

「触媒を用いる革新的ナフサ分解プロセス
基盤技術開発プロジェクト」
(中間評価) 第1回分科会
資料5-1

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

「触媒を用いる革新的ナフサ接触分解プロセス基盤技
術開発プロジェクト」

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 プロジェクト用語集

I. 事業の位置付け・必要性について

1. NEDOの関与の必要性・制度への適合性……………I-1
 - 1.1 NEDOが関与することの意義……………I-1
 - 1.2 実施の効果(費用対効果)……………I-3
2. 事業の背景・目的・位置づけ……………I-4

II. 研究開発マネジメントについて

1. 事業の目標……………II-1
2. 事業の計画内容……………II-2
 - 2.1 研究開発の内容……………II-2
 - 2.2 研究開発の実施体制……………II-4
 - 2.3 研究の運営管理……………II-8
 - 2.4 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……………II-9
3. 情勢変化への対応……………II-10
4. 評価に関する事項……………II-10

III. 研究開発成果について

1. 事業全体の成果……………III-1
2. 研究開発項目毎の成果……………III-7

IV. 実用化の見通しについて

1. 成果の意義……………IV-1
2. 成果の普及の見通し……………IV-1
3. 成果の実用化の見込み……………IV-2

(添付資料)

- ・添1 イノベーションプログラム基本計画
- ・添2 プロジェクト基本計画
- ・添3 技術戦略マップ(分野別技術ロードマップ)
- ・添4 事前評価関連資料(添4. 1事前評価書、添4. 2パブリックコメント募集の結果)
- ・添5 特許、論文、外部発表等リスト

概要

最終更新日

2011年6月18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/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/高性能ゼオライト触媒を用いる革新的ナフサ分解プロセスの開発	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 吉田 宏 2010.04-現在 主幹研究員 江口 弘一 2009.08-2010.04 主査 新井 唯 2009.04-現在 主任研究員 岩田 寛治 2010.04-現在		
0. 事業の概要	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）の研究開発を行う。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持続可能な産業構造への貢献が期待できる。本事業では、この中からiii) 資源生産性を向上できる革新的化学プロセスの開発に位置し、エネルギー多消費であった石油化学プラントの大幅な省資源化・省エネルギー化を可能とする技術を開発する。		
I. 事業の位置付け・必要性について	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(セミパルク、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を期待できる。 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。		
II. 研究開発マネジメントについて			
事業の目標	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。 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。		

事業の計画内容	主な実施事項		H21fy	H22fy	H23fy	
	高性能触媒による高収率、高選択プロセスの開発		←			→
	高性能触媒による実証規模プロセスに関する設計・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	総額
	一般会計		509,999千円	349,999千円		980,998千円
	特別会計 (電源・需給の別)				358,499千円	358,499千円
	加速予算 (成果普及費を含む)			121,000千円		
	総予算額		509,999千円	470,999千円	358,499千円	1,339,497千円
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		国立大学法人東京工業大学資源化学研究所 教授 辰巳 敬			
	委託先(*委託先が管理法人の場合は参加企業数および参加企業名も記載)		触媒技術研究組合(参加4社) (独)産業技術総合研究所 (国)東京工業大学 (国)北海道大学 (国)横浜国立大学			
情勢変化への対応	平成22年6月：実用化時の課題検討着手のため、加速によりセミベンチ装置の導入 平成22年：実用化検討開始に併せて、技術検討委員の拡充を行った					
評価に関する事項	事前評価	平成20年度実施 担当部 環境技術開発部及びナノテクノロジー・材料技術開発部				
Ⅲ. 研究開発成果について	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【100%達成】又は、エチレン、プロピレンへの収率47%以上【100%達成】とする。 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：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。【100%達成、さらに1kgのセミベンチを導入済み。】					
	投稿論文	「査読付き」1件、「その他」0件				
	特許	「出願済」3件、「登録」0件、「実施」0件(うち国際出願3件)				
	その他の外部発表 (プレス発表等)	44件				
Ⅳ. 実用化の見通しについて	基本的な考え方は、現行熱分解プラント改造での競争力強化及び省エネルギー化を目指している。そのため、現在炉自体が寿命近くになってきている旧型分解炉のスクラップ&ビルトによるリフォーマー型接触分解炉の建設を行う。工程イメージは、本成果をベンチスケールで確認し、その後パイロット又はセミコマmercial設備で確認・検証を行う。					
Ⅴ. 基本計画に関する事項	作成時期	21年3月 作成				
	変更履歴	21年12月 改訂(「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」)				
		22年8月 改訂(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) 23年1月 改訂(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)				

「触媒を用いる革新的ナフサ分解プロセス基盤技術開発」 事業原簿 用語集

あ行	
圧力損失	固定層型の触媒反応プロセスにおいて、原料や生成物が反応管内を流れる際に、触媒層前後で圧力差が生じる現象。原料や生成物と触媒粒子との間に摩擦抵抗が生じることにより起こる。
アルミナ源	ゼオライトは SiO_2 (シリカ) と Al_2O_3 (アルミナ) から構成されており、アルミナ源とは Al_2O_3 (アルミナ) の原料となる物質を示す
アレニウスプロット	速度定数を温度の逆数に対しプロットしたもの
イオン交換能	固体が接触している溶液中のイオンを取り込み、その固体が有するイオンを放出する能力
オートクレーブ	ゼオライト合成に用いる、ステンレス製の耐圧容器
か行	
界面活性剤	分子内に水になじみやすい部分と水になじみにくい部分の両方をもつ有機物の総称で、洗剤の主成分としても用いられている
外表面積	触媒粒子における粒子外部表面の面積。ゼオライトのような多孔質体の場合、細孔内部の表面と、粒子外部の表面では活性等が異なる場合があることから、区別して扱う。
外表面シリル化	ゼオライト粒子の外表面酸点を選択的にシリル化剤により被覆する操作。
拡散	物質が濃度の高い所から低い所へと移動して一様な濃度となろうとすること。(たとえば、水の中にインクを一滴入れたとき、インクは時間をかけて水の中を拡散(移動)し、薄い均一な濃度の液になる。)
拡散距離	分子が拡散する距離
活性	反応の起こりやすさ
活性化エネルギー	化学反応が進行するために必要となるエネルギー
含浸法	触媒の上に金属酸化物などを担持する方法
吸着ポテンシャル	気体成分が固体表面に吸着する際のエネルギー変化量
吸着空間容積	吸着した分子がすべて液体の状態で存在していると仮定したときのその液体の容積
吸着平衡	固体への分子の吸着(分子が固体の表面に取り込まれること)と脱離(分子が固体の表面から離れること)の速さが等しくなった状態。見かけ上、吸着が生じなくなった状態。
吸着平衡圧	吸着平衡状態時の、固体に接する気体の圧力
吸着等温線	温度を固定して、固体の周囲の吸着物質の圧力(または濃度)を変化させたときの、固体に吸着した吸着物質の量をプロットしたもの
キャラクタリゼーション	調製した触媒の物理的・化学的性状を明らかにすること。触媒の表面積等の物性値、構造や化学組成、酸量等の化学的性質などの解析結果は、触媒反応の活性と対比され、新触媒の設計に反映される。
形状選択性	細孔サイズと反応物、生成物の分子サイズとの関係から生成物

	の選択性が影響を受けること(細孔の中では、細孔の空間よりも大きく移動できない分子は生成されない)
結晶内拡散係数	ゼオライト結晶が持っている細孔の中で分子が移動する(拡散)時の、分子1つ1つの動きやすさ
固体酸性	固体物質(ゼオライトなど)が酸の性質を有していること(この酸が反応場となる)
構造規定剤	ゼオライトを合成する際に、その結晶構造を形作るために必要な材料。
コーキング	分解反応により、触媒上に炭素質の固体(コーク)が付着すること。触媒の活性劣化(反応が進行しにくくなる)の原因となる。
固定床型反応器	固体触媒を装置内に固定した反応器で工業反応器として最も広く使用される。
さ行	
細孔	ゼオライトなどの触媒には、ナフサに含まれる成分の分子の大きさと同程度の空間が連続的に存在しており、その小さな空間を細孔という。
再生	反応への使用に伴い性能が低下した触媒について、触媒性能を回復させることまたは触媒性能を回復させるための処理。
酸点	触媒上の酸性を有するサイト。分解反応の活性点(反応が生じるサイト)となる。
酸性質	ゼオライトに代表されるアルミノシリケートには、固体表面上にプロトン(H ⁺)を放出可能な架橋型水酸基が存在する。このプロトンが放出される場合、ブレンステッド酸性質が発現する。高温で処理すると水分子が脱離し、ルイス酸性質を示すようになることがある。また、骨格外アルミ種によるルイス酸性質の発現もある。酸の種類を見分けるには赤外分光法が有用である。また、酸量・酸強度を見積もる方法として、アンモニア昇温脱離法が知られている。
寿命(触媒)	触媒を用いた反応プロセスにおいて、触媒がある一定の水準以上の性能を連続的に保持する期間。「(触媒)ライフ」とも呼ぶ。また、反応と再生を繰返し行うことにより触媒を長期間使用するが、徐々に再生で触媒性能が回復しにくくなるのが一般的である。この長期的な触媒性能の低下により、触媒性能が一定の水準以下まで落ち込むまでの期間を触媒の寿命またはライフと呼ぶ場合もある。
触媒有効係数	細孔を持つ触媒の内部がどの程度有効に使用されているかを示す指標。この値が1に近づくほど触媒中の細孔がすべて有効に利用されていることを示す。ゼオライトのように反応する場が、触媒の細孔の中にある場合、触媒の細孔がすべて有効に使われることが望ましい
充填層	固体(触媒)を充填して形成する層
シリカアルミナ	シリカ(SiO ₂)とアルミナ(Al ₂ O ₃)から構成される固体。ゼオライトとは異なり特定の骨格構造は持たない
シリカ源	ゼオライトは SiO ₂ (シリカ)と Al ₂ O ₃ (アルミナ)から構成されており、シリカ源とは SiO ₂ (シリカ)の原料を示す

シミュレーション	コンピュータを用い、模擬的に実験を行うこと
Thiele 数	触媒粒子内における反応速度と拡散速度の比。
スチーミング	触媒を高温の加熱水蒸気(600°C以上が多い)で処理すること。ゼオライトの場合、骨格等からアルミニウム原子が抜けて構造が安定化されるため、触媒の前処理として行われることも多い。
水熱合成	高温高圧の熱水の存在下で固体物質を合成すること
ゼオライト	ゼオライトは SiO_2 (シリカ)と Al_2O_3 (アルミナ)で構成された結晶性(決まった形を持っている)の多孔質固体である(ナフサに含まれる n-ヘキサンなどの分子の大きさと同じ大きさの細孔が連続的に存在する)。
接触分解	触媒を用いて反応物を加熱分解すること
成形	触媒等の粉末を固め、一定の大きさおよび形状を持つ塊とすること。錠剤状、円柱状、球状等、様々な形状がある。成形により得られる塊を「成形体」、成形された触媒を「成形触媒」と呼ぶ。「成型」とも表記される。
た行	
脱アルミニウム	ゼオライトはシリコンとアルミニウムの複合酸化物であるが、その骨格構造から、アルミニウムが抜ける現象。水蒸気処理や各種の反応中に起こり、ゼオライト自身の構造の安定性や酸量に影響を与える。
滞留時間	物質が特定の空間に留まる時間(たとえば、100ml の空間に物質が 1ml/分の速さで流通されているとき、物質が 100ml の空間に留まる時間は 100 分となる)
脱水素反応	反応物中の特定の箇所から水素を引き抜く反応
炭素収率	原料中の炭素量に対する、ある生成物へと変換された炭素量の割合(C-mol%)。
窒素吸着等温線	固体への窒素の吸着量と固体近傍の窒素圧力の関係。一般的には-196°Cで測定が行われ、固体の表面積などの解析に用いられる。
逐次反応	量論式 $A \rightarrow R \rightarrow S$ で表わされるように、1 段目の反応($A \rightarrow R$)の生成物である R が、次の反応($R \rightarrow S$)の反応物となり次々に反応が進行すること
中間体生成物	逐次反応の中間の生成物。 $A \rightarrow R \rightarrow S$ の逐次反応の場合、R が中間体生成物である。
テンプレート	有機構造規定剤を示す
低密度反応場	ゼオライト中の酸点と酸点の距離が長い反応場
低級オレフィン	主に、エチレン、プロピレン、ブテン類を示す
定容法	拡散係数測定法の1つ。ある圧力(または濃度)の吸着質(一般的には、有機物あるいは無機ガス)が存在する一定体積の空間に、細孔を持つ固体を置くと吸着質が固体の表面および細孔内へ吸着する。固体の細孔内は吸着質にとってより安定に存在できる空間であるため、吸着質は安定な場へ向かって固体の細孔内を移動(拡散)する。この時、固体への吸着質の吸着により、固体が接している空間内の吸着質の量が減少し、空間中の圧力(または濃度)が低下する。この圧力または濃度の変化から固体の細孔内を

	物質が移動する移動しやすさ(拡散係数)を測定する。
トポロジー	ゼオライトの結晶構造。ゼオライトの種類によって異なる。本来は「位相幾何学」の意味だが、ここでは、ゼオライト中の全原子のつながり方を指す。原子の位置が多少ずれているか、原子の種類が異なっても、つながり方が同じであれば、トポロジーは同一とみなす。トポロジーの種類は、MFI, BEA などの三文字コードで示すことになっている。それぞれについて、物質名は別にある。
特性曲線	吸着ポテンシャルと吸着空間容積の関係を表す線図
な行	
ナフサ(フルレンジナフサ)	粗製ガソリンとも呼ばれ、沸点範囲が 35-180℃程度の原油に含まれる成分。
ナノ化 or ナノサイズ化(ゼオライト)	粒子径が概ね 200nm 以下の比較的均一な分布を持つ(ゼオライト)。
二段触媒	活性の異なる触媒 2 種を組合せてコーキングによる活性低下を抑制する手法。
熱分解	触媒や酸素などが存在しない環境下において、加熱のみで生じる有機物質の分解
は行	
反応速度定数	化学反応に伴い反応物や生成物量が増減する速さ(反応のおこりやすさ)
反応次数	ある反応の速度が、反応する成分の濃度の n 乗に比例する時((反応速度)=(反応速度定数)×(反応成分濃度) ⁿ)、n 次反応といい、この n を反応次数と呼ぶ
反応律速	多孔質な触媒を用いた反応では、反応物質が触媒の細孔内にある活性点(酸点)まで移動(拡散)し、活性点に吸着することで反応が進行する。これらの過程の中で、反応する速度が最も遅い状態を反応律速という。
反応率	転化率と同義。反応物が反応した割合
微分反応	転化率が小さくなる条件で行う反応
分子篩能	混合物中の分子径の異なる分子をふるい分ける性質(ゼオライトの細孔の大きさより小さい分子は細孔内へ入れるが、大きい分子は入れない)
ヒートフラックス	熱流束とも言い、単位時間、単位面積あたりに流れる熱量のこと。
比表面積	吸着媒体の面積を基準に計算した表面積のこと。例えば窒素吸着法で算出した表面積は、吸着窒素分子の断面積を基準として計算されるので、このように呼称される。
頻度因子	速度定数を表す式で用いられる温度に無関係な定数。(速度定数)=(頻度因子)×exp(-(活性化エネルギー)/(気体定数)/(温度))
ブレンステッド酸点	反応の際、プロトン(H ⁺)を反応物に与える酸点
物質収支	反応系に投入した物質の量と系から得られた物質の量の収支

ま行	
マクロサイズ	ゼオライト結晶の大きさが数マイクロメートルのものに対して、マクロサイズと表記している。
ミクロ孔	2 ナノメートル以下の大きさの細孔
モデルナフサ	ナフサを想定した、炭素数の異なる直鎖、分岐、環状など数種類の炭化水素の混合液。
目的生成物	「エチレン+プロピレン」または「エチレン+プロピレン+ブテン類+BTX」。
や行	
有機構造規定剤	ゼオライト結晶の合成時の鋳型となる有機物質。
有効拡散係数	触媒に接する流体中の物質濃度を基準とした、触媒細孔内の物質の拡散係数。一般的に用いられる拡散係数とはこの有効拡散係数を意味する。速度解析に用いられる。
ら行	
ライトナフサ	ナフサのうち沸点範囲が 35-80°C程度のもので、エチレンプラントの原料として多く使用される。
流動床型反応器 (FCC 型) (Fluid Catalytic Cracking)	固体触媒が装置内で流動している反応器で、反応が早く急速な熱の供給/除去が必要な場合などに用いられる。
リン酸処理	リン酸をゼオライト結晶に含浸担持したことを意味する
その他	
BEA	合成ゼオライトの1つであり、0.55 × 0.55nm のジグザグな細孔と 0.76 × 0.64nm の直線状の細孔を有するゼオライトである
BTX	ベンゼン、トルエン、キシレンを示す
DTA (differential thermal analysis)	示差熱分析: 基準物質と試料を同時に一定の速度で加熱し、両者の温度差から試料の熱的性質を解析する分析手法。物質の相転移や分解、酸化等についての情報が得られる。
FAU	直径 1.3 nm の巨大な空孔(スーパーケージ)を 12 員環細孔がつながることにより生じた、3 次元の骨格構造。物質名の代表例として、faujasite, Y, USY, X などがある。Faujasite が三文字コード名の由来。
FE-SEM	Field Emission Scanning Electron Microscope の略で、通常の顕微鏡では観察できないようなより小さいサイズの固体の形態観察に用いられる。
Freundlich 型	吸着等温線の型の1つ
MFI	代表的な合成ゼオライトの 1 つであり、0.56 × 0.53nm の直線状の細孔と 0.55 × 0.51nm のジグザグな細孔を有するゼオライトである
MOR	12 員環ストレートチャンネルが 8 員環細孔で横に連結された 2 次元細孔構造の骨格。FAU や BEA とは異なり、細孔の交点に広い空間は存在しない。ベンゼン環が入ったと仮定したとき、ベンゼン環が動けるのは 12 員環チャンネルのみ。物質名の代表例は mordenite であり、三文字コード名の由来でもある。
MSE	12 員環のストレートチャンネル 1 種類と、うねった 10 員環チャンネ

	ル 2 種類から成る 3 次元細孔構造の骨格。記号の由来は <u>Mobile Sixty-eight</u> 。10 員環同士の交点には大きなスーパーページがあるが、そこには 10 員環を通らなければアクセスできない。代表例として MCM-68 がある。
MTW	12 員環のストレートチャンネルのみをもつ 1 次元細孔構造の骨格。12 員環の中では細孔径が小さい部類に入る。物質名の代表例は ZSM-12 であり、三文字コード名の由来は <u>Mobile Twelve</u> 。
MWW	層状ユニットからなり、各層内には 10 員環 2 次元細孔が二種類走っている。層をまたぐように 12 員環のスーパーページが存在するが、これは層が剥離することにより 2 つに割れ、外表面におわん形のポケットが露出する。このポケットは反応場として重要とされている。物質名の代表例は MCM-22 で、三文字コードの由来は <u>Mobile twenty-two</u> 。
NMR (Nuclear Magnetic Resonance)	核磁気共鳴法: 強い磁界中に置かれた物質(測定核種)の運動状態(核スピン)の情報(核磁気共鳴スペクトル)から、核種の置かれている周囲の状態や価数等の化学状態などを分析する手法。
silicalite-1	MFI 型ゼオライトの 1 種。骨格中に Al を含まないものを silicalite-1 と呼ぶ。
Si/Al 比	ゼオライトに含まれる Si(ケイ素)と Al(アルミ)の比
TG(Thermogravimetric Analysis)	熱重量分析: 試料を加熱したときの質量変化を測定する分析手法。触媒内部の吸着水の脱離温度や触媒表面のコーク燃焼温度などが測定でき、吸着物質の状態に関する情報が得られる。
TPD (Temperature-Programmed Desorption)	昇温脱離法: プローブ分子を吸着させた触媒を一定速度で昇温し、脱離量や脱離温度から表面特性を評価する分析手法。プローブ分と触媒表面の相互作用の大きさについての情報が得られるため、アンモニア分子をプローブ分子とする TPD が、固体酸性の評価に用いられる。
W/F	触媒重量(W)と反応原料供給速度(F)の比
WHSV (Weight Hourly Space Velocity)	反応器に充填された触媒に対する原料供給量の重量比で単位は [1/hr]となる。数字が大きいほど触媒の負荷が高くなる。
XRD(X-ray Diffraction)	X 線回折法: 粉末試料の構造決定手法の一つ。X 線が微結晶に照射されて生ずる回折パターンから、物質構造を同定する。合成ゼオライト触媒の構造決定や結晶子の大きさ測定などにも用いられる。

I. 事業の位置付け・必要性について

1. NEDOの関与の必要性・制度への適合性

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、その他全産業に何らかの形で貢献している基幹産業である。我が国の化学産業は、高い技術力と競争力を有しており、出荷額ではアメリカ、中国に次ぐ世界第 3 位である。また、国内での製造業と比較すると、出荷額・負荷価値額共に第 2 位となっている我が国の経済においても非常に重要な産業である。一方、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、二酸化炭素排出量は製造業全体の 15%を排出しており第 2 位、産業廃棄物排出量は 12.5%で第 3 位となっている。

この様な背景の中、化学産業界は日本レスポンシブル・ケア協議会を 1995年に設立し、これらの課題に取り組んでいる。また、化学系の学会・団体および国立研究所により、2000年3月に GSC ネットワークが設立され、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、「人と環境の健康・安全」、「省資源・省エネルギー」などを実現する化学技術である「グリーン・サステイナブルケミストリー（以下 GSC）」活動を効果的かつ強力に推進している。GSCN には、オプザバーとして経済産業省、NEDO も関与している。

(2)本事業に関連する経済産業政策

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20年4月1日制定）として推進されている。

平成21年度開始の本事業は、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]の一つとして位置付けられている。

参考に、[イノベーションプログラムの概要]及び[2. ナノテク・部材イノベーションプログラム]を次頁に示す。

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	ナノテク・部材 IPG	ロボット・新機械 IPG	健康安心 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	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	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	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	環境安心 IPG	航空機・宇宙産業 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	①地球温暖化防止新技術 60億円 ②3R 33億円 ③環境調和産業パイオ 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	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

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。

● 一般会計 ● 特別会計



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。

(3)NEDO が関与することの意義

これらの化学業界の活動を受け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）では、単独企業ではリスクが高く困難な課題の克服に向けた取り組みを開始している。本事業では、この中でも消費エネルギーが、化学産業全体の 16%を占める石油化学熱分解プロセスに関しての省エネルギー化・省資源化の技術を開発している。詳細には、触媒によるナフサ接触分解プロセスを開発する。本技術は、世界各国において種々の石油メーカー、化学メーカーが独自に取り組んできたが、実用化には至っていない状況であるほど困難な課題である。しかし、実用化を達成できれば、分解熱の低温下、有価物の収率向上が計れ、石油化学プラントにおける省エネルギー化・省資源化が達成できる。最近では、韓国が国プロジェクトとして開発を始めており、セミプラントに着手したとの情報を得ている。エチレン、プロピレンなど化学品原料として有用な物の収率向上を目標としているとのことである。

このような開発を効率よく行うために、NEDO では、基礎基盤技術を有する「学」「官」と、実際に実用化を行う「産」の連携を推進している。密な連携を可能とするために、「集中研」方式を採用し、同じ施設内で研究開発を行うことによって、迅速な「成果」、「課題」、「得意分野を生かした解決方法」の共有化を行うことによって、開発期間の短縮を図っている。企業独自経営方針の部分は、分担研として研究開発を行い、全体会議にて可能な範囲での成果の報告・共有化・検討も行っている。

また、NEDO では、研究開発内容や開発計画の検討・修正・アドバイスをを行うために、有識者 6 名からなる技術検討委員会を設置している。年 2 回開催であり、このうち 1 回は集中研におもむき、装置を見ながら研究者らとの意見交換やアドバイスも行っている。これらの有識者は、産業界、学术界から「触媒開発」「プロセス設計」「プラント設計」を長年経験してきた専門家の方々を選考している。

1.2 実施の効果(費用対効果)

(1)事業費

事業費の推移を以下に示す。

(単位：百万円)

	平成 21 年度	平成 22 年度	平成 23 年度	総額
当初予算	510	350	358	1,218
加速予算		121		
実績(見込)	510	471	358	1,339

平成 22 年度に加速資金によりセミベンチ装置を導入し、実用化の促進を目指した。

(2)効果

①経済的効果

石油化学プラント1基を、現行の熱分解法と、本事業にて開発している接触分解法との純利益に関して比較計算した。詳細に関しては、IV 実用化の見通し部分に記載する。

要約すると、単純に見積もって、ナフサフィードを年間100万tとして、熱分解プラントと比較して接触分解プラントは年間100億円/基以上の増益となる。

②省エネルギー化（二酸化炭素削減量）、省資源化（原料削減量）

2010年の熱分解法による日本のエチレン年生産量約700万トンの内、年生産量100万トンが接触分解に代替される（エチレン+プロピレンベースで年生産量約150万トン）と仮定すると下記の削減が見込まれる。

- 原料ナフサ消費量の削減：300万トン/年から230万トン/年へ削減
- 消費エネルギーの削減に伴うCO₂の削減量：18万トン/年の削減

2. 事業の背景・目的・位置づけ

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。

これを受けてNEDO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）の研究開発を行っている。想定してい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。

本事業では、特に、「iii)資源生産性を向上できる」革新的な化学プロセスの開発を目指して、化学産業の中でもエネルギーを大量に消費する石油化学プラントの抜本的な省エネルギー・省資源化技術を開発する。個別な背景・目的を下記に記載する。

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。

Ⅱ. 研究開発マネジメントについて

1. 事業の目標

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、本事業は、上記③に該当する。

2. 事業の計画内容

2.1 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している。

【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」

本事業は、「触媒を用いる革新的ナフサ分解プロセス基盤技術開発」に関する詳細内容は以下の通りである。

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、ブテン類、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。これまでにも、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はなく商用生産プロセスを指向した技術開発は充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。

【詳細な開発項目】

①高性能触媒による高収率、高選択プロセスの開発

- ①－1 高性能触媒の開発
- ①－2 触媒評価および改良
- ①－3 触媒キャラクタリゼーション

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

- 研究開発項目③「新触媒によるナフサ接触分解に関するプロセス設計」
- ②－1 実用化触媒開発（成形・評価）
 - ②－2 触媒反応工学の観点からの検討

②—3 プロセス設計・評価

【事業目標（値）】

中間目標（平成 23 年度末）

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、ブテン類、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。

高性能触媒による実証規模プロセスに関する設計・開発

・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。

最終目標（平成 25 年度末）

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、ブテン類、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。

高性能触媒による実証規模プロセスに関する設計・開発

・国内外で稼動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。

2.2 研究開発の実施体制

(1) 実施者の選定

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。

（２）プロジェクトリーダー

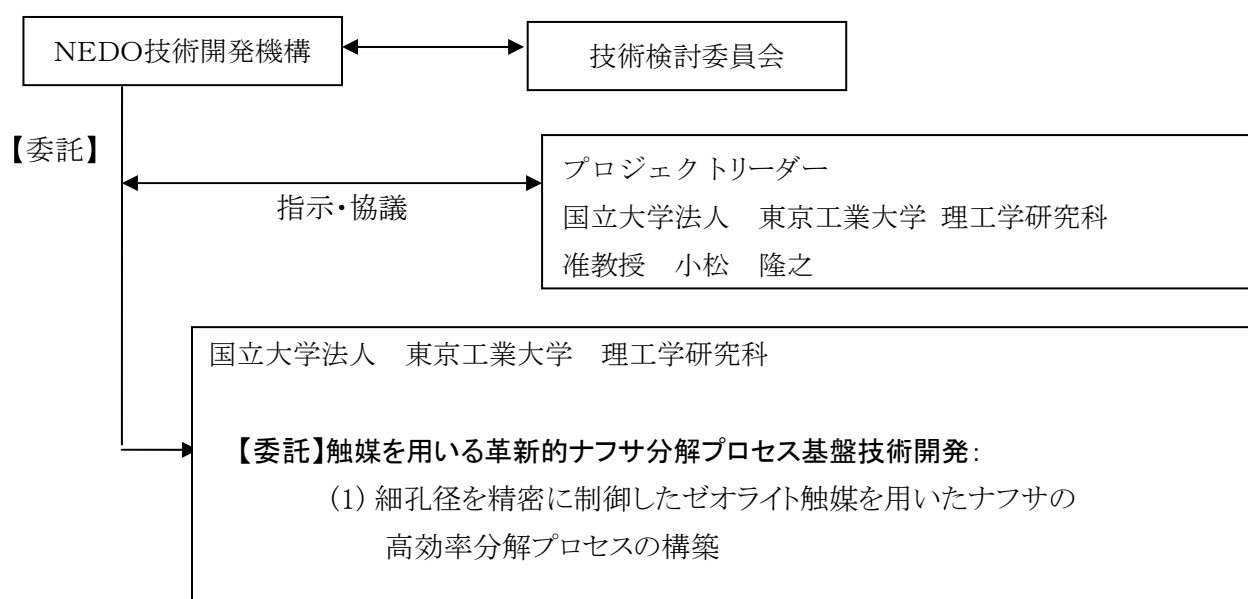
共同研究開発に参加する各研究開発グループの有する研究開発ポテンシャルを最大限に活用することにより効率的に研究開発推進を図る観点から、委託先決定後にNEDOが指名する研究開発責任者（プロジェクトリーダー）を研究体に置き、その下に研究者を可能な限り結集して効率的な研究開発を実施する。

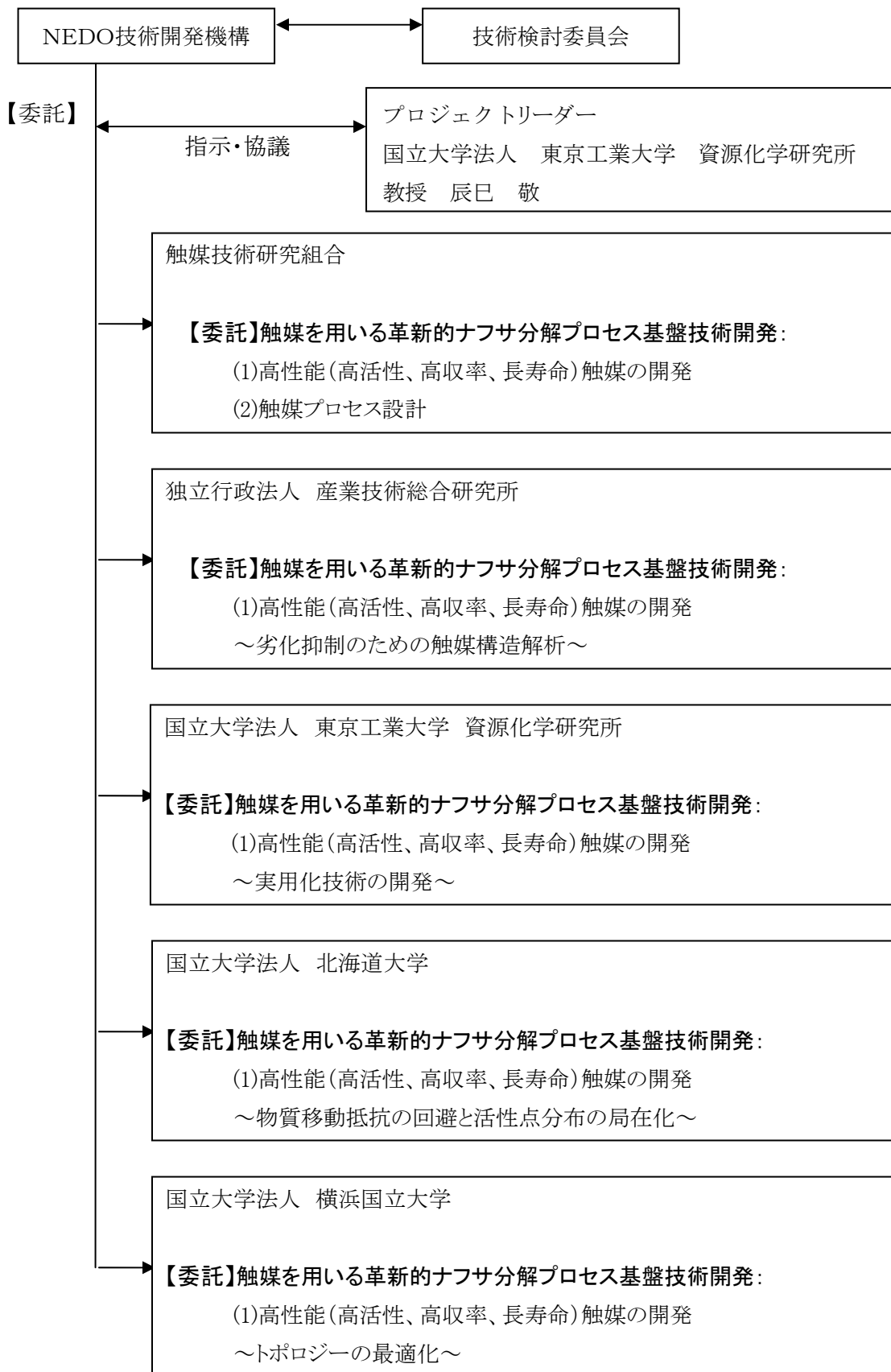
本事業では、的確な計画立案・指示・判断・研究開発マネジメントが遂行されるよう、実施者の中から国立大学法人東京工業大学資源化学研究所 教授 辰巳敬をプロジェクトリーダーとして委嘱した。

（３）実施体制

採択時の実施体制を下記に示す。採択審査委員会にて、２件の採択が決定した。一件は、東京工業大学小松隆之准教授の単独提案、もう一件は、東京工業大学辰巳敬教授が産業技術総合研究所、北海道大学、横浜国立大学、触媒技術研究組合と共同で提案してきた物である。両者共に、技術的に成功の可能性がある研究開発課題と計画を有しており、優劣つけがたい提案であった。しかし、小松准教授の提案は、東京工業大学単独の提案であり実用化に向けた企業のバックアップが必要との意見が採択審査委員会にて条件が付与された。

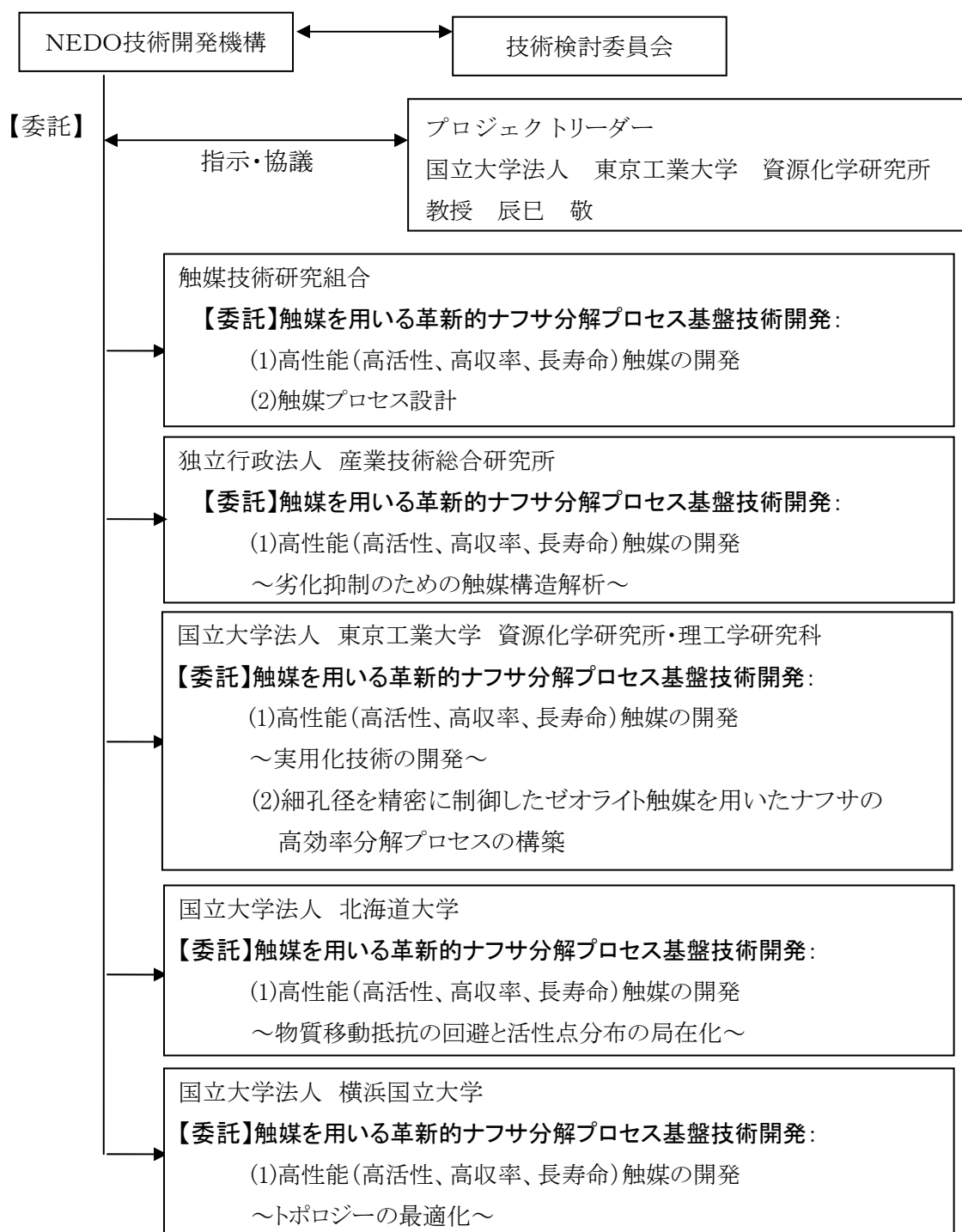
①採択時実施体制





これを受け、NEDOでは、事業開始にあたり、両実施者の代表と議論を重ね調整を行い、切磋琢磨しより大きな研究成果が出るようこれら2件を共同実施することとした。事業開始時の実施体制を下記する。また、研究の効率化を図るために、東京工業大学内に集中研を設けた。

②事業開始時の実施体制



2.3 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。

具体的には、本事業ではNEDOにより研究開発内容や開発計画の検討・修正・アドバイスを行うための有識者5名（御園生氏、菊地氏、沼口氏、野尻氏、宮脇氏）からなる技術検討委員会を設置した。事業開始時の委員のリストを以下に示す。

①事業開始時の技術検討委員

区分	氏名	所属	役職	専門分野
委員長	御園生 誠	国立大学法人 東京大学	名誉教授	触媒化学
委員	菊地 英一	学校法人 早稲田大学 理工学術院 応用化学科	教授	石油化学
委員	沼口 徹	日本ポール株式会社	バイスプレジデント	化学工学
委員	野尻 直弘	元 三菱化学株式会社	元 理事	工業化学
委員	宮脇 哲也	三菱商事株式会社 汎用化学品本部	次長	汎用化学品

(敬称略・順不同)

一年間の研究を行い技術開発が進み、二年目から事業化へ向けての実用化技術開発が開始されることとなった。そこで、NEDOでは、触媒化学・化学工学に多くの知識を有し事業化の経験が豊富な松本氏を技術検討委員に加えることとし、さらなる研究開発の加速に努めた。二年目以降の技術検討委員のリストを下記する。

②二年目以降の技術検討委員

区分	氏名	所属	役職	専門分野
委員長	御園生 誠	国立大学法人 東京大学	名誉教授	触媒化学
委員	菊地 英一	学校法人 早稲田大学 理工学術院 応用化学科	教授	石油化学

委員	沼口 徹	日本ポール株式会社	バイスプレジデント	化学工学
委員	野尻 直弘	元 三菱化学株式会社	元 理事	工業化学
委員	宮脇 哲也	三菱商事株式会社 汎用化学品本部	次長	汎用化学品
委員	松本 英之	神鋼リサーチ株式会社 先進技術情報センター	主席研究員	触媒化学 化学工学

(敬称略・順不同)

委員会は、年2回の開催とし、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研究者らとの意見交換やアドバイスも行っている。

(技術検討委員会開催履歴)

<平成21年度>

第1回 平成22年2月12日 於 NEDO 日比谷オフィス

参加法人 NEDO、METI、東京工業大学、産業技術総合研究所、北海道大学、
横浜国立大学、触媒技術研究組合

<平成22年度>

第2回 平成22年9月24日 於東京工業大学すずかけ台キャンパス(集中研)

参加法人 NEDO、METI、東京工業大学、産業技術総合研究所、北海道大学、
横浜国立大学、触媒技術研究組合

第3回 平成23年2月15日 於 NEDO 日比谷オフィス

参加法人 NEDO、METI、東京工業大学、産業技術総合研究所、北海道大学、
横浜国立大学、触媒技術研究組合

また、プロジェクト実施者側でも2名の外部有識者を招いた検討会を年2～3回ペースで実施し、研究開発及び事業化に向けたアドバイス等を得ている。

2.4 研究開発成果の実用化に向けたマネジメントの妥当性

本事業では、開発開始当初は基盤技術開発的要素が大きかったため、集中研を中心として情報および成果の共有化を図り、プロジェクトリーダーを交えた討議を頻繁に実施することにより、短期間で成果を挙げてきている。また、年4回開催の分担研を交えた進捗報告会等には、NEDOも極力出席して状況の把握に努めた。

二年目に入り、基礎技術の研究開発が進展し、実用化に向けた検討の開始に至までになった。それに基づいて、技術検討委員会のアドバイスなども踏まえて、加速資金投入の判断や、技術検討委員の補充を行った。

3. 情勢変化への対応

プロジェクトの成果が顕著であり、また海外での実用化の動きにも素早く対抗すべく、加速財源の投入を行った。

時期	金額 (百万円)	目的及び概要	主な成果
平成22年 6月	121	実用化触媒(成形触媒)の性能確認のために、セミベンチ装置の導入を行った。	成形触媒の性能と触媒単体での性能との比較検討が可能となり、課題の抽出の迅速化が図れている。

さらに、一年間の研究を行い技術開発が進み、二年目から事業化へ向けての実用化技術開発が開始されることとなった。そこで、NEDOでは、触媒化学・化学工学に多くの知識を有し事業化の経験が豊富な松本氏を技術検討委員に加えることとした。

4. 評価に関する事項

本事業に関しては、GSC 基盤技術開発のiii) 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として、平成20年度に当時の環境技術開発部、ナノテクノロジー・材料技術開発部にて事前評価を実施し、NEDOの実施する事業として適切であると判断した。

事前評価書は添付資料に示す。

また、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i、ii、iii-1、iii-2、iii-3)毎に中間評価を事業開始3年目に、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。それに従い、本事業の中間評価は平成23年度に実施する。

Ⅲ. 研究開発の成果について

1. 事業全体の成果

1-1 はじめに

本研究開発では、既存熱分解プロセスに対して、石油化学品(エチレン、プロピレン、ブテン、BTX 等)の収率、選択性を高めるために必要な高性能なゼオライト触媒等の開発を行うとともに、ナフサ分解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に関するプロセス設計、最適化を行って、早期に革新的かつ競争力の高い実用化プロセスに繋がる基盤技術を開発する。

基本計画に基づき高性能ゼオライト触媒を用いる革新的ナフサ分解プロセスの開発における研究開発項目ごとの研究開発成果要約を以下に述べる。

「高性能触媒による高収率、高選択プロセスの開発」

- ・ゼオライト触媒 27 種類のトポロジーのスクリーニングを行い、目的生成物収率、触媒寿命の観点から候補触媒を絞り込んだ。
- ・ナノサイズ化によるゼオライト触媒の改良検討を行い、ナノサイズ化は、目的生成物分布に影響を与えず、失活の抑制に有効であることを見出した。
- ・外表面積増加処理により目的生成物合計収率は向上し、触媒寿命も向上させることができた。
- ・ゼオライト触媒の長寿命化技術の開発を行い、以下を確認するとともに詳細検討を実施した。
 - ア スチーム処理及び酸処理、高温不活性ガス流通処理の有効性を確認
 - イ 外表面積点の不活性化の有効性を確認
 - ウ 触媒配置の最適化による長寿命化を確認
- ・成形触媒の再生条件検討もを行い、反応・再生 5 回を達成した。

「高性能触媒によるラボスケールでの生産」

- ・触媒成形技術の開発において、従来型触媒を用いて最適化することにより成形体の強度を向上させることに成功するとともに、触媒性能評価を行い、粉体触媒と同等の活性挙動（初期活性、経時活性劣化挙動）を得た。また、再生条件の最適化も行った。
- ・燃焼再生の速度解析を行い、コーク中に含まれる炭素の燃焼速度定数の頻度因子はコーク量に依らずほぼ等しい値を示した。一方、水素の燃焼速度定数の頻度因子はコーク量の増加により低下することがわかった。
- ・コーク付着ならびに未付着の MFI 型ゼオライトについて、ヘキサンとベンゼンの細孔内拡散係数測定を行い、反応温度と分圧の関数である吸着ポテンシャルを導入することで、任意の温度と分圧について、拡散係数と吸着量を予測できることを見出した。
- ・回収系のモデリング： 反応工程からガスの分離・回収工程までの全系のシミュレーションが可能となるよう、プロセスシミュレータを使用して回収系のフローのモデリングを行った。
- ・熱分解対比及び触媒性能の相対比較の付加価値表： 熱分解と触媒性能の相対比較のため、ナフサ接触分解において、低級パラフィンの熱分解を考慮した製品収率から付加価値表を作成し、スチーム添加および触媒再生周期の付加価値に対する影響を数値化し、触媒スクリー

ニング・開発の方向性の一助とした。

1—2 中間目標達成状況

基本計画で定めた中間目標の達成度は表1の通りであるが、実用化を念頭に基本計画で定めた中間目標に加え、プロセス設計から示された指針により付加目標も自主的に加えた。

表A1より明らかなように基本計画で定めた中間目標は全て達成した。

表A1 目標と達成度

1. 高性能触媒による高収率、高選択プロセスの開発	目標	成果	達成度	今後の課題
1. 高性能触媒による高収率、高選択プロセスの開発 ①収率(C_2^+ 、 C_4^+ 、BDX)	63%以上	67%	◎	反応条件の拡大への対応
1. 高性能触媒による高収率、高選択プロセスの開発 ②収率(C_2^+ 、 C_3^+)	47%以上	47%	○	
1. 高性能触媒による高収率、高選択プロセスの開発 ③触媒再生(再生後の初触媒活性)	90%以上	≒100%	◎	本命触媒での技術開発
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 ①アブサ処理量	0.2kg/日以上	0.2kg/日	○	実ナフサでの検証

◎ 大幅達成、○達成、△達成見込み、×未達

1—3 最終目標に向けた課題と達成見込み

基本計画で定めた最終目標のうち、目的生成物収率及び触媒再生に関しては最終目標もほぼ達成することができている。

したがって、基本計画で定める目標最終目標達成に向けては、これまで開発した技術の更なるブラッシュアップを図るとともに要素技術の組み合わせにより安定的な目標達成を目指していく。

さらに、実用化に向けてプロセス設計を最大限に活用し、付加目標の見直し、追加等も行っていく。

これらの実施により実用化のための基盤技術の確立が可能であると考ええる。

1—4 これまでの論文、特許、外部発表等

(1) 研究発表・講演

a. 論文リスト

発表年月日			発表媒体	発表タイトル	発表者
巻	頁	年			
46	266 2-2 664	2010	Chemical Communications	Selective formation of propylene by hexane cracking over MCM-68 zeolite catalyst	Satoshi Inagaki, Kazuyoshi Takechi, Yoshihiro Kubota

b. 口頭発表リスト

発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者
2011年5月18日	石油学会第54回年会, 第60回研究発表会	ゼオライト触媒を用いた n- ヘキサン接触分解の速度解 析	中坂佑太, 岡村拓 哉, 今野大輝, 川原 貴仁, 多湖輝興, 増 田隆夫
2011年3月 29~30日	第107回触媒討論会	ナノ結晶 MFI 型ゼオライト による n-ヘキサンの接触分 解	今野大輝, 岡村拓 哉, 中坂佑太, 多湖 輝興, 増田隆夫
2011年3月 29~30日	第107回触媒討論会	MFI 型ゼオライト触媒によ る n-ヘキサン接触分解の速 度解析	岡村拓哉, 今野大 輝, 中坂佑太, 多湖 輝興, 増田隆夫
2011年3月 29~30日	第107回触媒討論会	ナノサイズ MOR ゼオライ トの構造規定剤フリー合成 における界面活性剤添加効 果	藤原沙緒梨, 谷口太 一, 中坂佑太, 多湖 輝興, 増田隆夫
2011年5月18日	石油学会第54回年会, JPIJS 若手研究者のため のポスターセッション	n-ヘキサン接触分解におけ る MFI 型ゼオライトの結晶 サイズ微小化効果	今野大輝, 中坂佑 太, 多湖輝興, 増田 隆夫
2011年5月23~25 日	The 13th Korea-Japan Symposium on Catalysis	Effect of Crystal Size of MFI-type Zeolite on the Light Olefins Selectivity by n-Hexane Cracking	Hiroki Konno, Takuya Okamura, Yuta Nakasaka, Teruoki Tago, Takao Masuda
2011年5月18日	石油学会第60回研究発 表会	Catalytic steam cracking of n-hexane over modified ZSM-5 catalysts	Dingfeng Jin, Aritomo Yamaguchi, Takuji Ikeda, Koichi Sato, Norihito Hiyoshi, Tomoya Inoue, Masayuki Shirai, Fujio Mizukami, and Takaaki Hanaoka
2011年5月24日	The 13th Korea-Japan Symposium on Catalysis	Steam Cracking of n-Hexane over Modified ZSM-5 Catalysts for Propylene Production	Aritomo Yamaguchi, Dingfeng Jin, Takuji Ikeda, Koichi Sato, Norihito Hiyoshi, Tomoya Inoue, Masayuki Shirai, Fujio Mizukami, and Takaaki Hanaoka
2011年6月6日	22nd North American Catalysis Society Meeting	Modified ZSM-5 Catalysts for Steam Cracking of n-Hexane	Aritomo Yamaguchi, Dingfeng Jin, Takuji Ikeda, Koichi Sato, Norihito Hiyoshi, Tomoya Inoue, Masayuki Shirai, Fujio Mizukami, and Takaaki Hanaoka
2011年3月30日	第107回触媒討論会	ゼオライトの酸性質がヘキ サン接触分解に及ぼす影響 検討	望月大司, 今井裕 之, 横井俊之, 難波 征太郎, 野村淳子, 辰巳 敬
2011年3月27日	日本化学会第91回春季 年会	脱アルミ処理を施した BEA 型ゼオライトを用いたヘキ サンの接触分解	吉田雄太郎, 望月 大司, 今井裕之, 横 井俊之, 難波征太 郎, 野村淳子, 辰巳 敬
2010年12月16 日	PACIFICHEM2010 -the International Chemical Congress Pacific Basin Societies	Influence of particle size of zeolite on catalytic properties for n-hexane cracking	Hiroshi Mochizuki, Hiroyuki Imai, Toshiyuki Yokoi, Junko N. Kondo, Seitaro Namba, Takashi Tatsumi

2010年12月2日	第26回ゼオライト研究発表会	調製法の異なる*BEA型ゼオライトによるヘキサンの接触分解	吉田雄太郎, 望月大司, 難波征太郎, 今井裕之, 横井俊之, 野村淳子, 辰巳敬
2010年11月25日	第40回石油・石油化学討論会	修飾ゼオライトによるヘキサンの接触分解	望月大司, 今井裕之, 横井俊之, 難波征太郎, 野村淳子, 辰巳敬
2010年9月17日	第106回触媒討論会	ゼオライト触媒によるヘキサンの接触分解	望月大司, 今井裕之, 横井俊之, 難波征太郎, 野村淳子, 辰巳敬
2010年7月20日	TOCAT6/APCAT5 -the 6 th Tokyo Conference on Advanced Catalytic Science and Technology and the 5 th Asia Pacific Congress on Catalysis	The effect of crystal sizes of H-ZSM-5 on catalytic cracking of n-hexane	Hiroshi Mochizuki, Hiroyuki Imai, Toshiyuki Yokoi, Junko N. Kondo, Seitaro Namba, Takashi Tatsumi
2010年5月20日	石油学会第59回研究発表会 第15回JPIJS若手研究者のためのポスターセッション	修飾 ZSM-5 触媒によるヘキサンの接触分解	望月大司, 難波征太郎, 今井裕之, 横井俊之, 野村淳子, 辰巳敬
2010年9月17日	第106回触媒討論会	有機構造規定剤を使用しないナノ結晶 MFI ゼオライト合成における界面活性剤添加効果	多湖輝興, 藤原沙緒梨, 今野大輝, 中坂佑太, 遠子内渉, 増田隆夫
2010年9月17日	第106回触媒討論会	ヘキサクラッキングによる低級オレフィン選択的合成における MFI 型ゼオライトの結晶サイズの影響	今野大輝, 中坂佑太, 多湖輝興, 増田隆夫
2010年9月17日	第106回触媒討論会	MFI 型ゼオライト細孔内における n-ヘキサンの拡散係数測定	川原貴仁, 今野大輝, 中坂佑太, 多湖輝興, 増田隆夫
2010年9月25日	平成22年度化学系学協会東北大会	ゼオライト触媒を用いたオクタンの接触分解	水沼祐貴, Lixia Wang, 小松隆之
2010年9月16日	第106回触媒討論会	Ca ²⁺ -exchanged Ferrierite: an excellent catalyst for selective formation of light alkenes in catalytic cracking of n-octane	Lixia Wang, Kenichi Ozawa, Takayuki Komatsu, Takuji Ikeda
2010年12月17日	PACIFICHEM2010 -the International Chemical Congress Pacific Basin Societies	Synthesis, modification, and catalytic application of YNU-2 zeolite	Y. Kubota, S. Inagaki
2010年12月17日	PACIFICHEM2010 -the International Chemical Congress Pacific Basin Societies	Synthesis and catalytic applications of MSE-type molecular sieves with multi-dimensional pore systems	Y. Kubota, S. Inagaki
2010年12月2日	第26回ゼオライト研究発表会	微粒子 TON 型ゼオライトの合成とその触媒活性	金子良大, 稲垣怜史, 窪田好浩
2010年12月2日	第26回ゼオライト研究発表会	ポスト処理した Al-beta を触媒とする直鎖パラフィンの接触分解	小松来太, 稲垣怜史, 窪田好浩
2010年12月2日	第26回ゼオライト研究発表会	Al-MCM-68 ゼオライトのポスト処理によるクラッキング触媒としての高機能化	武智一義, 稲垣怜史, 窪田好浩
2010年11月25日	第40回石油・石油化学討論会	MCM-68 ゼオライト触媒によるヘキサンのクラッキングにおいて反応温度が生成物分布に与える影響	武智一義, 稲垣怜史, 窪田好浩
2010年9月17日	第106回触媒討論会・討論会 A	脱アルミニウムした TON 型ゼオライトの触媒活性	金子良大, 稲垣怜史, 窪田好浩
2010年9月17日	第106回触媒討論会・討論会 A	MCM-68 触媒の調製とヘキサンの接触分解におけるプロピレン選択性	武智一義, 稲垣怜史, 窪田好浩
2010年9月17日	第106回触媒討論会・討論会 A	多次元細孔ゼオライトを固体酸触媒としたドデカンの	小松来太, 稲垣怜史, 窪田好浩

		接触分解	
2010年9月17日	第106回触媒討論会・討論会 A	MCM-68 を固体酸触媒とするメタノールからの低級オレフィン合成	渡部恵大, 稲垣怜史, 窪田好浩
2010年7月8日	16th International Zeolite Conference joint with the 7th International Mesoporous Materials Symposium (IZC-IMMS2010)	Crystallization behavior of all-silica zeolite YNU-2 with MSE topology consisting of multi-dimensional large-micropore system	S. Inagaki, Y. Sato, Y. Koyama, T. Ikeda, Y. Kubota
2011年3月29日	第107回触媒討論会	Catalytic steam cracking of <i>n</i> -hexane over ZSM-5 catalysts modified by both lanthanum and phosphorus	Jin Dingfeng, 池田拓史, 井上朋也, 佐藤剛一, 白井誠之, 日吉範人, 水上富士夫, 山口有朋, 花岡隆昌
2011年3月9日	平成22年度日本表面科学会東北北海道支部講演会	Catalytic steam cracking of <i>n</i> -hexane: over ZSM-5 catalysts	Jin Dingfeng, 山口有朋, 池田拓史, 佐藤剛一, 日吉範人, 水上富士夫, 白井誠之, 花岡隆昌
2011年2月24日	第4回 Clayteam セミナー / Symposium on Advanced Composite Materials	ZSM-5 ゼオライトのナフサ接触分解反応への適用 (Application of ZSM-5 zeolites to catalytic steam cracking of naphtha)	山口有朋, Jin Dingfeng, 池田拓史, 佐藤剛一, 日吉範人, 水上富士夫, 白井誠之, 花岡隆昌
2010年12月16日	PACIFICHEM2010 -the International Chemical Congress Pacific Basin Societies	Activity and local structure of ZSM-5 for catalytic steam cracking of <i>n</i> -hexane	Aritomo Yamaguchi, Dingfeng Jin, Takuji Ikeda, Koichi Sato, Norihito Hiyoshi, Tomoya Inoue, Masayuki Shirai, Fujio Mizukami, and Takaaki Hanaoka
2010年12月2日	IWPI2010 - International Workshop on Process Intensification	Catalytic Steam Cracking Process of Naphtha	Aritomo Yamaguchi, Dingfeng Jin, Takuji Ikeda, Koichi Sato, Norihito Hiyoshi, Tomoya Inoue, Masayuki Shirai, Fujio Mizukami, and Takaaki Hanaoka
2010年11月26日	第40回石油・石油化学討論会	ヘキサン接触分解反応における ZSM-5 触媒の失活メカニズム	山口有朋, Jin Dingfeng, 池田拓史, 佐藤剛一, 日吉範人, 井上朋也, 白井誠之, 水上富士夫, 花岡隆昌
2010年11月5日	第24回日本吸着学会研究発表会	ZSM-5 による <i>n</i> -ヘキサン水蒸気接触分解反応と触媒細孔構造変化	白井誠之, Jin Dingfeng, 山口有朋, 井上朋也, 日吉範人, 佐藤剛一, 池田拓史, 水上富士夫, 花岡隆昌
2010年9月16日	第106回触媒討論会	Deactivation behavior of Zeolite Catalysts for Catalytic Steam Cracking of <i>n</i> -hexane	Dingfeng Jin, Aritomo Yamaguchi, Takuji Ikeda, Koichi Sato, Norihito Hiyoshi, Masayuki Shirai, Fujio Mizukami, Tomoya Inoue, and Takaaki Hanaoka
2010年8月25日	ACS 240th National Meeting	Deactivation Mechanism of ZSM-5 during Catalytic Steam	Aritomo Yamaguchi, Dingfeng Jin, Takuji

		Cracking of <i>n</i> -Hexane	Ikeda, Koichi Sato, Norihito Hiyoshi, Tomoya Inoue, Masayuki Shirai, Fujio Mizukami, and Takaaki Hanaoka
2010年7月19日	TOCAT6/APCAT5 -the 6th Tokyo Conference on Advanced Catalytic Science and Technology and the 5th Asia Pacific Congress on Catalysis	<i>n</i> -Hexane steam cracking behavior over ZSM-5 catalysts	Aritomo Yamaguchi, Dingfeng Jin, Takuji Ikeda, Koichi Sato, Norihito Hiyoshi, Tomoya Inoue, Masayuki Shirai, Fujio Mizukami, and Takaaki Hanaoka
2010年7月16日	Pre-Symposium of TOCAT6/APCAT5 -Recent Progress of Environment & Energy Related Catalysts	Deactivation Behavior of ZSM-5 during Catalytic Steam Cracking of <i>n</i> -Hexane	Aritomo Yamaguchi, Dingfeng Jin, Takuji Ikeda, Koichi Sato, Norihito Hiyoshi, Tomoya Inoue, Masayuki Shirai, Fujio Mizukami, and Takaaki Hanaoka

(2) 特許等

出願日	出願番号	出願に係る特許等の標題	出願人
2011.3.15	特願 2011-56575	プロピレンおよびエチレンの製造方法	山口有朋, Jin Dingfeng, 池田拓史, 日吉範人, 佐藤剛一, 井上朋也, 水上富士夫, 白井誠之, 花岡隆昌
2011.6.10	特願 2011-130306	芳香族炭化水素及び/又は炭素数4以下のオレフィンの製造方法、並びに、芳香族炭化水素及び/又は炭素数4以下のオレフィンの製造装置	池口真之、宮路淳幸、秋山聰、辰巳敬
2011.6.13	特願 2011-130906	不飽和炭化水素製造用触媒、その製造方法および不飽和炭化水素の製造方法	宮路淳幸、池口真之、秋山聰、辰巳敬、横井俊之、今井裕之

(3) 受賞実績：

なし

2. 研究開発項目ごとの成果

2-1 高性能触媒による高収率、高選択プロセスの開発

2-1-① 高性能触媒の開発

2-1-①-1 トポロジーの最適化および絞り込み

a. ゼオライトトポロジーの分類と作業仮説

1990年代前半より、有機の構造規定剤 (SDA) が盛んにゼオライト合成に用いられるようになり、特に高シリカ組成の大細孔ゼオライトの数が増えた。その後、構造解析手法の発達もあって、今ではゼオライト骨格の数は 190 を越えている。ゼオライトの細孔構造を模式化して分類したのが図 B1 である。Type-I は「トンネル型一次元細孔」、Type-II は一次元であるが内部にやや広い空間 (ケージ) が周期的に存在する「ケージ型一次元細孔」、Type-III はトンネル型の 12 員環一次元細孔同士が 8 員環の細い横穴でつながっている「二次元 (または三次元) 細孔」、Type-IV は 8 ~12 員環が 3 方向に交差した「三次元細孔」である。図の Type-IV は、細孔の交点に広い空孔があるように描いてあるが、本プロジェクトで最も有力視されている ZSM-5 (MFI) は交点が広がらないのが特徴であり、後述する MCM-68 (MSE) も同様に交点が広がらない。交点は広がるのが普通で、MFI や MSE のような例はむしろ少ない。

米国 Chevron 社の Zones らは、1980 年代から現在にかけて、複雑な構造の有機 structure-directing agent (SDA) を種々合成し、オーソドックスな水熱合成法で多くの新規ゼオライト合成を実現してきた。彼らが合成した代表的な高シリカゼオライトに SSZ-24 (AFI; 12)、SSZ-31 (*STO; 12)、SSZ-35 (STF; 10)、SSZ-42 (IFR; 12)、SSZ-44 (SFF; 10)、SSZ-48 (SFE; 12)、SSZ-53 (SFH; 14)、SSZ-55 (ATS; 12)、SSZ-59 (SFN; 14)、SSZ-60 (SSY; 12)、SSZ-65 (SSF; 12) などがある (カッコ内は FTC および員環数)。ここに挙げた中に 3 次元細孔をもつゼオライトは無く、ほとんどが Type-I の 1 次元細孔である。3 次元細孔構造をもつゼオライトを得るためには工夫が必要で、比較的難度が高いと言える。本プロジェクトの触媒としては、耐コーキング性が必要である。一般に、細孔の交点が大きく、そこに酸点が存在すると、コーク成長の場となりやすい。そこで、交点が広がらないことが望ましいと考えられる。いったんコークが生成すると、一次元細孔の場合、直接細孔閉塞につながるため、拡散経路を確保するために多次元細孔が望ましい。

プロピレンの選択性を向上させるためには、10 員環チャンネル内部を主たるプロピレン生成の場とすることが有効と考えられる。その根拠となる作業仮説を以下に述べる。

直鎖アルカンから生じたカルベニウムイオンで、①メチル基の 1,2-移動を起こし、②アルケンの付加を避けつつ、③優先的に β 切断し、④ジメチルカルベニウムイオンからのプロトン脱離 (触媒表面からのプロピレンの脱着) が容易に起こる、といった条件を満たす触媒設計が必要となる。②のアルケンの付加を避けるには、ゼオライト触媒ではマイクロ孔の大きさが重要なファクターである。④の段階でプロピレンの生成を阻害するのは、アルケンの付加または別のアルカンとの間のヒドリド移動 (水素移行の一種) である。ここでもマイクロ孔のサイズが重要なファクターとなり、上述のように 10 員環が最適であると考えられる。その概略を図 B2 に示した。

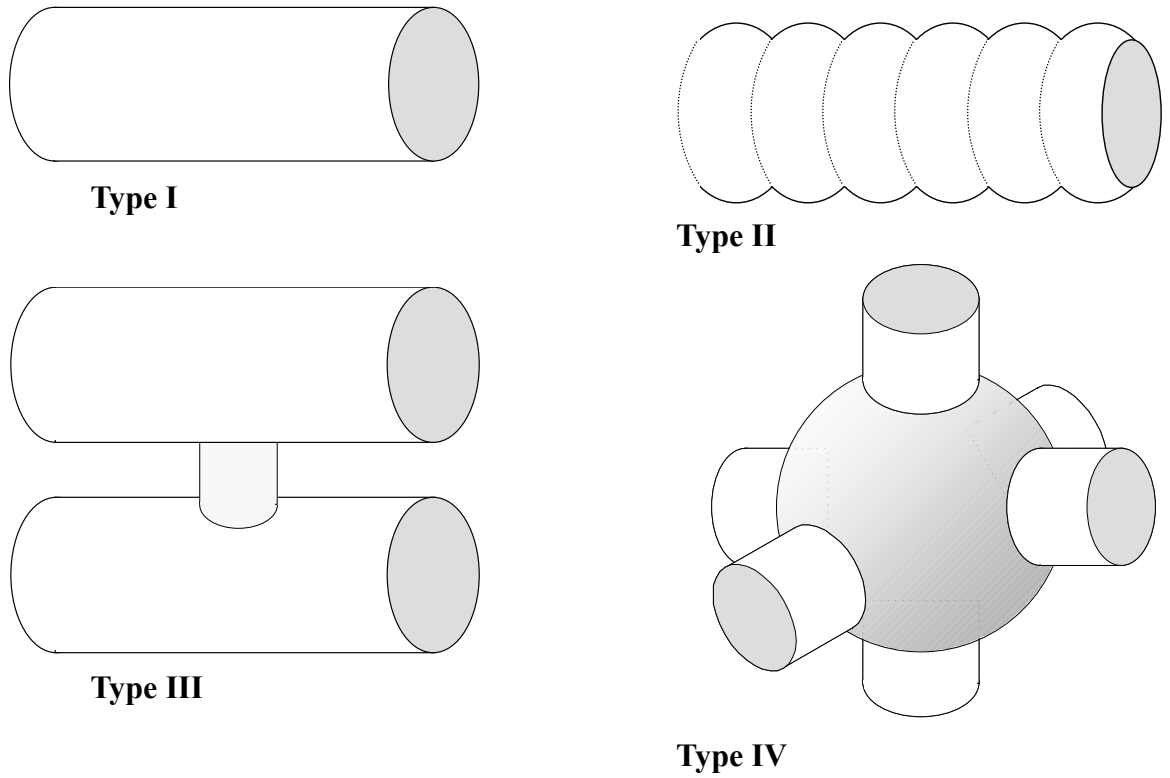


図 B 1 ゼオライトの細孔タイプ分類

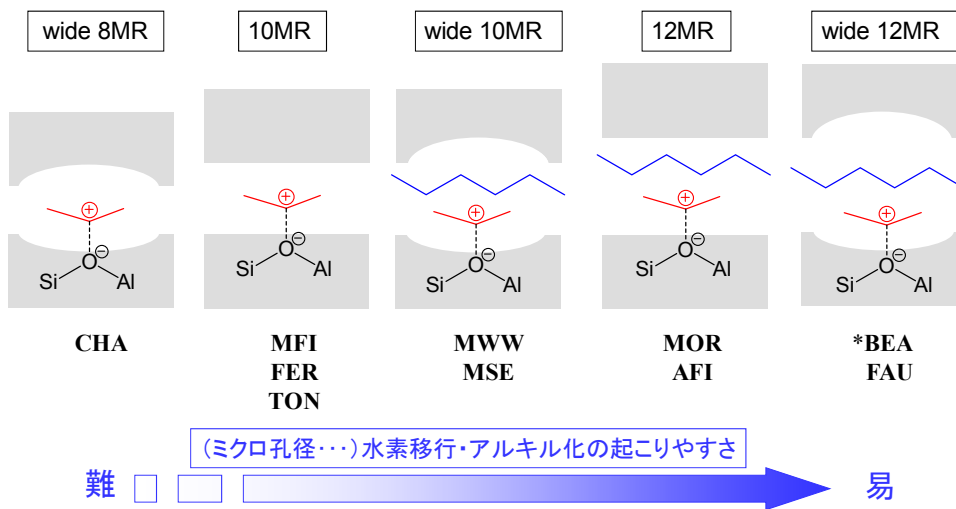


図 B 2 ジメチルカルベニウムイオンの挙動とマイクロ孔径との相関

次に、ヒドリド移動の抑制を最優先した第二の作業仮説について説明する。

ここで、もう一度ゼオライト細孔内空間の大きさと反応の選択性との関係について考える。図 B3 に、パラフィンのクラッキングにおける代表的なメカニズムの一つである「単分子クラッキングメカニズム」を示す。パラフィンとブレンステッド酸点との反応でカルボニウムイオンが形成され、その分解により低級パラフィンとカルベニウムイオンが生成する。後者から低級オレフィンが生成し、ブレンステッド酸点が再生される。このメカニズムではオレフィン選択率は 50 mol% となる。

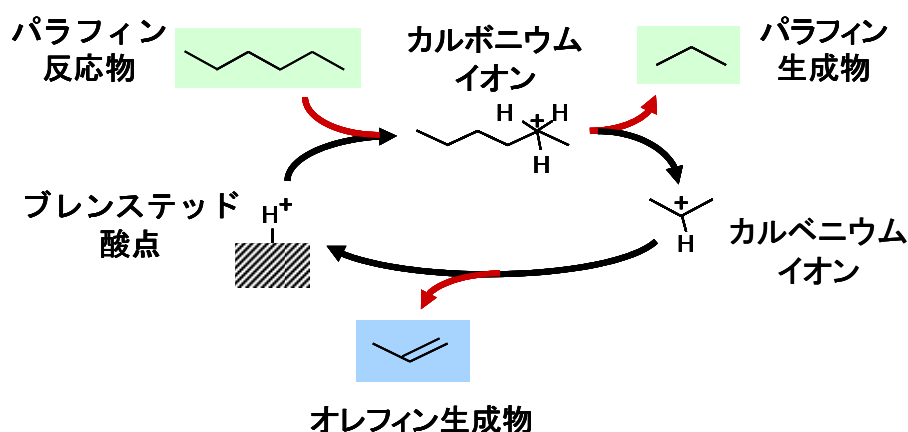


図 B3 パラフィンの単分子クラッキングメカニズム

一方、図 B4 に示すように、生成したオレフィンとカルベニウムイオンの間でヒドリド移動が起こると、パラフィンおよびコークや芳香族生成の中間体であるアリルカルベニウムイオンが形成される。このようなヒドリド移動はオレフィン選択性を低下させるだけでなく、コーク生成による触媒寿命の低下を引き起こす。ここで我々は次のような第二の作業仮説を立てた。すなわち「細孔径の小さいゼオライトを用いると、2分子反応であるヒドリド移動が抑制され、オレフィン選択性および触媒寿命が向上する」というものである。このような細孔径の効果は我々の先行研究ですでにある程度実証されている。

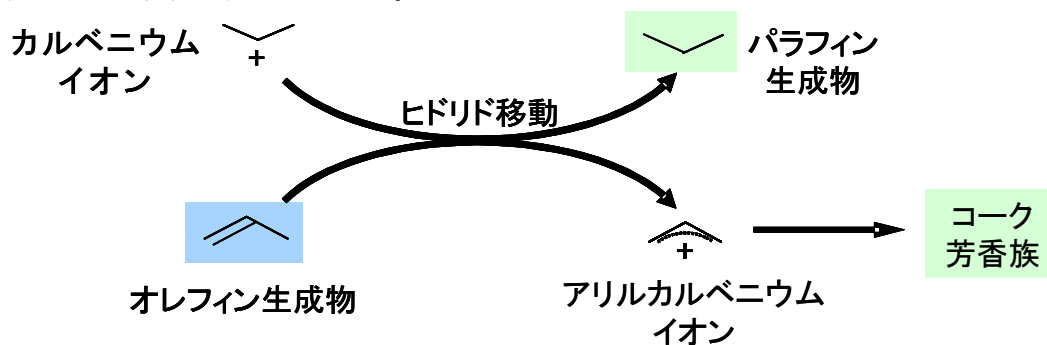


図 B4 ヒドリド移動によるオレフィンの消費とコーク生成

そこで今回はさらに細孔の次元に着目した。先行研究において、H-フェリエライトをCa²⁺でイオン交換することにより、オレフィン選択性および触媒寿命に改善が見られていた。これは導入したCa²⁺が一部の細孔を閉塞してヒドリド移動を抑制しているのではないかと考えた。今回、後述するようにCa²⁺がフェリエライトの8員環細孔を閉塞する位置に導入されることが明らかとなった。このことは、2次元細孔をもつフェリエライトが、Ca²⁺交換により1次元細孔ゼオライト

になることを示唆している。したがって、1次元細孔ゼオライト中ではヒドリド移動が効果的に抑制され、高いオレフィン選択性と触媒寿命が得られる可能性があると考えた（図B5）。

