「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発

資源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」

中間評価報告書

平成２３年１０月

独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構

研究評価委員会

平成２３年１０月

独立行政法人新エネルギー･産業技術総合開発機構
　理事長　古川　一夫　殿

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

ＮＥＤＯ技術委員・技術委員会等規程第３２条の規定に基づき、別添のとおり評価結果について報告します。

目　次

はじめに　1
分科会委員名簿　2
審議経過　3
評価概要　4
研究評価委員会におけるコメント　7
研究評価委員会委員名簿　8

第１章　評価
１．プロジェクト全体に関する評価結果　1-1
１．１　総論
１．２　各論
２．個別テーマに関する評価結果　1-16
２．１　副生ガスの分離・精製材料開発
２．２　副生ガスによるグリーンプロセス技術
３．評点結果　1-28

第２章　評価対象プロジェクト
１．事業原簿　2-1
２．分科会における説明資料　2-2

参考資料１　評価の実施方法　参考資料 1-1

はじめに

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

本書は、「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発／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」の中間評価報告書であり、第２８回研究評価委員会において設置された「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発／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」（中間評価）研究評価分科会において評価報告書案を策定し、第２９回研究評価委員会（平成２３年１０月１４日）に諮り、確定されたものである。

平成２３年１０月
独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構
研究評価委員会

「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発
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」

中間評価分科会委員名簿

（平成２３年６月現在）

	氏名	所属、役職
分科会長	峯元（みねもと）　雅樹（まさき）	九州大学　大学院工学研究院　化学工学部門　教授
分科会長代理	田門（たもん）　肇（はじめ）＊	京都大学　大学院工学研究科　化学工学専攻　教授
委員	風間（かざま）　伸吾（しんご）	財団法人地球環境産業技術研究機構　化学研究グループ グループリーダー　主席研究員
	川井（かわい）　雅人（まさと）	大陽日酸株式会社　開発・エンジニアリング本部 本部長付
	里川（さとかわ）　重夫（しげお）	成蹊大学　理工学部　物質生命理工学科　教授
	西原（にしはら）　寛（ひろし）	東京大学　大学院理学系研究科　化学専攻　教授
	西山（にしやま）　貴人（たかひと）	三菱化学株式会社　EOG・エタノール事業部 グループマネージャー

敬称略、五十音順

注＊：実施者の一部と同一大学であるが、所属部署が異なるため（実施者：京都大学大学院理学研究科、物質－細胞統合システム拠点、京都大学大学院工学研究科　合成・生物化学専攻）、「NEDO 技術委員・技術評価委員規程(平成２３年７月７日改正)」第３４条（評価における利害関係者の排除）により、利害関係はないとする。

審議経過

● 第１回　分科会（平成２３年６月９日）

公開セッション

１．開会、分科会の設置、資料の確認

２．分科会の公開について

３．評価の実施方法について

４．評価報告書の構成について

５．プロジェクトの概要説明

非公開セッション

６．プロジェクトの詳細説明

７．全体を通しての質疑

公開セッション

８．まとめ・講評

９．今後の予定、その他、閉会

● 第２９回研究評価委員会（平成２３年１０月１４日）

評価概要

１．総論

１）総合評価

わが国がグリーン・サステイナブルケミカルプロセスの分野で主導的な役割を担っていくためには、このような基礎的材料開発から進める研究は極めて重要である。

本プロジェクトは、潜在的に高い可能性を有する多孔性金属錯体（PCP）を用いる意欲的な研究開発であり、二酸化炭素選択吸着材としてのPCPの開発と、吸着と触媒反応の重畳場を利用する優れた着想に基づくPCPの触媒担体としての利用について、プロジェクトリーダーの強力なリーダーシップのもとで、大学と企業がうまく連携して研究を進めており、中間目標値を達成すると共に、当初の想定を上回る興味深い成果も得ており、世界的水準から見ても優れた成果が得られている。

しかしながら、実用化の観点から目標設定にやや問題がある。分離後の濃度、分離度は吸着材の性能が悪い場合も、操作条件や分離操作のカスケード化で達成できることは吸着技術で自明である。対象物質の吸着平衡や吸着速度など材料そのものの優れた点をアピールできる数値目標に変更すべきである。また、CO_2 分離では競合技術があることから、競合技術に対する優位性を明らかにする必要がある。さらに、CO_2 の直接分離除去だけでなく、分離プロセスの消費エネルギーが大幅に低減できるようなプロセスへの応用も間接的に CO_2 削減に寄与するものと考え、幅広いプロセスへの適用検討を進めることにより、成果の幅が拡大されるであろう。

２）今後に対する提言

グリーン・サステイナブルケミカル技術はわが国の将来によって欠くべからざる技術開発課題であり、NEDOは今後本プロジェクトのように世界を先導できる基盤技術を積極的に企画・推進する必要がある。対象としている具体的分野（シュウ酸の製造等）だけでは、大きなインパクトがあるとは感じられない。このような環境、エネルギーに関する研究はNEDOのみならず文科省など種々の機関が進めている。お互いがもっと連携して効率の良い研究開発を行なってほしい。

PCPは発展性がある技術なので、CO_2 削減の実用化を目指すと同時に、得られた現象に対する原理原則の解明を行い、他用途への発展の礎を築いてほしい。

２．各論

１）事業の位置付け・必要性について

CO_2 削減手段として複数の有力な候補が有る中で、決定的な方策は見出されていない。このような状況の中で、研究開発途上にあり、潜在的な可能性が高い多孔性金属錯体（PCP）を用いた、CO_2 等の副生ガスの高効率な分離・回収技術と副生ガス中 CO_2 のグリーンな反応プロセス技術の開発を行う意義は大きいと考える。このような材料開発から始める基礎研究で有用な成果を得るためには、大きな費用と人材が必要になり、NEDO 事業として実施することが妥当である。

しかしながら、CO_2 の分離精製は「環境保護意識の高まり」からは極めて時宜を得たテーマと言えるが、CO_2 削減を事業目標に掲げる一方で、CO_2 削減コストに関する議論が少ない。目標とする CO_2 削減コストのイメージを持つことが重要である。

２）研究開発マネジメントについて

本プロジェクトでは大学側のリーダーシップのもと、プロジェクトリーダーを中心に、民間企業と大学が連携をして実用化を推進しており、研究開発マネジメントの観点で、好ましい事業体制である。PCP 研究において世界をリードする大学の研究チーム、吸着材製造に関するわが国の先導的メーカーが参画し、集中研方式を採用している点を高く評価する。

しかしながら、二酸化炭素の分離に PCP を利用する可能性を検証するなら、PSA（Pressure Swing Adsorption：圧力スイング吸着法）に限定したコスト評価に終始するのではなく、既存技術であるアミン吸収法等と二酸化炭素分離コストを明確に比較するように求めるべきである。また、既存プロセスに比べて消費エネルギーを本当に大幅に低減できるのかどうかといったエネルギー評価は必要不可欠である。参画企業のエンジニアリング部門とのより緊密な連携が必要である。さらに、技術検討委員会のメンバーに、ここで提案している吸着材や装置を実際に使用するユーザー側の人を 2、3 名入れて、世の中のニーズを常に念頭に置いて進める必要がある。

３）研究開発成果について

中間目標はほぼ達成しており、成果は高く評価できる。国際的基準から判断して、基礎研究として妥当な PCP の二酸化炭素吸着平衡特性が得られている。PCP を実用に供するには、成形が必要であるが、ペレット化、押出成形など十分な検討が加えられている。特許、新聞発表などの成果の普及と広報は十分であり、成果の最終目標は十分達成できる見通しである。

一方、PCP の吸着平衡特性、触媒担体としての利用に関しては世界最高水準の成果が得られているが、速度論に関して検討を重ねる必要がある。また、CO_2を原料にしたシュウ酸等の新規合成プロセスはエネルギー的に合理的なものになり得るのか、皆が納得できるようなストーリーを確立することが必要である。

今後は、競合技術との優位性を考慮に入れた目標設定になっていることを確認してほしい。また、現象のメカニズムの解明にも力を入れるとともに、本プロジェクトの対象に限らずに、PCP の用途開発を行うことが望ましい。

４）実用化の見通しについて

PCP の潜在的な可能性を引き出す研究開発が行われており、関連分野への波及効果も期待できる。特に、PCP の吸着選択性と吸着と触媒反応の重畳場の利用は、二酸化炭素の分離回収だけでなく、他の用途への波及効果がある。また、国内の当該分野のトップ企業が参画しており、目標を達成した際の実用化の可能性を十分に有する。さらに、集中研方式でプロジェクトを遂行しているので、研究開発に係る人材育成が十分に期待できる。

しかしながら、材料コスト、分離プロセスを合わせたトータルコストとして既存技術と競合可能となる道筋が見えてこない。競合技術と比較して現時点でどのレベルとか、部材がここまで安くなれば競争力を持つ、等の評価が必要である。一方では、製造コストが現行レベルでも実用化が可能となるように、PCP の潜在可能性を引き出すことで他の方法では分離が難しい分離対象を選ぶことも、早期の実用化に必要と考える。

また、CO_2再資源化触媒の研究は、基礎研究の領域であり、実用化イメージ・出口イメージに基づき、開発の各段階でマイルストーンには、曖昧さがある。

研究評価委員会におけるコメント

第２９回研究評価委員会（平成２３年１０月１４日開催）に諮り、本評価報告書は確定された。研究評価委員会からのコメントは特になし。

研究評価委員会

委員名簿（敬称略、五十音順）

職　位	氏　名	所属、役職
委員長	西村　吉雄	学校法人早稲田大学大学院　政治学研究科 （科学技術ジャーナリスト養成プログラム） 客員教授
委員長 代理	吉原　一紘	オミクロンナノテクノロジージャパン株式会社 最高顧問
委員	安宅　龍明	一般社団法人ナノテクノロジービジネス推進協議会 企画運営推進会議（オリンパス株式会社　未来創造研究所） 副議長（コーディネーター）
	五十嵐　哲	工学院大学　応用化学科　教授
	伊東　弘一	学校法人早稲田大学　理工学術院総合研究所 客員教授（専任）
	稲葉　陽二	日本大学　法学部　教授
	尾形　仁士	三菱電機エンジニアリング株式会社　相談役
	小林　直人	学校法人早稲田大学　研究戦略センター　教授
	佐久間一郎	国立大学法人東京大学大学院　工学系研究科 精密機械工学専攻　教授
	佐藤　了平	大阪大学大学院　マテリアル生産科学専攻 （システムデザイン領域担当）　教授
	菅野　純夫	国立大学法人東京大学大学院　新領域創成科学研究科 メディカルゲノム専攻　教授
	架谷　昌信	愛知工業大学　工学部機械学科 教授・総合技術研究所所長
	宮島　　篤	国立大学法人東京大学　分子細胞生物学研究所　教授

第１章　　評価

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

１．プロジェクト全体に関する評価結果

１．１　総論

１）総合評価

わが国がグリーン・サステイナブルケミカルプロセスの分野で主導的な役割を担っていくためには、このような基礎的材料開発から進める研究は極めて重要である。

本プロジェクトは、潜在的に高い可能性を有する多孔性金属錯体（PCP）を用いる意欲的な研究開発であり、二酸化炭素選択吸着材としての PCP の開発と、吸着と触媒反応の重畳場を利用する優れた着想に基づく PCP の触媒担体としての利用について、プロジェクトリーダーの強力なリーダーシップのもとで、大学と企業がうまく連携して研究を進めており、中間目標値を達成すると共に、当初の想定を上回る興味深い成果も得ており、世界的水準から見ても優れた成果が得られている。

