m-CPBA 法と比較して環境負荷が極めて低いことが示された。

以上の検討成果から、本プロジェクトで開発した過酸化水素法は難酸化性基質の酸化に対して環境負荷を低減させることが可能で、光学材料用に利用できる高品質のエポキシドを提供する有効な酸化技術であると考えている。

5. 波及効果

直接的効果として、難酸化性基質の酸化に関して、従来までは危険性が高い酸化剤（例えば過蟻酸）、高価な酸化剤（例えば m-CPBA）を必要としていたが、本開発技術が実用化された場合、危険性が小さく、高品質な材料を低コストで製造が可能となる。さらに、低環境負荷な過酸化水素水を利用できる本技術は、社会的・技術的に、大きなインパクトを与えるものであり、今後、様々な分野で技術開発が加速されることを期待している。

Ⅲ. 2. 3. ⑤過酸化水素を用いた反応系の基礎研究（産総研）

（1）最終目標達成状況

最終目標	達成状況	達成度
各社技術のスケールアップ、コストダウンのための高活性・高選択性触媒の開発。反応率 80%以上、選択率 90%以上	三元系触媒の改良により、4社の希望する基質をそれぞれ反応率 80%以上、選択率 90%以上で酸化可能な新規技術を開発	◎
難易度の高い要因を複数持つ基質に適応する高活性・高選択性触媒の開発。反応率 80%以上、選択率 90%以上	三元系触媒にさらに新規添加剤を組み合わせる処方をし、高難度の基質に対しそれぞれ反応率 80%以上、選択率 90%以上を達成	◎
従来の三元系触媒では対応できない複雑で難易度の高い基質の酸化について新規触媒を設計し、反応率 80%以上、選択率 90%以上	鉄触媒による高度エポキシ化、白金触媒による転位酸化、パラジウム触媒による高選択カルボン酸合成などを開発。それぞれ、反応率 80%以上、選択率 90%以上を達成	○

（2）成果の詳細

1. 個別研究開発項目の目標と達成状況（共同研究、再委託研究による成果を含む。）

産総研グループでは、⑤過酸化水素を用いた反応系の基礎研究として、以下三種類の最終目標を設定しそれぞれ目標値を大幅に達成した。

（1）各社要素技術への対応（平成 21 年度）では、従来の過酸化水素を酸化剤とし、タングステン錯体、四級アンモニウム塩類、及びアミノメチルホスホン酸からなる三元系触媒を用いる高選択酸化技術をベースに、これまで達成されていなかった困難な基質への適用に挑戦した。すなわち①多官能性基質への適用、②高分子量基質への適用、③易加水分解性基質への適用、④難酸化性基質への適用である。これら四種類の課題に対し、それぞれ企業一社が標的とする化学品・触媒技術を明確にした。これら課題とする反応について、産総研ではそれぞれ反応率 80%、選択率 90%を達成する高活性新規触媒を開発した。本技術開発が大幅に達成されたことで、各企業が個別の目標とする製品製造開発の土台となった点で、初年度に目標値を達成した意義は極めて大きい。平成 22, 23 年度は各社が平成 21 年度に開発した触媒技術を用いてベンチスケール検討およびコスト検討を行い、産総研はスケールアップやコストに伴う触媒の改良およびプロセスの理論的考察を通して企業四社と共に開発を推進した。特に、実践的なプロセスに耐える触媒へと初年度の触媒をさらに改良することを行った。

（2）高難度要因を複数持つ基質への対応（平成 21～22 年度）では、前記（1）項にて記述した四通りの要素技術を二種類以上複合して有する基質に対しての触媒技術開発を行った。本技術は企業がターゲット開発を行った結果、技術開発の必要性が再確認されたもので、（1）項と同様の意義を有するが難易度はさらに高く、（1）項で達成した要素技

術を複数含んでいることが特徴である。三元系触媒を各々の基質の特性に応じてさらに改良することで、反応率 80%、選択率 90%以上をそれぞれ達成した。また、本目標値を達成することで、企業の製品製造プロセスの開発に一層の加速がかかった。例えば多官能かつ高分子量な基質や易加水分解性かつ高分子量な基質を高効率に酸化することに成功した。

(3) 新規な過酸化水素酸化触媒の探索と開発（平成 21～23 年度）では、前記（1）および（2）で開発した三元系触媒では適用しにくい基質をターゲットに、三元系触媒に限らず幅広い触媒の選択肢の中から、過酸化水素酸化技術として高効率高選択率を達成する触媒の開発を行った。触媒技術としての有用性を示す基準として、反応率 80%、選択率 90%を目標に掲げ、鉄による易加水分解性スチレン誘導体の酸化、不飽和アルデヒドの酸化、三級アリルアルコールの転位酸化反応という三種類の反応を開発した。それぞれの代表的な基質に対して反応率 90%以上、選択率 90%以上を達成し、目標値を上回る有用な技術開発に成功した。本技術開発により、従来の過酸化水素酸化技術の基盤を拡大し、より基質の適用範囲を広げることに成功した。波及効果として、従来検討対象とし、各企業が開発した製品よりもさらに広い範囲の機能性化学品や香料・医薬品原料の製造へ期待ができる酸化技術と位置づけられる。現実には、鉄による触媒技術は新規の機能性材料メーカーとの共同開発を 2012 年夏から予定し、不飽和アルデヒドの酸化も特許のライセンス契約を含めた打ち合わせを進めている。

これにより、三元系触媒は種々の要素技術を体系化・融合化したものとなり、ファインケミカルズ等の現行製造プロセスをクリーン酸化プロセスへ転換できる基盤が整ったと言える。さらに、新たな基盤技術の礎となる可能性のある新規触媒の開発にも成功した。これらの技術は今後、過酸化水素酸化技術のさらなる拡充に大きく寄与できると思われる。

全体として、当初目標である反応成績および新規触媒の開発に成功し、基本計画は達成したと考えている。

2. 研究開発の背景、目的及び基本計画

我々の快適な生活に不可欠な各種化学品、特に機能性化学品は、製造時に大量の廃棄物を出すことでも知られる。特に、基礎化学品や精密化学品よりも、より複雑な化合物を合成する医薬品や電子材料用の機能性化学品を製造する際の廃棄物が多い。

製造時に排出される廃棄物の量の指標として最もわかりやすいものの一つにE-因子がある。E-因子とは目的物を1 kg作るのに出る廃棄物の量で、この値が0であることが理想である。廃棄物の相対的な比率は、付加価値の高い物質の製造ほど大きくなる。特に液晶などの電子材料の場合、E-因子が1000、すなわち1 kgの目的物を作るのに1000 kgもの廃棄物が生じるとも言われている。医薬品や電子材料などは市場価格も高く、廃棄物の処理に多少費用がかかっても利益が得られるため、E-因子の大きさは見過ごされてきた。実際に、一品種あたりの生産量は小さくても種類が多い精密化学品、医薬品や電子材料などから生じる廃棄物の総量は石油化学産業全体の半分以上を占めるとも見積られる。従って、E-因子が大きく廃棄物量の多い精密化学品、医薬品や電子材料の製造方法を環境にやさしい方法に変換することで、E-因子を劇的に小さくできる（図1）。

廃棄物の極小化による低環境負荷なプロセスの開拓

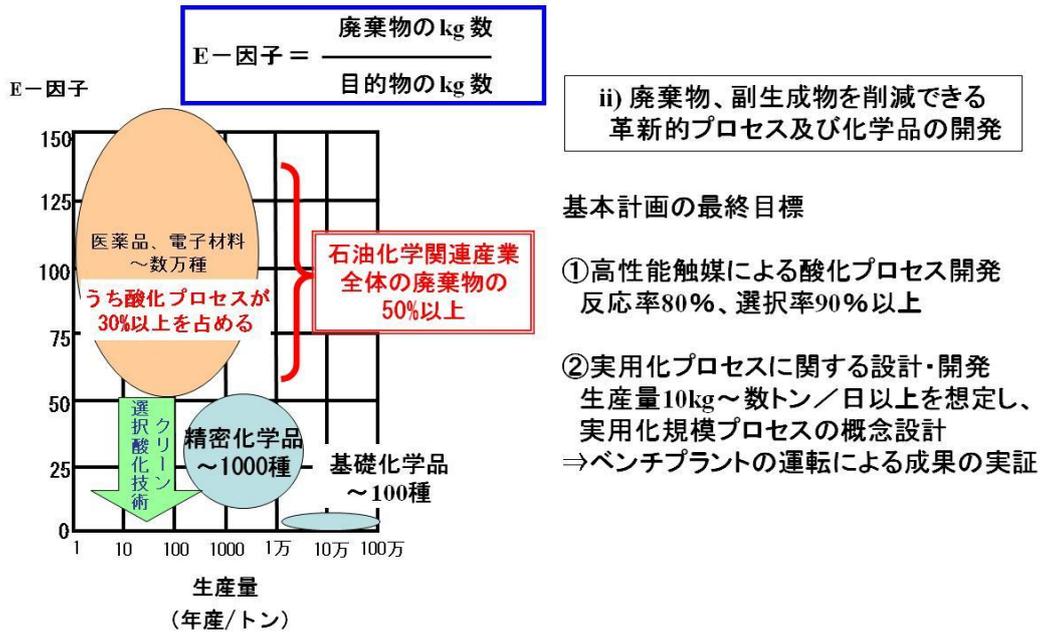
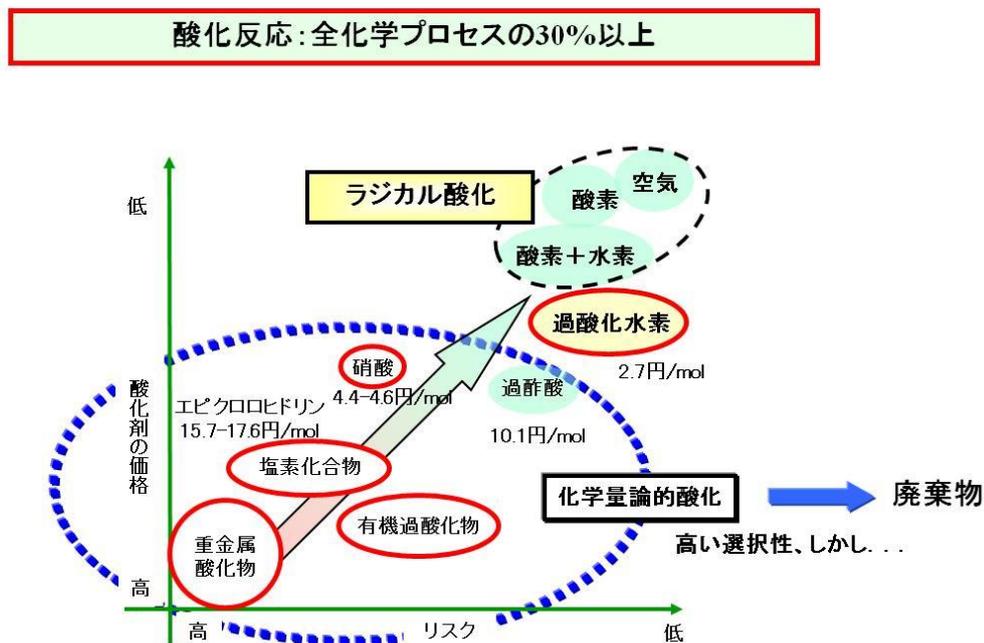


図 1. プロジェクトの概要

本 P J では、前述の観点から、機能性化学品および機能性化学品の原料となるモノマーにターゲットを絞った。医薬品や電子材料など精密化学品の製造プロセスにおいて、廃棄物、副生成物を削減できる革新的な酸化技術開発を行い、①高性能触媒による酸化プロセス開発において、反応率80%、選択率90%以上を達成するプロセスの開発、および②実用化プロセスに関する設計・開発を行い、生産量10 kg～数トン/日以上を想定し、実用化規模プロセスの概念設計、即ち同スケールでのベンチプラントによる成果の実証を行うことを最終目標とする。

酸化反応において、環境に最も負荷を与える因子のひとつは酸化剤である。クリーンな酸化技術の開発のためには、酸化剤に含まれる活性酸素の割合ができるだけ高く、且つ反応後の共生成物処理が比較的容易な酸化剤の選択が重要である。たとえば硝酸は工業的に大量に使われている酸化剤であり、コストも比較的安い、酸化反応を行う際に地球温暖化物質である亜酸化窒素を副生する。有機過酸化物は高効率かつ高選択的な一段階の酸化反応に極めて有効であるが、有効酸素含有率に乏しい。

酸化反応の重要性と問題点



酸素（空気）は環境に優しい理想的酸化剤であるが原料が二酸化炭素まで酸化されてしまう完全酸化（ラジカル反応）を抑えることが難しく、現状では、基礎化学品以外の高選択な酸化反応への適用が困難である。

酸素と同様にリスクの低い酸化剤として、過酸化水素が挙げられる。過酸化水素と分子触媒との組み合わせは、酸素などクリーンな酸化剤と固体触媒、ゼオライト系触媒、またはNHPI触媒の組み合わせに比べてバルクケミカルズの合成には不向きである。しかし、高効率高選択率を誇る反応であるために、より分子量が大きく、官能基数が多く、構造が複雑なファインケミカルズやスーパーファインケミカルズの合成に向いていることが特徴である（図2）。

図3では過酸化水素についてももう少し詳細に紹介する。過酸化水素（ H_2O_2 ）は無色透明な液体であり、国内での年間生産量は最近数年間で平均的に約20万トンと報告されている。主な用途は消毒、洗剤、工業的には半導体の洗浄や紙の漂白である。有機合成用途として考えた場合、水以外の副生成物が生じないことから、酸素と同様に環境に優しい理想的酸化剤と考えられる。このように過酸化水素は経済的かつクリーンな酸化剤であるが、それ自身の酸化力は弱く、石油化学由来のさまざまな化合物を酸化するためには、何らかの活性化が必要である。また50%以上の濃度の水溶液は爆発物として取り扱われるため、工業的には45%以下の濃度で使用し、何らかの要因によって過酸化水素濃度が高くなった場合には、速やかに水を添加して希釈することが必要である。

産総研では、クリーンな酸化剤として過酸化水素に注目し、その酸化力を飛躍的に向上させるいくつかの新しい触媒を発見してきた。開発した触媒のコンセプトと推定される反応機構について図4に示す。

過酸化水素について -酸化剤としての利用-



副生物が水のみクリーン酸化剤

但し、

- ・そのものの酸化力は弱い
- ・濃度50%以上は爆発物



45%程度以下で使用し、
触媒による活性化が必須

図 3. 過酸化水素について

過酸化水素酸化技術 -触媒の設計が鍵-

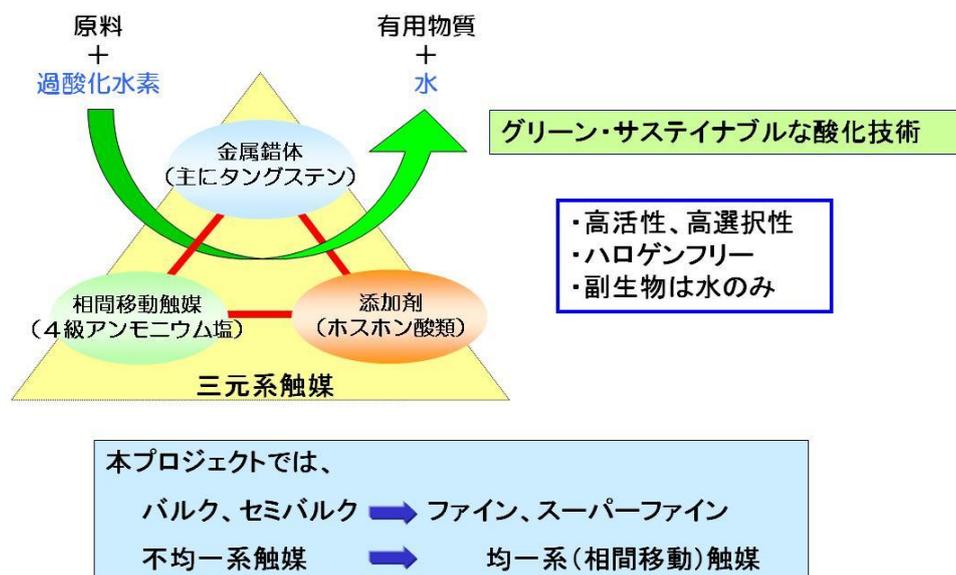


図 4. 過酸化水素酸化技術用の触媒

産総研では、過酸化水素を酸化剤とし、タングステン錯体、四級アンモニウム塩類、及びアミノメチルホスホン酸からなる三元系分子触媒を用いる酸化技術を開発した。開発した触媒は原料を高効率高選択的に酸化して目的とする有用物質を合成できるうえ、副生物は水のみである。本反応の大きな特徴としては、有機溶媒を使用せず、ハロゲンフリーな条件下でも高効率高選択的に酸化反応が進行する点である。本反応は過酸化水素を酸化剤

に利用するため、最も環境に負荷を与える酸化剤由来の共生成物が水のみである。加えて、触媒や反応系にハロゲン類（塩素など）を一切含まず、有機溶媒も基本的には使用しないため、グリーン・サステイナブルな酸化技術といえる。

反応メカニズムとして以下の様な機構が想定されている。すなわち、水相中で溶解しているタングステン酸の塩と過酸化水素がタングステンのペルオキシドを活性種として形成する。このペルオキシド種は相間移動触媒として転化した四級アンモニウム塩とイオン対を形成して有機相に移動し、オレフィンと反応してエポキシドを与える。タングステン種は再び水相に移動し過酸化水素により再度活性種となる。活性種の構造など詳細はタングステンの二核、四核、多核の錯体など現在も種々議論されているところであり、ここに示した機構に限定されるものではないが、反応を設計する際の作業仮説を設定する上で、この反応機構は有効と考えている。

過酸化水素酸化技術の歴史

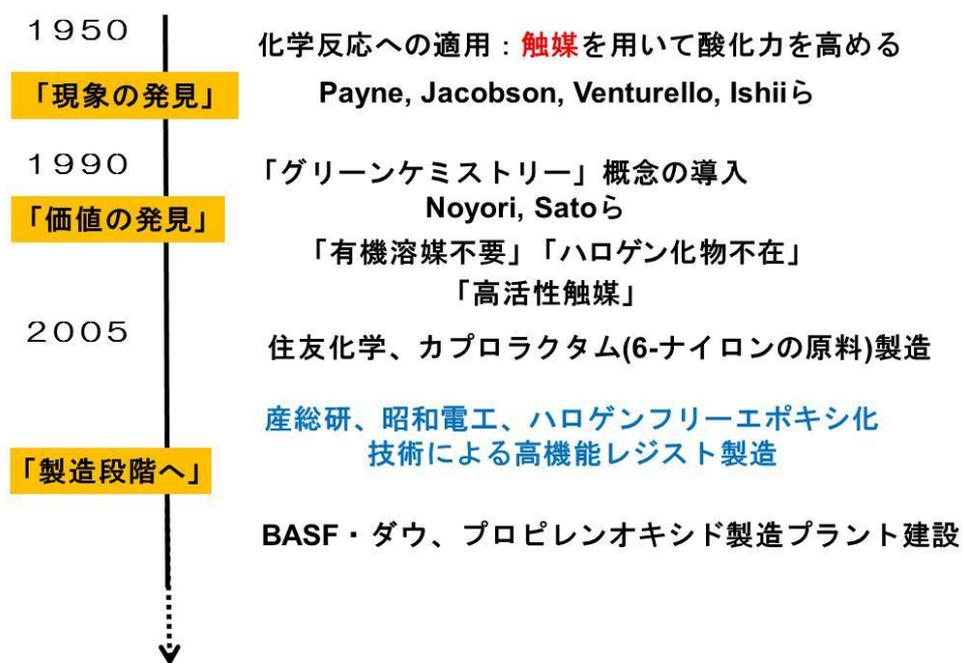


図 5. 過酸化水素酸化技術の歴史

過酸化水素を酸化剤に用いる酸化技術の歴史について図5に示す。1950年代に、触媒を用いて酸化力を高めることによる過酸化水素を化学反応へと利用した例が報告され始めている。その後、1980年代にかけて、タングステン金属触媒を中心とする三元系触媒の基礎が報告されている。具体的には1959年にPayneとWilliamsが α , β -不飽和カルボン酸のエポキシ化反応、1983年にはVenturelloらがタングステン酸塩、ホスホン酸、および4級アンモニウム塩からなる三元系触媒を、1988年には石井らが種々の基質について高効率エポキシ化反応をそれぞれ報告している。1990年代に入るとグリーンケミストリー概念が過酸化水素酸化技術に導入され、1997年には野依・佐藤らがハロゲン系触媒や有機溶媒を使用しな

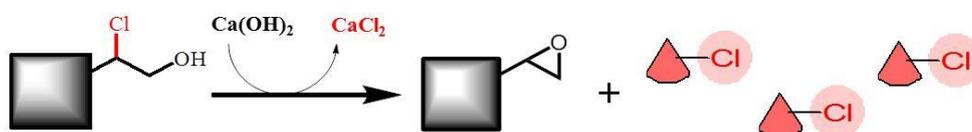
い環境にやさしい三元系触媒を報告している。産総研では、1997年に開発されたハロゲンフリーかつ有機溶媒不要な技術の開発者である佐藤を中心に、環境低負荷な過酸化水素技術の更なる適用範囲の拡大と高効率な技術の集積を行ってきた。

2005年頃から、過酸化水素を用いる化学品合成プラントの建設が報道されるようになり、住友化学（株）は6-ナイロンの原料であるカプロラクタムの製造工程のうち、酸化反応の部分に過酸化水素を酸化剤に用いたプロセスを採用している。また、BASF・ダウも過酸化水素を用いるプロピレンオキシド製造プラント建設を行っている。このように徐々に過酸化水素の製造プロセスへの有用性が活かされたプラントの建造が始められている。産総研でも先のNEDO「非フェノール系樹脂原料を用いたレジスト材料の開発」プロジェクトにおいて、昭和電工（株）と共に過酸化水素を用いるハロゲンフリーエポキシ化技術による高機能レジスト製造を行っている。

最近では、酸化反応で得られる種々の有用物質のなかでもとりわけ、電子材料、接着剤や建築材料の原料に広く使用されているエポキシ化合物が重要視され、種々のオレフィンを高効率かつ高選択的にエポキシ化する技術が求められている。特にタングステン系触媒を用いる過酸化水素エポキシ化技術は、他の触媒や酸化剤に比べて触媒効率や反応効率の面だけでなくコスト面からもファインケミカルズ合成に適している。

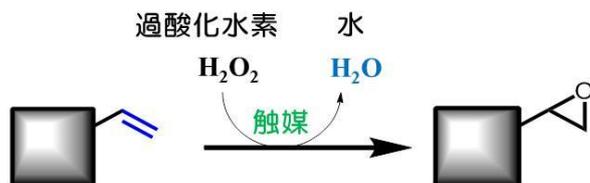
エポキシ化における従来法と過酸化水素酸化法の比較

従来法(エピクロロヒドリン法)



- ・塩素化合物を原料とするために廃棄物処理の負担が大
- ・不純物として混入する有機塩素化合物により、電気絶縁性が低下

過酸化水素酸化法



クリーンなプロセスを採用することで、性能も向上

- ・塩素を使用しない合成法
- ・有機塩素化合物がそもそも存在しない条件のため、電気絶縁性能が飛躍的に向上

図 6. 従来法と過酸化水素酸化法の比較

図6では、エポキシ化における従来法とグリーン・サステイナブルな酸化技術との比較を示す。エピクロロヒドリン法は、機能性化学品材料のエポキシ（炭素数6以上の有機化合物のエポキシド）を製造するうえで最も広範に使用されている従来法の一つとして知られている。エピクロロヒドリン法は高効率かつ確実にエポキシドを製造する方法として極

めて有用であるが、環境負荷の観点から考えると塩素化合物の使用によるハロゲン系廃棄物の大量排出の問題がある。同時に塩素由来の副生物が生成する化学品に混入することにより製品の電気絶縁性が大幅に低下する問題がある。

産総研の開発してきた過酸化水素酸化技術は塩素系化合物を反応に一切含まないため、廃棄物の処理が容易なクリーン酸化技術である。さらに得られたエポキシドをレジストに使用した場合に、塩素系の副生成物を製品中に一切含まないため、電気絶縁性およびその耐久性が飛躍的に向上するという利点がある。

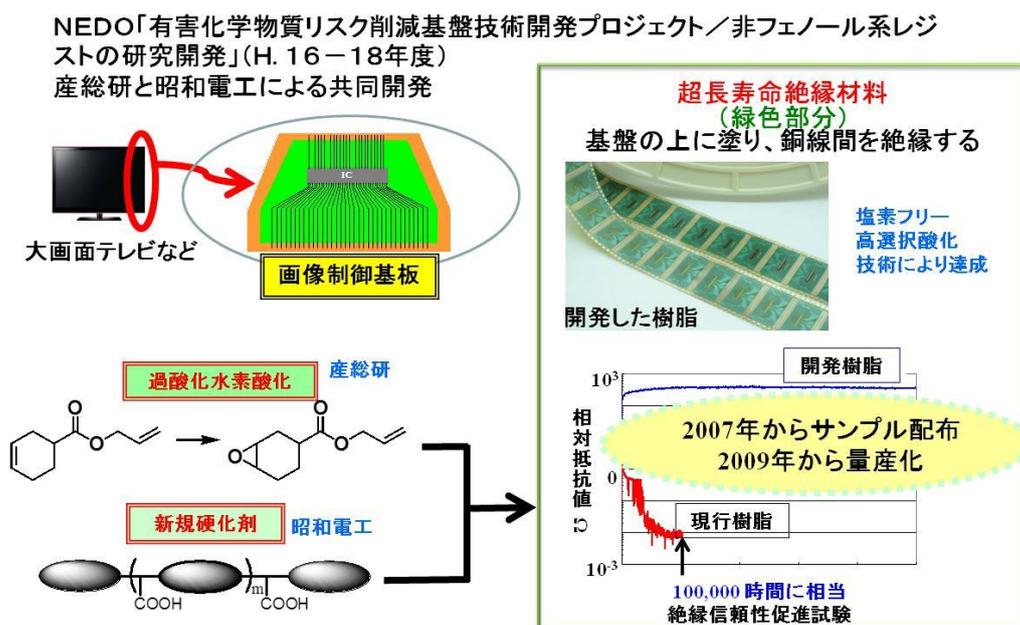


図 7. NEDO「非フェノール系樹脂原料を用いたレジスト材料の開発」プロジェクトの概要

レジストの性能が向上した実例として、NEDO「非フェノール系樹脂原料を用いたレジスト材料の開発」プロジェクトの概要について説明する(図7)。大画面テレビや携帯電話などのディスプレイ画像を制御する基盤は、近年の高細密化・大画面化・コンパクト化の要請を受けて従来よりもさらに柔軟性が高く且つ高い絶縁性能を有することが必要となっている。産総研の過酸化水素酸化技術による高効率高選択的エポキシド製造と昭和電工(株)の新規硬化剤を組み合わせることで超長寿命絶縁材料(超長寿命レジスト)の製造に成功した。開発した樹脂は塩素フリーな高選択酸化技術により現行樹脂よりも飛躍的に高い絶縁性能と耐久性を示した。2007年にサンプル配布、2009年から量産化している。

プロジェクトで対象とする各要素技術と予測される製品群

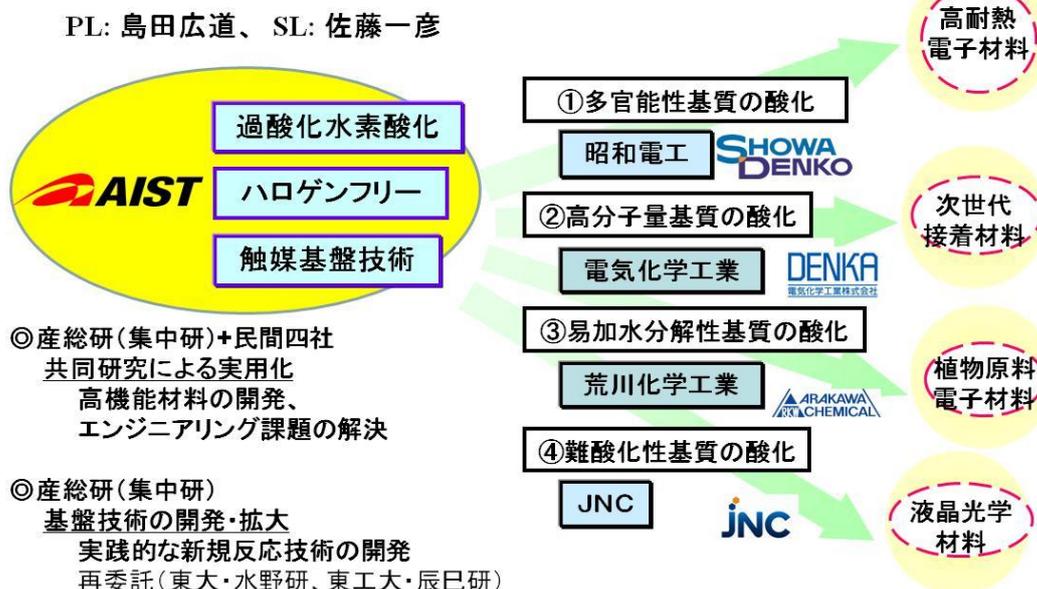


図 8. プロジェクトで対象とする各要素技術と予測される製品群

図8にプロジェクトで対象とする各要素技術と予測される製品群の関連について示す。これまでに開発されてきた酸化技術は、ファインケミカルズ等の現行製造プロセスのうち、特に環境負荷の大きな酸化プロセスをクリーン酸化プロセスへ転換しうるものであり、現実にはアジピン酸の製造やシンプルなエポキシ化合物の製造など、いくつかの実践的な合成例も示してきた。しかし、更に幅広く酸化技術を各種化学品の製造へ適用させることを想定した場合には、以下4種類の基質への適用が必要であった。即ち、多官能性基質への適用、高分子量基質への適用、易加水分解性基質への適用、難酸化性基質への適用である。さらに言えば、上記4種類が緊急に対処すべき基質として挙げられているが、それ以外にも未だ多くの高難度な基質が存在する。本プロジェクトでは、それら高難度な基質にも対応可能な近未来の技術を開発するために、新触媒を発見するだけでなく、それらを体系化・融合化することで、適用範囲を飛躍的に拡大させると共に、基盤技術としての確立をめざした。

上記コンセプトに基づき、本プロジェクトは二本の柱から成り立つ。一本目は、共同研究による製品の実用化であり、産総研と民間企業四社が共同開発して、高機能材料開発やエンジニアリング課題を解決する。二本目は基盤技術の開発・拡大であり、産総研が再委託先である東大・水野研と東工大・辰巳研の協力のもとに、実践的な新規反応技術の開発を行う。研究開発はいずれも産総研に設置した集中研を中心に行った。

民間企業四社との共同開発においては、①多官能性基質の酸化は産総研+昭和電工で開発し、高耐熱電子材料を製造する。②高分子量基質の酸化は、産総研+電気化学工業で開発し、主に次世代接着材料を製造する。③易加水分解性基質の酸化は、産総研+荒川化学

で開発し、植物由来の原料から電子材料原料を製造する。④難酸化性基質の酸化は、産総研+JNCで開発し、液晶光学材料を製造する。

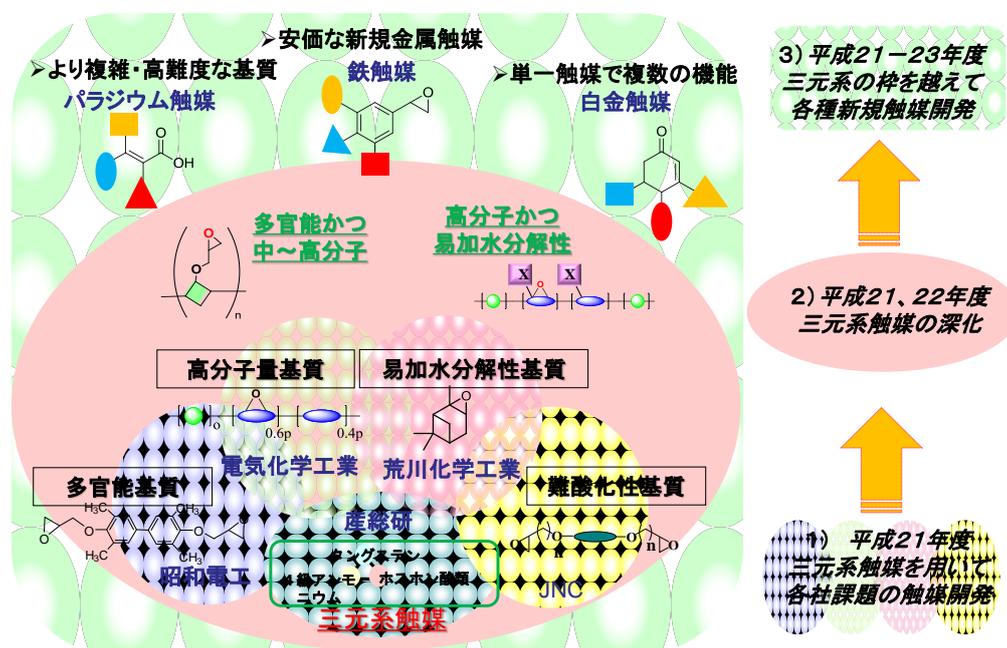


図 9. 産総研（集中研）での触媒開発技術の流れ

図 9 では産総研（集中研）での触媒開発技術の流れを含めた基本計画を示す。また、時系列にまとめたアロー図を図 10 にまとめる。平成 21 年度は、基盤技術の拡大のために、過酸化水素酸化のより広範囲な基質への適応を目指す。現行法で難易度の高い多官能性基質、高分子量基質、易加水分解性基質、難酸化性基質の酸化について、それぞれに有効な三元系分子触媒やポリオキシメタレート触媒、メソポーラスシリカ触媒などの探索を、各要素技術を必要とした各社と共同で行う。また、4 種の基質それぞれについて、過酸化水素分解や副反応の抑制条件など、高効率・高選択的酸化に必要な知見を得る。本研究を推進する上で、反応機構の推定・解明のために、活性触媒の同定や触媒と過酸化水素の反応により生じる化学種の検出が必要であり、紫外可視分光計を購入することによりこれを行う。触媒化学やグリーン・サステイナブルケミストリー全般、及び酸化反応分野の最新情報入手と動向調査のため、フランスのオソワで開催される「大気及び水圏環境の持続的保全のための環境触媒技術 (ECSAW)」の WS (6 月 2 日～5 日)、フランス・リールで開催される第 6 回酸化触媒国際会議 (7 月 5 日～10 日)、英国グラスゴーで開催される第 15 回有機金属国際会議 (7 月 26 日～30 日)・IUPAC 国際会議 (8 月 2 日～7 日) およびスペイン・サラマンカで開催される EuropaCat2009 (8 月 30 日～9 月 4 日) に参加する。

平成 22 年度は、前年度までに得られた基礎的知見に基づき、過酸化水素酸化の更なる汎用性向上を目指す。多官能性、高分子量、易加水分解性、難酸化性各基質の酸化についての知見から対象基質に合わせた触媒を設計し、多官能かつ高分子量基質や多官能かつ易加水分解性基質など、難易度の高い要因を複数持つ基質の選択的酸化に適用可能な触媒系の

構築を各社と共同で行う。また並行して、基盤技術拡大のため、三元系触媒以外の新規な過酸化水素酸化触媒の探索を行う。触媒化学やグリーン・サステイナブルケミストリー全般、及び酸化反応分野の最新情報入手と動向調査、および成果発表のため、英国・ロンドンで開催される Japan-UK Symposium "Catalysis for a Sustainable World" (7月15日, 16日) およびアメリカ・ホノルルで開催される 2010 環太平洋国際化学会議 (12月15日~20日) に参加する。

平成 23 年度は、前年度までに得られた知見を体系化・融合化し、より高い汎用性を持つ過酸化水素酸化技術として確立する。それを実証するために、多官能かつ高分子量基質や多官能かつ易加水分解性基質など、複雑で難易度の高い基質の酸化について触媒を設計し、反応率 80%以上、選択率 90%以上の目標を達成する。並行して、昨年度得られた過酸化水素を用いる画期的な成果 (α , β -不飽和アルデヒドから α , β -不飽和カルボン酸への高選択的酸化反応、転位を伴い 1 触媒成分で 2 段の反応を一度に行い複雑な生成物を与える転位酸化反応、および鉄錯体を触媒に用いるオレフィンの選択的エポキシ化反応) に関し、基質適用範囲の探索、反応条件の限界見極めおよび推定しうる他の反応系への適応性について検討し、基盤技術として定着させる。グリーン・サステイナブルケミカルプロセスの最新情報入手と動向調査、および成果発表のため、米国ワシントン DC で開催される "15th Annual Green Chemistry & Engineering Conference in partnership with the 5th International Conference on Green and Sustainable Chemistry" (6月21日~6月23日) およびオーストラリア・メルボルンで開催される "The 3rd Asian-Oceanian Conference on Green and Sustainable Chemistry (AOC-3)" (12月4~7日) に参加する。

再委託先の東京大学においては、平成 21 年度は、反応有効な活性点構造を有するポリオキシメタレートの分子設計を行う。活性点のみではなく親・疎水性の制御などの周辺構造も制御した触媒を設計する。このように設計した触媒を用いて過酸化水素を酸化剤とするエポキシ化反応などの酸化触媒反応を行う。平成 22 年度は、過酸化水素を酸化剤とするエポキシ化反応に有効な活性点構造を有するポリオキシメタレートの分子設計を行う。さらにこの時、反応機構の検討、反応のスケールアップなども行う。平成 23 年度は、ポリオキシメタレート触媒によるエポキシ化反応開発を行うとともに、得られた知見を総括する。このことにより、選択率 90%以上、過酸化水素有効利用率 90%以上の性能を有するポリオキシメタレート分子触媒の開発を行う。

再委託先の東京工業大学においては、平成 21 年度は、環状のやや嵩高な分子の酸化反応に優れた触媒を作り上げるべく、ゼオライト的な結晶性を持ちながら、メソポーラス物質のように表面積が非常に大きく分子のアクセスが容易なメタロシリケート触媒の合成法を探索する。このために、ゼオライトの超微粒子化、メソ構造を併せ持ったゼオライトの合成、メソポーラス物質の壁の結晶化、疎水化、修飾、官能基化を実施する。やや嵩高な分子を効率よく酸化し、酸化剤としての過酸化水素の分解等の副反応を抑制し、過酸化水素の有効利用率の高い触媒の設計の確立を目標とする。また、オレフィン酸化におけるエポキシ化とアリル酸化の選択性の支配因子を探り、活性種の解明と選択性の向上を目標とする。平成 22 年度は、より嵩高な二環あるいは縮合多環分子、さらにはオリゴマーの酸化に

適用できるゼオライト-メソ構造ハイブリッド触媒の合成方の探索、ならびに、バイヤー・ビリガー反応に適用できるゼオライト触媒の探索を実施する。アルケンの構造(末端-内部、置換度)に基づく酸化選択性の制御、他の官能基の存在下における一方の官能基の選択酸化、バイヤー・ビリガー反応によるラクトン選択性の向上を目標とする。平成23年度は、前年度までに見いだした高機能触媒を酸化反応に供した後、繰り返し再使用し、活性選択性に変化があればその原因を追及し、再生法の検討を実施する。過酸化水素を用いた酸化反応において、高い活性、選択性を保ちながら繰り返し使用が可能な触媒の実現を目標とする。

プロジェクト課題の年次展開

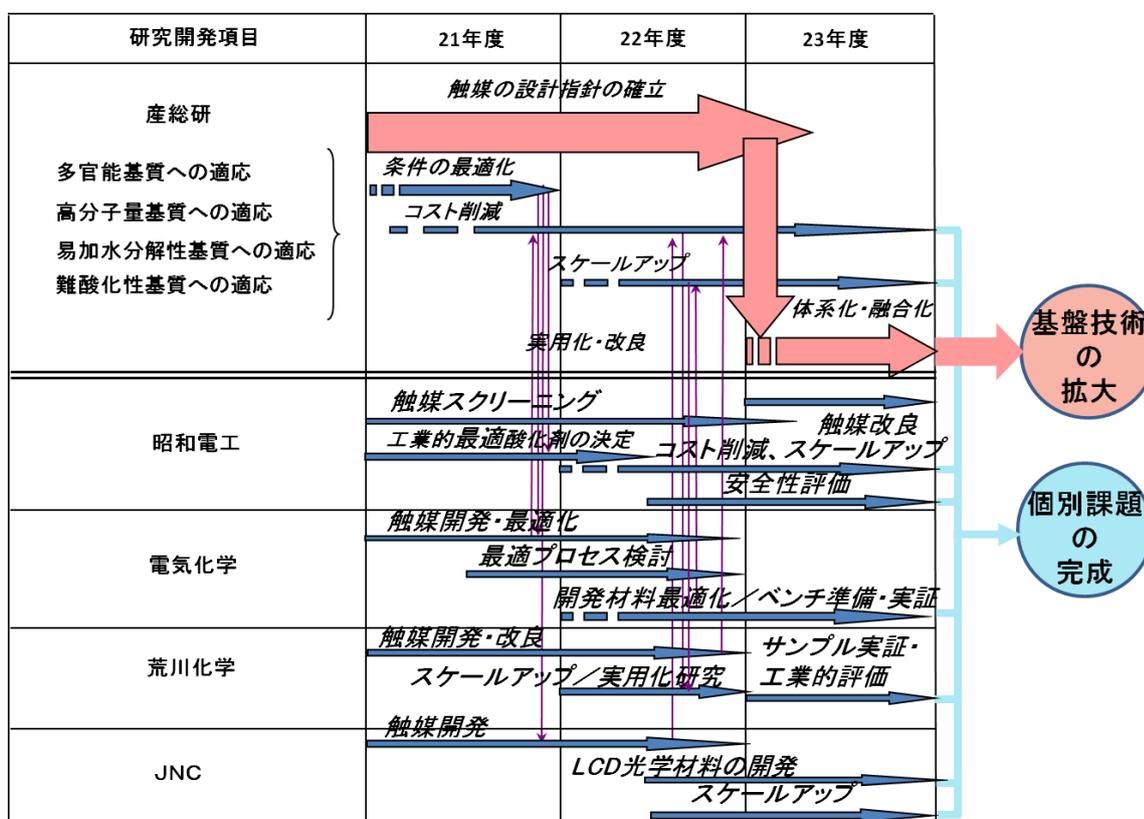


図 10. 過酸化水素を用いた反応系の基礎研究の開発計画と年次展開

2.1. 研究方法

2.1.1 試薬および実験条件

反応に用いた試薬は基本的に市販品を蒸留などの前処理を行わずにそのまま使用した。また、反応雰囲気は大気圧下で不活性ガス等は使用せず開放系で実験を行った。なお、揮発性の高い試薬を用いた場合には溶媒を還流させるため、上部に冷却機能（ジムロート冷却管等のコンデンサ）を設置して実験を行った。

2.1.2. 使用装置

過酸化水素酸化技術の触媒開発においては、対象となる基質の種類が膨大な数に上る。そこで、マシンタイムを必要とする大型装置の購入よりも実験者各人が占有可能な装置を整備することを優先させて装置の購入を行った。例えば、液体クロマトグラフを構成の中心とする触媒設計時高分子生成物分子量解析用液体クロマトグラフ、自動合成装置を中心とする触媒スクリーニング用自動合成装置、およびガスクロマトグラフを中心とする触媒設計時生成物解析用ガスクロマトグラフが代表例である。その結果、触媒開発の構想—実験（実証）—解析—検証—再び構想、の研究の流れが滞りなく行われ、各々の基質の難易度に合わせて実験計画を組み立てた結果、ストレスなく実験作業を行うことができ、淀みない研究成果の発信・発表につながった。当然ながら大型装置による解析も重要であるが、使用頻度が低い為、核磁気共鳴スペクトルの測定、X線の測定、表面の解析、元素分析などは、必要に応じ測定依頼や、既にインフラとして産総研に備わっている装置を使用することで滞りなく対応できた。

3. 研究結果と考察

3.1. 各社要素技術への対応(触媒開発は平成 21 年度、プロセス開発は平成 21~23 年度)

基盤研究として、各プロセスの反応率および選択率の目標値を上回る革新的且つ実践的な新規触媒の開発を行った。これら触媒開発の共通点としては、市販ないしは安価に製造可能で大量に入手できる化合物を触媒に用い、その組み合わせや反応系を適切に設定することで目標とする反応率 80%および選択率 90%を上回る反応成績を達成した。また、コストの削減、スケールアップに伴う効率的な除熱などに関しても考察し、各企業との共同開発により 4つの基質全てにおいて、ベンチスケール製造設備の建設およびベンチプラントの運転による成果の実証を通して、生産量 10k g ~数トン/日を想定した実用化規模プロセスの概念設計にも成功した（詳細は各社の発表および事業原簿（非公開版）に記載）。

・多官能性基質

多官能なエポキシ化合物は、各種封止材用途が期待される。本 PJ では IC 用の封止材を目的としたエポキシ樹脂原料となるエポキシ化合物を、ハロゲンは一切用いずに合成する手法を開発した。また、部分構造として高難度なアリルエーテル構造をもつ化合物のエポキシ化にも挑戦した。触媒設計と精密なスクリーニングにより最終的に目標値で

ある反応率 80%、選択率 90%以上を示す新規反応を発見した。ベンチスケールでの製造にも成功し、サンプルワークを行っている（図 11）。

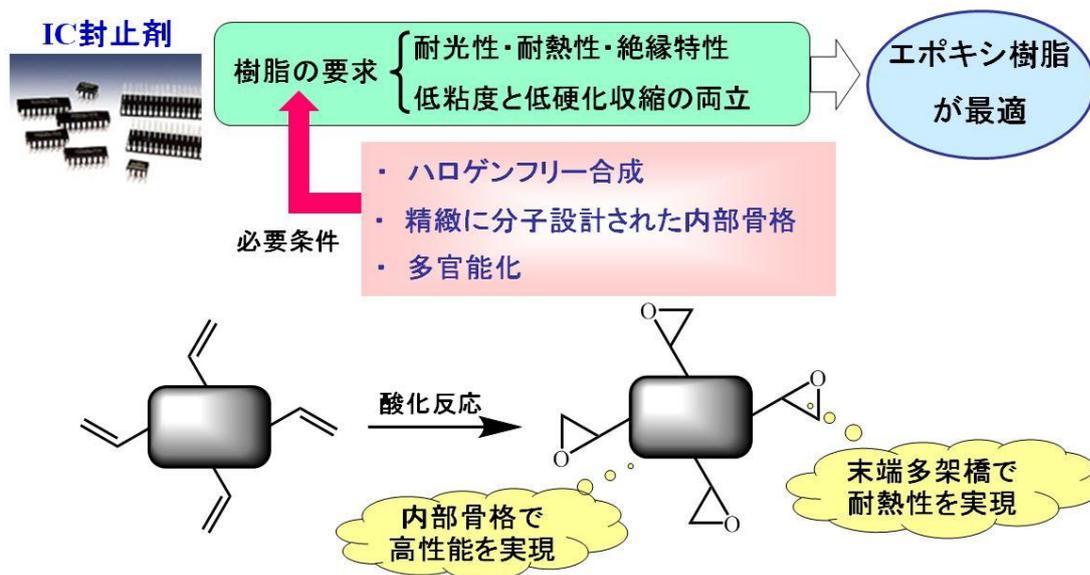


図 11. 多官能性基質の酸化技術とターゲット製品

・高分子量基質（ポリマー）

ポリマーのエポキシ化では、改質剤・相溶化剤を狙いとする分子量 10 万以上のポリマーA および、接着剤を狙いとする分子量数千～2 万程度のポリマーB の二種類をエポキシ化する触媒開発を行った。最終的に、ポリマーA（分子量 10 万）については 30%エポキシ化ポリマーを反応率 100%、選択率 92%で、ポリマーB（分子量 2 万）については 60%エポキシ化ポリマーを反応率 100%、選択率 91%で合成する技術を確認し、目標値である反応率 80%、選択率 90%を達成した。ベンチスケールでの製造にも成功し、ユーザーとの打合せを進めている（図 12）。

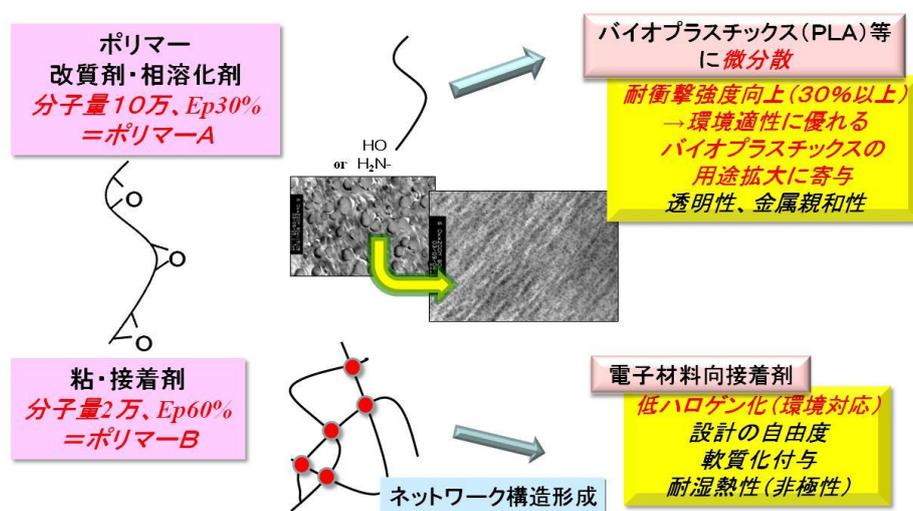


図 12. 高分子量基質の酸化技術とターゲット製品

・易加水分解性基質

松やにを蒸留して得られる成分のうち、低沸点成分であるテレピン油（主成分は α -ピネン）をエポキシ化して α -ピネンオキシドを製造し、機能性樹脂や電子材料原料へと変換可能な有用技術として開発することに成功した。

触媒のスクリーニングによって最適な触媒系を見出したのち、生成エポキシドの加水分解を抑える新規添加剤を含む触媒の設計により、選択率が劇的に向上することを見出した。この画期的発見により触媒量の大幅な低減と高活性化を実現した。ラボスケールでの反応率は89%、選択率は100%であり、目標値の反応率80%、選択率90%を上回る触媒技術の開発に成功した。ベンチスケールでの製造にも成功し、サンプル配布の準備中（図13）。

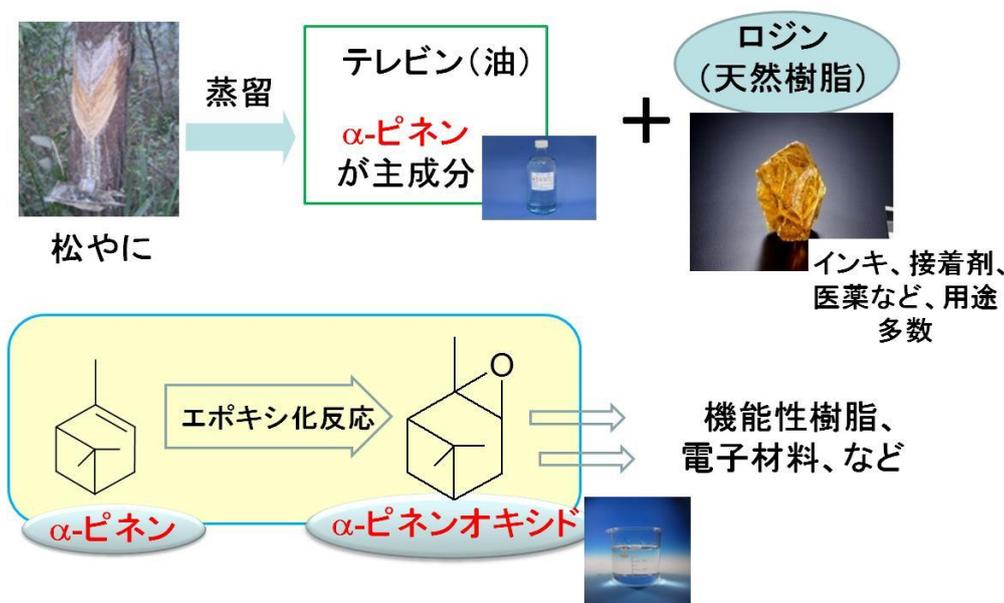


図 13. 易加水分解性基質の酸化技術とターゲット製品

・難酸化性基質

バイヤー・ビリガー反応はケトンからエステルを高効率に合成する有用な酸化反応のひとつだが、過酸化水素を酸化剤に用いた反応例はほとんどなく、極めて酸化しにくい反応として知られている。本PJでは触媒および反応条件を最適化することで、過酸化水素を酸化剤に用いる高効率バイヤー・ビリガー反応を開発した。また、エポキシ化反応においては触媒の回収再利用を可能とする固定化触媒を用いる新反応の開拓を行った。最終的にそれぞれ目標値の反応率80%、選択率90%を上回る触媒技術の開発に成功した。ベンチスケールの製造にも成功し、ユーザーとの打合せを進めている（図14）。

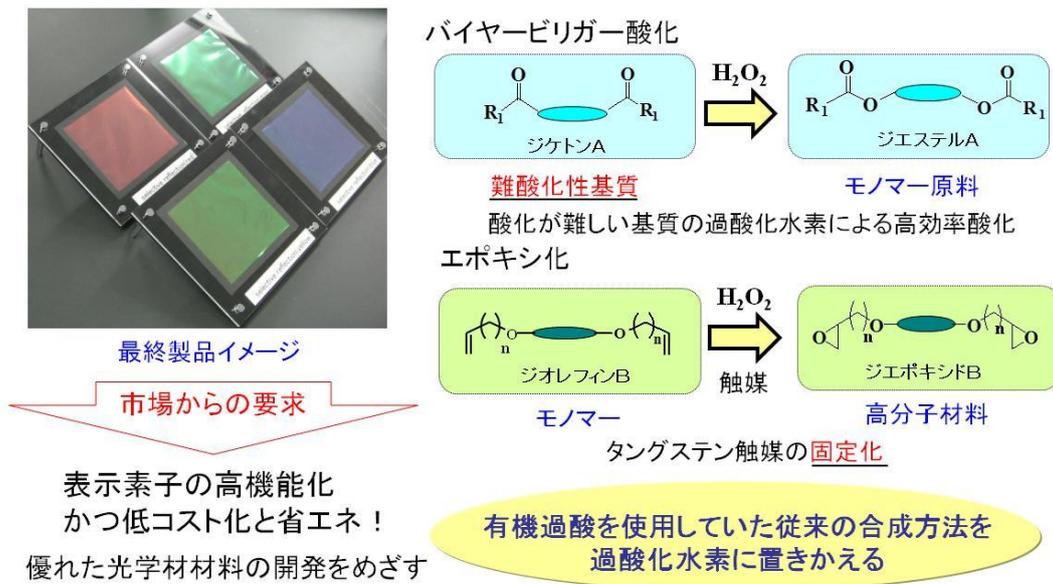


図 14. 多官能基質の酸化技術とターゲット製品

3.2. 高難度要因を複数持つ基質への対応（平成 21～22 年度）

- ・多官能、かつ分子量数千程度のオリゴマー基質の高効率エポキシ化

多官能、かつ分子量数千程度のオリゴマー基質という多官能性と高分子性という二つの課題をもつ難易度の高い原料の反応を検討した。企業から提供されたサンプルについて触媒を検討し、収率 90%、選択率 90%と目標値を上回る反応成績を達成した（詳細は事業原簿(非公開版)に記載）。

- ・高分子、かつ置換基の影響により加水分解性の上がった基質のエポキシ化

高分子、かつ置換基の影響により加水分解性の上がった基質のエポキシ化反応を検討した。系中の pH を精密制御することで目標値を上回る反応率と選択率でエポキシ基導入することに成功した（詳細は事業原簿(非公開版)に記載）。

3.3. 新規な過酸化水素酸化触媒の探索と開発（平成 21～23 年度）

三元系触媒を用いた過酸化水素によるエポキシ化は無溶媒かつハロゲンフリー条件下に進行するプロセスである。しかしタングステンは、特に六価のものについては安定で比較的毒性が低いとされているが多段階の酸化還元可能な重元素であるため大量使用に際して予期できぬリスクがある。また、もう一つの主要成分である四級アンモニウム塩は、特異的な疎水性かつさほど親油性も高くないという水相、油相いずれの相にも溶解しにくい構造が要求される。結果として製品からの除去が困難で吸着剤処理による生成が必要となり、これも製品の製造コスト増大の要因となる。

従って、過酸化水素酸化技術を将来にわたって持続的に発展してゆくためには、これらコスト・毒性の問題を極力排除した新規触媒の開発は必須であると考えられる。そのため集中研では、各社課題・三元系触媒とは独立に過酸化水素酸化に有効な新規触媒の

探索を試みた。開発にあたって高活性、高選択性といった通常の触媒開発に求められること以外にも、実用化を念頭に低毒性・低コスト化、成分数の減少、多機能化という要素も意識して行った結果、以下のような触媒系の開発に成功した。代表例として3例を示す。

- ・鉄錯体を用いたスチレン類の高効率エポキシ化

資源量が豊富で安価であり比較的毒性、あるいは毒性が明らかになっていて低コストでの除去法が確立している金属としては、鉄・マンガン・コバルトなど、前周期遷移金属が挙げられる。これらはタングステンに比べて多段階の酸化還元反応が容易で選択的な反応には不向きであり、また過酸化水素を触媒的に分解することから、これまで過酸化水素を用いた選択酸化の報告例は少ない。ただし先行研究例からは、添加剤とくに配位子を巧みに設計することで上記問題を抑制し、ある程度の選択的を持つ酸化反応触媒として作用させ得ることが示唆されている。

そこで当PJにおいては、安価かつ低毒性な鉄錯体触媒を用いた過酸化水素によるエポキシ化技術開発に取り組んだ。

対象とする基質は易加水分解性かつ機能性化学品材料としても有用なスチレン誘導体とした。

レドックス（酸化還元特性）を配位子によって微細に制御し、反応性の確認から再度触媒の設計を行う形でエポキシ化に最適な配位子の組み合わせを検討した。最終的にスチレンオキッドが反応率99%、選択率90%で得られる触媒の開発に成功した。目標値である反応率80%、選択率90%を達成した。従来の過酸化水素酸化技術では困難だったスチレン類のエポキシ化を、短時間かつ高い過酸化水素効率で達成できた。

本技術に関してPJ参画企業以外の化学品合成大手メーカーから問い合わせがあり、実用化へ向けた共同研究を2012年9月から開始予定である。

- ・パラジウム触媒を用いた α 、 β -不飽和アルデヒド類の α 、 β -不飽和カルボン酸への酸化

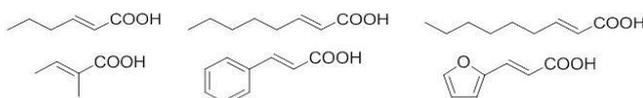
パラジウムは種々の有機合成反応・製造プロセスにおいて用いられる非常に有用な金属である。一方でパラジウムを触媒とした過酸化水素を酸化剤に用いる反応は、学術・実用両面において、優れた反応性・選択性を示すものの反応事例がほとんどない。これは、パラジウムが過酸化水素を触媒的に分解する作用を持つことも含め、過酸化水素とパラジウムの相互作用が未だ十分に解明されていないことに起因すると考えられる。先行研究例（Miyaji, T.; Kujime, M.; Hikichi, S.; Moro-oka, Y.; Akita, M. *Inorg. Chem.* **2002**, *41*, 1005.）からパラジウムはタングステン同様、金属過酸化物を生成することが知られているため、潜在的には過酸化水素を活性化し、酸化反応の触媒として使用可能であると期待される。



$$\text{R}-\text{CH}=\text{CH}-\text{CHO}$$
 > 不飽和アルデヒドは反応性が低い
 > 構造上、種々の副反応が進行
 穏和な条件で高活性な触媒が必要

高い配位能力を有し、活性なペ
 ルオキシド種を合成可能なパラ
 ジウムを触媒に使用する

種々の香料原料 α,β -不飽和化合物を高効率に合成



穏和な条件で良好な収率と選択性

特願2009-36014

世界初の過酸化水素による高効率 α,β -不飽和カルボン酸合成

図 15. パラジウム触媒による α , β -不飽和カルボン酸の高効率合成

種々検討の結果、けい皮アルデヒド (265 mg, 2.0 mmol) とトリフルオロ酢酸パラジウム (13.2 mg, 0.040 mmol) を混合し、10 °C で攪拌させながら 30% 過酸化水素水 (453 mg, 4.0 mmol) を徐々に滴下したのち、2 時間攪拌することで、けい皮酸が 95% の反応率 (ガスクロマトグラフィーによる収率)、96% の選択率で得られることを確認し、目標値を上回った (図 15)。選択性は他の酸化剤を用いる反応と比べても極めて高く、副生成物としてベンズアルデヒドと安息香酸はほとんど得られない。

このように医薬品中間体や香料原料として有用な α , β -不飽和カルボン酸を、シンプルに α , β -不飽和アルデヒドの酸化反応によって高反応率かつ高選択率に合成する新規な反応系を開発した。本反応では、過酸化水素を酸化剤に用いるため、従来の酸化剤と異なり副生成物は水のみとクリーンかつ後処理が容易である。更に、有機溶媒を一切使用せずに反応を行えるため、精製の手間を省くことが可能でありキログラムスケールでの製造も可能である。現在技術の詳細について P J 参画企業以外から、ライセンス契約を含めた問い合わせがある。

・白金触媒を用いた三級アリルアルコールからエノンへの転位酸化反応

白金は高価であるが、パラジウムと並び種々の有機合成反応・製造プロセスにおいて用いられる非常に有用な金属である。一方で白金を触媒とした過酸化水素を酸化剤に用いる反応は、学術・実用両面において、優れた反応性・選択性を示すものの事例が限られている。これは、パラジウム同様に過酸化水素と白金の相互作用が未だ十分に解明されていないことに起因すると考えられる。産総研では、白金黒を用いたアリルアルコールの α , β -不飽和アルデヒドへの酸化反応に代表されるように、白金触媒を用いた過酸化水素酸化反応についての先行研究例があり、知見と技術の蓄積面で世界をリードしている (Kon, Y.; Usui, Y.; Sato, K. *Chem. Commun.* 2007, 4399.)。さらに白金には酸

化数に依存せず有機化合物の炭素-炭素不飽和結合と強く相互作用する特性がある。この性質を巧く利用することで、白金を触媒とする過酸化水素酸化触媒のさらなる開発が可能であると考え、当PJにおいて白金触媒を用いた過酸化水素による新規酸化技術開発に取り組んだ。その過程で、予想しなかった基質の骨格転位を伴う新しい三級アリルアルコールの酸化反応を発見し、基盤技術として確立することに成功した。得られるエノン類は医薬品中間体製造で重要な基礎的かつ基盤となる構造である。

転位酸化の中間体をアリルカチオン型と想定し、アリルカチオンを安定化しつつ、アルコールの酸化に効果的な触媒を探索した。種々検討の結果、フェニル-2-シクロヘキセン-1-オールと白金黒を水中で混合した後、90°Cで30% H₂O₂水溶液を滴下し3時間攪拌したところ、望む転位酸化生成物である3-フェニル-2-シクロヘキセン-1-オンが反応率99%、選択率95%で得られ、目標値（反応率80%、選択率90%）を大きく上回った（図16）。白金黒を回収再利用して反応を検討したところ、白金黒の触媒活性はほとんど損なわれず、反応率90%以上で対応するエノンを合成することが出来た。また、ここで示された高い活性は白金黒に特異で、例えばカーボンに白金を担持した触媒や、均一系での白金(0)触媒を用いても収率は10%程度であった。

アリルアルコールは従来の三元系触媒では容易にエポキシ化が進行するのに比して、本反応は極めて様相を異にしており、単一の触媒で「基質の骨格変換」と「酸化反応」を同時に達成する新規反応である。炭素-炭素不飽和結合がエポキシ化されないのは、反応過程でオレフィン部位が白金触媒と相互作用することで保護された状態になるためと考えられる。本触媒反応が多くのエノン合成に適用可能になれば、これらの製造プロセスをクリーン酸化プロセスに置換する方法として非常に効果的であると言える。

なお、特許が出願済みであるが、まだ公開になっていない。

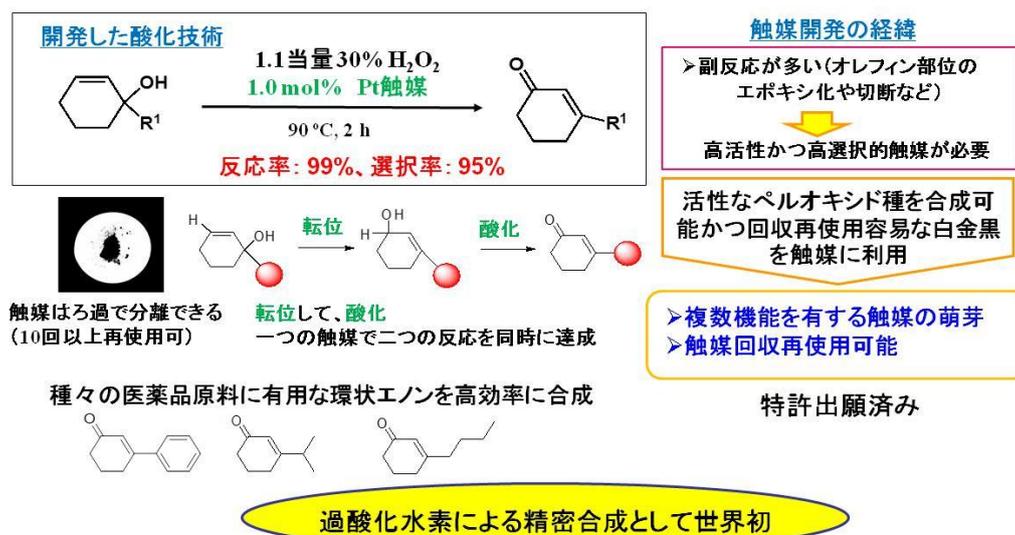


図 16. 白金触媒によるエノンの高効率合成

3.4. 産総研（集中研）での研究開発と再委託先との関り

PJ 目標達成の為には、産総研の技術を主体としながらも、無機化学の観点から活性触媒を見出す研究、および、回収再利用可能な触媒作成研究、といった多様な分野の成果を組み合わせ、それを元に更に高性能・精密化された触媒を設計することが必要である。そこで、ポリオキシメタレート触媒など無機化学の観点から活性触媒を見出す研究に精通している国立大学法人東京大学の水野研究室、および、回収再利用可能な触媒作成研究に造詣の深い国立大学法人東京工業大学の辰巳研究室、の2か所に再委託した。

再委託先である、東京大学の水野研究室および東京工業大学の辰巳研究室から得られた研究成果により、産総研が担当する各社課題への対応、すなわち多官能基質、高分子量基質、易加水分解性基質、難酸化性基質へと拡大する新規触媒およびプロセスの開発が加速された。さらに、平成 22 年以降の難易度の高い要因を複数持つ基質への適用やこれまでの技術を体系化・融合化し、三元系触媒の枠を越えて新規触媒を開発するうえで、東京大学および東京工業大学の研究成果をベースとする触媒開発のディスカッションは研究を加速する大きな原動力となった。

具体的には、東京大学の有するポリオキシメタレート触媒の知見と活性触媒を作成する技術開発の成果により、全社の合成プロセスに使用しているタングステン触媒の反応活性種の考察がより精密化され、それぞれの課題に最適な触媒設計がスムーズに行われた。東京工業大学の有する新規メソポーラスシリカ触媒作成ノウハウと、触媒を回収する技術および固体触媒による触媒の再利用技術の研究成果はタングステン含有無機材料の取り扱い方に習熟した研究者による最適な手法であり、各社の触媒回収および再利用プロセスに活かされた（図 17）。

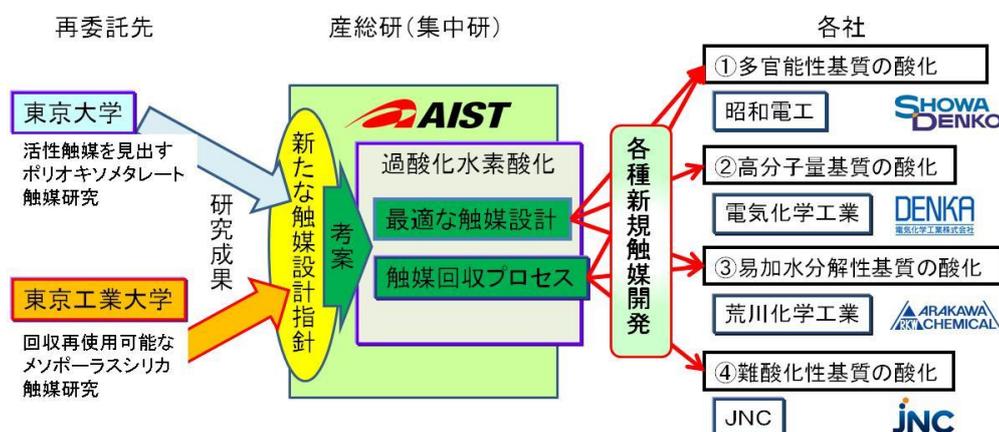


図 17. 再委託先の研究開発成果と本 PJ との関わり

4. 成果の普及

- ・ 知的財産権、成果の普及

事業の競合他者、原料の調達国などとの関連も考慮したうえで、特許を速やかに出願し、産総研の単願、および産総研と企業との共願特許を合わせて、国内特許 19 件、PCT3 件、PCT からアメリカ、中国へ外国出願している。

また、論文の投稿も併せて行い 22 報を投稿受理され、研究発表・講演も 91 件を行い開発成果の発信に努めた。ほかに、受賞、新聞への掲載、展示会への開発成果の出展も行った（表 1）。

表 1. 知的財産権、成果の普及（産総研グループの合計）

	H21	H22	H23	計
特許出願(うちPCTおよび外国出願)	7(0)	15(6)	7(2)	29(8)件
論文(うち査読付き)	9(8)	7(6)	9(8)	25(22)件
研究発表・講演	27	24	40	91件
受賞実績	0	0	1	1件
新聞・雑誌等への掲載	1	0	3	4件
展示会への出展	0	1	1	2件

(平成 24 年 8 月 15 日時点)

- ・ 人材育成

本プロジェクトに参加した職員および契約職員

常勤職員： 島田広道(PL)、佐藤一彦(SL)、清水政男、今喜裕

任期付き職員： Dr. T. C. ⇒ 民間(大手触媒製造メーカー)

契約職員(PD) : Dr. Ha. Ha. ⇒ 民間(大手機能性材料メーカー)
 Dr. Y. O. ⇒ 民間(中堅化学合成メーカー)
 Dr. D. I. ⇒ 民間(外資系触媒製造メーカー)
 Dr. Ho. Ha. ⇒ 民間(大手機能性化学品製造メーカー)
 Dr. T. N. ⇒ 民間(中堅機能性材料メーカー)

図 18. P J に携わった人材と P J 後の就職先

図 18 に示すように、本 PJ には産総研から集中研に常勤職員 4 名、任期付き職員 1 名、契約職員（ポスドク）5 名が携わった。いずれも本 PJ を通じて企業での研究開発について習熟し、結果として全員が PJ 後、企業の研究員として採用された。現在産業界の一員として精力的に活動を行っている。

5. 結言 ～基本計画の達成度を含めてのまとめ

これまでに産業技術総合研究所が開発して来た、過酸化水素を酸化剤とし、タングステン錯体、四級アンモニウム塩類、及びアミノメチルホスホン酸からなる三元系分子触媒を用いる高選択酸化技術について、多官能性基質への適用、高分子量基質への適用、易加水分解性基質への適用、難酸化性基質への適用を果たし、各社課題の解決に貢献した。また、上記の高難度要因を複数持つ基質に対しても三元系触媒が適用可能であることを示し、より多くのニーズに対して応えることができる技術へと深化を果たした。これにより、三元系触媒は種々の要素技術を体系化・融合化したものとなり、ファインケミカルズ等の現行製造プロセスをクリーン酸化プロセスへ転換できる基盤が整ったと言える。一方で、新たな基盤技術の礎となる可能性のある新規触媒の開発にも成功した。これらの技術は今後、過酸化水素酸化技術のさらなる拡充に大きく寄与できると思われる。

全体として、当初目標である反応成績および新規触媒の開発に成功し、基本計画はほぼ達成したと考えている。

IV. 実用化の見通しについて（成果の実用化可能性、波及効果）

IV.1 高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発（分子研G）

①錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の開発研究

芳香族アミノ化反応、芳香族カップリング：

開発した触媒ならびに同触媒を用いた芳香族アミノ化反応は協力企業A社とともに特許出願済みである。A社はELデバイスに利用可能なホール輸送剤の自社開発はもとより、将来において見込まれる多方面からの関連分子の委託合成における競争力強化を念頭に置き事業化を想定している。具体的に標的としたTPD誘導体は現在グラム単価100万円超であるが、EL照明の潜在的可能性を考慮するとその簡便安価な合成法の確立が強く望まれている。すなわち、本プロセスで簡便に高純度で合成可能なTPD誘導体の効率供給はEL照明の安価大量生産に繋がり、未来における蛍光灯代替照明となりうることから地球規模の波及効果さえも生じうる。（白熱照明をEL照明に転換した際の温室ガス削減効果143万トン（CO₂換算）である）今後、2～3年以内にA社研究陣による数十グラム/日の精密合成が検討確立され、EL照明メーカーなど潜在的関連クライアントに対して受託合成が提案されることが想定されている。

②ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究

アルコール類の酸素酸化反応：

本テーマに利用した触媒はすでに分子研が特許を取得済みである（（米国）

US7,897,817B2）。この特許触媒技術に立脚して開発されたアルコール類の酸素酸化プロセスによって国内洗浄剤メーカーBの協力のもと、供給ルートを確認したカルボン酸型界面活性剤は精密電子デバイスの洗浄等に用いるPFC代替洗浄剤として期待され、すでにユーザーによる製品評価（提供試料の実際の使用に際しての適合性を見極める初期段階の精密スペック分析を終え、問題点をB社、分子研にフィードバックし再調製、再試料提供のやり取り）の前の段階にある。カルボン酸系界面活性剤の国内需要は1万トン/年程度であるが（平成18年度経済産業省鉱工業動態統計室統計から推計）、PFCの温暖化ガス効果を考慮するならば、その代替洗浄剤としての供給は大きな環境波及効果が期待される。

また派生的に確立した連続フロー系によるPCB類縁体の還元的分解・無毒化システムは大きな社会的反響があり、各種メディアでも紹介されている。すなわち、酸化反応と還元反応は表裏一体の同一反応であり、酸化が進行するということは酸化剤が還元されていることとなる。NEDOプロジェクトで確立した酸化触媒をその逆反応である還元反応に利用することで上述のPCB類縁体の還元的分解・無毒化システムは成立しており、NEDOプロジェクトからの派生成果と言い切ることができる。

③エステル、アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究

目的とするカルボン酸の分子内脱水縮合反応は、1 mol%の触媒を用いて100グラムスケールで達成している。反応率95%以上、選択率98%以上。触媒の回収・再利用も可能であることを確認している。ただし、触媒の回収が実用的かどうかは検討の余地がある。現在、

触媒の製造・販売に向けて試薬メーカーと交渉段階にある。一方、本法を用いた製造プロセスが実用化されれば、ポリエステル、ポリアミド、ポリイミド樹脂の環境低負荷製造への技術革新となることが期待される。具体的には、本手法の導入により、カルボン酸の触媒脱水縮合を鍵にエステル、アミド、イミドが合成できることになり、従来法に比べ格段に副生成物量の削減や加熱温度の低下が期待される。また、開発したボロン酸触媒、2,6-Bis[(2,2,6,6-tetramethyl-1-piperidinyl)methyl]phenylboronic acid (contains varying amounts of anhydride) (商品番号B3927)が東京化成工業より上市(2012年7月)された。中部TLOに依頼し、関連する企業への技術移転についての検討も行っている。また、本プロジェクトにおいて見出したランタン触媒を用いるエステル交換反応、超原子価ヨウ素触媒を用いる α -オキシアシル化反応、Lewis酸触媒を用いるBaeyer-Villiger酸化反応についても実用化可能な技術に仕上がっている。具体的には数10gスケールでの実施に成功している。また、実施に必要な試薬はすべて市販されている等、実用化への障害は少ないと考えている。これらの技術もエステル類の合成に有効な技術であり、現在、化学系企業との共同研究に発展している関連企業はPJ以前から適時実用化に向けた協力関係にあった。

また、キラル超原子価ヨウ素触媒

(2R,2R')-2,2'-(2-Iodo-1,3-phenylene)bis(oxy)bis(N-mesitylpropanamine)が、和光純薬工業より上市された(商品番号095-06051, 091-06053, 2010年12月22日)。本触媒は光学活性スピロラクトン類の合成に有効な触媒であり、その評価を各企業で検討されることを期待している。

IV.2 革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発（東大グループ）

①アクア触媒によるアセトアルデヒド製造プラント排水中の希薄酢酸回収技術開発（昭和電工、東京大学）

本テーマでは、エステル化/エステル交換法および酢酸濃縮/水中エステル化法の二つの酢酸回収プロセスの検討に取り組み、それぞれコスト試算を行って実用性を評価した。その結果、エステル化/エステル交換法では、エタノールを酢酸エステルよりも過剰に使用せざるをえない点が、プロセス全体の経済性を成り立たせる上で大きな問題になった。一方、酢酸濃縮/水中エステル化法では、酢酸に対して等量のエタノールを用いることで大幅なコストダウンに成功し、エステル化/エステル交換法に比べて用益コストを 1/4 にすることができた。しかしながら、それでもなお設備償却（5年償却）負担が大きく、現状反応成績では大幅な赤字であった。

酢酸濃縮/水中エステル化法およびエステル化/エステル交換法それぞれについて、実用化に向けた課題を図1にまとめた。実用化に向けては、ラボ段階での課題が数多く残っており、触媒および反応場のさらなる基盤技術の開発が必要である。酢酸濃縮/水中エステル化法において、プロセスの経済性を成り立たせるためには、水中エステル化工程のさらなる進展が必要である。この目標達成に向けては、平衡収率の向上が鍵であり、より低コストで収率向上を達成できる触媒あるいは添加物の開発が必要である。今後、触媒あるいは添加物の構造最適化を行うことで、さらなる収率向上の可能性はある。今後は NEDO の継続研究のスキームの下、大学と企業の連携を図りながら、大学での基礎検討を継続し、新規触媒および反応場の開発に取り組むことで目標の達成を目指す。

開発段階	酢酸濃縮/水中エステル化法	エステル化/エステル交換法
ラボ検討 基礎検討	<ul style="list-style-type: none"> ・エステル化触媒、添加物の開発 目標 収率 >95%、添加物固定化 ・プロセス検討 ・経済性評価（大幅なコスト低減必須） 	<ul style="list-style-type: none"> ・エステル交換触媒の開発 目標 EtOH/ODN = 1で 収率99% ・プロセス検討 ・経済性評価（大幅なコスト低減必須）
ラボ検討 ベンチ、パイロット検討	連続反応、実廃水検討（各種成分挙動）、活性汚泥評価	

図1 実用化に向けた課題の整理



* NEDO継続研究契約(~2013年3月)

図2 実用化に向けた取り組み

②固定化触媒を活用する革新的水素化反応システム開発（日光ケミカルズ、東京大学）

高分子固定化触媒の開発において、ポリシランがパラジウムの担体として有用であることを見出し、ポリシラン担持パラジウム触媒を用いる連続フロー式水素化システムへと発展させた。その後、触媒とシステムの実用化を目指して装置の自動化とスケールアップの検討を進めた結果、現行のバッチ方式に比べて生産性と品質の向上を達成できた。さらには別のポリシランを用いた触媒の開発も実施され、より生産性が向上できる可能性が残されている。

残された課題は、触媒からの金属回収・再利用方法の確立や長時間使用が可能な原因の解明等である。これらの課題を解決すれば適用分野がさらに広がると考えられる。

事業化計画については、得られた結果や実用化した際の効果等を考慮して製品に優先順位を付け、最初の製品での実用化は本年実施する計画である。さらに引き続いてその他の製品を生産する計画となっている。

適用製品

化粧品、医薬品原料（乳化・可溶化・分散剤、油性成分）

実用化へのロードマップ

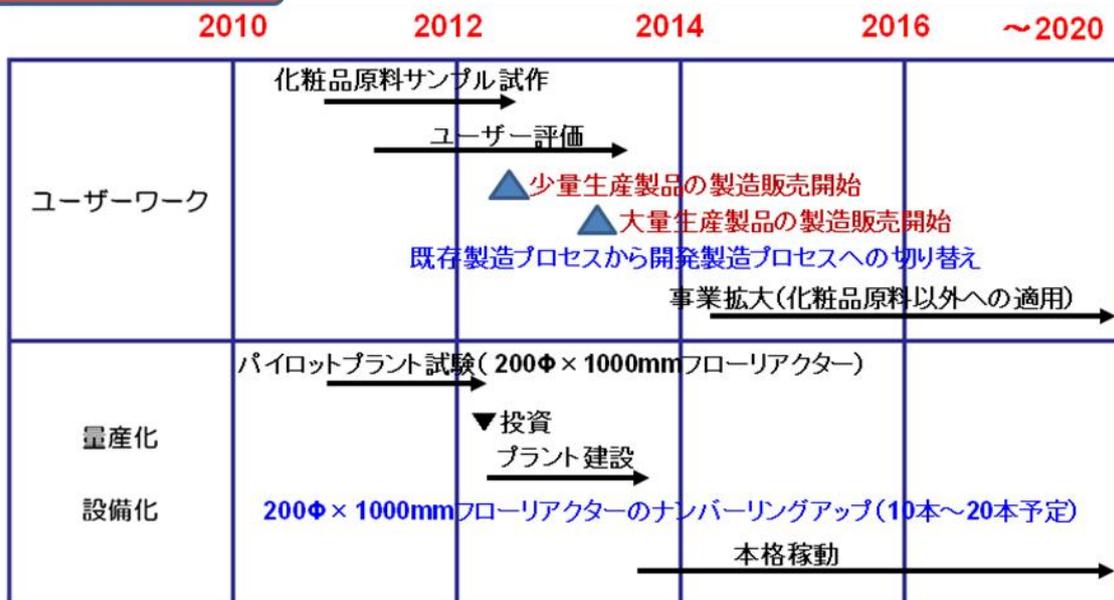


図3 適用製品および実用化へのロードマップ

本手法は触媒の長時間使用が可能なことから、再生コストやそれに伴う廃棄物の大幅な削減が可能である。また従来法に比べて反応温度や圧力を下げられる場合が多く、省エネのみならず副反応の抑制や安全性の向上も期待できる。さらに同等規模のバッチ方式に比べて装置が小型な省スペース型システムであり、安全性がバッチ方式装置と比較して高い反応装置といえる。反応例もオレフィン化合物の水素化にとどまらず、様々な化合物の水素化反応が可能になると考えられ、開発プロセスが波及する産業分野も、化粧品・医薬品原料のみならず、食品・ファインケミカル、石油化学などへと広がることが予想される。

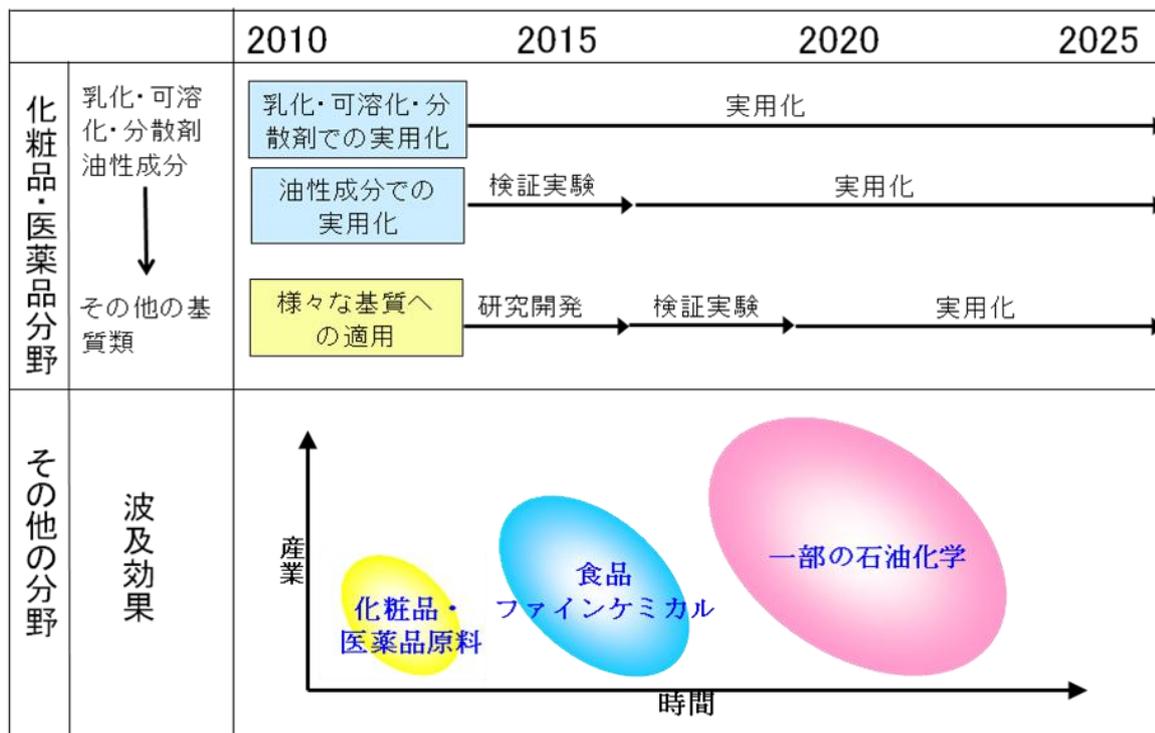


図4 実用化スケジュールと波及効果

③グリーンプロセスのための高分子固定化金属触媒試薬の開発（和光純薬、東京大学）

本プロジェクトで開発した 6 種類の固定化金属触媒(PI オスミウム触媒、PI オスミウム II 型触媒、PI カーボンブラック金触媒、PI 白金/金触媒、PI 白金触媒、PMI カーボンブラックパラジウム触媒)は、現在市場に供給している（供給予定も含む）。この供給をきっかけに、実際にこれらの固定化金属触媒を製薬企業や化学系企業に使用してもらい、使用することで生じる企業側からの要望、問題点に基づいて触媒のさらなる最適化を行っていく。最終的には、触媒をプロセス合成に適用するレベルまで開発を進め、工業レベルでの触媒のバルク合成および供給を行う。また、触媒の合成、供給だけではなく、固定化オスミウム触媒を用いたジヒドロキシル化のプロセス合成の経験を活かした医薬品中間体の特注合成等の受託合成を目指す。本プロジェクトでは、1 mol スケールでのカンプトテシン中間体合成を達成しており、これらの結果を製薬企業に公開することによって、医薬品中間体の特注合成を受託できると考えている。これらを達成するためには、固定化金属触媒の認知度を高めるための PR 活動が必要である。本プロジェクトで開発した触媒は、論文発表等を通じて大学等のアカデミックでは知られているものの、我々がターゲットとする企業には積極的に宣伝が必要であると考えられる。PR 活動を通じて、企業に対する固定化金属触媒の認知度を高めていく。

本プロジェクトで開発した高分子固定化金属触媒が様々な企業に利用されることによって、以下のような波及効果が期待される。

(1)製品の製造コスト削減

- ・触媒を回収、再利用することによって、高価な貴金属触媒の購入コストを抑えることができる。
- ・触媒をろ過で簡単に取り除くことができることから、製造プロセスの簡略化が可能になる。
- ・オスミウム触媒を使用した際に生じるオスミウム廃液の処理には大きなコストがかかるが、固定化オスミウム触媒を用いるとオスミウムの漏れを抑えることができるため、廃液処理のコストを低減させることができる。

(2)GSC 効果による環境保全、および資源枯渇の防止

- ・金、白金などの希少金属の使用量を 95%以上削減。
- ・水系固定化触媒の使用で有機溶媒の使用量を 80%以上削減。
- ・オスミウム廃棄物を 99%以上削減。
- ・高分子固定化オスミウム触媒を用いたジヒドロキシル化プロセスにより、従来ルートに比較して有機溶媒、廃棄物を 50%以上削減。

IV.3 革新的酸化プロセス基盤技術開発（産総研G）（成果の実用化可能性、波及効果）

・実用化の定義と現在までの進捗

プロジェクトが考える実用化の定義

1. 目的とする機能性化学品の**製造工程を確立**し、ユーザーとの連携により**サンプルワーク**を行う。
2. 必要に応じて、価格を含めて採用を見据えた認定試験など各種必要な**試験**を行う。
3. 「**上市**」する。

得られたプロジェクト成果の実用化の可能性

プロジェクト成果として、

「新規な過酸化水素酸化技術をベースとして、昭和電工、電気化学工業、荒川化学工業、JNC、4社共に**ベンチプラント数十～数百キログラム/日**を想定した運転による**成果の実証**まで完了」

これまでの順調な進捗から考えて、今後、

製造工程の確立、サンプルワーク、各種試験を通して製品を**上市に至る**可能性は極めて高い。

具体的には、昭和電工はIC封止材、電気化学工業は新規電子材料用接着剤など、荒川化学工業は松やに由来の透明電子材料原料、JNCはLCDモノマーをターゲットに設定している。

図 5. プロジェクトが考える実用化の定義と実用化可能性

産総研グループの革新的酸化プロセス基盤技術開発では、産総研と各社との共同研究体制により、各社が必要とする製品を原料基質から高効率かつクリーンに変換する新規触媒を開発した（図5）。引き続いて、ベンチ設備を設置したのち、ラボスケールからベンチスケールへとスケールアップし、プロセスの課題抽出、反応へのフィードバックまでを研究開発として行った。今後は、ベンチスケールでの過酸化水素酸化プロセスについてコスト面での確認を再度行い、工業規模製造へ向けて目処がついた後、ユーザーによるサンプルワークを通じての性能評価や安全性評価を進める。

サンプルワークによって良好な評価を受けることを想定して、引き続きプロセス改良およびコスト削減を触媒反応から精製過程まで全てについて検討した後、実機での検討、上市へ進める。具体的な化学品を以下の4種類の要素技術に対応してそれぞれ示す。

①多官能基質の酸化技術開発を通して、IC封止材を製造する。②高分子量基質の酸化技術開発を通して、新規電子材料用接着剤を製造する。続いて生分解性ポリマーの改質剤および相溶化剤の合成技術開発を進める。③易加水分解性基質の酸化技術開発を通して、透明電子材料用途のテルペンオキシドを高純度に製造する。④難酸化性基質の酸化技術を通して、光利用効率を改善する光学材料に使用するモノマー（LCDモノマー）を製造する。このうち①に関してはサンプルワークを概ね完了している。②—④に関しては、ベンチスケールでの検討までほぼ終了している。

製品の実用化—各企業実用化へ向けた基幹触媒技術の開発—

本開発技術により、各材料の製造プロセスにおいて、酸化剤のクリーン化による廃棄物の削減はもとより、反応速度の向上によるエネルギー・電力量の削減、それに伴う CO₂ の排出量削減などを含め、環境負荷を大幅に低減することが可能になった。同時に、不純物の混入をほぼゼロにしたため、本技術による製品は低環境負荷かつ安価に製造できるだけでなく、従来製品をはるかに上回る性能を示した。これら技術開発を行うために投じた予算 4 億 5300 万円に対し、新規技術創出による市場への新規参入に伴う市場規模の大幅な拡大が期待される。半導体封止材や高性能電子材料など機能性化学品の分野に関しては、最先端用途で性能の優位性を武器に市場導入後実績を積んでゆくことで、120 億円の市場規模拡大を見込んでいる。バイオプラスチック材料分野など高分子量基質の新材料創出による市場規模は 100 億円規模に上ると期待される。その他開発製品の市場への新規参入による市場規模拡大効果も含めると総額では 250 億円に上ると推定している。

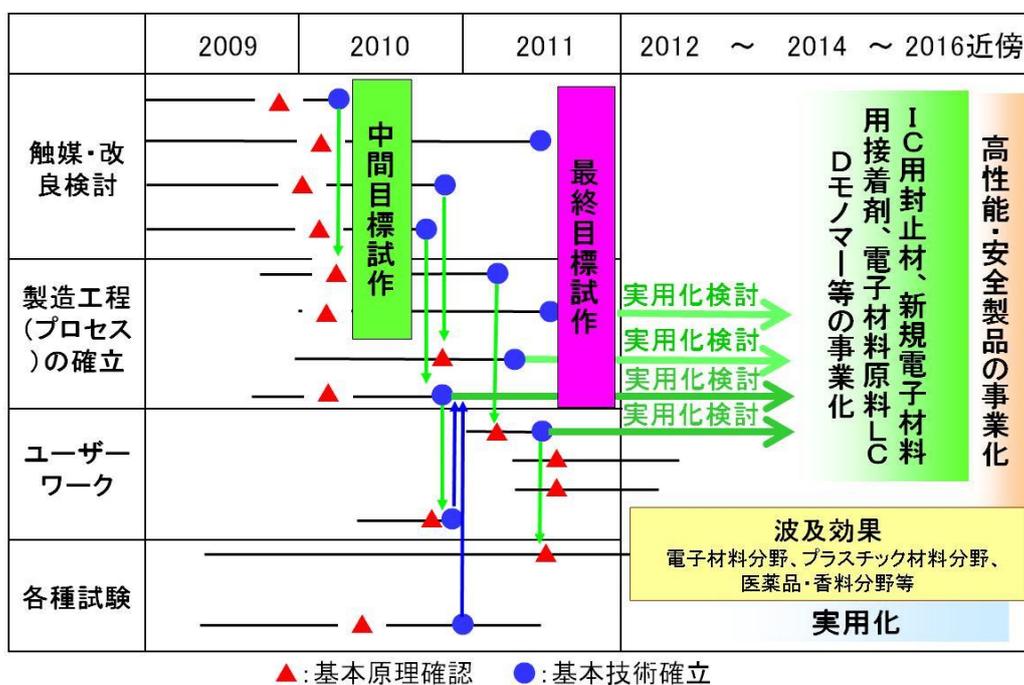


図 6. プロジェクトが考える実用化の定義と可能性

実用化の時期としては、4社のそれぞれ進捗度合いが少しずつ異なるが、早いところでは、2014年には小スケールでの上市を検討しており、IC封止材、接着剤、電子材料原料の提供、LCDモノマー、それぞれについて、いずれも2016年を目処に上市を行うことを予定し、製造プロセスの改良、コストの低減、および市場の開拓、調査を進めている(図6)。

表 基本計画と個別テーマの対応表

個別テーマ	詳細開発テーマ	基本計画の項目番号 および開発目標	詳細開発テーマ毎の目標	達成状況	
東大 G	革新的アクア・固定化触媒 プロセス技術開発	①アクア触媒によるアセトアルデヒド 製造プラント排水中の希薄酢酸回 収技術	①有害物質削減 (1) ・水、アルコール等で機能し、反応率80%以上、選択率90%以上の触媒 プロセスを開発する。 ・生産量(処理量)10kg~数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置に より、実用化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了 後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄 与が期待できる技術レベルを確立すること。	・水層溶け込み量0.1%以下の高活性触媒の開発、水中エステル化反 応の反応率80%以上、選択率90%以上 ・プロセスのコスト試算を実施し、実用性を評価	・酢酸のエステル化に有効な水中で機能する触媒(アクア触媒)を検 討し、目標値(反応率80%、選択率90%)を超える触媒プロセスを達成 ・高活性かつ溶け込み量0.1%以下の触媒の開発を達成 ・酢酸排水処理量300t/日以上を想定での実用化規模プロセスの概念 設計実施
		②固定化触媒を活用する 革新的水素化反応システム開発	②廃棄物、副生成物削減 (1) ・反応率80%、選択率90%、溶出金属回収率98%以上。 ・生産量(処理量)10kg~数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置に より、実用化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了 後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄 与が期待できる技術レベルを確立すること。	・以下の条件を満たした触媒の開発、金属漏出0.1%以下(製品への金 属混入1ppm以下)、触媒回転数:5万回以上 ・連続フローリアクター開発:開発触媒を用いたリアクター内径200mm のフローリアクターを設置し、実用化を目指す基質類での水素化反応 を実施する	・開発触媒の金属漏出0.1%以下、触媒回転数:5万回以上を達成 ・生産量30 kg/日以上を達成。リアクター内径200mmのフローリアク ターを設置し、実用化を目指す基質類での水素化反応を実施
		③グリーンプロセスのための高分 子固定化金属触媒試薬の開発	②廃棄物、副生成物削減 (1) ・反応率80%、選択率90%、溶出金属回収率98%以上。 ・生産量(処理量)10kg~数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置に より、実用化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了 後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄 与が期待できる技術レベルを確立すること。	・反応基質に対応した高分子固定化Os触媒により反応率85%、選択率 95%、金属漏出1%以下、 ・オスミウム触媒の100グラム~10キログラムでの生産法を確立、オス ミウム以外の金属触媒において50グラム~10キログラムでの生産法 を確立、サンプル供給を実施	・PIオスミウム触媒によりステン誘導体の不斉ジヒドロキシル化反 応において、反応率85%、選択率95%を達成、金属漏出1%以下、 ・PIオスミウム触媒のスケールアップ合成(100グラム)を達成、PIカー ボンブラック触媒、PI白金/金触媒、PI白金触媒の100グラムでの生 産法、PMIカーボンブラックパラジウム触媒の50グラムでの生産法を 確立、サンプル供給を実施した。 ・実生産を想定し、カンパトデシモン中間体1モルスケールの合成検討を 行い、金属漏出2%以下、反応率80%以上を達成。
分子研 G	高機能不均一触媒の開発と 環境調和型化学プロセスの 研究開発	①錯体触媒を利用した 水中不均一条件での 精密化学合成法の開発研究	①有害物質削減 (1) ・水、アルコール等で機能し、反応率80%以上、選択率90%以上の触媒 プロセスを開発する。 ・生産量(処理量)10kg~数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置に より、実用化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了 後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄 与が期待できる技術レベルを確立すること。	トリアニールゲイミン類(TPD)の合成 ・反応率80%以上、選択率90%以上、金属漏出2ppm以下、触媒回収 80%以上 ・生産量10kg以上を想定したプロセスの確立	・目的の芳香族アミノ化反応、芳香族カップリングは完全水系条件に て達成。 ・反応率96%、選択率96%、金属漏出<1ppm。また触媒の回収は、 90%以上、回収触媒再利用:10回目において単離率(反応率×選 択率)90%超 ・ベンチスケール装置での合成プロセス確立。 スケールアップは数十グラム/日に留まっているものの、現状の世 界需要に鑑みると特段のスケールアップ検討の必要はないと思われる
		②ナノ触媒を利用した 水中不均一条件での 酸素酸化反応の開発研究	②廃棄物、副生成物削減 (1) ・反応率80%、選択率90%、溶出金属回収率98%以上。 ・生産量(処理量)10kg~数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置に より、実用化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了 後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄 与が期待できる技術レベルを確立すること。	アルキル[オキシエチレン]カルボン酸の合成 ・反応率98%以上、選択率95%以上、金属漏出1ppm以下 触媒回収98%以上、触媒コスト90%削減 ・生産量10kg以上を想定したプロセスの構築	・目的とするアルコール類の酸素酸化反応は完全水系条件にて達 成。 ・反応率99%以上、選択率99%以上、金属漏出<0.1ppm。 触媒回収は、98%以上であり、さらに進んで連続フロー反応系を確立 した。(触媒コスト99%以上の低減に相当。) ・スケールアップ実験では試験サンプルの100グラムスケール合成/ 日を再現よく達成。 連続フロー装置の数十倍スケールの装置設計完了。装置メーカーに よって2~3kg/日相当の再現性確認済み。 本装置を並列化することで10キロ/日以上を製造可能。
		③エステル、アミド類の 高効率・高選択的合成分 法の開発研究	②廃棄物、副生成物削減 (1) ・反応率80%、選択率90%、溶出金属回収率98%以上。 ・生産量(処理量)10kg~数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置に より、実用化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了 後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄 与が期待できる技術レベルを確立すること。	カルボン酸無水物、エステル・アミド類の合成 ・反応率80%以上、選択率90%以上、反応温度170℃以下、反応時間24 時間以内、触媒量5mol%以下または触媒の回収98%以上、生産量100g 以上 ・生産量100g以上 酸化触媒の検討 ・反応率80%以上、反応時間24時間以内、触媒量5mol%以下または触 媒の回収98%以上、生産量10g以上 ・酸化触媒の検討:生産量10g以上	カルボン酸無水物、エステル・アミド類の合成 ・反応率80%以上、選択率90%以上、反応温度170℃以下、反応時間 24時間以内、触媒量1mol%以下 ・100グラムスケール合成/回、200グラムスケール合成/日を達成 酸化触媒の検討 ・反応率90%以上、反応時間24時間以内、触媒量5mol%以下または触 媒の回収98%以上、 ・生産量10g以上
産総研 G	革新的酸化プロセス 基盤技術開発	①多官能性基質 の酸化技術開発	②廃棄物、副生成物削減 (2) ・オレフィン類やケトン類に対して高活性、高選択性を有する酸化触媒 プロセスを開発する。なお、オレフィン類の選択酸化反応では反応率 80%以上、選択率90%以上、ケトン類の選択酸化反応では反応率80%以 上、選択率90%以上とする。 ・生産量10kg~数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用 化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了後、実用化 技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待 できる技術レベルを確立すること	・反応率90%以上、選択率90%以上、用途面としては半導体封止材とし てユーザー配布可能なレベルを目標とする。	・反応率、選択率とも目標である80%以上は達成でき、精製時の溶媒 除去後に、反応基質へのタグステン等の金属分の混入0.1wt%以下 は達成することが出来た。
		②高分子量基質 の酸化技術開発	②廃棄物、副生成物削減 (2) ・オレフィン類やケトン類に対して高活性、高選択性を有する酸化触媒 プロセスを開発する。なお、オレフィン類の選択酸化反応では反応率 80%以上、選択率90%以上、ケトン類の選択酸化反応では反応率80%以 上、選択率90%以上とする。 ・生産量10kg~数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用 化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了後、実用化 技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待 できる技術レベルを確立すること	・各ターゲットポリマーのエポキシ基導入率の目安に対して反応率 80%以上、選択率90%以上 ・ベンチでの大量合成	・左記数値達成、基本処方確立 ・接着剤合成分法確立
		③易加水分解性基質 の酸化技術開発	②廃棄物、副生成物削減 (2) ・オレフィン類やケトン類に対して高活性、高選択性を有する酸化触媒 プロセスを開発する。なお、オレフィン類の選択酸化反応では反応率 80%以上、選択率90%以上、ケトン類の選択酸化反応では反応率80%以 上、選択率90%以上とする。 ・生産量10kg~数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用 化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了後、実用化 技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待 できる技術レベルを確立すること	・テルペン類のエポキシ化において、反応率80%以上、選択率90%以上 ・1トン/年スケールの生産が可能レベルの実証を行う。	・触媒系の開発と化学工学的アプローチによる反応装置開発という 二つのレイクスルーを通して、易加水分解性基質の特有の問題を 解決し、最終目標である反応率、選択率それぞれ80%以上、90%以上 達成 ・年間1t以上の工業的生産の実証を達成した。
		④難酸化性基質 の酸化技術開発	②廃棄物、副生成物削減 (2) ・オレフィン類やケトン類に対して高活性、高選択性を有する酸化触媒 プロセスを開発する。なお、オレフィン類の選択酸化反応では反応率 80%以上、選択率90%以上、ケトン類の選択酸化反応では反応率80%以 上、選択率90%以上とする。 ・生産量10kg~数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用 化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了後、実用化 技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待 できる技術レベルを確立すること	・エポキシ化固定化触媒: 反応率80%、選択率90%、金属回収率90% ・ケトン類の酸化付加: 反応率80%、選択率80% ・ベンチ設備による反応: 生産量1~5kg/日	・シリコン系固定化触媒: 反応率100%、選択率90%、金属回収率90%以 上を達成 ・反応系A: 反応率100%、選択率90%以上を達成 ・50Lベンチ設備による目標、反応成績、生産性の確認 エポキシ化 1.1kg/日、ケトン酸化 1.2kg/日
		⑤過酸化水素を用いた 反応系の基礎研究	②廃棄物、副生成物削減 (2) ・オレフィン類やケトン類に対して高活性、高選択性を有する酸化触媒 プロセスを開発する。なお、オレフィン類の選択酸化反応では反応率 80%以上、選択率90%以上、ケトン類の選択酸化反応では反応率80%以 上、選択率90%以上とする。 ・生産量10kg~数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用 化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了後、実用化 技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待 できる技術レベルを確立すること	・難易度の高い要因を複数持つ基質に適用する高活性・高選択性触 媒の開発、反応率80%以上、選択率90%以上 ・従来の三元系触媒では対応できない複雑で難易度の高い基質の酸 化について新規触媒を設計し、反応率80%以上、選択率90%以上 を達成	・三元系触媒にさらに新規添加剤を組み合わせた処方をして、高難度の 基質に対しそれぞれ反応率80%以上、選択率90%以上を達成 ・鉄触媒による高度エポキシ化、白金触媒による転位酸化、パラジウム 触媒による高選択カルボン酸合成などを開発。それぞれ、反応率80%以 上、選択率90%以上を達成

ナノテク・部材イノベーションプログラム基本計画

1. 目的

このプログラムは、情報通信、ライフサイエンス、環境、エネルギーなど、あらゆる分野に対して高度化あるいは不連続な革新（ジャンプアップ）をもたらすナノテクノロジー及び革新的部材技術を確立するとともに、その実用化や市場化を促進することで、我が国産業の国際競争力の維持・強化や解決困難な社会的課題の克服等を可能とすることを目的とする。

2. 政策的位置付け

○第3期科学技術基本計画（2006年3月閣議決定）

- ・「ナノテクノロジー・材料分野」は、特に重点的に研究開発を推進すべき分野（重点推進4分野）の一つに指定、優先的に資源配分することとされている。
- ・我が国の材料技術は、基礎研究から応用研究、素材、部材の実用化に至るまでの全ての段階において世界のトップレベルを堅持しており、我が国製造業の国際競争力の源泉となっている。

○「イノベーション25」（2007年6月閣議決定）

- ・「ナノテクノロジー・材料分野」は、中長期的に取り組むべき課題として、「1. 生涯健康な社会形成」、「2. 安全・安心な社会形成」、「4. 世界的課題解決に貢献する社会形成」、及び「5. 世界に開かれた社会形成」の分野に位置付けられている。
- ・所要の措置を講じていくことが必要である事項として以下の点が指摘されている。
 - ・学際領域・融合領域における教育等人材育成、拠点形成
 - ・社会受容を促すための積極的な取り組み
 - ・知的財産確保のための戦略的な取り組み

○「経済成長戦略大綱」（2006年7月財政・経済一体改革会議）

- ・「我が国の国際競争力の強化」の取り組みとして、高度な部品・材料産業やモノ作り中小企業の強化が掲げられている。
- ・「技術戦略マップ」の活用等により、ユーザー企業との垂直連携による研究開発を推進することを通して、我が国経済発展の基盤である高品質、高性能な部品・材料産業の強化を図ることが今後の取組として記載されている。

○「新産業創造戦略2005」（2005年6月経済産業省）

- ・部材分野は、新産業群の創出を支える共通基盤技術として位置づけられている。
- ・「高度部材・基盤産業」の集積を形成していることが、「ものづくり」に不可欠な基盤技術のネットワーク化を通じた現場レベルでの迅速かつ高度な摺り合わせを可能としており、我が国「ものづくり」の強みの源泉となっていると記載されている。

3. 達成目標

- ・世界に先駆けて、ナノテクノロジーを活用した不連続な技術革新を実現する。

- ・我が国部材産業の強みを更に強化することで、他国の追随を許さない競争優位を確保するとともに部材産業の付加価値の増大を図る。
- ・ナノテクノロジーや高機能部材の革新を先導することで、これら部材を活用した情報通信、ライフサイエンス、環境、エネルギーなどの幅広い産業の付加価値の増大を図る。
- ・希少金属などの資源制約の打破、圧倒的な省エネルギー社会の実現など、解決困難な社会的課題の克服を目指す。

4. 研究開発内容

[プロジェクト]

I. ナノテクノロジーの加速化領域

ナノテクノロジーを活用した不連続な技術革新を加速・促進する。

(1) 異分野異業種融合ナノテクチャレンジ（運営費交付金）

①概要

革新的なナノテクノロジーの研究開発を促進し、キーデバイスの早期実現を目指すため、大学や研究機関などの川上と企業などの川下の連携、異業種異分野の連携による提案公募によって、ナノテク実用化に向けたチャレンジを支援する。

②技術目標及び達成時期

マテリアル・プロセス研究、加工・計測技術研究、昨今の環境意識向上に対応した研究、社会課題を解決するための基盤技術研究に加え、異分野等の融合研究を推進することにより、2011年度までにナノテクノロジーの産業化のための基盤的技術を確立し、実用化を図る。

③研究開発期間

2005年度～2011年度

II. 情報通信領域

ナノテクノロジーや革新的部材開発技術を駆使して既存技術の微細化の壁を突破し、電子デバイス・光デバイスで世界をリードするとともに、高度化された製造技術の開発を行う。

(1) ナノエレクトロニクス半導体新材料・新構造技術開発—うち新材料・新構造ナノ電子デバイス（運営費交付金）

①概要

従来の半導体は、性能の向上（高速化、低消費電力化、高集積化）を確保するために微細化が進められてきたが、絶縁性、誘電率等の物理的限界、微細化に伴う製造コストの増大など、集積度向上によるメリットが十分達成されなくなっている。

本研究開発では、シリコンで培った微細化技術やデバイス原理を活用しながら、シリコン材料の物理的限界を突破するための“新材料”および“新（デバイス）構造”の開発を行い、次世代の電子デバイス技術を確立する。

②技術目標及び達成時期

2011年度までに、産業界が10年後を見据えた将来の電子デバイスを開発する際に、産業技術として活用できるかどうかの実現可能性を見極め、また技術シーズを確立する。

③研究開発期間

2007年度～2011年度

(2) スピントロニクス不揮発性機能技術プロジェクト (運営費交付金)

①概要

将来のエレクトロニクスにおいて中核的な基盤技術となり得るスピントロニクス技術（電子の電荷ではなく、電子の自転＝「スピン」を利用する全く新しいエレクトロニクス技術）を確立するため、強磁性体ナノ構造体におけるスピンの制御・利用基盤技術を開発し、我が国が世界に誇るシーズ技術を核として、産学官の共同研究体制を構築し、将来の中核的エレクトロニクス技術における我が国の優位性の確保を図る。

②技術目標及び達成時期

2010年度までに、超高集積で高速な不揮発性メモリとして期待されるスピンメモリのための基盤技術を確立する。また、新ストレージ・メモリデバイス、不揮発性スピン光機能素子、スピン能動素子等の新しい動作原理によるスピン新機能素子の実現のための基盤技術を確立する。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

(3) ナノエレクトロニクス半導体新材料・新構造技術開発—うち窒化物系化合物半導体基板・エピタキシャル成長技術の開発 (運営費交付金) (再掲)

①概要

窒化物系化合物半導体は、パワーデバイス、高周波デバイス、発光デバイス等、重要なデバイスの飛躍的な性能向上と消費電力削減への貢献を期待されている。このため、従来の半導体材料では実現出来ない領域で動作可能なハイパワー・超高効率の電子素子、超高速電子素子等の作成に必要な窒化物系化合物半導体先進技術の国際競争力を強化すべく、高品質かつ大口径単結晶基板、高品質かつ大口径エピタキシャル成長技術等の開発を行う。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2011年度までに、次世代窒化物系半導体デバイスを実現する以下結晶作製技術を開発する。

1) 基板技術 (GaN, AlNバルク結晶作製技術)

- ・口径2～4インチで高品質エピ成膜を可能とする低コストの単結晶基板作製技術の確立。

2) エピ技術 (エピタキシャル成膜及び計測評価技術)

- ・低欠陥高品質エピ層を実現する成膜技術及び膜成長過程を計測評価する技術の確立。
- ・高出力かつ高安定動作可能なエピ層の実現
- ・高耐圧超高速な新しいデバイス構造の開発

③研究開発期間

2007年度～2011年度

(4) 三次元光デバイス高効率製造技術（運営費交付金）

①概要

波面制御素子による空間光変調技術を確立し、ガラス中に三次元造形を高精度に一括形成できるプロセス技術を開発する。この技術を用いて、具体的な光デバイスを作製し、当該技術の有効性の確認と市場への早期参入のための基盤技術を確立する。

②技術目標及び達成時期

2010年度までに波面制御素子による空間光変調技術を用いたフェムト秒レーザー照射技術等を確立し、高精度の光デバイスを高速に作製できるプロセス技術を開発する。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

(5) 低損失オプティカル新機能部材技術開発*（運営費交付金）（再掲）

①概要

近接場光の原理・効果を応用した低損失オプティカル新機能部材技術を開発し、実用化の目処を得ることを目的とする。動作原理に近接場光を用いるオプティカル新機能部材は、従来の材料特性のみに依存した光学部品では不可能な機能・性能を発揮し、液晶プロジェクター・液晶ディスプレイなど情報家電の省エネルギー、高性能・高信頼化を図る上でのキーデバイスとなることが期待できる。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2010年度までに、共通基盤技術として、ナノ構造部材の設計・作製・評価技術を開発するとともに、ナノ構造部材に発現する近接場光の機能を動作原理とする低損失オプティカル新機能部材を検討し機能を確認する。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

(6) 超フレキシブルディスプレイ部材技術開発*（運営費交付金）（再掲）

①概要

製造工程等の省エネルギー化を実現するために行う。従来、表示デバイスの製造には、真空蒸着と高温下での焼成と、それに伴う排ガス排水処理が必須であった。これを、ロールtoロール方式に代替することで常圧、常温下での製造を実現し、フレキシブルな薄型ディスプレイを製造する。そのために、有機TFT材料およびコンタクトプリント技術等を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術的目標及び達成時期

2009年度までに、実用化に向けた実証のための巻き取り方式ディスプレイのプロトタイプを試作する。またフレキシブルデバイス材料開発に貢献する部材ならびに薄膜複合化技術を開発し、これらをパネル化するための実用化技術を確立する。