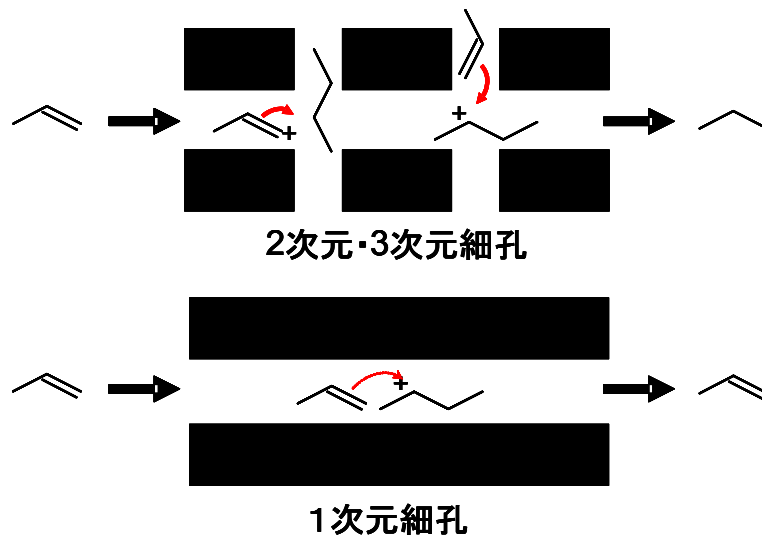


図 B5 1次元細孔内でのヒドリド移動の抑制

b. 特長あるゼオライトトポロジー

(i) MF I

本トポロジーに関しては、本命の一つと考えられるので以降の検討で中心的に用いられた。したがって、本トポロジーについては後述する。

(ii) MSE

MSE 型ゼオライトは、[001]方向に酸素 12 員環ストレートチャンネル、[100]および[110]方向に2つのうねった 10 員環チャンネルを有し、これらが互いに交わった三次元大細孔ゼオライトである (図 B 6 (a))。また 10 員環チャンネルを通ることによってのみアクセス可能なスーパーケージを有する (図 B 6 (b))。ここで他の代表的なゼオライトの骨格構造と **MSE** 構造 (図 B 7 (a)) を比較してみる。ZSM-5 ゼオライト (**MFI**) は、2 種類の 10 員環チャンネルが互いに交差した細孔構造をもつ (図 B 7 (b))。モルデナイト (**MOR**) には一次元 12 員環チャンネルがあり、これに直交するように 8 員環マイクロ孔が存在する (図 B 7 (c))。ゼオライトベータ (***BEA**) では 12 員環チャンネルが三次元に交差しており、そのインターセクションは細孔よりもわずかに広い (図 B 7 (d))。Y 型ゼオライト (**FAU**) は広い内部空間が 12 員環チャンネルで三次元に互いに連結した構造を有している (図 B 7 (e))。このように比較してみると、**MSE** 構造は **MFI** と **MOR** の特長を組み合わせた細孔構造をしており、なおかつ **FAU** のように細孔内部にスーパーケージを有している。さらに ***BEA** のように三次元に交差したマイクロ孔をもつ。

トポロジーとは直接関係ないが、(1) Si/Al 比が 10 前後の比較的アルミリッチな高シリカゼオライト、(2) 粒子径は 50 nm 以下、(3) SDA (*N,N,N',N'*-tetraethylbicyclo- [2.2.2]oct-7-ene-2,3:5,6-dipyrrolidinium diiodide; TEBOP²⁺(I)₂) は比較的手容易である、といった特徴もある。

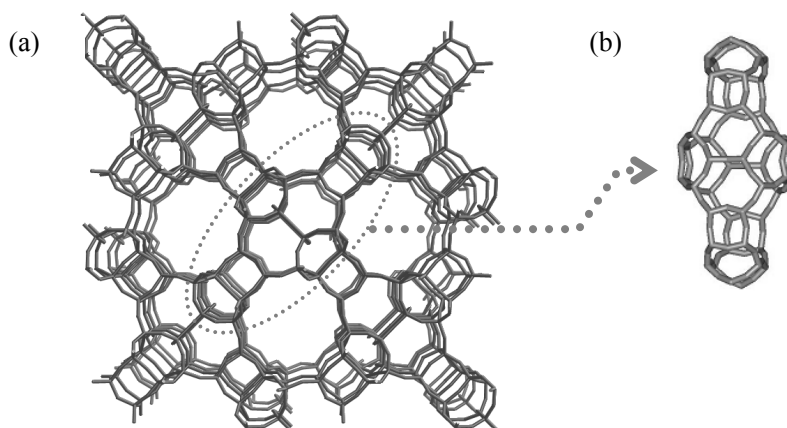


図 B 6 (a) MCM-68 ゼオライトの骨格構造, (b) スーパーケージ

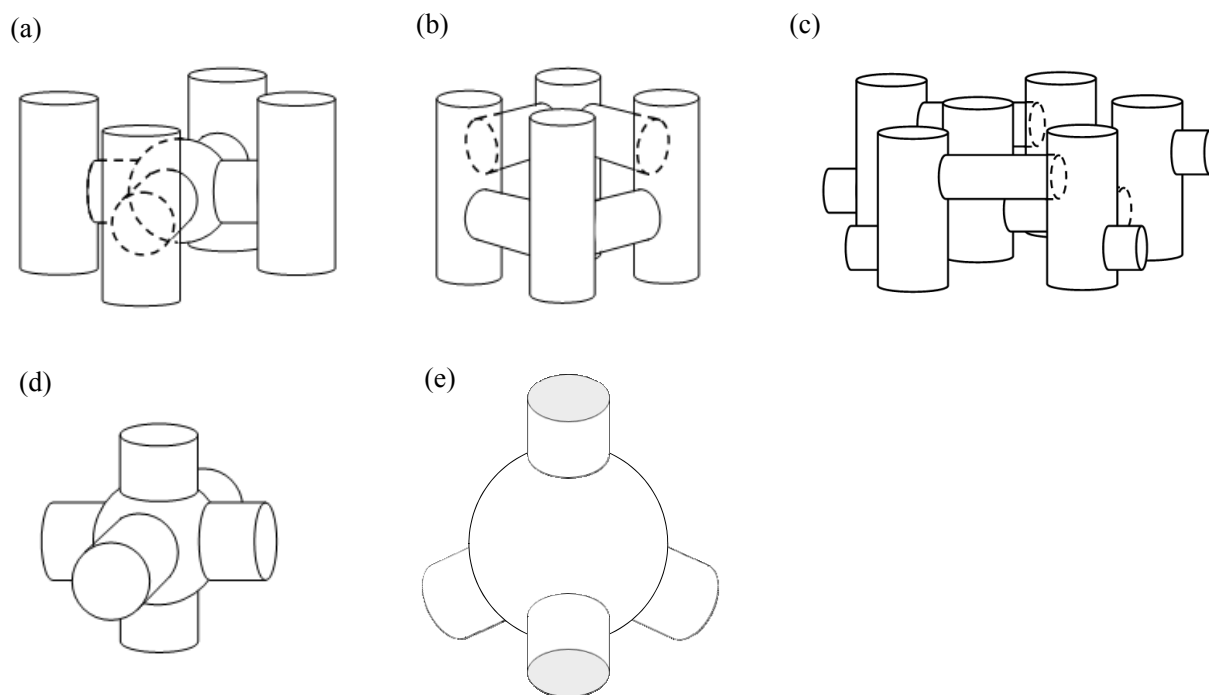


図 B 7 (a) MCM-68 (MSE), (b) ZSM-5 (MFI), (c) モルデナイト (MOR), (d) ゼオライトベータ (*BEA), (e) USY (FAU) の細孔構造の模式図

(1) 実験

ヘキサンの接触分解は固定床流通式反応器で行った。触媒の前処理条件は、空気気流下 650°C で 1 時間とした。キャリアガスとして 5.0 vol% CH₄/He または 1.0 vol% CH₄/Ar、1.0 vol% N₂/Ar を用い、ヘキサンの分圧は 5.0 kPa または 7.8 kPa とした。触媒量は 10~250 mg、W/F は 2.0~49.1 g-cat h mol⁻¹、反応温度は 450~650°C とした。生成物は GC(FID)で分析した。反応後の炭素析出量は熱分析により見積もった。

(2) 結果と考察

XRD パターンから脱 Al 処理後も MSE 構造を維持していることがわかった。450、500、550、600°C でのヘキサンのクラッキング開始 5 分後の結果を MCM-68 (13)、MCM-68(51)、ZSM-5(45)、Mordenite(45)、Beta(41) (カッコ内は Si/Al 比) についてまとめたグラフを (図 B 8) に示す。ここで、反応温度 500°C 以下では熱分解の寄与はほとんど無く、550°C では 2%、600°C では 5%程度であった。ZSM-5(45)では各温度で高いヘキサン転化率を示し、活性低下もほとんど起こらなかった。Beta(41)および Mordenite(45)ではクラッキング活性を示すものの各温度で反応開始直後から活性低下が起こり、特に高温で顕著に失活した。反応中に生成したコークが活性点を覆ったことが主たる原因と考えられる。MCM-68(13)では初期活性は高いものの活性低下が顕著であった。この失活の主たる原因も炭素析出である。酸処理によって脱 Al 処理を施し、適度に Al 含有量を

調節した MCM-68(51)ではどの反応温度においても ZSM-5(45)に匹敵するヘキサン転化率を示し、活性低下もほとんど起こらなかった。MCM-68 (51)では脱 Al 処理により炭素析出が抑制されたためであると考えられる。MCM-68(51)の炭素析出量は ZSM-5(45)とほぼ同等となり、MCM-68(13)の 10 分の 1 程度まで抑えることができた。続いてプロピレン選択率に関しては、ZSM-5(45)で 33~38%、Mordenite(45)で 40%前後、Beta(41)で 36%前後であった。一方、MCM-68(51)ではいずれの反応温度においてもプロピレン選択率が 40%以上と高かった。

MCM-68(13)と比較し、脱 Al 処理を施した MCM-68 が高いプロピレン選択性を示した理由として、反応場の変化が考えられる。活性点の分布について、MCM-68(13)では 12 員環マイクロ孔が主たる反応場となっていると考えられる。これは、12 員環マイクロ孔がヘキサクラッキングにおいて反応場となると考えられる Mordenite(45)、Beta(41)と似た生成物分布を示すことから推測できる。一方、MCM-68(51)では主として 10 員環マイクロ孔で反応が進行していると考えられる。これは、酸処理による MCM-68 の脱 Al は、12 員環マイクロ孔から優先的に起きており、内部スーパーケージへ通じる 10 員環マイクロ孔に面した Al が選択的に残っているためであると考えられる。

MCM-68(13)、Mordenite (45)、Beta(41)では 12 員環マイクロ孔内で二分子反応が起こりやすいため、プロピレン選択率が低くなったと考えられる。MCM-68(51)におけるプロピレン選択率が高い理由として、細孔次元が三次元であること、酸点のほとんど存在しない 12 員環マイクロ孔をヘキサンが拡散して 10 員環マイクロ孔内に到達できること、そして、10 員環マイクロ孔内で生成したプロピレンは 12 員環マイクロ孔を通じてゼオライト触媒の外へ拡散することなどがあげられる。

以上のように、反応温度 600°C では ZSM-5 と同等以上の触媒性能を示した MCM-68(51)においても、650°C では活性低下がみられた。これに対し、ZSM-5 は 650°C でも依然として長寿命であった (図 B9)。

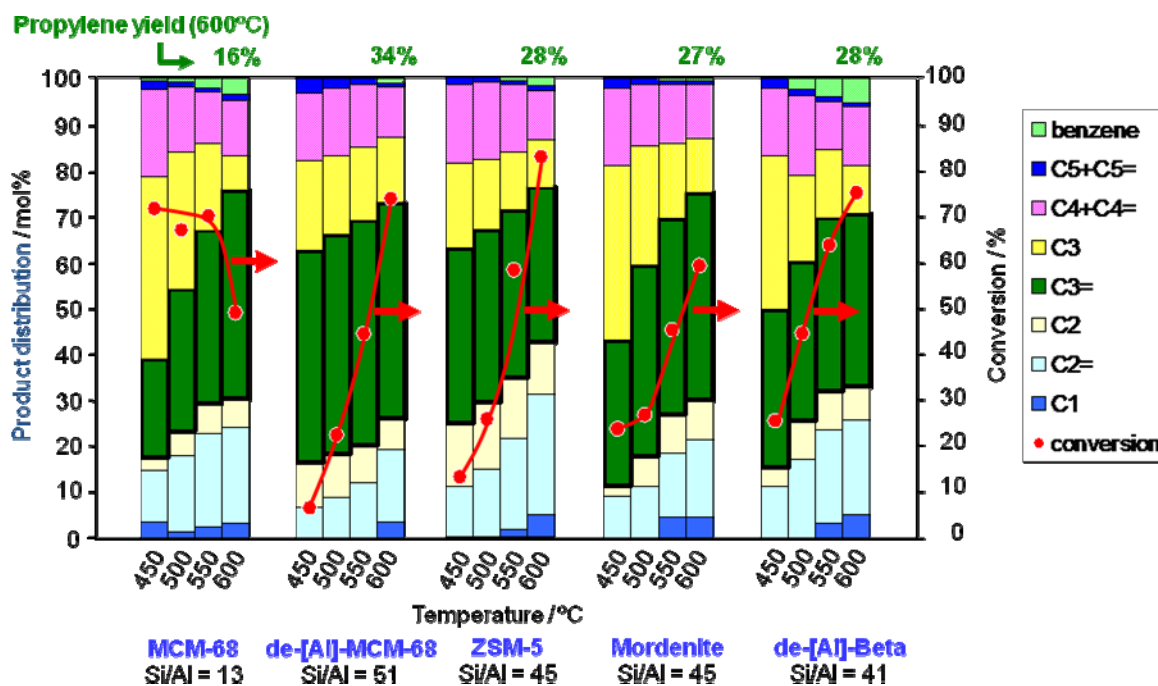


図 B8 MCM-68 (MSE)触媒を用いたヘキサンのクラッキング(450-600°C)

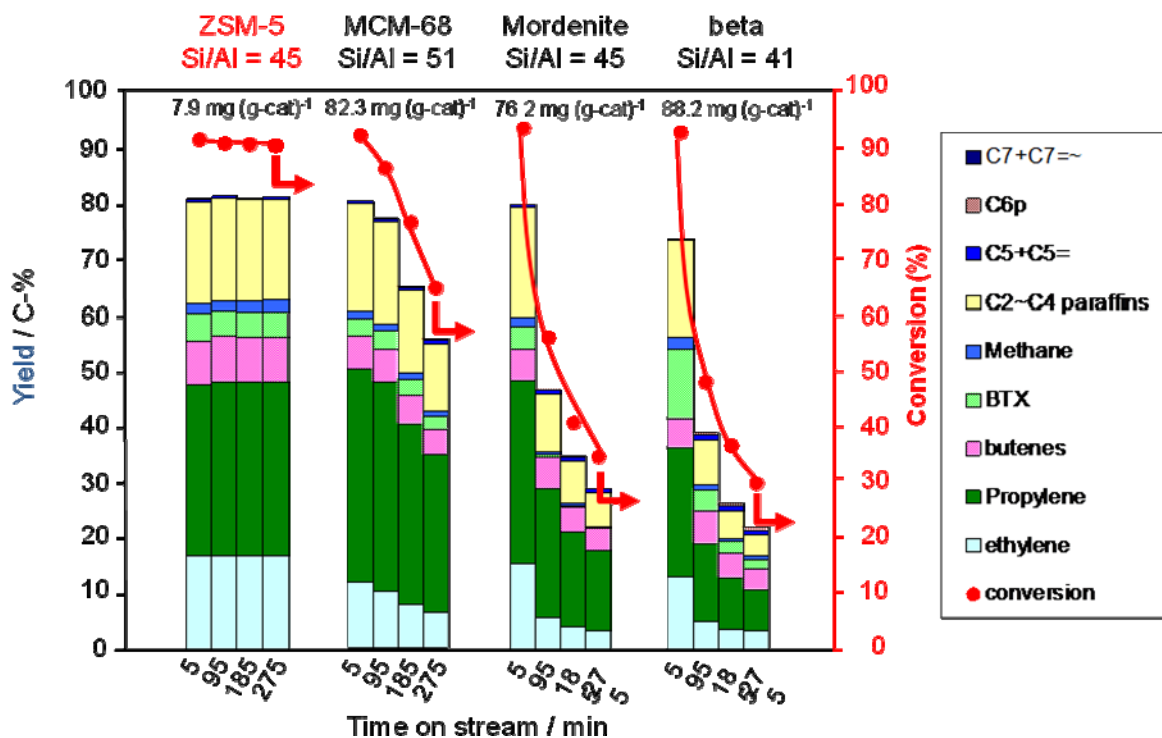
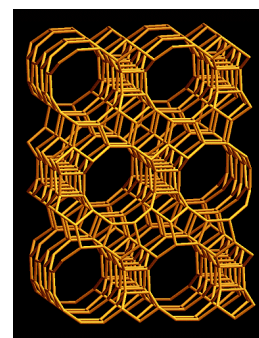


図 B9 MCM-68 (MSE)触媒を用いたヘキサンのクラッキング(650°C)

(iii)* B E A

単位胞組成 $\text{Na}_n[\text{Al}_n\text{Si}_{64-n}\text{O}_{128}] \cdot x\text{H}_2\text{O}$ をもつ正方晶系の合成ゼオライトであり、構造コードは*BEA である。合成時の Al 濃度を変えることにより、 $n < 7$ の範囲で組成を自由に変えることができる。c 軸方向に正方形に近い 12 員環(0.55×0.55nm)断面のらせん状の細孔、a 軸および b 軸方向に 12 員環(0.76×0.64nm)で直線状の細孔を持ち、これらが交差して 3 次元細孔を形成する。細孔の交差点は大きな空間となる。c 軸方向の積層のしかたにより 2 つの異なる構造(多型 A と多型 B)が存在し、ベータはこれら 2 つの混晶である。アルミノケイ酸塩タイプのもは Beta と呼ばれ、工業的にはエチルベンゼンの合成、芳香族のトランスアルキル化など用いられている。



水熱合成法により、ハイシリカで結晶性の高い Beta を合成することは困難であるが、酸処理することにより容易に脱 Al することが可能である。一方、フッ化物法やドライゲルコンバージョン法ではシリカアルミナ比が 100 以上のハイシリカ Beta を直接合成することが可能である。そこで、各種の方法で合成した Beta を触媒として使い、モデル反応としてヘキサンの接触分解を行い、合成法の違いが触媒性能、特にプロピレン選択性に及ぼす影響を検討した。

(1)実験

①Beta の合成と構造解析

次の3種の手法を用いて Beta ゼオライトの合成を行った。

【水熱合成法】シリカ源にヒュームドシリカ (Cab-O-Sil M5)、アルミニウム源に $\text{Al}(\text{NO}_3)_3$ 、構造規定剤 (Structure-directing agent: SDA) にtetraethylammonium hydroxide (TEAOH) を用いて、 140°C で3日間水熱処理を施した後、空気雰囲気下、 550°C で焼成した。生成物を“Beta(HTS)”と標記する。

【ドライゲルコンバージョン法】シリカ源にコロイダルシリカ、アルミ源に $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$ 、SDA に TEAOH を用いてドライゲルを得た。このドライゲルを 180°C で 24 時間水熱処理を施した後、空気雰囲気下、 550°C で焼成した。生成物を“Beta(DGC)”と標記する。

【フッ化物法】シリカ源にtetraethylorthosilicate (TEOS)、アルミニウム源に金属Al、フッ素源にHF、SDAにTEAOHを用いて、 140°C で14日間水熱処理を施した後、空気雰囲気下、 550°C で焼成した。生成物を“Beta(HF)”と標記する。

②Beta の触媒性能評価

①で合成した Beta は NH_4NO_3 水溶液を用いてイオン交換、続く焼成により酸型へと変換した。また、 HNO_3 水溶液により脱 Al を施したサンプルは“de-”をつけて標記する。

ヘキサン接触分解反応は、常圧固定床流通反応装置を用いて行った。外径 6 mm の石英管に、ペレット状 (0.5-0.6 mm) に成形した触媒を充填し、空気気流下 650°C で 1 時間の前処理を行った後に、 600°C に降温後、ヘリウムをキャリアガスとしてヘキサンを触媒に流通して反応を行った。

(2)結果と考察

①Beta の合成と構造解析

図 B 1 0 に各種の方法により合成した Beta の XRD パターンを示す。いずれの方法で合成したのも BEA 型構造であった。フッ化物法の Beta が最も結晶性が最も良く、水熱合成法とドライゲルコンバージョン法の Beta は同程度の結晶性であった。

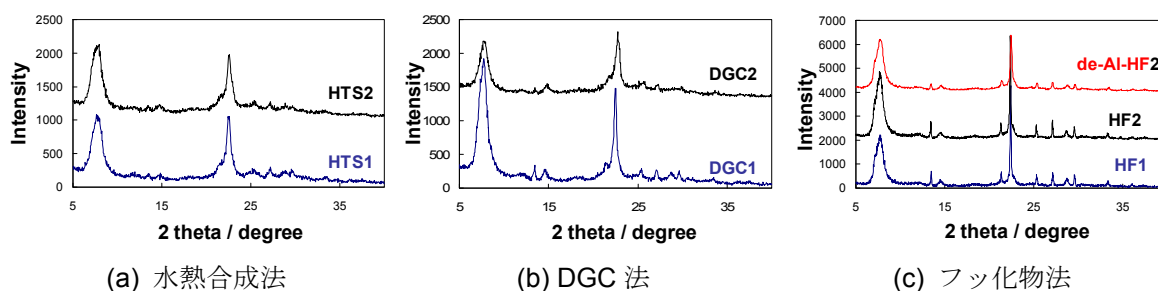


図 B 1 0 種々の調製法で調製した Beta の XRD パターン

(数字 1 : シリカ/アルミナ比=100、数字 2 : シリカ/アルミナ比=200)

図 B 1 1 に調製法の異なる Beta の SEM 像を示す。Beta(HF)の粒子径は約 $1.5\ \mu\text{m}$ 、Beta(HTS)と Beta(DGC)は $100\ \text{nm}$ ほどであった。Beta(HF)は $1.5\ \mu\text{m}$ 程度と他の二つと比べて大きい。なお、いずれの方法においても、シリカアルミナ比を変えても顕著な粒子径の変化は認められなかった。

また、Beta(HF)を酸処理により脱アルミニウムした場合は、粒子の角の部分が丸く削れ、凝集したような形態であった。

表 B 1 に反応に用いた触媒の物性を示す。シリカ/アルミナ比が同程度のものは、それぞれ酸量も同程度となった。Beta(HTS)および Beta(DGC)は Beta(HF)に比べ、外表面積が大きくなった。これは Beta(HTS) および Beta(DGC)の粒子径が Beta(HF)よりも小さい為である。しかし

ながら、BET 比表面積 (S_{BET}) およびマイクロ孔容積 (V_{micro}) は合成法によらずほぼ同じであった。なお、L シリーズは酸量が約 0.15 mmol/g、S シリーズは酸量が約 0.100 mmol/g のものである。

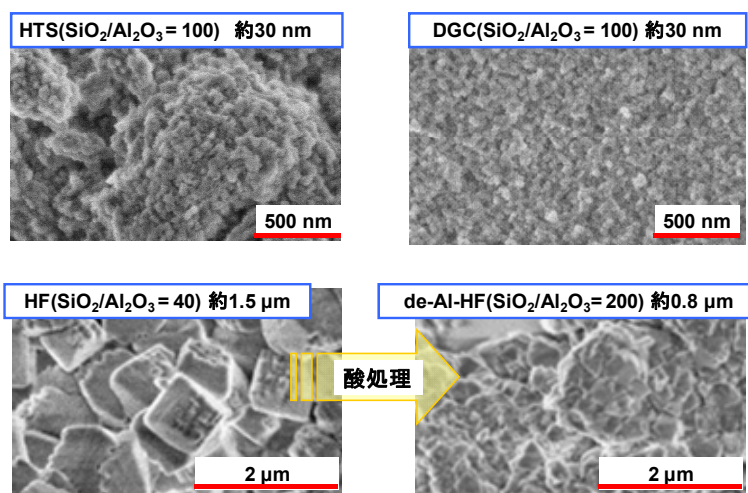


図 B 1 1 調製法の異なる Beta の SEM 像

表 B 1 種々の調製法で調製した Beta の物性値

Sample	SiO ₂ /Al ₂ O ₃ ¹	Acid amount ² (mmol/g)	S _{BET} ³ (m ² /g)	V _{micro} ³ (mL/g)	S _{EXT} ³ (m ² /g)
HTS(L)	138	0.146	575	0.21	138
DGC(L)	131	0.166	637	0.17	153
HF(L)	130	0.160	630	0.23	40
HTS(S)	180	0.099	625	0.24	213
DGC(S)	176	0.103	607	0.20	125
HF(S)	222	0.092	553	0.22	20
de-[Al]-HF(S)	216	0.107	572	0.29	33
JRC-ZSM-5 (90H)	90	0.228	420	0.15	80

¹determined by ICP, ²determined by NH₃-TPD and ³determined by N₂ adsorption-desorption

L シリーズ : 酸量約 0.150 mmol/g、S シリーズ : 酸量約 0.100 mmol/g

②Betaの触媒性能評価

図 B 1 2 に ZSM-5 (JRC-ZSM-5) と水熱合成法により調製した Beta (Beta(HTS)-L) の触媒特性を示す。初期活性はどちらの触媒も同程度であったが、Beta 触媒は急速に失活した。Beta(HTS)-L のプロピレン選択率は ZSM-5 に比べ 10%程度高く、プロピレン選択性が優れていた。また、エチレン選択率は ZSM-5 より低くなった。

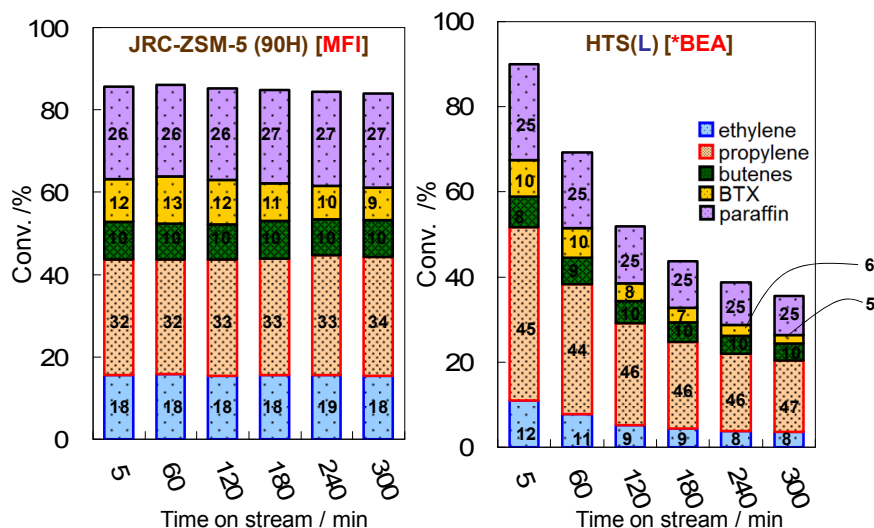


図 B 1 2 ZSM-5(JRC-ZSM-5)と水熱合成法により調製した Beta のヘキサン接触分解
 Reaction conditions: Cat. weight: 50 mg, Reaction temp. 650 °C, W/F = 7.9 g h mol⁻¹, WHSV = 10 /h, P_{Hexane} = 10 kPa, Carrier gas : He, Reaction time: 5 h.

ZSM-5 と Beta(HTS)-L の酸量当たりの *n*-hexane の接触分解反応速度定数および活性化エネルギーを検討した (表 B 2)。反応温度の上昇とともに両者の反応速度定数の差は小さくなり、650 °C では反応速度定数に顕著な差は見られなかった。活性化エ

表 B 2 ZSM-5 (JRC-ZSM-5) と Beta(HTS)-L の各温度における反応速度定数 *k* 及び活性化エネルギー

Sample	反応速度定数 <i>k</i> mol _{total flow} · h ⁻¹ · mol _{acid amount} ⁻¹ × 10 ⁵			活性化エネルギー <i>E</i> (kJ · mol ⁻¹)
	<i>k</i> _{550°C}	<i>k</i> _{600°C}	<i>k</i> _{650°C}	
JRC-ZSM-5 (90H)	0.21	0.68	1.41	121
Beta(HTS)-L	0.16	0.48	1.37	137

ネルギーの序列は Beta > ZSM-5 であることが分かった。NH₃-TPD プロファイルを比べると、“*h* ピーク”のピークトップ温度は ZSM-5 の方が Beta より高く、活性化エネルギーの序列と同じになった。以上より、Beta は高温側において初期活性は ZSM-5 と同程度であり、プロピレン選択率は優れているが、触媒寿命が短いことが分かった。Beta の触媒寿命が大幅に改善されれば Beta は本プロジェクトにおいて有力な候補触媒になりうると思われる。

図 B 1 3 に合成法の異なる Beta 触媒を用いて 650 °C での *n*-hexane の接触分解反応を行った結果を示す (L シリーズに比べ S シリーズでは触媒量を 2 倍用いた)。両シリーズとも初期活性には大きな違いは見られなかった。L シリーズではフッ化物法、水熱合成法、ドライゲルコンバージョン法の順に失活が速くなった。この序列は S シリーズでも同じであった。全体的に失活速度は L シリーズに比べ S シリーズの方が遅いといえる。これは、触媒表面の酸点密度が低いほどコークが生成しにくく、失活が抑制された為であると考えている。

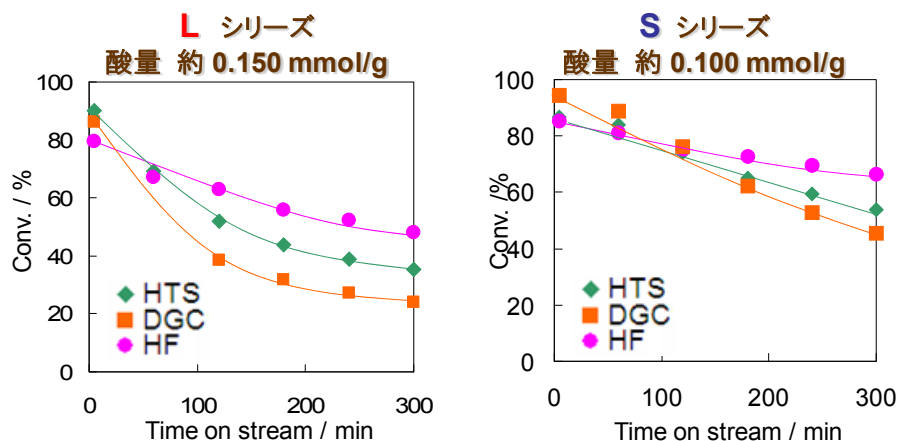


図 B 1 3 調製法の異なる Beta の触媒特性

Reaction conditions: L シリーズ : Cat. weight: 50 mg Reaction temp. 650 °C, W/F = 7.9 g h mol⁻¹, WHSV = 10 /h, P_{Hexane} = 10 kPa, Carrier gas : He, Reaction time: 5 h. S シリーズ : Cat. weight: 100 mg, Reaction temp. 650 °C, W/F=15.8 g h mol⁻¹, WHSV = 5.4 /h, P_{Hexane} = 10 kPa, Carrier gas : He, Reaction time: 5 h.

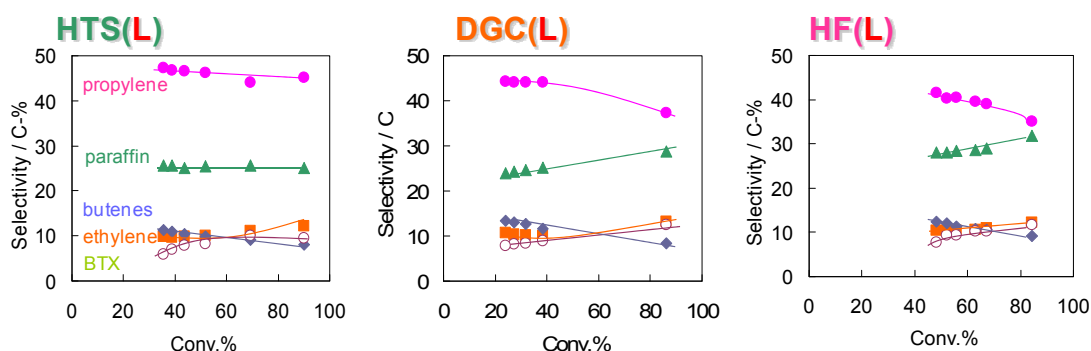


図 B 1 4 調製法の異なる Beta (L シリーズ) の転化率と選択率の関係

Reaction conditions: L シリーズ : Cat. weight: 50 mg, Reaction temp.: 650 °C, W/F = 7.9 g h mol⁻¹, WHSV = 10 /h, P_{Hexane} = 10 kPa, Carrier gas : He, Reaction time: 5 h.

L シリーズにおける転化率と生成物の選択率の関係を図 B 1 4 に示す。Beta(HTS)、Beta(DGC)、Beta(HF)いずれにおいてもプロピレンが主生成物であった。Beta(HTS)では転化率に寄らず 45%程度の高いプロピレン選択率を維持しているのに対し、Beta(DGC)や Beta(HF)では転化率の増加に伴いプロピレン選択率は減少した。以上より、Beta(HF)は寿命の点で、Beta(HTS)はプロピレン選択率の点で優れていると言える。

フッ化物法で調製した Beta (S シリーズ) について、酸処理による脱 Al の効果を検討した。図 B 1 5 に転化率の経時変化を示す。脱 Al したものの、“de-Al-Beta(HF)”, は Beta(HF)に比べて若干初期活性が低下したが、失活の速さは Beta(HF)と同程度で、Beta(HTS)よりも遅いことが分かった。NH₃-TPD より、わずかであるが、ピークトップ温度は de-Al-Beta(HF) < Beta(HTS) < Beta(HF)となった。脱 Al により酸量のみならず酸強度も若干変化することが分かった。この酸強度の変化につ

いては CO 吸着 FT-IR や高分解能固体 NMR 等により検討中である。生成物分布より、Beta(HF)-S は脱 Al することでプロピレン選択率が向上し、50%近くに達した。また、低い BTX の選択性を示し、HTS と類似の傾向となった。酸が弱いほど芳香族への逐次反応が抑制されることが示唆された。これは脱アルミにより強酸点が選択的に除去されるためであると考えている。

以上より、Beta は調製法の違いによりヘキサンの接触分解において異なる挙動を示すことが分かった。また、酸処理により脱 Al することによりプロピレン選択率が向上することを見出した。

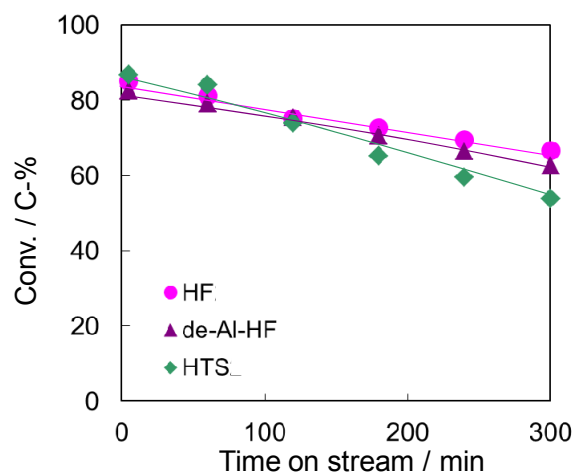
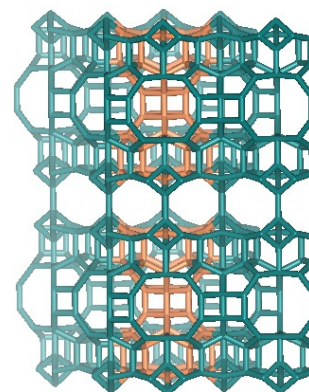


図 B 1 5 Beta(HF)の酸処理による脱 Al の効果

Reaction conditions: Cat. weight: 100 mg, Reaction temp.: 650 °C, W/F = 15.8 g h mol⁻¹, WHSV = 5.4 /h, P_{Hexane} = 10 kPa, Carrier gas : He, Reaction time: 5 h.

(iv) MWW

1990年にMobil社より合成法の特許が出された。単位胞組成 $H_{2.4}Na_{3.1}[Al_{0.4}B_{5.1}Si_{66.5}O_{144}]$ をもつ特異な細孔構造をもつ六方晶系のゼオライトである。通常、ヘキサメチレンイミンを構造規定剤に用い、 $150^{\circ}C$ で水熱合成して得る。水熱合成により得られるのは層状前駆体であり、これを焼成することにより層間で脱水縮合が起こり、MWW構造が形成される。c軸に垂直な方向(層の面方向)に、互いに独立した2つの細孔ネットワークをもつ。一方は層間にあり、まゆ状のスーパーケージ($0.71 \times 0.71 \times 1.82$ nm)がそのまわりの6個のスーパーケージと2次的に連結している。スーパーケージどうしは10員環により直接連結しているため、トンネル状の10員環細孔と比べやや大きな分子が進入できる。もう一方は、層内にあり、10員環のジグザグ状細孔で2次元ネットワークを形成している。アルミノケイ酸塩タイプのもはMCM-22と呼ばれ、工業的にはエチルベンゼンの合成やクメンの合成などに利用されている。



今回、Si/Al比やアルカリ処理やスチーム処理などのポスト処理がヘキサン接触分解性能に及ぼす影響について検討した。

(1)実験

①MCM-22の合成と構造解析

シリカ源にヒュームドシリカ (Cab-O-Sil M5)、Al源にアルミン酸ナトリウム ($NaAlO_2$)、水酸化ナトリウムを混合後、構造規定剤としてヘキサメチレンイミン (HMI) を加え攪拌した。合成ゲルをオートクレーブに入れ $150^{\circ}C$ 、7日間水熱処理した後、層状前駆体を得た。これを焼成することでMWW型ゼオライト (MCM-22) を得た。 NH_4NO_3 を用いイオン交換、空気雰囲気下での焼成により酸型へと変換した。

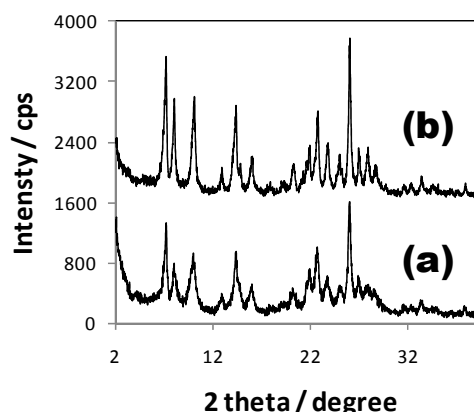
②MCM-22の触媒性能評価

ヘキサン接触分解反応は、上記のBetaの場合と同様の常圧固定床流通反応装置を用いて行った。外径6mmの石英管に、ペレット状(0.5-0.6mm)に成形した触媒を充填し、空気気流下 $650^{\circ}C$ で1時間の前処理を行った後に、ヘリウムをキャリアガスとしてヘキサンを触媒に流通して反応を行った。

(2)結果と考察

①MCM-22の合成と構造解析

図B16にMCM-22のXRDパターンを示す。Si/Al=12及び34の両者ともMWW型構造を有していることを確認した。なお、Si/Al=34の場合、 NH_3 -TPDより求めた酸量は 0.318 mmol/gであった。 N_2 吸着測定よりBET比表面積はどちらも 370 m^2/g であった。



図B16 H-MCM-22のXRDパターン
(a) Si/Al = 12, (b) Si/Al = 34.

②MCM-22 の触媒性能評価

図 B 1 7 に ZSM-5 (JRC-ZSM-5) および BEA の項で水熱合成法により調製した Beta (Beta(HTS)-L) と MCM-22 の触媒特性を示す。初期活性は MCM-22 が最も高く、ZSM-5 と Beta は同程度であったが、Beta は急速に失活し、MCM-22 は Beta よりも失活する速度が遅かった。転化率約 85 %における生成物分布をみると MCM-22 は ZSM-5 と類似の傾向を示し、Beta よりもプロピレン選択率は低いものの高いエチレン選択率を示した。ZSM-5 と Beta、および MCM-22 の 650 °C における酸量当たりの *n*-hexane の接触分解反応速度定数および活性化エネルギーを検討した (表 B 3)。650 °C での反応速度定数は MCM-22 が最も低かった。活性化エネルギーの序列は Beta > ZSM-5 > MCM-22 であり、低温では ZSM-5 と同程度の反応速度を示すことがわかった。

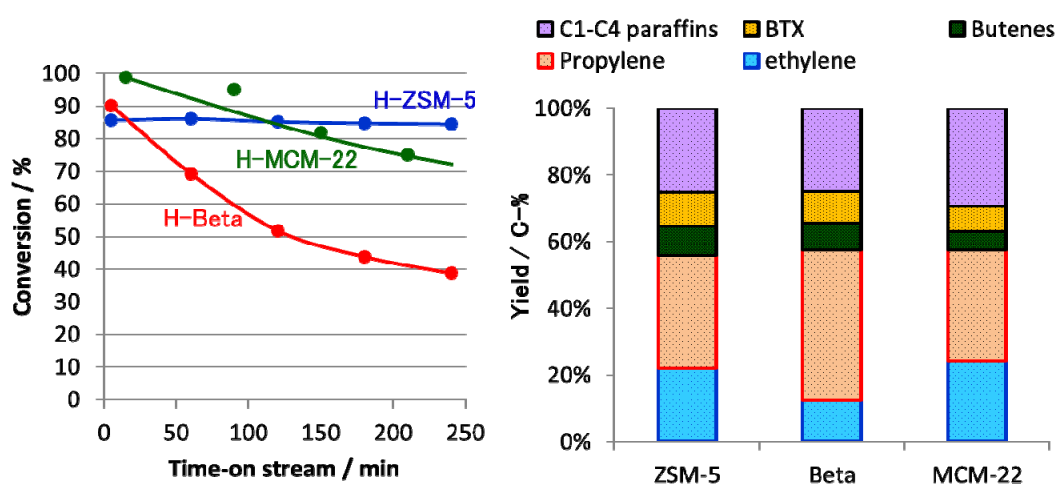


図 B 1 7 ZSM-5, Beta, MCM-22 を用いたヘキサン接触分解

Reaction conditions (ZSM-5, Beta): Cat. weight: 50 mg, Reaction temp.: 650 °C, W/F = 7.9 g h mol⁻¹, WHSV = 10 /h, P_{Hexane} = 10 kPa, Carrier gas : He, Reaction time: 5 h

Reaction conditions (MCM-22): Cat. weight: 100 mg, Reaction temp.: 650 °C, W/F = 24 g h mol⁻¹, P_{Hexane} = 6 kPa.

表 B 3 ZSM-5 (JRC-ZSM-5) と Beta(HTS)-L および MCM-22 の 650 °C における反応速度定数及び活性化エネルギー

Sample	Si/Al	酸量 mmol g ⁻¹	650°Cにおける反応速度定数 mol _{total flow} h ⁻¹ moi ⁻¹ acid amount × 10 ⁵	活性化エネルギー kJ mol ⁻¹
H-ZSM-5	45	0.228	1.41	121
H-Beta	69	0.146	1.37	137
H-MCM-22	34	0.318	0.52	81.4

図 B 1 8 に Si/Al 比の異なる H-MCM-22 でのヘキサンの接触分解反応の結果を示す。両者の初期活性は高い。失活挙動は Si/Al=12~34 の範囲では同程度であることがわかる。生成物分布をみると、Si/Al = 34 の場合、BTX の生成が抑制されており、高転化率側の逐次反応が抑制されていることがわかる。この傾向は ZSM-5 や Beta などと同じであった。

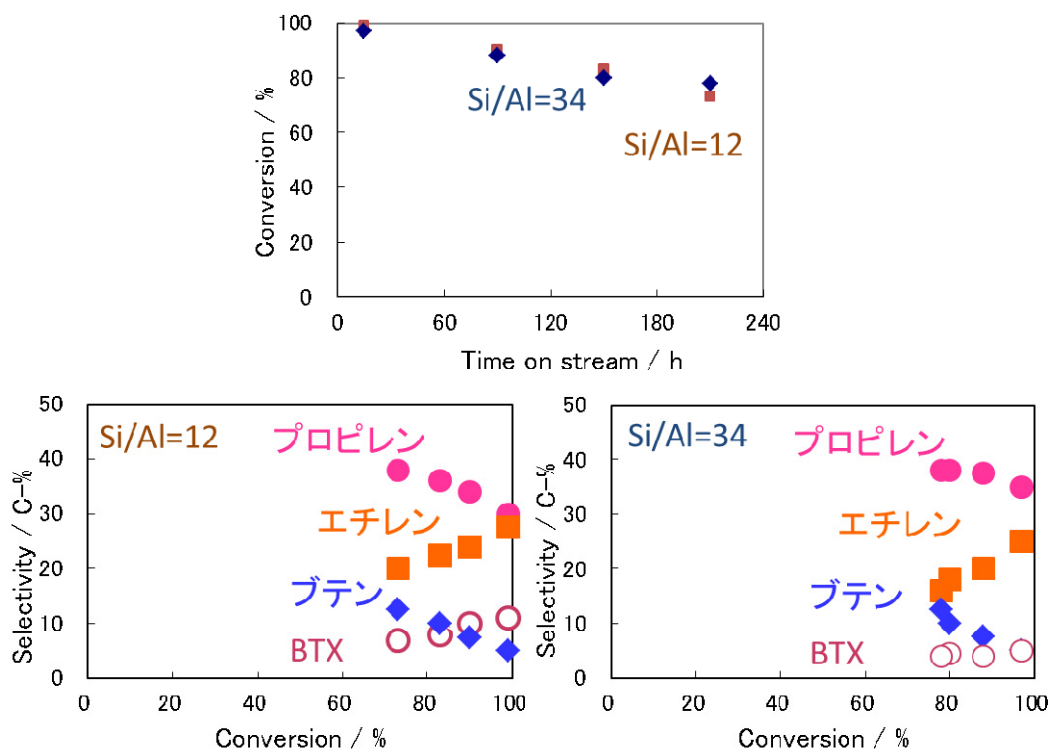


図 B 1 8 Si/Al 比の異なる H-MCM-22 でのヘキサンの接触分解反応

Reaction conditions: Cat. weight: 100 mg, Reaction temp.: 650 °C,

W/F = 64 g h mol⁻¹, P_{Hexane} = 6 kPa.

次に、Si/Al=14 の H-MCM-22 に対して脱 Al や酸性質の変化を期待し、ポスト処理の影響を検討した。行った処理と Si/Al 比の変化は、

- 酸処理: 2M HNO₃, Reflux, 20 h, Si/Al = 14 → 20
- Ammonium hexafluorosilicate 処理: 0.05 M AHFS, Reflux, 3 h, Si/Al = 14 → 37
- アルカリ処理: 0.05 M NaOH, 60 °C, 2 h, Si/Al = 14 → 11
- スチーム処理: Steam P_{H2O} = 30 kPa, 500 °C, 2 h, Si/Al = 14 → 15

である。XRD より各処理後も MWW 構造が維持されていることを確認した。処理前および各処理後の SEM 像を図 B 1 9 に示す。いずれも 100 ~ 300 nm の板状結晶の凝集体であることが分かる。Ammonium hexafluorosilicate 処理が最も脱 Al が進行していた。一方、NaOH 処理では Si/Al 比は減少した。これは脱 Si が起こった為である。

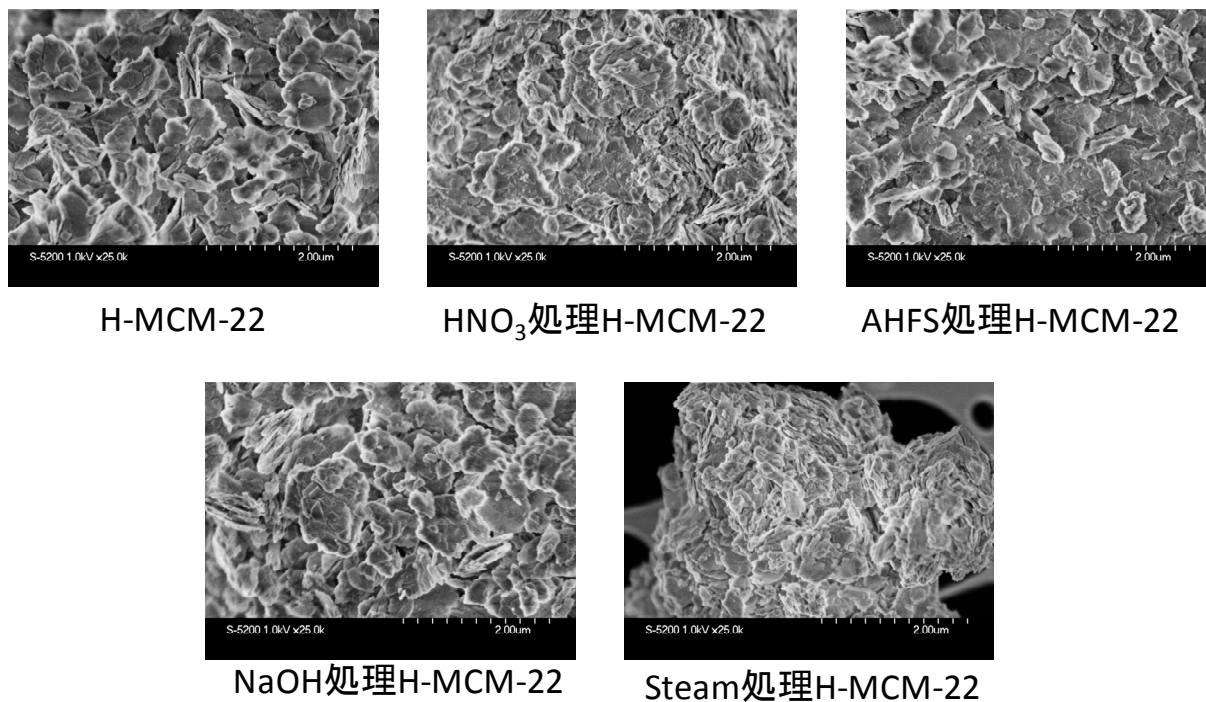


図 B 1 9 ポスト処理前後の H-MCM-22 の SEM 像

これらの触媒性能評価を実施した。図 B 2 0 に反応時間に伴う転化率の変化を示す。ポスト処理を行うことにより触媒寿命が向上した。AHFS 処理を施したものは初期活性がやや低下したものの、最も安定した活性を維持した。反応温度 650 °C における反応速度定数を求めたところ、処理前は 3.2、HNO₃ 処理では 2.0、AHFS 処理では 0.8、NaOH 処理では 2.5、Steam 処理では 4.3 mol · g⁻¹ · h⁻¹ と求まった。Steam 処理以外のポスト処理では活性が酸量の増減にかかわらず低下した。Steam 処理することで酸量は減少するが、活性が向上することが分かった。ZSM-5 でも同様の傾向が得られており、Steam 処理による脱 Al によって生じる骨格外 Al が触媒性能に影響していると考えられる。生成物分布より、MCM-22 の場合は、ZSM-5 と異なり、スチーミングやアルカリ処理を施しても大きな生成物分布の変化は見られなかった。

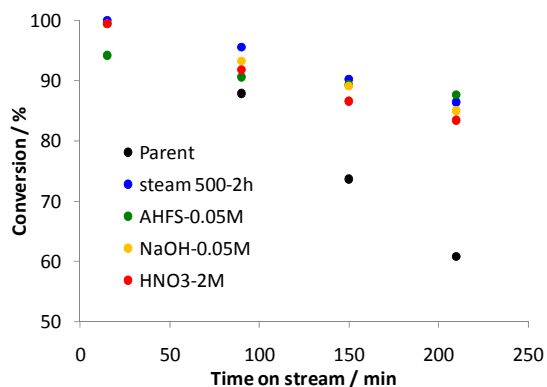
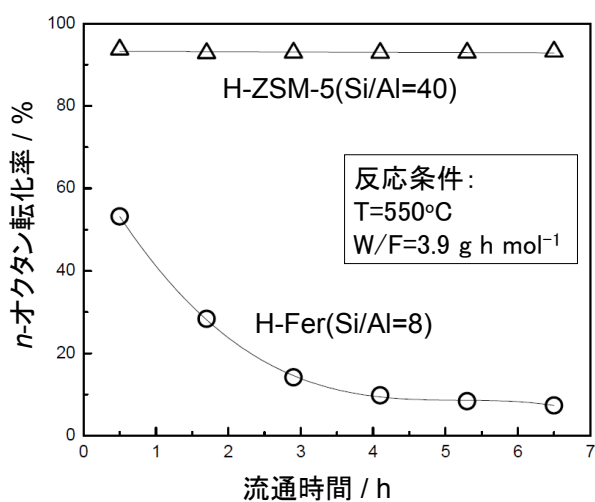


図 B 2 0 種々のポスト処理を施した H-MCM-22 によるヘキサンの接触分解反応
Reaction conditions: Cat. weight: 100 mg, Reaction temp.: 650 °C, W/F = 64 g h mol⁻¹, P_{Hexane} = 6 kPa.

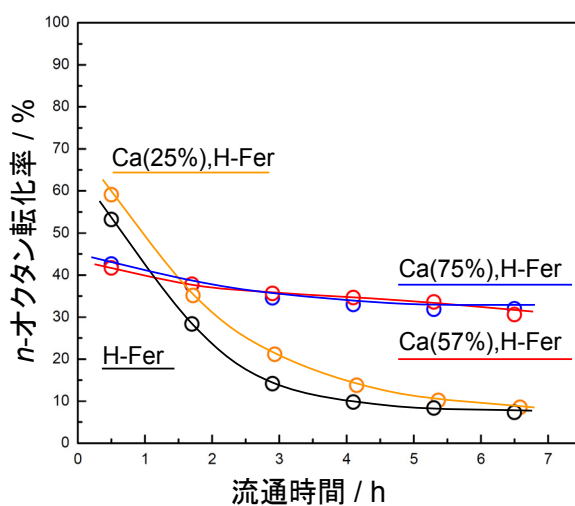
ここで、スチーミング処理温度について検討した。500 °C で最大活性になり、550 °C 以上の処理温度では活性が低下することが分かった。NH₃-TPD の *h*-ピークが大きく減少していることから、脱 Al がかなり進行してしまったために活性が低下したと考えられる。一方、生成物分布より、高温で処理したものほど高転化率におけるプロピレン選択率が若干向上していることが分かった。骨格内 Al が少なくなったため逐次反応が抑制された為であると推測している。

(v) FER

2-1-①-1a に示した第二の作業仮説の実証を目指して、FER 型構造（10 員環細孔と 8 員環細孔が交叉した 2 次元細孔構造）をもつフェリエライトについて検討した。図 B2 1 に、*n*-オクタンのクラッキングを 550°C で行ったときのオクタン転化率の経時変化を示す。H-フェリエライト（H-Fer）は H-ZSM-5 の半分程度の初期転化率を示し、流通時間とともに転化率が大きく低下した。H-Fer が活性および安定性の面で H-ZSM-5 より劣ることが明らかである。図 B2 2 は、Ca²⁺ でイオン交換したフェリエライトを用いたときの結果である。Ca²⁺ 交換率が低いときは顕著な効果が見られなかったが、交換率 57% 以上の Ca,H-Fer では、初期転化率はやや低下するものの安定性が大幅に向上した。



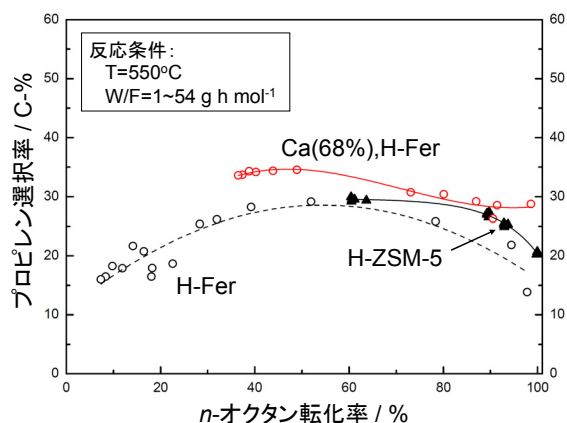
図B2 1 H-FerとH-ZSM-5の活性比較
(オクタンの反応)



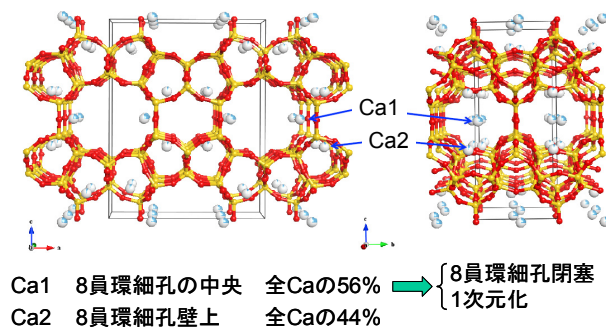
図B2 2 H-FerのCa²⁺イオン交換の効果

図 B2 3 に、プロピレン選択率を比較した結果を示す。H-Fer および H-ZSM-5 の場合、いずれも転化率が 100% に近づくとき選択率が低下した。これはヒドリド移動が促進され、一度生成したプロピレンが消費されるためと考えられる。一方、Ca²⁺ 交換率 68% の Ca,H-Fer では、転化率ほぼ 100% においてもプロピレン選択率は 28 C-% と高い値を保持した。このときのプロピレンとエチレン合計の収率は 52.6 C-% であり、平成 22 年度目標の 47 C-% を超える値が得られた。

イオン交換により導入した Ca²⁺ の位置を知るため、Ca(89%),H-Fer の高温粉末 X 線回折のリートベルト解析を行った。図 B2 4 に示すように、Ca²⁺ は Ca1 および Ca2 で表す 2 種類の位置に存



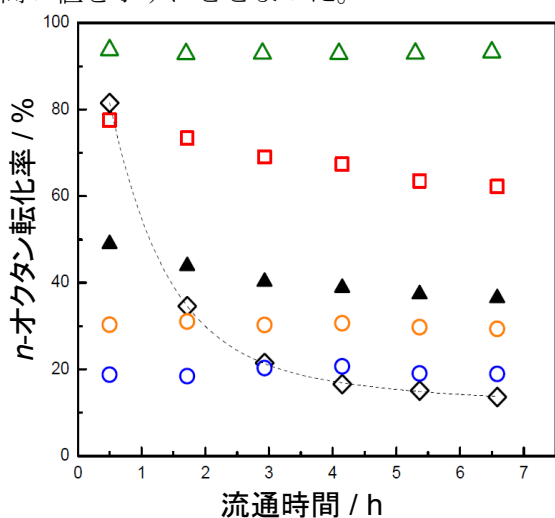
図B2 3 プロピレン選択率の比較



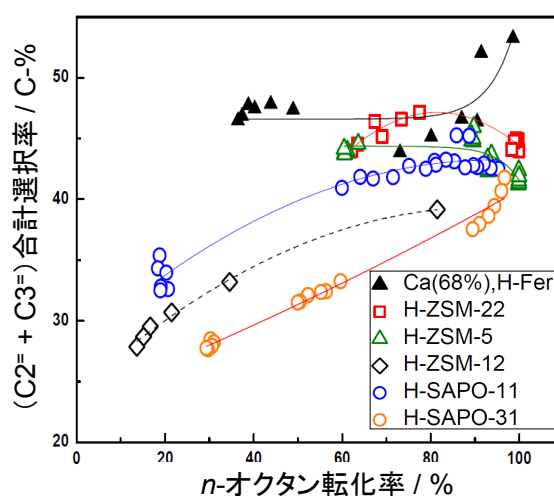
図B2 4 Ca(89%),H-Fer中のCa²⁺の位置

在することが明らかとなった。前者は8員環細孔の中央に位置し、全 Ca^{2+} イオンの56%がこのサイトを占める。このような Ca^{2+} が存在すると、その8員環細孔内では分子の拡散が大きく阻害されると考えられる。一方後者 ($\text{Ca}2$) は8員環細孔の細孔壁上に位置し、分子の拡散には影響を及ぼさないと考えられる。この結果から、 Ca^{2+} 交換によりフェリエライトが10員環入り口をもつ1次元細孔のみからなるゼオライトに近い細孔構造をとるようになると考えられる。 Ca,H-Fer では1次元細孔内でのヒドリド移動が起こりにくいため、オレフィン選択性および寿命が向上したと推定した。

そこで1次元細孔をもつゼオライトを触媒として、*n*-オクタンの反応を行った。図B25に示すように、初期転化率は $\text{H-ZSM-12} > \text{H-ZSM-22} > \text{Ca,H-Fer} > \text{H-SAPO-31} > \text{H-SAPO-11}$ の序列となったが、いずれも H-ZSM-5 より低い値であった。オレフィン（エチレンとプロピレン合計）選択性についても、図B26に示すように Ca,H-Fer には及ばず、 H-ZSM-22 のみが H-ZSM-5 よりやや高い値を示すにとどまった。



図B25 1次元細孔ゼオライトの比較
(活性)



図B26 1次元細孔ゼオライトの比較
(選択性)

2-1-①-2 ゼオライト触媒の長寿命化技術の開発

a コーキング抑制技術

(i) ナノ化

ゼオライト触媒は分子篩能、形状選択性、イオン交換能、固体酸性などの特性を有しており、工業的に広く利用されている触媒であることから、ヘキサン接触分解からの低級オレフィン選択的合成においても有利であると期待される。一方で、ゼオライトは低級炭化水素の分子径と同等の大きさの細孔を有しており、細孔内の反応物質、生成物の拡散が全体の反応速度を支配する場合がある。また、ナフサの接触分解の目的生成物であるプロピレンやエチレンは逐次反応の中間体生成物であるため、これらが細孔内で滞留することにより、過度に逐次反応が進行し芳香族やコーク析出の原因となる。ゼオライトの結晶内、外表面にコークが析出するとゼオライトの細孔が閉塞され、ゼオライトの内部酸点が活性な状態で残っていても見かけ上活性が劣化してしまう。そのため、ゼオライト細孔内での拡散抵抗が無視小となるような条件で接触分解反応を行うことで、長寿命ゼオライト触媒が実現できると考えられる。

ゼオライト細孔内の拡散速度は次式で表される。

$$(\text{拡散速度}) = D_{\text{eff}}/L^2$$

ここで D_{eff} はゼオライト細孔内の有効拡散係数 [m^2s^{-1}]、 L は拡散距離 [m] である。

ゼオライト細孔内の有効拡散係数は、拡散物質とゼオライトの特性に依存する。このため、拡散速度を大きくするためには、拡散距離を小さくすることが必要であると考えられる。つまり、ゼオライト結晶のサイズを小さくすることで、拡散抵抗の低減が可能となると考えられる。

(i-1) ナノ化ゼオライトの合成とナノ化効果の確認 (その1)

粒子サイズの異なる MFI 型ゼオライトを合成し n-hexane の接触分解によりゼオライトのナノ化の効果を確認するとともに、ゼオライト合成コストの低減を目的として MFI 型ゼオライトのテンプレートフリー合成を行った。結晶性の高いゼオライトを水熱合成する際、有機構造規定剤 (テンプレート) と呼ばれる 4 級アルキルアンモニウムを用いる必要がある。しかし、これら有機構造規定剤は高価である。有機構造規定剤を用いずに、高活性なゼオライトを従来法より低コストで合成する方法の開発が必要である。

(1) 実験

① MFI 型ゼオライトの合成

マクロサイズの MFI 型ゼオライトは、シリカ源、アルミ源、構造規定剤を混合させた水溶液をオートクレーブに移し、水熱合成により調製した。得られた白色の沈殿物は洗浄、乾燥後、焼成し構造規定剤を除去して得た。

ナノサイズの MFI 型ゼオライトは、水/界面活性剤/有機溶媒を反応場としたマイクロエマルション法 (T. Tago, et al., *J. Nanosci. Nanotechnol.*, **9**, 612 (2009)) により調製した。シリカ源とアルミ源、構造規定剤を混合した水溶液を調製した (溶液 A)。次に、界面活性剤とシクロヘキサンの混合溶液を調製した (溶液 B)。溶液 A と溶液 B を混合して得られた溶液をオートクレーブに移し、水熱合成を行った。得られた白色沈殿物は洗浄、乾燥の後、焼成により構造規定剤を除去した。

② テンプレートフリー MFI 型ゼオライト合成

界面活性剤を溶解させた均一な水溶液中に、シリカ源、アルミナ源を加え混合させた。この混

合溶液をオートクレーブに移し、水熱条件下でゼオライトの合成を行った。水熱合成後、試料を洗浄し乾燥させた。乾燥後、空気焼成を行い、得られた試料に吸着した界面活性剤を除去した。得られた試料の結晶性は粉末 X 線回折法、細孔特性は窒素吸着法、形状は走査型電子顕微鏡により評価した。また、試料に含まれる Si と Al のモル比は蛍光 X 線分析法と NMR 測定から求めた。

③接触分解反応

n-hexane の接触分解反応は固定層型流通式反応器を使用した。ゼオライト触媒は成形し、接触分解反応を行う前に反応器内で空気焼成を行って使用した。原料にはナフサのモデル物質として n-hexane を用い、反応温度 550~650°C、W/F=0.125~0.75 [kg-cat/(kg-hexane · h⁻¹)]、窒素気流中の常圧条件下で行った。また、n-hexane の転化率、生成物選択率はオンラインのガスクロマトグラフィーによって分析した。

(2) 結果

①テンプレートフリー-MFI 型ゼオライト合成

ゼオライト結晶生成過程における界面活性剤の添加効果を明らかにするために、構造規定剤(テンプレート)を使用しない条件で MFI ゼオライトの合成を行った。比較のため、テンプレート(構造規定剤)を使用した通常的合成、およびテンプレートと界面活性剤を添加しない条件でのゼオライト合成を行った。XRD パターンと窒素吸着等温線を図 C 1 (それぞれ図 C 1 (a)、(b)) に示す。

図 C 1 (a) より、界面活性剤の添加の有無に関わらずテンプレートフリー合成において、得られた試料は MFI 型ゼオライトに起因する回折ピークが得られた。これらのゼオライトの結晶性を詳細に検討するために、窒素吸着等温線を測定した(図 C 1 (b))。テンプレートを使用して得られる、結晶性に優れた MFI 型ゼオライトでは、マイクロ孔への窒素吸着に起因する窒素量は ($P/P_0 \approx 0$ 付近の吸着量)、約 90~100 ml/g に達する。図 C 1 (b) の窒素吸着等温線から、界面活性剤を添加せずに合成した試料では、界面活性剤を添加した試料に比べてマイクロ孔の形成 ($P/P_0 \approx 0$ 付近の吸着量) が不十分であった。一般的に非イオン界面活性剤分子が固体表面に吸着し、固液界面近傍で自己組織化することで微粒子分散系の安定性を高めることが知られている。強アルカリ条件であるゼオライトの合成系において高い結晶性を維持できる要因として、界面活性剤がゼオライトの前駆体や核に吸着し、結晶表面を安定化させているためと考えられる(図 C 2 参照)。

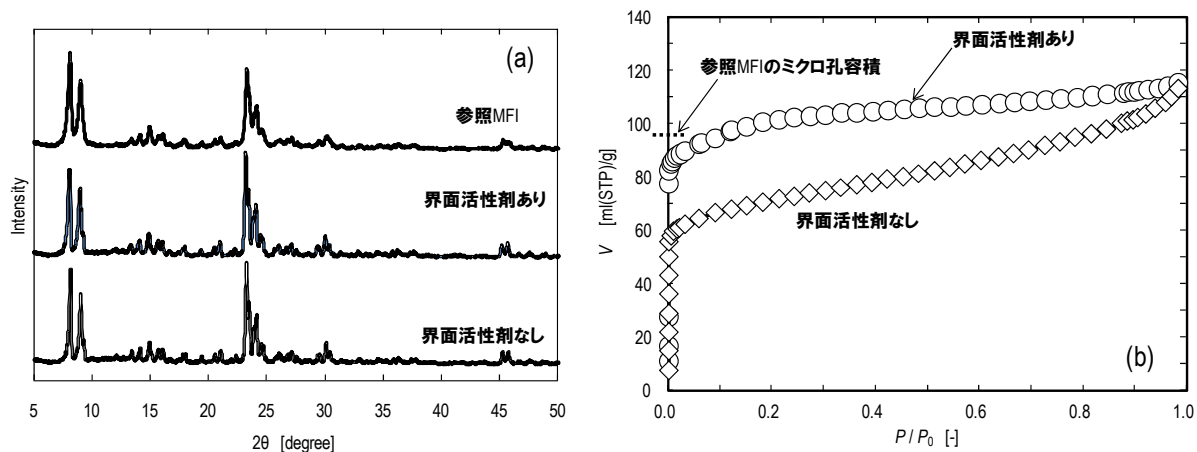


図 C 1 構造規定剤フリー合成法で得られた試料の(a)XRD パターンと(b)窒素吸着等温線

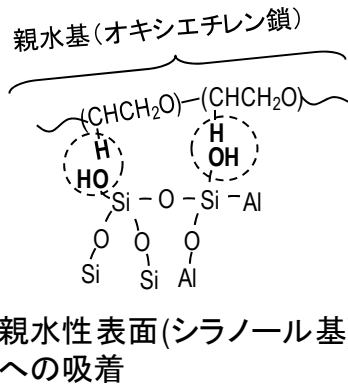


図 C2 ゼオライト表面と界面活性剤親水基の親和性

以上の結果より、テンプレートフリー合成条件においても、界面活性剤を添加することで結晶性に優れた MFI 型ゼオライトが合成されることが明らかとなった。また、この結晶性の違いは、XRD パターンの差異からは評価が困難である。そこで、以降の検討では、結晶性の評価に、窒素吸着等温線から得られるマイクロ孔への窒素吸着に起因する窒素量 ($P/P_0 \approx 0$ 付近の吸着量) を用いた。

次に、Al 源の添加量による結晶性の変化について検討した。図 C3 に Si/Al 比を変えて調製した試料の結晶性 (XRD パターン) を示す。Si/Al 比が 50 より小さい領域 (Al が多い領域) では純粋な MFI 型ゼオライトが得られている。一方、Si/Al 比が 80 より大きい領域 (Si が多い領域) では MFI 型の XRD パターンは僅かながら確認されるが、そのピーク強度は非常に弱い。従って、Si/Al 比 < 50 の条件において、MFI 型ゼオライトが得られることが明らかとなった。これは、Al 原子が MFI 型ゼオライトの骨格構造の形成に重要な役割を果たしているためと考えられる。

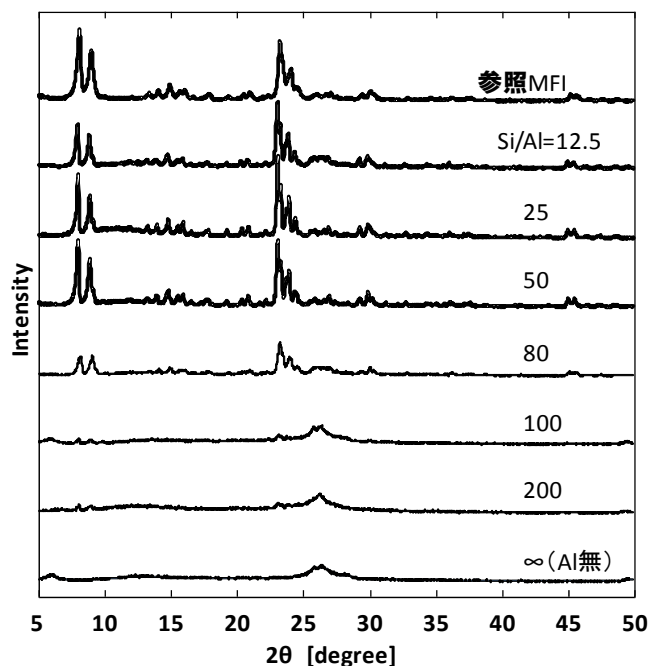


図 C3 仕込み Si/Al 比の異なる条件で調製した試料の XRD パターン

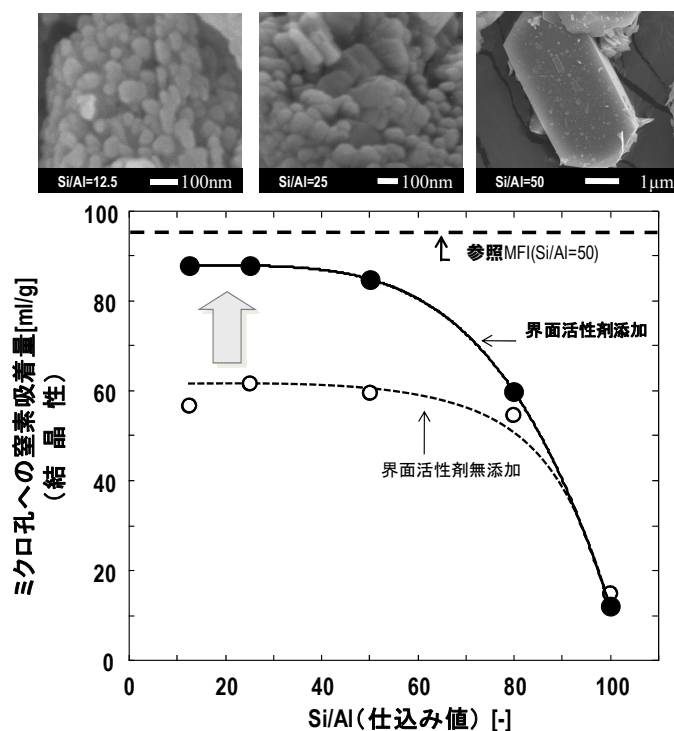


図 C4 Si/Al 比とマイクロ孔への窒素吸着量，および試料の FE-SEM 写真

次に同試料の窒素吸着等温線を測定し、マイクロ孔への吸着に起因する窒素量から結晶性を評価した。図 C4 に Si/Al 比とマイクロ孔への窒素吸着量の関係を示す。Si/Al 比が 50 より小さい領域ではマイクロ孔が十分に形成されており、高い結晶性を有していることが示された。また、Si/Al<50 の領域では、全ての試料において、界面活性剤を添加することにより結晶性が向上していることが明らかとなった。