しかしながら、実用化の観点から目標設定にやや問題がある。分離後の濃度、分離度は吸着材の性能が悪い場合も、操作条件や分離操作のカスケード化で達成できることは吸着技術で自明である。対象物質の吸着平衡や吸着速度など材料そのものの優れた点をアピールできる数値目標に変更すべきである。また、CO_2 分離では競合技術があることから、競合技術に対する優位性を明らかにする必要がある。さらに、CO_2 の直接分離除去だけでなく、分離プロセスの消費エネルギーが大幅に低減できるようなプロセスへの応用も間接的に CO_2 削減に寄与するものと考え、幅広いプロセスへの適用検討を進めることにより、成果の幅が拡大されるであろう。

〈肯定的意見〉

○ PCP という新材料を、CO_2 の高選択的、高効率な吸着・分離に利用する技術開発を産学が密に連携を取るハード、ソフトの体制づくりができている。各大学、企業がそれぞれの目標に向かって推進し、目標を達成、凌駕する優れた成果を得ている。

○ 二酸化炭素選択吸着材としての PCP の開発と、吸着と触媒反応の重畳場を利用する優れた着想に基づく PCP の触媒担体としての利用は、世界的水準から見ても優れた成果が得られている。実用化のポイントの一つである PCP の成形に、産学協同で意欲的に取り組んでいる点が高く評価できる。以上より、本プロジェクトはグリーン・サステナブルケミカルプロセス基盤技術開発として所定の成果が得られていると中間評価段階で判断できる。

○ 新しい機能性物質群である PCP を利用して、CO_2 削減（省エネルギーや

廃棄物削減を目指すことを含む）に貢献できるプロセスを探索することは、日本の産業競争力を維持する面で必要不可欠な事業といえる。

○ 潜在的に高い可能性を有する多孔性金属錯体（PCP）を用いる意欲的な研究開発であり、中間目標値を達成すると共に、当初の想定を上回る興味深い成果を得ており、良い成果をあげていると言える。特に、CO_2の電気還元触媒の成果が興味深い。最終目標の達成を目指して、研究開発を進めるべきと考える。

○ わが国がグリーン・サステイナブルプロセスの分野で主導的な役割を担っていくためには、このような基礎的材料開発から進める研究は極めて重要と考える。また大学と企業がうまく連携して研究を進めており、大きな成果が期待できる。ぜひ、世界の最先端を走ってほしい。

○ 中間評価段階ではキーマテリアルであるPCP開発が中心実施事項となると思われる。この点で様々な機能を持った素材開発が行われ、目標に合った材料選定が行われている点が評価される。

○ 多くの可能性を有する材料であり、その基礎開発、基盤技術開発を行う意義は大きい。

〈問題点・改善すべき点〉

● CO_2の直接分離除去だけでなく、分離プロセスの消費エネルギーが大幅に低減できるようなプロセスへの応用も間接的にCO_2削減に寄与するものと考え、幅広いプロセスへの適用検討を認めたら成果の幅が拡大されるであろう。単純なCO_2再資源化はエネルギー削減につながらない。

● 実用的見通しとして、エネルギー削減目標達成の可能性が推定の域を出ない。

● PCPと電極を用いてCO_2の還元的変換反応を行う研究体制が、ややあいまいである。

● 各担当場所でデータはかなり出てきており、今後実用化を目指したデータの取得が必要と考える。本研究に参加している企業のみならず、広く情報を集め、本技術を適用できる分野を広げていく必要がある。その場合、本技術のメリット、あるいは吸着材や触媒としての性能予測（期待値でもよい）など、皆を納得させられるような具体的な提示をする必要がある。

● 本プロジェクトの数値目標は同意できない点がある。分離後の濃度、分離度は吸着材の性能が悪い場合も、操作条件や分離操作のカスケード化で達成できることは吸着技術で自明である。対象物質の吸着平衡や吸着速度など材料そのものの優れた点をアピールできる数値目標を変更すべきである。

● 実用化の観点からの検討が不足している ように感じた。特に、CO_2分離では競合技術があることから、競合技術に対する優位性を明らかにして欲しい。その際に、コストイメージを示して欲しい。

〈その他の意見〉

・ 化学工場や製鉄所から排出する CO_2 の回収技術や CO_2 の利用技術が確立できた場合、どの程度の効果が期待できるのか示してほしい。すなわち、どの程度の経済効果、省エネ効果あるいは環境へのメリットがあるのか、従来と比べて具体的な期待値を示してほしい。

・ 条件によりいかようにもなる数値（吸着熱を除く）を目標数値として採用している。実用化には、吸脱着の速度が大切。静的な条件下ではなく具体的な条件下での検討をお願いいたします。また、無理矢理、目標を作り電解還元を実施しているようなイメージを受けました。一歩下がって、PCPの基礎研究面にも力を入れて、将来必要となる材の設計が可能となるような基礎研究の蓄積も大切だと思います。

２）今後に対する提言

グリーン・サステイナブルケミカル技術はわが国の将来によって欠くべからざる技術開発課題であり、NEDO は今後本プロジェクトのように世界を先導できる基盤技術を積極的に企画・推進する必要がある。対象としている具体的分野（シュウ酸の製造等）だけでは、大きなインパクトがあるとは感じられない。このような環境、エネルギーに関する研究は NEDO のみならず文科省など種々の機関が進めている。お互いがもっと連携して効率の良い研究開発を行なってほしい。

PCP は発展性がある技術なので、CO_2 削減の実用化を目指すと同時に、得られた現象に対する原理原則の解明を行い、他用途への発展の礎を築いてほしい。

〈今後に対する提言〉

- 対象としている具体的分野（シュウ酸の製造等）だけでは、大きなインパクトがあるとは感じられない。このような環境、エネルギーに関する研究は NEDO のみならず文科省など種々の機関が進めている。お互いがもっと連携して効率の良い研究開発を行なってほしい。国で全体を統轄するようなところはできませんか。
- 基本スタンスが分離・精製プロセスの革新技術であるので、実際に適用可能なプロセス条件を想定した工学的検討（温度条件の影響など）が加えられるようなデータ収集が必要。また、エネルギー消費の視点で既存のプロセス技術との比較検討を行わないと PCP 分離の優位性が証明できないので、自己満足な成果にしかならないことに注意する。
- 「PCP 等の産業利用に関してやや出遅れ」との位置付けから BASF の動向を watch していく必要はあるだろうが、試薬販売は必ずしも産業利用とは言えず、より具体的な視点が望まれる。たとえば実用上欠くことができない形態付与に関して情報が入手できるのであれば、実用の進展を測る上での尺度になるのではないか。
- PCP のコストパフォーマンスについて、単に市販試薬からの製造費だけではなく、独自の安価な配位子合成ルート、耐久性、リサイクル性、ハイエンド用途への利用、経済的効果も考慮して、実用になる試算を願いたい。
- 世界の動向、即ち、アカデミックな paper の数値ではなく、patent の状況解析をしっかりと実施し、各々の Target 及び出口イメージの明確化をされたらいかがでしょうか。
- GSC 技術はわが国の将来によって欠くべからざる技術開発課題であり、NEDO は今後本プロジェクトのように世界を先導できる基盤技術を積極的に企画・推進する必要がある。PCP の製造コストの削減は可能性が低

いと思われるので、コストに見合う用途開発を意識して研究開発を進めるべきである。大量生産のプロセスには、蒸留に比べて吸着分離が不向きであることを認識して、PCP の使用が必須である対象を探索する必要がある。

・ 要素技術で興味深い成果を上げている。予算目的の制約から、CO_2 削減の実用化に特化する必要があると思うが、PCP は発展性がある技術なので、CO_2 削減の実用化を目指すと同時に、得られた現象に対する原理原則の解明を行い、他用途への発展の礎を築いて欲しい。

〈その他の意見〉

・ NEDO が実施するプロジェクトでは事前の事業原簿の数値目標にとらわれることなく、フレキシブルに研究を推進することが必要である。

・ 本研究が成功した場合の全体的な絵を書いてほしい。対象としているもの以外にも本技術を適用できる分野は多くあると思う。幅広く情報を集め、全体としてどの程度 CO_2 削減や省エネが可能となるのか、期待値でもよいので見通しを示してほしい。

１．２　各論

１）事業の位置付け・必要性について

CO_2 削減手段として複数の有力な候補が有る中で、決定的な方策は見出されていない。このような状況の中で、研究開発途上にあり、潜在的な可能性が高い多孔性金属錯体（PCP）を用いた、CO_2 等の副生ガスの高効率な分離・回収技術と副生ガス中 CO_2 のグリーンな反応プロセス技術の開発を行う意義は大きいと考える。このような材料開発から始める基礎研究で有用な成果を得るためには、大きな費用と人材が必要になり、NEDO 事業として実施することが妥当である。 しかしながら、CO_2 の分離精製は「環境保護意識の高まり」からは極めて時宜を得たテーマと言えるが、CO_2 削減を事業目標に掲げる一方で、CO_2 削減コストに関する議論が少ない。目標とする CO_2 削減コストのイメージを持つことが重要である。

〈肯定的意見〉

○　このような材料開発から始める基礎研究で有用な成果を得るためには、大きな費用と人材が必要になる。また、これにより実用化を目指すことになれば NEDO の関与はぜひとも必要と考える。さらに、このような開発は国内外を問わず多くのところで行なわれており、これらの開発を先導していくためにも事業目的は妥当と考える。

○　材料として多くの可能性を秘めた材である事は明らか。ぜひ推進すべき案件である。

○　既存多孔性素材に無い高表面積、大空間、柔構造などを可能とする PCP を用いて革新的な分離特性を目指すためには、まず素材開発の面で先行する必要がある。網羅的検討は企業での開発にそぐわないから、NEDO 事業として実施することが妥当である。

○　わが国におけるエネルギーおよび資源制約の克服、環境との共生、生活の質的向上の観点から、本プロジェクトは「ナノテク・部材イノベーションプログラム」の下で妥当であり、政策課題の解決に資するものである。二酸化炭素の分離は化学原料としての利用、二酸化炭素固定において必須技術である。低コスト分離法の開発はきわめて重要である。この観点から、画期的な吸着材の開発は妥当な技術開発課題であり、NEDO の事業として相応しい。PCP は製造コストの観点から、民間だけでは研究を推進できない点からの NEDO の関与は妥当である。

○　CO_2 削減手段として複数の有力な候補が有る中で、決定的な方策は見出されていない。このような状況の中で、研究開発途上にあり、潜在的な可能

性が高い多孔性金属錯体（PCP）を用いた、CO_2等の副生ガスの高効率な分離・回収技術と副生ガス中CO_2のグリーンな反応プロセス技術の開発を行う意義は大きいと考える。

○ 研究期間前半において、京都大学のラボに大学や各企業の研究者を集めて、焦点を絞って連携研究を進めており、NEDOならではの事業を展開している。世界的な研究動向を精査し、それに基づいて日本の独自性が出る事業を組み立てて展開しており、事業の目的は妥当である。

○ PCPは設計自在性のある多孔質材料であることから、効率的な分離技術を構築できる可能性は大きい。世界的にも材料研究からプロセス研究への移行時期に来ており、国際競争力維持に向けた応用研究を実施することは評価できる。

〈問題点・改善すべき点〉

● 上記の通り、本事業は妥当と考えるが、それをもっと明確にする必要がある。すなわち、一般的な世の中の動向調査だけでなく、本技術が具体的に何を目指しており、これが成功したらどのような効果が期待できるというような説明が必要と思う。

● CO_2削減を事業目標に掲げる一方で、CO_2削減コストに関する議論が少ない。超概算でもよいから、目標とするCO_2削減コストのイメージを持つことが重要と考える。例えば、CO_2削減技術のひとつであるCO_2回収・貯留（CCS）のコストは、1トンのCO_2当り7200円程度と試算されている。本事業では、CO_2から有用物質を合成するので、この7200円/t-CO_2に合成した有用物質の価格を上乗せした値が、CO_2削減に向けた目標コストとなると考える。