③研究開発期間

2006年度～2009年度

(7) 半導体機能性材料の高度評価基盤開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

情報通信機器の高機能化や低消費電力化等の要求を満たす半導体集積回路を実現するため、新たな機能性材料開発に貢献する評価基盤技術を開発し、さらに開発した機能性材料を半導体及び半導体集積回路に適用できる統合的なソリューション技術を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術的目標及び達成時期

2011年度までに、半導体デバイス性能に直結する接合素子の性能性及び信頼性等、半導体製造プロセス全体を俯瞰しつつ、機能性材料開発が可能となる評価基盤技術を開発し、開発した機能性材料を用いた統合的なソリューションが提案できる材料評価基盤を構築する。

③研究開発期間

2009年度～2011年度

Ⅲ. ライフサイエンス・健康・医療領域

ナノテクノロジーを駆使して初めて可能となる診断・治療により革新的な医療を実現する。

(1) 次世代DDS型悪性腫瘍治療システムの研究開発事業（運営費交付金）

①概要

DDSのさらなる裾野の拡大、及び早期実用化を目指し、様々な外部エネルギー（機器技術）と薬剤技術を組み合わせることにより、比較的人体の深部にある臓器（肺、消化器）等のがんを対象としたDDS型治療システムの開発を行う。

②技術目標及び達成時期

光線力学治療システムの前臨床試験の開始及び治療効果・安全性の検証と、超音波診断・治療システムの前臨床試験を可能とする薬剤及び装置の完成に関する開発を難治性がんの治療に向けて行う。

③研究開発期間

2006年度～2009年度

(2) 個別化医療実現のための技術融合バイオ診断技術開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

我が国が有する微細加工技術・表面処理技術といったナノテク等の強みを活かし、染色体異常を高感度、高精度かつ迅速、安価で非コード領域までを検出するゲノムアレイや解析基盤技術開発を行うとともに、全自動解析システムの開発を行う。

②技術目標及び達成時期

2010年度までに、BAC（染色体の断片）を用いた非コード領域を含むゲノム全領域を検出できる高精度ゲノムアレイを開発する。さらに、臨床現場において、微量サンプル（数ナノグラム）から、12時間以内に染色体異常（増幅、欠失、コピー数多型等）を、低コストかつ定量性・再現性を確保して検出ができる自動染色体異常解析シス

テムのプロトタイプを開発する。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

(3) 分子イメージング機器研究開発プロジェクト（運営費交付金）

i) 生活習慣病超早期診断眼底イメージング機器研究開発プロジェクト

①概要

細小血管の分子レベルでの代謝機能を非侵襲で可視化する細胞代謝イメージングを実現し、代謝異常を細胞レベルで観察することにより、生活習慣病に起因する血管病変等合併症の早期の診断・治療を図る。

②技術目標及び達成時期

2009年度までに、ナノテクノロジーを活用した光学基盤技術等を確立することにより、細胞やタンパク質レベルの組織診断を可能とする機器を開発する。

③研究開発期間

2005年度～2009年度

ii) 悪性腫瘍等治療支援分子イメージング機器研究開発プロジェクト

①概要

良性・悪性の区別も含めた腫瘍の超早期診断を実現するため、悪性腫瘍に特異的に反応する標的物質を利用することにより生体細胞の分子レベルの機能変化を抽出・検出できる機器の開発を行う。

②技術目標及び達成時期

2009年度までに、全身で3mm、局所で1mmの分解能を有する分子イメージング機器を開発する。

③研究開発期間

2005年度～2009年度

iii) 新規悪性腫瘍分子プローブの基盤技術開発

①「概要

分子イメージングにおいて、病変を可視化する分子プローブの開発を一層強化・促進するため、分子プローブの基盤要素技術と評価システムの開発を行う。

②技術目標及び達成時期

2009年度までに、新規の近赤外蛍光分子プローブ及び小動物用近赤外蛍光イメージングシステムを試作し、同システムを用いて分子プローブのがん特異性を定量的に評価するための条件等を明らかにする。

③研究開発期間

2008年度～2009年度

IV. エネルギー・資源・環境領域

ナノテクノロジーや革新的部材開発技術を駆使して、エネルギー・資源・環境等の社会的制約を克服すると同時に我が国の強みであるナノテク関連産業・部材産業の競争力を強化する。

(i) エネルギー制約の克服

(1) サステナブルハイパーコンポジット技術の開発 (運営費交付金) (再掲)

①概要

炭素繊維複合材料は、軽量、高強度等の優れた特性を有している。従来の熱硬化性樹脂を用いた炭素繊維複合材料では成形性・加工性に乏しくリサイクルが困難であったため、熱可塑性樹脂を用いた炭素繊維複合材料 (CFRTP) の開発を行う。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2012年度までに、炭素繊維と熱可塑性樹脂との中間基材を開発し、高速成形技術、接合技術及びリサイクル技術を開発する。

③研究開発期間

2008年度～2012年度

(2) マルチセラミックス膜新断熱材料の開発 (運営費交付金) (再掲)

①概要

住宅やビルなどの冷暖房における大幅な省エネを実現する画期的な断熱性能を持つ壁および窓材料を、セラミックスのナノ多孔体構造やポリマー複合化構造などからなるマルチセラミックス膜アセンブリ技術によって開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2011年度までに、熱貫流率 (熱の伝わりやすさ) が $0.3 \text{ W/m}^2\text{K}$ 以下、壁厚さ 10 mm 程度の超断熱壁材料および熱貫流率が $0.4 \text{ W/m}^2\text{K}$ 以下、光 (可視光) 透過率が 65% 以上 (Low-E ガラス使用)、ヘイズ率が 1% 以下の超断熱窓材料を実現する。

③研究開発期間

2007年度～2011年度

(3) カーボンナノチューブキャパシタ開発プロジェクト (運営費交付金) (再掲)

①概要

高純度、高密度に配向した長尺の単層カーボンナノチューブの大量合成技術を開発するとともに、これを用いた従来よりも格段にパワー (電力) と蓄電量が大きなキャパシタを開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2010年度までに、単層カーボンナノチューブの高度配向技術及び大量生産技術を確立するとともに、キャパシタ製造技術を確立することで、 20 Wh/Kg の高エネルギー密度と耐久性を有する電気二重層キャパシタを開発する。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

(4) 革新的省エネセラミクス製造技術開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

小型炉設備で生産可能な小型セラミック中空ユニットを複数組みあわせることで、これまでその製造が難しかった複雑形状かつ大型セラミクス部材を省エネで製作することができる革新的なセラミック部材製造技術を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2013年度までに、高機能化された小さな精密ブロックを立体的に組み上げ、高効率で接合、一体化をし、複雑形状や大型の部材を製造可能とする革新的なプロセス技術の基盤を確立し、高耐性部材、高温断熱部材及び高比剛性部材の試作を行う。

③研究開発期間

2009年度～2013年度

(5) 革新的ガラス溶融プロセス技術開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

プラズマ等による高温を利用し瞬時にガラス原料をガラス化することにより、極めて効率的にガラスを気中で溶融（インフライトメルティング法）し省エネに資する革新的ガラス溶融プロセス技術を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2012年度までに、インフライトメルティング法により原料を溶解する技術、カレットをガラス原料として利用するため高効率で加熱する技術、カレット融液とインフライトメルティング法による原料融液とを高速で混合する技術を開発する。

③研究開発期間

2008年度～2012年度

(6) 高温超電導電力ケーブル実証プロジェクト（運営費交付金）（再掲）

①概要

革新的な高効率送電技術を確立して高温超電導ケーブルの実用化を促進するため、工業生産プロセスで実用化レベルに達している高温超電導線材（DIBSCCO等）を活用し、首都圏の系統に接続する実証試験及び評価を行う。

なお、本事業は、発電用施設による電気の供給の円滑化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2011年度までに、200MVA級の中間接続部を有した三心一括型高温超電導ケーブルを、冷却装置や保護装置などの付帯設備とともに66KV実系統に接続して、12ヶ月以上の長期連系試験を行うことによって総合的な安全性や信頼性を実証する。

③研究開発期間

2007年度～2012年度

(7) 発電プラント用超高純度金属材料の開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

超高純度金属材料を発電設備の蒸気配管等に実用化することを目指し、高純度金属材料の高度化に向けた低コスト・量産化製造技術を開発し、実使用環境における超高純度金属材料の耐久性試験等を行う。

なお、本事業は、発電用施設における電気の供給の円滑化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2009年までに、不純物総量100ppm未満、溶解量数100kg以上の低コスト・量産化技術製造技術を開発するとともに、製造された超高純度材料が発電プラントの各種機器に適用でき、本材料の持つ優れた特性を長期に亘って発揮できることを確認する。

③研究開発期間

2005年度～2009年度

(8) セラミックリアクター開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

低温域かつ高効率なエネルギー変換を可能とする次世代型セラミックリアクターの実現のため、世界最高効率の燃料電池マイクロセルの集積構造技術等の開発を行う。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2009年度までに、新電解質材料の適用や電極反応の高効率化等による、低温作動時（650℃以下）での出力性能を向上させる材料技術と共に、マイクロセルの集積構造化や精緻なインターフェース構築のための製造プロセス技術を開発。そして、これらの技術を統合することにより、次世代型セラミックリアクターとしてのプロトタイプモジュール実証（出力性能2kW/L等）を行う。

③研究開発期間

2005年度～2009年度

(ii) 資源制約の克服

(1) 希少金属代替材料開発プロジェクト（運営費交付金）

①概要

ハイテク製品の製造に不可欠であり世界的な需給逼迫が懸念されるレアメタル（タングステン、インジウム、ディスプロシウム）について、ナノテクノロジー等の最先端技術を活用して、代替材料開発・使用量削減を行う。なお、平成21年度からは、これまでの対象3鉱種に加えて、白金、セリウム、テルビウム等も研究開発の対象とする。

②技術目標及び達成時期

タングステン、インジウム、ディスプロシウムについては2011年度までに、白金、セリウム、テルビウム等については2013年度までに、使用原単位について現状と比較して削減ができる製造技術を開発し、ユーザー企業、大学等の外部機関に対して機能

評価のためにラボレベルで提供（試料提供）できる水準に至るまでの技術を確立することを目標とする。また、製品の機能や製造コストは現状と同等であることを少なくとも維持することを前提とする。

〔対象元素〕

- ・超硬工具向けタングステン（W）
- ・透明電極向けインジウム（In）
- ・希土類磁石向けディスプロシウム（Dy）
- ・排ガス浄化向け白金族（Pt）
- ・精密研磨向けセリウム（Ce）
- ・蛍光体向けテルビウム、ユーロピウム（Tb、Eu）

③研究開発期間

2007年度～2013年度

（iii）環境制約の克服

（1）グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発

①概要

化学品等の製造プロセスにおけるシンプル化、クリーン化、原材料・資源の多様化・有効利用、更に、廃棄物の減容化、容易なりサイクル等を実現し、産業競争力強化、国際規制の先取りを図って、将来にわたっても持続的に化学品等を製造するための必要なGSC（グリーン・サステイナブルケミストリー）プロセスを開発する。

②技術的目標及び達成時期

2015年度までに、有害な化学物質を削減できる又は使わない革新的な製造プロセス及び化学品の開発、廃棄物、副生成物を削減できる革新的な製造プロセス及び化学品の開発、資源生産性を向上できる革新的な製造プロセス及び化学品の開発を行う。

③研究開発期間

2008年度～2015年度

（2）革新的マイクロ反応場利用部材技術開発*（運営費交付金）（再掲）

①概要

マイクロリアクター、ナノ空孔などの精密反応場を利用し、反応分子の自由な運動を活性種レベルで制御した革新的な化学反応プロセスと新機能材料創成技術の確立を目指す。さらに、マイクロリアクターとナノ空孔反応場の組み合わせ、各反応場とマイクロ波等のエネルギー供給手段との組み合わせにより協奏的反応場を構成し、さらなる高効率生産等を可能にする基盤技術を開発する。これらの技術の確立により、反応システムの小型化、多段プロセスの簡略化等を通じた化学産業の製造工程等の省エネルギー化を図る。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術的目標及び達成時期

2010年度までに、マイクロリアクター技術、ナノ空孔技術を軸とし、これらに更にマイクロ波、超臨界流体等のエネルギー供給手段を組み合わせた協奏的反応場を構成

することにより、これまでにない革新的な化学反応プロセスを確立し、新機能材料創成技術を実現する。さらに、これらの技術を用いて高性能・高機能電子材料、医薬中間体などの部材を開発する。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

(3) 循環社会構築型光触媒産業創成プロジェクト（運営費交付金）

①概要

我が国で発見された光触媒技術の新産業分野開拓を目指し、サイエンスにさかのぼることにより、紫外光のみならず、可視光レベルでの性能・機能の飛躍的な向上のための技術基盤を構築する。これにより、従来では困難とされてきた医療関連分野や住宅建材分野、環境関連分野等に光触媒技術を導入し、光触媒の最大のメリットである自然エネルギーを利用した安心・安全な環境を提供できる技術を開発する。

②技術目標及び達成時期

2011年度までに、材料レベルで紫外光応答型2倍、可視光応答型10倍の感度向上を達成し、その高感度光触媒を適用した薄膜プロセス技術の基盤技術を確立する。

③研究開発期間

2007年度～2011年度

(4) 高感度環境センサ部材開発*

①概要

ダイオキシンをはじめとする極微量有害有機物質を超高感度で安価かつ簡易に計測するために、高感度セラミックセンシング材料を用いた環境センサーを開発する。

②技術目標及び達成時期

2010年度までに、ダイオキシン類、エストラジオール及びビスフェノールAについて、0.001ng・mlの濃度において有意な電気信号として検出し得る小型・携帯型計測器に挿入可能な寸法のセンサ部材の開発を目標とする。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

(5) 次世代高信頼性ガスセンサ技術開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

一酸化炭素中毒やガス漏れなどのガス事故を限りなくゼロに近づけるため、センサ素子のナノレベルでのメカニズム解析及び開発設計を行い、コードレスで高信頼性を有する次世代高信頼性ガスセンサ（COセンサ・メタンセンサ）を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2011年度までに、最先端のナノテクノロジー及びMEMS技術を導入し、電池駆動で5年以上の長寿命、高信頼性（数百ppm以下の故障率）、低コストなCOとメタンのセンサを開発する。

③研究開発期間

2008年度～2011年度

V. 材料・部材領域

極めて広範囲な産業領域に波及する材料・部材領域について、ユーザー製造業等との連携（川上・川下連携）を促進し、高度な部材産業群の「すり合わせ力」を一層強化する。

(1) 鉄鋼材料の革新的高強度・高機能化基盤研究開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

プラント、構造物や自動車等の革新的な高効率化、省エネルギー化、長寿命化、安全・安心化を図るため、最新の科学的知見を導入し、鉄鋼材料及び鋼構造体を超高機能化する基盤的研究開発を行う。具体的には、高強度鋼、高機能鋼の実用化拡大の基盤となる(1)高級鋼厚板(高強度鋼、極低温用鋼、耐熱鋼)溶接部の信頼性・寿命を大幅に向上する溶接施工技術(高密度・清浄熱源溶接技術)、及び金属組織制御技術を基本とする材料技術(クリープ破壊及び水素破壊の機構説明等を踏まえた)の開発、(2)部材の軽量化を図るために強度、加工性等の最適機能傾斜を付与する機械部品鍛造技術(駆動部材の信頼性確保のための耐疲労破壊特性の向上を踏まえた)の開発を行う。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2011年度までに、高級鋼厚板(高強度鋼・極低温用鋼・耐熱鋼)の溶接を予熱・後熱なしに可能とする溶接技術と材料技術を開発するとともに、傾斜機能部材の鍛造技術を開発する。

③研究開発期間

2007年度～2011年度

(2) 超ハイブリッド材料技術開発（運営費交付金）

①概要

従来実現が不可能と考えられていた相反する複数機能(トレードオフ機能)を両立できる材料を、異種素材の組合せ(ハイブリッド化)により実現するための技術を開発する。要素技術として、異種材料間の界面挙動をシミュレーション技術等により解明し、ナノレベルよりもさらに微小な原子・分子レベルでのハイブリッド化構造・配列制御のための合成技術を開発する。従来の単一材料では実現困難であったトレードオフの性能を引き出すことで、自動車用構造材料、パワーデバイス用材料、光学材料等を出口イメージとした、高機能革新部材製造に必要な技術基盤を開発する。

②技術目標及び達成時期

2011年度までに、電気・電子材料、光学材料、その他工業材料について従来材料では実現できなかった相反機能を解消するとともに、市場評価が可能な成果物を供試し、市場(ユーザー)から、客観的な実用化研究開発課題を抽出する。また、単なる相反機能の解消ではなく、相反機能を制御・実現する技術を開発する。

③研究開発期間

2007年度～2011年度

(3) 先端機能発現型新構造繊維部材基盤技術の開発* (運営費交付金)

①概要

電界紡糸や熔融紡糸等により創製される極微細な繊維状材料に対してナノオーダーの成形加工や微細な界面加工ならびに複合化することで材料を高機能化した革新的部材を創出する。高機能新材料を求めるユーザーの要望を満たす繊維の極微細加工と高次複合化を解決する基盤技術開発を行う。

②技術的目標及び達成時期

2010年度までに、電界紡糸法による繊維高機能化、大型装置化技術およびナノ熔融分散紡糸法による超極細炭素繊維製造技術を開発し、これら基盤技術を活用して、高性能・高機能電池用部材、高性能・高機能フィルター用部材、高性能・高機能医療衛生用・産業用部材を開発する。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

(4) 次世代光波制御材料・素子化技術* (運営費交付金) (再掲)

①概要

ガラス材料に関する精密モールド技術を確立し、機能性の高い光波制御素子を低コストで生産できるプロセス技術を開発することで部材の小型化・高機能化を図りつつ、省エネを実現する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2010年度までにサブ波長レベルの微細構造をガラス表面にモールド成形する技術を実現し、実装可能な具体的なデバイスを作製する。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

(5) 高機能複合化金属ガラスを用いた革新的部材技術開発 (運営費交付金)

①概要

複合化金属ガラス(金属ガラスマトリックス中に第二相として微結晶や微粒子または微小空隙等を分散させたもの)を創製して、次世代高密度記録媒体、超微小モータ用部材および高強度・高導電性電気接点部材を開発する。

②技術目標及び達成時期

2011年度までに、複合化金属ガラス合金を創製し、従来の金属ガラス単層合金の持つ優れた特徴に加えて、塑性加工性、硬磁気特性、高電気伝導性等を付与する。この複合化金属ガラスの新規特性を用いて、従来の金属ガラス単層合金では為しえなかった革新的部材の開発を行い、さらに多様な工業製品に応用することで、我が国産業の優位性を確保する。

③研究開発期間

2007年度～2011年度

(6) マグネシウム鍛造部材技術開発プロジェクト* (運営費交付金)

①概要

マグネシウム合金部材について、製品歩留まりが高く、高耐疲労性を付与する鍛造技術の開発を行う。また、循環型素材としてのマグネシウム合金部材の特性を活かし、リサイクル材の鍛造用ビレット化に係る課題抽出を行う。当該技術開発により、マグネシウム鍛造部材製造技術の基盤を構築し、我が国の家電、自動車等の川下産業の競争力の強化に不可欠な高度部材を供給する。

②技術目標及び達成時期

2010年度までに高強度・高耐疲労・加工性に優れたマグネシウム鍛造技術を確立する。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

VI. 共通基盤領域

ナノテクノロジー、部材分野の研究開発に必要な加工・計測・解析技術等の共通基盤の確立とともに、リスク不安に対処したリスク管理手法を開発し、社会に貢献する産業化の支援を相互的に推進する。

(1) ナノ粒子の特性評価手法開発 (運営費交付金)

①概要

ナノ粒子のキャラクタリゼーション、計測技術の確立とともに、生体影響等評価手法、暴露評価手法及びナノテクノロジーによるリスク不安に対処したリスク管理手法を開発する。

②技術目標及び達成時期

2010年度までに、生体影響等評価手法、暴露評価手法及びリスク評価手法を開発し、ナノ粒子のリスク評価及び管理の考え方の提言を行う。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

注：*印のある研究開発プロジェクトは、2006年度より開始された新産業創造高度部材基盤技術開発の一環として実施しているもの。

5. 政策目標の実現に向けた環境整備（関連施策）

ナノテクノロジーは、情報通信、ライフサイエンス、環境、エネルギーなどの分野における科学技術の進歩や課題解決に貢献する重要な技術シーズである。そのため、ナノテクノロジーの研究開発と一体となった関連施策を実施することで、その成果を市場に出していくことが重要である。主な関連施策を、以下に示す。

〔技術戦略マップ〕

- ・NEDO及び経済産業省では、技術戦略マップを策定、毎年改訂し、ナノテクノロジー・部材分野の将来の方向性を見定めながら、合理的かつ効果的な研究開発プロジェクトを推進している。また、技術戦略マップを活用して、多様な連携（川上川下の垂直連携、異業種間の水平連携など）による研究開発を促進、支援し、当該分野の技術革新を促進している。

〔サンプル提供・実用化促進〕

- ・NEDOでは、実施するナノテクノロジー関連の研究開発プロジェクト成果のサンプルを対象として、それらを活用した用途の開発、実用化ないし製品化提案を有する企業とのマッチングを図ることで、プロジェクトの事業化を促進する取組みを実施している。

〔標準化〕

- ・経済産業省では、ナノテクノロジー関連の研究開発成果を社会及び市場等に普及するための環境整備として、ナノテクノロジーの標準化活動（ISO/IEC、JIS）を推進している。

〔広報〕

- ・ナノテクノロジーに関する先端技術及び製品等の世界最大の展示会である「nano tech」が毎年日本で開催されている。

〔社会受容〕

- ・ナノテクノロジーの産業化の推進とともに、ナノ粒子のキャラクタリゼーション技術や人の健康や環境に及ぼす影響等の潜在的な課題に関する知見を蓄積する等のナノテクノロジーの社会受容に対する取組みを推進している。
- ・経済産業省では、2006年度から「ナノ粒子の特性評価手法開発」を開始し、工業ナノ粒子の有害性評価手法、また、そのリスク評価手法の確立を目標としたプロジェクトを開始しているところ。
- ・OECDでは、2006年9月、化学品委員会に工業ナノ材料作業部会（WPMN）が設置され、代表的な14種の工業ナノ材料について、試験計画の合意と試験実施を目的とする「スポンサーシッププログラム」が実施されている。スポンサーシッププログラム対象物質のうち、カーボンナノチューブ（単層、多層）、フラーレンの3物質については日本が中心となって担当し、「ナノ粒子の特性評価手法開発」等の成果で貢献している。

〔人材育成〕

- ・経済産業省では、「製造中核人材育成事業」を実施しており、産学連携による波及効果の高い人材育成プログラムを開発、実践している。ナノテクノロジー関連の人材育成プログラムも複数実施している。

（例）ナノテク製造中核人材の養成プログラム

概要：情報家電、燃料電池、ロボット、医療機器、バイオ等の応用分野において、その産業の基盤と創出を支える中堅企業を対象として、「基礎加工技能・技術、特殊な要素技能・技術に習熟し、製造技術の高度化を図る人材」及び「豊富なナノ加工プロセスの知識や先端機器を使いこなすノウハウ等を習熟し、製造現場の技能・技術を統括できず人材」を育成するもの。

- ・ N E D Oでは、我が国の産業技術の発展のため、先端分野や融合分野の技術を支える人材の育成と、人的交流の面から産学連携を促進するための「場」の形成を促進する取組みを実施している（N E D O特別講座）。具体的には、優れた成果を生み出しつつあり、大学が技術の中核となっている研究開発プロジェクトをコアプロジェクトとし、そのプロジェクトリーダーの所属大学に拠点を設置し、関連技術の人材育成、人的交流の拡大、周辺研究の実施を行うもの。ナノテクノロジー関連の研究開発プロジェクトも複数実施している。

〔関係機関との連携〕

- ・ ナノエレクトロニクス半導体新材料・新構造技術開発—うち新材料・新構造ナノ電子デバイスプロジェクト、希少金属代替材料開発プロジェクトにおいては、文部科学省との合同会議を設置するなど、連携しつつプロジェクトを推進している。

〔他省庁との連携〕

- ・ 総合科学技術会議／連携施策群において、「ナノバイオテクノロジー」「ナノテク研究推進と社会受容」等が設置され、関係省庁と連携して実施している。

6. 研究開発の実施に当たっての留意事項

事業の全部又は一部について独立行政法人の運営費交付金により実施されるもの（事業に（運営費交付金）と記載したもの）は、中期目標、中期計画等に基づき、運営費交付金の総額の範囲内で、当該独立行政法人の裁量によって実施されるものである。

7. 改訂履歴

- (1) 平成12年12月28日付け制定。
- (2) 平成14年2月28日付け制定。材料ナノテクノロジープログラム基本計画（平成12・12・27工総第16号）は、廃止。
- (3) 平成15年3月10日付け制定。ナノテクノロジープログラム基本計画（平成14・02・25産局第8号）は、廃止。
- (4) 平成16年2月3日付け制定。ナノテクノロジープログラム基本計画（平成15・03・07産局第1号）は、廃止。
- (5) 平成17年3月31日付け制定。ナノテクノロジープログラム基本計画（平成16・02・03産局第7号）は、廃止。
- (6) 平成18年3月31日付け制定。ナノテクノロジープログラム基本計画（平成17・03・25産局第4号）は、廃止。
- (7) 平成19年4月2日付け制定。ナノテクノロジープログラム基本計画（平成18・03・31産局第13号）は、廃止。
- (8) 平成14年2月28日付け制定。
- (9) 平成15年3月10日付け制定。革新的部材産業創出プログラム基本計画（平成14・02・25産局第9号）は、廃止。
- (10) 平成16年3月7日付け制定。革新的部材産業創出プログラム基本計画（平成15・03・07産局第5号）は、廃止。
- (11) 平成17年3月31日付け制定。革新的部材産業創出プログラム基本計画（平成16・03・07産局第5号）は、廃止。
- (12) 平成18年3月31日付け制定。革新的部材産業創出プログラム基本計画（平成17・03・25産局第3号）は、廃止。
- (13) 平成19年4月2日付け制定。革新的部材産業創出プログラム基本計画（平成18・03・31産局第14号）は、廃止。
- (14) 平成20年4月1日付け、ナノテク・部材イノベーションプログラム基本計画制定。ナノテクノロジープログラム基本計画（平成19・03・20産局第1号）および革新的部材プログラム基本計画（平成19・03・19産局第4号）は、本イノベーションプログラム基本計画に統合することとし、廃止。
- (15) 平成21年4月1日付け制定。ナノテク・部材イノベーションプログラム基本計画（平成20・03・24産局第1号）は、廃止。

ナノテク・部材イノベーションプログラム基本計画

平成２２年４月１日

産業技術環境局

製造産業局

1. 目的

「新成長戦略（基本方針）」（２００９年１２月閣議決定）に記載されている我が国の強みを活かした「課題解決型国家」の実現に向け、世界をリードする「グリーン・イノベーション」、「ライフ・イノベーション」などを迅速に推進し、課題解決とともに新たな成長の実現を目指す。

具体的には、ナノテク・部材イノベーションプログラムにおいては、情報通信、ライフサイエンス、環境、エネルギーなど、あらゆる分野に対して高度化あるいは不連続な技術革新（ジャンプアップ）をもたらすナノテクノロジー及び革新的部材技術を確立するとともに、その実用化や市場化を促進することで、我が国産業の国際競争力の維持・強化や解決困難な社会的課題の克服等を可能とすることを目的とする。

2. 政策的位置付け

○新成長戦略（基本方針）（２００９年１２月閣議決定）

- ・「（２）グリーン・イノベーションによる環境・エネルギー大国戦略」「（３）ライフ・イノベーションによる健康大国戦略」「（５）科学・技術立国戦略」に対応

○第３期科学技術基本計画（２００６年３月閣議決定）

- ・「ナノテクノロジー・材料分野」は、特に重点的に研究開発を推進すべき分野（重点推進４分野）の一つに指定、優先的に資源配分することとされている。
- ・我が国の材料技術は、基礎研究から応用研究、素材、部材の実用化に至るまでの全ての段階において世界のトップレベルを堅持しており、我が国製造業の国際競争力の源泉となっている。

○「イノベーション２５」（２００７年６月閣議決定）

- ・「ナノテクノロジー・材料分野」は、中長期的に取り組むべき課題として、「１．生涯健康な社会形成」、「２．安全・安心な社会形成」、「４．世界的課題解決に貢献する社会形成」、及び「５．世界に開かれた社会形成」の分野に位置付けられている。
- ・所要の措置を講じていくことが必要である事項として以下の点が指摘されている。
 - ・学際領域・融合領域における教育等人材育成、拠点形成
 - ・社会受容を促すための積極的な取り組み
 - ・知的財産確保のための戦略的な取り組み

3. 達成目標

- ・世界に先駆けて、ナノテクノロジーを活用した不連続な技術革新を実現する。
- ・我が国部材産業の強みを更に強化することで、他国の追随を許さない競争優位を確保するとともに部材産業の付加価値の増大を図る。

- ・ ナノテクノロジーや高機能部材の革新を技術先導することで、これら部材を活用した情報通信、ライフサイエンス、環境、エネルギーなどの幅広い産業の付加価値の増大を図る。
- ・ 希少金属などの資源制約の打破、省エネルギー化を目指した低炭素社会の実現など、解決困難な社会的課題の克服を目指す。

4. 研究開発内容

[プロジェクト]

I. ナノテクノロジーの加速化領域

ナノテクノロジーを活用した不連続な技術革新を加速・促進する。

(1) 異分野異業種ナノテクチャレンジ（運営費交付金）

①概要

革新的なナノテクノロジーの研究開発を促進し、キーデバイスの早期実現を目指すため、大学や研究機関などの川上と企業などの川下の連携、異業種異分野の連携による提案公募によって、ナノテク実用化に向けたチャレンジを支援する。

②技術目標及び達成時期

マテリアル・プロセス研究、加工・計測技術研究、昨今の環境意識向上に対応した研究、社会課題を解決するための基盤技術研究に加え、異分野等の融合研究を推進することにより、2014年度までにナノテクノロジーの産業化のための基盤的技術を確立し、実用化を図る。

③研究開発期間

2005年度～2014年度

II. 情報通信領域

ナノテクノロジーや革新的部材開発技術を駆使して既存技術の微細化の壁を突破し、電子デバイス・光デバイスで世界をリードするとともに、高度化された製造技術の開発を行う。

(1) ナノエレクトロニクス半導体新材料・新構造技術開発—うち新材料・新構造ナノ電子デバイス（運営費交付金）

①概要

従来の半導体は、性能の向上（高速化、低消費電力化、高集積化）を確保するために微細化が進められてきたが、絶縁性、誘電率等の物理的限界、微細化に伴う製造コストの増大など、集積度向上によるメリットが十分達成されなくなっている。

本研究開発では、シリコンで培った微細化技術やデバイス原理を活用しながら、シリコン材料の物理的限界を突破するための“新材料”および“新（デバイス）構造”の開発を行い、次世代の電子デバイス技術を確立する。

②技術目標及び達成時期

2011年度までに、産業界が10年後を見据えた将来の電子デバイスを開発する際に、産業技術として活用できるかどうかの実現可能性を見極め、また技術シーズを確立する。

③研究開発期間

2007年度～2011年度

(2) スピントロニクス不揮発性機能技術プロジェクト（運営費交付金）

①概要

将来のエレクトロニクスにおいて中核的な基盤技術となり得るスピントロニクス技術（電子の電荷ではなく、電子の自転＝「スピン」を利用する全く新しいエレクトロニクス技術）を確立するため、強磁性体ナノ構造体におけるスピンの制御・利用基盤技術を開発し、我が国が世界に誇るシーズ技術を核として、産学官の共同研究体制を構築し、将来の中核的エレクトロニクス技術における我が国の優位性の確保を図る。

②技術目標及び達成時期

2010年度までに、超高集積で高速な不揮発性メモリとして期待されるスピンメモリのための基盤技術を確立する。また、新ストレージ・メモリデバイス、不揮発性スピン光機能素子、スピン能動素子等の新しい動作原理によるスピン新機能素子の実現のための基盤技術を確立する。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

(3) ナノエレクトロニクス半導体新材料・新構造技術開発—うち窒化物系化合物半導体基板・エピタキシャル成長技術の開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

窒化物系化合物半導体は、パワーデバイス、高周波デバイス、発光デバイス等、重要なデバイスの飛躍的な性能向上と消費電力削減への貢献を期待されている。このため、従来の半導体材料では実現出来ない領域で動作可能なハイパワー・超高効率の電子素子、超高速電子素子等の作成に必要な窒化物系化合物半導体先進技術の国際競争力を強化すべく、高品質かつ大口径単結晶基板、高品質かつ大口径エピタキシャル成長技術等の開発を行う。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2011年度までに、次世代窒化物系半導体デバイスを実現する以下結晶作製技術を開発する。

1) 基板技術（GaN、AlNバルク結晶作製技術）

- ・口径2～4インチで高品質エピ成膜を可能とする低コストの単結晶基板作製技術の確立。

2) エピ技術（エピタキシャル成膜及び計測評価技術）

- ・低欠陥高品質エピ層を実現する成膜技術及び膜成長過程を計測評価する技術の確立。
- ・高出力かつ高安定動作可能なエピ層の実現
- ・高耐压超高速な新しいデバイス構造の開発

③研究開発期間

2007年度～2011年度

(４) 三次元光デバイス高効率製造技術（運営費交付金）

①概要

波面制御素子による空間光変調技術を確立し、ガラス中に三次元造形を高精度に一括形成できるプロセス技術を開発する。この技術を用いて、具体的な光デバイスを作製し、当該技術の有効性の確認と市場への早期参入のための基盤技術を確立する。

②技術目標及び達成時期

２０１０年度までに波面制御素子による空間光変調技術を用いたフェムト秒レーザー照射技術等を確立し、高精度の光デバイスを高速に作製できるプロセス技術を開発する。

③研究開発期間

２００６年度～２０１０年度

(５) 低損失オプティカル新機能部材技術開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

近接場光の原理・効果を応用した低損失オプティカル新機能部材技術を開発し、実用化の目処を得ることを目的とする。動作原理に近接場光を用いるオプティカル新機能部材は、従来の材料特性のみに依存した光学部品では不可能な機能・性能を発揮し、液晶プロジェクター・液晶ディスプレイなど情報家電の省エネルギー、高性能・高信頼化を図る上でのキーデバイスとなることが期待できる。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

２０１０年度までに、共通基盤技術として、ナノ構造部材の設計・作製・評価技術を開発するとともに、ナノ構造部材に発現する近接場光の機能を動作原理とする低損失オプティカル新機能部材を検討し機能を確認する。

③研究開発期間

２００６年度～２０１０年度

(６) 半導体機能性材料の高度評価基盤開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

情報通信機器の高機能化や低消費電力化等の要求を満たす半導体集積回路を実現するため、新たな機能性材料開発に貢献する評価基盤技術を開発し、さらに開発した機能性材料を半導体及び半導体集積回路に適用できる統合的なソリューション技術を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術的目標及び達成時期

２０１１年度までに、半導体デバイス性能に直結する接合素子の性能性及び信頼性等、半導体製造プロセス全体を俯瞰しつつ、機能性材料開発が可能となる評価基盤技術を開発し、開発した機能性材料を用いた統合的なソリューションが提案できる材料評価基盤を構築する。

③研究開発期間

２００９年度～２０１１年度

Ⅲ. ライフサイエンス・健康・医療領域

ナノテクノロジーを駆使して初めて可能となる診断・治療により革新的な医療を実現する。

(1) 個別化医療実現のための技術融合バイオ診断技術開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

我が国が有する微細加工技術・表面処理技術といったナノテク等の強みを活かし、染色体異常を高感度、高精度かつ迅速、安価で非コード領域までを検出するゲノムアレイや解析基盤技術開発を行うとともに、全自動解析システムの開発を行う。

②技術目標及び達成時期

2010年度までに、BAC（染色体の断片）を用いた非コード領域を含むゲノム全領域を検出できる高精度ゲノムアレイを開発する。さらに、臨床現場において、微量サンプル（数ナノグラム）から、12時間以内に染色体異常（増幅、欠失、コピー数多型等）を、低コストかつ定量性・再現性を確保して検出ができる自動染色体異常解析システムのプロトタイプを開発する。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

Ⅳ. エネルギー・資源・環境領域

ナノテクノロジーや革新的部材開発技術を駆使して、エネルギー・資源・環境等の社会的制約を克服すると同時に我が国の強みであるナノテク関連産業・部材産業の競争力を強化する。

(i) エネルギー制約の克服

(1) サステナブルハイパーコンポジット技術の開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

炭素繊維複合材料は、軽量、高強度等の優れた特性を有している。従来の熱硬化性樹脂を用いた炭素繊維複合材料では成形性・加工性に乏しくリサイクルが困難であったため、熱可塑性樹脂を用いた炭素繊維複合材料（CFRTP）の開発を行う。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2012年度までに、炭素繊維と熱可塑性樹脂との中間基材を開発し、高速成形技術、接合技術及びリサイクル技術を開発する。

③研究開発期間

2008年度～2012年度

(2) マルチセラミックス膜新断熱材料の開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

住宅やビルなどの冷暖房における大幅な省エネを実現する画期的な断熱性能を持つ壁および窓材料を、セラミックスのナノ多孔体構造やポリマー複合化構造などからなるマルチセラミックス膜アセンブリ技術によって開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2011年度までに、熱貫流率（熱の伝わりやすさ）が $0.3\text{W}/\text{m}^2\text{K}$ 以下、壁厚さ10mm程度の超断熱壁材料および熱貫流率が $0.4\text{W}/\text{m}^2\text{K}$ 以下、光（可視光）透過率が65%以上（Low-Eガラス使用）、ヘイズ率が1%以下の超断熱窓材料を実現する。

③研究開発期間

2007年度～2011年度

(3) カーボンナノチューブキャパシタ開発プロジェクト（運営費交付金）（再掲）

①概要

高純度、高密度に配向した長尺の単層カーボンナノチューブの大量合成技術を開発するとともに、これを用いた従来よりも格段にパワー（電力）と蓄電量が大きなキャパシタを開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2010年度までに、単層カーボンナノチューブの高度配向技術及び大量生産技術を確立するとともに、キャパシタ製造技術を確立することで、 $20\text{Wh}/\text{Kg}$ の高エネルギー密度と耐久性を有する電気二重層キャパシタを開発する。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

(4) 革新的省エネセラミックス製造技術開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

小型炉設備で生産可能な小型セラミック中空ユニットを複数組みあわせることで、これまでその製造が難しかった複雑形状かつ大型セラミックス部材を省エネで製作することができる革新的なセラミック部材製造技術を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2013年度までに、高機能化された小さな精密ブロックを立体的に組み上げ、高効率で接合、一体化をし、複雑形状や大型の部材を製造可能とする革新的なプロセス技術の基盤を確立し、高耐性部材、高温断熱部材及び高比剛性部材の試作を行う。

③研究開発期間

2009年度～2013年度

(5) 革新的ガラス溶融プロセス技術開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

プラズマ等による高温を利用し瞬時にガラス原料をガラス化することにより、極めて効率的にガラスを気中で溶融（インフライトメルティング法）し省エネに資する革新的ガラス溶融プロセス技術を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2012年度までに、インフライトメルティング法により原料を溶解する技術、カレットをガラス原料として利用するため高効率で加熱する技術、カレット融液とインフライトメルティング法による原料融液とを高速で混合する技術を開発する。

③研究開発期間

2008年度～2012年度

(6) 革新的セメント製造プロセス技術開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

クリンカ（セメントの中間製品）焼成温度の低温化等の効果がある物質（鉱化剤）の開発等を行うことにより、焼成温度の低温化や焼成時間の短縮化等、非従来型の革新的なセメント製造プロセスの基盤技術を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2014年度までに、単位セメント製造重量当たりのエネルギー消費量8%削減を可能とする基盤技術を確立する。

③研究開発機関

2010年度～2014年度

(7) 高温超電導電力ケーブル実証プロジェクト（運営費交付金）（再掲）

①概要

革新的な高効率送電技術を確立して高温超電導ケーブルの実用化を促進するため、工業生産プロセスで実用化レベルに達している高温超電導線材（DI-BSCCO等）を活用し、首都圏の系統に接続する実証試験及び評価を行う。

なお、本事業は、発電用施設による電気の供給の円滑化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2012年度までに、200MVA級の中間接続部を有した三心一括型高温超電導ケーブルを、冷却装置や保護装置などの付帯設備とともに66KV実系統に接続して、12ヶ月以上の長期連系試験を行うことによって総合的な安全性や信頼性を実証する。

③研究開発期間

2007年度～2012年度

(8) 発電プラント用超高純度金属材料の開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

超高純度金属材料を発電設備の蒸気配管等に実用化することを目指し、高純度金属材料の高度化に向けた低コスト・量産化製造技術を開発し、実使用環境における超高純度金属材料の耐久性試験等を行う。

なお、本事業は、発電用施設における電気の供給の円滑化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2010年までに、不純物総量100ppm未満、溶解量数100kg以上の低コスト・量産化技術製造技術を開発するとともに、製造された超高純度材料が発電プラントの各種機器に適用でき、本材料の持つ優れた特性を長期に亘って発揮できることを確認する。

③研究開発期間

2005年度～2010年度

(9) 次世代蓄電池材料評価基盤技術開発（運営費交付金）（新規）（再掲）

①概要

新しい蓄電池材料の性能や特性を共通的に評価できる基盤技術を確立する。これにより、各材料メーカーと電池メーカーとの擦り合わせ期間が短縮され、高性能蓄電池・材料開発の効率が抜本的に向上・加速化される。

②技術目標及び達成時期

2014年度までに、蓄電池の新材料について、構成材料間での適合性及び材料-製造工程間の相互影響の解析を踏まえた、共通的な性能特性評価方法（最適な製造工程、充放電様式等）を確立し、それを踏まえ、評価シミュレーション・システム技術の開発を行う。

③研究開発期間

2010年度～2014年度

(10) 低炭素社会を実現する新材料パワー半導体プロジェクト

①概要

次世代自動車のインバータ（電力制御装置）などに用いるパワー半導体について、Si（シリコン）に比べ、電力損失が1/100以下であるなど、優れた物性を有するSiC（シリコンカーバイド）の実用化を目指す。

②技術目標及び達成時期

高品質・低コストな大口径SiCウエハ製造技術及びSiC高耐圧スイッチングデバイス製造技術を確立する。具体的には、2014年度までに直径15cm（現状の1.5倍。面積では約2.3倍）のウエハ製造技術、鉄道等に用いられる5kV級の高耐圧スイッチングデバイス製造技術を開発する。

③研究開発期間

2010年度～2014年度

(ii) 資源制約の克服

(1) 希少金属代替材料開発プロジェクト（運営費交付金）

①概要

ハイテク製品の製造に不可欠であり世界的な需給逼迫が懸念されるレアメタル（タンゲステム、インジウム、ディスプロシウム）について、ナノテクノロジー等の最先端技術を活用して、代替材料開発・使用量削減を行う。なお、平成21年度からは、これま

での対象3鉱種に加えて、白金、セリウム、テルビウム等も研究開発の対象とする。

②技術目標及び達成時期

タングステン、インジウム、ディスプロシウムについては2011年度までに、白金、セリウム、テルビウム等については2013年度までに、使用原単位について現状と比較して削減ができる製造技術を開発し、ユーザー企業、大学等の外部機関に対して機能評価のためにラボレベルで提供（試料提供）できる水準に至るまでの技術を確立することを目標とする。また、製品の機能や製造コストは現状と同等であることを少なくとも維持することを前提とする。

〔対象元素〕

- ・超硬工具向けタングステン（W）
- ・透明電極向けインジウム（In）
- ・希土類磁石向けディスプロシウム（Dy）
- ・排ガス浄化向け白金族（Pt）
- ・精密研磨向けセリウム（Ce）
- ・蛍光体向けテルビウム、ユーロピウム（Tb、Eu）

③研究開発期間

2007年度～2013年度

（iii）環境制約の克服

（1）グリーン・サステナブルケミカルプロセス基盤技術開発

①概要

化学品等の製造プロセスにおけるシンプル化、クリーン化、原材料・資源の多様化・有効利用、更に、廃棄物の減容化、容易なりサイクル等を実現し、産業競争力強化、国際規制の先取りを図って、将来にわたっても持続的に化学品等を製造するための必要なGSC（グリーン・サステナブルケミカル）プロセスを開発する。

②技術的目標及び達成時期

2015年度までに、有害な化学物質を削減できる又は使わない革新的な製造プロセス、廃棄物、副生成物を削減できる革新的な製造プロセス、資源生産性を向上できる革新的な製造プロセスの開発を行う。

③研究開発期間

2008年度～2015年度

（2）革新的マイクロ反応場利用部材技術開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

マイクロリアクター、ナノ空孔などの精密反応場を利用し、反応分子の自由な運動を活性種レベルで制御した革新的な化学反応プロセスと新機能材料創成技術の確立を目指す。さらに、マイクロリアクターとナノ空孔反応場の組み合わせ、各反応場とマイクロ波等のエネルギー供給手段との組み合わせにより協奏的反応場を構成し、さらなる高効率生産等を可能にする基盤技術を開発する。これらの技術の確立により、反応システムの小型化、多段プロセスの簡略化等を通じた化学産業の製造工程等の省エネルギー化を

図る。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術的目標及び達成時期

2010年度までに、マイクロリアクター技術、ナノ空孔技術を軸とし、これらに更にマイクロ波、超臨界流体等のエネルギー供給手段を組み合わせた協奏的反応場を構成することにより、これまでにない革新的な化学反応プロセスを確立し、新機能材料創成技術を実現する。さらに、これらの技術を用いて高性能・高機能電子材料、医薬中間体などの部材を開発する。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

(3) 循環社会構築型光触媒産業創成プロジェクト（運営費交付金）

①概要

我が国で発見された光触媒技術の新産業分野開拓を目指し、サイエンスにさかのぼることにより、紫外光のみならず、可視光レベルでの性能・機能の飛躍的な向上のための技術基盤を構築する。これにより、従来では困難とされてきた医療関連分野や住宅建材分野、環境関連分野等に光触媒技術を導入し、安心・安全な環境を提供できる技術を開発する。

②技術目標及び達成時期

2011年度までに、材料レベルで紫外光活性2倍、可視光活性10倍の感度向上を達成し、その高感度光触媒を適用した成膜プロセス技術の基盤技術を確立する。

③研究開発期間

2007年度～2011年度

(4) 高感度環境センサ部材開発

①概要

ダイオキシンをはじめとする極微量有害有機物質を超高感度で安価かつ簡易に計測するために、高感度セラミックセンシング材料を用いた環境センサーを開発する。

②技術目標及び達成時期

2010年度までに、ダイオキシン類、エストラジオール及びビスフェノールAについて、0.001ng・mlの濃度において有意な電気信号として検出し得る小型・携帯型計測器に挿入可能な寸法のセンサ部材の開発を目標とする。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

(5) 次世代高信頼性ガスセンサー技術開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

一酸化炭素中毒やガス漏れなどのガス事故を限りなくゼロに近づけるため、センサー素子のナノレベルでのメカニズム解析及び開発設計を行い、コードレスで高信頼性を有する次世代高信頼性ガスセンサー（COセンサー・メタンセンサー）を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2011年度までに、最先端のナノテクノロジー及びMEMS技術を導入し、電池駆動で5年以上の長寿命、高信頼性（数百ppm以下の故障率）、低コストなCOとメタンのセンサーを開発する。

③研究開発期間

2008年度～2011年度

(6) 環境調和型水循環技術開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

我が国が強みを持つ、膜技術を始めとする水処理技術を強化し、省水型・環境調和型の水循環システムの開発に資する省エネ・省水型の要素技術を開発する。

②技術目標及び達成時期

2013年度までに、以下の技術を開発する。

・革新的膜分離技術の開発：

従来法に比べ膜透過加圧エネルギー等を50%以上削減。

・省エネ型膜分離活性汚泥法（MBR）技術の開発：

従来法に比べ膜洗浄の曝気（空気気泡）エネルギー等を30%以上削減。

・有用金属・有害物質の分離・回収技術の開発：

従来法に比べ汚泥の削減により汚泥処理・処分エネルギーを80%以上削減。

・高効率難分解性物質分解技術の開発：

従来法に比べ窒素処理に係るエネルギーを50%以上削減。

オゾン酸化法等のエネルギーを50%以上削減。

③研究開発期間

2009年度～2013年度

V. 材料・部材領域

極めて広範囲な産業領域に波及する材料・部材領域について、ユーザー製造業等との連携（川上・川下連携）を促進し、高度な部材産業群の「すり合わせ力」を一層強化する。

(1) 鉄鋼材料の革新的高強度・高機能化基盤研究開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

プラント、構造物や自動車等の革新的な高効率化、省エネルギー化、長寿命化、安全・安心化を図るため、最新の科学的知見を導入し、鉄鋼材料及び鋼構造体を超高機能化する基盤的研究開発を行う。具体的には、高強度鋼、高機能鋼の実用化拡大の基盤となる(1)高級鋼厚板(高強度鋼、極低温用鋼、耐熱鋼)溶接部の信頼性・寿命を大幅に向上する溶接施工技術(高密度・清浄熱源溶接技術)、及び金属組織制御技術を基本とする材料技術(クリープ破壊及び水素破壊の機構解明等を踏まえた)の開発、(2)部材の軽量化を図るために強度、加工性等の最適機能傾斜を付与する機械部品鍛造技術(駆動部材の信頼性確保のための耐疲労破壊特性の向上を踏まえた)の開発を行う。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

２０１１年度までに、高級鋼厚板（高強度鋼・極低温用鋼・耐熱鋼）の溶接を予熱・後熱なしに可能とする溶接技術と材料技術を開発するとともに、傾斜機能部材の鍛造技術を開発する。

③研究開発期間

２００７年度～２０１１年度

(２) 超ハイブリッド材料技術開発（運営費交付金）

①概要

従来実現が不可能と考えられていた相反する複数機能（トレードオフ機能）を両立できる材料を、異種素材の組合せ（ハイブリッド化）により実現するための技術を開発する。要素技術として、異種材料間の界面挙動をシミュレーション技術等により解明し、ナノレベルよりもさらに微小な原子・分子レベルでのハイブリッド化構造・配列制御のための合成技術を開発する。従来の単一材料では実現困難であったトレードオフの性能を引き出すことで、自動車用構造材料、パワーデバイス用材料、光学材料等を出口イメージとした、高機能革新部材製造に必要な技術基盤を開発する。

②技術目標及び達成時期

２０１１年度までに、電気・電子材料、光学材料、その他工業材料について従来材料では実現できなかった相反機能を解消するとともに、市場評価が可能な成果物を供試し、市場（ユーザー）から、客観的な実用化研究開発課題を抽出する。また、単なる相反機能の解消ではなく、相反機能を制御・実現する技術を開発する。

③研究開発期間

２００７年度～２０１１年度

(３) 先端機能発現型新構造繊維部材基盤技術の開発（運営費交付金）

①概要

電界紡糸や熔融紡糸等により創製される極微細な繊維状材料に対してナノオーダーの成形加工や微細な界面加工ならびに複合化することで材料を高機能化した革新的部材を創出する。高機能新材料を求めるユーザーの要望を満たす繊維の極微細加工と高次複合化を解決する基盤技術開発を行う。

②技術的目標及び達成時期

２０１０年度までに、電界紡糸法による繊維高機能化、大型装置化技術およびナノ熔融分散紡糸法による超極細炭素繊維製造技術を開発し、これら基盤技術を活用して、高性能・高機能電池用部材、高性能・高機能フィルター用部材、高性能・高機能医療衛生用・産業用部材を開発する。

③研究開発期間

２００６年度～２０１０年度

(４) 次世代光波制御材料・素子化技術（運営費交付金）（再掲）

①概要

ガラス材料に関する精密モールド技術を確立し、機能性の高い光波制御素子を低コストで生産できるプロセス技術を開発することで部材の小型化・高機能化を図りつつ、省エネを実現する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

2010年度までにサブ波長レベルの微細構造をガラス表面にモールド成形する技術を実現し、実装可能な具体的なデバイスを作製する。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

(5) 高機能複合化金属ガラスを用いた革新的部材技術開発（運営費交付金）

①概要

複合化金属ガラス（金属ガラスマトリックス中に第二相として微結晶や微粒子または微小空隙等を分散させたもの）を創製して、次世代高密度記録媒体、超微小モータ用部材および高強度・高導電性電気接点部材を開発する。

②技術目標及び達成時期

2011年度までに、複合化金属ガラス合金を創製し、従来の金属ガラス単層合金の持つ優れた特徴に加えて、塑性加工性、硬磁気特性、高電気伝導性等を付与する。この複合化金属ガラスの新規特性を用いて、従来の金属ガラス単層合金では為しえなかった革新的部材の開発を行い、さらに多様な工業製品に応用することで、我が国産業の優位性を確保する。

③研究開発期間

2007年度～2011年度

(6) マグネシウム鍛造部材技術開発プロジェクト（運営費交付金）

①概要

マグネシウム合金部材について、製品歩留まりが高く、高耐疲労性を付与する鍛造技術の開発を行う。また、循環型素材としてのマグネシウム合金部材の特性を活かし、リサイクル材の鍛造用ビレット化に係る課題抽出を行う。当該技術開発により、マグネシウム鍛造部材製造技術の基盤を構築し、我が国の家電、自動車等の川下産業の競争力の強化に不可欠な高度部材を供給する。

②技術目標及び達成時期

2010年度までに高強度・高耐疲労・加工性に優れたマグネシウム鍛造技術を確立する。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

(7) 低炭素社会を超軽量・高強度融合材料プロジェクト

①概要

日本で発見されたカーボンナノチューブ（CNT）は、電気や熱をよく通す、高強度で高

い柔軟性を持つ等、非常に多くの優れた特性を持つ新規ナノ材料である。このCNTと既存材料との融合を通じて、世界をリードする成長産業の創出に貢献する高機能、高性能な新規融合材料の開発を目指す。

②技術目標及び達成時期

2011年度までにCNTの形状、物性等の制御、分離・評価技術、既存材料中に分散する技術など融合基盤研究を、2014年度までにCNTを既存材料と融合させた応用研究開発技術を確立する。

③研究開発期間

2010年度～2014年度

VI. 共通基盤領域

ナノテクノロジーにおけるリスク不安に対処するため、リスク管理手法を開発し、社会に貢献する産業化のための支援を推進する。

(1) ナノ粒子の特性評価手法開発（運営費交付金）

①概要

ナノ粒子のキャラクタリゼーション、計測技術の確立とともに、生体影響等評価手法、暴露評価手法及びナノテクノロジーによるリスク不安に対処したリスク管理手法を開発する。

②技術目標及び達成時期

2010年度までに、生体影響等評価手法、暴露評価手法及びリスク評価手法を開発し、ナノ粒子のリスク評価及び管理の考え方の提言を行う。

③研究開発期間

2006年度～2010年度

5. 政策目標の実現に向けた環境整備（関連施策）

ナノテクノロジーは、情報通信、ライフサイエンス、環境、エネルギーなどの分野における科学技術の進歩や課題解決に貢献する重要な技術シーズである。そのため、ナノテクノロジーの研究開発と一体となった関連施策を実施することで、その成果を市場に出していくことが重要である。主な関連施策を、以下に示す。

〔技術戦略マップ〕

- ・NEDO及び経済産業省では、技術戦略マップを策定、毎年改訂し、ナノテクノロジー・部材分野の将来の方向性を見定めながら、合理的かつ効果的な研究開発プロジェクトを推進している。また、技術戦略マップを活用して、多様な連携（川上川下の垂直連携、異業種間の水平連携など）による研究開発を促進、支援し、当該分野の技術革新を促進している。

〔サンプル提供・実用化促進〕

- ・NEDOでは、実施する研究開発プロジェクト成果のサンプルを対象として、それらを活用した用途の開発、実用化ないし製品化提案を有する企業とのマッチングを図ることで、プロジェクトの事業化を促進する取組みを実施している（サンプルマッチング事業）。

〔基準・標準化〕

- ・経済産業省では、ナノテクノロジー関連の研究開発成果を社会及び市場等に普及するための環境整備として、ナノテクノロジーの標準化活動（ISO/IEC、JIS）を推進している。

〔広報〕

- ・ナノテクノロジーに関する先端技術及び製品等の世界最大の展示会である「nano tech」が毎年日本で開催されている。

〔社会受容〕

- ・ナノテクノロジーの産業化の推進とともに、ナノ粒子のキャラクタリゼーション技術や人の健康や環境に及ぼす影響等の潜在的な課題に関する知見を蓄積する等のナノテクノロジーの社会受容に対する取組みを推進している。
- ・経済産業省では、2006年度から「ナノ粒子の特性評価手法開発」を開始し、工業ナノ粒子のリスク評価管理手法の確立を目標としたプロジェクトを開始し、2009年10月に「ナノ材料リスク評価書」（中間報告書）を公表した。また、政策的対応として、2009年3月に取りまとめた「ナノマテリアル製造事業者等における安全対策のあり方研究会」報告書に基づき、ナノマテリアルの製造事業者等における自主的な安全対策を促進するための情報収集・開示プログラムを実施している。
- ・OECDでは、2006年9月、化学品委員会に工業ナノ材料作業部会（WPMN）が設置され、代表的な14種の工業ナノ材料について、試験計画の合意と試験実施を目的とする「スポンサーシッププログラム」が実施されている。スポンサーシッププログラム対象物質のうち、カーボンナノチューブ（単層、多層）、フラーレンの3物質については日本が中心となって担当し、「ナノ粒子の特性評価手法開発」等の成果で貢献している。

〔人材育成〕

- ・独立行政法人産業技術総合研究所は、「ナノテク製造中核人材の養成プログラム」を実施し、情報家電、燃料電池、ロボット、医療機器、バイオ等の応用分野において、その産業の基盤と創出を支える中堅企業を対象として、「基礎加工技能・技術、特殊な要素技能・技術に習熟し、製造技術の高度化を図る人材」及び「豊富なナノ加工プロセスの知識や先端機器を使いこなすノウハウ等を習熟し、製造現場の技能・技術を統括できる人材」の育成を行っている。
- ・NEDOでは、我が国の産業技術の発展のため、先端分野や融合分野の技術を支える人材の育成と、人的交流の面から産学連携を促進するための「場」の形成を促進する取組みを実施している（NEDO特別講座）。具体的には、優れた成果を生み出しつつあり、大学が技術の中核となっている研究開発プロジェクトをコアプロジェクトとし、そのプロジェクトリーダーの所属大学に拠点を設置し、関連技術の人材育成、人的交流の拡大、周辺研究の実施を行うもの。ナノテクノロジー関連の研究開発プロジェクトも複数実施している。

〔関係機関との連携〕

- ・ナノエレクトロニクス半導体新材料・新構造技術開発—うち新材料・新構造ナノ電子デバイス、希少金属代替材料開発プロジェクトにおいては、文部科学省との合同会議を設置するなど、連携しつつプロジェクトを推進している。

- ・経済産業省・文部科学省が協力のもと、平成21年6月より産業技術総合研究所、物質・材料研究機構、筑波大学が中核なり、茨城県つくば市において世界的なナノテク研究拠点を形成するための「つくばイノベーションアリーナ(TIA nano)」構想が推進されている。ナノエレクトロニクス、カーボンナノチューブ、ナノ材料安全評価などの研究領域、ナノデバイス実証・評価ファウンドリーなどのインフラを生かし、主要企業・大学との連携網を広げ、産学官に開かれた融合拠点として、ナノテクの産業化と人材育成を一体的に推進することとしている。

6. 研究開発の実施に当たっての留意事項

事業の全部又は一部について独立行政法人の運営費交付金により実施されるもの（事業に（運営費交付金）と記載したもの）は、中期目標、中期計画等に基づき、運営費交付金の総額の範囲内で、当該独立行政法人の裁量によって実施されるものである。

7. 改訂履歴

- (1) 平成12年12月28日付け制定。
- (2) 平成14年2月28日付け制定。材料ナノテクノロジープログラム基本計画（平成12・12・27工総第16号）は、廃止。
- (3) 平成15年3月10日付け制定。ナノテクノロジープログラム基本計画（平成14・02・25産局第8号）は、廃止。
- (4) 平成16年2月3日付け制定。ナノテクノロジープログラム基本計画（平成15・03・07産局第1号）は、廃止。
- (5) 平成17年3月31日付け制定。ナノテクノロジープログラム基本計画（平成16・02・03産局第7号）は、廃止。
- (6) 平成18年3月31日付け制定。ナノテクノロジープログラム基本計画（平成17・03・25産局第4号）は、廃止。
- (7) 平成19年4月2日付け制定。ナノテクノロジープログラム基本計画（平成18・03・31産局第13号）は、廃止。
- (8) 平成14年2月28日付け制定。
- (9) 平成15年3月10日付け制定。革新的部材産業創出プログラム基本計画（平成14・02・25産局第9号）は、廃止。
- (10) 平成16年3月7日付け制定。革新的部材産業創出プログラム基本計画（平成15・03・07産局第5号）は、廃止。
- (11) 平成17年3月31日付け制定。革新的部材産業創出プログラム基本計画（平成16・03・07産局第5号）は、廃止。
- (12) 平成18年3月31日付け制定。革新的部材産業創出プログラム基本計画（平成17・03・25産局第3号）は、廃止。
- (13) 平成19年4月2日付け制定。革新的部材産業創出プログラム基本計画（平成18・03・31産局第14号）は、廃止。
- (14) 平成20年4月1日付け、ナノテク・部材イノベーションプログラム基本計画制定。
ナノテクノロジープログラム基本計画（平成19・03・20産局第1号）および革新

的部材プログラム基本計画（平成19・03・19産局第4号）は、本イノベーションプログラム基本計画に統合することとし、廃止。

（15）平成21年4月1日付け制定。ナノテク・部材イノベーションプログラム基本計画（平成20・03・24産局第1号）は、廃止。

（16）平成22年4月1日付け制定。ナノテク・部材イノベーションプログラム基本計画（平成21・03・27産局第2号）は、廃止。

イノベーションプログラムについて

平成21年4月27日
経 済 産 業 省
研 究 開 発 課

目次

イノベーションプログラムの概要	1
1. ITイノベーションプログラム	2
2. ナノテク・部材イノベーションプログラム	3
3. ロボット・新機械イノベーションプログラム	4
4. エネルギーイノベーションプログラム		
① 総合エネルギー効率の向上	5
② 運輸部門の燃料多様化	6
③ 新エネルギー等の開発・導入促進	7
④ 原子力等利用の推進とその大前提となる安全の確保	8
⑤ 化石燃料の安定供給確保と有効かつクリーンな利用	9
5. 環境安心イノベーションプログラム	10
6. 健康安心イノベーションプログラム	11
7. 航空機・宇宙産業イノベーションプログラム	12

イノベーションプログラムの概要

1. 「イノベーションプログラム」の中での体系的推進 (Inside Management & Accountability)

- 経済産業省の全ての研究開発プロジェクトは、政策目標毎に7つの「イノベーションプログラム」の下で体系的に推進。
- 各プログラムの中で、政策目標に向けたプロジェクトの位置付けと目標の明確化、市場化に必要な関連施策(規制改革、標準化等)との一体化を図り、イノベーション実現に向け各プロジェクトを効果的に推進。

2. 「技術戦略マップ」に基づく戦略的企画立案 (Outside Communication & Networking)

- 先端産業技術動向を把握し、国が取り組むべき技術課題とイノベーションの道筋を明確化するため、産学官で協働するロードマッピング手法を導入(『技術戦略マップ 2005/2006/2007/2008』)。
- 研究開発プロジェクトの選定に当たっては、イノベーションプログラムにおける政策目標を基に技術戦略マップに位置付けられた重要技術課題を抽出し戦略的に企画立案。

イノベーションプログラム(IPG)の21年度予算額 (総額: 1,966億円¹⁾)

IT IPG

- ①ITコア技術の革新 94億円
- ②省エネ革新 42億円
- ③情報爆発への対応 44億円
- ④情報システムの安全性等 63億円

21年度予算 244億円

ナノテク・部材 IPG

- ①ナノテク加速化領域 36億円
- ②情報通信領域 28億円
- ③ライフサイエンス・健康・医療領域 16億円
- ④エネルギー・資源・環境領域 78億円
- ⑤材料・部材領域 27億円
- ⑥共通領域 4億円

21年度予算案 188億円

ロボット・新機械 IPG

- ①ロボット関連技術開発 38億円
- ②MEMS関連技術開発 12億円

21年度予算 50億円

健康安心 IPG

- ①創薬・診断技術開発 102億円
- ②診断・治療機器・再生医療等の技術開発 28億円

21年度予算 130億円

エネルギー IPG

- ①総合エネルギー効率の向上 707億円
- ②運輸部門の燃料多様化 278億円
- ③新エネルギー等の開発・導入促進 369億円
- ④原子力等利用の推進とその大前提となる安全の確保 268億円
- ⑤化石燃料の安定供給確保と有効かつクリーンな利用 479億円

21年度予算 1,281億円²

環境安心 IPG

- ①地球温暖化防止新技術 60億円
- ②3R 33億円
- ③環境調和産業バイオ 57億円
- ④化学物質総合評価 11億円
- ⑤共通領域 4億円

21年度予算案 165億円

航空機・宇宙産業 IPG

- ①航空機産業の基盤技術力の維持・向上 233億円
- ②宇宙産業の国際競争力強化 87億円

21年度予算案 320億円

¹ 各イノベーションプログラムにおけるプロジェクトの重複を排除した額 ² 各サブプログラムで重複があるため小計と一致しない

1. IT イノベーションプログラム

【平成21年度予算額 243.5億円】

各プロジェクト毎の予算額は21年度予算(20年度予算)【20年度補正予算】

一般会計 特別会計

高度情報通信
社会の実現

社会基盤を支えるIT技術。これらを活かし、イノベーションを創出するとともに、IT産業再編を睨み、選択と集中を図りつつ、持続的に競争力を強化する。

IT産業の国際
競争力の強化

情報爆発への対応

今や知的活動時間に占める検索に費やす時間は、何と30%...

これら情報爆発による課題を解決

ITの利活用による知の創造

情報大航海

26.0(41.1)

いつでもどこでもあらゆる場面で情報の検索・解析・活用環境を実現。

New ITとサービスの融合

15.0(新規)

ITによる生活の質の向上

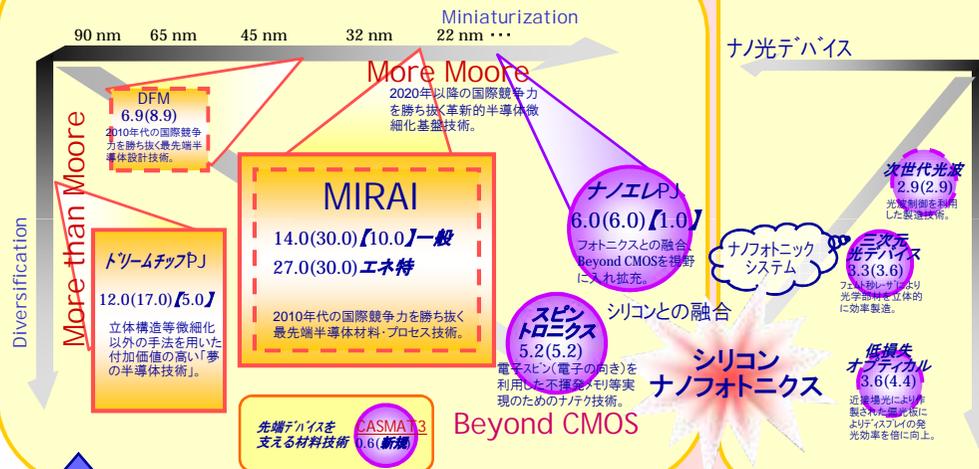
New 車載ITシステム

3.0(新規)

IT コア技術の革新

最終製品に占める半導体の価格割合はこの10年で3割以上増加。
今後の製品付加価値を高めるコアデバイスの開発。

世界最先端デバイスの先導開発



半導体アーキテクチャの革新

リコフィギュラブル・チップやマルチコア・チップ等デジタル革命を支える新しいコンセプトによる半導体の現出。

次世代アーキテクチャ 2.4(2.5)

アプリチップPJ 10.0(14.0)

省エネ革新

インターネットの普及により、このままでは2020年には国内総発電量の4.5%がルータで消える...

抜本的に解決

情報ネットワークシステムの徹底的省エネの実現

グリーンIT

50.0(40.0)【10.0】

目指せ！エネルギー効率100倍。

次世代NWデバイス

4.3(15.4)【5.0】

ネットワークルータの消費電力半減。

New 高効率住宅システム

1.0(新規)

ITを用いて住宅エネルギー最適化に省エネ化

情報機器の徹底的省エネの実現

次世代大型ディスプレイ

4.4(16.7)【5.0】

高精細大型ディスプレイの消費電力半減。

省エネを支えるプロセス基盤技術

GaN(ナノエ)

3.7(8.6)【3.6】

情報システム・ソフトウェアの安全性・信頼性・生産性の向上とオープン標準の普及促進

ソフトバグ、ハッカー等により引き起こされる情報システムのダウンは、我が国経済に大損害を与える...

安全性向上

ITS規格化 1.0(1.4)

セキュアプラットフォーム

8.0(8.0)

情報システムの安全性確保。

信頼性向上

産学連携ソフトウェアの実践

23.7(24.2)

ソフトウェア・エンジニアリングの抜本強化とそれを適用した高信頼な自動車用組込みソフトウェアプラットフォーム等開発。

生産性向上

オープンソフトウェア利用促進

5.4(5.6)

オープン標準の普及促進。

IT投資基盤PJ

4.0(8.0)

特定産業向け共通プラットフォームへの構築。

2. ナノテク・部材イノベーションプログラム

【平成21年度予算額：188億円】

各プロジェクト毎の予算額は21年度予算(20年度予算)【20年度補正予算】

○あらゆる分野に対して高度化・不連続な革新をもたらすナノテクノロジー・革新的部材技術を確立する。

● 一般会計 ● 特別会計

○我が国産業の国際競争力の維持・強化や解決困難な社会的課題の克服を可能とする。

IPGの目標

-ナノテクによる非連続技術革新-

世界に先駆けてナノテクノロジーを活用した不連続な技術革新を実現する。

-世界最強部材産業による価値創出-

我が国部材産業の強みを更に強化することで、他国の追随を許さない競争優位を確保するとともに、部材産業の付加価値の増大を図る。

-広範な産業分野での付加価値増大-

ナノテクノロジーや高機能部材の革新を先導することで、これら部材を活用した情報通信、ライフサイエンス、環境、エネルギーなどの幅広い産業の付加価値の増大を図る。

-エネルギー制約・資源制約などの課題解決-

希少金属などの資源制約の打破、圧倒的な省エネルギー社会の実現など、解決困難な社会的課題の克服を目指す。

ナノテクノロジーの加速化領域

-垂直連携・異分野融合型-nanotechnologyの加速化-

ナノテクチャレンジ
36.0(36.5)

情報通信領域

-世界最先端デバイスの先導開発-

ナノエレ (新材料新構造技術) (More Moore) 6.0(5.0)[1.0]
スピントロニクス 不揮発性機能性材料 5.2(5.2)

-光技術の革新利用-

三次元光デバイス 高効率製造技術 3.3(3.6)
低損失オプティカル 新機能部材 3.6(4.4)

-半導体材料評価技術-

半導体機能性材料 高度評価基盤技術 0.6(新規)

-ITの省エネ化を支える基盤技術-

ナノエレ (窒化物系化合物半導体基板) 3.7(5.0)[3.6]

-省エネ型ディスプレイ開発-

超フレキシブル ディスプレイ部材 5.4(6.2)

ライフサイエンス・健康・医療領域

-ナノテクノロジーを駆使した新しい医療技術-

次世代DDS型 悪性腫瘍治療システム 4.3(4.6)
個別化医療実現のための 技術融合バイオ診断技術 3.4(3.4)
分子イメージング機器 8.3(9.6)

エネルギー・資源・環境領域

エネルギー制約を乗り越える！

-革新的な省エネ部材-

サステナブル ハイパーコンポジット 6.4(3.2)
CNTキャパシタ 3.3(4.0)

-革新的な省エネプロセス-

革新的省エネ セラミクス製造技術 2.4(新規)
革新的ガラス溶融 プロセス技術 4.0(3.5)

資源制約を乗り越える！
希少金属の代替/使用量低減技術の確立-

希少金属代替材料開発
15.5(10.0)[5.0]

マルチセラミクス膜 新断熱材料 2.0(3.2)[2.0]

-革新的な燃料電池部材-

セラミックリアクター 3.5(4.5)

環境制約を乗り越える！

-環境に優しい部材開発-

革新的マイクロ 反応場利用部材 4.7(5.2)

光触媒産業創成 8.4(8.8)

-革新的な電力部材-

高温超電導 ケーブル実証 6.8(1.6)
発電プラント用 高純度金属材料 3.0(3.9)

-持続可能な革新的化学技術-

グリーン・サステナブルケミカルプロセス技術 (廃棄物削減、資源生産性向上など) 15.0(6.0)

-環境の安全を守る部材開発-

高感度環境 次世代高信頼性 センサ部材 1.5(2.0)
ガスセンサ 1.0(1.0)

材料・部材領域

-広範な産業に波及する基盤的革新材料-

鉄鋼材料革新的 高強度・高機能化 5.0(10.0)[5.0]
超ハイブリッド 材料 6.2(6.2)
先端機能発現型 新構造繊維部材 (ナノファイバー技術) 6.6(7.1)
次世代光波制御 材料・素子化 2.9(2.9)
高機能複合化 金属ガラス 革新的部材 3.4(3.4)
マグネシウム 鍛造部材 2.6(2.7)

共通基盤領域

-ナノ材料の安全性評価-

ナノ粒子特性評価 手法開発 4.0(3.7)

関連施策

- 技術戦略マップの策定
- ・ナノテクノロジー分野
- ・部材分野
- ・ファイバー分野
- ・GSC分野 など
- ナノテクノロジー標準化
- 人材育成 など

3. ロボット・新機械イノベーションプログラム

【平成21年度予算額：50億円】

各プロジェクト毎の予算額は、21年度予算(20年度予算)

目的

製造プロセス・装置技術

注：◎は新規事業

融合化

複合化

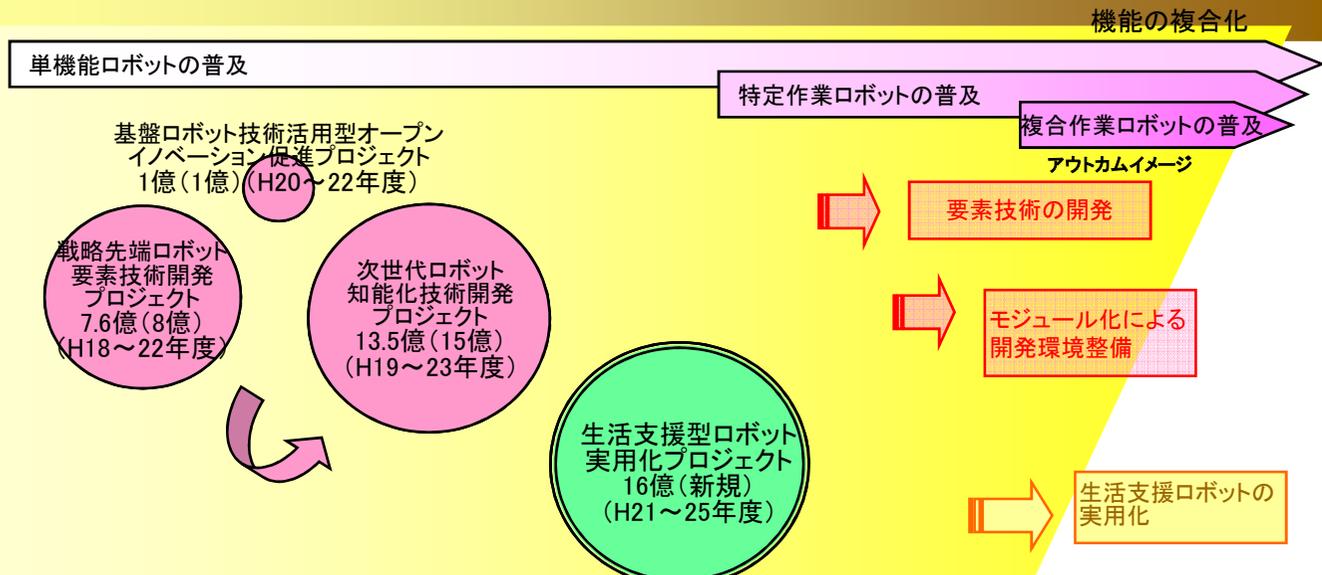
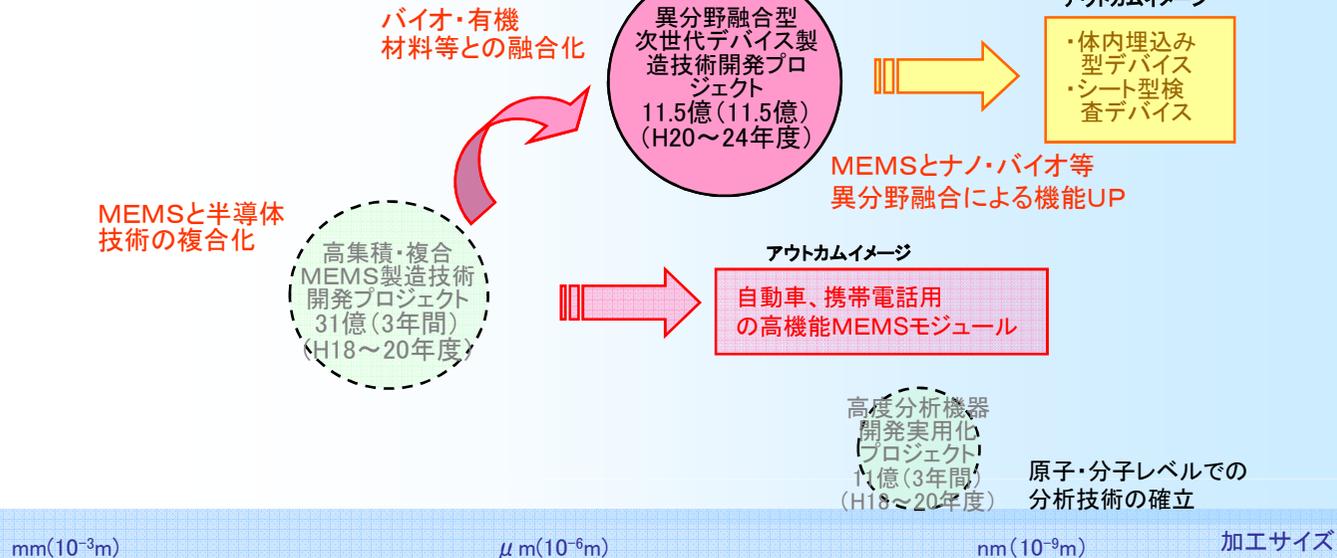
単品

基盤技術

システム化

実証

ロボット



我が国のものづくりを支える中核デバイスの国際競争力強化

ロボット技術の高度化を通じた生産性と生活の質の向上

4. エネルギーイノベーションプログラム

① 総合エネルギー効率の向上

【平成21年度予算案：707億円】

※基礎、実用、実証の区分内は、任意に配置。

※各プロジェクト毎の予算額は21年度予算(20年度予算)【20年度補正予算】

背景

基礎研究

実用化研究

実証

目標

即ち「省エネ」を図ることはエネルギー資源の約8割を海外に依存する我が国にとって、これを効率的に利用すること、これが重要な課題である。

超燃焼システム技術

微生物機能を活用した環境調和型製造基盤技術
5.4億円(11.0億円)【5.0億円】

希少金属等 高効率回収システム
5.0億円(2.0億円)

革新的省エネセラミック製造技術開発
2.4億円(新規)

環境調和型製鉄プロセス
11.2億円(5.6億円)【10.0億円】

時空を超えたエネルギー利用技術

カーボンナノチューブ
3.3億円(4.0億円)

キャパシタ開発
3.3億円(4.0億円)

革新型蓄電池先端科学基礎研究
30.0億円(新規)

水素貯蔵材料先端基盤研究
10.0億円(9.1億円)【2.1億円】

情報生活空間創生技術

有機発光高効率照明
1.6億円(3.6億円)【2.0億円】

グリーンITプロジェクト
50.0億円(30.0億円)【10.0億円】

低損失オプティカル新機能部材
3.6億円(4.4億円)

超フレキシブルディスプレイ部材
5.4億円(6.2億円)

先進交通社会確立技術

サステナブルハイパーコンポジット
6.4億円(3.2億円)

エネルギーITS
10.8億円(8.5億円)

次世代構造部材創製・加工(航空機用)
8.0億円(8.0億円)

環境適応型小型航空機用エンジン
6.0億円(6.0億円)

炭素繊維複合材
65.0億円(50.0億円)

次世代省エネデバイス技術

ナノエレクトロニクス半導体新材料・新構造
3.7億円(5.0億円)【3.6億円】

MIRAI
27.0億円(30.0億円)

半導体アプリケーションチップ
10.0億円(14.0億円)

次世代プロセスフレンドリー設計
6.9億円(8.9億円)

一般・共通・その他

エネルギー使用合理化産業技術研究助成
12.8億円(14.6億円)

省エネルギー革新技術開発
70.0億円(69.0億円)

次世代構造部材創製・加工(衛星用)
2.6億円(6.0億円)

新エネルギー技術実用化補助
0.6億円(3.0億円)

化学技術創成
8.9億円(24.7億円)

低品位鉱石等革新的製錬プロセス
1.0億円(新規)

革新的マイクロ応場利用部材
4.7億円(5.2億円)

革新的ガラス溶融プロセス
4.0億円(3.5億円)

先進超々臨界圧火力発電実用化要素技術
7.4億円(2.0億円)

革新的製鉄プロセス
3.8億円(新規)

固体酸化物形燃料電池システム等技術開発
12.0億円(13.5億円)【2.6億円】

水素製造・輸送・貯蔵要素技術開発
13.6億円(17.0億円)【1.8億円】

固体高分子形燃料電池実用化戦略的技術開発
67.0億円(66.7億円)【7.5億円】

系統連系平滑蓄電システム技術開発
17.0億円(24.0億円)

イットリウム系超電導電力機器
30.0億円(30.0億円)

次世代高効率ネットワークデバイス技術開発
4.3億円(10.4億円)【5.0億円】

マルチセラミックス膜新断熱材料
2.0億円(3.2億円)【2.0億円】

次世代光波制御材料・素子化
2.9億円(2.9億円)

次世代大型低消費電力ディスプレイ基盤技術
4.4億円(11.7億円)【5.0億円】

次世代自動車用高性能蓄電システム技術開発
35.0億円(29.0億円)

繊維関連次世代技術開発
0.8億円(1.2億円)

鉄鋼材料の革新的高強度・高機能化基盤
5.0億円(10.0億円)【5.0億円】

高効率紙/パルプ工程技術
2.0億円(9.5億円)

高効率ガスタービン実用化
16.4億円(5.4億円)

大規模電力供給用太陽光発電システム安定化等実証
20.2億円(35.8億円)

次世代高効率エネルギー利用型住宅システム技術開発・実証事業
1.0億円(新規)

噴流床石炭ガス化発電プラント
12.0億円(20.7億円)

環境調和型水循環技術開発
4.0億円(新規)

石油精製高度機能融合
36.0億円(79.3億円)

発電プラント用超高純度金属材料
3.0億円(3.9億円)

高温超電導ケーブル実証
6.8億円(1.6億円)

固体酸化物形燃料電池実証
7.2億円(8.0億円)

エネルギー消費効率を2030年度までに30%以上改善

4. エネルギーイノベーションプログラム

② 運輸部門の燃料多様化

【平成21年度予算案：278億円】

※基礎、実用、実証の区分内は、任意に配置。

※各プロジェクト毎の予算額は21年度予算(20年度予算)【20年度補正予算】

背景

基礎研究

実用化研究

実証

目的

ほぼ100%を石油に依存する運輸部門は我が国エネルギー需給構造上、最も脆弱性が
高く、その需給構造の次世代かは、将来に向けた対策が不可欠な課題となっている。

バイオマス由来燃料

新エネルギー技術研究開発のうち
バイオマスエネルギー等高効率転換技術開発
36.4億円(28.0億円)

**セルロース系エタノール
革新的生産システム開発**
7.8億円(新規)

バイオマスエネルギー
地域システム化実験
7.4億円(7.6億円)

バイオマス等未活用
エネルギー実証試験
5.1億円(7.3億円)

E3地域流通スタンダード
モデル創成事業
1.3億円(4.5億円)

GTL等の合成液体燃料

天然ガスの液体燃料化
(GTL技術実証研究)
38.0億円(60.0億円)

燃料電池

燃料電池先端科学研究
8.5億円(9.0億円)

水素貯蔵材料
先端基盤研究
10.0億円
(9.1億円)
【2.1億円】

水素製造・輸送・貯蔵
システム等技術開発
13.6億円
(17.0億円)
【1.8億円】

固体高分子形
燃料電池実用化
戦略的技術開発
67.0億円
(66.7億円)
【7.5億円】

水素社会構築
共通基盤整備
9.0億円(14.0億円)

燃料電池システム等実証
9.9億円(13.0億円)

電気自動車

革新型蓄電池先端科学基礎研究
30.0億円(新規)

次世代自動車
蓄電池技術開発
26.1億円(29.0億円)

その他・共通

非化石エネルギー
産業技術研究助成
7.0億円(8.2億円)

新エネルギー技術実用化補助
0.6億円(3.0億円)

石油依存度を2030年までに80%程度とする

4. エネルギーイノベーションプログラム
③新エネルギー等の開発・導入促進

【平成21年度予算案：369億円】

※基礎、実用、実証の区分内は、任意に配置。

※各プロジェクト毎の予算額は21年度予算(20年度予算)【20年度補正予算】

背景

一次エネルギー供給にしめる新エネルギーの導入は、依然として割合が低い状況である。

基礎研究

実用化研究

実証

目的

太陽・風力

太陽光発電無線送受電
1.5億円(1.0億円)

バイオマス・廃棄物・地熱等

新エネルギー技術研究開発
79.6億円(77.0億円)【5.0億円】

セルロース系エタノール
革新的生産システム開発
7.8億円(新規)

新エネルギー技術
フィールドテスト
85.4億円(85.9億円)

バイオマスエネルギー
地域システム化実験
7.4億円(7.6億円)

E3地域流通スタンダード
モデル創成事業
1.3億円(4.5億円)

電力系統制御・電力貯蔵

革新型蓄電池先端科学基礎研究
30.0億円(新規)

次世代自動車用高性能
蓄電システム技術開発
26.1億円(29.0億円)

系統連系円滑化
蓄電システム技術開発
17.0億円(24.0億円)

大規模電力供給用太陽光発電
系統安定化等実証
20.2億円(35.8億円)

燃料電池

水素先端科学
基礎研究
11.3億円
(17.5億円)
【6.0億円】

水素貯蔵材料
先端基盤研究
10.0億円
(9.1億円)
【2.1億円】

将来型燃料高度利用
5.1億円(6.0億円)

固体高分子形燃料電池
実用化戦略的技術開発
67.0億円
(66.7億円)
【7.5億円】

固体酸化物形
燃料電池実証研究
7.2億円(8.0億円)

燃料電池システム等実証研究
9.9億円(13.0億円)

セラミックリアクター開発
3.5億円(4.5億円)

燃料電池先端
科学研究
8.5億円(9.0億円)

水素製造・輸送・貯蔵
システム等技術開発
13.6億円
(17.0億円)
【1.8億円】

固体酸化物形
燃料電池システム要素技術開発
12.0億円(13.5億円)【2.6億円】

水素社会構築
共通基盤整備
9.0億円(14.0億円)

その他・共通

非化石エネルギー
産業技術研究助成
7.0億円(8.2億円)

新エネルギー技術実用化補助
0.6億円(3.0億円)

経済性・出力安定性といった課題を克服し、新エネルギー等の自律的な普及を図る

4. エネルギーイノベーションプログラム

④原子力等利用の推進とその大前提となる安全の確保

【平成21年度予算案：268億円】

※基礎、実用、実証の区分内は、任意に配置。

※各プロジェクト毎の予算額は21年度予算(20年度予算)【20年度補正予算】

背景

地球温暖化対策やエネルギー安全保障の観点から、核燃料サイクルを含む原子力発電を推進する国際的な動きが急激に進展している。

基礎・基盤研究

実証・実用化開発

目的

軽水炉・軽水炉核燃料サイクル

回収ウラン利用技術開発
0.9億円(1.0億円)

革新的実用原子力技術開発
12.8億円(8.0億円)

次世代軽水炉等技術開発
19.4億円(12.5億円)

使用済燃料再処理事業高度化
16.0億円(新規)

遠心法ウラン濃縮技術開発
8.0億円(11.0億円)

全炉心混合酸化物燃料技術開発
30.0億円(30.0億円)

高速増殖炉(FBR)サイクル

高速炉再処理回収ウラン等
除染技術開発
5.4億円(6.0億円)

発電用新型炉等技術開発
53.5億円(43.7億円)

放射性廃棄物処理処分

放射性廃棄物共通技術調査等
5.4億円(6.4億円)

地層処分技術調査等
36.5億円(36.8億円)

管理型処分技術調査等
3.7億円(5.4億円)

その他・共通

イットリウム系
超電導電力機器技術開発
30.0億円(30.0億円)

高温超電導ケーブル
実証プロジェクト
6.8億円(1.6億円)

その他電力供給安定化技術

系統連系円滑化
蓄電システム技術開発
17.0億円(24.0億円)

大規模電力供給用太陽光発電
系統安定化等実証
20.2億円(35.8億円)

発電プラント用超高純度
金属材料の開発
3.0億円(3.9億円)

2030年以降においても、発電電力量に占める原子力発電の比率を30〜40%以上とする

4. エネルギーイノベーションプログラム

⑤化石燃料の安定供給確保と有効かつクリーンな利用

【平成21年度予算案：479億円】

※基礎、実用、実証の区分内は、任意に配置。

※各プロジェクト毎の予算額は21年度予算(20年度予算)【20年度補正予算】

背景

化石燃料資源の太宗を輸入に依存する我が国にとって、その安定供給の確保は国家安全保障に直結する課題である。

基礎研究

実用化研究

実証

目的

石油・天然ガス・石炭の探鉱・開発・生産技術

- ASTER 5億円(0.6億円)
- ハイパースペクトルセンサ等 25.0億円(10億円)
- PALSAR 5億円(0.6億円)
- 石油資源遠隔探知 14.8億円(16.0億円)
- 石油精製物質等簡易有害性評価手法 2.5億円(2.5億円)
- 石油・天然ガス開発・利用促進型大型研究 9.6億円(8.5億円)

石油・天然ガスの有効利用技術

- 石油・天然ガス開発・利用促進型特別研究 3.0億円(1.5億円)
- 石油燃料次世代環境対策 9.1億円(10.7億円)
- 次世代高信頼性ガスセンサー 1.0億円(1.0億円)
- 天然ガスの液体燃料化(GTL技術実証研究) 38.0億円(60.0億円)
- 石油精製高度機能融合 36.0億円(79.3億円)
- 将来型燃料高度利用 5.1億円(6.0億円)
- 高効率ガスタービン実用化 16.4億円(5.4億円)
- 革新的次世代石油精製等 41.7億円(39.6億円)

メタンハイドレート等非在来化石資源の利用技術

- メタンハイドレート開発促進 45.3億円(25.3億円)

石炭のクリーン利用技術

- 先進超々臨界圧火力発電実用化要素技術 7.4億円(2.0億円)
- 石炭ガス化利用 3.8億円(3.5億円)
- 国際革新的ゼロエミッション石炭火力発電プロジェクト補助金 9.0億円(7.5億円)
- 革新的ゼロエミッション石炭火力発電プロジェクト 34.5億円(32.5億円)【10.2】
- 革新的製鉄プロセス 3.8億円(新規)
- 噴流床石炭ガス化発電プラント開発 12.0億円(20.7億円)

その他・共通

- 元素先端科学基礎研究 11.3億円(17.5億円)【6.0億円】
- 非化石エネルギー産業技術研究助成 7.0億円(8.2億円)
- 燃料電池先端科学研究 8.5億円(9.0億円)
- 水素貯蔵材料先端基盤 10.0億円(9.1億円)【2.1億円】
- 固体酸化物形燃料電池システム要素技術開発 12.0億円(13.5億円)【2.6億円】
- 水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発 13.6億円(17.0億円)【1.8億円】
- 固体高分子形燃料電池実用化戦略的技術開発 67.0億円(66.7億円)【7.5億円】
- 新エネルギー技術実用化補助 0.6億円(3.0億円)
- 固体酸化物形燃料電池実証 7.2億円(8.0億円)
- 燃料電池システム等実証研究 9.9億円(13.0億円)
- 水素社会構築共通基盤整備 9.0億円(14.0億円)

化石燃料の安定供給確保と有効かつクリーン・有効利用の促進

5. 環境安心イノベーションプログラム

【平成21年度予算額:165億円】

各プロジェクト毎の予算額は21年度予算(20年度予算)【20年度補正予算】

温室効果ガス削減目標達成への
貢献
向上・循環利用
率の向上・最終
処分量の削減
環境に調和した循環型産業システム
の創造
化学物質の効果を極大にリスクを
極小に

エコイノベーション事業
エコイノベーション推進・革新的温暖化対策技術発掘・実証プログラム4.0億円(4.2億円)

地球温暖化防止新技術
資源制約克服/3R
環境調和産業創造バイオ
化学物質総合評価管理



温室効果ガスを抑制し持続的な
経済成長の確保
資源循環型
社会の実現
バイオ技術を活用した環境モノ作り・
循環型産業の実現
化学物質のリスクを総合的に評価し、適切に管理できる社会システム
の確立

資源制約を克服し環境と調和した持続的な経済成長と安全・安心な国民生活の実現

6. 健康安心イノベーションプログラム

【平成21年度予算額：130.0億円】

各プロジェクト毎の予算額は、21年度予算(20年度予算)【20年度補正予算】

背景

創薬・診断ソース探索 > ターゲットの絞込 > 化合物の探索・評価 > 前臨床 > 民間等による臨床開発

目的

創薬・診断技術開発の推進

医療機器・再生医療等
技術開発の推進

少子高齢化社会の到来

機能性RNA
プロジェクト
8.0億円(8.2億円)

ゲノム創薬加速化支援
バイオ基盤技術開発
28.0億円(28.0億円)

幹細胞産業応用促進技術開発
10.0億円(新規)【10.0億円】

新機能抗体創製
技術開発
9.0億円(10.0億円)

糖鎖機能活用
技術開発
9.5億円(10.0億円)

基礎研究から臨床への
橋渡し促進技術開発
33.0億円(26.0億円)
(うち、創薬、
診断技術)

個別化医療の実現
のための技術融合
バイオ診断技術開発
3.4億円(3.4億円)

ベンチャー育成
臨床機関との一体的取組
治験環境の整備
厚労・文科・経産の連携

制度・基盤
・バイオ事業化に伴う生命倫理問題等に関する研究 0.3億(0.4億円)
・バイオインダストリー安全対策調査 0.4億円(0.6億円)
・統合データベースプロジェクト 0.7億円(0.7億円)

要素技術開発 > プロトタイプ試作 > 前臨床 > 臨床研究

分子イメージング機器
研究開発プロジェクト
8.3億円(9.6億円)

次世代DDS型悪性腫瘍
治療システム研究開発
4.3億円(4.6億円)

インテリジェント手術
機器研究開発
プロジェクト
6.0億円
(6.0億円)【2.0億円】

再生医療評価
研究開発事業
7.5億円(7.5億円)

基礎研究から臨床への
橋渡し促進技術開発
33.0億円(26.0億円)(再掲)
(うち診断技術、治療機器、
再生・細胞医療技術)

福祉用具実用化
開発推進事業
1.0億円(1.1億円)

制度・基盤
・医療機器開発ガイドライン策定事業 0.5億円(0.6億円)
・福祉機器情報収集・分析・提供事業 0.2億円(0.2億円)

分子イメージング、DDSについては、
薬剤開発を含む。

革新的医薬

診断ツール

医療機器

再生医療
(福祉機器
含む)

健康寿命の延伸

QOLの向上

新規産業の創出・国際競争力の強化

国民が健康で安心して暮らせる社会の実現

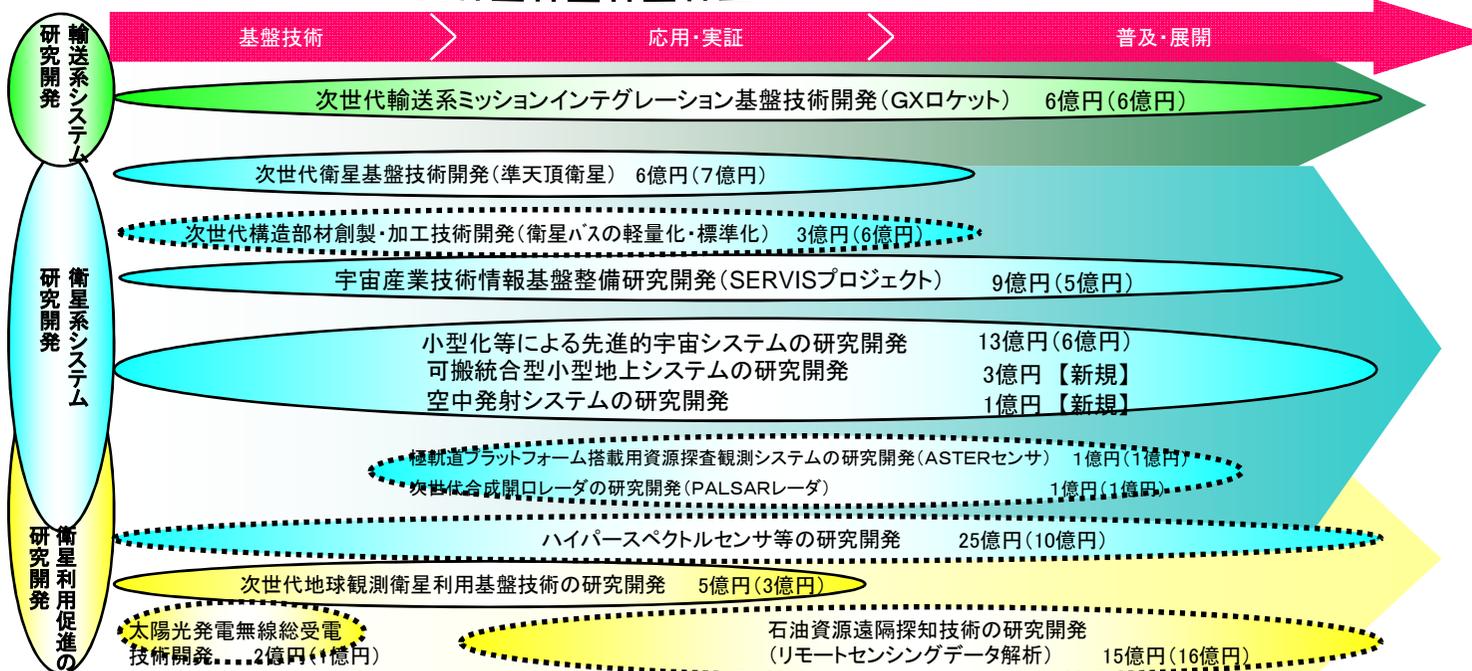
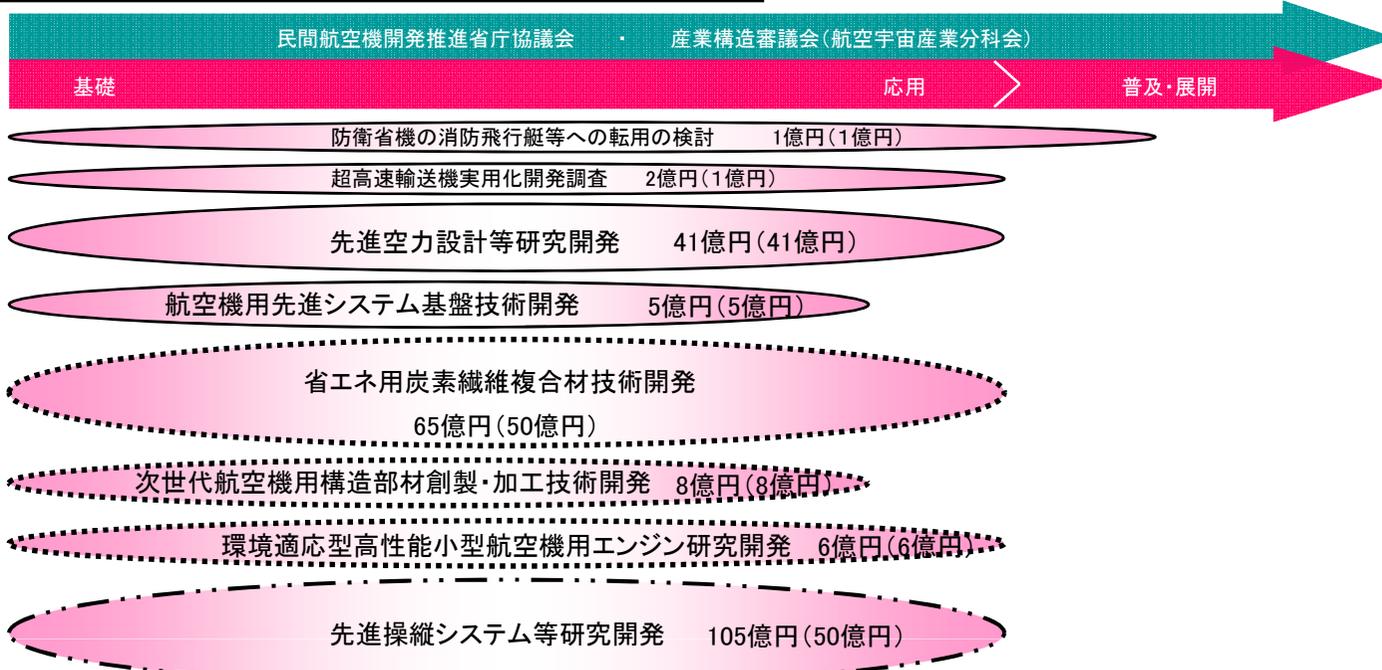
7. 航空機・宇宙産業イノベーションプログラム

【平成21年度予算案 320.1億円（うち財投出資 105億円）】
各プロジェクト毎の予算額は21年度予算（20年度予算）

背景

安全性・環境適合性・経済性等の社会ニーズ
航空機関連技術力の蓄積

高度情報化社会の実現、地球環境の保全、
資源開発等の多様な社会ニーズ



目的

我が国航空機産業の
基盤技術力の維持・向上、
中長期的な発展

我が国宇宙産業の
国際競争力の強化

(革新的部材産業創出プログラム)

「グリーン・サステナブルケミカルプロセス基盤技術開発」プロジェクト基本計画

1. 研究開発の目的・目標・内容

(1) 研究開発の目的

我が国の素材・部材製造産業は、国際的に高い技術力と競争力を有し、経済社会の発展を支えているが、地球温暖化問題、資源枯渇問題が現実化しつつある中で様々な課題を抱えてもいる。製造に際しては、有害な添加物(ハロゲン、重金属等)の利用、過度の高機能化追求にともなうプロセスの多段化等によるエネルギー消費の増大、中間工程における大量の廃棄物排出、リサイクルに不向きな製品の大量廃棄(廃棄処分場の不足等)などが問題となっている。一方、生産に必要な多くの原材料等は限られた産出国からの輸入に頼らざるを得ない状況にあり、今後、将来にわたって安定に製造できるかどうか危惧されている。さらに、欧州では RoHS 指令、REACH 規制の導入や中国などでの自主的な化学物質排出規制の制定など、化学品等の製造にまつわる環境対策が世界的に強化されている。

このような背景の下、わが国の全産業の基幹となる化学品等を持続的に生産、供給していくためには、これまでの大量消費・廃棄型生産プロセスから脱却して、持続的な生産が可能なプロセスによる供給体制の構築が急がれる。そこで本事業は、これら資源、エネルギー、環境の制約問題を克服し、高機能な素材、部材の持続的製造を可能とする基盤技術の確立を目指し、『部材分野の技術戦略マップを活用し、将来の部材の基盤技術の方向性を見定め、材料関係者だけでなく多様な連携による基盤技術開発の支援で、部材分野の技術革新を促進すること』を目的とした「革新的部材産業創出プログラム」に位置付けて実施するものである。

本研究開発では、化学品等の製造プロセスにおけるシンプル化、クリーン化、原材料・資源の多様化、さらに、廃棄物の減容化、容易なりサイクル等を実現し、産業競争力強化、国際規制の先取りを図って、将来にわたっても持続的に化学品等を製造するために必要な新規なグリーン・サステナブルケミカルプロセスを開発する研究開発を行う。想定される研究開発課題としては、()有害な化学物質を削減できる、又は使わないプロセス・製品の開発、()廃棄物、副生成物を削減できるプロセス・製品の開発、()容易なりサイクルを実現するプロセス・製品の開発、()消費エネルギーを削減できるプロセス・製品の開発、()希少資源を代替できるプロセス・製品の開発、()未利用 / 低品位資源を利用したプロセス・製品の開発等による独創的で革新的な化学プロセスを通じた化学品の開発であり、これら研究開発を通じたプロセスイノベーションやマテリアルイノベーションを早期に実現することを目指すものである。これにより、わが国全体の産業競争力強化と環境負荷低減を飛躍的に促進することができ、新産業創造戦略及び世界全体をリードしたサステナブルな産業構造への貢献が期待できる。

(2) 研究開発の目標

本研究開発では、既存の化学品等の製造において、これまでにないシンプル化(高い原子効率)、クリーン化、原材料・資源の多様化・有効利用が実現できる新規プロセス、又は既存の化学品等に比べて、使用から廃棄にわたるライフサイクルにおいて、大幅な省エネ効果、廃棄物の減容化、容易なりサイクル等が実現できる新規な化学品の製造等など、今後、30 年以上にわたって持続的に製造可能となるプロセスイノベーション、マテリアルイノベーションに資する革新的な研究開発を行う。研究開発目標は下記の通りである。

【研究開発目標】

有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発：

- ・ハザードの大きな溶媒、化合物等の使用に対して50%以上の大幅な削減が見込めること。
- ・ライフサイクルに亘り30%以上を目安とした省エネ効果、又は安全性、軽量化、長寿命化の大幅な改善が見込めること。

廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発：

- ・e-ファクター(副生成物量(産業廃棄物量)/目的生成物量)の大幅な低減、又は廃棄物、排水量等に対して50%以上の大幅な削減が見込めること。
- ・ライフサイクルに亘り30%以上を目安としたリサイクル率(カスケードリサイクル含む)、又は軽量化、長寿命化の大幅な改善が見込めること。

その他：

、 の研究開発項目に対する研究開発目標と同等以上とし、顕著な効果(副生成物削減、省エネ効果、長寿命化、軽量化、リサイクル率等)が期待できる数値目標が立てられること。

などの項目において顕著な効果が期待できる目標を達成すると共に、他の項目(性能、コスト等)に対しても既存のプロセス、化学品の製造に対して同等レベル以上であること。

研究開発目標は共通基盤技術、実用化技術の確立の点から十分なものと想定されるが、本事業では独創的な GSC プロセスによる高機能な素材・部材製造に関する研究開発テーマが数多く提案されることが期待されることから、適宜、最新の技術情報、有識者のヒアリング等を通じて柔軟に研究開発目標の変更を行う。なお、採択時に研究開発テーマ毎に具体的な数値目標を設けることとする。

(3) 研究開発の内容

本研究開発は、社会状況、「グリーン・サステナブルケミストリー(GSC)技術戦略ロードマップ」を勘案して経済産業省とNEDO技術開発機構が協議して政策的に重要と判断した研究開発テーマを優先的に実施する。具体的には、化学品等の製造プロセスの中でシンプル化、クリーン化、原材料の多様化・有効利用、廃棄物の減容化、容易なリサイクル等の観点から、有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発、廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発、及び その他として、～ 以外の研究開発テーマで、社会状況、緊急性を勘案して、産業競争力強化、大きな波及効果が期待できる革新的な基盤技術開発を委託により実施する。なお、研究開発項目 および については、別紙の研究開発計画に基づき、研究開発を実施するものとする。

【研究開発項目】

有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発

ハザードの大きな溶媒等を削減、使わないクリーンプロセス、及び有害物質を含まない 化学品を開発するために必要な水溶性触媒、無溶媒、親水性溶媒、相間移動触媒、有機合成の触媒化等を利用した革新的な技術

廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発

副原材料、廃棄物を大幅に削減できるクリーンプロセス、又はシンプルプロセスを利用した化学品を開発するために必要な酸化反応、エステル化等に利用できる新規触媒による革新的な技術

その他

～ 以外の研究開発テーマで、社会状況等の緊急性を勘案して、産業競争力強化、大きな波及効果が期待できる革新的なプロセス及び化学品に関する技術

2. 研究開発の実施方式

(1) 研究開発の実施体制

本研究開発は、経済産業省が、企業、民間研究機関、独立行政法人、大学等(委託先から再委託された研究開発実施者を含む)から公募によって研究開発実施予定者を選定後、共同研究契約等を締結する研究体を構築し、委託して実施する。

共同研究開発に参加する各研究開発グループの有する研究開発ポテンシャルを最大限に活用することにより効率的な研究開発の推進を図る観点から、研究体に経済産業省が委託先決定後に指名する研究開発責任者(テマリーダー)を置き、その下に研究者を可能な限り結集して効率的な研究開発を実施する。

本研究開発において、基礎的・基盤的研究開発であると判断される研究開発内容に示した共通基盤技術及び要素技術は委託により実施する。

(2) 研究開発の運営管理

経済産業省は、テマリーダーと密接な関係を維持しつつ、本研究開発の目的及び目標に照らして適切な運営管理を実施する。具体的には、外部有識者の意見を運営管理に反映させる他、テマリーダー等を通じてプロジェクトの進捗について報告を受けること等を行う。

また、経済産業省は、NEDO 技術開発機構が行う調査結果や専門的知見を活用し、NEDO 技術開発機構の協力を得ながら、本研究開発の運営管理を行う。

3. 研究開発の実施期間

本研究開発の期間は、平成 20 年度から平成 27 年度までの 8 年間とする。

4. 評価に関する事項

経済産業省は、経済産業省技術評価指針(平成 14 年告示第 167 号)に基づき、研究開発の目標達成度の把握や社会経済情勢等の変化を踏まえた改善・見直しのため、外部有識者による研究開発の中間評価、事後評価を実施する。事後評価を平成 28 年度に実施する。なお、評価の時期については、当該研究開発に係る技術動向、政策動向や当該研究開発の進捗状況に応じて、前倒しする等、適宜見直すものとする。

5. その他の重要事項

(1) 研究開発成果の取扱い

・成果の普及

実施者は、得られた研究成果の普及について、可能な限り、保有する特許等の活用も含め、最善

の努力をするものとする。経済産業省及びNEDO技術開発機構は、実施者との緊密なる連携の下、必要とされる環境整備等について十分な配慮をするものとする。

・知的基盤整備事業又は標準化等との連携

得られた研究開発の成果については、知的基盤整備又は標準化等との連携を図るため、データベースへのデータの提供、標準情報(TR)制度への提案等を積極的に行う。

・知的財産権の帰属

委託研究開発の成果に関わる知的財産権については、「産業技術力強化法(平成12年4月19日法律第44号)」第19条及び同法施行令第11条の規定等に基づき、同法令を遵守することを条件に原則として、すべて委託先に帰属させることとする。

(2)基本計画の変更

経済産業省は、研究開発内容の妥当性を確保するため、社会・経済的状況、内外の研究開発動向、産業技術政策動向、プログラム基本計画の変更、第三者の視点からの評価結果、研究開発費の確保状況、当該研究開発の進捗状況等を総合的に勘案し、達成目標、実施期間、研究開発体制等、基本計画の見直しを弾力的に行うものとする。

(3)担当課室

本基本計画の作成責任課は、産業技術環境局研究開発課及び製造産業局化学課である。

(4)その他

本研究によって得られたあらゆる知的財産、また本研究の過程又は成果に基づき開発したプログラム、サンプルもしくは装置などの成果物について、本プロジェクト外(国内外)への供試・開示については、事前にテマリーダーと経済産業省に連絡する。その際に、経済産業省が申請書の提出を求めた場合は、これに応じ速やかに提出する。

6.基本計画の改訂履歴

(1)平成20年3月制定

(別紙) 研究開発計画

研究開発項目 「有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発」

1. 研究開発の必要性

安全性が高い溶媒(水、アルコール等)で機能する触媒反応や無溶媒反応は、従来有機溶媒中で行われてきた化学品製造プロセスを代替することで、有害な有機溶媒の使用量を抜本的に改善することが期待できる技術である。しかしながら、これら新規反応の多くは、ラボスケールの研究開発段階にあり、工業プロセス化を進めるためには、水、アルコール等での触媒活性、選択性のさらなる向上、触媒寿命・耐久性の向上、生成物と触媒との分離・精製技術、及びスケールアップ等の生産システム化に向けた基盤技術の開発が必要である。

本研究開発では、水、アルコール等で機能する触媒を利用したハザードの大きい有機溶媒等を使用しないクリーンな生産システムのための共通基盤技術の確立を行う。

2. 研究開発の具体的内容

研究開発目標を達成するため、具体的に下記の内容の研究開発を実施する。

(1) 水、アルコール等で機能する触媒の高機能化、回収・再生、及び製造に関する共通基盤技術

現状の工業プロセスにおいては、有機合成反応は有機溶媒中で行われている。これを環境に優しい水、アルコール等の溶媒に置き換えることで環境負荷の大幅な削減が期待できる。これまでも水系で機能する新規な触媒が開発されてきているものの、その多くはラボスケールの実験結果であり、生産プロセスを指向した技術開発は十分に行われていない。本研究開発では、水、アルコール等で機能する触媒の活性、選択性、及び耐久性の向上、分離回収・再生技術、触媒製造技術等の実用化生産システム化に向けた共通基盤技術を確立する。

3. 達成目標

(1) 水、アルコール等で機能する触媒の高機能化、回収・再生、及び製造に関する共通基盤技術

中間目標(平成21年度末)