高い結晶性を示していた Si/Al=12.5, 25, 50 の試料 (●) について、FE-SEM による形状観察を行った結果を図 C4 に併せて示した。Si/Al 比が小さく (Al 源の添加量が多く) なるに従い、粒子径が小さくなることがわかる。このことから、Al 濃度がゼオライトの核発生数に影響を及ぼし、Al 添加量の多い条件 (Si/Al=12.5) では結晶性に優れたナノサイズのゼオライトが合成されることが明らかとなった。

以上の検討内容より、界面活性剤を添加した場合は、テンプレートフリー合成においても結晶性の高いゼオライト結晶が得られ、さらにアルミリッチ領域においてはナノクリスタルが合成できることが示された。

Al 濃度が MFI 型ゼオライト結晶の核発生と結晶形成に影響を与えていることが示唆された。そこで、界面活性剤の添加の有無がゼオライトの収率に及ぼす影響を検討した。図 C5 に Si/Al 比とゼオライト収率の関係を示す。界面活性剤を添加することで、収率が飛躍的に向上した。これは合成系が強アルカリ性条件下であるにも関わらず、界面活性剤が結晶表面を安定化することで、結晶が水相へ再溶解するのを抑制しているためと考えられる。

同図中には、Si/Al 比=50 における ^{29}Si MAS-NMR と ^{27}Al MAS-NMR の結果をあわせて示した。添加した Al 原子に関しては、骨格外の Al 原子 (6 配位) はほぼ含まれておらず、骨格内 (4 配位、Si(1Al)) に取り込まれていることがわかる。

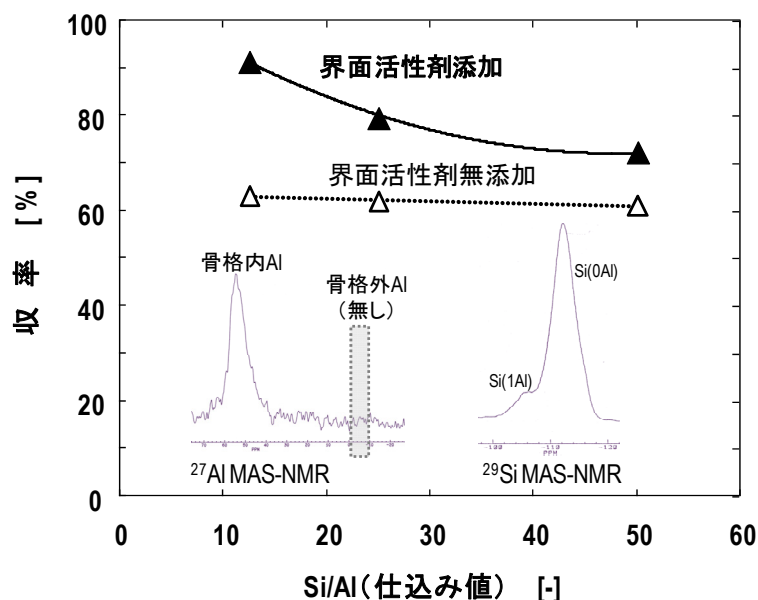


図 C5 Si/Al 比と得られたゼオライトの収率の関係、および NMR スペクトル

②MFI 型ゼオライト粒子径の影響

結晶サイズが 150~200nm、500~600nm、1.4~1.6 μ m の MFI 型ゼオライトを用い、n-hexane の接触分解反応を行った結果を図 C 6 に示す。この時の反応温度は 650 $^{\circ}$ C、W/F = 0.125 [kg-cat/(kg-hexane \cdot h $^{-1}$)]とした。図 C 6 (a)より、MFI 型ゼオライト結晶を微小化することで、オレフィンおよびパラフィンの選択性が向上し、BTX の選択性が低下することがわかる。また、図 C 6 (b)は生成した C2~C4 オレフィンの収率を示しており、ゼオライト結晶が微小化することで、プロピレンの収率が增大していることが確認される。n-hexane の接触分解反応では、まず n-hexane が反応し低級のアレフィンやパラフィンが生成する。その後、生成したこれら分子がゼオライト細孔内で滞留することで逐次反応が進行し BTX が生成すると考えられる。よって、MFI 型ゼオライトの結晶径を微小化することで、細孔内でのプロピレンの滞留時間が短くなり、逐次反応が抑制されたと考えられる。また、図 C 7は結晶サイズが 80~90nm、150~200nm の MFI 型ゼオライトを用い、650 $^{\circ}$ Cで n-hexane の接触分解反応を行った結果である。MFI 型ゼオライトの粒子径が 200nm 以下の領域では生成物選択性、オレフィン収率が粒子径に依らずほぼ等しい値を示していることがわかる。これより、粒子径 200nm 以下の領域では反応律速となっていると示唆される。同様に、反応温度 550 $^{\circ}$ Cにおいても粒子径が 200nm 以下では n-hexane の反応率、生成物の収率に変化がないことを確認している。

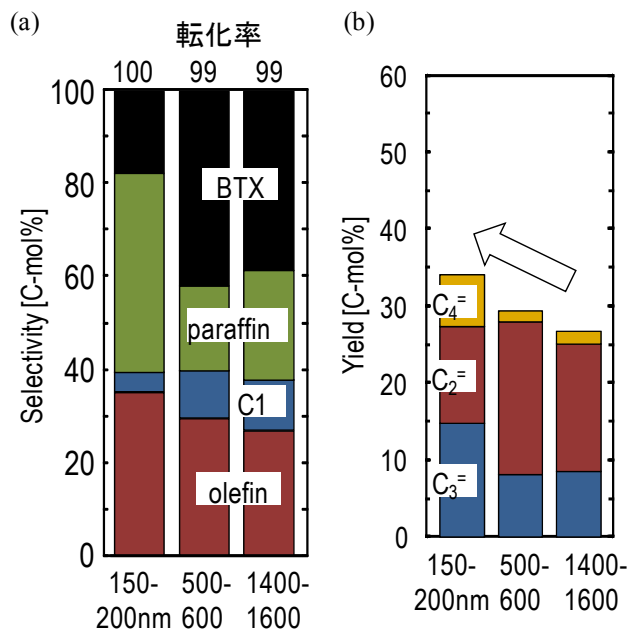


図 C 6 n-hexane 接触分解反応の生成物選択性(a)とオレフィン収率(b)

(MFI 型ゼオライト粒子径 150~200nm、500~600nm、1.4mm~1.6mm、Si/Al=50、反応温度 650°C)

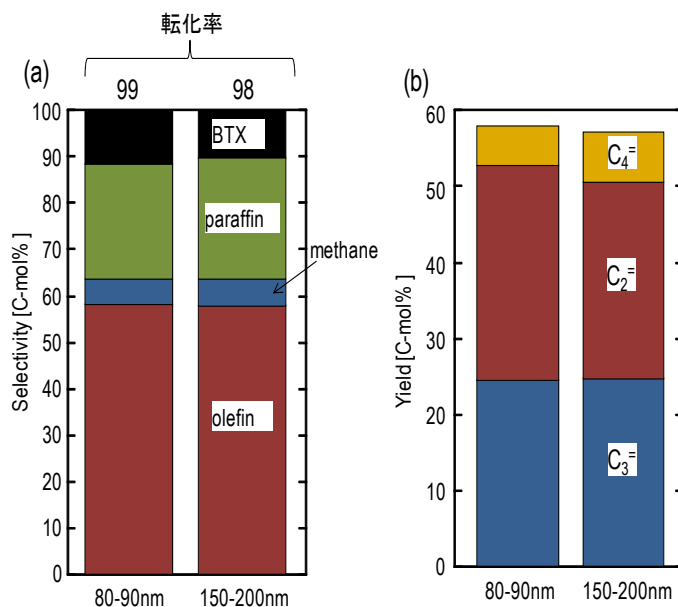


図 C 7 n-hexane 接触分解反応の生成物選択性(a)とオレフィン収率(b)

(MFI 型ゼオライト粒子径 80~90nm、150~200nm、Si/Al=150、反応温度 650°C)

③n-hexane 接触分解に及ぼす触媒量 (W/F) の影響

粒子径 150nm の MFI 型ゼオライトナノクリスタルを用い、n-hexane 供給量に対する触媒量 ($W/F[\text{kg-cat.}/(\text{kg-C}_6\cdot\text{h}^{-1})]$) の影響について検討を行なった。この結果を図 C 8 に示す。

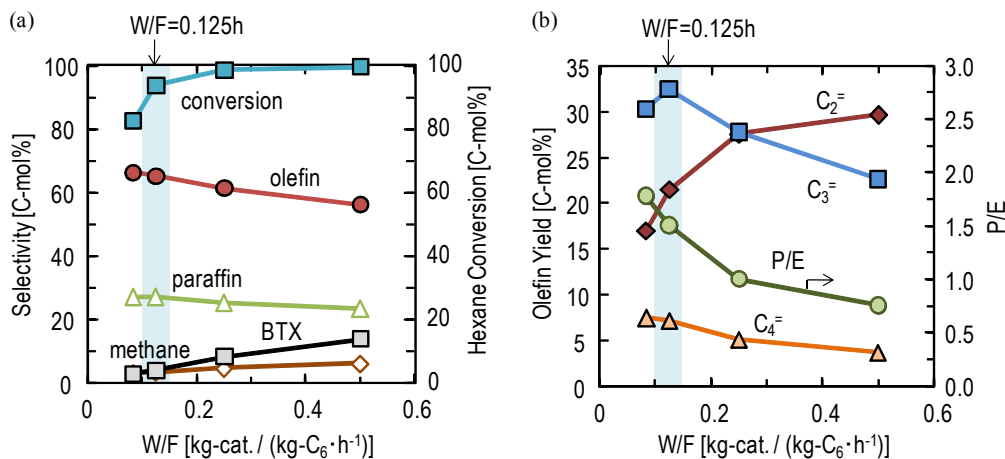


図 C8 各 W/F における転化率と選択性(a)、低級オレフィン収率(b)

$W/F = 0.083h, 0.125h, 0.25h, 0.5h$ の条件で反応実験を行なった。 W/F 値を大きく (MFI 型ゼオライト量を多く) するに伴い、 n -hexane の転化率は大きくなり $W/F=0.25h$ 以上ではほぼ 100% となった。また生成物選択性については、 W/F 値が大きくなるにつれオレフィン選択性は低下し、BTX 選択性が増加する結果が得られた。オレフィンの収率に着目すると、プロピレンの収率は $W/F=0.125h$ で最大値をとり、 W/F 値大きくなるに伴いプロピレン収率が低下した。また、エチレン収率は W/F 値が大きくなるに伴い大きくなるため、プロピレンとエチレンの比 (P/E) は W/F 値が大きくなるにつれて小さくなり、 $W/F=0.25$ より大きい領域では 1 以下となった。 W/F 値が大きい領域では、反応初期に生成したプロピレンが触媒細孔内で他の生成物へ逐次的に反応しているためであると考えられる。一方、触媒量の少ない $W/F=0.083h$ では、プロピレンからの逐次反応が高 W/F 値領域に比べ抑制されているものの、転化率が約 80% と他の W/F 値と比較し低いいためプロピレン収率が $W/F=0.125h$ に比べ低い値となったと考えられる。ここで検討した W/F の中で、最もプロピレン収率が高かったのは $W/F=0.125h$ の条件であり、90% 以上の高転化率となっているため、本研究においては $W/F=0.125h$ が最適であることが分かった。

④長時間 n -hexane 接触分解反応に対するゼオライト粒子径の影響

MFI 型ゼオライトの粒子径が長時間の n -hexane 接触分解反応に及ぼす影響について検討を行った。反応には結晶サイズ約 $3\mu m$ のマクロ結晶および粒子径約 $150nm$ のナノ結晶を用い、反応時間を 50 時間とした。反応結果を図 C9 ~ 10 に示す。

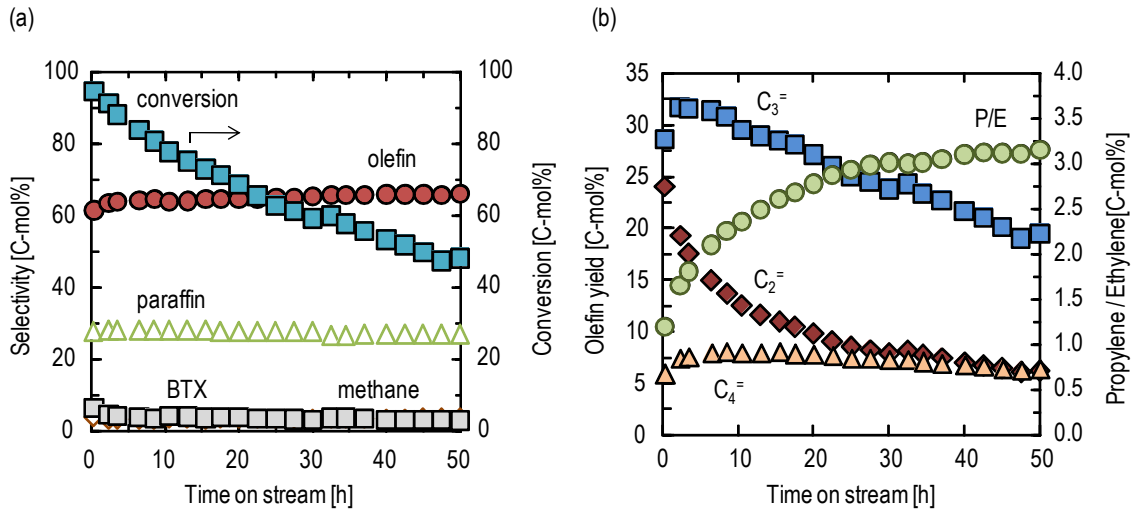


図 C9 マクロサイズ MFI 型ゼオライトを用いた *n*-hexane 接触分解反応における転化率と生成物選択性の経時変化(a)、低級オレフィン収率の経時変化(b)

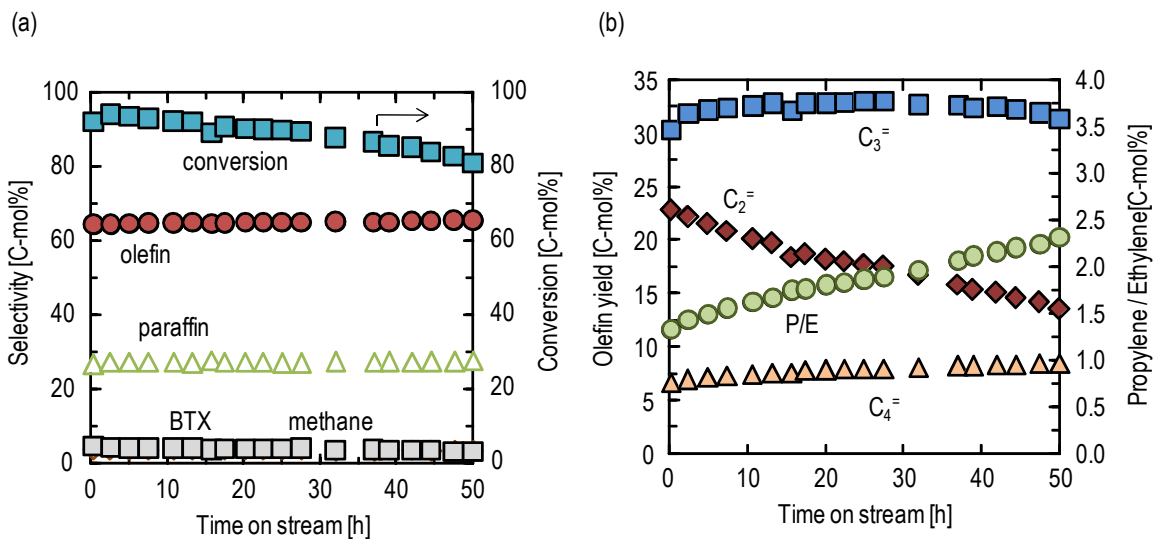


図 C10 ナノサイズ MFI 型ゼオライトを用いた *n*-hexane 接触分解反応における転化率と生成物選択性の経時変化(a)、低級オレフィン収率の経時変化(b)

同転化率における各生成物選択率の関係は MFI 型ゼオライトの結晶サイズに依らずほぼ同一であった。*n*-hexane 転化率の経時変化に着目すると、マクロ結晶の場合、反応初期ではおよそ 95% であった転化率が、反応時間 50h 経過後にはおよそ 48% にまで低下した。これはコークの析出により細孔閉塞が起こり、細孔内酸点が見かけ上劣化し、多くの細孔内酸点が反応に関与できなくなったためであると考えられる。一方、ナノ結晶の場合は反応時間 50h 経過後においても転化率が 80% 以上を維持し、プロピレンの収率も 30% 以上を維持する結果となった。これは結晶サイズを微小化したことにより外表面積が増大し、コーク析出による細孔閉塞の影響が低減したためであると考えられる。このように、結晶サイズの微小化は触媒の活性の安定に非常に有効である。

(i-2) ナノ化ゼオライトの合成とナノ化効果の確認 (その2)

－ 合成ゲル中の H₂O 量の制御によるナノ化 －

シリカライト-1 を合成する際、水の少ないゲル組成で、結晶化前に 80 °C で一日熟成させるだけで、平均結晶子径が 60 nm 程度の結晶子径のそろった単分散ナノサイズシリカライト-1 を合成できることを見出している。この手法を応用し、ZSM-5 の微結晶化の検討および結晶子径がヘキサンの接触分解に及ぼす影響を検討した。

(1) 実験

①結晶子径の異なる H-ZSM-5 の合成と構造解析

テトラプロピルアンモニウムヒドロキシド水溶液 (TPAOH) に、シリカ源であるテトラエトキシシラン (TEOS) を加え、80 °C で一定時間攪拌・熟成後、蒸発による質量減少量分の水にアルミニウム源である硝酸アルミニウム、水酸化ナトリウム、L-グルタミン酸(L-Glu) を溶かした溶液を滴下した。170 °C で 24 時間水熱処理を行った後、550 °C で焼成することで Na 型の ZSM-5 を得た。最終的な合成ゲルのモル組成は SiO₂ : Al₂O₃ : TPAOH : NaOH : H₂O = 1 : 0.01 : 0.25 : 0.1 : n とし、n = 8.3、30、40、100 とすることで合成ゲル中の水の量を変え、ZSM-5 の結晶子径を制御した。得られたサンプルを硝酸アンモニウム水溶液によりイオン交換、続く 550 °C での焼成により酸型の ZSM-5 を得た。

②結晶子径の異なる H-ZSM-5 の触媒性能評価

ヘキサン接触分解反応は、常圧固定床流通反応装置を用いて行った。外径 6 mm の石英管に、ペレット状 (0.5-0.6 mm) に成形した触媒を充填し、空気気流下 650 °C で 1 時間の前処理を行った後に、ヘリウムをキャリアガスとしてヘキサンを触媒に流通した。以下に各検討項目における詳細な条件を記す。反応に用いた触媒上析出したコークの定量は熱重量-示差熱分析装置 (TG-DTA) を用いて行った。

【反応温度の影響の検討】

反応管に触媒 50 mg 充填し、反応温度 450-650 °C で反応を行った。ヘキサン分圧は 6 kPa とした。触媒を充填したまま反応温度を 450-650 °C まで 50 °C ずつ変化させ連続的に反応を行った。各温度において 50 分間反応しサンプリング後ヘリウムを流通させ、5 °C/min で昇温し次の反応温度に達したら再びヘキサンを流通させた。

【W/F の影響の検討】

反応管に触媒 10-100 mg 充填し、反応温度 600 °C で反応を行った。ヘキサン分圧は 6 kPa とした。各 W/F において 50 分間反応しサンプリングした。触媒の充填量を変えることで異なる W/F において反応を行った。

【ZSM-5 の結晶子径が触媒寿命に及ぼす影響】

反応管に触媒 10 mg 充填し、反応温度 650 °C で反応を行った。ヘキサン分圧は 23 kPa、WHSV=70 h⁻¹ とした。反応開始 5 分後にサンプリングを行い、その後 60 分間隔で 48 時間反応を行った。

(2) 結果と考察

①結晶子径の異なる H-ZSM-5 の合成と構造解析

水の量を変え合成した H-ZSM-5 の SEM 画像を図 C 1 1 に示す。水の割合が最も少ない $H_2O/TEOS = 8.3$ のとき結晶子径は 100 nm 程度になり、ゲル組成中の水の割合を増やすにつれ結晶子径が増大し、 $H_2O/TEOS = 100$ のとき約 1 μm の ZSM-5 が得られた。なお、XRD 測定より、いずれのサイズの H-ZSM-5 も MFI 型構造であることを確認している。ゲル中の水の量が合成ゲルに及ぼす影響は二つ考えられる。

一つは水の量を減らすことで、ゲル中の SDA やシリケート種の濃度が上昇すること。もう一つは水の量を減らすことでゲルの pH が高くなることにより TEOS の加水分解が促進され、シリケート種の濃度が上昇することである。ゲルのアルカリ性が高いほど核発生が促進され、結晶子径の小さい MFI 型ゼオライトが得られることが報告されている。このことから上に挙げた二つの理由により核が発生しやすくなり結晶子径が減少したと考えられる。このことから水の量を変えるだけで容易に結晶子径を制御できることがわかった。

結晶子径が約 100 nm、400 nm、1 μm の三種類の H-ZSM-5 を反応に用いた。それぞれを結晶子径の小さいものから H-ZSM-5 (S)、H-ZSM-5 (M)、H-ZSM-5 (L) とする。これら三種類の詳細な構造解析について以下に述べる。窒素吸脱着測定、アンモニア TPD 測定、ICP 測定により得られた触媒の物性を表 C 1 にまとめた。ICP 測定の結果からいずれのサイズの H-ZSM-5 もほぼ仕込み通り $Si/Al=50$ 程度のものであることがわかった。アンモニア TPD の結果から導入された Al の約 90% が酸点になっていることがわかり、すべての H-ZSM-5 が同程度の酸量を有していることがわかった。窒素吸脱着測定の結果から BET 比表面積、外表面積ともに結晶子径が小さくなるにつれて増大することがわかった。BET 比表面積から外表面積を引くといずれも約 350 m^2/g 程度となり、マイクロ孔内の比表面積はサイズによらず同程度であることがわかった。 ^{27}Al MAS NMR 測定より、結晶子径によらず全ての試料で 50 ppm 付近に 4 配位 Al 種に帰属されるピークのみが見られ、6 配位 Al 種に帰属される 0 ppm のピークがほぼ見られなかった。これは導入したほぼすべての Al がゼオライト骨格内に入っていることを示しており、アンモニア TPD の結果とも一致する。

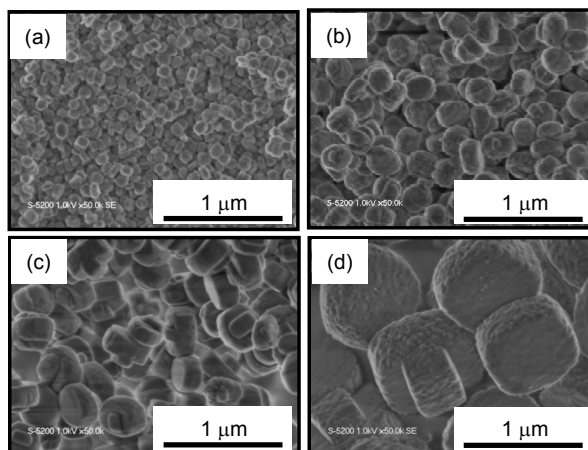


図 C 1 1 水の量を変化させ調製した ZSM-5 の SEM 像
 $H_2O/TEOS =$ (a) 8.3, (b) 30, (c) 40 (d) 100

表 C 1 結晶子径の異なる H-ZSM-5 の物性

Sample	Si/Al [ICP]	S_{BET} [m^2/g]	S_{EXT} [m^2/g]	Acid amount [mmol/g]	Al conc. [mmol/g]
H-ZSM-5 (S)	50	403	49	0.307	0.326
H-ZSM-5 (M)	53	399	32	0.286	0.309
H-ZSM-5 (L)	48	370	12	0.309	0.340

②結晶子径の異なる H-ZSM-5 の触媒性能評価

【反応温度の影響の検討】

図 C 1 2 に温度を変えて行った反応結果を示す。左の軸が転化率、右の軸が選択率を示している。結晶子径を変えても、各反応温度における転化率にほとんど違いは見られなかった。H-ZSM-5 を用いたヘキサンの接触分解はこの温度領域において拡散律速でないことが示唆された。選択性の反応温度依存性も各触媒で類似の傾向を示した。反応温度が高くなるにつれてプロピレン、ブテン類の選択性が低下し、エチレン、BTX (ベンゼン, トルエン, キシレン)の選択性が増加した。ブテンやプロピレンの選択性が減少したのは、逐次反応により芳香族(BTX)に転化してしまったためであると考えられる。エチレンはプライマリーカルベニウムイオンを経由しなければならず非常に生成しにくい物質であるため低温では選択性が低い。しかし高温になるにつれてプライマリーカルベニウムイオンが生成しやすくなったため選択性が増加したと考えられる。また、プロピレンやブテンに比べ逐次反応が進行しにくいことも選択性増加の理由であると考えられる。

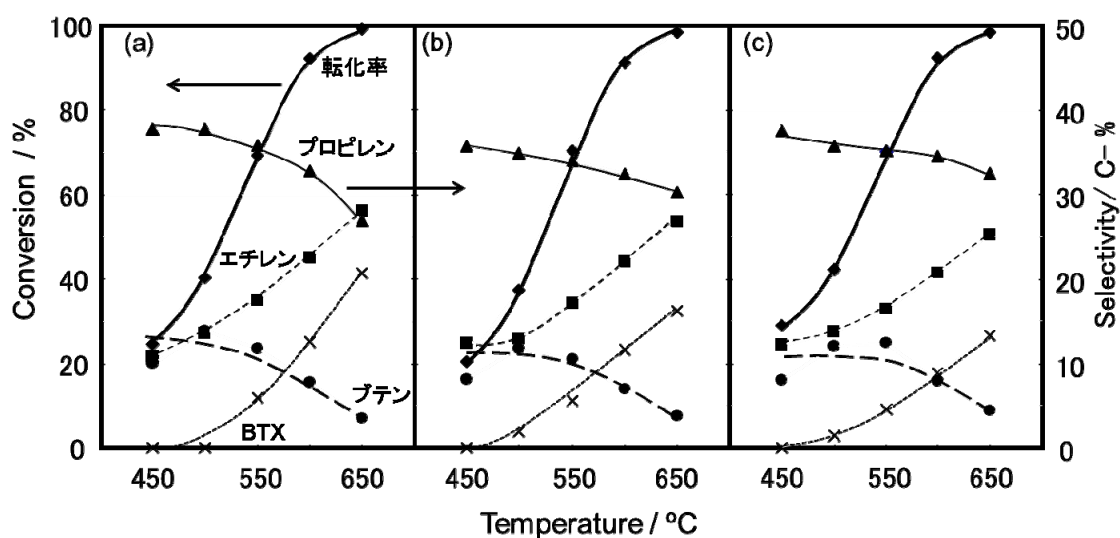


図 C 1 2 反応温度の影響 (a) H-ZSM-5 (S), (b) H-ZSM-5 (M), (c) H-ZSM-5 (L)

□転化率, ▲プロピレン, ■エチレン, ●ブテン類, × BTX

【W/F の影響の検討】

図 C 1 3 に W/F を変えて行った反応結果を示す。600 °C では熱分解により 3%ヘキサンが転化する。熱分解は流量に依存する反応であるため、これを一定にするために触媒量を変えることにより W/F を変えた。結晶子径を変えても、各 W/F における転化率にほとんど違いは見られなかった。選択性の依存性も各触媒で類似の傾向を示した。W/F が大きくなり転化率が大きくなるにつれてプロピレン、ブテン類の選択性が低下し、エチレン、BTX の選択性が増加した。ブテンやプロピレンの選択性が減少したのは、反応温度の影響の時と同様に逐次反応により芳香族 BTX に転化してしまったためであると考えられる。

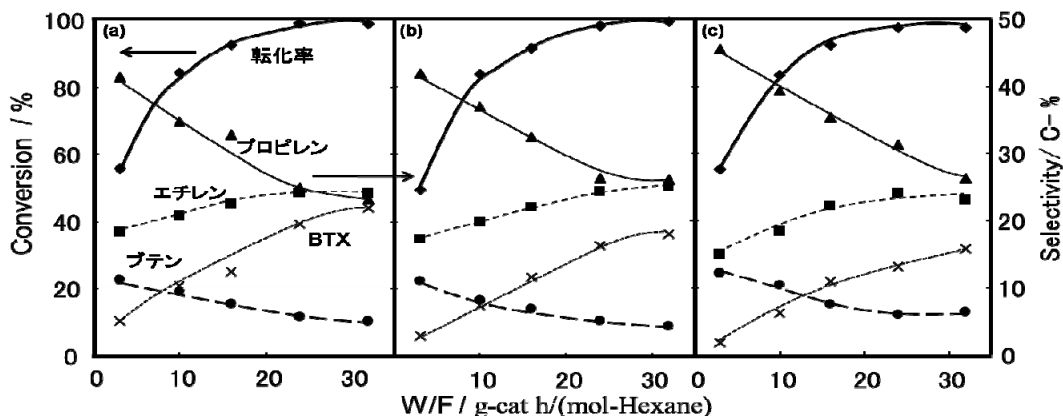


図 C 1 3 W/F の影響の検討 (a) H-ZSM-5 (S), (b) H-ZSM-5 (M), (c) H-ZSM-5 (L)
 □転化率, ▲プロピレン, ■エチレン, ●ブテン類, × BTX

【ZSM-5 の結晶子径が触媒寿命に及ぼす影響】

触媒活性の経時的劣化に及ぼす結晶子径の影響を調べた。ヘキサン分圧を高くした劣化しやすい条件で反応を行った。図 C 1 4 に反応結果を示す。結晶子径によらず初期の転化率は 3 つの触媒とも約 75%程度だった。このことも H-ZSM-5 を用いたヘキサンの接触分解は拡散律速ではないことを示している。反応開始直後から結晶子径によって転化率に差が出始め、反応時間の経過とともに転化率の差はこのように大きくなった。各生成物の選択性と転化率の関係を見ると結晶子径の影響は認められず、W/F の影響と同様の傾向が得られた。

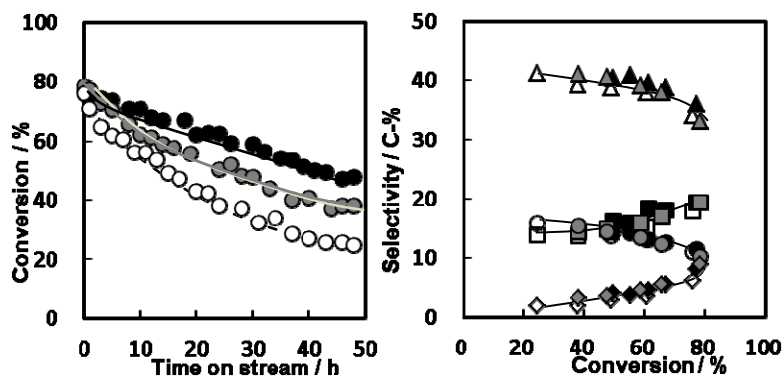


図 C 1 4 結晶子径が触媒寿命に及ぼす影響 (左) 反応の経時変化, (右) 生成物分布

● H-ZSM-5 (S), ● H-ZSM-5 (M), ○ H-ZSM-5 (L), ▲プロピレン, ■エチレン, ●ブテン類, □ BTX

反応に用いた触媒中のコークの量を TG により測定し、コーク生成の経時変化を調べた結果を図 C 1 5 に示す。結晶子径が小さくなるにつれてコークの生成速度が遅くなることがわかった。また、コークの生成量に対する各触媒の転化率を見ると、結晶子径の小さいものほどコークの生成量に対する転化率が高かった。これは結晶子径の微小化により

- 孔路が短くなったことにより拡散距離が短くなり生成物が容易に細孔外へ出やすくなった。
- 外表面積が増大し細孔の出入り口が増えたため、コークが生成してもヘキサン

や生成物が入りやすく、また出やすくなった。

といった効果が表れたためであると考えられる。結晶子径が小さくなるにつれてコークの生成速

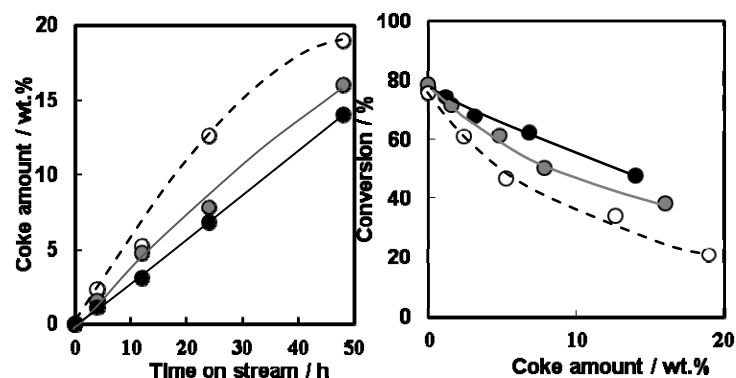


図 C15 結晶子径がコーク生成に及ぼす影響 (a) 経時変化, (b) コークの生成量に対する転化率 ● H-ZSM-5 (S), ● H-ZSM-5 (M), ○ H-ZSM-5 (L)

度が遅くなったのは結晶子径が小さくなるにつれて孔路の長さ、つまり拡散距離が短くなるために生成物が逐次反応によりコークとなる前に細孔外へ拡散しやすくなったためであると考えられる。また、結晶子径の小さいものほどコークの生成量に対する転化率が高かったのは、結晶子径の小さいものほど外表面積が大きくなり、細孔の出入り口の数が多くなるためにコークにより細孔閉塞が起こっても、拡散障害の影響が小さくなったためであると考えられる。以上の結果から、結晶子径の小さい ZSM-5 ほどコーキングによる活性劣化を抑制することができることがわかった。

(ii) アルカリ処理

ゼオライトの反応基質や生成物の拡散性の向上は長寿命化によって重要な要素である。その解決策として、ゼオライトの微小化に加え、ゼオライト粒子内部へのメソ細孔 (2~50 nm) の構築も有効な手段である。メソ細孔の存在により、ゼオライト中の活性点への反応基質や生成物の移動速度が向上する。主な合成方法として、(a) アルカリ水溶液によるリーチング処理、EDTA 等による薬品の処理、(b) カーボンブラック、カーボンナノチューブ、メソポーラスカーボンを鋳型として使用等が挙げられる。中でもアルカリ処理は、容易な操作手法から精力的に検討がなされている。ゼオライトを水酸化ナトリウム水溶液などのアルカリ水溶液で処理することによりシリカが選択的に溶出し、メソ細孔が形成されることが報告されており、ZSM-5 を用いたメチルナフタレンのメチル化、ベンゼンのアルキル化など主に拡散律速である反応に対し有効であることが報告されている。

今回の検討より、H-ZSM-5 を用いたヘキサンの接触分解は拡散律速ではないことがわかったが、微粒子化し拡散性を向上させることでコークが生成しても高い活性を維持できることを見出している。これは外表面積の増大により細孔の出入り口の数が増えるためにコークが生成しても拡散阻害の影響を受けにくいためであると考えられる。そのため ZSM-5 にアルカリ処理を施し、外表面積を増大させることで、コークの生成による失活を抑制することができると考えた。これまでパラフィンの接触分解反応において、アルカリ処理を施した H-ZSM-5 を用いて *n*-オクタンや *n*-ブタンの接触分解を行ったという報告はある。そこで、水酸化ナトリウム水溶液を用いてアルカリ処理を施した H-ZSM-5 を触媒として用いヘキサンの接触分解を行うことで、アルカリ処理が触媒性能、特に触媒寿命に及ぼす影響を検討した。

(1) 実験

① H-ZSM-5 のアルカリ処理

Si/Al = 約 50、結晶子径約 1 μm 、100 nm の二種類の ZSM-5 (L or S と表記) を用いた。合成法は先に記した方法で行い、水の量を変えることで結晶子径を変えた。純水に水酸化ナトリウムを溶解させ調製した 0.05、0.1、0.2 M の濃度の異なる水酸化ナトリウム水溶液 100 ml に Na-ZSN-5 を加え、60 $^{\circ}\text{C}$ の温度で 1-5 h 攪拌した。処理後の試料の Si/Al 比が 35 程度になるよう処理時間を調整した。硝酸アンモニウム水溶液を用いてイオン交換を行い、550 $^{\circ}\text{C}$ で焼成することにより酸型に変換した。得られたサンプルは 処理濃度-処理時間-処理した ZSM-5 のサイズ (L or S) の形で以後表記する。

② アルカリ処理 H-ZSM-5 の触媒性能評価

ヘキサン接触分解反応は、常圧固定床流通反応装置を用いて行った。外径 6 mm の石英管に、ペレット状 (0.5-0.6 mm) に成形した触媒を充填し、空気気流下 650 $^{\circ}\text{C}$ で 1 時間の前処理を行った後に、ヘリウムをキャリアガスとしてヘキサンを触媒に流通した。反応に用いた触媒上析出したコークの定量は熱重量-示差熱分析装置 (TG-DTA) を用いて行った。また、反応後に窒素吸着測定を行うことによりコークの生成による細孔閉塞の度合いを見積もった。

以下に各検討項目における詳細な条件を記す。

【反応温度の影響の検討】

反応管に触媒 50 mg 充填し、反応温度 450-650 $^{\circ}\text{C}$ で反応を行った。ヘキサン分圧は 6 kPa とした。触媒を充填したまま反応温度を 450-650 $^{\circ}\text{C}$ まで 50 $^{\circ}\text{C}$ ずつ変化させ連続的に反応を行った。

各温度において 50 分間反応しサンプリング後ヘリウムを流通させ、5 °C/min で昇温し次の反応温度に達したら再びヘキサンを流通させた。

【W/F の影響の検討】

反応管に触媒 10-100 mg 充填し、反応温度 600 °C で反応を行った。ヘキサン分圧は 6 kPa とした。各 W/F において 50 分間反応しサンプリングした。触媒の充填量を変えることで異なる W/F において反応を行った。

【ZSM-5 の結晶子径が触媒寿命に及ぼす影響】

反応管に触媒 10 mg 充填し、反応温度 650 °C で反応を行った。ヘキサン分圧は 23 kPa、WHSV=70 h⁻¹とした。反応開始 5 分後にサンプリングを行い、その後 60 分間隔で 24 時間反応を行った。

(2)結果と考察

①H-ZSM-5 のアルカリ処理

図 C1 6 に XRD パターンを示す。結晶子径によらずアルカリ処理することにより、処理濃度が高くなるにつれて回折強度は減少しているが、いずれの濃度で処理した場合も MFI 構造が維持されていることが分かった。

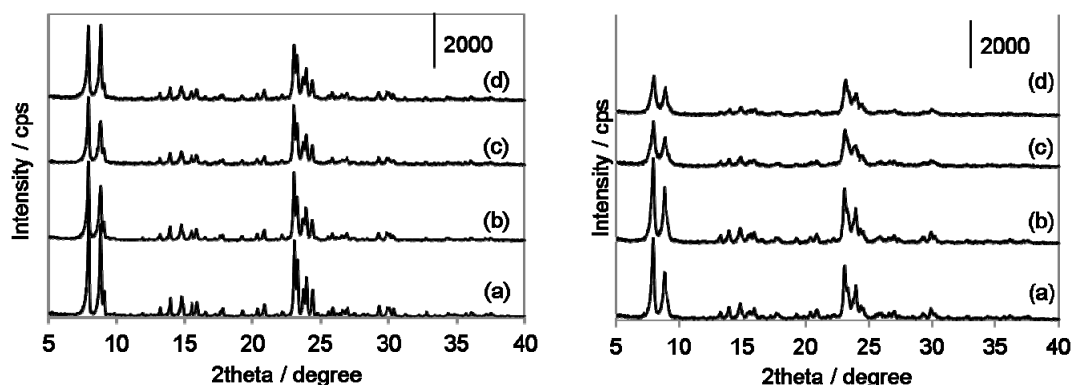


図 C1 6 濃度を変えてアルカリ処理を施した H-ZSM-5 の XRD プロファイル
左 L, 右 S (a) Parent, (b) 0.05-5, (c) 0.1-3, (d) 0.2-1

表 C2 に窒素吸着から求めた触媒の物性、およびアンモニア TPD から求めた酸量を示す。結晶子径によらず処理後の試料の Si/Al がすべて同程度であるにも関わらず、0.05 M では Si/Al 比の低下により 酸量は大きく増大したが、濃度が高くなるにつれ酸量の増加の程度は小さくなった。結晶子径の小さい ZSM-5 の BET 比表面積、外表面積はともに処理濃度が高いほど増加した。結晶子径の大きいものと比べると、小さいものの方がどちらも高い値を示した。しかし、処理濃度が高くなるにつれてマイクロ孔容積が低下したことから、一部構造が崩壊していると考えられる。

表 C 2 濃度を変えてアルカリ処理を施した H-ZSM-5 の物性

Sample	Si/Al	S_{BET}	S_{EXT}	V_{micro}	Acid amount
	[ICP]	[m ² /g]	[m ² /g]	[cm ³ /g]	[mmol/g]
Parent L	53	387	12	0.18	0.288
0.05-5 L	36	442	88	0.16	0.410
0.1-3 L	37	452	134	0.14	0.371
0.2-1 L	38	458	158	0.13	0.330
Parent S	51	410	65	0.17	0.291
0.05-5 S	34	447	123	0.15	0.430
0.1-3 S	35	500	180	0.14	0.358
0.2-1 S	34	520	215	0.14	0.344

図 C 1 7 にピリジン吸着の結果を示す。高い濃度で処理したもののほどブレンステッド酸点に起因する 1545 cm^{-1} のピークが小さくなり、ルイス酸点に起因する 1455 cm^{-1} のピークが大きくなっていった。このことからアンモニア TPD プロファイルに変化が現れたのは高い濃度で処理したもののルイス酸が多くなったためであると考えられる。すなわち、アルカリ処理を施すことにより外表面積が増大するだけでなく、新たにルイス酸が発現することがわかった。

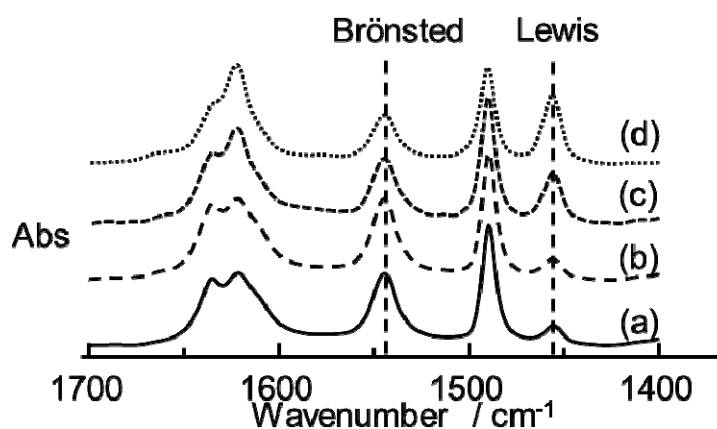


図 C 1 7 濃度を変えてアルカリ処理を施した H-ZSM-5 のアンモニアピリジン吸着 IR スペクトル

(a) Parent L, (b) 0.05-5 L, (c) 0.1-3 L, (d) 0.2-1 L

②アルカリ処理 H-ZSM-5 の触媒性能評価

【反応温度の影響の検討】

図 C 1 8 に各温度におけるヘキサン転化率を示す。処理濃度の最も低い 0.05-5 L では活性が向上し、いずれの温度においても Parent よりも高い転化率を示した。これは Parent、0.05-5 L とともに酸点のほとんどがブレンステッド酸点であるために、酸量の多い 0.05-5 L が高い活性を示

したと考えられる。

一方、0.1、0.2 M で処理したものは 550 °C までは Parent よりも低い転化率を示した。しかし 600 °C を超える高温での反応では、Parent よりも高い活性を示した。これは、高濃度で処理したことによりブレンステッド酸点が減ったことで低温では活性が低く、高温になるにつれレイス酸点も反応に関与したためではないかと考えている。

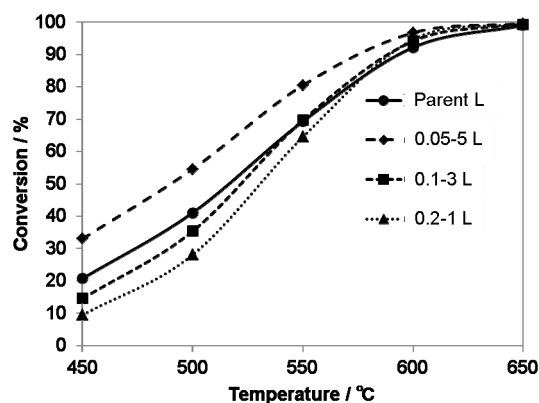


図 C 1 8 各反応温度における転化率

【W/F の影響の検討】

図 C 1 9 に各 W/F における転化率を示す。600 °C では熱分解により 3%ヘキサンが転化するためこれを一定にするために触媒量を変えることにより W/F を変えた。反応温度が低いときには 0.1、0.2 M で処理したものは Parent よりも低い活性を示したが、600 °C という高温下での反応ではアルカリ処理した試料は全て Parent よりも高い活性を示した。活性の序列は 0.05-5 L □ 0.1-3 L > 0.2-1 L > Parent となり、600 °C においては低濃度の水酸化ナトリウム水溶液で処理したもののほど活性が高かった。

図 C 2 0 に各転化率における選択性を示す。Parent と 0.05-5 L を触媒として用いた場合、各生成物に対し同様な選択性を示し、外表面積はあまり選択性には寄与していないことがわかった。ところが、さらに高い濃度で処理した 0.1-3 L と 0.2-1 L を触媒として用いた場合、各生成物に対する選択性に違いが見られた。処理濃度が高いときには低転化率において Parent に比べプロピレン、C1-C4 パラフィンに対する選択性が減少し、エチレン、BTX に対する選択性がわずかに増加した。この傾向は処理濃度が高いものほど顕著に表れており、処理濃度の低い 0.05-5 L ではこのような変化が見られなかったことから、酸性質の変化によるものと考えられる。

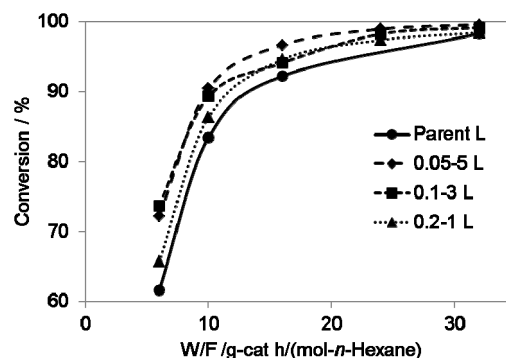


図 C 1 9 各 W/F における転化率

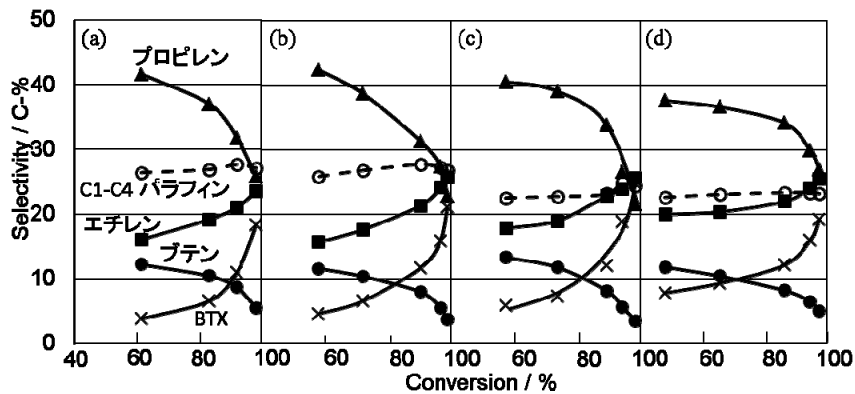


図 C 2 0 選択率の転化率依存性

(a)Parent L, (b)0.05-5 L, (c)0.1-3 L, (d)0.2-1 L

(▲プロピレン, ■エチレン, ●ブテン, ×BTX, ○C1-C4 パラフィン)

【ZSM-5 の結晶子径が触媒寿命に及ぼす影響】

触媒活性の経時的劣化に及ぼすアルカリ処理の影響を検討した。なお、ヘキサン分圧を高くした劣化しやすい条件で反応を行った。Parent は酸量が少ないためどちらの結晶子径のものも 0.05-5 に酸量を合わせて反応を行った。図 C 2 1 に結果を示す。

処理濃度または結晶子径によらず、いずれの試料を触媒として用いても初期の転化率は約 90% となった。結晶子径が大きいものはアルカリ処理により外表面積が大きいものほど劣化が抑制されたことがわかった。これはアルカリ処理により、外表面積が増大したことによって細孔の入り口が増えたためにコーキングによる細孔閉塞の影響が小さくなったためであると考えられる。

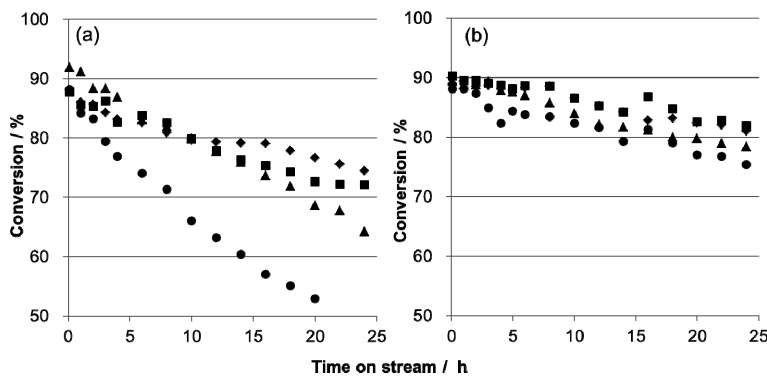


図 C 2 1 アルカリ処理が触媒寿命に及ぼす影響

(a) L, (b) S ● Parent W/F=16, ▲0.05-5, ■0.1-3, ◆0.2-1

次に、劣化速度を定数化し評価するために以下のような仮定のもと劣化の速度定数を求めた。活性の劣化速度が触媒活性に比例し、触媒活性はヘキサン接触分解の一次反応速度定数で表すことができるかと仮定すると(1)式が成立する。

$$-dk_c/dt = k_d k_c \quad (1)$$

ここで k_d は劣化速度定数、 k_c はヘキサン接触分解速度定数である。650 °C においては熱分解も並行して起こるので、反応条件下における熱分解反応速度を結果から差し引くことにより補正した。 t は Time-on-stream である。(1) 式の微分方程式を解くと(2)式が成立する。

$$k_d t = \ln k_{c0} - \ln k_c \quad (2)$$

ここで k_{c0} は $t=0$ における k_c である。これらを劣化の速度式とする。 $\ln k_c$ と t とをプロットしたものが図 C 2 2 である。これを見るといずれのプロットも直線関係が成立していることから、活性に比例して劣化していることがわかった。

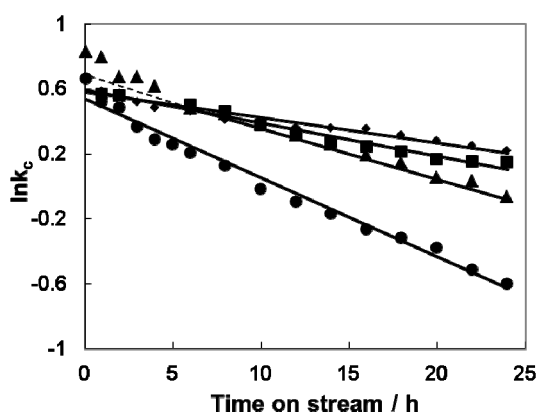


図 C 2 2 $\ln k_c$ vs. t ● Parent W/F=16, ▲ 0.05-5, ■ 0.1-3, □ 0.2-1

この直線の傾きから劣化の速度定数を求め外表面積に対してプロットした結果を図 C 2 3 に示す。予想通り結晶子径によらず外表面積が大きいものほど劣化速度が遅いことがわかった。

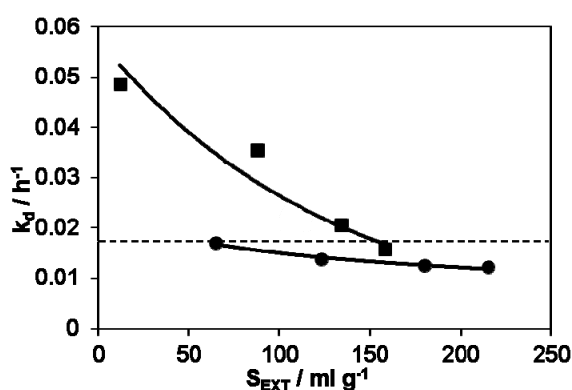


図 C 2 3 k_d vs. S_{EXT} ● S, ■ L

しかし、Parent S は外表面積が小さいにもかかわらず外表面積が 3 倍近くある 0.2-1 L と同程度の劣化速度となった。この原因を調べるために TG によるコークの定量を行った。図 C 2 4 にコークの生成量と外表面積との関係を示す。結晶子径の小さいものはコークの生成量が少なかった。また、いずれのサイズの試料も外表面積が大きいものほどコークの生成量が多いことがわか

る。

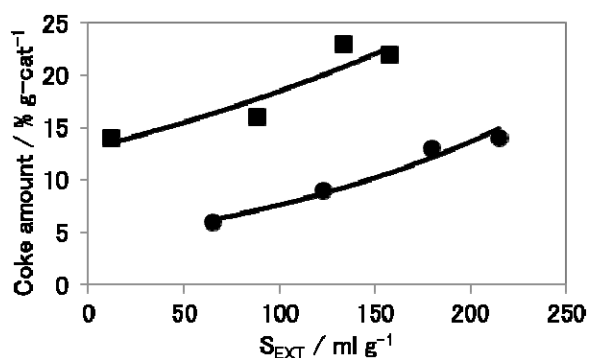


図 C 2 4 コークの生成量と外表面積との関係
コーク量 vs. S_{EXT} ●S, ■L

しかし、外表面積が大きいものほど、コークの生成量が多いにもかかわらず反応開始 24 時間後も高い活性を示した。そこでコークの生成による細孔閉塞の程度を調べるためにコークが付着した状態の試料の窒素吸脱着測定を行い、コーキングによるマイクロ孔容積の減少率を調べた。図 C 2 5 にマイクロ孔容積の減少率と外表面積との関係を示す。マイクロ孔容積の減少率は(3)式から求めた。

$$(1 - (\text{使用後の触媒の } V_{micro}) / (\text{使用前の触媒の } V_{micro})) \times 100 \quad (3)$$

結晶子径の小さいものは反応後のマイクロ孔容積の減少率が小さいことがわかる。これは、拡散距離が短いため生成物が細孔内でコークとなる前に細孔外へ拡散しやすいためであると考えられる。また、アルカリ処理することにより平均的な拡散距離が短くなるため、同様な効果が表れ、高濃度のアルカリ水溶液で処理し、よりメソ細孔が生成したものほど細孔閉塞の程度が小さくなったと考えられる。

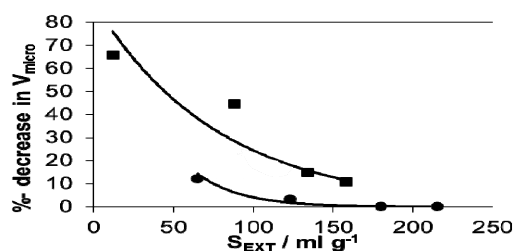


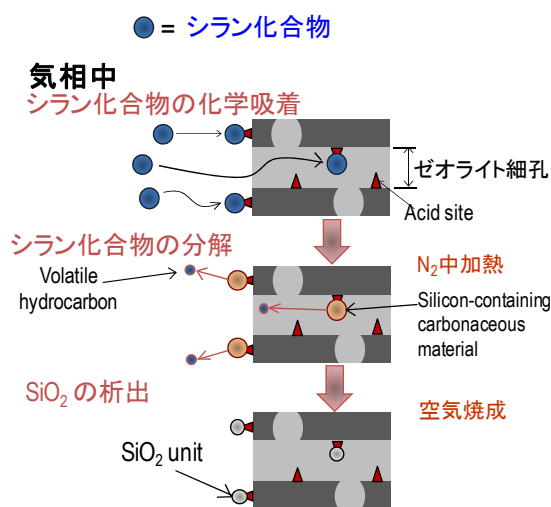
図 C 2 5 %-decrease in V_{micro} vs. S_{EXT} ●S, ■L

(iii) 外表面修飾

2-1-①-2 a. コーキング抑制技術(i)により、MFI型ゼオライトの粒子径を小さくすることで、ゼオライト細孔内における反応物や生成物の拡散速度を向上させ、目的生成物である低級オレフィン収率を向上することがわかった。また、粒子径の微小化により外表面積が大きくなり、コーク析出による細孔閉塞が低減し、触媒の長寿命化が実現可能であることが明らかとなった。しかし、ゼオライトの酸点は空間的な制限の無い結晶外表面上にも存在するため、結晶外表面上では芳香族の生成やオレフィンの消費、コークが生成する。そこで、結晶外表面酸点を選択的に不活性化させることで、外表面酸点での反応を抑制し、ゼオライト触媒外表面でのコーキングを抑制できると期待される。

シラン接触分解法を用いた外表面酸点の不活性化

シラン接触分解法は図C26に示すように、細孔内の強酸点上に SiO_2 ユニットを選択析出させることで各種ゼオライトの細孔径を微小化させる手法であるが、同時にこの方法は触媒の外表面酸点を不活性化できる。シラン接触分解法は様々な最小分子径を持つシランにも適用でき、ゼオライト外表面や内部の酸点分布を制御できると考えられる。



図C26 シラン接触分解法（シリル化）の概要

そこでヘキサン接触分解反応において、シリル化処理が低級オレフィンやBTXの選択率に及ぼす影響について検討した。

また、ゼオライト触媒の活性点は強い酸強度を有するため、オレフィンからBTXへの反応が進行しやすくコーク析出の原因となると考えられる。そこで、リン酸を含浸法により坦持し酸強度の制御によりオレフィンからの逐次反応の抑制について検討した。

(1) 実験

①シラン接触分解法

ゼオライト 1.0g を固定層型流通式反応装置に充填し、空気流通下で焼成した。焼成後、流通ガスを窒素に切り替え、100℃まで放冷した。触媒層温度が 100℃で安定したところで、シラン化合物を含む窒素ガスを流通させ、ゼオライトにシラン化合物を吸着させた。シラン化合物吸着後、高温窒素雰囲気下で加熱処理しゼオライト酸点上でシラン化合物を分解させた。その後、空気雰囲気下で焼成しゼオライト上に付着した炭素分を除去した。

②リン酸処理

所定量のリン酸水溶液とゼオライトを均一になるまで混ぜた後、乾燥、焼成して試料を得た。

(2) 結果

図 C 2 7 はシリル化処理したナノサイズ MFI 型ゼオライト (Si/Al=50) を使い、n-hexane の接触分解を行った結果を示す。また、図 C 2 8 はシリル化前のナノサイズ MFI 型ゼオライト (Si/Al=50、W/F=0.5) を用いた接触分解の結果を示す。なお、接触分解反応は 550℃で行った。シリル化処理により、ゼオライト酸点が不活性化され酸点密度が低下することにより触媒活性が低下する。このため、シリル化処理を行ったゼオライトを用いた反応では、触媒量を増やして (W/F=0.75)行なった。シリル化を行う前では、n-hexane 転化率は約 95%と高い値を示したが、時間の経過とともに転化率はやや低下した。一方、シリル化処理を行ったものでは、n-hexane の転化率は約 70%と低下するが、反応時間内での転化率低下は見られなかった。このため、長時間でも反応率低下を低減できると期待される。また、シリル化により低級オレフィン選択率は 37%から 44%まで向上した。さらに、シリル化処理を行う前のナノサイズ MFI 型ゼオライトを用いた反応では、生成した低級オレフィン中のプロピレンの割合は 47%であったのに対し、シリル化処理後では 53%を示した。このように PS によるシリル化処理は低級オレフィン選択性向上に有効であることが示唆された。また、リン酸処理を行ったナノサイズ MFI 型ゼオライト (Si/Al=50) を用いた接触分解反応 (W/F=0.75、550℃) においても、転化率は約 80%と反応時間 (260 分) 内で一定であり、低級オレフィン収率は約 44%であった。

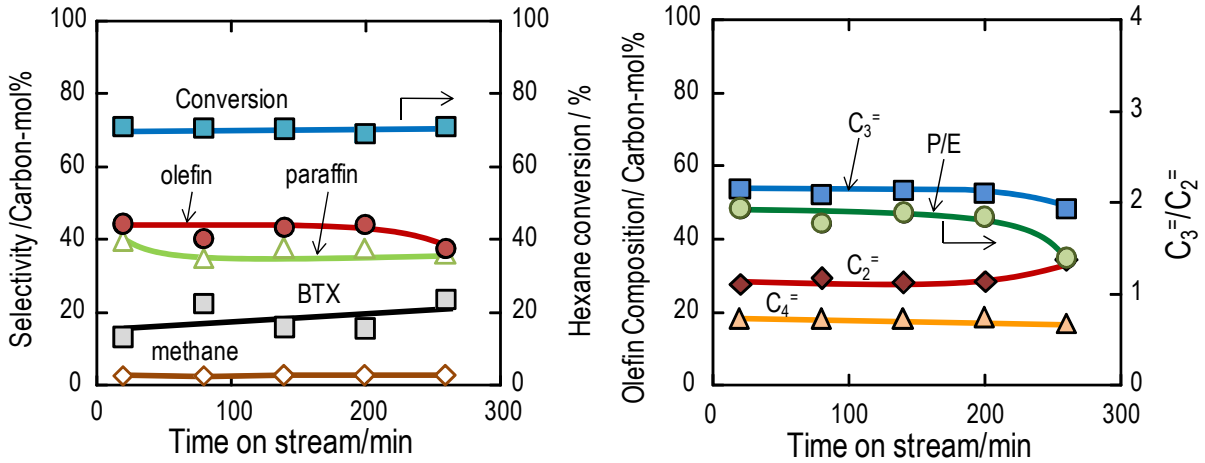


図 C 2 7 シリル化したナノサイズ MFI 型ゼオライトを用いた n-hexane 接触分解の経時変化 (左：転化率、選択性の経時変化、右：オレフィン収率の経時変化)

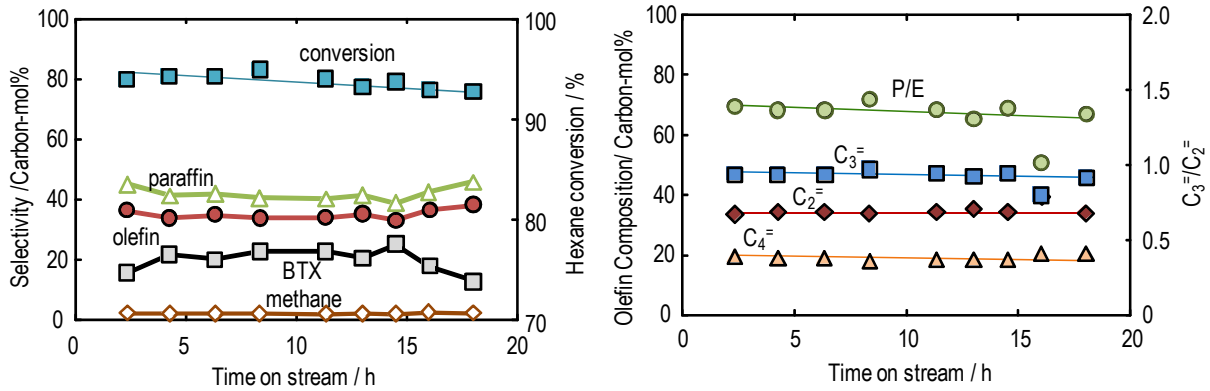


図 C 2 8 シリル化前のナノサイズ MFI 型ゼオライトを用いた n-hexane 接触分解の経時変化 (左：転化率、選択性の経時変化、右：オレフィン収率の経時変化)

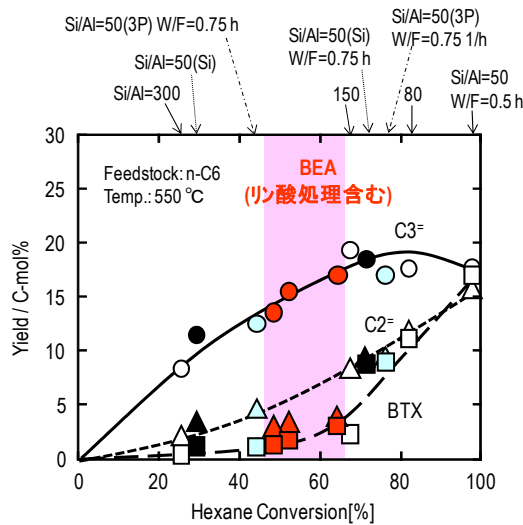


図 C 2 9 ナノサイズ MFI 型ゼオライト、BEA 型ゼオライトを用いた n-hexane 接触分解における n-hexane 転化率とプロピレン、エチレン、BTX 収率の関係

図 C 2 9 はシリル化処理前、シリル化処理後、リン酸処理後のナノサイズ MFI 型ゼオライト、BEA 型ゼオライト触媒を用い、550°C で n-hexane の接触分解反応を行った時の、初期活性における n-hexane 転化率とプロピレン、エチレン、BTX の収率の関係を示す。プロピレン、エチレン、BTX 収率は、外表面修飾の有無に依らず n-hexane 転化率に対し、それぞれ一本の曲線で相関されることがわかった。また、BEA 型ゼオライトは MFI 型ゼオライトに比べ同一転化率でもプロピレンの収率は等しいが、エチレンの収率は低く、プロピレン選択性が MFI 型ゼオライトに比べ高いことがわかる。この線図を用いることで、反応温度 550°C における任意のヘキサン転化率に対するプロピレン、エチレン、BTX の収率が予測可能である。

(iv) 修飾による酸性制御

2-1-①-1 b(v) に示したように、フェリエライトを Ca^{2+} 交換すると、オレフィン選択性および安定性が向上した。この原因としてフェリエライトの 1 次元細孔化を提案したが、ここでは酸性質についてさらに検討した。図 C 3 0 に、 Ca^{2+} 交換フェリエライトを用いて吸着アンモニアの TPD を行った結果を示す。H-Fer に Ca^{2+} イオンを導入していくと、400°C 付近に現れていた脱離ピークの強度が減少し、250°C 付近に新たなピークが現れた。 Ca^{2+} 交換により強酸点が減少し、弱い酸点が形成されることが明らかとなった。オレフィン選択性と安定性の向上に対して、このような酸性質の変化も影響を及ぼしている可能性がある。図 C 3 1 に、H-ZSM-5 との比較を示す。H-ZSM-5 はフェリエライトより Al 濃度が低いので、触媒量を増やして酸量がほぼ等しくなるようにした (W x 5)。その結果、Ca,H-Fer において残存する強酸点のピーク温度は、H-ZSM-5 より約 40°C 高く、酸強度はフェリエライトの方が強いことが示された。したがって、H-Fer が H-ZSM-5 より低い初期転化率を示したのは、H-Fer 中の酸点の酸強度が弱いためではないことが分かる。

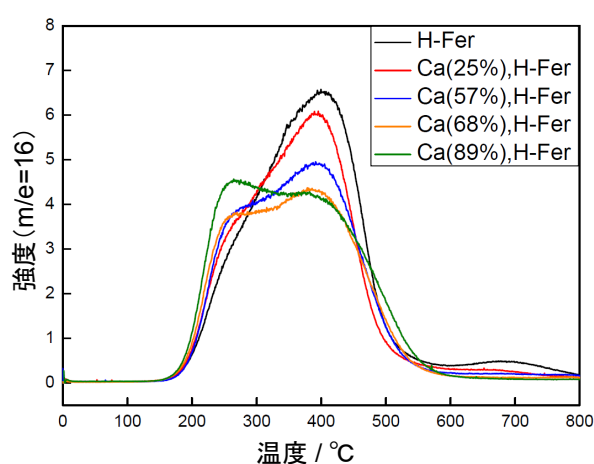


図 C 3 0 Ca^{2+} 交換による酸性質の変化 (NH₃-TPD)

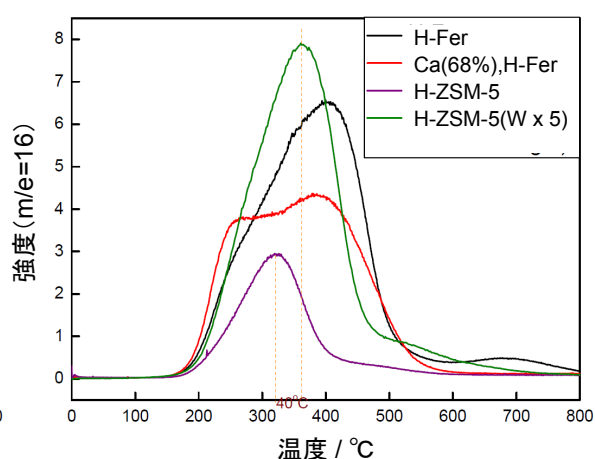
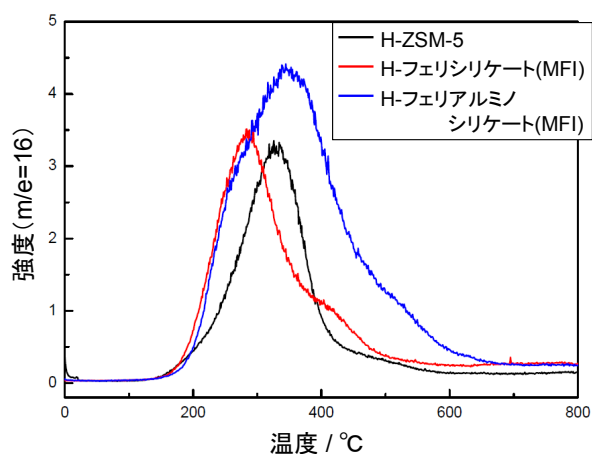
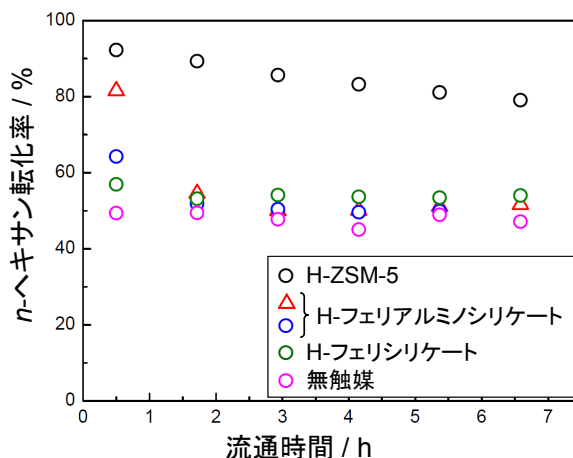


図 C 3 1 H-ZSM-5 との比較

Ca₂H-Fer の高選択性と H-ZSM-5 の高活性を合わせもつ可能性があるゼオライトとして、骨格中に Fe³⁺を含むフェリシリケートおよびフェリアルミノシリケートを合成した。アンモニア TPD の結果を図 C 3 2 に示す。フェリシリケートの酸点は Ca₂H-Fer の弱酸点より少し強いが、H-ZSM-5 の強酸点に対応するような酸点はほとんどない。これを用いて *n*-ヘキサンのクラッキングを行ったところ (図 C 3 3)、転化率が極端に低くなった。一方、Fe³⁺と Al³⁺が共存するフェリアルミノシリケートの TPD (図 C 3 2) を見ると、弱酸点および強酸点ともに十分な濃度で存在することが分かる。ヘキサンのクラッキングを行った結果、この触媒についても H-ZSM-5 の活性および安定性には及ばないことが分かった。



図C32 MFI型フェリアルミノシリケートの NH₃-TPD



図C33 MFI型フェリアルミノシリケートの活性

2-1-② 触媒評価および改良

2-1-②-1 ゼオライトトポロジーをベースとした性能比較と絞込み

a 性能評価基盤技術

本プロジェクトの触媒評価・触媒開発のためには、共通の装置を用い、各研究機関の装置間のファクターを可能な限り小さくする必要がある。そこで、可能な限り共通の小試用装置を導入し触媒性能評価を行った。

反応装置

・反応管

二種類の太さの反応管を用いた。反応管内部には触媒層内温測定用熱電対の保護管を挿入し、高温用の熱電対を用い、反応中も触媒層中心の温度を測定した。

・触媒充填

触媒層の上下は石英砂を充填し、反応管中心に触媒層の中心が来るように触媒を設置した。

・原料

気化器で完全にガス化させて反応器に流通した。

・反応管の加熱

反応管を電気炉で加熱し、触媒層中心温度が反応温度となるよう電気炉出力を制御した。

・分解反応

触媒層中心を反応温度に制御したのち接触分解反応を行う。触媒層を通過した分解反応ガスは、GC サンプルラインへ導かれ、設定した時間ごとに定期的に自動で GC によってオンライン分析される。