● CO_2分離は「環境保護意識の高まり」からは極めて時宜を得たテーマと言えるが、PCPによるCO_2分離はどこでも行われている研究で独自性に欠ける。

● 単純なCO_2分離や再資源化はエネルギー削減につながらずグリーンプロセスとはいえない。プロセス全体を俯瞰して、消費エネルギー削減になるテーマかどうかを再検討してほしい。

〈その他の意見〉

・ CO_2削減の流れの中での研究目標設定であるが、もっと原理原則を明らかにし、応用開発（民間）につながるような研究目標も設定した方がbetterであると思います。

・ グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発の下でのPCP

利用なので本事業は妥当であるが、PCP の高い価値を生み出す種が見つかる可能性が高く、それが起きた場合には、その種を開花させる手立てが望まれる。

- グリーンプロセス基盤技術の開発（触媒としての PCP 利用）は極めて意欲的な開発との印象を受ける。
- 新しい材料を用いたプロセスの実用化への壁は、最終的に分離材の製造コストになる場合が多い。本事業でも低コスト合成法の開発を意識していただきたい。
- この技術を適用できる分野をもっと広く考える必要がある。例えば、とりあえずシュウ酸の製造を考えるが、これも従来に比べて大きなメリットがあり、また今後こういう分野にも適用できる可能性があるということを示して下さい。全般的にこのような検討が不足している感じがする。
- CO_2 削減を事業目標に掲げることは好ましいが、潜在的な可能性が高い多孔性金属錯体（PCP）の実用化をより広い視点で検討することも重要と考える。

２）研究開発マネジメントについて

本プロジェクトでは大学側のリーダーシップのもと、プロジェクトリーダーを中心に、民間企業と大学が連携をして実用化を推進しており、研究開発マネジメントの観点で、好ましい事業体制である。PCP 研究において世界をリードする大学の研究チーム、吸着材製造に関するわが国の先導的メーカーが参画し、集中研方式を採用している点を高く評価する。

しかしながら、二酸化炭素の分離に PCP を利用する可能性を検証するなら、PSA（Pressure Swing Adsorption：圧力スイング吸着法）に限定したコスト評価に終始するのではなく、既存技術であるアミン吸収法等と二酸化炭素分離コストを明確に比較するように求めるべきである。また、既存プロセスに比べて消費エネルギーを本当に大幅に低減できるのかどうかといったエネルギー評価は必要不可欠である。参画企業のエンジニアリング部門とのより緊密な連携が必要である。さらに、技術検討委員会のメンバーに、ここで提案している吸着材や装置を実際に使用するユーザー側の人を 2、3 名入れて、世の中のニーズを常に念頭に置いて進める必要がある。

〈肯定的意見〉

○ プロジェクトリーダーを中心に、民間企業と大学が連携をして実用化を推進しており、研究開発マネジメントの観点で、好ましい事業体制であると考える。予算規模も妥当と思われる。

○ PL の強力なリーダーシップで産学連携が進められていると感じる。

○ 研究開発目標、研究開発計画、事業体制、マネジメントはいずれもほぼ妥当である。特に、分離 G の方は、非常に優れた研究開発マネジメントが行われている。

○ 材料開発のスケジュールは限られた年限内を考えると妥当である。PCP 研究において世界をリードする大学の研究チーム、吸着材製造に関するわが国の先導的メーカーが参画し、集中研方式を採用している点を高く評価する。また、プロジェクトリーダーの選任も妥当である。知財のマネジメントは妥当である。常に世界における PCP 開発現状を把握して開発を進めており、情勢変化に機敏かつ適切に対応している。

○ 組織体制、マネジメントとしては Good。

○ 大学と企業がうまく連携して進めており、実施体制は妥当と考える。大学あるいは企業のみでは、材料開発から実用化、装置化を目指した研究は困難であるが、本プロジェクトでは大学側のリーダーシップのもと、関係者が実用化に向けて鋭意取り組んでおり高く評価できる。

〈問題点・改善すべき点〉

- 本プロジェクトの数値目標は同意できない点がある。分離後の濃度、分離度は吸着材の性能が悪い場合も、操作条件や分離操作のカスケード化で達成できることは吸着技術で自明である。二酸化炭素の分離に PCP を利用する可能性を検証するなら、PSA（Pressure Swing Adsorption：圧力スイング吸着法）に限定したコスト評価に終始するのではなく、アミン吸収法と二酸化炭素分離コストを明確に比較するように求めるべきである。
- 目標値の設定の根拠として、「現行レベルを超えること」としているが、競合技術がある CO_2 分離回収では、競合技術に対して優位となるように目標値を設定する必要があると考える。また、実用化を目指すまでの数年での、競合技術の発展を考慮した目標値を設定することが必要である。
- 本プロジェクトは大学側の技術シーズからスタートしているが、このような研究は世の中のニーズ（必要性）を常に念頭に置いて進めないと、単に研究のための研究になる可能性がある。これを避けるためにも、国内外のニーズ調査をもっと幅広く進めてほしい。
- 事業の重要課題である、既存プロセスに比べて消費エネルギーを本当に大幅に低減できるのかどうかといったエネルギー評価は必要不可欠である。このような評価検討にも十分に原資を投入していただきたい。
- 触媒グループは、非常にチャレンジングな課題に取り組んでおり、実用化につなげる戦略は簡単でない。
- 情報が全て共有されているかどうかが見えなかった。各々専門分野があるとしても、プロジェクトリーダーがフォローする場面が多く、違和感を感じた。実担当者がその領域の No.1 であるべき。またその分野に不案内な人に誤解を与えるような資料（3-2.1.1 の P17）も散見。
- 目標の妥当性に関して、吸着エネルギー、分離度は素材特性であるから、分離エネルギー低減に係わる指標も付け加えられるべき。

〈その他の意見〉

- 数値目標の設定に当たって、既存技術を凌駕するためのクリティカル値を仮定して対比されるならば現状を判断する上で判りやすい。
- メーカーが設定した値なので確度が高いと信じるが、吸着剤の開発で、温度設定がないことには不安を感じる。成果に示した測定温度である 0℃で目標値を達成することの重要性を、実用化で目標とするコストの視点から検討して欲しい。
- 技術検討委員会を年 2 回開催しているが、このメンバーにここで提案している吸着材や装置を実際に使用するユーザー側の人を 2、3 名入れる必要

があるように思う。そこから、最近の動向や真に世の中が何を必要としているのかを把握していくべきではないか。

- 参画企業でエンジニアリングを専門部署との緊密な連携が、今後必要である。
- 各社の使用している PCP のコードネームが全て名前が異なっていた。全て異なった材ですか？

３）研究開発成果について

中間目標はほぼ達成しており、成果は高く評価できる。国際的基準から判断して、基礎研究として妥当なPCPの二酸化炭素吸着平衡特性が得られている。PCP を実用に供するには、成形が必要であるが、ペレット化、押出成形など十分な検討が加えられている。特許、新聞発表などの成果の普及と広報は十分であり、成果の最終目標は十分達成できる見通しである。 一方、PCP の吸着平衡特性、触媒担体としての利用に関しては世界最高水準の成果が得られているが、速度論に関して検討を重ねる必要がある。また、CO_2を原料にしたシュウ酸等の新規合成プロセスはエネルギー的に合理的なものになり得るのか、皆が納得できるようなストーリーを確立することが必要である。 今後は、競合技術との優位性を考慮に入れた目標設定になっていることを確認してほしい。また、現象のメカニズムの解明にも力を入れるとともに、本プロジェクトの対象に限らずに、PCPの用途開発を行うことが望ましい。

〈肯定的意見〉

○ キーマテリアルであるPCP開発として、柔構造、ナノ結晶化、固容体など多様な視点で開発が行われ、新たな特性が見出されている点を評価する。

○ 中間目標の設定値の是非は別にして、目標値を大幅に達成している。国際的基準から判断して、基礎研究として妥当なPCPの二酸化炭素吸着平衡特性が得られている。PCPを実用に供するには、成形が必要であるが、ペレット化、押出成形など十分な検討が加えられている。特許、新聞発表などの成果の普及と広報は十分である。成果の最終目標は十分達成できる見通しである。

○ 目標達成度に関しては事業者の報告の通りである。当初目標に縛られず、本質的な消費エネルギー削減に向けたプロセス検討を進め、実用化につながる成果を生み出してほしい。

○ 数値目標は前倒しでクリアしている。ある条件下で世界最高水準には達している。但し条件次第で可変な数値である事は要改善。

○ 中間目標を達成しており評価できる。特に、CO_2の還元反応に関する成果は興味深く、注目に値すると考える。知財の取得、成果の普及に関しても妥当な内容である。

○ 中間目標はほぼ達成しており、不足しているところはあるが特許や論文発表もよく行なわれている。今回の成果で「いけそうだ」という感はある。また、本研究は世界のトップレベルであり、これにより新しい技術領域を開拓することができると考える。

○ 世界でも高レベルである中間目標値をいずれも達成、凌駕しており、成果

は高く評価できる。最終目標値も達成できる可能性が非常に高い。高い質の論文を数多く発表している。

〈問題点・改善すべき点〉

- 知的財産に関し、よく見えなかった。どの領域でどの程度強いのか。
- PCP の吸着平衡特性、触媒担体としての利用に関しては世界最高水準の成果が得られているが、速度論に関して検討を重ねる必要がある。特許化を優先したためと推察されるが、論文としての成果の公表が十分とはいえない。今後積極的な発表を期待する。
- 「副性ガスによるグリーンプロセス技術」に関しては特許や論文発表が若干不足している印象がある。上記の通り「いけそうだ」という感じがするので、それを早く具体的データで示してほしい。CO_2 を原料にしたシュウ酸等の新規合成プロセスはエネルギー的に合理的なものになり得るのか、皆が納得できるようなストーリーを確立すること。
- 目標値の設定において、特に電極触媒に関しては、電流効率だけでなく、電位のシフトも考慮すべきである。
- 分離回収の目標値の設定に関して、競合技術との優位性を考慮に入れた目標設定になっていることを確認して欲しい。吸着実験で、0℃で測定をしていることに疑問を感じた。実機でも 0℃で運転するのであれば問題ないが、冷却によるコストアップに繋がると考える。

〈その他の意見〉

- 本プロジェクトが目標とする、吸着材や触媒の性能の数値目標をできるだけ具体的に示すことはできませんか。
- 中間評価段階では素材開発が中心になることは当然である。その際、素材開発の方向性を出すために分離プロセスとして PSA を意識して常圧再生にこだわることは妥当なプロセス選定と言えるのか。
- 本プロジェクトの対象に限らずに、有機金属錯体の用途開発を行うことが望ましい。
- 今後は、現象のメカニズムの解明にも力を入れて欲しい。

４）実用化の見通しについて

PCP の潜在的な可能性を引き出す研究開発が行われており、関連分野への波及効果も期待できる。特に、PCP の吸着選択性と吸着と触媒反応の重畳場の利用は、二酸化炭素の分離回収だけでなく、他の用途への波及効果がある。また、国内の当該分野のトップ企業が参画しており、目標を達成した際の実用化の可能性を十分に有する。さらに、集中研方式でプロジェクトを遂行しているので、研究開発に係る人材育成が十分に期待できる。

しかしながら、材料コスト、分離プロセスを合わせたトータルコストとして既存技術と競合可能となる道筋が見えてこない。競合技術と比較して現時点でどのレベルとか、部材がここまで安くなれば競争力を持つ、等の評価が必要である。一方では、製造コストが現行レベルでも実用化が可能となるように、PCP の潜在可能性を引き出すことで他の方法では分離が難しい分離対象を選ぶことも、早期の実用化に必要と考える。