水、アルコール等で機能する触媒の活性・耐久性向上

・水、アルコール等で機能し、反応率70%以上、選択率70%以上の触媒プロセスを開発する。

触媒反応プロセス、分離回収・再生技術に関する共通基盤技術

・反応物から触媒および生成物を効率的に回収する反応システムを設計し、ラボスケール装置により、生産量(処理量)0.1kg~10kg/日以上を達成する。

・水、アルコール等で機能する新規触媒反応プロセスに関する試設計、開発を行う。

最終目標(平成23年度末)

水、アルコール等で機能する触媒の活性・耐久性向上

・水、アルコール等で機能し、反応率80%以上、選択率90%以上の触媒プロセスを開発する。

触媒反応プロセス、分離回収・再生技術に関する実用化基盤技術

・生産量(処理量)10kg~数トン/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。

その他

・本研究開発目標(本文)に関して、大きな寄与が実現できる技術レベルを確立すること。

1. 研究開発の必要性

昨今、化学品を製造する有機合成反応では、e-ファクター(副生成物量(=産業廃棄物量)/目的生成物量)が10~100以上と、生産に伴う大量の廃棄物を排出し、そのための多大な無害化処理にコストが掛かっている。数多くの有機合成反応を触媒反応に置き換えることが出来れば、これまでの大量の廃棄物を大量に削減することが可能となる。しかしながら、有機合成反応を触媒反応に置き変える場合、金属活性種を担体に担持しても、十分な活性、選択性を保持できるか、担持触媒からの金属種の流出を十分抑えることができるのか、といった問題を解決することが重要となる。今後、ますます高まるであろう環境規制の強化に対応するためにも、より安定性、耐久性(長寿命)に優れ、かつ高活性、高選択な触媒とその固定化技術、及び新規な固定化触媒を用いた高付加価値生産に寄与できるプロセス技術の開発が必要である。一方、化学産業における酸化プロセスは30%を超える重要な基幹プロセスであるものの、ハロゲン等を含む有害な廃棄物を大量に排出するプロセスとなっており、これまでにないクリーンで難易度の高い高選択酸化触媒が開発されれば、精密化学品や電子材料等の普及に伴いますます需要が見込まれるオレフィン類やケトン類を含む化合物の特定の官能基を選択的に酸化することによる高付加価値な化学品が合成できるばかりでなく、大幅な廃棄物の削減を実現することができる。しかしながら、これらの高性能触媒による工業プロセス化に向けては、新規な高性能触媒の開発だけでなく、触媒回収・再生技術やスケールアップなど生産プロセスに関する基盤技術の確立が重要となる。

本研究開発では、(1)新規な触媒固定化技術 (2)高選択酸化触媒反応による廃棄物、副生成物を抜本的に削減できる革新的プロセス及び化学品の開発のための共通基盤反応の確立を行う。

2. 研究開発の具体的内容

(1) 新規な触媒固定化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術

触媒を利用した化学プロセスが抱える問題点として、触媒として利用している金属の反応場への流出、生成物への混入、また、反応で劣化した触媒(希少金属を含む)の大量廃棄が挙げられる。回収・再使用可能な新規な固定化技術により、これらの多くの問題が解決されることが期待できる。本研究開発では、高活性、高選択かつ再生可能な新規な固定化触媒の開発、さらに開発された新規な触媒を使った実用化プロセスに関する設計・開発等に関する共通基盤技術を確立する。

(2) 高選択酸化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術

オレフィン類やケトン類の選択酸化反応は化学品やポリマー材料の合成において極めて重要なプロセスであるが、選択酸化反応の制御は技術的に困難であり、多くの副生成物(廃棄物)が発生するプロセスとして知られている。ここでは、ハロゲン化物等の有害な化学物質を原料に用いない高活性、高選択な酸化触媒の開発、触媒回収・再生技術やスケールアップ等の生産システム化に向けた共通基盤技術を確立する。

3. 達成目標

(1) 新規な触媒固定化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術

中間目標(平成21年度末)

高活性、高選択かつ再生可能な新規な固定化触媒プロセスの開発

・反応率70%、選択性70%、溶出金属回収率90%以上

新規な固定化触媒によるラボスケールでの生産

- ・ラボスケール装置により、生産量 0.1 kg ~ 10 kg / 日以上を達成する。

最終目標(平成23年度末)

高活性、高選択かつ再生可能な新規な固定化触媒プロセスの開発

- ・反応率 80%、選択性 90%、溶出金属回収率 98%以上

新規な固定化触媒による実用化プロセスに関する設計・開発

- ・生産量 10 kg ~ 数トン/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。

その他

- ・本研究開発目標(本文)に関して、大きな寄与が実現できる技術レベルを確立すること。

(2)高選択酸化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術

中間目標(平成21年度末)

高性能触媒による高活性、高選択酸化触媒プロセスの開発

- ・オレフィン類やケトン類の選択酸化触媒プロセスを開発する。反応率 70%以上、選択率は 70%以上とする。

高性能触媒によるラボスケールでの生産

- ・ラボスケール装置により、生産量 0.1 kg ~ 10 kg / 日以上を達成する。

最終目標(平成23年度末)

高性能触媒による高活性、高選択酸化触媒プロセスの開発

- ・オレフィン類やケトン類の高活性、高選択的な酸化触媒プロセスを開発する。反応率 80%以上、選択率は 90%以上とする。

高性能触媒による実用化プロセスに関する設計・開発

- ・生産量 10 kg ~ 数トン/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。

その他

- ・本研究開発目標(本文)に関して、大きな寄与が実現できる技術レベルを確立すること。

以上

P09010

(ナノテク・部材イノベーションプログラム)

「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発」基本計画

環境部

電子・材料・ナノテクノロジー部

1. 研究開発の目的・目標・内容

(1) 研究開発の目的

我が国の化学品製造産業は、国際的に高い技術力と競争力を有し、経済社会の発展を支えているが、地球温暖化問題、資源枯渇問題が現実化しつつある中で様々な課題を抱えてもいる。製造に際しては、有害な添加物(ハロゲン、重金属等)の利用、過度の高機能化追求にともなうプロセスの多段化等によるエネルギー消費の増大、中間工程における廃棄物の大量排出、リサイクルに不向きな製品の大量廃棄(廃棄処分場の不足等)などが問題となっている。一方、生産に必要な多くの原材料等は限られた産出国からの輸入に頼らざるを得ない状況にあり、今後、将来にわたって安定的に化学品が製造できるか危惧されている。さらに、欧州では RoHS 指令、REACH 規制の導入や中国などでの自主的な化学物質排出規制の制定など、化学品の製造に関連する環境対策が世界的に強化されている。

このような背景の下、わが国の全産業の基幹となる化学品を持続的に生産、供給していくためには、これまでの大量消費・廃棄型生産プロセスから脱却して、持続的な生産が可能なプロセスによる供給体制の構築が急がれる。そこで、これら資源、エネルギー、環境の制約問題を克服し、高機能な化学品の持続的製造を可能とする基盤技術の確立を目指し、『部材分野の技術戦略マップを活用し、将来の部材の基盤技術の方向性を見定め、材料関係者だけでなく多様な連携による基盤技術開発の支援で、部材分野の技術革新を促進すること』を目的とした「ナノテク・部材イノベーションプログラム」に位置付けて本事業を実施する。また、資源生産性向上を目指すことを提言した「新経済成長戦略のフォローアップと改訂」(平成 20 年 9 月 19 日閣議決定)においても「地球温暖化、世界的な資源の需給逼迫に対応して、抜本的な省エネ、省資源技術の確立を目指すべく、グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発を推進する。」こととされている。

本事業では、化学品の製造プロセスにおけるシンプル化、クリーン化、省エネ化、原材料・資源の多様化・有効利用、さらに、廃棄物の減容化、容易なりサイクル等を実現し、産業競争力強化、国際規制の先取りを図って、将来にわたっても持続的に化学品を製造するために必要な新規なグリーン・サステイナブルケミカルプロセス(以下「GSC プロセス」という)の研究開発を行う。想定される研究開発課題としては、i)有害な化学物質を削減できる、又は使わない、ii)廃棄物、副生成物を削減できる、iii)資源生産性を向上できる、等による独創的で革新的な化学プロセスを通じた化学品の開発であり、これら研究開発を通じてプロセスイノベーションやマテリアルイノベーションを早期に実現することを目的とする。これにより、わが国全体の産業競争力強化と環境負荷低減を飛躍的に促進することができ、新産業創造戦略及び世界全体をリードしたサステイナブルな産業構造への貢献が期待できる。

(2) 研究開発の目標

本研究開発では、既存の化学品等の製造において、これまでになかったシンプル化(高い原子効率)、クリ

ーン化、原材料・資源の多様化・有効利用が実現できる新規プロセスや既存の化学品に比べて、使用から廃棄にわたるライフサイクルにおいて、大幅な省エネ効果、廃棄物の減容化、容易なりサイクル等が実現できる新規な化学品の製造等、今後、持続的に製造可能となるプロセスイノベーション、マテリアルイノベーションに資する革新的な研究開発を行う。研究開発目標は下記の通りである。

【研究開発目標】

①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発：

- ・ハザードの大きな溶媒、化合物等の使用に対して大幅な削減が見込めること。
- ・ライフサイクルに亘り大幅な省エネ効果、安全性、軽量化、長寿命化等に大幅な改善が見込めること。

②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発：

- ・e-ファクター(副生成物量(=産業廃棄物量)/目的生成物量)の大幅な低減、廃棄物、排水量等に対して大幅な削減が見込めること。
- ・ライフサイクルに亘り大幅なりサイクル率(カスケードリサイクル含む)向上、軽量化、長寿命化等の大幅な改善が見込めること。

③資源生産性を向上できる革新的プロセス及び化学品の開発：

- ・石油化学品、機能性化学品合成、生成物分離、副生ガス分離など、大量エネルギー消費に関わる単位操作のプロセスにおいて大幅な消費エネルギー削減が見込めること。
- ・ライフサイクルに亘り大幅なりサイクル率(カスケードリサイクル含む)、安全性、軽量化、長寿命化等の大幅な改善が見込めること。

④化学品原料の転換・多様化を可能とする革新グリーン技術の開発：

- ・化学品に使用される石油由来原料について、気体原料や植物由来原料等への大幅な転換・多様化が見込めること。
- ・ライフサイクルに亘り大幅な二酸化炭素の排出の抑制が見込めること。

上記項目において顕著な効果が期待できる目標を達成するとともに、他の項目(性能、コスト等)に対しても既存のプロセス、化学品の製造に対して同等レベル以上であること。なお、研究開発項目①～④に関する具体的な研究開発テーマの研究開発目標は、別紙の研究開発計画において設定するものとする。

(3) 研究開発の内容

本研究開発は、社会状況、「グリーン・サステイナブルケミストリー技術戦略ロードマップ」を勘案して独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(以下、「NEDO」という。)及び経済産業省が協議して政策的に重要と判断した研究開発テーマを優先的に実施する。具体的には、化学品等の製造プロセスの中でシンプル化、クリーン化、省エネ化、原材料・資源の多様化・有効利用、廃棄物の減容化、容易なりサイクル等の観点から、①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発、②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発、③資源生産性を向上できる革新的プロセス及び化学品の開発、④化学品原料の転換・多様化を可能とする革新グリーン技術の開発を委託により実施する。なお、研究開発項目①～④に関する具体的な研究開発テーマにつ

いては、別紙の研究開発計画に基づいて実施するものとする。

【研究開発項目】

[委託事業]

①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発:

ハザードの大きな溶媒等を削減又は使わないクリーンプロセス及び有害物質を含まない化学品を開発するために必要な水溶性触媒、無溶媒、親水性溶媒、相間移動触媒、有機合成の触媒化等を利用した革新的な技術を開発する。

・「水、アルコール等で機能する触媒の高機能化、回収・再生及び製造に関する共通基盤技術」

②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発:

副原材料、廃棄物を大幅に削減できるクリーンプロセス又はシンプルプロセスを利用した化学品を開発するために必要な酸化反応、エステル化等に利用できる新規触媒による革新的な技術を開発する。

・「新規な触媒固定化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術」

・「高選択酸化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術」

③資源生産性を向上できる革新的プロセス及び化学品の開発:

石油化学品、機能性化学品合成、生成物分離、副生ガス分離等に対して大幅な消費エネルギー削減が可能となるクリーンプロセスを開発するために必要な触媒、膜材料、分離材料、吸着剤、選択加熱法による革新的な技術を開発する。

・「触媒を用いる革新的なナフサ分解プロセス基盤技術開発」

・「規則性ナノ多孔体精密分離膜部材基盤技術の開発」

・「副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発」

④化学品原料の転換・多様化を可能とする革新グリーン技術の開発

気体原料を高効率に有効利用する技術や植物由来原料から有用な化合物を合成するプロセス及びこれらのプロセスから得られる化合物や既存の非化石由来原料から得られる化合物から高機能化部材を製造するプロセスの開発を行い、全体システムとして高度化・多様化する革新的な技術を開発する。

実用化までの長時間を要するハイリスクな「基盤的技術」に対して、産学官の複数事業者が互いのノウハウ等を持ちより協調して実施する事業、又は試験・評価方法、基準・プラットフォームの提案等、国民経済的には大きな便益がありながらも、民間企業の研究開発投資に見合うものが見込めない「公共財の研究開発」事業であり、原則、委託事業として実施する。

・「気体原料の高効率利用技術の開発」

・「植物由来原料から化合物を合成するプロセスの開発」

・「高機能化部材製造プロセスの開発」

2. 研究開発の実施方式

(1) 研究開発の実施体制

研究開発項目①及び②は、経済産業省により、企業、大学等(委託先から再委託された研究開発実施者を含む。)から公募によって研究開発実施者が選定され、共同研究契約等を締結する研究体が構築され、平成20年度より委託により実施されている。平成21年度よりNEDOが本研究開発を運営・管理するに当たっては、平成20年度の進捗状況を踏まえた研究開発内容・計画及び実施体制の妥当性について、外部有識者による審議を含めた評価を行った上で最適な研究開発体制を構築し、委託して実施する。さらに、研究開発項目③及び④については、平成21年度よりNEDOが、単独ないし複数の原則、本邦の企業、大学等の研究機関(原則、本邦の企業等で日本国内に研究開発拠点を有していること。なお、国外の企業等(大学、研究機関を含む)の特別の研究開発能力、研究施設等の活用または国際標準獲得の観点から国外企業等との連携が必要な部分を、国外企業等との連携により実施することができる。)から公募によって研究開発実施者を選定後、共同研究契約等を締結する研究体を構築し、委託して実施する。

共同研究開発に参加する各研究開発グループの有する研究開発ポテンシャルを最大限に活用することにより効率的に研究開発推進を図る観点から、委託先決定後にNEDOが指名する研究開発責任者(プロジェクトリーダー)を研究体に置き、その下に研究者を可能な限り結集して効率的な研究開発を実施する。

(2) 研究開発の運営管理

研究開発全体の管理・執行に責任を有するNEDOは、研究体毎にプロジェクトリーダーを設置し、担当範囲を明確にする。また、NEDOは、経済産業省及びプロジェクトリーダー等と密接な関係を維持し、更には、国内外の類似する技術開発の把握に努め、本研究開発の目的及び目標に照らして適切な運営管理を行う。具体的には、プロジェクトリーダー、委託先機関等からのヒアリングにより、開発目標に対する成果状況などの報告を受けるほか、自ら当該分野の国内外における技術開発動向の調査や技術マップの調査・更新を行い、次年度の業務委託の可否や、実施内容、予算規模の見直しを図る。優れた研究成果を上げている研究体に対しては、研究加速についても弾力的に対処するなど予算の効果的配分に努める。また、成果の早期達成が可能と認められた研究体については、期間内であっても研究を完了させ、実用化へ向けた実質的な研究成果の確保と普及に努める。

④「化学品原料の転換・多様化を可能とする革新グリーン技術の開発」については、個別の研究体毎に、研究開発責任者を設置する。また、NEDOは、経済産業省及び研究開発責任者等と密接な関係を維持し、更には、国内外の類似する技術開発の把握に努め、本研究開発の目的及び目標に照らして適切な運営管理を行う。

3. 研究開発の実施期間

本研究開発の期間は、平成21年度から平成25年度までの5年間とする。なお、社会的な要請、緊急性を勘案して、新規テーマの追加、研究実施期間を延長する場合もある。

平成20年度から経済産業省により「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発」として実施された研究開発項目①、②については、平成21年度よりNEDOの事業として平成23年度まで実施す

る。研究開発項目③については、平成21年度よりNEDOの事業として平成25年度まで実施する。「明日の安心と成長のための緊急経済対策(平成21年度補正予算(第2号))」により実施した研究開発項目④については、平成22年度補正予算(第1号)等による追加予算の充当にともない、研究内容の見直し及び期間延長を行ない平成21年度から平成25年度までの計画とする。平成24年度以降の目標・計画については、研究開発費の確保状況、当該研究開発の進捗状況等を総合的に勘案し、見直しを行う。

4. 評価に関する事項

NEDOは、技術的及び産業技術政策的観点から、研究開発の意義、目標達成度、成果の技術的意義並びに将来の産業への波及効果等について、研究開発テーマ(研究開発項目①、②、③-1、③-2、③-3)毎に中間評価を事業開始3年目(5年以上の研究期間を有する研究開発テーマ)に、事後評価を終了年度の次年度にそれぞれ外部有識者により実施する。研究開発項目④-1、④-2、④-3については、平成23年度に事後評価を行う。④-4、④-5については、事後評価を終了年度の次年度に外部有識者により実施する。また、本研究開発全体の事後評価は全ての研究開発テーマが終了した次年度に実施する。なお、評価の時期については、当該研究開発に係わる技術動向、政策動向や当該研究開発の進捗状況等に応じて、前倒しする等、適宜見直すものとする。

5. その他の重要事項

(1) 研究成果の取扱い

NEDOは、研究開発実施者に対して、研究成果の広範な導入・普及に努めるものとする。

(2) 知的基盤整備事業又は標準化等との連携

得られた研究開発の成果については、知的基盤整備又は標準化等との連携を図るため、データベースへのデータの提供、標準案の提案等を積極的に行う。

(3) 知的財産権の帰属

研究開発の成果に関わる知的財産権については、「独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 新エネルギー・産業技術業務方法書」第25条の規定等に基づき、原則として、全て受託者に帰属させることとする。

(4) 基本計画の変更

NEDOは研究開発内容の妥当性を確保するため、社会・経済的状況、研究開発動向、産業技術政策動向、第三者による評価結果、研究開発費の状況、当該研究開発の進捗等を総合的に勘案し、達成目標、実施期間、研究体制等、基本計画の見直しを弾力的に行うことができるものとする。

(5) 根拠法

本プロジェクトは独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構法第十五条第1項第一号ニ及び第二号に基づき実施する。

(6)その他

①～④以外の研究開発テーマで、社会状況等の緊急性を勘案して、産業競争力強化、大きな波及効果が期待できる革新的なプロセス及び化学品に関する研究開発についても実施する場合がある。なお、研究開発目標は共通基盤技術、実用化技術の確立の点から十分なものと想定されるが、本事業では数多くの独創的なGSCプロセスによる高機能な素材・部材製造に関する研究開発テーマの提案が期待されることから、適宜、最新の技術情報、有識者のヒアリング等を通じて柔軟に研究開発目標の変更を行う。また、①～④以外の研究開発を実施する場合には、①～④に対する研究開発目標と同等以上とし、顕著な効果(副生成物削減、未利用/低品位資源の活用、長寿命化、省エネ化、軽量化、リサイクル率向上等)が期待できる数値目標を立てることとする。

6. 基本計画の改訂履歴

平成21年3月、制定。

平成21年12月、「明日の安心と成長のための緊急経済対策(平成21年度補正予算(第2号))」に係る研究開発項目④追加による改訂。

平成22年8月、加速に伴い(別紙)研究開発計画の研究開発項目③-2の達成目標を修正。

平成23年1月、平成22年度補正予算第1号による研究開発項目④-4、④-5追加による改訂。

平成23年7月、根拠法改正に伴う改訂。

研究開発項目①「有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発」

1. 研究開発の必要性

安全性が高い溶媒(水、アルコール等)で機能する触媒反応や無溶媒反応は、従来有機溶媒中で行われてきた化学品製造プロセスを代替することで、有害な有機溶媒の使用量を抜本的に改善することが期待できる技術である。しかしながら、これら新規反応の多くは、ラボスケールの研究開発段階にあり、工業プロセス化を進めるためには、水、アルコール等での触媒活性、選択性の更なる向上、触媒寿命・耐久性の向上、生成物と触媒との分離・精製技術及びスケールアップ等の生産システム化に向けた基盤技術の開発が必要である。

本研究開発では、水、アルコール等で機能する触媒を利用することでハザードの大きい有機溶媒等を使用しないクリーンな生産システムを実現するための共通基盤技術の確立を行う。

2. 研究開発の具体的内容

研究開発目標を達成するため、具体的に下記の内容の研究開発を実施する。

(1) 水、アルコール等で機能する触媒の高機能化、回収・再生及び製造に関する共通基盤技術

現状の工業プロセスにおいては、有機合成反応は有機溶媒中で行われている。これを環境に優しい水、アルコール等の溶媒に置き換えることで環境負荷の大幅な削減が期待できる。これまでも水系で機能する新規な触媒が開発されてきているものの、その多くはラボスケールの実験結果であり、生産プロセスを指向した技術開発は十分に行われていない。本研究開発では、水、アルコール等で機能する触媒の活性、選択性及び耐久性の向上、分離回収・再生技術、触媒製造技術等の実用化生産システム化に向けた共通基盤技術を確立する。

3. 達成目標

(1) 水、アルコール等で機能する触媒の高機能化、回収・再生及び製造に関する共通基盤技術

中間目標(平成 21 年度末)

①水、アルコール等で機能する触媒の活性・耐久性向上

・水、アルコール等で機能し、反応率 70%以上、選択率 70%以上の触媒プロセスを開発する。

②触媒反応プロセス、分離回収・再生技術に関する共通基盤技術

・反応物から触媒および生成物を効率的に回収する反応システムを設計し、ラボスケール装置により、生産量(処理量)0.1kg~10kg/日以上を達成する。

・水、アルコール等で機能する新規触媒反応プロセスに関する試設計、開発を行う。

最終目標(平成 23 年度末)

①水、アルコール等で機能する触媒の活性・耐久性向上

・水、アルコール等で機能し、反応率 80%以上、選択率 90%以上の触媒プロセスを開発する。

②触媒反応プロセス、分離回収・再生技術に関する実用化基盤技術

・生産量(処理量)10kg～数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。

なお、本研究開発終了後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待できる技術レベルを確立すること。

研究開発項目②「廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発」

1. 研究開発の必要性

昨今、化学品を製造する有機合成反応では、 e -ファクター(副生成物量(=産業廃棄物量)/目的生成物量)が10~100以上と、生産に伴う大量の廃棄物を排出しているため、無害化処理に多大なコストが掛かっている。数多くの有機合成反応を触媒反応に置き換えることが出来れば、これまでの大量の廃棄物を大幅に削減することが可能となる。しかしながら、有機合成反応を触媒反応に置き換える場合、金属活性種を担体に担持しても、十分な活性、選択性を保持できるか、担持触媒からの金属種の流出を十分抑えることができるか、といった問題の解決が重要となる。今後、ますます高まるであろう環境規制の強化に対応するためにも、より安定性、耐久性(長寿命)に優れ、かつ高活性、高選択性を有する触媒とその固定化技術及び新規な固定化触媒を用いて高付加価値生産に寄与できるプロセス技術の開発が必要である。一方、化学産業における酸化プロセスは全化学プロセスの30%を超える重要な基幹プロセスであるものの、ハロゲン等を含む有害な廃棄物を大量に排出するプロセスとなっている。したがって、これまでにないクリーンで難易度の高い高選択酸化触媒が開発されれば、精密化学品や電子材料等の普及に伴いますます需要が見込まれるオレフィン類やケトン類を含む化合物における特定の官能基を選択的に酸化することによる高付加価値な化学品が合成できるばかりでなく、大幅な廃棄物の削減を実現することができる。しかしながら、これらの高性能触媒による工業プロセス化に向けては、新規な高性能触媒の開発ばかりではなく、触媒回収・再生技術やスケールアップなど生産プロセスに関する基盤技術の確立も重要となる。

本研究開発では、(1)新規な触媒固定化技術 (2)高選択酸化触媒反応による廃棄物、副生成物を抜本的に削減できる革新的プロセス及び化学品の開発のための共通基盤技術の確立を行う。

2. 研究開発の具体的内容

(1) 新規な触媒固定化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術

触媒を利用した化学プロセスが抱える問題点として、触媒として利用している金属の反応場への流出、生成物への混入、また、反応で劣化した触媒(希少金属を含む)の大量廃棄が挙げられる。回収・再利用可能な新規な固定化技術により、これらの多くの問題が解決されることが期待できる。本研究開発では、高活性、高選択かつ再生可能な新規な固定化触媒の開発、さらに開発された新規な触媒を使った実用化プロセスに関する設計・開発等に関する共通基盤技術を確立する。

(2) 高選択酸化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術

オレフィン類やケトン類の選択酸化反応は化学品やポリマー材料の合成において極めて重要なプロセスであるが、選択酸化反応の制御は技術的に困難であり、多くの副生成物(廃棄物)が発生するプロセスとして知られている。ここでは、ハロゲン化物等の有害な化学物質を原料に用いない高活性、高選択性を有する酸化触媒の開発、触媒回収・再生技術やスケールアップ等の生産システム化に向けた共通基盤技術を確立する。

3. 達成目標

(1) 新規な触媒固定化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術

中間目標(平成 21 年度末)

①高活性、高選択性かつ再生可能な新規な固定化触媒プロセスの開発

・反応率 70%、選択性 70%、溶出金属回収率 90%以上。

②新規な固定化触媒によるラボスケールでの生産

・ラボスケール装置により、生産量 0.1kg～10kg/日以上を達成する。

最終目標(平成 23 年度末)

①高活性、高選択性かつ再生可能な新規な固定化触媒プロセスの開発

・反応率 80%、選択性 90%、溶出金属回収率 98%以上。

②新規な固定化触媒による実用化プロセスに関する設計・開発

・生産量 10kg～数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。

(2) 高選択酸化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術

中間目標(平成 21 年度末)

①高性能触媒による高活性、高選択性酸化触媒プロセスの開発

・オレフィン類やケトン類に対する選択酸化触媒プロセスを開発する。なお、オレフィン類の選択酸化反応では反応率 70%以上、選択率 70%以上、ケトン類の選択酸化反応では反応率 60%以上、選択率 70%以上とする。

②高性能触媒によるラボスケールでの生産

・ラボスケール装置により、生産量 0.1kg～10kg/日以上を達成する。

最終目標(平成 23 年度末)

①高性能触媒による高活性、高選択性酸化触媒プロセスの開発

・オレフィン類やケトン類に対して高活性、高選択性を有する酸化触媒プロセスを開発する。なお、オレフィン類の選択酸化反応では反応率 80%以上、選択率 90%以上、ケトン類の選択酸化反応では反応率 80%以上、選択率 80%以上とする。

②高性能触媒による実用化プロセスに関する設計・開発

・生産量 10kg～数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。

なお、本研究開発終了後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待できる技術レベルを確立すること。

研究開発項目③-1「資源生産性を向上できる革新的プロセス及び化学品の開発」
(触媒を用いる革新的ナフサ分解プロセス基盤技術開発)

1. 研究開発の必要性

国内の化学プラントにおける省エネ率は世界最高レベルであるものの、全産業に占めるエネルギー使用量は鉄鋼業に次ぐ27%と膨大であり、1980年代以降は横這い状況が続いている。将来、国内の化学産業が持続的に高付加価値な機能性化学品(セミバルク、ファイン)を安定的に供給するためには、クリーンかつ省エネで石油化学品を生産できる革新プロセスの開発が求められている。現在、ナフサ接触分解は、エチレン、プロピレン、ブテン、BTXなどの石油化学品を生産するための基幹プロセスであるが、現行技術では原料ナフサを850℃程度の熱分解で生産しており、この工程での消費エネルギー量は、化学産業全体の16%(石油化学産業全体の30%強)を占めるに至っている。今後も長期間にわたりエチレンセンターが日本のみならず世界的に化学産業の中核的存在であると見込まれることから、ナフサ接触分解プロセスにおいて、革新的な高効率、省エネルギー化を図り、資源生産性の向上を図ることができるようになれば、2030年以降においても化学産業における産業競争力、国際競争力の強化に繋がることが期待できる。

本研究開発では、ナフサ分解プロセスにおいて、石油化学品の高収率、高選択、省エネルギー化が可能となる新規な触媒を用いた接触分解プロセスに関する基盤技術を確立する。

2. 研究開発の具体的内容

研究開発目標を達成するため、具体的に下記の内容の研究開発を実施する。

(1) 触媒を用いる革新的ナフサ接触分解プロセス基盤技術開発

現状のナフサ分解では、触媒は用いられておらず、熱分解でエチレン、プロピレン、ブテン、BTX等を生産している。このプロセスは、反応温度、反応時間、反応器の構造、フィード、経済性等により収率、選択性が制限され、大量のエネルギー投入を必要とするため、このプロセスを、触媒化プロセスに転換することができれば、収率や選択率の改善、プロセスの低温化(省エネルギー化)等が期待できる。これまでも、国内外で触媒の開発やナフサ接触分解の研究開発が行われてきたものの、実用化に至ったものではなく商用生産プロセスを指向した技術開発は十分に行われていないのが現状である。

本研究開発では、新規触媒によるナフサ接触分解を実用化するため、触媒の開発・評価を行い、触媒の性能向上、長寿命化を図る。ナフサ分解から得られる目的生成物に対する収率、選択性を高めるとともに、プロセス内のエネルギーバランス、分離工程におけるエネルギー消費の最適化を行い、既存熱分解プロセスを代替し得る、触媒を用いたナフサ分解プロセスに関する基盤技術を確立する。

3. 達成目標

(1) 触媒を用いる革新的ナフサ接触分解プロセス基盤技術開発

中間目標(平成23年度末)

① 高性能触媒による高収率、高選択プロセスの開発

・エチレン、プロピレン、ブテン、BTXの収率の向上及び低温化を図れる触媒プロセスを開発する。

上記4成分への収率63%以上(対熱分解比5%向上)又は、エチレン、プロピレンへの収率47%以上

(対熱分解比 5%向上)とする。

・触媒寿命については、再生後の初期活性 90%以上を達成する。

②高性能触媒によるラボスケールでの生産

・ラボスケール装置により、ナフサ処理量 0.2kg/日以上を達成する。

これらにより平成 23 年度末までに、触媒の開発・評価を行い、ナフサ接触分解プロセスにおける最適な反応運転条件を決定する。

最終目標(平成 25 年度末)

①高性能触媒による高収率、高選択プロセスの開発

・エチレン、プロピレン、ブテン、BTX の収率の向上及び低温化を図れる触媒プロセスを開発する。上記 4 成分への生成物収率 66%以上(対熱分解比 10%向上)又は、エチレン、プロピレンの収率 50%以上(対熱分解比 10%向上)とする。

・触媒寿命については、再生 5 回後の初期活性 90%以上を達成する。

②高性能触媒による実証規模プロセスに関する設計・開発

・国内外で稼働している実プラントレベルの生産量を想定し、セミベンチスケール装置により、ナフサ処理量:1kg/日以上を達成し、実証規模プロセスの概念設計を行う。

なお、本研究開発終了後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待できる技術レベルを確立すること。

研究開発項目③-2「資源生産性を向上できる革新的プロセス及び化学品の開発」
(規則性ナノ多孔体精密分離膜部材基盤技術の開発)

1. 研究開発の必要性

産業分野の約30%超のエネルギーを消費している化学・石油関連産業では、そのうち約40%のエネルギーが、分離精製を目的とする蒸留プロセスで消費されている。そのために両産業分野では長年に渡って効率改善に努力し、その技術は高度に洗練され、改善効果は頭打ちになっている。こうした背景にあって、更なる大規模な省エネルギー化を達成するためにはアプローチ手法の革新的転換が必要であり、それを可能にするための現在考え得る唯一の技術が膜分離技術である。

本研究開発では、

耐水性・耐熱性が必要なイソプロピルアルコール／水混合物分離

耐水性・耐酸性・耐熱性が必要な酢酸／水混合物分離

を対象とし、以下の基盤技術研究開発を行う。

- ③-2-1 分離膜製造基盤技術及び分離膜評価技術の開発
- ③-2-2 分離膜用セラミックス多孔質基材の開発
- ③-2-3 モジュール化技術の開発
- ③-2-4 試作材の実環境評価技術の開発

2. 研究開発の具体的内容

③-2-1 分離膜製造基盤技術及び分離膜評価技術の開発

(1) 分離膜製造基盤技術

- ・ 産業界において実用化ニーズの高いイソプロピルアルコール脱水用分離膜を開発する。併せて、工業的ニーズの高い酢酸脱水用分離膜を開発する。
- ・ モルデナイト(MOR型)、ZSM-5(MFI型)、Y型(FAU型)などの各種規則性ナノ多孔体膜合成条件を把握する。
- ・ 水熱反応の条件(反応温度、圧力、原料組成、濃度等)と規則性ナノ多孔体膜の構造及び化学組成の関係を系統的に調べるとともに、膜の分離能を評価し、両者を比較検討して膜組織を制御するための要因を明らかにする。
- ・ 構造欠陥の無い分離膜の合成方法を確立する。
- ・ 工業需要を満たすため、製造設備の制御因子(反応器の形状、加熱・加圧方法、結晶母液供給方法等)について明らかにする。

(2) 分離膜評価技術

- ・ 分離特性を支配する構造要因を明らかにする手法を開発する。
- ・ 複雑な膜形状を有する分離膜の構造解析を支援するため、評価用モデル膜を用いて、分離膜の構造と分離特性の関係を明らかにする。
- ・ 分離膜の分離・吸着特性評価法を開発し、膜製造プロセスの開発を支援する。

③-2-2 分離膜用セラミックス多孔質基材の開発

(1)セラミックス多孔質基材の開発

研究開発項目③-2-1 の目標分離性能を達成するために必要なセラミックス多孔質基材特性(形状精度、表面平滑性、蒸気透過性、最適細孔径、機械的強度、耐化学特性等)を満足する基材を開発する。具体的には、原料の材質、粒子形状及びサイズ等の適正化と基材作製技術(成形、乾燥、焼成)等の改良により、高性能なセラミックス多孔質基材を開発する。

(2)多チャンネル型セラミックス多孔質基材の開発

膜を集積化した構造を持つ多チャンネル型大面積基材を作製するための押出成形、乾燥、焼成技術を開発する。安定した基材品質を維持する作製プロセスと評価技術を開発する。多チャンネル型基材においては内管被覆となるので、内管被覆がしやすい(種結晶が付きやすい)内管表面の構造を具備する多チャンネル型基材を開発する。

③-2-3 モジュール化技術の開発

(1)管状基材を用いたモジュール化技術

研究開発項目③-2-1、③-2-2 で開発された分離膜部材を用い、接合部の熱的・化学的・物理的安定性を保持しつつ管状基材を複数本束ねたマルチエレメントの格納形状を決定し、その有効利用率を最大にする格納容器設計をする。

(2)多チャンネル型基材を用いたモジュール化技術

多チャンネル型基材を格納容器に接続できるよう、使用条件に耐えるシール材料の選定及びその塗布方法を開発する。

(3)膜分離解析モデル・シミュレーターの開発

膜のモジュール化技術を支援するための膜分離解析シミュレーターの開発のため、規則性ナノ多孔体分離膜の分離膜特性(透過度、分離係数)を定量的に表現するための数学モデルの導出、分離膜特性の透過分離挙動の解析シミュレーターの開発、膜モジュールシミュレーターの開発、膜モジュール設計手法と設計ツール等の開発を行う。

③-2-4 試作材の実環境評価技術の開発

(1)実環境評価検討

- ・ 分離膜モジュールを、実稼動しているイソプロピルアルコール製造プラントの蒸留塔に付設し、イソプロピルアルコールと水の混合実流体で分離試験をし、実用化技術の確立に向けての課題を抽出する。その際、分離流体の組成、単位面積あたりの処理量、モジュールの差圧等の実用化技術の開発に必要なデータを集める。
- ・ 連続運転試験に必要な監視・データ記録システムを構築し、上述のデータを収集する。
- ・ 得られたデータを基に、プロセスシミュレーションを用いて分離プロセスを設計する。

(2)プロセスシミュレーターの開発

- ・ 既存の蒸留システムに分離膜モジュールを組み合わせたHybridなプロセスシステムを対象とし、エネルギー効率や機器サイズを検討可能なプロセスシミュレーターを開発する。
- ・ 開発したプロセスシミュレーターを用いて、開発目標とする分離膜を想定した高効率・低コスト分離プロセスを設計する。

- ・ 既存の蒸留システムのプロセスフローに対して、分離膜モジュールを導入した場合のプロセスフローを想定し、ケーススタディーにより、分離膜モジュールを組み合わせた場合のプロセスシステムの最適化や、既存の蒸留プロセスと比較した場合の省エネ化、低コスト化を定量的に評価する。
- ・ 上記検討結果を適宜膜開発にフィードバックし、分離膜製造基盤技術の最適化を図る。

3. 達成目標

③-2-1 分離膜製造基盤技術及び分離膜評価技術の開発

(1) 分離膜製造基盤技術

イソプロピルアルコール脱水用:

中間目標(平成 23 年度末)

現行の市販無機膜の水の透過度が $1\sim 8\times 10^{-9}$ mol/(m² s Pa)であるのに対し、同透過度が 8×10^{-8} mol/(m² s Pa)、分離係数 100 以上の分離膜を工業的に製造できる技術を開発する。

最終目標(平成 25 年度末)

水透過度が 2×10^{-7} mol/(m² s Pa)、分離係数 200 以上の分離膜を工業的に製造できる技術を開発する。

また併せて、研究開発項目③-2-2 で開発される多チャンネル型管内壁の内部表面上に規則性ナノ多孔体薄膜を製膜することにより分離膜を製造する技術を開発する。

酢酸脱水用:

中間目標(平成 23 年度末)

水透過度 8×10^{-8} mol/(m² s Pa)、水と酢酸の分離係数が 100 以上であり、耐酸性を有する分離膜を工業的に製造できる技術を開発する。

最終目標(平成 25 年度末)

水透過度 2×10^{-7} mol/(m² s Pa)、水と酢酸の分離係数が 200 以上であり、耐酸性を有する分離膜を工業的に製造できる技術を開発する。

(2) 分離膜評価技術

中間目標(平成 23 年度末)

- ・ 膜組織と分離特性の関係及び膜組織と合成条件の関係を明らかにする。
- ・ 開発材の支援を可能とする評価法を確立する。
- ・ 分離特性を支配する構造欠陥を評価するための評価法を確立する。

最終目標(平成 25 年度末)

- ・ 評価技術を高度化し、より微細な構造解析を可能とする技術を確立する。
- ・ 実環境評価によって試作材に関する技術課題を抽出し、それらを解決するための指針を示す。

③-2-2 分離膜用セラミックス多孔質基材の開発

(1) セラミックス多孔質基材の開発

中間目標(平成 23 年度末)

- ・ 水熱法等のケミカルプロセスによる分離膜製膜技術及びイソプロピルアルコール及び酢酸の脱水プロセス条件下で大幅な強度劣化の生じない多孔質材料を開発する。

- ・ 目標分離性能を実現する分離膜を担持可能な細孔径、蒸気透過性、表面平滑性、耐化学特性を有する基材を開発する。

最終目標(平成 25 年度末)

- ・ イソプロピルアルコール及び酢酸の脱水分離膜として長期使用した際に、大幅な強度劣化が生じない多孔質材料を開発する。

(2)多チャンネル型セラミックス多孔質基材の開発

中間目標(平成 23 年度末)

- ・ 内管表面構造を制御する製造技術を開発する。
- ・ 多チャンネル型基材 長さ1m(管状 外径 30mm)当たり 0.2 m²の膜面積を実現する。

最終目標(平成 25 年度末)

- ・ 種結晶が均一に付着しやすい内管表面構造を有する多チャンネル型基材の製造技術を開発する。
- ・ 多チャンネル型基材 長さ1m(管状 外径 30mm)当たり 0.3m²の膜面積を実現する。

③-2-3 モジュール化技術の開発

(1)管状基材を用いたモジュール化技術

中間目標(平成 23 年度末)

マルチエレメントモジュールを想定し、モジュール化した際に、研究開発項目③-2-1、③-2-2 で開発する分離膜性能(透過度、分離係数)を最大限に引き出すためのマルチエレメント格納容器の設計をし、その構造実現に必要な要素技術を見極める。

最終目標(平成 25 年度末)

検討項目③-2-1 で開発する分離膜特性(透過度、分離係数)の 60%以上を有するモジュール製造のための基盤技術を確立する。

(2)多チャンネル型基材を用いたモジュール化技術

中間目標(平成 23 年度末)

使用条件に耐えるシール材料を選定する。

最終目標(平成 25 年度末)

管状型分離膜と同等のシール性能を確認する。

(3)膜分離解析モデル・シミュレーターの開発

中間目標(平成23年度末)

- ・ 分離膜の簡易的な1次元モデル・シミュレーターを開発する。
- ・ 膜モジュールシミュレーター開発のベースとなる3次元解析用モデルを開発する。

最終目標(平成25年度末)

- ・ 膜モジュールの設計手法を開発し、設計ツールを開発する。
- ・ 管状型膜モジュールシミュレーター及び多チャンネル型膜モジュールシミュレーターを開発する。

③-2-4 試作材の実環境評価技術の開発

(1)実環境評価検討

中間目標(平成 23 年度末)

- ・ 開発する分離膜モジュールの性能を十分に引き出せるサイズを確定し、配置場所、流体の流路方向、気体状態を維持するための効率的な保温、液体発生時の対策等を考慮し、モジュールの製造とリンクさせた実環境試験フローを設計する。

最終目標(平成 25 年度末)

- ・ 200 時間連続運転によるモジュールの耐用性能評価を可能とするシステムを開発し、実用化のための技術課題を抽出する。
- ・ プロセスシミュレーションにより、膜分離システムを組み込んだ分離プロセスを提案する。

(2)プロセスシミュレーターの開発

中間目標(平成 23 年度末)

- ・ 既存の蒸留システムに分離膜モジュールを組み合わせたHybridなプロセスシステムを対象としたプロセスシミュレーターを開発する。

最終目標(平成25年度末)

- ・ 既存の蒸留システムとのエネルギー効率、コストの比較を容易に行えるようなシステムを開発する。
- ・ プロセスシミュレーターを用いて、イソプロピルアルコール系を対象として最適な高効率・低コスト分離プロセスを設計する。

なお、本研究開発終了後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待できる技術レベルを確立すること。

研究開発項目③-3 「資源生産性を向上できる革新的プロセス及び化学品の開発」
(副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発)

1. 研究開発の必要性

現在、産業分野から排出される 3.2 億t-CO₂/年のうち、約 20%が化学工業から排出されている。化学プロセスでは、加熱や蒸留に伴う燃料消費での CO₂ 発生がある一方で、化学反応に伴う低濃度の副生ガスとしての CO₂ 発生がある。いずれの場合においても、希薄、低温、低圧レベルで発生するため、CO₂ の分離は化学吸着、物理吸着、膜分離等により技術的に回収することが可能であっても、従来技術では経済性の観点から困難を極めている。同様に他の化学プロセスでも低濃度の副生ガスとして N₂、N₂O、CH₄、C₂H₆、NO_x、SO_x 等が発生している場合があり、これらの低濃度の副生ガスを取り除くために大量のエネルギーが消費されている。これらの低濃度の副生ガスは、分離、濃縮されれば、汎用の基礎化学品へ転換、CO₂ 削減と資源制約からの脱却という我が国の抱える 2 つの課題を同時に解決することが期待できる。

本研究開発では、多孔性金属錯体などのような革新的な材料を用いて、燃焼や化学反応に伴う低濃度の副生ガス(以下「副生ガス」という。)を、低温、低圧で効率よく吸着、脱離する技術を開発し、高濃度に濃縮された副生ガスにより有用な化学品をクリーンに生産するための基盤技術の確立を行う。

2. 研究開発の具体的内容

(1)副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発

研究開発目標を達成するため、具体的に下記の内容の研究開発を実施する。

副生ガスの回収は、化学吸着、物理吸着、膜分離等により技術的に可能であるものの、現在使用されている化学吸着材料では、脱離プロセスで高温エネルギーが必要であったり、物理吸着材料や膜分離材料では、吸着量が小さかったり、分子透過に伴う膜設計が困難であったりと、現状では、基礎基盤的な開発段階にある。

本研究開発では、化学プロセス、石油化学プロセス等の生産プロセスから発生する副生ガス(主として CO₂)を、マイルドな条件で効率よく吸着、脱離することで、高濃度に濃縮された副生ガスを、①高純度、②低コスト、③低エネルギーで精製できる革新的な材料を開発し、濃縮された副生ガスを原料として有用な化学品をクリーンに生産できるプロセスに繋げる。

3. 達成目標

(1)副生ガスの高効率分離・精製プロセス基盤技術開発

中間目標(平成 23 年度末)

①副生ガスの分離・精製材料開発

・副生ガスの分子サイズに合わせた多孔性金属錯体等の分子設計を行い、副生ガスとしての CO₂ 等を高濃度(95%以上)に濃縮でき、かつ高選択に分離する材料を開発する。具体的には、現在実用されているゼオライト、活性炭等の分離材料に比べて低い操作エネルギーで高選択的に副生ガス(CO₂ 等)を吸着・脱離できる新規材料(副生ガスの吸着エネルギーが 40kJ/mol 以下、分離度(吸着相と気相における目的成分のモル分率比)が 150 以上である材料)を開発する。

②副生ガスによるグリーンプロセス技術

- ・95%以上に濃縮された副生ガスを原料として、目的生成物の選択率が60%以上となる化学プロセスに関する試設計を行う。

最終目標(平成25年度末)

①副生ガスの分離・精製材料開発

- ・副生ガスの分子サイズに合わせた多孔性金属錯体等の分子設計を行い、副生ガスとしてのCO₂等を高濃度(99.9%以上)に濃縮でき、かつ高選択分離する材料を開発する。具体的には、現在実用されているゼオライト、活性炭等の分離材料に比べて低い操作エネルギーで高選択的に副生ガス(CO₂等)を吸着・脱離できる新規材料(副生ガスの吸着エネルギーが30kJ/mol以下、分離度(吸着相と気相における目的成分のモル分率比)が300以上である材料)を開発する。

②副生ガスによるグリーンプロセス技術

- ・99.9%以上に濃縮された副生ガスを原料として、目的生成物の選択率が80%以上となる化学プロセスに関する試設計を行う。

なお、本研究開発終了後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待できる技術レベルを確立すること。

研究開発項目④ 「化学品原料の転換・多様化を可能とする革新グリーン技術の開発」

1. 研究開発の必要性

化学製品の大半は石油由来の原料から製造されており、これは現在の石油消費量の約 20% を占める。将来的に、石油資源自体の供給リスクを克服して、持続可能な低炭素社会を実現していくためには、化学製品の製造において使用される石油由来原料を石油以外の原料へ転換・多様化していくことが必要である。

そのためには、汎用的に入手可能な原料、例えば、気体原料（メタン、水素、二酸化炭素等）や非可食性植物由来原料（糖類、アルコール類、有機酸、セルロース、ヘミセルロース、リグニン、油脂等）から有用な化合物を省エネルギー・高効率に製造するプロセスの開発やそれらの化合物の利用を促進する技術の開発を行い、化学品原料の転換・多様化を可能とする全体システムとして製造プロセスの高度化・多様化を実現し、ライフサイクルに亘る二酸化炭素の排出の抑制及び化学産業・化学製品のグリーン化を図っていく必要がある。

2. 研究開発の具体的内容

（1）化学品原料の転換・多様化を可能とする革新グリーン技術の開発

研究開発目標を達成するため、具体的に下記の内容の研究開発を実施する。本研究開発では、将来的な実用化を念頭に置き、出発原料から化合物、さらには高機能化部材までの全体システムとして高機能化、低コスト化、省エネルギー化、高効率化の観点から、製造プロセスの高度化・多様化に資する技術開発を行う。そのために、個別の出発原料である気体原料（メタン、水素等）を選択的に分離・貯蔵等することにより、化合物の合成等への利用を促進する技術や植物由来原料（糖類、アルコール類、有機酸、セルロース、ヘミセルロース、リグニン、油脂等）から有用な化合物（中間体、モノマー、ポリマー等）を合成するプロセス及びこれらのプロセスから得られる化合物や既存の非化石由来原料から得られる化合物を用いた高機能化部材を製造するプロセスの開発を行う。

具体的には、以下の研究開発を行う。

④-1 気体原料の高効率利用技術の開発【平成 21～22 年度】

・石油由来原料に代えて、気体原料（メタン、水素等）の選択的な分離・貯蔵等により、化合物の合成等への利用を促進する基盤技術の開発を行う。

④-2 植物由来原料から化合物を合成するプロセスの開発【平成 21～22 年度】

・石油由来原料に代えて植物由来原料（糖類、アルコール類、有機酸、セルロース、ヘミセルロース、リグニン、油脂等）を使用することにより有用な化合物を省エネルギー・高効率に合成するプロセスの基盤技術の開発を行う。

④-3 高機能化部材の製造プロセスの開発【平成 21～22 年度】

・④-1、④-2 で得られる化合物や既存の非石油原料由来の化合物を用いた新規ポリマー製造プロセスの開発やこれらの化合物を用いた材料化プロセスの開発を行い、化学品原料の転換・多様化を促進する高機能化部材の開発を行う。

平成 22 年度補正予算(第 1 号)等による追加予算の充当にともない、本プロジェクトの研究項目④-4、④-5 の追加及び期間延長を行う。

④-4 気体原料の化学品原料化プロセスの開発【平成22～25年度】

④-1 及び既存の転換・多様化プロセスを組み合わせ、石油由来原料からの転換・多様化を、より多角的に進めるため、豊富に存在する気体（メタン、水素、二酸化炭素等）の利用技術の開発を行う。具体的には、高効率な分離・精製技術等により、従来は原料としての利用が困難であった低品位の気体（バイオメタン等の混合ガス）を利用するための分離・精製プロセスや、既存のプロセスと比較して、低環境負荷で且つ総合的に二酸化炭素排出量の低減が可能となる気体原料を利用した新規製造プロセスの開発を行う。

本技術開発により、コスト或いはその他の要素（不純物低減、二酸化炭素低減等）が既存プロセスと比較して優位なものとなり、将来的な石油資源からの置き換えを可能とし、化学品原料の転換・多様化を実現する。

④-5 植物由来原料からの化合物・部材製造プロセスの開発【平成22～25年度】

④-2、④-3 及び既存の転換・多様化プロセスを組み合わせ、非可食性植物由来原料から化合物・部材までを省エネルギー・高効率に製造する一貫生産プロセスの開発を行なう。

開発する製品・部材はセルロース、ヘミセルロース、リグニン、油脂等の特徴を活かした製品・部材やポリエステル、ポリアミド等の含酸素系樹脂等の製造するプロセスであり、原料の構造的な特徴を活かすこと等により、分離・精製や成形・加工のプロセスを含めて、省エネルギー・高効率に製造できるプロセスを開発する。

開発するプロセスは既存の石油系から製造するプロセスよりも省エネルギーであり、石油由来のものを代替することによる二酸化炭素の削減効果を含めて、低炭素社会の実現に貢献する。また、開発する製品・部材については、既存の石油由来の製品と同等以上の性能・コストであり、将来的な普及により、大規模に化学品原料の転換・多様化を実現する。

本研究開発は、幅広いプロセスが対象となるため、テーマ選定にあたっては、開発の難易度、研究開発実施体制、実現可能性、2020年及び2030年の市場創出効果、原料転換の効果及び二酸化炭素削減効果を総合的に判断する。

3. 達成目標

(1) 化学品原料の転換・多様化プロセス技術開発

平成22年度補正予算(第1号)等による追加予算の充当にともない、本プロジェクトの研究内容の見直し及び期間延長を行う。それに伴い、従来の最終目標を平成22年度末目標とし、新たに平成23年度末目標及び25年度末目標を設定する。目標・計画については、平成24年度以降の研究開発費の確保状況、当該研究開発の進捗状況等を総合的に勘案し、見直しを行う。

平成22年度末目標

④-1 気体原料の高効率利用技術の開発

- ・省エネルギー・高効率利用技術の可能性の実証

④-2 植物由来原料から化合物を合成するプロセスの開発

- ・省エネルギー・高効率合成プロセスの可能性の実証

④-3 高機能部材製造プロセスの開発

- ・新規ポリマー製造プロセスの可能性の実証

- ・新規の材料化プロセスの可能性の実証

なお、本研究テーマは「明日の安心と成長のための緊急経済対策（平成21年度補正予算（第2号））の一環で短期間に実施するため、詳細な目標については採択者が決定した後、NEDO、研究開発責任者及び採択者との間で協議の上、実施期間において実現可能なものを定めるものとする。

平成23年度末目標

④-4 気体原料の化学品原料化プロセスの開発

気体原料を用い、従来の石油由来原料から製造されるものに対して、市場での競争力のある基盤技術としての可能性を実証する。

具体的には、以下のいずれかのレベルを達成すること。

- ・低品位な気体原料（混合ガス）から高品位な基幹化学品を製造するための分離・精製等の基盤技術の開発を行い、併せて製造プロセスへの適用条件の検討により、得られる基幹化学品が現行品に対して、特性・コスト面で同等以上となる可能性を示す。

- ・気体原料から基幹化学品等を合成する新規製造プロセスの基盤技術の開発を行い、併せて製造プロセスへの適用条件の検討により、得られる基幹化学品等が、既存製品、プロセスと比較して、環境負荷を低減し、二酸化炭素削減が可能となる見通しを示す。

④-5 植物由来原料からの化合物・部材製造プロセスの開発

非可食性植物由来原料から化合物・部材までを従来の石油由来から製造されるものよりも省エネルギー・高効率であり、市場でのコスト競争力のある一貫生産プロセスの可能性を実証する。

具体的には、以下のいずれかのレベルを達成すること。

- ・植物由来原料からポリエステル、ポリアミド等のポリマーを合成するプロセスの開発を行ない、ポリマーの試作・評価を行なうとともに、スケールアップを行うための課題を抽出することにより、代替するポリマーと比較して、性能・コスト面で同等以上との見通しを得る。

- ・セルロース、リグニン、油脂等の植物由来原料の特徴を活かした材料化プロセスの開発を行い、自動車、家電等に材料の試作・評価を行なうことにより、要求される基礎特性を満たすことを確認するとともに、部材を製造するための課題を抽出することにより、代替する実部材と比較して、性能・コスト面で同等以上との見通しを得る。

平成25年度末目標

④-4 気体原料の化学品原料化プロセスの開発

気体原料を用い、従来の石油由来原料から製造されるものに対して、市場での競争力が見込めるレベルの実証を行う。

具体的には、以下のいずれかのレベルを達成すること。

- ・低品位な気体原料から基幹化学品を製造する分離・精製プロセスの開発において、スケールアップ評価により量産時の課題を整理し、特性・コスト面等で市場での競争力が見込める生産プロセスの試設計を行う。

- ・気体原料を利用した基幹化学品等を合成する新規製造プロセスの開発において、スケールアップ評価により量産時の課題を整理し、既存プロセスと比較して、環境負荷を低減し、二酸化炭素削減が可能となる生産プロセスの試設計を行う。

④-5 植物由来原料からの化合物・部材製造プロセスの開発

非可食性植物由来原料から化合物・部材までを省エネルギー・高効率に製造する一貫生産プロセスであり、市場でのコスト競争力のあるプロセスの確立が見通せるレベルを実証する。

具体的には、以下のいずれかのレベルを達成すること。

- ・植物由来原料からポリエステル、ポリアミド等のポリマーを合成する製造プロセスのスケールアップに必要な要素技術の開発を行い、代替するポリマーと比較して、性能・コスト面での優位性を確認する。

- ・セルロース、リグニン、油脂等の植物由来原料の特徴を活かした材料を用いた自動車、家電等へ適用する部材の製造・加工プロセスの開発を行い、代替する実部材と比較して、性能・コスト面での優位性を確認する。

本開発終了後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待できる技術レベルを確立することとする。

なお、詳細な目標・計画については採択者が決定した後、NEDO、研究開発責任者及び採択者との間で協議の上、実施期間において実現可能なものを定めるものとする。

技術戦略マップ（分野別技術ロードマップ）

グリーン・サステイナブル ケミストリー（GSC）分野

（持続的社會のための環境共生化学）

我が国の素材・部材製造産業は、国際的に高い技術力と競争力を有し、経済社会の発展を支えているが、地球温暖化問題、資源枯渇問題が現実化しつつある中で様々な課題を抱えてもいる。製造に際しては、有害な添加物（ハロゲン、重金属等）の利用、過度の高機能化追求に伴うプロセスの多段化等によるエネルギー消費の増大、中間工程における大量の廃棄物排出、リサイクルに不向きな製品の大量廃棄（廃棄処分場の不足等）などが問題となっている。一方、生産に必要な多くの原材料等は限られた産出国からの輸入に頼らざるを得ない状況にあり、将来にわたって安定に製造できるかどうか危惧されている。さらに、欧州での RoHS 指令、REACH 規制の導入や中国などでの自主的な化学物質排出規制の制定など、化学品等の製造に係わる環境対策が世界的に強化されている。

このような背景の下、我が国の全産業の基幹となる化学品等を持続的（サステイナブル）に生産、供給していくためには、これまでの大量消費・廃棄型生産プロセスから脱却して、持続的な生産が可能なプロセスによる供給体制の構築が急がれる。そこで本ロードマップは、エネルギー、資源制約問題を克服し、環境との共生を図ると同時に生活の質の向上をめざすことで安全・安心で競争力のある持続型社会を構築するための化学技術、すなわちグリーン・サステイナブルケミストリー（GSC）を実現するために必要な要素技術を抽出し、これらの制約条件や競争力や基盤性といった観点から重要技術を選定するとともに、今後の技術の発展を描いた。

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術戦略マップ

I. 導入シナリオ

(1) GSC 分野の目標と将来実現する社会像

化学産業は、社会のニーズに応じて有用な製品を製造し、資源の不足や枯渇と戦い、環境問題に直面しつつそれを克服してきた。

GSC とは、エネルギー、資源制約を克服して、環境との共生を図ると同時に、生活の質の向上を目指して、安全・安心で競争力のある持続可能な社会を構築するための化学技術の体系【参考資料 1：GSC 概念図】であり、今後の化学産業の発展に大きな役割が期待される。

今後の社会変化の様々な可能性【参考資料 2：GSC を推進させる 2050 年までの背景】に国家として対応できるよう、GSC を国家の将来の化学分野における戦略的テーマに据え、その競争力を担保するための目標と将来社会像について示す。

<将来の資源・エネルギー制約と GSC の目標>

世界的に地球温暖化防止への動きが加速している観点から、大幅な CO₂ 削減への対応が検討されている。産業界においても、より一層の省エネルギー、CO₂ 削減が求められている。この観点から化学産業としても、今まで以上に省エネルギー、CO₂ 削減への対応が求められる。一方、これまで依存してきた原油価格は確実に上昇していくことは避けられない。長期的には、現 OECD 諸国のエネルギー需要は、将来、人口の多いアジア・アフリカ地域に追い越されると予想される。このような状況により、今後日本は、これまでどおり高品質の原油を安定的に購入することが難しくなり、重質で硫黄や重金属等の多い低品位の原油を扱っていかなければならないと予想される。

また、原料としては、炭化水素以外の元素も重要であり、高機能部材を支えているものも多い。それらの中には、将来の枯渇が危ぶまれるものや、産出国が偏在しているものがある。これら資源の供給が政変等で止まる事態となれば、高機能部材を収益源とする日本の化学産業の競争力は、言うまでもなく、日本経済自体に打撃を与える恐れがある。希少資源の供給断絶事例は、実際に過去に起きている。

以上を鑑みると、日本としては、地球温暖化防止のために、より一層の省エネルギー技術、CO₂ 削減技術や資源安全保障の確保のための資源・エネルギーの効率的利用技術、リサイクル技術、代替技術が必須である。短期的には省エネルギー技術、資源リサイクル技術や、重質化・低品位化する原油をクリーンかつ効率的に利用していく技術が必要である。しかし、リサイクルにも限界があり、中期的には代替技術に移行していくこととなる。また、遠い将来には究極的な CO₂ 削減につながる技術や石油資源のピークが訪れることから、原料の革新的な変換技術が必要である。

<将来の環境との共生と GSC の目標>

持続可能な開発に関する世界首脳会議において合意されたヨハネスブルグ宣言の

2020年の目標実現に向け、引き続き、大気汚染防止、水質汚濁防止、産業廃棄物処理、土壌汚染防止を進めていくことが求められる。

一方で、欧州のRoHSやREACHに代表される化学物質規制の動きは、日本からの進出企業や輸入品への規制等を通じて我が国にも影響するものであるが、さらに中国等で類似の規制の導入を呼ぶこととなった。今後、この動きが世界に広がって「標準的」な規制になっていくのか、注視が必要である。

日本としても化審法、化管法が改正されたことを受けて、これらの規制に適切に対応するとともに、このような規制を先取りして対応しうる技術開発をしていくことが必要である。

<将来の生活の質の向上とGSCの目標>

将来の生活の質の向上について、短期・中期・長期に分けると次のようになる。

短期的にはまず、我々の生活環境のリスクのさらなる低減が望まれる。具体的には、衣食住におけるリスクの低減（例：シックハウス症候群への対応）、交通や通信などのもたらす環境負荷の低減、廃棄物削減（製品の再利用・長寿命化・軽量化等）等が挙げられる。

このような短期的なリスクの低減に加え、中期的にはアメニティを積極的に向上する方向に進んでいくことが望まれる。特に、今後、少子高齢化が進むことから、個人の行動を支援し、充実した暮らしができるようにしていくことが望まれる（バリアフリー化、福祉対応製品等）。

さらに、長期的には、アメニティの向上と言っても快適性や利便性の一方的な追求だけでは過去の大量生産・大量消費・大量廃棄と同じでサステナビリティを実現できないので、国のレベルでは社会経済システムの変革、個人のレベルではライフスタイルや価値観の転換が求められることとなる。

以上を鑑みると、GSCにおいても、社会ニーズに応じて快適性や利便性を実現していく際に、資源・エネルギーの浪費や環境負荷の増大を招かないような技術開発が不可欠である。

<将来の化学産業>

BRICs 台頭の中で国際競争は激化し、“今日のファインは明日のバルク”という状況となってくる。

日本には、ファインケミカルズを中心とする高機能部材の集積と川下産業との摺り合わせにより、強い競争力を有する分野がある。しかし、今後も継続的に、革新的なプロセス、材料を開発していく必要がある。また大規模の欧米企業と伍していくには、より広い視点を化学産業としてとらえ、産業間連携を拡大していく必要がある（これは省エネ・省資源や摺り合わせ強化にも資すると考えられる）。

いまや日本の化学企業の海外移転は不可避の流れであるが、国内はファインケミカルズの新しい技術・製品の発明のセンターとなっていく必要がある。一方で、バルク

ケミカルズは、そこからファインケミカルズが作られていく基礎原料であり、全てを海外移転していくと、生産国の事情で供給が不安定になった場合、日本の化学工業は打撃を受けることとなる。このような事態を防ぐため、バルクケミカルズも一定以上の生産を残し、その生産性を向上させていく必要がある。

<GSCの短期・中期・長期の目標>

以上を鑑み、エネルギー・資源・環境制約からの脱却と生活の質の向上とに向けて、GSCの短期・中期・長期の目標を置いた。

すなわち、短期的には、喫緊の問題として省エネルギー、CO₂削減を考慮しながら、グリーンの方角性（廃棄物を減らす、今ある資源・エネルギーを効率的に利用）、中期的には、サステイナブルの方角性（有害物質、希少元素の代替）、さらに長期的には、グリーン・サステイナブルの方角性（快適でサステイナブルな生活を実現する新しい材料の開発、原料の革新的転換）とした。

なお、これらの目標を達成するために、プロセス(How to make)及びマテリアル(What to make)の両面でイノベーションが必要となる。特にマテリアルは、その機能によって社会の発展や生活の質の向上に直接的に貢献するものであるが、グリーン・サステイナビリティの観点からは、マテリアルを製造するときだけでなく、ユーザに使われるときの効果が重要となる。すなわち、マテリアルの場合、ライフサイクルでみたときの環境への優しさが重要となる。具体的に化学産業における、GSCの典型的な実績を例示した。【参考資料 3-1～3-3：GSCの実績例】

(2) 研究開発の取組

研究開発の推進については、開発目標を戦略的に設定するとともに、効率的な研究開発体制の構築が重要である。特に、今後予想される様々な社会変化に対応するためには、持続的発展が可能となるプロセス及び製品のイノベーションに資する革新的な化学技術の開発を行うことが必要である。以上に鑑み、経済産業省・NEDOでは、GSCの名称を冠した我が国初の国家プロジェクト「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発」を2008年度より実施するに至った。同プロジェクトの目標として、①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発、②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発、③資源生産性を向上できる革新的プロセス及び化学品の開発、を掲げている。これらの目標を達成することにより、我が国全体の産業競争力強化と環境負荷低減を飛躍的に促進することができ、新産業創造戦略及び世界全体をリードしたサステイナブルな産業構造構築への貢献も期待できる。

(3) 関連施策の取組

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の目標や将来像を実現するためには、研究開発と並行して技術を定量的に評価できる基準の開発、産学官連携、国際連携を推進する制度、体制の充実が必要である。

〔基準・標準化〕

GSC の普及を図るためには、感覚に訴える言葉を発するだけでなく、定量的に技術を評価する必要がある。環境負荷、有害性・安全性、経済性・社会性という評価尺度が異なるものを、評価の目的にあわせて正しく評価する必要がある。経済産業省では、GSC の効果を正しく把握するために、グリーン・サステイナブルケミストリーネットワーク (GSCN) を通じ、GSC 賞の評価手法に取り入れるなど、実務面の評価を加えつつ、GSC 評価手法 (例えば i-Messe) の開発と標準化を推進している。

〔産学官連携〕

日本における グリーン・サステイナブルケミストリーの活動を効果的かつ強力に推進するために、2000 年 3 月に化学系の学協会、独法研究機関など 25 団体によって「グリーン・サステイナブルケミストリーネットワーク (GSCN)」が設立された。ここでは、研究開発推進上の諸課題と提言、GSC 賞の贈呈、ワークショップ・シンポジウム開催、教材作成、教育支援、国際交流などを展開している。経済産業省は GSCN にオブザーバーとして参加し、GSC 賞における経済産業大臣賞の設置やシンポジウムの支援等を行っている。これら活動を通して、GSCN を産学官連携のコアのひとつとして、GSC の概念だけでなく、GSC 技術の産業界への普及を図っている

(4) 海外での取組

1992 年のリオ宣言を契機として持続可能な発展 (Sustainable Development) のための取組が各国で開始される中、日米欧が中心となって化学分野でのその取組は活発に活動されている。

米国では、1995 年に EPA により Green Chemistry (GC) が提案され、GC12 カ条が打ち出されている。また、GC の大統領賞が創設されている。

欧州でも、米国とほぼ時を同じくして、産業界を中心として Sustainable Chemistry が推進されている。1994 年には、CEFIC (欧州化学工業連盟) により SUSTECH が設立されている。2004 年には、CEFIC や EuropaBio (欧州バイオ産業協会) 等により、技術開発のプラットフォームとして SusChem (The European Technology Platform for Sustainable Chemistry) が設立され、2007 年以降の EU の科学技術 5 ヵ年計画 (FP7) の重点技術分野を策定することとなった。SusChem では、「製品のライフサイクルはどんどん短くなっており、スペシャリティも急速にコモディティになってしまう」との意識や、このままでは日米アジアに押されてしまうことへの危機感の下、①マテリアルテクノロジー、②反応、プロセス設計、③バイオ工業テクノロジー、④革新のフレームワークと経済的成果、の 4 分野について、目指すべき方向性 (ビジョン) が示されている。また、「Strategic Research Agenda 2005」により、具体的に技術開発すべき項目が列挙されている。

1998 年には OECD で Sustainable Chemistry (SC) 活動が開始され、日米欧が中心となって、研究開発のガイダンス作成や教育支援等が行われてきている。欧州委員会

では、規制面において持続可能な生産と消費のための実行計画を検討中、現時点ではいくつかの規制ツールや、よりソフトなボランティアプログラムを考えている。また、環境技術実行計画のもと国家レベルの環境技術のためのロードマップを現在までに 22 カ国が策定している。

(5) 改訂のポイント

- GSC 分野の目標と将来実現する社会像において、最近の情勢を踏まえた CO2 削減の必要性について言及した。

II. 技術マップ

(1) 技術マップ

わが国の素材・部材産業が、全産業の基幹となる化学品等を持続的(持続可能な)に生産、供給していくためには、これまでのエネルギー大量消費・大量廃棄型生産プロセスから脱却し、かつ、地球温暖化問題、資源枯渇問題等を解決した持続可能な生産が可能なプロセスによる供給体制の構築、および、持続可能な社会に対応したマテリアルの開発が急がれる。そのためには、プロセス及びマテリアルの両面でイノベーションが必須であることから、2050 年までの中長期における両分野のイノベーションの対象となる技術課題を、目標の実現のために設定したサステナビリティに関する 4 分野、すなわち、エネルギー制約からの脱却(エネルギーと略す)、資源制約からの脱却(資源と略す)、環境との共生(環境と略す)、さらに生活の質の向上(生活と略す)に分別して収録した。また、その抽出の過程で、4 分野が相互に重なり合う領域について 4 分野共通というカテゴリーを設け、さらに全ての分野に技術の基盤として関わりをもつものを、新たに共通基盤技術として加えた。共通基盤技術は、昨年度は技術俯瞰図には基盤技術として全分野に共通の枠組みとして取り上げていたが、技術マップには載せていなかったものである。また、本年度の調査として、将来にわたり GSC 技術の波及効果の大きいと思われる分野を抽出した中で、昨年度は重要とされていなかった IT に関する 2 件の技術項目「IT 向け化学品(電子材料)」、「微細構造・精密構造形成技術」について、重要技術項目に加えた。

(2) 重要技術の考え方

「クリーン化、シンプル化、省エネルギーを実現するための新規プロセス、マテリアルの創生につながるような国内外の革新的な要素技術」および「廃棄物の減容化、容易なりサイクル、原材料多様化を実現するための新規プロセス、マテリアルの創生につながるような国内外の革新的な要素技術」の観点から広く調査、収集され、分類された2009年度の技術テーマを踏襲し、本年度ローリング作業のベースとした。

技術項目および技術テーマの評価にあたっては、①省エネ効果、②原料多様化、③有害物質削減量、④廃棄物排出減、⑤温室効果ガス削減効果、⑥生活向上度の6つの指標からなる「グリーン・サステナブルケミストリー(GSC)評価」および①市場規模、

②付加価値率、③コスト削減、④機能向上、⑤他分野への波及効果の5つの指標からなる「産業競争力・創設力評価」を活用した。また、選定された重要技術項目について俯瞰図を作成し、安全・安心で競争力のある持続型社会を構築するための化学技術の役割をわかりやすく表現した。以下は、各分野で抽出した各分野における26件の重要技術項目の一覧である

○ エネルギー

・ グリーン製造化学プロセス

- ・ 熱エネルギー高効率変換利用技術
- ・ 再生可能エネルギー
- ・ 高効率水素製造

・ IT向け化学品（電子材料）

○ 資源

- ・ 低品位資源利用技術
- ・ 次世代蓄電材料技術
- ・ 稀少金属の有効利用と代替材料技術
- ・ 非枯渇性資源の化学品・材料化
- ・ 易リサイクル加工用材料とプロセス
- ・ CO₂分離・回収・利用技術
- ・ 微細構造・精密構造形成技術

○ 環境

- ・ ハザード管理されたハロゲン製品
- ・ 製造工程廃棄物・副生物の大幅削減
- ・ 環境負荷が小さい製品
- ・ 環境負荷が小さい加工プロセス
- ・ 革新的燃焼による大気環境の保全

○ 生活

- ・ 日用品の快適性向上と低消費化
- ・ 食の安全と量の確保
- ・ 快適な省資源型ロングライフ住宅
- ・ 容易で安全な医療・介護と身体機能補助

○ 4分野共通

- ・ 輸送システム（低環境負荷・高利便性交通輸送システム）
- ・ 水（良質な水資源確保システム）

○ 共通基盤技術

- ・ 分析化学
- ・ 計算科学

- ・ 環境評価

(3) 改訂のポイント

- 昨年度の技術マップには載せていなかった技術項目の「共通基盤技術」とそれに関する技術テーマを加えた。
- 本年度の GSC 技術の展望として議論した 6 テーマの中で、IT 関連分野をその一つとし、これに該当する技術項目、技術テーマを新たに重要項目、重要技術テーマに加え、他と同様グレー、ローズ色で示した。
- その他には、研究課題について、適宜追加をおこなった。

Ⅲ. 技術ロードマップ

(1) 技術ロードマップ

技術マップに記載した技術テーマの中で各重要技術項目における重要技術テーマとして選定したのに関して「GSC 評価」、および「産業競争力・創設力評価」を実施した。評価方法は 2009 年度のデータを参考に 3 段階で再評価を実施した。その結果をレーダー図に示し、技術ロードマップとともに各頁ごとにまとめて掲載した。また「技術の概要」と「技術優位性」についても解説し、技術内容理解のための助けとした。

当該テーマが中期（2020 年以降）、長期（2030 年以降）のいずれの時間軸を前提にしたものであるかを考慮し、記述にもできうる限り反映させた。また、基礎研究から事業化・市場導入の間に必然的に経由する数段階の状況を、現時点で可能な範囲でイメージとして示せるよう心がけた。

(2) 改訂のポイント

- 重要技術項目毎に対象となる重要技術テーマを 1 ページにまとめ、内容を理解しやすいものとするを狙った。配置としては 2050 年までの技術ロードマップを中心に置き、以下の 4 つの説明のための欄を更新した。
- 各欄の内容は次のとおりであり、評価項目の更新にあわせて、新たな評価を行い、レーダー図を更新した。
 - 「技術の概要」：重要技術テーマについて概要を説明
 - 「技術優位性」：重要技術テーマについての日本あるいは、日本企業の国際的な優位性についてコメント
 - 「GSC 評価」：各重要技術テーマについて 3 段階で各項目につき技術評価し、その結果をレーダー図に表すと同時にコメント
 - 「産業競争力・創設力評価」：産業競争力や創設力について 3 段階で各項目について評価し、その結果をレーダー図に表すと同時にコメント

Ⅳ. その他の改訂のポイント

- GSC 技術の展望

GSC 技術によって持続可能な社会を実現していくために、「GSC 技術の展望」として、GSC に関する技術 6 件を以下に取り上げ例示し、わかり易いイメージ図で示した【参考資料 4：GSC 技術の展望】【参考資料 5：革新的重要技術テーマ】。

- ・ Green Agriculture（食糧資源に貢献する環境適応型肥料および農薬）
- ・ Green Biomass（バイオマスからの化学品製造）
- ・ Green Electronic Storage（電気エネルギーの貯蔵）
- ・ Green Information Electronics（半導体製造向け化学製品）
- ・ Green Process（環境負荷の小さい化学品製造プロセス）
- ・ Green Sustainable Housing（快適で長持ちする省エネ型住宅）

グリーン・サステナブルケミストリー分野の技術マップ(1/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グレーは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色:プロセスイノベーション 青色:マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小:数万吨未満 中:数十万吨以下 大:100万吨以上	実用時期 短期:2016年以降 中期:2020年以降 長期:2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
エネルギー	グリーン製造化学プロセス	G001	革新的省エネ型化学分離プロセス	・高配向性(ゼオライト、酸化物等)による蒸留、抽出、吸着分離、濾過プロセスへの導入 ・新規炭素系ガス分離材、MOF等有機金属分離材 ・省エネ蒸留塔(HIDIC)適用系等の実用化プロセス技術開発	省エネ、省資源	大	中期	1,000	基礎化学(蒸留、PSA、脱水)プロセス、水処理等広範囲
		G002	グリーン酸化プロセスの開発	・過酸化水素、空気酸化用多成分系触媒 ・直接法フェノール、パラフィン酸化、活性酸素包接化合物利用等 ・直接法過酸化水素製造技術、活性酸素包接化合物利用等 ・ナノ、マイクロバブルを用いた酸化反応	省エネ資源多様化産業競争力	大	短期、中期	1,000	化粧品、医薬品、電子材料、接着剤、封止材、環境浄化触媒
		G003	電磁エネルギー利用高効率化学合成プロセス	・マイクロ波、高周波、プラズマ等の利用 ・誘電体触媒等による無溶媒プロセス	省エネ、省資源	中	短期、中期	500	医薬品原体、電子材料、香料、添加剤、プラスチック等
		G004	分離・反応一体型リアクタープロセス	・界面活性剤型触媒、相間性移動触媒の開発 ・MOF等有機金属錯体の開発 ・非平衡反応分離型(気体分離、液体分離、イオン交換、電気透析、逆浸透等)プロセス ・分離性能と反応性能のマッチング最適設計	省エネ資源確保産業競争力	大	短期、中期	1,000	化学品製造、医薬品原体、電子材料、香料、添加剤、水処理等広範囲
		G005	マイクロリアクタープロセス	・ナノ空孔、協奏的反応場等反応制御技術 ・マイクロリアクターを利用したプラント技術 ・細溝化技術 ・キャピラリーを用いた無触媒精密重合プロセス	省エネ、省資源	中	中期	100	医薬品原体、電子材料、香料、添加剤等
		G006	精密制御高分子製造	・汎用モノマーの精密重合プロセス:メタロセン触媒、リビング重合などによる重合プロセス設計 ・高性能機能化学品の製造	省エネ、省資源	大	中期、長期	1,000	化粧品、電子材料、接着剤、封止材等高分子関連産業
		G007	低環境負荷型縮合系高分子製造技術	・新規触媒、選択加熱、新媒体利用等によるプロセス ・透明、長寿命、省資源材料プロセス ・新規原料モノマーの利用	資源確保産業競争力	中	中期、長期	500	樹脂成型物(電機電子、自動車等)
		G008	高純度金属ケイ素の省エネ製造プロセスの開発	・非ハロゲン法プロセス ・ノンハロゲン高純度金属ケイ素製造法	省エネ、省資源	大	中期	1,000	太陽電池、半導体、電子産業
		G009	有機分子触媒	・不斉合成、相間移動触媒、水系触媒、酸塩基触媒、酵素触媒等 ・有機合成の触媒反応プロセス(αファクター低減)	省エネ、省資源	大	中期、長期	500	化粧品、医薬品、電子材料、接着剤、封止材等高分子関連産業
		G010	金属錯体を用いた資源回収	・海水からのトリウム捕集材 ・固体分離回収、気体分離、触媒膜等による資源回収	資源確保産業競争力	小	中期、長期	100	化学分離、精製プロセス、金属・非鉄金属、電子材料等
熱エネルギー高効率変換利用技術	G011	低品位排熱の蓄熱・輸送、回収材料、及び熱変換プロセスの開発	・合成珪酸(エリスリトール等)、ゼオライト、粘土鉱物、クラスレート等蓄熱材 ・アンモニウム塩、代替溶媒、アンモニウム等による各種ヒートポンプ、カーナサイクル ・Ca、Mg塩等の水和・脱水によるオンサイト蓄熱システム	利用効率の向上	大	短期、中期	1,000	熱供給業、ガス業、集合住宅・公共施設、ゴミ処理場における給熱給湯、冷熱	
	G012	低温排熱エネルギー変換用熱電変換材料の開発	・ポストBi-Te系、Zn-Sb系、多成分、クラスター系新規材料 ・有機系熱電変換材料開発、無機材料:Mg2Si他 ・熱交換器塗布型高分子、易加工材(無機/有機系複合材料)	利用効率の向上	小	長期	500	製造業(化学、セメント、石油等)、電気業、ゴミ処理場における給熱給湯、冷熱	
	G013	化学エネルギー変換高密度蓄熱材料・触媒・プロセスの開発	・アルコール、芳香族、多環芳香族化合物の水素化、脱水素反応用触媒(単金属系) ・アンモニウム塩、Br系水和反応系蓄熱プロセス ・可逆的分子骨格変換触媒(光または熱)	利用効率の向上	大	長期	500	製造業(化学、セメント、石油等)、オンサイト熱供給業、給熱給湯、冷熱関連	
	G014	低摩擦表面素材/潤滑物質の開発	・新規炭素材料(DLC等)、無機・有機ハイブリッド表面コーティング、ナノ潤滑剤等 ・潤滑油のトライボロジーによる省エネ、高寿命材料、 ・固体表面のナノレベル分子配向制御	利用効率の向上	中	短期、中期	1,000	機械、エネルギー、一般製造業等広範囲	
	G015	高性能デシカント空調用高湿潤吸着材料の開発	・既存除湿冷房とのハイブリッド用吸着材料 ・高性能ゼオライト、シリカゲル、高分子ポリマー、多孔性配位高分子等 ・高濃度水溶性塩系材料(アンモニウム塩系等) ・ヒートポンプへの組み込み	利用効率の向上	大	短期、中期	500	空調設備、熱供給業、集合住宅、ショッピングセンター、コンビニ等関連産業	
再生可能エネルギー	G016	風力発電用新規材料の開発	・ポリプロピレン系高強度、軽量材料 ・オンサイト小型発電システム ・メンテナンス処理がしやすい環境適合型部材 ・低損失潤滑剤	新エネルギー	大	中期、長期	1,000	照明、機械、住宅、オンサイトエネルギー産業	
	G017	色素増感型太陽電池材料の開発	・チタニア色素増感型、プラスチック基板型等 ・建材一体型太陽光利用材料:屋根以外の曲面構造部分への装着 ・安価(非Ru)色素増感剤開発	新エネルギー	中	中期、長期	1,000	オフィス、住宅、オンサイト小型発電、街路灯等	
	G018	薄膜シリコン型太陽電池材料の開発	・高効率アモルファス、微結晶シリコン材料 ・オンサイト小型発電システム:系統連携とのマッチング	新エネルギー	中	中期	1,000	照明、電子材料、住宅、オンサイトエネルギー産業	

グリーン・サステナブルケミストリー分野の技術マップ(2/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グレーは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色: プロセシノベーション 青色: マテリアリノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小: 数万吨未満 中: 数十万吨以下 大: 50万吨以上	実用時期 短期: 2016年以降 中期: 2020年以降 長期: 2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
		2010							
再生可能エネルギー	G019	有機半導体型太陽電池材料の開発		・p型半導体ポリマー、n型フラーレン等 ・家電等補助電源用システム ・発電のカスケード利用等材料の開発 ・マルチスケールコーティング&パターニング技術を用いた周辺技術の開発	新エネルギー	中	中期	1,000	照明、電子材料、住宅、オンサイトエネルギー産業
	G020	燃料電池(PEFC・SOFC)用新規材料の開発		・低価格化、普及を目的にPt代替電極、Pt代替膜 ・CO選択酸化触媒、水素製造装置等 ・高信頼性: 酸化還元によるダメージの改善	コスト低減	大	中期、長期	1,000	電気業、ガス業、住宅、移動体(自動車、バス等)
	G021	ハイブリッド太陽電池材料及び次世代ナノ材料太陽電池材料の開発		・有機系、無機・有機複合化合物、クラスター金属利用高効率半導体(GIGSなど) ・オンサイト小型発電システム ・量子ドット太陽電池システム ・マルチエキシトン太陽電池システム	新エネルギー	中	中期、長期	500	照明、電子材料、住宅、オンサイトエネルギー産業
高効率水素製造	G022	高効率水素製造技術の開発		・高温水蒸気電解等 ・改質炉伝熱性向上技術 ・太陽光利用光触媒、原子炉熱利用技術 ・MOF等有機金属錯体の開発 ・オンサイトとオフサイト双方での製造・輸送技術	エネルギー転換	大	短期、中期	1,000	石油化学産業、ガス業、移動体(自動車、バス等)
	G023	水素貯蔵・輸送技術の開発		・合金ナノ粒子、有機金属材料による高密度貯蔵材料 ・超圧ガス容器不要の貯蔵、輸送技術 ・水素利用社会インフラ整備のための安全性技術 ・水素/都市ガス共通パイプライン利用技術(膜) ・有機ハイドレート	インフラ整備	大	中期、長期	1000	石油化学産業、電気業、ガス業、住宅、移動体(自動車、バス等)
代替材料(軽量・高強度材料)	G024	新規コンポジット樹脂材料の開発		・CFRP、炭素、無機有機ハイブリッド材料 ・セルロースナノファイバの高次構造を活かしたコンポジット樹脂材料 ・軽量・高強度・難燃性かつ成形性・加工性・リサイクル性に優れたコンポジット樹脂材料	省エネ、長寿命	中	短期、中期	1,000	建材、電子材料、機械材料、医療、パソコン等
	G025	超耐熱性、強度等を有する新規材料(ポリオレフィン類等)の開発(再掲)		・ポストメタロセン触媒、モノマー材料 ・金属・高分子ハイブリッド材料 ・高密度、易加工ポリオレフィン材料の開発	省エネ、長寿命	大	短期、中期	1,000	建材、電子材料、機械材料、医療、輸送材料等
	G026	金属代替超軽量材料の開発		・有機無機ハイブリッド材料 ・超高密度高分子材 ・超軽量、超高強度を有する航空宇宙材料 ・導電性高分子材料	代替材料	大	中期、長期	1,000	建材、電子材料、機械材料、航空機及び自動車等車体等
	G027	光機能を有するプラスチック材料の開発		・ポリカーボネート、ポリメタクリレート等の高機能光ファイバ材料等 ・複合材料による光透過性向上、低減衰、高速応答等	機能性向上	中	中期、長期	1,000	建材、電子材料、機械材料、窓ガラス、パソコン、照明材料等
	G028	省エネ成形、易リサイクル型硬化性樹脂の開発(再掲)		・モノマー、ハイブリッドモノマー利用材料・樹脂 ・超臨界ガス利用による発泡・加工 ・熱可塑性設計によるリサイクル材料	利用効率の向上	大	中期	1,000	建材、電子材料、機械材料、医療、輸送材料等
	G029	機能性接合、接着剤の開発		・高性能金属-樹脂接合材料 ・表面修飾、界面改質による接着機能向上	機能性向上	小	中期	500	機械材料、金属・樹脂加工等広範囲
	G030	薄膜塗装技術による防食材料の開発		・マグネ表面処理用脂環族モノマー等共重合材料 ・連続加工、塗装プロセス	機能性向上	小	短期	500	電子部品、パソコン・家電筐体、携帯電話、自動車部品等
	G031	自己修復スマート材料の開発		・有機・無機ハイブリッド、複合化プラスチック ・酵素材料、バイオマス材料の高度利用 ・バイオミメティック材料	機能性向上	中	中期、長期	500	医療、電子材料、機械材料、医療、輸送材料等
	G032	ノンフロン断熱・保温・保冷物質の開発(再掲)		・ポスト代替フロン断熱材料 ・超臨界CO ₂ 利用空調システム ・環境への負荷がない新規保冷物質 ・低温暖化係数、低オゾン層破壊、環境適合型新規フロン化合物	ヒートアイランド対策	大	短期、中期	1,000	空調、建材
	G033	多孔質断熱材料の開発(再掲)		・廃土木資材利用による断熱材料 ・廃プラスチック利用多孔質断熱材料 ・廃建材利用による断熱材料 ・多孔質樹脂、バイオマスアロイを利用した断熱材	省エネ、長寿命	大	短期、中期	1,000	空調、建材
省エネのための化学品(生活環境材料)	G034	易リサイクル性断熱部材の開発(再掲)		・高断熱性成形樹脂、無機断熱材料 ・バイオ樹脂、バイオマスアロイを用いた易リサイクル性断熱部材 ・材料カスケードプロセス	省エネ、廃棄物削減	中	短期、中期	1,000	製造業(化学、石油、セメント、機械加工等)、空調、建材、
	G035	省電力照明材料の開発(再掲)		・超微量レアメタルによる次世代LED、有機EL、無機EL等材料 ・低価格発光材料の開発による普及: ZnO薄膜、ナノ材料	省エネ	大	短期、中期	1,000	街灯、ビル照明、コンビナート、住宅等
	G036	低摩擦性材料の開発		・添加剤、界面修飾による低摩耗タイヤ ・低摩擦性による省エネ効果 ・低摩擦潤滑剤の長寿命化	長寿命、廃棄物削減	中	短期、中期	1,000	自動車、移動体

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術マップ(3/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グレーは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色: プロセスイノベーション 青色: マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小: 数万吨未満 中: 数十万吨以下 大: 50万吨以上	実用時期 短期: 2016年以降 中期: 2020年以降 長期: 2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
		2010							
エネルギー	IT向け化学品 (電子材料)	G037	新型高温超伝導材料の開発	・有機金属化合物系、有機・無機ハイブリッド複合材料 ・革新的原理に基づく新規高温超伝導材料 ・超伝導材料の革新的インフラ技術	省エネ、産業競争力	中	中期、長期	1,000	半導体関連産業 (太陽電池等)、住宅・ビル照明、電卓等
		G038	光利用率向上有機半導体材料の開発	・フラーレン系等新規材料 ・機能性ポリマーによる新規液晶材料	利用効率の向上	大	短期、中期	1,000	半導体関連産業 (太陽電池等)、住宅・ビル照明
		G039	新規封止材、絶縁材料、パワー半導体等の開発	・無機有機複合材料、ハイブリッド、ナノコンポジット等による高性能IT材料 ・ フッ素系絶縁有機材料 ・SiC、GaN等次世代パワー半導体材料	機能性向上、廃棄物削減	小	短期、中期	500	電気・電子・精密機器関連産業
		G040	超高密度超ナノ情報素子材料の開発	・量子ナノデバイス、統合量子シリコンチップ等 ・スピントロニクス素子材料	機能性向上	小	短期、中期	500	コンピュータ・情報電子関連産業
	原子力	G041	廃棄物の高効率減容化、リサイクル技術の開発	・化学処理、超臨界利用等による放射能被曝材料の減容化	廃棄物削減	大	短期、中期	1,000	電力供給産業
	耐熱・伝熱材料	G042	新規高伝熱材、熱損失抑制用材料の開発	・超合金による複合材の高密度発泡、超耐熱(1000℃超)材料 ・非金属、炭素材料による耐熱材料	省エネ	中	中期、長期	500	建材、プラント、エネルギー
	エネルギー変換・活用材料	G043	高分子アクチュエータの開発	・機能性たんぱく質、機能性ポリマーの開発 ・ナノセンサーとの組み合わせによりマイクロマシン	機能性向上	中	中期、長期	1,000	精密機器・ロボット・マイクロマシン関連産業
資源	低品位資源利用技術	G044	バイオマス、未利用有機資源からの合成ガス・化学品の製造	・環境負荷の小さい原材料前処理技術 ・安定原料確保のための原料供給・利活用モデル ・化学品原料向けGTL(低鎖長留分、オレフィンリッチ) ・DME直接合成/間接合成、エタノール及びエタノール經由エチレン製造等 ・バイオマスから基幹中間原料の一貫製造プロセス ・合成・バイオリアファイナリーの展開	資源確保 産業競争力	大	中期、長期	1,000	石化基礎品産業、 液体燃料関連産業
		G045	低品位ガス系化石資源、メタンハイドレート、コールベットメタン等からのオレフィン、芳香族化合物製造技術の開発	・脱硫、脱窒素系触媒 ・低温水素化分解触媒 ・各種化学品変換触媒 ・メタンホモゲネーション ・エタン酸化脱水素 ・高密度酸化によるエチレン製造 ・酸化脱水素触媒	資源確保 産業競争力	大	中期、長期	1,000	液体燃料関連産業、 基礎化学品産業、 電力供給関連産業
		G046	低品位固体系化石資源からのナフサ留分、オレフィン等の製造	・脱硫、脱窒素系触媒 ・低温水素化分解触媒 ・コンデンセート、重質油、石油コークス、オイルサンド等分解プロセス ・蒸留分離以外の分離プロセス(物理吸着・吸収、化学吸着・吸収、分離膜)、 マイクロチャネル伝熱利用分離	資源確保 産業競争力	大	短期、中期	1,000	石化基礎化学品産業
		G047	各種資源の接触法による芳香族、オレフィン等製造	・ナフサ接触分解技術 ・新規ゼオライト、複合貴金属触媒新による収率・選択性向上 ・新規流動相・固定床反応プロセス ・高寿命高性能新規触媒(固体酸・固体塩基)の開発 ・酸化脱水素法によるオレフィン製造用触媒 ・高効率膜分離プロセス	省エネ 資源確保 産業競争力	大	短期、中期	1,000	石化基礎製品
		G048	化学品、電力、熱のトリジェネレーション	・低温吸熱、発熱発熱用反応対応触媒、及びプロセス ・高度エクセルギー解析技術、製造工場間のエネルギー関連フローの統合化技術 ・コンビナート再生、生産効率向上のためのプロセス設計技術	省エネ、 産業競争力	大	中期、長期	1,000	化学産業、鉄鋼産業、 エネルギー、 コンビナート関連産業
		G049	石炭ガス化発電(IGCC)と化学品の併産	・石炭ガス化発電、化学品併産に使える機能性触媒 ・生産多様化、高効率CO2回収・利用プロセスの構築 ・安価酸素製造技術	省エネ、 産業競争力	大	中期、長期	500	火力発電と化学品製造
	次世代蓄電材料技術	G050	超高蓄電型二次電池材料の開発(再掲)	・安全性の高い、正負極活性物質、炭素電極、電解液、セパレーター(膜)等 ・高出力密度汎用型電気二重層キャパシタ ・ナノファイバー電極、セパレーター	省エネ、 産業競争力	中	短期、中期	1,000	商用施設、住宅、 オンサイト小型発電、 自動車等
		G051	新しい電池材料の開発(再掲)	・次世代リチウムイオン電池向け材料:リチウム硫黄系新固体電解質、不燃性有機電解質、非Co系正極 ・新型ニッケル・水素電池、リチウムポリマー電池、リチウム硫黄系電解質等	省エネ、 産業競争力	中	短期、中期	1,000	商用施設、住宅、 オンサイト小型発電、 移動体、パソコン、 携帯電話等
		G052	有機ラジカル電池・レドックス高分子材料の開発(再掲)	・非リチウムイオン電解質 ・短時間充電、高容量、高出力で発火や爆発リスクの低い有機/ラジカルポリマー電池	省エネ、 産業競争力	小	短期、中期	100	商用施設、住宅、 オンサイト小型発電等

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術マップ(4/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グリーンは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色:プロセスイノベーション 青色:マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小:数万吨未満 中:数十万吨以下 大:50万吨以上	実用時期 短期:2016年以降 中期:2020年以降 長期:2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
		2010							
資源	次世代蓄電材料技術	G053	高蓄電池用電解液の開発(再掲)	・新規な高容量・安全なイオン液体:イミダゾリウムやピリジニウムのリチウムイオン液体	省エネ、産業競争力	小	中期、長期	100	商用施設、住宅、オンサイト小型発電、移動体、パソコン、携帯電話等
		G054	移動電源、及び固定電源用高蓄電エネルギー材料の開発(再掲)	・新型固体電解質、電解質膜、イオン液体等の開発:不燃性により安全性向上、移動体等への適用	省エネ、産業競争力	大	中期、長期	1,000	電子機器、バス、電車等用エネルギー供給・利用関連産業
		G055	個人用移動システム駆動源の開発(再掲)	・軽量小型電池等の開発:体積および重量あたりの蓄電容量および出力とも大きい高性能電池	省エネ、産業競争力	小	中期、長期	100	機械ロボット、車椅子
	稀少金属の有効利用と代替材料技術	G056	希少元素、貴金属代替新材料の開発	・ニッケル、コバルト、モリブデン、タングステン、リチウム、インジウム、希土類、タンタル、白金族、ホウ素等を代替する新材料 ・カーボンアロイ触媒	資源確保 産業競争力	中	短期、中期	1,000	電子部品、パソコン・家電筐体、携帯電話、自動車部品等
		G057	高耐熱材料の開発	・稀少金属やNi,Co,Wを使わない高耐熱性材料 ・タービン用耐久性新規高耐熱材料 ・熱分解反応器、水蒸気改質反応器、バーナーノズルに使用可能な稀少金属を使わない高耐熱性材料 ・原子炉、核融合炉用高耐熱性材料	資源確保 産業競争力	中	中期、長期	1,000	電子部品、パソコン・家電筐体、携帯電話、自動車部品等
		G058	希少金属、特定元素資源の抽出・リサイクル技術の開発及び代替材料の開発	・低品位鉱物原料・廃棄物(都市鉱山)からの稀少金属資源の分離・回収 ・触媒、製品等に使用される稀少金属資源の分離・回収、代替 ・環境リサイクル型設計	資源確保 産業競争力	中	中期、長期	1,000	電子部品、パソコン・家電筐体、携帯電話、自動車部品等
	非枯渇性資源の化学品・材料(化学品原料の転換・多様化)	G059	バイオマスからの化学品原料製造技術	・ウレタンポリオール、ファインケミカルズ、中間原料・ポリアミド4、リグニン誘導体(熱硬化性樹脂、接着剤、ピロジカルボン酸等)化学品 ・高選択的プロセス、完全水添触媒プロセス ・マイクロ構造を活かした機能性樹脂、バイオマスアロイ	資源確保 産業競争力	中	中期	500	化粧品、食品、接着剤、洗剤、医薬品、合成繊維等高分子関連産業
		G060	構造保持セルロースによる機能化学品製造技術	・セルロース繊維のシングルナノファイバーへの転換 ・触媒酸化技術によるセルロース変換 ・軽量高強度材料 ・機能性バイオマス樹脂、バイオマスアロイ	資源確保 産業競争力	小	中期、長期	500	化粧品、医薬品、自動車、建材、合成繊維等高分子関連産業
		G061	新規酵素等を利用したバイオマスの利用技術	・酸化還元酵素による高分子モノマー、ファインケミカルズ製造 ・酵素モジュール触媒プロセス	資源確保 産業競争力	中	長期	500	化粧品、食品、洗剤、医薬品、合成繊維等高分子関連産業
		G062	油脂等からの化学品原料・液体燃料製造技術	・グリセリン副生抑制プロセス ・油脂系バイオマスからの有効成分の高効率抽出、分離プロセス	資源確保 産業競争力	中	中期、長期	500	化粧品、食品、接着剤、洗剤、医薬品、合成繊維等高分子関連産業
		G063	気体原料や非食糧資源からのプラスチック、モノマー等化学品製造技術の開発	・バイオガス、空気等気体原料を原料とする化学品原料製造技術 ・非食糧資源を原料とするポリ乳酸、PBS等、L-乳酸、D-乳酸、バイオエタノール/ブタノール、BTL等製造 ・セルロースの革新的糖化技術 ・セルロースナノコンポジットを用いた光通信関連部材、ディスプレイ部材等の開発	省エネ 資源確保 産業競争力	大	中期、長期	1,000	化学品原料、自動車、電機電子、日用品等広範囲
	易リサイクル加工用材料とプロセス	G064	積層フィルムの代替材料、及び易リサイクル材料(再掲)	・フィルムの単層化、相溶化等によるリサイクル性の向上:単相化フィルムでのパッケージ性能保持 ・易剥離性積層フィルムと易解体接着剤の開発 ・光配線フィルム材料 ・リサイクル可能な同時多層積層成膜製造技術 ・環境適合型重層製膜プロセス	資源確保、リサイクル	中	短期、中期	500	包材、建材、日用品
		G065	解体性接着材料と易リサイクル加工法	・機能性マイクロカプセル、エポキシ樹脂等材料の改良 ・多機能多成分性接着剥離用フィルム ・新たな剥離プロセス:熱、通電、発泡などによる接着材料の剥離プロセス構築	省エネ、省資源	小	短期、中期	500	包材、建材、文房具、等
		G066	易リサイクル、易分解性粘着剤及び自己剥離材料の開発(再掲)	・非エポキシ系樹脂等のリサイクル材料:リサイクルが困難な熱硬化性樹脂であるエポキシ樹脂を代替 ・熱可塑性樹脂の活用によるリサイクル性の向上	資源確保、リサイクル	小	中期	500	建築土木、自動車、電機電子等
	CO2分離・回収・利用技術	G067	GO2等の分離・回収	・分離方法の確立(化学吸収法、物理吸収/吸着法、膜分離法、未利用低品位熱利用による吸収液再生法) ・化学吸収(未利用廃熱利用、低再生エネルギー吸収液開発) ・膜分離(高選択性膜開発、分離膜の大型化、連続製造) ・MOF等有機金属錯体の開発	地球環境、リサイクル	大	長期	500	電力供給産業・鉄道
		G068	超臨界流体の加工プロセスへの利用(再掲)	・超臨界CO2による塗装、表面処理、重合、発泡、複合化、洗浄、めっき等、選択的分解、可溶化等 ・有機溶媒代替反応場	リスク削減	小	短期	500	機械、金属加工産業

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術マップ(5/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グレーは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色:プロセスイノベーション 青色:マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小:数万吨未満 中:数十万吨以下 大:100万吨以上	実用時期 短期:2016年以降 中期:2020年以降 長期:2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
		2010							
資源	フッ素資源リサイクル(フッ素化学)	G069	CO ₂ を原材料としたポリカーボネート樹脂等化学品製造技術の開発	・脂肪族、芳香族ポリカーボネート等化学品製造技術 ・低温、低濃度CO ₂ 活性触媒	資源確保 リスク削減	中	中期、長期	500	電機電子、包材、窓、封止材等
		G070	フッ素系機能化学品代替材料の開発	・低温硬化係数、低オゾン層破壊、新規環境適合型含フッ素化合物 ・冷媒、発泡剤、噴射剤、絶縁材、半導体/液晶用代替材料 ・炭化水素系、ヘテロ化合物系代替物質	資源確保 産業競争力	中	中期、長期	500	機能性化学品・樹脂関連産業、電機電子等
		G071	廃蛍石、低品位鉱石等からのフッ化水素酸回収・製造技術の開発	・低濃度フッ素含有原料からの濃縮、分離技術:フロン類、フッ素樹脂からのフッ素の回収、再生利用のため高純度CaF ₂ 回収技術	リサイクル、資源確保	中	短期、中期	500	電機電子、鉄鋼、化学品関連産業
		G072	フッ素樹脂リサイクル技術の開発	難リサイクル材からの再利用、リサイクルプロセス ・カスケード利用プロセス	リサイクル、資源確保	小	短期、中期	500	樹脂リサイクル関連産業
	微細構造・精密構造形成技術	G073	印刷法による革新的加工材料開発(プリンタブルエレクトロニクス)	・印刷技術による有機トランジスタ、電子回路製造を可能とする材料・プロセス ・硬化性、絶縁性、耐熱性等の機能を持たせたインク材料開発。 ・大画面、高精細等の精密印刷技術、プロセスの低温化。	省エネ、省資源	大	短期	1,000	情報電子機器製造関連産業
		G074	分子自己組織化を利用した高性能ナノ・マイクロ材料の開発	・電子材料、記憶素子用熱硬化性、光硬化性樹脂 ・核酸やコラーゲン、抗体などの選択的結合を模した機能性高分子複合体)	省エネ、省資源	小	短期	500	情報電子機器製造関連産業
		G075	ナノ三次元構造制御による材料加工プロセスの開発	・熱溶解鋳型、溶媒溶解鋳型高分子材料 ・微小重力、光加工プロセス	省エネ、省資源	中	短期	1,000	情報電子機器・精密機器製造関連産業
		G076	新規リソグラフィ加工技術の開発	・ナノインクプリントを利用した電気化学法、表面処理等による加工技術:ナノレベルのインクによるリソグラフィ技術	省エネ、省資源	小	短期	500	情報電子機器・精密機器製造関連産業
	水処理プロセス	G077	工業用超高純度水(再掲)	・次世代NF、RO、耐酸化性非フッ素膜等による水循環 ・オンプレ、MBR等による難分解物質分解プロセス ・酸化剤、硫化物沈殿による汚泥削減プロセス ・汚染湖沼河川浄化用バイオマス由来大量安価な浄化膜	資源確保 産業競争力	大	短期、中期	1,000	めっき業、化学・石油、医薬品、コンピナート等広範囲の製造業
		G078	洗浄機能水の開発	・機能水の安定化(長寿命化) ・機能水、超純水の安価製造プロセス ・不純物回収分離膜プロセス	資源確保 産業競争力	中	短期	1,000	航空機、電気・電子・精密機器関連産業
	ナノ材料	G079	エレクトロニクス・マイクロマシン用ナノ実装材料の開発	・無機有機ハイブリッドナノ材料 ・電気化学プロセスによる新規ナノ材料製造技術:新規磁性ナノ粒子などを組み込んだ高次機能性ハイブリッド材料・プロセス	省資源 産業競争力	小	短期	500	電気・電子・精密機器関連産業
		G080	新規低誘電率ナノ材料の開発	・新規メソポーラス体材料の開発(誘電率1.3以下) ・次世代半導体製造技術	省エネ、省資源	小	中期	100	電気・電子・精密機器関連産業
		G081	光学機能用材料の開発	・ケイ素系ナノコンポジット有機無機等透明材料 ・ナノ技術による高屈折率光学透明材料 ・熱線吸収透明材料 ・ナノファイバー材料	省エネ、省資源	小	中期	100	光学加工、レンズ、医療、分析機器等
	バイオポリマー	G082	易リサイクル、カスケードリサイクル材料の開発	・リサイクルし易いバイオ樹脂、コンポジット材料、バイオマスアロイ等の製造 ・モノマー段階からの分子設計と重合技術開発	資源確保 産業競争力	小	長期	100	コンシューマプロダクト
		G083	生分解性次世代ゴム材料の開発(再掲)	・エラストマー、コンポジットによる弾性材料 ・バイオマスからの多輪環誘導体等を原料とした弾性体 ・バイオマス、ゴムのハイブリッド型弾性材料	省エネ、省資源	中	中期	1,000	建設部材、家電、食器等
	海洋開発	G084	化学技術による海洋開発	・造水、メタンハイドレート、CO ₂ 固定、ウラン・リチウム等希少元素の分離、回収技術 ・海洋バイオマス、有用有機・無機資源の効率的回収、利活用技術	資源確保 産業競争力	中	中期、長期	1,000	資源・エネルギー関連産業
	元素資源の確保	G085	めっきスラッジ等からの金属回収、減容化技術の開発	・新規凝集材、固化材による汚泥削減と有用資源(Ni,Zn,Cr他)の回収 ・油水分離プロセスによる金属イオン回収 ・微生物を利用した金属分離回収	省資源 産業競争力	大	短期、中期	1,000	金属資源リサイクル関連産業・金属加工業・電機電子産業
	複合材料処理	G086	化学処理による複合材料・混紡繊維等リサイクル技術の開発	・界面活性型抽出・分離プロセス ・繊維リサイクルのための炭化水素系溶媒分離プロセス	省エネ、省資源	小	短期、中期	100	高分子素材リサイクル関連産業
	環境	G087	クリーン再資源化可能な塩化ビニル樹脂	・有機溶剤の回収再利用 ・塩化ビニル樹脂および可塑剤の回収再利用率アップ ・有害安定剤を使用しない塩化ビニルの開発	リスク削減、資源多様化	大	中期、長期	1,000	資源リサイクル関連産業・化学・電機電子等の製造業

グリーン・サステナブルケミストリー分野の技術マップ(6/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グレーは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色: プロセスイノベーション 青色: マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小: 数万吨未満 中: 数十万吨以下 大: 100万吨以上	実用時期 短期: 2016年〜中期: 2020年以降 長期: 2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
		2010							
環境	ハザード管理されたハロゲン製品	G088	過酸化水素酸化を利用した高機能材料製造技術	・過酸化水素等による新酸化プロセス ・ハロゲンを含まない超高機能電子材料	リスク削減、資源多様化	大	中期、長期	1,000	封止材、プラスチック、医薬品、絶縁材料等
		G089	ジクロロメタン代替物質としての機能水	・有害なジクロロメタン代替溶剤としての機能水 ・物理的・化学的方法で機能付与	リスク削減、国際規制	中	短期、中期	500	脱脂洗浄(機械加工、電子材料)、有機合成溶媒
		G090	生活用浄水技術(再掲)	・非塩素系消毒、微量有機物/無機物対策、膜技術、光分解触媒等 ・オンサイト小型浄水処理プロセス	水資源、リサイクル	大	中期、長期	500	下水道、過疎地排水等
		G091	CO ₂ 利用ノンハロゲンプロセスの開発	・CO ₂ をつかったポリカーボネート、ウレタン、イソシアネート等化学品製造プロセス ・合成ガス原料の効率化製造プロセス	リスク削減、資源多様化	中	中期、長期	500	基礎化学品、ファインケミカル製造業
		G092	ノンフロン洗浄剤、溶剤、機能材料の開発	・新規炭化水素系脱フロン代替溶剤(配合技術、添加剤等) ・環境負荷が小さい新規フロン洗浄剤の開発	国際規制産業基盤	小	短期、中期	100	電気・電子機器・機能材料関連産業
		G032	ブロム及びリンフリー新規難燃材料の開発(再掲)	・表面修飾、クラスター加工によるハイブリッド化、微細構造化 ・シリコン系、複合金属系新規難燃剤: ポリカーボネート、発泡ウレタン	リスク削減、国際規制	大	短期、中期	1,000	電気・電子機器・機能材料関連産業
		G093	ノンフロン断熱・保温・保冷物質の開発(再掲)	・ポスト代替フロン断熱材料 ・超臨界CO ₂ 利用空間システム ・環境への負荷がない新規保冷物質 ・低温硬化係数、低オゾン層破壊、環境適合型新規フロン化合物	リスク削減、国際規制	大	短期、中期	500	建材・食品保管・輸送関連産業
	製造工程廃棄物・副生物の大幅削減	G094	新規固体酸・塩基触媒による化学プロセスのグリーン化	・塩化アルミニウム、硫酸、硝酸等の代替触媒(ゼオライト、Ti系触媒、ヘテロポリ酸) ・カボラクタム、MMA、ニトロ化合物プロセスのグリーン化	廃棄物削減、資源多様化	大	中期、長期	1,000	医薬品、香料、石油製品、潤滑油、電子材料、農業、防錆剤等
		G095	従来型有機合成のシンプル化	・合成ルートの転換、触媒反応化、溶媒転換、精製工程転換等を含む副原料削減 ・新触媒による大型生産プロセスへの転換(医薬原体、電子材料等) ・マイクロリアクター(流体特性)と触媒(分子特性)の最適化探索	廃棄物削減、資源多様化	大	中期、長期	1,000	医薬品、香料、石油製品、潤滑油、電子材料、農業、自動車部品、建材、液晶材料等
		G096	ナノ空間触媒による新合成プロセス	・石油化学プロセス用触媒、ナフサ接触分解等 ・新規触媒によるエステル化、骨格異性化反応の効率改善とグリーン化	省エネ、廃棄物削減、資源多様化	大	中期、長期	500	石油化学製品、光学材料、医薬・農業等製造業
		G097	低環境負荷型廃水処理の開発	・化学/物理ハイブリッド処理によるバイオプロセスの効率化 ・汚泥の減量、再利用等のための新規処理剤 ・(工場)排水の高清浄化・有害成分の高濃縮回収技術(高濃縮と高濃縮の両立)	省エネ、省資源	大	中期、長期	1,000	水処理業
	環境負荷が小さい製品	G025	超耐熱性、強度等を有する新規材料(ポリオレフィン類等)の開発(再掲)	・ポストメタロセン触媒、コモナー材料 ・金属、高分子ハイブリッド材料 ・高密度、易加工ポリオレフィン材料の開発	省エネ、長寿命	中	短期、中期	1,000	建材、電子材料、機械材料、医療、輸送材料等
		G098	易リサイクル型高弾性ゴムの開発(再掲)	・高純度モノマー材料による易リサイクル ・配合技術を利用したカスケード利用	省エネ、省資源	中	省エネ、省資源	1,000	建設部材、家電、食器等
		G099	環境安全性が高い添加剤の開発	・ポリオレフィン等向け添加剤材料 ・天然由来添加剤	資源多様化、安全	小	中期	100	レザー製品、壁紙、電線等
		G100	植物由来原料からの高性能防錆剤の開発	・松脂等からの防錆剤 ・新規モノマー/樹脂開発 現行樹脂の改良	資源多様化、安全	小	中期	100	家具、建材、食料品防錆等
		G101	アスベスト代替シール材の開発	・膨張黒鉛の改良 ・つなぎ目のない配管材料の開発 ・粘土鉱物等とのハイブリッドシール材	国際規制産業基盤	大	短期、中期	500	化学・石油プラント、製鉄、発電所等大型プラント、配管設備施工関連産業
	環境負荷が小さい加工プロセス	G102	亜臨界、超臨界流体を利用した表面処理技術	・超臨界CO ₂ による塗装、表面処理、重合、発泡、複合化、洗浄、めっき等	リスク削減	中	短期	500	機械、金属加工産業
		G103	ジクロロメタン代替としての洗浄プロセス	・超臨界流体による半導体、機械等の精密洗浄 ・洗浄プロセスの開発	リスク削減、国際規制	中	短期、中期	500	脱脂洗浄(機械加工、電子材料)、有機合成溶媒
G104		脱VOCリソグラフィエターニング技術の開発	・非VOC型液状硬化性樹脂 ・液状効果性樹脂によるナノインプリントプロセス	リスク削減	中	短期	500	電気・電子・精密機器関連産業	
革新的燃焼による大気環境の保全	G105	クリーン燃料(水素以外)・清浄燃焼技術の開発	・リンバーン燃焼触媒の性能向上、耐熱性、長寿命化 ・高濃度酸素の製造技術による煤煙、NOx等抑制技術 ・重質残油クリーン燃料転換	地球環境、産業競争力	大	短期、中期	1,000	自動車、エネルギー、化学・石油・製鉄プロセス	
	G106	燃焼排ガス浄化技術の開発	・NOx直接分解触媒、DPF触媒等による排ガス浄化: EOP向け燃焼触媒	地球環境、産業競争力	大	短期、中期	1,000	セメント、廃棄物処理業、小型発電機等	