分析装置

生成物の同定、定量は定期的に自動で反応ガスをオンラインサンプリングし GC 分析を行うことが可能である。

以上の装置を用い、集中研、分担研で触媒反応評価、プロセスデータ取得等を行った。

b ゼオライトトポロジーの絞り込み

(1)緒言

ゼオライトのトポロジーは触媒活性、安定性などに大きな影響を与える。そこで、ナフサのクラッキングに適したトポロジーを絞り込むために、入手できた 27 種類のトポロジーのゼオライトについて、反応評価を行った。

(2)実験方法

①使用ゼオライト

スクリーニングには購入ゼオライト、あるいは本プロジェクト各研究拠点にて調製したゼオライトを使用した。

②反応評価

炭化水素原料として n-ヘキサンを使用し、固定層流通反応装置を用いて 650°Cにて接触分解を行った。

反応ガスの分析はガスクロマトグラフィーにより行い、その結果から転化率(%)を算出した。また、有用成分をエチレン、プロピレン、ブテン類、BTX として、その炭素原子換算の選択率(C-mol%)、炭素収率(C-mol%)を算出した。

(3)結果と考察

各触媒について反応評価を行った。反応開始後 3h 目の各成分の炭素収率を図 D 1 に示す。各成分の炭素収率の合計(高さ)が、ヘキサンの転化率に相当する。入手できるゼオライトの制限から、Si/Al₂ モル比や粒子径などの反応に影響する物性が大きく異なるため、反応結果から単純にトポロジーの効果を比較することはできないが、いくつかの傾向は見られた。転化率 60%以上と活性が高かったものは、いずれも 10 員環または 12 員環を持つものであり、8 員環のものはいずれも転化率が 40%以下と低活性であった。ヘキサンの接触分解を行うには、10 員環以上の細孔径が必要であると考えられる。

以上より、H-ZSM-5 が活性、安定性、選択性ともにより性能を示しており、また、合成、入手が容易なことから、今後触媒開発する上で最も重要な触媒である。それ以外には、特異的な選択率を示した H-BETA、比較的高い活性を示した H-MCM-22、H-MCM-68 などを触媒開発対象の候補とした。

(4)まとめ

トポロジーの異なる 27 種類の触媒について、ヘキサン接触分解を行い、評価した。高活性のものは、10 員環または 12 員環をもち、細孔は 2 次元または 3 次元であった。

H-ZSM-5(MFI)が活性、安定性、選択性ともにより性能を示したことから、H-ZSM-5 を中心に触媒開発を進める。それ以外には、特異的な選択率を示した H-BETA、比較的高い活性を示した H-MCM-22、H-MCM68 などの検討も進める。

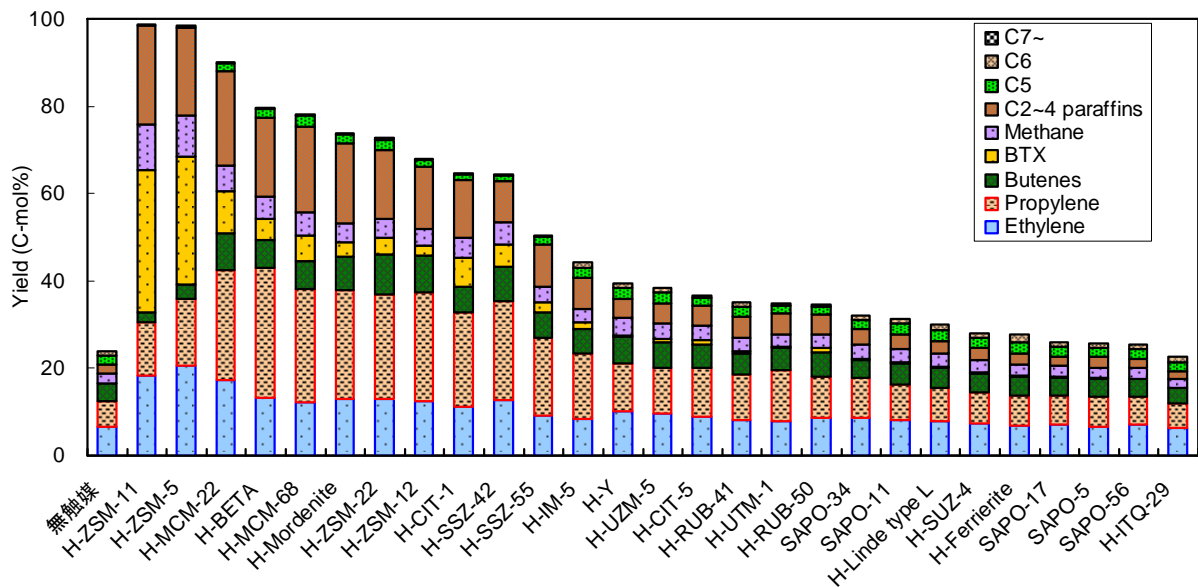


図 D1 トポロジーの異なる触媒を用いたヘキサン接触分解における転化率の経時変化
 反応温度:650℃、触媒:0.36g、C₆流量:3.6g/h、N₂流量:53cc/min、WHSV:10h⁻¹

2-1-②-2 触媒評価と改良

a コーキング抑制技術

(i) ナノ化

緒言

ゼオライト粒子を微小化することで拡散効率が向上することにより触媒の長寿命化が期待できる。本項では、粒径の違いによる反応活性への影響を確認し、微小化ゼオライトが触媒の長寿命化に有効であることを述べる。また、微小化ゼオライトの大量合成法について検討した結果についても述べる。

実験

・粒径測定

ゼオライト粒子の粒径は、走査型電子顕微鏡を用いて測定した。

・反応評価

調製した H⁺型ゼオライト触媒の触媒活性を、固定床流通式反応装置を用い生成物の組成を分析した。生成物収率、選択率および転化率は炭素換算%で示す。

結果・考察

粒径が小さいゼオライト(A)および粒径が大きいゼオライト(B)を合成した。

それぞれのゼオライトを走査型電子顕微鏡で観察したところ、両者共、粒径はほぼ均一であることが分かる(図 E1)。

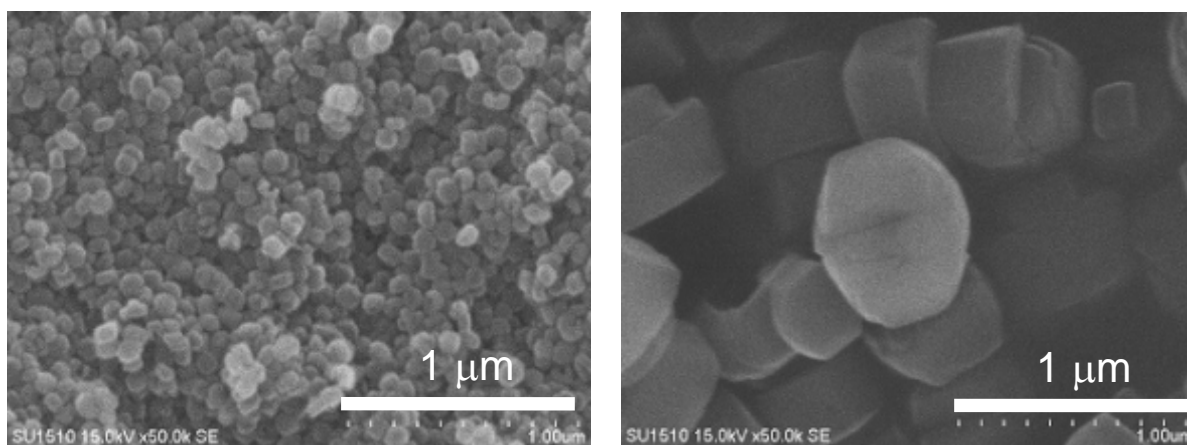


図 E1 小粒径および大粒径のゼオライトの SEM 像

左図 : 小粒径のゼオライト

右図 : 大粒径のゼオライト

これらのゼオライトを触媒として反応評価を行った。図 E2 のように大粒径のゼオライトは反応初期から反応活性が減少するのに対し、小粒径のゼオライトは反応初期の活性を長く維持し長寿命であることが分かった。

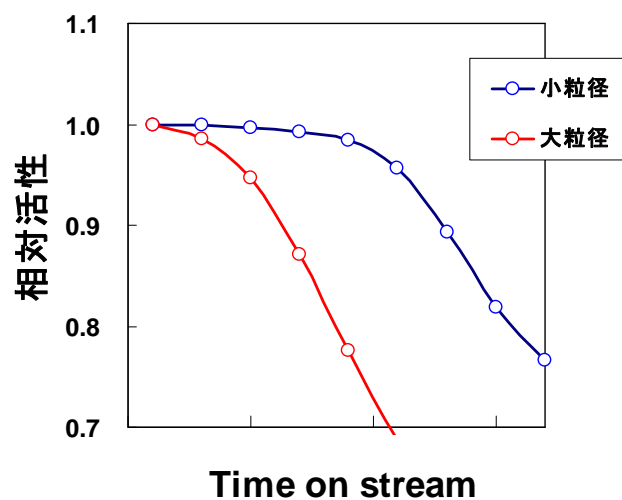


図 E 2 粒径の違いによる反応活性の経時変化の比較

まとめ

以上のように、粒径の小さいゼオライトは触媒の長寿命化が図れ、候補触媒に成り得るものと期待される。

(ii) スチーム・酸処理

緒言

ゼオライトをスチームで処理すると骨格内 Al が脱離し、骨格外 Al が増加することが知られている。また、塩酸、硝酸等で処理することにより、骨格内外の Al を溶出、除去することができる。これらの操作により、酸性質、Al の状態、細孔構造等が変化するため、触媒寿命の延長、選択性の向上など触媒性能の向上効果が期待される。Si/Al₂ 比の異なる H-ZSM-5 についてこれらの処理を行い、触媒特性への影響および物性の変化について検討した。

実験方法

①使用ゼオライト

種々の Si/Al₂ モル比をもつ H-ZSM-5 を使用した。H-ZSM-5(150)の括弧内の数値は Si/Al₂ モル比を表す。

②スチーム処理

600℃にて窒素で希釈したスチームを供給し、スチーム処理を行った。所定の時間処理した後、窒素に切り替え、冷却した。

③酸処理

ゼオライトを所定濃度の塩酸に添加し、加熱下、所定時間還流を行った。冷却後、ろ過し、イオン交換水にてろ液が中性になるまで洗浄を行った後、乾燥した。

④反応評価

炭化水素原料として n-ヘキサンを使用し、650℃にて接触分解を行った。分析はガスクロマトグラフィーにより行い、その結果から転化率(%)を算出した。また、有用成分をエチレン、プロピレン、ブテン類、BTX として、その炭素原子換算の選択率(C-mol%)、炭素収率(C-mol%)を算出した。

⑤分析

ア．コーク量測定

コーク量は、反応後の触媒を抜き出し、熱重量分析により空気流通下、10℃/min で 900℃まで昇温して分析した。コークを除いた触媒重量に対する、燃焼したコークの重量をコーク量(wt%)とした。

イ．NH₃-TPD

NH₃-TPD 法により酸性質の分析を行った。ゼオライトを分析すると 200~300℃までの低温側のピークと、それ以降の高温側のピークが現れるが、高温側のピークが酸に由来するため、200~300℃の間で垂直分割によりピーク分離を行い、高温側のピーク面積から、酸量を算出した。

ウ．比表面積測定

比表面積は、ガス吸着測定装置を用い、N₂ を吸着ガスとして測定を行った。

エ．組成分析

ICP 発光分光分析装置により Si、Al 濃度を分析した。処理前のゼオライトに対する Si/Al₂ 比の変化から、処理後の Al 残存率を算出した。

結果と考察

①H-ZSM-5(150)のスチーム、酸処理検討

H-ZSM-5(150)について、スチーム処理、酸処理、およびスチーム処理後のサンプルに酸処理を行った。これらの触媒について、反応評価を行った。未処理の H-ZSM-5(150)の初期転化率を 1 としたときの相対転化率の経時変化を図 E3 に示す。酸処理したものは、未処理に比べ活性低下がある程度抑制された。スチーム処理を行ったものは初期活性が低下したが、活性低下が大きく抑制された。スチーム処理を行ったものを酸処理すると初期活性が未処理と同等まで向上し、さらに活性低下、コーキングは未処理のものとは比べ大きく抑制された。また、スチーム処理、およびその後酸処理したものについては、目的生成物の選択率の向上も確認された。

以上より、H-ZSM-5(150)において、スチーム処理は活性低下抑制、目的生成物選択率向上に有効であり、さらに酸処理することにより、活性を向上できることがわかった。

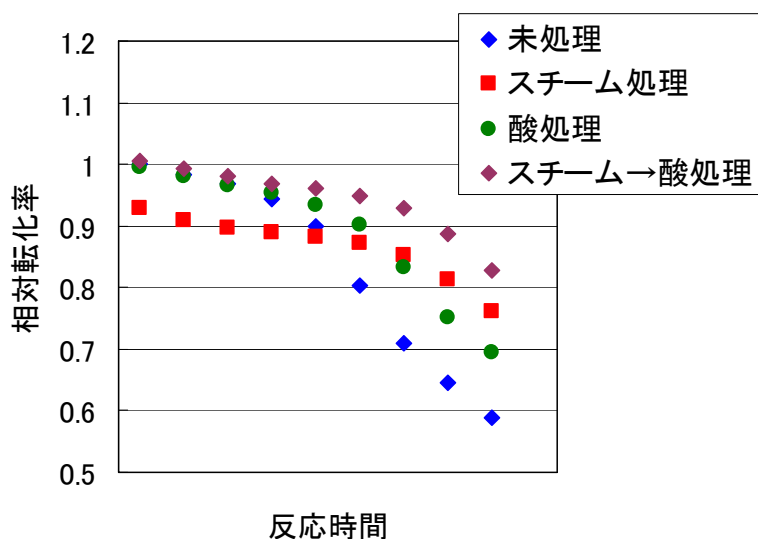


図 E3 スチーム処理、酸処理した H-ZSM-5(150)を用いたヘキサン接触分解における相対転化率(未処理における初期転化率基準)の経時変化 反応温度:650°C

②H-ZSM-5(80)のスチーム、酸処理検討

H-ZSM-5(80)について、H-ZSM-5(150)において効果が確認された、スチーム処理およびスチーム処理後の酸処理を行った。これらの触媒について、反応評価を行った。未処理の H-ZSM-5(80)の初期転化率を 1 としたときの相対転化率の経時変化を図 E4 に示す。スチーム処理を行ってもヘキサン転化率はほとんど低下せず、さらに活性低下が大幅に抑制された。スチーム処理後、酸処理を行ったが、初期活性が向上した H-ZSM-5(150)の場合と異なり、初期活性は低下した。スチーム処理後の酸処理については塩酸濃度、処理時間等条件を変えて検討したが、スチーム処理のみのものと比べ、活性、安定性が向上するものは無かった。H-ZSM-5(150)の場合と同様、スチーム処理、およびその後酸処理したものについては、目的生成物の選択率の向上も確認された。

以上より、H-ZSM-5(80)において、スチーム処理は活性低下抑制、目的生成物選択率向上に有効であったが、その後の酸処理は H-ZSM-5(150)の場合と異なり性能の向上につながらな

いことがわかった。なお、H-ZSM-5(150)をスチーム処理後酸処理したものと、H-ZSM-5(80)をスチーム処理のみしたものを比較すると、H-ZSM-5(80)をスチーム処理したものが、初期転化率が高く、活性低下も抑制され、高性能であった。

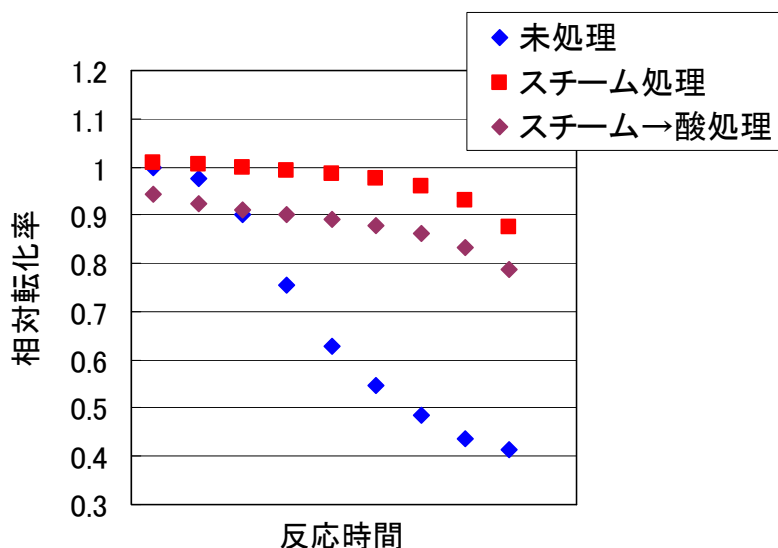


図 E4 スチーム処理、酸処理した H-ZSM-5(80)を用いたヘキサン接触分解における炭素収率の経時変化 反応温度:650℃

③スチーム処理、酸処理した H-ZSM-5(80)および(150)の分析

スチーム処理、酸処理した H-ZSM-5(150)について、分析を行った。XRD により分析を行ったところ、いずれも MFI 構造に由来するピークのみが確認され、処理による大きな変化は確認されなかった。

各分析により求めた、処理した H-ZSM-5(80)および H-ZSM-5(150)の物性値をそれぞれ表 E 1 および表 E 2 に示す。ICP 発光分光分析により求めた Al 残存率を見ると、酸処理のみでは Al はほとんど溶出していないことがわかった。一方スチーム処理後に酸処理を行うと、H-ZSM-5(80)、H-ZSM-5(150)いずれも Al 残存率は 20%以上減少しており、スチーム処理によって骨格外に出た Al が酸処理により溶出したと考えられる。表面積は、スチーム処理によって減少した。その後酸処理を行うと、活性が向上した H-ZSM-5(150)では表面積が微増した一方、活性低下した H-ZSM-5(80)では表面積が低下した。活性挙動の違いに影響した可能性がある。

NH₃-TPD の結果を図 E 5 に示す。酸処理では酸量の減少はほとんど見られない。一方スチーム処理では、大幅な酸量の減少が見られた。スチームにより、活性点となるゼオライト骨格内の Al が骨格外に脱離したためである。スチーム処理の後酸処理を行うと、H-ZSM-5(150)の場合、触媒活性は向上したにもかかわらず酸量は減少していた。H-ZSM-5(80)では、触媒活性は低下したが、酸量は同程度であった。NH₃-TPD で求められる酸量と触媒活性は必ずしも相関関係にはなかった。

表 E1 スチーム処理、酸処理した H-ZSM-5(150)の物性値

触媒	Al残存率	S _{BET} m ² /g	酸量 mmol/g
H-ZSM-5(150)未処理	—	411	0.234
スチーム処理	0.97	361	0.113
酸処理	0.98	455	0.212
スチーム処理→酸処理	0.79	385	0.086

表 E2 スチーム処理、酸処理した H-ZSM-5(80)の物性値

触媒	Al残存率	S _{BET} m ² /g	酸量 mmol/g
H-ZSM-5(80)未処理	—	467	0.424
スチーム処理	0.99	428	0.086
スチーム処理→酸処理	0.74	386	0.087

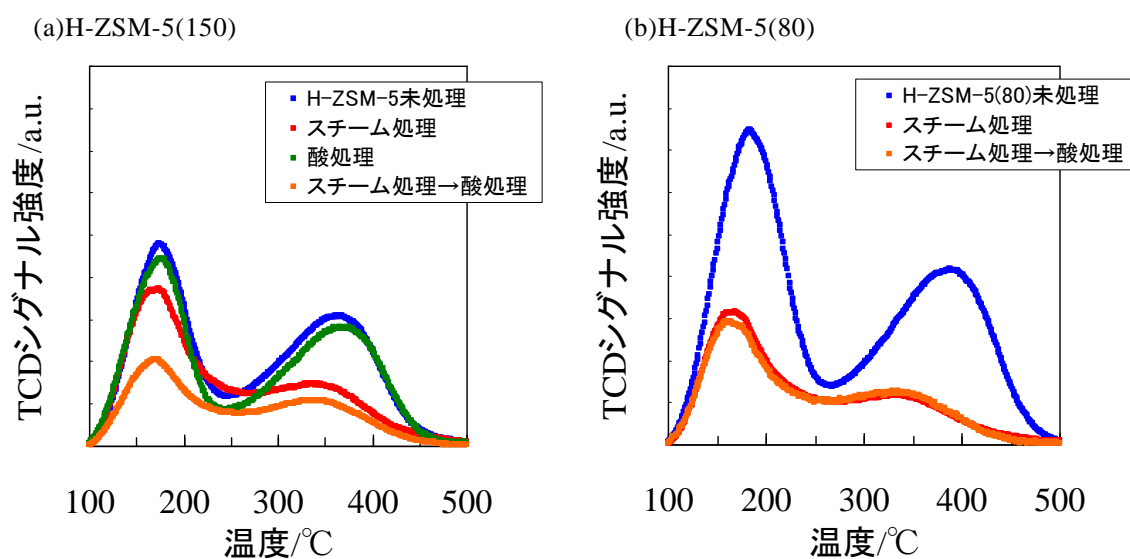


図 E5 スチーム処理、酸処理した H-ZSM-5(150)および H-ZSM-5(80)の NH₃-TPD 結果

④スチーム処理最適化検討

スチーム処理が活性低下抑制、選択率向上に効果があることが分かったため、最適化検討を行った。Si/Al₂の異なるゼオライトについて、同じ条件でスチーム処理を行った。処理前と処理後の触媒を用いたヘキサン接触分解の転化率の経時変化を図 E6 に示す。

未処理の場合、最も低 Al の H-ZSM-5(500)を除き、比較的高い初期活性を示し、また、高 Al のものほど失活がはやかった。Al が過剰だと逐次反応が進行し、コーキングしやすいためである。高い初期活性を示した Si/Al₂=30~150 のものについてスチーム処理を行った。H-ZSM-5(150)は初期活性が低下したが、他のものは高い初期活性を示した。また、いずれの触媒も、スチーム処理により、活性低下が大きく抑制された。検討した触媒では、H-ZSM-5(80)

をスチーム処理したものが、最も安定した活性を示した。また、スチーム処理を行ったものについては、いずれも目的生成物選択率の向上が確認された。

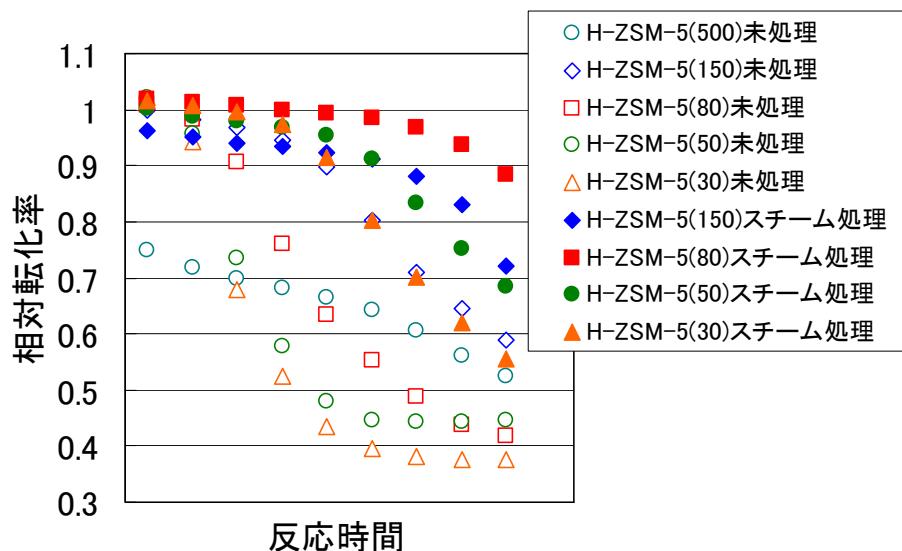


図 E6 未処理およびスチーム処理した Si/Al₂ の異なる H-ZSM-5 を用いたヘキサン接触分解における相対転化率(H-ZSM-5(150)未処理の初期転化率基準)の経時変化 反応温度:650℃

まとめと課題

H-ZSM-5 を、スチームおよび塩酸で処理を行い、Al の状態や酸性質の制御を行った。H-ZSM-5(150)の場合、スチーム処理により活性低下は抑制されたが、活性が低下した。その後、酸処理を行うと活性低下は抑制されたまま、活性が向上した。一方、H-ZSM-5(80)の場合、スチーム処理しても初期活性は高く、活性低下も抑制された。さらに酸処理を行うと、H-ZSM-5(150)と異なり、初期活性は低下した。スチーム処理を行うと、その後の酸処理の有無、ゼオライトの Si/Al₂ 比に関わらず、目的生成物の選択率は向上した。

反応条件より低い温度でスチーム処理することで触媒性能が向上したが、反応や再生でスチームを希釈剤等の目的で加えるケースや、再生でスチームが発生することを考慮すると、反応中にスチーム処理と同様の効果がおきることが想定される。しかし、運転初期の選択性、触媒寿命を向上するのにスチーム処理は有効な手段となると考えられる。

(iii) 外表面修飾

ゼオライトは規則的細孔を有しているため、ゼオライトを固体酸触媒として用いる反応では、その規則的な細孔構造により形状選択性が発現する。しかしながら、ゼオライトの酸点は細孔内だけでなく外表面にも均一に存在する。外表面酸点は規則的細孔内に存在しないため形状選択性を発現出来ず、目的生成物選択率の低下およびコーク堆積の進行が考えられる。そこでゼオライトの外表面酸点のみを不活性化し、触媒の長寿命化を検討した。

実験

使用したゼオライト

- ・ H-ZSM5(150)

Si/Al₂ 比 150 の NH⁺型 ZSM5 をマッフル炉にて 550°C 10h 焼成して H⁺型 ZSM5 に変換した。以後 H⁺型のゼオライトを H-ZSM5(150)と記す。

- ・ 外表面酸点不活性化ゼオライト

H-ZSM5(150)に対し外表面酸点不活性化処理を施した触媒を S-ZSM5(150)と記す。

- ・ 反応評価

調製した H⁺型ゼオライト触媒の触媒活性を、固定床流通式反応装置を用い 650°C にて、評価し生成物の組成を分析した。比較のために H-ZSM5(150)の初期活性を 1 として、それに対する相対的な転化率を相対活性として示す。

結果と考察

外表面酸点不活性化の効果

H-ZSM5(150)および H-ZSM5(150)に対し外表面酸点の不活性化を行い得られた S-ZSM5(150)の活性の経時変化を図 E 7 に示す。外表面酸点を不活性化することで、長時間相対転化率が高く持続しており、長寿命化していることがわかる。

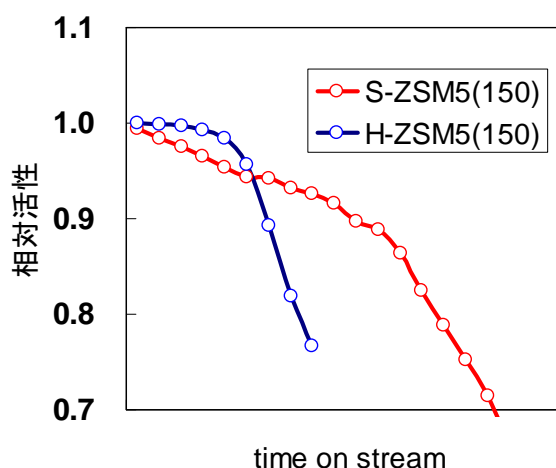


図 E 7 H-ZSM5(150)への外表面酸点不活性化による触媒寿命への影響

まとめ

以上のように、外表面酸点の不活性化によりコーク生成が抑制され、触媒の長寿命化が図れることが分かった。

b 脱アルミニウム防止技術

(i) 修飾による安定化

緒言

ナフサ接触分解ではコーキングによる失活がおき、再生するためには空気等で燃焼、除去する必要があるが、その際、スチームが発生する。また、反応や再生の際、コーキングの抑制、希釈、あるいは熱の供給を目的として、スチームを供給することも考えられる。このように、触媒は実プロセスにおいてはスチームに曝されると考えられるが、一般にゼオライトを高温のスチームに曝すと骨格中の Al が骨格外に脱 Al し、酸量が減少することにより触媒活性が低下するという問題が生じる。脱 Al による失活はコーキングによるものと異なり、容易には再生できない。そのため、スチームを使用する反応を実プロセスで行うと想定した場合、運転のスタートから停止までの最低数千時間、スチーム下で十分な活性を維持することが求められる。そこで、耐スチーム性を高めるために、ゼオライトに修飾を行い、高温のスチームで処理した後の触媒について反応試験を行い、その耐性を評価した。

実験方法

①使用ゼオライト

H-ZSM-5 を使用した。H-ZSM-5(150)の括弧内の数値は Si/Al₂ モル比を表す。

②触媒調製

修飾は、いずれも含浸法により担持した。二成分以上担持した場合、先に担持したものから左側に表記する。また担持元素の左の数値は、その元素の担持量(wt%)である。例えば、10La2P/ZSM-5(150)は、Si/Al₂=150 の ZSM-5 に、10wt% の La を含浸法により担持した後、2wt% の P を含浸法により担持した触媒を示す。ただし、1 成分目はゼオライトに対する担持量を示すが、2 成分目以降は、その前に担持したものの状態が不明でゼオライトの正確な重量がわからないため、先に担持した成分を含んだ担体に対する担持量を示す。

③スチーム処理

触媒の耐スチーム性を調べるために、スチーム供給下、反応温度あるいはそれよりも高い温度で処理を行った。

④反応評価(スチーム共存反応)

炭化水素原料として n-ヘキサンを使用し、また、スチームを共存させ、固定層流通反応装置を用いて 650℃にて接触分解を行った。n-ヘキサンに対する水の供給量(S/O)は重量比で 0.1 とした。分析はガスクロマトグラフィーにより行い、その結果から転化率(%)を算出した。また、有用成分をエチレン、プロピレン、ブテン類、BTX として、その炭素原子換算の選択率(C-mol%)、炭素収率(C-mol%)を算出した。

結果と考察

①La および P 担持触媒

次世代化学プロセス技術開発(シンプルケミストリー・プログラム)で開発された、スチーム存在下でのナフサクラッキングにおいて安定性が高いとされる LaP/ZSM-5 触媒について、耐スチーム性の評価を行った。10La2P/ZSM-5(200)が活性が高く、10La2P/ZSM-5(69)が劣化が小さいと報告されており、今回、その間の Si/Al₂ 比をもつ 10La2P/ZSM-5(150)について評価

した。

反応温度と同じ 650°C および、より高温の 700°C でスチーム処理を行い、耐スチーム性の検討を行った。未処理および各条件でスチーム処理した触媒を用いてヘキサン接触分解を行った際の、反応 1h 目の炭素収率を図 E 8 に示す。La、P を担持することにより初期活性は低下した。650°C、17h 処理後は未担持のものより活性の低下が小さいことから、LaP 修飾による耐スチーム性向上の効果が確認された。しかし、さらに長時間あるいは高温と処理条件を厳しくすると、さらに活性は低下したことから、実機で想定するような長時間使用するには不十分と考えられる。現在、さらに耐スチーム性を向上するために、担持成分や組成の検討を進めている。

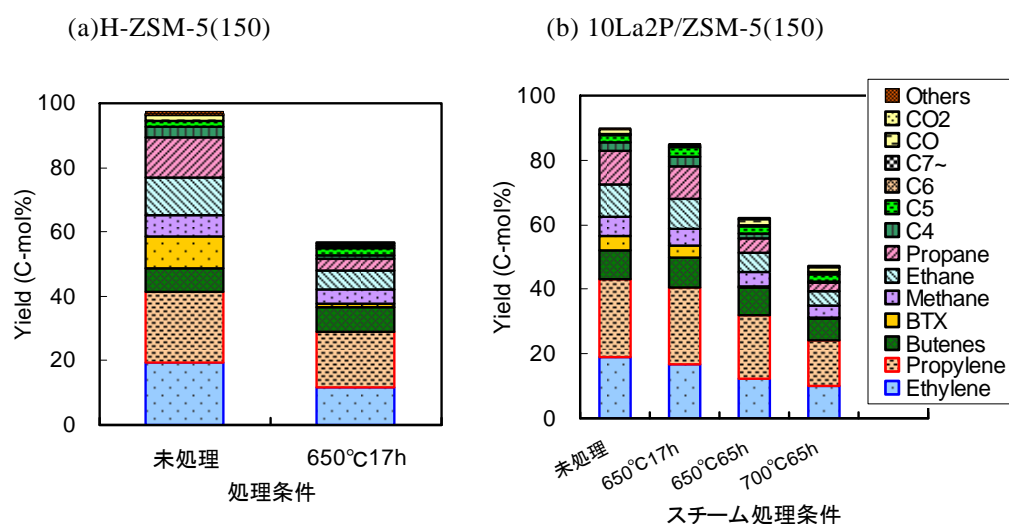


図 E 8 未処理およびスチーム処理した (a) H-ZSM-5(150)、(b) 10La2P/ZSM-5(150) を用いたヘキサン接触分解における反応開始後 1h 目の炭素収率 反応温度: 650°C、S/O: 0.1

c 反応工学的制御

(ii) 二段触媒反応

二段触媒反応コンセプト

二段触媒反応のコンセプトを図 E9 に示す。ナフサ接触分解における活性低下の主な要因の1つとして、触媒へのコーキングが挙げられる。コーキングが主に分解生成物の逐次反応による芳香族化、多環化により生成していると想定すると、触媒層入口では、コーキングの原因となる分解生成物濃度が低いためコーキング速度は遅く、一方触媒層出口付近では分解生成物濃度が高く、逐次反応が進行するためコーキングが激しいことが予想される。触媒層を上下段の2段に分け、コーキングの挙動を検討したところ、下段のほうがコーク量が大きいことを確認した。したがって、下段は上段と比べ、コーキングによる失活が早いと考えられる。特に高活性の触媒においては逐次反応、コーキングの速度も大きいことから反応開始後、短い時間で触媒層下部から失活していくと考えられる。一方上部は下部と比べると長い時間活性を示すが、触媒層全体では有効な触媒が少なくなるため活性低下が早いと推定される。低活性の触媒(高安定性触媒)の場合、逐次反応の活性も低いためコーキングは抑制され、触媒層下部でも長時間活性を示すが、高転化率を得るための活性が不足している。

そこで、上段に高活性の触媒、下段に低活性(高安定性)の触媒を用いる二段触媒反応について検討した。これは、上段は生成物濃度が低くコーキングが遅いため高活性の触媒を使

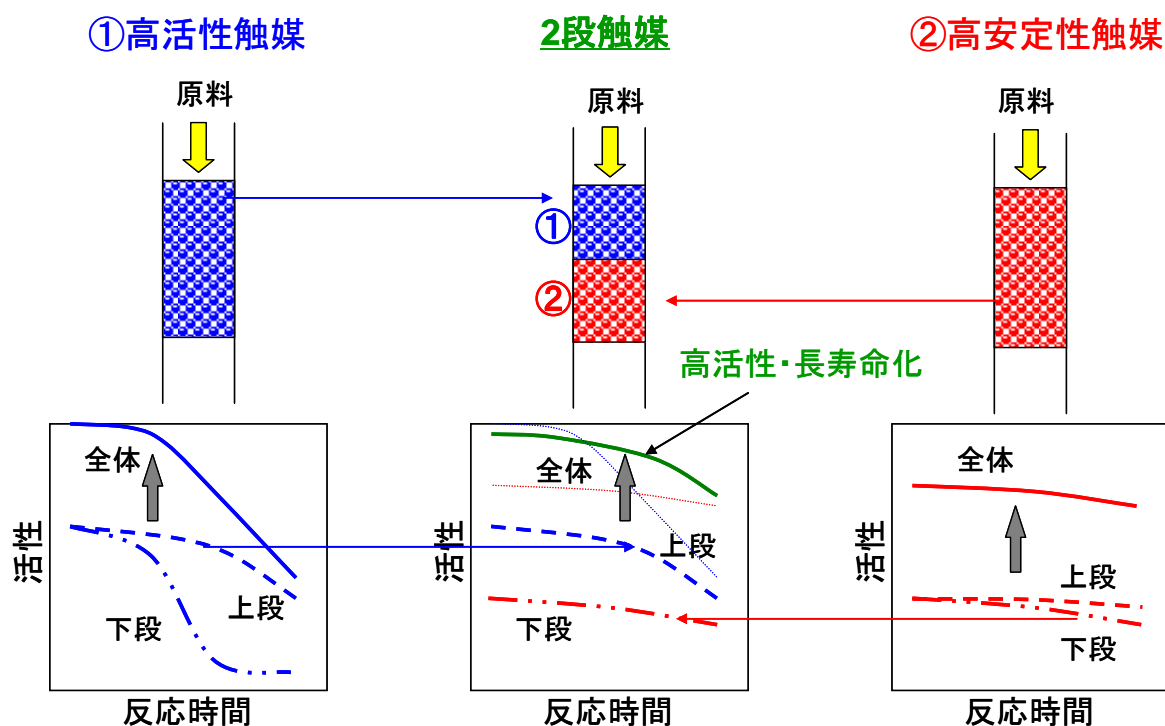


図 E9 二段触媒反応の概念図(触媒配置および触媒層位置ごとの活性挙動)

用しても長時間、高い活性を維持できると考えられる。下段はコーキングしやすいため、活性は低いが高安定性の高い触媒を用いる。これにより、上段、下段の触媒がともに長時間有効となり、単独で使用するよりも失活が抑制され、高い転化率を示すことが期待される。

実験方法

①反応評価

炭化水素原料として n-ヘキサンを使用し、固定層流通反応装置を用いて 650°Cにて接触分解を行った。2 段に分ける場合は上段用および下段用触媒を、それぞれ 1 種類のみ用いて反応を行う場合の半分の量ずつ順に反応管に充填し、反応を行った。分析はガスクロマトグラフィにより行い、その結果から転化率(%)を算出した。また、有用成分をエチレン、プロピレン、ブテン類、BTX として、その炭素原子換算の選択率(C-mol%)、炭素収率(C-mol%)を算出した。

検討結果

二段触媒検討に用いる触媒として、Al 量の異なる H-ZSM-5 を使用し、高 Al の H および低 Al の L の組合せについて検討した。L と比較し、H のほうが酸量が多い。

- ・ H のみ : H
- ・ L のみ : L
- ・ 上段に H、下段に L : H→L
- ・ 上段に L、下段に H : L→H
- ・ L と H を混合 : H+L

の 5 つの配置でヘキサンの接触分解を行った。H の初期転化率を 1 としたときの、ヘキサンの相対転化率の経時変化を図 E10 に示す。酸量の多い H のみを用いた場合、初期活性は高いが、コーキングにより失活した。一方酸量の少ない L を用いた場合は活性は低いものの、安定した活性を示した。

2 種の触媒を、同じ量使用し、配置のみが異なる H→L、L→H、H+L を見ると、上段に高活性、下段に高安定性の触媒を使用した H→L が初期活性が高く、活性低下が最も小さかった。H と L の転化率がほぼ同等になる点では、その値よりも H→L が高い転化率を示した。一方上下を逆転させた L→H や混合した H+L の場合、活性低下が大きく、H と L よりも低い転化率であった。以上より、上段に高活性、下段に高安定性の触媒を用いることにより、1 種の触媒を単独で用いる、あるいは 2 種の触媒を異なる配置で用いるよりも、安定して高い転化率を示すという効果が確認された。

さらに長寿命化を図るために、他の触媒への適用、最適化の検討を行っている。

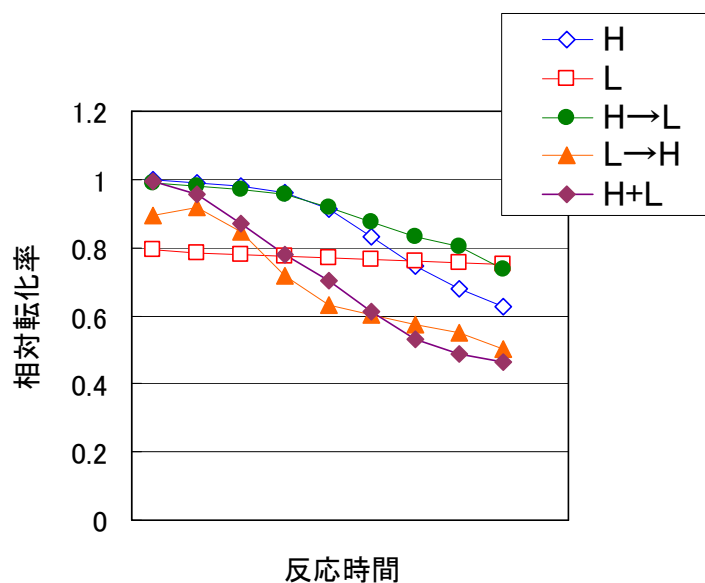


図 E10 高 Al の H-ZSM-5(H)と低 Al の H-ZSM-5(L)を異なる配置で用いたヘキサン接触分解におけるヘキサンの相対転化率(H における初期転化率基準)の経時変化
反応温度:650°C

まとめと課題

触媒層内のコーキング挙動を考慮し、二段触媒反応について検討した。活性の異なる2種類の触媒を使用し、上段に高活性、下段に低活性(高安定性)の触媒を配置することで、コーキングを抑制し、他の配置と比べ長時間、高い活性を維持した。このことから、複数の触媒を組み合わせたプロセスを提案する。2段触媒は、単独での使用目的で開発した触媒に対し、修飾や処理で活性を変えるだけで適用可能な技術と考えられる。

2-1-③

a. コーキング挙動の解析

ゼオライト触媒を用いるナフサ分解反応では、反応中に活性点（酸点）で反応物由来の炭素質の堆積（コーキング）が起き、触媒が失活する。ナフサ分解反応のキャリアーとして安価な水蒸気を用いることによりコーキングを抑えることが期待できる。しかしながら水蒸気がゼオライト骨格からのアルミニウムの脱離（脱アルミ）を引き起こし、活性劣化を引き起こす問題が新たに生じることが予想される。本項においては、ゼオライト触媒を用いるナフサ分解反応のモデルとして ZSM-5 触媒による *n*-ヘキサンの分解反応を行い、劣化機構解明を行った。更に化学修飾 ZSM-5 触媒を開発し、その耐久性を評価した。ただし、触媒として用いる ZSM-5 は全て市販品とした。これは、次のような理由による。①市販品は、誰でも、容易に入手できるので、これで得られたデータは全体の標準と成りえる。②今後、ラボレベルからベンチ、パイロットと進むにつれ、多量の触媒が必要になるが、物性・性能の一定したものを、必要な量、必要な時に手軽に入手できるのは市販品であるので、市販品の性能を調べておくことが必須である。なお、触媒は常にスチーム流通下で反応に使用したが、これは次の理由による。キャリアガスとして、スチームが最も安いうえに、スチームにはデコーキングの作用があると考えられるので、将来の実プラントを念頭に置いた場合、スチーム下での反応データを集積しておく必要があるからである。

○ZSM-5 系触媒のコーキング挙動の解明

ZSM-5 触媒 ($[\text{SiO}_2]/[\text{Al}_2\text{O}_3]=60$) による *n*-ヘキサンの水蒸気分解反応について調べた。反応温度 650°C, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa の反応条件では水蒸気の共存により反応時間と共に活性が低下した (図 F1)。活性劣化の程度は水蒸気分圧にほとんど依存しなかった。

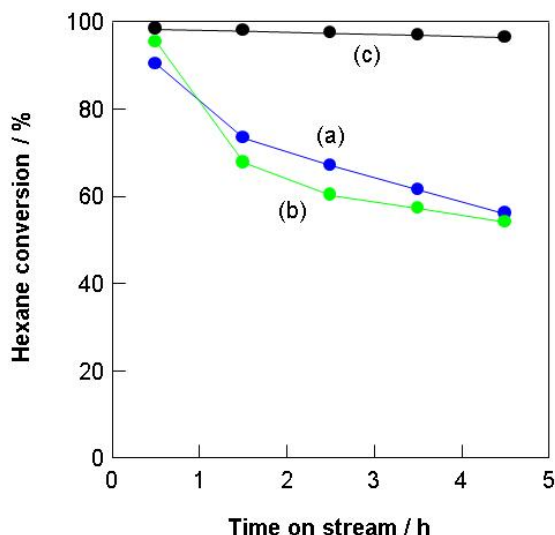


図 F1 ZSM-5($[\text{SiO}_2]/[\text{Al}_2\text{O}_3]=60$)触媒による *n*-ヘキサンの分解反応の水蒸気分圧依存性 (反応温度 650°C, 触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa). (a) 水分圧 69 kPa, 窒素分圧 18 kPa, (b) 水分圧 35 kPa, 窒素分圧 53 kPa, (c) 水分圧 0 kPa, 窒素分圧 87 kPa.

反応終了後の試料について TG-DTA (昇温速度 5°C/min, 空気流 50 cm³/min) を測定し (図 2)、堆積した炭素質重量を TG 曲線から、堆積した炭素の燃焼温度を DTA 曲線の最大値から決定した

(表 F1)。水蒸気を共存させないと反応中に 4.7 wt%の炭素質が ZSM-5 触媒に堆積したが、水蒸気の共存により炭素質の堆積は 1 wt%以下となった。*n*-ヘキサン分解中に水蒸気を共存させることよりコーキングを抑制できることを確認した。また共存する水蒸気分圧を変えても炭素質の堆積量はほとんど同じであった (図 F2 (a), (b))。

DTA から見積もった炭素質が燃焼により除去される温度は、水蒸気が共存しない場合と共存する場合で燃焼温度がほとんど変化せず (表 F1)、ZSM-5 触媒に堆積する炭素質の種類は水蒸気共存により変化しない。

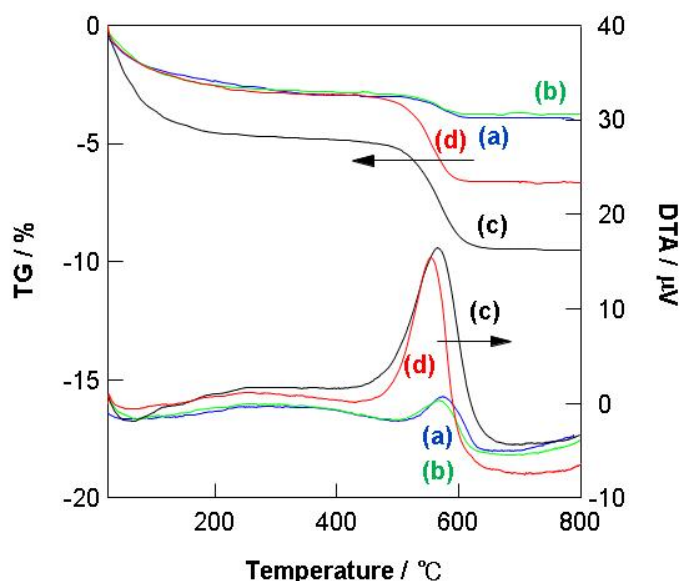


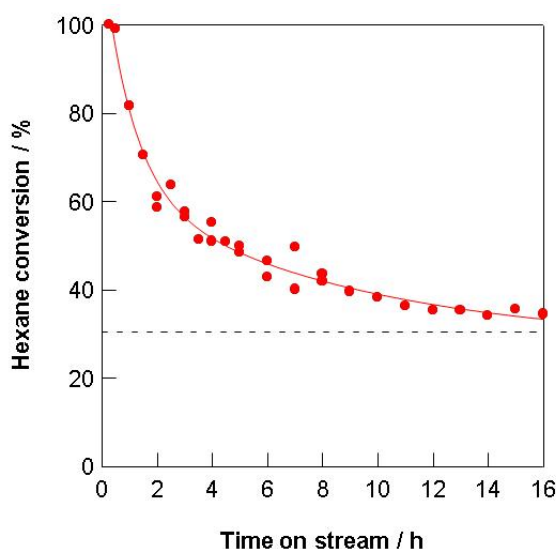
図 F2 *n*-ヘキサン分解反応 (反応温度 650°C, 触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 反応時間 5 時間)を行った ZSM-5([SiO₂]/[Al₂O₃]=60)触媒の TG-DTA 曲線. (昇温速度 5 °C/min, 雰囲気 空気流 50 cm³/min). 分解反応の分圧(a) 水分圧 69 kPa, 窒素分圧 18 kPa, (b) 水分圧 35 kPa, 窒素分圧 53 kPa, (c) 水分圧 0 kPa, 窒素分圧 87 kPa. , (d) (a)の試料を 5 時間水分圧 69 kPa, 窒素分圧 18 kPa で処理.

表 F1 *n*-ヘキサン分解反応 (反応温度 650°C, 触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 反応時間 5 時間) で ZSM-5([SiO₂]/[Al₂O₃]=60)触媒に堆積した炭素質量と炭素質燃焼温度 (燃焼条件 昇温速度 5 °C/min, 雰囲気 空気流 50 cm³/min)

水蒸気分圧/kPa	炭素質堆積量/wt%	炭素質燃焼温度/°C
0	4.7	565
18	0.97	573
35	0.92	568

ZSM-5 に堆積した炭素質の水蒸気による除去効果について調べた。*n*-ヘキサン分解を 5 時間行った ZSM-5 触媒 (図 F1 (c)) に水蒸気蒸気処理 (水蒸気分圧 69 kPa、窒素分圧 32 kPa、流速 67 cc/min) を行い TG-DTA を測定した。*n*-ヘキサン分解反応を 5 時間行うことで 4.7 wt%堆積した炭素質 (図 F2 (c)) は、5 時間の水蒸気処理により 3.7%まで減少した (図 F2 (d))。水蒸気は堆積した炭素質の除去にも効果があることを明らかにした。

水蒸気共存下での *n*-ヘキサン分解反応におけるコーキング量の反応時間依存性について調べた。ZSM-5 触媒 ([SiO₂]/[Al₂O₃]=60) に反応温度 650°C, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 窒素分圧 18 kPa, 水蒸気分圧 70 kPa で *n*-ヘキサン分解反応を行うと 16 時間で触媒活性がほぼゼロになった (図 F 3)。 *n*-ヘキサン分解反応を行った ZSM-5 触媒についての TG-DTA より、ZSM-5 触媒に堆積した炭素質量は反応時間と共に増加することが分かった (図 4、表 2)。また DTA 曲線の極大値を示す温度は反応時間に関係なく 600°C でほぼ一定であり、触媒上に堆積



する炭素質は反応時間により質的な変化がない。

図 F 3 ZSM-5([SiO₂]/[Al₂O₃]=60)触媒による *n*-ヘキサンの分解反応 (反応温度 650°C, 触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 水蒸気分圧 70 kPa,)。点線は無触媒時の熱分解率。

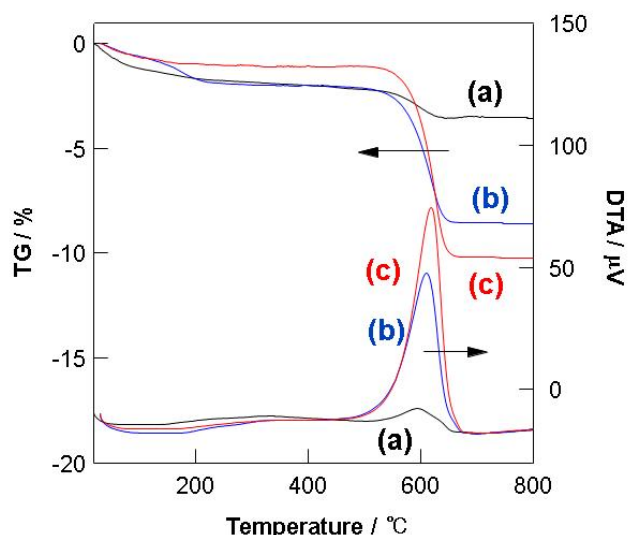


図 F 4 *n*-ヘキサン分解反応 (反応温度 650°C, 触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 水蒸気分圧 70 kPa) 後の ZSM-5([SiO₂]/[Al₂O₃]=60)触媒の TG-DTA 曲線 ((a) 反応時間 5 時間, (b)10 時間, (c)16 時間)。

n-ヘキサン分解反応を行った ZSM-5 触媒について酸素処理と再反応を行い、触媒へのコーキングの影響を調べた (図 F5)。*n*-ヘキサン分解反応 (反応温度 650°C, 触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 水蒸気分圧 70 kPa) を 5 時間行くと ZSM-5 触媒の活性 (*n*-ヘキサン転化率) が 51% まで減少した (図 F5 A 点)。その後 ZSM-5 触媒を 20% の酸素で 600°C、5 時間焼成処理し、再度 *n*-ヘキサン分解反応を行うと初期 *n*-ヘキサン転化率 (図 F5 B 点) に活性) は 66% まで向上した。即ち 5 時間の *n*-ヘキサン分解反応により ZSM-5 触媒の活性 (*n*-ヘキサン転化率) は 50% 低下するが、このうちコーキングによる活性劣化は 15% である。図 F5 の結果はコーキングよりも脱アルミによる酸点の減少の割合が多いことを示す。

表 F2 *n*-ヘキサン分解反応 (反応温度 650°C, 触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 水蒸気分圧 70 kPa) を行った ZSM-5([SiO₂]/[Al₂O₃]=60)触媒に堆積した炭素質量と炭素質燃焼温度

反応時間/時間	炭素質堆積量/wt%	炭素質燃焼温度/°C
5	1.3	595
10	6.5	611
16	9.0	618

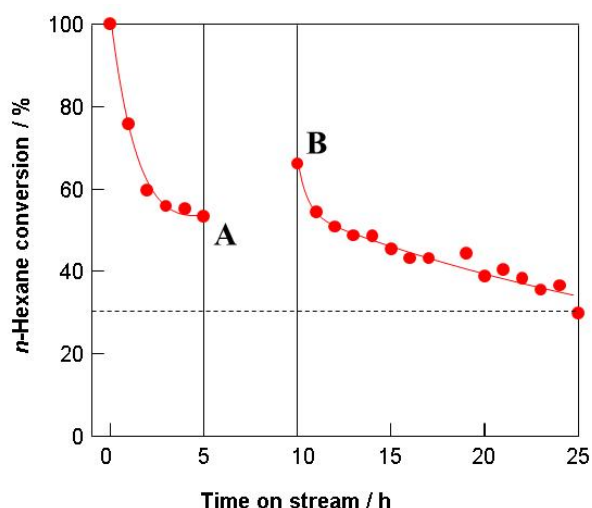


図 F5 ZSM-5([SiO₂]/[Al₂O₃]=60)触媒による *n*-ヘキサン分解反応 (反応条件: 反応温度 650°C, 触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 水蒸気分圧 70 kPa, 酸素処理条件: 酸素 20%, 600°C, 5 時間)。

酸素で処理した ZSM-5 触媒と水蒸気前処理を施した ZSM-5 触媒について反応挙動を比較し、水蒸気による脱アルミとコーキングとの関係を調べた。*n*-ヘキサン分解反応 (反応温度 650°C, 触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 水蒸気分圧 70 kPa) を 10 時間行くと ZSM-5 触媒の *n*-ヘキサン転化率は 38% まで減少した (図 F6 (a))。反応後 ZSM-5 触媒を 20% の酸素で 600°C、5 時間焼成処理し、炭素質を除去して再度 *n*-ヘキサン分解反応を行うと *n*-ヘキサン転化率は 53% まで再生した (図 F6 (b))。未使用 ZSM-5 触媒を 70 kPa の水蒸気で 10 時間前処理した場合には初期 *n*-ヘキサン転化率は 48% であった (図 F6 (c))。即ち酸素処理した

ZSM-5 触媒 (図 F 6 (b)) は水蒸気前処理触媒 (図 F 6 (c)) よりも高い活性を維持することが分かった。*n*-ヘキサン分解反応ではコーキングは活性劣化の原因となるが、コーキングはもう一つの劣化要因である脱アルミによる酸点減少を抑制していることを示唆している。

アンモニア TPD により再生触媒と水蒸気前処理触媒の酸性質について調べた。*n*-ヘキサン分解反応 (反応温度 650°C, 触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 水蒸気分圧 70 kPa, 反応時間 5 時間) を行った後に 20%の酸素で 600°C、5 時間焼成処理することで、炭素質を除去した ZSM-5 触媒と、70 kPa の水蒸気処理を行った ZSM-5 触媒の TPD プロファイルを図 F 7 に示す。*n*-ヘキサン分解反応時間が長いほど酸量の減少が大きいこと、水蒸気前処理時間が長いほど酸量の減少が大きくなった。また同一時間の水蒸気暴露条件では、水蒸気前処理触媒の酸量は酸素処理触媒の酸量より少なかった。この結果は、反応中に起こるコーキングは脱アルミによる酸点減少を抑制していることを意味する。

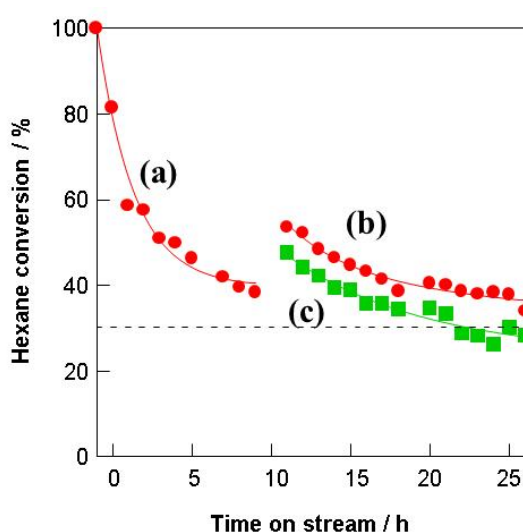


図 F 6 *n*-ヘキサン分解反応活性の経時変化. (a) ZSM-5([SiO₂]/[Al₂O₃]=60)触媒, (b)10 時間反応後酸素処理 (酸素 20%, 600°C, 5 時間) を行った ZSM-5 触媒, (c) 70 kPa 水蒸気で 10 時間前処理した ZSM-5)触媒. (反応条件: 反応温度 650°C, 触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 水蒸気分圧 70 kPa).

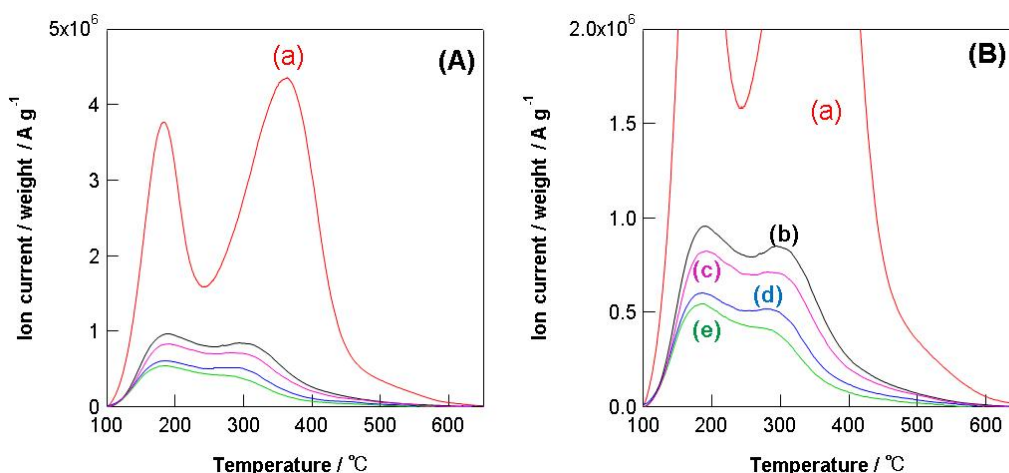


図 F 7 ZSM-5([SiO₂]/[Al₂O₃]=60)触媒のアンモニア TPD. (a) ZSM-5([SiO₂]/[Al₂O₃]=60)触媒,

(b) *n*-ヘキサン分解反応（反応条件：反応温度 650°C，触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 水蒸気分圧 70 kPa, 5 時間）後に焼成処理（酸素 20%, 600°C, 5 時間），
 (c) *n*-ヘキサン分解反応 10 時間後に焼成処理，
 (d) 70 kPa の水蒸気で 5 時間前処理，
 (e) 70 kPa の水蒸気で 10 時間前処理。

化学修飾により耐久性を維持する ZSM-5 触媒について、耐コーキング能を調べた。ZSM-5([SiO₂]/[Al₂O₃]=60)に硝酸ランタンとリン酸水素二アンモニウムを前駆体として 10wt%ランタン、2wt%リンおよび 10wt%ランタンと 2wt%リンを含浸担持した触媒(それぞれ La/ZSM-5、P/ZSM-5、LaP/ZSM-5 と示す)を調製した。それぞれの *n*-ヘキサン分解反応（反応条件：反応温度 650°C，触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 水蒸気分圧 70 kPa) 活性を図 F 8 に示す。ランタンおよびリンを担持することにより未修飾の ZSM-5 触媒（図 F 8 (a)）に比較して初期活性は減少するが、16 時間後も 60%以上の高い活性を維持していることがわかる。

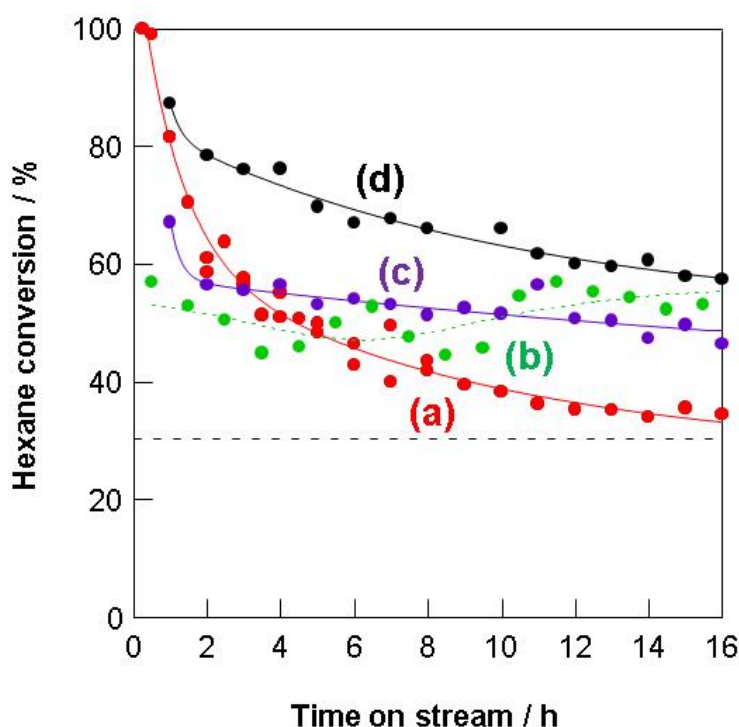


図 F 8 化学修飾 ZSM-5([SiO₂]/[Al₂O₃]=60)触媒による *n*-ヘキサン分解反応（反応条件：反応温度 650°C，触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 水蒸気分圧 70 kPa). (a):ZSM-5, (b): P/ZSM-5, (c): La/ZSM-5, (d): LaP/ZSM-5.

n-ヘキサン分解反応に耐久性を示す化学修飾 ZSM-5 触媒について TG-DTA を調べた(図 F 9)。調べた触媒全てについて *n*-ヘキサン分解反応により炭素質が析出したが、ZSM-5 触媒へランタンおよびリンを担持することにより析出量が大きく低減した。特に P/ZSM-5 については炭素質の析出量が小さかった。反応時間に対する触媒の重量変化を調べコーキングの反応時間依存性を調べた(図 F 10)。P/ZSM-5 触媒では 16 時間反応しても 1wt%の炭素質の堆積であった。ランタンやリンの化学修飾により ZSM-5 触媒へのコーキングを抑えることができ耐久性向上が向上した。

特にリンの担持が効果的であった。

また触媒に堆積した炭素質の燃焼温度はランタンの担持により大きく低下した（表F3）。ランタン触媒作用により炭素質がより低温で燃焼する。即ちランタン修飾触媒は耐久性と共に再生能が向上する。

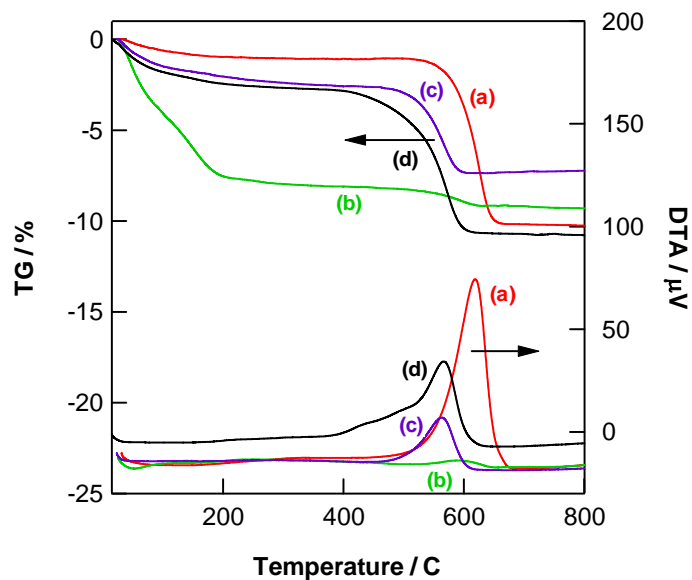


図 F 9 n -ヘキサン分解反応した化学修飾 ZSM-5 触媒の TG-DTA 曲線（反応条件：反応温度 650°C, 触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 水蒸気分圧 70 kPa, 反応時間 16 時間）. (a) ZSM-5, (b) P/ZSM-5, (c) La/ZSM-5, (d) LaP/ZSM-5.

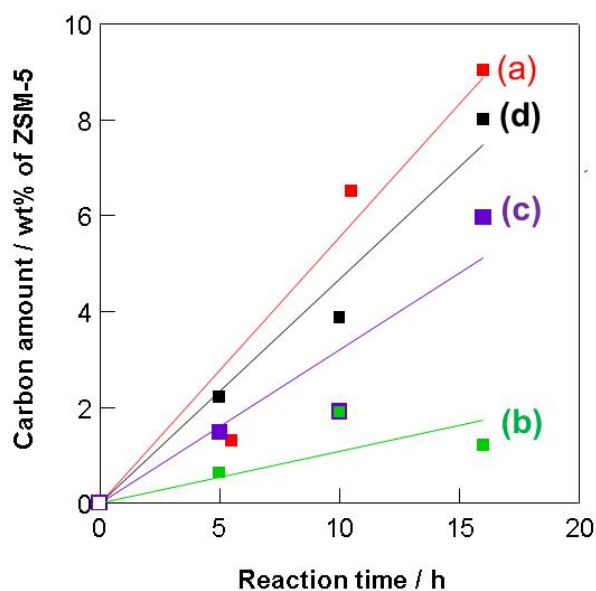


図 F 1 0 化学修飾 ZSM-5([SiO₂]/[Al₂O₃]=60)触媒への炭素質堆積量の反応時間依存性. (反応条件：反応温度 650°C, 触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 水蒸気

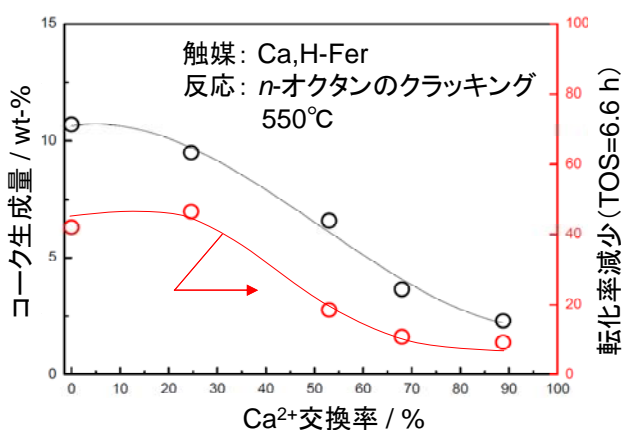
分圧 70 kPa). (a) ZSM-5, (b) P/ZSM-5, (c) La/ZSM-5, (d) LaP/ZSM-5.

表 F 3 化学修飾 ZSM-5([SiO₂]/[Al₂O₃]=60)触媒に堆積した炭素質の燃焼温度 (反応条件: 反応温度 650°C, 触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 水蒸気分圧 70 kPa. 燃焼条件: 昇温速度 5 °C/min, 雰囲気 空気流 50 cm³/min)

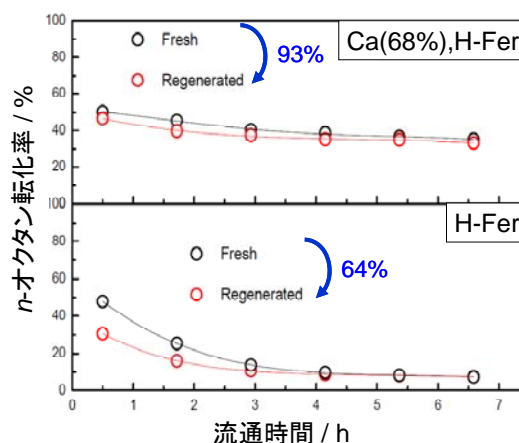
触媒	炭素燃焼温度 / °C		
	反応 5 時間	反応 10 時間	反応 15 時間
ZSM-5	595	611	619
LaP/ZSM-5	429	521	567
La/ZSM5	ND	540	563
P/ZSM-5	ND	590	593

○FER系触媒のコーキング挙動の解析

2-1-①-1 b(v)で述べたフェリエライトへの Ca²⁺交換による安定性の向上に関して、その原因を知るため、*n*-オクタンのクラッキングを行った触媒上のコークの定量を行った。図 F 1 1 に、Ca²⁺交換率と流通時間 6.6 h におけるコーク生成量の関係を示す。交換率の上昇とともにコーク生成量は大幅に減少した。初期転化率と 6.6 h 後の転化率の差を赤線で示す。両曲線はよく似た挙動を示す。すなわち、安定性の向上はコーク生成量の減少によることが分かる。この結果は、コーク形成の前駆体であるアリルカルベニウムイオンが Ca,H-Fer 細孔内で生成しにくいことを示す。2-1-①-1 b(v)において推定したように、Ca²⁺交換によりフェリエライト細孔内でヒドリド移動が抑制されることが実証された。



図F 1 1 Ca²⁺交換によるコーク生成量の変化



図F 1 2 Ca,H-Ferの再生試験

再生条件: O₂/He=1/4、550°C、1 h

生成したコークの焼成による触媒の再生を行った。オクタンのクラッキングを 550°C で 6.6 h 行った後、O₂(20%)/He 流通下、550°C で再生処理を 1 h 行った。再生後の触媒を用いて反応を行ったところ (図 F 1 2)、Ca(68%),H-Fer では初期転化率が 1 回目の反応のときの 93% となり、その後の経時変化も 1 回目とほぼ同様な傾向を示した。Ca,H-Fer 上のコークがこの再生条件下でほぼ完

全に取り除けたことが分かる。一方、H-Fer を用いた場合、初期転化率は1回目の64%にとどまり、再生が不十分であることが分かる。以上の結果から、Ca²⁺交換がフェリエライトの再生に対しても効果的であることが明らかとなった。

b. 脱アルミニウム挙動の解析

ZSM-5系触媒の脱アルミ挙動の解明

反応に共存させる水蒸気により、ゼオライト触媒中のアルミニウム原子が格子から脱離し酸点が減少する挙動を調べた。更に開発した化学修飾ゼオライトの耐水蒸気能について調べた。

ZSM-5 触媒 ([SiO₂]/[Al₂O₃]=60) について水蒸気前処理を行い活性の低下と脱アルミニウム (酸点減少量) との関係について調べた。図 F 1 3 にモデル化合物である *n*-ヘキサン分解反応挙動を示す。用いた反応条件 (反応温度 650°C, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa) では16時間反応活性を維持した (図 F 1 3 (a))。水蒸気前処理を行うと初期活性が減少し、水蒸気前処理時間が長いほどに初期活性の低下の程度は大きかった。

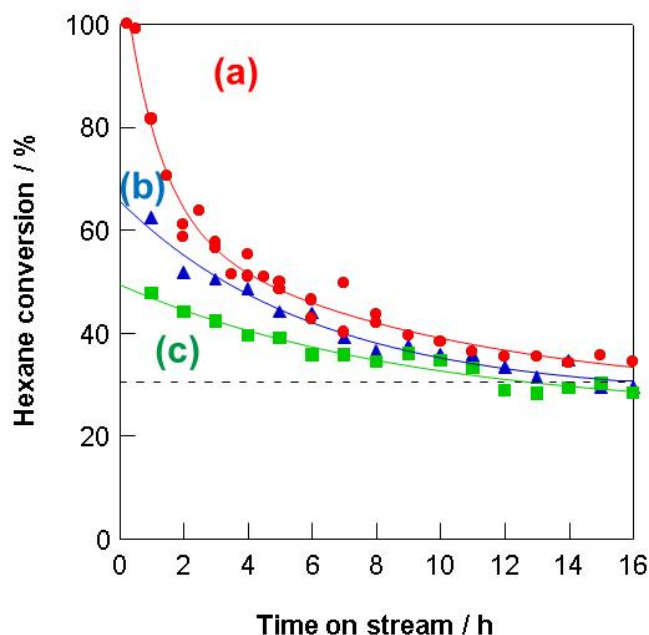


図 F 1 3 ZSM-5([SiO₂]/[Al₂O₃]=60)触媒による *n*-ヘキサンの分解反応の水蒸気前処理依存性 (反応温度 650°C, 触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 水蒸気分圧 70 kPa, 窒素分圧 18 kPa, 水蒸気前処理条件 650°C, 水分圧 70 kPa). (a) 未処理, (b) 水蒸気 70 kPa, 窒素 30 kPa, 5 時間前処理, (c) 水蒸気 70 kPa, 窒素 30 kPa, 10 時間前処理.