また、CO_2 再資源化触媒の研究は、基礎研究の領域であり、実用化イメージ・出口イメージに基づき、開発の各段階でマイルストーンには、曖昧さがある。

〈肯定的意見〉

○ テーマによっては実用化を意識した課題設定になっているといえる。

○ １．複製ガス分離精製＆材料開発に関しては、明確。

○ PCP の成形法に関して有用な検討が行われている。また、気相法による PCP 製造は PCP の大量生産に向けて有用な情報である。PCP の吸着選択性と吸着と触媒反応の重畳場の利用は、二酸化炭素の分離回収だけでなく、他の用途への波及効果がある。集中研方式でプロジェクトを遂行しているので、研究開発に係る人材育成が十分に期待できる。

○ 開発のマイルストーン等は明確であり、このまま進めてもよいと考える。またこの成果の関連分野への波及効果はかなり大きいと考える。

○ コストの問題が残されているが、出口イメージは明確にされており、技術的波及効果は大きい。産学の連携、基礎科学と工学の連携が上手に行われており、研究開発や人材育成等を促進する波及効果がある。

○ 国内の当該分野のトップ企業が参画しており、目標を達成した際の実用化の可能性を十分に有すると考える。加えて、PCP の潜在的な可能性を引き出す研究開発も行われており、関連分野への波及効果が期待できる。

〈問題点・改善すべき点〉

● 繰返しになるが、他の競合する分離技術との比較が不十分と感じた。ユーザーは、コストを重視して技術を選定するので、競合技術がある場合は、

競合技術に対してコスト競争力を有するための開発目標の設定が重要である。

- 剤コスト、分離プロセスを合わせたトータルコストとして既存技術と競合可能となる道筋が見えてこない。
- 二酸化炭素の分離回収では、ガス吸収法などとコスト面で定量的な比較が行われないと、実用化のイメージを描ききれない。
- 触媒グループの方に関しては、実用化イメージ・出口イメージに基づき、開発の各段階でマイルストーンには、あいまいさがある。ただし、難しい事業内容であることは考慮すべきであろう。
- 実用化のイメージはテーマごとにバラバラである。特に CO_2 再資源化触媒の研究は、基礎研究の領域であり、CO_2 活性化をベースにどのような展開があるかを検討してほしい。
- この技術の適用分野はかなり広いものと思う。この適用分野の調査をもっとやるべきではないか。この技術はここに紹介してあるものの他にどういう分野に適用できそうか検討してほしい。例えば、空気中の水分除去あるいは水素貯蔵等に適用できないか。このようなことが可能であれば適用分野はかなり広がると考える。
- ２．副生ガスによるグリーンプロセス技術に関しては、無理矢理感があります。１．をサポートする基礎研究、例えばなぜそうなるのか？この現象は＊＊ゆえ。よってこのような作業仮設をベースに、材料開発を行えば＊＊が期待できる。など、１．につながるような、また将来の応用開発につながるような目標に変更したらいかがでしょうか？

〈その他の意見〉

- 吸着剤の実用化を考えると、PCP の製造コストを下げることが重要であるとの報告であった。一方で、製造コストが現行レベルでも実用化が可能となるように、PCP の潜在可能性を引き出すことで他の方法では分離が難しい分離対象を選ぶことも、早期の実用化に必要と考える。
- 現行のプロセスの数値（例えば工業的に実施されている分離精製コスト）は明らかなはずである。それと比較して現時点でどのレベルとか、部材がここまで安くなれば競争力を持つ、等の評価があるとわかりやすいと思います。
- CO_2 分離対象としてバイオガスを取り上げたことから、シロキサンが除去対象成分として浮上する。比較的高価な PCP を微量成分除去に適用してコストメリットは出せるのだろうか。
- PCP の製造原価が高く、これでは特殊な用途にしか使えないのではないか。さらなるコスト低減の検討を望む。

２．個別テーマに関する評価結果

２．１　副生ガスの分離・精製材料開発

２．１．１　研究開発成果についての評価

CO_2 分離機能材に関する研究は過去数十年にわたって行なわれているが、画期的なものは出ていない。このような中で、本プロジェクトに関する期待は大きく、新領域を開拓できる可能性は高い。PCP の設計自在性や豊富なデータベースに基づき、適切な材料開発が行われ、目標値を大幅に達成している。特許、新聞発表などの成果の普及と広報は十分である。成果の最終目標は十分達成できる見通しである。特に、柔構造を持つ PCP をペレット化できたことは実用上の意義が大きい。 しかしながら、PCP の吸着平衡における二酸化炭素選択性、常圧脱着に関しては世界最高水準の成果が得られているが、速度論に関して検討を重ねる必要がある。また、目標値の設定が「世界最高レベル」とあるが、世界最高レベルでも実用化されていない技術は多く存在する。競合技術との比較において、実用化に必要となる値を目標値として設定することが好ましい。

〈肯定的意見〉

○ 分離の視点を加味して材料開発が行われている。柔構造を持つ PCP をペレット化できたことは実用上の意義が大きい。

○ CO_2 分離機能材に関する研究は過去数十年にわたって行なわれているが、画期的なものは出ていない。このような中で、本プロジェクトに関する期待は大きく、新領域を開拓できる可能性は高いと考える。また、特許出願、論文発表等はよく行なわれており、中間目標はほぼ達成されていると考える。

○ PCP の設計自在性や豊富なデータベースに基づき、適切な材料開発が行われ、当初目標に関しては達成している。

○ 京都大学が材料となる PCP の設計、合成を行い、クラレ、昭和電工、東洋紡績、昭栄化学工業の各企業がそれぞれの応用技術を高めるという連携がとれており、中間目標を達成している。最終目標を達成できる見込みも高い。

○ 十分な将来性が期待できる材料である。実用化に関しての数値目標及び世界の特許状況の中での位置付けが明確にされたならば、更なる加速も視野にいれてもよいと思います。また、上記をサポートする基礎研究に力を入れるのも必要と思います。

○ 中間目標の設定値の是非は別にして、目標値を大幅に達成している。作製した PCP の二酸化炭素とメタンの吸着平衡選択性は世界最高水準である。

CO_2PSA の脱着圧力を常圧として十分な有効吸着量を得ることに成功している。PCP の成形に成功し、成形による二酸化炭素吸着特性の低下を防止している。一部の用途では、打錠成型により実用化可能な強度をもつ成形体の作製に成功している。PCP のスケールアップ合成の環境が整いつつある。特許、新聞発表などの成果の普及と広報は十分である。成果の最終目標は十分達成できる見通しである。

○ 目標値は概ねクリアしており、評価できる。また、知財等の具体的な成果も妥当であると考える。

〈問題点・改善すべき点〉

● 中間目標を達成しただけでは必ずしも実用化には結びつかないと考える。この吸着材は多くのプロセスに適用できると思われるが、例えばいくつかのプロセスについて実用化のためには何が必要となるのか明確にしてほしい。CO_2 回収のための全消費エネルギー、耐久性、耐熱性、吸着容量、吸着速度、再生方法（加熱または減圧の条件）等を明らかにし、それに対して現状はどうなっているのか示してほしい。

● CH_4 分離用 PCP とエチレン分離用 PCP で成形法が異なるのはいかなる理由によるものか。参画企業間の連携は十分行われているだろうか。

● 分離プロセスへの応用を考えると、プロセス側から要求される条件を考慮した材料選択が必要となる。実用化を目指す上で避けては通れないので、十分に意識してほしい。

● 目標値の設定が「世界最高レベル」とあるが、世界最高レベルでも実用化されていない技術は多く存在する。競合技術との比較において、実用化に必要となる値を目標値として設定することが好ましいと考える。実用化を目指す材料で、0℃で吸着量を測定する意味が分かり難い。

● PCP の吸着平衡における二酸化炭素選択性、常圧脱着に関しては世界最高水準の成果が得られているが、速度論に関して検討を重ねる必要がある。二酸化炭素－メタン分離において、二酸化炭素の分離回収量では BASF 社の PCP を凌駕しているが、メタン回収量では BASF 社に及ばない。特許化を優先したためと推察されるが、論文としての成果の公表が十分とはいえない。今後積極的な発表を期待する。

● コスト面を改善する方策をもっと明確にすることが必要である。

〈その他の意見〉

・ 設定目標値は、ひとつの材料で全ての項目をクリアすべきと考えるが、CO_2/窒素分離の PCP の中間目標の達成度の表（18/22）で、3 つの目標項

目の内、吸着熱は別の材料でクリアしたと聞いた。これが正しいとすると、表に材料名を明記して、その事実を喚起すべきだと考える。誤解を生じる可能性がある。報告資料全般で、測定条件（例えば、温度）が明記されていない等、技術的に正しく評価するための情報が不足しているように感じた。

- 上記に関連し、達成目標に吸着エネルギー40kJ／mole 以下とあるが、これよりも重要なのは CO_2 を分離回収するための全消費エネルギーである。このような実用化のために必要なデータを示してほしい。まだ試作段階であるから、全てを明らかにすることは困難であろうが、消費エネルギーは圧力、温度条件が決まれば比較的簡単に計算できる。これより、本技術と従来技術との概略比較ができると思う。
- 各社が実施している分野での知財関係を整理するべきと思います。
  数値や target など参考になると思います。
  既にがっちり押さえられている領域への try は、非常に困難だと思います。

２．１．２　実用化の見通しについての評価

PCP の構造柔軟性を利用した吸着選択性と脱着性の向上は二酸化炭素の分離回収だけでなく、他の用途への波及効果もある。集中研方式でプロジェクトを遂行しているので、研究開発に係る人材育成が十分に期待できる。

一方、ある程度の基礎データは出ており、そろそろ実用化を念頭に置いたデータを出してほしい。二酸化炭素の分離回収では、ガス吸収法などとコスト面で定量的な比較が行われないと実用化のイメージを描ききれない。分離プロセスへの応用を考えると、プロセス側から要求される条件を考慮した材料選択が必要となる。実用化を目指す上で避けては通れないので、十分に意識してほしい。例えば、原料ガスには多様な不純物が含まれる。本開発では分離対象を限定した条件下で分離材料の選定を行っているが、今後は不純物の影響等についても検討が必要である。この吸着材でできることと、できないことを明確にし、これを広く PR してほしい。その中では、PCP を使った時のメリットを具体的にする必要がある。

〈肯定的意見〉

○ 各テーマとも実用化を考慮した材料探索を実施している。

○ 実用化に必須である PCP の成形法に関して有用な検討が行われている。PCP の構造柔軟性を利用した吸着選択性と脱着性の向上は二酸化炭素の分離回収だけでなく、他の用途への波及効果がある。集中研方式でプロジェクトを遂行しているので、研究開発に係る人材育成が十分に期待できる。

○ 各企業とも、出口イメージが明確になっており、成果の波及効果も大きい。

○ 既存のプロセスや材の置き換えなので目標、出口イメージは明確。

○ いくつかのプロセスを対象に種々検討されており、実用化の可能性は高いと考える。もし成功すれば関連分野への波及効果は大きい。また、本技術は国内外で大いに注目されており、現在参加している人のみならず、その他の研究開発や人材育成を促進する等の波及効果が期待できる。

○ その分野のトップ企業が関与しているので、目標値を達成した際の実用化の可能性は高いと考える。

〈問題点・改善すべき点〉

● ある程度の基礎データは出ており、そろそろ実用化を念頭に置いたデータを出してほしい。また、本吸着材の適用分野をもっと広げる必要がある。今対象としているシロキサン除去やメタン／CO_2、エチレン／CO_2 分離だけでは規模が小さい。とりあえずはこれでよいが、今後さらにこういうこともできるということを示してほしい。PCP の試験は平衡吸着量、破過