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術マップ(7/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グリーンは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色:プロセスイノベーション 青色:マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小:数万吨未満 中:数十万吨以下 大:50万吨以上	実用時期 短期:2016年以前 中期:2020年以降 長期:2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
環境	水環境の保全	G107	非金属元素含有排水の高度処理技術の開発	・バイオマス、シリカ系吸着材によるBF回収 ・アナモックス菌による硝酸性窒素等分解プロセス	水資源、リサイクル	中	中期、長期	500	金属加工、化学プラント、医薬品、上下水処理
		G108	難分解性物質含有排水の高度処理技術の開発	・オゾン曝気、MBR等による高効率分解プロセス ・油水分離プロセスによる分離	水資源、リサイクル	中	中期、長期	500	金属加工、化学プラント、医薬品、上下水処理
		G109	植物・バイオマス起源生分解性溶剤の開発	・天然物起源生分解性溶剤:乳酸エステルなどの環境対応溶媒	資源多様化、リスク削減	小	中期、長期	100	洗剤、香料、プラスチック容器、化粧品等
		G110	環境調和型潤滑油添加剤、及び生分解性潤滑油の開発	・天然物由来原料(誘導体化)による生分解性潤滑油:アミノ酸系など生分解性潤滑油	資源多様化、リスク削減	小	中期、長期	100	洗剤、香料、食品加工、機械加工、化粧品等
		G111	易生分解性界面活性剤の開発(再掲)	・天然物由来原料(誘導体化)による生分解性界面活性剤:アミノ酸や脂肪酸系界面活性剤	資源多様化、リスク削減	小	中期、長期	500	洗剤、香料、食品加工、洗浄剤、化粧品等
		G112	リン資源の高効率回収、代替技術の開発	・排水や機能性製品等に含まれるリン回収 ・土壌からの残存P回収プロセス ・非リン系農薬、PFOS,PFOA対応	国際規制、資源確保	中	短期、中期	500	農薬、消化剤、プラスチック等
		G113	重金属含有排水、汚泥の新規高度処理技術の開発	・回収重金属のカスケード利用:精練、精製 ・回収汚泥のカスケード利用:スラッジからの重金属回収、精練、精製	省エネ、省資源	大	中期、長期	1,000	無機系資源リサイクル関連産業・化学・電機電子等の製造業
	リサイクル促進	G114	無機系副生物・廃棄物のリサイクル、及びカスケードリサイクル技術の開発	・金属イオン回収材、磁性プロセスの効率化 ・酸化物固化、産業材による汚泥減容等 ・廃酸・廃アルカリ含むリサイクル技術	省エネ、省資源	大	中期、長期	1,000	無機系資源リサイクル関連産業・化学・電機電子等の製造業
		G115	易リサイクル型コンポジット材料の開発	・GFRP、ナノファイバー等コンポジット材料 ・ナノテクの応用などでコンポジット率を低減化 ・バイオ樹脂、バイオアロイをベースとした易リサイクル型コンポジット材料	省エネ、省資源	中	中期、長期	1,000	自動車、電機電子、建材等
		G028	省エネ成形、易リサイクル型硬化性樹脂の開発(再掲)	・コモノマー、ハイブリッドモノマー利用材料・樹脂 ・超臨界ガス利用による発泡・加工 ・熱可塑性設計によるリサイクル材料	省エネ、省資源	中	中期、長期	500	電機電子等広範囲
		G064	積層フィルムの代替材料、及び易リサイクル材料(再掲)	・フィルムの単層化、相溶化等によるリサイクル性の向上:単相化フィルムでのバックージ性能保持 ・易剥離性積層フィルムと易解体粘着剤の開発 ・光配線フィルム材料 ・リサイクル可能な同時多層積層成膜製造技術 ・環境適合型重層製膜プロセス	資源確保、リサイクル	中	短期、中期	500	包材、建材、日用品
		G033	多孔質断熱材料の開発(再掲)	・廃土木資材利用による断熱材料 ・廃プラスチック利用多孔質断熱材料 ・廃塗材利用による断熱材料 ・多孔質樹脂、バイオマスアロイを利用した断熱材	省エネ、長寿命	大	短期、中期	1,000	空調、建材
		G034	易リサイクル性断熱部材の開発(再掲)	・高断熱性成形樹脂、無機断熱材料 ・バイオ樹脂、バイオマスアロイを用いた易リサイクル性断熱部材 ・材料カスケードプロセス	省エネ、廃棄物削減	中	短期、中期	1,000	製造業(化学、石油、セメント、機械加工等)、空調、建材、
生活	日用品の快適性向上と低消費化	G116	高機能繊維材料の開発	・新ポリウレタン材料(体感向上素材、温湿度コントロール、撥水、耐熱・耐薬) ・天然由来原材料の高度化利用	資源多様化、生活向上	小	短期、中期	500	繊維、装飾品等
		G027	光機能を有するプラスチック材料の開発(再掲)	・ポリカーボネート、ポリメタクリレート等の高機能光ファイバ材料等 ・複合材料による光透過性向上、低減減、高速応答等	機能性向上	大	中期、長期	1,000	建材、電子材料、機械材料、窓ガラス、パソコン、照明材料等
		G117	軽量化素材	・有機無機コンポジット、バイオマス原料による高度製造技術 ・金属代替材料(エンブラ等)の低価格化	省エネ、省資源	大	短期、中期	1,000	自動車、寝具、家具等
	食の安全と量の確保	G035	省電力照明材料の開発(再掲)	・超微量レアメタルによる次世代LED、有機EL、無機EL等材料 ・低価格発光材料の開発による普及:ZnO薄膜、ナノ材料	省エネ	大	短期、中期	1,000	街灯、ビル照明、コンビナート、住宅等
		G118	電気製品の汎用修理可能な機能材料	・製造容易でリサイクル可能な材料開発(例えばCPUボードの換装)	リサイクル、産業競争力	小	短期、中期	500	電気製品、電子材料、太陽光発電、液晶材料等
		G119	高機能性食品包材	・保冷・酸化防止・脱水・保湿・遮光材料 ・エチレン吸収材 ・空気透過性高分子材料	生活向上、安全	小	短期、中期	500	食品加工・包装・流通・輸送関連産業
		G120	システム農業資材(肥料・農薬を含む)	・生分解性肥料、殺虫剤、農薬 ・水性培地材料の開発 ・生育工業光源材料 ・家庭菜園への提供	食糧確保、国際競争力	大	短期、中期	1,000	食料品、医薬品
G121	耐塩・耐毒性殺菌	・ゲノム育種と開発の実証 ・ムギ・イネの有用遺伝子探索 ・遺伝子操作・解析技術開発	生活向上、安全	小	短期、中期	500	食品加工・包装・流通・輸送関連産業		

グリーン・サステナブルケミストリー分野の技術マップ(8/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グレーは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色:プロセスイノベーション 青色:マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小:数万吨未満 中:数十万吨以下 大:100万吨以上	実用時期 短期:2016年〜 中期:2020年 長期:2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野		
										2010	
生活	快適な省資源ロングライフ住宅	G122	水分、養分保持材料の開発	・高性能吸水性材料(長期保存) ・エチレン吸収剤	生活向上、安全	中	短期、中期	500	食品加工・包装・流通・輸送関連産業		
		G123	200年住宅用外装・内装材料・断熱材	・高分子、金属ハイブリッド断熱材等 ・耐紫外線塗料、ペンキ材料 ・光触媒による防汚、浄化材料	生活向上、安全	大	短期、中期	1,000	建材・居住用素材関連産業		
		G124	高効率太陽電池材料	・負荷変動対応型高密度蓄電材料(家庭用) ・高効率かつ低価格な太陽光電池 ・家庭の形状に適応可能な柔軟性材料 ・有機太陽電池	新エネルギー	大	中期、長期	500	照明、電子材料、住宅、オンサイトエネルギー産業		
		G035	省電力照明材料の開発(再掲)	・超微量レアメタルによる次世代LED、有機EL、無機EL等材料 ・低価格発光材料の開発による普及:ZnO薄膜、ナノ材料	省エネ	大	短期、中期	1,000	街灯、ビル照明、コンビニナート、住宅等		
		G032	フロム及びリンフリー新規難燃材料の開発(再掲)	・表面修飾、クラスター加工によるハイブリッド化、微細構造化 ・シリコン系、複合金属系新規難燃剤:ポリカーボネート、発泡ウレタン	リスク削減、国際規制	中	短期、中期	1,000	電気・電子機器・機能材料関連産業		
		G125	重塗装用完全水性塗料の開発(再掲)	・新規オリゴマー高分子材料による硬化剤、基剤塗料 ・ミニエマルション材料による新塗料	地球環境、産業競争力	大	短期、中期	1,000	建材、道路、大型構造物(ビル、橋)等		
		G126	ノンVOC含有建材用材料の開発	・水性、シリコン系接着剤及び接合材料 ・接着剤を使わない接合技術	リスク削減、生活向上	大	短期、中期	1,000	建材・居住用素材関連産業		
		G127	ノンVOC系塗料・インキの開発	・完全水性塗料、インキ材料 ・非溶剤型塗料、インキ	リスク削減、生活向上	中	短期、中期	500	文具、建材、組み立て加工関連産業		
		G128	安全性殺虫防虫剤・防かび剤・除菌剤の開発	・光触媒、ナノ触媒型抗菌剤(Ag/TiO ₂) ・天然物由来触媒	リスク削減、生活向上	小	短期、中期	500	農業、食品加工、衛生関連素材・管理関連産業		
		G129	完全防臭・消臭材料の開発	・ナノ触媒型消臭剤として(ZnO/TiO ₂) ・ナノ孔型消臭剤(ナノゼオライト他) ・高寿命消臭分解型材料	リスク削減、生活向上	中	短期、中期	500	農業、食品加工、衛生関連素材・管理関連産業		
		G130	遮音、遮熱、断熱、電磁波遮蔽材料の開発	・遮音、遮熱、断熱可能な新規ガラス、新規建材 ・断熱効果が高く安全な塗料等 ・電磁波を効率的に遮断する材料	リスク削減、生活向上	大	短期、中期	1000	建材、構造物、空調設備、ホール等		
		G032	ノンフロン断熱・保温・保冷物質の開発(再掲)	・ポスト代替フロン断熱材料 ・超臨界CO ₂ 利用空調システム ・環境への負荷がない新規保冷物質 ・低温暖化係数、低オゾン層破壊、環境適合型新規フロン化合物	ヒートアイランド対策	大	短期、中期	1,000	空調、建材		
		G033	多孔質断熱材料の開発(再掲)	・塵土木質材利用による断熱材料 ・廃プラスチック利用多孔質断熱材料 ・廃建材利用による断熱材料 ・多孔質樹脂、バイオアロイによる断熱部材	省エネ、長寿命	大	短期、中期	1,000	空調、建材		
		G034	易リサイクル性断熱部材の開発(再掲)	・高断熱性成形樹脂、無機断熱材料 ・バイオ樹脂、バイオマスアロイを用いた易リサイクル性断熱部材 ・材料カスケードプロセス	省エネ、廃棄物削減	大	短期、中期	1,000	製造業(化学、石油、セメント、機械加工等)、空調、建材、		
		G131	耐震材料の開発	・軽量、超強度プラスチック材料 ・免震ゴム、 ・耐震工法適合材料	生活向上、安全	大	短期、中期	1,000	建材・居住用素材関連産業		
		生活	容易で安全な医療・介護と身体機能補助	G132	介護ロボット用構成材料の開発	・新規金属・高分子軽量材料 ・感情変化、触感、臭い検知センサー ・目的に適合した機能ソフト	生活向上、安全	小	短期、中期	1,000	医療・医用材料関連産業
				G133	身体補助材料の開発	・(人工筋肉など)高性能身体補助材料 ・人体に親和性の高い機能を実現する材料 ・拒絶反応のない長期安定材料	生活向上、安全	小	短期、中期	1,000	医療・医用材料関連産業
				G134	医薬・診断薬の開発	・独自性の高い医薬品 ・機能性タンパク質検出用簡易キット ・生活習慣病をモニタリングできるデバイス ・簡易で信頼性のある診断薬、キット、診断システムの開発	生活向上、安全	小	短期、中期	1,000	医療・医用材料関連産業
G135	長寿命ペースメーカー用電池の開発			・高密度小型電池材料(次世代リチウム電池等) ・軽量化、安全性向上	生活向上、安全	小	短期、中期	1,000	医療・医用材料関連産業		
G136	簡易人工透析システムの開発			・人工透析用新規分離材料:取り扱いやすく安価な透析膜 ・院外で安全に人工透析を行うシステム	生活向上、安全	小	短期、中期	1,000	医療・医用材料関連産業		
G137	細胞(骨髄等)代替担体材料の開発			・2次元/3次元の成形性・体内への親和同化性・目的細胞の培養プロセス ・高機能性ステント、人工骨等	生活向上、安全	小	短期、中期	100	医療・医用材料関連産業		
G138	体内埋め込み型の超小型システム			・埋め込み型の診断システムやインスリンなどの投与システム、人工臓器など	生活向上、安全	小	短期、中期	1,000	医療・医用材料関連産業		
G051	新しい電池材料の開発(再掲)			・次世代リチウムイオン電池向け材料:リチウム硫黄系新固体電解質、不燃性有機電解質、非Co系正極 ・新型ニッケル・水素電池、リチウムポリマー電池、リチウム硫黄系電解質等	省エネ、産業競争力	中	短期、中期	1,000	商用施設、住宅、オンサイト小型発電、移動体、パソコン、携帯電話等		

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術マップ(9/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グレーは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色:プロセスイノベーション 青色:マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小:数万吨未満 中:数十万吨以下 大:100万吨以上	実用時期 短期:2016年中 中期:2020年以降 長期:2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
生活	安全・クリーン・省エネで便利な交通機関	G052	有機ラジカル電池・レドックス高分子材料の開発(再掲)	・非リチウムイオン電解質 ・短時間充電・高容量・高出力で発火や爆発リスクの低い有機/ラジカルポリマー電池	省エネ、産業競争力	小	短期、中期	100	商用施設、住宅、オンサイト小型発電等
		G053	高蓄電池用電解液の開発(再掲)	・新規な高容量・安全なイオン液体:イミダゾリウムやピリジニウムのリチウムイオン液体	省エネ、産業競争力	小	中期、長期	100	商用施設、住宅、オンサイト小型発電、移動体、パソコン、携帯電話等
		G054	移動電源、及び固定電源用高蓄電エネルギー材料の開発(再掲)	・新型固体電解質、電解質膜、イオン液体等の開発:不燃性により安全性向上、移動体等への適用	省エネ、産業競争力	中	中期、長期	1,000	電子機器、バス、電車等用エネルギー供給・利用関連産業
		G055	個人用移動システム駆動源の開発(再掲)	・軽量小型電池等の開発:	省エネ、産業競争力	中	中期、長期	100	機械ロボット、車椅子
		G139	交通制御システム	・超高速通信移動体向け材料 ・暗視対応色素材料、液晶材料の開発	生活向上、安全	大	短期、中期	500	交通、電子材料、ソフト、液晶等
		G140	生体情報センサー・デバイス	・有機ハイブリッドセンサー材料 ・生体の温度、動作等の自動感知センサーシステム ・衝突防止システム用センサー材料	生活向上、安全	小	短期、中期	100	医療・医用材料関連産業
		G141	高機能化学センサー	・高感度反応化学物質 ・新機能デザイン	生活向上、安全	中	短期、中期	500	セキュリティ、環境
		G050	超高蓄電型二次電池材料の開発(再掲)	・安全性の高い、正負極活性物質、炭素電極、電解液、セパレータ(膜)等 ・高出力密度汎用型電気二重層キャパシタ	省エネ、産業競争力	大	短期、中期	1,000	商用施設、住宅、オンサイト小型発電、自動車等
		G142	無騒音道路舗装材	・微細構造制御、空隙確保等による無機材料 ・高分子軽量材料:高性能防音壁用材料	生活向上、安全	中	短期、中期	500	道路・都市交通・騒音街区建設・管理関連産業
	きれいな水・空気の確保	G090	生活用浄水技術(再掲)	・非塩素系消毒、微量有機物/無機物対策、膜技術、光分解触媒等 ・オンサイト小型浄水処理プロセス	水資源、リサイクル	大	中期、長期	500	下水道、過疎地排水等
		G111	易生分解性界面活性剤の開発(再掲)	・天然由来原料(誘導体化)による生分解性界面活性剤:アミノ酸や脂肪酸系界面活性剤	資源多様化、リスク削減	中	中期、長期	500	洗剤、香料、食品加工、洗浄剤、化粧品等
		G143	微粒子・アレルギーの除去	・有機系低抵抗、高効率フィルター ・抗原、抗体ウイルス対応型材料	生活向上、安全	小	短期、中期	100	医療・医用材料関連産業
	廃棄物の削減	G064	積層フィルムの代替材料、及び易リサイクル材料(再掲)	・フィルムの単層化、相溶化等によるリサイクル性の向上:単相化フィルムでのパッケージ性能保持 ・易剥離性積層フィルムと易解体粘着剤の開発 ・光記録フィルム材料 ・リサイクル可能な同時多層積層成膜製造技術 ・環境適合型重層製膜プロセス	資源確保、リサイクル	小	短期、中期	500	包材、建材、日用品
		G066	易リサイクル、易分解性粘着剤及び自己剥離材料の開発(再掲)	・非エポキシ樹脂等のリサイクル材料:リサイクルが困難な熱硬化性樹脂であるエポキシ樹脂を代替熱可塑性樹脂の活用によるリサイクル性の向上	資源確保、リサイクル	中	中期	500	建築土木、自動車、電機電子等
		G098	易リサイクル型高弾性ゴムの開発(再掲)	・高純度モノマー材料による易リサイクル ・配合技術を利用したカスケード利用	省エネ、省資源	中	省エネ、省資源	1,000	建設部材、家電、食器等
		G083	生分解性次世代ゴム材料の開発(再掲)	・エラストマー、コンポジットによる弾性材料 ・バイオマスからの多糖類誘導体等を原料とした弾性体 ・バイオマス、ゴムのハイブリッド型弾性材料	省エネ、省資源	中	省エネ、省資源	1,000	建設部材、家電、食器等
	化粧品材料	G144	未来型化粧品材料の開発	・ナノ技術、界面技術によるアンチエージング機能、安全性等を有した材料開発 ・海洋、天然由来タンパク質材料の大量分離生産プロセス	生活向上、安全	小	短期、中期	500	化粧品・アンチエージング関連産業
	共通	輸送システム(低環境負荷・高利便性交通輸送システム)	G145	電池式駆動	・次世代リチウムイオン電池、・新型固体電解質、電解質膜、イオン液体等の開発:不燃性により安全性向上、移動体等への適用	省エネ、産業競争力	大	中期、長期	1,000
G146			車体軽量化、高機能内装	高強度・軽量・超耐熱性に加え、遮音、断熱、紫外線吸収、アレルギー削減、導電性等の機能を高めた構造材用新規コンポジット樹脂材料	省エネ、産業競争力	大	中期、長期	1,000	陸上車両・航空機等エネルギー利用産業
G147			無騒音舗装、低摩擦材料	トライボロジーによる無騒音道路舗装材、低転がり摩擦タイヤ、機械摩擦低減による、駆動エネルギーロス削減	省エネ、産業競争力	大	中期、長期	1,000	自動車道路・タイヤ産業
G148		高度交通制御・事故防止システム	・超高速移動体通信向け材料 ・暗視対応色素材料、液晶材料 ・センサー用高感度反応化学物質 ・生体情報センサーデバイス	省エネ、産業競争力	小	中期	500	都市空間制御	
水(良質な水資源確保システム)		G077	工業用超高純度水(再掲)	・次世代NF、RO、耐酸化性非フッ素膜等による水循環 ・オン曝気、MBR等による難分解物質分解プロセス ・酸化剤、硫化物沈殿による汚泥削減プロセス ・汚染湖沼河川浄化用バイオマス由来大量安価な浄化膜	資源確保 産業競争力	大	短期、中期	1,000	めっき業、化学・石油、医薬品、コンピュータ等広範囲の製造業
		G090	生活用浄水技術(再掲)	・非塩素系消毒、微量有機物/無機物対策、膜技術、光分解触媒等 ・オンサイト小型浄水処理プロセス	水資源、リサイクル	大	中期、長期	500	下水道、過疎地排水等

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術マップ(10/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グレーは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色:プロセスイノベーション 青色:マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小:数万吨未満 中:数十万吨以下 大:50万吨以上	実用時期 短期:2016年ごろ 中期:2020年以降 長期:2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野	
		2010								
共通		G149	排水の高度処理技術	・高濃縮と高濃縮の両立する排水のリサイクル技術	水資源、リサイクル	小	中期、長期	500	金属加工、化学プラント、医薬品、下水処理	
	共通基盤技術	分析化学	G150	微細、微量、高速、迅速な化学分析(構造決定、成分分析など)	・様々な技術へ波及する各種分析技術の向上 原子・分子スペクトル分析、レーザー分光分析、X線分析、電気化学分析、質量分析、フローインジェクション分析、クロマトグラフィー・分離科学、電気泳動分析、マイクロ・ナノ分析、顕微鏡、界面分析、材料分析・材料解析等		—	—	—	全分野
計算科学		G151	技術の発展に寄与するための計算科学	・ナノテク分野など特に必要とされる分野へのより適用し易いソフトの開発		—	—	—	全分野	
環境評価		G152	LCA評価	・信頼性の高いLCA(データ・境界条件の共通化による客観性の向上)		—	—	—	—	全分野
		G153	リスク評価	・リスク初期評価のための有害性評価、暴露評価精度向上		—	—	—	—	全分野

ーグリーン・サステイナブルケミストリー(GSC)重要技術俯瞰図ー

統合化による化学技術システムの最適化
(2030年を見据えて)

- 工** : エネルギー重要技術項目
 - 資** : 資源重要技術項目
 - 環** : 環境重要技術項目
 - 生** : 生活重要技術項目
 - 共** : 共通重要技術項目
- 重要技術テーマ
- ★マテリアルイノベーション
 - ☆プロセスイノベーション

エネルギー

工 熱エネルギー変換利用技術

- ☆低品位排熱の蓄熱・輸送・回収材料およびプロセス
- ★低温排熱エネルギー変換用熱電変換材料
- ★低摩擦表面素材/潤滑物質
- ★高性能デシカント空調用高湿潤吸着材料
- ☆化学エネルギー変換高密度蓄熱材料・プロセス(触媒他)

工 再生可能エネルギー

- ★風力発電用新規材料
- ★太陽電池材料
(色素増感型、薄膜シリコン系、有機半導体型、ナノ材料)

水素製造

- ☆高効率水素製造技術(水蒸気改質、及び水電気分解等)

資 微細構造・精密構造形成技術

- ★印刷法による革新的加工材料開発
- ★分子自己組織化を利用した高性能ナノ・マイクロ材料
- ★ナノ三次元構造制御による材料加工プロセス
- ★新規リソグラフィ加工技術の開発

資 低品位資源利用技術

- ☆バイオマス・混合有機資源からの合成ガス・化学品の製造
- ☆低品位ガス系化石資源(メタンハイドレート等)からの基礎化学品製造
- ☆低品位固液系化石資源(オイルサンド等)からのナフサ、オレフィン製造

資 次世代蓄電材料技術

- ★超高蓄電型二次電池材料
- ★新しい電池(リチウム代替等)材料
- ★有機ラジカル電池・レドックス高分子材料

資 稀少金属の有効利用と代替材料技術

- ★希少元素、貴金属代替新材料
- ★稀少金属やNi,Co,Wを使わない高耐熱材料

資 非枯渇性資源の化学品・材料化

- ☆バイオマスからの化学品原料製造技術
- ☆構造保持セルロースによる機能化学品
- ☆非食糧資源からのプラスチック、モノマー等化学品製造技術

資 易リサイクル加工用材料・プロセス

- ★解体性接着材料と易リサイクル加工法
- ★積層フィルムの代替材料・易リサイクル材料

資 CO2分離・回収・利用技術

- ☆CO2等の分離・回収技術
- ☆CO2を原材料としたポリカーボネート樹脂等化学品製造技術

資源

工 グリーン製造化学プロセス

- ☆化学分離プロセス
- ☆グリーン酸化プロセス(直接過酸化水素製造、過酸化水素酸化、空気酸化等)
- ☆電磁エネルギー利用合成プロセス
- ☆分離・反応一体型リアクタープロセス
- ☆マイクロリアクタープロセス
- ☆精密制御高分子製造
- ☆有機分子触媒

工 IT向け化学品(電子材料)

- ★光利用率向上有機半導体材料の開発
- ★新規封止材、絶縁材料、パワー半導体等の開発
- ★超高密度超ナノ情報素子材料

4分野共通

共 水

- (化学技術利用による良質な水資源確保システム)
- ☆工業用超高純度水
 - ☆生活用浄水技術
 - ☆排水の高度処理技術

共 輸送システム

- (低環境負荷・高利便性交通輸送システム)
- ★電池式駆動
 - ★車体軽量化、高機能内装
 - ★無騒音舗装、低摩擦材料
 - ★高度交通制御・事故防止システム材料

環境

環 製造工程廃棄物・副生物の大幅削減

- ☆新規固体酸・塩基触媒による化学プロセスのクリーン化
- ☆従来型有機合成のシンプル化
- ☆ナノ空間触媒による新合成プロセス

環 環境負荷が小さい加工プロセス

- ☆亜臨界、超臨界流体を利用した表面処理技術
- ☆ジクロロメタン代替としての洗浄プロセス

環 革新的燃焼による大気環境の保全

- ☆クリーン燃料(水素以外)・清浄燃焼技術

環 ハザード管理されたハロゲン製品

- ☆クリーン再資源化可能な塩化ビニール樹脂
- ☆過酸化水素酸化を利用した高機能材料
- ☆CO2利用ノンハロゲンプロセスの開発
- ★ジクロロメタン代替物質としての機能水

環 環境負荷が小さい製品

- ★超耐熱性、強度等を有する新規ポリオレフィン類
- ★易リサイクル型高弾性ゴム

生 日用品の快適性向上と低消費化

- ★高機能繊維材料
- ★光機能(材料透明化、低減衰、高速応答等)プラスチック
- ★軽量化素材
- ★省電力照明

生 容易で安全な医療・介護と身体機能補助

- ★介護ロボット用構成材料(センサー等)
- ★身体補助材料(人工筋肉等)

生活

GSC概念図

参考資料1

安全・安心で競争力ある持続可能社会の創生

グリーン・サステイナブル ケミストリーの実現

社会環境の変化

プロセスイノベーション

(省エネ、廃棄物最小、資源有効利用製造技術)

マテリアルイノベーション

(安全・安心で高機能製品)

エネルギー

- 省エネルギー
- エネルギーの効率的利用
- 新エネルギー・未利用エネルギー利用

環境

- 環境負荷物質の低減
- 廃棄物・副生物の低減
- 危険物質等を使わない、作らない

資源

- 化石資源の高度利用
- 原料の多様化(天然ガス、石炭、バイオ等)
- 未利用、低品位資源の有効活用

生活

- 衣食住の向上
- 健康増進
- アメニティ増進

大量生産・消費・廃棄社会

グリーン・サステイナブルケミストリー (GSC)

サステイナブル社会

2010年

2020年

2030年

2050年

エネルギー

増え続ける世界のエネルギー需要
(日本のエネルギー自給率6%、石油の中東依存度86%) 非在来型化石資源、石炭、バイオマス等の利用拡大

さらなる省エネルギー推進

自然エネルギー利用拡大(太陽光、風力等)

大幅なCO2削減圧力

原子力発電の利用拡大(高レベル廃棄物処理処分)

水素エネルギー

資源

原油価格・供給変動への対応

原油重質化低品位化

資源の多様化(石油、天然ガス、バイオマス、石炭等)

石炭の環境適合型高効率利用技術

石油資源の高度利用、省資源

世界的な水資源の不足

希少元素の偏在・枯渇

水の高度利用、国際貢献

資源リサイクル

省資源技術、代替物質の開発

希少元素代替・リサイクルの革新的技術

環境

大気汚染防止、水質汚濁防止、産業廃棄物処理、土壌汚染防止等規制強化(化審法・化管法の改正)

リスクの高い物質の回避

低環境負荷・低リスク・長寿命材料の開発

環境負荷物質削減

廃棄物・副生物の削減

欧州規制の強化(Rohs法、REACH法)

新興国への波及

環境調和型製品への転換

国際規制を先取りした製品の開発

生活関連

生活環境場のリスク最小化対応

衣食住、交通・通信の環境負荷低減

廃棄物縮減(再利用、長寿命化、軽量化)

アメニティ増進

低環境負荷ライフスタイル適合製品

バリアフリー化・福祉対応製品

ライフスタイルの転換

価値観の転換

快適でサステイナブルな社会の実現

GSCの実績例

1) 自動車・航空機の軽量化を進めるプラスチック

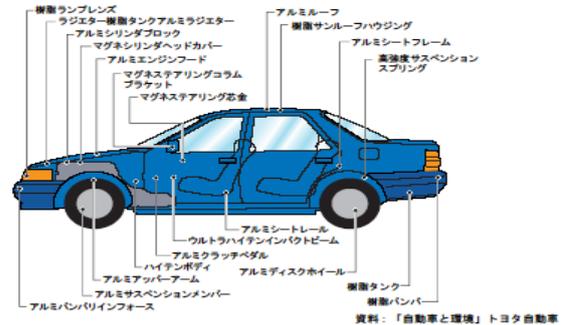
自動車の軽量化は、燃費向上の重要なポイントである。車体の約7割をしめる鉄の比重が7.8であるのに対して、プラスチックでは比重が1であることから軽量化に大きな寄与が期待できる。乗用車の場合、**プラスチックが占める重量構成比は1973年で2.9%**であったものが、**2007年には、8~10%**と向上しており、体積比ではほぼ1:1にまでなり大幅な省エネに貢献している。

航空機においても高靱性炭素繊維複合材料等が利用され始めている。

自動車に使用されるプラスチック類

- PP (ポリプロピレン)
- PE (ポリエチレン)
- ABS 樹脂
- PVC (ポリ塩化ビニル)
- PA (ポリアミド、ナイロン)
- POM (ポリアセタール)
- PBT (ポリブチレンテレフタレート)
- PC (ポリカーボネート)
- PPS (ポリフェニレンサルファイド)
- CFRP (炭素繊維強化複合材料)

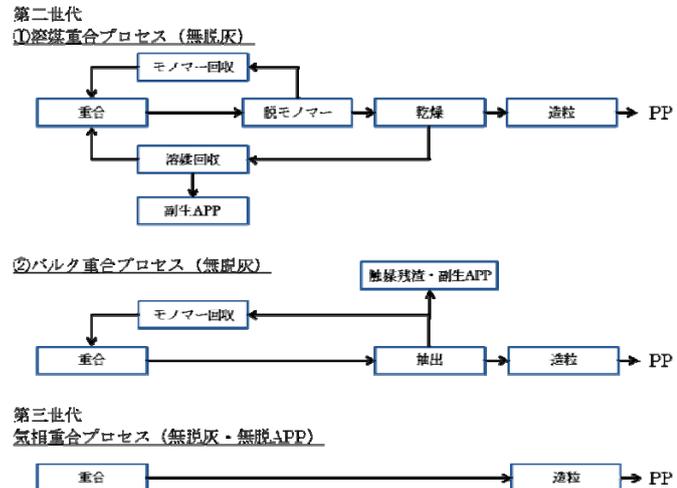
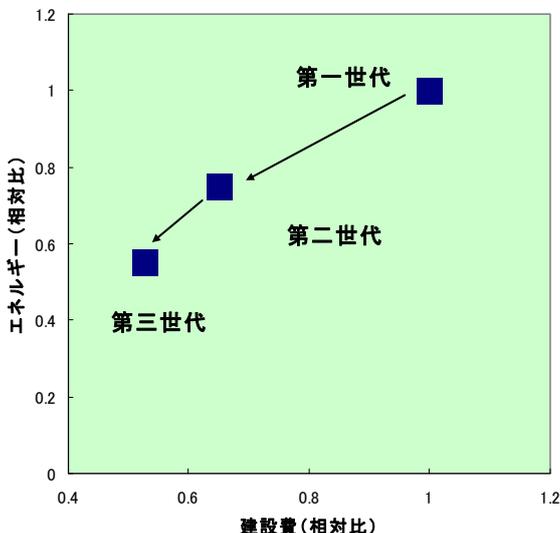
●自動車の軽量化部品例



樹脂系材料は、形状の出し易さやコストダウンにも繋がることから、内外装部品はもとより、エンジンルーム内の機能部品やエレクトロニクスシステム、燃料システム、エアバッグ、シートベルト等の安全システム、更に駆動・シャシ系にも採用されている。さらに強度、剛性、耐熱性などが改良されれば、さらにその比重を増す可能性が残されている。

ポリプロピレン(PP)の製造法でも、 大幅な省エネとプロセスの簡略化を達成している

自動車の軽量化に貢献する樹脂系材料の中でも、その比重が高いポリプロピレンの製造法においても、プロセスの簡略化や新規触媒の開発により、大幅な省エネとコスト削減を達成している。



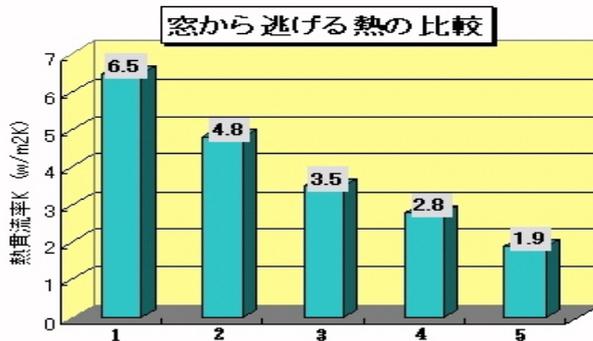
GSCの実績例

2) 冷暖房エネルギーの大幅削減を果たす高断熱建材

GSCのマテリアルイノベーション（製品による大幅省エネへの貢献）

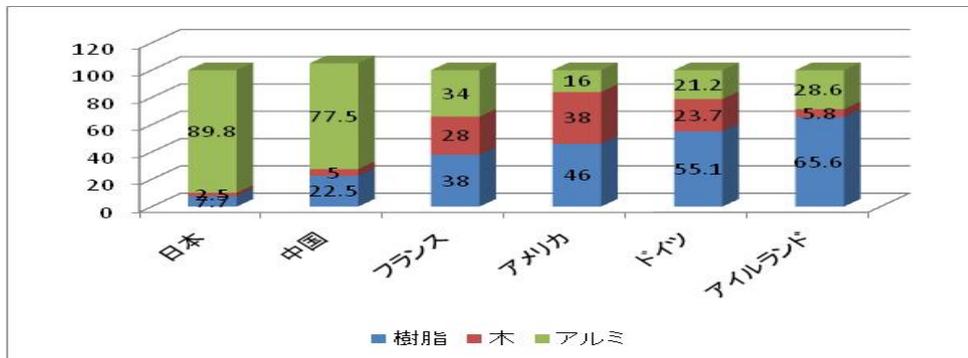
★窓枠部分に塩化ビニル樹脂（塩ビ）を使用し、間に空気層を備えた2層のガラスを用いる「複層ガラス塩ビサッシ」は、従来のアルミサッシ（単層ガラス）と比べると、**断熱性が非常に高い。**

★従来と比べ、**冷暖房費は3割～4割減少**



1. アルミサッシ1重ガラス(従来使われていたもの)
2. アルミサッシ2重ガラス(ガラスとガラスの間隔・空気層が6mm)
3. アルミ・樹脂の複合断熱サッシ2重ガラス(空気層12mm)
4. 樹脂(又は木製)サッシ2重ガラス(空気層12mm以上)
5. 樹脂(又は木製)サッシ2重ガラス(空気層12mm以上)
Solar Shield(高性能Low-Eガラス入り樹脂サッシ)

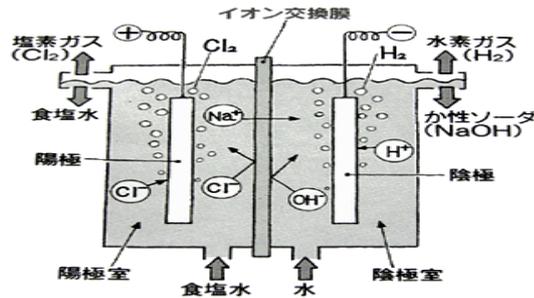
★日本は、アルミサッシが90%近くで、諸外国に較べても、樹脂サッシの比率が低い。



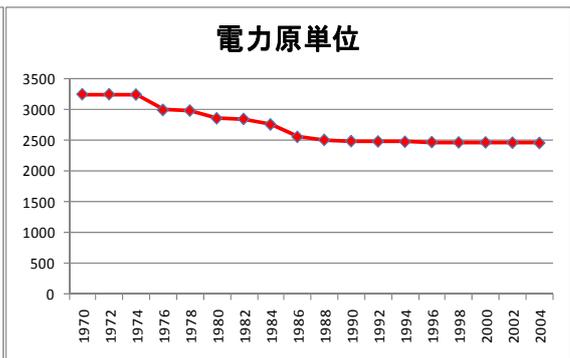
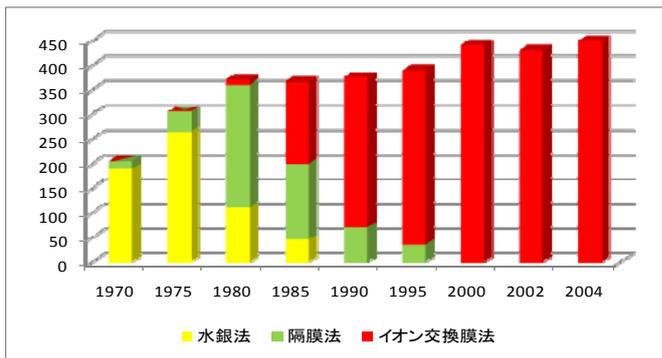
3) 省エネとリスク削減を同時に果たした食塩電解

GSCプロセスイノベーション (大幅な省エネと環境との調和プロセス)

食塩水を電気分解して、塩素と苛性ソーダを得るプロセスは、化学工業にとって重要なプロセスであるが、日本はリスクの大きな水銀を使う水銀法からリスクのないイオン交換法への転換を世界に先駆けて2000年に完了している。



さらにイオン交換法はそれまでの水銀法、隔膜法と較べて大幅な消費電力の削減を果たすことができた。水銀というリスクの高い物質を使わない方法への転換と大幅な省エネルギーにも貢献したイオン交換法は、GSCに理念にかなった製造方法の転換で、プロセスイノベーションの成果といえる。



日本の食塩電解プロセスの変遷 (縦軸: 生産量千トン) 食塩電解の電力原単位の推移

出典: 日本ソーダ協会

食塩電解における水銀使用廃止の動き

	2000	2010	2012	2020
日本	全廃	全廃	全廃	全廃
アメリカ	全廃	全廃	全廃	全廃
EU	全廃	全廃	全廃	全廃

我が国は、2000年に水銀法からイオン交換法への全面転換を果たしたが、諸外国の状況を見ても、アメリカではアスベストを利用する隔膜法が依然として主流となっており、水銀法については、オバマ政権になって転換の方針が変わり、2012年までに全廃となる予定である。これに対して、ヨーロッパでは、2008年でもイオン交換法は46%、水銀法が38%、それに隔膜法が14%となっており、EU全体としては2020年までに全廃とする目標を掲げている。

GSC技術の展望

～GSCが拓く持続可能な社会～

参考資料4

Green Agriculture

- ◎安全で高活性な農薬の創生
- ◎省エネ型肥料製造プロセス等



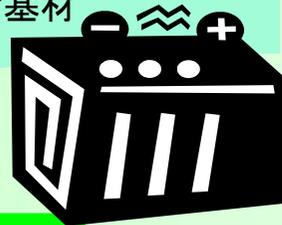
Green Sustainable Housing

- ◎高性能断熱材
- ◎窓枠、遮蔽塗料等の省エネ化学品



Green Electronic Storage

- ◎高性能蓄電池向け基材



Green Information Electronics

- ◎半導体向け化学品
- ◎リソグラフィ技術への化学品部材



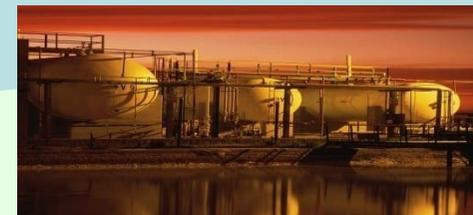
Green Biomass

- ◎バイオマス原料の糖化技術
- ◎脱化石資源への挑戦



Green Process

- ◎Eファクターに優れた省エネ型プロセス



革新的重要技術テーマ

GSC技術として特に重要と評価された
6テーマを革新的技術テーマとした。評価はGSC委員会での審議によった

革新的技術テーマ	理由	研究課題(例)
Green Agriculture (食糧資源に貢献する環境適応型 肥料および農薬)	食料資源の確保のために化学製品である肥料や農薬の役割は大きい	<ul style="list-style-type: none"> ・安全性が高く高活性な農薬の創生 ・省エネ型肥料製造プロセスの開発
Green Biomass (バイオマスからの化学品製造)	脱化石原料による化学品製造体系の構築は資源面で重要	<ul style="list-style-type: none"> ・バイオマス原料の糖化技術開発 ・バイオプロセスの開発
Green Electronic Storage (電気エネルギーの貯蔵)	電気自動車や自然エネルギーの活用のために電気貯蔵技術は重要である	<ul style="list-style-type: none"> ・高性能蓄電池向け機材の開発
Green Information Electronics (半導体製造向け化学製品)	大きな省エネルギー効果があるGreen ITの推進のためには高性能な半導体が必須であり、製造には化学製品が重要である	<ul style="list-style-type: none"> ・半導体製造向け化学品の開発 ・リソグラフィ技術の要である化学品の開発
Green Process (環境負荷の小さい化学品製造プロセス)	化学製品の製造プロセスにおいて、廃棄物が少なく省エネルギーなものとするために触媒・反応の開発は常に重要である	Eファクターに優れた省エネ型プロセスの開発
Green Sustainable Housing (快適で長持ちする省エネ型住宅)	高性能な断熱材などを使用した省エネルギー住宅は地球温暖化防止対策への貢献が大きい	<ul style="list-style-type: none"> ・高性能断熱材 ・窓枠、遮熱塗料等の省エネ化学品の開発



研究テーマ名「グリーン・サステナブル・ケミカルプロセス基盤技術開発」

2007年12月 現在

研究目的

背景、目的、必要性(政策的位置付け、市場ニーズ、技術ニーズ)

①背景:地球温暖化問題、資源枯渇問題が現実化しつつある中、地球及び人類のサステナビリティ(持続性)を如何に確保しながら、将来も持続的に高度な素材、部材を生産、供給できるかが製造産業の喫緊の課題となっている。

②市場ニーズ(目的):今後も持続的にわが国の全製造業を支えるためには、これまでにない高機能な素材、部材を、未利用な資源等を利用して製造するクリーンで独創的な化学プロセスの開発が急がれている。

③技術ニーズ:高機能な素材、部材をクリーンで持続的に製造する技術ニーズとして、(1)有害な化学物質の削減、(2)廃棄物、副生成物の削減、(3)リサイクル容易、(4)ライフサイクルにおける消費エネルギー削減、(5)希少資源の代替、(6)未利用/低品位資源の利用を実現する独創的で革新的な化学プロセスの技術開発が求められている。

プロジェクトの規模

○事業費と研究開発期間(目安として)

20年度事業費(未定)6億円、研究開発期間:8年
事業期間中に複数回の公募を想定

その他関連図表

水中で機能する界面活性剤型触媒

種々の有機合成反応(アルドール縮合、ヒドロキシメチル化、脱水エステル化反応)を促進する。

・水による触媒活性の低下がない

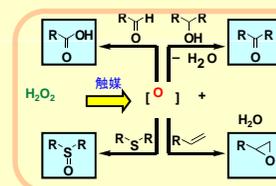
・高選択性(光学活性)

・水中で高活性(TON)な反応場を形成



過酸化水素酸化によるノンハロ材料製造

- ・過酸化水素による選択的新酸化法により有害なハロゲン、重金属等を用いないで、これまでにないクリーン材料製造
- ・生成物が目的物と水のみ
- ・リサイクルが容易な材料



高分子固定化触媒によるグリーン化

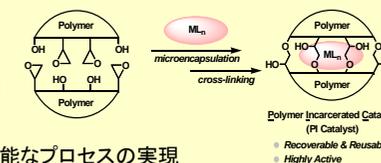
・パラジウム、オスmium、ルテニウム、金、白金等貴金属の繰り返し利用が可能。

・水素化反応、カップリング反応、アリル化など汎用的な製品製造への展開が可能

・金属の漏出の抑制

による廃棄物削減

及び回収・再使用可能なプロセスの実現



研究内容

○研究開発課題(目的達成のための技術課題)

持続的に高機能な素材・部材を製造するためのプロセスのクリーン化を実現するため、下記の(1)~(6)の技術課題を解決できる、独創的で革新的な化学プロセスの技術開発を行う。

(1)有害な化学物質の削減:有機溶媒、ハロゲン系化合物などを大幅に削減、利用しない、(2)廃棄物、副生成物の削減:重金属、酸・アルカリなどを大幅に削減、利用しない、(3)リサイクル容易:新規代替材料、カスケード利用型材料、(4)ライフサイクルにおける消費エネルギー削減:プロセスのシンプル化、ルート変更、原材料転換、(5)希少資源代替:有機材料、複合材料による代替、機能高度化、(6)未利用/低品位資源利用: CO_2 , N_2 、低品位化石燃料等を利用

○キーテクノロジー、ブレークスルーのポイント、オリジナリティ

上記の研究開発課題を早期に実現するため、新規な触媒、溶媒、加熱方法等を開発し、持続的でクリーンな製造が実現できる独創的なプロセスを開発する。

- ・水、イオン性流体、 CO_2 中で高選択性、高収率を示す触媒、及びプロセスの開発等
- ・ハロゲン、酸・塩基、重金属を用いない、排出しないプロセス、素材、部材の開発
- ・低品位原料等を用いたシンプルで、有害物質ができないプロセス、素材、部材の開発

○目標値(技術水準)とその条件及び設定理由(根拠)

目標: ①e-factor 又は廃棄物排出量50%以上削減 ②排水処理コスト50%以上削減、③リサイクル効率30%以上向上、など製造原単位が既存プロセス、製品製造に対して同等以上。

設定理由: 革新的な技術開発に対し妥当な目標とするが、今後、妥当性を検討する。

技術戦略マップ上の位置付け

本年度から化学プロセス、素材・部材のプロセスイノベーション、マテリアルイノベーションを実現するために「グリーン・サステナブルケミストリー」に関する技術戦略マップを新たに作成中



研究テーマ名 「グリーン・サステナブル・ケミカルプロセス創造的基盤技術開発」

研究目的

背景、目的、必要性(政策的位置付け、市場ニーズ、技術ニーズ)

①背景:地球温暖化問題、資源枯渇問題が現実化しつつある中、地球及び人類のサステナビリティ(持続性)を如何に確保しながら、将来も持続的に高度な素材、部材を生産、供給できるかが製造産業の喫緊の課題となっている。

②市場ニーズ(目的):今後も持続的にわが国の全製造業を支えるためには、これまでにない高機能な素材、部材を、未利用な資源等を利用して製造するクリーンで独創的な化学プロセスの開発が急がれている。

③技術ニーズ:高機能な素材、部材をクリーンで持続的に製造する技術ニーズとして、(1)有害な化学物質の削減、(2)廃棄物、副生成物の削減、(3)リサイクル容易、(4)ライフサイクルにおける消費エネルギー削減、(5)希少資源の代替、(6)未利用/低品位資源の利用を実現する独創的で革新的な化学プロセスの技術開発が求められている。

プロジェクトの規模

○事業費と研究開発期間(目安として)

20年度事業費(未定)6億円、研究開発期間:8年
事業期間中に複数回の公募を想定

その他関連図表

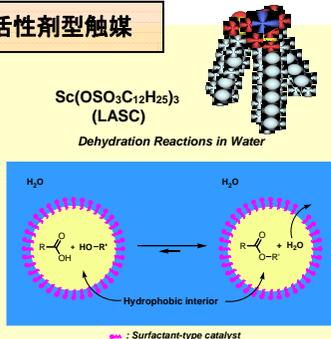
水中で機能する界面活性剤型触媒

種々の有機合成反応(アルドール縮合、ヒドロキシメチル化、脱水エステル化反応)を促進する。

・水による触媒活性の低下がない

・高選択性(光学活性)

・水中で高活性(TON)な反応場を形成

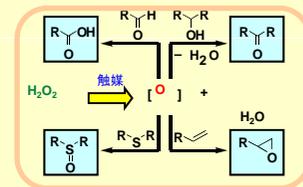
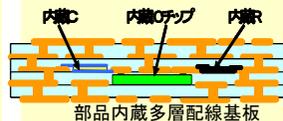


過酸化水素酸化によるノンハロ材料製造

・過酸化水素による選択的新酸化法により有害なハロゲン、重金属等を用いないで、これまでにないクリーン材料製造

・生成物が目的物と水のみ

・リサイクルが容易な材料



高分子固定化触媒によるグリーン化

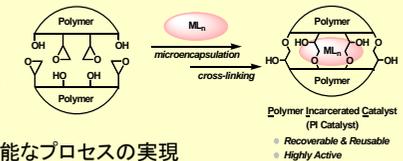
・パラジウム、オスmium、ルテニウム、金、白金等貴金属の繰り返し利用が可能。

・水素化反応、カップリング反応、アリル化など汎用的な製品製造への展開が可能

・金属の漏出の抑制

による廃棄物削減

及び回収・再使用可能なプロセスの実現



研究内容

○研究開発課題(目的達成のための技術課題)

持続的に高機能な素材・部材を製造するためのプロセスのクリーン化を実現するため、下記の①~③の技術課題を解決できる、独創的で革新的な化学プロセスの技術開発を行う。

①有害な化学物質を削減、使わない革新的プロセス及び化学品の開発、②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発、③その他:①~②以外の研究開発テーマで、社会状況等の緊急性を勘案して、産業競争力強化、大きな波及効果が期待できる革新的なプロセス及び化学品に関する技術

○キーテクノロジー、ブレークスルーのポイント、オリジナリティ

上記の研究開発課題を早期に実現するため、新規な触媒、溶媒、加熱方法等を開発し、持続的でクリーンな製造が実現できる独創的なプロセスを開発する。

・水、イオン性流体、 CO_2 中で高選択性、高収率を示す触媒、及びプロセスの開発等

・ハロゲン、酸・塩基、重金属を用いない、排出しないプロセス、素材、部材の開発

・低品位原料等を用いたシンプルで、有害物質ができないプロセス、素材、部材の開発

○目標値(技術水準)とその条件及び設定理由(根拠)

目標:①使用溶媒、使用化合物を50%以上削減、及びライフサイクルに亘り30%以上の省エネ効果、又は安全性、軽量化、超寿命化の大幅な改善、②e-ファクターの大幅な低減、又は廃棄物、排水量等の50%以上削減、及びライフサイクルに亘り30%以上の廃棄物削減、又はリサイクル率、軽量化、超寿命化の大幅な改善、③①、②の目標と同等以上で、顕著な効果(副生成物削減、省エネ効果、超寿命化、軽量化、リサイクル率等)の数値目標を設定。

技術戦略マップ上の位置付け

本年度から化学プロセス、素材・部材のプロセスイノベーション、マテリアルイノベーションを実現するために「グリーン・サステナブルケミストリー」に関する技術戦略マップを新たに作成中

事前評価書(案)

		作成日	平成20年 2月29日
1. 事業名称	「グリーン・サステナブル・ケミカルプロセス創造的基盤技術開発」		
2. 推進部署名	バイオテクノロジー・医療技術開発部		
3. 事業概要	<p>(1)概要:</p> <p>本事業では、わが国の強みとされる高度素材・部材開発におけるプロセスのシンプル化、クリーン化、原材料・資源の多様化を図って、産業競争力強化、国際規制の先取りを図るものである。想定される研究開発課題としては、①有害な化学物質を削減、使わない②廃棄物、副生成物を削減、③リサイクルが容易、④ライフサイクルでの消費エネルギー削減、⑤希少資源の代替、⑥未利用／低品位資源を用いる等の問題点を解決し、持続的に高機能な素材・部材が製造できる独創的なプロセスの開発である。テーマの選定に際しては、社会状況、GSC 技術戦略ロードマップの策定状況を勘案して NEDO 技術開発機構、経済産業省が政策的に重要と判断した研究開発テーマを優先的に実施し、高機能な素材・部材開発におけるプロセスイノベーションやマテリアルイノベーションを早期に実現することを目的とする。</p> <p>(2)平成 20 年度予算額:6 億円(予定)</p> <p>(3)事業期間:平成 20 年度～平成 27 年度(8 年間)</p>		
4. 評価の検討状況			
(1)事業の位置付け・必要性			
①事業自体の必要性			
<p>地球温暖化問題、資源枯渇問題が現実化しつつある中、地球及び人類のサステナビリティ(持続性)をいかに確保しつつ、かつ将来も持続的に高機能な素材、部材を生産、供給できるかが喫緊の課題となっている。欧州では RoHS、REACH の導入、米国ではグリーンケミストリーの大統領表彰の創設、中国などでは自主的な排出規制の制定など、化学品製造プロセスに関わる環境対策が強化されている。実際、国内メーカーの海外進出において、有害物質の利用、廃溶剤の多さから、操業停止に追い込まれる企業が出ている。また、これまでは素材・部材の高機能化を過度に追求するあまり、プロセスの多段化によるエネルギー消費の増大、廃棄物の激増、原材料の確保に伴う製造コスト(特に後処理)の高騰が起こってきている。今後、わが国の全製造業を支えるためには、高機能な素材、部材の開発が不可欠であり、有害な化学物質を削減、使用しない、リサイクルが容易、未利用な資源を利用できる等、独創的なプロセスによる素材、部材の開発が急がれる。本事業は、これらの問題点を根本的に解消し、日本の産業競争力の強化の源泉となるプロセス基盤技術の保有を後押しする革新的な技術開発である。</p>			
②上位政策との関係から見た位置付け			
本事業は、第3期科学技術基本方針の重点推進4分野のうちのものづくり技術分野に位置づけら			

れる。また、基本方針の中で、目指すべき国の姿として「国際競争力があり持続的発展ができる国」と示されており、本事業の目的はこれと合致する。さらに、本事業は平成 19 年度の総合科学技術会議において S 評価「特に重点的に実施すべき」を受けた新規事業であり、優先的に実施すべきテーマとなっている。

NEDO 技術開発機構、経済産業省が策定した技術戦略マップ 2007 では、化学物質総合評価管理分野における「過酸化水素酸化によるノンハロゲン化」、「水溶性触媒による水系溶媒」、「マイクロリアクター等によるプロセスのシンプル化及び高速化」、「イオン液体による高選択グリーン化」、部材分野の「反応強化用技術(高効率、高選択反応)」、CO₂ 固定化・有効利用分野の「CO₂ 有効利用技術」などが関連する。さらに、技術戦略マップ 2008 に追加予定の「グリーン・サステイナブル・ケミストリープロセス」分野が関連する。

(2) 研究開発目標の妥当性

本事業では、以下の研究開発課題を克服する研究開発を行い、目標達成を目指す。

【研究開発課題】

①有害な化学物質を削減、使わない革新的プロセス及び化学品の開発

ハザードの大きな溶媒等を削減、使わないクリーンプロセス、及び有害物質を含まない 化学品を開発するために必要な水溶性触媒、無溶媒、親水性溶媒、相間移動触媒、有機合成の触媒化等を利用した革新的な技術

②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発

副原材料、廃棄物を大幅に削減できるクリーンプロセス、又はシンプルプロセスを利用した化学品を開発するために必要な酸化反応、エステル化等に利用できる新規触媒による革新的な技術

③その他

①～②以外の研究開発テーマで、社会状況等の緊急性を勘案して、産業競争力強化、大きな波及効果が期待できる革新的なプロセス及び化学品に関する技術

【研究開発目標】

本研究開発では、既存の化学品等の製造において、これまでにないシンプル化(高い原子効率)、クリーン化、原材料・資源の多様化・有効利用が実現できる新規プロセス、又は既存の化学品等に比べて、使用から廃棄にわたるライフサイクルにおいて、大幅な省エネ効果、廃棄物の減容化、容易なりサイクル等が実現できる新規な化学品の製造等など、今後、30年以上にわたって持続的に製造可能となるプロセスイノベーション、マテリアルイノベーションに資する革新的な研究開発を行う。研究開発目標は下記の通りである。

①有害な化学物質を削減、使わない革新的プロセス及び化学品の開発

- ・ハザードの大きな溶媒、化合物等の使用に対して50%以上の大幅な削減が見込める
- ・ライフサイクルに亘り30%以上を目安とした省エネ効果、又は安全性、軽量化、長寿命化の大幅な改善が見込めること

②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発

- ・e-ファクター(副生成物量(産業廃棄物量)/目的生成物量)の大幅低減、又は廃棄物、排水量等に対して50%以上の大幅な削減が見込める
- ・ライフサイクルに亘り30%以上を目安とした廃棄物の削減、又はリサイクル率(カスケードリサイクル含む)、軽量化、長寿命化の大幅な改善が見込めること

③その他

- ・①、②の研究開発項目に対する研究開発目標と同等以上とし、顕著な効果(副生成物削減、省エネ効果、長寿命化、軽量化、リサイクル率等)が期待できる数値目標が立てられること

などの項目において顕著な効果が期待できる目標を達成すると共に、他の項目(性能、コスト等)に対しても既存のプロセス、化学品の製造に対して同等レベル以上であること。

【研究開発目標の妥当性】

研究開発目標は共通基盤技術、実用化技術の確立の点から十分なものと想定されるが、本事業では独創的なGSCプロセスによる高機能な素材・部材製造に関する研究開発テーマが数多く提案されることが期待されることから、適宜、最新の技術情報、有識者のヒアリング等を通じて柔軟に研究開発目標の変更を行う。なお、採択時に研究開発テーマ毎に具体的な数値目標を設けることとする。

(3)研究開発マネジメント

①事前評価におけるマネジメント

NEDO 技術開発機構調査(H17)「化学産業における革新的技術戦略とロードマップ作成に関する先導調査」(次世代グリーン・サステナブルケミストリー技術開発)の中で、将来、国内の化学産業が持続的に高品位な化学製品を安定的に供給するためには、1)環境対応、2)規制の先取り、3)資源の枯渇、4)未利用資源、原料の多様化に対応した、安定供給、省資源・省エネルギー等が実現できる革新的な化学プロセスへの変革が求められていると提言されている。さらに、本年度は「グリーン・サステナブルケミストリーの体系化に関する戦略調査(戦略ロードマップの作成)」に関する最新動向調査を行い、今後、経済産業省、NEDO 技術開発機構が積極的に開発すべき技術戦略ロードマップを作成している。そのため、調査委託機関に、国、大学、研究機関、関係団体、民間企業等の学識経験者からなる研究会(委員長:NITE 理事長、東京大学名誉教授 御園生誠)を設置し、取り纏めを行っている。本事業では早期に実用化を実現するために必要な優れた技術開発スキームを構築するため、当該関連技術に関する調査結果を基本計画の策定及び事業の実施に反映させるものとする。

②研究開発におけるマネジメント

本研究開発は、経済産業省が、企業、民間研究機関、独立行政法人、大学等(委託先から再委託された研究開発実施者を含む)から公募によって研究開発実施予定者を選定後、共同研究契約等を締結する研究体を構築し、委託して実施する。

共同研究開発に参加する各研究開発グループの有する研究開発ポテンシャルを最大限に活用することにより効率的な研究開発の推進を図る観点から、研究体に経済産業省が委託先決定後に指名する研究開発責任者(プロジェクトリーダー)を置き、その下に研究者を可能な限り結集して効率的な研究開発を実施する。

本研究開発において、基礎的・基盤的研究開発であると判断される研究開発内容に示した共通基盤技術及び要素技術は委託により実施する。

経済産業省は、プロジェクトリーダーと密接な関係を維持しつつ、本研究開発の目的及び目標に照らして適切な運営管理を実施する。具体的には、外部有識者の意見を運営管理に反映させる他、プロジェクトリーダー等を通じてプロジェクトの進捗について報告を受けること等を行う。

また、経済産業省は、NEDO 技術開発機構が行う調査結果や専門的知見を活用し、NEDO 技術開発機構の協力を得ながら、本研究開発の運営管理を行う。

(4) 研究開発成果

本事業は、高度な素材・部材開発におけるプロセスのクリーン化、シンプル化、原材料の多様化等を図り、産業国際競争力の強化、国際規制の先取りを目指すものである。想定される研究開発課題である、過酸化水素酸化プロセス、アクアファクトリープロセス(水系触媒利用技術、高分子担持触媒)等、技術戦略ロードマップにおける GSC 分野の策定プロセスを通じて NEDO 技術開発機構、経済産業省が政策的に重要と判断した独創的なプロセスによる持続的で、高機能な素材・部材の製造が可能となるプロセスイノベーションやマテリアルイノベーションの早期実現を図る。

これにより、開発成果を欧米はじめ諸外国の取組に先んじて出すことで、我が国全体の産業競争力強化と環境負荷低減を飛躍的に促進することができ、新産業創造戦略及び世界全体をリードした産業面・環境面でのサステイナブルな仕組み作りへの貢献が期待できる。

(5) 実用化・事業化の見込み

本事業の成果を適用することによって期待される経済波及効果は、素材・部材分野(電子材料、医薬中間体等)、環境分野(無害化、リサイクル)等において 1.4~1.8 兆円程度と見込まれる。また、本事業の成果により、ファインケミカル等の製造プロセスにおける消費エネルギーの削減、E-ファクターの低減が期待され、2030 年における酸、アルカリ、重金属等で 243 万トンの削減効果、ナフサ、石油製品 1100 万トンの削減効果が期待できる。

(6) その他特記事項

本事業は、欧州、米国、中国等における研究開発動向に留意し、適宜関係者間(国内外を問わず)との連携を図りつつ、効率的なプロジェクト運営に努める。

5. 総合評価

本プロジェクトは、ナショナルプロジェクトとして適切であると判断する。

特許論文等リスト

◆高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発（分子研）

【まとめ】特許、論文、外部発表等の件数（内訳）

年度	特許出願**			論文		外部発表		受賞
	国内	外国	PCT*出願	査読付き	その他	外部発表	新聞掲載	
H 2 1 年度	2	0	1	15	0	25	0	2
H 2 2 年度	4	1	3	20	0	34	0	1
H 2 3 年度	1	0	2	23	0	71	4	5

【産業財産権（特許）】

H 2 1 年度

番号	出願日	出願番号	発明名称	発明者	出願人
1	2009(H21) 年 2 月 12 日	特願 2009-29548- (P2009-29548) 特開2010- 184890 (P2010- 184890A)	カルボニル化合物の製法	魚住泰広、 大迫隆男	自然科学研究機構
2	2009(H21) 年 10 月 26 日	特願 2009-245275	ヨードベンゼン誘導体及びそれを用いた光学活性スピロラクトン化合物の製法	石原一彰、 ウヤヌク ムハメット	名古屋大
3	2010(H22) 年 3 月 3 日	PCT/JP2010/05344 2 日本国移行：特願 2011-503782	カルボン酸無水物の製造方法及びア リールボロン酸化合物	石原一彰、 坂倉彰	名古屋大

H 2 2 年度

番号	出願日	出願番号	発明名称	発明者	出願人
1	2010(H22) 年 4 月 15 日	PCT/JP2010/056735	高分子担持触媒及びこの触媒を用いた芳香族性ヘテロ化合物の製造方法	魚住泰広、 大黒一美、 平井義則	自然科学研究機構
2	2010(H22) 年 7 月 1 日	特願 2010-150999	β -アミノカルボニル化合物の製法	石原一彰、 波多野学、 堀部貴大	名古屋大
3	2010(H22) 年 10 月 14 日	PCT/JP2010/068031 優先権主張：特願 2009-245275	ヨードベンゼン誘導体及びそれを用いた光学活性スピロラクトン化合物の製法	石原一彰、 ウヤヌク ムハメット	名古屋大
4	2010(H22) 年 10 月 22 日	特願 2010-237228	エステル製造方法	石原一彰、 波多野学	名古屋大

特許論文等リスト

5	2010(H22) 年 11 月 2 日	特願 2010-245944	ラクトンの製法	石原一彰、 Muhammet Uyanik	名古屋大
6	2011(H23) 年 2 月 18 日	特願 2011-033808	窒素原子又は酸素原子を含む環構造 を有する芳香族化合物の製造方法	石原一彰、 Muhammet Uyanik	名古屋大
7	2011(H23) 年 3 月 4 日	台湾 100107298	α -アシロキシカルボニル化合物の 製法及び新規な α -アシロキシカル ボニル化合物	石原一彰、 Muhammet Uyanik	名古屋大
8	2011(H23) 年 3 月 4 日	PCT/JP2011/55043	α -アシロキシカルボニル化合物の 製法及び新規な α -アシロキシカル ボニル化合物	石原一彰、 Muhammet Uyanik	名古屋大

H 2 3 年度

番号	出願日	出願番号	発明名称	発明者	出願人
1	2011(H23) 年 6 月 22 日	PCT/JP2011/64220 優先権主張：特願 2010-150999	β -アミノカルボニル化合物の製法	石原一彰、 波多野学、 堀部貴大	名古屋大
2	2011(H23) 年 9 月 9 日	特願 2011-196789 優先権主張：特願 2010-237228	エステル製造方法	石原一彰、 波多野学	名古屋大
3	2011(H23) 年 10 月 11 日	PCT/JP2011/73340 優先権主張：特願 2010-245944	エステルの製法	石原一彰、 Muhammet Uyanik	名古屋大

【論文】

H 2 1 年度

番号	発表 年月 日	発表誌	論文タイトル	発表者	所属	査読
1	2009	Vol.5/1-5 Beil. J. Org.Chem	Oxidative cyclization of alkenols w ith Oxone using a miniflow reacto r	Yoichi M.A.Yamada, Kaoru Torii, and Yasuhiro Uozumi	分子研	有
2	2009	Vol.4/1092- 1098 Chem. Asian J.	An Amphiphilic Resin-dispersion of Nanoparticles of Platinum (ARP- Pt): A Highly Active and Recyclable Catalyst for the Aerobic Oxidation of a Variety of Alcohols in Water	Yoichi M.A.Yamada, Takayasu Arakawa, Heiko Hocke, and Yasuhiro Uozumi	分子研	有
3	2009	Vol.38/902- 903 Chem. Lett.	Aquacatalytic Aerobic Oxidation of Benzylic Alcohols with a Self- supported Bipyridyl-Palladium Complex	Takao Osako and Yasuhiro Uozumi	分子研	有
4	2009	5594-5596 Chem. Comm.	Catalytic membrane-installed microchannel reactors for one- second allylic arylation	Yoichi M.A.Yamada, Toshihiro Watanabe, Kaoru Torii, and	分子研	有

特許論文等リスト

				Yasuhiro Uozumi		
5	2009	Vol.9/51-65 The Chemical Record	Development of an Amphiphilic Resin-Dispersion of Nanopalladium and Nanoplatinum Catalysts: Design, Preparation, and Their Use in Green Organic Transformations	Yoichi M.A.Yamada, Yasuhiro Uozumi	分子研	有
6	2009	Vol.131/7086- 7093 J.Am.Chem.S oc	Effect of Electronic Structures of Au Clusters Stabilized by Poly(N-vinyl-2-pyrrolidone) on Aerobic Oxidation Catalysis	H. Tsunoyama, N. Ichikuni, H. Sakurai, T. Tsukuda	分子研	有
7	2009	Vol.38/908- 909 Chem. Lett.	Intramolecular Addition of Toluenesulfonamide to Unactivated Alkenes Catalyzed by Gold Nanoclusters under Aerobic Conditions	H. Kitahara, I. Kamiya, H. Sakurai	分子研	有
8	2009	Vol.131/251- 262 J. Am. Chem. Soc.	2-Iodoxybenzenesulfonic Acid as an Extremely Active Catalyst for the Selective Oxidation of Alcohols to Aldehydes, Ketones, Carboxylic Acids, and Enones with Oxone	M. Uyanik, M. Akakura, K. Ishihara	名古屋 大	有
9	2009	Vol.11/3470- 3473 Org. Lett.	IBS-Catalyzed Oxidative Rearrangement of Tertiary Allylic Alcohols to Enones with Oxone	M. Uyanik, R. Fukatsu, K. Ishihara	名古屋 大	有
10	2009	Vol.19/3848- 3851 Bioorg. Med. Chem. Lett.	Hypervalent iodine-catalyzed oxylactonization of ketocarboxylic acids to ketolactones	M. Uyanik, T. Yasui, K. Ishihara	名古屋 大	有
11	2010	Vol.80/505- 514 Heterocycles	A Self-Supported Palladium-Bipyridyl Catalyst For The Suzuki-Miyaura Coupling in Water	Takao Osako and Yasuhiro Uozumi	分子研	有
12	2010	Vol.66/1064- 1069 Tetrahedron	Copper-Free Sonogashira coupling in water with an amphiphilic resin-suppoorted palladium complex	Toshimasa Suzuka, Yukari Okada, Kazumasa Ooshiro, Yasuhiro Uozumi	分子研	有
13	2010	Vol.39/46-48 Chem. Lett.	Gold Nanocluster as a Catalyst for Intramolecular Addition of Primary Amines to Unactivated Alkenes under Aerobic Conditions	H. Kitahara, H. Sakurai	分子研	有
14	2010	Vol.5/456-460 Chem. Asian J.	Bromine Catalyzed Aerobic Oxidation of Alcohols	M. Uyanik, R. Fukatsu, K. Ishihara	名古屋 大	有
15	2010	Vol.49/2175- 2177 Angew. Chem. Int. Ed.	Enantioselective Kita Oxidative Spirolactonization Catalyzed by In Situ Generated Chiral Hypervalent Iodine(III) Species	M. Uyanik, T. Yasui, K. Ishihara	名古屋 大	有

H22年度

番	発表	発表誌	論文タイトル	発表者	所属	査読
---	----	-----	--------	-----	----	----

特許論文等リスト

号	年月日					
1	2010	Vol.5/1788-1789 Chem. Asian J.	Heterogeneous Aromatic Amination of Aryl Halides with Arylamines in Water with PS-PEG Resin-Supported Palladium Complexes	Y. Hirai, Y. Uozumi	分子研	有
2	2010	1988-1989 Synlett	Green Chemistry - A New Paradigm of Organic Synthesis	Yasuhiro Uozumi	分子研	有
3	2010	Vol.16/11311-11319 Chem. Eur. J	Palladium Membrane-Installed Microchannel Devices for Instantaneous Suzuki-Miyaura Cross-Coupling	Yoichi M.A.Yamada, Toshihiro Watanabe, Kaoru Torii, and Yasuhiro Uozumi	分子研	有
4	2010	Vol.12/4540-4543 Org. Lett.	H ₂ O ₂ -Oxidation of Alcohols Promoted by Polymeric Phosphotungstate Catalysts	Yoichi M.A.Yamada, Chung Keun Jin, and Yasuhiro Uozumi	分子研	有
5	2010	Vol.75/4626-1628 J. Org. Chem.	Stereoselective Cyclotrimerization of Enantiopure Iodonorbornenes Catalyzed by Pd Nanoclusters for C ₃ or C _{3v} Symmetric syn-Tris(norborneno)benzenes	S. Higashibayashi, A. F. G. Masud Reza, H. Sakurai	分子研	有
6	2010	Vol.82/2005-2016 Pure Appl. Chem.	Formal Lewis Acidic Character of Gold Nanocluster Catalyst	H. Sakurai, I. Kamiya, H. Kitahara	分子研	有
7	2010	Vol.39/1174-1176 Chem. Lett.	N-formylation of Amines Catalyzed by Nanogold Under Aerobic Oxidation Conditions with MeOH or Formalin	P. Preedasuriyachai, H. Kitahara, W. Chavasiri, H. Sakurai	分子研	有
8	2011	Vol.696/442-449 J. Organomet. Chem.	Catalytic Activity of Gold Nanoclusters in Intramolecular Hydroamination of Alkenes and Alkynes with Toluenesulfonamide under Aerobic and Basic Conditions	H. Kitahara, H. Sakurai	分子研	有
9	2011	Vol.16/149-161 Molecules	Magnetically Recoverable Magnetite/Gold Catalyst Stabilized by Poly(N-vinyl-2-pyrrolidone) for Aerobic Oxidation of Alcohols	H. W. Chen, A. Murugadoss, T. S. A. Hor, H. Sakurai	分子研	有
10	2011	Vol.6/736-748 Chem. Asian J.	Aerobic Oxidations Catalyzed by Colloidal Nanogold	T. Tsukuda, H. Tsunoyama, H. Sakurai	分子研	有
11	2010	Vol. 5/456-460 Chem. Asian. J.	Bromine-catalyzed aerobic oxidation of alcohols	Muhammet Uyanik, Ryota Fukatsu, Kazuaki Ishihara	名古屋大	有
12	2010	Vol. 66/5841-5851 Tetrahedron	Chiral hypervalent iodine-catalyzed enantioselective oxidative Kita spirolactonization of 1-naphthol	Muhammet Uyanik, Takeshi Yasui, Kazuaki Ishihara	名古屋大	有

特許論文等リスト

			derivatives and one-pot diastereoselective oxidation to epoxy Spirolactones			
13	2010	Vol. 328/1376–1379 Science	Quaternary ammonium (hypo)iodite catalysis for enantioselective oxidative cycloetherification	Muhammet Uyanik, Hiroaki Okamoto, Takeshi Yasui, Kazuaki Ishihara	名古屋大	有
14	2011	Vol. 13/426–429. Org. Lett.	Ligand-assisted rate acceleration in lanthanum(III) isopropoxide-catalyzed transesterification of carboxylic esters	Manabu Hatano, Yoshiro Furuya, Takumi Shimmura, Kastuhiko Moriyama, Sho Kamiya, Toshikatsu Maki, Kazuaki Ishihara	名古屋大	有
15	2011	Vol. 13/430–433 Org. Lett.	Lanthanum(III) isopropoxide-catalyzed chemoselective transesterification of dimethyl carbonate and methyl carbamates	Manabu Hatano, Sho Kamiya, Katsuhiko Moriyama, Kazuaki Ishihara	名古屋大	有
16	2011	Vol. 13, ASAP Org. Lett.	Brønsted base-assisted boronic acid catalysis for the dehydrative intramolecular condensation of dicarboxylic acids	Akira Sakakura, Takuro Ohkubo, Risa Yamashita, Matsujiro Akakura, Kazuaki Ishihara	名古屋大	有
17	2010	Vol. 46/737–744 ファルマシア	プロセス化に耐えうるエステル化及びアミド合成の開発	石原一彰	名古屋大	有
18	2010	Vol. 52/497–502 触媒	超原子価ヨウ素触媒を用いるアルコールの選択的酸化反応の開発	石原一彰	名古屋大	有
19	2010	Vol. 43/83–91 Aldrichimica Acta	2-Iodoxybenzenesulfonic acid (IBS) catalyzed oxidation of alcohols	Muhammet Uyanik, Kazuaki Ishihara	名古屋大	有
20	2011	Vol. 29/18–21. Chimica Oggi–Chemistry Today	In situ-generated chiral quaternary ammonium (hypo)iodite catalysis for enantioselective oxidative cyclizations	Muhammet Uyanik, Kazuaki Ishihara	名古屋大	有

H23年度

番号	発表年月日	発表誌	論文タイトル	発表者	所属	査読
1	2011	0787-0790 Synlett	Tandem Olfen Migration-Aldol Condensation in Water with an Amphiphilic Resin-Supported Ruthenium Complex	Yohei Oe and Yasuhiro Uozumi	分子研	有

特許論文等リスト

2	2011	Vol.50/876-4878 Angew. Chem. Int. Ed.	Molecular-architecture-Based Administration of Catalysis in Water: Self-Assembly of an Amphiphilic Palladium Pincer Complex	G.Hamasaka, T.Muto, Y.Uozumi	分子研	有
3	2011	Vol. 1/19-25 Green and Sustainable Chemistry	Recovery of in situ-generated Pd Nanoparticles with Linear Polystyrene	Atsushi Ohtaka, Ryoza Kuroki, Takuto Teratani, Tsutomu Shinagawa, Go Hamasaka, Yasuhiro Uozumi, Osamu Shimomura, Ryoki Nomura	分子研	有
4	2011	Vol.40/934-935 Chem. Lett.	C-N and C-S Bond Forming Cross Coupling in Water with Amphiphilic Resin-supported Palladium Complexes	Yoshinori Hirai, and Yasuhiro Uozumi	分子研	有
5	2011	Vol.6/2545-2549 Chem.Asian J.	Highly Active Copper-Network Catalyst for the Direct Aldol Reaction	Hidetoshi Ohta, Yasuhiro Uozumi and Yoichi M. A. Yamada	分子研	有
6	2011	Vol.40/8859-8868 Dalton Trans	A novel amphiphilic pincer palladium complex: design, preparation and self-assembling behavior	Go Hamasaka, Tsubasa Muto and Yasuhiro Uozumi	分子研	有
7	2011	Vol.13/3892-3895 Org. Lett.	In-Water Dehydrative Alkylation of Ammonia and Amines with Alcohols by a Polymeric Bimetallic Catalyst	Hidetoshi Ohta, Yoshinari Yuyama, Yasuhiro Uozumi and Yoichi M. A. Yamada	分子研	有
8	2011	Vol.50/9437-9441 Angew. Cham. Int. Ed.	A Highly Active and Reusable Self-Assembled Poly(Imidazole/Palladium) Catalyst: Allylic Arylation/ Alkenylation	Shaheen M. Sarkar, Yasuhiro Uozumi, and Yoichi M. A. Yamada	分子研	有
9	2011	Vol.52/2633-2637 Tetrahedron Lett.	Gold- and Gold-Palladium/Poly(1-vinylpyrrolidin-2-one) Nanoclusters as Quasi- Homogeneous Catalysts for Aerobic Oxidation of Glycerol	S. Yudha S., R. N. Dhital, H. Sakurai	分子研	有
10	2011	1121-1124 Synlett	Aerobic Oxidation of Cyclic Amines to Lactams Catalyzed by PVP-stabilized Nanogold	P. Preedasuriyachai, W. Chavasiri, H. Sakurai	分子研	有
11	2011	Vol.341/1-6 J. Mol. Catal. A: Chemical	Chitosan-Stabilized Gold, Gold-Palladium, and Gold-Platinum Nanoclusters as Efficient Catalysts for Aerobic Oxidation of Alcohols	A. Murugadoss, H. Sakurai	分子研	有

特許論文等リスト

12	2011	Vol.40/1445-1446 Chem. Lett.	Synthesis of Aromatic Polyketones Bearing 1,1'-Binaphthyl-2,2'-dioxy Units through Suzuki-Miyaura Coupling Polymerization	K. Maeyama, T. Tsukamoto, M. Suzuki, S. Higashibayashi, H. Sakurai	分子研	有
13	2011	Vol.50(23)/5331-5334 <i>Angew. Chem. Int. Ed</i>	In situ generated (hypo)iodite catalysts for the direct α -oxyacylation of carbonyl compounds with carboxylic acids	Muhammet Uyanik, Daisuke Suzuki, Takeshi Yasui, Kazuaki Ishihara	名古屋大	有
14	2011	Vol.353(11-12)/1938-1942 <i>Adv. Synth. Catal</i>	Desymmetrization of meso glycerol derivatives induced by L-histidine-derived acylation catalysts	Akira Sakakura, Syuhei Umemura, Kazuaki Ishihara	名古屋大	有
15	2011	Vol.64(11)/1458-1465 <i>Austr. J. Chem</i>	Intramolecular dehydrative condensation of dicarboxylic acids with Brønsted base-assisted boronic acid catalysts	Akira Sakakura, Risa Yamashita, Takuro Ohkubo, Matsujiro Akakura, Kazuaki Ishihara	名古屋大	有
16	2011	152-161 ヨウ素の化学と最新応用技術 シーエムシー出版	第16章 超原子価ヨウ素触媒を用いる選択的酸化反応(Up-to-date Chemistry & Technological Application of Iodine)	石原一彰	名古屋大	有
17	2011	Vol.4(2)/177-185 <i>ChemCatChem</i>	Catalysis with in situ-generated (hypo)iodite ions for oxidative coupling reactions	Muhammet Uyanik, Kazuaki Ishihara	名古屋大	有
18	2011	Vol.5/293-299 <i>ChemSusChem</i>	Development of Polymeric Pd Nanoparticle Membrane-Installed Microflow Devices and Their Application in Hydrodehalogenation	Y. M. A. Yamada, T. Watanabe, A. Ohno, and Y. Uozumi	分子研	有
19	2012	Vol.134/3190-3198 <i>J. Am. Chem. Soc.</i>	Self-Assembled Poly(imidazole-palladium): Highly Active, Reusable Catalyst at Parts per Milion to Parts per Billion Levels	Yoichi M.A.Yamada, Shaheen M. Sarkar, and Yasuhiro Uozumi	分子研	有
20	2012	Vol.7/55-59 <i>Chem. Asian J</i>	Dual Roles of Polyhydroxy Matrices for Homocoupling of Arylboronic Acid Catalysed by Gold Nanoclusters Under Acidic Conditions	R. N. Dhital, A. Murugadoss, H. Sakurai	分子研	
21	2012	Vol.89/105-114 <i>Org. Synth</i>	2-Iodoxy-5-methylbenzenesulfonic acid-catalyzed selective oxidation of 4-bromobenzyl alcohol to 4-bromobenzaldehyde or 4-bromobenzoic acid with oxone	Muhammet Uyanik, Kazuaki Ishihara	名古屋大	有
22	2012	Vol.14(1)/30-	Hydrophobic <i>N,N</i> -diarylammonium	Akira Sakakura,	名古屋	有

特許論文等リスト

		33 <i>Org. Lett.</i>	pyrosulfates as dehydrative condensation catalysts under aqueous conditions	Yoshiki Koshikari, Matsujiro Akakura, Kazuaki Ishihara	大	
23	2012	Vol.86(1)/3-10 <i>科学と工業</i>	工業化を指向した触媒的エステル交換反応の開発	波多野学, 石原一彰	名古屋大	有

【外部発表】

H 2 1 年度

番号	発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者	所属
1	2009.4.21	TLO Academic Seminar	cat. I(V)/Oxone を用いるアルコール酸化反応、cat. Zn(II)/RMgX を用いるアルコールの不斉合成、La(III)触媒を用いる官能基選択的エステル交換反応	石原一彰	名古屋大
2	2009.7.7	13th International IUPAC Conference on Polymers and Organic Chemistry	Catalytic Membrane-Installed Microchannel Reactors For Instantaneous Cross-Coupling Reactions	Yasuhiro Uozumi	分子研
3	2009.8.3	JSPS Asian CORE Program China-Japan Joint Symposium	Catalyst immobilization via molecular convolution	Yasuhiro Uozumi	分子研
4	2009.8.3	International Conference on Green and Sustainable Chemistry	Gold Cluster as a Unique Catalyst under Aerobic Condition	Hidehiro Sakurai	分子研
5	2009.8.4	The International Conference on Green and Sustainable Chemistry	2-Iodoxybenzenesulfonic acid (IBS) as an Extremely Active Catalyst for the Selective Oxidation of Alcohols to Aldehydes, Ketones, Carboxylic Acids, and Enones with Oxone®	Kazuaki Ishihara	名古屋大
6	2009.8.28	The 4th International Conference of Concerto Catalysis	Heterogeneous Catalytic Organic Transformations in Water with Amphiphilic Resin-Supported Complexes	Yasuhiro Uozumi	分子研
7	2009.9.4	テクノフェア名大2009	選択的有機合成のための高機能触媒の開発	Kazuaki Ishihara	名古屋大
8	2009.9.14	4th International workshop on Chemistry, Polymers, Chemical Technology and Biotechnology for a Sustainable Future	Catalyst Immobilization via Molecular Convolution	Yasuhiro Uozumi	分子研
9	2009.9.15	13th Asian Chemical Congress	Gold Cluster as a Unique Catalyst under Aerobic Condition	Hidehiro Sakurai	分子研
10	2009.9.16	The 26th Seminar on Synthetic Organic Chemistry	Rational Design of Highly Functional Acid-Base Combined Catalysts	Kazuaki Ishihara	名古屋大
11	2009.9.18	第 26 回有機合成化学セミナー	高分子担持錯体による水中触媒的不斉合成	魚住 泰広	分子研

特許論文等リスト

12	2009.9.21	The 2nd International Symposium on Combinatorial Sciences in Biology, Chemistry, Catalysts and Materials (SCS 09) Sept. 19-23,2009	Cross-Coupling Catalyses with PS-PEG Resin-Supported Palladium Complexes	Yasuhiro Uozumi	分子研
13	2009.9.25	Combinatorial Chemistry and Chemical Biology toward A New Paradigm for Drug Discovery	Catalytic Membrane-Installed Microchannel Reactors for High-Throughput Cross-Coupling Reactions	Yasuhiro Uozumi	分子研
14	2009.10.6	Department of Chemistry, hosted by Professor Pauline Chiu, The University of Hong Kong, Hong Kong	Rational Design of Highly Functional Acid-Base Combined Catalysts	Kazuaki Ishihara	名古屋大
15	2009.10.7	Department of Chemistry, hosted by Professor Chun-Yu Jason Ho, The Chinese University of Hong Kong	Rational Design of Highly Functional Acid-Base Combined Catalysts	Kazuaki Ishihara	名古屋大
16	2009.10.8	Department of Chemistry, hosted by Professor Zhihong Guo, The Hong Kong University of Science and Technology	Rational Design of Highly Functional Acid-Base Combined Catalysts	Kazuaki Ishihara	名古屋大
17	2009.10.19	IUPAC 5th International Symposium on Novel Materials and Synthesis 19th International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers	Catalyst Immobilization via Molecular Convolution	Yasuhiro Uozumi	分子研
			Gold Cluster as a Unique Catalyst under Aerobic Condition	Hidehiro Sakurai	分子研
18	2009.10.24	The 14th Japan-Korea Seminar on Organic Chemistry	Chiral lithium(I)-binaphtholate complexes for the diastereo- and enantioselective direct Mannich-type reaction	Kazuaki Ishihara	名古屋大
19	2009.10.30	第12回ヨウ素学会シンポジウム	超原子価ヨウ素触媒を用いるアルコールの選択的酸化反応	石原一彰	名古屋大
20	2009.11.10	The 11th International Kyoto Conference on New Aspects of Organic Chemistry	Hypervalent iodine-catalyzed enantioselective oxidative cycloethrification of 3-(2-hydroxyphenyl)propan-1-ones to 2,3-dihydrobenzobenzofuran-2-carbonyl derivatives	Kazuaki Ishihara	名古屋大
21	2009.11.19	有機合成化学講習会有機合成化学の社会的意義	超原子価ヨウ素触媒を鍵とする酸化反応の開発とその後の展開	石原一彰	名古屋大

特許論文等リスト

22	2009.11.30	第3回物質科学フロンティアセミナー	ナノサイズの金が示す特異な触媒活性	櫻井 英博	分子研
23	2009.12.7	新化学発展協会先端化学技術部会講演会	超原子価ヨウ素触媒を用いるアルコールの酸化反応	石原一彰	名古屋大
24	2009.12.10	International Conference on Advanced Nanomaterials and Nanotechnology	Gold Cluster as a Unique Catalyst under Ambient Condition	Hidehiro Sakurai	分子研
25	2009.12.11	Novel Catalytic Systems with Polymer-Supported Palladium Complexes	Catalyst Immobilization via Molecular Convolution	Yasuhiro Uozumi	分子研

H 2 2年度

番号	発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者	所属
1	2010.4.8	25th Philippine Chemistry Congress	Gold Nanocluster as a Unique Catalyst under Aerobic Condition	Hidehiro Sakurai	分子研
2	2010.4.21	CPhI JAPAN 2010(国際医薬品原料・中間体展)、Exhibition Catalogue 2010, pp. 10	TLO Academic Seminar: エステル交換触媒、カルボン酸の脱水縮合触媒、不斉超原子価ヨウ素触媒	石原一彰	名古屋大
3	2010.5.21	BIT's 1st Annual World of Congress of Catalytic Asymmetric Synthesis 2010	Enantioselective oxidative cyclizations catalyzed by chiral hypervalent iodines	Kazuaki Ishihara	名古屋大
4	2010.5.28	公開講演会 協和発酵キリン株式会社 富士サーチパーク創薬化学研究所	超原子価ヨウ素触媒研究の展開	石原一彰	名古屋大
5	2010.6.8	創造機能化学講演会	水中で有機反応は可能かー不均一パラジウム触媒による精密化学変換ー	魚住 泰広	分子研
6	2010.7.3	第22回万有札幌シンポジウム 構築的有機合成化学：医療そして材料科学の未来へ	水中不均一での不斉 Pd 触媒反応	魚住 泰広	分子研
7	2010.7.5	3rd international Conference on Hypervalent Iodine Chemistry (ICHIC2010)	Hypervalent Iodine-Catalyzed Enantioselective Oxidative Cyclizations	Kazuaki Ishihara	名古屋大
8	2010.7.6	第43回有機金属若手の会夏の学校	水中不均一での Pd 触媒反応	魚住 泰広	分子研
9	2010.7.12	Inaugural (1st) International Conference on Molecular & Functional Catalysis (ICMFC-1)	Cyclotrimerization of Haloalkenes Catalyzed by Pd Nanoclusters and its Application to Asymmetric Synthesis of Chiral Buckybowls	Shuhei Higashibayashi, Hidehiro Sakurai	分子研
10	2010.7.14	NIMS 2010 Conference Challenges of Nanomaterials Science:	Organic Molecular Transformations in Water with Recyclable Transition Metal Catalysts	Yasuhiro Uozumi	分子研

特許論文等リスト

		towards the Solution of Environment and Energy Problems			
11	2010.9.9	公開講演会 大日本住友製薬株式会社プロセス化学研究所	超原子価ヨウ素触媒を用いる精密有機合成法の開拓	石原一彰	名古屋大
12	2010.9.21	公開講演会 積水メディカル岩手工場	酸・塩基複合型機能触媒の設計	石原一彰	名古屋大
13	2010.9.22	第3回有機触媒シンポジウム	有機触媒を用いるエナンチオ選択的カップリング反応	石原一彰	名古屋大
14	2010.9.22	McGill-RIKEN Scientific Workshop on Nanotechnology and Green Chemistry	Organic Molecular Transformations in Water with Recyclable Transition Metal Catalysts	Yasuhiro Uozumi	分子研
15	2010.9.25	China-Japan Symposium on Catalytic Organic Synthesis	Colloidal Nanogold as a Catalyst for Intramolecular Heterocyclization under Aerobic Conditions	Hidehiro Sakurai	分子研
16	2010.9.26	China-Japan Symposium on Catalytic Organic Synthesis	Asymmetric Suzuki-Miyaura Coupling in Water with Polymer-Supported Palladium Complexes	Yasuhiro Uozumi	分子研
17	2010.10.3	Japan-Korea Symposium on Organometallic Chemistry	Asymmetric Suzuki-Miyaura Coupling in Water with a Chiral Palladium Catalyst Supported on an Amphiphilic Resin	Yasuhiro Uozumi	分子研
18	2010, 10, 8	The Fourth International Forum on Homogeneous Catalysis and the First China-Canada Bilateral Symposium on Catalysis	Hypervalent Iodine-Catalyzed Enantioselective Oxidative Cyclizations	Kazuaki Ishihara	名古屋大
19	2010.10.15	第40回複素環化学討論会	金ナノクラスター触媒を用いたアルケンの分子内ヒドロアルコキシ化反応およびヒドロアミノ化反応	櫻井 英博, 北原宏朗, 神谷育代	分子研
20	2010.11.6	第37回中部化学関係学協会支部連合秋季大会	キラリヨウ素触媒を用いる不斉酸化のカップリング反応	石原一彰	名古屋大
21	2010.12.3	2010 ウィンターシンポジウム	クリーン有機合成を実現する水中機能性固定化遷移金属触媒	魚住 泰広	分子研
22	2010.12.6	水科学ワークショップ「水を知る、水を活かす、水を創る」	水中での触媒的有機化学合成	魚住 泰広	分子研
23	2010.12.6	The XIV Organic Chemistry Conference (OCC), The National Organic Symposium Trust (NOST)	Hypervalent Iodine-catalyzed Enantioselective Oxidative Cyclizations	Kazuaki Ishihara	名古屋大
24	2010.12.15	2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies	Asymmetric Suzuki-Miyaura coupling	Yasuhiro Uozumi	分子研

特許論文等リスト

25	2010.12.16	2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies	Instantaneous cross-coupling using catalytic membrane-installed microchannel devices	Yasuhiro Uozumi	分子研
26	2010.12.16	Pacificchem2010	Enantioselective direct Mannich-type reaction catalyzed by chiral lithium complexes	Kazuaki Ishihara, Manabu Hatano, Takahiro Horibe	名古屋大
27	2010.12.17	2010 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies	Heterogeneous catalytic asymmetric synthesis in water with polymeric palladium complexes	Yasuhiro Uozumi	分子研
28	2010.12.18	Pacificchem2010	Hypervalent iodine-catalyzed enantioselective oxidative cycloetherification of 3-(2-hydroxyphenyl)propan-1-ones to 2,3-dihydrobenzofuran-2-carbonyl derivatives	Kazuaki Ishihara, Muhammad Uyanik, Takeshi Yasui, Hiroaki Okamoto	名古屋大
29	2011.1.11	公開講演会 第一三共株式会社製薬技術本部	酸・塩基複合化学を基盤にする高機能触媒の設計	石原一彰	名古屋大
30	2011.1.28	Special Seminar at Cardiff University	Hypervalent Iodine-catalyzed Enantioselective Oxidative Cyclizations	Kazuaki Ishihara	名古屋大
31	2011.2.1	The Symposium of Catalysis and Sensing for Health (CAS) 11	Hypervalent Iodine Catalyses	Kazuaki Ishihara	名古屋大
32	2011.3.10	Science Forum 2011, Chulalongkorn University	Matrix Effect in the quasi-Homogeneous Nanogold Catalysis	Hidehiro Sakurai	分子研
33	2011.3.17	Nagoya University Global COE-RCMS International Symposium on Organic Chemistry and the 7 th Yoshimasa Hiarata Memorial Lecture	Rational Design of Asymmetric Cu(II) Catalyses Based on π - or n-Cation Interactions	Kazuaki Ishihara	名古屋大
34	2011.3.27	ACS 241st National Meeting	Colloidal nanogold as a catalyst for intramolecular heterocyclization under aerobic conditions	Hidehiro Sakurai	分子研

H23年度

番号	発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者	所属
1	2011.5.6	PERCH-CIC VII	Matrix Effect in the quasi-Homogeneous Nanogold Catalyst	Hidehiro Sakurai	分子研
2	2011.6.2	第11回GSCシンポジウム	水中エステル脱水縮合に有効な硫酸アンモニウム超分子塩触媒の開発	越後良樹、坂倉彰、石	名古屋大

特許論文等リスト

				原一彰	
3	2011.6.2	第 11 回 G S C シンポジウム	安価、安定、低毒性な硝酸ランタンを触媒とするエステル交換反応	波多野学、神谷渉、石原一彰	名古屋大
4	2011.6.27	25 th National Chemistry Congress with International Participation (Turkish Chemical Society)	Hypervalent Iodine-Catalyzed Enantioselective Oxidative Cyclizations	M. Uyanik	分子研
5	2011.7.2	第 23 回万有札幌シンポジウム 有機化学の深化と多様化	元素戦略に基づく酸・塩基複合触媒の精密設計	石原一彰	名古屋大
6	2011.7.5	14th Asian Chemical Congress	Bimetallic Gold/Palladium Nanoclusters Catalyze the Suzuki-Miyaura-Type Reaction of Chloroarene at Room Temperature	Hidehiro Sakurai	分子研
7	2011.7.12	The 23rd International Symposium on Chiral Discrimination (ISCD 23)	Asymmetric Hypervalent Iodine Catalyses	Kazuaki Ishihara	名古屋大
8	2011.7.14	hosted by Professor Mike Shipman, Department of Chemistry, The University of Warwick, Warwick, United Kingdom	Hypervalent Iodine-catalyzed Enantioselective Oxidative Cyclizations	Kazuaki Ishihara	名古屋大
9	2011.7.25	OMCOS 16	Development of a Vesicular Catalyst Based on Self-Assembly of an Amphiphilic Pincer Palladium Complex	Go Hamasaka, Tsubasa Muto, Yasuhiro Uozumi	分子研
10	2011.7.25	OMCOS 16	Dual Roles of Poly-hydroxy Matrices for Homo-coupling of Arylboronic Acids Catalyzed by Gold Nanoclusters under Aqueous Acidic Conditions.	Raghu Nath Dhital, Arumugum Murugado ss, Hidehiro Sakurai	分子研
11	2011.7.25	OMCOS 16	Bimetallic Gold/Palladium Nanoclusters Catalyze the Suzuki-Miyaura Cross-Coupling Chloroarenes at Room Temperature	Reghu Nath Dital and Hidehiro Sakurai	分子研
12	2011.7.25	OMCOS 16	Intramolecular Hydroamination of Unactivated Alkenes Catalyzed by	Hiroaki Kitahara	分子研

特許論文等リスト

			Colloidal Nanogold	and Hidehiro Sakurai	
13	2011.7.2 5	OMCOS 16	Selective α -Oxygenation of Heterocyclic Amines Catalyzed by Gold Nanoclusters	P. Preedasuri yachai, W. Chavasiri, and Hidehiro Sakurai	分子 研
14	2011.9.2	テクノフェア名大 2011	人工酵素への挑戦：レディメイドからテラーメイドへ	石原一彰	名古 屋大
15	2011.9.7	The 14th Asian Chemical Congress	Water: as a Medium of Organic Transformations	Yasuhiro Uozumi	分子 研
16	2011.9.8	The 14th Asian Chemical Congress	Efficient Organic Transformations in Water with Polymer-Supported Transition Metal Catalysits	Yasuhiro Uozumi	分子 研
17	2011.9.8	The 14th Asian Chemical Congress	Catalytic Organic Transformations in Water	Yasuhiro Uozumi	分子 研
18	2011.9.9	hosted by Professor Hendrik Zipse, LMU Munich, Munich, Germany	Asymmetric Hypervalent Iodine Catalyses	Kazuaki Ishihara	名古 屋大
19	2011.9.1 2	The 22 nd French– Japanese Symposium of Medicinal and Fine Chemistry (FJS-2011)	Advanced Hypervalent Iodine Catalyses	Kazuaki Ishihara	名古 屋大
20	2011.9.1 5	XV. International Symposium on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis	Bimetallic Gold/Palladium Nanoclusters Catalyze the Suzuki-Miyaura Cross-Coupling of Chloroarenes at Room Temperature	Hidehiro Sakurai	分子 研
21	2011.9.1 5	XV. International Symposium on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis	Intramolecular Hydroamination of Unactivated Alkenes Catalyzed by Colloidal Nanogold	Satoru Onogi, Hidehiro Sakurai	分子 研
22	2011.9.1 5	hosted by Professor Jieping Zhu, EPFL, Lausanne, Switerland	Asymmetric Hypervalent Iodine Catalyses	Kazuaki Ishihara	名古 屋大
23	2011.9.1 7	第4回有機触媒シンポジウム	水中脱水エステル縮合に有効な超分子ピロ硫酸アンモニウム塩触媒	坂倉彰、越 飯良樹、石 原一彰	名古 屋大
24	2011.10. 2	The 15 th Korea–Japan Seminar on Organic Chemistry	Asymmetric Hypervalent Iodine Catalyses	Kazuaki Ishihara	名古 屋大
25	2011.10.	7 th IUPAC International	Unique Reactivity of Gold/Palladium	Hidehiro	分子

特許論文等リスト

	17	Symposium on Novel Materials and their Synthesis and 21th International Symposium on Fine Chemistry and Functional Polymers	Bimetallic Nanoclusters toward the Suzuki-Miyaura-Type Coupling Reaction	Sakurai	研
26	2011.10.21	International Conference on Advanced Materials and Nanotechnology	Bimetallic Gold/Palladium Nanoclusters Catalyze the Suzuki-Miyaura Cross-Coupling Chloroarenes at Room Temperature under Aqueous Conditions	Hidehiro Sakurai	分子研
27	2011.10.21	第5回物質科学フロンティアセミナー	超分子硫酸アンモニウム塩触媒を用いた水中エステル縮合法の開発	越後良樹、坂倉彰、赤倉松次郎、石原一彰	名古屋大
28	2011.10.22	International Conference on Advanced Materials and Nanotechnology	Matrix Effect in the quasi-Homogeneous Nanogold Catalys	Hidehiro Sakurai	分子研
29	2011.10.31	Hosted by Chi-Wi Ong, Department of Chemistry, National Sun Yat-Sen University, Kaohsiung, Taiwan, Republic of China	Acid-Base Combination Chemistry for Catalytic Dehydrative Condensation Reaction	A. Sakakura	名古屋大
30	2011.11.2	Hosted by Shang-Cheng Hung, Genomics Research Center, Academia Sinica, Taipei, Taiwan, Republic of China	Acid-Base Combination Chemistry for Catalytic Dehydrative Condensation Reaction	A. Sakakura	名古屋大
31	2011.11.3	Hosted by Biing-Jiun Uang, Department of Chemistry, National Tsing Hua University, Hsinchu, Taiwan, Republic of China	Acid-Base Combination Chemistry for Catalytic Dehydrative Condensation Reaction	A. Sakakura	名古屋大
32	2011.11.4	Hosted by Hsyueh-Liang Wu, Department of Chemistry, National Taiwan Normal University, Taipei, Taiwan, Republic of China	Acid-Base Combination Chemistry for Catalytic Dehydrative Condensation Reaction	A. Sakakura	名古屋大
33	2011.11.8	グリーン・サステイナブルケミストリー(GSC)講演会	高分子固定化触媒による不均一水中有機プロセスの開発	魚住泰広	分子研
34	2011.11.11	名古屋大学新技術説明会 医薬品・医薬中間体・農薬、科学技術振興機構	エステル、ラクトン、カルボン酸無水物の新しい触媒的製造法	石原一彰	名古屋大

特許論文等リスト

35	2011.11.15	第2回ものづくりを革新する新しい触媒研究会：有機分子触媒からクロスカップリング金属触媒まで	レディメイド小分子触媒からテーラーメイド超分子触媒への新展開	石原一彰	名古屋大
36	2011.11.17	第8回触媒相模セミナー	水中での有機分子変換を実現する高分子担持遷移金属触媒	魚住泰広	分子研
37	2011.11.17	千葉大学理学部4号館1階マルチメディア1、ホスト：荒井孝義教授	酵素を凌駕する動的超分子触媒の設計	石原一彰	名古屋大
38	2011.11.18	第14回ヨウ素学会シンポジウム	求核性リン(III)化合物を用いる触媒的ヨード環化反応の開発	坂倉彰、仲辻秀文、澤村泰弘、石原一彰	名古屋大
39	2011.11.28	Nagoya University Global COE International Symposium on Elucidation and Design of Materials and Molecular Functions & 7 th and 8 th Yoshimasa Hirata Memorial Lectures	Design of hydrophobic N,N-diarylammonium pyrosulfate catalysts for dehydrative esterification reactions under aqueous conditions	Y. Koshikari, A. Sakakura, M. Akakura and K. Ishihara	名古屋大
40	2011.12.4	The 3 rd Asia-Oceania Conference on Green and Sustainable Chemistry	Development of Dehydrative Ester Condensation under Aqueous Conditions Catalyzed by Hydrophobic N,N-Diarylammonium Sulfates	Y. Koshikari, A. Sakakura, M. Akakura and K. Ishihara	名古屋大
41	2011.12.9	International Symposium on EcoTopia Science 2011 (ISETS11)	Hydrophobic N,N-Diarylammonium Pyrosulfates as Dehydrative Condensation Catalysts under Aqueous Conditions	A. Sakakura	名古屋大
42	2011.12.19	第22回万有仙台シンポジウム 有機合成化学における新物質・新手法・新思想	超原子価ヨウ素触媒	石原一彰	名古屋大
43	2011.12.20	積水メディカル岩手工場	酵素を凌駕する動的超分子触媒の設計	石原一彰	名古屋大
44	2011.12.30	8 th AFMC International Medicinal Chemistry Symposium (AIMECS11) "Frontier of Medicinal Science", Organized by: Asian Federation for Medicinal Chemistry (AFMC)	Asymmetric Hypervalent Iodine Catalyses	K. Ishihara	名古屋大
45	2012.01.09	2 nd Molecular Materials Meeting	Matrix and Dopant Effects on Quasi-Homogeneous Gold Nanoclusters Catalyst	Hidehiro Sakurai	分子研

特許論文等リスト

			in Aqueous Media		
46	2012.1.3 1	AstraZeneca Excellence in Chemistry Award 2011 – Symposium	Conformationally Flexible Supramolecular Catalysts	Kazuaki Ishihara	名古屋大
47	2012.2.1	hosted by Prof. Santanu Mukherjee, Department of Organic Chemistry, Indian Institute of Science (IISc)	Conformationally Flexible Supramolecular Catalysts	Kazuaki Ishihara	名古屋大
48	2012.2.2	Ulf Widengren Auditorium, AstraZeneca India Pvt Ltd	Asymmetric Hypervalent Iodine Catalyses	Kazuaki Ishihara	名古屋大
49	2012.2.2	有機合成のニュートレンド 2012	高分子担持 Pd 触媒を用いた水中有機合成	魚住泰広	分子研
50	2012.2.3	hosted by Prof. Choon Hong Tan, National University of Singapore	Conformationally Flexible Supramolecular Catalysts	Kazuaki Ishihara	名古屋大
51	2012.2.4	8th CRC International Symposium on Organometallics & Catalysis	Recent Progress in the Suzuki-Miyaura Coupling: Green, Flow, Asymmetric Catalytic Systems.	Yasuhiro Uozumi	分子研
52	2012.2.2 0	The Winter School of Asian-Core Program in Beijing: "Self-assembly and Function of Molecular Materials: Experiment and Theory"	Asymmetric Sonogashira Coupling with a Chiral Palladium Imidazoindole Phosphine Complex	Haifeng Zhou, Yasuhiro Uozumi	分子研
53	2012.3.1 9	理研セミナー (ホスト: 袖岡有機合成化学研究室)	配座柔軟性を活かした超分子不斉触媒の設計	石原一彰	名古屋大
54	2012.3.2 3	プロセス化学セミナー, CPhI Japan	超原子価ヨウ素触媒を用いる低環境負荷型有機変換反応の開拓	石原一彰	名古屋大
55	2012.3.2 5	日本化学会第 92 春季年会	DFT 計算を用いた金ナノクラスターによるメタノール酸化の反応機構解析	Sangita, Karanjit・櫻井 英博・BOBUATONG, Karan・福田 良一・江原 正博	分子研
56	2012.3.2 5	日本化学会第 92 春季年会	金/パラジウム合金クラスター触媒による新形式のカップリング反応	櫻井 英博・DHITAL, Raghu Nath・KAMONSATIKUL,	分子研

特許論文等リスト

				Choavarit ・ SOMSOOK, Ekasith	
57	2012.3.2 5	日本化学会第 92 春季年会	ブレンステッド塩基複合型ボロン酸触媒を用いる α -ヒドロキシカルボン酸のアミド縮合	山下莉沙、 坂倉彰、石 原一彰	名古屋大
58	2012.3.2 5	日本化学会第 92 春季年会	水中エステル脱水縮合反応に有効なピロ硫酸 N,N-ジアリールアンモニウム塩触媒とその応用	越俣良樹、 坂倉彰、石 原一彰	名古屋大
59	2012.3.2 5	日本化学会第 92 春季年会	安価な硝酸ランタン-ホスホニウム塩複合触媒を用いるエステル交換反応	神谷渉、波 多野学、石 原一彰	名古屋大
60	2012.3.2 6	日本化学会第 92 春季年会	光学活性パラジウム-イミダゾールホスフィン錯体による不斉菌頭カップリング	周 海峰・ 魚住泰広	分子研
61	2012.3.2 6	日本化学会第 92 春季年会	カップリング反応のための自己組織化高分子イミダゾールパラジウム触媒	山田陽一、 Shaheen M. Sarkar、魚 住泰広	分子研
62	2012.3.2 6	日本化学会第 92 春季年会	A self-assembled poly(imidazole-copper) catalyst for Huisgen cycloaddition	SARKAR Shaheen M.・山田陽 一・魚住泰 広	分子研
63	2012.3.2 7	日本化学会第 92 春季年会	キラル銅錯体によるフェノール類 O-H 結合へのエナンチオ選択的カルベノイド挿入反応	大迫隆男・ PANICHAKUL , Duanghatha i・魚住泰広	分子研
64	2012.3.2 7	日本化学会第 92 春季年会	ポリマー酸触媒導入型マイクロリアクターの開発: アセタール類のフロー合成	皆川真規、 山田陽一、 魚住泰広	分子研
65	2012.3.2 7	日本化学会第 92 春季年会	高分子パラジウムナノ粒子複合膜導入型マイクロリアクターの開発と水素化脱ハロゲン化反応への応用	大野 綾、 渡部 敏 裕、山田 陽一、魚住 泰広	分子研
66	2012.3.2 7	日本化学会第 92 春季年会	キラル (次) 亜ヨウ素酸塩触媒を用いるエナンチオ選択的酸化的エーテル環化反応による光学活性 2-アシルクロマン誘導体の合成	林裕樹、 Uyanik, Muhamme t、石原一 彰	名古屋大
67	2012.3.2 7	日本化学会第 92 春季年会	キラル (次) 亜ヨウ素酸塩触媒を用いるエナンチオ選択的分子内酸化的アミノ化反応を鍵とする光学活性 2-アシルピロリジン合成	鈴木大介、 Uyanik, Muhamme t、石原一 彰	名古屋大
68	2012.3.2	日本化学会第 92 春季年会	キラル超原子価ヨウ素(III)触媒と m-CPBA	安井猛、	名古屋大

特許論文等リスト

	7		を用いるフェノール類のエナンチオ選択的北スピロラクトン化反応	Uyanik, Muhammet、石原一彰	屋大
69	2012.3.27	日本化学会第 92 春季年会	IBS 触媒と Oxone を用いる芳香族化合物の酸化反応	六鹿達矢、Uyanik, Muhammet、石原一彰	名古屋大
70	2012.3.27	日本化学会第 92 春季年会	アルカリ・アルカリ土類金属塩を触媒とする過酸化水素によるバイヤー・ビリガー酸化反応	中島大輔、Uyanik, Muhammet、石原一彰	名古屋大
71	2012.3.31	日本薬学会第 132 年会 (2012)	カップリング反応に有効な自己組織化高分子イミダゾールパラジウム触媒の開発	山田陽一、Shaheen M. Sarkar、魚住泰広	分子研

【新聞掲載】

H 2 1 年度

無し

H 2 2 年度

無し

H 2 3 年度

番号	発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者
1	2011. 4. 7	化学工業日報	「日産化学 新規酸化触媒 治験薬向け相次ぎ採用 大学から導入の高活性 2 種 技術普及に弾み」 日産化学工業が導入した IBS 酸化技術の実用化に関するニュース	石原一彰
2	2011. 4	SYNFACTS	“Brønsted base-assisted boronic acid catalysis for the dehydrative intramolecular condensation of dicarboxylic acids” <i>Org. Lett.</i> 2011 , <i>13</i> (5), 892–895 の研究業績紹介	石原一彰
3	2011. 9. 16	日刊工業新聞	「ポリマー樹脂などの原料、低コストで安全に合成、金属触媒や効果な共酸化剤不要」	石原一彰
4	2011. 12 . 15	中日新聞	「水中で働く新触媒 名大院教授ら 酵素ヒントに開発」 <i>Org. Lett.</i> 2011 , in press の研究業績紹介	石原一彰

【受賞】

H 2 1 年度

特許論文等リスト

番号	受賞年月日	主催者名	受賞名称	受賞件名	受賞者
1	2009.9.16	the Society of Synthetic Organic Chemistry, Japan	The 5 th Mukaiyama Award	The rational design of highly functional acid - base combined catalysts	Kazuaki Ishihara
2	2010.2.4	財団法人井上科学振興財団	井上學術賞	水中での不均一触媒による精密有機変換反応の開発	魚住 泰広

H 2 2 年度

番号	受賞年月日	主催者名	受賞名称	受賞件名	受賞者
1	2011. 2. 4	財団法人 井上科学振興財団	第27 回井上學術賞	酸・塩基複合化学を基盤とする高機能動的錯体触媒の設計	石原一彰

H 2 3 年度

番号	受賞年月日	主催者名	受賞名称	受賞件名	受賞者
1	2011. 6	GSCネットワーク	GSC Student Travel Grant Award	水中エステル脱水縮合に有効な硫酸アンモニウム超分子塩触媒の開発	越仮良樹
2	2011. 11	万有生命科学振興国際交流財団	Banyu Chemist Award (BCA)	酸・塩基協奏作用を鍵とする高次機能塩触媒の創製	波多野学
3	2011. 11	有機合成化学協会	中部化学関係学会支部連合大会特別討論会優秀賞	1P01 安価、安定、低毒性な高活性硝酸ランタン塩触媒による無着色エステル交換反応	神谷渉
4	2011. 2	有機合成化学協会	有機合成化学協会有機合成化学奨励賞	酸・塩基協奏型高次機能塩触媒による高効率分子変換反応の開拓	波多野学
5	2011. 2	有機合成化学協会	有機合成化学協会日本触媒研究会企画賞	オニウム塩触媒を用いる低コスト環境低負荷型エステル交換反応の開発	波多野学

特許論文等リスト

◆革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発（東大グループ）

【まとめ】特許、論文、外部発表等の件数（内訳）

年度	特許出願**			論文		外部発表		受賞
	国内	外国	PCT*出願	査読付き	その他	外部発表	新聞掲載	
H. 21FY	3	0	0	0	0	11	0	0
H. 22FY	1	0	0	6	0	20	3	0
H. 23FY	3	0	0	11	0	27	4	0

【産業財産権（特許）】

H 2 1 年度

番号	出願日	出願番号	発明名称	発明者	出願人
1	2009. 7. 15	特願 2009-166474	水中脱水縮合反応方法及びその方法に用いる触媒	小林修、森雄一朗、内藤武詩、江夏寛人、奥村吉邦、五十嵐威史	東京大学、昭和電工
2	2010. 1. 22	特願 2010-012109	水中の有機酸回収方法	小林修、森雄一朗、内藤武詩、東寅吉、奥村吉邦、五十嵐威史	東京大学、昭和電工
3	2010. 3. 11	特願 2010-054619	オスミウム担持触媒組成物の製造方法	小林修、秋山良、大野桂二、三宅寛	東京大学、和光純薬工業