水蒸気前処理による ZSM-5 触媒の構造変化を XRD と窒素吸着法により調べた。XRD パターンを図 F 1 4 に示す。ZSM-5 触媒の XRD パターンは水蒸気前処理によりほとんど変化せず水蒸気処理によりゼオライトの結晶構造はほとんど保たれていることがわかる。窒素吸着法により表面積を調べ、また *t*-プロット法により外表面積を調べた (図 F 1 5 と表 F 4)。水蒸気処理の有無で表面積はほとんど変化しなかったが、水蒸気処理により外表面積の割合が大きく増えた。また ICP 法により、試料内に存在するアルミニウム量は水蒸気処理により変化しないことを確認した。

以上より ZSM-5 触媒は水蒸気によりマクロな構造は保っているが、部分的に壊れていることが予想される。

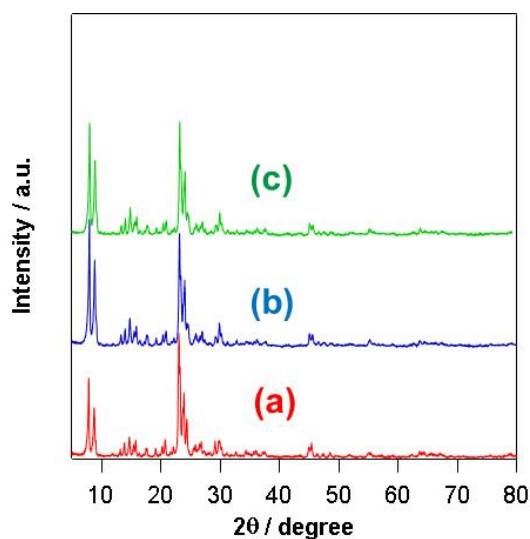


図 F 1 4 水蒸気処理した ZSM-5($[\text{SiO}_2]/[\text{Al}_2\text{O}_3]=60$)触媒の XRD パターン. (a) 未処理, (b) 水蒸気 70 kPa, 窒素 30 kPa, 5 時間処理, (c) 水蒸気 70 kPa, 窒素 30 kPa, 10 時間処理.

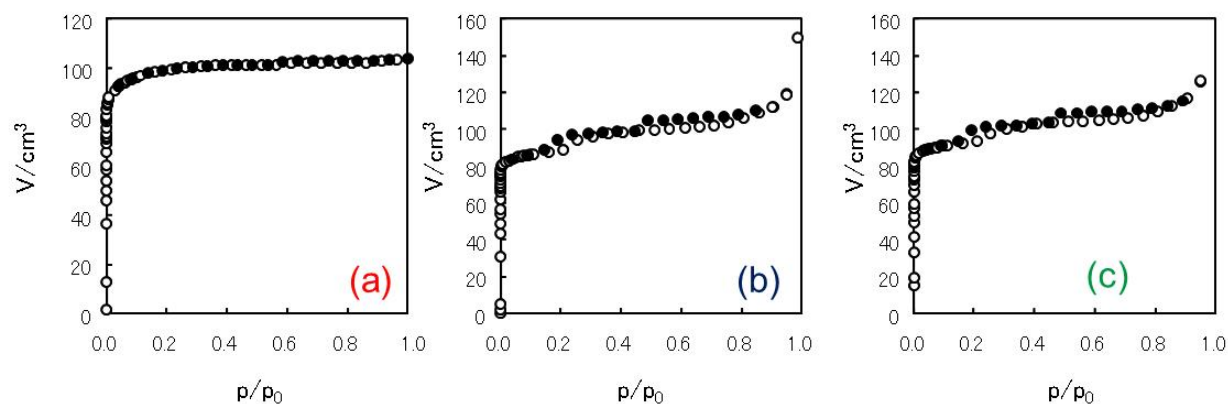


図 F 1 5 水蒸気処理した ZSM-5($[\text{SiO}_2]/[\text{Al}_2\text{O}_3]=60$)触媒の窒素吸脱着等温線. (a) 未処理, (b) 水蒸気 70 kPa, 窒素 30 kPa, 5 時間処理, (c) 水蒸気 70 kPa, 窒素 30 kPa, 10 時間処理.

表 F 4 ZSM-5 触媒の $[\text{SiO}_2]/[\text{Al}_2\text{O}_3]$ 比と表面積

試料	$[\text{SiO}_2]/[\text{Al}_2\text{O}_3]$	表面積 / $\text{m}^2 \text{g}^{-1}$	外表面積 / $\text{m}^2 \text{g}^{-1}$
未処理	60.3	344	2
水蒸気 5 時間処理	59.7	305	77
水蒸気 10 時間処理	59.6	320	63

水蒸気処理による ZSM-5 触媒の酸性質およびアルミニウムの局所構造変化を TPD および NMR で調べた。

アンモニア TPD による酸量測定結果を図 F 1 6 示す。未処理 ZSM-5 触媒では 180°C および 350°C 付近に二つのピークが観測されたが、水蒸気処理によりその強度は共に大きく減少した。また水蒸気処理時間が長い試料ほど高温側のアンモニア脱離ピークが減少し、水蒸気処理時間が長いほど残存酸量が少ないことがわかった。

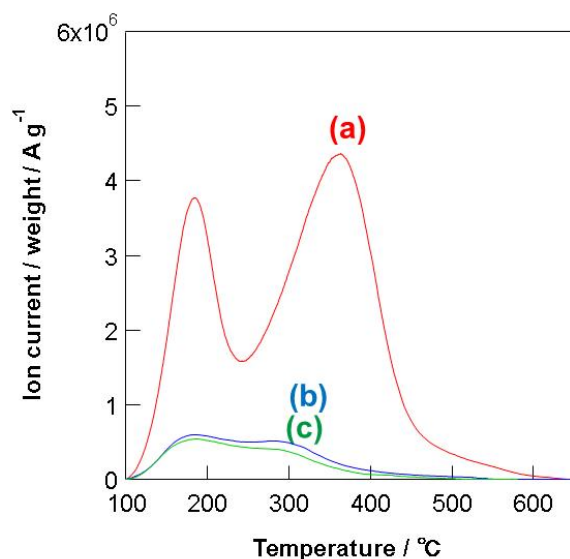


図 F 1 6 水蒸気前処理した ZSM-5 ZSM-5([SiO₂]/[Al₂O₃]=60)触媒触媒のアンモニア TPD (TPD 測定条件: 500°C排気, 100°Cアンモニア吸着, 100°Cヘリウム流通, 昇温速度 10 K/min). (a) 未処理, (b) 水蒸気 70 kPa, 窒素 30 kPa, 5 時間処理, (c)水蒸気 70 kPa, 窒素 30 kPa, 10 時間処理.

²⁷Al MAS NMR によるアルミニウムの局所構造について調べた (図 F 1 7)。用いた ZSM-5 触媒では 55 ppm 付近に 4 配位アルミニウムに帰属されるピークのみが観測された。このピークは水蒸気処理によりほとんど消失した。また、6 配位のアルミニウムに帰属されるピーク (0 ppm 付近) は新たに観測されることはなかった。

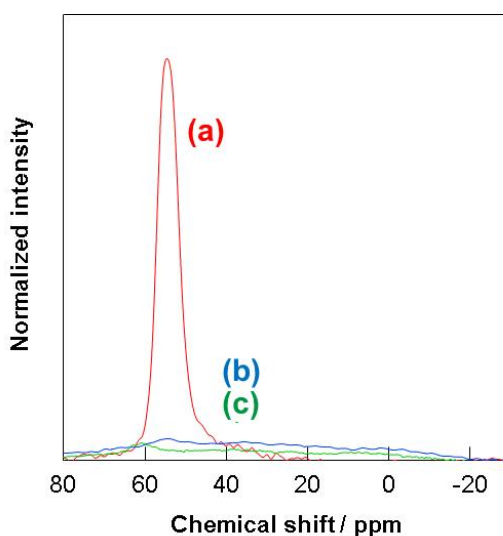


図 F 1 7 水蒸気前処理した ZSM-5 ([SiO₂]/[Al₂O₃]=60)触媒の ²⁷Al MAS NMR. (a) 未処理, (b) 水蒸気 70 kPa, 窒素 30 kPa, 5 時間処理, (c)水蒸気 70 kPa, 窒素 30 kPa, 10 時間処理.

ZSM-5 触媒は *n*-ヘキサン分解反応において高い初期活性を示すが、耐久性が無く容易に失活する。種々の化学種による添加効果を調べランタンおよびリンの ZSM-5 への化学修飾が効果的であることが分かった。ランタンおよびリンを担持することにより未修飾の ZSM-5 触媒(図 F 1 8 (a))に比較して初期活性は減少するが、16 時間後も 60%以上の高い活性を維持することがわかる。

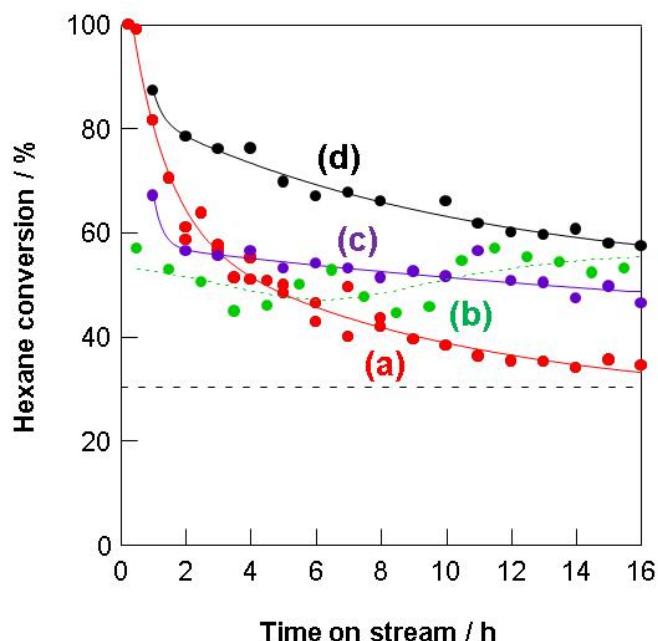


図 F 1 8 化学修飾 ZSM-5($[\text{SiO}_2]/[\text{Al}_2\text{O}_3]=60$)触媒による *n*-ヘキサン分解反応 (反応条件: 反応温度 650°C, 触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 水蒸気分圧 70 kPa). (a):ZSM-5, (b): P/ZSM-5, (c): La/ZSM-5, (d): LaP/ZSM-5.

化学修飾が ZSM-5 触媒の酸量およびアルミニウムの局所構造に与える影響を調べた。化学修飾 ZSM-5 触媒のアンモニア TPD を示す (図 F 1 9)。無修飾 ZSM-5 触媒では 180°C および 350°C 付近に二つのアンモニア脱離ピークが観測された。ランタンおよびリンで修飾した ZSM-5 触媒では高温側のピークが大きく減少した。特に 2 wt% のリンで修飾した試料では (図 F 1 9 (b)) 高温側のピーク強度は大きく減少した。650°C、70 kPa で 5 時間水蒸気処理した試料のアンモニア TPD スペクトルを点線で示す。未修飾試料ではピーク強度が水蒸気処理により 1/10 ほどに減少したが、化学修飾試料では水蒸気処理前に比べて半分ほど酸点が残っていることが分かった。

化学修飾 ZSM-5 触媒のアルミニウムの局所構造を ^{27}Al MAS NMR により調べた (図 F 2 0)。無修飾 ZSM-5 触媒では 4 配位のアルミニウムに帰属される 60 ppm 付近のピークが水蒸気処理により完全に消失した。ZSM-5 触媒をリンまたはランタンで化学修飾すると 60 ppm 付近のピーク強度が減少したが、650°C、70 kPa、5 時間の水蒸気処理を行っても ZSM-5 触媒中に 4 配位に帰属されるアルミニウムが試料中に残存した。特に 2wt% のリンで修飾した P/ZSM-5 については、650°C、70kPa の水蒸気で 5 時間処理しても酸量が 70% 残存することが分かった。

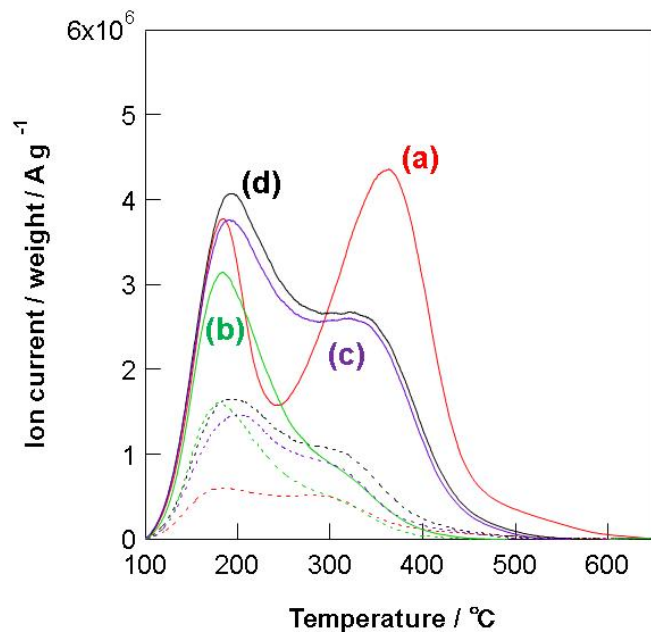


図 F 1 9 化学修飾 ZSM-5($[\text{SiO}_2]/[\text{Al}_2\text{O}_3]=60$)触媒のアンモニア TPD (測定条件: 500°C 排気, 100°C アンモニア吸着, 100°C ヘリウム流通, 昇温速度 10 K/min). 点線は水蒸気処理試料 (水蒸気処理条件: 650°C , 70 kPa , 5 時間). (a) ZSM-5, (b) P/ZSM-5, (c) La/ZSM-5, (d) LaP/ZSM-5.

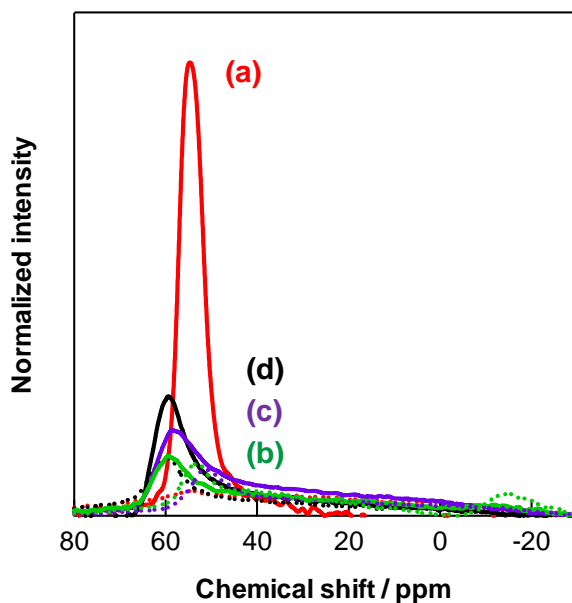


図 F 2 0 化学修飾 ZSM-5($[\text{SiO}_2]/[\text{Al}_2\text{O}_3]=60$)触媒の ^{27}Al MAS NMR. 点線は水蒸気処理試料 (水蒸気処理条件: 650°C , 70 kPa , 5 時間). (a) ZSM-5, (b) P/ZSM-5, (c) La/ZSM-5, (d) LaP/ZSM-5.

P/ZSM-5 触媒の *n*-ヘキサン分解反応および各種キャラクタリゼーション結果より、リンの修飾

が ZSM-5 中のアルミニウム原子の安定性と、耐コーキングに寄与することが分かった。リンの修飾量が耐久性に及ぼす効果について調べた。

リンの化学修飾によって *n*-ヘキサン分解反応の初期活性および耐久性（16 時間後の活性）が変化した（図 F 2 1）。特に 1.0wt%のリンで修飾した触媒が初期活性及び耐久性が最も高かった。

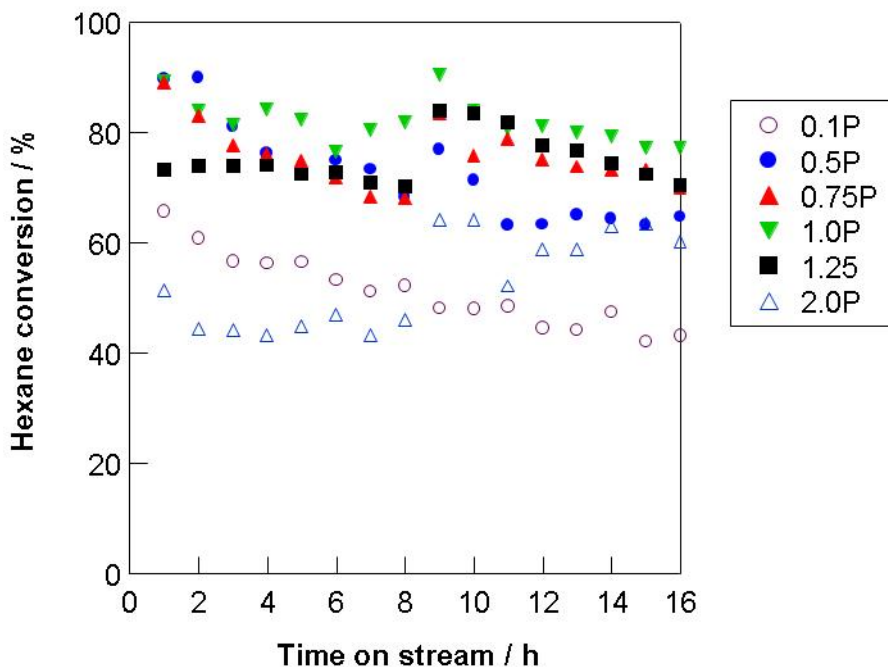


図 F 2 1 P/ZSM-5([SiO₂]/[Al₂O₃]=60)触媒による *n*-ヘキサンの分解反応のリン修飾量依存性。(水蒸気処理条件：650°C, 70 kPa, 5 時間)。

修飾量の異なる P/ZSM-5 触媒についてアンモニア TPD を調べると、リンの修飾量と共に酸量が減少した。特に 350°C 付近の高温側のピークが大きく減少した。（図 F 2 2）

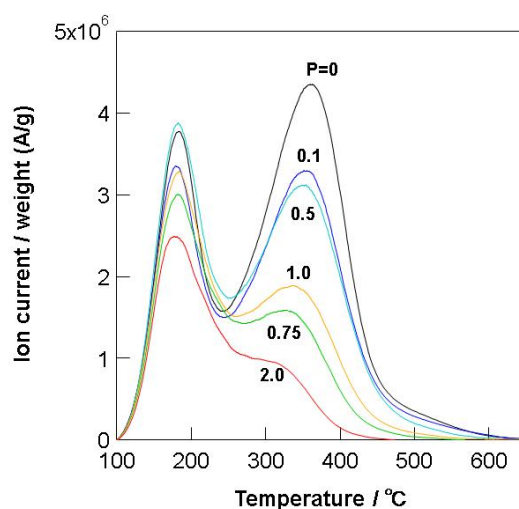


図 F 2 2 P/ZSM-5([SiO₂]/[Al₂O₃]=60)触媒のアンモニア TPD (TPD 測定条件：500°C 排気, 100°C アンモニア吸着, 100°C ヘリウム流通, 昇温速度 10 K/min, 水蒸気処理条件：650°C, 70 kPa, 5 時間)。

[SiO₂]/[Al₂O₃]比の異なる ZSM-5 ([SiO₂]/[Al₂O₃]=90) 触媒を用い、リン修飾量と耐久性との関係を調べた (図 F 2 3)。ZSM-5 ([SiO₂]/[Al₂O₃]=90) 触媒の場合はリン修飾量 0.75 wt%において最も高い耐久性を示した。1 wt%のリン修飾で最も高い耐久性を示した ZSM-5

([SiO₂]/[Al₂O₃]=60) の結果と合わせると、ZSM-5 触媒をアルミニウム原子に対して 0.6 個のリンで修飾すると、アルミニウムの脱離とコーキングが抑制され、水蒸気とコーキングに耐久性のある触媒となることが分かった。

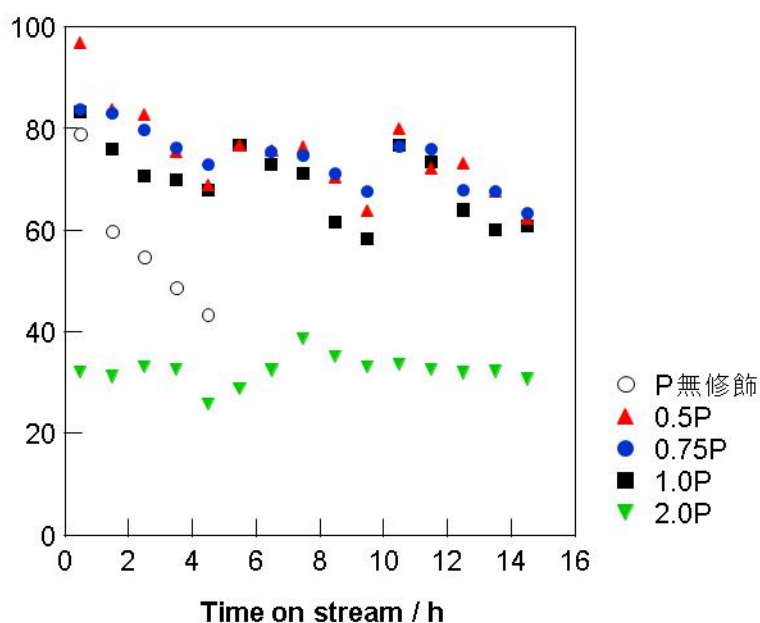


図 F 2 3 P/ZSM-5([SiO₂]/[Al₂O₃]=90)による *n*-ヘキサンの分解反応 (反応温度 650°C, 触媒量 0.25 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサン分圧 14 kPa, 水蒸気分圧 70 kPa, 窒素分圧 18 kPa,)

以上のような化学修飾による耐久性向上の実験より、リン量を最適化した条件で *n*-ヘキサン分解反応を長時間評価した。結果を図 F 2 4 に示す。1.0wt%のリンで化学修飾した 1.0P/ZSM-5 触媒 (焼成前処理温度 600°C) は *n*-ヘキサン分解反応 (反応温度 650°C, 触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-ヘキサン、ヘキサン分圧 14 kPa、水分圧 70 kPa、窒素分圧 18 kPa) の条件においては初期転化率 90%を示し、48 時間後においても 60%の高い転化率を維持した (図 F 2 4 (a))。更に焼成前処理温度を 600°Cから 700°Cにあげると 48 時間反応においても 65%の活性を維持することが分かった (図 F 2 4 (b))。XRD より 700°C焼成でもゼオライト構造が保たれていた。前処理温度により更に耐久性の高い触媒が得られる可能性がある。

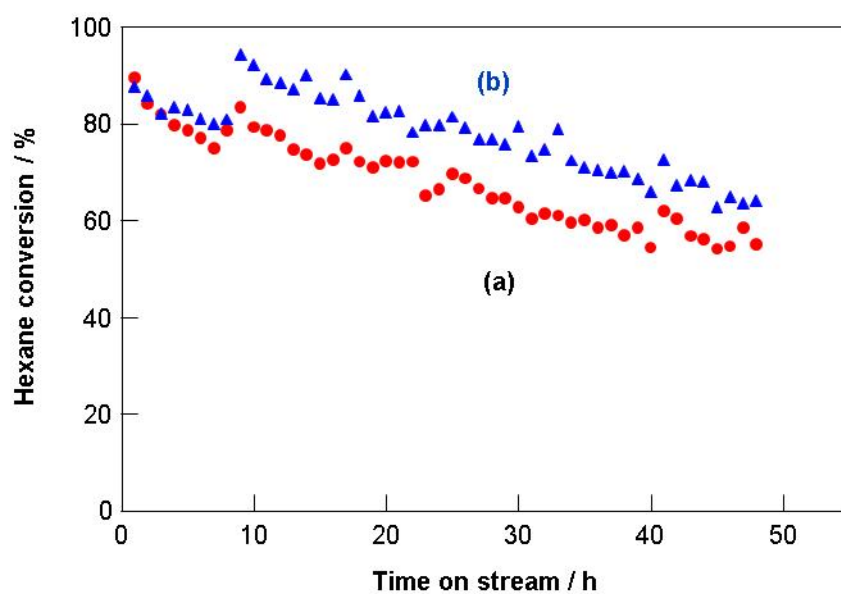


図 F 2 4 1.0P/ZSM-5($[\text{SiO}_2]/[\text{Al}_2\text{O}_3]=60$)触媒による *n*-ヘキサンの分解反応 (反応温度 650°C, 触媒量 0.2 g, W/F 8.0 g-cat h/ mol-hexane, ヘキサンの分圧 14 kPa, 水分圧 70 kPa, 窒素分圧 18 kPa). (a)前処理温度 600°C, (b)前処理温度 700°C.

2-2-① 実用化触媒開発（成形・評価）

（1）背景

ナフサ接触分解反応は、炭素数5～8のパラフィンを主成分とした価値の低い原料を用い、オレフィン類やベンゼン・トルエン・キシレン類（BTX）等の高付加価値成分の製造を目的としている。本反応系で目的とする触媒反応は、主に炭素-炭素結合開裂による分解反応および炭素-水素結合開裂による脱水素反応であるが、その他副反応として、異性化反応、付加・環化反応、逐次反応の過剰な進行によるコーク生成反応、加えて触媒を介さない熱分解反応等が同時に進行する。反応系はoverallには大きな吸熱反応であり、かつ分子数が増大する分解反応であるため、目的とする化合物生成についての平衡は高温、低圧で有利となる。しかし、高温下においては必要以上に炭素数が小さくなる過剰な分解反応が進行し、目的とするプロピレン等高付加価値成分の収率が低下する。そのため、高付加価値成分収率向上のためには、低温で高活性を示す触媒の開発が目指すべき目標となっている。

以上のような反応の特性により、本反応のプロセスは活性、選択性、触媒ライフといった触媒性能、大きな吸熱反応を進行させるための熱の供給方法、過剰反応により副生するカーボンを除去し活性を回復するための触媒再生方法を、最適に設計することが重要である。従ってこれら触媒に要求される性能と反応様式、再生方式は密接に係わりあっている。

実用触媒としては様々な性能が必要とされる。これらの性能は以下のような分類ができる。

- ・ 化学的性能：活性、選択性、触媒ライフ（触媒組成や構造の安定性、耐熱性、耐被毒性、繰り返し再生後の安定性）など
- ・ 物理的性能：形状、粒径、粒度分布、密度、熱容量など
- ・ 機械的性能：機械的強度、耐摩耗性など
- ・ 取り扱い・作業性に係わる性能：安全性、流動性、充填性、回収の容易性、貯蔵性など

またこのような性能を有する触媒製造時の品質安定性、歩留まり、成形性、そして腐食の少ない設備や、廃液が少ない製造法等触媒の価格に係わる性能も必要である。

工業的な反応様式を装置の構造形式で分類すると(1)固定層型、(2)移動層型、(3)流動層型、(4)攪拌槽型、(5)気泡塔型などが挙げられる。本反応では、原料が気体、触媒が固体であるために、反応様式としては(1)～(3)が適している。その中でも、本プロジェクトでは反応器の構造が複雑ではなく、建設費が相対的に安価で、現行のスチームクラッキングへの組み込み面で柔軟性が高い(1)固定層型を優先して取り組んでいる。この場合、外部から加熱する管式加熱炉型の反応様式が現在ナフサクラッキングの反応様式と類似となる。

管式加熱炉型の反応様式では、触媒の基本的な性能である活性、選択性、触媒ライフに加え、機械的強度付与と圧力損失極小化のための触媒形状が重要となる。加えて、年オーダーの長期使用での反応-再生サイクルにおいて、熱・圧力変動により触媒が受けるストレスへの耐久性、さらには、緊急時に触媒が受ける同様のストレスによって触媒が破壊・粉化してしまうことに対する機械的強度も要求される。

本反応様式での反応は、反応系中に均一に分布する原料気体とその中に固体として不均一に分布する触媒との接触により進行するため、原料と触媒との接触効率が反応に重要な役割を果たす。このような反応では、一般に用いる触媒サイズが小さいほど、また、接触する気体の流速が速いほど触媒の内部まで有効に使用され、活性は向上する。しかしながら触媒サイズが小さくなると、気体が通過する断面積が小さくなり流れにくくなり、触媒充填層による圧力損失が大きくなる。

圧力損失を小さくすることは、反応の安定化以外にも、気体を供給する圧縮工程の動力を軽減させるために重要である。そこで固定層反応器用の触媒は、粉末や破碎した形状の触媒ではなく、ある程度の大きさまで成形して用いられている。この成形触媒の形状としては、球形や、タブレット状、リング状、ハニカム状など、流量スケールや圧力等に応じた様々な形状の成形触媒が使用されている。

このように、本反応様式では(a)強度、(b)触媒と原料の高接触効率、(c)低圧力損失、の三つの条件を満たす触媒成形技術の開発が不可欠である。触媒の成形法としては、(1)押出成形法、(2)打錠成形法、(3)転動造粒法などがある。(1)は触媒をペースト状にして型枠に通して成形する方法で、成形装置が比較的簡単で、成形触媒を連続的に大量に製造できるため製造コストが安価である。(2)は圧縮することで成形する方法であり、装置が複雑で生産性が悪く製造コストが高くなる。また(3)は経済性の良い方法として知られるが、原理的に形状のバラつきや粒度分布が避けられない。

本プロジェクトにおいてはゼオライト触媒の使用を念頭に置いている。上述の経済性に加え、ゼオライトの粒子は一般に非常に凝集力が弱く、打錠により圧縮成形体とするのは困難とされている。また、同様の理由で転動造粒による成形も適さない。そのため本プロジェクトでは押出成形法に注力する。

触媒押出成形法は一般的に以下のような工程で行う(図G1)。

- ① 原料混合・混練：粉末状触媒に、押出成形が最適になされる性状のペーストにするために水や有機溶媒の他にこれらと親和し粘度や成形性を調整する成分、成形触媒の強度を上げるために粉末触媒を結合させるバインダーと呼ばれる成分、さらに成形触媒の内部まで原料を拡散させ効率よく反応させるために、有機質を主成分とし、成形後に焼成することによりその成分は燃焼してなくなり空洞を形成しその目的を果たす賦孔剤と呼ばれる成分等を加え、十分に混練し、ペースト状の押出用前駆体を調製。
- ② 押し出し：①で調製したペースト状の前駆体を、押出機により型枠を通してソバ状に成形。
- ③ 乾燥・焼成：②で得られたソバ状の成形体を乾燥後、焼成により成形助剤中の有機物成分を燃焼除去。焼成したソバ状の成形体は一定の長さに切断。
- ④ 洗浄：③で焼成した成形体に含まれる被毒物質の洗浄除去。

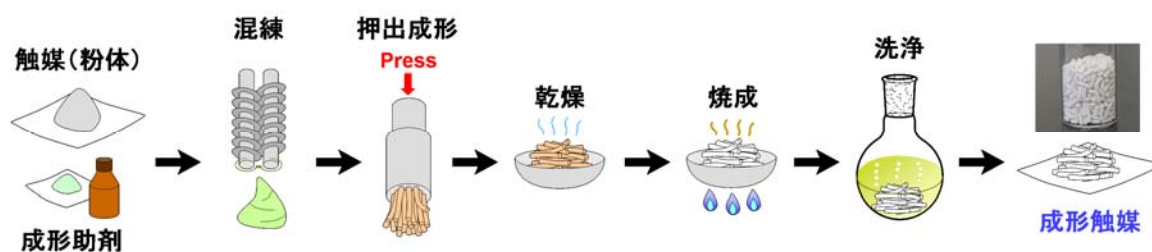


図 G1 触媒押出成形フローの概略

(2) 成形技術開発の方針

以上のような背景を踏まえ、本プロジェクトでは触媒成形技術を触媒開発のため基盤技術の一つとして位置付け、成形触媒開発において必要不可欠な要素である「活性と強度を両立する成形

技術」の獲得を目指して検討を開始した。

活性、選択性、触媒ライフ面から触媒の探索を行って複数の触媒候補を開発し、それぞれの候補触媒を使用して成形法を開発する手順が一般的である。しかし、本プロジェクトにおいては、2014年度までに実証規模プロセスの概念設計が可能な触媒開発を目指している。期間内にこの目標を達成するため、触媒探索とその成形法、さらには長期使用を前提とした再生法の開発を同時に実施する。

触媒探索で使用する粉体触媒と成形された触媒とは活性、選択性などの性能が異なることが多く、通常は触媒毎に使用する成形助剤など各種成形条件や再生条件が異なるはずである。ただし、本プロジェクトにおいては、触媒探索はゼオライト触媒、特に ZSM5 をベースとする触媒を有力な候補の一つと選定し、探索の領域を絞り込んでいる。したがって、ZSM5 をベースとする触媒についての成形および再生方法の検討を通じて触媒成形の基盤技術獲得を目指す。具体的には、既知触媒の中から La、P 担持 ZSM5 触媒 (La/P/ZSM5) を触媒成形および再生検討のベース触媒として選定し検討を開始する。この La/P/ZSM5 で最適化した成形および再生条件やその他の知見をベースとし、本プロジェクトで開発される候補触媒にこの成形および再生条件を適用し、また、その知見を展開して、成形触媒の最適化を行う。

成形触媒の開発にあたり、活性については成形前の粉体触媒と同等以上（粉体触媒あたり）、かつ、強度については圧壊強度 ≥ 1.0 kg であることを指標として成形法の基礎技術を確立し、次いで、圧力損失を最小化する成形触媒の形状を設計することとした。

(3) 押出成形触媒の設計コンセプト

ゼオライト触媒の押出成形について、通常は成形を円滑に行うために適切に配合した成形助剤を添加する。成形助剤の添加により、凝集力の弱いゼオライト粒子を一定以上の強度を持つ成形体とすることができる。しかしながら、成形助剤で触媒粒子が被覆されることによって原料物質の拡散が阻害されるため、一般に強度向上に相反して触媒活性は低下する場合が多い。そこで、成形触媒内部においてマクロスケールの物質拡散の流路を確保するために、ゼオライト細孔とは別の付加的な細孔付与により、成形体を多孔質化できるよう成形触媒を設計した。

また、成形助剤には触媒活性点を被毒する物質が含まれている場合が多いため、洗浄により成形体に含まれる被毒物質を除去することとした。

成形触媒の設計コンセプトを図 G2 にまとめる。

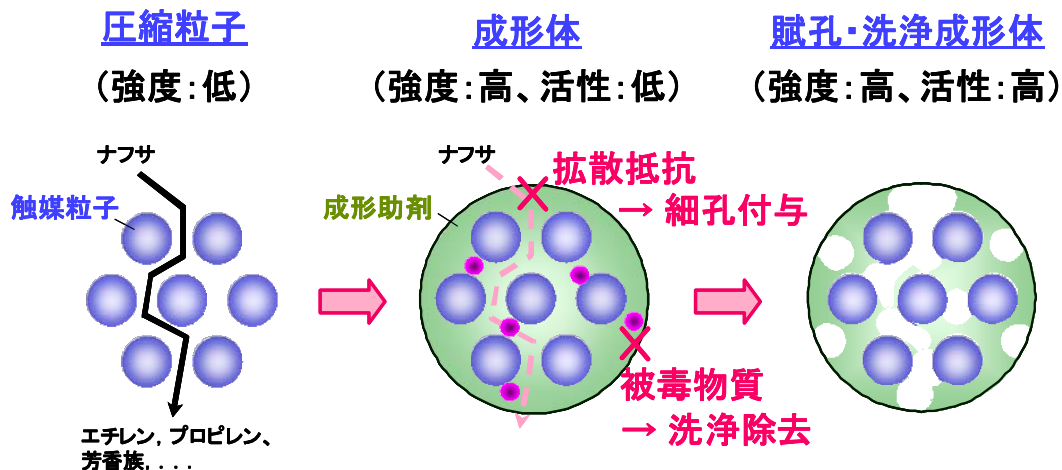


図 G2 成形触媒の設計コンセプト

以上のような触媒成形工程において、成形体の物性および触媒性能に大きく影響する key factor を以下の3つと考えている。

- ①成形助剤の選定および配合比率：成形体の活性、強度両面に影響
- ②混練・押出しの条件：成形体の形状を整える
- ③洗浄条件：成形体の活性に影響

その内、成形体の強度および活性を決定付ける①および③を特に重要と考え、本プロジェクトではこれらの点に特に注力して検討を実施した。

(4) 成形触媒評価方法

●圧壊強度

成形触媒の圧壊強度はデジタル硬度計 KHT-40N（藤原製作所製）を用いて測定した。

●構造

成形触媒の結晶構造は、X線回折装置（MultiFlex、リガク社製）を用い、CuK α 線をX線源として $2\theta = 5\sim 80^\circ$ の範囲での粉末X線回折測定により評価した。

●活性

分解反応

成形触媒の活性評価については、固定床流通式反応装置を用い、モデルナフサを原料とする分解反応により行った。モデルナフサの組成を以下の表 G1 に示す。

表 G1 モデルナフサ組成

成分	含有量 (wt%)
<i>n</i> -ペンタン	29
<i>n</i> -ヘキサン	14
2-メチルペンタン	14
<i>n</i> -オクタン	29
シクロヘキサン	7
メチルシクロヘキサン	7

内径 10 mm の反応管に、成形触媒をゼオライト成分が 0.75 g となるように充填し、原料を反応管に供給して反応を開始した。原料は 7.5 g/h (ゼオライト重量当りの WHSV = 10 h⁻¹) の速度で、反応管の手前で加熱・気化させてから反応管へ供給した。生成物はガスクロマトグラフで分析した。ガスクロマトグラフの検出器は炭化水素の分析には水素炎イオン化検出器 (FID)、H₂ の分析には熱伝導度検出器 (TCD) を用いた。FID 用の分離カラムとして、炭素数 1~6 の炭化水素生成物については Al₂O₃/Na₂SO₄-PLOT キャピラリーカラム (VARIAN 製)、炭素数 6 以上の炭化水素生成物については BP-1 PONA キャピラリーカラム (SGE 製) を、TCD 用の分離カラムとして Shincarbon T (信和化工製) を用いて評価した。分解生成物はエチレン、プロピレン、ブテン類、BTX (ベンゼン、トルエン、キシレン類の合計)、メタン、C₂~C₄パラフィン類の 6 種類に分類した。転化率を上記 6 種類の分解生成物収率の合計として定義した。

$$\text{転化率 (\%)} = \Sigma (\text{出口分解生成物重量}) / \text{出口全物質重量}$$

$$\text{収率 (\%)} = 100 \times \text{出口対象分解生成物重量} / \text{出口全物質重量}$$

再生

反応後触媒の再生処理は反応管内に触媒を充填したまま行った。分解反応終了後、反応管への原料供給を停止し、反応器内に酸素を含んだガスを流通させて触媒の再生を行った。再生排ガスの組成を赤外ガス濃度測定装置 (CGT-7000、島津製作所製) により分析した。

(5) 成形触媒評価結果

●既知触媒 (La/P/ZSM5)

La/P/ZSM5 の調製は既報 (特開平 11-180902) に順じて行った。La/P/ZSM5 について押出成形条件の検討の結果、圧壊強度 ≥ 1.0 kg となる成形触媒の調製に成功した。

成形前の粉体触媒と成形触媒について反応開始後 1 時間の時点での活性を比較した結果を図 G 3 に示す。粉体触媒の転化率を 1 として、成形触媒の反応成績を相対値として示している。成形触媒の生成物分布は粉体触媒と比較してややエチレン+プロピレン合計収率が低く、芳香族化合物収率が高めとなった。この原因として、成形触媒では触媒内での物質拡散が阻害され、生成したエチレン、プロピレン等の低級オレフィンが逐次的な副反応の進行により一部芳香族化したことが考えられる。一方で、転化率に着目すると、成形触媒と粉体触媒の反応結果に大きな差はなく、成形による触媒活性への影響はないと考えられる。

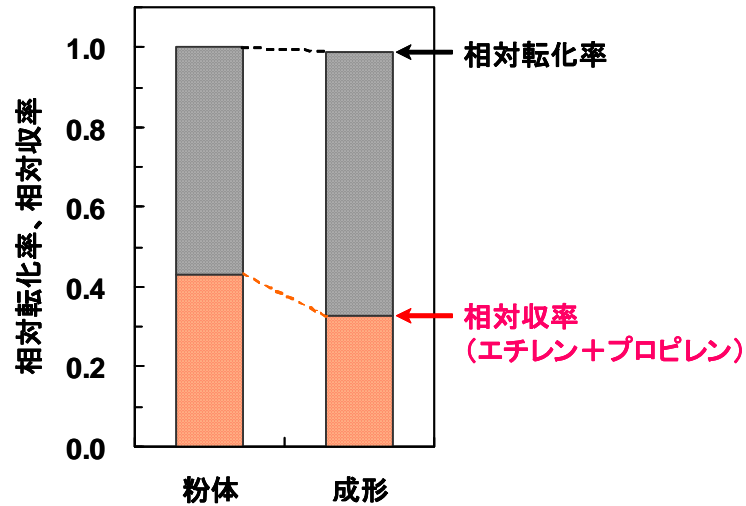


図 G3 La/P/ZSM5 成形触媒の性能評価

反応後 La/P/ZSM5 成形触媒の再生検討のため、再生-反応のサイクルを 5 回繰返し実施した。Fresh 触媒の転化率を 1 とし、再生触媒の反応成績を相対値として示した反応結果 (図 G4) から再生-反応サイクルの繰返しによる活性挙動の変化は認められず、再生により触媒性能は低下しないことが分かった。

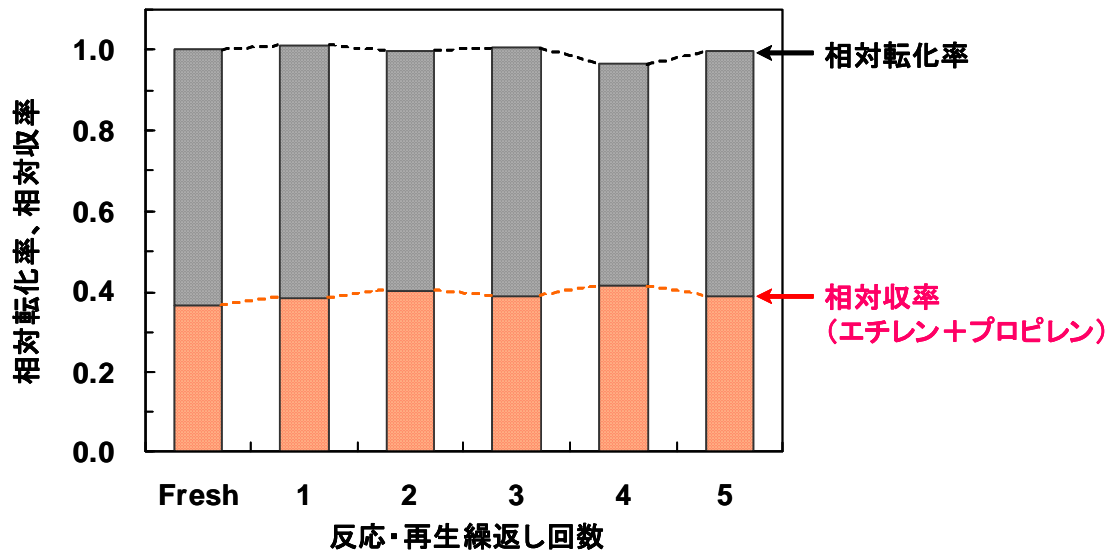


図 G4 再生後 La/P/ZSM5 成形触媒の性能評価

X 線回折測定の結果から、いずれの触媒も再生・反応繰返しによる大きな変化が無いことを確認した。これらの結果から、本再生条件においては La/P/ZSM5 成形触媒の構造は維持されることが分かった。

●開発触媒

本プロジェクト開発触媒についても同様に押出成形条件の検討により圧壊強度 ≥ 1.0 kg となる成形触媒を調製した。

成形前の粉体触媒と成形触媒について反応開始後 1 時間の時点での活性比較した結果を図 G5 に示す。粉体触媒の転化率を 1 として、成形触媒の反応成績を相対値として示している。La/P/ZSM5 と同様に成形触媒と粉体触媒の反応結果に大きな差はなく、開発触媒についても成形による触媒性能への影響はないと考えられる。

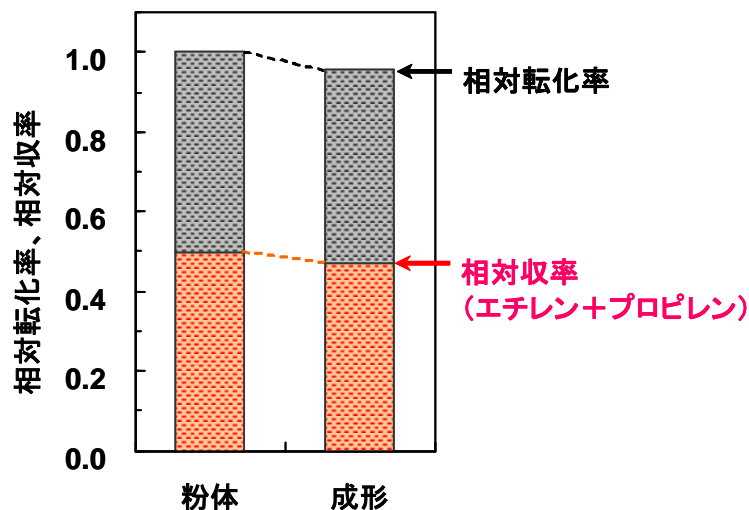


図 G5 開発成形触媒の性能評価

開発触媒の再生検討のため、反応後触媒を再生し、活性評価を行った。Fresh 触媒の転化率を 1 として、再生触媒の反応成績を相対値として示した反応結果 (図 G6) から再生処理による活性挙動の変化は見られず、開発触媒についても再生により触媒性能は低下しないことが分かった。

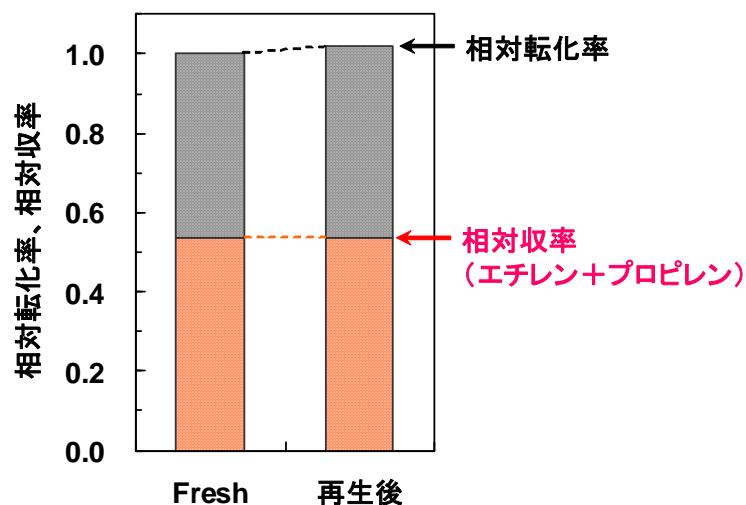


図 G6 再生後開発成形触媒の性能評価

(6) 研究開発の成果まとめ

●既知触媒 (La/P/ZSM5)、本プロジェクト開発触媒いずれについても押出成形条件の検討により以下の性能を示す成形触媒の開発に成功した。

- ・ 圧壊強度 ≥ 1.0 kg
- ・ 成形前の粉体触媒と同等の活性

●上記 2 種の成形触媒について、反応後の触媒は再生処理により活性が回復した。

2-2-② 触媒反応工学の観点からの検討

a. 反応速度解析

ナフサ接触分解の反応プロセス・操作条件が指定されると、まず適切な反応装置の形式を選定し、ついで装置の大きさを決定しなければならない。このような一連の作業を反応装置のプロセス設計という。プロセス設計を考えた場合、反応装置を合理的に設計するには反応の特性を把握し、反応速度を反応成分ならびに触媒の濃度または重量、反応温度などの関数として表式化しておく必要がある。

ここでは、ナフサのモデル物質として n-hexane を反応原料に用い、n-hexane の熱分解および MFI 型、BEA 型ゼオライトを用いた接触分解の反応速度解析を行った。

実験

MFI型ゼオライトの合成

MFI 型ゼオライトの合成は、2.1.2 ゼオライト触媒の長寿命化技術の開発 a. コーキング抑制技術 (i) ナノ化で示す方法で、マクロサイズおよびナノサイズの MFI 型ゼオライト結晶を合成した。

BEA型ゼオライト

BEA 型ゼオライトには、東ソー株式会社 HSZ-900 シリーズの BEA 型ゼオライトを使用した。

n-hexane熱分解、接触分解の反応速度解析

n-hexane の接触分解反応は固定層流通式反応装置を用いて行った。ゼオライト触媒は反応装置内において焼成し、反応に使用した。熱分解は接触分解と同様の固定層流通式反応装置を用い、触媒層部を空の状態にして行った。反応温度は 550~650°C とした。生成物の分析にはオンラインのガスクロマトグラフィーを用いて測定した。

結果

熱分解

n-hexane の熱分解反応の反応次数を求めるため、微分反応条件で反応実験を行った。解析には次式を用いた。

$$(-r_A)_{av} = C_{A0} \frac{\Delta x_A}{\tau} \quad (1)$$

$(-r_A)_{av}$ は平均反応速度、 Δx_A は反応器の出口と入口における反応率の差、 C_{A0} は反応原料の初濃度、 τ は滞留時間を表している。 Δx_A の値が大きくなるほど微分反応器としての条件を満たさなくなるが、あまり小さい範囲では誤差が大きくなる。

また、微分反応器内の平均反応速度は反応器入り口と出口の平均反応率における反応速度とみなせるので、式(2) が成り立つ。

$$(-r_A)_{av} = k_n (C_A)^n = k_n C_{A0}^n (1 - \Delta x / 2)^n \quad (2)$$

ここで k_n は反応速度定数を表す。

(1)式(2)式より、(3)式が成り立つ。

$$C_{A0} \Delta x / \tau = k_n C_{A0}^n (1 - \Delta x / 2)^n \quad (3)$$

(3)式の両辺の対数を取ると、(4)式が得られる。

$$\ln\left(\frac{C_{A0}\Delta x_A}{\tau}\right) = \ln k + n \ln\left[C_{A0}\left(1 - \frac{\Delta x_A}{2}\right)\right] \quad (4)$$

よって、 $C_{A0}\Delta x_A/\tau$ と $C_{A0}(1-\Delta x_A/2)$ を両対数プロットすると、傾きが反応次数となる。プロットしたグラフを図H1に示す。

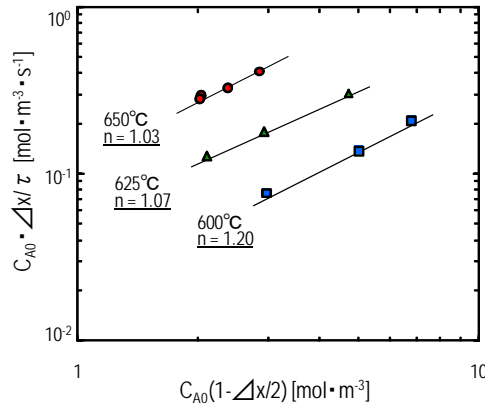


図 H 1 微分法による反応次数の決定

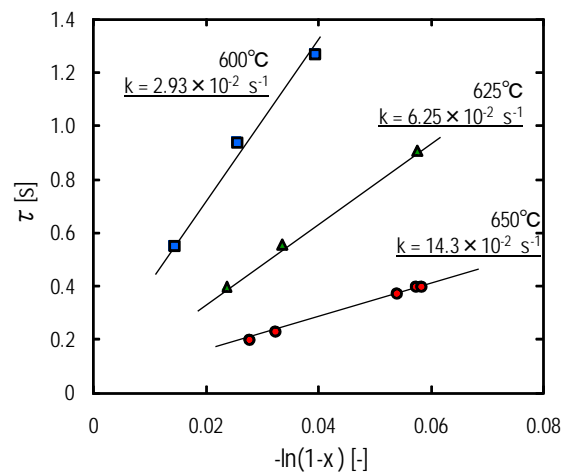


図 H 2 積分法による反応速度定数の決定

図 H 1 より、反応次数は 1 次と求まった．そこで 1 次反応と仮定し、積分反応条件では以下の(5)式が成り立つ．

$$\tau = C_{A0} \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{C_{A0}^n (1-x_A)^n} = \frac{1}{k} \cdot \{-\ln(1-x_A)\} \quad (5)$$

よって、 τ と $-\ln(1-x_A)$ をプロットすると、仮定した反応次数が正しければ、原点を通る直線が得られ、直線の傾きが速度定数の逆数になる．プロットしたグラフを図 H 2 に示す．図 H 2 より、原点を通る良好な直線関係が得られ、 n -ヘキサンの熱分解反応は 1 次反応で進行していると考えられる．図 H 2 で求めた各温度における熱分解反応の速度定数のアレニウスプロットを図 H 3 に示す．反応速度定数は 1 本の直線で表される．このため、式(6)に示す関係式 (Arrhenius の式) が成

り立つ。

$$\ln k = \ln k_0 - \frac{E}{R} \cdot \frac{1}{T} \quad (6)$$

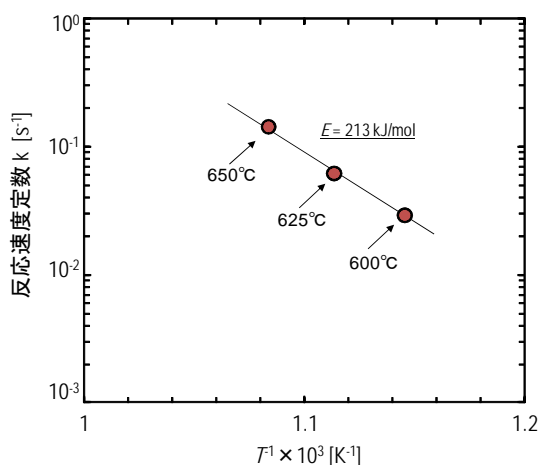


図 H3 n-hexane 熱分解の反応速度定数のアレニウスプロット

図 H3 より、熱分解の活性化エネルギーは 213 kJ/mol と求めた。n-ヘプタンの熱分解の活性化エネルギーは 208.9 kJ/mol (J.Prasad, et al., *J. Anal. Appl. Pyrolysis*, 86 (2009) 44) と報告がある。n-ヘキサン熱分解の活性化エネルギーはこの値と比較し、近い値が得られていたことから本実験値は妥当であったと考えられる。

接触分解

ゼオライト触媒を用いた n-hexane 接触分解の速度解析は、ゼオライト種の影響 (MFI 型、BEA 型)、MFI 型ゼオライト細孔内の拡散の影響に着目して検討を行った。使用したゼオライト触媒は上記の実験項で示した方法で調整したものを使用している。マクロサイズ MFI 型ゼオライト、ナノサイズ MFI 型ゼオライトの粒子径は FE-SEM 観察よりそれぞれ約 2.6 μm、約 90 nm であることを確認した。また、マクロサイズ MFI 型ゼオライト、ナノサイズ MFI 型ゼオライト、BEA 型ゼオライトの Si/Al 比は XRF 測定よりそれぞれ 290、320、310 であることがわかった。

熱分解と同様に微分反応条件にて反応次数の決定を行った。触媒を用いた場合、微分反応条件では次式が成り立つ。

$$\frac{F_{A0} \Delta x_A}{W} = k_n \left\{ C_{A0} \left(1 - \frac{\Delta x_A}{2} \right) \right\}^n \quad (7)$$

(7)式に従ってプロットを行うと直線の傾きから反応次数が求まる。図 H4 にマクロサイズ MFI 型ゼオライトを用いた時の反応次数の解析結果を示す。

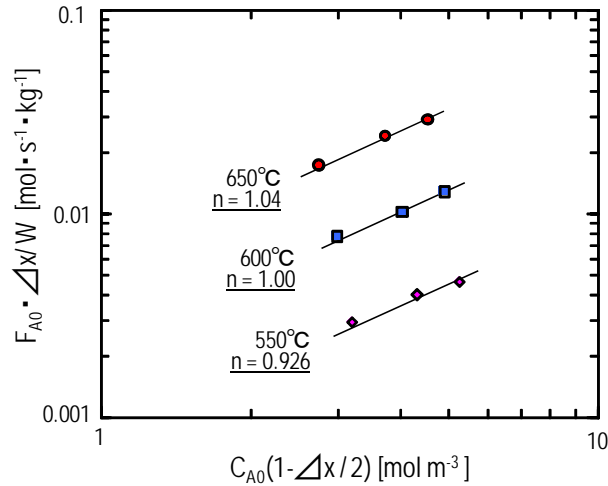


図 H4 マクロサイズ MFI 型ゼオライトを用いた時の反応次数決定

図 H4 より、反応次数は 1 次と求まった。よって、本反応条件下では接触分解は 1 次反応で進行することが明らかとなった。なお、ナノサイズ MFI 型ゼオライト、BEA 型ゼオライトについても同様に 1 次反応であることがわかった。

次に積分条件にて反応速度定数の決定を行った。1 次反応の場合、積分条件では次式が成り立つ。

$$\frac{W}{F_{A0}} = \int_0^{x_A} \frac{dx_A}{C_{A0}^n (1-x_A)^n} = \frac{1}{k} \cdot \frac{-\ln(1-x_A)}{C_{A0}} \quad (8)$$

(8)式に従ってプロットを行い直線の傾きの逆数から反応速度定数を求めた。図 H5 にマクロサイズ MFI 型ゼオライトを用いた時の反応速度定数の解析結果を示す。

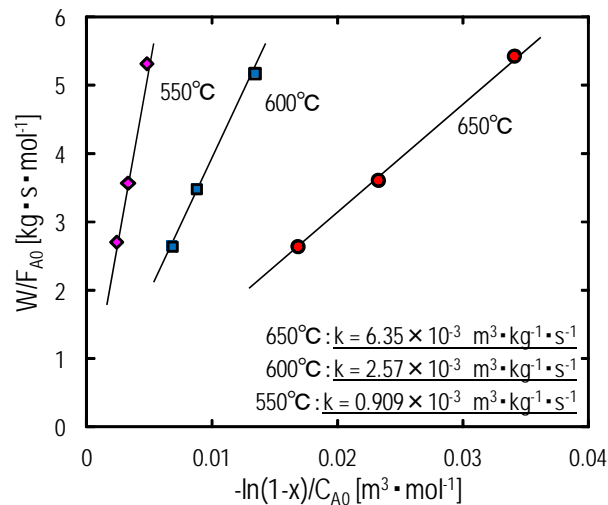


図 H5 マクロサイズ MFI 型ゼオライトを用いた時の反応速度定数の決定

いずれの反応温度においても良好な直線関係が得られた。これより、微分条件で求めた反応次

数が 1 次という結果が正しいことがわかる。なお、この時の反応速度定数は図中に示す値であった。また、ナノサイズ MFI 型ゼオライト、BEA 型ゼオライトについても同様に反応速度定数を求めた。

解析結果をもとに、反応速度定数のアレニウスプロットを図 H6 に示す。

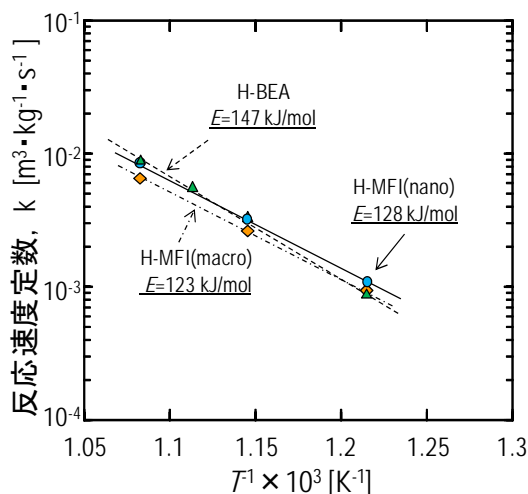


図 H6 n-hexane 接触分解の反応速度定数のアレニウスプロット

図 H6 より、MFI 型ゼオライトおよび BEA 型ゼオライトの反応速度定数はほぼ等しい値を示していることがわかる。接触分解はゼオライトのブレンステッド酸点上で起こると考えられており、この場合のようにトポロジーが異なっているにもかかわらず Si/Al 比が等しい場合、n-hexane の接触分解の反応速度定数は等しくなると考えられる。MFI 型ゼオライトの粒子サイズに着目すると、接触分解の反応速度定数は粒子サイズが小さくなることで大きくなっていることがわかる。これは、MFI 型ゼオライト粒子径が大きくなることで、MFI 型ゼオライトの細孔内を n-hexane が拡散するための拡散距離が長くなり、拡散の影響を受けているためであると考えられる。また、MFI 型ゼオライト細孔内における n-hexane の拡散マクロサイズ MFI 型ゼオライト、ナノサイズ MFI 型ゼオライト、BEA 型ゼオライトを用いたときの反応速度定数の活性化エネルギーはそれぞれ 128、123、147kJ/mol と求められた。MFI 型ゼオライトの粒子サイズによらず、活性化エネルギーはほぼ等しい値であった。一方、BEA 型ゼオライトと MFI 型ゼオライトの活性化エネルギーを比較すると BEA 型ゼオライトは MFI 型ゼオライトに比べ高い活性化エネルギーを示している。これは MFI 型、BEA 型ゼオライトの酸強度の違いによるものと考えられる。

図 H7 に n-hexane の熱分解と接触分解の速度定数のアレニウスプロットを示す。本研究より得られる熱分解と接触分解の反応速度定数は、それぞれ単位が異なる。このため、単位を統一するため、接触分解の反応速度定数 [$m^3 kg^{-1} s^{-1}$] に触媒層の嵩密度 [$kg m^{-3}$] を乗じて得られる反応速度定数 [s^{-1}] を用いて示した。

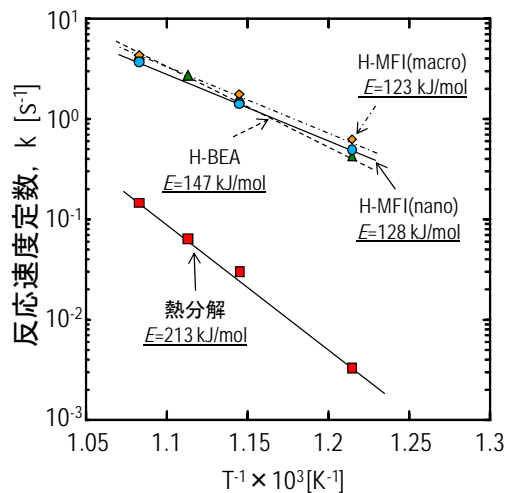


図 H7 n-hexane の熱分解、接触分解の反応速度定数のアレニウスプロット

図 H7 より、ゼオライト触媒を用いた n-hexane の接触分解反応の反応速度定数は熱分解の反応速度定数に比べ 650°C で約 30 倍大きい値となっていることがわかる。また、活性化エネルギーに着目すると、接触分解の活性化エネルギーは熱分解の 60~70% であることがわかった。反応温度が 650°C より高い領域では、接触分解と熱分解の反応速度比は小さくなる (30 以下)。このため、接触分解の優位性を示すには、反応温度は 650°C 以下が望ましいと考えられる。

b. 拡散への影響の解析

ゼオライトのような多孔性物質では、表面積の大部分が細孔内壁の面積で占められている。従って、細孔の内部まで進入できる物質、あるいは細孔の内部を速く移動できる物質の方が、吸着や反応に用いたときにははるかに有利となる。また、ゼオライトは分子サイズレベルの均一な細孔を持つため、反応物や生成物の大きさがゼオライト細孔と同程度の場合、細孔と分子形状の幾何学的関係により反応の速度や選択性が影響を受ける。特定の分子の拡散や特定の反応の進行がこのような立体的因子によって阻害される結果、発現する反応の選択性を形状選択性という。ゼオライトの形状選択性は、各物質の細孔の内部における拡散速度（結晶内拡散係数）によって支配される。また、*Thiele Modulus* が 0.1～数 10 となるため、見かけの反応速度が結晶内の拡散速度に支配されることが多い。従って、希望する活性や形状選択性を有する固体触媒を設計するためには、固体触媒細孔内の拡散係数を実測するとともに、拡散機構を解明することが必要不可欠である。本研究では、ゼオライト細孔内における炭化水素種の拡散・吸着現象に及ぼす酸点や Coke の影響の解明を目的として、ナフサ成分である n-ヘキサンおよび生成物の一つに挙げられるベンゼンの MFI 型ゼオライト細孔内における吸着量および拡散係数の測定を行った。

結晶内拡散係数、有効拡散係数、分配係数

結晶内拡散係数(*intracrystalline diffusivity, D_{ad}*)は、触媒細孔内での拡散分子 1 つ 1 つの *mobility* つまりは移動度を表している。分配係数(*partition factor, H*)は、触媒細孔内に吸着した拡散分子の吸着量(*q*)と触媒粒子に接するバルク中の拡散物質濃度(*C*)の比で表され、拡散物質の濃縮度を表している。例えば、 $H=1$ の時、触媒細孔内に吸着した拡散物質濃度はバルク相中の拡散物質濃度と等しく、濃縮されていないことになる。また、 $H=100$ の時、触媒細孔内に吸着した拡散物質濃度はバルク相中の拡散物質濃度より 100 倍大きいということになる。有効拡散係数(*effective diffusivity, D_{eff}*)は、結晶内拡散係数と分配係数の積で表され、バルク濃度基準の拡散係数であり仮想的である。分子の *mobility* が大きくて分配係数が小さい場合、*mobility* が小さくて分配係数が大きい場合と細孔内の現象が異なっても、有効拡散係数が等しい場合が存在する。この為、結晶内拡散係数と分配係数で分けて検討する必要がある。また、有効拡散係数は *Thiele* 数といった反応速度解析の式に用いられる。

実験

吸着剤

吸着剤には、酸点を有さない silicalite-1 (SL)、酸点を有する H-MFI、反応実験によって Coke が付着した H-MFI (以後、Coke-MFI) の 3 種類の MFI 型ゼオライトを用いた。

SL は、Si 源と構造規定剤を含む水溶液を調製し、オートクレーブを用いて水熱合成した。得られた試料は、乾燥後、空気焼成し、構造規定剤を除去した。得られた試料は、XRD、SEM、窒素吸着から MFI 型ゼオライト構造を有していることを確認し、粒子径を決定している(図 H8)

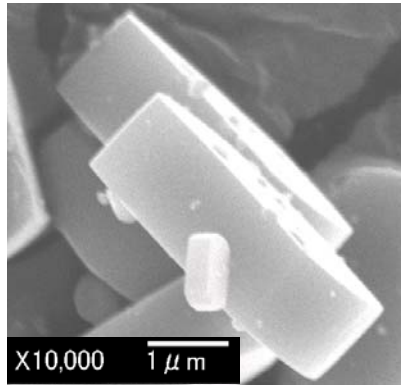


図 H 8 silicalite-1 の SEM 写真

定容法による気相での結晶内拡散係数測定法

気相での結晶内拡散係数の測定は図 H 9 に示す装置で行った。まず、吸着剤をセル内に仕込み所定の測定温度に設定した。次いで、恒温層中のバルーン内に拡散物質の純粋な蒸気を導入し、続いて試料部とバルーンを接続しているバルブを開け、吸着剤試料に拡散物質を吸着させた。そのときの系内の圧力変化を測定し、吸着量の経時変化を求めた。

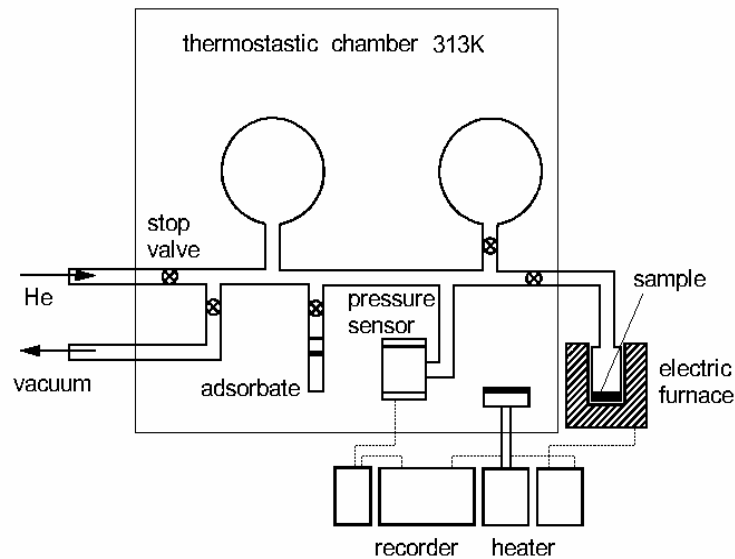


図 H 9 気相拡散係数測定装置概略図

測定条件における MFI 型ゼオライトについての *Fick* の拡散方程式の解は次のような級数解で表されることが分かっている。

$$\frac{M_t}{M_\infty} = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2\alpha(1+\alpha)}{1+\alpha+\alpha^2q_n^2} \exp\left(-\frac{D_{ad}q_n^2t}{L^2}\right) \quad (9)$$

ただし、 $\alpha = V/(a_m WHL)$ 、 $\tan q_n = -\alpha q_n$ (10)

ここで、 M_t は時間 t における吸着量、 M_e は平衡状態での吸着量、 L は拡散距離半径、 D_{ad} は吸着過程の結晶内拡散係数を表す。定容法で測定される吸着量(M_t)_{obs}には、結晶内への吸着量 M_t のほかに結晶外表面への吸着量 M_s が含まれる。従って、測定された見かけの吸着量の経時変化を拡散係数の算出に用いると誤差を生じることになる。ここで、拡散物質の結晶外表面への吸着速度は結晶内への吸着速度と比較して非常に速く、結晶外表面への吸着は非常に短い時間で平衡に達すると考えられる。従って、結晶内への真の吸着量は次式で表すことができる。

$$M_t/M_e = \{(M_t)_{obs} - M_s\} / \{(M_e)_{obs} - M_s\} \quad (11)$$

測定した吸着量の経時変化と式(9)~(11)から得られる理論値を用いてフィッティングすることで M_s と D_{ad} の値を求めた。図 H 1 0 に silicalite-1 について n-ヘキサンの見かけの吸着量の経時変化を測定した一例を示す。

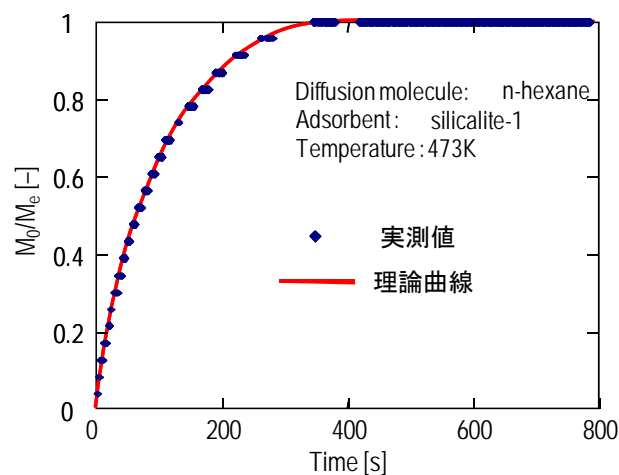


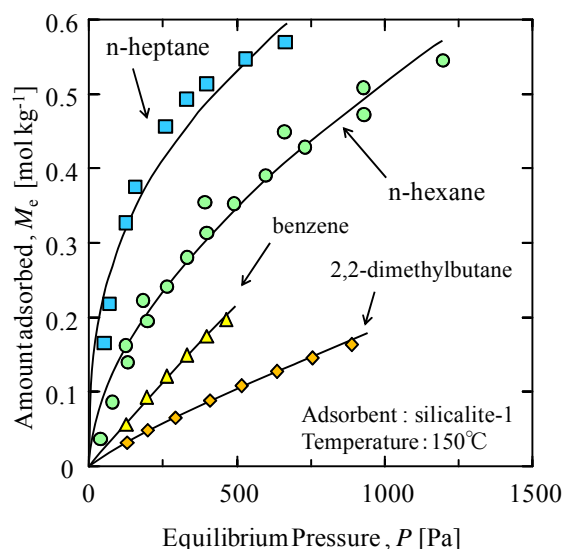
図 H 1 0 吸着量の経時変化の一例

結果

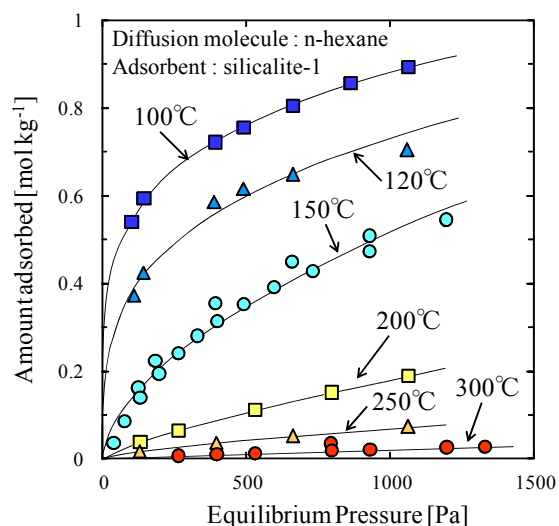
silicalite-1 細孔内における吸着・拡散現象

本研究で用いた定容法では、拡散係数の測定と同時に吸着等温線が得られる。図H 1 1 は炭素数 6以上の炭化水素であるn-heptane、n-hexane、benzene、2,2-dimethylbutaneがsilicalite-1細孔内へ吸着した際の吸着等温線を示す。それぞれの炭化水素の吸着量を比較すると、吸着量の序列は n-heptane (C7) > n-hexane (C6) > 2,2-dimethylbutane (C6) > benzene (C6) となった。炭素数が同じでも分子の形状が直線状のn-hexane、炭素鎖が分岐している2,2-dimethylbutane、芳香族分子のbenzeneを比較すると、分子の形状が球状から直線状に近づくにつれて吸着量が増大した。