曲線、再生曲線など評価しやすいデータを取る必要がある。

- PCP は分子構造に大きく性能が依存するので、コストを下げるために市販の試薬を探す方策では、無理があるように思われる。
- 二酸化炭素の分離回収では、ガス吸収法などとコスト面で定量的な比較が行われないと実用化のイメージを描ききれない。
- 競合技術との比較を行い、PCP 吸着剤の有効性を明確にして欲しい。
- 既存プロセスと比較して、どの程度の性能があれば実用化が可能かといった視点での目標設定や技術評価をしてない。材料開発と並行してプロセス開発が進まないと実用化には繋がらない点に注意してほしい。
- CH_4、エチレンと CO_2 分離において、原料ガスには多様な不純物が含まれる。本開発では分離対象を限定した条件下で分離材料の選定を行っている。ここで取り上げていない分離が必要な成分については従来技術で対応すると考えられるが、工程を重ねることはイニシャルコスト的にも目的成分の回収率の点でも不利である。このような点において、最終評価に向けた見通しが明らかとはいえない。

〈その他の意見〉

- この吸着材でできることと、できないことを明確にし、これを広く PR してほしい。その中では、PCP を使った時のメリットを具体的にする必要があると思う。例えば、今話題の放射性物質の吸着分離には適用の可能性はありませんか。
- 波及効果を考える場合、原料ガス構成が同一で濃度だけが異なるケースと言うのは極めて限られ、他の成分が混入する場合がほとんどである。本 PCP 探索では目的成分を絞って特異的な特性を見出す努力が行われてきたから、除去対象成分が増えることには対応していない。このようなことはシロキサン除去に場合に典型的で、波及効果を VOC 除去あるいは脱臭に求める時、開発済みの PCP が転用できるという保証あるいは根拠は発表資料の範囲では見当たらない。波及効果を何に求めるかについて一考を要する。
- いかに材のコストダウンを行うかが課題。現状、材料の原料費だけで目標材料価格を大幅に上回っている。

２．１．３　今後に対する提言

CO_2 分離回収は、競合技術が存在するので、是非、競合技術との比較検討を行い、PCP の優位性を示して欲しい。本技術を適用した時の、従来法に比べての経済性、省エネ性、環境面でのメリットを極力具体的に示してほしい。 脱離のエネルギーが低い事や吸着量が多い事は、一つの側面では重要であるが、実条件下では、異なる環境の場合が多い。また速度というキーワードが欠けている。実条件に対応できる材の設計、また材の微妙な制御が可能となるような、今後の研究成果に期待したい。

〈今後に対する提言〉

- PCP の製造コストの削減は可能性が低いと思われるので、コストに見合う用途開発を意識して研究開発を進めるべきである。大量生産のプロセスには、蒸留に比べて吸着分離が不向きであることを認識して、PCP の使用が必須である対象を探索する必要がある。
- 今の順調な研究の進捗状況から察すると、各目標は達成されると思われるので、もっと PCP の高価値性をいかす用途を探すことも視野に入れた方がよい。
- 脱離のエネルギーが低い事や吸着量が多い事は、一つの側面では重要ですが、実条件下では、例えば室温のガスなどそうそうありません。また速度という keyword が欠けているように思います。実条件に対応できるような材の設計が可能な、また材の微妙な制御が可能な、今後の研究成果に期待しております。
- CO_2 分離回収は、競合技術が存在するので、是非、競合技術との比較検討を行い、PCP の優位性を示して欲しい。この優位性を得るための PCP の物性値が、事業の目標値となると考える。目標値の測定条件に、温度条件が無くても良いかを検討して欲しい。0℃で実用化が出来るとは考え辛いので。
- 素材の実用化に当たって粉体は扱いにくく、形態付与は必須である。ガスの分離・精製は今後の課題であるが、プロセス最適化を意図した粒子製造はまだ着手されていないから、最終評価に向けてこの点が促進される必要がある。
- PCP の優位性を利用した分離プロセスは、本テーマ以外にも考えられると思う。検討の幅を広げるとより大きな成果が得られると思う。逆にすでに実用化は難しいテーマも見られる。消費エネルギーの削減につながる課題があれば、柔軟に対応していただきたい。
- 適用分野が今検討しているものだけでは小さく、そのため波及効果も少な

いような印象を受ける。そのため、まず第１段階としては、今検討しているテーマをとりあえず対象とするが、今後こういう分野も視野に入れて研究を進めており、その社会的インパクトはかなり大きいというようなことを示してほしい。

〈その他の意見〉

- CO_2を原料に転化するための触媒開発とCO_2分離剤開発が一連のものなら、CH_4分離の際、空隙ガスが脱着CO_2に混入するPSAプロセスは妥当であるかと言う疑問が湧く。つまりCH_4回収が主目的になると、CO_2自身を触媒により他の物質に変換する際、簡単なプロセスで高純度のCO_2を回収して使うことが経済的にも反応的にも望ましいという基本線がおろそかになってしまうことを危惧する。
- データを早く出して、本研究が広い分野での実用化を目指しており、その波及効果はかなり大きいということを示してほしい。また、本技術を適用した時の、従来法に比べての経済性、省エネ性、環境面でのメリットを極力具体的に示して下さい。

２．２　副生ガスによるグリーンプロセス技術

２．２．１　研究開発成果についての評価

実用化を目指した触媒の製造法をほぼ確立しており、中間目標はほぼ達成されている。特に、CO_2 の還元電位を下げることに成功した成果は、注目に値する。水中での二酸化炭素の還元は世界初の技術である。世界に先駆けて低電位で還元を実現し、電流効率 60%以上を達成している。気相法を用いた PCP 製造の見通しが得られたことは、今後の PCP 大量生産への道を切り開く有用な成果であり、高く評価する。

しかしながら、試設計といえども、電解でシュウ酸を合成した場合の、現行プロセスとの比較が必要である。また、特許や論文発表が少ない。シュウ酸、ギ酸の合成以外にも用途が展開する可能性を有すると考える。反応メカニズムの解明を行い、他用途への発展の可能性を示してほしい。

〈肯定的意見〉

○ 実用化を目指した触媒の製造法をほぼ確立しており、中間目標はほぼ達成されていると考える。これが実用化できれば、触媒を始め新領域を開拓できる可能性はあると考える。

○ オートクレーブが必要だった反応が、気相法を用いた調製を可能にした事は非常に興味深い。本質の解析検討をしていただき、他のオートクレーブが必要な材合成や、時間のかかった合成などに応用できるとなお楽しいと思います。

○ 実用的反応装置による PCP 合成に目処を得たことを評価する。

○ 気相法による合成技術の成果は評価に値する。PCP 実用化に向けた１つのブレークスルーであろう。原料製造も含めて今後もコストダウン研究の成果を期待したい。

○ 中間目標で設定された目標値を問題なく達成している。PCP と触媒の複合化に関する基盤技術が確立されている。水中での二酸化炭素の還元は世界初の技術である。世界に先駆けて低電位で還元を実現し、電流効率 60%以上を達成している。気相法を用いた PCP 製造の見通しが得られたことは、今後の PCP 大量生産への道を切り開く有用な成果であり、高く評価する。特許、新聞発表などの成果の普及と広報は十分である。成果の最終目標は十分達成できる見通しである。

○ CO_2 の還元電位を下げることに成功した成果は、注目に値する。

○ より安価な金属錯体を触媒で、CO_2 をより低ポテンシャル（電圧）で還元できる系を見出したことは高く評価できる。電流効率は中間目標に掲げられているが、この低ポテンシャルの方がエネルギー的に意義が大きい。

〈問題点・改善すべき点〉

- シュウ酸、ギ酸の合成以外にも用途が展開する可能性を有すると考える。是非、反応メカニズムの解明を行い、他用途への発展の可能性を示して欲しい。CO_2 削減の目的で、化学反応に電力を用いることには慎重であるべきだと思う。
- 電解でシュウ酸を合成した場合の、現行プロセスとの比較が必要と思います。実施する意味があるのか要精査すべきと感じました。
- 還元型分子触媒の研究は、基礎研究の領域であり、現在の研究を進めてもプロセス研究としての成果のイメージがつかめない。特に電気化学的な利用を目指すのか、気固反応での応用を目指すのかわからない。目標の再設定が必要ではないか。
- 特許や論文発表が少ない。今後早急な対応を望む。対象としているプロセスに関し、従来法との比較を行ない、本法のメリットを明確にしてほしい。また、そのメリットをデータにより示して下さい。
- スケールアップ要件の抽出は自明の結果であるので、評価できない。特許化を優先したためと推察されるが、論文としての成果の公表が十分とはいえない。今後積極的な発表を期待する。

〈その他の意見〉

- 高価な PCP を担体として使うことの必然性が判りにくい。電流効率 60% 以上は担体価格差を解消するに十分な性能だろうか。
- 触媒としての性能評価を早く実施してほしい。その評価は実用化を目指した内容とする必要がある。従来法に比べてどのようなメリットを出そうとしているのか見えにくい。
- 基礎研究としての、電極上へのアセンブリや金属との複合による新材料、新機能発現などの研究は、CO_2 うんぬんを抜きにして、NEDO 先導で実施する意味があると思います。また、十分実施されているとは思いますが、材の特性を生かした種々の反応の整理を実施され、今回ハンドリングされている材料に apply できないかなども検討されたらいかがでしょうか。

２．２．２　実用化の見通しについての評価

PCP を触媒単体として使用するという初めての試みであり、新しい可能性を見出しており、時間を要するかも知れないが、成功すればその波及効果は大きい。

一方、実用化に向けて、従来法に比べてどの程度の低コスト化、省エネ化、高性能化が期待できるのかを示す必要がある。基盤技術を確立する段階であることは理解できるが、PCP を用いた二酸化炭素の還元では、コスト面で定量的評価が行われないと実用化のイメージを描ききれない。CO_2 削減の目的で、エネルギー源として電力を用いる反応を実用化することは難しいと感じる。

〈肯定的意見〉

○ PCP の成形法に関して有用な検討が行われている。また、気相法を用いた PCP 製造は、PCP の大量生産に向けて有用な情報である。吸着と触媒反応の重畳場の利用は、二酸化炭素の還元だけでなく、他の用途への波及効果がある。集中研方式でプロジェクトを遂行しているので、研究開発に係る人材育成が十分に期待できる。

○ 新しい可能性を見出しており、時間を要するかも知れないが、実用化の可能性を有すると考える。

○ PCP を触媒単体として使用するという初めての試みであり、成功すればその波及効果は大きいと考える。

○ 気相合成に関しては実用化イメージが明確である。

〈問題点・改善すべき点〉

● PCP を触媒単体として用いることによる期待効果を、具体的数値目標で示す必要がある。従来法に比べてどの程度の低コスト化、省エネ化、高性能化が期待できるのか、予想でもよいので示すべきと考える。シュウ酸は従来どういう方法で製造されており、これを本法で製造するとどの程度の低コスト化、省エネ化が期待できるのか示してほしい。

● 実用化に向けた課題の抽出と実用化の促進に向けた研究開発の加速を行って欲しい。

● 前述したが、無理矢理 CO_2 ではなく、より基礎研究側の目標設定に変更されたらいかがでしょうか。

● VOC 分解触媒実用化は 26 年以降触媒設計から着手であり、果たして期待できるものであるか予測がつかない。

● 複合触媒の合成は前述の通り実用化イメージがつかめない。すでに新たな技術領域の開拓と位置付けているが、そうすると東洋紡の実施内容は見直

しが必要。

- 基盤技術を確立する段階であることは理解できるが、PCP を用いた二酸化炭素の還元では、コスト面で定量的評価が行われないと実用化のイメージを描ききれない。

〈その他の意見〉

- PCP を触媒単体として使用した場合、可能なこと、不可能なことを明確にして下さい。（PCP を使えば何でもできるということではないと思う）うまくいけば波及効果は大きいが、広く普及するかどうかが見えない。
- 元来、CO_2 の利用は、実用化までは道のりが遠いテーマである。
- CO_2 削減の目的で、エネルギー源として電力を用いる反応を実用化することは難しいと感じる。従来の触媒では難しい化学反応を可能とする触媒を提供する方向で実用化を目指した事も合わせて検討して欲しい。