H 2 2 年度

番号	出願日	出願番号	発明名称	発明者	出願人

未公開特許として、東京大学と昭和電工の共願で国内出願 1 件。

H 2 3 年度

番号	出願日	出願番号	発明名称	発明者	出願人

未公開特許として、東京大学と昭和電工の共願で国内出願 3 件（うち国内優先出願 1 件）。

特許論文等リスト

【論文】

H21年度

無し

H22年度

番号	発表年月日	発表誌	論文タイトル	発表者	所属	査読
1	2010	J. Am. Chem. Soc., 132, 15096-15098	Remarkable Effect of Bimetallic Nanocluster Catalysts for Aerobic Oxidation of Alcohols: Combining Metals Changes the Activities and the Reaction Pathways to Aldehydes/Carboxylic Acids or Esters	K. Kaizuka, H. Miyamura, S. Kobayashi	東京大学	有
2	2011	J. Am. Chem. Soc., 133, 3095-3103	Polymer-Incarcerated Gold-Palladium Nanoclusters with Boron on Carbon: A Mild and Efficient Catalyst for the Sequential Aerobic Oxidation-Michael Addition of 1,3-Dicarbonyl Compounds to Allylic Alcohols	W.-J. Yoo, H. Miyamura, S. Kobayashi	東京大学	有
3	2011	Chem. Asian J., 6, 621-627	Rate-Acceleration in Gold-Nanocluster-Catalyzed Aerobic Oxidative Esterification Using 1,2- and 1,3-Diols and Their Derivatives	T. Yasukawa, H. Miyama, S. Kobayashi	東京大学	有
4	2010	Chem. Commun., 46, 8052-8054	In Situ Coupled Oxidation Cycle Catalyzed by Highly Active and Reusable Pt-Catalysts: Dehydrogenative Oxidation Reactions in the Presence of a Catalytic Amount of o-Chloranil Using Molecular Oxygen as the Terminal Oxidant	H. Miyamura, K. Maehata, S. Kobayashi	東京大学	有
5	2010	Chem. Lett., 39, 652-653	Silver Oxide as a Novel Catalyst for Carbon-Carbon Bond-Forming Reactions in Aqueous Media	M. Ueno, A. Tanoue, S. Kobayashi	東京大学	有
6	2010	Synlett., 2010, 2033-2036	Copper(II) and Bismuth(III) Hydroxide-catalyzed Addition Reactions of Hydrazonoester with Allenylboronate in Aqueous Media	S. Kobayashi, M. Ueno	東京大学	有

特許論文等リスト

H23年度

番号	発表年月日	発表誌	論文タイトル	発表者	所属	査読
1	2012	<i>Can. J. Chem.</i> , 90 , 306-313	Oxidative transformation of <i>N</i> -substituted 2-aminophenols to 2-substituted benzoxazoles catalyzed by polymer-incarcerated and carbonyl-stabilized platinum nanoclusters	W.-J. Yoo, H. Yuan, H. Miyamura, S. Kobayashi	東京大学	有
2	2012	<i>J. Flow Chem.</i> , 2 , 1-4	Multiphase Flow Systems for Selective Aerobic Oxidation of Alcohols Catalyzed by Bimetallic Nanoclusters	K. Kaizuka, K-Y. Lee, H. Miyamura, S. Kobayashi	東京大学	有
3	2012	<i>Top. Curr. Chem.</i> , 311 , 1-18	Bismuth Catalysts in Aqueous Media,	S. Kobayashi, M. Ueno, T. Kitanosono	東京大学	有
4	2011	<i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> , 50 , 12262-12265	Chiral Zinc-Catalyzed Asymmetric α -Alkylallylation and β -Chloroallylation of Aldehydes	S. Kobayashi, T. Endo, M. Ueno	東京大学	有
5	2011	<i>J. Am. Chem. Soc.</i> , 133 , 18550-18553	Powerful Amide Synthesis from Alcohols and Amines under Aerobic Conditions Catalyzed by Gold or Gold-Iron, -Nickel or -Cobalt Nanoparticles	J.-F. Soulé, H. Miyamura, S. Kobayashi	東京大学	有
6	2011	<i>Chem. Asian J.</i> , 6 , 2308-2311	Kinetics Studies of the Enantioselective Hydroxymethylation of Silicon Enolates Using Aqueous Formaldehyde in the Presence of Sc(OTf) ₃ and a Chiral 2,2'-Bipyridine Ligand	C. Mukherjee, T. Kitanosono, S. Kobayashi	東京大学	有
7	2011	<i>Org. Biomol. Chem.</i> , 9 , 3619-3621	Chiral Sc-Catalyzed Asymmetric Michael Reactions of Thiols with Enones in Water	M. Ueno, T. Kitanosono, M. Sakai, S. Kobayashi	東京大学	有
8	2011	<i>Kobunshi Ronbunshu</i> , 68 , 493-508	Aerobic Oxidation of Alcohols and Direct Oxidative Ester Formation Catalyzed by Polymer-	K. Kaizuka, H. Miyamura, S. Kobayashi	東京大学	有

特許論文等リスト

			Immobilized Bimetallic Nanocluster Catalysts			
9	2011	<i>Adv. Synth. Catal.</i> , 353 , 3085 - 3089	Facile Preparation of 2-Substituted Benzoxazoles and Benzothiazoles via Aerobic Oxidation of Phenolic and Thiophenolic Imines Catalyzed by Polymer-Incarcerated Platinum Nanoclusters	W.-J. Yoo, H. Yuan, H. Miyamura, S. Kobayashi	東京大学	有
10	2011	<i>Beilstein J. Org. Chem.</i> , 7 , 735-739	Continuous Flow Hydrogenation Using Polysilane-Supported Palladium/Alumina Hybrid Catalysts	H. Oyamada, T. Naito, S. Kobayashi	東京大学	有
11	2011	<i>Bull. Chem. Soc. Jpn.</i> , 84 , 588-599	Aerobic Oxidation of Amines Catalyzed by Polymer-Incarcerated Au Nanoclusters: Effect of Cluster Size and Cooperative Functional Groups in the Polymer	H. Miyamura, M. Morita, T. Inasaki, S. Kobayashi	東京大学	有

特許論文等リスト

【外部発表】

H21年度

番号	発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者	所属
1	2010. 3. 26-29	第90回日本化学会春季年会、大阪	アンモニウム塩触媒を用いる酢酸の水中エステル化反応の開発	五十嵐威史、東寅吉、奥村吉邦、内藤武詩、中條哲夫、森雄一郎、小林修	東京大学、昭和電工
2	2010. 3. 26-29	第90回日本化学会春季年会、大阪	高分子カルセランド型オスミウム触媒による不斉ジヒドロキシル化反応を用いるカンプトテシン合成中間体のスケールアップ合成	秋山良、小林修	東京大学
3	2010. 3. 26-29	第90回日本化学会春季年会、大阪	新規高分子カルセランド型オスミウム触媒の開発	三宅寛、秋山良、小林修	東京大学、和光純薬工業
4	2010. 3. 26-29	第90回日本化学会春季年会、大阪	ポリシラン担持パラジウム触媒を用いた連続流通反応の開発	赤塚裕一、沼田好幸、村越加奈子、村本育世、小山田秀和、小林修	東京大学、日光ケミカルズ
5	2010. 3. 26-29	第90回日本化学会春季年会、大阪	水中で働く表面モレキュラーインプリンティングRu触媒の調製	翁志換、邨次智、岩澤康裕、唯美津木	電気通信大学
6	2009. 9. 27-30	第104回触媒討論会、宮崎	水中で働く表面モレキュラーインプリンティング固定化Ru錯体触媒の設計	翁志換、邨次智、岩澤康裕、唯美津木	電気通信大学

H22年度

番号	発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者	所属
1	2011. 3	第91回日本化学会春季年会、神奈川	高分子固定化触媒を用いる酢酸とエタノールの水中エステル化反応	五十嵐威史、柳生大輔、奥村吉邦、中條哲夫、森雄一郎、小林修	東京大学、昭和電工
2	2011. 3	第91回日本化学会春季年会、神奈川	活性炭含有高分子カルセランド型パラジウム触媒の開発とカップリング反応への応用	秋山良、小林修	東京大学、和光純薬工業
3	2011. 3	第91回日本化学会春季年会、神奈川	ポリシラン担持パラジウム触媒を用いたフローシステムの新展開	赤塚裕一、沼田好幸、村越加奈子、村本育世、小山田秀和、小林修	東京大学、日光ケミカルズ

特許論文等リスト

4	2011.3	第91回日本化学会春季年会、神奈川県	高分子内包型金属ナノクラスター触媒を用いる1,3-ジカルボニル化合物の酸素酸化反応の開発	宮村浩之、小林修	東京大学
5	2011.3	第91回日本化学会春季年会、神奈川県	高分子カルセランド型二元金属ナノクラスター触媒を用いるアルコール類の高選択的酸素酸化反応	貝塚互輔、宮村浩之、小林修	東京大学
6	2011.3	第91回日本化学会春季年会、神奈川県	高活性ポリシラン担持型パラジウム触媒による鈴木-宮浦クロスカップリング	前畑佳納子、宮村浩之、小林修	東京大学
7	2011.3	第91回日本化学会春季年会、神奈川県	金ナノクラスター触媒による1,2-及び1,3-ジオールとその誘導体を用いた酸素酸化的エステル形成反応における反応速度促進効果	安川知宏、宮村浩之、小林修	東京大学
8	2011.3	第91回日本化学会春季年会、神奈川県	高分子カルセランド型金属ナノクラスター触媒による酸素酸化を用いた効率的なベンゾオキサゾール誘導体合成	ユウウージン、袁浩、宮村浩之、小林修	東京大学
9	2011.3	第91回日本化学会春季年会、神奈川県	高分子カルセランド型金属ナノクラスター触媒を用いた1級アルコールからの酸化的エチルエステル合成の開発	福里優、貝塚互輔、宮村浩之、小林修	東京大学
10	2011.3	第91回日本化学会春季年会、神奈川県	高分子カルセランド型二機能性触媒によるアリルアルコールへの1,3ジカルボニル化合物の酸素酸化-マイケル付加連続反応の開発	ユウウージン、宮村浩之、小林修	東京大学
11	2011.3	第91回日本化学会春季年会、神奈川県	キラルな水酸化亜鉛を触媒とする水系溶媒中でのアルデヒドの α -選択的不斉アリル化反応	遠藤俊充、上野雅晴、小林修	東京大学
12	2011.3	第91回日本化学会春季年会、神奈川県	水中での不斉炭素-炭素結合形成反応を指向した多機能触媒の設計と開発	北之園拓、酒井克、上野雅晴、小林修	東京大学
13	2011.3	第91回日本化学会春季年会、神奈川県	酸化鉄(I)を触媒とする水中でのアルデヒドに対するAntiおよび α -選択的アリル化反応	田上新、上野雅晴、小林修	東京大学
14	2010.5.13-15	ナノ学会第8回大会、岡崎	Fabrication of Nano-Sized Molecularly-Imprinted Reaction Space on Oxide Surface for Shape-Selective Asymmetric Transfer Hydrogenation in Water	Z. Weng、邨次智、岩澤康裕、唯美津木	電気通信大学
15	July 19-23, 2010	6 th TOCAT/APCAT, Sapporo	Preparation and Catalytic Performances of Surface Molecularly-Imprinted Ru-Complex Catalysts for Asymmetric Transfer Hydrogenation in Water	Z. Weng, S. Muratsugu, Y. Iwasawa, and M. Tada	電気通信大学

特許論文等リスト

H23年度

番号	発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者	所属
1	2011.12.6	The 3rd Asia-Oceania Conference on Green and Sustainable Chemistry (AOC-3), Melbourne	Asymmetric α -Selective Allylation of Aldehydes Catalyzed by Chiral Zinc-Bipyridine Complexes in Aqueous Media	T. Endo, M. Ueno, S. Kobayashi	東京大学
2	2011.12.5	The 3rd Asia-Oceania Conference on Green and Sustainable Chemistry (AOC-3), Melbourne	Development of Bifunctional Polymer Incarcerated Gold and Rhodium Catalysts for Tandem Oxidation/ α , β -addition Reactions	T. Yasukawa, H. Miyamura, S. Kobayashi	東京大学
3	2011.12.5	The 3rd Asia-Oceania Conference on Green and Sustainable Chemistry (AOC-3), Melbourne	Design and Development of Multifunctional Catalyst for Asymmetric Aldol Reactions in Water	T. Kitanosono, M. Ueno, S. Kobayashi	東京大学
4	2011.12.5	The 3rd Asia-Oceania Conference on Green and Sustainable Chemistry (AOC-3), Melbourne	Recovery of Acetic Acid from Waste Water in Chemical Plants by Using Aqueous Catalysts	Y. Mori, T. Igarashi, D. Yagyū, T. Naito, Y. Okumura, T. Nakajo, S. Kobayashi	東京大学、昭和電工
5	2011.7.7	創薬懇話会 2011、日本薬学会、岡山	固定化金属触媒を使用した環境にやさしい有機反応について	松澤 啓史	和光純薬工業
6	2011.3.26	日本化学会第 92 春季年会, 東京	分子状酸素を酸化剤として用いる金ナノクラスター触媒による β -ジカルボニル化合物の α 水酸化反応	宮村 浩之, 小林 修	東京大学
7	2011.3.26	日本化学会第 92 春季年会, 東京	金属ナノクラスターおよびカテコール誘導体を用いる金属酵素様酸素酸化反応系によるアミンの酸化反応	袁 浩, YOO, Woo-Jin, 宮村 浩之, 小林 修	東京大学
8	2011.3.26	日本化学会第 92 春季年会, 東京	ポリシラン固定化パラジウム触媒を用いた菌頭カップリング反応の開発	奥村 美樹子, 宮村 浩之, 小林 修	東京大学
9	2011.3.28	日本化学会第 92 春季年会, 東京	金及び金-鉄, -ニッケル, -コバルトナノ粒子触媒によるアルコールとアミンからの酸素酸化的アミド合成	SOULE, Jean-Francois, 宮村 浩之, 小林 修	東京大学

特許論文等リスト

10	2011. 3. 28	日本化学会第 92 春季年会, 東京	高分子固定化二元金属ナノクラスター触媒を用いた酸素酸化反応によるアルコールとアンモニア水溶液からの一級アミド合成	MIN, Hyemin, SOULE, Jean-Francois, 宮村浩之, 小林 修	東京大学
11	2011. 3. 28	日本化学会第 92 春季年会, 東京	高分子カルセランド型二元金属ナノクラスターを触媒とする酸化的直接エステル合成によるエタノールから酢酸エチル合成	貝塚 互輔, 福里 優, 宮村浩之, 小林 修	東京大学
12	2011. 3. 28	日本化学会第 92 春季年会, 東京	高分子固定化複合機能性金, ロジウムナノクラスター触媒による連続的酸素酸化/不斉1,4付加反応の開発	安川 知宏, 宮村 浩之, 小林修	東京大学
13	2011. 3. 28	日本化学会第 92 春季年会, 東京	二機能性不均一系触媒による連続的酸素酸化反応及び不斉マイケル付加反応の開発	CHOO, Chong Yu Gerald, 安川知宏, 宮村 浩之, YOO, Woo-Jin, 小林 修	東京大学
14	2011. 3. 27	日本化学会第 92 春季年会, 東京	水酸化亜鉛を触媒とする水系溶媒中でのアルデヒドの α -選択的アリル化反応の開発	遠藤 俊充, 上野 雅晴, 小林修	東京大学
15	2011. 3. 27	日本化学会第 92 春季年会, 東京	アリルホウ素を用いるアルデヒドのアリル化反応における溶媒効果	吉野 匠, 遠藤俊充, 上野 雅晴, 小林 修	東京大学
16	2011. 3. 27	日本化学会第 92 春季年会, 東京	酸化銀(I)を触媒とするアリルケイ素を用いる水中でのアルデヒドのアリル化反応	上野 雅晴, 小林 修	東京大学
17	2011. 3. 28	日本化学会第 92 春季年会, 東京	水系溶媒中での触媒的不斉向山アルドール反応	徐 鵬宇, 小林修, 北之園 拓	東京大学
18	2011. 3. 28	日本化学会第 92 春季年会, 東京	キラルスカンジウム触媒を用いる水中におけるチオールの不斉マイケル付加反応および不斉プロトン化反応	酒井 克, 北之園 拓, 上野 雅晴, 小林 修	東京大学
19	2011. 3. 28	日本化学会第 92 春季年会, 東京	多機能集約型触媒を用いた水中に於ける直截的不斉ヒドロキシメチル化反応の開発	北之園 拓, 上野 雅晴, 小林修	東京大学
20	2011. 3. 25	日本化学会第 92 春季年会, 東京	ポリシラン担持触媒を用いたフロー水素化反応システムの実用化研究	赤塚裕一, 沼田好幸, 小山田秀和, 小林 修	東京大学、日光ケミカルズ
21	2011. 3. 25	日本化学会第 92 春季年会, 東京	疎水性反応場を活用する酢酸とエタノールの水中エステル化反応の開発	柳生大輔, 森雄一朗, 五十嵐威史, 奥村吉邦, 中條哲夫, 小林修	東京大学、昭和電工
22	2011. 3. 25	日本化学会第 92 春季年会, 東京	酢酸とエタノールの水中エステル化反応における電解質の添加効果	森雄一朗, 柳生大輔, 大石哲生, 五十嵐威	東京大学、昭和電工

特許論文等リスト

				史、奥村吉邦、 中條哲夫、小林 修	
--	--	--	--	-------------------------	--

特許論文等リスト

【新聞掲載】

H21年度

無し

H22年度

番号	発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者
1	2010.10.4	化学工業日報	東大 アルコールから自在に作り分け 酸素酸化プロセス新触媒	東京大学
2	2010.10.7	日刊工業新聞	ナノクラスター触媒 酸化反応で制御実証 東大	東京大学
3	2010.11.11	日経産業新聞	化学品、廃棄物なく室温で合成、東大が技術、生産性・省エネ両立	東京大学

H23年度

番号	発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者
1	2011.6.15	化学工業日報	化粧品・医薬品原料製造向け低コスト新プロセス 東大-日光ケミカルズ 独自触媒で環境対応	東京大学
2	2011.7.18	日刊工業新聞	東大と日光ケミカルズ、医薬原料生産時の「水素化反応」新触媒で効率良く	東京大学
3	2011.10.31	日刊工業新聞	アミド化合物、縮合剤使わず収率9割超、触媒に金・コバルト、東大が新合成法	東京大学
4	2011.10.31	化学工業日報	アミド化合物、アルコール原料に合成、東大、金・コバルト触媒開発	東京大学

【受賞】

H21年度

無し

H22年度

無し

H23年度

無し

特許論文等リスト

◆革新的酸化プロセス基盤技術開発（産総研グループ）

【まとめ】特許、論文、外部発表等の件数（内訳）

年度	特許出願**			論文		外部発表		受賞
	国内	外国	PCT*出願	査読付き	その他	外部発表	新聞掲載	
H 2 1 年度	7	0	0	8	1	27	1	0
H 2 2 年度	9	3	3	6	1	24	0	0
H 2 3 年度	7	1	1	8	1	40	3	1

【産業財産権（特許）】

H 2 1 年度

番号	出願日	出願番号	発明名称	発明者	出願人
1	2009(H21) . 6. 18	特願2009-144798	スチレンオキシドの製造方法	今 喜裕、小野 豊、 佐藤一彦	産業技術総合研究所
2	2009(H21) . 7. 24	特願2009-172647	テルペン（モノ）オキサイドの製造方法	内匠清、笹川巨樹、 恵崎陽一郎、今 喜裕、 小野 豊、佐藤一彦	荒川化学工業、 産業技術総合研究所
3	2009(H21) . 8. 13	特願2009-187760	ポリグリシジルエーテル化合物の製造方法	内田博	昭和電工
4	2009(H21) . 9. 9	特願2009-207625	リモネンジオキサイドの製造方法	内匠清、笹川巨樹、 恵崎陽一郎、今 喜裕、 小野 豊、佐藤一彦	荒川化学工業、 産業技術総合研究所
5	2009(H21) . 9. 28	特願2009-221992	エポキシ化合物の製造方法	内匠清、笹川巨樹、 恵崎陽一郎、今 喜裕、 小野 豊、佐藤一彦	荒川化学工業、 産業技術総合研究所
6	2009(H21) . 12. 24	特願2009-292315	グリシジルエーテル化合物の製造方法	内田博、佐藤一彦、 千代健文	昭和電工、産業 技術総合研究所
7	2010(H22) . 10. 8	特願2010-002585	エキソメチレン部位を有する化合物のエポキシ化方法	内匠清、笹川巨樹、 恵崎陽一郎、今 喜裕、 小野 豊、佐藤一彦	荒川化学工業、 産業技術総合研究所

H 2 2 年度

番号	出願日	出願番号	発明名称	発明者	出願人
1	2010(H22) . 4. 23	特願2010-099342	エポキシ化重合体の製造方法	今 喜裕、服部初彦、 長峰高志、佐藤一彦、 大橋慶太、尾田 威、 石井 聡	電気化学工業、 産業技術総合研究所
2	2010(H22) . 5. 10	特願2010-108696	グリシジルエーテル化	内田博、新井良和、	昭和電工、産業 技術総合研究所

特許論文等リスト

			合物の製造方法及びモノアリアルモノグリシジルエーテル化合物	佐藤一彦、千代健文	
3	2010(H22) .5.21	特願2010-117110	スチレンオキシド化合物の製造方法	千代健文、今喜裕、佐藤一彦	産業技術総合研究所
4	2010(H22) .7.16	PCT/JP2010/062085 優先権主張 特願2009-172647 特願2009-207625 特願2009-221992 特願2010-002585 日本国内移行 特願2011-523644	エポキシ化合物の製造方法及び炭素-炭素二重結合のエポキシ化	内匠清、笹川巨樹、恵崎陽一郎、今喜裕、小野豊、佐藤一彦	荒川化学工業、産業技術総合研究所
5	2010(H22) .7.16	中国 201080031981.6 優先権主張 特願2009-172647 特願2009-207625 特願2009-221992 特願2010-002585	エポキシ化合物の製造方法及び炭素-炭素二重結合のエポキシ化方法	内匠清、笹川巨樹、恵崎陽一郎、今喜裕、小野豊、佐藤一彦	荒川化学工業、産業技術総合研究所
6	2010(H22) .10.28	特願2010-241586	液状硬化性組成物	池谷達宏、新井良和、福本直也、内田博	昭和電工
7	2010(H22) .11.25	特願2010-262230	半導体封止用硬化性組成物	小林孝充、内田博、佐藤光	昭和電工
8	2010(H22) .11.25	特願2010-262245	半導体封止用硬化性組成物	佐藤光、石橋圭孝、内田博	昭和電工
9	2010(H22) .11.30	特願2010-266996	グリシジルエーテル化合物の製造方法	石橋圭孝、内田博	昭和電工

上記の他に、未公開特許として、昭和電工と産業技術総合研究所の共願で、PCT が 1 件、外国出願が 1 件、昭和電工単願で、PCT が 1 件、国内出願 2 件、荒川化学と産業技術総合研究所の共願で、外国出願が 1 件。

H23年度

未公開特許として、産業技術総合研究所の単願で、国内出願 3 件、昭和電工の単願で、PCT が 1 件、外国出願が 1 件、国内出願 3 件、JNC の単願で、国内出願 1 件。

【論文】

H21年度

番号	発表年月日	発表誌	論文タイトル	発表者	所属	査読
1	H21.5	SYNLETT	An Effective Catalytic Epoxidation of Terpenes with Hydrogen Peroxide under Organic Solvent-Free	今喜裕、小野豊、松本朋浩、佐藤一彦	産総研	有

特許論文等リスト

			Conditions			
2	H21.5	CHEMISTRY LETTERS	Palladium(II)-Catalyzed Selective Oxidation of α, β -Unsaturated Aldehydes to α, β -Unsaturated Carboxylic Acids with Hydrogen Peroxide	今 喜裕、今尾太輔、中島拓哉、佐藤一彦	産総研	有
3	H22.3	荒川化学工業株式会社「環境・社会報告書 2009」	製品の環境配慮への取り組みの一環として本プロジェクトでの取り組みを紹介	内匠清、笹川巨樹、恵崎陽一郎	荒川化学	無
4	H21.5	<i>J. Am. Chem. Soc.</i>	Hydrogen-Bond-Assisted Epoxidation of Homoallylic and Allylic Alcohols with Hydrogen Peroxide Catalyzed by Selenium-Containing Dinuclear Peroxotungstate	K. Kamata, T. Hirano, S. Kuzuya, N. Mizuno	東京大学	有
5	H21.6	<i>Chem. Commun.</i>	Highly Efficient Oxidation of Sulfide with Hydrogen Peroxide Catalyzed by $[\text{SeO}_4\{\text{WO}(\text{O}_2)_2\}_2]^{2-}$	K. Kamata, T. Hirano, N. Mizuno	東京大学	有
6	H21.11	<i>Angew. Chem. Int.</i>	Highly Selective Oxidation of Organosilanes to Silanols with Hydrogen Peroxide Catalyzed by Lacunary Polyoxotungstate	R. Ishimoto, K. Kamata, N. Mizuno	東京大学	有
7	H22.2	<i>Inorg. Chem.</i>	Epoxidation of Alkenes with Hydrogen Peroxide Catalyzed by Selenium-Containing Dinuclear Peroxotungstate and Kinetic, Spectroscopic, and Theoretical Investigation of Mechanism	K. Kamata, R. Ishimoto, T. Hirano, S. Kuzuya, K. Uehara, N. Mizuno	東京大学	有
8	H21.8	<i>Chem. Mater.</i>	Mechanism of Formation of Uniform-Sized Silica Nanospheres Catalyzed by Basic Amino Acids	Toshiyuki Yokoi, Junji Wakabayashi, Yuki Otsuka, Wei Fan, Marie Iwama, Ryota Watanabe, Kenji Aramaki, Atsushi Shimojima, Takashi Tatsumi, Tatsuya Okubo	東京工業大学	有

特許論文等リスト

9	H21.6	<i>Microporous Mesoporous Mater.</i>	Effect of ammonium salts on the synthesis and catalytic properties of TS-1	Fan, Weibin; Fan, Binbin; Shen, Xiaohua; Li, Junfen; Wu, Peng; Kubota, Yoshihiro; Tatsumi, Takashi	東京工業 大学	有
---	-------	--------------------------------------	--	--	------------	---

H22年度

番号	発表年月日	発表誌	論文タイトル	発表者	所属	査読
1	H23.2	ペトロテック 34巻2号91- 95 ペー	環境共生化学を指向したノンハロゲン酸化プロセスの開発	今喜裕、佐藤一彦	産総研	無
2	H23.3	SYNTHESIS-STUTTGART	An Effective Synthesis of Acid-Sensitive Epoxides via Oxidation of Terpenes and Styrenes using Hydrogen Peroxide under Organic Solvent-free Conditions	今喜裕、蜂谷宝人、小野豊、松本朋浩、佐藤一彦	産総研	有
3	H22.6	<i>Nature Chem.</i>	Efficient Stereospecific and Regioselective Hydroxylation of Alkanes by All Inorganic Catalyst	K. Kamata, K. Yonehara, Y. Nakagawa, K. Uehara, N. Mizuno	東京大学	有
4	H22.12	<i>Angew. Chem. Int. Ed.</i>	Flexible Non-porous Heterogeneous Catalyst for Size-selective Oxidation	N. Mizuno, S. Uchida, K. Kamata, R. Ishimoto, S. Nojima, K. Yonehara, Y. Sumida	東京大学	有
5	H22.8	<i>Inorg. Chem.</i>	Sandwich-Type Zinc-Containing Polyoxometalates with a Hexaprismane Core $[\{Zn_2W(O)_3\}_2]^{4+}$ Synthesized by Thermally Induced Isomerization of a Metastable Polyoxometalate	Y. Kikukawa, K. Yamaguchi, N. Mizuno	東京大学	有
6	H22.8	<i>Angew. Chem. Int. Ed.</i>	Zinc(II) Containing μ -Keggin Sandwich-Type Silicotungstate: Synthesis in Organic Media and Oxidation Catalysis	Y. Kikukawa, K. Yamaguchi, N. Mizuno	東京大学	有
7	H22.6	<i>Chem. Mater.</i>	Synthesis of Mesoporous Silica	T. Yokoi, T.	東京工業	有

特許論文等リスト

			Nanospheres Promoted by Basic Amino Acids and their Catalytic Application	Karouji, S. Ohta, J. N. Kondo, T. Tatsu mi	大学	
--	--	--	---	--	----	--

H23年度

1	H23.9	未来材料	クリーン酸化技術による超寿命絶縁材料の開発 一触媒の開発から製品化まで	千代 健文、今喜裕、佐藤一彦	産総研	無
2	H23.10	TETRAHEDRON LETTERS	Palladium-catalyzed oxidation of vinyl ether to acetate with hydrogen peroxide	今喜裕、千代 健文、今尾太輔、中島拓哉、長峰高志、蜂谷宝人、佐藤一彦	産総研	有
3	H23.11	SYNLETT	Unique Salt Effect on the High Yield Synthesis of Acid-Labile Terpene Oxides Using Hydrogen Peroxide under Acidic Aqueous Conditions	蜂谷宝人、今喜裕、小野豊、内匠清、笹川巨樹、恵崎陽一郎、佐藤一彦	産総研	有
4	H24.5	SYNTHESIS-STUTTGART	Unique Salt Effect on Highly Selective Synthesis of Acid-Labile Terpene and Styrene Oxides with Tungsten-H ₂ O ₂ Catalytic System under Acidic Aqueous Conditions	蜂谷宝人、今喜裕、小野豊、内匠清、笹川巨樹、恵崎陽一郎、佐藤一彦	産総研	有
5	H24.7	CHEMISTRY LETTERS	Pt-Catalyzed Oxidative Rearrangement of Cyclic Tertiary Allylic Alcohol to Enones Using Aqueous Hydrogen Peroxide	長峰高志、今喜裕、佐藤一彦	産総研	有
6	H23.12	<i>Angew. Chem. Int. Ed.</i>	Efficient Heterogeneous Epoxidation of Alkenes by Supported Tungsten Oxide Catalyst	K. Kamata, K. Yonehara, Y. Sumida, K. Hirata, S. Nojima, N. Mizuno	東京大学	有
7	H23.6	<i>Chem. Eur. J.</i>	Efficient Epoxidation of Electron-deficient Alkenes with Hydrogen Peroxide Catalyzed by $[\gamma\text{-PW}_{10}\text{O}_{38}\text{V}_2(\mu\text{-OH})_2]^{3-}$	K. Kamata, K. Sugahara, K. Yonehara, R.	東京大学	有

特許論文等リスト

				Ishimoto, N. Mizuno		
8	H23. 4	<i>J. Colloid Interface Sci.</i>	Synthesis and Application of Colloidal Nanocrystals of the MFI-type Zeolites	R. Watanabe, T. Yokoi, and T. Tatsumi	東京工業大学	有
9	H23. 8	<i>J. Colloid Interface Sci.</i>	Extension of Size of Monodisperse Silica Nanospheres and their Well-ordered Assembly	R. Watanabe, T. Yokoi, E. Kobayashi, Y. Otsuka, A. Shimojima, T. Okubo and T. Tatsumi	東京工業大学	有

【外部発表】

H21年度

番号	発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者	所属
1	H21. 6. 4	ECSAW ワークショップ	Catalytic Oxidation of Alcohols and Olefins with Hydrogen Peroxide under Organic Solvent-Free Conditions	今 喜裕	産総研
2	H21. 10 .15	The 12 th Japan-Korea Symposium on Catalysis	Catalytic Oxidation of α , β -Unsaturated Aldehydes with Hydrogen Peroxide under Organic Solvent-Free Conditions	今 喜裕、今尾太輔、中島拓哉、佐藤一彦	産総研
3	H21. 11 .15	第42回酸化反応討論会	パラジウム触媒を用いる α , β -不飽和アルデヒド類の高選択的過酸化水素酸化反応	今 喜裕、今尾太輔、中島拓哉、佐藤一彦	産総研
4	H21. 11 .16	IFOC-6	An Effective Preparation of Acid-Sensitive Epoxides of Terpenes with Hydrogen Peroxide	小野 豊、今 喜裕、佐藤一彦	産総研
5	H21. 11 .16	IFOC-6	Synthesis of α , β -Unsaturated Carboxylic Acids through Selective Direct Oxidation of the Corresponding Aldehydes with Hydrogen Peroxide	今尾太輔、今 喜裕、中島拓哉、佐藤一彦	産総研
6	H21. 12 .5	第三回野依セミナー	環境低負荷を目指した過酸化水素酸化技術の開発	今 喜裕	産総研
7	H21. 12 .8	北海道大学触媒化学研究センタ20周年記念	Catalytic Oxidation of Allylic Alcohols and α , β -Unsaturated Aldehydes with Hydrogen Peroxide under Organic Solvent-Free Conditions	今 喜裕、今尾太輔、中島拓哉、佐藤一彦	産総研

特許論文等リスト

		国際シンポジウム			
8	H22. 3. 4	第10回GSCシンポジウム	過酸化水素による易加水分解性アルケンの高選択的エポキシ化反応	小野 豊、今 喜裕、佐藤一彦	産総研
9	H22. 3. 4	第10回GSCシンポジウム	過酸化水素を用いた無溶媒・ハロゲンフリー酸化技術の開発	千代健文、今 喜裕、佐藤一彦	産総研
10	H22. 3. 4	第10回GSCシンポジウム	過酸化水素を用いたパラジウム触媒による α , β -不飽和アルデヒドの選択的酸化反応	今尾太輔、今 喜裕、中島拓哉、佐藤一彦	産総研
11	H22. 3. 5	GSCセミナー—持続的社会的のための環境共生化学—	グリーンケミストリーを担う過酸化水素酸化技術	佐藤一彦	産総研
12	H21. 7. 28	International Symposium on Polyoxometalates	Design of Highly Functionalized Polyoxometalate-Based Nano-Structured Catalysts by Hierarchical Three-Dimensional Control of Structures and Morphologies	水野哲孝	東京大学
13	H21. 9. 17	International Symposium on Relations between Homogeneous and Heterogeneous Catalysis XIV	Green Oxidation Reactions by Polyoxometalate-Based Catalysts: From Molecular to Solid Catalysts	水野哲孝	東京大学
14	H21. 9. 28	第104回触媒討論会	セレン中心二核ペルオキシタングステートによる過酸化水素を酸化剤とした不飽和アルコール類のエポキシ化反応	鎌田慶吾, 平野智久, 葛谷慎次郎, 水野哲孝	東京大学
15	H21. 9. 28	第104回触媒討論会	セレン中心二核ペルオキシタングステートによる過酸化水素を酸化剤としたスルフィドの効率的酸化反応	平野智久, 鎌田慶吾, 水野哲孝	東京大学
16	H21. 10. 15	The 12th Japan-Korea Symposium on Catalysis	Epoxidation of Homoallylic Alcohols with H_2O_2 Catalyzed by Selenium-Containing Peroxotungstate	T. Hirano, S. Kuzuya, K. Kamata, N. Mizuno	東京大学
17	H22. 1. 22	触媒学会 愛媛地区講	ポリオキシメタレートを用いた精密触媒設計	水野哲孝	東京大学

特許論文等リスト

		演会－高度に制御された活性点を利用した触媒化学－			
18	H22. 1. 23	平成 21 年度高難度選択酸化反応研究会シンポジウム	ポリオキシメタレートを基盤とした高難度選択酸化反応の開発	水野哲孝	東京大学
19	H22. 3. 25	第 105 回触媒討論会	欠損型ポリオキシメタレートによる過酸化水素を酸化剤とした有機シランの高選択的酸化反応	石本綾, 鎌田慶吾, 水野哲孝	東京大学
20	H22. 3. 27	第 90 春季年会	欠損型ポリオキシタンゲステートを触媒とした過酸化水素による有機シラン類のシラノールへの酸化反応	石本綾, 鎌田慶吾, 水野哲孝	東京大学
21	H22. 3. 26	日本化学会第 90 回春季年会	Ti 含有メソポーラスシリカナノ粒子触媒の調製と応用	横井俊之, 唐牛拓己, 今井裕之, 野村淳子, 辰巳 敬	東京工業大学
22	H22. 3. 26	日本化学会第 90 春季年会	塩基性アミノ酸添加法による TS-1 の合成	清川豪, 横井俊之, 今井裕之, 野村淳子, 辰巳敬	東京工業大学
23	H21. 11. 25	第 25 回ゼオライト研究発表会	緩衝溶液系で調製した TS-1 の構造特性と酸化触媒特性	清川豪, 横井俊之, 今井裕之, 野村淳子, 辰巳敬	東京工業大学
24	H21. 10. 15	The 12th Japan-Korea Symposium on Catalysis	Preparation of Ti-containing mesoporous silica nanospheres and their catalytic performance in epoxidation	Takumi Karouji, Toshiyuki Yokoi, Hiroyuki Imai, Junko Nomura, Takashi Tatsumi	東京工業大学
25	H21. 8. 5	ZMPC2009-International Symposium on Zeolites and Microporous Crystals	Preparation of mesoporous silica nanospheres with unique pore structure in the presence of basic amino acid	Takumi Karouji, Seigo Ohta, Ryota Watanabe, Toshiyuki Yokoi, Junko Nomura, Takashi Tatsumi	東京工業大学
26	H22. 1. 18	環境化学技術研究部門講演会, 産業技術総合研究所	高性能 Ti 含有ゼオライト及びメソポーラスシリカ酸化触媒の開発	横井俊之	東京工業大学
27	H21. 5. 20	第 58 回石油学会研究発表会	TS-1 合成における塩基性アミノ酸の添加効果	清川豪, 横井俊之, 今井裕之, 野村淳子, 辰巳敬	東京工業大学

特許論文等リスト

H22年度

番号	発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者	所属
1	H22. 6. 25	日華化学セミナー	過酸化水素を用いる環境低負荷型酸化プロセス	今喜裕	産総研
2	H22. 7. 15	英国王立化学会(RSC)－日本化学会(CSJ)ジョイントシンポジウム "Catalysis for a Sustainable World"	Pt black-catalyzed selective oxidation of allylic alcohols with aqueous hydrogen peroxide under organic solvent-free conditions	今喜裕、佐藤一彦	産総研
3	H22. 7. 15	英国王立化学会(RSC)－日本化学会(CSJ)ジョイントシンポジウム "Catalysis for a Sustainable World"	Environmentally Benign Selective Oxidation of alpha, beta-Unsaturated Aldehydes to the Corresponding Carboxylic Acids with Hydrogen Peroxide	今尾太輔、今喜裕、中島拓哉、佐藤一彦	産総研
4	H22. 7. 15	英国王立化学会(RSC)－日本化学会(CSJ)ジョイントシンポジウム "Catalysis for a Sustainable World"	Green Oxidation with Hydrogen Peroxide	佐藤一彦	産総研
5	H22. 7. 16	ECSAW Workshop 2010	Organic Solvent- and Halide-Free Oxidation with Hydrogen Peroxide	千代健文、今喜裕、佐藤一彦	産総研
6	H22. 9. 1	分析展(JAIMAフォーラム)	環境負荷最小プロセスの実現に向けて	佐藤一彦	産総研
7	H22. 9. 4	第30回野依フォーラム	有機合成を基盤とする産学官連	佐藤一彦	産総研
8	H22. 11. 12	第43回酸化反応討論会	過酸化水素による α , β -不飽和アルデヒド類の直接的な高効率酸化反応	今尾太輔、今喜裕、中島拓哉、佐藤一彦	産総研

特許論文等リスト

9	H22. 11 . 13	第 43 回酸化 反応討論会	鉄触媒を用いた過酸化水素によるエポキシ化反応	千代健文、今喜裕、佐藤一彦	産総研
10	H22. 12 . 2	高分子学会 ポリマーフォーラム	低ハロゲン脂肪族グリシジルエーテルの開発	新井良和、内田博、貴家潤治、小林孝充、福本直也、石橋圭孝	昭和電工
11	H22. 12 . 16	Pacificbem 2010	Palladium-catalyzed Direct Oxidation of α , β -Unsaturated Aldehydes with Hydrogen Peroxide	今尾太輔、今喜裕、中島拓哉、佐藤一彦	産総研
12	H22. 12 . 19	Pacificchem 2010	A simple and Efficient Iron Catalyst for Epoxidation of Aromatic Olefins with 30% Hydrogen Peroxide	千代健文、今喜裕、佐藤一彦	産総研
13	H23. 1. 11	創造機能化学第 116 委員会	過酸化水素を用いるテルペン類の高選択的エポキシ化反応	今喜裕、佐藤一彦	産総研
14	H23. 1. 29	高難度選択酸化反応研究会シンポジウム	白金およびパラジウム触媒を用いる過酸化水素酸化反応	今喜裕、佐藤一彦	産総研
15	H22. 7. 14	Frontiers in Metal Oxide Cluster Science	Design of Highly Functionalized Polyoxometalate-based Nano-structured Catalysts	Noritaka Mizuno	東京大学
16	H22. 10 . 8	7th International Symposium on the Chemistry and Biological Chemistry of Vanadium	Selective Oxidation of Hydrocarbons with Hydrogen Peroxide Catalyzed by Di-Vanadium-Substituted Polyoxotungstate	Noritaka Mizuno	東京大学
17	H22. 11 . 12	第 43 回酸化 反応討論会	新規バナジウム二置換ホスホタングステートによるアルカンの位置選択的ヒドロキシ化反応	鎌田慶吾、米原和宏、中川善直、上原和洋、水野哲孝	東京大学
18	H23. 3. 27	日本化学会 第 91 春季年会	柔軟なポリオキソメタレート不均一系触媒による形状選択的酸化反応	水野哲孝、内田さやか、鎌田慶吾、石本綾、野島晋、米原宏司、住田康隆	東京大学
19	H23. 3. 27	日本化学会 第 91 回春季年会	Ti 含有メソポーラスシリカナノ粒子のシリル化処理と酸化触媒性能評価	劉テイテイ、横井俊之、今井裕之、野村淳子、辰巳敬	東京工業大学
20	H22. 12 . 16	PACIFICHEM2 010	Synthesis of tungsten oxide having 3D mesopores by using colloidal array of	Ayako Mizukami, Toshiyuki	東京工業大学

特許論文等リスト

			silica nanospheres as template	Yokoi, Junko N. Kondo, Ryu Abe, Takashi Tatsumi	
21	H22. 12 .2	第26回ゼオライト研究発表会	鋳型法によるゼオライト粒子の形態制御	水上亜矢子, 横井俊之, 野村淳子, 辰巳敬	東京工業大学
22	H22. 12 .2	第26回ゼオライト研究発表会	Ti含有球状メソポーラスシリカナノ粒子の調製条件の検討	劉テイテイ, 唐牛拓己, 横井俊之, 今井裕之, 野村淳子, 辰巳敬	東京工業大学
23	H22. 7. 5	IZC16-IMMS7-16 th International Zeolite Conference joint with the 7 th International Mesostructured Materials Symposium	Synthesis of Core-1Shell structure of TS-1 nanoparticles and Mesoporous silica	Ryota Watanabe, Toshiyuki Yokoi, Takashi Tatsumi	東京工業大学
24	H22. 5. 20	石油学会第59回研究発表会	単分散シリカナノ粒子を原料に用いたTi含有ゼオライトの調製	水上亜矢子, 横井俊之, 野村淳子, 辰巳敬	東京工業大学

H23年度

番号	発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者	所属
1	H23. 6. 2	第11回GSCシンポジウム	鉄触媒を用いた過酸化水素によるエポキシ化反応の開発	千代健文、今喜裕、佐藤一彦	産総研
2	H23. 6. 2	第11回GSCシンポジウム	過酸化水素を用いた転位酸化反応	長峰高志、今喜裕、佐藤一彦	産総研
3	H23. 6. 2	第11回GSCシンポジウム	過酸化水素による α , β -不飽和アルデヒド類の触媒的酸化反応	今尾太輔、今喜裕、中島拓哉、佐藤一彦	産総研
4	H23. 6. 2	第11回GSCシンポジウム	中性塩添加を鍵とするテルペンの環境低負荷型過酸化水素酸化技術の開発	蜂谷室人、小野豊、松本朋浩、今喜裕、佐藤一彦	産総研
5	H23. 6. 2	第11回GSCシンポジウム	過酸化水素を用いた環境調和型酸化技術の開発	長峰高志、千代健文、今喜裕、清水政男、佐藤一彦	産総研
6	H23. 6. 23	15th Annual Green	Environmentally benign selective oxidation of allylic alcohols and	今喜裕、今尾太輔、佐藤一彦	産総研

特許論文等リスト

		Chemistry & Engineering Conference	α, β -unsaturated aldehydes using hydrogen peroxide under organic solvent-free conditions		
7	H23.6.23	15th Annual Green Chemistry & Engineering Conference	Hydrogen Peroxide Epoxidation of Aromatic Olefins with a Simple Iron Catalyst	千代健文、今喜裕、佐藤一彦	産総研
8	H23.7.5	International Symposium on Activation of Dioxygen and Homogeneous Catalytic Oxidation (ADHOC) 2011	An Effective Preparation of Acid-Sensitive Epoxides of Terpenes with Hydrogen Peroxide	蜂谷宝人、小野豊、今喜裕、佐藤一彦	産総研
9	H23.7.5	International Symposium on Activation of Dioxygen and Homogeneous Catalytic Oxidation (ADHOC) 2011	Pt-catalyzed Oxidative Rearrangement of Tertiary Allylic Alcohols: Environmentally Benign Process using Aqueous Hydrogen Peroxide	長峰高志、今喜裕、佐藤一彦	産総研
10	H23.7.5	International Symposium on Activation of Dioxygen and Homogeneous Catalytic Oxidation (ADHOC) 2011	Pd-Catalyzed Oxidation of Vinyl Ether to Acetate Ester Using Hydrogen Peroxide	今喜裕、中島拓哉、佐藤一彦	産総研
11	H23.7.5	International Symposium	Development of Environmentally Benign Oxidation Reactions with Hydrogen Peroxide	千代健文、今喜裕、佐藤一彦	産総研

特許論文等リスト

		on Activation of Dioxygen and Homogeneous Catalytic Oxidation (ADHOC) 2011			
12	H23. 9. 21	第 108 回触 媒討論会	過酸化水素を用いる酸化プロセス基盤技 術開発	今 喜裕、佐藤 一 彦	産総研
13	H23. 11 . 5	第 44 回酸化 反応討論会	鉄触媒を用いた過酸化水素によるエポキ シ化反応	千代健文、今喜 裕、佐藤一彦	産総研
14	H23. 11 . 5	第 44 回酸化 反応討論会	過酸化水素水を用いた三級アリルアル コール類の転位酸化反応	長峰高志、今喜 裕、佐藤一彦	産総研
15	H23. 11 . 5	第 44 回酸化 反応討論会	過酸化水素酸化反応を用いるビニルエー テルから酢酸エステルの合成	今喜裕、千代健 文、中島拓哉、佐 藤一彦	産総研
16	H23. 11 . 5	第 44 回酸化 反応討論会	酸に鋭敏なテルペンオキシドの過酸化水 素による高選択的合成における中性塩の 効果	蜂谷宝人、小野 豊、今喜裕、佐藤 一彦	産総研
17	H23. 11 . 30	8th AFMC Internation al Medicinal Chemistry Symposium	Platinum-Catalyzed Oxidative Rearrangement of Tertiary Allylic Alcohols to β -Disubstituted α , β - Unsaturated Ketones with Aqueous Hydrogen Peroxide	長峰高志、今喜 裕、佐藤一彦	産総研
18	H23. 12 . 5	The 3rd Asia- Oceania Conference on Green and Sustainable Chemistry	Hydrogen Peroxide Epoxidation of Aromatic Olefins with a Simple Iron Catalyst	千代健文、今喜 裕、佐藤一彦	産総研
19	H23. 12 . 5	The 3rd Asia- Oceania Conference on Green and Sustainable Chemistry	Selective Oxidation of Vinyl Ether to Acetate using Hydrogen Peroxide	今喜裕、千代健 文、中島拓哉、佐 藤一彦	産総研
20	H23. 12 . 5	The 3rd Asia- Oceania Conference	Pt-Catalyzed Oxidative Rearrangement of Cyclic Tertiary Allylic Alcohol to Enones	長峰高志、今喜 裕、佐藤一彦	産総研

特許論文等リスト

		on Green and Sustainable Chemistry			
21	H23. 12 . 5	The 3rd Asia-Oceania Conference on Green and Sustainable Chemistry	An Effective Synthesis of Acid-Labile Terpene Oxides using Hydrogen Peroxide	蜂谷宝人、今喜裕、佐藤一彦	産総研
22	H24. 2. 8	理化学研究所袖岡研究室講演会	過酸化水素を用いるクリーン酸化プロセスの開発ー触媒開発から製品化までー	今喜裕	産総研
23	H24. 4. 20	大阪大学基礎工学部講演会	過酸化水素を用いる環境にやさしい酸化技術の開発ー基盤技術開発から企業との製品共同開発までー	今喜裕	産総研
24	H23. 5. 10	7 th International Symposium on Group Five Elements	Oxydative Functional Group Transformations with Hydrogen Peroxide Catalyzed by Divanadium-Substituted Polyoxotungstates	Noritaka Mizuno, Keigo Kamata, Kazuya Yamaguchi	東京大学
25	H23. 5. 25	The 13th Korea-Japan Symposium on Catalysis	Oxidative Functional Group Transformations with Hydrogen Peroxide Catalyzed by a Divanadium-Substituted Phosphotungstate	Noritaka Mizuno, Keigo Kamata, Kazuya Yamaguchi	東京大学
26	H23. 7. 7	11th International Symposium on Activation of Dioxygen and Homogeneous Catalytic Oxidation (ADHOC2011)	Selective Oxidation of Hydrocarbons with H ₂ O ₂ Catalyzed by a Divanadium-substituted Phosphotungstate	Keigo Kamata, Kazuhiro Yonehara, Yoshinao Nakagawa, Kazuhiro Uehara, Kosei Sugahara, Ryo Ishimoto, Noritaka Mizuno	東京大学
27	H23. 8. 30	EUROPACAT X	Oxidative Functional Group Transformations with Hydrogen Peroxide Catalyzed by Divanadium-	Noritaka Mizuno, Keigo Kamata, Kazuya Yamaguchi	東京大学

特許論文等リスト

			Substituted Polyoxometalates		
28	H23. 9. 8	14 th Asian Chemical Congress	Design of Highly Functionalized Polyoxometalate-Based Nano-Structured Catalysts	Noritaka Mizuno	東京大学
29	H23. 9. 20	第 108 回触媒討論会	バナジウム二置換ホスホタングステートによる過酸化水素を酸化剤とした炭化水素類の酸化的臭素化反応	米原和宏, 鎌田慶吾, 山口和也, 水野哲孝	東京大学
30	H23. 9. 20	第 108 回触媒討論会	バナジウム二置換ホスホタングステートによる過酸化水素を酸化剤とした電子不足アルケンの官能基選択的エポキシ化反応	鎌田慶吾, 菅原紘成, 米原和宏, 石本稜, 水野哲孝	東京大学
31	H23. 11. 25	高資源循環ポリマー研究センター第 3 回セミナー	触媒化学の最前線 ～モノマー合成へ向けて～	鎌田慶吾	東京大学
32	H23. 12. 5	International Symposium on Catalysis and Fine Chemicals 2011	Oxidative Functional Group Transformations Catalyzed by Polyoxotungstate	Noritaka Mizuno	東京大学
33	H23. 12. 13	French Japanese Workshop The NANOTECH	Design and Functionalized Polyoxometalate-based Nano-structured Catalysts by Hierarchical Three-dimensional Control of Their Structures	Noritaka Mizuno	東京大学
34	H23. 11. 10	第 41 回石油・石油化学討論会	Ti 含有メソポーラスシリカナノ粒子のシリル化と酸化触媒性能評価	劉テイテイ・横井俊之・今井裕之・野村淳子・辰巳敬	東京工業大学
35	H23. 6. 2	第 11 回グリーン・サステイナブルケミストリーシンポジウム	Ti 含有メソポーラスシリカナノ粒子触媒の開発	劉テイテイ・横井俊之・今井裕之・野村淳子・辰巳敬	東京工業大学
36	H23. 5. 18	第 16 回石油学会 JPIJS	Ti 含有メソポーラスシリカナノ粒子の調製条件の検討	劉テイテイ・横井俊之・今井裕之・野村淳子・辰巳敬	東京工業大学
37	H23. 11. 10	第 41 回石油・石油化学討論会	種々のアルコールを基質としたチタノシリケートの酸化触媒特性評価	田村直也・横井俊之・野村淳子・辰巳敬	東京工業大学
38	H23. 9. 21	第 108 回触媒討論会	チタノシリケート／過酸化水素による種々のアルコールの選択酸化反応	田村直也・大友亮一・今井裕之・横	東京工業大学

特許論文等リスト

				井俊之・野村淳子・辰巳敬	
39	H23. 6. 2	第 11 回グリーン・サステイナブル ケミストリーシンポジウム	チタノシリケート触媒によるグリセリンの選択酸化反応	田村直也・大友亮一・今井裕之・横井俊之・野村淳子・辰巳敬	東京工業大学
40	H23. 5. 18	第 16 回石油学会 JPIJS	チタノシリケート触媒によるアルコール選択酸化特性	田村直也・大友亮一・今井裕之・横井俊之・野村淳子・辰巳敬	東京工業大学

【新聞掲載】

H 2 1 年度

番号	発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者
1	H22. 1. 21	化学工業日報	2010 年針路を問う（TOP インタビュー）：環境対応テーマが中心であり、本プロジェクトでのクリーンな反応で高機能な製品を作るプロセス開発に取り組んでいることを発表	荒川化学

H 2 2 年度

無し

H 2 3 年度

番号	発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者
1	H24. 5. 30	日経産業新聞	安全・高効率に製造 高性能電子材料 松ヤニ物質から 産総研と荒川化学	産総研、荒川化学
2	H24. 5. 30	日刊工業新聞	電子材の原料「テルペンオキシド」 松ヤニから合成 荒川化学と産総研	産総研、荒川化学
3	H24. 5. 30	化学工業日報	テルペンオキシド 安全・高効率に合成 産総研—荒川化学 低環境負荷の新技術	産総研、荒川化学

【受賞】

H 2 1 年度

無し

特許論文等リスト

H22年度

無し

H23年度

番号	受賞年月日	主催者名	受賞名称	受賞件名	受賞者
1	H23. 4. 11	産業技術総合研究所	2011年産業技術総合研究所 理事長賞（本格研究）	過酸化水素酸化技術の開発と新規機能性化学品の創出	産総研佐藤一彦、今喜裕、千代健文、清水政男、島田広道

2. 分科会における説明資料

次ページより、プロジェクト推進・実施者が、分科会においてプロジェクトを説明する際に使用した資料を示す。

ナノテク・部材イノベーションプログラム
グリーン・サステナブルケミカルプロセス基盤技術開発

「①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発・②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発」

(事後評価)

(2009年度～2011年度 3年間)

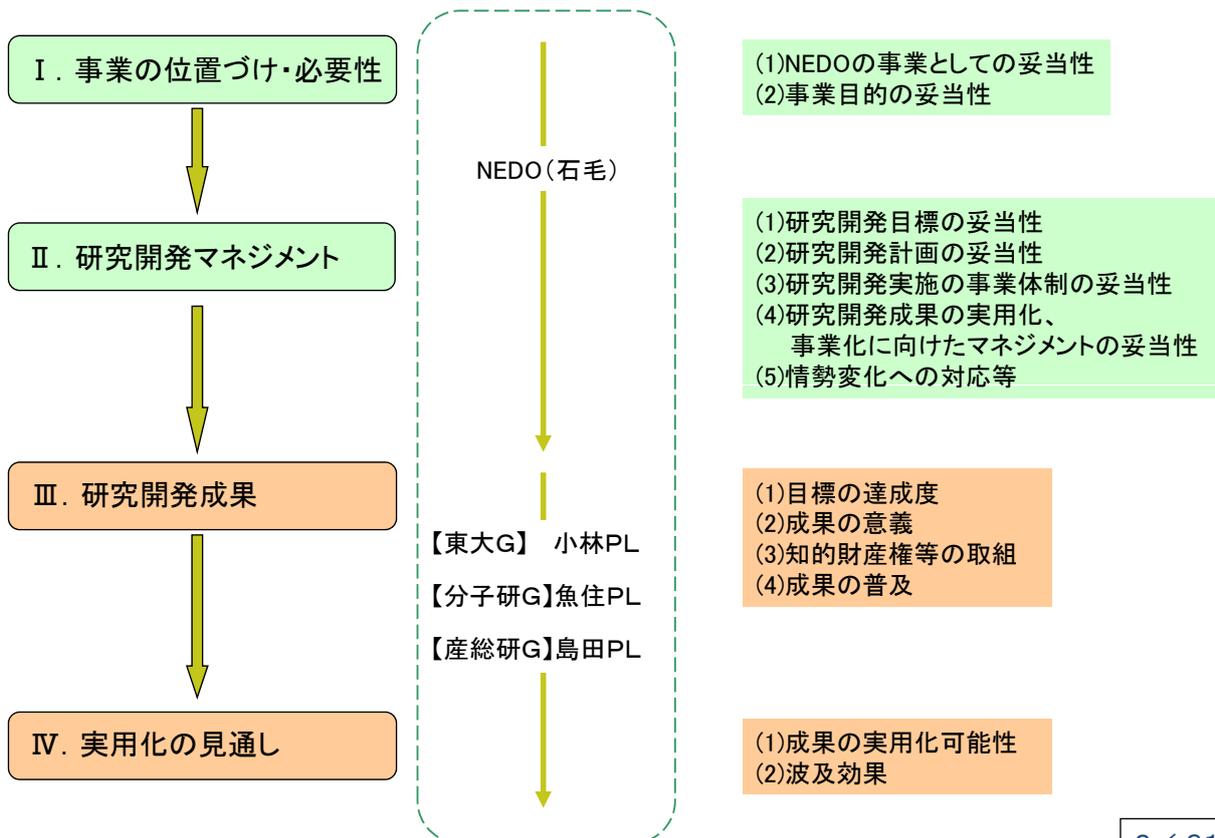
プロジェクトの概要 (公開)

NEDO 環境部

2012年 9月14日

説明内容

公開



I. 事業の位置付け・必要性について

(1) NEDOの事業としての妥当性

3 / 31

1. 事業の位置付け・必要性について
(1) NEDOの事業としての妥当性

公開

NEDOで実施中のGSCプロジェクト

グリーン・サステイナブルケミカル プロセス基盤技術開発

資源、エネルギー、環境の制約問題を克服し、高機能な化学品の持続的製造を可能とする基盤技術の確立を目指しています。

①有害物質削減 平成21～23年度

- 有害な有機溶媒を用いずに、化学反応を水中で行うことを可能にする革新的技術

②廃棄物削減 平成21～23年度

- 触媒を固定化し、リサイクルすることで廃棄物・副生成物を削減する革新的技術
- 化学プロセス中の酸化反応のクリーン化を行い、産業廃棄物を削減する革新的技術

③エネルギー削減 平成21～27年度

- 石油化学品、機能性化学品合成、生成物分離、副生ガス分離等に対して大幅な消費エネルギー削減が可能となるグリーンプロセス技術

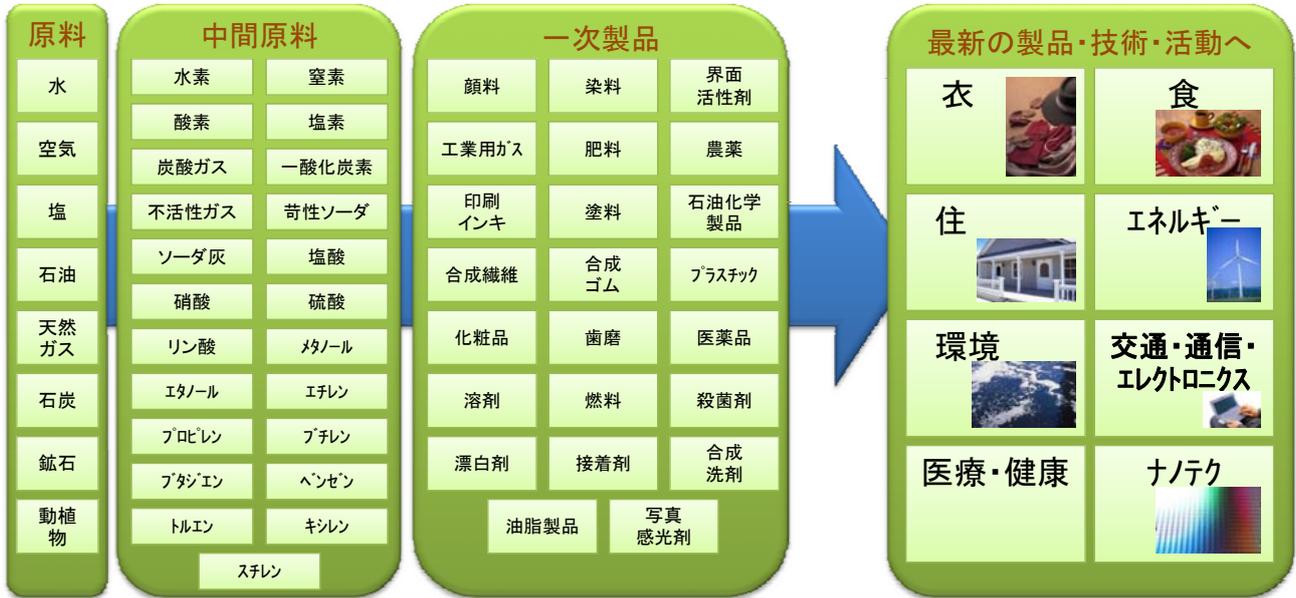
④化学品原料転換 平成22～24年度

- 化石原料に依存している化学品原料の転換・多様化を可能とする革新グリーン技術の開発

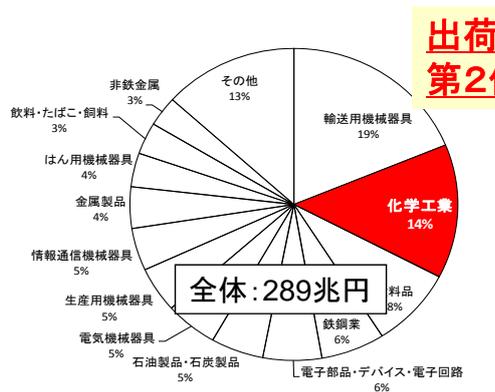
4 / 31

化学産業とは

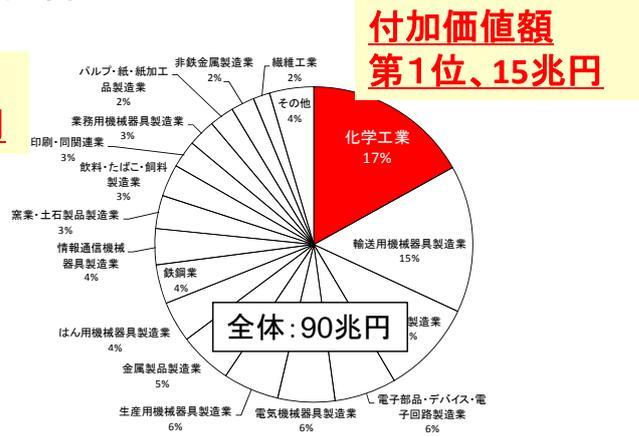
身の回りの製品の原材料、エネルギー、環境、交通、通信、エレクトロニクス、医療、健康、ナノテクノロジーなど様々な分野で無くてはならない産業



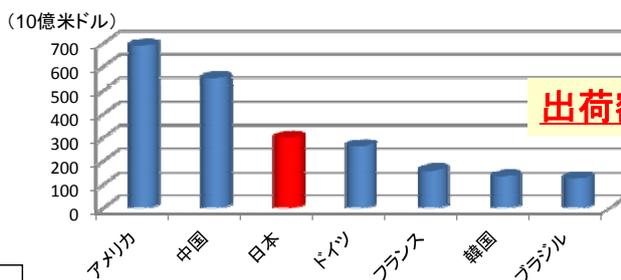
我が国の化学産業の特徴(出荷額・世界シェア)



製造業における出荷額の内訳(2010年)
 出典: 2012年経済産業省工業統計



製造業における付加価値額の内訳(2010年)
 出典: 2012年経済産業省工業統計

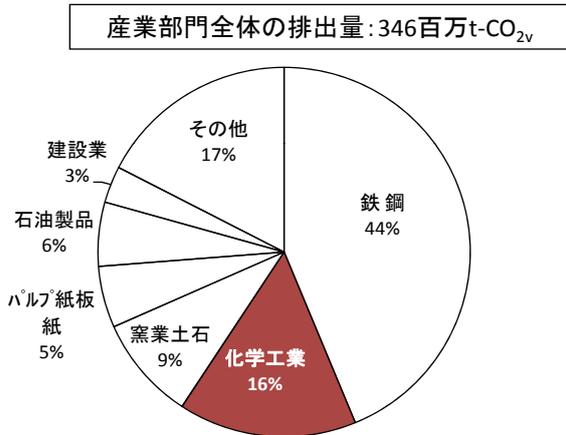


世界の化学工業出荷額比較(2009年): 出典: 米国化学工業協会

※化学工業には、プラスチック製品、ゴム製品を含む

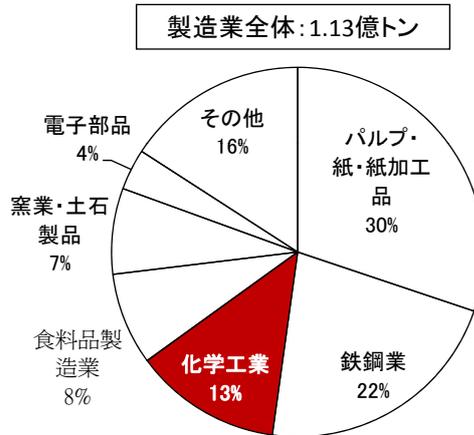
化学産業の課題【エネルギー消費、産業廃棄物】

化学産業は、エネルギー多消費であり、かつ廃棄物大量排出型産業である。



**CO₂排出量
第2位、年間0.5億トン**

業種別二酸化炭素排出量
 (2010年度実績)
 出典:環境省

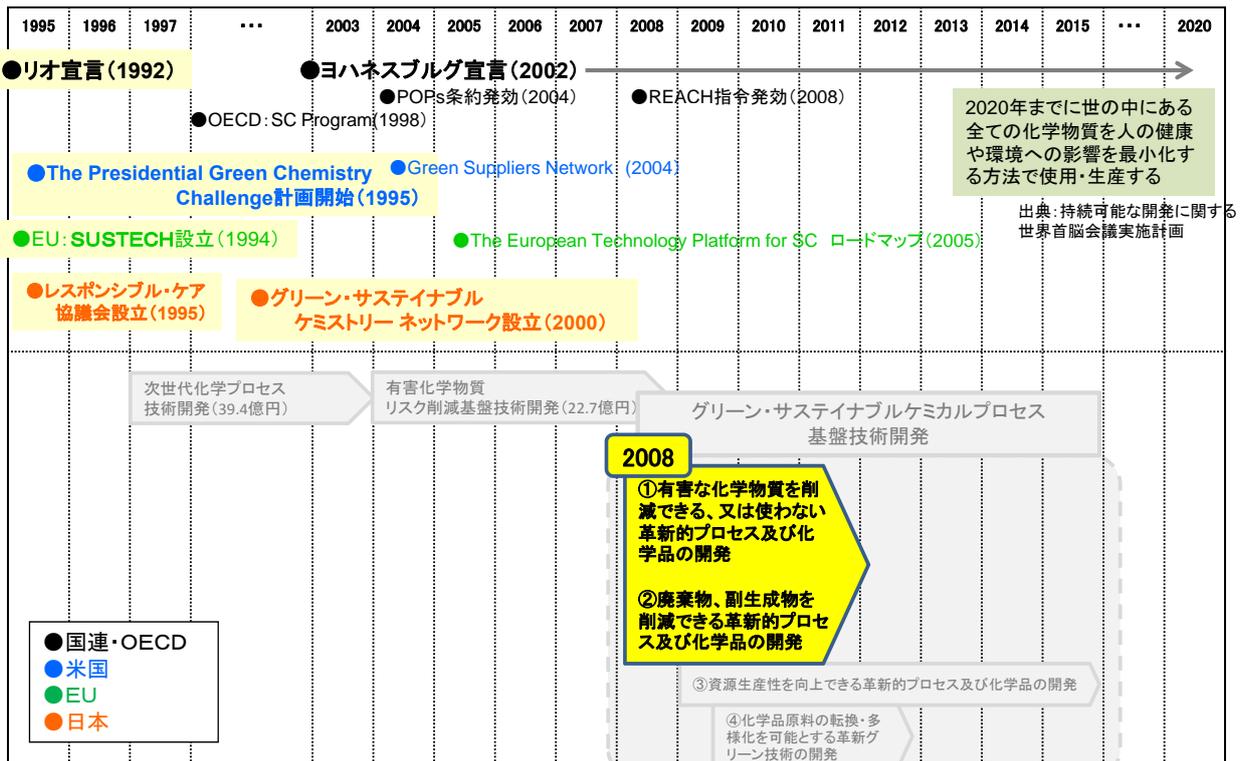


**産業廃棄物排出量
第3位、年間0.14億トン**

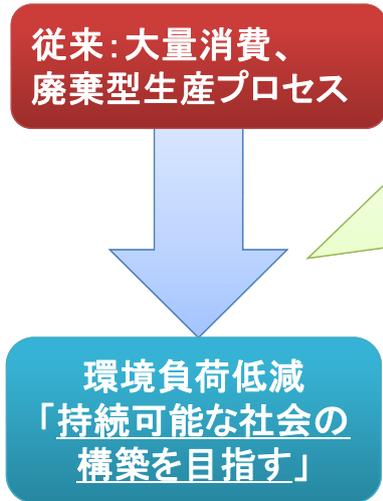
産業廃棄物の業種別排出量
 (2009年度実績)
 出典:環境省

※化学工業には、プラスチック製品、ゴム製品を含む

国内外の動向



化学産業界に関する環境負荷低減への動向



米国 : グリーンケミストリー(GC)
 欧州 : サステイナブルケミストリー(SC)
 日本 : グリーン・サステイナブル・ケミストリー(GSC)
 (2000年GSCN設立:普及活動)

GSCの定義

エネルギー・資源制約を克服して環境との共生を図り、安全・安心で持続可能な社会の構築を目指す化学

GSCNの活動

- (1)GSCに関わる産学官、業際・学際および国際的な連携
- (2)GSCに関わる情報の収集・発信および社会との対話
- (3)GSCの理念の普及・啓発

<http://www.gscn.net/about/about1.html>

政策への適合性(経済産業省の政策)

イノベーションプログラムの概要

1. 「イノベーションプログラム」の中での体系的推進 (Inside Management & Accountability)
 - 経済産業省の全ての研究開発プロジェクトは、政策目標毎に7つの「イノベーションプログラム」の下で体系的に推進。
 - 各プログラムの中で、政策目標に向けたプロジェクトの位置付けと目標の明確化、市場化に必要な関連施策(規制改革・標準化等)との一体化を図り、イノベーション実現に向け各プロジェクトを効果的に推進。
2. 「技術戦略マップ」に基づく戦略的企画立案 (Outside Communication & Networking)
 - 先端産業技術動向を把握し、国が取り組むべき技術課題とイノベーションの道筋を明確化するため、産学官で協働するロードマッピング手法を導入(『技術戦略マップ 2005/2006/2007/2008』)。
 - 研究開発プロジェクトの選定に当たっては、イノベーションプログラムにおける政策目標を基に技術戦略マップに位置付けられた重要技術課題を抽出し戦略的に企画立案。

イノベーションプログラム(IPG)の21年度予算額 (総額:1,966億円*1)

IT IPG ①ITコア技術の革新 94億円 ②省エネ革新 42億円 ③情報爆発への対応 44億円 ④情報システムの安全性等 63億円 21年度予算 244億円	ナノテク・部材 IPG ①ナノテク加速化領域 36億円 ②情報通信領域 28億円 ③ライフサイエンス・健康・医療領域 16億円 ④エネルギー・資源・環境領域 78億円 ⑤材料・部材領域 27億円 ⑥共通領域 4億円 21年度予算案 188億円	ロボット・新機械 IPG ①ロボット関連技術開発 38億円 ②MEMS関連技術開発 12億円 21年度予算 50億円	健康安心 IPG ①創薬・診断技術開発 102億円 ②診断・治療機器・再生医療等の技術開発 28億円 21年度予算 130億円
エネルギー IPG ①総合エネルギー効率の向上 707億円 ②運輸部門の燃料多様化 278億円 ③新エネルギー等の開発・導入促進 369億円 ④原子力等利用の推進とその大前提となる安全の確保 268億円 ⑤化石燃料の安定供給確保と有効かつクリーンな利用 479億円 21年度予算 1,281億円*2	環境安心 IPG ①地球温暖化防止新技術 60億円 ②3R 33億円 ③環境調和産業バイオ 57億円 ④化学物質総合評価 11億円 ⑤共通領域 4億円 21年度予算案 165億円	航空機・宇宙産業 IPG ①航空機産業の基盤技術力の維持・向上 233億円 ②宇宙産業の国際競争力強化 87億円 21年度予算案 320億円	

*1 各イノベーションプログラムにおけるプロジェクトの重複を排除した額 *2 各サブプログラムで重複があるため小計と一致しない

イノベーションプログラムでの位置づけ

2. ナノテク・部材イノベーションプログラム

【平成21年度予算額：188億円】

※各プロジェクト毎の予算額は21年度予算(20年度予算)【20年度補正予算】

- あらゆる分野に対して高度化・不連続な革新をもたらすナノテクノロジー・革新的部材技術を確立する。
- 我が国産業の国際競争力の維持・強化や解決困難な社会的課題の克服を可能とする。

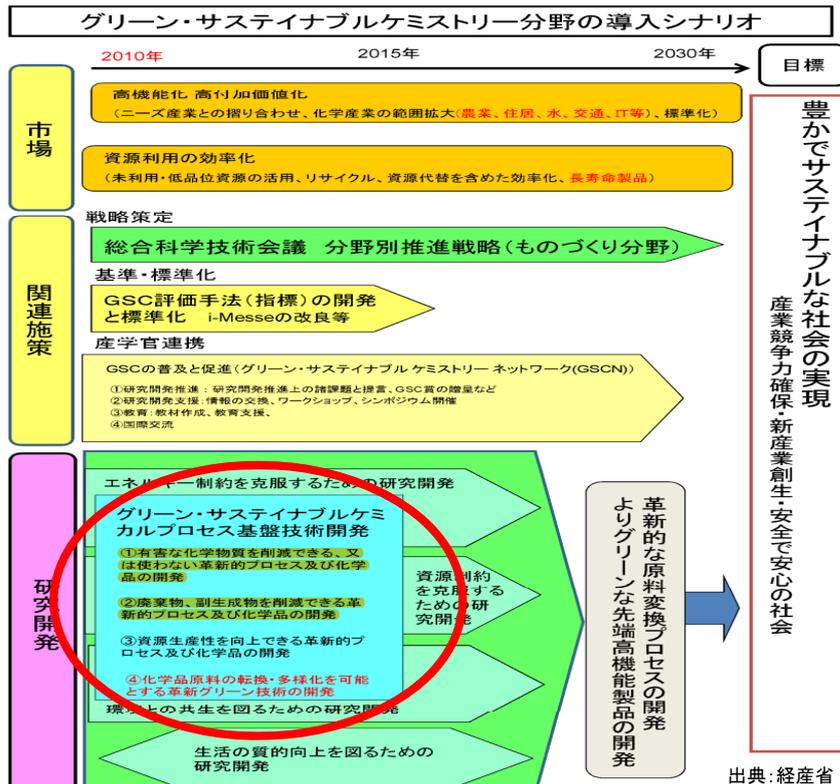


IPGの目標

- ナノテクによる非連続技術革新-
世界に先駆けてナノテクノロジーを活用した不連続な技術革新を実現する。
- 世界最強部材産業による価値創出-
我が国部材産業の強みを更に強化することで、他国の追随を許さない競争優位を確保するとともに、部材産業の付加価値の増大を図る。
- 広範な産業分野での付加価値増大-
ナノテクノロジーや高機能部材の革新を先導することで、これら部材を活用した情報通信、ライフサイエンス、環境、エネルギーなどの幅広い産業の付加価値の増大を図る。
- エネルギー制約・資源制約などの課題解決-
希少金属などの資源制約の打破、圧倒的な省エネルギー社会の実現など、解決困難な社会的課題の克服を目指す。

出典：経産省

技術戦略マップ(GSC導入シナリオ)



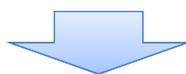
出典：経産省

赤字は2010年変更箇所

NEDOが関与する意義

- ◆ 社会的必要性:大
GSCの取組みは企業にとってインセンティブ小。国等が主導すべき。
- ◆ 研究開発の難易度:高
企業のみでは実用化が困難。産官学の知見を結集すべき。
- ◆ 投資規模:大＝開発リスク:大
幅広い産業分野への波及効果。反面、企業単独では投資リスク大。

GSCの革新技術を実用化して我が国全体の産業競争力強化 と 環境負荷低減・資源エネルギー制約からの脱却 を実現するためには

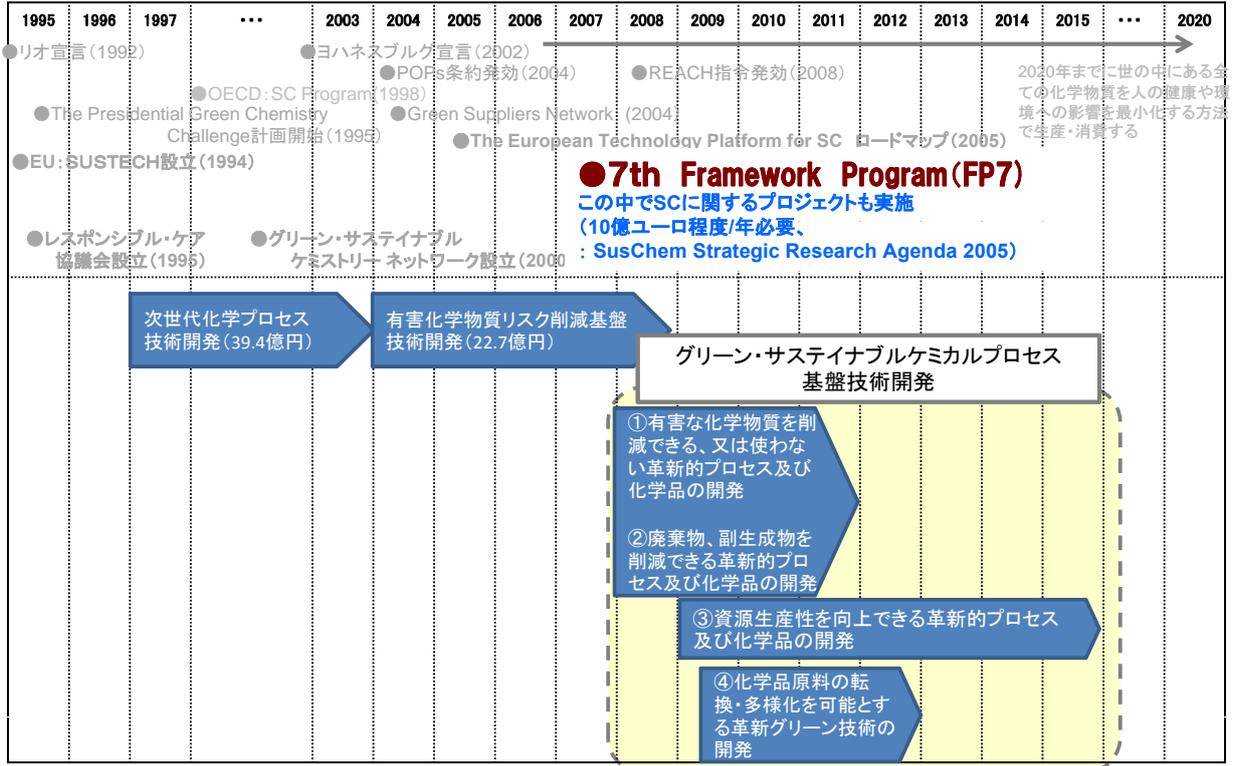


NEDOの研究開発マネジメント機能を
活用して実施することが適当

I. 事業の位置付け・必要性について

(2)事業目的の妥当性

国内外の開発動向とNEDOプロジェクト



GSC基盤技術開発プロジェクトへの投入予算

	H20年度	H21年度	H22年度	H23年度	H24年度	H25年度	H27年度
① 有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発		1.4億円	1.1億円	0.8億円			
② 廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発		4.0億円	3.9億円	2.8億円			
③ 資源生産性を向上できる革新的プロセス及び化学品の開発							
④ 化学品原料の転換・多様化を可能とする革新グリーン技術の開発							
支出額	6億円	17億円	46億円	23億円	19億円 (予算)		

経産省*

14億円

※NEDOは委託先候補選定、運営管理等において経済産業省に助言、協力

実施者の選定(基本計画と研究内容の関係)

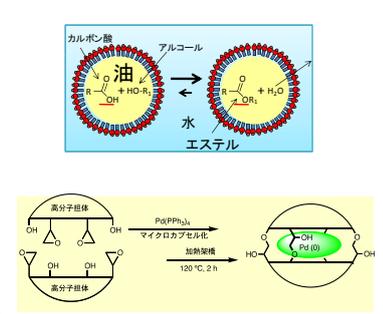
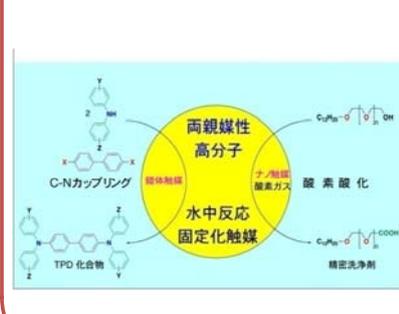
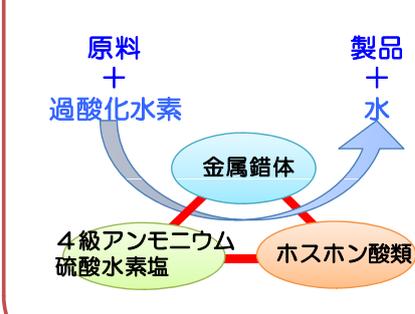
- ①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発:
水溶性触媒、無溶媒、親水性溶媒、相間移動触媒、有機合成の触媒化等を利用した革新的な技術開発
- ②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発:
酸化反応、エステル化等に利用できる新規触媒による革新的な技術開発

2テーマを公募(経済産業省)

↓ NEDO内に設置した
外部専門家による技術審査委員会を経て

5件の応募から3件
東大G、分子研G、産総研G
を採択

3グループの開発内容

東大G	分子研G	産総研G
アクア・固定化触媒技術 	水中不均一触媒技術 	過酸化水素酸化触媒技術 

- ①溶剤: 有機→水
- ②廃棄物: 使用済み触媒→リサイクル

『脱』有機溶剤／触媒『固定化』

- ②廃棄物: 重金属・ハロゲン→水

『クリーン』酸化反応

基本計画と個別テーマの関係

基本計画	①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発	②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発	
	(1)水、アルコール等で機能する触媒の高機能化、回収・再生及び製造に関する共通基盤技術	(1)新規な触媒固定化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術	(2)高選択酸化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術
個別テーマ	東大G: 革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発 ①アクア触媒によるアセトアルデヒド製造プラント排水中の希薄酢酸回収技術 ②固定化触媒を活用する革新的水素化反応システム開発 ③グリーンプロセスのための高分子固定化金属触媒試薬の開発		産総研G: 革新的酸化プロセス基盤技術開発 ①多官能性基質の酸化技術開発 ②高分子量基質の酸化技術開発 ③易加水分解性基質の酸化技術開発 ④難酸化性基質の酸化技術開発 ⑤過酸化水素を用いた反応系の基礎研究
	分子研G: 高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発 ①錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の研究開発 ②ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究 ③エステル・アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究		

基本計画の開発テーマ全てを網羅

実施の効果(費用対効果)

	分子研G	東大G	産総研G
支出額	1.0億円	8.4億円	4.5億円
用途	ELデバイス 電子デバイス洗浄剤	化学品、化粧品、 医薬品、試薬	半導体封止剤、接着剤、 高性能電子材料、 バイオプラスチック材料
予想効果 ^{※1} (新規市場開拓)	122億円／年	140億円／年	250億円／年

※1 化学品ベースの金額、想定時期は対象製品により異なる



支出額に対して大きな効果が期待できる

Ⅱ. 研究開発マネジメント

- (1) 研究開発目標の妥当性
- (2) 研究開発計画の妥当性
- (3) 研究開発実施の事業体制の妥当性

21 / 31

Ⅱ. 研究開発マネジメント 1. 研究開発目標の妥当性

公開

基本計画とグループ目標

個別テーマ		基本計画の開発目標	触媒プロセス開発の開発目標
東大 G	革新的アクア・固定化触媒 プロセス技術開発	①(1) ・反応率80%以上、選択率90%以上 の触媒プロセス開発。	水中エステル化反応の 反応率80%以上、 選択率90%以上
		②(1) ・反応率80%、選択率90%、 溶出金属回収率98%以上。	・薬粧品原料の水素化に適した触媒。 金属漏出0.1%以下、 触媒回転数:5万回以上 ・反応基質に対応した高分子固定化Os触媒 により反応率85%、選択率95% 金属漏出 1%以下、
分子研 G	高機能不均一触媒の開発と 環境調和型化学プロセスの 研究開発	①(1) ・反応率80%以上、選択率90%以上 の触媒プロセス開発。	TPDの合成 反応率80%以上、 選択率90%以上
		②(1) ・反応率80%、選択率90%、 溶出金属回収率98%以上。	アルキルカルボン酸の合成 反応率80%、選択率90%、 溶出金属2ppm以下 触媒回収率98%以上。
産総研 G	革新的酸化プロセス 基盤技術開発	②(2) ・オレフィン類の選択酸化反応では 反応率80%以上、選択率90%以上 ・ケトン類の選択酸化反応では 反応率80%以上、選択率80%以上	・オレフィン類の選択酸化反応では 反応率80%以上、選択率90%以上、 ・ケトン類の選択酸化反応では 反応率80%以上、選択率80%以上

< 実用化プロセス設計の開発目標 >

- ◆生産量(処理量)10kg~数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、**実用化規模プロセスの概念設計**を行う
- ◆本研究開発終了後、実用化技術として**コスト低減、早期の市場導入**に対して大きな寄与が期待できる技術レベルの確立

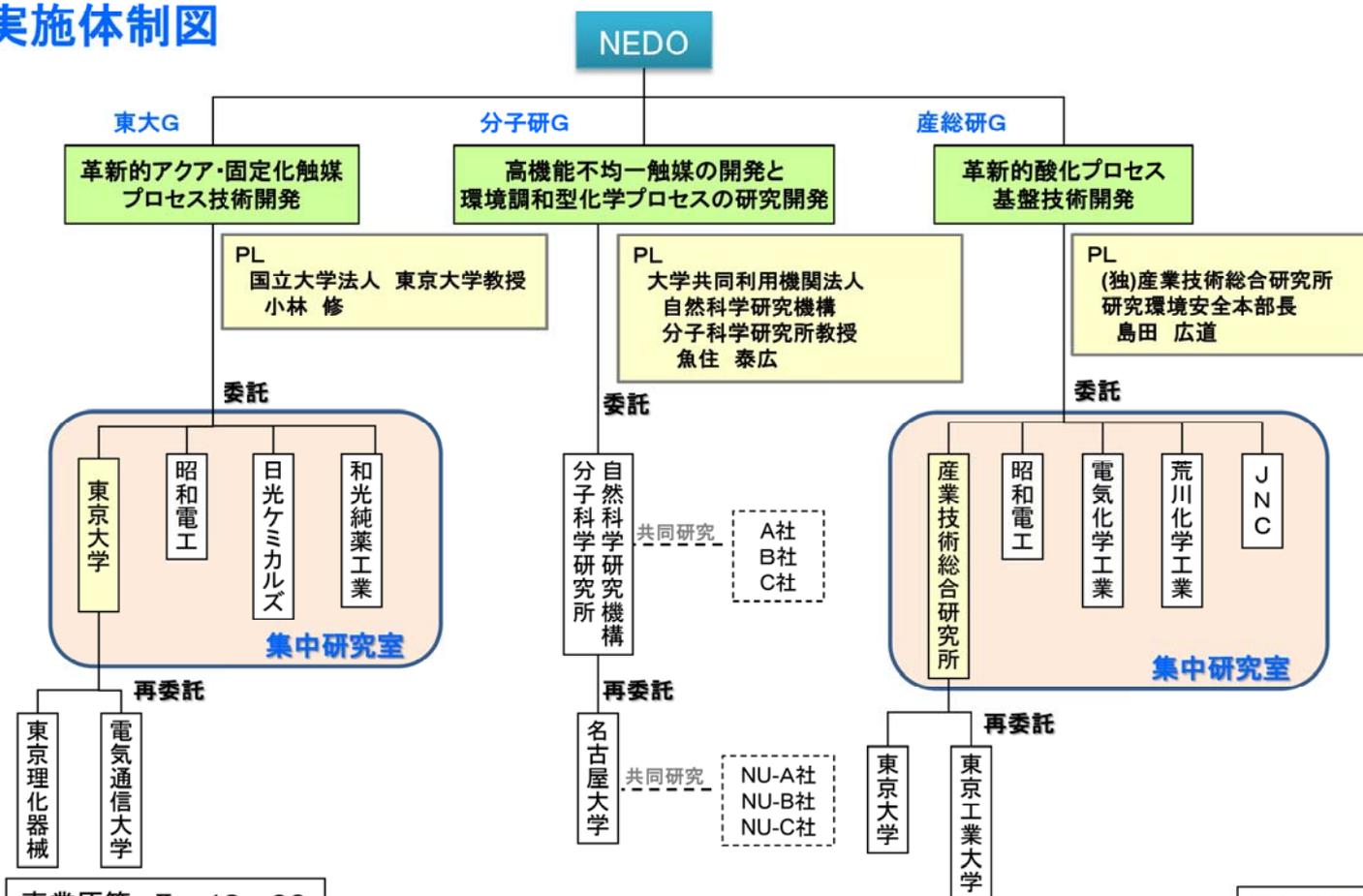
研究開発計画

		平成21年度	平成22年度	平成23年度	支出額
東大G	触媒開発	←		→	8.4
	プロセス検討	←	→		
	スケールアップ/試薬化	←		→	
	コスト試算/パイロットプラント設計		←	→	
分子研G	基本性能確認	←	→		1.0
	条件確立	←		→	
	スケールアップ		←	→	
産総研G	触媒開発	←		→	4.5
	プロセス検討/スケールアップ		←	→	
	ベンチ準備/安全性評価		←	→	
支出額		5.5	5.0	3.5	14.0

(単位: 億円)

早期の実用化を目指した計画としている

実施体制図



Ⅱ. 研究開発マネジメント

(4) 研究開発成果の実用化に向けたマネジメント

25 / 31

運営管理

●技術検討委員会: 2回/年開催

専門家から技術・実用化について助言をもらう(内1回は研究開発場所にて実施)

委員名(敬称略)	所属等	専門
御園生 誠(委員長)	東京大学名誉教授	触媒化学、化学環境学
野尻 直弘	元三菱化学 理事	工業化学
北島 昌夫	早稲田大学 招聘研究員	材料化学
染宮 昭義	神鋼リサーチ 主席研究員	高分子化学
沼口 徹	日本ポール Director	化学工学
室井 高城	アイシーラボ 代表	触媒化学

<助言の反映例>

産総研G: 各社で事業部との連携を強め、事業化に向けてより加速すること。(21年度)
→指摘以降の技術検討委員会では毎回、各社事業部からの報告も追加

分子研G: 出口の明確化に向けNEDOがガイドしていくこと。(22年度)
→NEDOがサンプル評価の支援を開始

東大G: 各企業の実用化に向けたバックアップをきっちりと行うこと。(23年度)
→PJ終了後もバックアップできるようNEDO継続研究契約を締結

実用化につなげるマネジメント

◆委託先企業幹部へのアピール(東大G、産総研G)



PLが各委託先幹部と会談。

事業化への後押し

◆サンプル評価支援(分子研G)



サンプル評価依頼企業をNEDOが斡旋

NEDOプロジェクト委託先の化学メーカー22社
および日本産業洗浄協議会に打診

**日本産業洗浄協議会、他企業4社へプレゼン実施
(5社出席)**

成果普及・知財マネジメント

東大G、産総研Gについては集中研方式のため、内容がバッティングしていないか
予め各社間で確認・承認後に提出。知財に関する摩擦防止を図っている。

	特許出願 (外国出願)	論文 (査読有り)	外部発表	受賞実績	新聞・雑誌等 への掲載
東大G	7 (0)	17 (17)	58	0	7
分子研G	16 (8)	58 (58)	130	8	4
産総研G	31 (8)	25 (22)	91	2	4
合計	54 (16)	100 (97)	279	10	15

※外部発表には研究発表、講演、展示会への出展を含む

II. 研究開発マネジメント

(5) 情勢変化への対応

II. 研究開発マネジメント (5) 情勢変化への対応

4回の加速による効果

成果が顕著であるものの実用化を促進すべく、4度に渡り加速財源を投入

産総研G

平成23年度実施予定のベンチ設備による反応を**前倒しで設計**し、スケールアップの研究を早期に実施。
大量生産を開始する**予定時期を2年早める**ことができた。

東大G

平成24年中に本プロジェクトでの開発プロセスに**生産切り替え予定**。

分子研G

試料を高効率で容易にスケールアップ可能な**条件を確立**し、平成23年度内に**試料提供を実現**。

	多機能器具の改良技術開発	正付から正付への反応条件を変更し、開発を加速する。	従来のベンチ設備による反応を前倒しで設計し、スケールアップの研究を早期に実施。大量生産を開始する予定時期を2年早めることができた。
平成22年度			H23年度に実施予定のベンチ設備による反応を前倒しで設計し、スケールアップの研究を早期に実施。大量生産を開始する予定時期を2年早めることができた。
平成23年度			平成24年度に見込んでいたユーザー評価を平成23年度に実現。
平成24年度			フロー反応装置での反応スケールアップ検討が順調に展開し、平成24年中に本プロジェクトでの開発プロセスに生産切り替え予定
	件での酸素酸化反応の開発研究	圧力を多様な組み合わせで制御できる固体触媒反応装置を導入	試料検体を高効率で容易にスケールアップ可能な合成と条件を確立し、平成23年度内に複数回の試料提供を実現した。

グループ目標と達成状況

個別テーマ		触媒プロセス開発の目標	達成状況		
			触媒プロセス開発	実用化プロセス設計の開発	
東大 G	革新的アクア・固定化触媒 プロセス技術開発	水中エステル化反応の 反応率80%以上、 選択率90%以上	水中エステル化反応の 反応率80%以上 選択率90%以上	酢酸排水処理量300t/日以上想定での 実用化規模プロセスの概念設計実施	○
		・薬粧品原料の水素化に適した触媒。 金属漏出0.1%以下、 触媒回転数:5万回以上 ・反応基質に対応した高分子固定化Os触媒 により反応率85%、選択率95% 金属漏出1%以下、	・薬粧品原料の水素化に適した触媒。 金属漏出0.1%以下、 触媒回転数:5万回以上 ・反応基質に対応した高分子固定化Os触媒により 金属漏出1%、 反応率99%、選択率95%以上	・実生産規模でのフロー反応容器 の設計・製造実施 生産量30 kg/日以上達成 ・実生産を想定したスケールアップ合成 実施。1モルスケールでの合成達成	◎
分子研 G	高機能不均一触媒の開発と 環境調和型化学プロセスの 研究開発	TPDの合成 反応率80%以上、 選択率90%以上	TPDの合成 反応率96%以上、 選択率96%以上	ベンチスケール装置での合成プロトコル は確立 スケールアップ:数十グラム/日	○
		アルキルカルボン酸の合成 反応率80%、選択性90%、 溶出金属2ppm以下 触媒回収率98%以上。	アルキルカルボン酸の合成 反応率99%、選択性99%、 溶出金属0.1ppm以下 触媒回収率98%以上	・100グラムスケール合成/日達成 装置メーカーにより20-30倍スケール (2~3kg相当)の再現性確認 ・100グラムスケール合成/日達成	◎
産総研 G	革新的酸化プロセス 基盤技術開発	・オレフィン類の選択酸化反応では 反応率80%以上、選択率90%以上、 ・ケトン類の選択酸化反応では 反応率80%以上、選択率80%以上	オレフィン類の選択酸化反応では 反応率92%以上、 選択率92%以上、 ケトン類の選択酸化反応では 反応率95%以上、 選択率85%以上	数百~数十kg/日(流通)あるいはrun (バッチ)規模のベンチスケール装置 を製作・運転して成果の実証実施。	◎

◎ 大幅達成、○達成、△達成見込み、×未達

基本計画の目標値を全て達成

「革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発」

(事後評価)

(2009年度～2011年度 3年間)

プロジェクトの概要(公開)

東京大学大学院理学系研究科

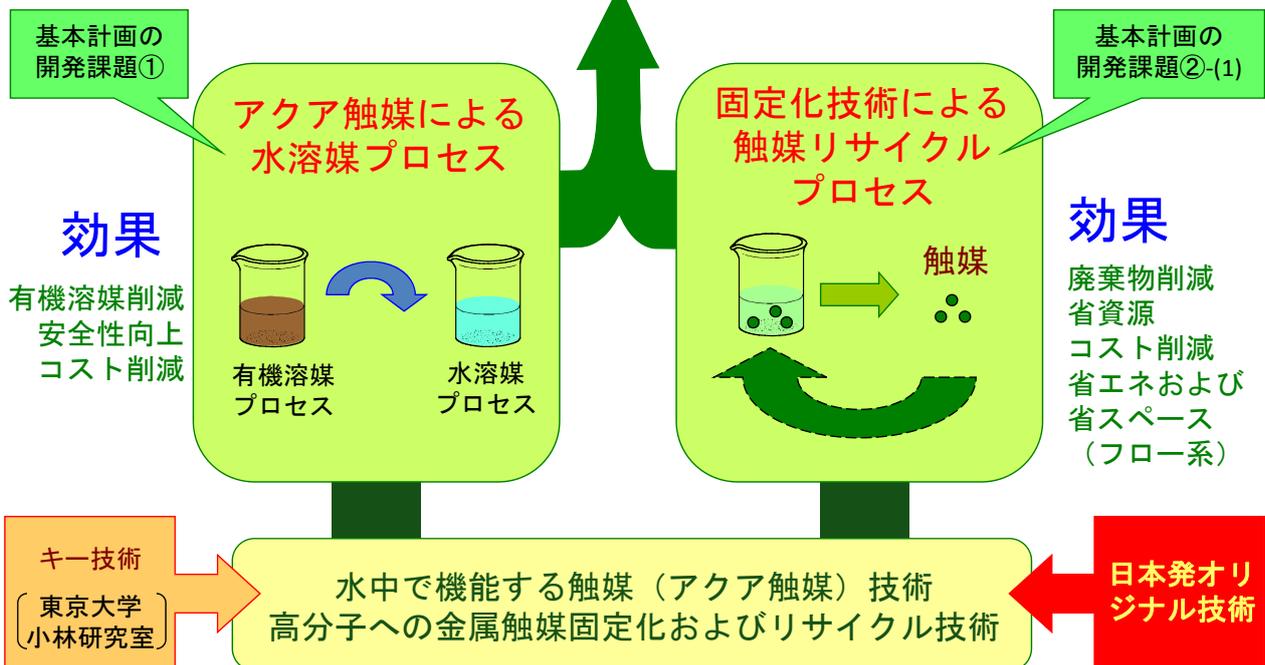
2012年9月14日

1/25

研究開発概要

公開

世界をリードする日本発の革新的触媒プロセス



2/25

共同開発テーマ

公開

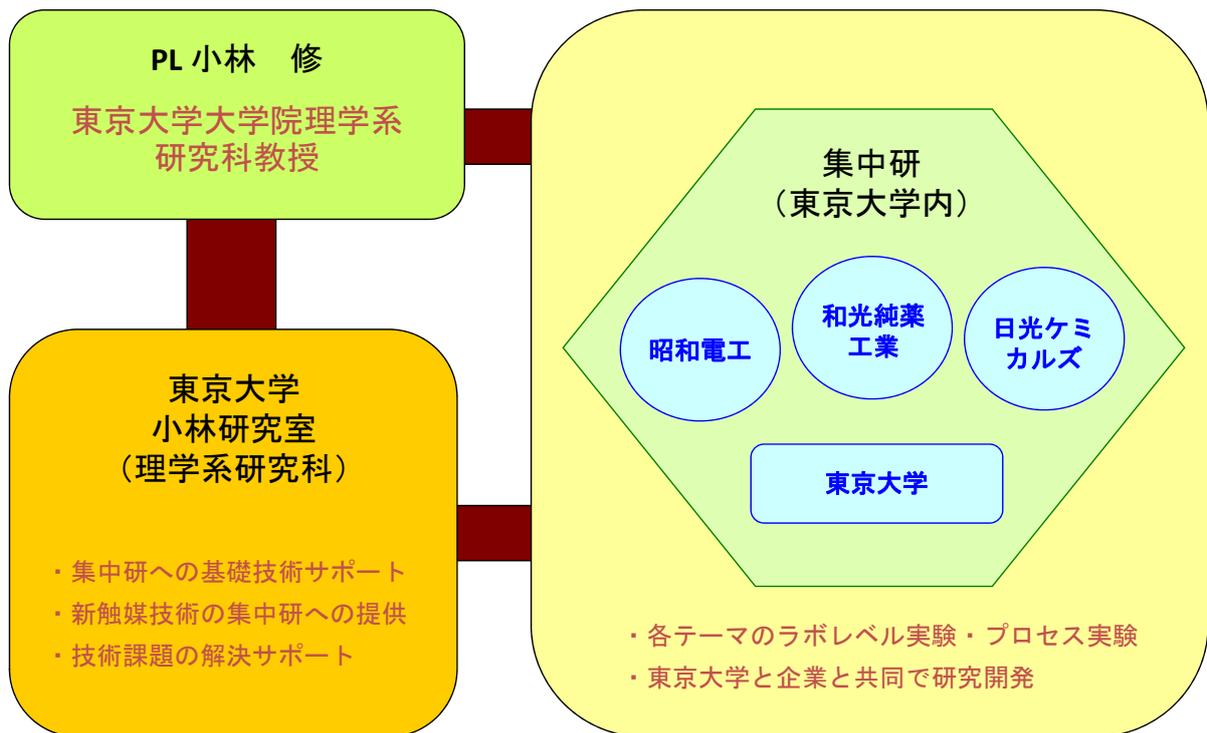


事業原簿 II-8~12

3/25

集中研の体制

公開



事業原簿 II-19

4/25

(1)個別研究開発項目の目標と達成状況(昭和電工・東京大学)

	目標	成果	達成度	今後の課題
<p>①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発</p> <p>(1)水、アルコール等で機能する触媒の高機能化、回収・再生及び製造に関する共通基盤技術</p>	<p>①水、アルコール等で機能する触媒の活性・耐久性向上</p> <p>・水、アルコール等で機能し、反応率80%以上、選択率90%以上の触媒プロセスを開発する。</p> <p>②触媒反応プロセス、分離回収・再生技術に関する実用化基盤技術</p> <p>・生産量(処理量)10kg～数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。</p>	<p>①酢酸のエステル化に有効なアクア触媒を検討し、反応率80%以上、選択率90%以上の触媒プロセスを達成。また、廃水への触媒溶出を抑えるため、触媒の水層溶け込み量を一定量以下に抑制。②反応後の分離・回収・再生が可能な触媒開発を達成し、このプロセスをもとに酢酸排水処理量300t/日以上を想定した実用化規模プロセスの概念設計を行い、経済性評価を実施し、実用化に向けた課題を確認。</p>	○	触媒改良によるコスト削減

(1)個別研究開発項目の目標と達成状況(日光ケミカルズ・東京大学)

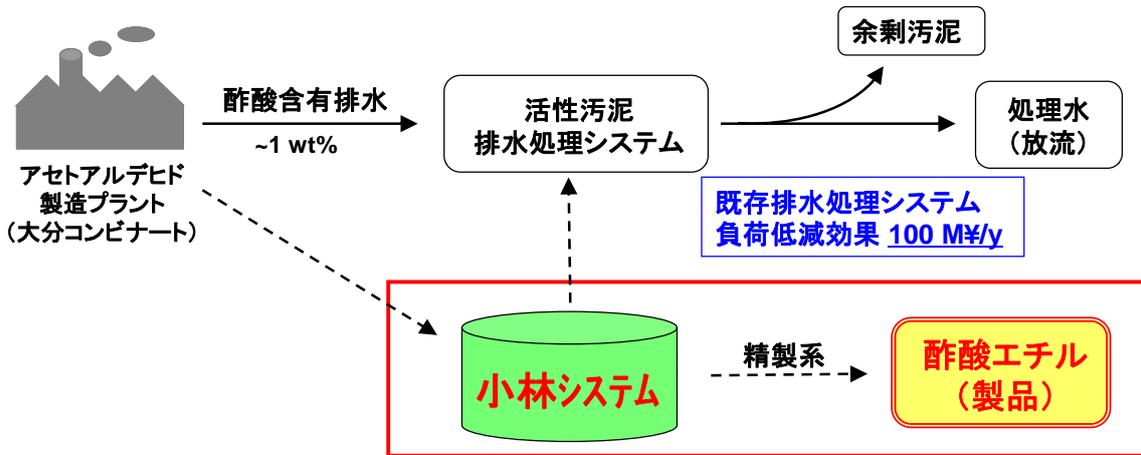
	目標	成果	達成度	今後の課題
<p>②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発</p> <p>(1)新規な触媒固定化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術</p>	<p>①高活性、高選択性かつ再生可能な新規な固定化触媒プロセスの開発</p> <p>・反応率80%、選択性90%、溶出金属回収率98%以上。</p> <p>②新規な固定化触媒による実用化プロセスに関する設計・開発</p> <p>・生産量10kg～数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。</p>	<p>①ポリシラン固定化パラジウム触媒を用いることで、高活性、高選択性かつ再生可能な新規な固定化触媒プロセスの開発を達成し、目標である反応率80%、選択性90%を大きく超えており、溶出金属も検出限界以下であり、数値目標を大きく超えて達成。</p> <p>②実生産規模でのフロー反応容器の設計・製造を行い、実際に反応を行い、生産量30kg/日以上を達成した。この水素化システムは本年の実用化が既に決定しており、他の原料を用いるプロセスも今後順次実用化予定。</p>	◎	他製品への適用

(1)個別研究開発項目の目標と達成状況(和光純薬工業・東京大学)

	目標	成果	達成度	今後の課題
<p>②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発 (1)新規な触媒固定化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術</p>	<p>①高活性、高選択性かつ再生可能な新規な固定化触媒プロセスの開発 ・反応率80%、選択性90%、溶出金属回収率98%以上。 ②新規な固定化触媒による実用化プロセスに関する設計・開発 ・生産量10kg～数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。</p>	<p>①PI Os触媒を二種類開発し、モデル基質において目標値である反応率80%以上、選択性90%以上を達成し、金属溶出の抑制の目標も達成している。 ②実生産を想定した抗がん剤Camptothecin中間体のスケールアップ合成を行い、1モルスケール(反応時間16h)での合成を達成し、工業化の可能性を示すことができた。また、各PI触媒についてスケールアップ合成が可能であることを示した。</p>	◎	ユーザー企業へのPR、受託合成

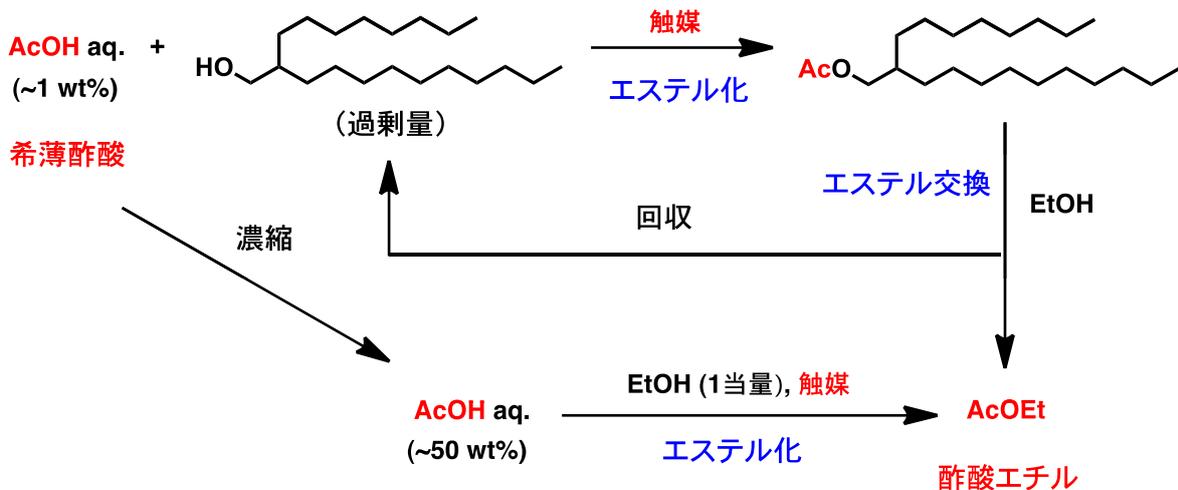
- いずれのテーマにおいても、東京大学の日本発オリジナル技術をもとに、グリーンな触媒プロセス開発において高い収率や選択率、触媒のリサイクル等を達成しており、**基盤技術開発としての目標は達成**できた。
- 各テーマのプロセスの実用化に関しては、
 - ・水素化システムは**本年実用化**予定、
 - ・グリーン触媒試薬(PI触媒)は顧客開拓により**実用化**予定、
 - ・水中エステル化プロセスは触媒改良により**経済性を再評価**予定、となっている。**研究開発はいずれも継続**している。
- これらの触媒技術は種々のアクア・固定化触媒プロセスに応用可能であり、市場の拡大等**大きな波及効果**が期待できる。

個別テーマの成果～希薄酢酸の回収(昭和電工・東京大学)



ALD製造プラント排水から酢酸を50%回収
小林システム／従来システム併用でコンビナート排水バランス維持

個別テーマの成果～希薄酢酸の回収(昭和電工・東京大学)

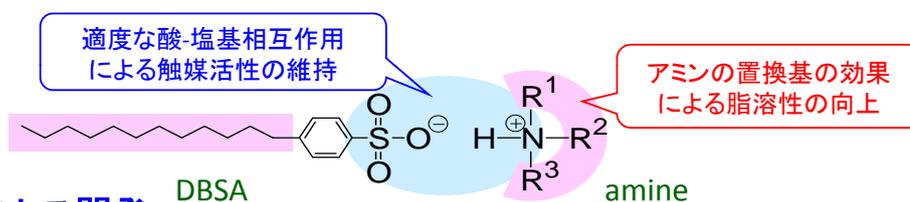


◆ 過剰量の脂溶性アルコールを用いてエステル化を行うエステル化／エステル交換プロセスと、希薄酢酸を濃縮した後にエタノールを1当量用いて酢酸エチルを直接合成する酢酸濃縮／エステル化プロセスを検討

個別テーマの成果～希薄酢酸の回収(昭和電工・東京大学)

◆触媒開発

触媒活性と脂溶性を両立させた**新規アミン塩触媒**等の触媒を開発



◆プロセス開発

エステル化／エステル交換プロセス、及び酢酸濃縮／エステル化プロセスの二つを検討し、後者において水中エステル化反応**収率90%以上**を達成、精製工程も簡略化

◆生産コスト試算

酢酸濃縮/水中エステル化法により、**大幅なコストダウン**達成
設備償却負担が未だ大きく、さらなるコストダウンが必要

◆実用化の見通し

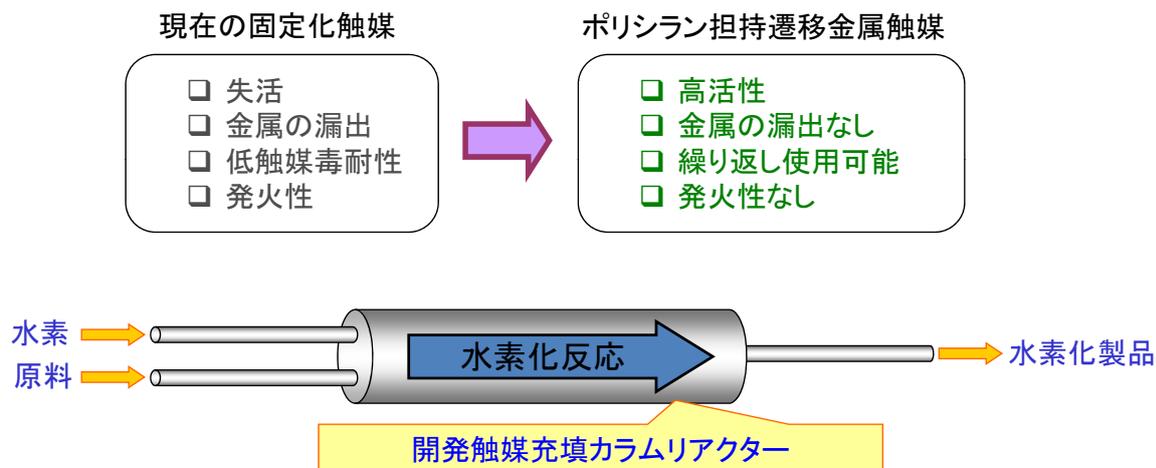
産学連携を図りながら、大学での触媒開発を継続

個別テーマの成果～希薄酢酸の回収(昭和電工・東京大学)

成果の意義

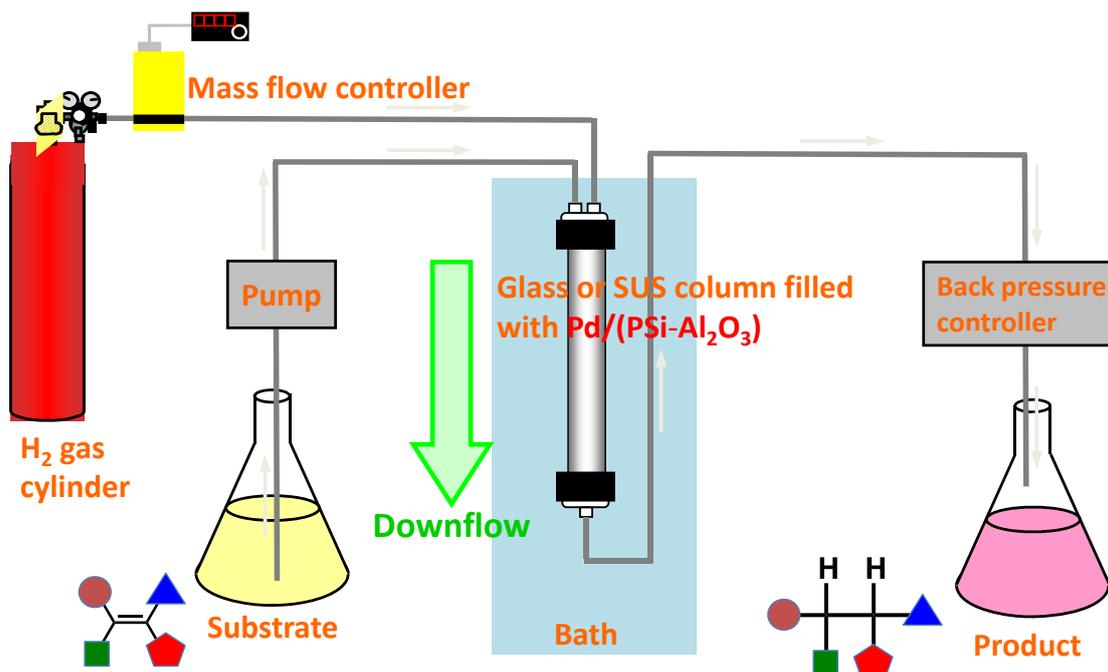
- ◆ 従来技術では困難な、希薄な酢酸水溶液からオリジナルの触媒でのエステル化反応を鍵工程とすることで酢酸エチルを得る技術を開発した。**世界最高水準**であり、他のアクアプロセスへの応用も可能。
- ◆ 当初は水層への触媒の溶出が問題となっていたが、触媒を再設計(脂溶性のアミン塩とする等)することで**溶出を抑制**することも達成した。
- ◆ 本テーマでは**特許出願を6件**行っており、他の酢酸排水への適用等の**波及効果が期待**できる。原料が低濃度のものであっても適用可能であり、**水を溶媒とするグリーンプロセス**が開発できる。

個別テーマの成果～水素化システム開発(日光ケミカルズ・東京大学)



- ◆ 独自に開発したポリシラン固定化パラジウム触媒による水素化システム開発
- ◆ フローリアクターに触媒を充填することにより、連続フロー反応を行う
- ◆ 高い収率、触媒の高い耐久性を目指す

個別テーマの成果～水素化システム開発(日光ケミカルズ・東京大学)



- ◆ 上図の反応システムにより種々の薬粧品原料の水素化反応を行う。

個別テーマの成果～水素化システム開発(日光ケミカルズ・東京大学)

◆触媒開発

ポリシランを高分子担体として用い、ほぼ均一な**パラジウムクラスター**が生成
ポリシランの構造を検討、また二次担体としてアルミナを活用

◆プロセス開発

触媒をフローリアクターに充填し、水素化プロセスを検討、**収率目標達成**
種々の製品において目標とする収率を達成、触媒耐久性も確認、**金属漏出<0.1%**
順次リアクターのスケールアップを行い、**直径200mm(実機レベル)も達成**

◆生産コスト試算

触媒調製方法において、目標とするコスト削減を達成、**実用化可能と判断**

◆実用化の見通し

既存のプロセスから開発プロセスに**本年切り替え**予定
他の製品も順次実用化を進める予定

個別テーマの成果～水素化システム開発(日光ケミカルズ・東京大学)

成果の意義

◆ 従来技術では困難な、長時間の連続生産可能な水素化反応システムをオリジナルの触媒を用いて開発した。本技術は**世界最高水準**であり、**種々の製品や水素化反応に汎用性がある。**

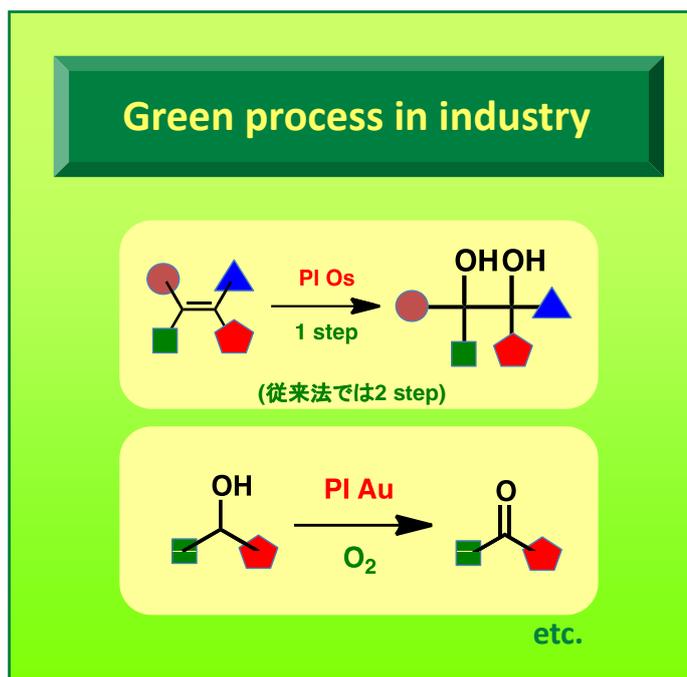
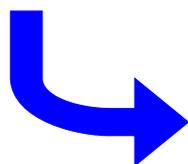
◆ 開発した水素化プロセスは、既に**本年の実用化が決定している**。他の種々の製品に関しても現在検討中であり、**事業拡大の予定**である。一方で、触媒の構造・活性の研究を引き続き行っていく。

◆ 水素化プロセスは最も頻用される反応の一つであり、技術の**波及効果**が期待できる。例として食品やファインケミカル、石油化学において、**金属廃棄の無いグリーンな水素化プロセス**の実現が期待できる。

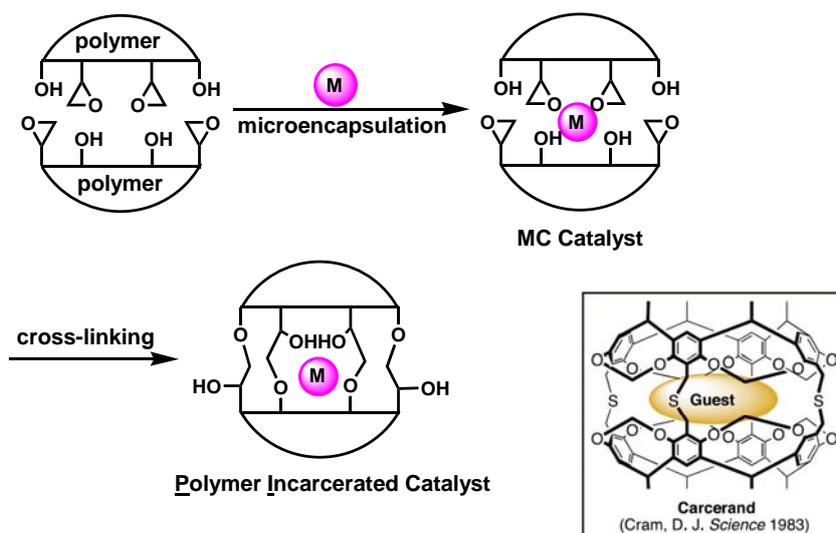
個別テーマの成果～グリーン触媒試薬開発(和光純薬工業・東京大学)

高分子カルセランド型触媒 (PI触媒)
 PI Os, PI Pd, PI Au, PI Pt, etc.