図H 1 2 はn-hexaneの各測定温度に対する吸着等温線(吸着剤: silicalite-1)である。吸着等温線の形状は、測定温度が低いときにはFreundlich型を示したが、測定温度が高くなるに従って線形となった。この傾向はn-hexaneとbenzene以外にもn-heptane、2,2-dimethylbutaneにも共通して確認された。Freundlich型の吸着等温線は結晶内にエネルギーの分布が生じていることを示している。そのため、低温条件下では細孔内の吸着分子がsilicalite-1壁面から強く引き寄せられ、測定温度が高くなるに従って壁面から分子が受ける影響が減少したと考えられる。



図H1 1 n-heptane, n-hexane, benzene, 2,2-dimethylbutaneの吸着等温線



図H1 2 n-hexaneの吸着等温線

特性曲線 (silicalite-1)

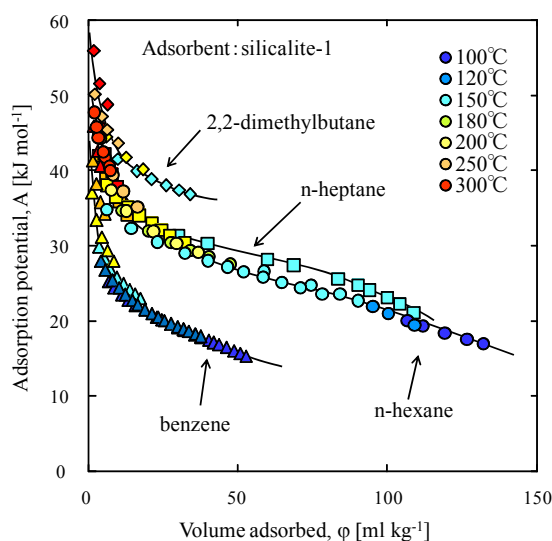
吸着ポテンシャル理論という古典的な吸着のモデルでは、気体成分が固体表面への吸着する際、式(2.1)で計算される「吸着ポテンシャル」と称される自由エネルギー量分の熱を放出して安定化すると考えられている。また、固体表面上に吸着した分子は液体状態をとると仮定できるというのが本理論である。

$$A = RT \ln(P_0/P) \quad (12)$$

ここで P_0 は飽和蒸気圧、 P は吸着平衡圧である。

本実験では吸着平衡圧が高いほど吸着量も多くなるため、式(12)より吸着量と吸着ポテンシャルは反比例することが分かる。そのため、吸着量が少ない測定初期段階では吸着ポテンシャル (A) は大きく、吸着量が多くなるに従って吸着ポテンシャルは小さくなる。この吸着ポテンシャル理論では、吸着ポテンシャルと吸着空間容積 (吸着量を吸着温度における液体の体積に換算した値) の関係が、吸着温度によらず一本の曲線で相関されることが知られており、この曲線は「特性曲

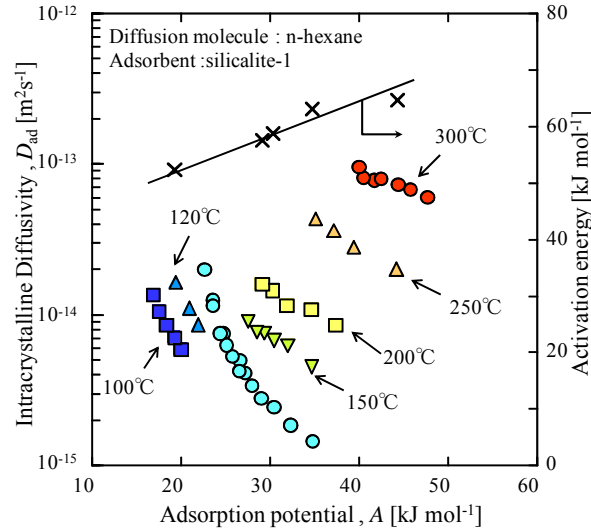
線」と呼ばれる。この特性曲線は、縦軸が吸着平衡圧の関数で横軸が吸着量の関数となっている。そのため、特性曲線は吸着等温線を変形させたものでもあり、測定温度の異なる吸着等温線を一本の曲線で表現することのできるグラフである。図 H 1 3 は、n-hexane、n-heptane、benzene、2,2-dimethylbutane の silicalite-1 細孔内吸着における特性曲線を示しており、それぞれの炭化水素において温度によらず一本の曲線で表されることが確認された。一方、特性曲線の形状を比較すると、直線状分子の n-heptane と n-hexane の曲線は類似であるが、芳香族分子の benzene や分岐アルカンの 2,2-dimethylbutane とは異なる形状となっている。そのため、吸着分子の形状によって吸着様式は変化すると考えられる。



図H 1 3 n-heptane,n-hexane,benzene,2,2-dimethylbutaneのsilicalite-1細孔内吸着における特性曲線

silicalite-1 細孔内におけるn-hexaneの拡散係数

図 H 1 4 は n-hexane の各測定温度における silicalite-1 結晶内拡散係数 (D_{ad}) と吸着ポテンシャルの関係を示す。また、異なる測定温度において吸着ポテンシャルの値がほぼ等しい時の結晶内拡散係数の値を用いて活性化エネルギーを算出し、同図中に示した。結晶内拡散係数は各測定温度において吸着ポテンシャルが小さくなる（吸着物質の吸着量が大きくなる）につれて結晶内拡散係数が大きくなっていることがわかる。また、活性化エネルギーは吸着ポテンシャルが小さくなるにつれて小さくなっていることがわかる。これは、吸着量が増加して細孔内に存在する分子が増えると、吸着した分子の間で相互作用が働き、拡散係数に影響を及ぼすためと考えられる。



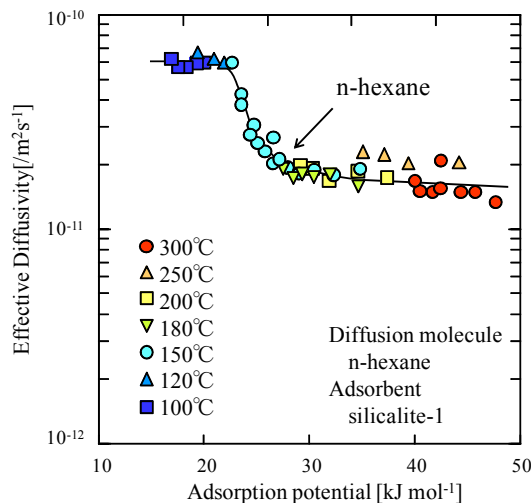
図H1-4 silicalite-1細孔内におけるn-hexaneの結晶内拡散係数 (D_{ad}) および活性化エネルギーの吸着ポテンシャルとの関係

n-hexaneのsilicalite-1 細孔内における有効拡散係数

Thiele modules の算出などの反応速度解析で用いられる拡散係数は測定から得られる結晶内拡散係数 (D_{ad}) ではなく、有効拡散係数 (D_{eff}) である。有効拡散係数 (D_{eff}) は、吸着分子の吸着剤中濃度と気相濃度との比であり細孔内の濃縮効果を定量的に表す数値である分配係数 H と結晶内拡散係数 (D_{ad}) との積で表わされる (式(13))。

$$D_{eff} = HD_{ad} \quad (13)$$

有効拡散係数 (D_{eff}) と吸着ポテンシャル (A) の関係を図H1-5に示す。これより、それぞれ n-hexane の有効拡散係数 (D_{eff}) が温度に依存しない曲線で相関されることがわかった。



図H1-5 n-hexaneの有効拡散係数 (D_{eff}) と吸着ポテンシャルとの関係

吸着量や有効拡散係数の推算

吸着ポテンシャルは式(12)で示されるように、温度 T と圧力 P という2種類の独立したパラメータをまとめて1つの変数として取り扱うことが可能である。本測定結果の「特性曲線」や「有

効拡散係数と吸着ポテンシャルの関係」は吸着ポテンシャル A の関数として温度に依存しない 1 本の曲線で表されているため、これらを利用することで任意の圧力および温度に対する吸着量や有効拡散係数を推算することが可能となる。そのため、触媒の設計を行う上で有効に活用することができる。

反応律速となる粒子径の検討

ゼオライト触媒を用いた反応では、細孔内の拡散抵抗によって触媒が有効に活用されない場合がある。そのため、ゼオライト触媒の細孔内を有効に活用できる触媒設計を行う必要がある。ここでは、n-hexane からプロピレン、プロパンへ分解する初期の接触分解反応において反応律速（触媒有効係数が 1）となる MFI 型ゼオライトの粒子径を検討した。

触媒反応工学的な触媒設計を行う際、触媒有効係数 (η) と Thiele 数 (ϕ) が用いられ、slab 形状の粒子の場合、触媒有効係数と Thiele 数は以下の式で求められる。

$$\text{触媒有効係数, } \eta = \frac{\tanh(\phi)}{\phi} \quad (13)$$

$$\text{Thiele number, } \phi = L \sqrt{\frac{k \times \rho_p}{D_{\text{eff}}}} \quad (14)$$

ここで、 D_{eff} は有効拡散係数 [m^2s^{-1}]、 k は反応速度定数 [$\text{m}^3\text{kg}^{-1}\text{s}^{-1}$]、 ρ_p は触媒の見かけ密度 [kg m^{-3}]、 L は拡散距離 [m] を表している。図 H1 6 は触媒有効係数と Thiele 数の関係を示しており、Thiele 数が 0.1 以下となる時、反応律速となるとされている。

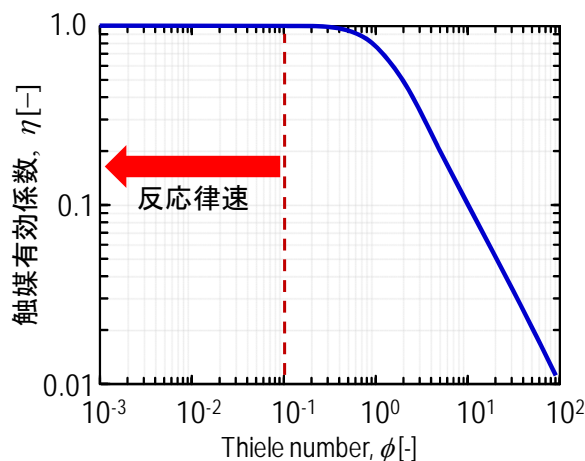


図 H1 6 触媒が Slab 形状の時の触媒有効係数と Thiele 数の関係

そこで、反応温度 650°C において Thiele 数が 0.1 となる時の MFI 型ゼオライト粒子径を算出した所、粒子径が 185nm 以下で n-hexane の接触分解反応が反応律速となると算出された。

c. 再生処理解析

ゼオライト触媒を用いて石油留分の接触分解や脱水素反応などを行うと、ゼオライトの細孔表面や外表面上にコークと呼ばれる炭素質の物質が析出する。コーク析出によりゼオライトの活性点が被覆され触媒活性が低下する。また、ゼオライト触媒の細孔はナフサ留分の分子サイズに近い大きさであるため、ゼオライトの外表面や細孔入口近傍にコークが析出し細孔が閉塞されることで、結果的に見かけ上触媒活性が低下する。通常、コーク付着した触媒は空気気流中でコークを燃焼除去して再生される。コークは炭素のみならず水素も含んでいるため、燃焼除去の際に CO、CO₂ に加え H₂O が生成する。ゼオライト触媒は水蒸気雰囲気下で高温処理した場合、骨格中の Al が脱離しゼオライト触媒の活性点が減少することが知られている。そのため、ナフサの接触分解によってゼオライト触媒上に付着したコークの燃焼除去を行う上で、操作条件が重要となる。ここでは、ナフサ成分の代表として n-hexane を原料に用いた接触分解反応で得られたコーク付着ゼオライトを用い、コーク燃焼の速度パラメータの検討を行った。

コーク燃焼反応のモデル

コーク燃焼反応の速度解析は橋本らが提案したモデル (K. Hashimoto, et al., *The Chemical Engineering Journal*, 27 (1983)177) を用いた。図 H1 7 がコーク粒子内の水素と炭素の燃焼モデルであり、図中の C'_C、C'_H はそれぞれコーク粒子内の炭素と水素の濃度を表しており、p_A は酸素の分圧を表す。コークは半径 r₀ の均一な球状粒子であり、炭素と水素からなる。反応初期ではすべてのコーク粒子の組成は同じであると考え、その組成を CH_n と表す。ここで n は通常 0.4~2.0 の値をとる。コーク粒子内の水素は炭素よりも早く酸素と反応するため、コーク粒子内には半径 r_H で界面が現れる。この界面は水素燃焼反応の進行とともに r=r₀ からコーク粒子中心に向かって移動する。このようにコーク粒子内には二つの領域が形成される。界面より内部の領域ではその組成は反応前と等しく、界面より外側の領域には炭素のみが存在する。外側の領域ではその半径位置により酸素と接している時間が異なるため炭素の濃度は不均一である。また、水素燃焼反応は早く、さらにコーク粒子の未反応部分の空隙が小さいために酸素は未反応部分に拡散しづらい。そのため、酸素分圧は未反応の部分ではゼロと考える。

コーク中の炭素、水素の燃焼反応は以下の量論式と速度式で表される。



コーク粒子内の水素の反応率は以下の式で表される。触媒に付着したコークの見かけの反応率は以下の式で表すことができる。

$$1 - X_H = (1 - u)^3 \quad ; 0 \leq u \leq 1 \quad (18)$$

$$1 - X_H = 0 \quad ; 1 < u \quad (19)$$

ただし、 $u = tk_{HS} p_A / r_0$ (20)

コーク粒子内の炭素の反応率は以下の式で表される。

$$1 - X_C = (1 - u)^3 + 3\{(1 - u)^2 + 2(1 - u)/\alpha + 2/\alpha^2\}/\alpha - 3 \exp(-au) \cdot (1 + 2/\alpha + 2/\alpha^2)/\alpha \quad ; 0 \leq u \leq 1 \quad (21)$$

$$1 - X_c = (1 - X_c^*) \exp\{-\alpha(u - 1)\} \quad ; 1 < u \quad (22)$$

ここで、 $\alpha = k_c r_0 / k_{H_2}$ であり、 $1 - X_c^*$ は次式で表される。

$$1 - X_c^* = 3 \exp(-\alpha) \left\{ \frac{\exp \alpha - 1}{2/\alpha^3 - 2/\alpha^2 - 1/\alpha} \right\} \quad (23)$$

触媒に付着したコークの見かけの反応率は以下の式で表すことができる。

$$1 - X_t = \left(\frac{n}{12 + n} \right) (1 - X_H) + \left(\frac{12}{12 + n} \right) (1 - X_c) \quad (24)$$

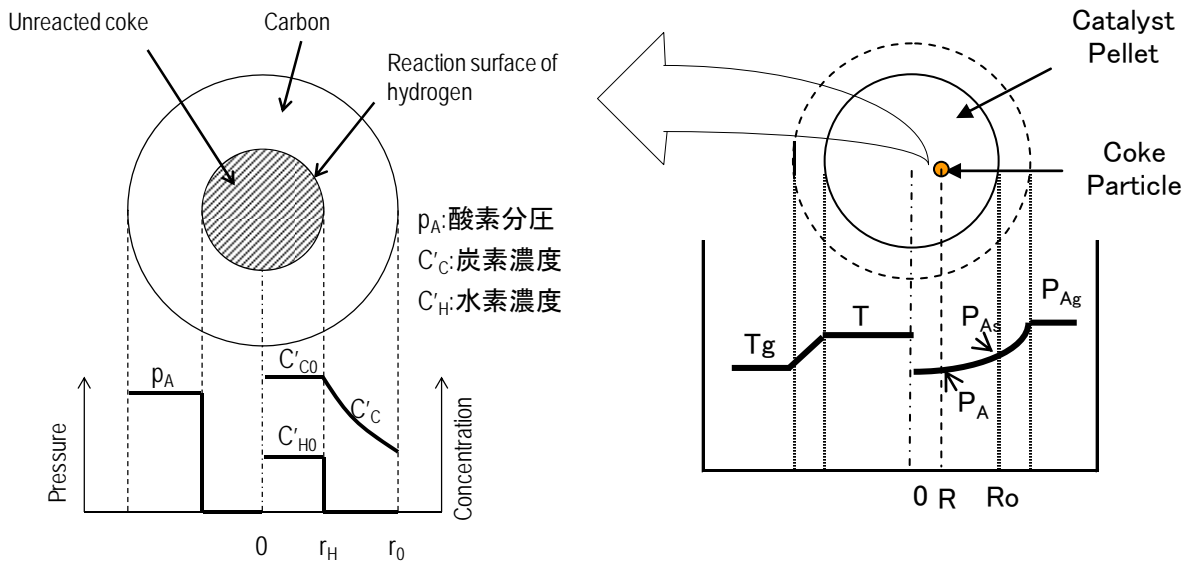


図 H1 7 コーク粒子内の水素と炭素の燃焼モデル

実験

コーク付着ゼオライトの燃焼再生実験には熱重量測定装置を用いた。コーク付着ゼオライトは n-hexane の接触分解反応によって得られたコーク量の異なるゼオライトを用いた。また、ゼオライト種の影響について検討するため、MFI 型、BEA 型、MOR 型のゼオライトを用いた。石英セルにコーク付着ゼオライトを 10~15 mg 入れ、装置下部より窒素ガスを流通させ測定温度まで昇温した。昇温後、5.1kPa の酸素を含んだ窒素ガスを流通させてコーク燃焼に伴う重量の経時変化を測定し、コークの見かけの未反応率を求めた。測定温度は、500~650℃とした。

結果

図 H1 8 は、コークが 1.5wt% 付着した MFI 型ゼオライトを用い、燃焼反応を行った時の見かけの未反応率 ($1 - X_t$) の経時変化を示す。図中のプロットが実験点であり、実線が (24) 式より計算した結果である。実験点と計算結果は良く一致していることが確認される。また、燃焼温度が低くなるにつれ、コーク燃焼にかかる時間が長くなっており、500℃では 600℃の 10 倍以上の時間が必要となっていることがわかる。500℃の結果に着目すると、燃焼初期では見かけの未反応率にほとんど変化がないことがわかる。これは、コーク燃焼初期では水素が主に燃焼するため反応が進行しても重量変化としては表れにくいためであると考えられる。コーク中に含まれる水素の

燃焼後に炭素がコークの全域で燃焼するため、重量変化が大きくなっている。

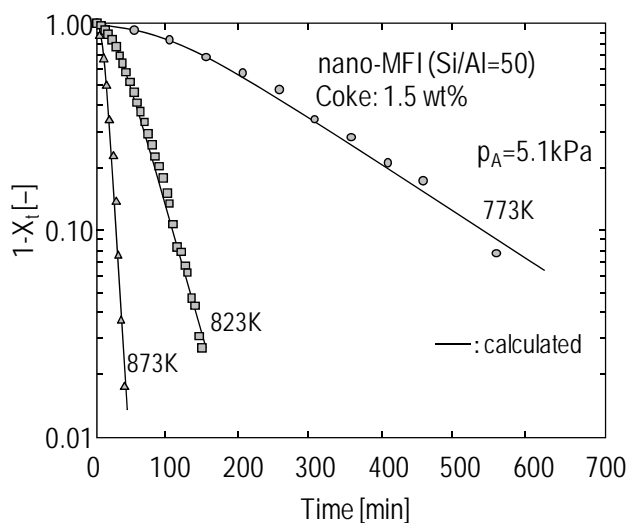


図 H18 コーク付着ナノサイズ MFI 型ゼオライト燃焼の経時変化

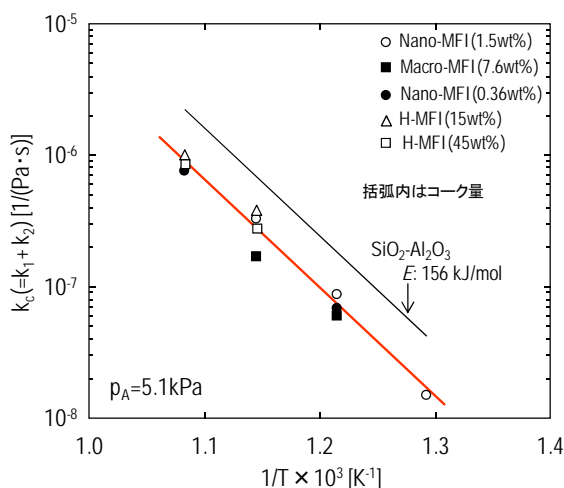


図 H19 コーク燃焼における炭素の燃焼速度定数のアレニウスプロット

図 H19 ゼオライト触媒に付着したコーク燃焼における炭素の燃焼速度定数のアレニウスプロットを示す。比較のため、橋本ら (K. Hashimoto, et al., *The Chemical Engineering Journal*, 27 (1983)177) が行ったシリカアルミナに付着したコークの燃焼速度解析結果を示す。炭素の反応速度定数は、シリカアルミナの場合と等しい傾きの直線で相関されることがわかった。この時の炭素燃焼の活性化エネルギーはそれぞれ 156 kJ/mol である。この結果より、コークは主にゼオライトの結晶外表面上に付着していると考えられる。

図 H20 は炭素の速度定数の頻度因子をコーク量に対してプロットした結果である。炭素燃焼速度定数の頻度因子は付着コーク量に依らずほぼ等しい値をとることがわかる。これは、コーク中の炭素がコークの全域で均一に燃焼するためであると考えられる。

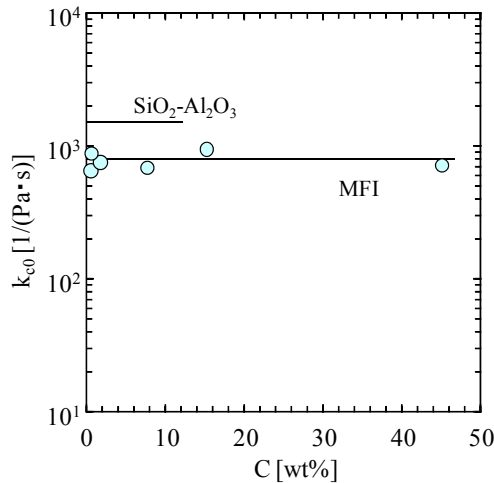


図 H 2 0 炭素燃焼速度定数の頻度因子

充填層でのコーク付着ゼオライト触媒再生のシミュレーション

コーク付着したゼオライト触媒を再生するためには、充填層内に充填した状態で酸素を含んだガスを流通させて燃焼再生を行う。コークの燃焼反応は発熱反応であるため、充填層内の温度は再生反応中に上昇し、充填層内で温度分布が生じると考えられる。また、充填層の上部から酸素が消費されるため、充填層内の酸素濃度も同様に分布が生じる。熱重量測定装置のような系とは異なり、実際の系でのコークの燃焼に必要な時間は各成分の濃度分布や温度分布によって大きく変化する。そこで、充填層でのコーク燃焼を想定し、これらの情報を得るためシミュレーション (gPROMS, PSE) を用い検討を実施している。

初めに、反応器内の温度は一定、反応管内半径方向の濃度分布は無視小であるとして充填層でのコーク燃焼のシミュレーションを行った。シミュレーションはゼオライトで構成された粒径が 400 μm のペレット内にコークが均一に分散しており、このペレットが充填されているものとした。コークはゼオライト結晶外表面に主に付着していると考えられるため、ゼオライト細孔内の物質収支は考慮に入れていない。

充填層内での酸素の物質収支式は次式で表される。

$$\frac{\partial C_{O_2,b}}{\partial t} = -u \frac{\partial C_{O_2,b}}{\partial z} - \frac{3(1-\varepsilon)}{R} \cdot \frac{\partial C_{O_2,p}}{\partial r} \cdot D_{eff} \quad (25)$$

ここで、 $C_{O_2,b}$ 、 $C_{O_2,p}$ はそれぞれ充填層内、ペレット内の酸素濃度、ペレット内の水蒸気濃度、 u は流通ガスの線速度、 R はペレットの半径、 ε は充填層の空隙率、 D_{eff} はペレット内の拡散係数を表している。

ペレット内の酸素の物質収支式は次式で表される。

$$\frac{\partial C_{O_2,p}}{\partial t} = \frac{D_{eff}}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial C_{O_2,p}}{\partial r} \right) - N_c \cdot r_{O_2} \quad (28)$$

ここで、 N_c はペレット単位体積当たりのコーク粒子数、 r_{O_2} は酸素の反応速度を表す。

コーク燃焼時の酸素、水素、炭素の反応速度は以下の式で表される。

$$-r_{O_2} = \left(-\frac{1}{4} r_{H_2} \right) + (-r_{C_p}) \quad (31)$$

$$-r_{H_p} = 4\pi_0^2 C_{H_0} k_{H_0} \exp\left(-\frac{E_H}{R_g T}\right) p_{O_2} (1 - X_H)^{2/3} \quad (32)$$

$$-r_{C_p} = \frac{4}{3}\pi_0^3 C_{C_0} k_{C_0} \exp\left(-\frac{E_C}{R_g T}\right) p_{O_2} (X_H - X_C) \quad (33)$$

ここで、 r_{H_p} 、 r_{C_p} はそれぞれ水素、炭素の反応速度を表す。

シミュレーションに用いたパラメータを表 8 に示す。図 H 2 1 (a), (b)に一例として充填層内の高さ方向、ペレット内の酸素濃度の経時変化を示す。燃焼開始から酸素が供給され、充填層の高さ方向に酸素の濃度分布が生じ、充填層上部から酸素が消費されていることがわかる。また、ペレット内では反応開始後ペレット内では均一に酸素が消費されていることがわかる。図 H 2 2 はシミュレーションにより得られた充填層出口における酸素、二酸化炭素および一酸化炭素、水蒸気の濃度の経時変化を示す。コーク中の水素が先に燃焼し、その後に炭素が燃焼するため、水蒸気が二酸化炭素より先に充填層出口から排出されることがわかる。また、酸素は反応開始直後では水素燃焼にのみ使用されるため、充填層出口での濃度が一時的に高くなるものの水素燃焼後に炭素は充填層の全域で燃焼するため、酸素の消費量が多くなり充填層出口での濃度が反応初期より低下したと考えられる。

表 H 1 充填層コーク燃焼シミュレーションに用いたパラメータ

充填層高さ, L	1.3×10^{-2} m
ペレット粒径, 2R	4.0×10^{-4} m
反応管内径, D	1.0×10^{-2} m
炭素燃焼速度定数の頻度因子, k_{C_0}	7.5×10^2 Pa ⁻¹ s ⁻¹
炭素燃焼速度定数の活性化エネルギー, E_C	156.2×10^3 J/mol
付着コーク割合	20 wt%
触媒重量, W	0.5 g
充填層内温度, T	923 K

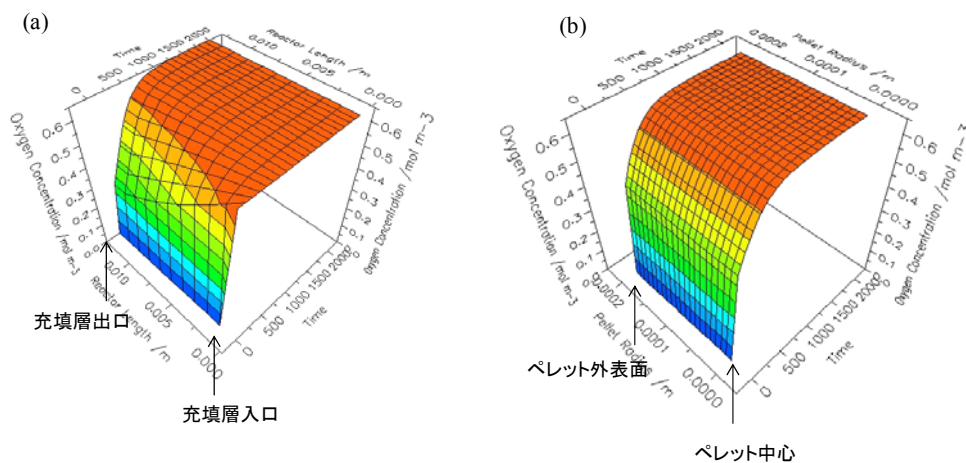


図 H 2 1 充填層内の酸素濃度分布(a)、ペレット内の酸素濃度分布(b)

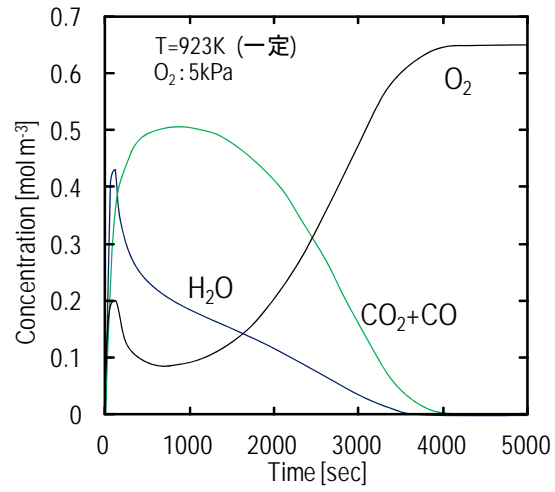


図 H2 2 コーク付着ゼオライト（コーク 20wt%）燃焼における充填層出口の生成ガス濃度変化のシミュレーション結果

2-2-③ プロセス設計・評価

2-2-③-1 プロセス設計

a. 検討条件

「ナフサ接触分解技術の開発」におけるプロセス構築及び経済性評価検討では、以下に示す条件に基づき検討を実施した。

(i) 原料ナフサ性状

ナフサ接触分解の原料ナフサは、テストで使用されている表 I 1 のモデルナフサを使用。これは日本の石油化学業界で現在使用されている典型的なライトナフサに相当する。また、将来的にもこのタイプが原料と予想される。

表 I 1 原料モデルナフサ性状 (PONA 分析)

Wt%	n-Paraffin	i-Paraffin	Olefin	Naphthene	Aromatics	合計
C4						
C5	29					29
C6	14	14		7		35
C7				7		7
C8	29					29
合計	72	14		14		100

(ii) 接触分解反応装置運転条件

接触分解反応器運転条件を表 I 2 に示す。

表 I 2 接触分解反応器運転条件

反応温度 (°C)	入口	140
	出口	650
反応圧力 (kPaA)	入口	185
	出口	251
WHSV (h ⁻¹)		10
S/O (wt/wt) (注 1)		0.2
W/F (g•s/cc) (注 2)		1.4
連続反応時間 (h)		48

(注 1) S/O はスチームとナフサの重量流量比

(注 2) W/F = (触媒充填量, g/s) ÷ (反応器入口ガス体積流量 cc)

(iv) 触媒再生条件

触媒再生条件を表 I 3 に示す。

表 I 3 触媒再生時運転条件

温度 (°C)	650
W/F (g·s/cc)	0.44
再生ガス組成	スチーム 80 vol%, 空気 20vol%
再生時間	8 hrs

b. 接触分解反応装置

(i) 接触分解反応装置タイプの選定

接触分解反応器のタイプとしては、流動床型(FCC 型)と固定床型のリフォーマー型、プラットフォーム型(ラジアルフロー型反応器とリヒーターの組み合わせ)が挙げられるが、プラットフォーム型のシステムでは、ショートコンタクトタイムで且つ非常に大きな反応吸収熱を供給することが難しいと考えられ、今回は検討から省いた。

また、流動床型(FCC 型)のナフサ接触分解装置はKBR 社と韓国 SK 社の ACO(Advanced Catalytic Olefins)プロセスのデモプラントが 2010 年 10 月末より実証運転されており、FCC 型反応器と比較してコスト競争力のある固定床のリフォーマー型を選定した。

(ii) リフォーマー型接触分解装置

反応器はチューブ内に触媒を充填した固定床タイプの構造である。反応器を設計するに当たり考慮した点を以下に挙げる。

1) 反応吸収熱

ナフサ接触分解プロセスにおける反応吸収熱を、ナフサ熱分解での反応吸収熱から反応器出口温度(650°C)及び収率で補正して推算すると、約 445 kcal/kg HC となる。このように熱分解同様に非常に大きな熱量を与えることが可能な反応装置とする必要がある。

2) ショートコンタクト時間

目的生成物の収率低下を防ぐ為に、触媒とのコンタクト時間が十分短い必要がある。

3) 低圧力損失

目的生成物の収率低下を防ぐ為に、ハイドロカーボン圧力が大きくなるよう、反応器内での差圧を抑える必要がある。

4) コーク生成

コークの生成を考慮して、触媒再生が容易に行える必要がある。

ナフサ接触分解反応はハイドロカーボンの分圧が低いほど製品であるオレフィンの収率が高く

なるため、なるべく低圧での反応が望ましい。チューブの径と長さは、WHSV=10 (h⁻¹)としてヒートフラックスと圧力損失を考慮し決定した。

c. プロセスフロー

本プロセスでは、ナフサ接触分解装置からの反応ガス中のエタン及びプロパンの収率が熱分解プロセスに比べ非常に多い事から (4~5 倍)、精製系より回収されたエタン及びプロパンをリサイクル炉にて熱分解し製品として回収するという、接触分解装置と熱分解炉を組み合わせたプロセスフローを選定した。

プロセスフローは、急冷工程、圧縮工程、酸性ガス除去工程、圧縮工程、脱メタン塔、脱エタン塔、エチレン精留塔、脱プロパン塔、プロピレン精留塔、脱ブタン塔の順に構成される。

なお、本プロセスでは熱分解プロセスに比べて PF0(Pyrolysis Fuel Oil)留分が少ないので、通常のナフサ熱分解プロセスには設置されているガソリン分留塔は設けずに、クエンチ塔にてクエンチ水により熱回収を行った。図 I 1 にナフサ接触分解リフォーマー型反応器・リサイクル熱分解を組合せたプロセスフローを示す。

d. プラントの規模

接触分解と従来型の熱分解の製品バランスの差を分かり易くする為、ナフサフィードは年間 100 万トン (125 ton/h) とした。

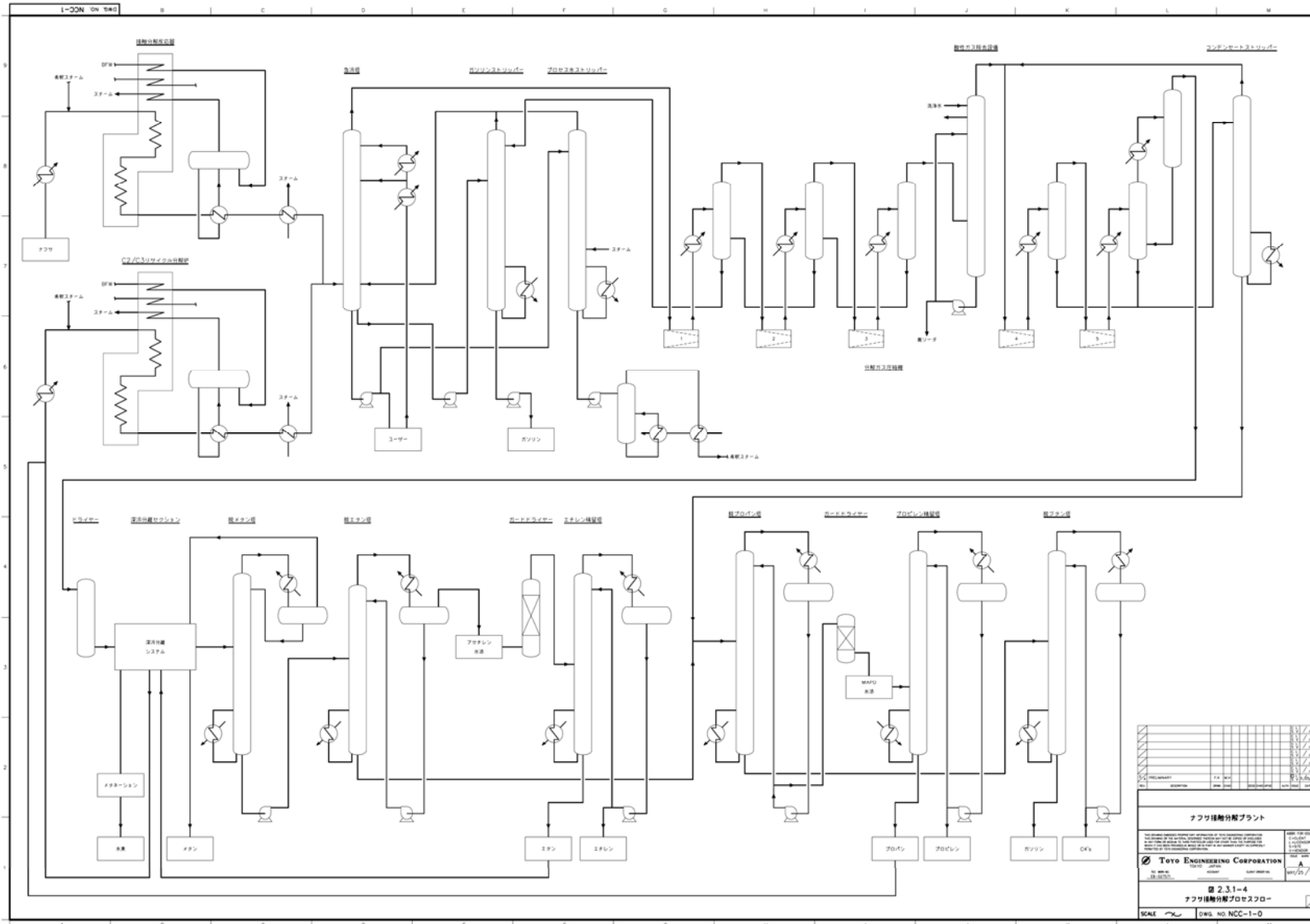


図 I 1 プロセスフロー

2-2-③-2 プロセスの評価

a. エネルギー原単位比較

(i) 接触分解プロセスのエネルギー原単位の算出

接触分解製品バランスからエネルギー消費量を算出し、エネルギー原単位を算出した。

検討前提条件を下記に挙げる。

- 1) バッテリーリミットは接触分解装置への原料ナフサフィードから製品回収系での製品出口までとし、製品回収系からの回収されたエタン・プロパン用リサイクル熱分解炉も含めてエネルギー原単位を計算した。(図 I 1 参照)
- 2) リフォーマー型接触分解装置の輻射部からの排ガス温度は約 800 °Cあるため、熱回収として SS スチームのスーパーヒーティング、HS スチーム発生、BFW 予熱及び原料ナフサ予熱を行うとした。
- 3) 急冷熱交換器 (TLE) 出口は 360 °Cとし、第二 TLE は 200°Cまでの冷却とし、分解原料希釈スチーム発生、若しくは HS 発生を行うとした。

(ii) 熱分解プロセスのエネルギー原単位の算出

熱分解製品バランスからエネルギー消費量を算出し、エネルギー原単位を算出した。

(iii) エネルギー原単位評価

但し、接触分解の一つの特徴はプロピレン収率が高く、エチレン/プロピレンプラントであることから、(エチレン+プロピレン) 合計あたりのエネルギー消費量で比較すると、S/O=0, 0.2 どちらのケースでも、また触媒再生サイクルが 2 日と仮定した場合においても、従来型の熱分解炉のエネルギー原単位よりも 10-20%程度低くなる。

b. プラント建設費比較

以下の前提に基づきプラント建設費を試算した。

- 1) 接触分解プロセス (エタン、プロパンリサイクル熱分解炉含む)

図 I 1 に示すプロセスフローに基づき建設費を見積った。

リフォーマー型接触分解装置は、触媒再生を考慮し、4 基運転+1 基デコーキングという運転サイクルとし、5 基で見積った。また、エタン、プロパンリサイクル熱分解炉も見積に含めた。

- 2) 熱分解プロセス

従来型の熱分解プロセスフローに基づき建設費を見積った。また、エタン、プロパンリサイクル熱分解炉も見積もりに含めた。(熱分解炉は(4+1)炉)

また、建設費見積は 2011 年第一四半期の日本でのプラント建設を想定したコスト情報に基づいている。

リフォーマー型プロセスの建設費は熱分解プロセスの建設費よりも 10%安くなった。これは、リフォーマー型は従来型の熱分解炉よりもコンパクトになっているためである。

c. 総付加価値計算

従来型の熱分解プロセスと、接触分解プロセスの $S/O=0, 0.2$ の各ケースにおいて実用化を考慮し触媒再生を 2 日に 1 回としたケースについて総付加価値計算を行なった。

償却費は金利も含めて建設費と触媒の初期充填量の合計金額の 25%とし、触媒費用について初期充填分は建設費とし、以後の交換は変動費として計上した(触媒ライフを一年に設定)。

接触分解プロセスは、建設費は従来型の熱分解プロセスより若干低く、エチレン+プロピレンエネルギー原単位でも低くなっているため、熱分解プロセスに比べ 70%以上の総付加価値向上が見込まれる。接触分解プロセスが実用化された折には、従来型の熱分解プロセスと比較して省エネルギーであると共に大きな収益を得られると見込まれる。

2-2-③-3 エネルギー・環境問題への貢献について

接触分解プロセスの優位な点として、エネルギー及び環境問題への貢献がある。

省エネルギー率として、(エチレン+プロピレン)生産量ベースのエネルギー原単位が、従来型の熱分解プロセスと比較して下記のように向上する。

- 接触分解 $S/O=0.0$ の場合: 16.2 % 向上
- 接触分解 $S/O=0.2$ の場合: 7.7 % 向上

CO_2 削減率については、2010 年の熱分解法による日本のエチレン年生産量 約 700 万トンの内、年生産量 100 万トンが接触分解に代替される(エチレン+プロピレンベースで年生産量 約 150 万トン)と仮定すると下記の削減が見込まれる。

- 原料ナフサ消費量の削減: 300 万トン/年から 230 万トン/年へ削減
- 消費エネルギーの削減に伴う CO_2 の削減量: 18 万トン/年の削減 ($S/O=0.0$)

2-2-③-4 プロセスの最適化

触媒研究開発の結果、従来型の熱分解プロセスの経済性を超越する可能性のある触媒が探索されたと考えられる。しかしながら、現在までの触媒開発は、ラボスケールでの実験によるより高性能な触媒探索に留まっている。

実用化にあたっては、本プロセス検討にて仮定をおいた条件の実現可能性を探る必要があり、引き続き設計・運転パラメータデータの収集・解析が必要である。

今後、商業化を目指したプロセス最適化にはまだいくつかの課題が残されているが、現状の日本の熱分解エチレンプラントにおいて、熱分解炉自体が寿命近くになってきており、旧型熱分解炉のスクラップ&ビルドが今後予想される。このタイミングで、リフォーマー型接触分解炉の建設を組み込めることが望まれる。

IV. 実用化の見通しについて

1. 成果の意義（研究開発成果が社会や産業に与えるインパクト）

本研究開発の成果は、環境負荷低減とエチレンセンターの製品を高収率で得ることができる技術あるいは製品構成を付加価値の高いエチレン、プロピレン等の構成比へ柔軟にシフトすることができる技術として既存のナフサクラッカー設備の改良に適用される。これにより、日本のナフサクラッカー稼働率の回復／維持／拡張が達成され、日本の石油化学コンビナートの世界市場における競争力強化が期待される。

また、2005年に発効した京都議定書により日本はGHG排出量6%の削減が目標として定められている。これまでの対応は主として工場における既存設備の省エネルギーや燃料転換、また、生産停止などにより対応がなされてきたが、一層のGHG削減に資する革新的製造法が切望されている。

本研究開発にて開発される技術は、石油化学産業のナフサクラッカーの競争力強化を目的として使用されると同時に、石油化学産業の基幹プロセスの省エネルギー化を達成することができ、社会的ニーズであるグリーン化にも大きく寄与するものである。

日本の石油化学における主幹製品であるエチレン、プロピレンは、その大部分がナフサの熱分解（ナフサクラッカー）において生産されているが、ナフサ価格の高騰／下落や、米国経済破綻後のアジア大不況の影響を受け、日本のナフサクラッカーは何れも減産を余儀なくされている。

一方、昨今の石油化学業界では、中東などの天然ガス産出国を中心として原料転換が急速に進み（例えば、エチレン原料がナフサからエタンへ、プロピレン原料/製造法がナフサ熱分解から重質油原料の石化型FCCやプロパン脱水素へ）、市場におけるナフサ以外の原料由来製品のプレゼンスが大幅に向上している。このような状況下、日本のナフサクラッカーの競争力は将来的に確実に低下していく事が予想される。

このような環境の下、日本の石油化学コンビナートが国際市場における競争力を維持する為には大きな技術転換が必要と見られるが、既存コンビナートにおいてはナフサクラッカーを中心とした製品／用役バランスが既に完全に組上げられており、全く新たな技術を導入し、既存設備を置換することは現実的には困難である。また、日本は原料の大部分を輸入に依存しており、天然ガスのような輸送コストのかかる資源への切り替えも実質困難であり、今後とも輸入ナフサに依存せざるを得ない状況は継続するものと考えられる。

2. 成果の普及の見通し

日本の既存コンビナートにおいては、ナフサクラッカーを中心とした製品／用役バランスが既に完全に組上げられており、既存設備を完全に置換することは現実的では無いが、本研究開発において開発された技術は、既存のナフサクラッカーの改良設備として組み入れられる見込みが高い。

一般的にナフサクラッカーには複数の分解炉（反応器）があり、各分解炉はナフサ処理ベースで数万トン～十数万トン／年程度の分解処理能力を有している。この反応器の一部を接触分解反応器に置き換え、セミコマーシャルプラントとして目的とする製品構成の達成を検証する（触媒再生システムも含む）こと、および生成した反応混合物の分離・精製が既存の精製設備あるいは最小の投資で適応可能であることを検証することまでで実用化レベルに到達すると判断される。さらに、使用する触媒は新たな製造設備が必要な為、工業的製法の確立も必要である。

3. 成果の実用化の見込み

現状のナフサクラッカー分解炉をセミコマーシャル規模の設備から始め、順次開発技術で代替することにより、省エネルギーを達成し、製品構成を高付加価値製品へシフトできる。

しかし、セミコマーシャルプラントの実現のためには下記主要項目に関し、今後精査し研究開発にフィードバックさせる必要があるものとする。

3. 1 実用化プロセスに関するコスト試算

現時点での正確なコスト試算は極めて困難であるが、目的製品の効率を向上させることにより原材料費は10%以上削減可能となり、比較的短期間に設備費等の投資が回収できるものとする。

3. 2 スケールアップ、導入波及に伴うコスト

セミコマーシャルプラントの建設には20億円以上規模の投資が必要であるが、それ以降はナフサクラッカーの更新計画にあわせたスクラップ&ビルドの投資となる。また、精製系は現行の装置、規模を利用し、全体の投資ミニマム化で実用化の完成を目指す。

イノベーションプログラム 基本計画

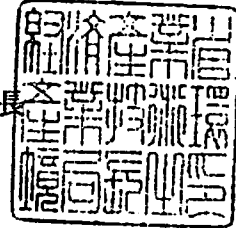
平成21年4月
経 済 産 業 省

経済産業省

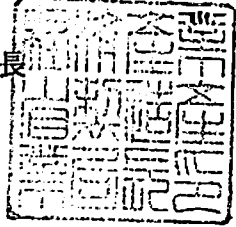
平成 21・03・25 産局第 1 号

平成 2 1 年 4 月 1 日

経済産業省産業技術環境局長



経済産業省製造産業局長



ナノテク・部材イノベーションプログラム基本計画の制定について

上記の件について、イノベーションプログラム実施要領（平成 1 6 ・ 0 7 ・ 2 7 産局第 1 号）第 4 条第 1 項の規定に基づき、別添のとおり制定する。

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]

．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)

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。

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。

研究開発期間

2005年度～2011年度

．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)

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。

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。

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)

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。

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。

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)

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。

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

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)

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。

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。

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)

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。

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。

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)

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。

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。

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)

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。

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。

研究開発期間

2009年度～2011年度

・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)

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。

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。

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)

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。

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。

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)

)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

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。

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。

研究開発期間

2005年度～2009年度

)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

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。

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。

研究開発期間

2005年度～2009年度

)新規悪性腫瘍分子プローブの基盤技術開発

「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。

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。

研究開発期間

2008年度～2009年度

・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ック関連産業・部材産業の競争力を強化する。

() 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)

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。

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。

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)

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。

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10mm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。

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)

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。

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。

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)

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。

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。

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)

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。

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。

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)

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。

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。

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)

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。

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。

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)

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。

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。

研究開発期間

2005年度～2009年度

() 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)

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。

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）

研究開発期間

2007年度～2013年度

（ ）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

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・サステナブルケミストリー）プロセスを開発する。

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。

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）

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。

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。

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)

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。

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。

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*

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。

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、 $0.001 \text{ ng} \cdot \text{ml}$ 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。

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)

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。

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。

研究開発期間

2008年度～2011年度

・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）

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（クリーブ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。

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。

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）

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。

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。

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)

概要

電界紡糸や溶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。

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溶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。

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)

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。

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。

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)

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。

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。

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)

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。

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。

研究開発期間

2006年度～2010年度

・ 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)

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。

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。

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)

「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(案)

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もちより強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。

(別紙) 研究開発計画

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。これまでにも、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

・国内外で稼動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積する。
- ・ 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 高機能化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・コスト面等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。

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）¹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。

¹ GSC の定義：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、「人と環境の健康・安全」、「省資源・省エネルギー」などを実現する化学技術（平成 11 年 11 月、産学官の参加により開催された GC ワークショップにおいて合意された。）

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

．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、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を鑑み、それ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。

<将来の生活の質の向上と GSC の目標>

将来の生活の質向上について、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：いわゆるシックハウス症候群への懸念がある中で、室内大気をよりきれいにしていくこと）、交通や通信などのもたらず環境負荷の低減、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、我々自身のライフスタイルや価値観の転換を図ることによって、快適性や利便性の一方的な追求の結果により生じる大量生産・大量消費・大量廃棄に依ることなく、アメニティのさらなる向上を求めていくことが望まれる。

以上に鑑みると、GSC の方でも、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必要である。

<将来の資源・エネルギー制約と GSC の目標>

2007 から 2008 年にかけて年原油価格は異常なほどに高騰した後、急激に下落しており、原油価格は激変している。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できなくなり、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ある。しかし、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められる事態ともなれば、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。

以上に鑑みると、日本としては、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2030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、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。

日本としては、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進めていくことが必要である。

<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、今後も常に革新的なプロセス、マテリアル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、より広い産業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止まった場合、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>

以上に鑑み、生活の質の向上と資源・エネルギー・環境制約からの脱却に向けて、GSCの短期・中期・長期の目標を置いた。

すなわち短期的には、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）、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・サステイナブルの観点からは、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、ライフサイクルで見たときの環境への優しさが重要となる。

(2) 研究開発の取組み

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) 関連施策の取組み

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、定量的に技術の評価できるようにする必要がある。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、評価の目的により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 賞の応募資料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〕

・1998年2月のOECD化学品リスクマネジメント委員会において、「OECD サステイナブルケミストリープログラム」が提案され、我が国においてもその推進策を策定するための検討が始まった。「国際競争力強化と社会の持続的な発展を目指す新しい科学技術体系を創成する」目的で産学官総意の下に1998年3月に設立された（財）化学技術戦略推進機構を中心に、OECD のステアリンググループの会合に委員を派遣すると共に、国内の推進体制として、通商産業省物質プロセス技術戦略推進室（当時）、工業技術院物質工学工業技術研究所（当時）、業界団体（日本化学工業協会、バイオインダストリー協会、新化学発展協会、化学技術戦略推進機構）、学会（日本化学会、化学工学会、高分子学会）が協議し、1998年9月にグリーンケミストリー連絡会を発足させた。

さらに、我が国における 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）海外での取組み

1992年のリオ宣言を契機として持続可能な発展（Sustainable Development）のための取組みが各国で開始される中、日米欧が中心となって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 (SUStainable TEChnology) が設立している。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。

一方、欧州委員会（EU（欧州連合）の政策執行機関）のサステナビリティへの取組を見てみると、規制面においてサステナブルな生産と消費のための実行計画を検討中であり、現時点ではいくつかの規制ツールや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下、国家レベルでの環境技術のためのロードマップを2008年までに22カ国が策定している。

（５）改訂のポイント

- 経済産業省が推進する研究開発プロジェクト（グリーン・サステナブルケミカルプロセス基盤技術開発）とその基本計画の内容を反映した。

．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（サステナブル）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的な生産が可能なプロセスによる供給体制の構築、及び、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繋がるような国内外の革新的な要素技術」及び「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繋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、収集された2008年度の技術テーマを本年度ローリング作業のベースとする技術テーマとした。

一方で、資源・エネルギー、環境、生活の分野ごとに有識者からなる3つのワーキンググループ(WG)を設け議論を重ねて新たな技術テーマを適宜追加しつつ、すべての2008年度技術テーマをローリングした。各4回に及ぶそれぞれのWGでの検討から、148件の技術テーマが抽出されたが、これらの整理・分類のための新たな技術項目を策定した。次に、WGからの答申を受けて本委員会での検討(4回)を行い、その中で特に重要なものを重要技術項目とした。

なお、技術項目及び技術テーマの評価にあたっては、①エネルギー効率改善②資

源生産性の改善③廃棄物排出減④化学物質リスク最小化⑤温室効果ガス削減効果の5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」及び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21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

○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

○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）

(3) 改訂のポイント

- これまでサステナブルを考慮する上で、エネルギー、資源、環境からの制約の克服に重点がおかれていたために、少子高齢化社会となる2050年に向けた生活の

質的改善に関する課題抽出が必ずしも十分でなかったことを改め、生活面での化学の貢献に関する課題を積極的に取上げた。2008GSC 技術マップでは、生活に関する課題が 16 件であったが、2009GSC 技術マップでは、48 件を抽出した。これにより 2008GSC 技術マップでは、全体で 113 件であった課題数が、2009GSC 技術マップでは 148 件になった。

. 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されたものに関して「GSC 評価」、及び「産業競争力・創設力評価」を実施した。評価方法は 2008 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頁毎にまとめて掲載した。さらに、「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

- 2008 年度ロードマップからデザインを一新した。重要技術項目毎に対象となる重要技術テーマを 1 ページでまとめることにより、内容を理解しやすいものとすることを狙った。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、説明のための欄を 4 つ作成した。各欄の内容は次のとおりである。
 - ・「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ともにコメントをした
 - ・「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ともにコメントをした。

. その他の改訂のポイント

国際競争ポジション（ベンチマーキング）

- 日系企業の化学製品の売上高や生産量に基づいて世界市場シェアの高い製品と低い製品を分析した。
- 我が国の化学産業の SWOT 分析を行った。
- （社）日本化学工業協会「環境保全フォローアップ結果の報告」、環境省「産業別

廃棄物量統計」及び（独）製品評価技術基盤機構 HP から化学工業におけるエネルギー使用量、CO2 排出量、廃棄物量などに関する図表を作成した。

【グリーン・サステイナブルケミストリー分野の国際競争ポジション】

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

2009年

2015年

2030年

目標

市場

高機能化 高付加価値化

(ニーズ産業との摺り合わせ、化学産業の範囲拡大、標準化)

資源利用の効率化

(未利用・低品位資源の活用、リサイクル、資源代替を含めた効率化)

戦略策定

総合科学技術会議 分野別推進戦略(ものづくり分野)

基準・標準化

GSC評価手法(指標)の開発
と標準化 i-Messeの改良等

産学官連携

GSCの普及と促進(グリーン・サステイナブルケミストリー ネットワーク(GSCN))

研究開発推進: 研究開発推進上の諸課題と提言、GSC賞の贈呈など

研究開発支援: 情報の交換、ワークショップ、シンポジウム開催

教育: 教材作成、教育支援、

国際交流

関連施策

研究開発

エネルギー制約を克服するための研究開発

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

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

資源制約を克服するための研究開発

環境との共生を図るための研究開発

生活の質的向上を図るための研究開発

添3-10

革新的な原料変換プロセスの開発
よりグリーンな先端高機能製品の開発

豊かでサステイナブルな社会の実現

産業競争力確保 新産業創生 安全で安心の社会

GSCをめぐる背景(克服すべき課題)

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%)

さらなる省エネルギー推進
大幅なCO₂削減努力

エネルギー源の多様化が進行
非在来型化石資源、石炭、バイオマス等
原子力の利用拡大
新エネルギーへの移行
太陽光、水素等

資源

原油価格・供給変動への対応

石油資源の高度利用、省資源
希少元素の偏在・枯渇
資源リサイクル

資源の多様化(石油、天然ガス、バイオマス、石炭等)
世界的な水資源の不足
省資源技術、代替物質の開発

クリーンコールテクノロジーの新展開
水の高度利用、国際貢献
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

リスクの高い物質の回避
環境負荷物質削減
欧州規制の強化(RoHS法、REACH法)

低環境負荷・低リスク・長寿命材料の開発
廃棄物・副生物の削減
中国等の新興国への波及
国際規制を先取りした製品の開発

環境調和型製品への転換

生活

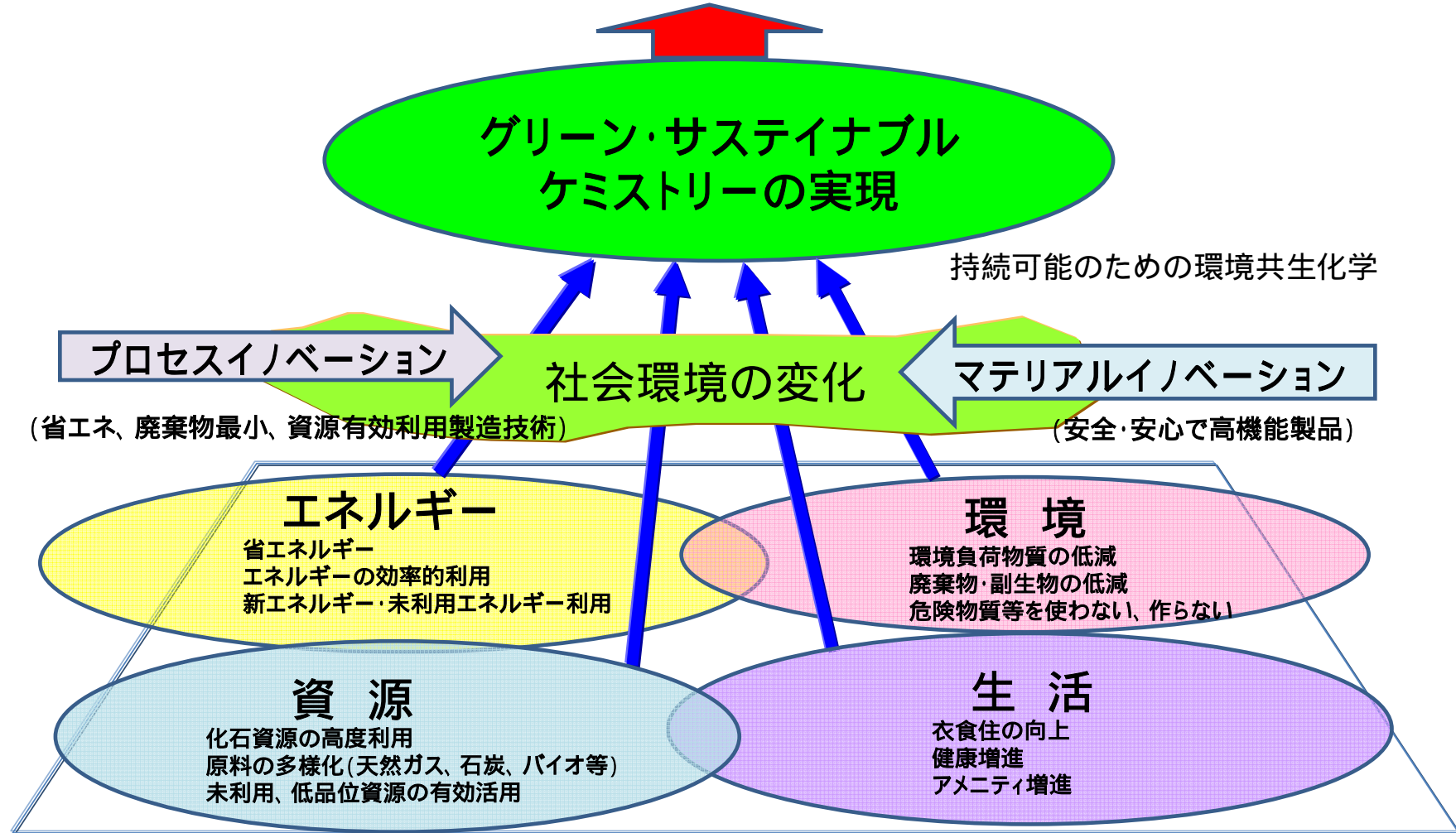
生活環境場のリスク最小化対応

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

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概念図

GSC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、生活の質的向上を図ることで、安全・安心で競争力のある持続型社会を構築するために必要な化学技術の体系である
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分野の技術マップ(3/20)

サステイナビリティ	技術項目 (グレー は重要技術項目)	テーマNo (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	CO ₂ 削減効果 <small>小: 数万吨未満 中: 数十万吨以下 大: 50万吨以上</small>	実用時期 <small>短期: 2015年ごろ 中期: 2020年以降 長期: 2030年以降</small>	期待される市場規模 <small>(億円/年)</small>	関連市場分野
		2009							
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	<ul style="list-style-type: none"> 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	<ul style="list-style-type: none"> 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 	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	<ul style="list-style-type: none"> 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・反応一体型膜リアクタープロセス	<ul style="list-style-type: none"> 界面活性剤型触媒、相間性移動触媒の開発 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 	資源確保産業競争力	大	短期、中期	1,000	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	<ul style="list-style-type: none"> キャピラリーカラム型触媒プロセス 低圧、低温反応製造プロセス 細溝化技術 	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	<ul style="list-style-type: none"> 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	<ul style="list-style-type: none"> 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資源省エネ製造プロセスの開発	<ul style="list-style-type: none"> 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	<ul style="list-style-type: none"> 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(e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	<ul style="list-style-type: none"> 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

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(4/20)

サステイナビリティ	技術項目 (ブルー は重要技術項目)	テーマNo (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	CO ₂ 削減効果 <small>小: 数万吨未満 中: 数十万吨以下 大: 50 万吨以上</small>	実用時期 <small>短期: 2015 年ごろ 中期: 2020 年以降 長期: 2030 年以降</small>	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野	
		2009								
エネルギー	利用技術	熱エネルギー 高効率変換	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	<ul style="list-style-type: none"> 合成糖類(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、代替フロン溶媒、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	<ul style="list-style-type: none"> 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 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	<ul style="list-style-type: none"> アルコール、芳香族、多環芳香族化合物の水素化、脱水素反応触媒(卑金属系) 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	<ul style="list-style-type: none"> 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	<ul style="list-style-type: none"> 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	<ul style="list-style-type: none"> 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・メンテや解体処理がし易い環境適合型部材・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	<ul style="list-style-type: none"> 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	<ul style="list-style-type: none"> 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	
		G019	有機半導体型太陽電池材料の開発	<ul style="list-style-type: none"> 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 	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・サステイナブルケミストリー分野の技術マップ(5/20)

サステイナビリティ	技術項目 (グレー は重要技術項目)	テーマNo (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	CO ₂ 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: 2015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
		2009							
エネルギー		G020	燃料電池 (PEFC・SOFC) 用新規材料の開発	<ul style="list-style-type: none"> ・低価格化、普及を目的に Pt 代替電極、フッ素代替膜 ・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	<ul style="list-style-type: none"> ・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 (CIGS 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
	製造	G022	高効率水素製造技術の開発	<ul style="list-style-type: none"> ・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 ・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	<ul style="list-style-type: none"> ・合金ナノ粒子、有機金属材料による高密度貯蔵材料 ・超高压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	<ul style="list-style-type: none"> ・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)	<ul style="list-style-type: none"> ・ポストメタロセン触媒、コモノマー材料 ・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	<ul style="list-style-type: none"> ・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筐体等
		G027	光機能を有するプラスチック材料の開発 (再掲)	<ul style="list-style-type: none"> ・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)	<ul style="list-style-type: none"> ・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 	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	<ul style="list-style-type: none"> ・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	<ul style="list-style-type: none"> ・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	

グリーン・サステナブルケミストリー分野の技術マップ(6/20)

サステイナビリティ	技術項目 (グリーン は重要技術項目)	テーマNo (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	CO ₂ 削減効果 <small>小: 数万トン未満 中: 数十万トン以下 大: 50万トン以上</small>	実用時期 <small>短期: 2015年ごろ 中期: 2020年以降 長期: 2030年以降</small>	期待される市場規模 <small>(億円/年)</small>	関連市場分野
		2009							
エネルギー	省エネのための化学品 (生活環境材料)	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	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
		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、コンパクト、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
		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、電車等
	電子材料	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、絶縁材料の開発	・無機有機複合材料、無機ハイブリッド、ナノコンポジット等による高性能 II 材料・ノンハロゲン系絶縁有機材料	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	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爆材料の減容化	廃棄物削減	大	短期、中期	1,000	電力供給産業	

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(7/20)

サステイナビリティ	技術項目 (グ は重要技術項目)	テーマNo (ロ は重要テーマ)	テーマ名 (茶 : プロセスイノベーション 青 : マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO ₂ 削減効果 <small>小: 数万トン未満 中: 数十万トン以下 大: 50万トン以上</small>	実用時期 <small>短期: 2015年ごろ 中期: 2020年以降 長期: 2030年以降</small>	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
		2009							
エネルギー	耐熱・伝熱材料	G042	新規高伝熱材、熱損失抑制用材料の開発	<ul style="list-style-type: none"> 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	<ul style="list-style-type: none"> 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

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(8/20)

サステイナビリティ	技術項目 (ブルー は重要技術項目)	テーマNo (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	CO ₂ 削減効果 <small>小: 数万トン未満 中: 数十万トン以下 大: 50万トン以上</small>	実用時期 <small>短期: 2015年ごろ 中期: 2020年以降 長期: 2030年以降</small>	期待される市場規模 <small>(億円/年)</small>	関連市場分野
		2009							
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	<ul style="list-style-type: none"> 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経由エチレン製造等 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	<ul style="list-style-type: none"> 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・メタンホモロゲーション・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	低品位固液系化石資源からのナフサ留分、オレフィン等の製造	<ul style="list-style-type: none"> 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	<ul style="list-style-type: none"> 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 	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、熱のトライジェネレーション	<ul style="list-style-type: none"> 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	<ul style="list-style-type: none"> 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
		蓄電材料技術 次世代	G050	超高蓄電型二次電池材料の開発(再掲)	<ul style="list-style-type: none"> 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	中	短期、中期	1,000
	G051		新しい電池材料の開発(再掲)	<ul style="list-style-type: none"> 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C₀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・サステナブルケミストリー分野の技術マップ(9/20)

サステイナビリティ	技術項目 (ブルー は重要技術項目)	テーマNo (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	CO ₂ 削減効果 <small>小: 数万トン未満 中: 数十万トン以下 大: 50万トン以上</small>	実用時期 <small>短期: 2015年ごろ 中期: 2020年以降 長期: 2030年以降</small>	期待される市場規模 <small>(億円/年)</small>	関連市場分野
		2009							
資源	蓄電材料技術 次世代	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	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
	用と代替材料技術 稀少金属の有効利	G056	稀少元素、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	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格耐熱材料 ・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	稀少金属、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、製品等に用いら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
	材料化 非枯渇性資源の化学品・	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 ・高選択酸化プロセス、完全水添触媒プロセス ・ミ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

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(10/20)

サステイナビリティ	技術項目 (ブルー は重要技術項目)	テーマNo (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	CO ₂ 削減効果 <small>小: 数万トン未満 中: 数十万トン以下 大: 50万トン以上</small>	実用時期 <small>短期: 2015年ごろ 中期: 2020年以降 長期: 2030年以降</small>	期待される市場規模 <small>(億円/年)</small>	関連市場分野
		2009							
資源	易リサイクル加工用材料とプロセス	G063	非食糧資源からのバイオプラスチック、及びモノマー製造技術の開発	・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	資源確保産業競争力	中	中期、長期	500	自動車、電機電子、日用品等広範囲
		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、易分解性粘接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
	CO ₂ 分離回収利用技術	G067	CO ₂ 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、未利用低品位廃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)	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CO ₂ 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
		G069	CO ₂ を原材料としたポリカーボネート樹脂の開発	・脂肪族、芳香族ポリカーボネート ・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
	フッ素資源リサイクル(フッ素化学)	G070	フッ素系機能化学品代替材料の開発	・低温暖化係数、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、低品位鉍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	電気電子、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

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(11/20)

サステイナビリティ	技術項目 (グリーン は重要技術項目)	テーマNo (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	CO ₂ 削減効果 <small>小: 数万トン未満 中: 数十万トン以下 大: 50万トン以上</small>	実用時期 <small>短期: 2015年ごろ 中期: 2020年以降 長期: 2030年以降</small>	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
		2009							
資源	微細構造精密 構造形成技術	G073	インクジェット法による革新的加工材料開発	・印刷技術による有機トランジスタ、電子回路製造向け材料(新規熱硬化性、光硬化性樹脂) ・新規インクジェットインキ材料(粘性、硬化性、絶縁性、耐熱性等)	省エネ省資源	中	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	新規リソグラフィー加工技術の開発	・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ー技術	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
	プロセス 水処理	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・オゾン爆気、MBR 等による難分解物質分解プロセス ・酸化物、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、コンビニ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	省エネ省資源	小	中期	100	光学加工、レンズ、医療、分析機器等
	ポリマー バイオ	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ツ
		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	中期	1,000	建設部材、家電、食器等
	開発 海洋	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

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(12/20)

サステイナビリティ	技術項目 (グレー は重要技術項目)	テーマNo (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	CO ₂ 削減効果 <small>小: 数万トン未満 中: 数十万トン以下 大: 50万トン以上</small>	実用時期 <small>短期: 2015年ごろ 中期: 2020年以降 長期: 2030年以降</small>	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
		2009							
資源	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	<ul style="list-style-type: none"> ・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 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	<ul style="list-style-type: none"> ・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 	省エネルギー省資源	小	短期、中期	100	高分子素材リサイクル関連産業

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(13/20)

サステイナビリティ	整理軸 (グレー は重要整理軸)	テーマNo	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	CO ₂ 削減 効果 小: 数万トン未満 中: 数十万トン以下 大: 50万トン以上	実用時期 短期: 2015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
		2009	(ローズ色 は重要テーマ)						
環境	ハサード管理されたハロゲン製品	G087	クリーン再資源化可能な塩化ビニール樹脂	・有機溶剤の回収再利用 ・塩化ビニー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ールの開発	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
		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	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
	副生物の大幅削減・ 製造工程廃棄物	G094	新規固体酸・塩基触媒による化学プロセスのクリーン化	・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) ・カプロラクタム、MMA、ニトロ化合物プロセスのクリーン化	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、農薬、防腐剤等
		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、農薬、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 ・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クリーン化	廃棄物削減 資源多様化	中	中期、長期	500	石油化学製品、光学材料、医薬・農薬等製造業
		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)排水の高濃度化・有害成分の高濃縮回収技術(高濃度と高濃縮の両立)	省エネ 省資源	大	中期、長期	1,000	水処理業

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(14/20)

サステイナビリティ	技術項目 (グレー は重要技術項目)	テーマNo (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	CO ₂ 削減効果 <small>小: 数万トン未満 中: 数十万トン以下 大: 50万トン以上</small>	実用時期 <small>短期: 2015年ごろ 中期: 2020年以降 長期: 2030年以降</small>	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
		2009							
環境	製品 環境負荷が小さい	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	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、食品防腐等
		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
	い加工プロセス 環境負荷が小さい	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 リソグラフィーパターンニング技術の開発	・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
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 B,F 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	

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(15/20)

サステイナビリティ	技術項目 (グリーン は重要技術項目)	テーマNo (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	CO ₂ 削減効果 小: 数万トン未満 中: 数十万トン以下 大: 50万トン以上	実用時期 短期: 2015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
		2009							
環境	水環境の保全	G108	難分解性物質含有排水の高度処理技術の開発	・オゾン爆気、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: 精錬、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、精錬、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、凝集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	・CFRP、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
		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

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(16/20)

サステイナビリティ	技術項目 (グリーン は重要技術項目)	テーマNo	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	CO ₂ 削減効果 <small>小:数万吨未満 中:数十万吨以下 大:50万吨以上</small>	実用時期 <small>短期:2015年ごろ 中期:2020年以降 長期:2030年以降</small>	期待される市場規模 <small>(億円/年)</small>	関連市場分野
		2009	(ローズ色 は重要テーマ)						
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・耐寒) ・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、低減衰、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
		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
	食の安全と量の確保	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・耐寒性穀物	・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
		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
	快適な省資源型ロングライフ住宅	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	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 ・家屋の形状に適応可能な柔軟性材料	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、コンビナート、住宅等
		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	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、基材塗料 ・ミニエマルジョン材料による新塗装材料	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	

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(17/20)

サステイナビリティ	技術項目 (グレー は重要技術項目)	テーマNo	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	CO ₂ 削減効果 <small>小:数万吨未満 中:数十万吨以下 大:50万吨以上</small>	実用時期 <small>短期:2015年ごろ 中期:2020年以降 長期:2030年以降</small>	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
		2009							
生活	快適な省資源型ロングライフ住宅	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) ・天然物由来機材	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)	・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
	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	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:取り扱いやしく安価な透析膜 ・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

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(18/20)