２．２．３　今後に対する提言

PCP の製造コストの削減は可能性が低いと思われるので、コストに見合う用途開発を意識して研究開発を進めるべきである。CO_2 削減と言う出口に限定されること無く、従来の触媒では難しかった反応が可能となる新規触媒の開発を目指してほしい。可能であれば、CO_2 の電気化学的還元だけでなく、化学変換する他のプロセスも視野に入れた方がよい。

〈今後に対する提言〉

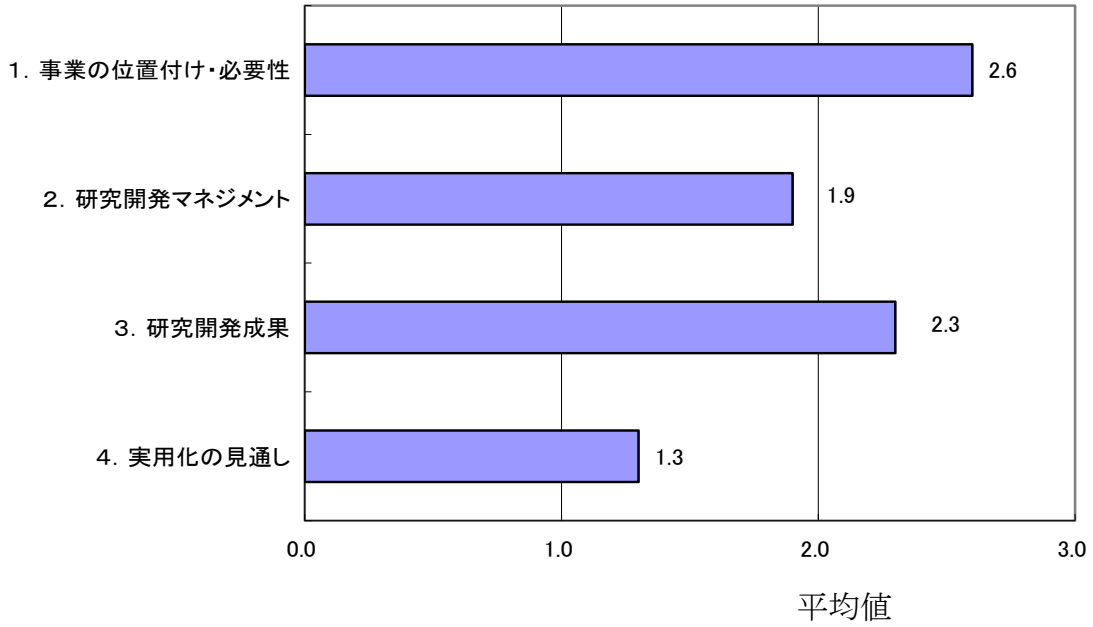
- 分離材としての可能性だけでなく、種々のコントロールが可能な機能性材料としての可能性も非常に大きいと思います。将来の応用研究、実用化の礎となる基礎研究にも重きを置いていただければと思います。
- 本技術の適用範囲を、現在対象としているものだけでなくさらに広げることを検討してほしい。触媒の合成には成功したが、その用途が少なかったということがないように研究を推進して下さい。
- 気相合成の成果は分離材料としての PCP 合成であれば成果ありといえる。しかし、複合触媒の合成と結びつけると出口イメージが不明確になる。触媒研究とは切り離して目標設定をしたらいいのではないか。
- PCP の製造コストの削減は可能性が低いと思われるので、コストに見合う用途開発を意識して研究開発を進めるべきである。
- CO_2 削減と言う出口に限定されること無く、従来の触媒では難しかった反応が可能となる新規触媒の開発を目指して欲しい。
- 可能であれば、CO_2 の電気化学的還元だけでなく、化学変換する他のプロセスも視野に入れた方がよい。

〈その他の意見〉

- CO_2 排出削減のために、様々な化学プロセスで高度な分離や選択的触媒反応の実用化を目指すことは間違ってない。しかし、CO_2 の直接資源化や既存のプロセスへ PCP 複合触媒を適用することは、コスト的にも厳しく、LCA の観点からも増エネルギーになってしまうのでよく確認してほしい。
- これを適用例としてあげている CO_2 還元触媒として使用した場合の、従来法に比べてのメリットを示して下さい。また、CO_2 還元触媒のニーズが大きいのか見えない。

３．評点結果

３．１　プロジェクト全体



評価項目	平均値	素点（注）						
１．事業の位置付け・必要性について	2.6	A	A	B	B	A	B	A
２．研究開発マネジメントについて	1.9	B	A	C	C	B	B	B
３．研究開発成果について	2.3	B	A	B	B	B	B	A
４．実用化の見通しについて	1.3	C	B	C	C	B	C	C

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

〈判定基準〉

１．事業の位置付け・必要性について

・非常に重要　→A
・重要　→B
・概ね妥当　→C
・妥当性がない、又は失われた　→D

２．研究開発マネジメントについて

・非常によい　→A
・よい　→B
・概ね適切　→C
・適切とはいえない　→D

３．研究開発成果について

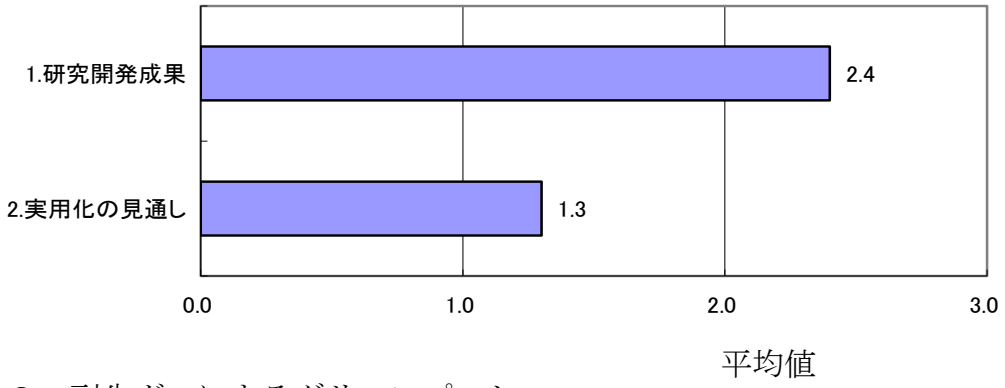
・非常によい　→A
・よい　→B
・概ね妥当　→C
・妥当とはいえない　→D

４．実用化の見通しについて

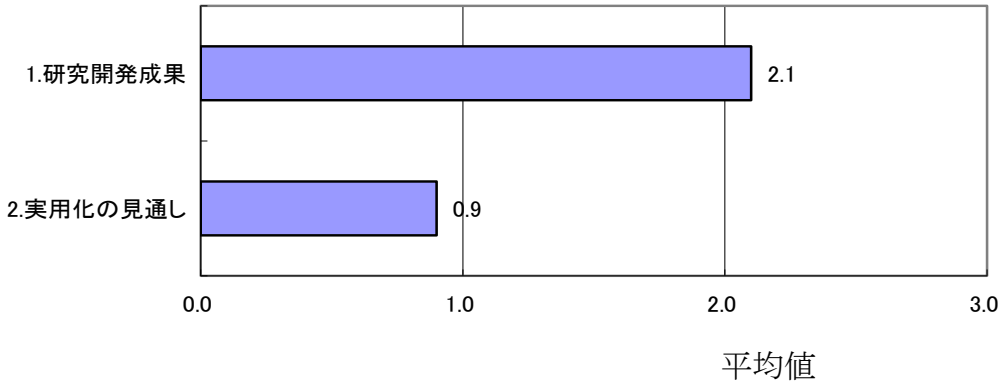
・明確　→A
・妥当　→B
・概ね妥当であるが、課題あり　→C
・見通しが不明　→D

３．２　個別テーマ

３．２．１　副生ガスの分離・精製材料開発



３．２．２　副生ガスによるグリーンプロセス



個別テーマ名と評価項目		平均値	素点（注）						
３．２．１　副生ガスの分離・精製材料開発									
	１．研究開発成果について	2.4	A	A	B	B	B	B	A
	２．実用化の見通しについて	1.3	C	B	C	C	B	C	C
３．２．２　副生ガスによるグリーンプロセス技術									
	１．研究開発成果について	2.1	B	B	C	B	B	A	A
	２．実用化の見通しについて	0.9	D	C	D	C	B	C	C

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

〈判定基準〉

１．研究開発成果について

・非常によい　→A
・よい　→B
・概ね適切　→C
・適切とはいえない　→D

２．実用化の見通しについて

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

第２章　　評価対象プロジェクト

１．事業原簿

次ページより、当該事業の事業原簿を示す。

「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発
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」
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・・ Ⅰ-1
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・・・ Ⅱ-1
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 研究開発の運営管理・・・ Ⅱ-5
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・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ Ⅱ-6
3. 情勢変化への対応・・・ Ⅱ-7
4. 評価に関する事項・・・ Ⅱ-7

Ⅲ. 研究開発成果について
1. 事業全体の成果・・ Ⅲ1-1
2. 研究開発項目毎の成果
2.1 副生ガス分離・精製用 PCP 基盤技術開発の成果
2.1.1 CO_2／窒素分離・精製用 PCP 基盤技術開発・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・ Ⅲ2.1.1-1
2.1.2 メタン精製用 PCP 開発・・・ Ⅲ2.1.2-1
2.1.3 CO_2／エチレン分離用 PCP 開発・・・ Ⅲ2.1.3-1
2.1.4 PCP による微量ガス分離材開発・・ Ⅲ2.1.4-1
2.2 回収 CO_2 によるグリーンプロセス基盤技術開発の成果
2.2.1 PCP 複合触媒基盤技術開発・・・ Ⅲ2.2.1-1
2.2.2 CO_2 還元反応触媒基盤技術開発・・・ Ⅲ2.2.2-1
2.2.3 液相法による PCP 複合触媒開発・・ Ⅲ2.2.3-1
2.2.4 気相法による PCP 複合触媒開発・・ Ⅲ2.2.4-1

2.3 プロジェクト共通基盤技術開発の成果
2.3.1 理論化学・計算化学による PCP 設計アプローチ・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・Ⅲ2.3.1-1
2.3.2 多孔性金属錯体に関する技術動向・・・Ⅲ2.3.2-1

Ⅳ. 実用化の見通しについて
1. 副生ガス分離・精製用 PCP 基盤技術開発の実用化見通しについて
1.1 メタン精製用 PCP 開発・・・Ⅳ1.1-1
1.2 CO_2／エチレン分離用 PCP 開発・・Ⅳ1.2-1
1.3 PCP による微量ガス分離材開発・・・Ⅳ1.3-1
2. 回収 CO_2 によるグリーンプロセス基盤技術開発の実用化見通しについて
2.1 液相法による PCP 複合触媒開発・・Ⅳ2.1-1
2.2 気相法による PCP 複合触媒開発・・Ⅳ2.2-1