グリーン試薬
 (リサイクル可能)



個別テーマの成果～グリーン触媒試薬開発(和光純薬工業・東京大学)



- ◆ 独自に開発した高分子カルセランド型金属触媒(PI触媒)を活用し工業化を目指す
- ◆ 毒性の高いオスmium触媒を固定化することで無毒化し、グリーンプロセスを開発
- ◆ オスmium以外の金属(パラジウム、金、白金)についてもPI触媒を開発

個別テーマの成果～グリーン触媒試薬開発(和光純薬工業・東京大学)

◆触媒開発

高分子カルセランド型**オスミウム**触媒(PI Os)を開発、配位子固定化も検討
パラジウム、白金、金を固定化したPI触媒も開発

◆プロセス開発

PI Osによる触媒的不斉ジヒドロキシル化反応を行い、**目標値を達成**
抗がん剤カンプトテシン中間体の**1モル合成(スケールアップ合成)**を達成
パラジウム、白金、金を固定化したPI触媒の**100g合成**を達成

◆生産コスト試算

PI Osは繰り返し使用することで、固定化前のオスミウム触媒よりコスト削減可能

◆実用化の見通し

開発触媒は**市場にサンプル供給中**
企業へのPRにより実用化を目指す。受託合成も実施予定

個別テーマの成果～グリーン触媒試薬開発(和光純薬工業・東京大学)

成果の意義

◆ 従来技術では困難な、工業化可能な一段階ジオール化反応をオリジナルの触媒技術を用いて開発した。触媒はリサイクル可能であり、オスミウムの毒性・揮発性が抑制されている。本技術は**世界最高水準**であると言える。様々なジオール化プロセスに適用可能性がある。

◆ PI触媒は、オスミウム以外の様々な金属の固定化が可能であり、**リサイクル可能な、金属廃棄物のないプロセスが可能**である。パラジウム、金、白金でのスケールアップ合成及び反応適用が達成されており、これらを含めた種々の金属での工業化が期待できる。

◆ 触媒開発を継続中であり、上記以外のPI触媒の開発が進んでいる。
様々な金属や反応の適用が可能であり、**汎用性のある触媒技術である**。

(3)知的財産権、成果の普及

	H21	H22	H23	計
特許出願(うち外国出願)	3	1	3	7件
論文(査読付き)	0	6	11	17件
研究発表・講演	6	15	22	43件
受賞実績	0	0	0	0件
新聞・雑誌等への掲載	0	3	4	7件
展示会への出展	5	5	5	15件

◆ポスドクを積極的に雇用することにより人材育成に貢献

スライドのみ表示

※平成23年度6月15日 化学工業日報

(1) 成果の実用化可能性

希薄酢酸の回収

本テーマの実用化には経済性評価の改善が必要であり、ラボレベルでの**触媒プロセス検討**を継続することでコスト削減を目指す。経済性の評価が改善されれば実用化に向けて開発を進める。

水素化システム開発

開発した水素化プロセスは、日光ケミカルズにおいて既存プロセスの置き換えが決定しており、**本年中に実用化される**。他の種々の製品に関しても現在検討中であり、**事業拡大の予定**である。

グリーン触媒試薬開発

本プロジェクトで開発したPI触媒を**ユーザーにサンプル提供**しており、今後は**ユーザーによる工業化や、和光純薬工業による受託合成**を目指す。試薬としても和光純薬工業より販売する。試薬販売は実用化の一つの形であるが、PI触媒が実生産プロセスの触媒として用いられるのを最終的な実用化として目指す。そのためのPR活動を行っている。

	2012	2013	~	2017	~	2020近傍
アクア触媒技術	触媒改良、コスト試算 他のエステル化プロセス適用の調査・検討		触媒改良・プロセス検討・事業化検討・他プロセス検討 酢酸エステル合成プロセス			酢酸回収・エステル化プロセスへの波及効果 アクア触媒による化学プロセス全般
ポリシラン触媒技術	サンプル試作・ユーザー評価・製造開始 パイロットプラント試験・プラント建設		量産化・事業拡大 化粧品・医薬品原料			薬粧品以外の水素化プロセスへの波及効果 食品・ファインケミカル・石油化学等
PI触媒技術	触媒サンプルの市場への供給 企業に対するPR活動		工業スケールでの事業化検討 不斉ジヒドロキシル化反応 医薬品合成			固定化金属触媒(Os, Pd, Pt, Au等)の事業化 医薬品・化成品・ファインケミカル・受託合成

実用化された際の効果

(1)経済効果

本成果における革新的触媒技術は化学プロセスに対する汎用性の高いものであり、今回のプロジェクトにおいて直接ターゲットとしたプロセス以外の化学品生産プロセスに対しての波及効果が十分に見込める。

酢酸排水処理プロセスへの適用や、水素化反応市場・医薬品事業市場等への波及効果を想定することで約140億円／年の市場拡大効果が期待できる。

(2)GSC効果

金属廃棄物を出さない水素化プロセスの実用化により本プロジェクトのGSC効果も十分得られていると考えられる。今後の水素化プロセスの事業拡大や、アクアプロセスやPI触媒のテーマの進展により、さらに高いGSC効果が見込める。

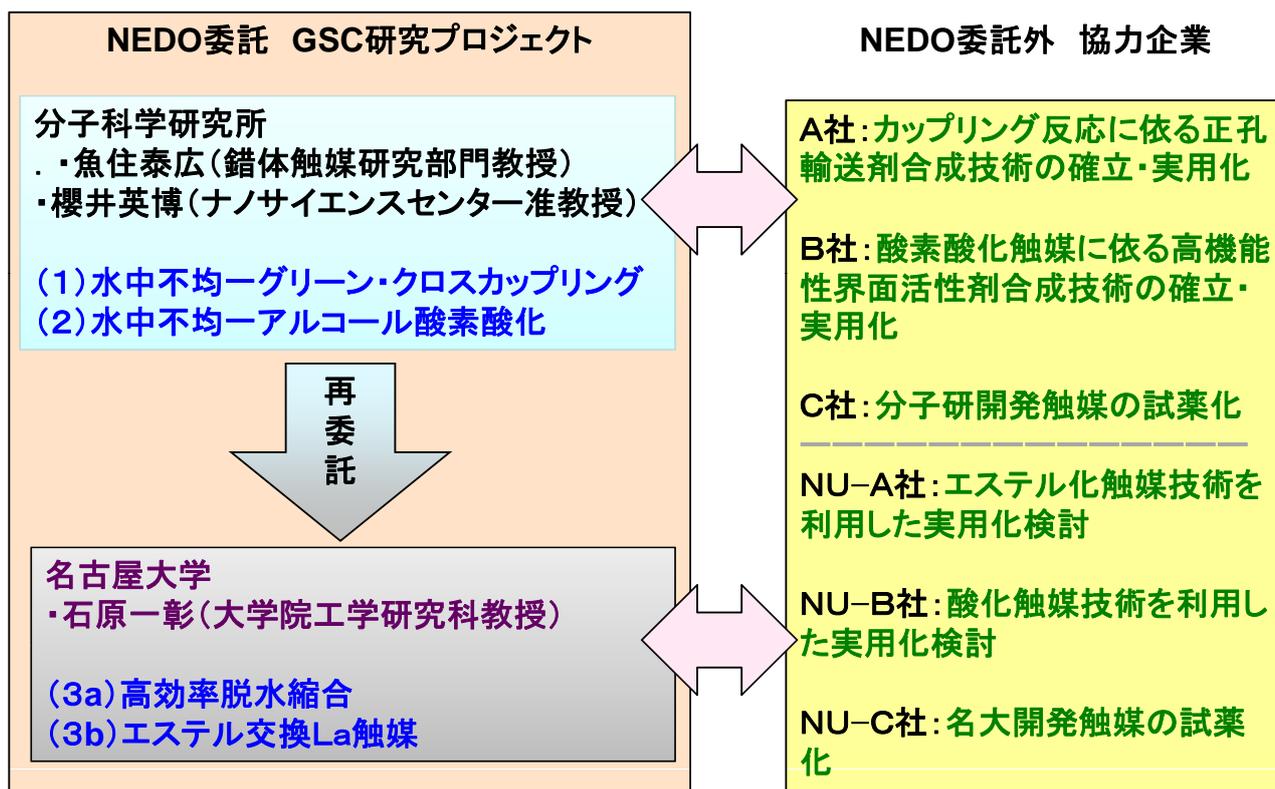
グリーン・サステイナブルケミカルプロセス
基盤技術開発プログラム
高機能不均一触媒の開発と環境調和
型化学プロセスの研究開発
(2009-2011年度 3年間)
プロジェクトの概要 (公開)

魚住泰広
分子科学研究所
2012年 9月14日

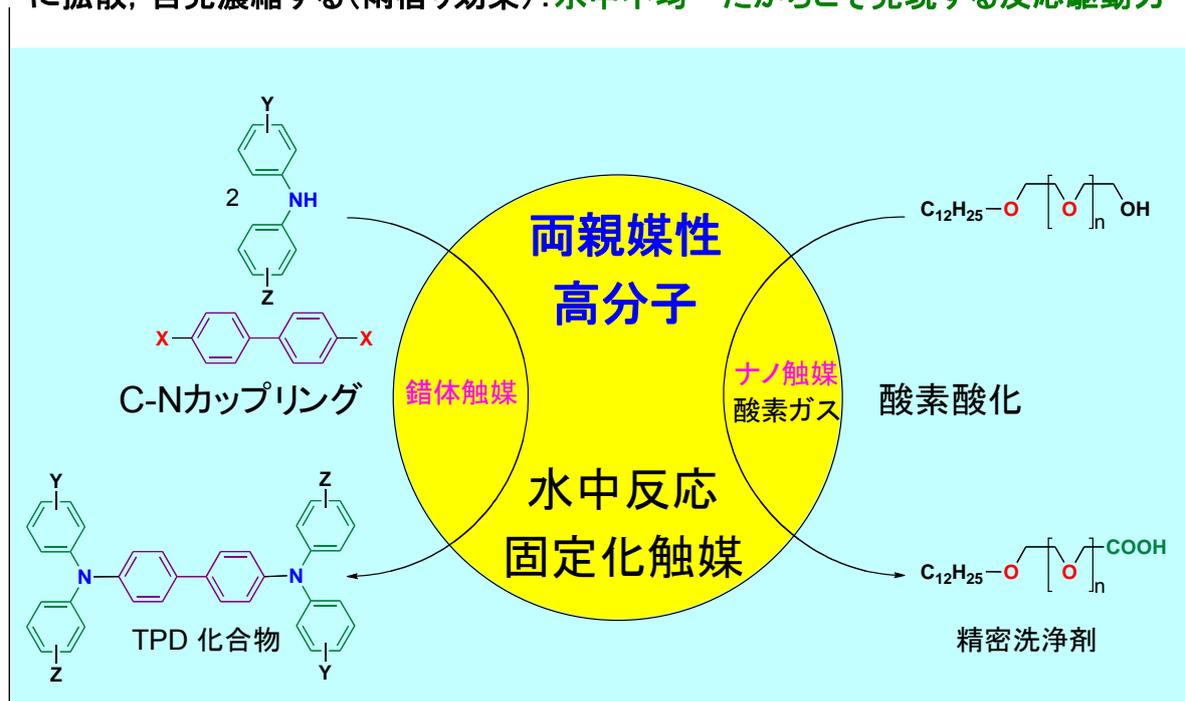
3. 研究開発成果について (1) NEDO設定課題と具体的検討内容

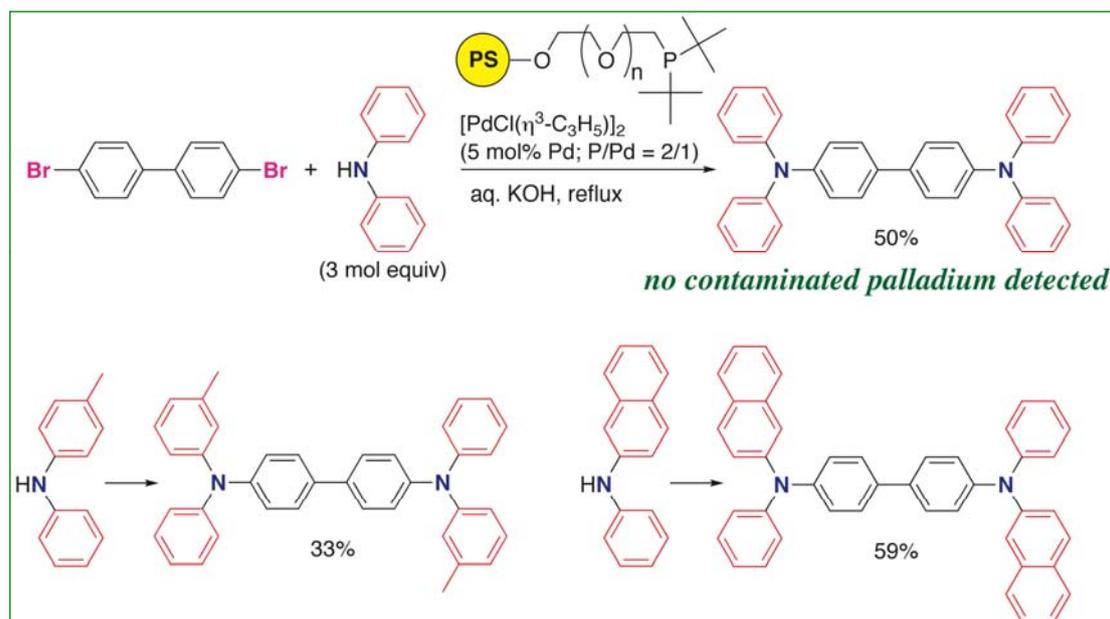
公開





水中において、本来「油」である有機分子は両親媒性高分子マトリクス内に能動的に拡散、自発濃縮する(雨宿り効果):水中不均一だからこそ発現する反応駆動力





【プロセス】
水中触媒反応
触媒回収再利用
金属漏出無し

【標的】
正孔輸送剤

※正孔輸送剤の実勢価格は10-100万円/g
1キロのプロセスは1-10億円の価格相当

※国内白熱灯をEL照明にすると温室ガス削減効果143万トン(CO₂換算)

(1) 個別研究開発項目の目標と達成状況(i)

テーマ:高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発【有害物質削減】

	目標	成果	達成度	今後の課題
① 錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の研究開発(グリーンカップリングプロセス)	電子材料としての特定の化学物質に特化したプロセスで数値目標を達成し、目的化合物の10 kg以上のスケールを想定したプロセスを確立しサンプル製造を実施する。	目標の芳香族アミノ化反応、芳香族カップリング反応は完全水系条件で達成。数値目標は達成。スケールアップは数十グラムまで。	○	触媒の簡便な回収手法、あるいは連続フロープロセス化を実現する。また、より安価なキトサンなどのバイオマス担体を利用したアミノ化触媒、ビアリールカップリング触媒の完成を経て、さらに実用性に富むプロセスを確立する。
	最終目標 反応率80%以上 選択率90%以上 金属漏出2 ppm以下 触媒回収80%以上	最終到達成果 反応率96%以上 選択率96%以上 金属漏出1ppm以下 触媒回収90%以上		

◎ 大幅達成(全的に所期目標を越え、実用化に至りつつある)

○ 達成(概ね所期目標に到達しつつある)

△ 達成見込み(所期目標到達度が7割を越え、更なる進展が見込まれる)

× 未達(所期目標到達度が7割程度以下)

高分子ビーズ (φ=100 μm) 内で金属ナノ粒子を発生

発生したナノ粒子

nano-Pt (0.17 mmol Pt) (flow reactor)

O₂, H₂O, 100°C
9 d, 10 L
System Pressure: 60 bar
Flow Rate: 0.8 mL/min
Contact Time: 55 sec

TON = 2K

100% conv. (120 g)

Chemical structures: C11H23[CH2]3O[CH2]3OH and C11H23[CH2]3O[CH2]3COOH

【プロセス】
水中触媒反応
触媒回収再利用
フローシステムへの展開
酸素ガスのみで酸化

【標的】
カルボン酸型界面活性剤
PFC代替洗浄剤
※PFCの温室ガス効果は
約17百万トンCO₂相当
PFCの1割を削減するとCO₂
排出量取引の実勢相場換算
で150-300億円に相当

【アウトプット】
ナノ白金触媒は試薬
化決定, 技術移転中

(1) 個別研究開発項目の目標と達成状況(ii)

テーマ:高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発【有害物質削減】

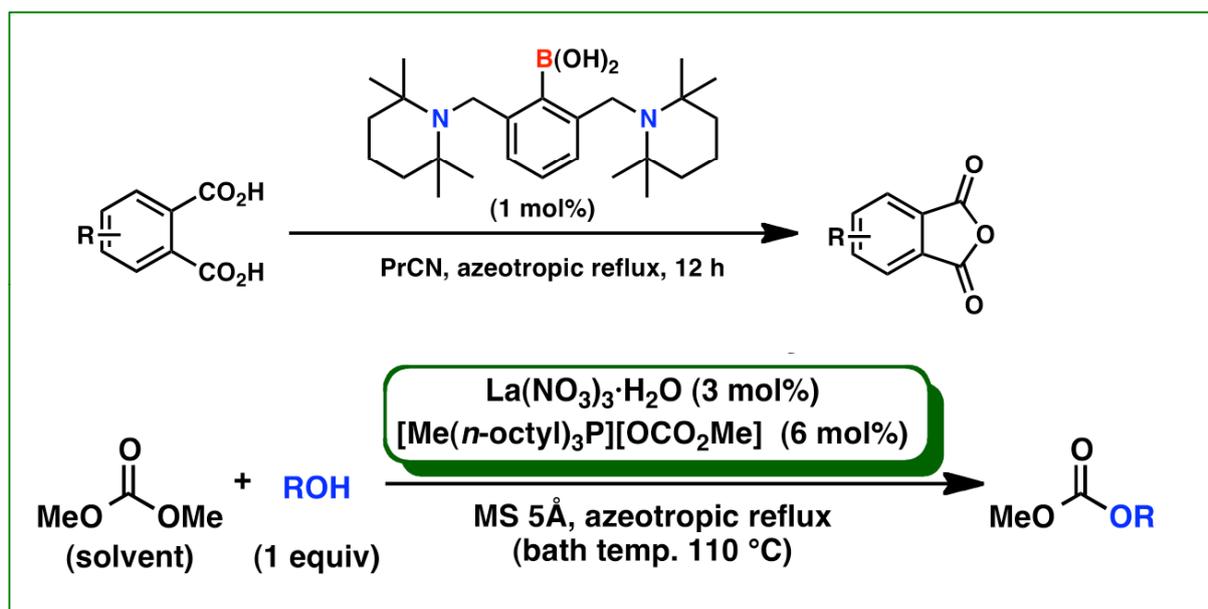
	目標	成果	達成度	今後の課題
② ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の研究開発(グリーン酸化プロセス)	特定の目標化学物質の10 kg以上のスケールを想定したプロセスを確立しサンプル製造を実施する。 触媒工程のフロープロセス化を実施する。	目標のアルコール類の酸素酸化は完全水系条件で達成。 サンプル製造実施済み(数百グラム)。	◎	開発触媒は既に製品化予定 実際のクライアント(製品ユーザー企業)の用途に合わせた製品スペック(純度, コスト等)の見直し, 微調整 ※製品はPFC代替精密洗浄剤
	最終目標 反応率98%以上 選択率95%以上 金属漏出1 ppm以下 触媒回収98%以上 触媒コスト90%低減	最終到達成果 反応率99%以上 選択率99%以上 金属漏出0.1ppm以下 触媒回収98%以上 プロセスのフロー化に成功し触媒の消耗消費90%低減を達成		

◎ 大幅達成(全面的に所期目標を越え, 実用化に至りつつある)

○ 達成(概ね所期目標に到達しつつある)

△ 達成見込み(所期目標到達度が7割を越え, 更なる進展が見込まれる)

× 未達(所期目標到達度が7割程度以下)



【プロセス】
高効率触媒反応
塩化物フリーの縮合

【標的】
ポリイミド原料
であるピロメリット酸無水物など

※ホウ酸試薬は既に製品化、販売済み
※塩化物フリー縮合により温暖化物質である塩素排出を根絶できる

(1) 個別研究開発項目の目標と達成状況 (iii)

テーマ: 高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発【有害物質削減】

	目標	成果	達成度	今後の課題
③ エステル, アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究 (グリーン縮合プロセス) ※再委託先: 名古屋大学	独自の高活性触媒を開発・確立しキログラムスケールを想定した反応系でのカルボン酸無水物, エステル, アミド類製造を実施する。	触媒量0.01以下で100グラムスケールのカルボン酸無水物合成を達成 触媒の回収再利用達成	◎	開発触媒は既に製品化予定 ポリエステル, ポリアミド, ポリイミド樹脂のグリーン製造技術へ展開する。
	最終目標 反応率80%以上 選択率90%以上 反応時間24時間以内 反応温度170℃以下 触媒量0.05以下, あるいは触媒回収98%	最終到達成果 反応率95%以上 選択率98%以上 反応温度, 時間は目標値以内 触媒量は目標の1/5		

◎ 大幅達成(全面的に所期目標を越え, 実用化に至りつつある)

○ 達成(概ね所期目標に到達しつつある)

△ 達成見込み(所期目標到達度が7割を越え, 更なる進展が見込まれる)

× 未達(所期目標到達度が7割程度以下)

(4)知的財産権、(5)成果の普及

	H21	H22	H23	計
特許出願(うち外国出願)	3 (PCT:1)	8 (外国:2) (PCT:2)	3 (PCT:2)	14件
論文(査読付き)	15	20	23	58件
研究発表・講演	25	34	71	130件
受賞実績	2	1	5	8件
新聞・雑誌等への掲載	0	0	4	4件
展示会への出展	0	0	0	0件

事業原簿 III.2.1

※ : 平成24年度5月31日現在

10/13

【新聞等報道(代表的なもの)】

アジア化学雑誌:2010/05 表紙を飾る

化学工業日報:2010/08/14

化学工業日報:2011/04/07

日刊工業新聞:2011/09/16

中日新聞:2011/12/15

日経プレス:2012/01/12

化学工業日報:2012/01/13

日刊工業新聞:2012/01/18

科学新聞:2012/04/20

日刊工業新聞:2012/08/28

【受賞(代表的なもの)】

向山賞:2009年(石原)

井上學術賞:2010年(魚住)

井上學術賞:2011年(石原)

【人材育成】

雇用ポストA:国内アカデミック助教

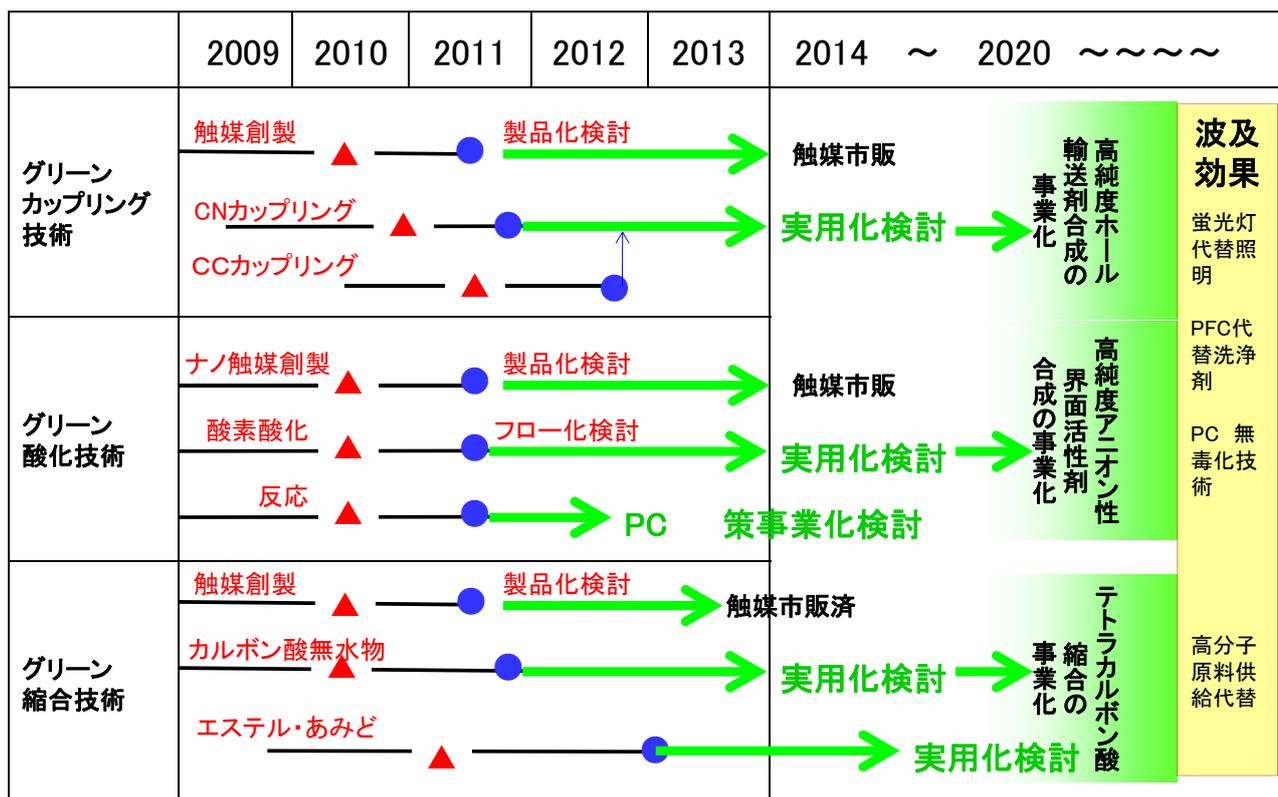
雇用ポストB:国外(中国)アカデミック講師

事業原簿 III.2.1

11/13

研究課題	最終目標(平成23年度末)	達成見通し
① 錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の研究開発 (グリーンカップリングプロセス)	芳香族アミノ化プロセス触媒の確立 TPD類合成プロセスへと展開 ・反応率80%以上 ・選択率90%以上 ・金属漏出2 ppm 以下 ・触媒回収80%以上	触媒開発に成功(特許出願) TPD試料合成(数十グラム) ・数値目標は全てクリア 所期目標は達成されている
② ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の研究開発 (グリーン酸化プロセス)	アルコール酸素酸化触媒の確立 アニオン界面活性剤合成プロセスへと展開 ・反応率98%以上 ・選択率95%以上 ・金属漏出1 ppm 以下 ・触媒回収98%以上 ・触媒コスト90%低減	触媒開発に成功(製品化見込) 高純度界面活性剤試料合成(数百グラム) ・数値目標は全てクリア 所期目標は達成されている
③ エステル、アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究(再委託研究) (グリーン縮合プロセス)	カルボニル縮合触媒の確立 カルボン酸無水物合成プロセスへと展開 ・反応率80%以上 ・選択率90%以上 ・反応時間24時間以内 ・反応温度170℃以下 ・触媒量0.05以下	触媒開発に成功(一部既に製品化済み) ・数値目標は全てクリア 所期目標は達成されている

4. 実用化の見通しについて:実用化までのシナリオ



▲: 基本原理確認 ●: 基本技術確立

グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発
「革新的酸化プロセス基盤技術開発」
 (事後評価)
 (2009年度～2011年度 3年間)

プロジェクトの概要 (公開)

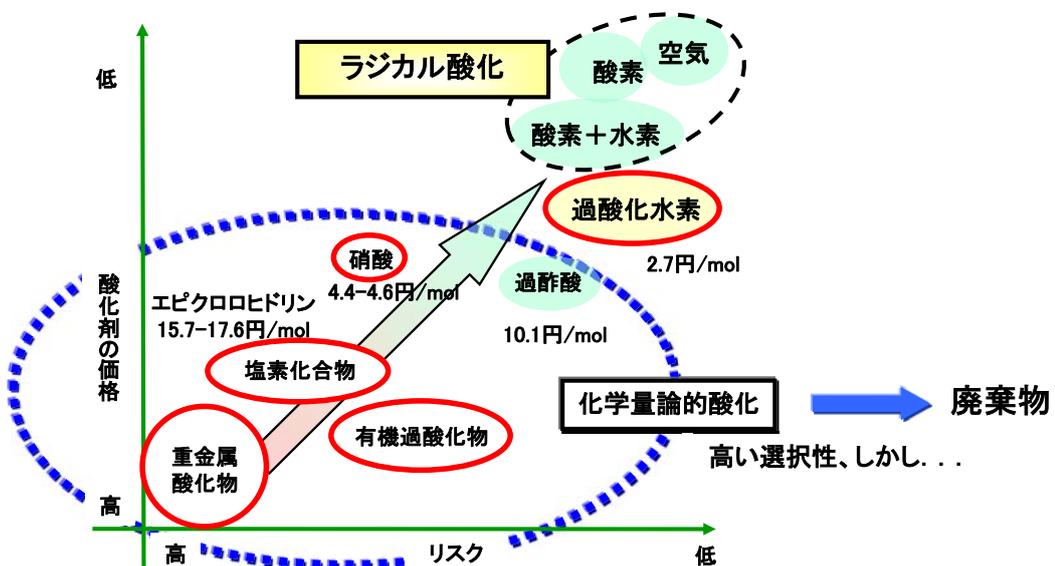
産業技術総合研究所
 2012年 9月14日

3. 研究開発成果について

公開

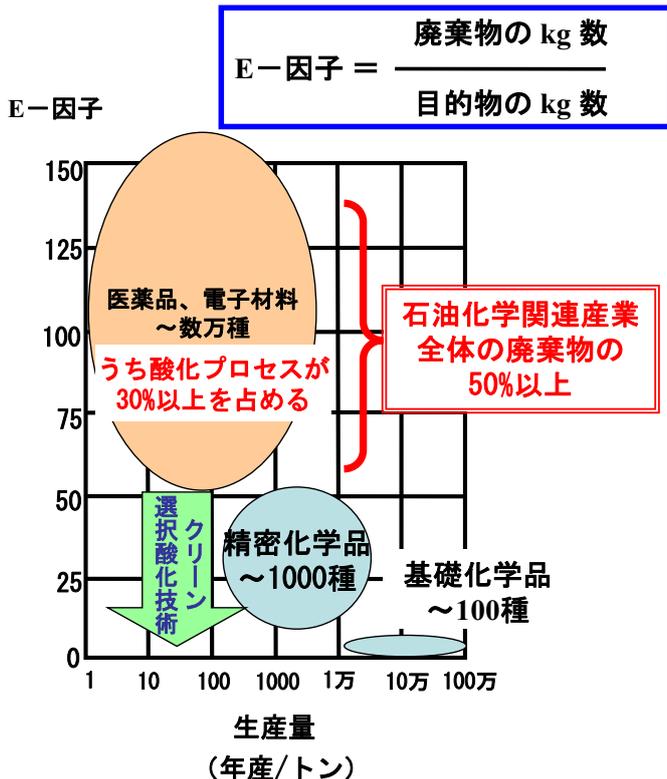
酸化反応の重要性と問題点

酸化反応: 全化学プロセスの30%以上



3. 研究開発成果について

廃棄物の極小化による低環境負荷なプロセスの開拓



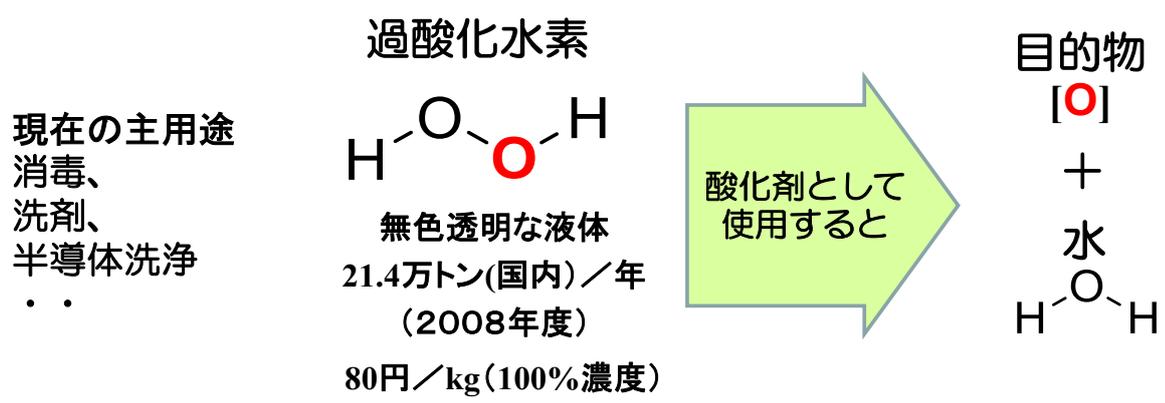
② 廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発

基本計画の最終目標

- ① 高性能触媒による酸化プロセス開発
反応率80%、選択率90%以上
- ② 実用化プロセスに関する設計・開発
生産量10kg～数トン／日以上を想定し、
実用化規模プロセスの概念設計
⇒ベンチプラントの運転による成果の実証

3. 研究開発成果について

過酸化水素について - 酸化剤としての利用 -

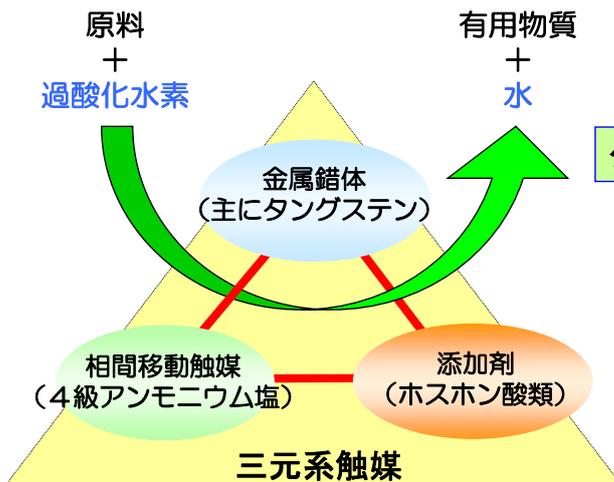


副生物が水のみクリーン酸化剤
但し、

- ・ そのものの酸化力は弱い
- ・ 濃度50%以上は爆発物

45%程度以下で使用し、
触媒による活性化が必須

過酸化水素酸化技術 —触媒の設計が鍵—



グリーン・サステイナブルな酸化技術

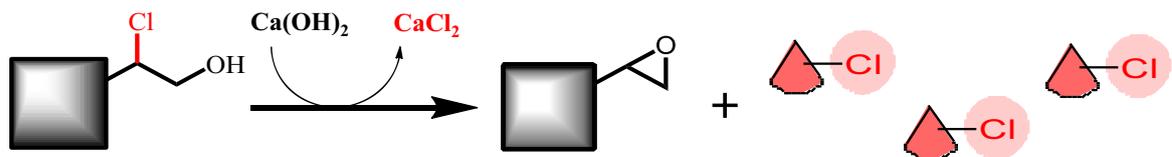
- ・高活性、高選択性
- ・ハロゲンフリー
- ・副生物は水のみ

本プロジェクトでは、

- バルク、セミバルク → ファイン、スーパーファイン
- 不均一系触媒 → 均一系(相間移動)触媒

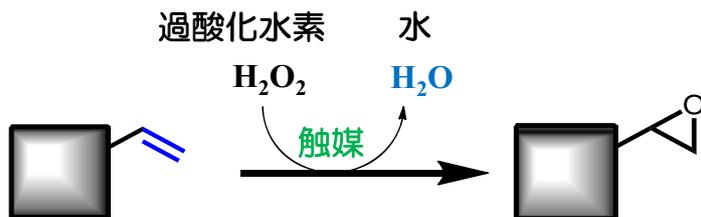
エポキシ化における従来法と過酸化水素酸化法の比較

従来法(エピクロロヒドリン法)



- ・塩素化合物を原料とするために廃棄物処理の負担が大
- ・不純物として混入する有機塩素化合物により、電気絶縁性が低下

過酸化水素酸化法

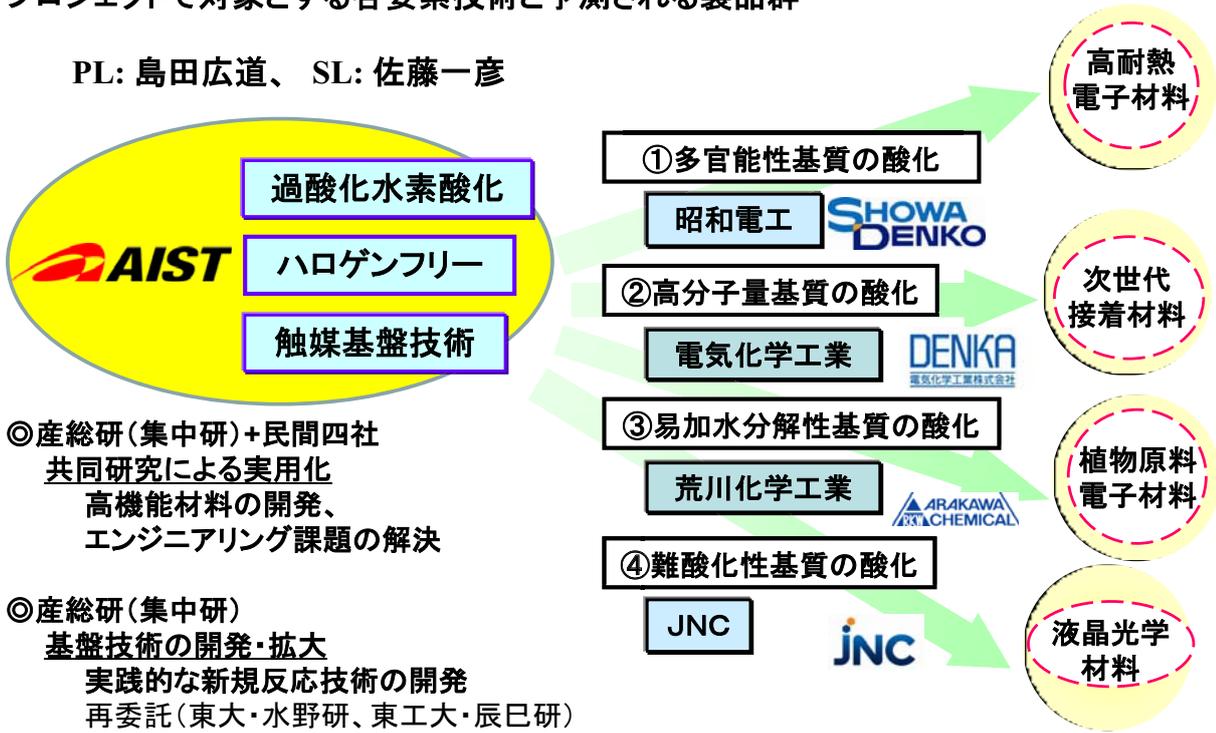


クリーンなプロセスを採用することで、性能も向上

- ・塩素を使用しない合成法
- ・有機塩素化合物がそもそも存在しない条件のため、電気絶縁性能等が飛躍的に向上

プロジェクトで対象とする各要素技術と予測される製品群

PL: 島田広道、 SL: 佐藤一彦



◎産総研(集中研)+民間四社
共同研究による実用化
高機能材料の開発、
エンジニアリング課題の解決

◎産総研(集中研)
基盤技術の開発・拡大
実践的な新規反応技術の開発
再委託(東大・水野研、東工大・辰巳研)

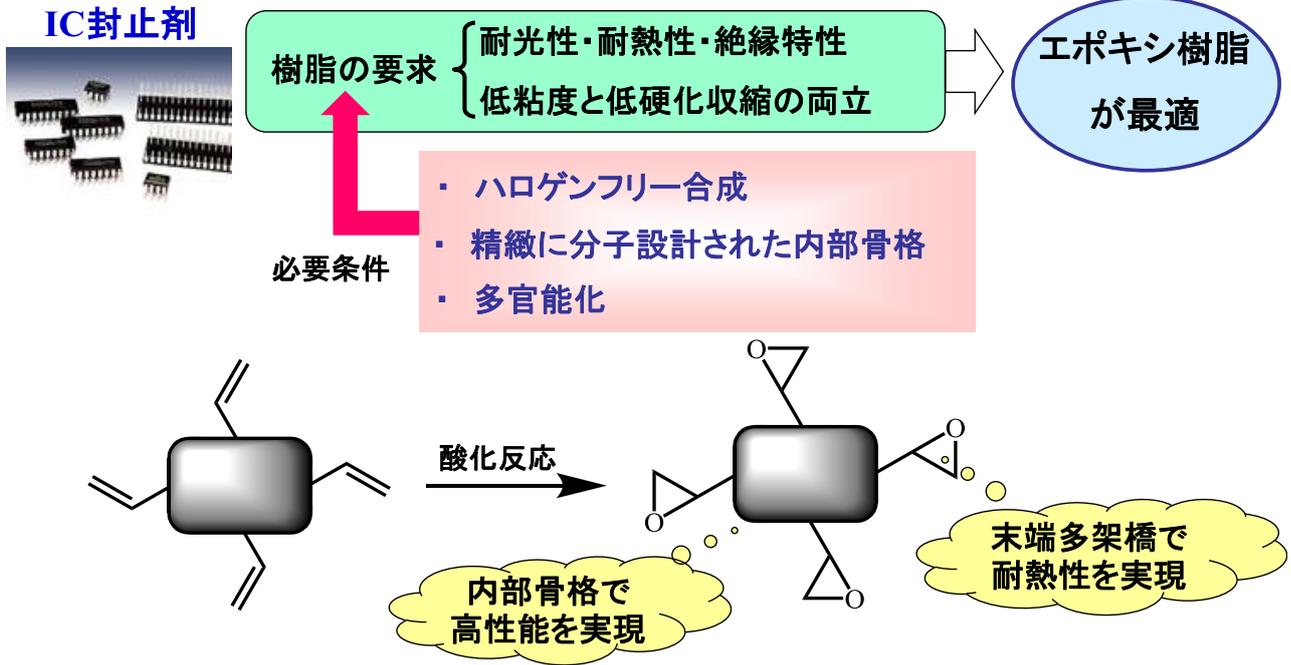
(1)個別研究開発項目の目標と達成状況

	目標	成果	達成度
①	高性能触媒による高活性、高選択性酸化触媒プロセスの開発	オレフィン類やケトン類に対して高活性、高選択性を有する酸化触媒プロセスを開発する。なお、オレフィン類の選択酸化反応では反応率80%以上、選択率90%以上、ケトン類の選択酸化反応では反応率80%以上、選択率80%以上とする。	◎
②	高性能触媒による実用化プロセスに関する設計・開発	生産量10kg～数t/日以上を想定し、ベンチスケール装置により、実用化規模プロセスの概念設計を行う。なお、本研究開発終了後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待できる技術レベルを確立すること。	◎

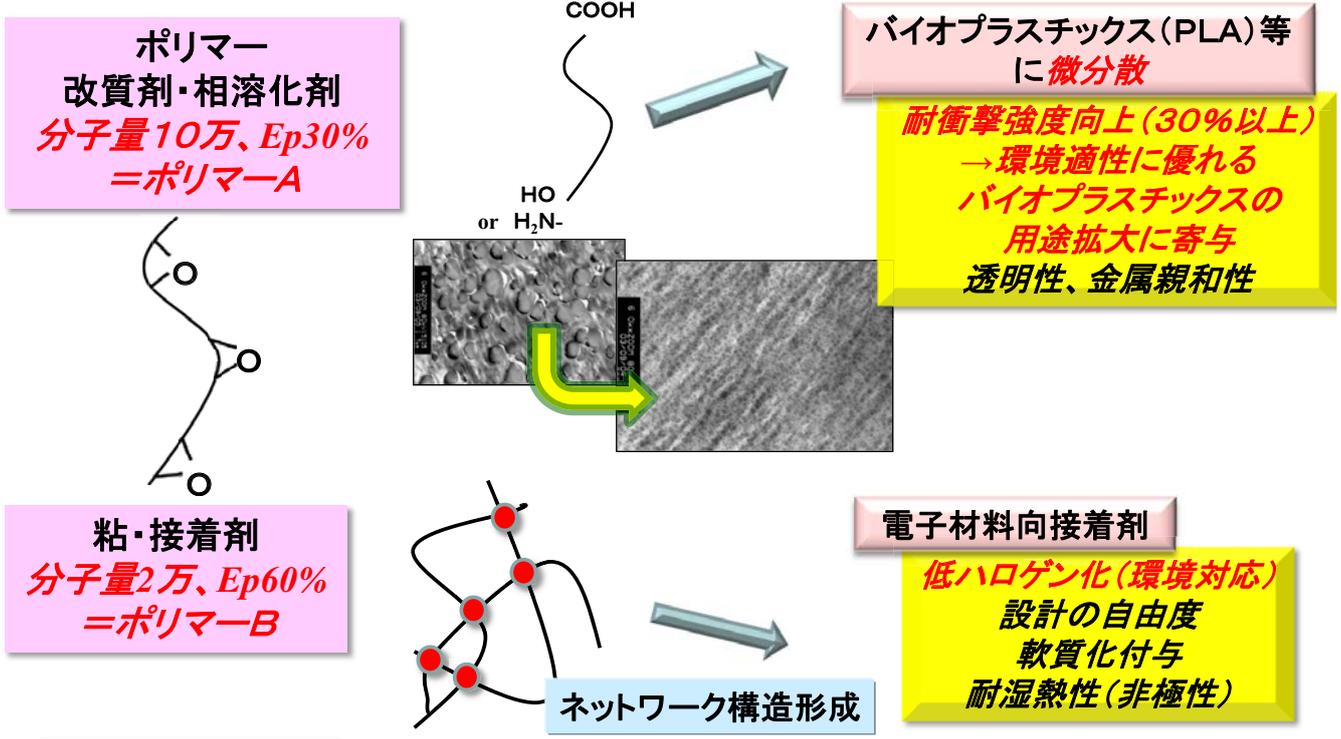
◎ 大幅達成、○達成、△達成見込み、×未達

(2) 成果の意義

1) - ① 多官能基質の酸化技術に適用する新規触媒の開発



1) - ② 高分子量基質の酸化技術
次世代ポリマー改質剤、接着材料等の開発



1) - ③ 易加水分解性基質の酸化技術

松やに

蒸留

テレピン(油)
α-ピネン
が主成分

ロジン
(天然樹脂)

インキ、接着剤、
医薬など、用途
多数

エポキシ化反応

α-ピネン

α-ピネンオキシド

機能性樹脂、
電子材料、など

事業原簿 III.2.3.⑤-15

<http://www.arakawachem.co.jp/jp/>

11/18

1) - ④ 難酸化性基質の酸化技術に適用する新規触媒の開発

最終製品イメージ

市場からの要求

表示素子の高機能化
かつ低コスト化と省エネ！
優れた光学材料の開発をめざす

バイヤービリガー酸化

ジケトンA

ジエステルA

難酸化性基質

モノマー原料

酸化が難しい基質の過酸化水素による高効率酸化

エポキシ化

ジオレフィンB

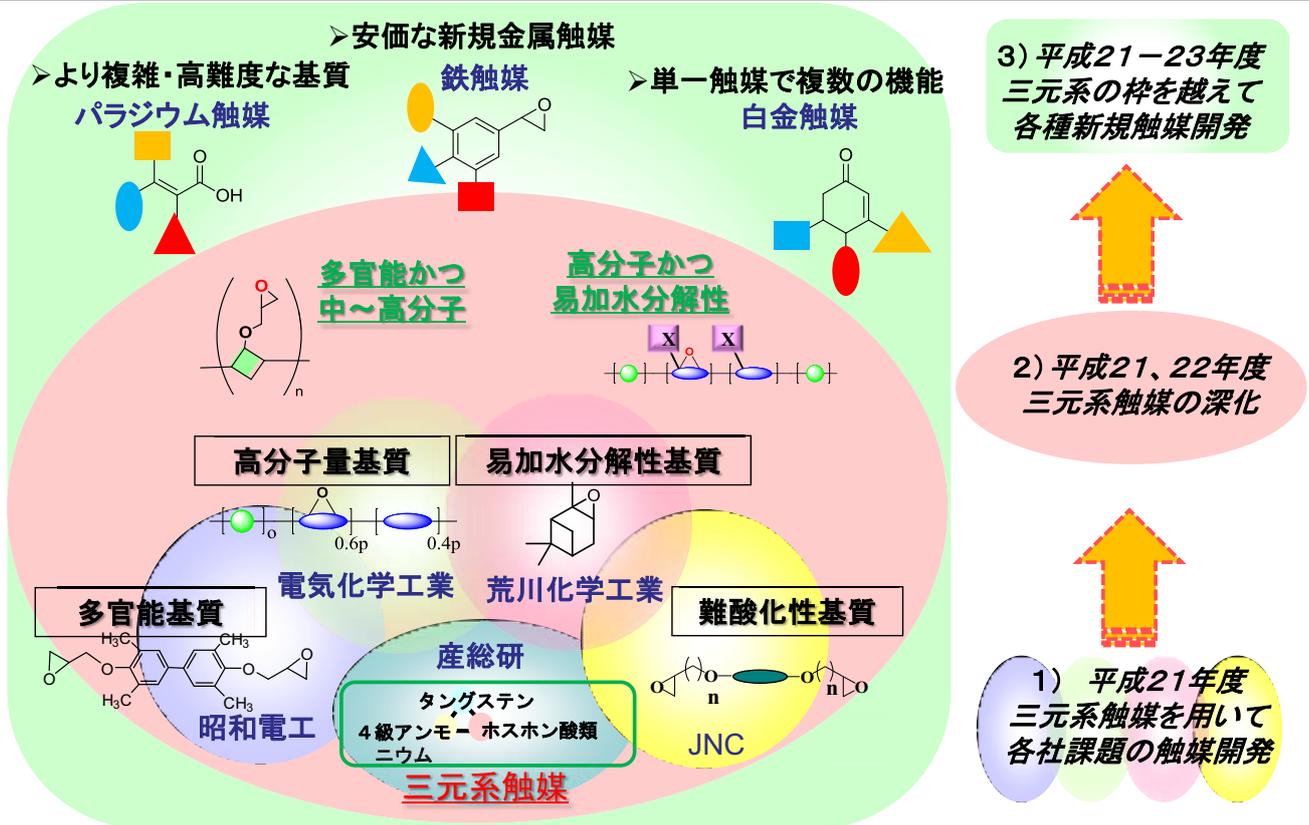
ジエポキシドB

モノマー

高分子材料

タングステン触媒の固定化

有機過酸を使用していた従来の合成方法を
過酸化水素に置きかえる



事業原簿 Ⅲ.2.3.⑤-10

1) - ⑤ 産総研での触媒開発技術の流れ

13/18

(3) 知的財産権、成果の普及 (産総研、企業4社、および再委託先の合計)

	H21	H22	H23	計
特許出願(うちPCTおよび外国出願)	7(0)	15 (6)	7(2)	29 (8)件
論文(うち査読付き)	9(8)	7(6)	9(8)	25 (22) 件
研究発表・講演	27	24	40	91 件
受賞実績	0	0	1	1 件
新聞・雑誌等への掲載	1	0	3	4 件
展示会への出展	0	1	1	2 件

(4) 成果の普及: 人材育成

本プロジェクトに参加した職員および契約職員

常勤職員: 島田広道(PL)、佐藤一彦(SL)、清水政男、今喜裕

任期付き職員: Dr. T. C. ⇒ 民間(大手触媒製造メーカー)

契約職員(PD): Dr. Ha. Ha. ⇒ 民間(大手機能性材料メーカー)

Dr. Y. O. ⇒ 民間(中堅化学合成メーカー)

Dr. D. I. ⇒ 民間(外資系触媒製造メーカー)

Dr. Ho. Ha. ⇒ 民間(大手機能性化学品製造メーカー)

Dr. T. N. ⇒ 民間(中堅機能性材料メーカー)

(1) 成果の実用化可能性

プロジェクトが考える実用化の定義

1. 目的とする機能性化学品の**製造工程を確立**し、ユーザーとの連携により**サンプルワーク**を行う。
2. 必要に応じて、価格を含めて採用を見据えた認定試験など各種必要な**試験**を行う。
3. 「**上市**」する。

得られたプロジェクト成果の実用化の可能性

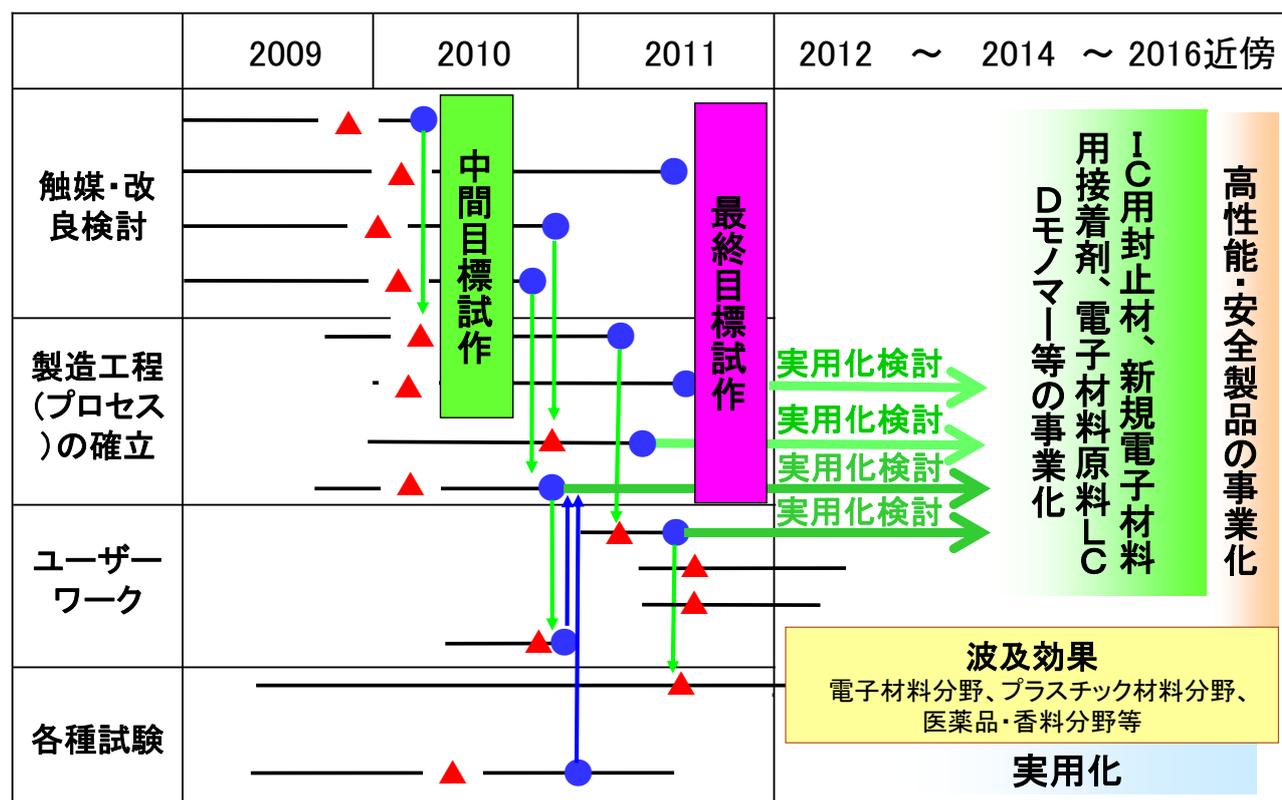
プロジェクト成果として、

「新規な過酸化水素酸化技術をベースとして、昭和電工、電気化学工業、荒川化学工業、JNC、4社共に**ベンチプラント数十～数百キログラム/日**を想定した運転による**成果の実証**まで完了」

これまでの順調な進捗から考えて、今後、

製造工程の確立、サンプルワーク、各種試験を通して製品を**上市に至る**可能性は極めて高い。

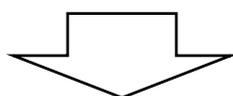
具体的には、昭和電工はIC封止材、電気化学工業は新規電子材料用接着剤など、荒川化学工業は松やに由来の透明電子材料原料、JNCはLCDモニターをターゲットに設定している。



▲: 基本原理確認 ●: 基本技術確立

(2) 費用対効果およびGSC効果

- ・本PJの研究開発費は総額で4億5300万円
- ・電子材料分野(IC用封止材、透明電子材料原料等)
塩素フリー化による耐湿信頼性向上をメリットにIC封止材用途での顕在化が期待
松やに由来の透明電子材料は植物由来原料かつ透明性など機能面で優位性有
いずれも市場に新規参入により2018年頃までに120億円の市場規模拡大を想定
- ・プラスチック材料分野(新規接着剤・改質剤・相溶化剤)
酸化剤のクリーン化やポリ乳酸の用途拡大による環境適性や資源削減に期待
市場参入により1次製品の売り上げ見込み最大で110億円の拡大を想定
- ・医薬品・香料分野(新規触媒反応・テルペンオキッド由来化学品)
PJで開発した新反応およびテルペンオキッド由来品の医薬品・香料への応用を期待
上記2項目に比べ時間軸としては長い、数10億円の市場規模拡大に寄与すると思われる。



- ・酸化剤のクリーン化による廃棄物の大幅な削減・製造コストの低下
- ・CO₂削減効果は上記製品全体で約15万t/年と推定

グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基 盤技術開発プログラム

高機能不均一触媒の開発と環境調和 型化学プロセスの研究開発 (事後評価)

「錯体触媒を利用した水中不均一条件での
精密化学合成法の研究開発」の詳細 (公開)

魚住泰広

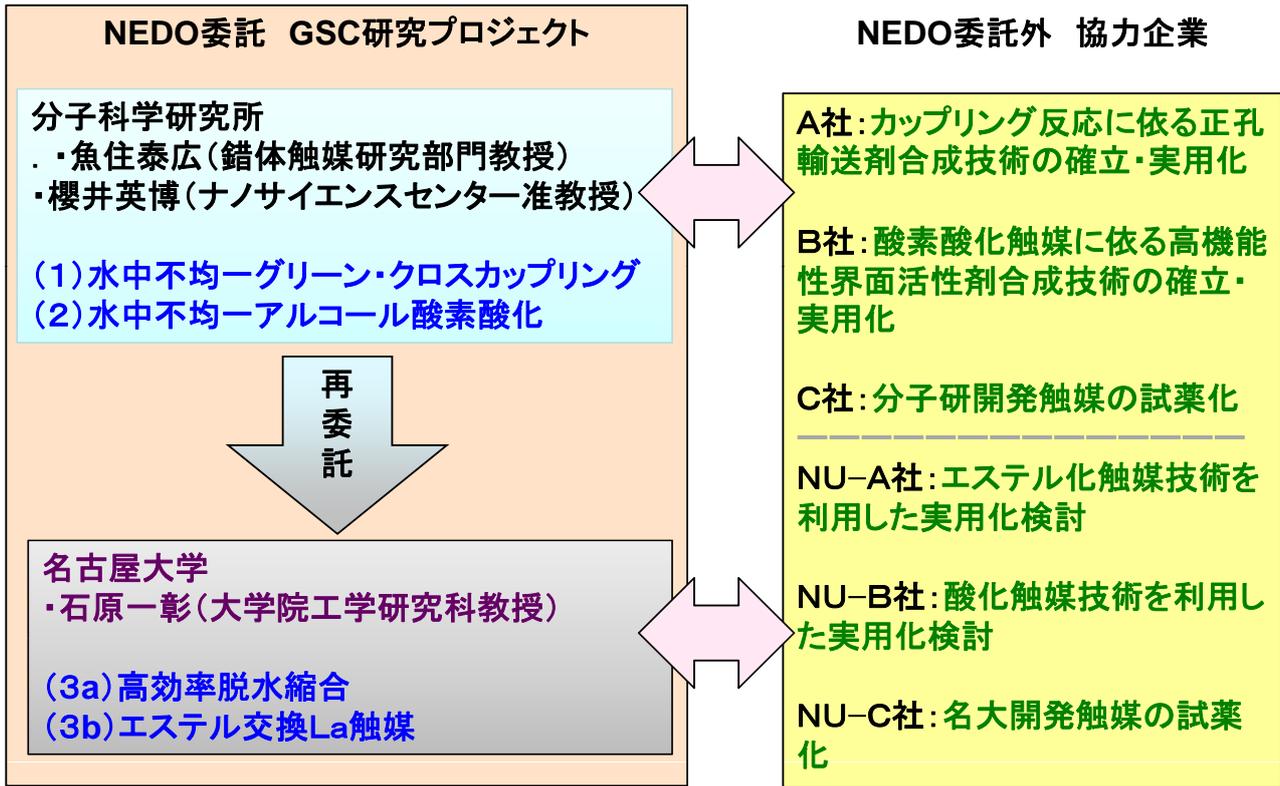
分子科学研究所

2012年 9月14日

研究の位置づけ: NEDO設定課題と具体的検討内容

公開





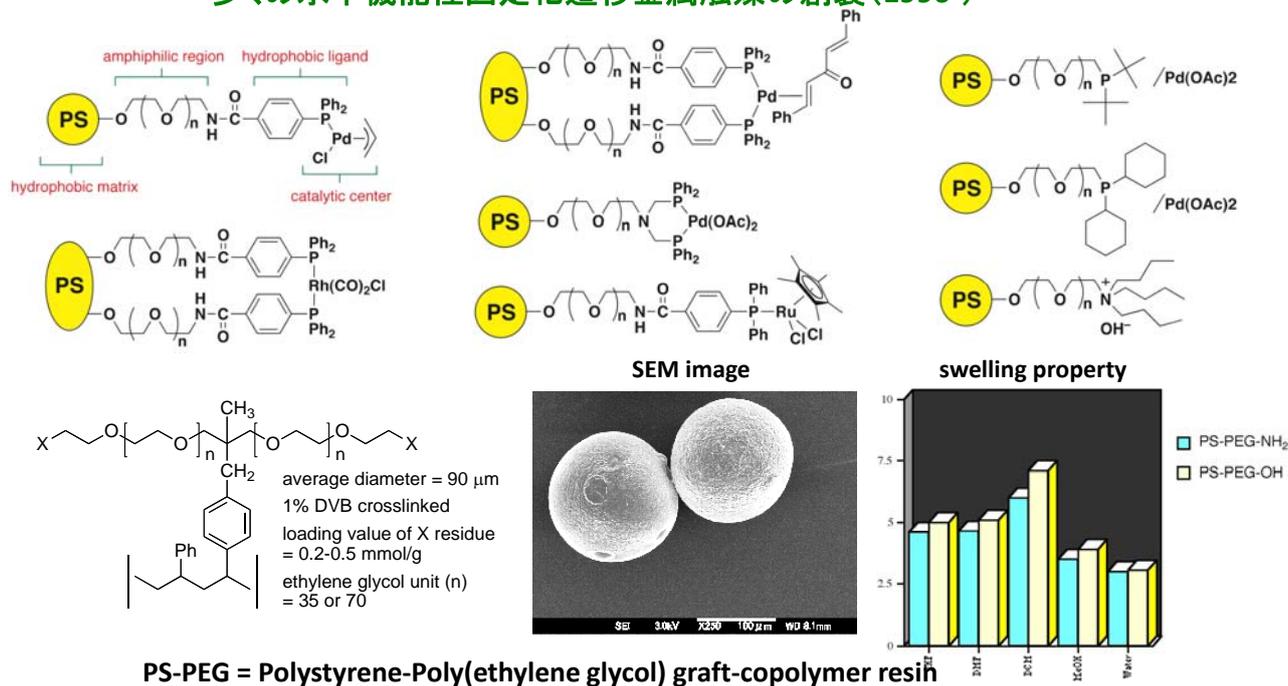
研究開発成果について (1) 詳細テーマにおける年度達成度

分子研

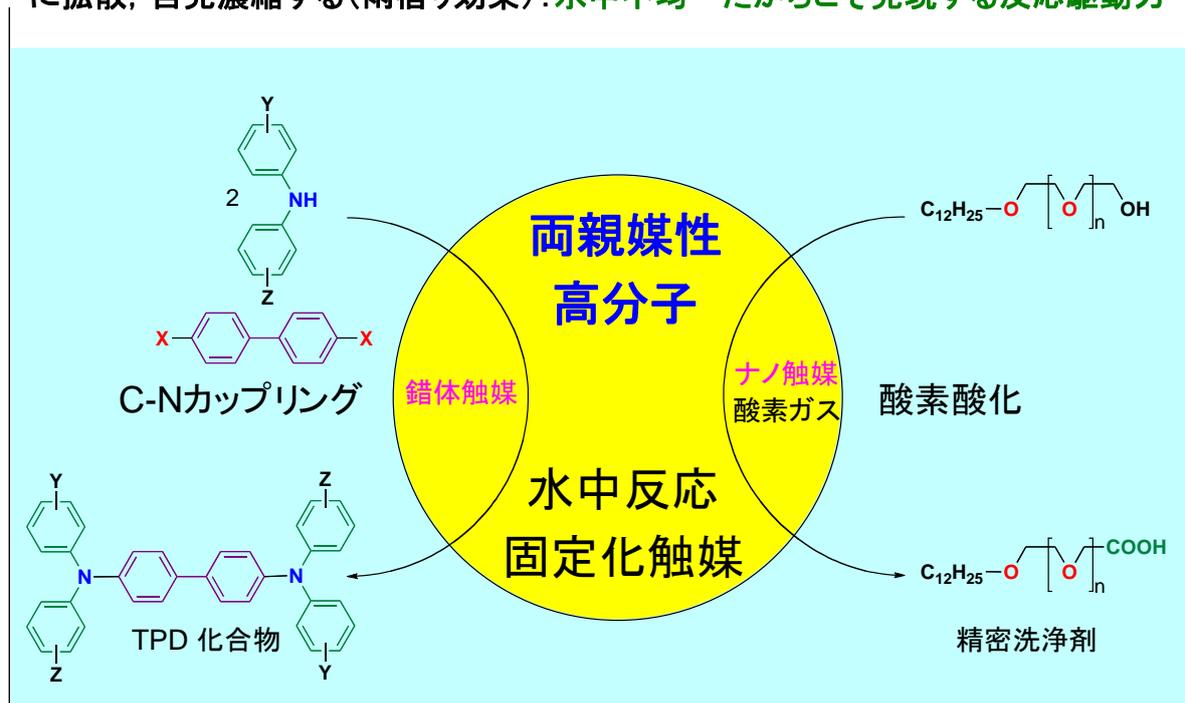
事業項目	最終目標	H21年度	H22年度	H23年度	達成度
① 錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の開発研究	トリアニルジアミン類(TPD)の合成 反応率80%以上 選択率90%以上 金属漏出2ppm以下 触媒回収80%以上 生産量10kg以上を想定したプロセスの確立	当初研究開発目標 反応率70%以上 選択率70%以上 金属漏出<20ppm 触媒回収80%以上 達成状況 反応率80% 選択率75-80% 金属漏出<10ppm 触媒回収80%以上	当初研究開発目標 低コストプロセスの開発と利用 達成状況 ・バイオマス利用 触媒の開発 ・モノリス触媒の開発と利用	当初研究開発目標 反応率80%以上 選択率90%以上 金属漏出<2ppm 触媒回収80%以上 達成状況 反応率96% 選択率96% 金属漏出<1ppm 触媒回収定量的	100%
② ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究	アルキル[オリゴ(オキシエチレン)]カルボン酸の合成 反応率98%以上 選択率95%以上 金属漏出1ppm以下 触媒回収98%以上 触媒コスト90%削減 (最終目標は上方修正済み) 生産量10kg以上を想定するプロセスの構築	当初研究開発目標 反応率70%以上 選択率70%以上 金属漏出<15ppm 触媒回収90%以上 達成状況 反応率80% 選択率75-80% 金属漏出<10ppm 触媒回収80%以上	当初研究開発目標 低コストプロセスの開発と利用 達成状況 ・モノリス触媒の開発と利用 ・ポリスチレン触媒の開発と利用 ・連続フローシステム構築	当初研究開発目標 反応率80%以上 選択率90%以上 金属漏出<2ppm 触媒回収98%以上 (最終目標は上方修正済み) 達成状況 反応率98%以上 選択率98%以上 金属漏出<0.1ppm 触媒回収定量的 生産量50g/日(実験室)	120%

学術背景

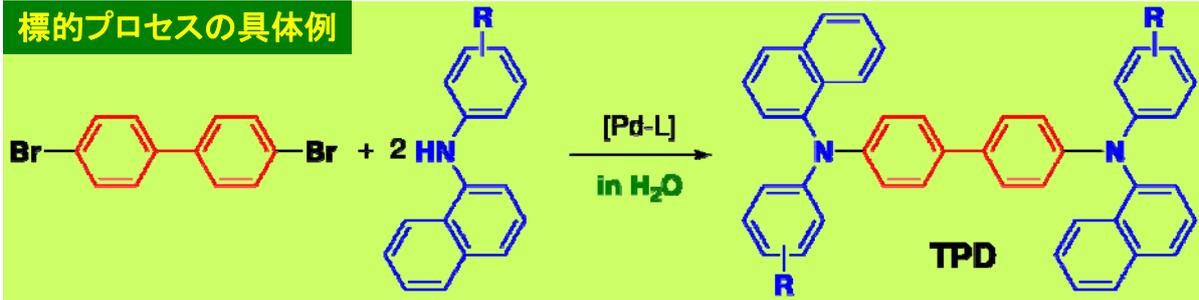
多くの水中機能性固定化遷移金属触媒の創製(1996-)



水中において、本来「油」である有機分子は両親媒性高分子マトリクス内に能動的に拡散、自発濃縮する(雨宿り効果):水中不均一だからこそ発現する反応駆動力



パイ電子材料製造: 標的

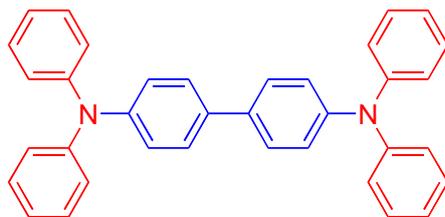


TPD=EL材料(ホール輸送剤): 従来コスト >100万円/グラム
 高純度(金属残存無し)での供給がボトルネック
 ELが次世代照明のパラダイムシフトの鍵を握れるか?

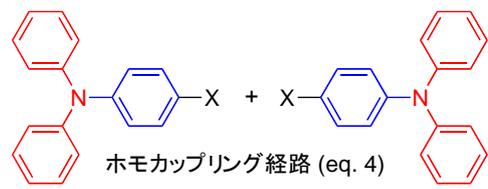
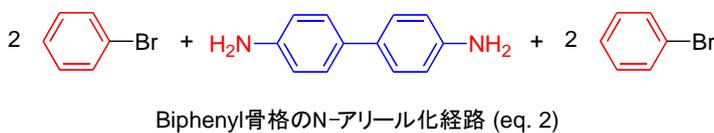
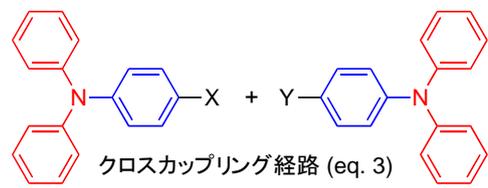
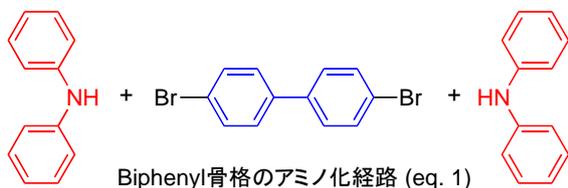
国内白熱灯を蛍光灯にすると温室ガス削減効果143万トン(CO₂換算)
 しかし、蛍光灯は次世代照明になり得ない ← 水銀使用による環境負荷

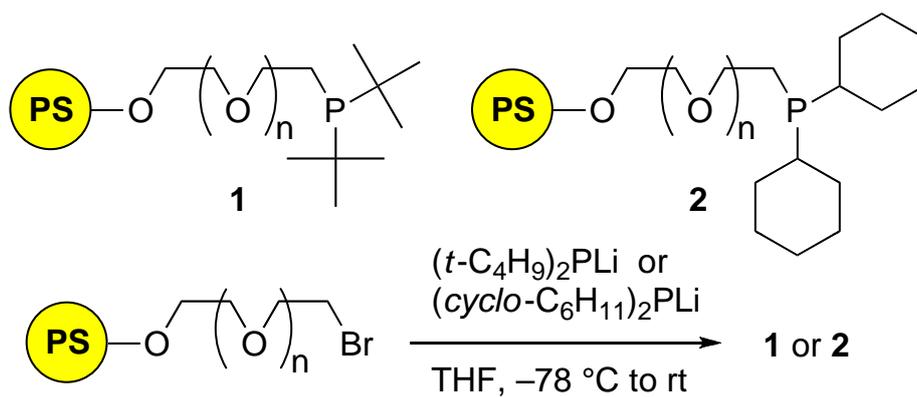
本提案シリーズでは、有機溶剤ゼロ、触媒回収100%、金属混入ゼロ
 TPD供給プロセスへの展開を推進する。

参考: セイコーエプソン株式会社地球環境推進部分析リサーチセンター
 「製品含有全廃化学物質調査ツール(2004年7月版)」
 平成22年3月17日東芝プレスリリース

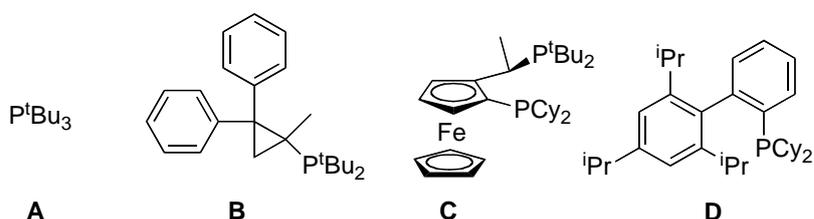


TPD誘導体の基本骨格



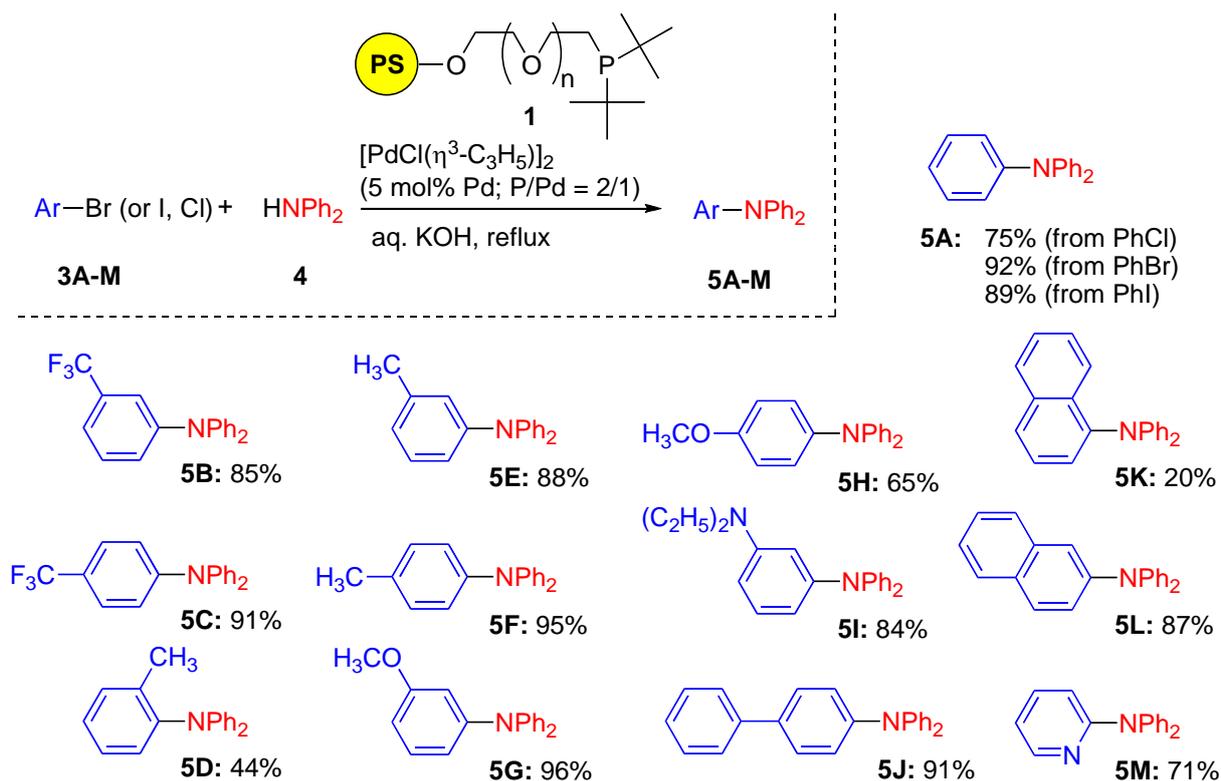


参考: 既存の触媒(配位子構造)



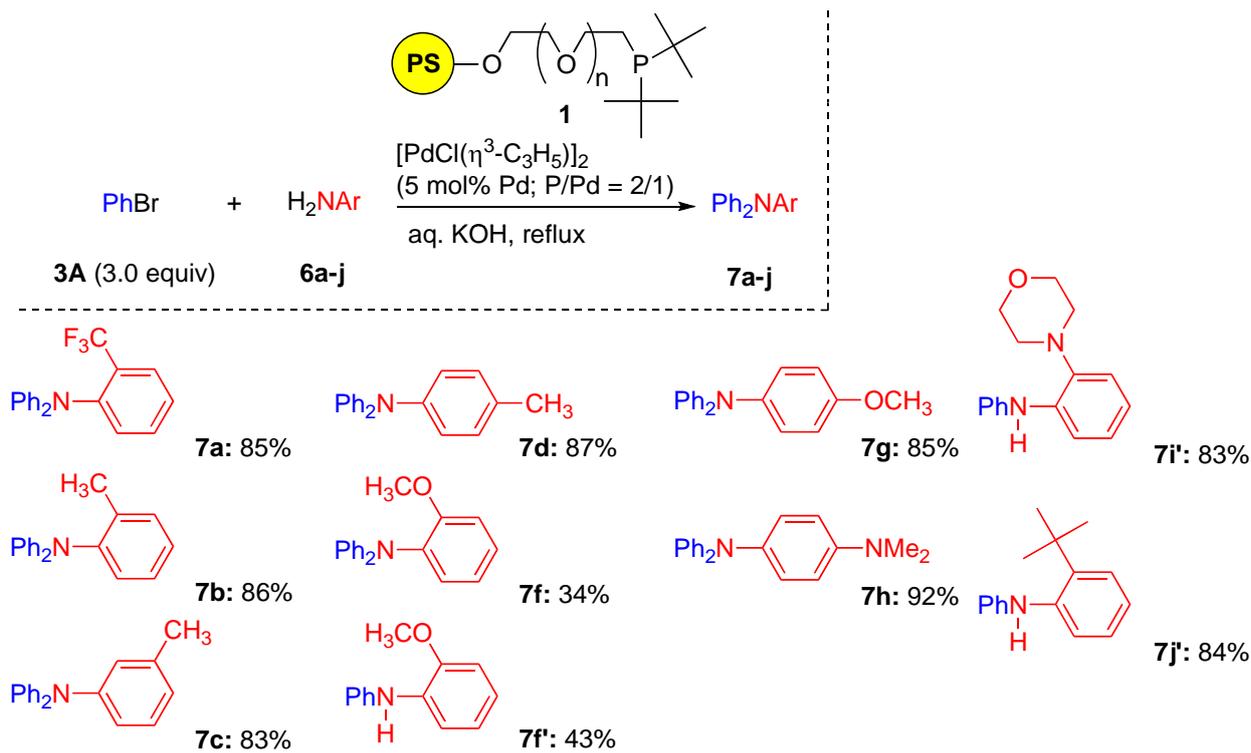
事業原簿 III.2.1①-6,7

8/22



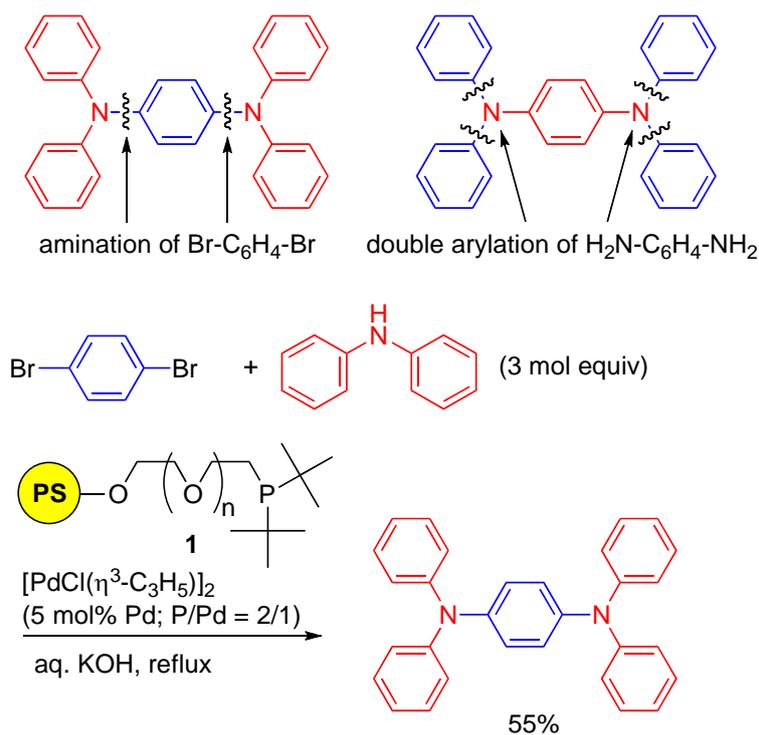
事業原簿 III.2.1①-10,11

9/22



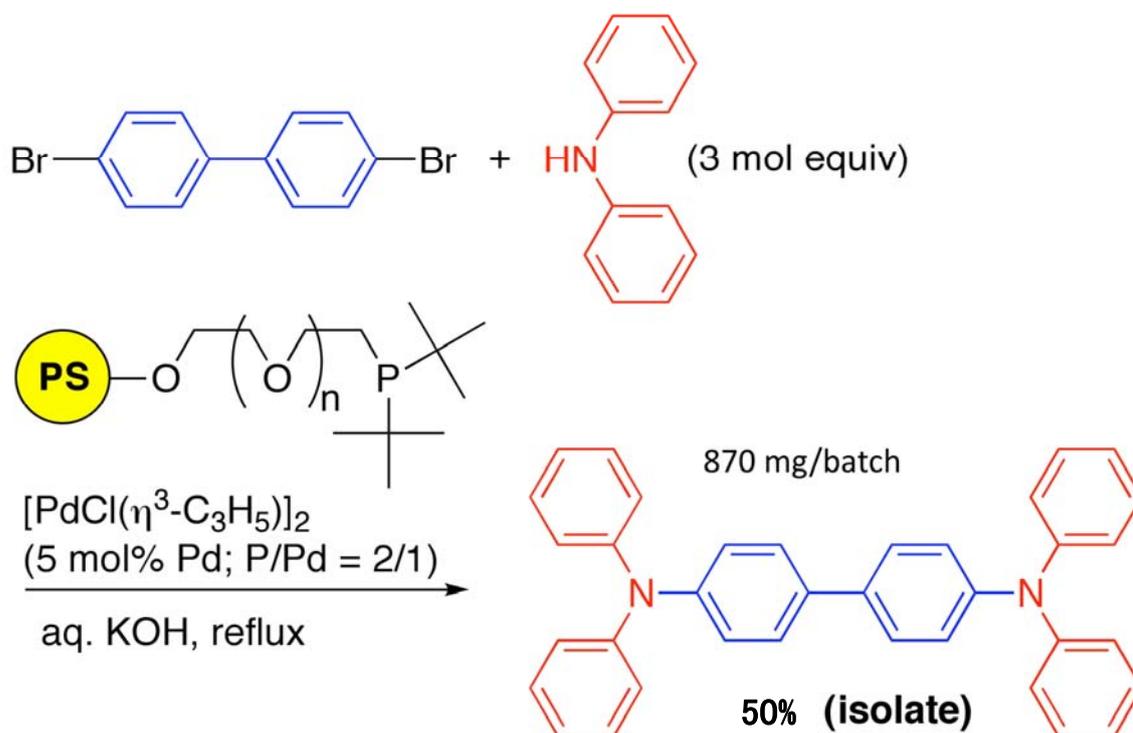
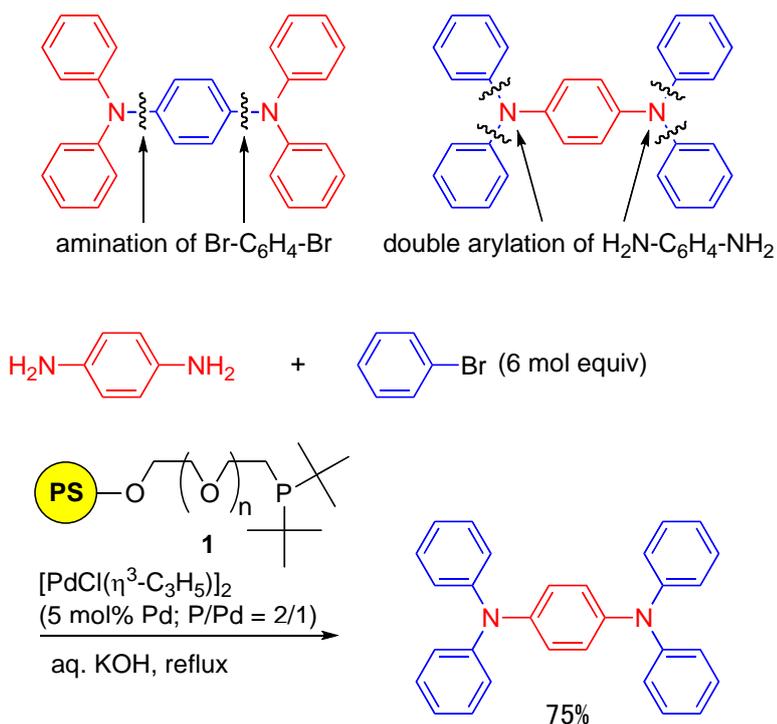
事業原簿 III.2.1①-11,12

10/22

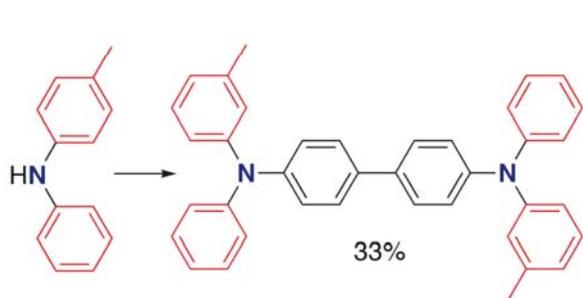
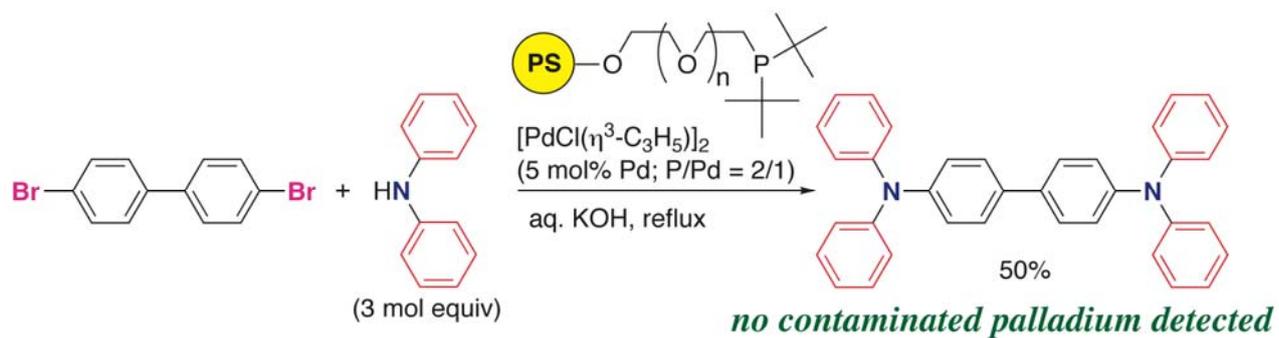


事業原簿 III.2.1①-13,14

11/22

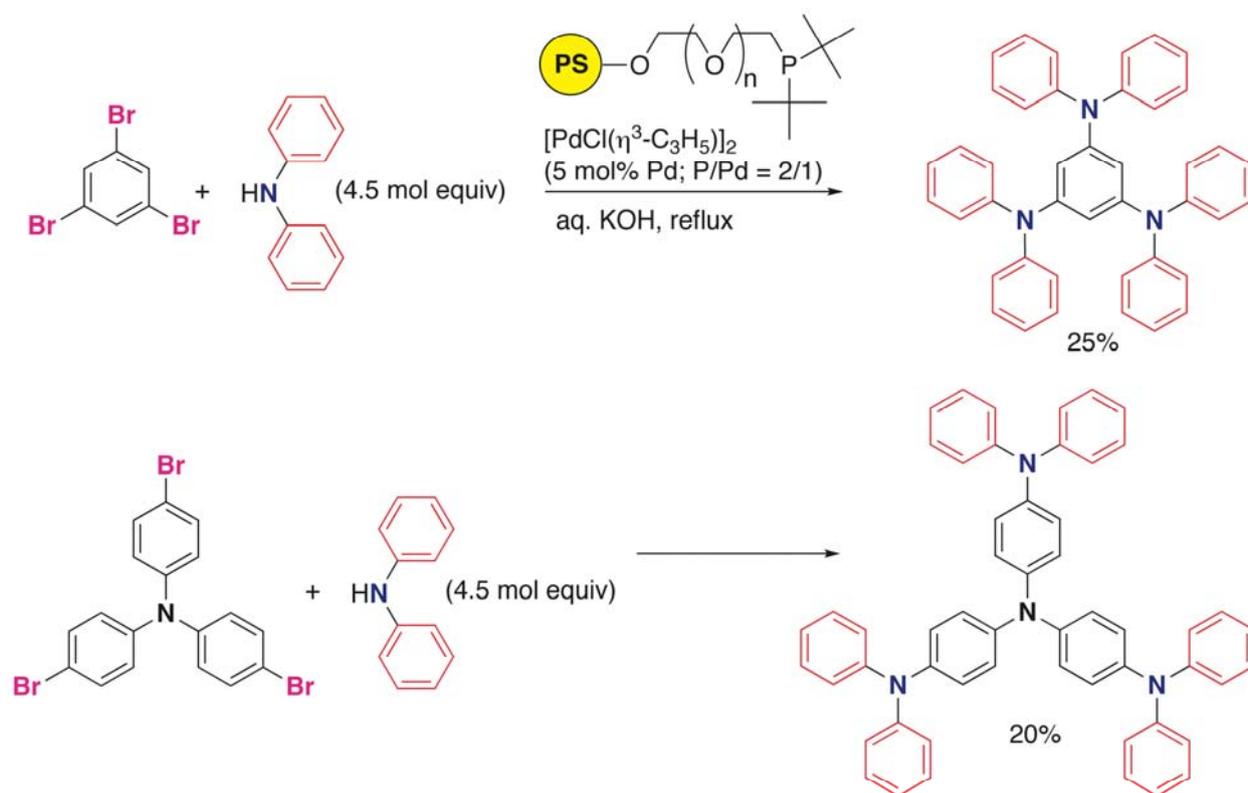


金属混入：ICP分析では検出限界以下！！



事業原簿 III.2.1①-15

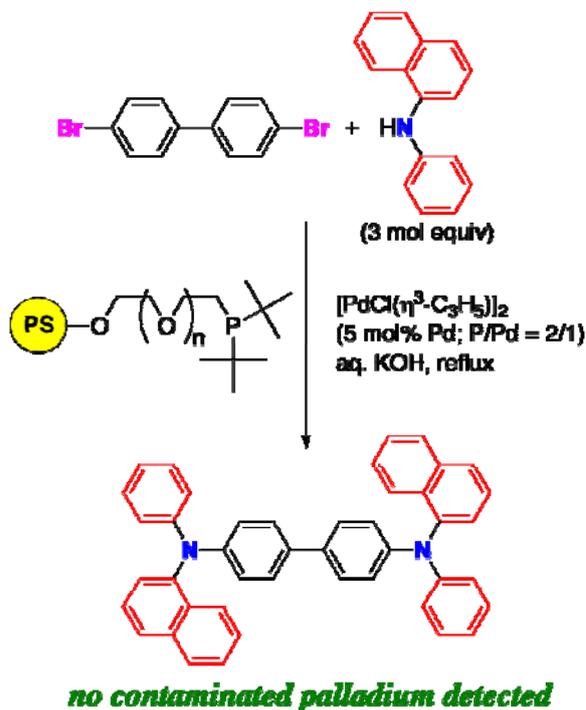
14/22



事業原簿 III.2.1①-16

15/22

スライドのみ表示

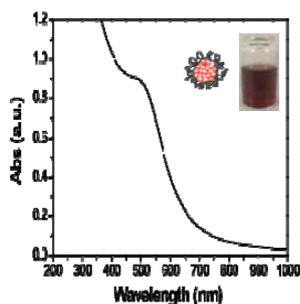
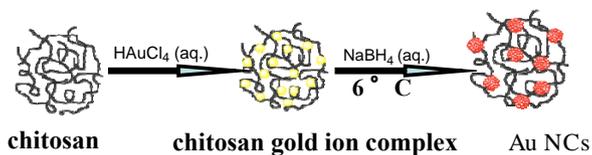
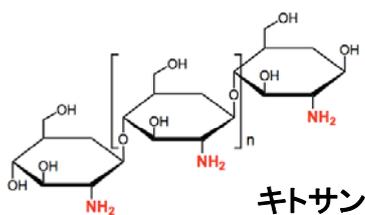


事業原簿 III.2.1①-15

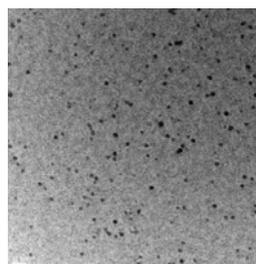
Chem. Commun. 2010, 46, 1103
Chem. Asian J. 2010, 8, 1788

16/22

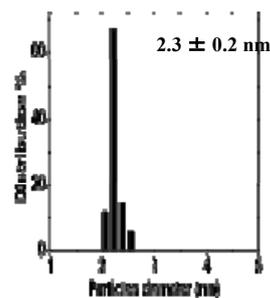
天然物由来／豊富な資源量
アミノ基、ヒドロキシル基による安定化
pH制御によるリサイクル過程構築
(酸性水溶液に可溶、中性～塩基性で不溶)



Uv-vis spectrum of Au-chit NCs



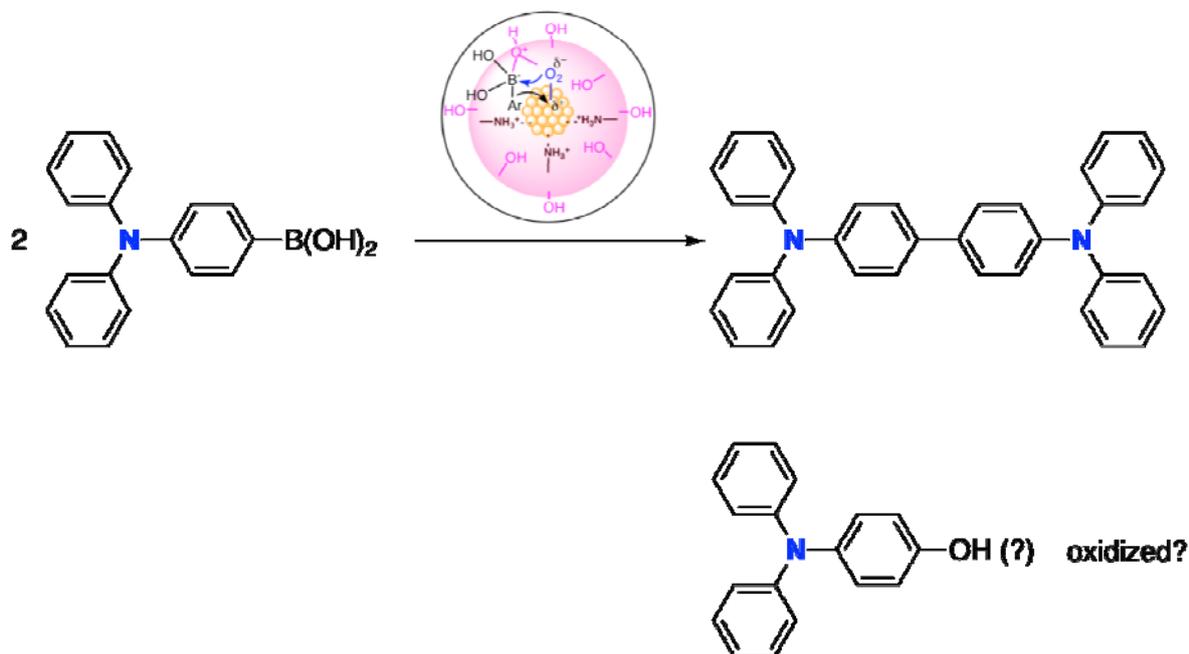
TEM image of Au-chit NCs



事業原簿 III.2.1①-17

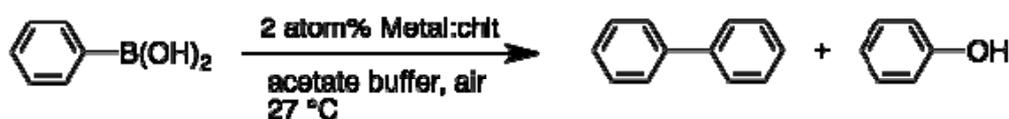
17/22

キトサン保護金属ナノ粒子触媒



18/22

金-パラジウム合金の効果

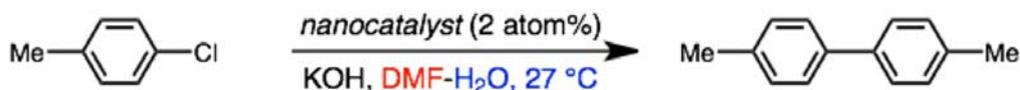


catalyst	Time / h	Yield / %	
		biphenyl	phenol
Au	9	93	7
Au _{0.80} Pd _{0.20}	3	>99	trace

20%パラジウムを添加した合金を用いると
 更に**高い活性**: (反応時間の大幅な短縮)
高い選択性: (フェノールはほぼ副生しない)
安定性: (10回にわたり回収、再利用可能)

PVP保護Pd-Au合金触媒

金/パラジウム合金ナノ触媒を用いた室温での芳香族塩素化物のUllmanカップリング



nanocatalyst	time/h	Yield /%
Au:PVP	24	0
Pd:PVP	24	0
Au_{0.5}Pd_{0.5}:PVP	24	99

- 室温で芳香族塩素化物のホモカップリングが進行する**初めての例**
- **金/パラジウム合金**クラスターでのみ反応が進行する
- **DMF**が共溶剤、還元剤の2つの役割を果たしている
- (還元剤を別途添加する必要なし)

事業原簿 III.2.1①-17,18

20/22

触媒担体	触媒構造	触媒機能	反応率・選択率	課題
PS-PEG (TentaGel) TM	(PS-PEG)-Pd(Bu-t) ₂	芳香環アミノ化	>95%, >95% (最適条件下)	価格, 高分子の熱安定性
PS-PEG (ArgoGel) TM	(PS-PEG)-Pd(Bu-t) ₂	芳香環アミノ化	>95%, >95% (最適条件下)	価格, 高分子の熱安定性
PS (linear)	Pd nano	Suzukiカップリング	<50%, 90% (初期データ)	連続フローの可能性
PVP	Pd-Au nano	Ullmannカップリング	99%, 90% (初期データ)	触媒の物理的安定性確認
chitosan	Pd-Au nano	芳香族ホモカップリング	>95%, >95% (最適条件下)	再現性 基質適用範囲

21/22

	2009	2010	2011	2012	2013	2014 ~ 2020 ~ ~ ~ ~
グリーン カップリング 技術	触媒創製 ▲		●	製品化検討 →		触媒市販 → 実用化検討 → 事業化 高純度ホール 輸送剤合成の 事業化
	CNカップリング ▲		●	製品化検討 →		
	CCカップリング ▲			●		
グリーン 酸化技術	ナノ触媒創製 ▲		●	製品化検討 →		触媒市販 → 実用化検討 → 事業化 高純度アニオン性 界面活性剤 合成の事業化
	酸素酸化 ▲		●	フロー化検討 →		
	反応 ▲		●	→ C	策事業化検討	
グリーン 縮合技術	触媒創製 ▲		●	製品化検討 →		触媒市販済 → 実用化検討 → 事業化 テトラカルボン酸 縮合の 事業化
	カルボン酸無水物 ▲		●	製品化検討 →		
	エステル・アミド ▲			●	→ 実用化検討	

波及効果
 蛍光灯代替照明
 PFC代替洗浄剤
 PC 無毒化技術
 高分子原料供給代替

▲: 基本原理確認 ●: 基本技術確立

グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発プログラム

高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発 (事後評価)

「ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究」の詳細 (公開)

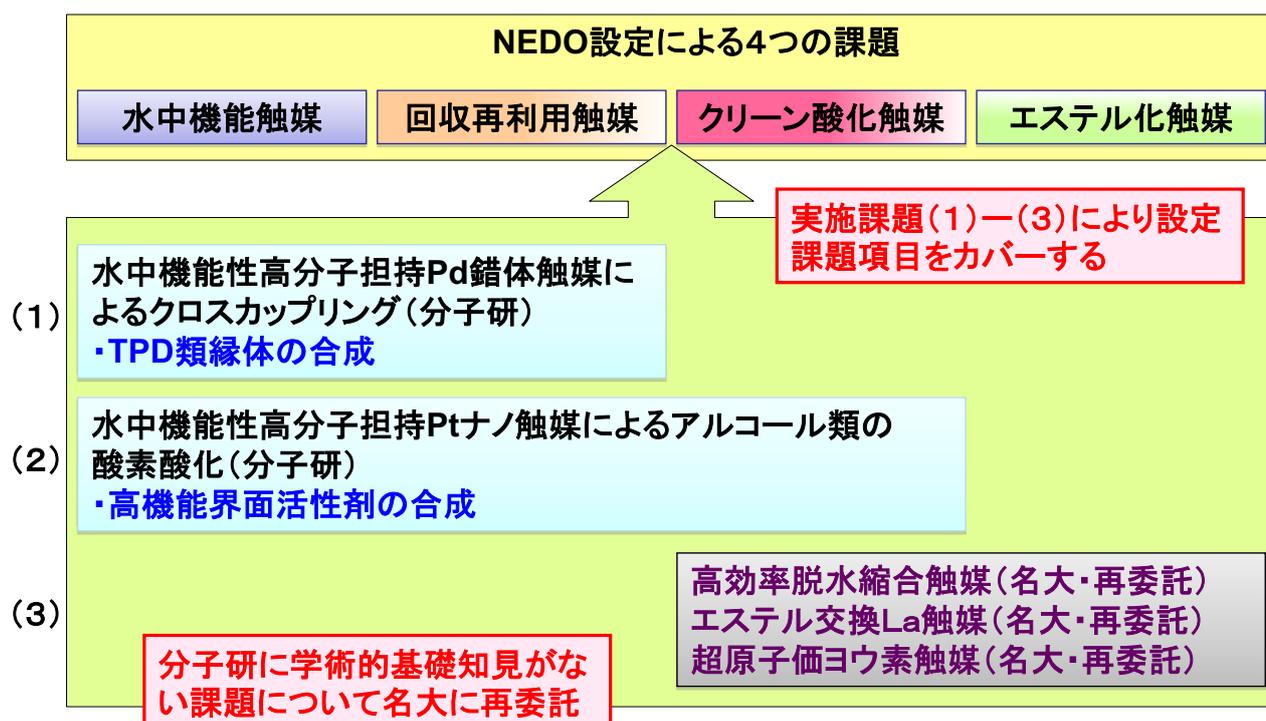
魚住泰広

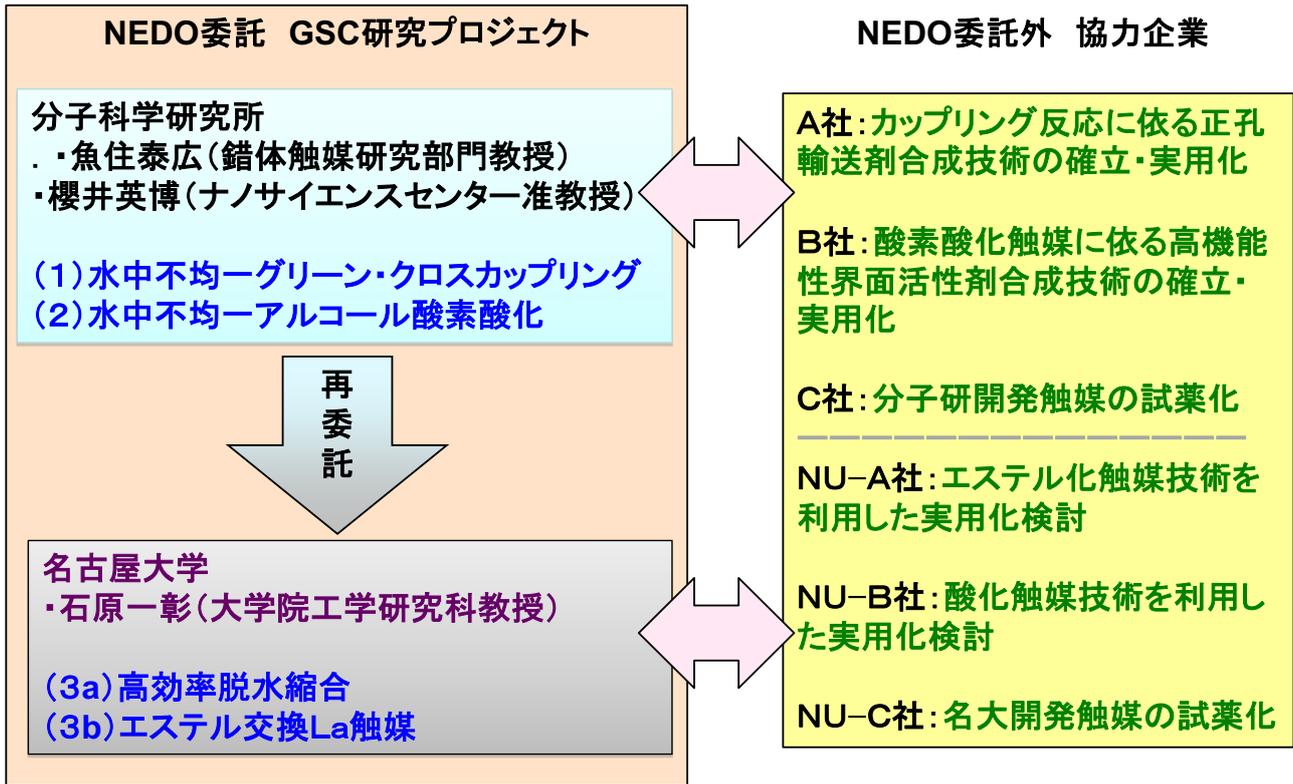
分子科学研究所

2012年 9月14日

研究の位置づけ: NEDO設定課題と具体的検討内容

公開



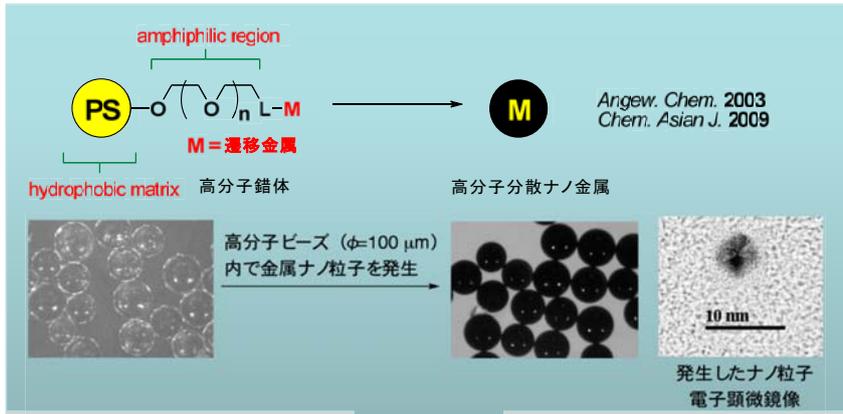


研究開発成果について (1) 詳細テーマにおける年度達成度

分子研

事業項目	最終目標	H21年度	H22年度	H23年度	達成度
① 錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の開発研究	トリアニルジアミン類(TPD)の合成 反応率80%以上 選択率90%以上 金属漏出2ppm以下 触媒回収80%以上 生産量10kg以上を想定したプロセスの確立	当初研究開発目標 反応率70%以上 選択率70%以上 金属漏出<20ppm 触媒回収80%以上 達成状況 反応率80% 選択率75-80% 金属漏出<10ppm 触媒回収80%以上	当初研究開発目標 低コストプロセスの開発と利用 達成状況 ・バイオマス利用触媒の開発 ・モノリス触媒の開発と利用	当初研究開発目標 反応率80%以上 選択率90%以上 金属漏出<2ppm 触媒回収80%以上 達成状況 反応率96% 選択率96% 金属漏出<1ppm 触媒回収定量的	100%
② ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究	アルキル[オリゴ(オキシエチレン)]カルボン酸の合成 反応率98%以上 選択率95%以上 金属漏出1ppm以下 触媒回収98%以上 触媒コスト90%削減 (最終目標は上方修正済み) 生産量10kg以上を想定するプロセスの構築	当初研究開発目標 反応率70%以上 選択率70%以上 金属漏出<15ppm 触媒回収90%以上 達成状況 反応率80% 選択率75-80% 金属漏出<10ppm 触媒回収80%以上	当初研究開発目標 低コストプロセスの開発と利用 達成状況 ・モノリス触媒の開発と利用 ・ポリスチレン触媒の開発と利用 ・連続フローシステム構築	当初研究開発目標 反応率80%以上 選択率90%以上 金属漏出<2ppm 触媒回収98%以上 (最終目標は上方修正済み) 達成状況 反応率98%以上 選択率98%以上 金属漏出<0.1ppm 触媒回収定量的 生産量50g/日(実験室)	120%

グリーン酸化技術: シーズ



固体高分子マトリクス内で金属ナノ粒子を発生させる手法を確立

↓
分子性錯体からボトムアップ型で創製した「デザインされた不均一触媒」を開発

↓
両親媒性高分子の適用により水中機能触媒へと展開

↓
グリーン触媒機能を発現

↓
アルコールの不均一触媒による水中酸素酸化

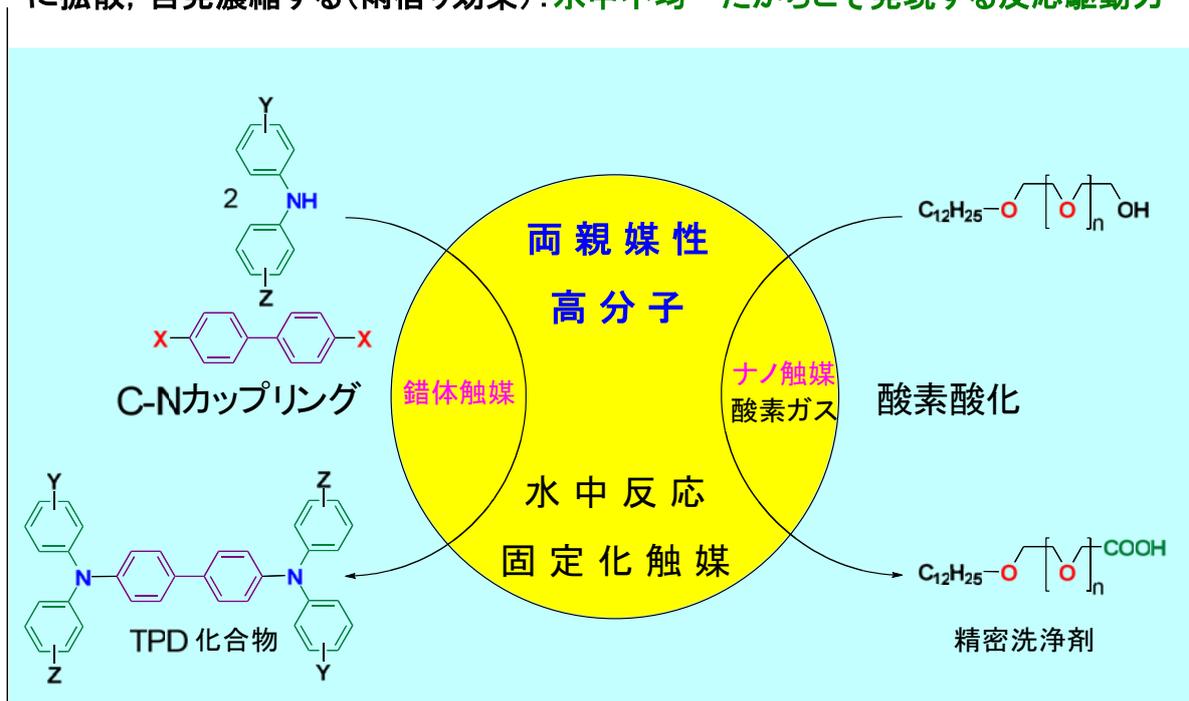
↓
環境ホルモン類のギ酸による触媒的無毒化

有機溶剤ゼロ!