サステイナビリティ	技術項目 (ブルー は重要技術項目)	テーマNo (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	CO ₂ 削減効果 <small>小: 数万吨未満 中: 数十万吨以下 大: 50万吨以上</small>	実用時期 <small>短期: 2015年ごろ 中期: 2020年以降 長期: 2030年以降</small>	期待される市場規模 <small>(億円/年)</small>	関連市場分野
		2009							
生活		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
	安全 クリーン 省エネで 便利な 交通機関	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
		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	・有機ハイブリットセンサー材料 ・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

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(19/20)

サステイナビリティ	技術項目 (グレー は重要技術項目)	テーマNo (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	CO ₂ 削減効果 <small>小: 数万トン未満 中: 数十万トン以下 大: 50万トン以上</small>	実用時期 <small>短期: 2015年ごろ 中期: 2020年以降 長期: 2030年以降</small>	期待される市場規模 <small>(億円/年)</small>	関連市場分野
		2009							
生活	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	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・アレルゲンの除去	・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	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	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イジング機能、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・アンチエイジング関連産業

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(20/20)

サステイナビリティ	技術項目 (グリーン は重要技術項目)	テーマNo (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	CO ₂ 削減効果 小:数万トン未満 中:数十万トン以下 大:50万トン以上	実用時期 短期:2015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
		2009							
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	電子機器、バス、電車等 用エネルギー供給・利用 関連産業
		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、アレルゲン削減、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、耐酸性非フッ素膜等による水循環・オゾン爆気、MBR等による難分解物質分解プロセス・酸化物、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、コンビナート等広範囲の製造業
		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
		G149	排水の高度処理技術	・高清澄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

- 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 -

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)

- : エネルギー重要技術項目
 - : 資源重要技術項目
 - : 環境重要技術項目
 - : 生活重要技術項目
 - : 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

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)

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)

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

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

稀少金属の有効利用と代替材料技術

稀少元素、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

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

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

CO2分離・回収・利用技術

CO2分離・回収技術

資源

環境

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・反応一体型膜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

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

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

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

共通輸送システム

(低環境負荷・高利便性交差輸送システム)

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
ジクロロメタン代替物質としての機能水

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

生食の安全と量の確保

高機能性食品包材
システム農業資材(肥料、農薬を含む)
耐塩・耐寒性穀物
水分、養分長期保持材料

生快適な省資源省エネ型ロングライフ住宅

200年住宅用外装・内装材料・断熱材
高効率太陽電池材料
省電力照明

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

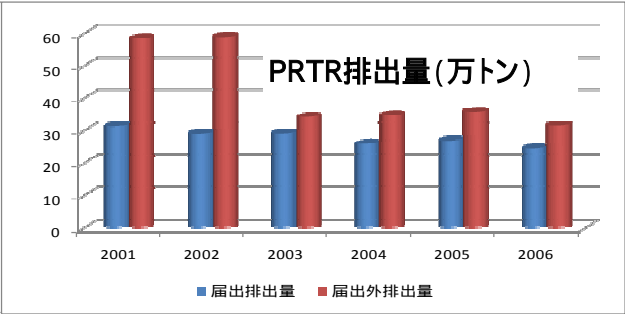
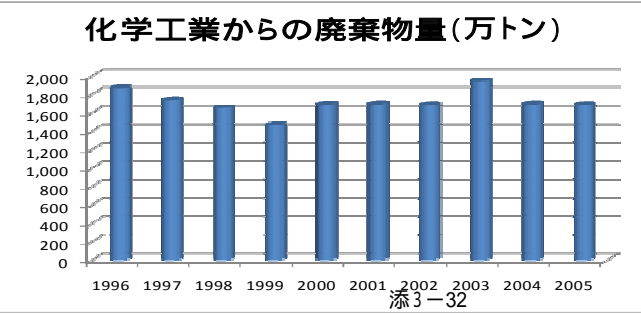
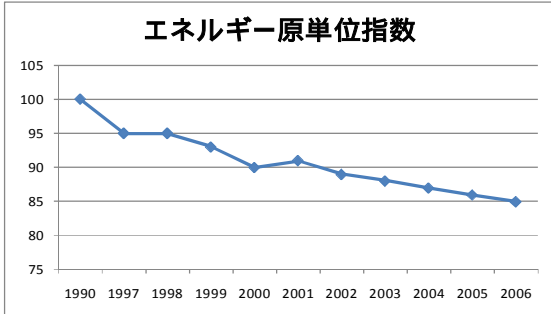
GSC戦略目標

GSCの課題

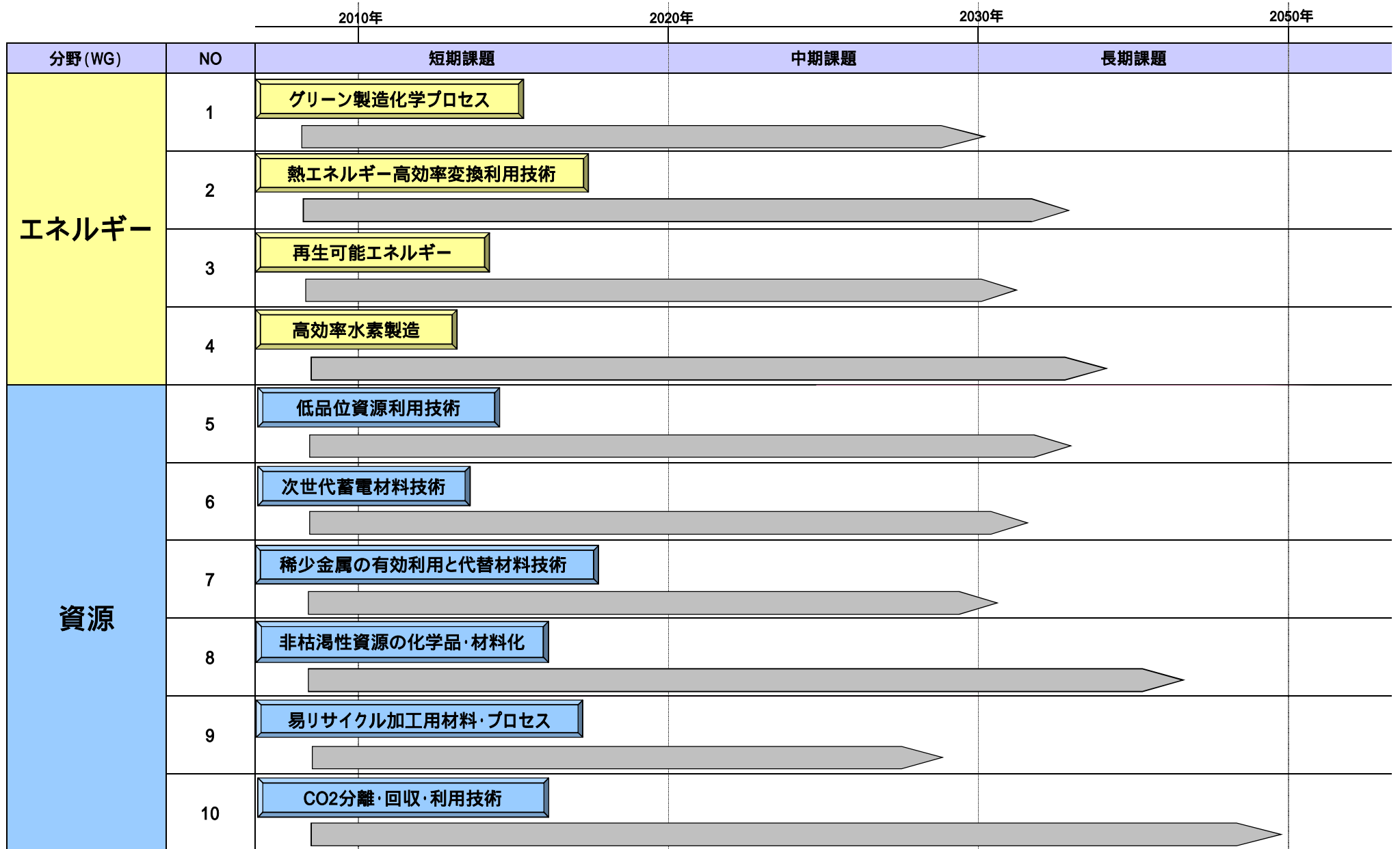
	プロセスイノベーション	マテリアルイノベーション
エネルギー	プロセスのシンプル化、高効率化 エネルギー原単位の大幅削減 低品位エネルギー利用 未利用エネルギー導入 新エネルギー導入	建材の断熱性向上による省エネ 自動車等の軽量化による燃費削減 高効率エネルギー変換材料 エネルギー負荷の少ない材料 エネルギー貯蔵材料
資源	化石資源の高度利用プロセス 代替原料プロセス 非枯渇資源からの材料製造プロセス	リサイクル容易な原料選択による製品 耐久性に優れた長寿命製品
環境	グリーン製造プロセス リスクの高い化学物質を使わないプロセス 廃棄物を最小化するプロセス 副生物を大幅削減するプロセス	リスクの高い化学物質を含まない製品 ハザード管理されたハロゲン製品
生活関連		ロングライフ住宅用建材 快適・低消費な日用品 医療・看護用材料

2030年に向けた目標値

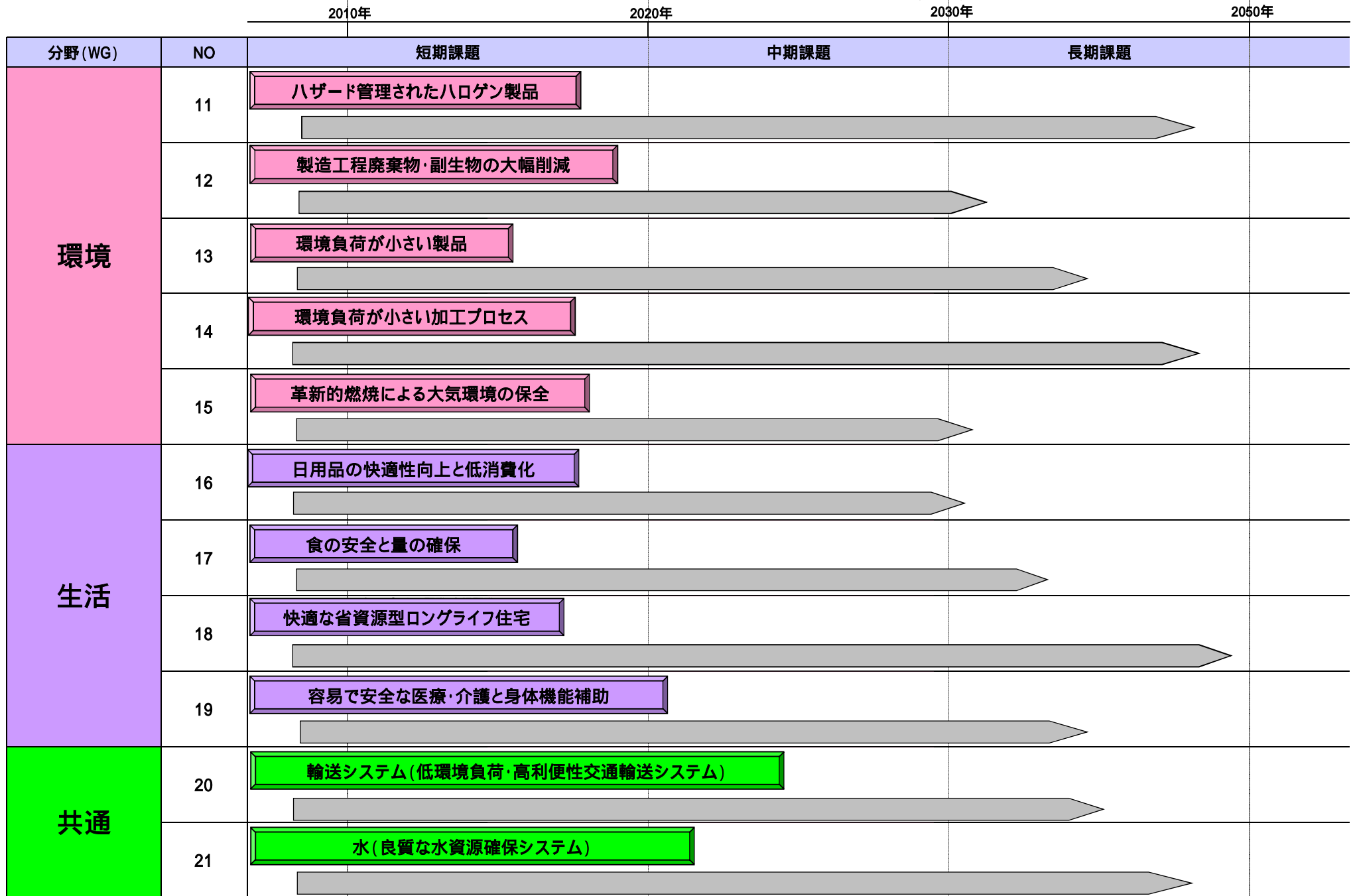
GSCの目標	内容	プロセス (プロセスイノベーション)	製品 (マテリアルイノベーション)
エネルギー効率の改善	省エネルギー、CO ₂ 削減	生産段階のエネルギー原単位を1990年レベルから30%向上	製品による間接的省エネルギー量を量的、質的改善と新製品の開発により現状の2倍にする
	廃熱利用	捨てられている排熱を30%回収利用する	
資源生産性の改善	資源有効利用	原材料等の資源生産性を現状より30%改善する	再利用、寿命延長、カスケード利用により現状より30%改善する
環境負荷の削減	廃棄物排出削減	化学プロセスからの廃棄物を現状より30%削減する	製品寿命を現状より大幅に長くする
	化学物質リスク削減	PRTR排出量を現状より30%削減する	リスクある化学物質の使用最小化



グリーン・サステイナブルケミストリー (GSC) ロードマップ概要



グリーン・サステイナブルケミカルケミストリーの技術ロードマップ(4/26)



ロードマップ説明図

9. 易リサイクル加工用材料・プロセス

技術マップでの技術項目名

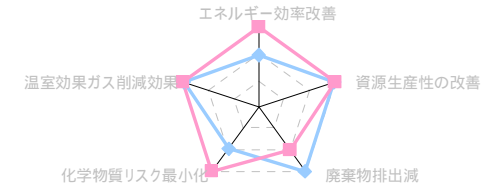
技術の概要

現在包装用等に多く使われる樹脂フィルムは、片面から多数の材料を組み合わせられており、リサイクルしにくいものとなっている。この問題を代替材料・易リサイクル材料の技術開発により解決する。また、解体性接着材料と易リサイクル加工法の開発により、リサイクルのしやすさを向上させることで、資源循環のよりよい構築を目指す。

技術テーマについて概要を説明

GSC評価

	積層フィルムの代替材料・易リサイクル材料の開発	解体性接着材料と易リサイクル加工法
エネルギー効率改善		
資源生産性の改善		
廃棄物排出減		
化学物質リスク最小化		
温室効果ガス削減効果		



易リサイクル素材を用いることで、新たな資源投入が減少し、また、さらにリサイクルの際のエネルギー効率の向上もへとシフトしていくことにより、リサイクル性を向上させていく。

技術ロードマップ

分野 (WG)	2010年		2020年		テーマ番号
	短期課題	中期課題	長期課題	2050年	
資源	積層フィルムの代替材料・易リサイクル材料				G064
	複合材料の相溶化等による易リサイクル化				
	樹脂の分子設計による単純組成材料の開発				
	マーケティング				
	解体性接着材料と易リサイクル加工法				G065
	要素技術開発(非エポキシ系マトリックス樹脂材料、発泡剤、分解剤)				
		マーケティング			

GSC評価項目について、空欄の3段階で技術評価し、評価の適用外を - で示した。結果をレーダ図に投影し、その結果についてコメント(技術テーマ名の背景の色はレーダ図の、

それぞれの「技術テーマ名」について、2050年ごろまでのロードマップを作成 (はレーダ図中の配色を示

技術マップにおけるテーマ番号を記載

技術優位性

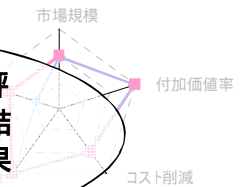
日本の技術の優位性の例
日本において、解体性接着材料の技術は2010年ごろから開発されてきている。通常の熱による乖離以外に、超音波やレーザーによる乖離が可能となり、実用化されている。一方で米国ではエネルギー効率の向上が求められる。これは50V程度の電圧で解体が可能となる。日本企業において、この技術が開発されているが、まだまだ新しい分野であるため、将来的な技術のブレイクスルーも含め日本の技術の優位性がこれから期待される。

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関してコメント

積層フィルムに関しては、ポリイミドのポリマーを種類を変えることによる光伝送システム用の光配線

産業競争力・創設力評価

	積層フィルムの代替材料・易リサイクル材料の開発	解体性接着材料と易リサイクル加工法
市場規模(億円/年)	500	500
付加価値率		
コスト削減		
機能向上		
他分野への波及効果		



解体性接着材料は、住居用だけでなく、SiチップやICチップなど、エレクトロニクス分野にも利用され、マクロからマクロまで適用分野は幅広い。

産業競争力や創設力に関わる評価項目について、評価を行い、結果をレーダ図に投影し、その結果

1. グリーン製造化学プロセス

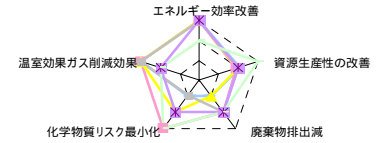
技術の概要

製造プロセスでの環境負荷をより低減させる技術であり、プロセスをシンプル化したり、選択性を高めることにより、原料の削減や省エネを実現するものである。

化学プロセスの中で最もエネルギーを要していた分離プロセスを画的に効率化し、省エネを実現する。グリーン酸化プロセスでは、これまでプロセスが複雑で、また副産物を多く出していた化学工業の基本である酸化反応において、水素と酸素から直接製造した過酸化水素を多面的に利用する。過酸化水素はすぐれた酸化剤であり、選択的に酸化でき、副産物が少なくて済む(しかも主な副産物は水である)。マイクロリアクターは物質の拡散を制限した狭い場で反応させるので、反応をコントロールしやすく、必要な物質を必要な量だけ必要に応じて生産でき、省エネにつながる技術である。高分子の製造を精密に制御し、マイクロ・ナノスケールでの欠陥をなくし、構造制御を達成することにより、高分子が有する性能を格段に向上させることができる。

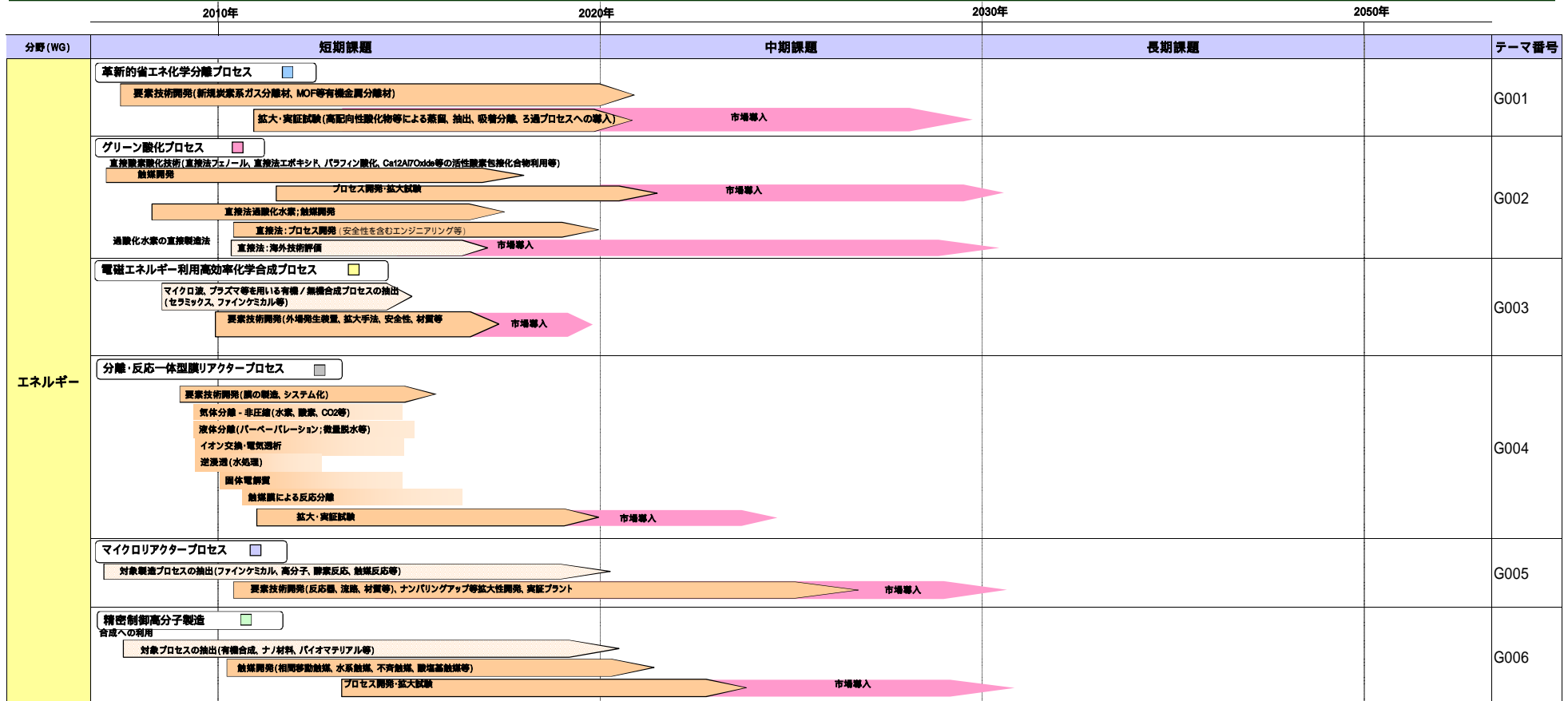
GSC評価

	化学分離プロセス	グリーン酸化プロセス	電磁エネルギー利用合成プロセス	分離・反応一体型膜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
エネルギー効率改善						
資源生産性の改善						
廃棄物削減						
化学物質リスク最小化						
温室効果ガス削減効果						



過酸化水素の酸化剤としての活用技術や、酸化経路をシンプル化する直接

技術ロードマップ

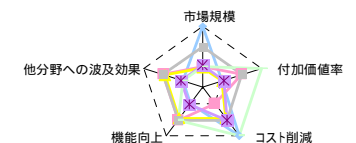


技術優位性

この分野では、これまでも数多くの日本で生み出された技術があり、今後の優位性も期待できる。特にマイクロ波、プラズマ技術については、世界にリードする半導体分野でのCVDによるプラズマ蒸着技術などで古からの技術的蓄積があり、今後の新技術の展開が期待される分野である。

産業競争力・創設力評価

	化学分離プロセス	グリーン酸化プロセス	電磁エネルギー利用合成プロセス	分離・反応一体型膜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
市場規模(億円/年)	1,000	1,000	100	1,000	100	500
付加価値率						
コスト削減						
機能向上						
他分野への波及効果						



2. 熱エネルギー高効率変換利用技術

技術の概要

低品位排熱の蓄熱・輸送、及び回収材料及び熱変換プロセス
潜熱蓄熱材、高分子顕熱輸送媒体等を基礎技術として、各種ヒートポンプ、ケミカル蓄熱、高効率断熱材、デシカント利用空調、真空蒸気過熱システム等が検討項目。

低温排熱エネルギー変換用熱電変換材料の開発
熱電対の原理による低温域の熱電変換機能は有効。ヒートポンプとの組み合わせによる更なる排熱回収も可能。

触媒反応を利用した化学エネルギー変換プロセスの開発
反応熱を利用した蓄熱技術は、定置型や輸送型設備との組み合わせによるCO2削減効果にも期待される。

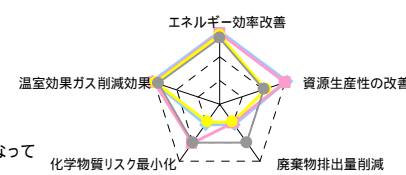
低摩擦表面素材・潤滑剤の開発
動力伝達率向上と作動抵抗低減を通じた省エネ効果は大きく、表面処理技術や潤滑剤開発はトライボロジー・国家プロジェクトで対応されている。潤滑油に関しては省エ

GSC評価

工場や民生で廃棄される低温エネルギーを熱又は電気として利用することで一次エネルギーの相当量が削減できる。石油化学工業では、投入エネルギーのうちの40%が利用困難な排熱として放出されている。

ヒートポンプの重要性が認識されているものの、産業用では高コストがネックとなって食料品冷凍等以外では普及していない。コスト削減の実現、普及拡大が急務。民間の熱需要の約半分を占める空調・給湯分野におけるCO2削減は、2030年までに28%と見込まれているが、ヒートポンプを導入した場合の理論的CO2削減量は70%に達する。

	低品位排熱の蓄熱・輸送・回収材料	低温排熱の熱電変換	化学E変換高密度蓄熱	低摩擦表面潤滑物質
エネルギー効率改善	○	○	○	○
資源生産性の改善	○	○	○	○
廃棄物排出量減	○	○	○	○
化学物質リスク最小化	○	○	○	○
温室効果ガス削減効果	○	○	○	○



技術ロードマップ

	2010年	2020年	2030年	2050年	
分野(WG)	短期課題		中期課題	長期課題	テーマ番号
エネルギー	低品位排熱の蓄熱・輸送・回収材料及びプロセス		各種ヒートポンプ(デシカント組込を含む)の効率化、蓄熱材料開発(固液潜熱回収、高分子顕熱輸送媒体等)		市場導入
	低品位排熱の蓄熱・輸送・回収材料及びプロセス		各種ヒートポンプ(デシカント組込を含む)の効率化、蓄熱材料開発(固液潜熱回収、高分子顕熱輸送媒体等)		市場導入
	低品位排熱の蓄熱・輸送・回収材料及びプロセス		各種ヒートポンプ(デシカント組込を含む)の効率化、蓄熱材料開発(固液潜熱回収、高分子顕熱輸送媒体等)		市場導入
	低品位排熱の蓄熱・輸送・回収材料及びプロセス		各種ヒートポンプ(デシカント組込を含む)の効率化、蓄熱材料開発(固液潜熱回収、高分子顕熱輸送媒体等)		市場導入
	低品位排熱の蓄熱・輸送・回収材料及びプロセス		各種ヒートポンプ(デシカント組込を含む)の効率化、蓄熱材料開発(固液潜熱回収、高分子顕熱輸送媒体等)		市場導入
	低品位排熱の蓄熱・輸送・回収材料及びプロセス		各種ヒートポンプ(デシカント組込を含む)の効率化、蓄熱材料開発(固液潜熱回収、高分子顕熱輸送媒体等)		市場導入

技術優位性

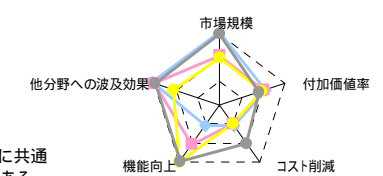
日本の技術の優位性の例
国際的にはIEAがHPP実施協定に基づき主導しており、米国やドイツ、英国、スウェーデン等では、国策としての普及が進んでおり、特に熱電変換材料開発や蓄熱輸送に関しては、ドイツが進んでいる。HPP実施協定には日本も全省庁、NEDO等が参加しており、基礎技術や応用技術では世界的レベルにあるが、実機での普及が遅れている。

日本のヒートポンプ技術は、効率等で世界トップレベルにあり、企業中心に特許取得が進んでいるが、設備化コストが高く、大型化が期待される産業分野で普及が進まない。低コストの実現がブレークスルーの鍵。

真空断熱材や機械設備のエネルギーロス削減のための潤滑材の検討も併行的に行われている。しかし蓄熱材と蓄熱・輸送・放熱システム全体との組み合わせ面での応用研究・開発があまり進んでいない。

産業競争力・創設力評価

	低品位排熱の蓄熱・輸送・回収材料	低温排熱の熱電変換	化学E変換高密度蓄熱	低摩擦表面潤滑物質
市場規模 億円/年	1,000	500	500	1,000
付加価値率				
コスト削減				
機能向上				
他分野への波及効果				



低品位・低温排熱利用、熱電変換、低摩擦化等は、あらゆる産業に共通の問題点であり、これらの問題解決は、全産業に活用可能な技術である。技術開発は、化学を基礎とした素材の開発と設備開発の統合化が初めて実現するとみられるので、化学産業分野を中心としたシステム開発が

3. 再生可能エネルギー

技術の概要

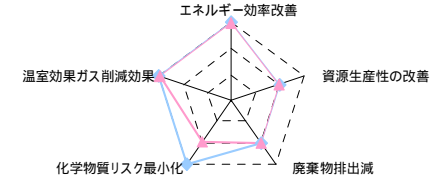
風力発電設備ではタービン翼の軽量化を測りつつ、長期の運用に対する強度や耐久性に配慮した新素材を開発することによって、より高容量で長寿命な設備とすることで、ライフサイクルで考慮する環境負荷やコストの削減を図るとともに景観やデザイン性にも考慮する

薄膜シリコン系の材料によって少ない資源の利用で高効率の太陽電池をつくる。また、太陽電池に必要な高純度金属ケイ素を新しい省資源、省エネプロセスにより製造する。

色素増感型太陽電池の開発や有機半導体型の電池材料が開発されれば、太陽電池をいろいろな形状で、安く製造できるため、用途が増え、再生可能エネルギーの利用が大きく促進されることが考えられる。

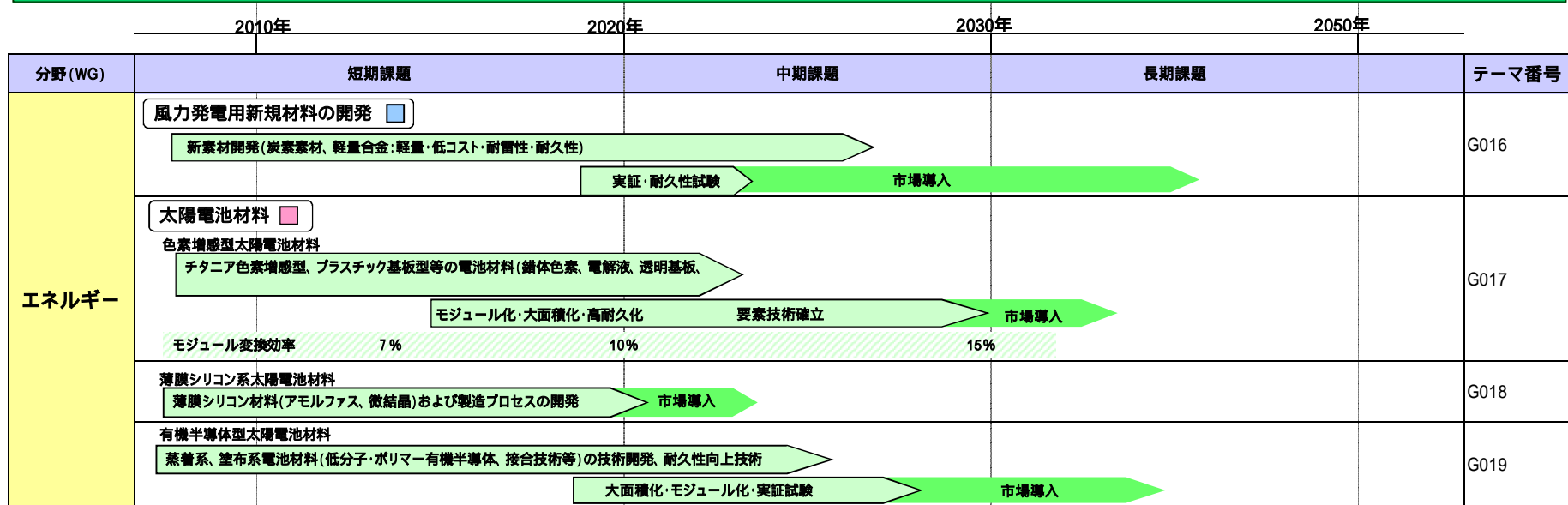
GSC評価

	風力発電用新規材料の開発	太陽電池材料
エネルギー効率改善		
資源生産性の改善		
廃棄物排出減		
化学物質リスク最小化		
温室効果ガス削減効果		



エネルギー分野における再生可能エネルギーはまさにグリーンでサステナブルな理想的な

技術ロードマップ



技術優位性

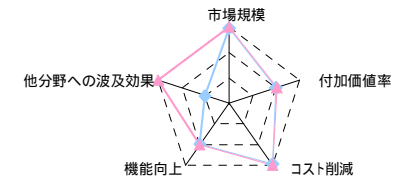
日本の技術の優位性

日本では風力発電に適した土地は国内に少ないが、しかしながら、風力発電設備の技術においては、優れた技術力で世界に先行してきた。

太陽光発電においては、日本企業は長年技術力、シェアの面で優位な立場にあったが、近年、特にドイツなどの環境重要視の国家が政策によって、再生可能エネルギーの重用をおこなうことにより、シェアを伸ばし、シェアの面で日本は劣勢に立たされている。しかし、色素増感型有機半導体、薄膜太陽電池といった新たな太陽電池が生まれつつあるため、これからは技術開発面での優位性に期待したい。またこれらの新しい太陽電池はいずれも低コストでの生産が可能であり、加工もしやすいことから、変換効率の上昇さえ図れば市場での導入は大きく進むことが予想される。

産業競争力・創設力評価

	風力発電用新規材料の開発	太陽電池材料
市場規模(億円/年)	1,000	1,000
付加価値率		
コスト削減		
機能向上		
他分野への波及効果		



国内での再生可能エネルギーのシェアはまだ低く、また国際的には分散電源として途上国等でも潜在需要はひじょうに大きいと思われる国内企業が今までの国際的

4. 高効率水素製造

技術の概要

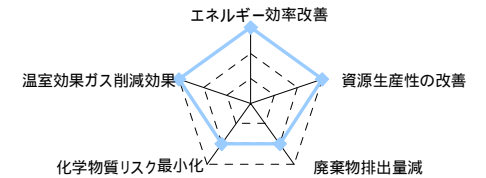
新規水蒸気改質、及び水電気分解等による水素製造技術の開発
 自動車搭載用や定置用の燃料電池用の水素製造技術である。化石燃料や水、バイオマス等を原料として、新規高温水蒸気改質等によって製造される際には、副生するCO₂分離回収処理(CCS)との組み合わせ技術が必要。光触媒、原子炉熱利用等での、CO₂フリーの電力による水電気分解による水素製造法も期待される。
 オンサイトで水素製造とオフサイトでの

技術要素		
製造	改質(オンサイト)	水蒸気改質 オートサーマル
	改質(オフサイト)	水蒸気改質 部分酸化
	水電解	固体高分子水電解 アルカリ水電解 高温水蒸気電解
	再生可能エネルギー	バイオマス・生物利用 太陽・風力エネルギー利用
精製	原子力エネルギー	原子力エネルギー利用
	PSA	
	膜分離	合金膜・非合金膜 高分子膜
	深冷分離	

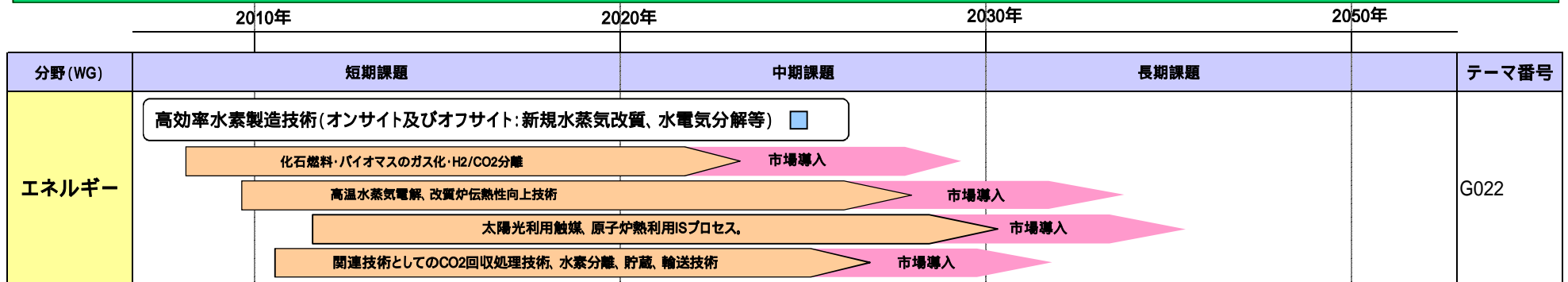
GSC評価

水素製造技術	
エネルギー効率改善	
資源生産性の改善	
廃棄物排出量減	
化学物質リスク最小化	
温室効果ガス削減効果	

製造された水素は、多様な用途・規模をカバーする燃料電池のエネルギー源となる。
 水素は使用段階ではゼロエミッションであり、製造段階での再生可能エネルギー利用や二酸化炭素回収(CCS)との



技術ロードマップ



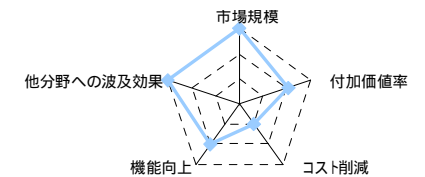
技術優位性

日本では、1970年代のサンシャイン計画以来、1990年代のWe-Netや2008年のCool Earth計画等を通じて、2050年までにCO₂の大幅な削減を目指し、オンサイト、オフサイトでの水素製造・貯蔵・輸送全体の総合システムとして位置づけられ、官民を上げて推進されている。
 米国でもDOE主導で、又欧州連合も、水素製造や水素貯蔵システム開発を、自動車業界や大学等と共同して進めている。カリフォルニア、ロサンゼルス、ニューヨーク、ロンドン、ベルギー等で水素ステーションも(試験的)稼働を始めた。
 日本は原子炉高温ガス・ISプロセスの研究では欧米に先行。欧米も共同研究を進めており、2008年には実用材料製装置による毎時200リッター規模試験を行う計画。
 日本は、廃棄物系バイオマスを利用した非燃焼方式ガス化・発電プロセスに最新の分離技術を組み合わせた選択的水素製造技術の開発についても、諸外国と比較して優位にある。

産業競争力・創設力評価

水素燃料電池は、無尽蔵にある水素を利用できる可能性があり、その完成は民生・産業双方のエネルギー事情を一変させる。
 現時点での安価な水素源は化石燃料にあるがCO₂の副生問題があり、CCSとの組み合わせが必要。
 将来的には、超高温ガスとISプロセスとの組み合わせによるCO₂フリーの

水素製造技術	
市場規模(億円)	1,000
付加価値率	
コスト削減	
機能向上	
他分野への波及効果	



5. 低品位資源利用技術

技術の概要

既存の石油化学はナフサ等を出発原料としているが、本来、化学は広い範囲の炭化水素を出発原料にできる技術体系であり、低品位炭化水素を原料化することで、GSCに沿った新しい展開を目指す。

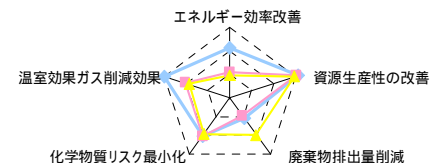
バイオマスや藻類を高効率醗酵菌体、触媒、水熱反応により、DME、エタノール、オレフィン製造等を通じた基幹中間原料の一貫製造プロセスや、セルロース醗酵・触媒分解によるバイオリファイナリーへの統合化を実現する。

低品位(ガス系)化石資源(メタンハイドレート、コールベッドメタン等)の回収・輸送技術開発と併行して、メタンホモロゲーションによるエチレン製造を実現化する。

低品位固液系化石資源であるコンデンセート、重質油、オイルサンド等低品位炭化水素の低温水素化接触分解触媒と併行して、分解生成物の物理吸着・吸収、膜分離、マイクロチャネル伝熱利用等で蒸留分離以外の分離プロセスを開発する。

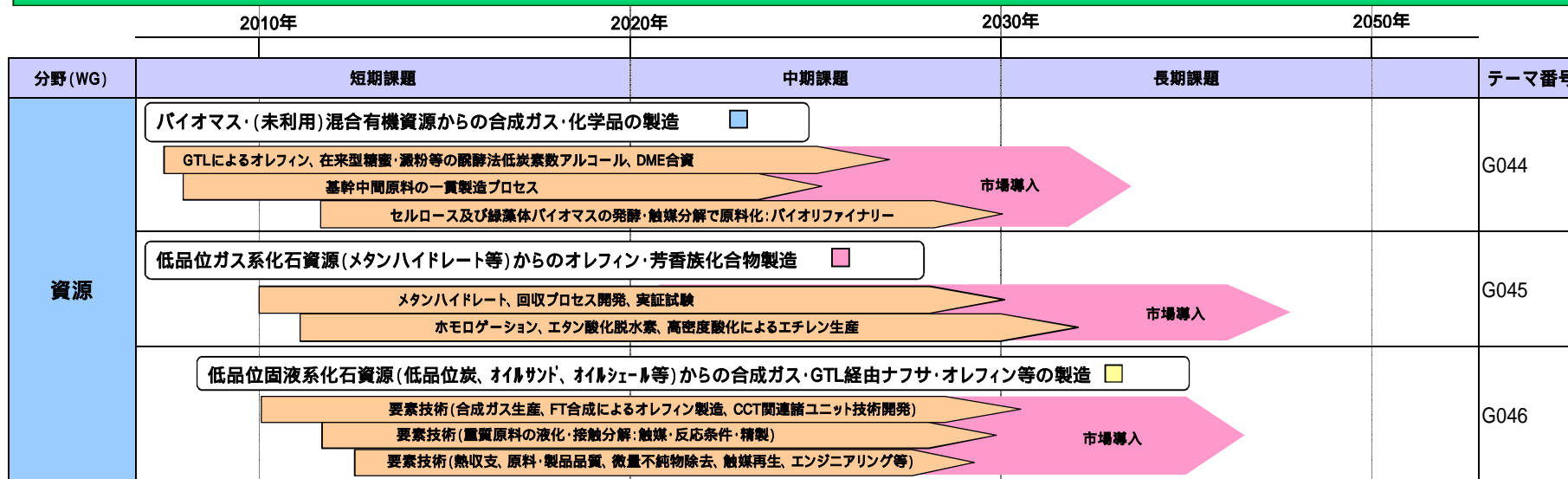
GSC評価

	バイオマス 有機資源からの 醗酵法経由化学品	低品位 化石ガスから 化学品製造	低品位石炭 重質油から 石化原料
エネルギー効率改善			
資源生産性の改善			
廃棄物排出量減			
化学物質リスク最小化			
温室効果ガス削減効果			



バイオマス、メタンハイドレートや重質化石燃料等の低品位原料を、燃料化せず化学原料として利用し、既存化石燃料の原料化から脱却

技術ロードマップ



技術優位性

日本の技術の優位性の例

バイオマス醗酵によるエタノール及びその誘導品は、日本でも技術開発は進んでいるが、事業化の面で海外に遅れをとっている。

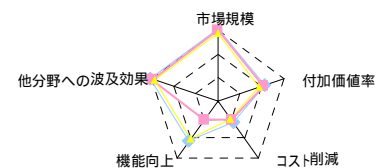
醗酵法ではメタノール、エタノール以外でのn-ブタノール、アセトン等石化基礎原料化技術(第二次大戦中に開発が進んだ)の再開発・高度化は、日本で可能。

非食料・セルロース系バイオマスからのバイオリファイナリーについては、コリネ菌の遺伝子組み換え等による日本の技術も進んでいる。米国も国家プロジェクトと位置づけ、シンガポール、中国や欧米化学企業等との開発競争中。

重質化石燃料の接触分解や高度利用化、石化原料化は、世界的にも今後の進捗が待たれる。

産業競争力・創設力評価

	バイオマス 有機資源からの 醗酵法経由化学品	低品位 化石ガスから 化学品製造	低品位石炭 重質油から 石化原料
市場規模 億円/年	1,000	1,000	1,000
付加価値率			
コスト削減			
機能向上			
他分野への波及効果			



化学分野で低分子量オレフィン等石化原料化による高度利用が

6. 次世代蓄電材料技術

技術の概要

太陽光・風力発電系との連携円滑化や車載、ウェアラブルな電池のための、二次電池の高性能化や電気二重層キャパシタのエネルギー密度向上を図る。現在最も高性能なリチウムイオン電池が、火災・爆発の危険性があるため、リチウムイオン電池自体の安全性を高める方法と、別の材料や方式の電池の開発がテーマとなっている。

超高蓄電型二次電池材料として、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)等が求められる。又、高出力密度汎用型キャパシタとして電気二重層方式の開発が進んでいる。非リチウムイオン電池として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の研究が進んでいる。

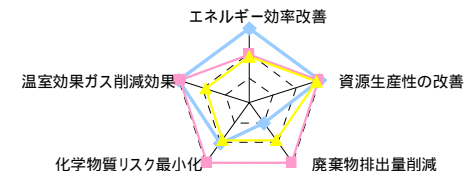
安全性の高い有機ラジカル電池・液循環式レドックス高分子電池材料が、短時間充電、高容量、高出

リチウムイオン電池では、異常発熱対策が進んでいる。

発電量が自然に左右される太陽光や風力発電による電力のキャパシタによる蓄電の組み合わせと、車載やモバイル等、安全で移動可能な発電能力を持つ二次電池は、連携円滑化を通じたグリーン電力供給の鍵となる。

GSC評価

	超高蓄電材料	新電解材料	有機ラジカル・レドックス高分子
エネルギー効率改善			
資源生産性の改善			
廃棄物排出量減			
化学物質リスク最小化			
温室効果ガス削減効果			



技術ロードマップ

分野 (WG)	2010年	2020年	2030年	2050年	テーマ番号	
資源	短期課題		中期課題	長期課題		
	超高蓄電型二次電池材料 ■		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、要素技術	市場導入		G050
	新しい電池(非リチウムイオン系等)材料 ■		次世代二次電池材料の探索・開発 新規イオン電解液、リチウム系を含む新規固体電解質、電解質膜等の開発 大容量・高性能キャパシタ材料の探索・開発	市場導入		G051
	有機ラジカル電池、レドックス高分子材料 ■		発火や爆発リスク無し、短時間充電、高容量、高出力有機/	市場導入		G052

技術優位性

日本の技術の優位性の例

日本の電池技術はモバイル用リチウムイオン電池を中心とした実用化と普及で、欧米を凌駕している。しかし、正極での発火等の安全性の指摘により、日本ではリチウムイオン系電池の車載対応に慎重である。

一方で、米国や中国での車載普及が先行しており、日本での安全面に力点を置いた各種の開発を踏まえた車載方針の進展が期待される。

欧米は新規正極材料等の開発基礎研究が進んでいるが、日本は応用・実用化技術に強い。

リチウムイオン電池の現状世界シェア：日本57%、韓国13%、中国13%、その他13%

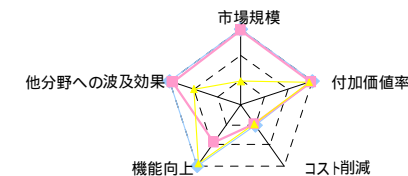
電気二重層キャパシタは、世界に先駆けて日本での開発が進んでいる。

産業競争力・創設力評価

安全性により、車載用電池開発の方向性を模索中の日本勢に対して、GM等の米国メーカーは、従来路線のリチウムイオン電池の早期車載方針を変えていない。

日本での安全高性能な二次電池の開発正否が自動車産業の今後を左右する。そのためには、コスト面の

	超高蓄電材料	新電解材料	有機ラジカル・レドックス高分子
市場規模 億円/年	1000	1000	100
付加価値率			
コスト削減			
機能向上			
他分野への波及効果			



7. 希少金属の有効利用と代替材料技術

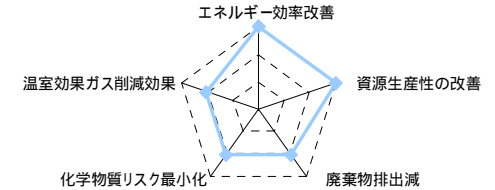
技術の概要

国家的に重要な希少資源の供給が、生産国の政治的事情等で途絶えても、産業の不全、社会の不全に陥らないようにするため代替材料を確保しておく必要がある。国家の安全保障上の弱点を技術で補っていくことは技術立国日本として理想的な姿である。希少元素に限らず、資源の確保は元来少資源国日本が持つ大きな課題であり、これを克服することは、政治的リスクを減らし、諸外国との外交渉力を強めることにもつながり、多方面で日本のプレゼンスを高める結果が期待できる。様々な技術分野で用いられる希少金属はほとんどが、途上国を中心とする諸外国からの輸入であり、価格の乱高下のリスクが常に存在するため、代替物質の開発が急がれる。また現在、希少金属の中でもレアアースのほとんどは、中国で生産されており、世界的に中国に対する依存が高まっているのに加えて、中国の政策として、課税強化や国内の生産規制などで緩やかに輸出を絞りこんだり、間接的な価格調整をおこなう傾向がでてきているため、諸外国からの輸出に頼るその他のレアメタルも含めこれらを代替する技術の開発が急務と

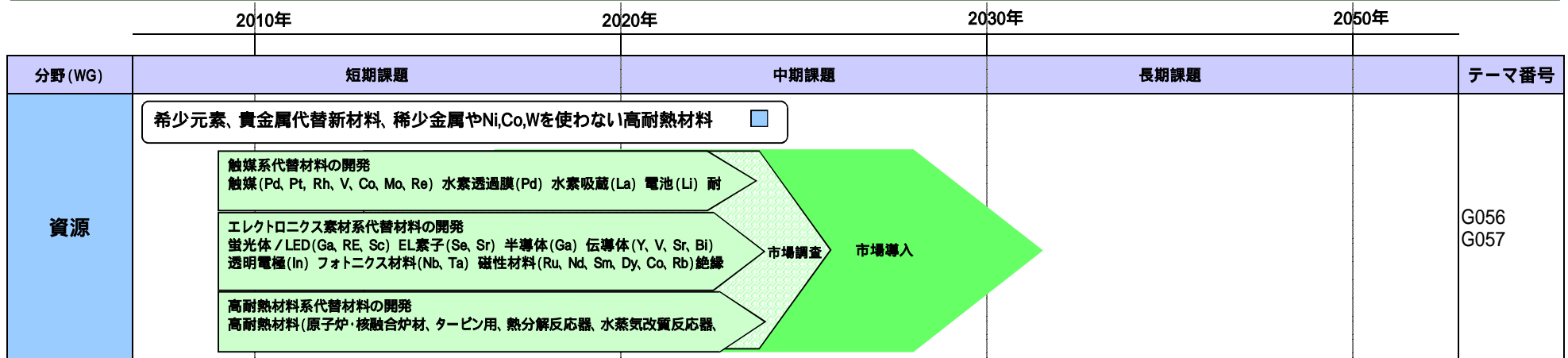
GSC評価

	希少元素、貴金属代替新材料の開発 希少金属やNi,Co,Wを使わない高耐熱材料
エネルギー効率改善	
資源生産性の改善	
廃棄物排出減	
化学物質リスク最小化	
温室効果ガス削減効果	

希少金属の代替は日本の産業、社会にとってのサステナビリティそのものであり、その重要度については、それぞれの評価項目に現れる評価



技術ロードマップ



技術優位性

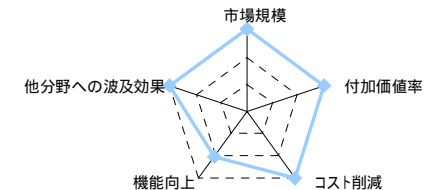
日本の技術の優位性の例

液晶パネルの内部で透明な電極膜を作るために必要なITO(酸化インジウム錫)についてインジウムを亜鉛に代替し、錫をアルミニウムで代替した素材がすでに日本の企業により、開発されている。また希少金属をクラーク数上位の元素から成る物質で代替する研究が数多く進行中である。

産業競争力・創設力評価

	希少元素、貴金属代替新材料の開発 希少金属やNi,Co,Wを使わない高耐熱材料
市場規模 (億円/年)	1,000
付加価値率	
コスト削減	
機能向上	
他分野への波及効果	

希少金属は技術立国の日本において特に需要が高いのに対し、その生産が少ないため代替物質に対する潜在需要が極めて高いこと



8. 非枯渇性資源の化学品・材料化

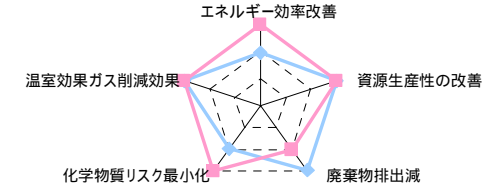
技術の概要

化石資源枯渇への備えとして、今まで有効に使われていなかった天然資源から、様々な化学原料を製造する途を開く。また天然資源には、合成物質にはない特性があり、それを生かすことにより高機能・高性能化が実現できる。例えば天然セルロースはマイクロフィブリルと呼ばれるセルロース分子十数本からなる高結晶性のナノファイバーを構成要素としており、マイクロフィブリル間は無数の水素結合で強固に結合している。この強固な結合が素材転換を困難にしていたが、近年の研究により、触媒酸化処理によって利用の途が開かれつつある。

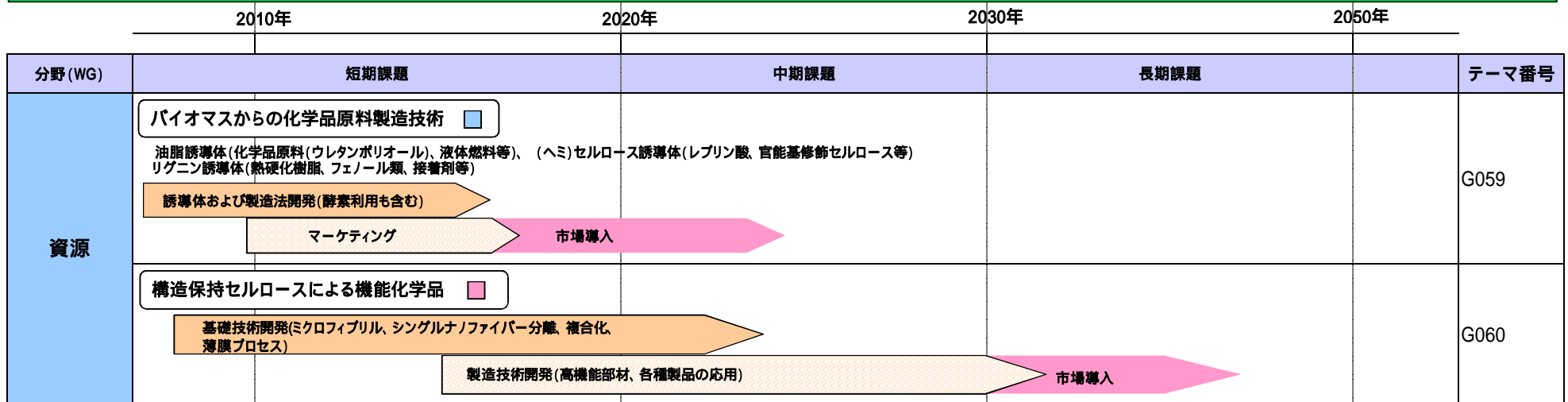
GSC評価

	バイオマスからの化学原料製造技術の開発	構造保持セルロースによる機能化学品
エネルギー効率改善		
資源生産性の改善		
廃棄物排出減		
化学物質リスク最小化		
温室効果ガス削減効果		

天然資源は環境負荷も少なく、実用化できれば化石原料、エネルギーの代替として多大なメリットが期待できる。



技術ロードマップ



技術優位性

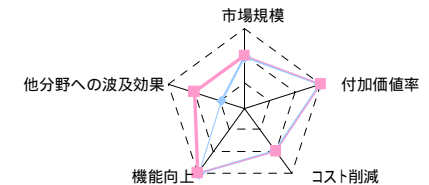
日本の技術の優位性の例

構造保持セルロースによる機能化学品の合成は、まだ実用化には遠いが、TEMPO触媒酸化によりシングルナノファイバーへの変換が確認されており、様々な部材への応用が期待できる。この分野はバイオマス資源の化学原料利用の特許戦略において、欧米諸国に大きく水を開けられている日本にとって、優位を保ち得る数少ない分野のひとつである。

産業競争力・創設力評価

	バイオマスからの化学原料製造技術の開発	構造保持セルロースによる機能化学品
市場規模(億円/年)	500	500
付加価値率		
コスト削減		
機能向上		
他分野への波及効果		

市場規模や他産業への波及効果など産業競争力については不明確なところが大きいですが、脱化石資源



9. 易リサイクル加工用材料・プロセス

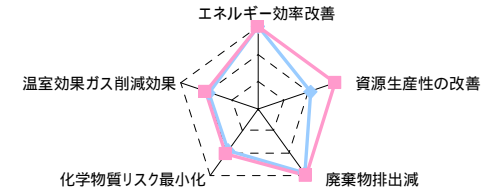
技術の概要

現在包装用等に多く使われる樹脂フィルムは、性能面から多数の材料を組み合わせられており、リサイクルしにくいものとなっている。この問題点を代替材料や易リサイクル材料の技術開発により解決する。
また、他にも多くの製品をリサイクルが容易な素材を用いた設計にすることで、資源循環のよりよいプロセスを実現し、環境負荷低減を計る。

GSC評価

	積層フィルムの代替材料・ 易リサイクル材料の開発	解体性接着材料と 易リサイクル加工法
エネルギー効率改善		
資源生産性の改善		
廃棄物排出減		
化学物質リスク最小化		
温室効果ガス削減効果		

易リサイクル素材を用いることで、新たな資源投入が減少し、また、さらにリサイクルの際のエネルギー効率の良いものへとシフトしていくことにより、リサイクル性を向上させて、



技術ロードマップ

	2010年	2020年	2030年	2050年			
分野 (WG)	短期課題				中期課題	長期課題	テーマ番号
資源	積層フィルムの代替材料・易リサイクル材料 ■ 複合材料の相溶化等による易リサイクル化 樹脂の分子設計による単純組成材料の開発 マーケティング				市場導入		G064
	解体性接着材料と易リサイクル加工法 ■ 要素技術開発(非エポキシ系マトリックス樹脂材料、発泡剤、分解剥離手法等) マーケティング				市場導入		G065

技術優位性

日本の技術の優位性の例

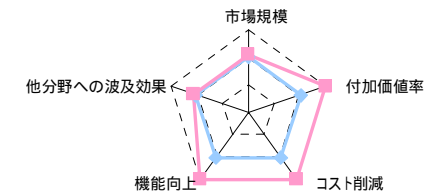
日本において、解体性接着材料の技術はこの10年で着実な進展を遂げてきている。通常の熱による乖離以外に金属箔を利用した電磁誘導加熱によるオーバーオール工法も開発され実用化されている。一方で米国ではエレクトリースと呼ばれる通電により剥離する接着剤が、開発され販売されている。これは50V程度の直流電圧を印加することにより、1分弱の時間で強度が激減し、人力で容易に接合部の解体が可能となるものである。このように他国においても優れた技術が開発されつつあるが、まだまだ新しい分野であるため新方式の技術のブレークスルーも含め日本の技術の優位性がこれからも期待される。

積層フィルムに関しては、ナノレベルのポリマーを積層することによる光伝送システム用の光配線

産業競争力・創設力評価

	積層フィルムの代替材料・ 易リサイクル材料の開発	解体性接着材料と 易リサイクル加工法
市場規模(億円/年)	500	500
付加価値率		
コスト削減		
機能向上		
他分野への波及効果		

解体性接着材料は、住建用だけでなく、LSIチップやICチップなど、エレクトロニクス分にも利用され、マイクロからマクロまで適用分野は幅広い。



10. CO2分離・回収・利用技術

技術の概要

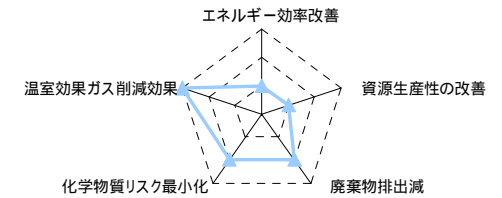
CO₂の分離回収技術は、大規模CO₂発生源(火力発電所等)の排ガスCO₂を分離回収し、それを地中や海中に安定的に貯留隔離し、温暖化を防止する技術であるCCS技術(Carbon dioxide Capture and Storage)の中の貯留に関する技術と並ぶ中核技術の一つであり、化学吸収法、物理吸収法、膜分離法、物理吸着法、深冷分離法などの技術がある。

現時点の技術から見積もった分離回収に関わるコストはCCS全体の6割を超えると考えられ、CCSを実用化する上でもっとも大きな課題と考えられている。またIPCCによれば、CCS付の発電所では10～40%の追加エネルギーが必要とされており、コスト面でも環境面でも課題は大きい。

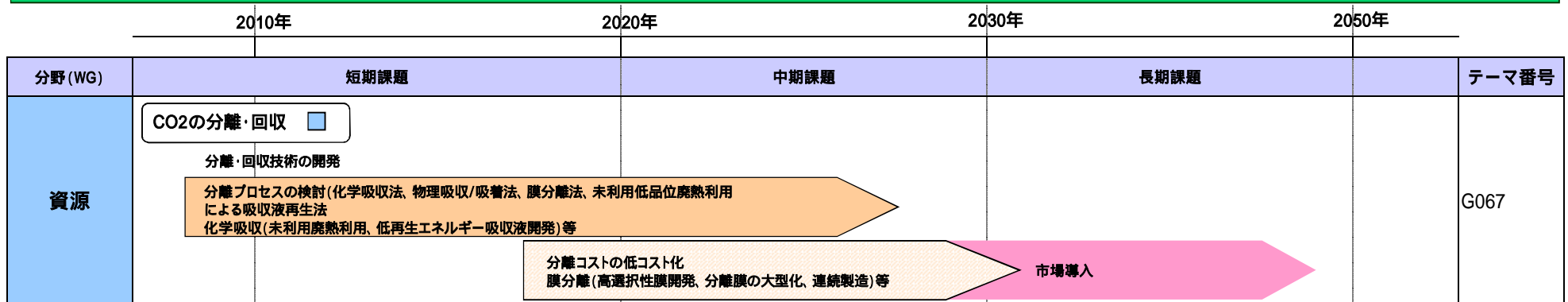
GSC評価

	CO ₂ の分離回収
エネルギー効率改善	
資源生産性の改善	
廃棄物排出減	
化学物質リスク最小化	
温室効果ガス削減効果	

エネルギー効率、資源生産性の改善などの点で課題が残るが温暖化防止効果に関して非常に有益である。



技術ロードマップ



技術優位性

日本の技術の優位性の例

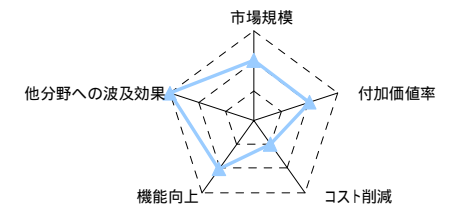
国内では電力会社を中心に1980代末からCO₂回収技術を中心とした基礎研究に取り組んでいる。この中で化学吸収によるCO₂回収の技術では世界トップレベルにあり、発電設備ではないものの、尿素製造プラントでのCO₂回収プラントとして商用化されている。

また分離膜を用いた回収法でも加圧・加湿環境でのCO₂選択性について、研究室レベルではあるものの世界最高水準を有しており、これからの実用化に対し強い期待のもてる分野である。

産業競争力・創設力評価

	CO ₂ の分離回収
市場規模(億円/年)	500
付加価値率	
コスト削減	
機能向上	
他分野への波及効果	

環境対策コスト増加により、コスト削減効果はむしろマイナスであるが、分離膜技術やその他の分離技術の技術開発の他分野へ



11. ハザード管理されたハロゲン製品

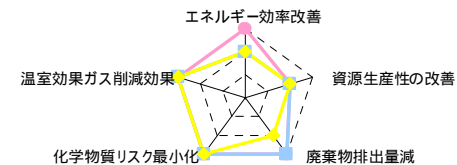
技術の概要

ハロゲンは持続的社會を実現するため今後とも重要な元素である。一方で、ハロゲン化合物には有害性のあるものが多くあるとか、不純物として機能商品（IT関連等）の性能に悪影響をおよぼしたりすることから、適正にハロゲンに由来するハザードを管理することが必要である。そのための技術としては以下のものをあげる。

- 有害安定剤を使用しないマテリアルリサイクルが可能な塩化ビニール樹脂の開発
- ハロゲン酸化を過酸化水素酸化に変えることによる不純物としてハロゲンを含まない高機能材料の製造プロセス
- ジクロロメタン代替としての超臨界洗浄プロセス「環境負荷が小さい加工プロセス」ロードマップで記述した技術内容となる

GSC評価

	再資源化可能な塩化ビニール樹脂	過酸化水素酸化の利用	ジクロロメタン代替
エネルギー効率改善			
資源生産性の改善			
廃棄物排出量減			
化学物質リスク最小化			
温室効果ガス削減効果			



ハロゲンを使うプロセスや製品のハザード管理により大気への

技術ロードマップ

分野 (WG)	2010年		2020年		2030年		2050年		テーマ番号
	短期課題		中期課題		長期課題				
環境	クリーン再資源化可能な塩化ビニール樹脂 ■		再資源化可能な塩化ビニール樹脂の開発		リサイクルプロセス開発		市場導入		G087
	過酸化水素酸化を利用した高機能材料製造技術 ■		ノンハロ材料:対象の抽出		ノンハロ材料:製造技術開発		ノンハロ材料:マーケティング(不純物とコスト)		
	市場導入		ジクロロメタン代替としての機能水 ■		機能水の開発		市場開発		G089
市場導入									

技術優位性

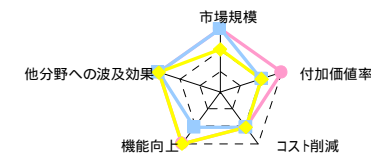
大量に使われている有用な塩化ビニール樹脂の再資源化は、環境及び資源的に重要な課題である。一方で安定剤として含まれている鉛(Pb)を使用しなくなると、樹脂の回収再使用が容易になることから資源的にも環境的にも大いなる効果がある。

我が国の主要産業であるIT関連部材において、品質・性能に悪影響を与えるハロゲンの管理はハザード削減及び製品の機能発現のための技術として産業界に蓄積されてきた。今後とも、世界的に規制が強くなると考えられるハロゲンの管理技術を培うことは、益々重要になると思われる。

有害ではあるが有用な溶剤であるジクロロメタンについては、用途によっては代替できない場合も多いことから、これにかわる溶媒や洗浄プロセスをもつことは産業競争力維持のためにも重要である。

産業競争力・創設力評価

	再資源化可能な塩化ビニール樹脂	過酸化水素酸化の利用	ジクロロメタン代替
市場規模(億円/年)	1,000	1,000	500
付加価値率			
コスト削減			
機能向上			
他分野への波及効果			



ハロゲンプロセスおよびその製品は優れた機能性により多くの産業分野で使われている。一方でそれらが持つハザードを管理することは産業育成面からも

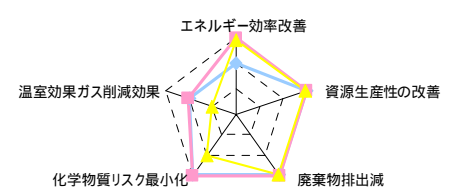
12. 製造工程廃棄物・副生物の大幅削減

技術の概要

触媒技術や新たな化学反応経路の開発によって、反応プロセスのシンプル化や、反応の選択性の向上を実現し、副生物や廃棄物を大きく削減することが期待されている。
 例として挙げられた技術には以下のような効果がある。
 これまで使い捨てであった触媒を繰り返し利用でき、廃酸・廃アルカリの発生を減らせる。
 何工程も経ていた合成プロセスを単体化し、エネルギー使用量や副産物を減らす。また、改良プロセスにより種々の副資材の使用をやめ、廃棄物を減らす。
 触媒上の活性点の不均一性が大きい固体触媒について、立体制御等により多孔体表面の規則性を高め、反応の選択性を高めることにより多くの副生物を削減することができる。

GSC評価

	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	形状選択性を有するナノ空間触媒による新規合成プロセス開発
エネルギー効率改善			
資源生産性の改善			
廃棄物排出減			
化学物質リスク最小化			
温室効果ガス削減効果			



エネルギー効率改善

資源生産性の改善

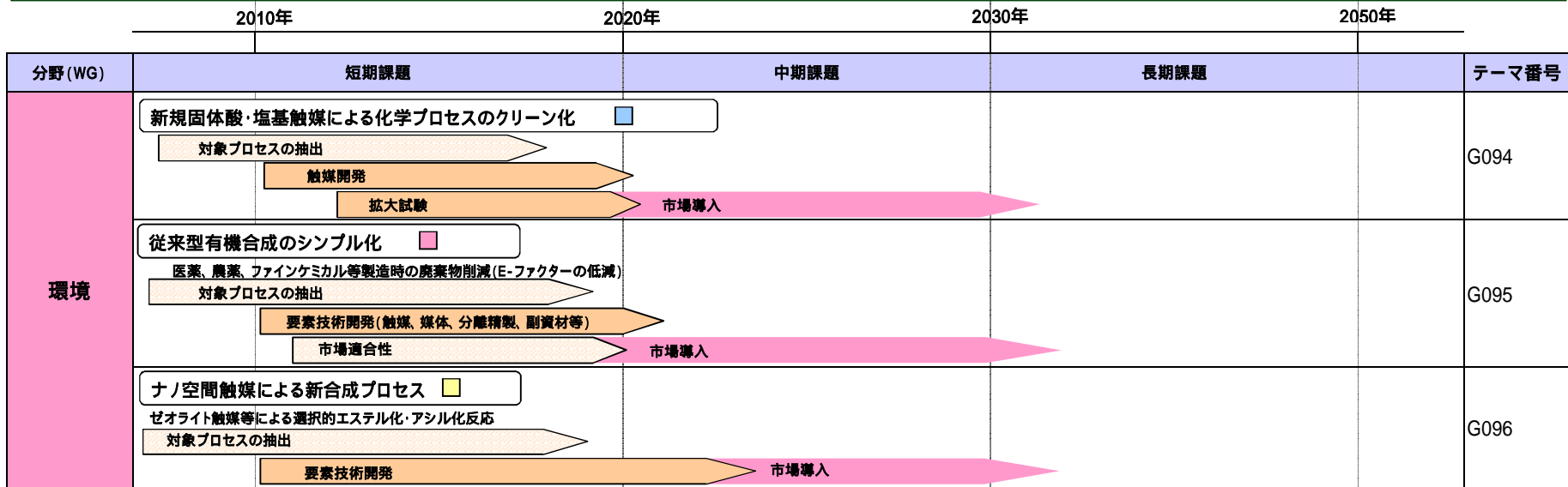
廃棄物排出減

化学物質リスク最小化

温室効果ガス削減効果

化学プロセスの技術革新や技術向上によって、副生物、廃棄物が大きく削減されることが期待されるだけでなく、資源生産性の向上、反応経路のシンプル化による

技術ロードマップ



技術優位性

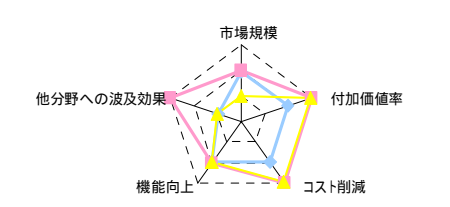
日本の技術の優位性の例

- 気相法カプロラクタム製造
- ヘテロポリ酸法MMA製造(イソブチレン直接酸化法MMA製造)
- L-メントールの製造プロセスにおける触媒の不斉合成

などの世界的に優位な製造法の開発実績がある。

産業競争力・創設力評価

	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	形状選択性を有するナノ空間触媒による新規合成プロセス開発
市場規模(億円/年)	500	500	100
付加価値率			
コスト削減			
機能向上			
他分野への波及効果			



市場規模

付加価値率

コスト削減

機能向上

他分野への波及効果

廃棄物の大幅削減によるコスト削減が可能となり、産業競争力の向上が期待される。また市場規模の

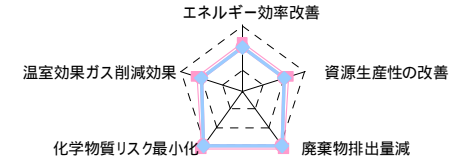
13. 環境負荷が小さい製品

技術の概要

有害な添加物を含まずに基本的にCとHからなるポリオレフィンの分子設計とそれを製造するための触媒、プロセスやモノマーの開発を実施する。ここで製造されるポリオレフィンは、高弾性ゴムをはじめ種々の現行機能性材料代替となるが、有害添加物が大幅に削減されている。したがって、リサイクルが容易であり、また燃やしても有害ガスの発生が削減され環境負荷の低減が可能となる。