（添付資料）

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

概　要

		最終更新日	平成２３年５月３０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・サステイ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/副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発	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　浅子　洋一　2009.04-2009.06 主査　吉田　宏　2009.04-現在　主査　新井　唯　2009.04-現在 主幹研究員　江口　弘一　2009.08-2010.04　主任研究員　岩田　寛治　2010.04-現在		
O．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。 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、ⅳ)化学品原料の転換・多様化を可能とする、等による独創的で革新的な化学プロセスを通じた開発であり、これら研究開発を通じてプロセスイノベーションやマテリアルイノベーションを早期に実現することを目的とする。これにより、わが国全体の産業競争力強化と環境負荷低減を飛躍的に促進することができ、新産業創造戦略及び世界全体をリードしたサステイナブルな産業構造への貢献が期待できる。 本事業では、この中の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、各種化学プロセス等から発生する二酸化炭素等の副生ガスを既存の吸着材料と比較して低エネルギーで効率良く吸着・脱着することができる革新的な吸着材料の開発及び回収副生ガスから有用な化学品を合成するための基盤技術の開発を行う。		
Ⅰ．事業の位置付け・必要性について	我が国の化学産業は、国際的に高い技術力と競争力を有し、社会の発展を支えているが、様々な課題も抱えている。製造プロセスでは、有害添加物(ハロゲン、重金属等)利用、高機能化に伴う多段化等によるエネルギー消費増、廃棄物大量排出等が問題となっている。また、生産に必要な多くの原材料等は一部の産出国からの輸入に頼らざる得ない状況にあり、将来にわたって安定的に化学品を製造可能なのかも危惧されている。これらの問題は、我が国のみならず、地球規模においても認識されており、科学の発展に伴い大量生産・大量消費文明を築き、資源枯渇、地球温暖化に代表されるような問題が顕在化してきている。これら問題に対して、様々な環境対策が世界的に強化されていることに加え、これらの問題を克服し、持続的社会を実現するために、日米欧においてグリーン・サステイナブル・ケミストリー（GSC）活動が進められてきている。我が国においては、GSC は枯渇性資源（原料、エネルギー）の消費を最小化し、かつ製造・加工プロセスで排出される廃棄物及び使用後に排出される廃棄物を最小化すると共に、使用時を含めた全ライフサイクルにわたって「人と環境の健康、安全」を実現する化学技術として位置付けられてきた。NEDO では、これら資源、エネルギー、環境の制約問題を克服し、高機能な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、前項ⅰ)～ⅳ）による「GSC プロセス基盤技術開発」を実施している。 本事業は、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（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の開発）の内の開発項目の一つとして、副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発を行うものである。具体的には、分子設計が可能な多孔性金属錯体（以下、PCP と略す）により、各種化学プロセス等から発生する二酸化炭素等の副生ガスを効率良く吸着・脱着し濃縮することができる革新的な吸着材料を開発し、工業的な利用を目指す。また、回収副生ガスから有用な化学品を合成するための複合触媒に関する基盤技術開発を行う。 本事業により、化学プロセス等から発生する副生ガスの有効利用のための分離に要するエネルギーを低減することに加え、副生ガスを原料として用いるための基盤技術を開発することにより、我が国の化学産業等の GSC プロセス化に寄与することができる。		

概　要

Ⅱ．研究開発マネジメントについて

事業の目標	化学プロセスや製鉄所等から排出される二酸化炭素を含む副生ガスの分離・精製には、現状は化学吸収法やPSA（プレッシャースイングアドソープション）法等が用いられているが、吸収液の再生や吸脱着時のコンプレッサー等の運転に要するエネルギーが大きい等の問題点を有している。 本事業では、化学プロセス等の生産プロセスから発生する二酸化炭素等の副生ガスを、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、高純度、低コスト、低エネルギーで精製できる革新的な吸着材料（多孔性金属錯体、PCP）を開発し、濃縮された副生ガスを有用な化学品に転換できるクリーンなプロセスを確立するための基盤技術の開発を行う。 中間目標（平成23年度末） ①副生ガスの分離・精製材料の開発 ・副生ガス中に含まれる二酸化炭素等を選択的に分離するPCP構造の設計を行い、副生ガスに含まれる有用成分、微量成分を効率的に分離できる吸着特性の優れたPCP材料を開発する。 ・数値目標は以下の通り 二酸化炭素に関し、選択分離後の濃度95%以上、吸着エネルギー40kJ/mol以下、 分離度150以上 ②副生ガスによるグリーンプロセス技術の開発 ・回収した二酸化炭素を有用な化学品に転換できるクリーンなプロセスのモデル反応として二酸化炭素からシュウ酸等の含酸素化合物をマイルドな条件で効率的に合成するPCP担持の複合触媒を開発する。 ・数値目標は以下の通り 二酸化炭素からシュウ酸等の含酸素化合物の生産における選択率（電流効率）60%以上

事業の計画内容

主な実施事項	H21fy	H22fy	H23fy	
副生ガスの分離・精製材料の開発	←→	←→	←→	←→
副生ガスによるグリーンプロセス技術の開発	←→	←→	←→	←→

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	１８０	１５２		３３２
特別会計（電源・需給の別）			１５９	１５９
加速予算（成果普及費を含む）	６１	３２４		３８５
総予算額	２４１	４７６	１５９	８７６

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	国立大学法人京都大学　大学院理学研究科　教授　北川　宏
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）	（国）京都大学 （共）自然科学研究機構分子科学研究所 （株）クラレ 昭和電工（株） 東洋紡績（株） 昭栄化学工業（株）

情勢変化への対応	平成２２年２月：開発サイクル高効率化のため、加速により集中研に反応装置及び評価装置を導入 平成２２年６月：実用化時の課題検討着手のため、加速により成形装置、評価装置等を導入 平成２２年１１月：早期実用化のため、中量合成装置及び実ガス想定の評価装置等を導入
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

概　要

<table>
<tr><td>Ⅲ. 研究開発成果について</td><td>
中間目標（平成 23 年度末）とそれに対する成果は以下の通り

①副生ガスの分離・精製材料の開発
<table>
<tr><td>項目</td><td>目標（平成 23 年度末）</td><td>成果（平成 22 年度末時点）</td></tr>
<tr><td>選択分離後の濃度</td><td>95%以上</td><td>98%</td></tr>
<tr><td>吸着エネルギー</td><td>40kJ/mol 以下</td><td>35kJ/mol</td></tr>
<tr><td>分離度</td><td>150 以上</td><td>200</td></tr>
</table>
・中間目標は既に達成
・各企業の個別開発目標についても達成

②副生ガスによるグリーンプロセス技術の開発
<table>
<tr><td>項目</td><td>目標（平成 23 年度末）</td><td>成果（平成 22 年度末時点）</td></tr>
<tr><td>選択率（電流効率）</td><td>60%以上</td><td>60%以上</td></tr>
</table>
・中間目標は既に達成
・各企業の個別開発目標についても年度内に達成の目処
</td></tr>
<tr><td></td><td>
<table>
<tr><td>投稿論文</td><td>「査読付き」７件、「その他」２件</td></tr>
<tr><td>特　　許</td><td>「出願済」１８件、（うち国際出願１件）　（ 2011 年 5 月末現在）</td></tr>
<tr><td>その他の外部発表
（プレス発表等）</td><td>研究発表３件、新聞掲載５件</td></tr>
</table>
</td></tr>
<tr><td>Ⅳ. 実用化の見通しについて</td><td>基盤技術としては、①副生ガスの分離・精製材料の開発及び②副生ガスによるグリーンプロセス技術の開発とも、当初目標を上回るペースで開発が進んでいる。
また、各企業にて当初計画より前倒しで実用化の検討を開始している。</td></tr>
<tr><td rowspan="2">Ⅴ. 基本計画に関する事項</td><td>
<table>
<tr><td>作成時期</td><td>２１年３月　作成</td></tr>
<tr><td>変更履歴</td><td>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）</td></tr>
</table>
</td></tr>
</table>

プロジェクト用語説明集

Ⅰ．事業の位置づけ・必要性について
Ⅱ．研究開発マネジメントについて
Ⅲ．研究開発成果について
　1．事業全体の成果

専門用語	英語記載	専門用語の説明
グリーンプロセス	green process	材料、エネルギー、廃棄物等による環境負荷の低減を図ったプロセス
多孔性金属錯体	Metal-Organic Framework	金属イオンと有機配位子よりなる多孔性の構造体 MOF（Metal-Organic Framework）という呼び方もあるが、本プロジェクトでは、別称であるPCP（Porus Coordination Polymers：多孔性配位高分子）と略する 金属イオンと配位子の組合せにより、分子デザインが可能
化学吸収法	chemical absorption process	CO_2をアミンや炭酸カリウムの溶液に吸収させ分離する方法 吸収液は加熱して再生しCO_2を回収
PSA法	Pressure Swing Adsorption method	圧力スイング吸着法 圧力の切り換えにより吸着と脱着を行い、混合ガスを分離・精製する手法
PCP複合触媒	PCP hybridized catalyst	PCPと触媒を複合化させたもの
電流効率	current efficiency	流した電流のうち、目的とする電極反応に使用された割合
液相法	liquid phase reaction	溶液を用いてPCP及びPCP複合触媒を調製する方法
気相法	gas phase reaction	気相中でPCP及びPCP複合触媒を調製する方法

プロジェクト用語説明集

Ⅲ. 研究開発成果について
2. 研究開発項目毎の成果
2.1 副生ガス分離・精製用PCP基盤技術開発の成果
2.1.1 CO_2／窒素分離・精製用PCP基盤技術開発

専門用語	英語記載	専門用語の説明
クラウジウスークラペイロンの式	Clausius-Clapeyron Equation	ガスの吸着においてどの程度強い力で吸着するかを見積もれる式
有機配位子	Organic Ligand	金属と結合できる有機物
熱力学的半径	Kinetic Diameter	吸着するときにその分子が取る半径
結晶構造解析	X-ray Structure Analysis	X線によって分子構造を明らかにすること
ミクロ多孔体	Microporous Material	固体の内部に2nmより小さな細孔を持つ化合物のこと
ゲートオープン型	Gate-Opening	あるガス圧力に達したときに急にガス吸着が始まること
二次元レイヤー構造	Two-dimensional Layer Structure	層状の分子構造体がお互い重なってできる構造のこと
平衡状態	Equilibrium Condition	ガスの吸着・脱着が同じ頻度で起こっている状態のこと
ガスクロマトグラフィー	Gas Chromatography	気化しやすい化合物の同定・定量に用いられる機器分析の手法
圧力スウィング法	Pressure Swing Adsorption	混合ガスにおいてあるガスを分離するときに用いられる手法の一つ
双極子モーメント	Dipole Moment	化合物内・化合物間で電気的に＋と－の場所がお互い引き合うときの値
固溶体	Solid Solution	固体内において、異なる固体構造部分を一緒に持つような化合物のこと
ル・ベール解析	Le Bail Analysis	X線を粉末固体に照射して得られるデータを元に固体の結晶の情報を得る手法のこと
吸着等温線	Adsorption Isotherm	ガス分子が固体中にどのように吸着してゆくかを追ったデータ
ゼオライト	Zeolite	主にSi(シリカ)とAl(アルミナ)から合成できる多孔性材料のこと