触媒は回収再利用!

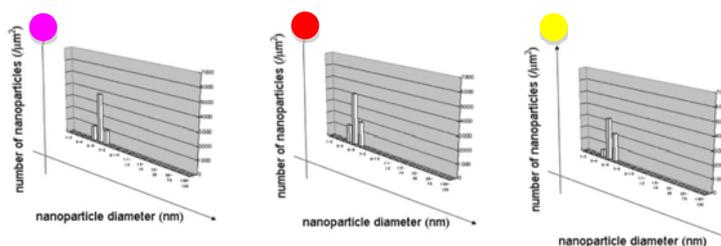
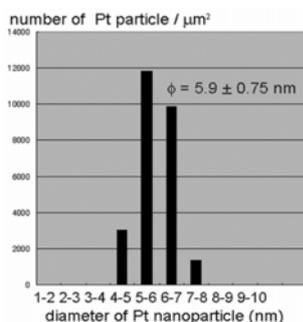
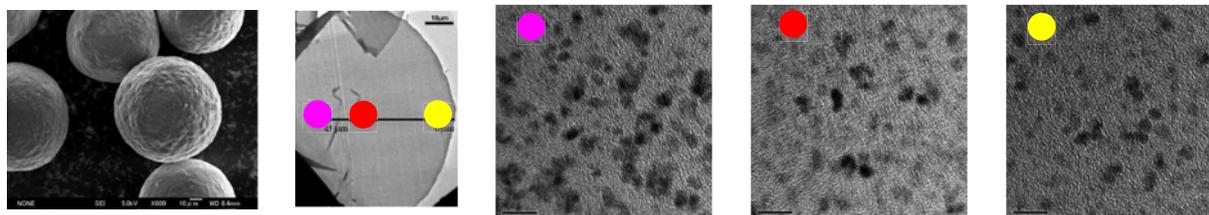


水中において、本来「油」である有機分子は両親媒性高分子マトリクス内に能動的に拡散、自発濃縮する(雨宿り効果): 水中不均一だからこそ発現する反応駆動力



酸化触媒の調製・精査を完了

固定化ナノ白金触媒: PhCH_2OH in H_2O による還元調製



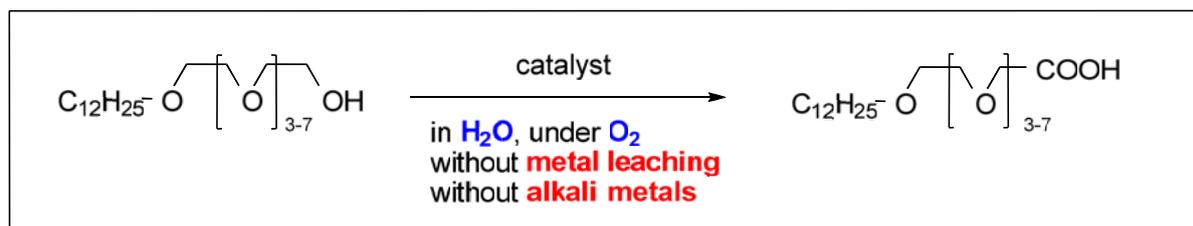
※還元条件(PhCH_2OH)の最適化により固相内で限定されたサイズ分布のナノ粒子発生を実現した最初の例である

事業原簿 III.2.1. ②-5.6

Chem. Asia. J. 2009

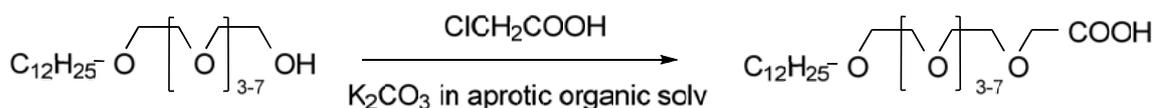
8/26

酸化: 標的開発工程



【課題】 エチレンオキシ部分のユニット数は限定せず混合状態で進める一般性の高い酸化工程が必要とされる

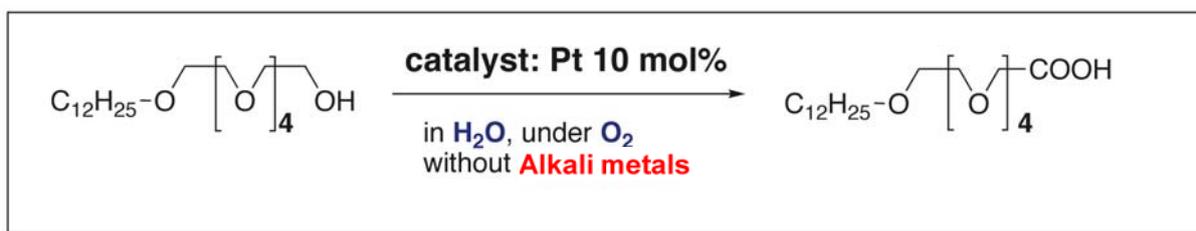
so far prepared via...



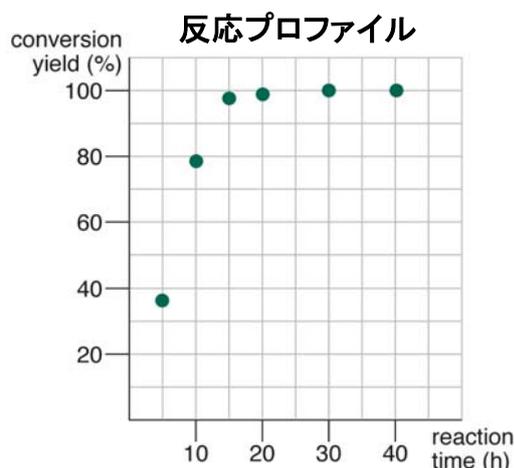
serious drawback: contamination of alkali metals

9/26

触媒の回収・再利用



触媒利用回数	変換率%	収率%
1	99	90
2	99	85
3	99	94
4	99	84
5	99	90



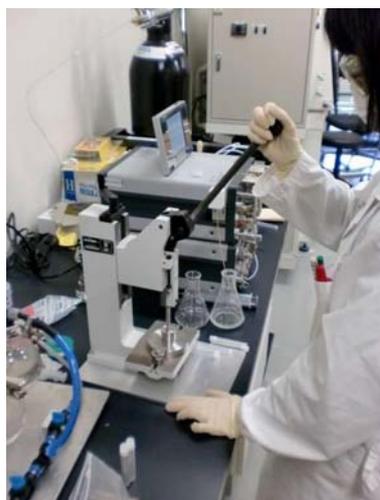
事業原簿 III.2.1. ②-15,16

10/26

酸素酸化反応

触媒担体	触媒構造	触媒機能	反応率・選択率	課題
PS-PEG (TentaGel) TM	Pt nano (Φ=5-10 nm)	アルコール酸素酸化	>95%, >95% (最適条件下)	価格, 高分子の熱安定性
PS-PEG (ArgoGel) TM	Pt nano (Φ=5-10 nm)	アルコール酸素酸化	>95%, >95% (最適条件下)	価格, 高分子の熱安定性
PS (linear)	Pd nano	アルコール酸素酸化	<50%, ??% (初期データ)	連続フローに適用化
PS (monolith)	Pt nano	アルコール酸素酸化	<30%, 90% (初期データ)	触媒の物理的安定性
PS-PEG (TentaGel) TM	Pt nano (Φ=1-50 nm)	アルコール酸素酸化	>95%, >95% (最適条件下)	反応性はやや低い

11/26



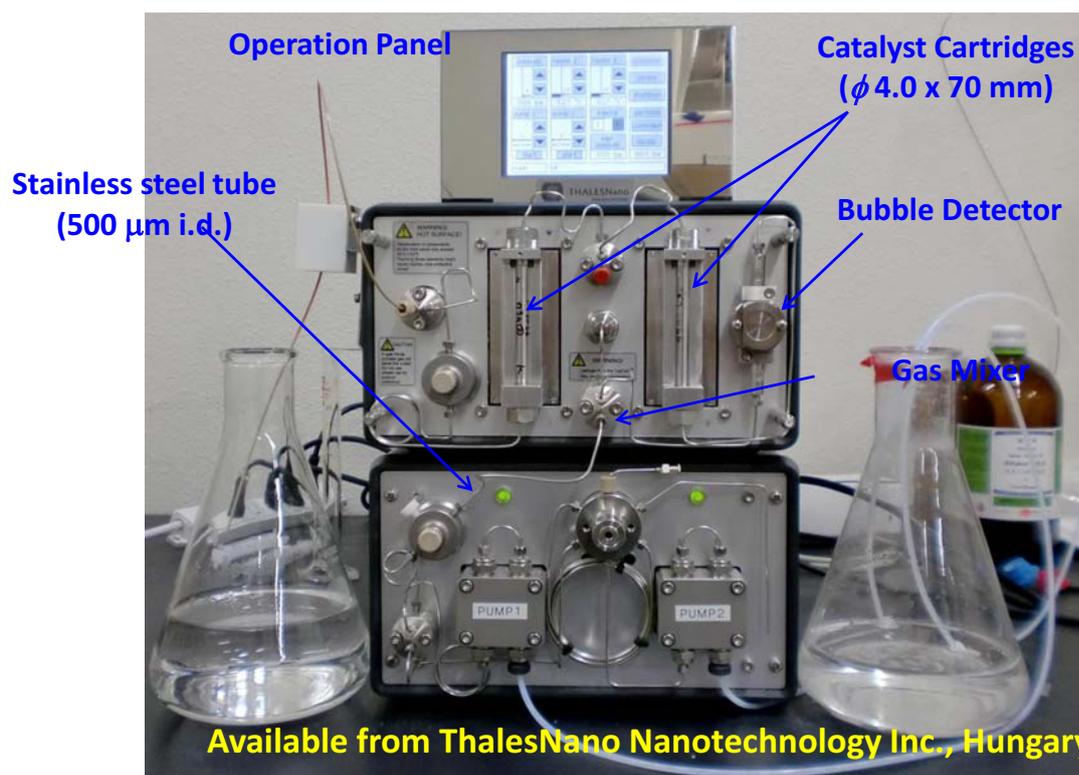
Preparation of the Cartridge



Catalyst Cartridge (7 cm)

事業原簿 III-2-17

12/26

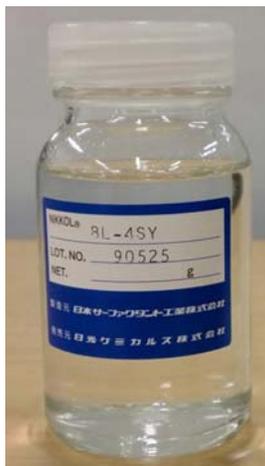


X-Cube™ Reactor

事業原簿 III-2-17

13/26

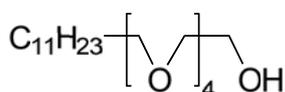
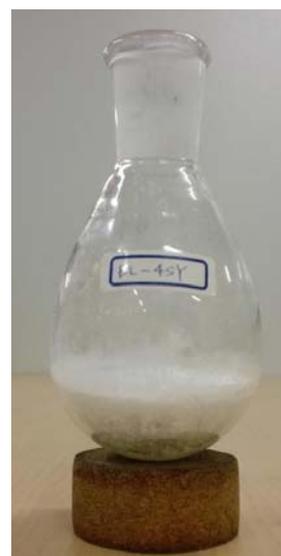
フロー酸素酸化 (BL-4SY)



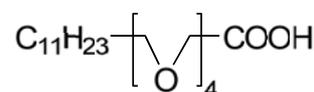
ART-Pt (0.17 mmol Pt)
(X-Cube™ Reactor)

O₂, H₂O, 100 °C
6 d, 5 L

System Pressure: 60 bar
Flow Rate: 0.6 mL/min
Contact Time: 75 sec



TON = 2.5K

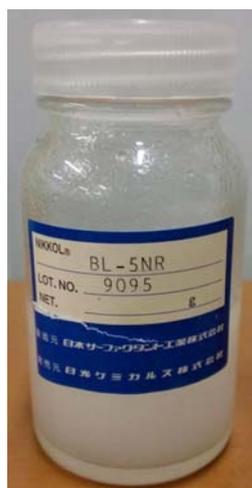


100% conv. (160 g)

事業原簿 III-2-18

14/26

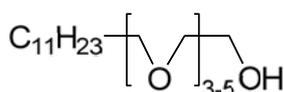
フロー酸素酸化 (BL-5NR)



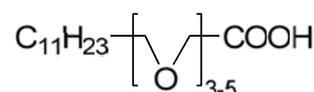
ART-Pt (0.17 mmol Pt)
(X-Cube™ Reactor)

O₂, H₂O, 100 °C
9 d, 10 L

System Pressure: 60 bar
Flow Rate: 0.8 mL/min
Contact Time: 55 sec



TON = 2K



100% conv. (120 g)

事業原簿 III-2-18

15/26

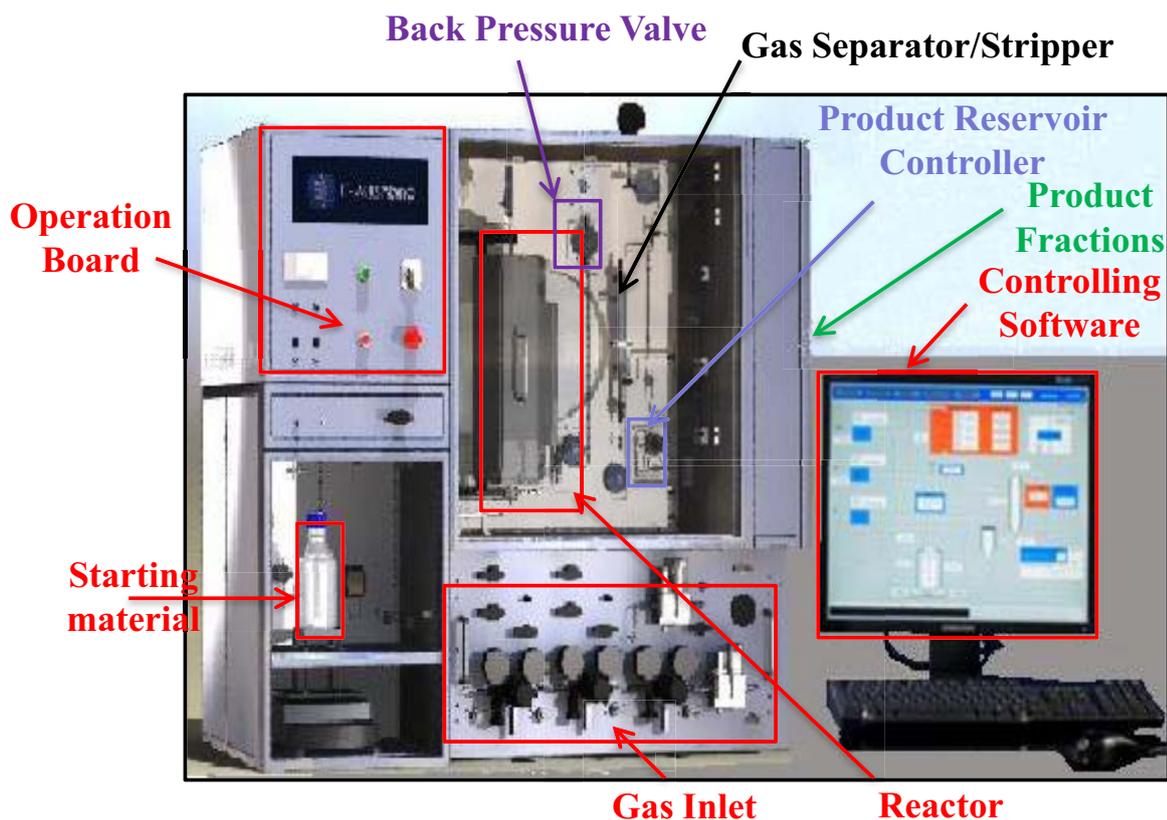
中規模フロー反応装置 タレス社(ハンガリー)が試験検討

卓上型フロー反応装置の20~30倍のスケールアップ可能性が確認されている



- ・ 幅120 x 奥行65 x 高さ100 cm
- ・ 最大温度: 500°C
- ・ 最大圧力: 180 bar (±1 bar)
- ・ Flow Rate (liquid): 0.05 - 10 mL/min
- ・ Flow Rate (gases): 10 - 200 mL/min
- ・ カラム径: ID 10 mm
- ・ カラム長: 300 mm
- ・ カラム容積: 23 ml

16/26



17/26

(参考)タレス社によって提案されている大型フロー反応装置

- ・実際の当該プロセスには未適用
- ・卓上型フロー反応装置のの最大720倍のスケールアップが可能



- ・ 最大温度: 350°C (± 0.5°C)
- ・ 最大圧力: 130 bar (± 0.8 bar)
- ・ Flow Rate (liquid): 0.1 - 50 mL/min
- ・ Flow Rate (gases): 10 - 1000 mL/min
- ・ カラム径: ID 30 mm
- ・ カラム長: 900 mm
- ・ カラム容積: 635 mL

18/26

主たる触媒(まとめ)

公開

開発項目	触媒担体	製品	プロセス	製品品質
カップリング (水中不均一)	PS-PEG	TPD誘導体	芳香環 アミノ化	触媒メタル混入 <ppm
カップリング (水中不均一)	PVP	TPD誘導体 (検討中)	芳香環ホモカッ プリング	n/a
酸素酸化 (水中不均一)	PS-PEG	アニオン性洗浄 剤	アルコール酸素 酸化	触媒メタル混入 <ppm アルカリ金属フ リー
酸素酸化 (水中不均一)	PS (MONOLITH)	アニオン性洗浄 剤	アルコール酸素 酸化	触媒メタル混入 <ppm アルカリ金属フ リー

19/26

	2009	2010	2011	2012	2013	2014 ~	2020 ~ ~ ~ ~	
グリーンカップリング技術	触媒創製 ▲		●	製品化検討 →		触媒市販	高純度ホール輸送剤合成の事業化	
	CNカップリング ▲		●	製品化検討 →		実用化検討 →		波及効果 蛍光灯代替照明
	CCカップリング ▲		●	製品化検討 →				
グリーン酸化技術	ナノ触媒創製 ▲		●	製品化検討 →		触媒市販	高純度アニオン性界面活性剤合成の事業化	
	酸素酸化 ▲		●	フロー化検討 →		実用化検討 →		PFC代替洗浄剤 PCB無毒化技術
	還元反応 ▲		●	PCB対策事業化検討 →				
グリーン縮合技術	触媒創製 ▲		●	製品化検討 →		触媒市販済	テトラカルボン酸縮合の事業化	
	カルボン酸無水物 ▲		●	製品化検討 →		実用化検討 →		高分子原料供給代替
	エステル・アミド ▲		●	製品化検討 →		実用化検討 →		

▲:基本原理確認 ●:基本技術確立

担持ナノ触媒の展開(派生的成果)

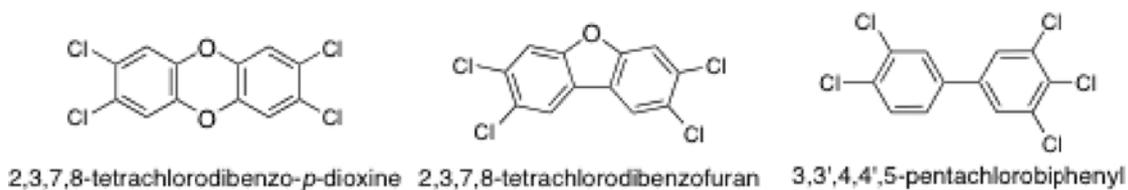
The figure shows a microchip with a nanocatalyst membrane. A scale bar indicates 100 μm. An inset shows a magnified view of the membrane with a 50 nm scale bar. The chemical reaction scheme shows the dehalogenation of a substituted benzene ring (R-C6H4-X) to a benzene ring (R-C6H5) using a polymeric Pd nanoparticle membrane-installed μ-device. The reaction is: R-C6H4-X + H2 → R-C6H5 + HX. X = Cl, Br, I, OSO2CF3. Below the scheme, it shows the dehalogenation of a PCB derivative (Xn = Cl) to biphenyl (fungicide, Br = PBB).

ナノ触媒膜導入マイクロチップ(フロー反応)デバイスを創製
PCB類縁体のppmレベル水溶液における脱ハロゲン化に成功
反応時間2秒

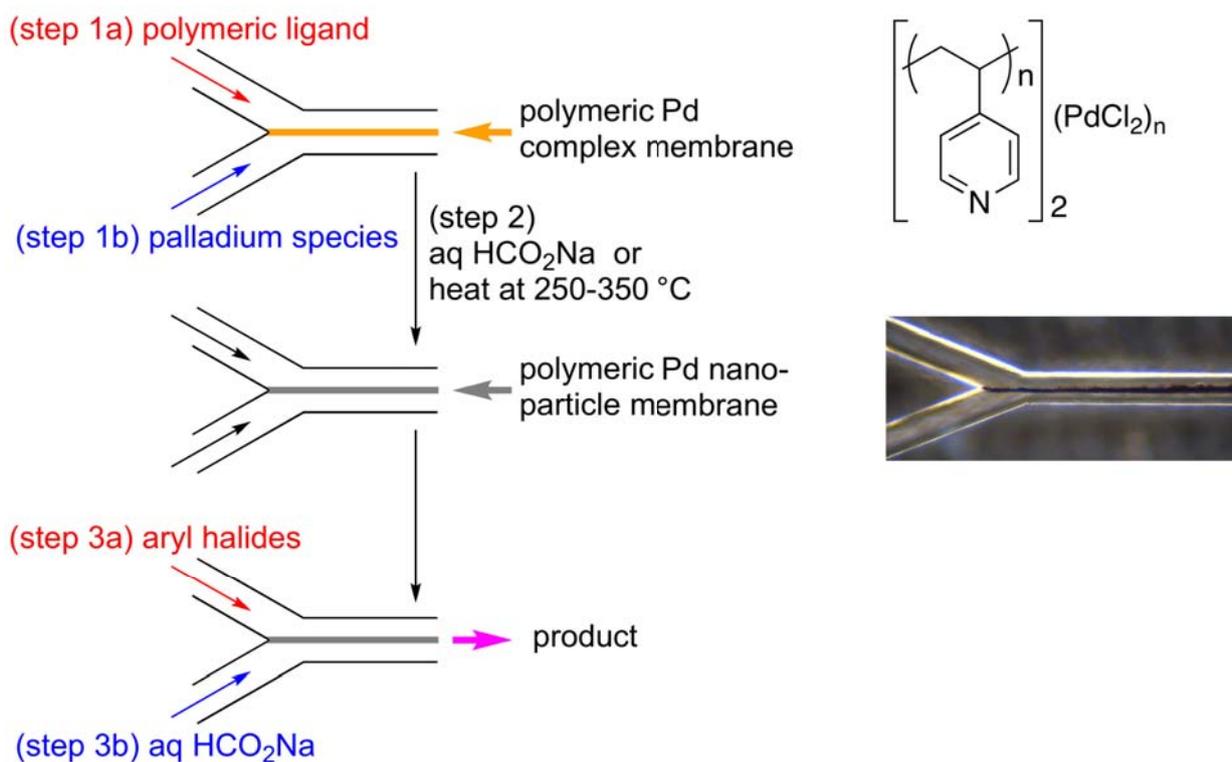


F. Alonso, I. P. Beletskaya, M. Yus, *Chem. Rev.* 2002, 102, 4009.

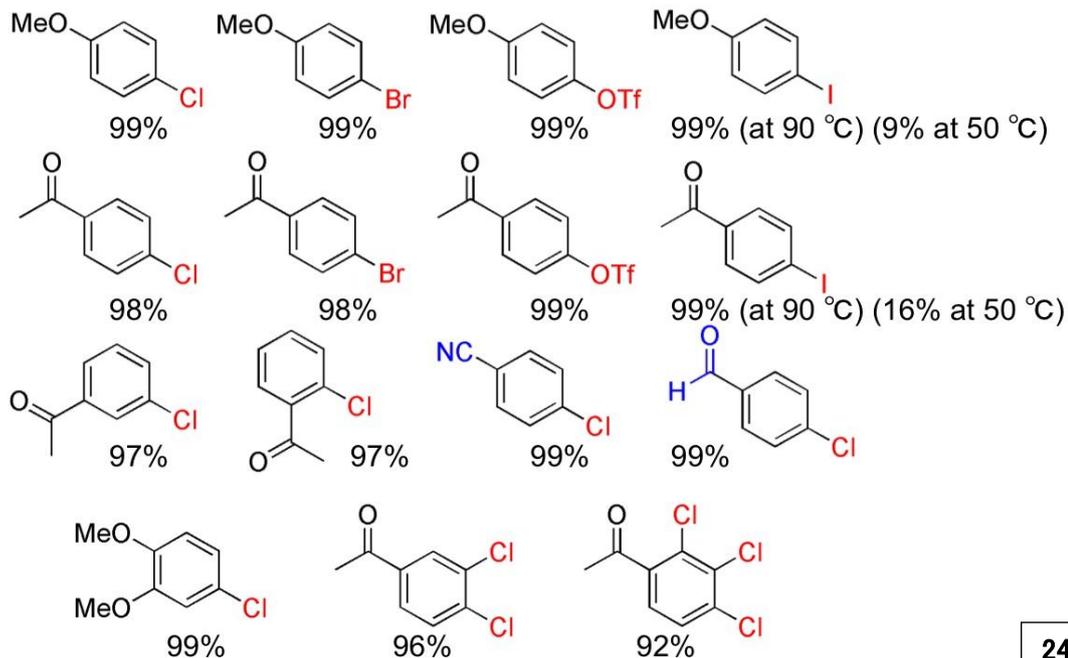
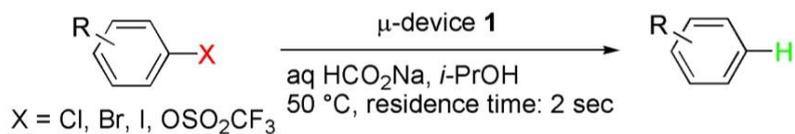
Typical examples (PCBD, PCBF, PCB)



22/26



23/26



24/26

化学工業日報 2012年1月13日(金曜日)

科学新聞 2012年1月20日(金曜日)

スライドのみ表示

スライドのみ表示

25/26

グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基
盤技術開発プログラム

高機能不均一触媒の開発と環境調和
型化学プロセスの研究開発
(事後評価)

「エステル・アミド類の高効率・高選択的合成法の
開発研究」の詳細 (公開)

石原一彰

名古屋大学大学院工学研究科

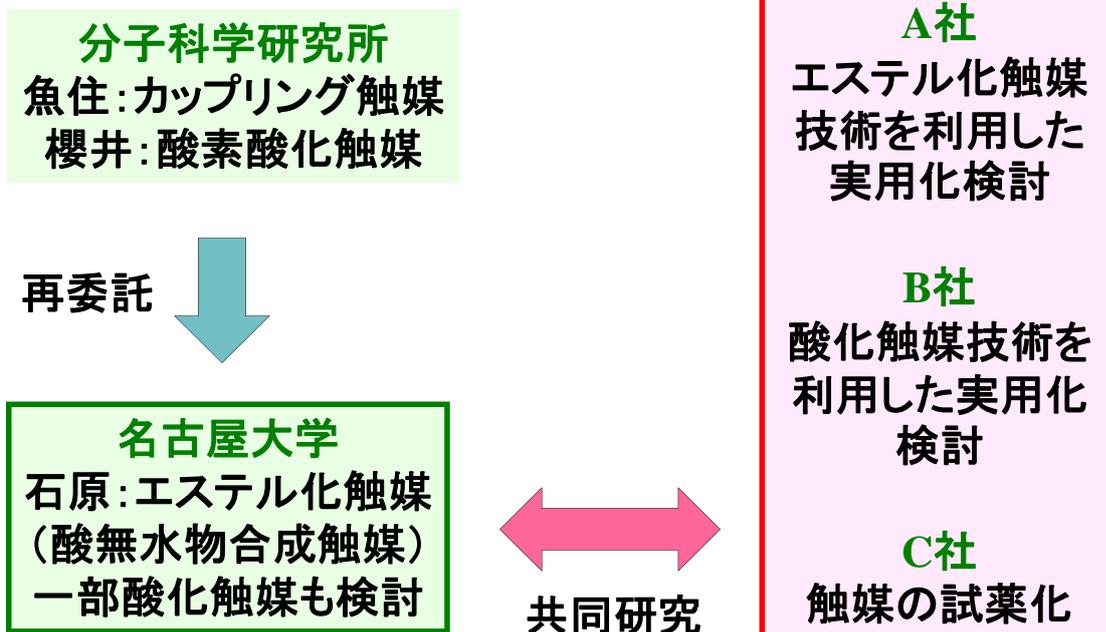
2012年 9月14日

1/21

研究開発全体図

公開

名大プロジェクトの位置づけ



2/21

名古屋大学

事業項目	最終目標	H21年度	H22年度	H23年度	達成度
エステル、アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究	カルボン酸無水物、エステル・アミド類の合成 反応率80%以上、選択率90%以上、反応温度170°C以下、反応時間24時間以内、触媒量5mol%以下または触媒の回収98%以上、生産量100g以上	当初研究開発目標 反応率50%以上、選択率50%以上、反応温度200°C以下、反応時間24時間以内、触媒量20mol%以下、生産量1g以上 達成状況 同上	当初研究開発目標 反応率80%以上、選択率90%以上、反応温度170°C以下、反応時間24時間以内、触媒量5mol%以下、生産量5g以上 達成状況 同上	当初研究開発目標 反応率80%以上、選択率90%以上、反応温度170°C以下、反応時間24時間以内、触媒量5mol%以下、生産量20g以上 達成状況 反応率90%以上、触媒量1mol%以下、生産量100gスケール達成 他同上	110%
エステル、アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究	酸化触媒の検討 反応率80%以上、反応時間24時間以内、触媒量5mol%以下または触媒の回収98%以上、生産量10g以上	当初研究開発目標 反応率50%以上、反応時間24時間以内、触媒量20mol%以下、生産量1g以上 達成状況 同上	当初研究開発目標 反応率80%以上、選択率90%以上、反応時間24時間以内、触媒量5mol%以下、生産量5g以上 達成状況 同上	当初研究開発目標 反応率80%以上、選択率90%以上、反応時間24時間以内、触媒量5mol%以下、生産量10g以上 達成状況 反応率90%以上、他同上	105%

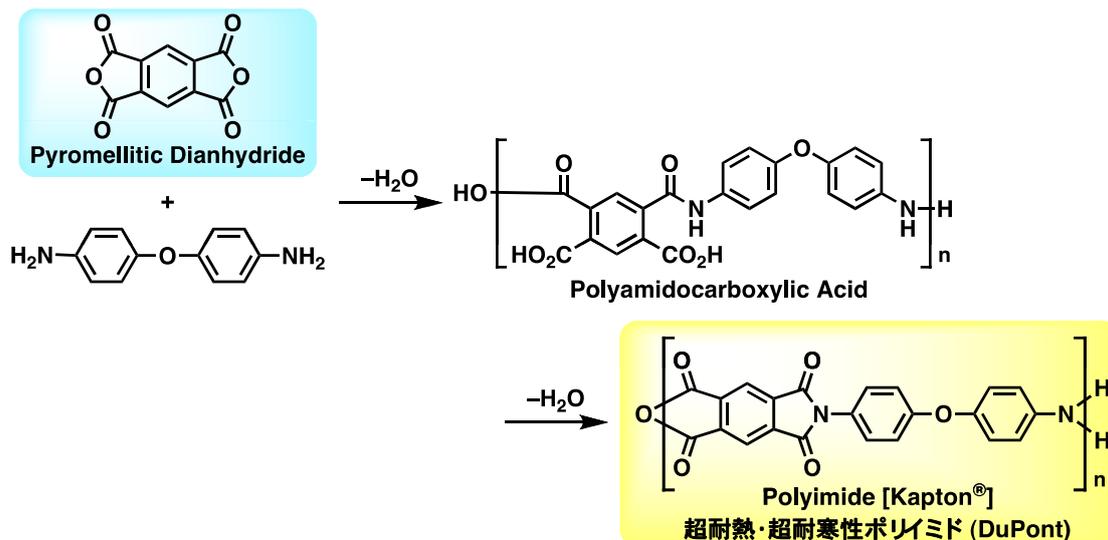
事業原簿 III.2.1. ③-1

3/21

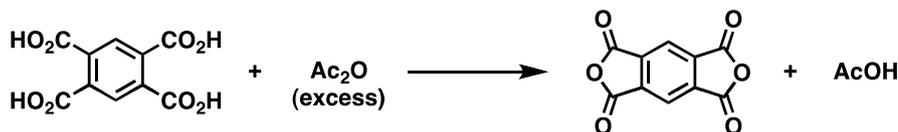
- “Brønsted base-assisted boronic acid catalysis for the dehydrative intramolecular condensation of dicarboxylic acids”
Akira Sakakura, Takuro Ohkubo, Risa Yamashita, Matsujiro Akakura, Kazuaki Ishihara
Org. Lett. **2011**, 13(5), 892–895.
- “Intramolecular Dehydrative Condensation of Dicarboxylic Acids with Brønsted Base-Assisted Boronic Acid Catalysts”
Akira Sakakura, Risa Yamashita, Takuro Ohkubo, Matsujiro Akakura, Kazuaki Ishihara
Aust. J. Chem. **2011**, 64(11), 1458–1465.
- “カルボン酸無水物の製造方法及びアリールボロン酸化合物”
発明者: 石原一彰、坂倉彰; 権利者: 国立大学法人名古屋大学
国際出願番号: PCT/JP2010/053442、2010年3月3日
国際公開番号: WO2010/103976、2010年9月16日
- “α-ヒドロキシカルボン酸アミド化合物の製法及び新規なアリールボロン酸化合物”
発明者: 石原一彰、坂倉彰; 権利者: 国立大学法人名古屋大学
特願2012-032400、2012年2月17日
- 2,6-Bis[(2,2,6,6-tetramethyl-1-piperidiny)methyl]phenylboronic acid (contains varying amounts of anhydride)(商品番号B3927)を東京化成工業より販売開始(2012年7月)

4/21

Application of Carboxylic Anhydrides

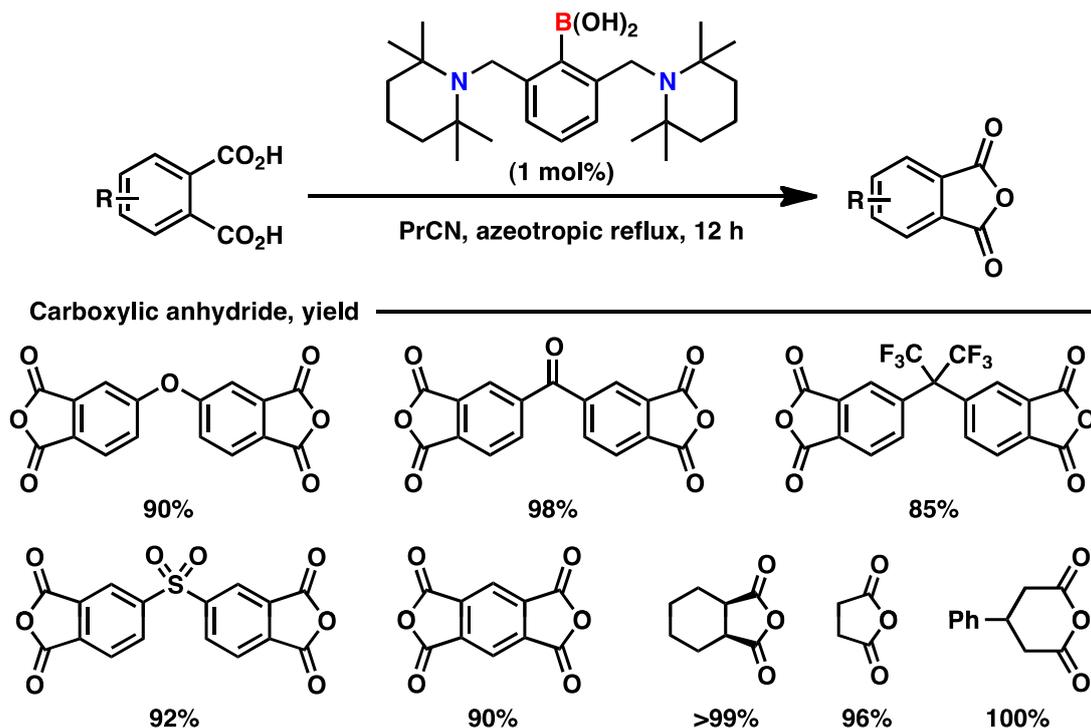


Current Synthesis of Carboxylic Anhydride



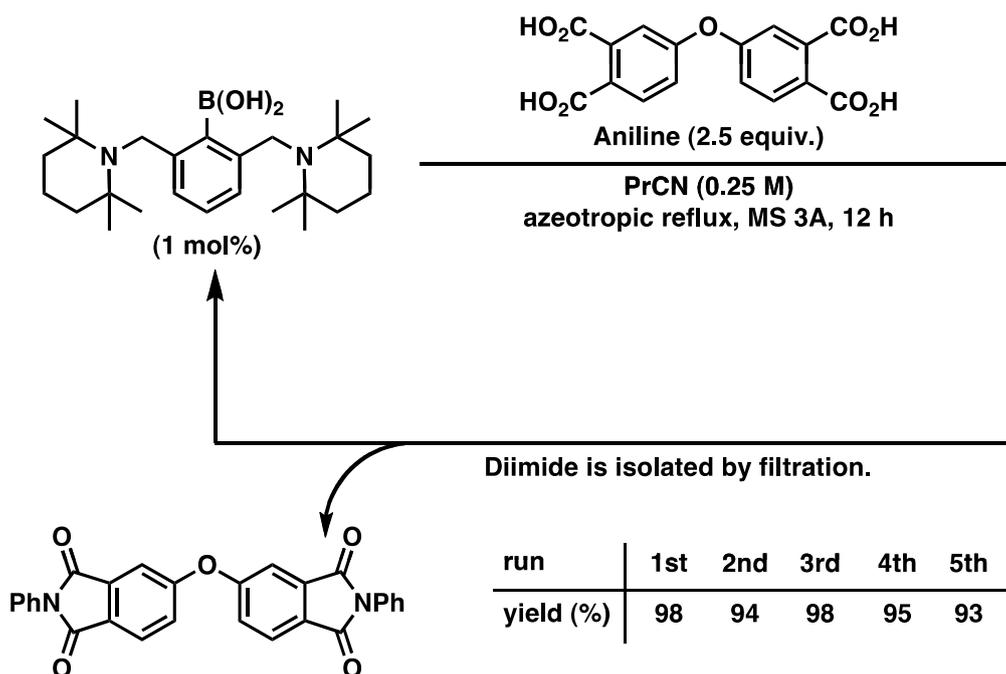
5 / 21

Catalytic Dehydrative Condensation of Di- or Tetracarboxylic Acids



Sakakura, A.; Ohkubo, T.; Yamashita, R.; Akakura, M.; Ishihara, K. *Org. Lett.* 2011, 13, 892-895.

Catalytic Dehydrative Condensation Between Phthalic Acid and Aniline for the Synthesis of Diimide



Sakakura, A.; Ohkubo, T.; Yamashita, R.; Akakura, M.; Ishihara, K. *Org. Lett.* 2011, 13, 892-895

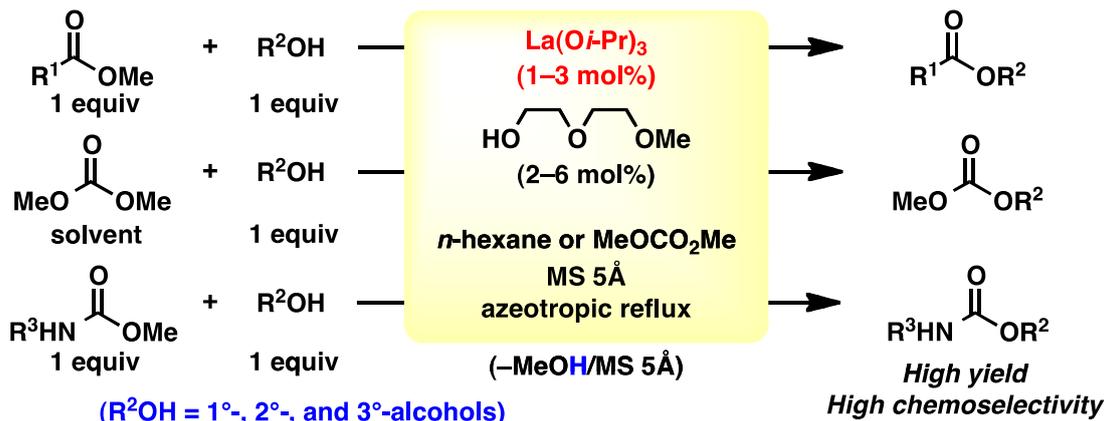
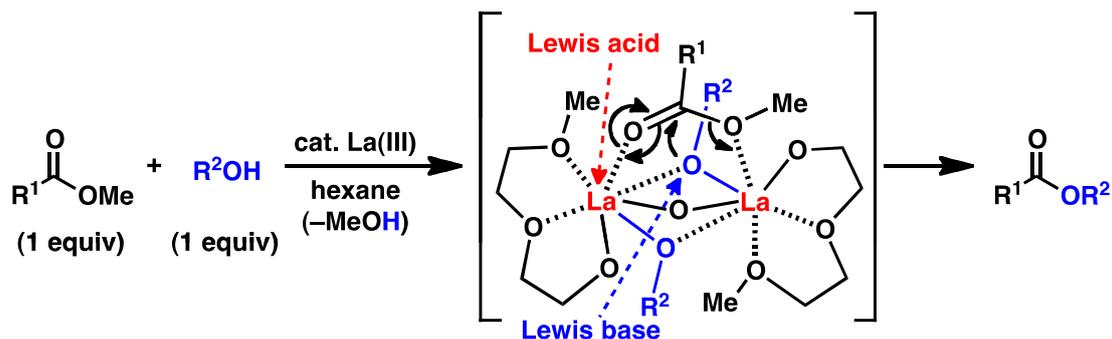
事業原簿 III.2.1. ③-2

7/21

- “Ligand-assisted rate acceleration in lanthanum(III) isopropoxide-catalyzed transesterification of carboxylic esters”
Manabu Hatano, Yoshiro Furuya, Takumi Shimmura, Kastuhiko Moriyama, Sho Kamiya, Toshikatsu Maki, Kazuaki Ishihara
Org. Lett. **2011**, 13(3), 426–429.
- “Lanthanum(III) isopropoxide-catalyzed chemoselective transesterification of dimethyl carbonate and methyl carbamates”
Manabu Hatano, Sho Kamiya, Katsuhiko Moriyama, Kazuaki Ishihara
Org. Lett. **2011**, 13(3), 430–433.
- “In situ generated “lanthanum(III) nitrate alkoxide” as a highly active and nearly neutral transesterification catalyst”
Manabu Hatano, Sho Kamiya, Kazuaki Ishihara
Chem. Commun. **2012** Advance Article. DOI: 10.1039/C2CC34987F.
- “エステル製造方法”
発明者: 石原一彰、波多野学; 権利者: 国立大学法人名古屋大学
特願2010-237228, 2010年10月22日
- “エステル製造方法”
発明者: 石原一彰、波多野学; 権利者: 国立大学法人名古屋大学
特願2011-196789, 2011年9月9日
- 日刊工業新聞(2012年8月28日(火)21面)
記事の見出し「名大 ランタン触媒でエステル合成 医薬品製造 効率化へ」

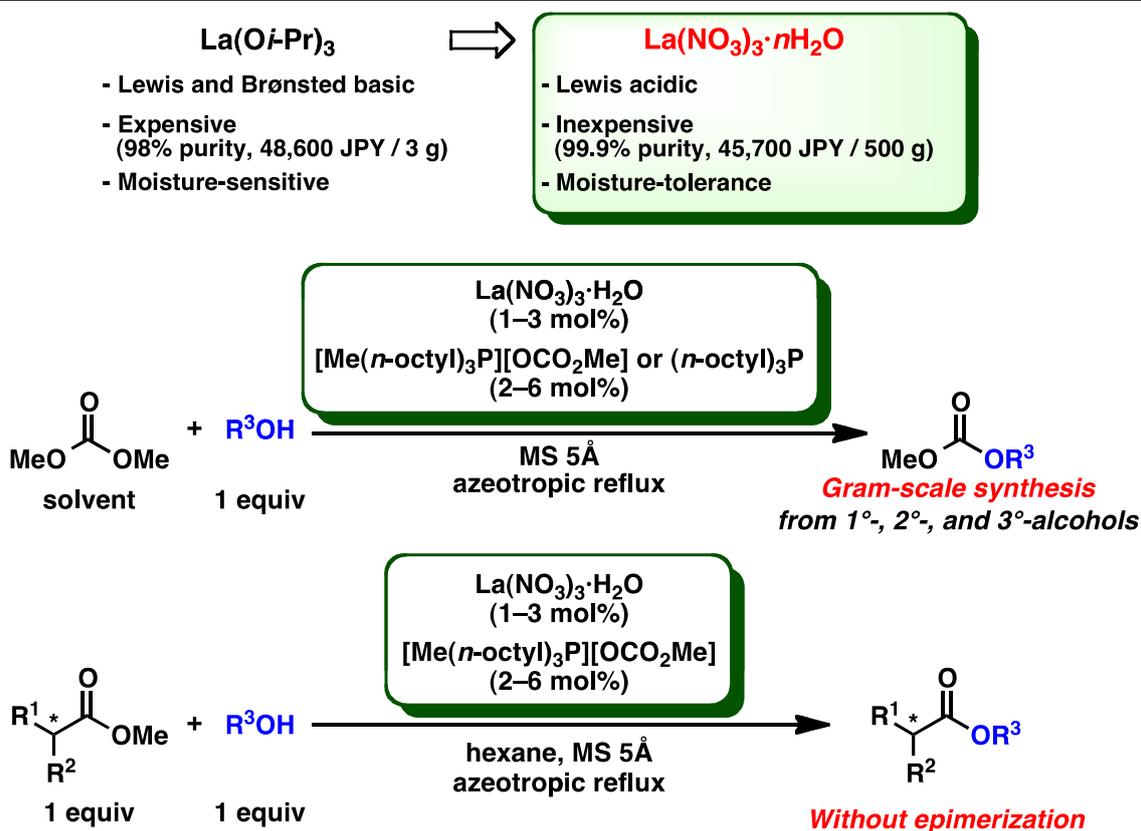
8/21

La(Oi-Pr)₃-Catalyzed Transesterification



事業原簿 III.2.1. ③-4

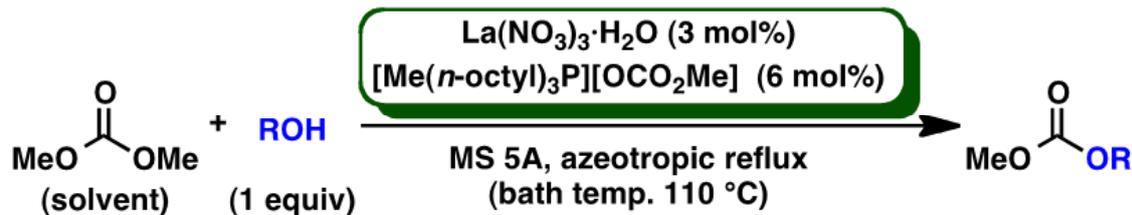
9/21



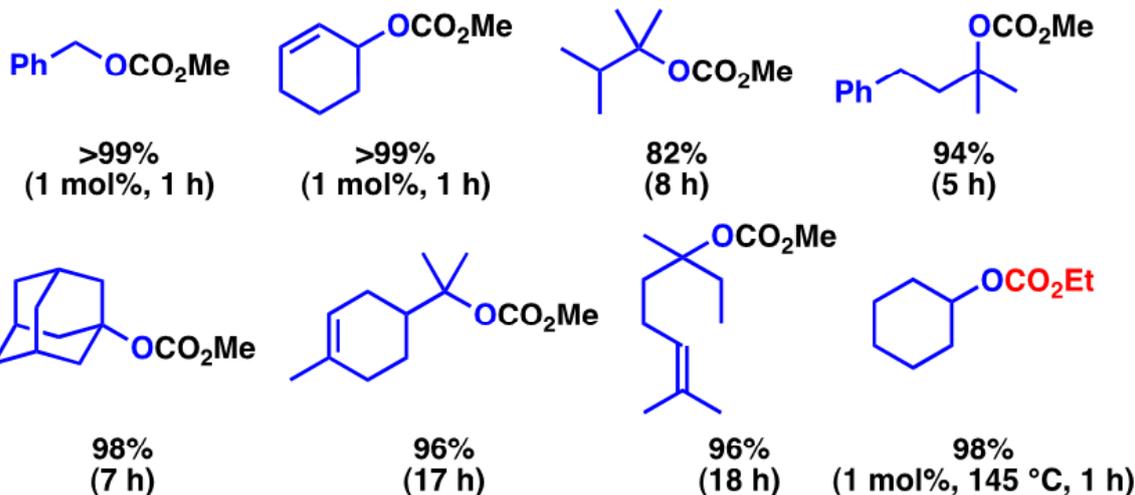
事業原簿 III.2.1. ③-14

10/21

Transesterification of Dimethyl Carbonate



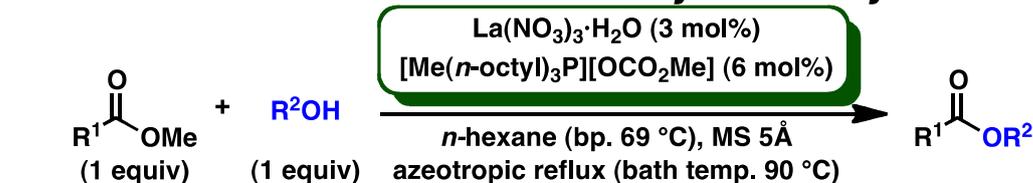
Product and yield (time)



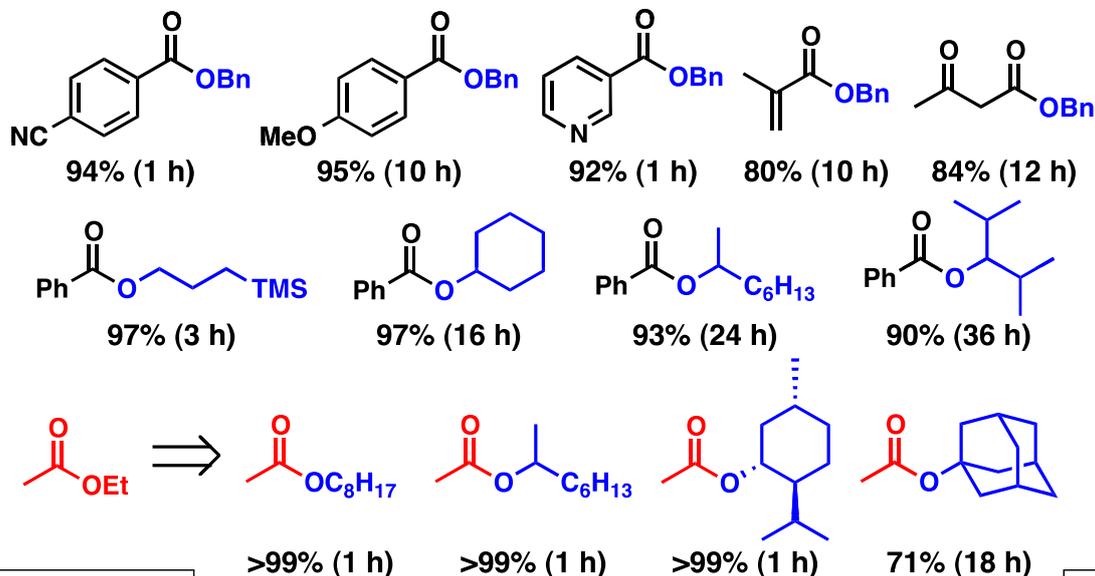
事業原簿 III.2.1. ③-13

11/21

Transesterification of Methyl Carboxylates



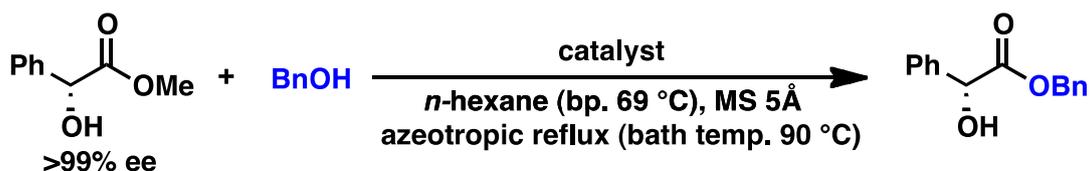
Product and yield (time)



事業原簿 III.2.1. ③-13

12/21

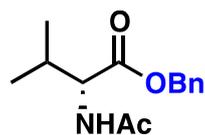
Non-Epimerized Transesterification



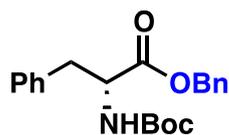
$\text{La}(\text{NO}_3)_3 \cdot \text{H}_2\text{O} / \{[\text{Me}(n\text{-octyl})_3\text{P}][\text{OCO}_2\text{Me}]\}_2$ (3 mol%) : 91% (3 h), >99% ee

$\text{La}(\text{O}i\text{-Pr})_3 / [\text{H}(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_2\text{OMe}]_2$ (3 mol%) : 87% (3 h), 0% ee

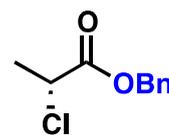
Product, yield, and ee (time)



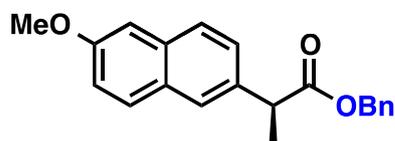
90% yield
>99% ee (24 h)



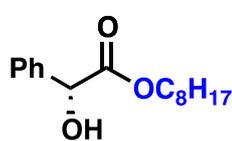
84% yield
>99% ee (70°C, 3 mol%, 20 h)



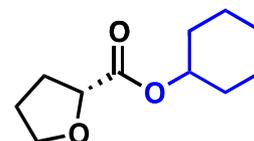
91% yield
97% ee (rt, 3 mol%, 12 h)



99% yield
97% ee (3 mol%, 16 h)



88% yield
99% ee (70°C, 3 mol%, 9 h)



95% yield
>99% ee (2 h)

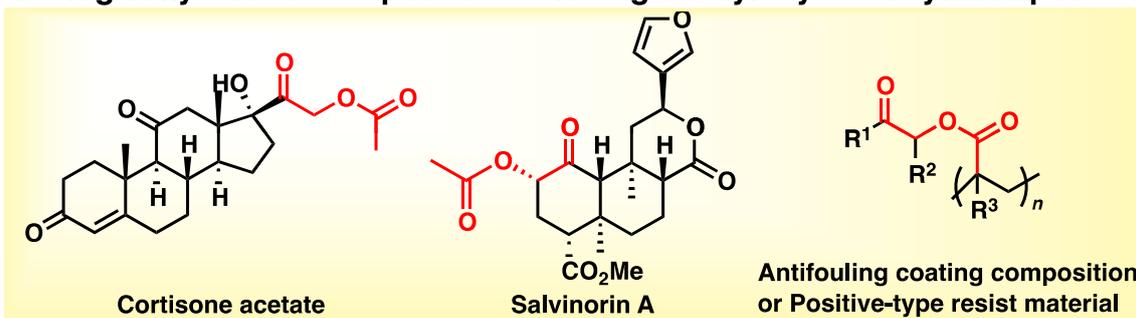
事業原簿 III.2.1. ③-14

13 / 21

- “In situ generated (hypo)iodite catalysts for the direct α -oxyacylation of carbonyl compounds with carboxylic acids”
 Muhammet Uyanik, Daisuke Suzuki, Takeshi Yasui, Kazuaki Ishihara
Angew. Chem. Int. Ed. **2011**, 50(23), 5331–5334.
- 日刊工業新聞 (2011年9月16日23面)
 記事の見出し「ポリマー樹脂などの原料、低コストで安全に合成、金属触媒や効果な共酸化剤不要」
- “ α -アシロキシカルボニル化合物の製法”
 発明者: 石原一彰、Muhammet Uyanik; 権利者: 国立大学法人名古屋大学
 特願2010-049003, 2010年3月5日
- “ α -アシロキシカルボニル化合物の製法及び新規な α -アシロキシカルボニル化合物”
 国際出願番号: PCT/JP2011/055043(WO), 2011年3月4日; 権利者: 国立大学法人名古屋大学・三菱レーヨン株式会社
 台湾出願番号: 100107298(TW), 2011年3月4日; 公開番号: TW201139360, 2011年11月16日

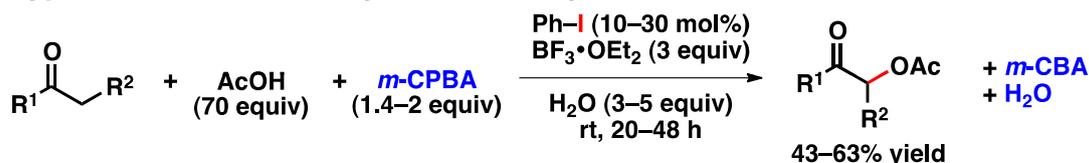
14 / 21

Biologically Active Compounds Including α -Acyloxycarbonyl Compounds

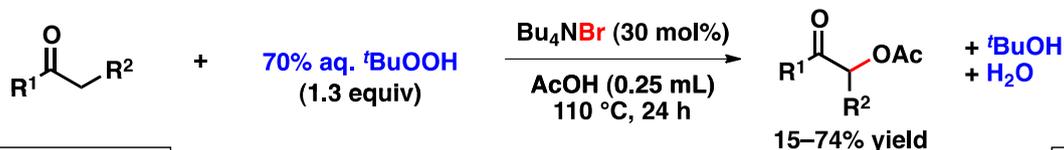


Previous Methods for α -Oxyacetylation of Carbonyl Compounds

Hypervalent Iodine-Catalyzed α -Acetoxylation: Ochiai, et al. *JACS* 2005, 127, 12244.



Bromine-Catalyzed α -Acetoxylation: Hayashi et al. *Chem. Lett.* 2010, 39, 929.

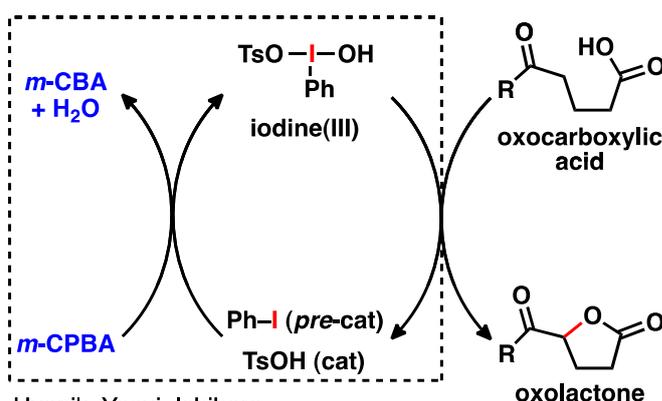


事業原簿 III.2.1. ③-5

15 / 21

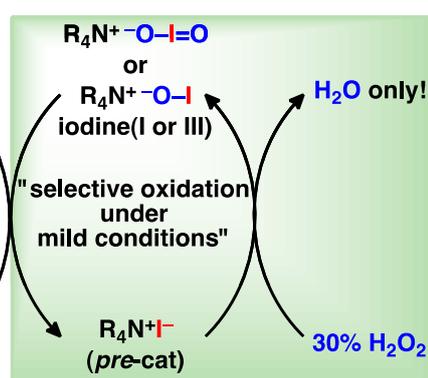
Oxylactonization of Oxocarboxylic Acid

ArI / *m*-CPBA Oxidation System:



Uyanik, Yasui, Ishihara, *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2009, 19, 3848.

I⁻ / H₂O₂ Oxidation System:



Yasui, Uyanik, Ishihara, *Proc. 89th Ann. Meet. of Jpn. Chem. Soc.* 2009, 3G-13.

carbonyl compound

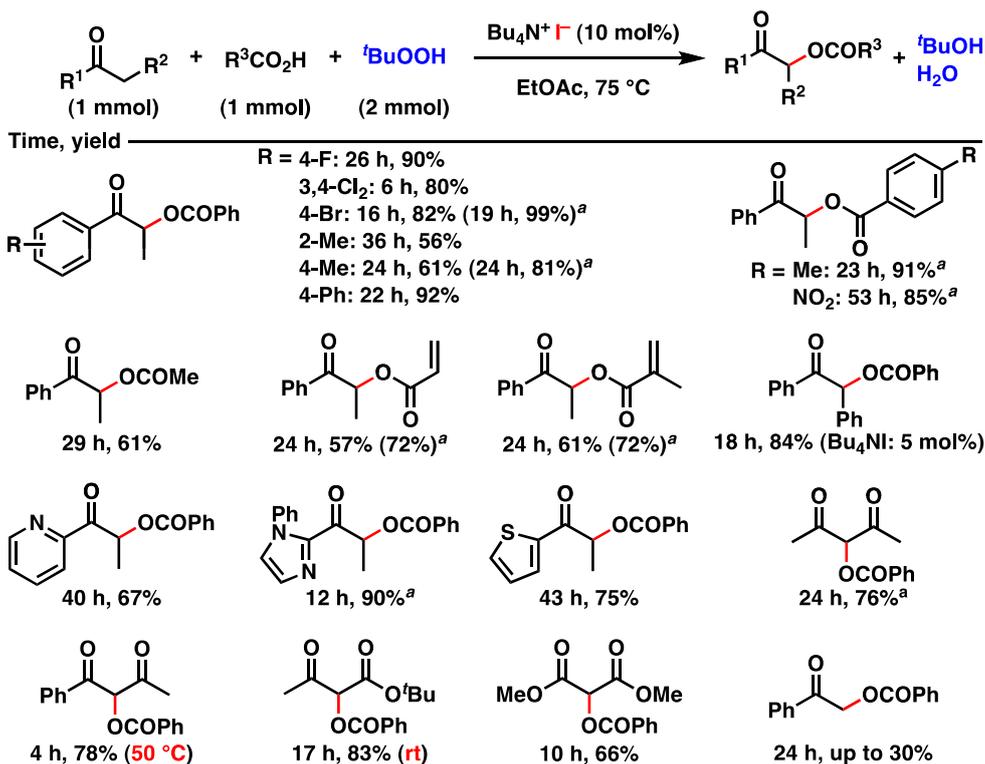
carboxylic acid

α acyloxycarbonyl compound

事業原簿 III.2.1. ③-6

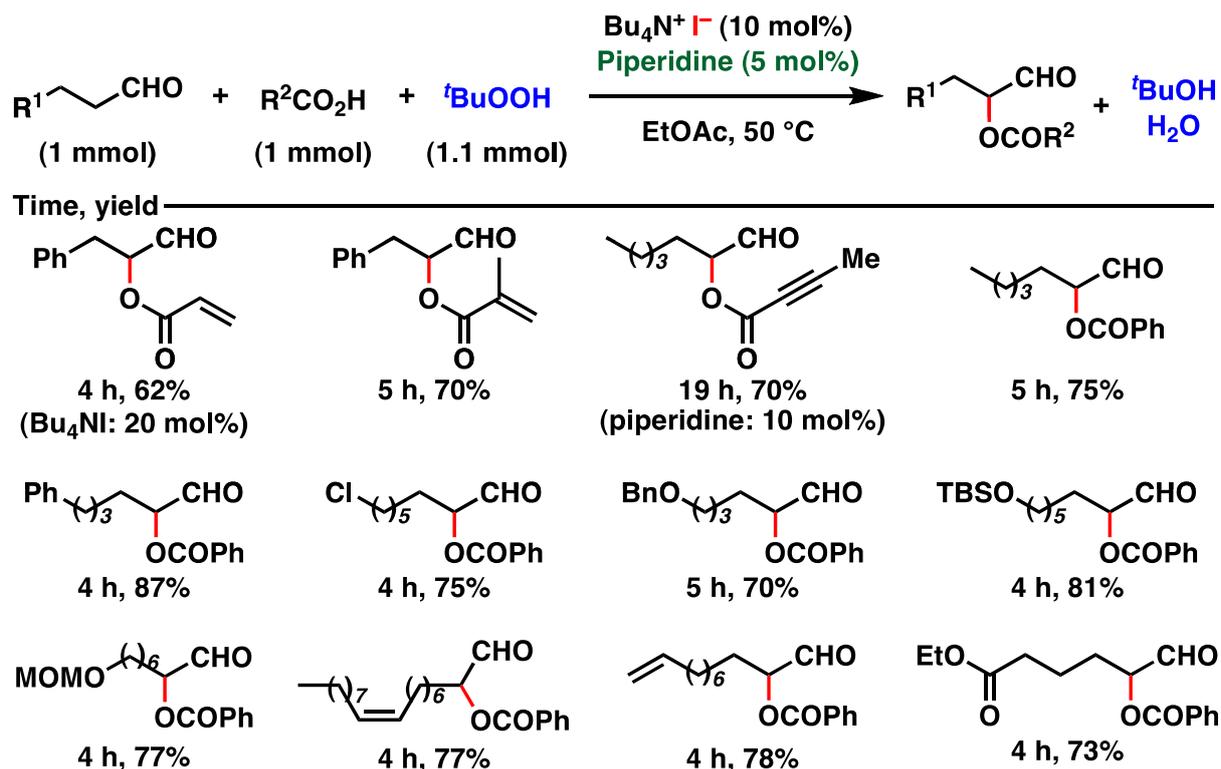
16 / 21

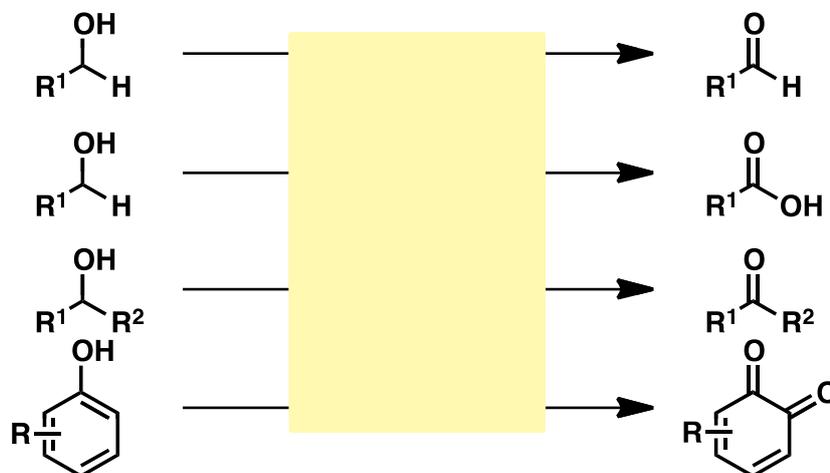
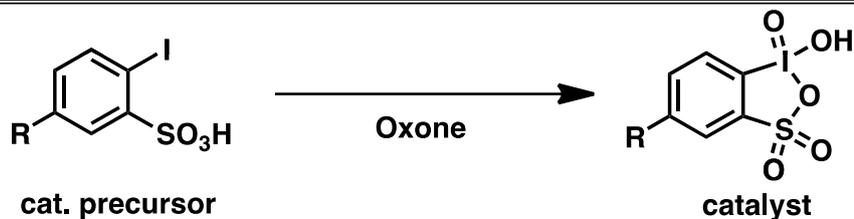
Direct Oxidative Coupling of Ketones and Carboxylic Acids



^a: 2 mmol of ketone was used.

Oxidative Coupling of Aldehydes and Carboxylic Acids





Uyanik, M.; Ishihara, K. *Aldrichim. Acta* **2010**, *43*, 83–91.

Uyanik, M.; Mutsuga, T.; Ishihara, K. *Molecules* **2012**, *17*, 8604–8616.

Muhammet Uyanik助教が第15回ヨウ素学会シンポジウムでポスター賞受賞(2012年9月11日)

「IBS触媒とOxoneを用いるフェノールの1,2-キノンへの選択的酸化反応」

事業原簿 III.2.1. ③-17

19 / 21

開発項目	触媒	触媒構造	触媒機能	合成反応	反応率・選択率	課題
エステル、アミド類の高効率・高選択率合成法の開発研究	ボロン酸	アミノボロン酸	脱水縮合反応を促進	カルボン酸 → カルボン酸無水物・α-ヒドロキシカルボキシアミド	高活性(<5 mol%)	鎖状カルボン酸無水物の合成に適用できない
	ランタン塩	La(NO ₃) ₃ ・[Me(C ₈ H ₁₇) ₃ P][OCO ₂ Me]	エステル交換反応を促進	メチルエステル → エステル・炭酸エステル	高活性(<3 mol%)・ラセミ化抑制(>98% ee)	Laを使用、触媒の回収・再利用
	超原子価ヨウ素塩	R ₄ Ni	オキシアルル化反応を促進	ケトン、アルデヒド → α-オキソエステル	高活性(<10 mol%)・位置選択的(>99%)	基質適用範囲の拡大

20 / 21

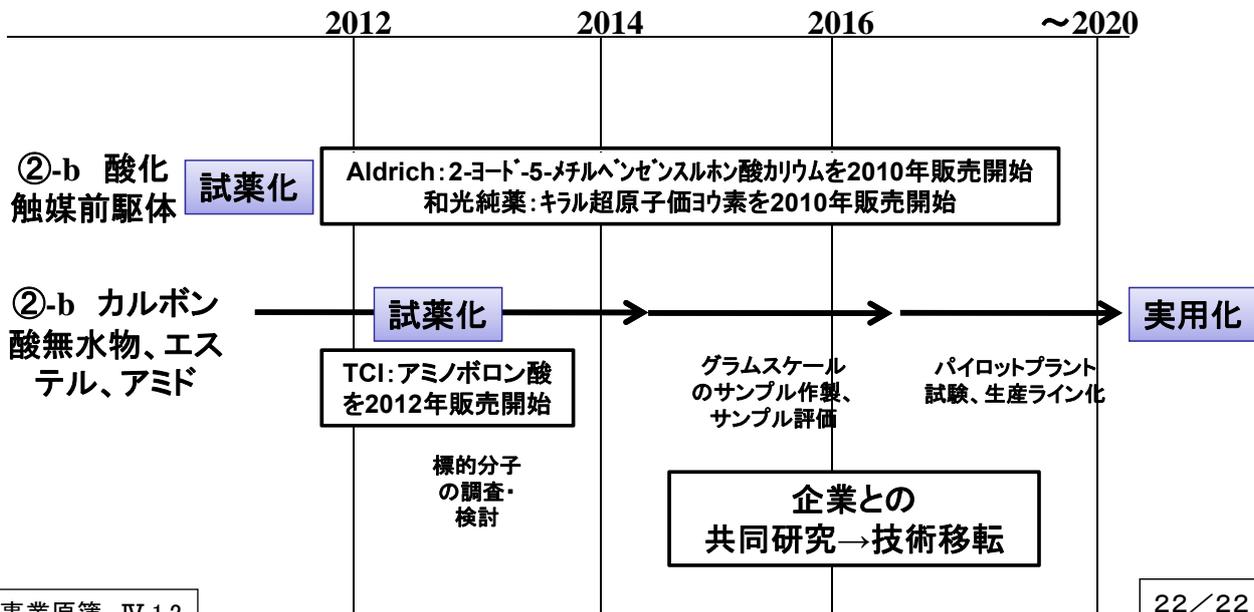
開発項目	触媒	製品	製造プロセス	品質・コスト	課題
エステル、アミド類の高効率・高選択率合成法の開発研究	ボロン酸	ポリイミド原料、医薬品中間体、触媒の試薬化 カルボン酸無水物、 α -ヒドロキシカルボン酸アミド、ポリイミド	カルボン酸無水物、 α -ヒドロキシカルボン酸アミド、ポリイミドの製造プロセス	無着色、高純度、低毒性 比較的低温で製造でき製造コストを抑えられる。	標的分子の探索
	ランタン塩	ポリマー原料、ポリエステル、医薬品中間体 第3級アルキルエステル、アクリル酸エステル	第3級アルキルエステル、アクリル酸エステルの製造プロセス	無着色、高純度、低毒性 コストはやや高め	標的分子の探索
	超原子価ヨウ素塩	医薬品中間体、レジスト材料、汚れ止め剤 α -オキシエステル	α -オキシエステルの製造プロセス	高純度、低毒性	標的分子の探索

実用化のシナリオ

適用製品

- ②-b 酸化触媒前駆体
- ②-b カルボン酸無水物、エステル、アミド等の有機材料中間体

実用化へのロードマップ

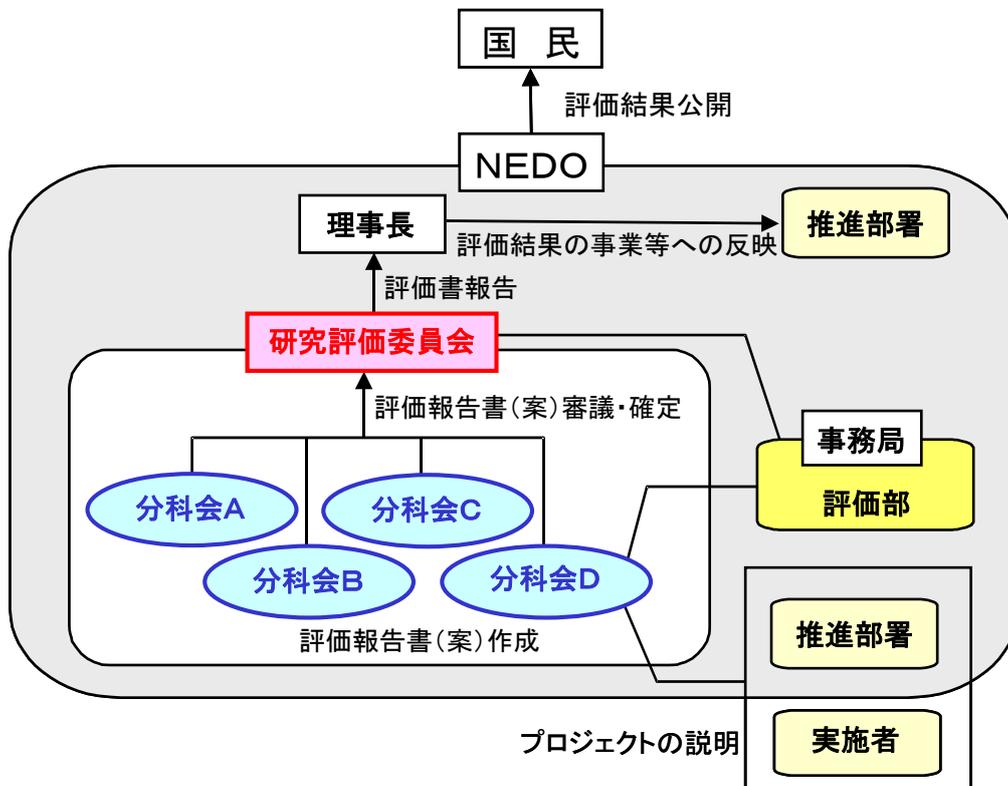


参考資料 1 評価の実施方法

本評価は、「技術評価実施規程」（平成 15 年 10 月制定）に基づいて研究評価を実施する。

独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）における研究評価の手順は、以下のように被評価プロジェクトごとに分科会を設置し、同分科会にて研究評価を行い、評価報告書（案）を策定の上、研究評価委員会において確定している。

- 「NEDO 技術委員・技術委員会等規程」に基づき研究評価委員会を設置
- 研究評価委員会はその下に分科会を設置



1. 評価の目的

評価の目的は「技術評価実施規程」において。

- 業務の高度化等の自己改革を促進する
- 社会に対する説明責任を履行するとともに、
経済・社会ニーズを取り込む
- 評価結果を資源配分に反映させ、資源の重点化及び業務の効率化を
促進する

としている。

本評価においては、この趣旨を踏まえ、本事業の意義、研究開発目標・計画の妥当性、計画を比較した達成度、成果の意義、成果の実用化の可能性等について検討・評価した。

2. 評価者

技術評価実施規程に基づき、事業の目的や態様に即した外部の専門家、有識者からなる委員会方式により評価を行う。分科会委員選定に当たっては以下の事項に配慮して行う。

- 科学技術全般に知見のある専門家、有識者
- 当該研究開発の分野の知見を有する専門家
- 研究開発マネジメントの専門家、経済学、環境問題、国際標準、その他社会的ニーズ関連の専門家、有識者
- 産業界の専門家、有識者
- ジャーナリスト

また、評価に対する中立性確保の観点から事業の推進側関係者を選任対象から除外し、また、事前評価の妥当性を判断するとの側面にかんがみ、事前評価に関与していない者を主体とする。

これらに基づき、分科会委員名簿にある8名を選任した。

なお、本分科会の事務局については、独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構評価部が担当した。

3. 評価対象

平成21年度に開始された「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発／①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発・②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の

開発」プロジェクトを評価対象とした。

なお、分科会においては、当該事業の推進部署から提出された事業原簿、プロジェクトの内容、成果に関する資料をもって評価した。

4. 評価方法

分科会においては、当該事業の推進部署及び研究実施者からのヒアリングと、それを踏まえた分科会委員による評価コメント作成、評点法による評価及び実施者側等との議論等により評価作業を進めた。

なお、評価の透明性確保の観点から、知的財産保護の上で支障が生じると認められる場合等を除き、原則として分科会は公開とし、研究実施者と意見を交換する形で審議を行うこととした。

5. 評価項目・評価基準

分科会においては、次に掲げる「評価項目・評価基準」で評価を行った。これは、研究評価委員会による『各分科会における評価項目・評価基準は、被評価プロジェクトの性格、中間・事後評価の別等に応じて、各分科会において判断すべきものである。』との考え方に従い、第1回分科会において、事務局が、研究評価委員会により示された「標準的評価項目・評価基準」（参考資料1-7頁参照）をもとに改定案を提示し、承認されたものである。

プロジェクト全体に係わる評価においては、主に事業の目的、計画、運営、達成度、成果の意義や実用化への見通し等について評価した。各個別テーマに係る評価については、主にその目標に対する達成度等について評価した。

評価項目・評価基準

1. 事業の位置付け・必要性について

(1) NEDOの事業としての妥当性

- ・ 「ナノテク・部材イノベーションプログラム」の目標達成のために寄与しているか。
- ・ 民間活動のみでは改善できないものであること、又は公共性が高いことにより、NEDOの関与が必要とされる事業か。
- ・ 当該事業を実施することによりもたらされる効果が、投じた予算との比較において十分であるか。

(2) 事業目的の妥当性

- ・ 内外の技術開発動向、国際競争力の状況、エネルギー需給動向、市場動向、政策動向、国際貢献の可能性等から見て、事業の目的は妥当か。

2. 研究開発マネジメントについて

(1) 研究開発目標の妥当性

- ・ 内外の技術動向、市場動向等を踏まえて、戦略的な目標が設定されているか。
- ・ 具体的かつ明確な開発目標を可能な限り定量的に設定しているか。
- ・ 目標達成度を測定・判断するための適切な指標が設定されているか。

(2) 研究開発計画の妥当性

- ・ 目標達成のために妥当なスケジュール、予算（各個別研究テーマ毎の配分を含む）となっているか。
- ・ 目標達成に必要な要素技術を取り上げているか。
- ・ 研究開発フローにおける要素技術間の関係、順序は適切か。

(3) 研究開発実施の事業体制の妥当性

- ・ 適切な研究開発チーム構成での実施体制になっているか。
- ・ 真に技術力と事業化能力を有する企業を実施者として選定しているか。
- ・ 全体を統括するプロジェクトリーダー等が選任され、十分に活躍できる環境が整備されているか。

- ・ 目標達成及び効率的実施のために必要な実施者間の連携が十分に行われる体制となっているか。
 - ・ 実用化シナリオに基づき、成果の受け取り手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、関与を求める体制を整えているか。
- (4) 研究開発成果の実用化に向けたマネジメントの妥当性
- ・ 成果の実用化につなげる戦略が明確になっているか。
 - ・ 成果の実用化につなげる知財マネジメントの方針が明確に示され、かつ妥当なものか。
- (5) 情勢変化への対応等
- ・ 進捗状況を常に把握し、社会・経済の情勢の変化及び政策・技術動向に機敏かつ適切に対応しているか。
 - ・ 計画見直しの方針は一貫しているか（中途半端な計画見直しが研究方針の揺らぎとなっていないか）。計画見直しを適切に実施しているか。

3. 研究開発成果について

- (1) 目標の達成度
- ・ 成果は目標値をクリアしているか。
 - ・ 全体としての目標達成はどの程度か。
 - ・ 目標未達成の場合、目標達成までの課題を把握し、課題解決の方針が明確になっているか。
- (2) 成果の意義
- ・ 成果は市場の拡大或いは市場の創造につながることを期待できるか。
 - ・ 成果は、世界初あるいは世界最高水準か。
 - ・ 成果は、新たな技術領域を開拓することが期待できるか。
 - ・ 成果は汎用性があるか。
 - ・ 投入された予算に見合った成果が得られているか。
 - ・ 成果は、他の競合技術と比較して優位性があるか。
- (3) 知的財産権等の取得及び標準化の取組
- ・ 知的財産権等の取扱（特許や意匠登録出願、著作権や回路配置利用権の登録、品種登録出願、営業機密の管理等）は事業戦略、または実用化計画に沿って国内外に適切に行われているか。

(4)成果の普及

- ・ 論文の発表は、研究内容を踏まえ適切に行われているか。
- ・ 成果の受取手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、適切に成果を普及しているか。また、普及の見通しは立っているか。
- ・ 一般に向けて広く情報発信をしているか。

4. 実用化の見通しについて

(1)成果の実用化可能性

- ・ 実用化イメージ・出口イメージが明確になっているか。
- ・ 実用化イメージ・出口イメージに基づき、開発の各段階でマイルストーンを明確にしているか。それを踏まえ、引き続き研究開発が行われる見通しは立っているか。

(2)波及効果

- ・ 成果は関連分野への波及効果（技術的・経済的・社会的）を期待できるものか。
- ・ プロジェクトの実施自体が当該分野の研究開発や人材育成等を促進するなどの波及効果を生じているか。

標準的評価項目・評価基準（事後評価）

2010. 3. 26

【事後評価 標準的評価項目・評価基準の位置付け（基本的考え方）】

標準的評価項目・評価基準は、第25回研究評価委員会（平成22年3月26日付）において以下のとおり定められている。（本文中の記載例による1…、2…、3…、4…が標準的評価項目、それぞれの項目中の(1)…、(2)…が標準的評価基準、それぞれの基準中の…が視点）

ただし、これらの標準的評価項目・評価基準は、研究開発プロジェクトの事後評価における標準的な評価の視点であり、各分科会における評価項目・評価基準は、被評価プロジェクトの性格等に応じて、各分科会において判断すべきものである。

1. 事業の位置付け・必要性について

(1) NEDOの事業としての妥当性

- ・ 特定の施策（プログラム）、制度の下で実施する事業の場合、当該施策・制度の目標達成のために寄与しているか。
- ・ 民間活動のみでは改善できないものであること、又は公共性が高いことにより、NEDOの関与が必要とされる事業か。
- ・ 当該事業を実施することによりもたらされる効果が、投じた予算との比較において十分であるか。

(2) 事業目的の妥当性

- ・ 内外の技術開発動向、国際競争力の状況、エネルギー需給動向、市場動向、政策動向、国際貢献の可能性等から見て、事業の目的は妥当か。

2. 研究開発マネジメントについて

(1) 研究開発目標の妥当性

- ・ 内外の技術動向、市場動向等を踏まえて、戦略的な目標が設定されているか。
- ・ 具体的かつ明確な開発目標を可能な限り定量的に設定しているか。
- ・ 目標達成度を測定・判断するための適切な指標が設定されているか。

(2)研究開発計画の妥当性

- ・ 目標達成のために妥当なスケジュール、予算（各個別研究テーマ毎の配分を含む）となっているか。
- ・ 目標達成に必要な要素技術を取り上げているか。
- ・ 研究開発フローにおける要素技術間の関係、順序は適切か。
- ・ 継続プロジェクトや長期プロジェクトの場合、技術蓄積を、実用化の観点から絞り込んだうえで活用が図られているか。

(3)研究開発実施の事業体制の妥当性

- ・ 適切な研究開発チーム構成での実施体制になっているか。
- ・ 真に技術力と事業化能力を有する企業を実施者として選定しているか。
- ・ 研究管理法を介する場合、研究管理法が真に必要な役割を担っているか。
- ・ 全体を統括するプロジェクトリーダー等が選任され、十分に活躍できる環境が整備されているか。
- ・ 目標達成及び効率的実施のために必要な実施者間の連携 and/or 競争が十分に行われる体制となっているか。
- ・ 実用化シナリオに基づき、成果の受け取り手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、関与を求める体制を整えているか。

(4) 研究開発成果の実用化、事業化に向けたマネジメントの妥当性

- ・ 成果の実用化、事業化につなげる戦略が明確になっているか。
- ・ 成果の実用化、事業化につなげる知財マネジメントの方針が明確に示され、かつ妥当なものか。

(5)情勢変化への対応等

- ・ 進捗状況を常に把握し、社会・経済の情勢の変化及び政策・技術動向に機敏かつ適切に対応しているか。
- ・ 計画見直しの方針は一貫しているか（中途半端な計画見直しが研究方針の揺らぎとなっていないか）。計画見直しを適切に実施しているか。

3. 研究開発成果について

(1)目標の達成度

- ・ 成果は目標値をクリアしているか。

- ・ 全体としての目標達成はどの程度か。
- ・ 目標未達成の場合、目標達成までの課題を把握し、課題解決の方針が明確になっているか。

(2)成果の意義

- ・ 成果は市場の拡大或いは市場の創造につながることを期待できるか。
- ・ 成果は、世界初あるいは世界最高水準か。
- ・ 成果は、新たな技術領域を開拓することが期待できるか。
- ・ 成果は汎用性があるか。
- ・ 投入された予算に見合った成果が得られているか。
- ・ 成果は、他の競合技術と比較して優位性があるか。

(3)知的財産権等の取得及び標準化の取組

- ・ 知的財産権等の取扱（特許や意匠登録出願、著作権や回路配置利用権の登録、品種登録出願、営業機密の管理等）は事業戦略、または実用化計画に沿って国内外に適切に行われているか。
- ・ 国際標準化に関する事項が計画されている場合、得られた研究開発の成果に基づく国際標準化に向けた提案等の取組が適切に行われているか。

(4)成果の普及

- ・ 論文の発表は、研究内容を踏まえ適切に行われているか。
- ・ 成果の受取手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、適切に成果を普及しているか。また、普及の見通しは立っているか。
- ・ 一般に向けて広く情報発信をしているか。

4. 実用化、事業化の見通しについて

(1)成果の実用化可能性

- ・ 産業技術としての見極め（適用可能性の明確化）ができているか。
- ・ 実用化に向けて課題が明確になっているか。課題解決の方針が明確になっているか。
- ・ 国際標準化に関する事項が計画されている場合、国際規格化等、標準整備に向けた見通しが得られているか。

(2)事業化までのシナリオ

- ・ NEDO後継プロジェクト、NEDO実用化助成、企業内研究等、プロ

プロジェクト終了後の事業化までの道筋は明確か。

- ・ 市場の規模や成長性、コストダウン、競合技術との比較、導入普及、事業化までの期間、事業化とそれに伴う経済効果等の見通しは立っているか。

(3)波及効果

- ・ 成果は関連分野への波及効果（技術的・経済的・社会的）を期待できるものか。
- ・ プロジェクトの実施自体が当該分野の研究開発や人材育成等を促進するなどの波及効果を生じているか。

※ 基礎的・基盤的研究及び知的基盤・標準整備等の研究開発の場合は、以下の項目・基準による。

* 基礎的・基盤的研究開発の場合

2. 研究開発マネジメントについて

(1) 研究開発目標の妥当性

- ・ 内外の技術動向、市場動向等を踏まえて、戦略的な目標が設定されているか。
- ・ 具体的かつ明確な開発目標を可能な限り定量的に設定しているか。
- ・ 目標達成度を測定・判断するための適切な指標が設定されているか。

(2) 研究開発計画の妥当性

- ・ 目標達成のために妥当なスケジュール、予算（各個別研究テーマ毎の配分を含む）となっているか。
- ・ 目標達成に必要な要素技術を取り上げているか。
- ・ 研究開発フローにおける要素技術間の関係、順序は適切か。
- ・ 継続プロジェクトや長期プロジェクトの場合、技術蓄積を、実用化の観点から絞り込んだうえで活用が図られているか。

(3) 研究開発実施の事業体制の妥当性

- ・ 適切な研究開発チーム構成での実施体制になっているか。
- ・ 真に技術力と事業化能力を有する企業を実施者として選定しているか。
- ・ 研究管理法人を経由する場合、研究管理法人が真に必要な役割を担っているか。
- ・ 全体を統括するプロジェクトリーダー等が選任され、十分に活躍できる環境が整備されているか。
- ・ 目標達成及び効率的実施のために必要な実施者間の連携 and/or 競争が十分に行われる体制となっているか。
- ・ 実用化シナリオに基づき、成果の受け取り手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、関与を求める体制を整えているか。

(4) 研究開発成果の実用化に向けたマネジメントの妥当性

- ・ 成果の実用化につなげる戦略が明確になっているか。
- ・ 成果の実用化につなげる知財マネジメントの方針が明確に示され、かつ妥当なものか。

(5)情勢変化への対応等

- ・ 進捗状況を常に把握し、社会・経済の情勢の変化及び政策・技術動向に機敏かつ適切に対応しているか。
- ・ 計画見直しの方針は一貫しているか（中途半端な計画見直しが研究方針の揺らぎとなっていないか）。計画見直しを適切に実施しているか。

3. 研究開発成果について

(1)目標の達成度

- ・ 成果は目標値をクリアしているか。
- ・ 全体としての目標達成はどの程度か。
- ・ 目標未達成の場合、目標達成までの課題を把握し、課題解決の方針が明確になっているか。

(2)成果の意義

- ・ 成果は市場の拡大或いは市場の創造につながることを期待できるか。
- ・ 成果は、世界初あるいは世界最高水準か。
- ・ 成果は、新たな技術領域を開拓することが期待できるか。
- ・ 成果は汎用性があるか。
- ・ 投入された予算に見合った成果が得られているか。
- ・ 成果は、他の競合技術と比較して優位性があるか。

(3)知的財産権等の取得及び標準化の取組

- ・ 知的財産権等の取扱（特許や意匠登録出願、著作権や回路配置利用権の登録、品種登録出願、営業機密の管理等）は事業戦略、または実用化計画に沿って国内外に適切に行われているか。
- ・ 国際標準化に関する事項が計画されている場合、得られた研究開発の成果に基づく国際標準化に向けた提案等の取組が適切に行われているか。

(4)成果の普及

- ・ 論文の発表は、研究内容を踏まえ適切に行われているか。
- ・ 成果の受取手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、適切に成果を普及しているか。また、普及の見通しは立っているか。
- ・ 一般に向けて広く情報発信をしているか。

4. 実用化の見通しについて

(1) 成果の実用化可能性

- ・ 実用化イメージ・出口イメージが明確になっているか。
- ・ 実用化イメージ・出口イメージに基づき、開発の各段階でマイルストーンを明確にしているか。それを踏まえ、引き続き研究開発が行われる見通しは立っているか。
- ・ 国際標準化に関する事項が計画されている場合、国際規格化等、標準整備に向けた見通しが得られているか。

(2) 波及効果

- ・ 成果は関連分野への波及効果（技術的・経済的・社会的）を期待できるものか。
- ・ プロジェクトの実施自体が当該分野の研究開発や人材育成等を促進するなどの波及効果を生じているか。

* 知的基盤・標準整備等の研究開発の場合

2. 研究開発マネジメントについて

(1) 研究開発目標の妥当性

- ・ 内外の技術動向、市場動向等を踏まえて、戦略的な目標が設定されているか。
- ・ 具体的かつ明確な開発目標を可能な限り定量的に設定しているか。
- ・ 目標達成度を測定・判断するための適切な指標が設定されているか。

(2) 研究開発計画の妥当性

- ・ 目標達成のために妥当なスケジュール、予算（各個別研究テーマ毎の配分を含む）となっているか。
- ・ 目標達成に必要な要素技術を取り上げているか。
- ・ 研究開発フローにおける要素技術間の関係、順序は適切か。
- ・ 継続プロジェクトや長期プロジェクトの場合、技術蓄積を、実用化の観点から絞り込んだうえで活用が図られているか。

(3) 研究開発実施の事業体制の妥当性

- ・ 適切な研究開発チーム構成での実施体制になっているか。
- ・ 真に技術力と事業化能力を有する企業を実施者として選定しているか。
- ・ 研究管理法人を経由する場合、研究管理法人が真に必要な役割を担っているか。
- ・ 全体を統括するプロジェクトリーダー等が選任され、十分に活躍できる環境が整備されているか。
- ・ 目標達成及び効率的実施のために必要な実施者間の連携 and/or 競争が十分に行われる体制となっているか。
- ・ 実用化シナリオに基づき、成果の受け取り手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、関与を求める体制を整えているか。

(4) 研究開発成果の実用化に向けたマネジメントの妥当性

- ・ 成果の実用化につなげる戦略が明確になっているか。
- ・ 成果の実用化につなげる知財マネジメントの方針が明確に示され、かつ妥当なものか。

(5) 情勢変化への対応等

- ・ 進捗状況を常に把握し、社会・経済の情勢の変化及び政策・技術動向に機敏かつ適切に対応しているか。

- ・ 計画見直しの方針は一貫しているか（中途半端な計画見直しが研究方針の揺らぎとなっていないか）。計画見直しを適切に実施しているか。

3. 研究開発成果について

(1)目標の達成度

- ・ 成果は目標値をクリアしているか。
- ・ 全体としての目標達成はどの程度か。
- ・ 目標未達成の場合、目標達成までの課題を把握し、課題解決の方針が明確になっているか。

(2)成果の意義

- ・ 成果は市場の拡大或いは市場の創造につながることを期待できるか。
- ・ 成果は、世界初あるいは世界最高水準か。
- ・ 成果は、新たな技術領域を開拓することが期待できるか。
- ・ 成果は汎用性があるか。
- ・ 投入された予算に見合った成果が得られているか。
- ・ 成果は公開性が確保されているか。

(3)知的財産権等の取得及び標準化の取組

- ・ 研究内容に新規性がある場合、知的財産権等の取扱（特許や意匠登録出願、著作権や回路配置利用権の登録、品種登録出願、営業機密の管理等）は事業戦略、または実用化計画に沿って国内外に適切に行われているか。
- ・ 国際標準化に関する事項が計画されている場合、得られた研究開発の成果に基づく国際標準化に向けた提案等の取組が適切に行われているか。

(4)成果の普及

- ・ 論文の発表は、研究内容を踏まえ適切に行われているか。
- ・ 成果の受取手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、適切に成果を普及しているか。また、普及の見通しは立っているか。
- ・ 一般に向けて広く情報発信をしているか。

4. 実用化の見通しについて

(1)成果の実用化可能性

- ・ 整備した知的基盤についての利用は実際にあるか、その見通しが得られて

いるか。

- 公共財として知的基盤を供給、維持するための体制は整備されているか、その見込みはあるか。
- 国際標準化に関する事項が計画されている場合、国際規格化等、標準整備に向けた見通しが得られているか。
- J I S化、標準整備に向けた見通しが得られているか。注) 国内標準に限る
- 一般向け広報は積極的になされているか。

(2)波及効果

- 成果は関連分野への波及効果（技術的・経済的・社会的）を期待できるものか。
- プロジェクトの実施自体が当該分野の研究開発や人材育成等を促進するなどの波及効果を生じているか

参考資料 2 評価に係る被評価者意見

研究評価委員会（分科会）は、評価結果を確定するにあたり、あらかじめ当該実施者に対して評価結果を示し、その内容が、事実関係から正確性を欠くなどの意見がある場合に、補足説明、反論などの意見を求めた。研究評価委員会（分科会）では、意見があったものに対し、必要に応じて評価結果を修正の上、最終的な評価結果を確定した。

評価結果に対する被評価者意見は全て反映された。

参考資料 3 分科会議事録

研究評価委員会

グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発／「有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発」・「廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発」

(事後評価) 分科会議事録

日 時：平成24年9月14日(金) 10:00～15:25

平成24年9月21日(金) 9:30～18:30

場 所：コンベンションホール AP浜松町 会議室B・C

出席者(敬称略、順不同)

分科会長	浅岡 佐知夫	北九州市立大学 国際環境工学部 特任教授
分科会長代理	吉田 潤一	京都大学 大学院 工学研究科 合成・生物化学専攻 教授
委員	稲永 純二	九州大学 名誉教授
委員	植山 正基	一般社団法人 日本化学工業協会 産業部 兼 技術部 部長
委員	薩摩 篤	名古屋大学 大学院 工学研究科 物質制御工学専攻 教授
委員	杉本 裕	東京理科大学 工学部 工業化学科 准教授 (9/21:欠席)
委員	永島 英夫	九州大学 先導物質化学研究所 分子集積化学部門 教授
委員	三宅 孝典	関西大学 環境都市工学部 エネルギー・環境工学科 教授

<推進者>

相楽 希美	NEDO 環境部 部長
海老根 強	NEDO 環境部 統括主幹
岩田 寛治	NEDO 環境部 主任研究員
石毛 悦子	NEDO 環境部 主査

<オブザーバー>

羽部 浩	経済産業省 化学課 機能性化学品室 研究開発専門職
------	---------------------------

<実施者>

魚住 泰広	大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 分子科学研究所 教授 (PL)
小林 修	東京大学大学院理学系研究科 教授 (PL)
島田 広道	独立行政法人 産業技術総合研究所 研究環境安全本部 本部長 (PL)
石原 一彰	名古屋大学 大学院 工学研究科 化学・生物工学専攻 教授
森 雄一朗	東京大学大学院理学系研究科 グリーン・サステイナブル・ケミストリー社会連携講座 特任准教授
奥村 吉邦	昭和電工株式会社 研究開発センター 大分触媒グループ グループリーダー
五十嵐 威史	昭和電工株式会社 研究開発センター リサーチャー
柳生 大輔	昭和電工株式会社 研究開発センター 大分触媒グループ
沼田 好幸	日光ケミカルズ株式会社 那須事業所 技術グループ チーフ

赤塚 裕一 日光ケミカルズ株式会社 那須事業所 技術グループ

大野 桂二 和光純薬工業株式会社 試薬事業部 試薬開発本部 試薬研究所 所長

松澤 啓史 和光純薬工業株式会社 試薬事業部 試薬開発本部 試薬研究所

佐藤 一彦 独立行政法人 産業技術総合研究所 企画本部 総括企画主幹

清水 政男 独立行政法人 産業技術総合研究所 環境化学技術研究部門精密有機反応制御グループ
主任研究員

今 喜裕 独立行政法人 産業技術総合研究所 環境化学技術研究部門精密有機反応制御第3グループ
研究員

齋藤 信 昭和電工株式会社 技術本部戦略マーケティングセンター スタッフマネージャー

内田 博 昭和電工株式会社 研究開発センター コーポレートフェロー

大関 雄二 電気化学工業株式会社 新規材料研究部 主幹研究員

渡辺 淳 電気化学工業株式会社 新規材料研究部 グループリーダー

大橋 慶太 電気化学工業株式会社 新規材料研究部 研究員

笹川 巨樹 荒川化学工業株式会社 開発統轄部 技術事業開発部 筑波研究所 研究員

恵崎 陽一郎 荒川化学工業株式会社 開発統轄部 技術事業開発部 筑波研究所 主任研究員

浦田 泰男 JNC株式会社 研究開発本部 市原分室 PJリーダー

渡辺 健一 JNC株式会社 研究開発本部 主席研究員

<企画調整>

増山 和晃 NEDO 総務企画部 課長代理

<事務局>

竹下 満 NEDO 評価部 部長

三上 強 NEDO 評価部 主幹

松下 智子 NEDO 評価部 職員

中村 茉央 NEDO 評価部 職員

加藤 芳範 NEDO 評価部 主査

<一般傍聴者> 4名

議事次第

< 1 日目 > 9 月 1 4 日 (金)

【公開セッション】

1. 開会、分科会の設置、資料の確認
 2. 分科会の公開について
 3. 評価の実施方法
 4. 評価報告書の構成について
 5. プロジェクトの概要説明
 - 5.1. 事業の位置付け・必要性／研究開発マネジメント
 - 5.2. 研究開発成果／実用化・事業化の見通し
 - 5.3. 質疑
 6. プロジェクトの詳細説明
 - 6.1. 分子研G：高性能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発
 - 6.1.1. 錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の研究開発（分子研）
 - 6.1.2. ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究（分子研）
 - 6.1.3. エステル・アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究（名古屋大）
- 分子研Gの全体を通しての質疑

< 2 日目 > 9 月 2 1 日 (金)

【非公開セッション】

非公開資料取り扱いの説明

- 6.2. 東大G：革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発
 - 6.2.1. アクア触媒によるアセトアルデヒド製造プラント排水中の希薄酢酸回収技術（東京大+昭和電工）
 - 6.2.2. 固定化触媒を活用する革新的水素化反応システム開発（東京大+日光ケミカルズ）
 - 6.2.3. グリーンプロセスのための高分子固定化金属触媒試薬の開発（東京大+和光純薬工業）
- 東大Gの全体を通しての質疑
- 6.3. 産総研G：革新的酸化プロセス基盤技術開発
 - 6.3.1. 過酸化水素を用いた反応系の基礎研究（産総研）
 - 6.3.2. 多官能性基質の酸化技術開発（昭和電工）
 - 6.3.3. 高分子量基質の酸化技術開発（電気化学）
 - 6.3.4. 易加水分解性基質の酸化技術開発（荒川化学）
 - 6.3.5. 難酸化性基質の酸化技術開発（JNC）
- 産総研Gの全体を通しての質疑
7. 全体を通しての質疑

【公開セッション】

8. まとめ・講評
9. 今後の予定、その他
10. 閉会

議事録

<1日目> 9月14日(金)

【公開セッション】

1. 開会、分科会の設置について、資料の確認

- ・開会宣言(事務局)
- ・研究評価委員会分科会の設置について、資料1-1、1-2に基づき事務局(加藤主査 NEDO 評価部)より説明。
- ・浅岡分科会長挨拶
- ・出席者(委員、推進者、実施者、事務局)の紹介(事務局、推進者)
- ・配布資料確認(事務局)

2. 分科会の公開について

事務局より資料2-1及び2-2に基づき説明し、議題6.2.「東大G:革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発」、議題6.3.「産総研G:革新的酸化プロセス基盤技術開発」及び議題7.「全体を通しての質疑」を非公開とすることが了承された。

3~4. 評価の実施方法と評価報告書の構成について

評価の実施方法を事務局より資料3-1~3-5、資料4に基づき説明し、事務局案どおり了承された。

5. プロジェクトの概要説明

推進者(石毛主査 NEDO環境部)・実施者(魚住PL、小林PL、島田PL)より資料5-1及び資料5-2-1~3に基づき説明が行われた。

5-1. 事業の位置付け・必要性/開発マネジメントについて

5-2. 研究開発成果/実用化・事業化の見通しについて

5-3. 質疑

説明に対し以下の質疑応答が行われた。

【浅岡分科会長】 ただいまの説明に対しまして、意見質問等がありましたらお願いします。

技術の詳細については後ほど議題6で議論しますので、ここでは主に事業の位置付け・必要性、マネジメントについての意見をお願いします。

【吉田分科会長代理】 今、分科会会長がのべられたように、ここでは事業の位置付けが多分、一番重要だと思しますので、その点について質問したいと思います。

最初に説明された石毛主査のところで、13ページのNEDOが関与する意義で、「社会的必要性が大」です。GSCの取り組みが非常に大事だということではわかるのですが、次の「研究開発の難易度が高い」については大学の間から見れば当たり前かもしれないのですが、やはりNEDOでやる時に、どうして研究開発の難易度が高いことが必要なのかをもう少し詳しく説明していただきたい。

【岩田主研】 説明のときにもふれたかと思いますが、GSCということで、目指しているものが従来の製造技術の延長線にはないアプローチです。従来の化学産業というのは最初から、特に今、島田PLからも説明がありましたように、複雑な構造の高機能物質の場合、多段階反応とか、そういったもの

を使うという化学量論的反応ということなのです。しかし、今回の場合は、最初から廃棄物を出さないとかの視点でやっていますが、もともとのシーズの一つはアカデミアが有している場合が多くて、それをアカデミアの貢献で触媒プロセスとして達成したとしても、今度は、それをクリーンとか、そういう形だけではなかなか付加価値に持っていきません。実際には実用化、事業化の視点を前倒しにして、この基盤技術開発の段階から実用化に持っていくためには、実際に早めにサンプルを提供できるような段階に持って行って、ポテンシャルがあるユーザーとの間ですり合わせします。特に電子部材などの場合には、必要になってきます。このような意味で「非常に実用化の開発が難しい面がある」と説明しています。

【吉田分科会長代理】 少しわかりづらく、もう少し整理してください。要するに、研究開発の技術的な難易度が高いということは、実用化するときのハードルも非常に高いということですね。だから、企業単独では難しいのだという論理でよいですね。論理がはっきりしていると、大学の人間は理解が非常に楽になります。

【岩田主研】 そのとおりです。

【浅岡分科会長】 ほかに意見等ありませんか。植山委員お願いします。

【植山委員】 そもそも論かもしれませんが、反応溶媒を水・アルコールということで、単純に考えれば、酵素を使えばいいという考えがありますが、今回、この種の触媒でのリアクションは、たまたまなのか、酵素はもう整理をされて従来技術という位置付けにされているのかを知りたいのが一点です。

もう一点は、いろいろ各開発の概要を説明されていますが、感想としては、用途がかなり特殊な製品あるいは機能材になっているので、それは出口としてはいいのかなと思うのです。しかし、一つの例としての酢酸エチルのような汎用的な製品のもの場合、開発研究はいいのですけれども、触媒が高価であるとなかなか出口に至らないといえます。GSCとして付加価値、ないし評価でGSCのラベルをつければ売れるということがないため、従来の技術と比べてコストで負けてしまって、そこで止まってしまうことが往々にしてあるかと思うのです。その辺の全体的な考え方を聞かせてください。この2点が、質問です。

【岩田主研】 今の2点の質問のうち、最初のほうの酵素を使ったらとの話はバイオ的なアプローチということだと思うのです。これについては、NEDOの中の縦割りの話をしては申し訳ないのですが、一応、バイオ技術みたいなどころについては別の部署で従来も対応しています。酵素は反応温度とか、酵素なりに得手不得手な部分があるので、それはそれが適した部分を別途、別の部でやっています。

つぎに、出口の物質等の整理ですが、これはスライド4ページで、4本柱でやっているという説明を致しました。今回のテーマは、どちらかというとい先ほど島田PLからも説明があったように、いわゆる高機能材料ないしスペシャリティーケミカルというものに属し、量は少ないけれども高付加価値で複雑な構造を持っているものにターゲットを当てたわけですが、しかし、指摘があったようなもっと規模の大きなものでやるのは、例えば③のエネルギー削減などで石化です。ナフサなどのクラッキングをやっています。温度を下げて、エチレンとプロピレンの比率を触媒反応でもって、ある程度コントロールできるというプロジェクトを今やっております。したがって、そういった意味では、今回のプロジェクトは、ご指摘のとおり、まさに機能性材料のプロセスに焦点を当てたという位置付けになっております。

東大の小林先生から補足をお願いします。

【小林PL】 私どもの取り組んでいる酢酸エチルについて、少し補足します。

この水・アルコール系の触媒反応ですが、これは基本的に酵素ではできない反応です。この反応だけでなく、分子研の魚住先生の取り組んでいるクロスカップリング反応も酵素ではできない反応ですから、そこに意義があると考えています。