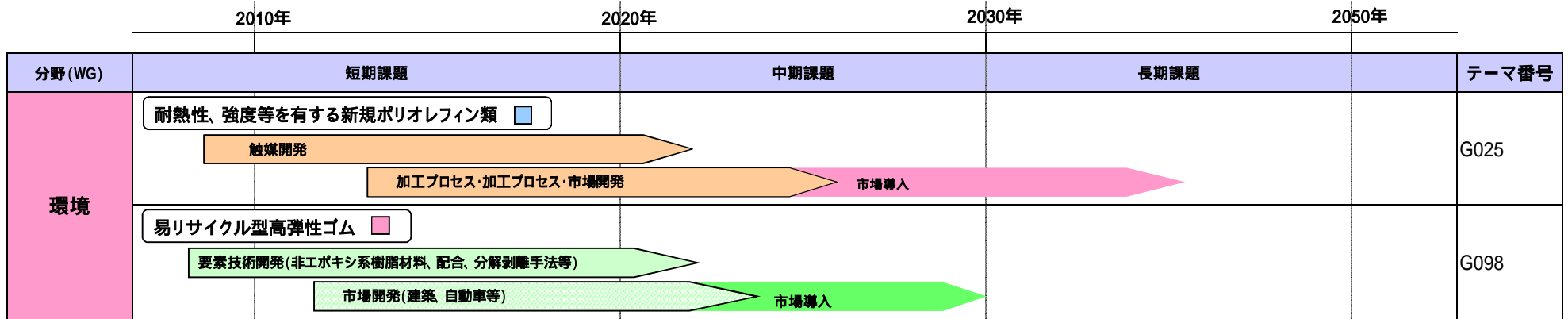
GSC評価

	新規ポリオレフィン	高弾性ゴム
エネルギー効率改善		
資源生産性の改善		
廃棄物排出量減		
化学物質リスク最小化		
温室効果ガス削減効果		



添加物が削減されることにより、リサイクルが容易となり廃棄物の排出量が削減される。また有害物の環境への

技術ロードマップ

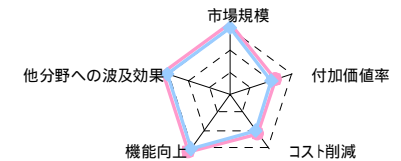


技術優位性

我が国は、高分子化学の学問領域においては、その各分野において世界のトップレベルの研究成果をあげている多くの研究者を有しておりポテンシャルは高い。一方産業界における応用・開発研究においてエンジニアリングプラスチック、生分解性ポリマーなどについては欧米にひけをとらないが基礎研究については必ずしも強いとはいえない。従って、添加物を削減し、分子設計、精密重合技術により各種製品本来の性能を発揮させるためにはナノテクノロジー、触媒設計、プロセス開発などに関する産官学横断的な取り組みが必要である。

産業競争力・創設力評価

	新規ポリオレフィン	高弾性ゴム
市場規模(億円/年)	1,000	1,000
付加価値率		
コスト削減		
機能向上		
他分野への波及効果		



汎用の機能性化学品を環境負荷が小さい代替品に移行することになることから大きな市場規模と波及効果が期待できる

14. 環境負荷が小さい加工プロセス

技術の概要

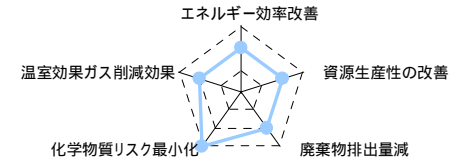
超臨界流体は、液体に近い密度をもち、油などの非極性物質の溶解性が大きく、一方気体のように粘度が低く、拡散性に優れ、物質移動が容易で、これを利用するのが超臨界流体洗浄法である。本洗浄法の特徴としては下記のとおりである。

作業や環境に優しい

微細、複雑な構造物の溝や細孔の汚れも容易に除去できる
水や熱を使うことがなく、洗浄後の乾燥工程が不要である
処理時間が短く、コスト安である

GSC評価

	亜臨界、超臨界流体を利用した高度洗浄技術
エネルギー効率改善	
資源生産性の改善	
廃棄物排出量減	
化学物質リスク最小化	
温室効果ガス削減効果	



精密洗浄に使われてきた塩素系溶媒やフッ素系溶媒の代替により環境排出が大幅に削減

技術ロードマップ

分野 (WG)	2010年	2020年	2030年	2050年	テーマ番号
環境	短期課題		中期課題	長期課題	G102
	超臨界流体を利用した表面処理技術 <input type="checkbox"/>				
	1.精密洗浄技術(IC基板等)、フィルター再生・活性炭再生技術		市場導入		
	1.最適操作条件探索、装置化技術 2.超純水リンス代替、レジスト剥離、レジスト無機化、超臨界乾燥・脱水、薄膜配線化				

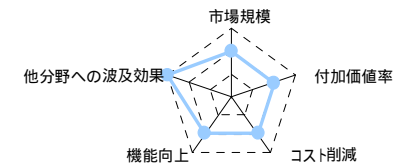
技術優位性

半導体洗浄技術は変革期を迎えている。多品種少量生産化、ウエーハの大口径化、回路パターンの微細化、配線の多層化などに対応するため新たな洗浄法が必要である一方で、フロン系溶剤に変わる代替溶剤の使用による、地球環境に対する負荷低減も強く求められている。

半導体製造に欠かせない洗浄技術は、これまで日本がリードしてきた分野ではあるが、今後とも重要度を増すであろう新しい洗浄技術である超臨界流体の利用は環境および産業面からの期待が大きい。

産業競争力・創設力評価

	亜臨界、超臨界流体を利用した高度洗浄技術
市場規模(億円/年)	500
付加価値率	
コスト削減	
機能向上	
他分野への波及効果	



半導体分野における技術開発が先行しているが他の分野における工業用

15. 革新的燃焼による大気環境の保全

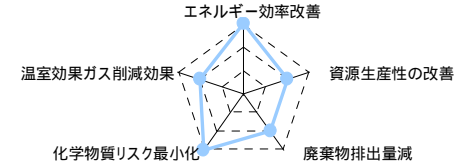
技術の概要

燃焼生成物による大気環境負荷の最小化のためには排ガス除害設備等を設けるEOP対策とクリーン燃料の使用や燃焼を清浄化するIP対策がある。ここで取り上げる技術は水素以外の重質残油からのクリーン燃料への転換および環境負荷物の生成を最小化する清浄燃焼技術の開発である。具体的な技術項目例は以下のとおりである。

- 重質残油の転換触媒及びプロセスの開発
- 清浄燃焼技術の開発
- ・燃焼の高度化、複合化技術
- ・高効率加熱化技術
- ・エクセルギー再生技術

GSC評価

	クリーン燃料・清浄燃焼技術
エネルギー効率改善	
資源生産性の改善	
廃棄物排出量減	
化学物質リスク最小化	
温室効果ガス削減効果	



燃料のクリーン化、燃焼プロセスの高度化、効率化により大気への環境負荷物質の排出抑制・削減が

技術ロードマップ

	2010年	2020年	2030年	2050年	テーマ番号		
分野 (WG)	短期課題				中期課題	長期課題	
環境	クリーン燃料(水素以外)・清浄燃焼技術の開発						G105
	クリーン燃料転換触媒・清浄燃焼技術の開発						
	実用化プロセス開発				市場導入		

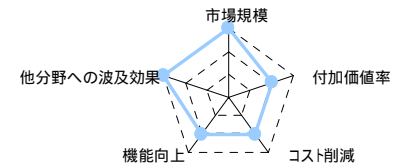
技術優位性

重質残油のクリーン燃料への転換については、国プロとして実施され世界最高水準のものを見込んでいる。実用化への開発が今後の課題である。

清浄燃焼を実現することは省エネおよび産業力強化にもつながるものである。一方で、我が国の省エネ技術は世界でもトップレベルであるがその中核をなす技術が燃焼技術である。省エネ戦略2008にも取り上げられているように、将来にわたり国家戦略として今後とも取り組むべき技術である。

産業競争力・創設力評価

	クリーン燃料・清浄燃焼技術
市場規模(億円/年)	1,000
付加価値率	
コスト削減	
機能向上	
他分野への波及効果	



燃料のクリーン化、エネルギー効率向上によるコスト削減で産業競争力の強化が可能となり、また燃焼技術を適用する

16. 日用品の快適性向上と低消費化

技術の概要

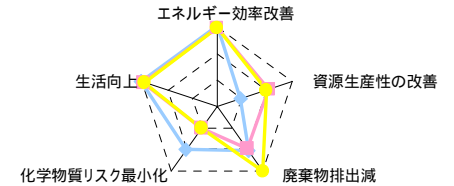
日常的に使用されている衣料品や家電製品等について、生活の質(QOL)を向上させる快適性を保ち、かつ長期間の使用を可能にして消費を抑えることを目指し、その素材や部品、製品を開発する。

健康的で高機能な衣料材料、医療品
 好感触で通気・保温性に富みアレルギー源のない素材。
 強度・柔軟性の高い洗濯容易な衣料品。
 時代の流れに応じた光機能保有材料
 ユビキタス情報発信システムのための透明で長寿命な高速応答性を持つ材料。
 生活様式の変化や高齢化に対応できる軽量化家具や家電
 軽量で安定性や操作性の高い小型家具。

GSC評価

	高機能繊維材料	光機能プラスチック・軽量化材料	半導体光源材料・省電力照明
エネルギー効率改善			
資源生産性の改善			
廃棄物排出減			
化学物質リスク最小化			
生活向上			

高付加価値日用品材料の供給により、「モノの豊かさ」から「心の豊かさ」への生活意識の変化に伴った快適性・生活の向上が見込まれる。また、材料の軽量化や照明の省電力から省エネルギー



技術ロードマップ

	2010年	2020年	2030年	2050年	テーマ番号
生活	短期課題		中期課題	長期課題	
	高機能繊維材料 ■				G116
	汎用繊維の高性能化、ナノ繊維・ナノ複合化繊維の開発		市場導入		
	光機能(材料透明化、低減衰、高速応答等)プラスチック、軽量化材料 ■				G027, G117
	改良(表面特性・強度・耐久性、軽量化)		市場導入		
	材料開発(新素材開発・複合化による特性向上等)				
	性能 - コストバランス				
	半導体光源材料、省電力照明 ■				G035
	次世代LED、有機EL、無機EL等の材料検討・開発(リン光材料、正孔・電子輸送材料、酸化物系新材料、電極材、封止剤、新規半導体探索等)		市場導入		
	製造プロセス技術開発				

技術優位性

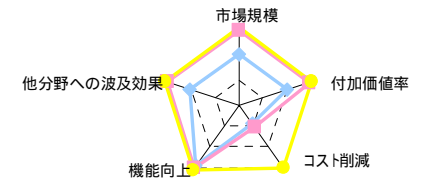
・我が国は、質の高い製品を作る技術力、製造事業者単独で最終製品を完成させる開発力、成熟した生活者による高い品質管理技術を保有している。

・消費電力が低く輝度の大きなLEDの技術では、窒化ガリウムによる青色・緑色LEDが日本で開発された。さらに白色LEDも開発され、世界に先んじた開発力を持つ。

産業競争力・創設力評価

	高機能繊維材料	光機能プラスチック・軽量化材料	半導体光源材料・省電力照明
市場規模(億円/年)	500	1,000	1,000
付加価値率			
コスト削減			
機能向上			
他分野への波及効果			

安価な労働力を保有したアジア諸国の追い上げや欧州の高級品の世界的な展開により、日本の日用品の国内シェアは低減し、輸入が増加する傾向にある。技術的には欧州と同水準にあり、



17. 食の安全と量の確保

技術の概要

持続可能な社会を目指し、食品の安全性と消費者の信頼性の確保、及び食料の量の確保による食糧自給率向上が重要視される中、特に食品の鮮度の持続化、生産性の大幅な向上を図るための材料や手法の開発が望まれている。

食品の安全性・信頼性の向上

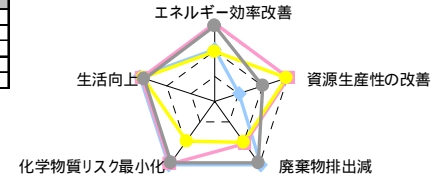
包装材料の高耐熱性、高ガスバリア性等による高機能化により、食品の鮮度・安全性を保持した保存材料や鮮度表示資材を開発する。

食糧生産性の向上

農作物の病気、害虫被害の防止や肥料供給を備えた高収量植物工場システム、農業資材の開発により、食料供給を増大・安定化し省力化する。また、ゲノム科学応用により、劣悪環境高生産性の作物の

GSC評価

	高機能性食品包材	システム農業資材	耐塩・耐寒性穀物	水分・養分長期保存材料
エネルギー効率改善				
資源生産性の改善				
廃棄物排出減				
化学物質リスク最小化				
生活向上				



食品の鮮度保持による廃棄物減や、システム農業や水分・養分長期保存による省力化・量産が見込まれる。

技術ロードマップ

分野 (WG)	2010年	2020年	2030年	2050年	テーマ番号
生活	短期課題		中期課題	長期課題	
	高機能性食品包材 <input type="checkbox"/> 保冷・酸化防止・脱水・保湿・遮光・密封・異常検知 センサー・鮮度表示等の機能を備えた材料開発 マーケティング → 市場導入				G119
	システム農業資材(肥料、農業を含む) <input type="checkbox"/> 人工光源、肥料、農業、などの開発 → 市場導入				G120
	耐塩・耐寒性穀物 <input type="checkbox"/> ゲノム育種の開発と実証、ムギ・イネの有用遺伝子探索、 遺伝子解析技術開発 安全性評価、遺伝子組み換え技術の利用と汎用化 → マーケティング → 市場導入				G121
	水分・養分長期保持材料 <input type="checkbox"/> 高性能吸水性材料などの開発 → 市場導入				G122

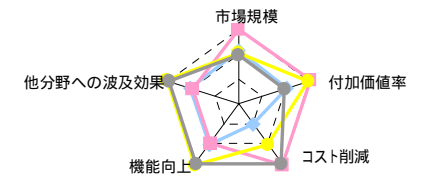
技術優位性

日本は高度なセンサー技術によるモニタリング技術開発に優位性を持つ。半導体デバイス技術に立脚したテラヘルツパルス発生技術においては、日本独自で世界最大の材料分光データベースを保持しており、食品混入物検査分野等で応用可能とされている。

日本では、各地の気候に合わせて古くから品種改良技術が培われてきた。また、耐塩・耐寒性に係わる遺伝子解析及び機能制御の技術開発は、日本でシロイヌナズナをモデル植物として世界に先駆けて発見・開発された。世界全体では食料不足が深刻な問題になると予測されるが、これらの日本の技術は寒冷地や塩性土壌地域における食糧増産に大いに貢献できる研究レベルである。また、イネゲノム・機

産業競争力・創設力評価

	高機能性食品包材	システム農業資材	耐塩・耐寒性穀物	水分・養分長期保存材料
市場規模(億円/年)	500	1,000	500	500
付加価値率				
コスト削減				
機能向上				
他分野への波及効果				



日本の食糧自給率は低下しているが、戦略的政策により、

18. 快適な省資源型ロングライフ住宅

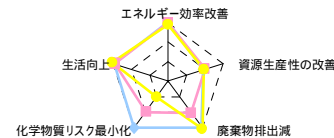
技術の概要

住宅の長寿命化による所要資源や廃棄物の削減と快適性の向上を目指す。超寿命・資源循環型住宅は、高耐久性の構造躯体と改装可能な居住空間で構成され、居住者に合わせて間取りや内装・外装の装備を更新して長期間使用を可能とする。

住宅が200年の間保たれるような、材料・構法の工夫や適切な維持管理技術
風通しや光など屋外の自然との共有感や、保湿・保温性を向上した快適な住宅機能
住宅における省エネルギー化に対応する高効率太陽電池材料
発光効率や高演色性を有した照明技術や、従来と原理の異なる新しい照明システム

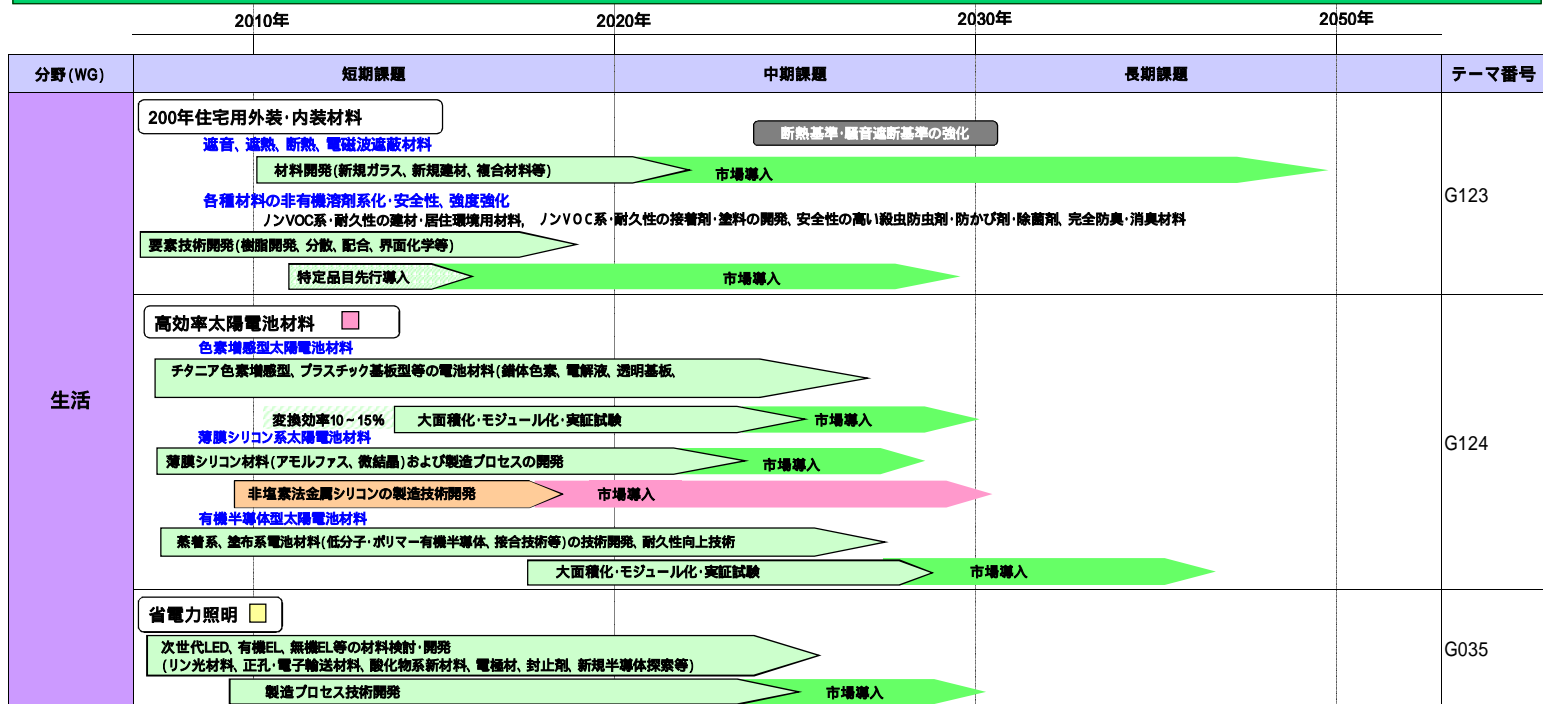
GSC評価

	200年住宅用外装・内装材料	高効率太陽電池材料	省電力照明
エネルギー効率改善			
資源生産性の改善			
廃棄物排出減			
化学物質リスクの最小化			
生活上			



建設時の資源消費の削減や、住宅使用時の省エネルギー・性向上が期待される。また、遮音・遮熱・断熱や内装・外装材料の安全性強化により住宅の快適性が向上する。

技術ロードマップ



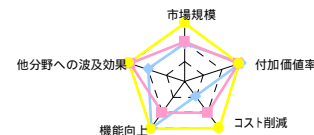
技術優位性

木造の日本住宅では、滅失住宅の平均築後年数は約30年で、米国の55年、イギリスの77年と比較して耐久性が短い。しかし、伝統的な日本建築は、柱や梁を一本の木材の組み合わせで構成して耐久性を高め、再利用を図るといった技術思想を持っており、長期耐久住宅の構築に有利である。

太陽電池開発は、1974年のサンシャイン計画に始まり、効率向上、低コスト化、導入普及施策が進められ、生産量、累積導入量は世界トップレベルにある。

産業競争力・創設力評価

	200年住宅用外装・内装材料	高効率太陽電池材料	省電力照明
市場規模(億円/年)	500	500	1000
付加価値率			
コスト削減			
機能向上			
他分野への波及効果			



国内市場を中心として、住宅の快適性を求めるニーズが高まっている。また、開発された技術はビルや車両などの分野への波及効果が期待できる。

19. 容易で安全な医療・介護と身体機能補助

技術の概要

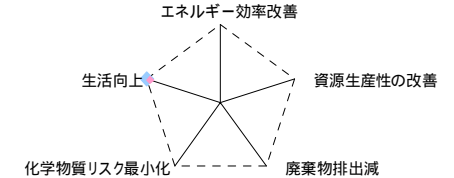
高齢まで健康を維持するための自立支援、介助・介護、訓練などに資する、医療用の材料やシステムの開発。要介護者と介護提供者の両者を同時支援する機器やその材料を提供する。

食事支援ロボット、起床・移動支援ロボット、排泄支援ロボット、歩行支援スーツ等の介護ロボットに装備する感情理解・触感・臭いなどのセンサーの材料やソフトの開発。

身体機能の代替・修復を目的とし、治療部位に適合した2次元、3次元の形成性や身体への親和同化性に優れた、本来の人体により近い身体補助材料、システムの開発。

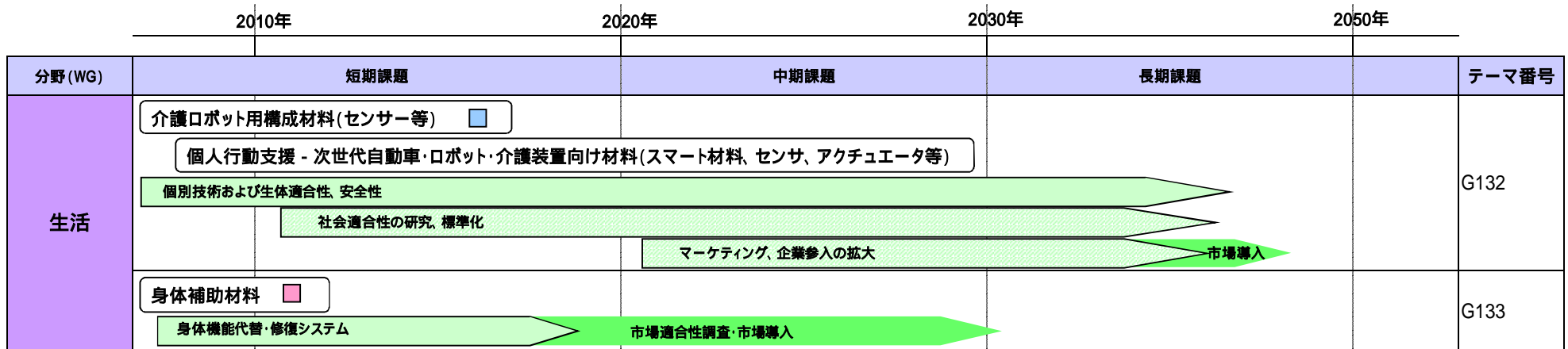
GSC評価

	介護ロボット用構成材料	身体補助材料の開発
エネルギー効率改善		
資源生産性の改善		
廃棄物排出減		
化学物質リスク最小化		
生活向上		



高齢者、障害者の介護負担の軽減、ハンディキャップの補完等により良質で効率的な医療環境が整備され、生活の質の向上、健康寿命の延伸が可能となる。医療現場や在宅での継続的利用が可能が高い

技術ロードマップ



技術優位性

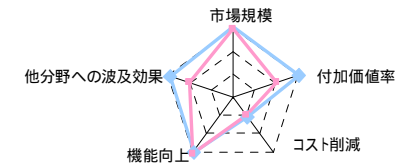
産業用ロボットや宇宙ロボットにおいて世界を先んじる強みを持ち、高度なロボット製造技術を持している。また、医療用ロボット技術として重要なヒューマノイド技術や汎用化(モジュール化)に向けた技術でも世界をリードしている。この技術に培われたメカトロニクス技術、生産技術等をベースとし、さらに日本が持つモバイル等のネットワーク技術を融合することにより、医療用ロボット技術の更なる高度化が進展すると期待される。

脳とのインターフェイスに必要な赤外光技術レーザー技術、マイクロチップのセンサー技術は、世界トップレベルの技術。

無痛性除細動を実現する停電力除細動技術は、激しい開発競争を勝ち抜き世界に先駆けて開発された。人工心臓システムにおける回転軸のない血液ポンプ技術は、消費電力の少なさ、耐久性、安定性

産業競争力・創設力評価

	介護ロボット用構成材料	身体補助材料の開発
市場規模(億円/年)	1,000	1,000
付加価値率		
コスト削減		
機能向上		
他分野への波及効果		



高齢化社会に向け市場規模は大きく、付加価値も高い、産業用ロボットでは稼働台数、生産台数において世界のトップレベルであり、医療用分

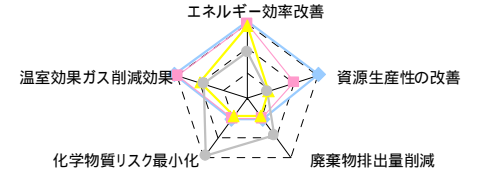
20. 輸送システム(低環境負荷・高利便性)

技術の概要

各種のGSC向け素材とプロセスを自動車等輸送機関に統合化し、安全・快適な移動空間を実現する
 自動車搭載用燃料電池・次世代リチウムイオン電池材料を探索し、現時点で安全性が指摘されるリチウムイオン電池の欠点を補う高性能電池系駆動システムを開発し、脱化石燃料エンジンを実現する。
 金属系構造材を代替する高強度・軽量新規コンポジット樹脂材料を使用し、省エネを図ると同時に、遮音、断熱、紫外線吸収、アレルギー吸収、水性重塗装塗料等の高機能材料を提供する。
 無騒音舗装材料、低転がり摩擦性タイヤ材料及び低機械摩擦材料により省エネと対騒音公害を図る。
 暗視対応色素材料、液晶材料、生体情報センサー用材料等を開発し、超高速移動体向け通信技術を組み合わせた交通制御システム、安全運転・事故防止システムを構築する

GSC評価

	次世代リチウムイオン等電池材料	高強度・軽量高機能コンポジット樹脂材料	低摩擦材料	高度交通制御システム
エネルギー効率改善				
資源生産性の改善				
廃棄物排出量削減				
化学物質リスク最小化				
温室効果ガス削減効果				



GSCを目的として交通機関に適用される技術(主に部材供給)は、交通機関以外の産業で利用される各種技術と同様なものが複合的に利用されるシステム体系である。
 動力用電池や軽量化、塗料高度化、摩擦削減に関する技術は、

技術ロードマップ

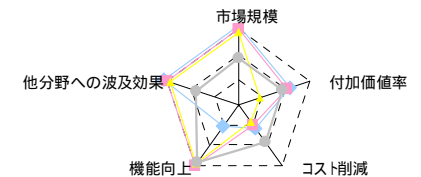
分野(WG)	2010年	2020年	2030年	2050年	テーマ番号
共通	短期課題		中期課題	長期課題	
	自動車搭載用燃料電池・次世代リチウムイオン電池等による新規駆動源の開発		安全性を高めたリチウムイオン電池、燃料電池、キャパシタ等による移動型駆動動力	市場導入	G145
	高強度・軽量、高機能新規コンポジット樹脂材料の開発		CO2由来ポリカーボ、ウレタン、カーボンファイバー等のコンポジット利用・易リサイクル可能な高機能樹脂	市場導入	G146
	無騒音舗装材料、低転がり摩擦性タイヤ材料、低機械摩擦材料		微細表面構造制御、トライボロジーによる摩擦制御	市場導入	G147
	高度交通制御・安全運転/事故防止システム向け 高感度センサー材料		超高速移動体向け通信材料と、暗視対応色素材料、液晶材料開発、生体情報センサーの組み合わせ	市場導入	G148

技術優位性

日本の技術の優位性の例
 次世代リチウムイオン電池、燃料電池等、ガソリンやディーゼル油代替動力の開発は、日本が最も進んでいるといえる。
 自動車・バス・トラック等の軽量化についても、日本車メーカーの技術は高い。但し、航空機自体の軽量化についての応用は欧米系航空機会社が進んでいるといえるが、それらの軽量化部材等の多くが日本の企業から供給されている。
 遮熱・紫外線・電磁波遮蔽、遮音・路面改良等も、日本の材料や組み立て技術は進んでいる。
 交通制御、安全運転・事故防止システムは、研究段階。

産業競争力・創設力評価

	次世代リチウムイオン等電池材料	高強度・軽量高機能コンポジット樹脂材料	低摩擦材料	高度交通制御システム
市場規模 億円/年	1000	1000	1000	500
付加価値率				
コスト削減				
機能向上				
他分野への波及効果				



交通機関に利用されるGSC関連技術・部材の供給は、その他の多くの産業に対する技術・部材供給と同様または関連の深いものである。産業間の競合と

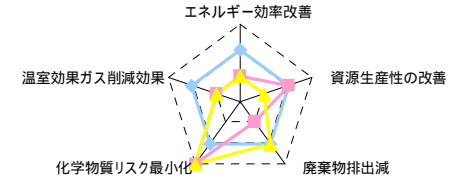
21. 水(良質な水資源確保システム)

技術の概要

電子部品製造に使われるなど、産業上重要な超純水を効率よく作る技術や処理しにくい排水の効率よい処理方法を開発する。
 生活用浄水技術の分野では、今後、世界的に水不足が顕著となるが、浄水技術は日本の強みであり、世界に向けてリーダーシップを取ることが期待される。
 水の循環を考えると、浄水側に加えて、排水側の浄化技術も重要となる。有害物を高濃縮し回収したり、リサイクルするシステムが求められている。

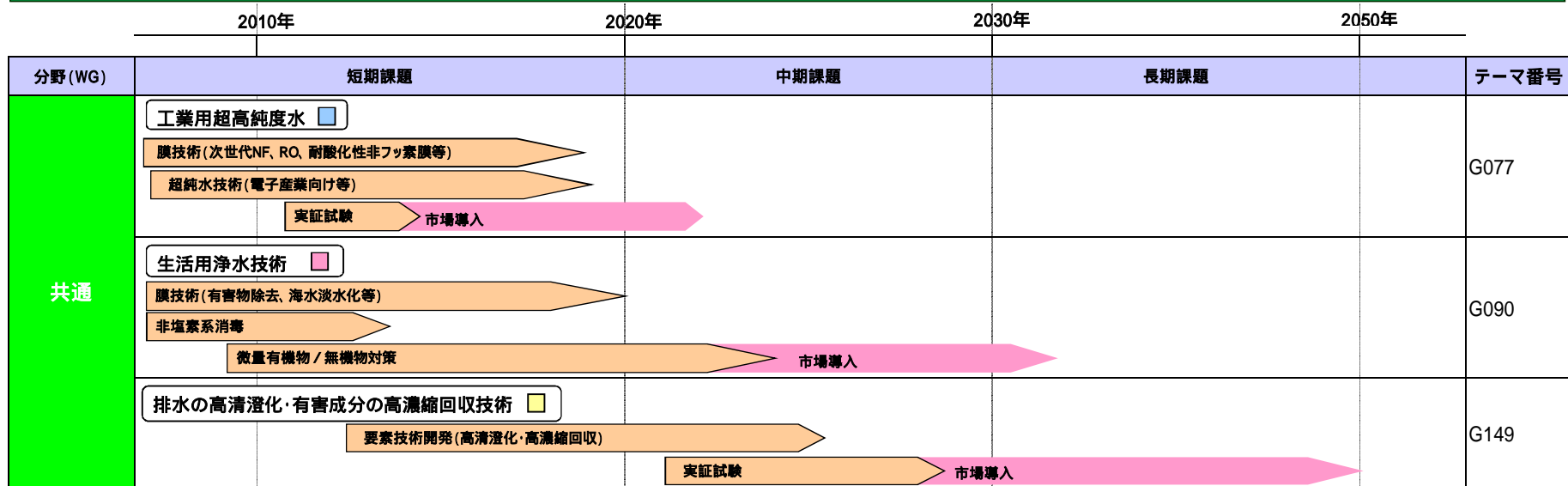
GSC評価

	工業用超高純度水	生活用浄水技術	排水の高清澄化・有害成分の高濃縮回収技術
エネルギー効率改善			
資源生産性の改善			
廃棄物排出減			
化学物質リスク最小化			
温室効果ガス削減効果			



GSCの観点からでは評価できる項目が少ないが、特に排水側で、画期的なブレークスルーにより、リサイクル

技術ロードマップ



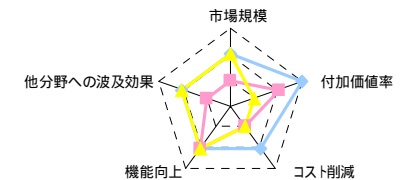
技術優位性

日本の技術の優位性の例

排水の高清澄化・有害成分の高濃縮回収技術では半導体工場や液晶工場から排出される電子機器製造の際のフッ酸排水の処理技術として、従来の凝集沈殿法で大量の脱水汚泥が生成されていたものを、晶析法により、ペレット状のフッ化カルシウムの純度の高い結晶として成長させ、フッ化カルシウム(90%以上)としてリサイクル可能とした技術が日本企業により世界にさがかけて開発されている。

産業競争力・創設力評価

	工業用超高純度水	生活用浄水技術	排水の高清澄化・有害成分の高濃縮回収技術
市場規模(億円/年)	500	500	500
付加価値率			
コスト削減			
機能向上			
他分野への波及効果			

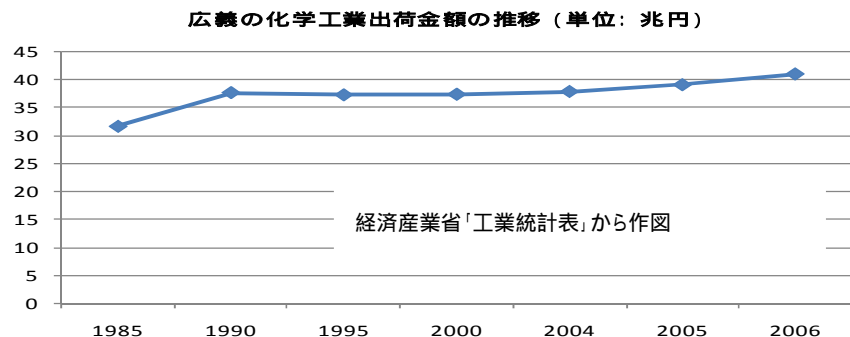


水に関する技術は国内より、海外、特に途上国において大きな潜在需要を持つ。日本企業は水ビジネスの上で進出が遅れているばかりではなく、ODAなしでは、

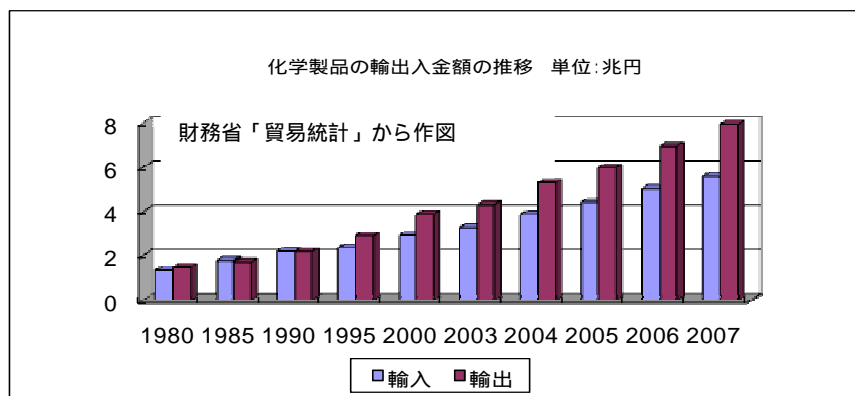
【グリーン・サステイナブルケミストリー分野の国際競争ポジション（1/3）】

日本の化学産業のポジショニング

広義の化学工業(医薬品工業、プラスチック製品製造業、ゴム製品製造業を含む)では、出荷金額は40.9兆円で輸送用機械器具について、製造業では第2位。付加価値額は、16.8兆円で、全製造業のトップとなっている。



化学製品の輸出入金額では、2.28兆円の出超。輸出は、中国、韓国、台湾、インド、インドネシア等で、輸入はEU、アメリカ等。



日系企業の世界シェアの高い製品、低い製品

製品	世界市場 (生産量)	日系企業 シェア (%)	%					
			20	40	60	80	100	
高シエア製品・部材	半導体封止材	1,300億円	100	[Progress bar to 100%]				
	位相差フィルム		100	[Progress bar to 100%]				
	TCAフィルム(偏光膜保護)		100	[Progress bar to 100%]				
	プラスチック光ファイバー		100	[Progress bar to 100%]				
	カラーフィルター		100	[Progress bar to 100%]				
	熱可塑性ポリイミド	0.2万トン	100	[Progress bar to 100%]				
	リチウムイオン電池負極材		>95	[Progress bar to >95%]				
	プラスチック基盤	5,000億円	92	[Progress bar to 92%]				
	水晶振動子	500億円	>85	[Progress bar to >85%]				
	セラミック基盤	1,565億円	>85	[Progress bar to >85%]				
	ボンディングワイヤー		>80	[Progress bar to >80%]				
	MBS樹脂		80	[Progress bar to 80%]				
	炭素繊維	4,1万トン	75	[Progress bar to 75%]				
	水素吸蔵合金		73	[Progress bar to 73%]				
	シリコンウエハー	1兆4000億円	70	[Progress bar to 70%]				
フォトレジスト	1,300億円	70	[Progress bar to 70%]					
フッ素樹脂	5.6万トン	57	[Progress bar to 57%]					
青色LED		<50	[Progress bar to <50%]					
高吸水性樹脂		40	[Progress bar to 40%]					
低シエア製品	ナイロン	164万トン	16	[Progress bar to 16%]				
	カプロラクタム	450万トン	12	[Progress bar to 12%]				
	医薬品	7.5兆円	10	[Progress bar to 10%]				
	プロピレングリコール	191万トン	10	[Progress bar to 10%]				
	ポリプロピレン	4,740万トン	7	[Progress bar to 7%]				
	ポリスチレン	1,800万トン	6	[Progress bar to 6%]				
	低密度ポリエチレン	4,440万トン	5	[Progress bar to 5%]				
高密度ポリエチレン	3,390万トン	4	[Progress bar to 4%]					

出典：
化学工業白書（2008）
半導体材料ハンドブック
（2008）等から作成、

【グリーン・サステイナブルケミストリー分野の国際競争ポジション (2/3)】

化学産業のSWOT分析

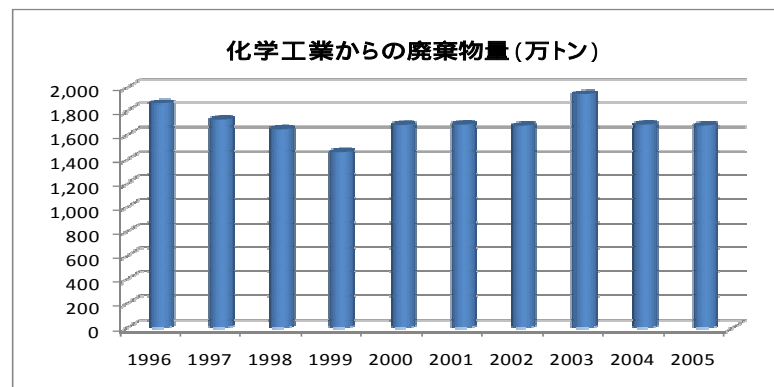
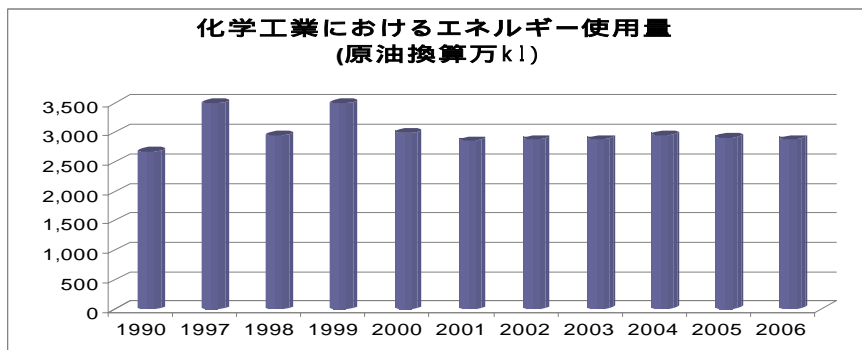
コモディティ・ケミカルズ(基礎化学品、バルク製品)のSWOT分析

強み(strength)	機会(opportunity)
石油化学汎用品(特にPP)で高い競争力を有し、アジアを中心に生産拠点を海外展開している エネルギー利用効率の向上や連産品の有効利用等生産技術面での大きな蓄積がある バルクケミカル製造技術のクリーン化で世界をリードしている 下流部門が充実しており、効率的な装置利用がなされている	中国を中心とするアジア需要の高成長の持続が期待される アジア地域を中心に、海外進出の強化が図られている 既存装置を利用した最新鋭革新技術への転換の好機である
弱み(weakness)	脅威(threat)
低付加価値、労働集約型製品(汎用プラスチック加工品)は、中国等からの輸入品に圧迫されている 旧式で小規模な生産設備、高い原材料コスト等が国際競争力の観点から不利となっている 国内企業間の過当競争により追加コストや変動費(輸送費)高騰を転嫁することが困難である 製品ごとの需給変動に迅速に対応することが困難である	世界経済の流れの中で、原材料費の乱高下に悩まされる 中国、中東における大規模設備の増設が続き、特にエチレン系誘導品の需給バランスの崩れによる競争の激化が予想される 海外への生産移転は、長期的には輸出減少要因となる 環境コストの認識の高まりによる追加コストの増加に伴う成長率の押し下げ要因が発生する

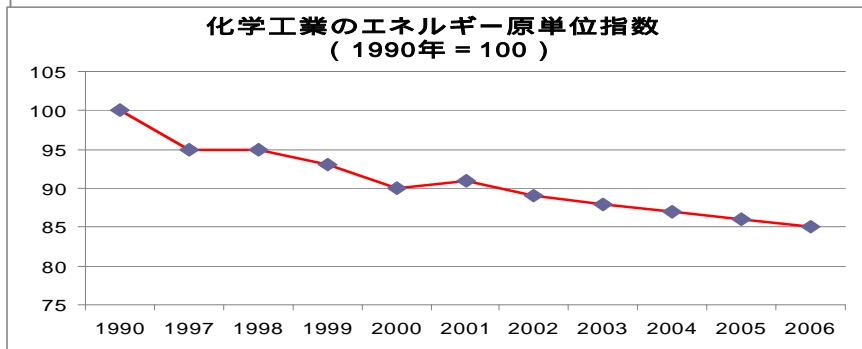
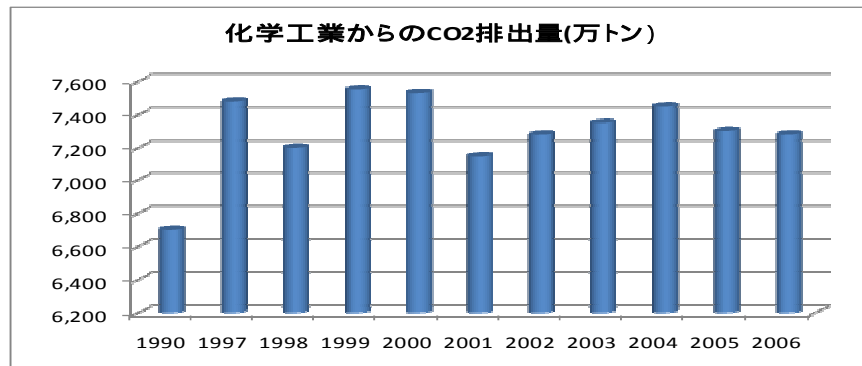
スペシャリティ・ケミカルズ(高付加価値・高機能製品)のSWOT分析

強み(strength)	機会(opportunity)
液晶ディスプレイ、半導体材料分野で高い世界シェアを有している 部素材の営業利益率は高く、顧客仕様に沿ったカスタマイズにより寡占化が進みやすい分野である 顧客仕様に、組合せ技術、設計技術等的確にこたえる対応力を有している 高い技術力やきめ細かい品質管理能力を有している 技術開発力に優れ、独創的製品を生み出す力がある	新興国の自動車、情報家電分野の需要の大幅拡大に対して日本の部材部門の優位性が期待される 先進国では、量的拡大は鈍化するものの電子材料、医薬品等の高付加価値品市場の成長が期待される 生活水準の向上により、衣食住など幅広い分野でより高い機能製品の需要が高まる期待がある 各国の環境規制を逆手に取ったプロアクティブな製品開発の好機でもある
弱み(weakness)	脅威(threat)
海外上位企業と比較して、企業規模が相対的に小さく、大きなリスクをとって事業展開する企業体力に乏しい	技術革新速度は速く、製品寿命も短くなる傾向にあり、絶えず新たな研究開発が必要となる 半導体・液晶等の大資本ユーザーでは、新興国に子会社を抱えるケースが多く、技術流出に対するリスクが懸念される 環境問題、Reach等への対応が課題となる

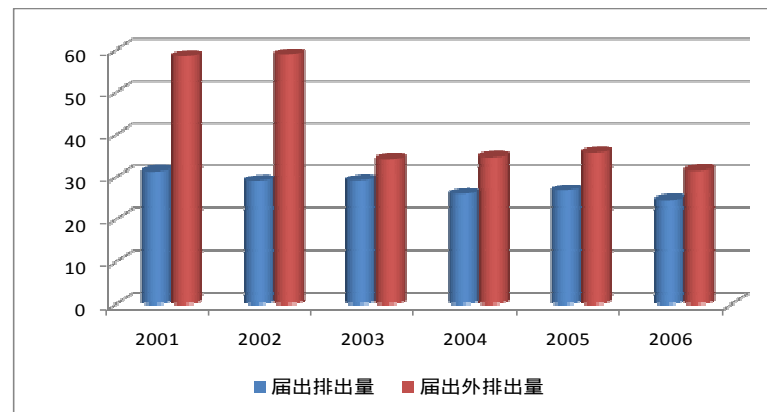
【グリーン・サステイナブルケミストリー分野の国際競争ポジション (3/3)】



環境省:産業別廃棄物量統計から作図



(社)日本化学工業協会「環境保全フォローアップ結果の報告」から作図



(独)製品評価技術基盤機構 HP より PRTR 排出量統計から作図

事前評価書(案)

		作成日	平成 21 年 2 月 5 日
1. 事業名称	「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-石油化学品の革新的製造プロセスの開発-」		
2. 推進部署名	環境療技術開発部、ナノテクノロジー・材料技術開発部		
3. 事業概要	<p>(1)概要:</p> <p>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、容易なリ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イナブルな産業構造への貢献が期待できる。</p> <p>(2)平成 21 年度予算額: 15 億円の内数(予定)</p> <p>(3)事業期間: 平成 21 年度～平成 25 年度(5 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、独創的な省エネルギー型化学プロセスによる素材、部材の開発が急がれる。本事業は、これらの問題点を抜本に解決し、日本の産業競争力の強化の源泉となる化学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			
<p>本事業は、第3期科学技術基本方針の重点推進 4 分野のうちの環境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</p>			

事業の目的はこれと合致する。

政策的な位置付けとしては、新経済成長戦略“『経済財政改革の基本方針 2008』(平成 20 年 6 月 27 日閣議決定)第 2 章 成長力の強化 1. 経済成長戦略 III 革新的技術創造戦略 ② 環境・エネルギー技術等のトップランナー構想:我が国の環境・エネルギー技術は世界のトップ水準にあるが、革新的技術により世界をリードするとともに我が国の経済を支えるため、トップ水準の堅持に資する。“また、“『経済成長戦略大綱』(平成 20 年 6 月 27 日改定)第 1. 国際競争力の強化 3. 資源・エネルギー政策の戦略的展開(1)省エネルギーフロントランナー計画:「省エネルギー技術戦略」に基づく重点的な技術開発に“該当する重要な研究開発テーマである。

さらに、NEDO 技術開発機構と経済産業省が 2007 年度に策定した「グリーン・サステナブルケミストリー(技術戦略マップ)」では、エネルギー分野における「各種資源の接触分解による芳香族、オレフィン等製造」、「低利用石油関連資源を利用したナフサ留分、オレフィン等製造技術の開発」、「選択透過膜を用いた非平衡分離・省エネ化と反応分離同時処理技術」、環境分野における「CO₂を用いる新規ノンクロルプロセスの開発」、2002 年度に策定された「革新的部材産業創出プログラム」では、「メンブレンリアクターを利用した化学合成プロセスの省エネ・高効率化に関する調査(2006 年度)」及び「無機規則性ナノ多孔体薄膜を利用したプロセスの省エネ・高効率化に関する調査(2007 年度)」、2008 年版「化学物質総合管理プログラム(リスク削減分野)」では、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。

(2) 研究開発目標の妥当性

本事業では、以下の開発課題を克服することができ、持続的に高機能な素材・部材が製造可能となる革新的な化学プロセスの研究開発を行い、目標達成を目指す。

【研究開発課題】

「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。

③-1 「触媒を用いる革新的ナフサ分解プロセス基盤技術開発」

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、選択性を高めると共に、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。

③-2 「規則性ナノ多孔体精密分離膜部材基盤技術の開発」

蒸留操作による分離・精製プロセスは、化学・石油関連産業分野の消費エネルギーの約40%を占めるエネルギー多消費型プロセスのひとつとなっている。省エネ型分離・精製プロセスのひとつに、膜分離プロセスがあり、中でも炭化水素用分離膜としては耐熱性、耐化学薬品性などの観点から無機多孔膜が有望であることから、新規ナノ構造材料を用いた革新的な分離・精製プロセスを開発する。

③-3 「副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発」

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。

【研究開発目標】

③-1 「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)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

- ・国内外で稼動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。

③-2 「規則性ナノ多孔体精密分離膜部材基盤技術の開発」

(1)分離膜製造基盤技術および分離膜評価技術の開発

- ・イソプロピルアルコール脱水用: 透過度が $2 \times 10^{-7} \text{ mol}/(\text{m}^2 \text{ s Pa})$ 、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。
- ・酢酸脱水用: 水透過度 $2 \times 10^{-7} \text{ mol}/(\text{m}^2 \text{ s Pa})$ 、水と酢酸の分離係数が100 以上であり、耐酸性を有する規則性ナノ多孔体化合物を見出し、製膜できる技術を確認する。

(2)分離膜用セラミック多孔質基材の開発

- ・分離膜としての長期使用による大幅な特性劣化が生じない多孔質材料を作製開発する。
- ・多チャンネル型基材で長さ1m(管状 外径30mm)当たり0.3m²の膜面積を実現する。

(3)モジュール化技術の開発

- ・多チャンネル型基材を用いたモジュールについて管状型分離膜と同等のシール性能を確認する。

(4)試作材の実環境評価技術の開発

- ・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。

③-3 「副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発」

(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吸着材料の分子設計を行ない、CO₂等の濃度が 30%以下の副生ガス濃度を 99.9%以上に濃縮できる高選択吸着材料を開発する。
- ・既存の吸着剤、吸収剤に比べ、吸着した吸着体からの副生ガス(CO₂等)の脱離エネルギーが小さい新規材料を開発する。

(2)副生ガスによるグリーンプロセス技術

- ・高濃度に濃縮された副生ガスから目的物を選択率 80% 以上で得られるプロセスを設計し、実用化が可能となるプロセスの概念設計を行う。

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であること。また、これらの技術の普及、波及により、CO₂換算で、920万トン/年削減(2030年)が期待できる。

* 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。

【研究開発目標の妥当性】

化学産業は全製造産業中、鉄鋼産業に次いで第2のエネルギー多消費産業である。化学産業の消費エネルギー(年間約7,200万トンをCO₂換算)のうち、基礎化学品を製造するナフサ分解炉が約1,200万トン、蒸留塔に代表される分離・精製プロセスが約3,000万トン占めており、分解炉及び分離・精製プロセスにおける省エネルギー化は化学産業の重要な研究開発テーマとなっている。グリーン・サステナブルケミカルプロセス*(GSC)基盤技術開発では、エコイノベーションの一環として、我が国の強みとされる高度部材開発における化学プロセスのシンプル化、クリーン化、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目指すものである。本研究開発は、GSC分野のサステナビリティ目標分野の「資源制約からの脱却」、「エネルギー制約からの脱却」等の重点課題を解決するためのプロセス、材料に関するイノベーションを実現するものであり、具体的には、機能性化学品の安定供給、及びCO₂排出量の大幅削減が可能となる革新的な資源生産性の向上に資する革新的な化学プロセスの開発を行い、化学産業のCO₂排出量約900万トンの削減を図ることが期待できる。

本研究開発では、日本の産業競争力の強化の源泉となるGSCプロセス基盤技術の保有を後押しするものであり、具体的な開発課題は以下の通り。

○重質化、低品位化する化石原料に対応し、収率を大幅改善する省エネ型接触分解炉技術の開発。

○石油化学工業の約40%のエネルギーを消費する分離プロセスの消費エネルギー約50%削減する革新的膜分離技術の開発。

○化学工場より大量に排出されるCO₂を高濃度回収及びCO₂を有用化学品へ変換する技術の開発。

(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

平成17年度に「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機能性化学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した。また、平成19年度には「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)」において、GSCに関連する最新動向調査を行って、2030年ごろまでにNEDO技術開発機構と経済産業省が積極的に研究開発すべき技術体系を作成した(委員長:NITE理事長、東京大学名誉教授 御園生誠)。さらに、平成20年度には、GSCに関する研究開発を行うことによるGSC効果(エネルギー生産性、環境負荷、リサイクル等)、産業競争力(市場規模、他産業への波及効果等)について、半定量的な分析を行いながら、昨年度作成したロードマップのローリング作業を行っている。

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「革新的省エネルギー化学プロセスに関する先導調査」(平成20年度NEDO技術開発機構で実施)、及び「無機規則性ナノ多孔体薄膜を利用したプロセスの省エネ・高効率化に関する調査」(平成19年度NEDO技術開発機構で実施)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。

① 究開発におけるマネジメント

GSC技術戦略ロードマップ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

と判断した革新的な化学プロセス、素材・部材に関する研究開発テーマについて、一般公募を通じて、高い技術を有する民間企業、大学、公的研究機関等に委託する方式を採用する。各研究開発テーマにテーマリーダーを設置し、研究開発の責任の所在を明確にする。なお、NEDO 技術開発機構は別途定められた技術評価に係わる指針及び技術評価実施要領に基づき、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外部有識者による中間評価を平成 23 年度、事後評価を平成 25 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、前倒しすることも含めて、適宜見直すものとする。

(4) 研究開発成果

本事業は、高度な素材・部材開発における化学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つつ、抜本的な資源生産性の向上が実現できる革新的石油化学品等の製造プロセスを開発することで、国際的な産業競争力の強化、国際規制の先取りを目指すものである。本年度に設定した研究開発課題は、「グリーン・サステナブルケミストリー戦略ロードマップ」において、優先的に実施すべき研究開発テーマであり、具体的には①触媒を用いた低温接触分解プロセス、②規則性ナノ多孔体膜分離膜プロセス、③高濃度 CO₂ 精製・回収プロセスに関する研究開発テーマである。これらの研究開発テーマ以外に関しても、引き続き、技術戦略ロードマップのローリングを通じて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ついて研究開発することで、持続的、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実現が達成できることになる。

これらの研究開発により、開発成果を欧米を始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

製造業の中でエネルギー多消費である化学分野において、2020 年～30 年での実用化を目指し、地球温暖化問題や石油由来原料の高騰・低品位化への抜本的な対応を図る。具体的な、研究開発は下記の通り。なお、本研究開発では、研究開発終了後、5 年以内に実証レベルのプラントが稼動して、10 年以内に本格的な実用化、事業化が見込める技術開発を優先的に行う。

- 接触分解炉技術の開発により、重質原料収率改善及び低温化が可能となり、目的生成物に要する製造エネルギーの約20%を削減可能。本技術開発成果を全ナフサ分解プロセスに適用した場合、CO₂換算で、120万トン／年の削減。
- 炭化水素用分離膜の開発により、石油化学産業の蒸留塔10,000基のうち、5,000基に導入された場合、分離プロセスで消費されているエネルギー約3000万トン／年 のうち25%、約750万トン／年の削減。
- CO₂ のように、非石油系原料からの化学品製造技術の確立は、長期にわたり安定的な材料提供の観点から、部材産業、ユーザー産業の競争力強化、持続的発展可能なものづくり産業の確立に貢献。

接触分解による機能性化学品製造(プラスチック製品、電子材料、基礎化学品等)における直接的効果1000 億円以上、間接的効果で 5000 億円以上、高効率分離膜プロセスの導入により、基礎化学品、水処理プロセスでの利用により2000 億円以上、高純度 CO₂ 精製・回収プロセスによる機能性化学品(ポリカーボネート)、合成ガス原料、新規 CO₂ プロセス(塗装、洗浄等)での利用により、2000 億円以上の市場効果が期待されている。また、本研究開発の成果により、ファインケミカル等の製造プロセスにおける大幅な省エネルギーが期待され、研究開発終了 10 年程度で商用プラントが稼動すれば CO₂ 換算で、920 万トン／年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

NEDO の実施する事業として適切であると判断する。

「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基本計画（案）」に対するパブリックコメント募集の結果について

平成 21 年 3 月 24 日
NEDO 技術開発機構
環境技術開発部

NEDO POST3 において標記基本計画（案）に対するパブリックコメントの募集を行いました結果をご報告いたします。
みなさまからのご協力を頂き、ありがとうございました。

1. パブリックコメント募集期間

平成 21 年 2 月 4 日～平成 21 年 2 月 17 日

2. パブリックコメント投稿数＜有効のもの＞

計 2 件

3. パブリックコメントの内容とそれに対する考え方

ご意見の概要	ご意見に対する考え方	基本計画への反映
全体について		
<p>[意見 1]</p> <p>回収された CO2 など下記のような反応により、再利用することが実現性が高いのではないかと考えます。</p> <p>①ジメチルエーテルと炭酸ガスの反応によるジメチルカーボネートの一段合成 $CH_3OCH_3 + CO_2 \rightarrow CH_3OC(=O)OCH_3$</p> <p>②ジメチルエーテルと酸化エチレンの反応によるエチレングリコールジメチルエーテルの一段合成 $CH_3OCH_3 + C_2H_4O \rightarrow CH_3OCH_2CH_2OCH_3$</p> <p>③エチレンと酸化エチレンより直接テトラヒドロフランの合成および THF より 1,4-ブタンジオールの合成 $CH_2=CH_2 + C_2H_4O \rightarrow THF \rightarrow 1,4\text{-ブタンジオール}$</p>	<p>[考え方と対応]</p> <p>副生ガスとして CO2, C2H4O を想定した場合の、化学プロセスへの応用と理解しております。基本計画の中に、副生ガスを化学品に転換するためのフィージビリティスタディーに関する研究開発がありますので、新規吸着剤の開発とあわせて革新的な化学プロセスに関するご提案をお待ちしております。</p>	<p>[反映の有無と反映内容]</p> <p>基本計画に十分反映しているものと考えており、特に変更することは致しません。</p>

ご意見の概要	ご意見に対する考え方	基本計画への反映
全体について		
<p>[意見 2]</p> <p>CO₂の分離回収技術が含まれているのに、CO₂の利用に関する研究が対象になっていない。いくらCO₂を集めて精製しても使うことができなければ価値は半減することは明白。</p> <p>CO₂の化学原料としての活用は難しいテーマだが、それだからこそNEDOにおいて長期プロジェクトとして推進するべきものだと考える。</p>	<p>[考え方と対応]</p> <p>ご意見有り難うございます。CO₂や極微量副生を利用するには、大容量、低コストで回収することが必須を考えております。これまでにCO₂を原料とした研究開発が数多く行われてきましたが、実用化された物はごく一部に限られています。今回の研究開発では、これまでにない新しい吸着材を開発することで、CO₂等の回収に係るエネルギーを大幅に削減して、これまでにないCO₂の利用を拡大しようとする物です。そのため、吸着材の開発と併せて、CO₂を原料とした化学プロセスに関するフィージビリティスタディーを行うことにしております。このような観点から、新規吸着剤の開発とあわせて革新的な化学プロセスに関するご提案がございましたら、是非、ご提案いただくことをお待ちしております。</p>	<p>[反映の有無と反映内容]</p> <p>基本計画に十分反映しているものと考えており、特に変更することは致しません。</p>

以上

特許、論文、外部発表等リスト

【特許】

番号	出願者	出願番号	国内外 国 PCT	出願日	状態	名 称	発明者
1	(独)産業技術 総合研究所	特願 2011-56575	国内	2011/3/15	出願	プロピレンおよびエチレンの 製造方法	山口有朋、他
2	住友化学(株)、 三井化学(株)、 昭和電工(株)、 (学)東京工業大 学	特願 2011-130306	国内	2011/6/10	出願	芳香族炭化水素及び／又は炭 素数4以下のオレフィンの製造 方法、並びに、芳香族炭化水 素及び／又は炭素数4以下の オレフィンの製造装置	池口真之、他
3	住友化学(株)、 三井化学(株)、 昭和電工(株)、 (学)東京工業大 学	特願 2011-130906	国内	2011/6/13	出願	不飽和炭化水素製造用触媒、 その製造方法および不飽和炭 化水素の製造方法	宮路淳幸、他

【論文】

番号	発表者	所属	タイトル	発表誌名、ページ番号	査読	発表年
1	Satoshi Inagaki、 Kazuyoshi Takechi、 Yoshihiro Kubota	(学)横浜 国立大学	Selective formation of propylene by hexane cracking over MCM-68 zeolite catalyst	Chemical Communications 46 (2010) 2662-2664	有	2010,

【発表】

番号	発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者
1	2011年5月18 日	石油学会第54回年会、第 60回研究発表会	ゼオライト触媒を用いた n-ヘキサン 接触分解の速度解析	中坂佑太、岡村拓哉、今野大輝、川原 貴仁、多湖輝興、増田隆夫
2	2011年3月 29~30日	第107回触媒討論会	ナノ結晶 MFI 型ゼオライトによる n-ヘキサンの接触分解	今野大輝、岡村拓哉、中坂佑太、多湖 輝興、増田隆夫
3	2011年3月 29~30日	第107回触媒討論会	MFI 型ゼオライト触媒による n-ヘキ サン接触分解の速度解析	岡村拓哉、今野大輝、中坂佑太、多湖 輝興、増田隆夫
4	2011年3月 29~30日	第107回触媒討論会	ナノサイズ MOR ゼオライトの構造 規定剤フリー合成における界面活性 剤添加効果	藤原沙緒梨、谷口太一、中坂佑太、多 湖輝興、増田隆夫
5	2011年5月18 日	石油学会第54回年会、 JPIJS 若手研究者のための ポスターセッション	n-ヘキサン接触分解における MFI 型 ゼオライトの結晶サイズ微小化効果	今野大輝、中坂佑太、多湖輝興、増田 隆夫
6	2011年5月 23~25日	The 13th Korea-Japan Symposium on Catalysis	Effect of Crystal Size of MFI-type Zeolite on the Light Olefins Selectivity by n-Hexane Cracking	Hiroki Konno, Takuya Okamura, Yuta Nakasaka, Teruoki Tago, Takao Masuda
7	2011年5月18 日	石油学会第60回研究発表 会	Catalytic steam cracking of n-hexane over modified ZSM-5 catalysts	Dingfeng Jin, Aritomo Yamaguchi, Takuji Ikeda, Koichi Sato, Norihito Hiyoshi, Tomoya Inoue, Masayuki Shirai, Fujio Mizukami, and Takaaki Hanaoka
8	2011年5月24 日	The 13th Korea-Japan Symposium on Catalysis	Steam Cracking of n-Hexane over Modified ZSM-5 Catalysts for Propylene Production	Aritomo Yamaguchi, Dingfeng Jin, Takuji Ikeda, Koichi Sato, Norihito Hiyoshi, Tomoya Inoue, Masayuki Shirai, Fujio Mizukami, and Takaaki Hanaoka

9	2011年6月6日	22nd North American Catalysis Society Meeting	Modified ZSM-5 Catalysts for Steam Cracking of n-Hexane	Aritomo Yamaguchi, Dingfeng Jin, Takuji Ikeda, Koichi Sato, Norihito Hiyoshi, Tomoya Inoue, Masayuki Shirai, Fujio Mizukami, and Takaaki Hanaoka
10	2011年3月30日	第107回触媒討論会	ゼオライトの酸性質がヘキサン接触分解に及ぼす影響検討	望月大司, 今井裕之, 横井俊之, 難波征太郎, 野村淳子, 辰巳 敬
11	2011年3月27日	日本化学会第91回春青年会	脱アルミ処理を施した BEA 型ゼオライトを用いたヘキサンの接触分解	吉田雄太郎, 望月大司, 今井裕之, 横井俊之, 難波征太郎, 野村淳子, 辰巳 敬
12	2010年12月16日	PACIFICHEM2010 -the International Chemical Congress Pacific Basin Societies	Influence of particle size of zeolite on catalytic properties for n-hexane cracking	Hiroshi Mochizuki, Hiroyuki Imai, Toshiyuki Yokoi, Junko N. Kondo, Seitaro Namba, Takashi Tatsumi
13	2010年12月2日	第26回ゼオライト研究発表会	調製法の異なる*BEA型ゼオライトによるヘキサンの接触分解	吉田雄太郎, 望月大司, 難波征太郎, 今井裕之, 横井俊之, 野村淳子, 辰巳 敬
14	2010年11月25日	第40回石油・石油化学討論会	修飾ゼオライトによるヘキサンの接触分解	望月大司, 今井裕之, 横井俊之, 難波征太郎, 野村淳子, 辰巳 敬
15	2010年9月17日	第106回触媒討論会	ゼオライト触媒によるヘキサンの接触分解	望月大司, 今井裕之, 横井俊之, 難波征太郎, 野村淳子, 辰巳 敬
16	2010年7月20日	TOCAT6/APCAT5 -the 6 th Tokyo Conference on Advanced Catalytic Science and Technology and the 5 th Asia Pacific Congress on Catalysis	The effect of crystal sizes of H-ZSM-5 on catalytic cracking of n-hexane	Hiroshi Mochizuki, Hiroyuki Imai, Toshiyuki Yokoi, Junko N. Kondo, Seitaro Namba, Takashi Tatsumi
17	2010年5月20日	石油学会第59回研究発表会 第15回 JPIJS 若手研究者のためのポスターセッション	修飾 ZSM-5 触媒によるヘキサンの接触分解	望月大司, 難波征太郎, 今井裕之, 横井俊之, 野村淳子, 辰巳 敬
18	2010年9月17日	第106回触媒討論会	有機構造規定剤を使用しないナノ結晶 MFI ゼオライト合成における界面活性剤添加効果	多湖輝興, 藤原沙緒梨, 今野大輝, 中坂佑太, 遠子内渉, 増田隆夫
19	2010年9月17日	第106回触媒討論会	ヘキサクラッキングによる低級オレフィン選択的合成における MFI 型ゼオライトの結晶サイズの影響	今野大輝, 中坂佑太, 多湖輝興, 増田隆夫
20	2010年9月17日	第106回触媒討論会	MFI 型ゼオライト細孔内における n-ヘキサンの拡散係数測定	川原貴仁, 今野大輝, 中坂佑太, 多湖輝興, 増田隆夫
21	2010年9月25日	平成22年度化学系学協会東北大会	ゼオライト触媒を用いたオクタンの接触分解	水沼祐貴, Lixia Wang, 小松隆之
22	2010年9月16日	第106回触媒討論会	Ca ²⁺ -exchanged Ferrierite: an excellent catalyst for selective formation of light alkenes in catalytic cracking of n-octane	Lixia Wang, Kenichi Ozawa, Takayuki Komatsu, Takuji Ikeda
23	2010年12月17日	PACIFICHEM2010 -the International Chemical Congress Pacific Basin Societies	Synthesis, modification, and catalytic application of YNU-2 zeolite	Y. Kubota, S. Inagaki
24	2010年12月17日	PACIFICHEM2010 -the International Chemical Congress Pacific Basin Societies	Synthesis and catalytic applications of MSE-type molecular sieves with multi-dimensional pore systems	Y. Kubota, S. Inagaki
25	2010年12月2日	第26回ゼオライト研究発表会	微粒子 TON 型ゼオライトの合成とその触媒活性	金子良大, 稲垣怜史, 窪田好造
26	2010年12月2日	第26回ゼオライト研究発表会	ポスト処理した Al-beta を触媒とする直鎖パラフィンの接触分解	小松来太, 稲垣怜史, 窪田好造
27	2010年12月2日	第26回ゼオライト研究発表会	Al-MCM-68 ゼオライトのポスト処理によるクラッキング触媒としての高機能化	武智一義, 稲垣怜史, 窪田好造
28	2010年11月25日	第40回石油・石油化学討論会	MCM-68 ゼオライト触媒によるヘキサンのクラッキングにおいて反応温度が生成物分布に与える影響	武智一義, 稲垣怜史, 窪田好造
29	2010年9月17日	第106回触媒討論会・討論会 A	脱アルミニウムした TON 型ゼオライトの触媒活性	金子良大, 稲垣怜史, 窪田好造
30	2010年9月17日	第106回触媒討論会・討論会 A	MCM-68 触媒の調製とヘキサンの接触分解におけるプロピレン選択性	武智一義, 稲垣怜史, 窪田好造

31	2010年9月17日	第106回触媒討論会・討論会 A	多次元細孔ゼオライトを固体酸触媒としたドデカンの接触分解	小松来太, 稲垣怜史, 窪田好浩
32	2010年9月17日	第106回触媒討論会・討論会 A	MCM-68 を固体酸触媒とするメタノールからの低級オレフィン合成	渡部恵大, 稲垣怜史, 窪田好浩
33	2010年7月8日	16th International Zeolite Conference joint with the 7th International Mesosstructured Materials Symposium (IZC-IMMS2010)	Crystallization behavior of all-silica zeolite YNU-2 with MSE topology consisting of multi-dimensional large-micropore system	S. Inagaki, Y. Sato, Y. Koyama, T. Ikeda, Y. Kubota
34	2011年3月29日	第107回触媒討論会	Catalytic steam cracking of <i>n</i> -hexane over ZSM-5 catalysts modified by both lanthanum and phosphorus	Jin Dingfeng, 池田拓史, 井上朋也, 佐藤剛一, 白井誠之, 日吉範人, 水上富士夫, 山口有朋, 花岡隆昌
35	2011年3月9日	平成22年度日本表面科学会東北北海道支部講演会	Catalytic steam cracking of <i>n</i> -hexane over ZSM-5 catalysts	Jin Dingfeng, 山口有朋, 池田拓史, 佐藤剛一, 日吉範人, 水上富士夫, 白井誠之, 花岡隆昌
36	2011年2月24日	第4回 Clayteam セミナー / Symposium on Advanced Composite Materials	ZSM-5 ゼオライトのナフサ接触分解反応への適用 (Application of ZSM-5 zeolites to catalytic steam cracking of naphtha)	山口有朋, Jin Dingfeng, 池田拓史, 佐藤剛一, 日吉範人, 水上富士夫, 白井誠之, 花岡隆昌
37	2010年12月16日	PACIFICHEM2010 -the International Chemical Congress Pacific Basin Societies	Activity and local structure of ZSM-5 for catalytic steam cracking of <i>n</i> -hexane	Aritomo Yamaguchi, Dingfeng Jin, Takuji Ikeda, Koichi Sato, Norihito Hiyoshi, Tomoya Inoue, Masayuki Shirai, Fujio Mizukami, and Takaaki Hanaoka
38	2010年12月2日	IWPI2010 - International Workshop on Process Intensification	Catalytic Steam Cracking Process of Naphtha	Aritomo Yamaguchi, Dingfeng Jin, Takuji Ikeda, Koichi Sato, Norihito Hiyoshi, Tomoya Inoue, Masayuki Shirai, Fujio Mizukami, and Takaaki Hanaoka
39	2010年11月26日	第40回石油・石油化学討論会	ヘキサン接触分解反応における ZSM-5 触媒の失活メカニズム	山口有朋, Jin Dingfeng, 池田拓史, 佐藤剛一, 日吉範人, 井上朋也, 白井誠之, 水上富士夫, 花岡隆昌
40	2010年11月5日	第24回日本吸着学会研究発表会	ZSM-5によるn-ヘキサン水蒸気接触分解反応と触媒細孔構造変化	白井誠之, Jin Dingfeng, 山口有朋, 井上朋也, 日吉範人, 佐藤剛一, 池田拓史, 水上富士夫, 花岡隆昌
41	2010年9月16日	第106回触媒討論会	Deactivation behavior of Zeolite Catalysts for Catalytic Steam Cracking of <i>n</i> -hexane	Dingfeng Jin, Aritomo Yamaguchi, Takuji Ikeda, Koichi Sato, Norihito Hiyoshi, Masayuki Shirai, Fujio Mizukami, Tomoya Inoue, and Takaaki Hanaoka
42	2010年8月25日	ACS 240th National Meeting	Deactivation Mechanism of ZSM-5 during Catalytic Steam Cracking of <i>n</i> -Hexane	Aritomo Yamaguchi, Dingfeng Jin, Takuji Ikeda, Koichi Sato, Norihito Hiyoshi, Tomoya Inoue, Masayuki Shirai, Fujio Mizukami, and Takaaki Hanaoka
43	2010年7月19日	TOCAT6/APCAT5 -the 6th Tokyo Conference on Advanced Catalytic Science and Technology and the 5th Asia Pacific Congress on Catalysis	<i>n</i> -Hexane steam cracking behavior over ZSM-5 catalysts	Aritomo Yamaguchi, Dingfeng Jin, Takuji Ikeda, Koichi Sato, Norihito Hiyoshi, Tomoya Inoue, Masayuki Shirai, Fujio Mizukami, and Takaaki Hanaoka
44	2010年7月16日	Pre-Symposium of TOCAT6/APCAT5 -Recent Progress of Environment & Energy Related Catalysts	Deactivation Behavior of ZSM-5 during Catalytic Steam Cracking of <i>n</i> -Hexane	Aritomo Yamaguchi, Dingfeng Jin, Takuji Ikeda, Koichi Sato, Norihito Hiyoshi, Tomoya Inoue, Masayuki Shirai, Fujio Mizukami, and Takaaki Hanaoka