汎用性に関しては、例えば我々のグループの水素化は非常に汎用性がある反応です。可能性としては、例えばパラジウムカーボンにとって変われば、さらに非常に汎用性、波及効果もおおきくなると思います。

先程の酢酸エチルの価格ですが、現在、実際に実用化の見積り等をやっておりますが、ここでは特にこのグリーンでつくったから高く売るということではなくて、市場価格に合わせて計算をしております。

【浅岡分科会長】 ほかの委員の意見はありませんか。薩摩委員お願いします。

【薩摩委員】 資料の20ページに費用対効果が示されていますが、どういう形で計算したかについて説明願いたい。例えば、ターゲットとする、物質の市場が、今、これだけありますよという形で計算されたのでしょうか？どのような形で、この数字が出ているかを説明願います。

【石毛主査】 この数値は、試算の仕方がグループ毎にそれぞれ違っていますので、横に並べられるようなものではありません。分子研グループにつきましては、電子機器、ディスプレイの照明のELデバイス材料が、今回開発したTPDにすべて置き換わったとしたときに、2014年の市場規模想定を155億ドルと想定し、そのコストの1%を占めるという想定のもとに試算しています。東大グループ、産総研グループにつきましては、各企業が参加していますので、今回開発した製品を販売することで、各社が拡大すると予想する売上の増加分を各社が算出しまして、それを積算した値になっています。東大グループ、産総研グループに関しましては、製品ができた後の川下企業への波及効果や、その後の波及効果については、それ以上の算出が難しいので、今回の中には入っていません。将来的には、予想よりも、さらに高い効果を期待しています。

【薩摩委員】 成長が見込める分野の2014年時点を想定しているとの事ですが、その先には市場が拡大すれば、もっと大きくなる可能性もあるということですね。

【石毛主査】 はい。

【薩摩委員】 説明を了解しました。

【浅岡分科会長】 ほかには意見はありませんか。杉本委員お願いします。

【杉本委員】 勘違いがないように確認したいのですが、今話題に出た資料の26ページの助言の反映例についてです。確か先ほど、この会の冒頭に、分科会長から、事業化と実用化を分けて考えるという趣旨の説明があったと思うのですが、ここに記載されている「このプロジェクトの初年度に事業化に向け、より加速することという助言が来ている」とはどういう意味なのでしょう。

【石毛主査】 NEDOの執行としては1年目ですが、その前に経済産業省で1年やっていますので、プロジェクトとしては2年目に入ってから助言ということになります。

それまで各企業からの発表では、研究部門のみからの発表でした。「実用化に向けて、事業部との連携をより強化することによって、加速するように」という助言をもらっています。

【杉本委員】 もう一つ確認なのですが、この助言があったことに対して、その助言は、それを実現なくはないかというオブリゲーションがあるのですか。例えば、産総研については、事業化に向けて加速することとありますが、加速できなかった場合はどういう位置付けになるのでしょうか。

【岩田主研】 これはあくまでNEDOの実施側の委員会、アドバイスをするという位置付けです。実

施できなければ、事後評価委員会で厳しい評価が下ると認識しています。企業として実用化、事業化に進む意思があるのであれば、そういうアドバイスをきちんと実行に移していくということです。

【杉本委員】 それでは最初の質問に戻ります。ここでの「事業化云々の加速」とあることと、今日の委員会の趣旨としての「事業化は評価に入れない」との矛盾がどうしても解消し切れないのですが。

【岩田主研】 このプロジェクトは、あくまでプロジェクト自体として正確に言うと、プロジェクトが終わった本年2月末までは、実用化技術の見込みが立つところまで行うこととなります。プロジェクトの中ではそうなのですが、その先について進まない、結局、そこまで到達しないという問題になります。ですから、事業化まで先に考えながら、そうした実用化に向けて、このプロジェクトの最後の締め段階は、どういうところに着地点を設けるのかを具体的に詰めていくこととなります。そのためには、前倒しに考えていく必要があるということとなります。ここに達しているレベル自体の実用化の目処をつけるということなのですが、そのためには早くから、何を事業化して、そのために実用化をいつの時点でやるのかという細かいターゲットを定めますという意味になっていると思います。

【杉本委員】 最後の確認です。そうすると、この場合の加速することということには、例えば具体的な年限設定はないと考えればいいのですか。

【岩田主研】 そうです。この技術検討委員会の中では、研究開発部門だけで研究のペースを設定してやっていたのでは研究がなかなか効率的にいかない、事業化というところで、具体的な最終的な落としどころにしていくのかを定め、早めにそういった視点をとり入れてやっていくとのアドバイスということになります。

【杉本委員】 わかりました。

【相楽部長】 杉本委員の指摘について、先ほどの評価の軸のところ、実用化と事業化の区別がいま一つ、すっきりしなかったと私も感じていまして、その点での確認の質問と理解しました。

今の岩田主研からの説明のように、ここの運営管理の中でやっております技術検討委員会は、NEDO内部に外部の方からアドバイスをいただくという位置付けでの委員会です。先ほど評価部からの説明については、プロジェクトが終わった段階で、NEDOの推進部がやっている技術検討委員会とは別に専門家の方々に集まっていたいて、より第三者の厳しい目で見ていただくという評価です。その際に評価軸は、プロジェクトの範疇で、どこまでが達成目的だったかを明確にしなければいけないということで、今回は基礎基盤がもとの研究プロジェクトの性格ですので、そこについては事業化ではなくて、実用化の目処が立ったかどうかということまでがスコープです。そういう説明を評価部からしています。

それで、我々推進部でやっておりますアドバイス機能としての技術検討委員会では、先生方からいろいろな助言をもらうわけですが、特に、こういった最終的な評価の場にプレゼンテーションを行うに際して、こういった視点でいろいろな点を加速化して、より詰めていかなければいけないのかというご助言で、そういった意味で、ここで言っている事業化とか、実用化は、あまり文言としては区別をせずに、この場では当然、実用化までで評価をしていただくのですが、将来的には当然、事業化までスコープに入れているという意味での発言でした。特に、なぜこういった発言が出てきたかということ、研究開発部門だけでやっている、社内でも事業化を事業部門がどう考えているのかということが、事業を推進している中で非常に問題になることがあります。そういった意味で、この技術検討委員会からは、事業化に向けてこういった手立てが組めるのかという指摘をもらっています。NEDOとしては、研究開発部門だけではなくて事業化をする事業部の人にも、その場に参加してもらって、

認識を持ってもらうことで事業化への道筋が、より前倒しできるのではないかと考えて、こういった対策をとりました。

島田先生、何か追加の説明があればお願いします。

【島田 P L】　　このところの趣旨は今、相楽部長が説明されたとおりののですが、事業化に向けて、より加速するとありますが、文章ではこういう表現になっておりますが、この検討委員会のメンバーは、御園生委員長以外すべて、民間の研究所の出身でして、特に中央研究所の出身の方から、「中央研究所だけでやっていると、いいものができたぞと事業部へ持って行くと、蹴り飛ばされることがよくある。早いうちから、事業部の人を混ぜたらどうか。それには会社の中で中央研究所から事業部へは難しいから、ぜひこういう検討会の委員会に出てきてもらったらどうか。あわせてアドバイスを聞いたらどうか。」との発言でした。ですから、このところは、「事業部の観点からすれば、こうしたほうがいいよ」みたいなことを言ってもらおうということも同時に、「事業部の人に、こういうことをやっているのだということをちゃんと訴えなさい」との位置付けのアドバイスで、大変役に立ちました。今回も事業部の方が何人か、来てもらえると思うのですが、それは非常にいいコミュニケーションだったと思います。

【小林 P L】　　一つだけよろしいですか。この助言は、厳しい意見も多かったのですが、非常に参考になりました。そこで、いつまでにやるかという期限は特に言われませんでした。ここにありますように検討会は年2回ありますので、そのときに言われたことを次回までにやっていないと、非常に注意を受けるのではないかとということで、基本的に、次の検討会までにやるということで理解していました。

【浅岡分科会長】　　ただいまの議論、よろしいですか。

次の議論をどうぞ。

【吉田分科会長代理】　　24ページの実施体制について伺いたいのですが、東大グループと産総研グループは集中研方式をとったことについてです。集中研方式をとるのはNEDOの方針としてとられたのでしょうか。

【岩田主研】　　先ほどの私の説明で触れましたように、このプロジェクトの採択時はMETIだったので、その提案の中で、アカデミアの技術シーズを各社へ伝える核となる集中研方式でやるのが非常に効果的な研究体制であるということアピールいただいたので、おそらく、こういった形で採択になっているといった面もあったと思います。

【吉田分科会長代理】　　もちろん個別に各企業がやる方式と集中研方式でやる方式の2種類があると思うのです。東大グループは基盤の技術を持っておられるので、それを活用するには集中研方式がふさわしいと思うのですが、集中研方式でやられたメリットとデメリットをお二人の P L から説明してください。

【小林 P L】　　東京大学のほうから説明をします。

この方式はわがグループ側が強く希望した結果です。実際、この方式は非常によく、メリットが非常に大きかったと考えています。それは近い場所に研究室があるということで、これは私の P L としてのやり方でもあるのですが、私は現場に行って触媒の色を見たりとか、例えば触媒が失活してしまったら、そのときの反応の様子を見てあれこれと研究者と議論するのが私の研究のスタイルです。これがもし実験室が遠くてなかなか行けない、それで報告書を紙でいただいて議論するのは随分違う。本郷キャンパスの中に作ってもらったことで、そういう意味で研究がすごく進んだと考えております。

それから、今も話がありましたように、技術が東京大学にあったということで、基礎と、企業化に一步進んだ基盤技術、これを共通に持った基盤研究室を東大に持つことによって、各企業の研究が、トントンと進めばいいのですが、必ず壁に当たるわけで、その壁に当たったときにすぐに問題を基盤研究室にフィードバックできる。問題を受け取った基盤研はある程度基礎に立ち戻って問題を解決し、企業側に返す。一つの企業で出た問題がほかの企業の問題にも共通するというのもありましたので、非常に密接な連携がとれました。このメリットは非常に大きかったと思います。特にデメリットについては感じませんでした。

【吉田分科会長代理】 企業間で牽制し合うというようなことはなかったでしょうか。

【小林 P L】 それは最初の参画企業を選ぶときに競合しないということをきちんと確かめましたので問題ありませんでした。各企業とも、非常に仲よかったと思います。

【島田 P L】 メリットにつきましては、まさに小林 P L の発言のとおりだと思います。ここで我々のところも、実は1社を除けば、触媒開発をほとんどやったことがないような会社でしたので、そこに触媒開発、特に、こういう少し複雑な系ですので、それは難しかったのではないかと思います。そういうところで産総研という土台があって、そこでできたことで随分進捗したと思います。

吉田分科会長代理の指摘の、その間のバッティングなのですが、一つは、やはり競合するようなことを持っている会社には最初から外した経緯が一つあります。それでも、相当程度は他社のことは気になりますので、ポスドクの人なんかテーマごとにきっちり分けて、その間では技術の話はしないということも気をつけたことは事実です。

デメリットなのですが、プロジェクトの進行にはあまりなかったと思いますが、集中研をやると、産総研の研究員の負荷が非常に増えます。これは非常に強く感じました。やはり進捗は早くなる一方で、忙しくなるというか、かなりその分の仕事が増えてしまう。それが欠点だろうと思いますが、これはやむを得ないことと思っております。

【吉田分科会長代理】 わかりました。私が京大で集中研をやったときも、やはり京大のスタッフの負荷が物すごく増えてしまったというのは、デメリットというか、プロジェクトを進める上では大変だったということがありました。

【浅岡分科会長】 議論を次に進めます。

私からもコメントを一つします。①有害物質削減と②廃棄物削減が、このプロジェクトの目標、方向性だと思いますが、それに関して目標設定ないしは実施の効果をなぜ纏められないのかということが、私にとっては非常に不可思議です。20ページ目の実施の効果として、市場規模に対しての研究開発投資が費用対効果ということで、効果が市場規模で、費用が研究開発投資になっています。しかし、そうではなくて、実際には有害物をどの程度削減できたか、有害物削減ないしは廃棄物処理のコストをどの程度削減できたかということに対して技術評価をすべきではないかということです。その辺の値が出ていないのです。各プロジェクトの方が非常に技術レベルの高い開発を行って成果が上がっていると思うのですが、それを目標に対してまとめられていないというのは非常に残念です。追加でもいいですから、その辺の効果をきちんと予測してください。それが実用化への裏づけになるというのが私の考え方です。

化学プロセスの場合には、反応率、選択率だけではなくて、処理にかかる日数だけではなくて、装置規模が問題です。これぐらいの大きさの装置で1日当たり、これだけの処理ができるというのを、化学工学的な見地から推算していただきたいというのがポイントです。

有害物削減、廃棄物削減に関しては、コストをかければ、現状の技術でも削減できるわけです。現状の技術で削減した場合と新たに開発された技術を使って削減した場合と、どれだけ効果が違うのかという点でまとめられると、いいプロジェクト成果のプレゼンテーションになるのではないかという気はします。

【植山委員】 今の分科会長のコメントにも関連するのですが、今の②の触媒を固定化し、リサイクルすることで実現することに関して、要するに固定化触媒という観点で開発されていると思うのですが、その場合、ライフが気になります。その辺の使用バッチ回数とか、どれぐらいバッチを重ねていくと活性が落ちてくるとか、そういう考察が全然なかったです。それも、これからなのか、もし検討されているのであれば、その辺も後でも説明願いたい。

さらには、もし失活した場合、その触媒を捨てるのか、あるいは何らかの方法で回収するのか。先ほどパラジウムカーボンの話がありましたが、パラジウムカーボンは、実際はパラジウムが高いので、業者でパラジウムを回収して、もう一度触媒として入れて、実際はリサイクルされています。そういうこともあるので、その辺の失活した触媒の先がどうなるのかということも、また後でも説明願いたい。

【魚住P L】 分科会会長の最初のご指摘について確認したいことがあります。例えば市場規模ではなくて、実際にどれだけ削減されたのかを具体的に示しなさいということですか。

【浅岡分科会長】 具体的にというのは、具体的に予測されることを示してくださいということです。

【魚住P L】 はい。それについてなのですが、例えば私のグループは先ほど10分間、プレゼンをした資料の中の6/13のところ、我々の製品で現状の技術を置き換えたときに、温室ガスが何万t相当のものが、その1割を削減できたとしても、1,700万tのCO₂換算の洗浄剤が実際に使われていて、その1割と換算しますと、もちろん170万tとしています。例えば、こういう数値をきちんと示すことでは足りませんか。

【浅岡分科会長】 それで十分なのですが、個別で出てくるのではなくて、全体をまとめるのが市場規模というよりもそういう観点からしてほしいという話であります。

【魚住P L】 わかりました。NEDOの推進部のまとめが市場規模になっていたのですが、我々、やっている実際のP Lの人たちは、市場規模というより、市場規模も気になりますが、実際に本当にグリーンな将来設計にどれぐらい役に立つのかを、このように気にしてやっていたつもりです。このようなことをきちんとNEDOに上げていって、その情報をNEDOで取りまとめていただければ、それがある程度の答えになるという理解でよろしいでしょうか。

【浅岡分科会長】 そうです。魚住P Lのこのページの記述は、従来どれだけ出ていて、その1割を削減する効果がありますとしっかりとしているわけです。ところが絶対値だけで示されている例もどこかにあったと思うので、要するに従来技術でこれだけ、それに対してどれだけ削減するかという話をしていたけるといいと思います。

【魚住P L】 この視点をもう少しきちんと整理すればよいということですか。

【浅岡分科会長】 はい。

【魚住P L】 わかりました。そのようにします。

【小林P L】 すごくよくわかりました。

今のその後の植山先生のご質問に関しては、今日ではなくて、個別に回答を用意しておりますので、そちらで答えたいと思います。

【浅岡分科会長】 稲永委員、お願いします。

【稲永委員】 このプロジェクトの難しいところだと思うのですが、合成方法論をやっておられますので、とにかく物が具体的にないといけません。これから、これをつくるのに、こういう方法でやると有害物質が出ませんよ、廃棄物が出ませんということが大事になります。そのコストパフォーマンスが本当は欲しいところですが、分科会会長の発言のように大事なところだと思うのですが、難しいのは、最終生成物がこれだと決まっていれば、それに合わせて最適な方法論が確立できるのですが、今の場合は、先に方法論があって、それをどういうふうに展開できるでしょうかという話の中身ですので、言われたようなことを出すのは実際やっておられる方は大変だろうと思います。そういうふうに感じました。

そういう意味では最終的には成功したようですが、実際にペイするためには、本当に意味のある最終生成物の設計が大事です。それをつくらないと意味がないこととなります。ですから、いくら、こういう物ができますよといっても、ほんとうにコストパフォーマンスがある方法でできますかというのが最終的に問われると思うのです。その意味では、常にフィードバックをしながらやっていかないといけないというところで、ぜひNEDOも、こういうプロジェクトへ先の長いサポートをお願いしたいと思います。

もう一点は、先ほど吉田分科会長代理からもありましたが、最初のスライドの24/31のそれぞれに下に書いてある再委託ということについてです。マネジメントの話ですが、この再委託というところを見ていて、私は非常にいいなと思いました。実際、スタートしてみて、いろいろな問題が出てくると思うのです。それに対して、あそこの研究室、あそこのグループは非常におもしろいことをやっているというときに、それをフレキシブルに取り込んで、意味のあるプロジェクトにするためには、そういうことが大事だと思うのです。その辺のマネジメントのやり方は非常にうまく、今回は取り組まれている、共同研究がうまくいっていると思います。マネジメントのやり方としては、NEDOとしての具体的な方針、とくに再委託に関してコメントが何かありますか。

【岩田主研】 再委託は、しっかりとした方針のもとに行われないと、安易にプレーヤーを増やしてしまうリスクも反面あります。特に最近の研究開発ですと、まさにこのプロジェクトもそうですが、できるだけ早期に技術開発の実用化の目処をつけることが求められています。しかし、先ほどの魚住PLのプレゼンの中にもあったように、名古屋大学でのプロジェクトでは、期間的には少し先のほうでより大きな効果が出てくるという、具体的には非常に有望な触媒の種をさらにリファインするプロジェクトです。これはMETIで、こういった再委託というフレームワークを作られたものを利用されたわけですが、そういった意味では、短期にもかかわらず、もう少し先の成果を狙ったものがきちんと進められたのでよかったと思います。

【稲永委員】 質問をし直しますが、どういうふうにして再委託先を選ばれましたか？これはプロジェクトリーダーからの提案ですか？

【岩田主研】 先ほどの魚住PLのご説明にもあったように、魚住先生の方でエステル化の部分をカバーできなかったのが、これを再委託へ持って行ったわけです。再委託は最初から、そういう提案としてMETIが採択したという位置付けです。

【稲永委員】 NEDOの中に、そういうシステムがもともとあり、プロジェクトリーダーがこういうふうにして再委託先をお願いしますと言え、それを認められるようなフレキシビリティを持っているということですか？

【岩田主研】 いや、そうではなくて、公募で5件の提案があったということで、魚住 PL のご提案の中に、最初から我々が提案するプロジェクトでは、こういうふうに名古屋大学にこの部分を再委託して行いたい、という提案でして、そのところが当時の採択審査委員の方等から評価されたということだと思います。

【稲永委員】 そうすると、途中から入れたいということは無理ということですか。

【相楽部長】 NEDOのプロジェクト採択の仕組みのところを明確にすれば理解いただけるのかなと思います。プロジェクト採択のときは MITI の採択審査委員会を通しまして、その後、NEDO内部での部長会、契約助成審査委員会という機構内部での審査会を経て採択になります。基本的にはプロジェクトのテーマ設定を NEDO でした後、実施者の方々から、それを実現するにはどういった実施体制とテーマ構成でやるのが最適かというご提案書をもらいます。この提案書に基づきまして MITI の採択審査委員会で議論して、その結果を踏まえて、NEDO の中での部長会、契約審査委員会等に進んでいくということです。

再委託のところについては、基本的には実施計画で実施者の方々が、これが最適であるというフォーメーションで組んで持ってくる 경우가多くあります。その中で、先ほど岩田主研から説明したように、むやみやたらに増やしてしまうような状況もありますので、それが最適なフォーメーションであるかどうかという判断をNEDOのマネジメント側としてもしています。

また、途中で再委託先を増やせるかどうかは、複数年度でやっている研究については、その過程で、ぜひ外部の知見を、このプロジェクトの成果に反映していきたいという提案があれば、それを所定の手続ののっとなって実施計画の変更という形で再委託先を増やすこともマネジメントとしては可能になっています。そういう答えでよろしいですか。

【稲永委員】 はい、最後の部分が聞きたかったことです。

【浅岡分科会長】 もう一つ気になっていることがあります。上の委員会からのアドバイスということで、各企業の事業部からのフィードバックという話の中で、「企業化のため」という説明だったのですが、これは「実用化のため」だと思います、実質的には。皆さんのプロジェクトにとって、開発技術の実用化のシナリオとしては、必ずどこかでニーズ・商用化からのフィードバックが必要です。このプロジェクトはシーズ指向であって、それに対してニーズ、社会的要請、社会的に実施された場合に品質とか、生産性とか、そういう点から必ず要求が来て、それと開発成果がマッチしているかどうかという突き合わせをやるという意味で、そういう事業部との交流を進めなさいというアドバイスだったと思います。それはぜひとも実用化のシナリオの中に示しておいてください。個別企業での事業化は、このプロジェクトでは目標ではないと思います。単なる結果であって、その辺のところを理解してほしいというコメントです。

ほかに。三宅委員が発言されていないのですが、いかがですか。

【三宅委員】 一つは、20ページの費用対効果についてですが、この費用対効果の数字をどういうふうにNEDOとしては見ているのかというのが一点です。

もう一つは、今回選ばれた3つのプロジェクトについては非常に成果が上がっているかなと判断しましたが、もともと5つあって、その5つのうちから3つを選ばれて、残りの2つについてどうだったのか、何が選ばれない理由だったのか、教えてください。

【岩田主研】 費用対効果につきましては、これは見積り自体が、分子研グループのものについては、基本的にEL照明等に置き換わったという想定で、わりと大胆な考え方なのですが、あと東大と産総研

は、それぞれ実用化を目指している企業の市場予測的なところから積み上げているので、控え目な数字なのですが、一応、先ほどの説明のスライドにもあったように、研究開発資金から見ますと、それなりに大きな効果があったと考えられると思っています。

【三宅委員】 それなりにというのは、2倍あればいいのか、5倍あればいいのか、10倍あればいいのでしょうか。

【岩田主研】 定量的な線、どれだけあればいいのかというのは特にNEDOとして設定しているわけではないのですが、そういった意味では定性的なのですが、投下した研究資金のわりに実際、これがどれだけ産業なり、国民の生活なりに影響するのかを考えますと、国民生活のほうは、先ほどの廃棄物削減効果とかのアセスメントをもう一回しないといけないのですが、それなりに大きな効果と言えるのではないかと思います。

それから、この採択自体は、NEDOも助言をしたのですが、METIで行ったのです。2つのうち1つは、先ほど議論にあったようなバイオ的なものだったのかなと思います。要は、このプロジェクトの効果のところをあまり狙っていなかったようなところがあったと思います。あと、もう一件については正確な記憶がないのですが、もし必要であれば、どういうものであったかは、また後で答えたいと思います。

【浅岡分科会長】 あと、永島委員が発言されていませんが、短い形でお願いします。

【永島委員】 最初に植山委員が質問されたことがちょっと気になっております。要するに一般的な技術としての完成度、それと個々の出口イメージ、そこはそれぞれ固有の問題があります。これは2段階に分けて技術としては評価しなければならないと思いますので、午後あるいは来週の説明のときに、全体の評価と個々の達成目標に対する評価というのを分けて説明してください。

【浅岡分科会長】 この議題を終了します。

6.プロジェクトの詳細説明

6.1. 分子研G：高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発

6.1.1. 錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の研究開発（分子研）

魚住PLより資料6-1-1に基づき説明が行われ、以下の質疑応答が行われた。

【浅岡分科会長】 質疑応答に移ります。吉田分科会長代理をお願いします。

【吉田分科会長代理】 基本的に、この事後評価は、基本計画に対してどれくらい達成したかをチェックするという意味もあると思うのです。基本計画を見ますと、研究開発項目①と②があって、2番目のところに廃棄物・副生成物を削減できるとあります。eファクターの大幅な削減が見込めることと取れます。先ほど途中で、少しだけeファクターの話ができました。なかなか難しいとは思いますが、eファクターがどれくらい削減できたのかを、今ここで言えますか。

【魚住PL】 言えません。言えない理由は、これらの化合物のeファクターの大きな部分は精製プロセスです。つまり、化学反応のプロセスはもちろんなのですが、その後の精製プロセスの物すごさというか、それによってかなりの電力、熱を使っているところが製品の価格にはね返ってきている部分がありまして、そこはちょっとメーカーに聞いても、そのノウハウを開示してくれないのです。

【吉田分科会長代理】 では、例えば製造のところだけでもeファクターは言えますか。既存の製造法の

eファクターがこれぐらいで、この製造法のeファクターがどれぐらいかと言えますか。

【魚住PL】 製造のところだけのeファクターの計算は実際にはやっておりません。ただ、触媒に関しては回収できていますので、貴金属という部分のeファクターはゼロにしています。カップリングのときにハロゲンのごみが当然出ますから、そのハロゲンの部分はそんなに変わらなくなってしまい、eファクターは重さだけでするので差が生じなくなります。

【吉田分科会長代理】 あと、例えば、使った水をどうするかとか、全部含まれてきますね。

【魚住PL】 水に関しては、これはほんとうにただの塩の溶けた水で、金属は漏出していませんので、普通に精製すれば、塩を除く精製だけで何度でも使えます。

【吉田分科会長代理】 そこも含まれますね。eファクターを言った以上は、やはりそれをちゃんと、ある程度の答えは出しておくのは重要と思います。

【魚住PL】 わかりました。

【吉田分科会長代理】 実は私も自分の合成についてあるところで新聞記者に聞かれて、答えられなかったのです。

【魚住PL】 プロセスに関するeファクターだけでもきちんと目を向けるようにしたいと思います。

【浅岡分科会長】 ほかに発言ありませんか。永島委員お願いします。

【永島委員】 触媒回収で、目標は10kgだとすると、再利用を前提にしていたかと思うのですが、それについて何も話がなかったのですがいかがでしょう。

【魚住PL】 今回は時間の制約があって示せませんでした。触媒はろ過によって簡単に回収することができ、それを繰り返し使うことについては、既に10回程度の繰り返しでは全然落ちないことを実験室レベルで確認しています。

今、実際にその触媒をフロー系のカラムに詰めて、フローでできるかというところを検証しつつあるところで、フロー系がうまく行き始めますと、さらにフローで100とか、1,000とかという回数ができるかどうかという検証ができるはずですよ。

【永島委員】 活性の問題というよりは、むしろ繰り返し再使用していくとき、PEG部分が切れてきたり、特にリンが流出すると、最終的には昇華精製が必要になってくるのではないかと考えます。そういう意味では金属のリーチングだけではなくて、Pや有機物のリーチングも見る必要があるのではないのでしょうか。

【魚住PL】 それは全くそのとおりです。それについてはきちんと検証しております。実際に我々が見たところ、リンについても傷んでいないことは確認しております。PEGの部分について傷んでいるか、傷んでいないかまでは確認していないのですが、PEGが切れるという要素はあまりない条件であることは事実です。普通のコバレントボンドですので、水の中で煮ただけですので、そこが切れ出すことは通常はないと思います。あと、PEGに関して言いますと、生成物の純度、つまり使用に耐えるための純度に関しては、PEGのような軽いものと、それほど大きなダメージはなくて、むしろ金属が混じってくるのが最も忌み嫌われる部分ですので、その辺、一番重要な部分については間違いなくクリアしていると考えています。

【永島委員】 もう一つ、やはり繰り返し再使用に関する質問なのですが、これを空気中でろ過して回収するという手法をとっていくと、Pが酸化をされていくという過程が入ってきて、そこから来る触媒の劣化、すなわち本質的な触媒の劣化ではなくて、雑に取り扱うことなどの部分も出てくるかと思えます。

【魚住 P L】 いわゆる雑にゆっくりと空気中でろ過していたら、これはだめになるだろうというのは永島委員の推察のとおりです。基本的に我々は初期段階で、技術として確立するまでの間はグローブボックスの中で、きちんと嫌気性の条件、つまり酸素等のない条件で、取り扱っていました。その後、今、問題になっていますことは、これをフロー系にしてしまえば、酸素に触れる部分がなくなりますし、フロー系でやったほうが触媒の回収というか、再利用率をさらに上げることが間違いなくできます。そういうこともあって、今、フロー系での検証を次の課題と考えています。

【浅岡分科会長】 三宅委員お願いします。

【三宅委員】 リンにくっついているターシャリーブチルのところが、水系でリフラックスされていて、切れることはないのでしょうかというのが一つ目の質問です。

2つ目は、金属の溶出は、ここで1 ppm 未満と書いてあるのですが、これは濃度なので、ちょっとわかりづらい。生成物に対してどれぐらいであるとかの表現のほうが解かりやすい。どれぐらいの濃度で反応させるかによりまして、ppm は変わってきますので、わかりづらいと思うのですが、いかがでしょうか。

【魚住 P L】 1 ppm は非常にわかりにくい表現でしたので補足説明をします。これは最初に使った金属に対して、反応後に生成物側に最初に入れた金属量のどれぐらいが漏れ出てきたのかということを検証しています。当然、I C P 分析するときは溶液に溶かして調べるわけですが、それは溶液に溶かした濃度がわかっていますから、絶対値として、この1 ccなら1 ccの検体の中に、どれだけ重さのパラジウムが入っていたのかは厳密に測定でき、そこから最初に投入した触媒に対して、どれだけのものがそこに出てきてしまったのかということを検知することができます。その過程で、最初に入れたものの1%はおろか、1 ppm さえも漏れ出せば、検知できるはずという条件で検査したにもかかわらず、検知できなかったということを表示しております。

最初の質問のリン上の置換基、tブチル基がほんとうに安定なのかということについてですが、tブチル基はtブチルホスフィンです。tブチルと、あとホスフオラスの結合というものは、特にこの条件で傷むことは実際ありません。それは実際、反応後に固体のリンのNMR等でリンのピークが実際変わっていないかどうかということ、きちんと検証しています。tブチルの¹³C-NMRもとれるのですが、それはなくなって、どこかに行ってしまったら、わかりません。リンの上はtブチル基がなくなれば、tブチル基があるかないかで、リンのNMRの数値がシフトしますので、そこを見ている限り、変化がないということから、tブチルの切れ出しは、少なくとも分光学的に見る限りないと考えております。

【浅岡分科会長】 植山委員お願いします。

【植山委員】 基本的なことを質問します。この研究開発は、有機ELの素材を開発されているのではなくて、あくまでもG S Cのプロセスを開発されていると思うので、そういう観点から質問します。もしこの技術が無かったならば、TPDですか、これはどういう合成法になって、それはどういう有害な化学品というか、どういう有害なプロセスなのかをご説明してください。

【魚住 P L】 TPDの合成については、TPDあるいはホール輸送剤トリアリールアミン系に相当するものというのは幾つかの誘導体があって、その化合物ごとに若干ずつつくり方が違ってきます。ただ、基本的なつくり方としては、やはり炭素と窒素の結合をつくるのが基本となっていて、従来はパラジウム触媒での方法もあり、それでもやっているところもあります。また、銅触媒を使っている会社があります。銅触媒の場合は、さらに触媒量が多くて、1%とかではなくて、10%近いような

銅の触媒を用いて、炭素と窒素の結合をつくることを行っています。パラジウムの場合ですと、先ほど紹介しましたように、既存技術として、これらのリンを配位子とするパラジウム錯体であれば、炭素と窒素の結合を形成する触媒反応は知られております。知られているのですが、残念ながら、それらでは、これらのものは溶けてしまいますので、しかも有機溶剤で全部行います。反応条件が有機溶剤であること、そして、有機溶剤である限り、錯体が溶けてしまいます。例えば、これらの生成物の中に、まずろ過したら、パラジウムもリンも全部抜けるのですが、従来法では銅を使う系でも、パラジウムを使う系でも、まずこれを担持したときは、粗生成物の段階では最初に入れた金属はすべて、その粗生成物の中に入っているという段階からの精製になります。ですから、10%近い重さであれば、ほんとうに1対1に近いぐらいの銅が入っている、あるいは何割かを占めるぐらいの重さのパラジウムが入っている中から、それを ppm 以下まで除去するというプロセスが必要になります。そういう意味で、従来の方法論とは、いわゆるプロセスとして水ですから、有機溶媒として化石燃料でありますから石油由来のものを全く使わないとか、実際に水の中で回収・再利用できて、金属がむだにならないというだけではなく、生成物の純度という点で大きく優位性があると考えています。

【浅岡分科会長】 稲永委員お願いします。

【稲永委員】 今の質問にも関連するのですが、触媒の回収・再利用は、そういう意味では、このプロジェクトでは大事ということになります。ポリスチレンと PEG に乗ったホスフィンの開発は水中で使えるリガンドにオリジナリティーがあるということで、触媒の回収は、この場合ですと、パラジウムを含んだものの回収ということですか？

【魚住 PL】 はい、錯体の状態での回収です。

【稲永委員】 錯体の状態ですね。それがもちろん立体的にかなり保護されているので、特に水を使っている限りにおいてはよさそうな気がします。しかし、最初の質問にも関連するのですが、触媒の寿命、これはフロー系にすれば随分改善するとは思うのです。積極的に寿命がどれぐらいだということを出すことがもし可能であれば例えば1年間やっても大丈夫ですとか、そういうデータがあると良いと思います。酸素に対する安定性も含めてですが、それが一つの質問です。

また、この方法ですと、どうしても塩が出てきますね。HBr が出るのですが、それを KOH で中和すると KBr が出てくることになります。これに対し、最近、CH アクティベーションで水素が副生成物になるというのがありますね。この方法論をそっちのほうに展開できる可能性はありますか？

【魚住 PL】 最初の質問、つまり触媒のライフタイム（寿命）ですが、回収・再利用そのものに関しては10回程度の回収・再利用で問題がないことを確認し、それ以上はフローでやろうということで、そちらにて行っています。ただ、どれぐらいストレージできるのかということでは、実際につい2~3カ月前に、これを一緒にやっている会社の方が、うちにストックしてあった触媒、冷蔵庫に入れてあった触媒を、これを使って別の反応に混ぜてみるよと使って、全然、それは問題がなく使えました。そのときに、別な反応で活性が落ちては困るというので、我々の経験の豊富なこの反応にまず試してみたところ、ずばり同じようなデータが出たので、1年程度、普通の瓶に入れて冷蔵庫に入れておくだけで、問題なく、それは錯体の状態で置いておけることを確認しています。

次の質問の CH アクティベーションの可能性については、これぐらい比較的ツルツルの骨格になると、正確にこの位置だけを CH アクティベートできるかどうかは、はっきりとは分かりません。それは実は均一系でもおそらくまだその壁は実は破れていません。このような CH アクティベーションの

位置をきちんと正確に、しかも両方同じ条件でということになると、なかなかまだ蓄積が、世界の化学のレベルがまだそこに至ってなくて、我々も当然、まだ足もとに及んでいないというのが現状です。ただ、可能性としては、それができたら非常に楽しい、非常にうれしいと感じます。

【稲永委員】 もう一点、追加なのですが、ICP分析だと、溶けないので可能かどうか分からないのですが、この場合ですとリンとパラジウムの相対比を出されて、何回も繰り返した後でも、その比が変わらないということであれば寿命に関して有る程度納得できると思うのです。もし可能でしたら、その比を出したらいいと思います。

【魚住PL】 わかりました。使用後のもののリンとパラジウムの比については、まだ検討してなかったと思います。使用前のものはもちろん元素分析として、すべて、その比率は出して、論文の中で報告しているのですが、使用後のものについてはNMR等でチェックしただけで、その比率をまだ見ていませんでしたので、それについては次に実際に10回ぐらい使ったのが出てきたときに、その機会を逃さず、検討したいと思います。

【浅岡分科会長】 薩摩委員お願いします。

【薩摩委員】 繰り返しの質問になるかもしれませんが、結局、金属の混入は昇華を必要としない程度まで抑えることができたかという質問が一点目です。

【魚住PL】 それは実際に、ここまでになりますと、昇華を必要なかどうかというのは、クライアントの実際のデバイスに持ち込んで、そのできたデバイスの寿命です。何カ月、光り続けていたかというところまで検証する必要があります。全く同じ構造だったけれども、既存のプロセスできれいに精製したやつは1年もったのに、おまえのところから納入されたこの化合物は半年で光らなくなったぞというようなことが出てきて初めて、やはり製造工程や精製工程にどこか問題があったのではないかということが出てくる場合があります。現在のところはICPのレベルで十分スペックを満たしているとは考えているが、実際の使用になると、クライアントが製品として長い間、それを使ってみるといところを通過しないと、ほんとうに同じだといところまでは断言できないというのが正直なところではあります。

【薩摩委員】 2つ目の質問ですが、私の専門が気相反応なので、この反応系のイメージがよくわからないのです。生成物は全部、水層に出てきて、簡単に分離できる。そのような反応系なのですか。

【魚住PL】 簡単に分離できるわけではありません。実は反応が終わった後に関しては、ごみとなるKBrはまだ水に溶けているので、後処理で、まずろ過します。そうしますと、KBrがほぼ除けて、水で洗えばそれが全部除けます。その後は、触媒の中に目的物が実は入っています。有機物同士ですから、触媒のビーズのマトリクスの中に絡んでいたり、ダマになってこびりついていたりしています。これを有機溶剤で洗っていたのでは、せっかく水中でやった意味がなく、グリーンではなくなります。実はこの化合物に関しては、最初、超臨界CO₂でやりましたが、それでも十分きれいに抽出できました。その後わかったことは、実は普通のKOHの水溶液には溶けないのですが、真水、純水は結構油を溶かす能力がありまして、熱純水、熱した純水で、この化合物が絡んだビーズを洗ってやりますと、ほぼ完全に（完全にといっても、結構ある程度の量は水に流しますが）、それで化合物が得られてくることが見えてきました。そこで現在は、反応が終わった後、ろ過して、KBrを除き、残ったビーズを熱純水で濯いで、出てきたこの化合物の入った水溶液を凍結乾燥で水部分を飛ばすという形で、この化合物を単離しています。

【薩摩委員】 わかりました。

【浅岡分科会長】 この説明でICP分析の検出限度以下という表現は不適切なので、具体的にICPの検出限界が、この物質に対して製品グラム当たり何ppmかを示して、それ以下という数値を示すことが必要です。

このことに絡んで、金属の漏出についてですが、さっきも説明があった2ppmは製品に対する漏出ですか。それとも系外への漏出ですか。どちらを議論されているかを明解にしてください。

【魚住PL】 系外です。製品の重さ当たりではありません。

【浅岡分科会長】 今の話ですと、ICPで測定しているのは製品を測定しているのではないのですか。

【魚住PL】 はい、もちろん。

【浅岡分科会長】 その辺の話、製品の品質の話とプロセス的な金属の固定化率の話は別だと思うのです。そこを分けて、記述してください。漏出の結果起こる問題は、一つは製品の品質にかかわる、寿命にかかわる金属の混入です。もう一つは、プロセスとして永続性があるかどうかです。

また、何項目かある最終目標は、それに対応する達成度という表現を本来はしてください。反応率、選択率、金属の漏出に関してはあります。しかし、触媒回収に関しては、定量的な表現になっていません。何%以上という数値で、99.999%でもいいですが、数値で示してください。「定量的」という表現は「全量回収したという100%」という意味だと理解されます。検出限界がある以上、ある数値を持っているはずですが、それを示してください。また、「生産量100kg以上」の目標（/dayか何かわかりませんが）につて、それに対して想定したプロセスを確立されたかどうかという表現をしてください。以下も同じです。

【魚住PL】 同じことを言われると思いますが、以下は次のトピックスです。

【浅岡分科会長】 わかりました。

また、各年度の進行状況に応じて、目標の表現が22年度は違っています。この理由を教えてください。最終的によくわからなかったのが、ブレイクダウンとして、固定化錯体とナノ金属の触媒との2つの話が含まれていたと思うのですが、これは①の話ですか。

【魚住PL】 すべて①の話です。

【浅岡分科会長】 それでは、これの達成した目標は、どちらの技術で達成されたのか。また、22年度で開発する技術が少し変わっているように思うのですが、その関係を教えてください。

【魚住PL】 まず達成状況の数値に関しては、示しています。

特に金属漏出に関しては、なぜ生成物ベースでの重さでないかという質問ですが、そうではない理由は、今回は一応、基礎技術、つまり水中で回収できる技術の確立がNEDOの達成目標だったので、触媒から漏れ出していないことを証明することが第一義でした。最初に入れた触媒量のどれだけが漏れたかということを見えています。

【浅岡分科会長】 それだとたとえば回収率99.999%以上という表現になります。

【魚住PL】 触媒の回収は人によって違うと思うのですが、普通は不活性化された触媒でも回収できたら回収と呼ぶのかというのに対して我々はそうは思っていません。この触媒の回収というものは活性化状態で回収している。つまり、そのまま使えるという状態の回収です。

【浅岡分科会長】 そうすると、「目標値は80%」というのは何を意味しているのですか。

【魚住PL】 これはNEDOが設定した目標値ですから、我々が設定したのではなくて、こう設定されたものに対して我々は、ここまで行ったということです。これはNEDOの公募条件です。

【浅岡分科会長】 その目標は達成されたかどうかというのはどうなりますか。

【魚住PL】 我々は十分達成しました。この最終目標は、NEDOの公募条件にあった数字です。それに対して、我々は、例えばNEDOがこれを目標とみなさいといったところに対して、最初の段階で、結構いいところまで行けたと思ったので、2年目は、このままでは達成できるだろうけれども、コストが高いというので、2年目に我々はコストの低減も考えようということで、ポリスチレンポリエチレングリコールのみならず、バイオマスとか、モノリス触媒とか、もっと安価な担体も試したという途中経過です。つまり、この年度、我々は低コスト化も考え、この数値だけではなく値段も考えようという目標を自分たちで立て直して、それについてチャレンジしたのです。最終的には、ここはまだ完成していない技術ですので、PS-PEG という最初に提案した触媒で達成しています。その達成状況は、NEDOが最初に課した達成目標を超えて達成できていますので、そのとき、NEDOが触媒回収は例えばパラジウムチャコールのように、多少、パラジウムが傷んだり、消えたり、何かしても、何とか回収できればという形でおそらく提案したと思うのですが、我々は幸い、ろ過して回収するだけで、定量的には99%を超えて、そのままどこにも行っていないくすべて丸ごと回収できているという意味なのですが、丸ごと回収が実際にできたことをこちらに示しています。これは我々が立てた数字ではないので、こうなってしまったのです。

【浅岡分科会長】 いや、そうではなくて、触媒回収率100%という表現は定量的ではないので、「ほぼ100%」でもいいのですが、そういう表現にしてください。

【魚住PL】 99%以上とかにします。

【浅岡分科会長】 それと、一つだけわからなかったのは、バイオマス利用とモノリス触媒の位置付けです。開発の中での位置付けが最終目標達成に対してどういう作用をしたかが、ちょっと簡単には理解できませんでした。

【魚住PL】 最終目標達成に関しては、これはまだそれほど大きな貢献はしていません。ただ、実はこの高分子は結構、市販では高いので、これから先、実用化できますか、事業化できますかという質問が来たときに、それに対しては、さらに触媒のコストを下げる研究を既にスタートして、ある程度の基本的な知見を得ていますということをお答えすることができればと思って、その途中経過を少し示したのが、この位置付けです。

【浅岡分科会長】 22年度だけが達成度に対する表現方法が違って違和感があるので、そこをうまく統一してください。示した意図はよくわかります。いろいろな方法で、より効率の高い安価な廉価な触媒を模索したという努力は非常に買いますが、わかりやすい表現に直しておいてください。

【魚住PL】 わかりました。

【浅岡分科会長】 同じレベルの目標達成ではないのですから見直してください。

【魚住PL】 もう一回見直しますが、たしかNEDOが、公募の段階でというか、研究計画の段階で、年度ごとの目標値みたいなものをある程度、NEDO側が設定してしまっていて、それにたしかコストダウンみたいなものが入っていたような気がしたので、それで対応するように書いたと思います。この辺の数値は結構、最初の計画に入ってしまった数値なので、それを達成したことを示す形で、このような表現になりました。

【浅岡分科会長】 最後に吉田分科会長代理をお願いします。

【吉田分科会長代理】 今のところを確認したいのですが、この数値、達成目標は、基本計画の10ページ目の話なのでしょうか。数字のことなので、はっきりしておいたほうがいいと思うのです。基本計画の研究開発項目の②ですか。

- 【石毛主査】 今は①です。
- 【吉田分科会長代理】 ①ですか。①には、それは書いていません。
- 【魚住P L】 基本的には、例えばですが、7ページ目の達成目標のところ、例えば平成21年度は70%以上、70%以上の触媒プロセスをやっています。
- 【吉田分科会長代理】 そうすると、そこには触媒回収率は書いていません。
- 【魚住P L】 確かにそこには書いていません。
- 【吉田分科会長代理】 ①のどこに書いてあるのかなと思ったのです。②には書いてあるのですね。研究開発項目の②に書いてあるのは今関係ないのですね。どこに最終目標を挙げてあるのかというのは確認しておいたほうがいいです。
- 【魚住P L】 基本的には、こちらに書いてあるのが、その原型になるのは間違いありません。
- 【吉田分科会長代理】 原型というか、基本計画が重要なので、それに従ってやるべきなのではないですか。
- 【魚住P L】 ただ、これはなぜかという、間違いなく、これが基本計画であることは間違いありません。それに対して、例えば、次のときにやりますが、上方修正済みという場合もあります。
- 【吉田分科会長代理】 それはいいのですが、例えば最終目標値というのが80と90とか書いてあります。それはいいのですが、金属溶出2 ppm以下とか、そんなことはどこに書いてありますか。
- 【魚住P L】 ppmまでは書いていないかもしれません。これは自分で勝手に、上方設定した数字かもしれません。というのは、上のハードルを設定する分にはいいだろうというのが僕自身にあります。
- 【吉田分科会長代理】 それはそのように事業原簿に記述すべきなのです、そもそも基本計画の目標は何だったのかをはっきりさせる必要があります。
- 【魚住P L】 わかりました。
- 【岩田主研】 ②にはあるのですが、おそらく実施計画か何かで、とにかく上乘せの目標になっています。
- 【魚住P L】 実施計画を出したときに、年度の頭に、技術検討委員会の方と勉強会があって上乘せの目標になっています。
- 【吉田分科会長代理】 ただ、基本計画が重要なので、私はそう聞いています。
- 【魚住P L】 基本計画に関しては、これは載っていないので、より以上のものを書いてあるかもしれません。
- 【吉田分科会長代理】 それから、「生産量は10 kg～数 t/day以上を想定し」と書いてあります。その部分は勝手に書いてありますね。
- 【魚住P L】 これは実は、このプロセスに関しては、10 kg～数 tというのが、とてもじゃないけれども、世界で必要としていない量なのです。
- 【吉田分科会長代理】 それは別にこの化合物を想定するからであって、基本計画では特定の化合物は書いていないのです。だから、それを想定して書いたのですね。
- 【魚住P L】 そのとおりです。
- 【吉田分科会長代理】 最終目標は正直に、もともとの基本計画を書くべきです。それで、実際やったのは、こうですとするのは構わないです。
- 【魚住P L】 ここは10 kg～数 tと書くということですね。
- 【吉田分科会長代理】 正直に全部、基本計画をコピーして書いてください。
- 【魚住P L】 先ほどのICPのことがよくわからなかったということもありましたが、これはプレゼン

なので、細かく書かずに、端的に書いていったので、ちょっと誤解があるものが残っているかもしれませんが、指摘のとおりです。

【浅岡分科会長】 時間も無いのですが、ただ、達成度100%との表現について、何を根拠に100%とか、次も議論になるでしょうが、120%とかにしていますか。100%という数字、これは反応率とか、そういうものを見ると、100%どころではないのではないですかという質問なのですが。何を基準に100%にしたのかということ、次のプレゼンでも、なぜ120%したかを説明してください。

6.1.2. ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究（分子研）

魚住PLより資料6-1-2に基づき説明が行われ、以下の質疑応答が行われた。

【浅岡分科会長】 では、質疑応答に移ります。永島委員お願いします。

【永島委員】 そもそも論になってしまうかもしれないのですが、パーオキシドテストは行いましたか。つまり、エチレングリコール等のエーテルの隣はフリーラジカル酸化を起こし製品劣化を起こすので、このプロセスに本当に酸素酸化を当てはめていいものかどうか。

【魚住PL】 それについては、エチレングリコールのみならず、実はポリスチレンのベンジル基も危ないのです。ラジカル酸化という意味で我々は結構、そこは気にして見えています。その結果わかったことは、過酸化水素的なものが完全に遊離して出てきます。それらは実はパラジウムで分解されて、すぐさま酸素になり、その速度が非常に速いので、当然、酸化反応なので過酸化物はできていると考えています。けれども、その有機過酸化物が酸化に行く分にはいいのですが、ほかにラジカル的なサイドリアクションを分子間で起こすというところになってくると、むしろそれが分解して、酸素になって逃げていくほうがメインのパスになります。パラジウムやプラチナによって過酸化水素は爆発的に分解しますから、そういうプロセスがかなり含まれますが、実際に見ている分にはベンジル基の酸化やエチレングリコール部分の傷みは今のところ見当たりません。

【永島委員】 基本的にそれが起こると製品が違ってくるわけですね。

【魚住PL】 触媒そのものが傷んでくるのは間違いないです。

【永島委員】 触媒は傷むでしょう。アミノ基が一番危ないです。むしろ問題となるのは製品のほうなのですが。

【魚住PL】 製品のほうは、製品できちんとそれは完全に有機物としては純度検定をしていますので、そこにはそういう過酸化物は混ざってきません。

【永島委員】 それがあるとケトンが出てきますね。

【魚住PL】 そのはずです。

【永島委員】 分かりました。

【浅岡分科会長】 ほかにありませんか。

【植山委員】 聞き逃したかもわからないのですが、この配布の資料の10ページの反応プロファイルは、大体100%近くに行くのは20時間ぐらいかかっているのですが、先ほどのフローでは1分ぐらいという話だったのです。これはどこがどう違うのですか。

【魚住PL】 ここで一旦、なぜ紹介したかという、触媒回収ができて、反応がうまくいって、これでNEDOの目標値を達成してしまうからです。反応率も他のものもです。たとえば反応率は99%

です。しかし、これでは実際に使いものにならないわけです。20時間も何十時間もかかっていたら使いものになりません。そういうことで、さらなる本当に紆余曲折の条件検討の後で、とうとう我々は最後に、このフローの系でうまくいったのです。というのは、圧力が60 bar ぐらいに増えているのです。そこが全然違うわけです。これぐらい圧力をかけていくと、反応が圧倒的に速くなりまして、わずか1分程度のコンタクトで目的物になるところに最終的に至ったわけです。ここも条件をつかみ取るまでは、圧力を変える、温度を変える、フローのスピードは変えると、かなりの条件検討をやった結果、行き着いた先がこれということで、このような結果になりました。

【植山委員】 そうしますと、基本的な最初の図は、圧力がほとんど掛かっていないのですね。

【魚住PL】 常圧です。

【植山委員】 常圧ということですね。これは水中での酸化反応だから、水中での酸素の溶解度が律速になるから、そういう意味で反応が進んだということですね。

【魚住PL】 そうです。

【植山委員】 それで一つ、コメントなのですが、これは純酸素を使われているのですね。

【魚住PL】 はい。

【植山委員】 これは気をつけているかもわからないのですが、コメントとしては、装置の中の油分は純酸素を使う場合は禁油ですので、これから装置を大きくされる場合とかには十分気をつけてください。

【魚住PL】 分かりました。その辺は実はタレス社の技術者は、装置の専門家の方と、これは酸素でやるよということを前提で装置開発、最適化を一緒にやっているのです、その辺、我々は素人なのですが、プロが結構やっていて助かっています。

また先ほどの答えに追加なのですが、永島委員の質問の中のラジカル酸化というのは、バッチの場合は不都合なことが多いのですが、最終的に1分で行くと触媒に触らなくなってしまうので、おかしなサイドリアクションを抑えることに役立っているのではないかと考えています。つまり、バッチですと、反応が全部行くまでには最初にできたものも、途中経過のものも全部、その条件にさらされます。フローでやると、ほんとうに1分程度で、触媒にも酸素にも触れず、圧力もかからない常圧の状態、しかも温度が下がった状態で生成物が出てきますので、そういう意味で生成物に、そういう不都合なものが混じり込むことをかなり避けることに成功していると思います。

【永島委員】 逆に触媒は繰り返し再使用をしていると、今の範囲内では大丈夫だけれども、将来的にはやはり気をつけなければいけないということですね。

【魚住PL】 それはそのとおりだと思います。今のところ、まだ1週間程度、2,000回程度の回転なので、1年何万回というところまでは、まだ検証が進んでいません。

【浅岡分科会長】 吉田先生お願いします。

【吉田分科会長代理】 先ほどの植山委員の質問と関係するのですが、酸素は非常に危険だということです。昔、NEDOのプロジェクトでマイクロフローの酸素酸化をやったときも、燃焼はとまるのでマイクロの中では安全なのです。出たところが一番危ないので、その工夫を十分してくださいということです。特に大量合成の場合は非常に危ないと思うので、そこで急に薄めるとか、何かしないと。ただ薄めると、かえって危ないこともあるのです。そこが難しいところです。そのときにカラムの径とか、いろいろなことがきいてくるので、大量合成をするときには特に注意する必要があると思います。

それから、これもコメントなのですが、基本計画には、溶出金属回収率と書いてあります。これは

一応、溶出した金属を回収するという意味なので、それを読み替えて、こういうふうにしましたよということもどこかに書いておいたらいいと思います。

【魚住P L】 溶出してこなく、回収できていないので書いていません。

【吉田分科会長代理】 そうですね。そこはこういうふうに解釈して、こうしましたよということ、どこかに書かれたほうがいいと思います。

【浅岡分科会長】 三宅委員お願いします。

【三宅委員】 かなり技術的なことになるのですが、このマイクロリアクターを使ったときのアルコールのOHと酸素のモル比はどれぐらいでやっているのですか。

【魚住P L】 フロー系のモル比ですか。

【三宅委員】 といいますのは、酸素がどれだけ残るのかという安全性の面もありますし、酸素がたくさん残るとすると、パラジウム、白金が徐々に酸化を受ける心配もあるかなということもあります。結果にまとめられているコンバージョンとか、選択率はフローの系のですか。

【魚住P L】 はい。なるほど、モル比については考えたことがなかったのです。というのは、反応が終わった後、これは系中（圧力がかかった状態）から反応が終わって出てきた段階で、常圧常温に戻りますので、その段階では常圧常温の水の飽和酸素量にしかなく、つまり、それ以上のものは圧力がなくなつた途端、気体になって出て行ってしまいます。

【三宅委員】 出口はそのとおりかもしれないのですが、出口のときに余った酸素が出てきているかどうかですね。

【魚住P L】 出てきます。余った酸素はバブル（泡）として出てきます。

【三宅委員】 ということは、反応器の中では酸素がアルコールに対して必要量よりも多く入っているんですね。

【魚住P L】 それはそうだと思います。

【三宅委員】 それはどのぐらいでしょうか。

【魚住P L】 それについては、どれだけの量だったか、そこは圧力と酸素濃度ばかり気にしていて、絶対量の計算をしていません。気をつけて見てみたいと思います。

【三宅委員】 入口の酸素の供給量と入口のアルコールの供給量がモル比でわかれば、すぐわかるはずで

【魚住P L】 はい。そこを気にしていなかったのですが、今、手もとに実験ノートさえあれば、すぐにも計算できることなのですが、数字がすぐに出てきません。

【浅岡分科会長】 液のフローレートとガスのフローレートをきちんと示してください。

【魚住P L】 いいえ、圧力だけなのでガスのフローレートはないのです。ガスが、マイクロバブルというか、ナノレベルのバブルにスリットを通して、非常に細かいナノレベルのバブルになって溶け込んだ、いわゆる気液のエマルジョンみたいな状態になって、それがフローしていきます。

【浅岡分科会長】 その場合には酸素は後から供給しないのですか。

【魚住P L】 しないです。しないというか、流路の途中で吹き込むのです。

【浅岡分科会長】 吹き込む速度です。

【魚住P L】 速度はないです。圧力だけです。速度はありますが、速度は関係ないです。

【浅岡分科会長】 なぜですか。普通、トリクルのリアクターの場合には、ガスと液の存在比が固定床の触媒のリアクターの中での接触の問題で、化学工学的には非常に重要なのです。今の質問にも絡むの

ですが、ガス液比、60気圧ですからガスは60分の1の量になるのですが、それで反応器の中の空間比率を占めているかは必ず検討されるほうがいいです。

【魚住PL】 空間比率はもちろん出せますが、それはガスの流量ではなくて、ガスは圧でかけていて、それがナノバブルになって、気液のエマルジョンになった状態で一体になって流れていきますので、ガスだけのフローというのではないのです。気体だけの流量を出せるわけではありません。

【浅岡分科会長】 出口を絞られているわけではないですね。出口はオープンなのですね。だから、これはIN/OUTのガスがないから、基本的には反応で食われた分だけ酸素が入ると。そういうことですね。

【魚住PL】 そうです。食われた分ではない分は、オーバーフローして余分なガスとして出ていきます。

【浅岡分科会長】 では、出て行くはずですから、出口には圧力が発生して出て行くはずですから、充填された分の圧力損失分だけ60キロから食われて、残りの分がベントというか、出て行くはずですから、流量はあるはずですよ。

【魚住PL】 流量というか、ボリュームです。ボリュームは出せます。流速のことかと思ったので。

【浅岡分科会長】 いや、流速です。

【植山委員】 半径で割ったら流速になります。

【魚住PL】 それはそうです。それは別にどれだけ流路が長かったかというだけのことになってしまうのですが、流速がそんなに大事ですか。

【植山委員】 要するに、酸素のほうの選択率と収率も出したらどうかということです。

【魚住PL】 それは出せるのですが、流速という言葉を出すことには違和感があるのですが、相変わらず、酸素の流速は必要ですか。出せば出しますが、一体になって流れているので、酸素のバブルの流速は多分、液体の流速と一緒にではないですか。

【浅岡分科会長】 もう一つ、ダウンフローですか、アップフローですか。

【魚住PL】 下から上にです。それは普通の液体と同じ速度になります。

【浅岡分科会長】 液の連続相で、その場合には溶解律速とか、溶解になります。直接、触媒層にガスは接触しないことになります。わかりました。

【魚住PL】 もう既に、完全なガスフローではないです。

【浅岡分科会長】 稲永委員お願いします。

【稲永委員】 今の議論で、酸素ですが、これは将来的には空気に置き換えることは可能ですか。

【魚住PL】 可能だと考えています。というのは、これをバッチでやったときは、空気でもやっています。空気になると、やはり分圧が下がる分、反応が遅くなるだけで、空気中の開放でやってもバッチの場合はいまいくきます。このフロー系も空気ボンベでやったら、ある程度のもんはできると思いますが、ただし、今は酸素でやっています。

【稲永委員】 コンタクトタイムを長くすればいいのですか。

【魚住PL】 はい、それだけで行けると思っています。

【稲永委員】 これは非常にいい触媒だと私は思います。ポリエチレン系はKBrとか、そういうものが確かに取り込まれやすいですね。そうすると、先ほどの反応系でKC1も、塩が副生成物として触媒系の中に取り込まれる心配があるということでしたが、この場合は塩を使っていないから、非常によろしいと思います。

【魚住PL】 前回のKですか。前回のKは、触媒のほうには絡んでくる、包摂する可能性はありますが、

それは水で洗えば、ある程度は触媒には、そのKC1が多少混じっても、そんなにダメージにならないですね。

【稲永委員】 わかりました。それは先ほどの話でした。

【浅岡分科会長】 杉本委員お願いします。

【杉本委員】 細かいことの確認と、質問をします。TONの計算の分母、分子は何ですか。

【魚住PL】 これはターンオーバーナンバーなので、パラジウムのモル数1（モル数で計算して、昔の言葉で言うとグラム原子ですか、金属ですから今はモル計算でいきますが）、パラジウム1モルに対して、2,500モルの生成物が得られたという計算です。

【杉本委員】 その2,500に至るまでの時間はどのぐらいですか。

【魚住PL】 それは2,500に至るまでは、この場合は流速が遅いので、6日間です。

【杉本委員】 それで計算は合いますか。

【魚住PL】 それはここに基づいて、この触媒に対してできてきたものの例えば160gができたときに、そのモル数で割っていただきますとでます。

【杉本委員】 その6日間というのは、ずっと連続運転という意味ですか。

【魚住PL】 はい。

【杉本委員】 何かけたが合わなかったような気がしたもので。こちらの計算違いかもしれません。

もう一つが、これは基本的に水系の反応で、酸素は圧力をかけてということですね。それでここまですうまくいくのは、基質がそれだけ親水性が高いからですか。

【魚住PL】 いえ、そうは思いません。

【杉本委員】 例えば単純にエーテル鎖のないような、もっと脂肪族鎖が長い単純アルコールでもうまくいくものなのでしょうか。

【魚住PL】 はい。そのほうがうまくいきます。最初の基本技術は、それでやっていたのです。このときに一番心配だったのは、むしろこの反応でうまくいくかのほうが心配でした。というのは、この技術の一番の根幹にある基本的な基礎化学概念が、これになりますので、高分子のマトリクスが水中だと有機物は水に溶けにくいので、この中にやってくると疎水性相互作用によって、自己濃縮されるので反応が行くのだ、行きやすいのだとなり、普通は行かない反応も行くようになります。

【杉本委員】 連続層だからという意味で聞いているのですが。

【魚住PL】 連続層でも同様だと思います。基本的にバッチでうまくいったものは、連続層だとさらにうまく行くことはあってもいかなことはありません。ですから、触媒そのものが水中でうまく行くことに関しては、反応単発で言うと、このもののほうが行きにくいのです。これは水に溶けやすいので。この中に入ってきませんから。ですが、連続層にする分には、このほうがやりやすいのは事実です。プラクティカルに。というのは、割りと均一になりますので、これが完全に油だと連続で回そうと思ったときに、流し込む水の中に有機の油を浮かせておくと、そこが均一にできなくて、非常にフローしにくいのですね。この場合、完全に均一のようなコロイダルな状態になったものでフローできますので、プラクティカルには、このものであったことがフロー系では得をしています。しかし、反応論としては、これは不利な反応です。

【杉本委員】 わかりました。

それで、ちょっと観点が変わるのですが、先ほどの前の話で質問できなかったので、ここであわせて聞いておきますが、今回の話ですと、先ほど私が質問したように、時間的な観点が入っていたので

すが、最初の一つ前の話では、時間軸がどこにも出てこなかったですね。全部、効率で割り算した結果しかなかったの、今回のこういうような固定化触媒を使うことによって、時間軸で見たときには有利、不利というのはどの程度あるのでしょうか。

【魚住 P L】 前回のものに関しては、あの条件では反応時間としては約半日から 2 4 時間ぐらい、アミノ化にはかかります。もちろん触媒をもっと増やせば速くなりますが、それは金属を消費して、グリーンな方向に行きませんので、落とすところとして、触媒を減らした状態でやると、どうしても 1 2 時間から 2 4 時間ぐらいかかってしまいます。ですが、それが既存の反応方法では、3 時間で終わるものもありますし、やはり 2 4 時間程度かかる工程も知られています。既存のものに比べて不利か、有利かという、反応そのものでは、先ほどのアミノ化は、時間軸に関してはそれほど著しく有利というものではないと思います。

【杉本委員】 濃い液が混在していることによる、例えば拡散律速があるとか、そういうわけではなさそうということですね。

【魚住 P L】 ではないと思います。この反応は、普通に均一系でやるよりも水中のほう、不均一のほうが速いぐらいです。

【杉本委員】 わかりました。

【浅岡分科会長】 最後の質問を薩摩委員お願いします。

【薩摩委員】 一つコメントと一つ質問です。コメントは、3 ページにありますサマリーのところ、漏出濃度が①では 1 ppm、②では 0.1 ppm と書いてありましたが、これはおそらく同じ I C P ではかられているので、検出限界は同じではないかと思うのですが、おそらく数字は揃うものではないかと思っています。

【魚住 P L】 そうではありません。これは先ほど言いましたように、使ったメタルがどれだけ来たかです。出てきたものをはかって、1 cc の中にどれぐらいメタルがあったかを見て、そこから逆算します。ですから、出てきたサンプルをどんどん濃縮できれば、もっと精度が上がるのです。濃縮できるようなサンプルの量がたくさんとれたときは濃縮して、なるべく精度を上げるようにしますので、それで最初のものと同効数字のけた数が 1 個変わってくる場合があります。

【薩摩委員】 わかりました。

あと質問は、これだけ大きな分子が入るので、かなりポリスチレンはポーラスなものだと思うのですが、どのぐらいの細孔径を持ったものなのか。

【魚住 P L】 ポリスチレンそのものの細孔径については、特にそんなにポーラスではないです。エチレングリコールの長さがかなり長くて、物理的にポーラスというよりは、分子レベルでゆるゆるという状態です。いわゆるメソポーラスなポリスチレンが市販でありますね。穴が実際にあいているものですが。ああいうものではないです。どんなに顕微鏡で見ても、表面はツルツルしています。実際、両親媒性の面から、エチレングリコール側鎖のユニット数が 2 0 ぐらいでは全然足りなくて、3 5 ~ 7 0 ぐらいの間を幾つかやりましたが、3 5 以上 7 2 までは同じような反応性を示します。そして、架橋度がまた重要で、これはジビニールベンゼンで 1 % 架橋です。1 % 架橋でエチレングリコール側鎖がかなり長いというところにして、かなり柔らかいジェル状になっており、分子として緩いというところに、いろいろなものが入り込んでくるのではないかと理解しています。

【薩摩委員】 分かりました。

6.1.3. エステル・アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究（名古屋大）

石原教授より資料 6-1-3 に基づき説明が行われ、以下の質疑応答が行われた。

【浅岡分科会長】 質疑応答をお願いいたします。吉田先生お願いします。

【吉田分科会長代理】 今の出口イメージのところですが、非常にすばらしい結果ですが、その中で、真ん中に言われたカーボネートのエステル交換に関して、あの反応で思いつくのはポリカーボネートをつくる方法なので、普通はホスゲンを使うのですが、ホスゲンを使わないで、エチレンカーボネートから平衡に逆らって、反応蒸留しながら、どんどん平衡をずらしながら、フェノールを入れてという応用は考えたことがありますか。

【石原教授】 それも考えました。しかし、現在の触媒系では、ジメチルカーボネートとアルコールから、モノエステル交換しかできないです。

【吉田分科会長代理】 ジエステル交換はできないのですか。

【石原教授】 ジエステル交換にはもっと活性の強い触媒が必要です。

【吉田分科会長代理】 もちろん、すべてアップヒルなのですが、それに逆らって、反応蒸留して行って、平衡をずらしていくというのが今の旭化成の方法なのですね。そういうところに、これがよりいい触媒として適用できれば、アウトプットとしておもしろいと思ったのですが。

【石原教授】 2 段目はかなり遅いことは確認しております。あともう一つは、ランタンイソプロポキシドから 100 倍安価なものを使えるようになったとはいえ、それでもレアアースであることには変わらないです。このランタンの場合は、毒性が非常に低いことがわかっていますので、それでもメタルとしては高価ですから、医薬品系の中間体等のほうに活路を見出したいと考えています。

【吉田分科会長代理】 分かりました。

【浅岡分科会長】 ほかに発言はありませんか。植山委員お願いします。

【植山委員】 先ほどの出口の話なのですが、出口イメージがまだ定まっていないということと、それから冒頭お話をいただきましたスケールアップの件なのですが、話では、大学の研究だから、そこそこのスケールで、当初提示された 10 kg～数 t まで至らなくてもいいというのが初回の会合で話があったということなのですが、それは再委託だからですか。

【石原教授】 いや、そうではないです。

【植山委員】 そうではなく、NEDO からそういう話があったということなのですか。

【石原教授】 そのときは初回ですから、経産省の方のところに魚住 PL と一緒に我々が行って、このプロジェクトについての説明をうけるという機会が最初にありました。その中で、この最終目標に対する考え方としては、こういった最終目標について、我々大学とか分子研で行うにはちょっと現実的ではないということを伝えました。我々自身が、最終年度までに、これを達成するのではなく、そこへの道筋として、ほんとうに試験管でやるようなスケールではなくて、我々自身でできるだけスケールアップして、そのスケールアップする中での問題点を解決していきながら、最終的には企業で、そういったスケールアップへ持って行くような道筋を切り開いていくことができれば OK でしょうというような、それはある意味、口約束みたいなことなのではなかったか。

魚住 PL、そういう話でしたね。

【魚住 PL】 はい。

【石原教授】 そして、実際に毎年、年度初めに計画書を出すのですが、その目標もここに示したような

目標値でずっと認めてもらってやってきている経緯があります。

【植山委員】 それで、その表現の仕方なのですが、冒頭の2件のご説明のときにも議論があったかと思うのですが、もともとの前提というか、もともとの目標から途中で目標が変わったなら、これこれこういう理由で目標が変わったと。前提条件が変わりましたと。それで最終的にこうなりましたと。だから、評価はこうですと。そういう形にしないと、公募の事業なので、透明性という意味からもいけないとのコメントですが。

【石原教授】 その点は、我々に変更したつもりはなくて、申請書を出す段階から、自分たちでできないような1 tとか、数kgというような単位で実現しますという申請書はもともと書いていないのです。ただ、採択された時点で最終確認をさせていただきまして、我々の考えは認めていただいたと考えています。それは変更したということではなくて、解釈として問題はないと我々としては認識しているところです。

ここの基本計画のところの達成状況の中の文言につきましては、それに沿った書き方をしています。例えば、ページ数がわかりづらいのですが、研究開発成果の基盤技術のⅢ.1.1-1の、3ページ目というのですか。これは何と言ったらいいのですか。

【石毛主査】 3章の1の1の3ページです。

【石原教授】 そう言えば皆さん、おわかりになるのでしょうか。その例えば②というところに、スケールアップ実験では100 gスケール合成/回、200 gスケール合成/費用を達成したと書いてありますが、その最後のほうです。10 kg～数t/日以上も十分に可能だと考えていると。開発した触媒の工業製品化に向けて検討中で、技術移転を進めていると。これは、ここに掲げてあるNEDOの最終目標に沿って、達成状況を矛盾なく書いているつもりでいます。

【植山委員】 今の説明をされた触媒は全部、均一系ですか、固体ですか。

【石原教授】 均一系です。

【植山委員】 均一系で、触媒は溶解しているのですか。

【石原教授】 溶解しています。

【植山委員】 全部、均一系ということですね。

【石原教授】 均一系です。これは場合によっては、魚住 PL のところの技術を応用して固定化することも考えていたのですが、まずその段階の前に、できる限り触媒活性を上げて、触媒量を減らしたいという我々の思いがありまして、そちらの研究を優先的にやってきています。今後、場合によっては、魚住 PL と相談して、そういう固定化についても検討する必要があるれば、していきたいと思います。ただ、例えば最初のボロン酸においては、ターゲットがポリマーだったりしますと、むしろ今のままのほうがいいのかもかもしれません。

【浅岡分科会長】 永島委員お願いします。

【永島委員】 多分、今の話はターゲットが決まらなないと、そしてもう一つは機能性材料とか、医薬品とか、それぞれ全部、リクワイアメントが違うので、なかなか答えにくいと思うのですが、ここで実用化の見通しという評価項目が入っていますので、そうすると、例えば一般論として後半の話のヨウ素というのは、これはできれば使いたくないと。特にI⁻ですね。これは着色しますし、またヨウ素がなかなか抜けないことがあるので、例えば医薬品みたいな非常に高いもので、分離コストも高くてもよければ使えるけれども、もう少し安いときは臭素ないしは塩素が望ましいとか、そういう形で、ある程度の想定ターゲットに応じて、今後残された問題と今後やっていくべき問題を少し整理して提示

をしたほうがいいのですが。

【石原教授】 ヨウ素はできる限り使いたくないとなりますと大変ショックなのですが、塩素はやっていませんが、臭素については比較検討しています。場合によっては臭素のほうがいいときもあるのですが、少なくとも今回の件においては、断然、ヨウ素のほうが活性が高いということはあります。

ヨウ素については、できれば使わないほうがいいのですかね？ちょっとわかりませんが、私たちの立場から申しますと、他の元素、金属等に比べると、ヨウ素の産出量というか、保有量は日本は世界第2位ですし、そのほとんどが千葉で鹹水からとれるということで、日本が唯一と言っていいほどの資源の輸出国になっています。ヨウ素についてはです。そういったヨウ素技術を開発することは、我が国にとっては決して戦略上損にはならないことだと。そういう信念でやっているのですが、使わないほうがいいのでしょうか。

【永島委員】 発言は全く正しいのです。ですから、あくまでもどういうところに使うのかということによって、例えばなかなか、この試薬のI⁻が除けないような製品の場合に、それが着色等で問題なときには、これは使わないほうがいいわけです。ですから一般論ですべて、I⁻を使ってはいけないのではなくて、こういうところに関しては非常に強い点があって、こちらの点に関しては、やはり代替品が必要という分析も少しは必要なのではないかというコメントです。

【石原教授】 今のところ、ラボスケールにおいては、実際には、これは過酸化水素とか、ターシャリーメチルハイポオキシドを酸化剤に用いておりますので、テトラブチルアンモニウムヨウ化物を加えているのですが、着色はしません。ヨウ素は全部、亜ヨウ素酸とかのアンモニウム塩になっていますので、色もほとんどついていませんので、分離という意味でも、塩になっていますから、I₂のようなものが通常の条件では遊離してくることはないです。多分大丈夫だと思うのですが。

【浅岡分科会長】 稲永先生、お願いします。

【稲永委員】 今の質問とも関連するのですが、従来法との比較は出ていましたか？すばらしい触媒ですが、従来法と比べてのメリットを出していただくと、すごくいいのではないかと思うのですが。

【石原教授】 例えば、これは従来法がここにあるのですが、テトラカルボン酸に無水酢酸を過剰量用いて、過酷な条件で合成しているというのがあります。酢酸をその後、蒸留等で分けていくと。この酢酸もそのまま放っておけませんので、それを回収して何かに利用するというのであればいいのですが、非常に臭い化合物ですから適切な処理が求められます。

【稲永委員】 従来法はいろいろあると思うのですが、幾つか代表的なもの、例えば、それだったら触媒はなしということですか。

【石原教授】 これは触媒はなしです。酢酸無水物を入れまして、加熱して、そのまま分留するというような形になります。

それで、例えばこれは無理やりに何百℃という温度をかければ、蒸留しながら、これを単離することができます。しかしながら、こういったものが連結したようなテトラカルボン酸誘導体の場合は、分子量が大き過ぎて、蒸留と昇華等ができないという問題がありまして、それはポリイミド等を合成している企業との話でわかっていることなのですが、我々の方法が有効であることは認められています。

【稲永委員】 私が言いたいのは、先生が触媒のメリットとデメリット、まあ、デメリットはあまりないと思いますが、メリットをより明確に出す、何か表現があったらいいなと思ったということです。

中身はわかっております。

- 【石原教授】 メリットは水しか出てこないということですね。
- 【稲永委員】 メリットのの一つとして、これは均一触媒ということですが、触媒の回収・再利用というのは、今の時点ではできていないということでしょうか。
- 【石原教授】 触媒の回収・再利用は5回やりましたが、これは多分、繰り返しできると思います。
- 【稲永委員】 見ると、少しずつ落ちているのかなという気もしないではないのですが。
- 【石原教授】 これは実験誤差です。ここでは94%にいきなり落ちていまして、その後、98%になってきて、95%、93%になっています。これは93%から98%のあたりをうろろうろしていまして、これは単離収率ですので、決して徐々に劣化しているということではないと思います。
- 【稲永委員】 わかりました。もう一つ、最後ですが、ランタンのナイトレートを使っておられるのは個人的には非常にうれしいのですが、IV族は試されましたでしょうか。つまり、他の金属ではだめなのかということなのですが。
- 【石原教授】 ナイトレートがということですか。
- 【稲永委員】 対アニオンは何でもいいのですが。
- 【石原教授】 これは他の研究者の方が、もう10年以上前なのですが、アルコールを溶媒にして、メチルエステルをアルコリススするという条件で、さまざまなメタルのアルコキシドを触媒としてふったという論文があります。その中で、このランタンのイソプロポキシドが最も活性が高かったという論文がありまして、それをもとに研究をスタートしていますので、我々はランタン以外は試していません。
- 【稲永委員】 その論文はよく存じ上げております。
- それで、これはコメントですが、石原先生もご存じだと思いますが、最近、小笠原諸島ですか、日本領海内の5,000mぐらいの海底に、かなりのレアアースがあって、ランタンは特に埋蔵量が多いし、たくさんありますので、将来的には中国よりもはるかに多い埋蔵量があるということで、コスト面さえうまくいけば、安く大量に手に入るということで、先ほどのヨウ素の問題も似たような問題ですが、将来的には希土類は日本の強みになる可能性があると思いますので、今後もぜひ発展させていただければと思います。
- 【石原教授】 ありがとうございます。ほんとうにそうなるとうれしいのですが、こればかりはわからないので。ですから、現状だけ考えて、どのメタルがレアメタルなのかということに振り回されるのはどうかと思うのですね。昔、10年、20年前ですと、リチウムは全然問題なかったのですが、今はリチウム電池の普及によって、突然、リチウムがレアメタル化してしまっているということがあってありますから、経済等によって、何がレアメタルかも変わって来たりしますので、まあ、レアアースとは違いますが、いいものを取りあえず見つけていこうかなと思っております。
- 【浅岡分科会長】 時間も大幅に遅れていますので、どうしてもコメントをこの時点でというものがなければ、次の全体を通じてのほうに移りたいと思いますので、宜しくお願い致します。

○ 分子研Gの全体を通しての質疑

以下の質疑応答が行われた。

- 【浅岡分科会長】 それでは、分子研グループ全体を通じての質疑を10分予定しておりますので、この中で3研究アイテムを横串にしての意見をお願いします。永島委員お願いします。
- 【永島委員】 魚住 PL のフロー法は非常に期待をしているのですが、このプログラムの中では、ある部

分はフローは入らず、ある部分に関しては達成をされると。その達成した部分の中には、目標を書かれたときにはカートリッジぐらいまでと。あとはフロー系への展開という書き方をされたのですが、今、結果を見て踏み込まれると、これは装置の部分、それに助けられている部分も出てきていると思うのですが、どこまでをこの評価項目にして、今後、どういうところが今後の課題として整理をされるのか。その部分を少し明確にしたほうが良いということです。

あとは石原先生のところまで含めて、将来的に大きな目標ですね。そこに向けて、今のフローにどんどんしていくという方針であれば、個別の反応によって、装置のほうも違ってくると思いますので、そこに関する課題というものを整理するとどうなるのでしょうか。

【魚住PL】 そのことは答えたほうが良いですか。まず、装置に依存しているのも結構あると。最初はカートリッジ化ぐらいというところを設定したけれども、それをもっと進んでいっているようだということで、確かに幸いにもカートリッジ化のみならず、それをフロー系に実際にシステム化できたので、そういう意味ではご評価されると非常にうれしいなどは思っているのですが、実際に装置に助けられている部分はあります。これは当然で、これは実は加速費でまさに導入した、やはり研究を進捗させるために、そういう装置を導入して、どんどん進捗を促すべきだということで、加速したところから、これは導入して、実際にどんどんやっています。

【吉田分科会長代理】 加速財源ですね。

【魚住PL】 はい。研究を加速するような財源を持って、この装置を導入し、オプティマイズして、ここに至っていますので、実際に当初の目標はここまでだったと。でも、加速したおかげで、その上に行けたと。まさにそこを含めて、NEDOのプロジェクトの一部と考えています。

【永島委員】 これは、その評価に含まれるという解釈ですね。

【魚住PL】 そうですね。当初の目標を超えています、ある程度含んでいただいて、僕は構わないと思います。というのは、NEDOの加速財源で、加速したおかげで、当初目標を超えたわけですから、NEDOのおかげということで評価していただければと思います。

【永島委員】 それでしたら、要するに触媒やカートリッジは達成できた部分と、機械が入ったことによる、その工夫によって達成された部分をもう少し明らかにするとわかりやすいのですが。

【魚住PL】 機械はいろいろな機械がある中で、自分に合ったものを選んで買ってきたというのが基本です。

【永島委員】 いや、機械の種類じゃないです。システムを工夫すること、プロセスを工夫することによって達成できたこと。その問題点が明らかになるので、成果見通しのところに何が問題だったかというのが明らかになるということです。

【魚住PL】 わかりました。

【浅岡分科会長】 このグループ全体を通じて、部分的には分子研に確立的基礎知見がない課題については名古屋大に再委託という表現になっていますが、いずれにしても、このグループ全体を通じて、きちんとした統一概念で研究開発に取り組んだという結果が必要だと思うのです。それで、前半の魚住PLのところは、高機能不均一触媒という1つの技術ポイントがあるのですが、石原先生の部分に関して、これは環境調和型化学プロセスの研究開発に相当するのですか。後半部分のテーマ名は。その辺のことで、石原先生ではなくて、魚住PLにプロジェクトリーダーとしての見解をきちんと報告書に示していただきたい。統一して「既存の技術に比べて、これだけ有害物、廃棄物が削減されました」というのを従来プロセスに比べてというポイントで整理していただきたい。なかなか難しい注文をつ

けているようですが、やはりNEDOのプロジェクトとしては、そういう観点のまとめが不可欠ではないかと思えます。

【魚住PL】 先ほども返事したCO₂換算でこれぐらい減ったという数値を出しているのよいかですか。

【浅岡分科会長】 いや、そうではなくて、例えば石原先生の部分をどう表現するかも考えていただきたい。有害物を使わないとか、そういうポイントがあるのではないかと思うのですが。生産効率が上がるとか、選択性が上がるとか、そういう話です。何らかの視点で従来プロセスからどれだけ進歩したか。技術的に進歩したかという点が欲しいですというのが私の意見ですが。

吉田科会長代理をお願いします。

【吉田分科会長代理】 同じことなのですが、今のことが出てくるのは、これが研究開発項目の何番の何々に当たるというのがはっきり書いていないです。プレゼンの資料に。基本計画の研究開発の何番のどこなのですか。

【魚住PL】 研究開発項目のですね。

【吉田分科会長代理】 はい。それがちゃんと書いてあると、これはこの研究ですよ、これはこの研究ですよというのがはっきりわかるかなと思うのです。そうしたら、それに対して目標もはっきりするし。基本計画に基づいてどの研究なのかというのがはっきりできます。

【魚住PL】 事業原簿のⅢ1.1-1とか、Ⅲ1.1-2ではなくてということですね。

【吉田分科会長代理】 そうです。

【魚住PL】 「そうです」というのは、そうだということですか。そうではないということですか。

【吉田分科会長代理】 基本計画に載っているのは、研究開発項目というのは①しかないのですよ。

【魚住PL】 後ろのほうです。

【吉田分科会長代理】 Ⅲとか、そういうのは事業原簿のⅢとか、そういうものです。事業原簿の最後に基本計画が載っています。

【魚住PL】 別添資料ですね。

【吉田分科会長代理】 別添資料の②-2です。その3ページ目に研究開発項目があります。委託事業と。これの①が有害な化学物質を削減できる、または使わない革新的プロセスと。②が廃棄物・副生成物を削減できる革新的な化学プロセス云々と。どちらなのかがはっきりしないのです。

【魚住PL】 それについては、私の発表の途中で常に示していたのですが。

【吉田分科会長代理】 途中ではなくて、まずタイトルに書かないといけません。

【魚住PL】 了解しましたが、NEDOの人と相談します。というのは、私たちがNEDOに提案したときに、これはNEDOが出した研究開発項目は、NEDOの公募要件なのです。

【吉田分科会長代理】 基本計画はずっと続くわけです。

【魚住PL】 わかります。わかりますが、それに対して我々は、例えば酸化反応であれば、この①は、水中で回収しようとか書いていない。②は酸化をやれと書いてある。水中で回収して酸化をやったらどっちなのだということで、両方にまたがるものがありますということ、こうやって常に今日のプレゼンでも、両方にまたがってしまっていることを示している。①と②の両方にまたがってしまうようなものが出てしまうのです。

【吉田分科会長代理】 そのときは、両方に書いてください。

【魚住PL】 わかります。わかりますが、それはNEDOが①と②と公募の前に、NEDOなりのお考えで切り分けられた。ところが実際の現場では、①も②も同時に達成してしまう成果が出てきたとい

うことなので、両方を書けと言われたら、両方書きますが、そういう状況です。

【吉田分科会長代理】 でも、それをしないと、要するに目標と達成がはっきりしないので、これはNEDOのプロジェクトの話だけなので、慣行的な話では全然ないのですが。

【魚住PL】 了解しました。それはNEDOの方と相談します。というのは、実はこれは予行演習をやったのですが、そのときに切り分けをしています、NEDOの方のご指導で、切り分けせずに発表しようということにしたのです。

【吉田分科会長代理】 そうですか。とにかく基本計画に基づいて発表してください。

【魚住PL】 発表の仕方についてはNEDOの指導ですので、NEDOの方に相談します。

【吉田分科会長代理】 そうしてください。

【相楽部長】 一言、一番初めにNEDOで研究開発マネジメントを発表させていただきました19/31ページのところに、今、魚住PLから話がありました基本計画①②と。確かにその点、実はどういう形でプレゼンテーションをしようかというのは議論になった上で、今日のような発表をしたという経緯ですが、東大グループと分子研グループについては、①と②にまたがるような研究内容と成果が出たとしました。

【吉田分科会長代理】 だから、それぞれのところにこれは①ですよ、これは②ですよというのを、それぞれのパーツパーツに分けても書いたらいいわけですよ。そうするとはっきりするのです。恣意的に目標を決めて、それで達成しましたみたいに思われるので、よくありませんよということです。

【浅岡分科会長】 今の20ページの内容は、これは取り組んだ内容ですね。基本計画と個別テーマの関係です。結果ではないです。成果に関して、この表が必要ですよということを指摘されているのだと思います。

【魚住PL】 いや、成果に対してではないですよ。

【浅岡分科会長】 その成果に対してです。

【吉田分科会長代理】 成果も全部、そうですね。それを切り分けて……。

【浅岡分科会長】 基本計画に対して、どのような成果が上がったかという関係がないということ、委員の方がいっていると思います。

【吉田分科会長代理】 わかりにくいですということです。

【浅岡分科会長】 植山委員お願いします。

【植山委員】 念押しですが、魚住PLはCO₂の話をよくされますが、この場合、CO₂は③のエネルギー削減のほうのアイテムであって、我々が知りたいのは、そのプロセスで、従来法はどういう有害物を使っていたとか、有害物が出ていたのかと。廃棄物が出ていたかなのです。それで今度開発されたプロセスは、その差として、どういうクリーンなものであるのかをアピールすればと思うのです。

【魚住PL】 では、パーフルオロカーボンなぜ有害なのですか。それは温暖化があるからでしょう。

【植山委員】 それはあくまでも最終製品ですね。

【魚住PL】 ええ、最終製品です。今、最終製品のことを言われたのかと思って。

【植山委員】 私の認識は、最終製品の議論ではなくて、その前の素材なり、原料なりで、例えば洗浄剤であっても、PFC以外にもいろいろ種類がありまして、PFCから、この界面活性剤に100%置き換わるとは言えないと思うのです。

【魚住PL】 言えないです。そんなことはだれも言っていません。

【植山委員】 私がやってほしいのは、従来は、その界面活性剤がどういう製法で作られていて、今回の

プロセスは、どこがどう違うのかというのを知りたいのです。

【魚住 P L】 従来法がない場合は？

【植山委員】 ない場合は難しいですね。

【浅岡分科会長】 従来法がない場合には、界面活性剤に代わる、フルオロカーボンですか、その害が除けたという表現を。

【魚住 P L】 それを定量的にしると先ほど発言されましたが。

【浅岡分科会長】 いやいや、定量的というのは、そういう有害物をゼロにするわけです、ある意味で。どの程度代替できるか、まあ、ゼロではなくても、半分ぐらいまでは、この技術で、この界面活性剤で洗浄可能ですよという見込みでもいいのです。要するに地球環境に対して有害な物をどの程度削減できたかという表現でもいいです。

【魚住 P L】 はい。そのときに、有害の指標というのは P F C、例えば年間 1 t 使っていたものがなくなりましたと言われても、パーフルオロカーボン（P F C）がどの程度有害だったかとか、どんなに有害だったのかという指標がないと、いくら P F C を削減しましたと言っても意味がないので、温暖化効果ガスとしての効果が C O₂ 換算でどのぐらいだったかを示すのが、そんなにおかしな指標でしょうか。

【植山委員】 いや、そういうわけではなくて、私にわからないのは、P F C というのは、聞いた話によると、F 分としてのフッ素としての効果があって、例えば代替として、N F₃ とかあるのですが、それもまた今度指定されようとしているのですが、そういうものと完全に界面活性剤に置き換わるというのは疑問を持ってまして、もともと、このターゲットとされたものは、世の中にもともとあって、用途が増えたというものではないのですか。私はそういう認識だったのですが。

【魚住 P L】 はい、用途が増えたものです。ただ、用途が増えたときに、従来のものでは用途に満たないのです。汚くて。だから、クライアントが界面活性剤メーカーに、高純度な製品を納品してほしいと言っているわけです。しかし、高純度なものをつくる技術がゼロなのです。だから、従来法では、そもそもその純度のものがないので、従来法とどうですかと言われても、その従来法は汚いものをつくっていたので、それときれいなものをつくるものを比べて、おまえのところは効率はあまり上がっていないぞと言われても、これは困ってしまう。

【岩田主研】 その両面なのですね。G S C のほうは、いわゆるプロセスイノベーションとマテリアルイノベーションとあって、製品のほうは、今、パーフルオロカーボンの C O₂ 削減効果のほうは、できた製品がどれだけ貢献するかということなのですが、先ほどから委員の方たちが言われているのは、このプロジェクトの第一の目的は、コンベンショナルな製造プロセスに比べて、この革新プロセスが、どれだけ廃棄物とか、有害物を使わないとか、出さないとかとなっていることなので。

【魚住 P L】 だから、従来法がない場合はどうするのと。

【岩田主研】 それで、その場合には、例えば類似の洗浄剤みたいなものが、従来、いろいろな金属を出したりしているわけです。そういったものと近似的に比べるのもあるでしょうし。

【魚住 P L】 いや、類似の機能ということで、類似のとなったら、P F C と比べましようとなるわけですね。

【岩田主研】 いや、それは最終製品ですよ。カルボン酸型洗浄剤と比べることです。

【魚住 P L】 デバイスに使えるレベルのカルボン酸型洗浄剤なら二東三文でできます。

【岩田主研】 そういうものと比べるということになると思います。

- 【魚住 P L】 それはボロ負けです。使えないプロセスですよ、こんなものは。評価はゼロですよ。製品の精度が違うのだから。
- 【浅岡分科会長】 だから、P F C と比べることになります。P F C の社会的使用量を減らすことに成功できたという表現で十分ではないですか。その P F C をわざわざ C O₂ に換算しなくても、一応、有害物の範囲として定義して、その有効な代替物を開発できたというのは十分社会に理解される成果だと私は思いますが。
- 【魚住 P L】 定量化しなくていいと。定性的な表現でいいと。
- 【浅岡分科会長】 どれぐらいの P F C の使用量がこれに変わるか。ないしは、こういうものの洗浄で、半導体工業とか電子工業が発展するとか、そういう表現でも構わないのではないかと思いますね。
- 【魚住 P L】 わかりました。
- 【植山委員】 ですから、そこのところを、私は基本的には、P F C はドライ洗浄で、界面活性剤はウェット洗浄だと。洗浄の仕方が違うと思っていたのです。もし私の認識が違っていたら、その辺を明示していただければと思います。
- 【魚住 P L】 いや、ドライとウェットの差はありますが、それがなぜカルボン酸型アニオン性界面活性剤水溶液で置き換えられる可能性があるのかは、それはデバイス屋さんに聞かないとわかりません。彼らは絶対教えてくれない、そのノウハウを。どうやって使うの？ とか、どれぐらいのスペックが要るの？ と言っても、とりあえず高純度のものを下さいと言って、ほんとうに結構言わない、彼らは。その秘密のノウハウは。
- 【浅岡分科会長】 その辺が実用化の見込みだと思うのです。それは何とかうまく表現しないと、これ自身の評価の 4 項目目が、なかなか評価しづらいのではないかとというのが我々の意見なのです。
- 【魚住 P L】 4 項目目というと、実用化への見込みですか。
- 【浅岡分科会長】 事業化ではなくて、実用化への可能性について、その点のある程度のレベルで示していただかないと難しいのではないかと考えています。
- 【魚住 P L】 了解しました。
- 【三上主幹】 あと、先ほどもちょっと基本計画と各プレゼン資料との関係については、我々事務局でまた調整をしまして、提示させていただく形にさせていただきます。
- 【魚住 P L】 事務局とだれが調整するのですか？ 私がですか？
- 【三上主幹】 我々がです。
- 【浅岡分科会長】 よろしいですか。では、本日の議事進行、大幅に遅れましたが、終了したいと思います。

< 2日目 > 9月21日(金)

【非公開セッション】

非公開資料取り扱いの説明

6.2. 東大G：革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発

6.2.1. アクア触媒によるアセトアルデヒド製造プラント排水中の希薄酢酸回収技術（東京大+昭和電工）

6.2.2. 固定化触媒を活用する革新的水素化反応システム開発（東京大+日光ケミカルズ）

6.2.3. グリーンプロセスのための高分子固定化金属触媒試薬の開発（東京大+和光純薬工業）

○ 東大Gの全体を通しての質疑

6.3. 産総研G：革新的酸化プロセス基盤技術開発

6.3.1. 過酸化水素を用いた反応系の基礎研究（産総研）

6.3.2. 多官能性基質の酸化技術開発（昭和電工）

6.3.3. 高分子量基質の酸化技術開発（電気化学）

6.3.4. 易加水分解性基質の酸化技術開発（荒川化学）

6.3.5. 難酸化性基質の酸化技術開発（JNC）

○ 産総研Gの全体を通しての質疑

7. 全体を通しての質疑

(非公開のため省略)

【公開セッション】

8. まとめ・講評

各委員から、以下の講評があった。

【三宅委員】 今回たくさんの報告のなかで、個別の報告については、非常にいい結果が得られていると思いました。ユニークなデータもあったと思います。

今回のターゲットにした化合物、製品というのは、どちらかというと高付加価値のファインケミカルズとか、スペシャリティ、あるいはスーパーファインとか、そんな表現もあったかもしれませんが、そういう化合物が取り上げていたので、過酸化水素とかを使っても十分競争できる検討が多かったかなと少し感じました。

それから、反応系としては、これはすごく強く感じたのですけれども、水と油の二相系をすごくうまく利用していると思いました。触媒を油のほうに取り込んで、そちらのほうで働かせるというものが大分あったと思うのですけれども、その辺の、従来ですと、むしろ水系だけとか、あるいは有機系、均一系を目指すようなところを、二相系を上手に利用されたという印象を持ちました。

それから、成果に係わることですけれども、事業化ではなくて実用化ということで私もよくわからなかったのですけれども、その技術で何とか物ができるのが実用化というのであればとすると、事業化とは場合によったら随分違うのかなというふうな、その辺は私自身少し割り切れていないところがあるんです。実用化できるかどうかという評価をしなくてはいけないのですけれども、全体的に思ったのは、比較対象とするような技術、その辺の記述が正確なのかなというのが少し良く分かりませんでした。

今、どちらかというとは基盤技術を作るということですので、なかなかプロセスの評価も難しいのだろうというふうには思ったのですけれども、何かあまりにも素晴らしい結果ばかり聞かせていただいたような気はするのですけれども、それがどこまで本当に捉えていいのかなというのは、私自身判断しにくいところがあったということです。

全体としては、皆さん非常に良い結果を出されたというのが私の評価です。

【永島委員】 講評といたしますか、まとめという意味でいいますと、全て素晴らしい基盤的な研究成果を持っておられて、それを展開しようとしていられると。そこに国の支援が必要である。これはそのまますぐに企業さんが受け入れられるものではなくて、ぜひ国のほうでバックアップをして大きな技術に育てようという観点では、レベルの違いはあったと思いますが、いいシーズを持たれて、よい努力をされているということに関しては、これは疑うことはないと思います。

ただ、先ほどの三宅委員の発言のように、事業化という具体的なターゲットがありますので、具体的なターゲットの成果があれば良いけれども、今回はあえて実用化の見通しというところで評価結果を書くということがございます。私は産総研のときに発言したのですけれども、このレベルであるとする、やはり普遍性、つまり、これからのこの成果の将来展開の部分をしっかり見ていく。これは事後評価か、将来の追跡評価もあるわけですから、そここのところでぜひ見ていくべきではないかと思います。

また、ある意味で出来るだけ社会に公表して、ここまでのことでこれだけのことがわかったので、これをぜひ波及効果としてみんな利用してほしいと、ここまで含めての評価をする工夫が必要なのかなと私は感じました。

【薩摩委員】 個々の研究につきましては、本当に皆さんよく頑張られて、少なくとも当初の目標が概ね達成されて、更に実用化の見通しがついた研究が幾つかあり、達成度はかなり高いと思います。先ほども言われましたように、今後の実用化の期待が大きいものについては、ぜひ、NEDOの支援をお願いします。

先ほど、基盤技術が本当にできたかとの話がありました。確かに特許の絡みで技術の公開が難しいのであれば、基盤技術としての成果の公表はやりにくいかもしれません。例えばこのプロジェクトからグリーン・サステイナブルケミカルプロセスの成功例が幾つか出て、今後こういった方向が国際競争力を高める上でも良いですよといういくつかのサクセスストーリーを、出していただくことが、また次のプロセスが出てくるモチベーションを高めるものと思います。そのような形でも、波及効果をより一層高めることに繋がるのではないかと思います。

【植山委員】 私も三人の委員さんと同じで、かなり素晴らしい研究内容もたくさんあって、非常に有意義だったと思っております。逆に言いますと、このままで終わってしまうのは非常にもったいない。要するに、各企業の方でということもなかなか難しいようなところもあるかと思っておりますので、今後、やはりNEDOといたしますか、国のほうで、新たな仕組みづくりというか、もう一度こういうプロジェクトを立ち上げるとか、そういうことが必要ではないかと思いました。

世界に目を向けますと、今、カーボンフットプリントとあって、製品に対してCO₂どれだけというのは、経産省もいろいろ試行して、試行事業とかをやって、皆さんよくご存じだと思うのですけれども、今、さらに進んで、環境フットプリントというのがヨーロッパを中心にして動きつつあります。それにウォルマートとかも乗っかって、今後、製品をつくるのに、CO₂だけじゃなくて、廃棄物とか有害物質とかがこの製品をつくるのにどれだけ乗っかっているというのが表示される方向に、すぐというわけではないと思うのですけれども、そういう方向にあります。

そういう意味からも、各企業の意識づけというか、やっぱりまだまだ環境に目を向けて、そちらの方面に投資していく、研究開発していくというのは、企業も今、体力のないところもありますので、なかなか難しいところもあるので、やっぱり国を挙げてそういう意識づくりというか、モチベーションを上げていけたらと思いました。

これから我々、評価していくわけですがけれども、今、プロジェクトのいろいろの説明の中で、先ほども話が出たかも知れないですがけれども、初日も言いましたけれども、目標というのが、当初の目標はあったかもしれないですがけれども、途中で目標の積み上げとか、逆に緩くなったりとか、個々で目標が変わっていて、そういう説明だったので、最終目標の説明が多かったので、横にらみで全てを評価するときになかなか評価しづらいところがあります。やはり整理の仕方として、当初はこうであったけれども、こういうふうに変わっていったら、最終的に成果はこうでしたというような整理の仕方がほしかったというか、今後そういうふうにしてほしいと思います。

【稲永委員】 このプロジェクトはGSCとなっておりますけれども、テクノロジーも入って産官学でうまく協力できて、かなりのところまで達成されたプロジェクトであったと感じました。

ですが、最初に言いましたけれども、これは方法論というか、触媒の開発だったり、プロセスですね。それは必ずしもターゲットが決まらないことには、リファインといいますか、ポリッシュできないという部分がどうしてもありますので、どうしても具体的なターゲットが非常に大事で、しかもそのターゲットがインパクトのある、非常に大きな、ああ、こんなことができるという、それがGSCをやることによってこれだけ達成できたといえるような何か目玉になるターゲット化合物が欲しいと思いました。今からの研究で出てくるかも知れませんが、今後に向けた評価としては、何かドカンと目玉になるターゲットを見つけた方法論の開発が重要に思いました。どうしても方法論というのは演繹的ですので分散しがちですがけれども、最終的にまとめた形で大きく評価できるような化合物ができると、このプロジェクトの意味合いがものすごく大きくなると思いました。

それからもう1つは、技術検討委員会についてです。テクノロジーの重要性は岩田主研のほうがかさき説明されたのでおわかりになっているのですが、我々アカデミアから見てこれはおもしろいと思っいろいろなことを言いますが、実際それは役に立つのかという話になったときに、どうしてもテクノロジーが大事になります。テクノロジーのアドバイザーという意味合いで、技術検討委員会というのがどうもあるのではないかと初日の話を聞いていたのですが、その役割をもっと大きくされたら良いのではないかと印象を受けました。

それから、3点目です。今回は固体触媒というのが非常に多くて、不均一触媒系だったので、将来的には均一系触媒のほうがおそらく効率は良いはずなので、均一系触媒で、しかもリサイクルできるような、そういうシステムができるとよいと思いました。その際の問題点は、有機溶媒の削減です。これは途中でも少し出ましたが、有機溶媒の大幅削減というのは今後ものすごく大きな課題の1つとしてクローズアップさらにされてくるのではないかなということを感じました。

【吉田分科会長代理】 このプロジェクトというのは、基本的にシーズから出発したプロジェクトであるということです。それでいい面も、逆によくはない面も出ていて、当然そう思います。でも、シーズとなった技術は非常にすばらしい技術で、そこから展開された技術も非常にすばらしいと思います。そういう意味では、アカデミアから見ると非常におもしろくてよいです。今もたくさんの委員が発言されたのですが、実用化という観点で、やはり工学的にまだまだ検討すべき課題がたくさんある。それでも、やはり実用化できそうな、ある意味で事業化まで行くなと思われる技術もたくさんありました。

グリーン・サステイナブル・ケミストリーなので、私もよく授業で言っているのですが、実験室で終わったら何もならない、やはり実際に社会に使われないとしょうがないと。そのためには、実際、事業化まで行かないといけないですが、特にこのプロジェクトでは、どちらかという、ファインケミカルズ、医薬とかそういった、一つ一つのプロセスは規模の小さいプロセスが多かったですね。それでも、ファインケミカル全体をまとめれば50%以上の廃棄物はそこから出るという話だったので大事なのですが、やはり数を増やすか、あるいはもう少し大きなプロセスに持っていくか、そういったことが必要かと思えます。そういう意味で、このプロジェクトに参加した企業以外の企業にこれをどう広げていくかというのが、多分NEDOとして、あるいは国としての課題かと思えます。

それから、これはアカデミアの問題もあるでしょうけれども、やはり実用化をやる場合にはどうしても工学が大事になってくるので、例えば化学ですから化学工学が大事になる。今回のアカデミアの人はみんな、合成化学。私も合成化学ですが、合成化学者と化学工学者との連携をこれからどうやっていくか。それはアカデミアの分野でもそうだし、それ以外の分野でもそうかもしれないですが、それに対してNEDOがどうコントリビューションできるのかということをもし考えていただければ有り難いです。これは我々も考えなければいけないことです。

それから、せっかくすばらしい成果も出ているので、それを社会にどう発信するかということのもやっぱり大事な問題だと思うのです。今、社会的に一般的に見れば、化学に対して必ずしもみんな、バックアップしよう、日本の化学はすばらしいとは思っていない面もあると思う。ですから、日本の化学の力、化学産業の力をどう社会にアピールするか。それによって、これから若い人たちをどう引きつけるか。若い人たちに日本の将来を担ってもらわなければいけないので、せっかく成果が出ているので、社会に対する発信をNEDOとしても考えたらと思えます。

【浅岡分科会長】 最後に私、分科会長として、取りまとめの講評を、私自身の意見も入れてさせていただきたいと思えます。

全体として、各委員がおっしゃったように、個別の成果は非常に上がっていると思えます。ただし、これ自身が、結局、環境と化学物質という関係において、もう少しアピールできる成果として示したほうが良いと思えます。そういう面では非常に成果が上がっていると思えます。

要するに、化学物質というか、有害な化学物質の使用量を減らす技術も開発されているし、使わない技術、廃棄物を低減する、反応の選択性を上げて副生物を削減できる技術、それが革新的かどうかというのは部分的にはちょっと疑問符がつくのですけれども、確実にそういう方向性で成果が上がっていると思えます。そういうことでは、そういう点できちんとこのプロジェクトの成果がまとめられるような状態だと思えますということが私の取りまとめです。

あとは、今後どうしていくかという方向性に関して、どなたかの委員の発言にもありましたけれども、そこを明確にやっぱり事後評価として方向性が出たという方向でまとめられるのがよいのではないかと思います。ある程度の方向性があるので、プレゼンテーションの問題のような気がします。

それともう1つ、講評とちょっと外れるかもしれませんが、これに参加されなかった日本の化学企業がいっぱいいます。それとの関係において、この成果をどのように国のプロジェクトの成果としてアピールしていくかというか、波及させていくかということも考えられたほうが良いのではないかと、その点がちょっと弱いような気がします。それがこのプロジェクトの成果に対する私の大体の感想及び総合的な評価になります。

それでは、私のまとめた意見に対して部分的に何か、個別の委員の方で追加意見等があればお聞きし

ますけれども、特にございませんか。

以上の講評でございますけれども、推進部長あるいはプロジェクトのリーダーから最後に何か一言等ございましたら、お願いします。

【島田 PL】 いろいろなアドバイスはぜひこれから生かしていきたいと思います。なかなかこのプロジェクトは、4年間ということもありまして、確かに基盤技術、その辺を広げていって、それを大きな成果としたいという思いは持っていたのですが、若干言い訳みとなりますが、やはり二兎を追うと一兎も得られないのではないかと、そういう心配を、今から思えばし過ぎていたのかなという思いはあります。

やはりどうしても実用化、あと、事業化も、今回評価の対象ではないことでしたが、やはり事業化というのも技術検討委員会等の場で強く言われていてということもありまして、そちらのほうへ行ってちょっとやはり、特に取りまとめ方の面でうまくいかなかったことがあるかと思えます。ただ、佐藤共同研究者がちょっと申しましたように、産総研ではその辺は蓄積を十分していますので、これをぜひ幅広く日本の、このプロジェクトに参加しない企業という言葉がありましたけれども、そういう企業にも使えるようにしたいと思えます。

【相楽部長】 それでは、私からも一言。2週にわたりましての非常に長時間の審議、誠にありがとうございました。非常に有益なご助言、プロジェクトの評価のみならず、まとめ方についても多くの示唆をいただいたと思っております。

それで、議論に出ました中で、NEDOとしての役割から考えたときに、国、その実施機関であるNEDOが課題を設定して、それに対して非常によいシーズを実施者の方々から提案いただいて、またそのシーズをどのように社会に還元していくかというプロセスにおいて、NEDOが引き続き力を発揮していければと考えております。

それから、化学分野につきましては、日本のノーベル賞の受賞者のほとんどは化学分野ということで、産業界においても非常に重要な分野だと我々も思っておりますが、やっぱり一般の人になかなか認知しにくい分野であるかなと。特に今回対象になっていたファインケミカルズ分野とかは、なかなか実感しにくいだけでも、実は心臓部分というか、そこを握っている部分だということで、この部分につきましては、化学の分野については、国としても、NEDOとしても、引き続きしっかり産業競争力、それから、アカデミアでのシーズの育成といったところに気を配って頑張っていきたいところだというふうに我々も認識しております。

最後に、委員方の意見の中で、他への波及効果というところは我々も非常に重要視をしています。委員からの指摘にもありましたけれども、NEDOの1つの良いところに、プロジェクトが終わった後も追跡調査といった形で、その技術が世の中にどういうふうに普及しているのかというのを把握した上で、いろいろなパンフレットとか、ホームページ公表とか、もしくは審議会とか、一般向けのシンポジウムでPRを行っていくことも可能です。

このプロジェクトで出てきた成果につきましては、2方面で、まず1つは特許化したということで、企業にとっては、参加企業は実現してほしい。それから、基盤部分については、今、島田先生からも話がありましたけれども、アカデミアの部分に基盤の部分が残っているということもありますので、そういったところで次の企業の参画をこの技術シーズに対しては促していける余地も残っているのではないかと考えております。

いずれにしても、この分野、それから、このプロジェクトの今後という意味で、NEDOとして

もしっかり支援をして、普及を図っていきたいと考えております。

【浅岡分科会長】 実施者側、ほかに発言はないですか、
では、これで分科会を終了させていただきます。

9.今後の予定、その他

10.閉会

配布資料

- 資料 1-1 研究評価委員会分科会の設置について
- 資料 1-2 N E D O 技術委員・技術委員会等規程
- 資料 2-1 研究評価委員会分科会の公開について（案）
- 資料 2-2 研究評価委員会関係の公開について
- 資料 2-3 研究評価委員会分科会における秘密情報の守秘について
- 資料 2-4 研究評価委員会分科会における非公開資料の取り扱いについて
- 資料 3-1 N E D O における研究評価について
- 資料 3-2 技術評価実施規程
- 資料 3-3 評価項目・評価基準
- 資料 3-4 評点法の実施について（案）
- 資料 3-5 評価コメント及び評点票（案）
- 資料 4 評価報告書の構成について（案）
- 資料 5-1 事業の位置付け・必要性／研究開発マネジメント
- 資料 5-2-1 革新的アクア・固定化触媒プロセス技術開発（東大G）
- 資料 5-2-2 高機能不均一触媒の開発と環境調和型化学プロセスの研究開発（分子研G）
- 資料 5-2-3 革新的酸化プロセス基盤技術開発（産総研G）
- 資料 5-3 事業原簿（公開）
- 資料 5-4 事業原簿（非公開）
- 資料 6-1-1 プロジェクトの詳細説明資料（公開）錯体触媒を利用した水中不均一条件での精密化学合成法の研究開発
- 資料 6-1-2 プロジェクトの詳細説明資料（公開）ナノ触媒を利用した水中不均一条件での酸素酸化反応の開発研究
- 資料 6-1-3 プロジェクトの詳細説明資料（公開）エステル・アミド類の高効率・高選択的合成法の開発研究
- 資料 6-2-1 プロジェクトの詳細説明資料（非公開）アクア触媒によるアセトアルデヒド製造プラント排水中の希薄酢酸回収技術
- 資料 6-2-2 プロジェクトの詳細説明資料（非公開）固定化触媒を活用する革新的水素化反応システム開発
- 資料 6-2-3 プロジェクトの詳細説明資料（非公開）グリーンプロセスのための高分子固定化金属触媒試薬の開発
- 資料 6-3-1 プロジェクトの詳細説明資料（非公開）過酸化水素を用いた反応系の基礎研究
- 資料 6-3-2 プロジェクトの詳細説明資料（非公開）多官能性基質の酸化技術開発
- 資料 6-3-3 プロジェクトの詳細説明資料（非公開）高分子量基質の酸化技術開発
- 資料 6-3-4 プロジェクトの詳細説明資料（非公開）易加水分解性基質の酸化技術開発
- 資料 6-3-5 プロジェクトの詳細説明資料（非公開）難酸化性基質の酸化技術開発
- 資料 7 今後の予定

以上

参考資料4 評価結果の反映について

評価結果を受けた今後の取り組み方針について

評価における主な今後の提言	今後の取り組み方針
<p>○本事業では産業基盤技術開発に重点がおかれたので、その後の実用化・事業化をめざした具体的なフォローアップが重要と考えられる。</p> <p>○事業参画企業だけでなく他の多くの企業に対しても NEDO が積極的にコンタクトをとり、本事業の成果の活用を進めて頂くことを期待する。</p> <p>○実用化イメージ・出口イメージの設定自体が小さ過ぎる。もっとインパクトのある大物を具体的に狙うべきではないか。ハードルは高く成功率は低くなるが、年間数千トンあるいはそれ以上の製造量のあるバルク製品あるいはセミバルク製品の環境に優しい革新的製造技術の開発にも取り組んでほしい。</p> <p>○環境調和型の触媒や合成方法論の開発は、それを具体的に重要化合物の合成に結びつけてはじめて意義のあるものになる。見出された方法論が何に使えるかという演繹的なアプローチだけでなく、これができたら凄いという社会的意義のあるアピール性の強い重要化合物を選んで、そのための具体的方法論開発をコーディネートする帰納的方法も検討してほしい。</p>	<p>○実用化・事業化をめざして継続研究を実施し、フォローアップを行っており、引き続きフォローアップに努めていく。</p> <p>○プロジェクトに参加したアカデミア・企業において、引き続き学会、プレスリリースなどで成果を発信し、川下企業等への成果の活用を促していきたい。</p> <p>○プロジェクトに参加した企業において、順次横展開を検討しており、年間1万トン規模の製品も視野にある。また、後継プロジェクトでは、大量生産を狙った製造装置の開発を行う予定である。 バルク製品としては、CO2削減技術を対象としたプロジェクト「資源生産性を向上できる革新的プロセス及び化学品の開発」の中で実施中である。</p> <p>○研究開発を進めるにあたっては、演繹的アプローチ、帰納的アプローチ双方とも有効な手法であると認識しており、今後、新規プロジェクトの立案においては、双方の方法を念頭に置き、最善の方法を検討していきたい。</p>

本研究評価委員会報告は、独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）評価部が委員会の事務局として編集しています。

平成25年1月

NEDO 評価部

部長 竹下 満

主幹 三上 強

担当 加藤 芳範

* 研究評価委員会に関する情報は NEDO のホームページに掲載しています。

(http://www.nedo.go.jp/introducing/iinkai/kenkyuu_index.html)

〒212-8554 神奈川県川崎市幸区大宮町1310番地

ミュージア川崎セントラルタワー20F

TEL 044-520-5161 FAX 044-520-5162