プロジェクト用語説明集

Ⅲ. 研究開発成果について
2. 研究開発項目毎の成果
2.1 副生ガス分離・精製用PCP基盤技術開発の成果
2.1.2 メタン精製用PCPの開発

専門用語	英語記載	専門用語の説明
バイオガス	bio gas	バイオ燃料の一種で、生物の排泄物、有機質肥料、生分解性物質、汚水、ゴミ、エネルギー作物などの発酵、嫌気性消化により発生するガス。メタン、CO_2が主成分。
ランドフィルガス	landfill gas	バイオガスの内、ごみの埋立処分場から発生するガス。
精製	purification	混合物を純物質にする工程、あるいはその技術。
多孔性金属錯体	porous coordination polymer	金属イオンと配位子からなる多孔性の金属錯体。
嫌気性消化処理	anaerobic digestion treatment	下水・し尿汚泥処理において、酸素との接触を断って、嫌気性細菌によって分泌される酵素の働きのみによって有機物を分解(消化)すること。
バイオマス	biomass	家畜排せつ物や生ゴミ、木くずなどの動植物から生まれた再生可能な有機性資源。
吸着法	adsorption process	ゼオライト、活性炭、アルミナなどの吸着剤に、二酸化炭素を選択吸着させ、分離・回収する手法。
物理吸収法	physical absorption process	高圧でメタノール、ポリエチレングリコール等の溶解度を上げた液体に二酸化炭素を物理的に吸収させ、分離・回収する手法。
化学吸収法	chemical absorption process	二酸化炭素を反応吸収するアミンなどのアルカリ性の溶液を用いて、二酸化炭素を分離・回収する手法。
膜分離法	membrane separation process	セルロースアセテートなどの多孔質の高分子膜にガスを透過させ、透過速度の違いを利用して、二酸化炭素を選択的に分離・回収する手法。
深冷分離法	cryogenic distillation process	ガスを圧縮液化し、蒸留により他の不純物を除去し、二酸化炭素を選択的に分離・回収する手法。

Ⅲ. 研究開発成果について
2. 研究開発項目毎の成果
2.1 副生ガス分離・精製用PCP基盤技術開発の成果
2.1.2 メタン精製用PCPの開発

専門用語	英語記載	専門用語の説明
分子篩炭	carbon molecular sieve	対象とする物質の分子の大きさの違いを利用して選択的に分離するため、細孔径を精密に制御した活性炭。
ゼオライト	zeolite	ナノメートルオーダーの細孔が規則的に並んだ多孔性アルミノ珪酸塩総称。天然でも産出されるが、さまざまな構造・性質をもつものが人工的に合成されている。
圧力スイング吸着	pressure swing adsorption	圧力を高くすることにより気体を吸着材に吸着させ、圧力を低くすることで吸着材から気体を脱着させることにより、気体の分離・回収を行う方法。
平衡状態	equilibrium state	一般に系の変化を起こす力がつり合っている状態のこと。吸着平衡とは、一定圧力で吸着の進行が止まったように見える状態(吸着分子数=脱着分子数)を意味する。
吸着速度	adsorption rate	吸着する速度。
温暖化係数	global warming potential	温室効果ガスの地球温暖化に対する効果を、その持続時間も加味した上で、CO_2の効果に対して相対的に表す指標(CO_2=1)。
オフガス	off-gas	PSA装置において、吸着されたガスを脱離して発生するガス。
活性炭	activated carbon	特定の物質を選択的に分離、除去、精製するなどの目的で吸着効率を高めるために化学的または物理的な処理(活性化、賦活)を施した多孔質の炭素を主な成分とする物質。
吸着開始圧	adsorption beginning pressure	吸着等温線において、吸着量が急激に増加する際の圧力。

Ⅲ. 研究開発成果について
2. 研究開発項目毎の成果
2.1 副生ガス分離・精製用PCP基盤技術開発の成果
2.1.2 メタン精製用PCPの開発

専門用語	英語記載	専門用語の説明
吸脱着等温線	adsorption-desorption isotherm	横軸に圧力、縦軸に吸着量をとり、圧力を昇圧または降圧した際の各圧力における平衡状態での吸着量(平衡吸着量)をプロットしたグラフ。
STP	STP	standard temperature and pressure(標準状態)の略。標準状態:温度273.15K及び圧力1bar(10^5Pa)。
分離度	selectivity	流通系ガス分離性能評価により得られる、出口ガス組成比/入口ガス組成比。
有効吸着量	effective capacity	ガスの吸着と脱離を経て得られる吸着量。
吸着エネルギー	adsorption energy	吸着に伴って発生する熱量。
配位子	ligand	孤立電子対を持つ基を有しており、金属と金属を配位結合により連結し、PCPを形成する有機化合物。
静的吸着特性	static adsorption property	主に平衡吸着挙動。
動的吸着特性	dynamic adsorption property	平衡吸着だけでなく、ガスの流通による吸着速度を考慮した挙動。
吸着等温線	adsorption isotherm	横軸に圧力、縦軸に吸着量をとり、圧力を昇圧した際の各圧力における平衡状態での吸着量(平衡吸着量)をプロットしたグラフ。
Clausius-Clapeyron式	Clausius-Clapeyron equation	温度を変えて測定した吸着等温線から等量吸着等温線を求め、その圧力と温度をこの式に代入することにより、熱量計を用いずに吸着エネルギーを求めることができる。
バインダー	binder	成形する際に、粉体の粒子同士を接着する物質。

Ⅲ. 研究開発成果について
2. 研究開発項目毎の成果
2.1 副生ガス分離・精製用PCP基盤技術開発の成果
2.1.2 メタン精製用PCPの開発

専門用語	英語記載	専門用語の説明
ペレット	pellet	粉体を数mm～数cm程度の円筒状に加工したもの。

プロジェクト用語説明集

Ⅲ. 研究開発成果について
2. 研究開発項目毎の成果
2.1 副生ガス分離・精製用PCP基盤技術開発の成果
2.1.3 CO_2/エチレン分離用PCP開発

専門用語	英語記載	専門用語の説明
動的吸着特性	dynamic adsorption property	吸着現象における、ある条件化・非平衡状態での吸着量
打錠成型	tablet compression	粉末を扱いやすい固体にするため、圧力をかけて粒状に成型する手法。
圧力スイング吸着法	pressure swing adsorption method	圧力切り換えにより吸着と脱着を繰り返してガスを精製する手法。
PSA法	pressure swing adsorption method	圧力スイング吸着法の略名。
分離能	degree of separation	クロマトグラフなどで、分離できる能力のこと。
破過	breakthrogh	吸着剤などの性能が限界に達し，除去対象物質が除去装置から流出し始める状態のこと
破過試験	breakthrogh expreiment	上記の破過状態を調べるための実験
熱炭酸カリ法	hot potassium carbonate acid gas removal system	炭酸カリウムを用いた吸収法。酸性ガスの分圧が高い場合の粗除法に適している。

プロジェクト用語説明集

Ⅲ. 研究開発成果について
2. 研究開発項目毎の成果
2.1 副生ガス分離・精製用PCP基盤技術開発の成果
2.1.4 PCPによる微量ガス分離材開発

専門用語	英語記載	専門用語の説明
シロキサンD4	siloxane D4	環状シロキサンの一種であるオクタメチルシクロテトラシロキサンのこと。
細孔径	pore size	多孔質材料が持つ微細な空孔のサイズのこと
活性炭	activated carbon	特定の物質を選択的に分離、除去、精製するなどの目的で吸着効率を高めるために化学的または物理的な処理(活性化、賦活)を施した多孔質の炭素を主な成分とする物質。
嵩密度	bulk density	一定容積の容器に粉体を目一杯充てんし、その内容積を体積としたときの密度
オートクレーブ	autoclave	内部を高圧力にすることが可能な耐圧性の装置。
圧縮成形	compression molding	粉末状の成形材料を金型のキャビティに入れ、圧力と熱を加えて成形する方法。
押出成形	extrusion molding	耐圧性の型枠に入れられた素材に圧力を加え、一定断面形状のわずかな隙間から押出すことで求める形状に加工する方法。

プロジェクト用語説明集

Ⅲ. 研究開発成果について
2. 研究開発項目毎の成果
2.2 回収CO_2ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発の成果
2.2.1 PCP複合触媒基盤技術開発

専門用語	英語記載	専門用語の説明
シュウ酸	oxalic acid	もっとも単純なジカルボン酸。 構造式 HOOC−COOH で表される
含酸素化合物	oxygenated compound	酢酸、ギ酸、シュウ酸やアルコールなど
ラングミュア・ブロジェット法	Langmuir-Blodgett(LB)法	有機分子の薄膜を作成する手法の一つ。一分子の厚みで膜圧をコントロールすることができる製膜法
ポルフィリン	porphyrin	ピロールが4つ組み合わさって出来た環状構造を持つ有機化合物
カルボキシル基	carboxyl group、−COOH	炭素原子にヒドロキシ基一つと酸素原子が二重結合した官能基
石英	quartz	二酸化ケイ素 (SiO2) が結晶してでできた鉱物
layer-by-layer	layer-by-layer	交互積層法、ナノメータースケールの薄膜を溶液から形成する方法
X線回折	XRD	X線が結晶格子で回折を示す現象
電解質	electrolyte	溶媒中に溶解した際に、陽イオンと陰イオンに電離する物質
粉末X線回折測定	X-ray powder diffraction measurement	粉末のように多数の単結晶の集合と考えられる試料のX線回折を測定すること。通常、未知試料を同定するために行われる。
表面X線回折測定	surface X-ray diffraction	平行性の良いX線を試料に極浅い角度で入射し、全反射条件にて試料面に垂直な格子面でのX線回折測定
ナノ	nano	基礎となる単位の10-9倍(＝十億分の一、0.000 000 001倍)の量
大型放射光施設 (SPring-8)	Super Photon ring 8 GeV	世界最大・最高水準の放射光実験施設
還元能	reducing ability	対象とする物質に電子を与える能力

プロジェクト用語説明集

Ⅲ. 研究開発成果について
2. 研究開発項目毎の成果
2.2 回収CO_2ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発の成果
2.2.2 CO_2還元反応触媒基盤技術開発の成果

専門用語	英語記載	専門用語の説明
平衡電位	Equilibrium potential	電気化学的な平衡状態が成立しているときの電極電位。
2電子還元反応	Two electron reduction	基質に対して電子を2つ付加する反応。ここでは二酸化炭素を蟻酸などの2電子還元体に還元すること。
2電子還元電位	Two electron reduction potential	2電子還元されるために必要な電位
電気化学的二酸化炭素還元反応	electrochemical CO_2 reduction	電気化学的に二酸化炭素を還元させる反応
熱力学的平衡電位	thermodynamic equilibrium potential	電気化学的に熱力学的な平衡状態が成立しているときの電極電位。

Ⅲ. 研究開発成果について
2. 研究開発項目毎の成果
2.2 回収CO_2ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発の成果
2.2.3 液相法によるPCP複合触媒開発

専門用語	英語記載	専門用語の説明
液相法	liquid phase method	溶液中で調製する方法
超臨界CO_2	supercritical carbon dioxide	気相-液相間の相転移が起こりうる温度および圧力以上における二酸化炭素のこと。気体と液体の区別がつかない状態にあり、気体の拡散性と液体の溶解性を持つ。
シュウ酸	oxalic acid	構造式 HOOC−COOH で表される、もっとも単純なジカルボン酸。
基質	substrate	ここでは、吸着され、化学反応するガスのこと。
VOC	Volatile Organic Compounds	揮発性有機化合物のこと。常温常圧で大気中に容易に揮発する有機化学物質の総称のことである。トルエン、ベンゼン等が挙げられる。
電流効率	current efficiency	通過した電流のうち、目的とする電極反応に使用された電流の割合。
電気化学的安定性	electrochemical stability	ここでは、ある一定の電位をかけた際にPCP構造が分解されないことを指す。
IR測定	infrared spectroscopy	赤外分光法のこと。測定対象の物質に赤外線を照射し、透過(あるいは反射)光を分光することでスペクトルを得て、対象物の特性を知る方法。
透過型電子顕微鏡	Transmission Electron Microscope; TEM	電子顕微鏡の一種である。観察対象に電子線をあて、それを透過してきた電子が作り出す干渉像を拡大して観察する電子顕微鏡

Ⅲ. 研究開発成果について
2. 研究開発項目毎の成果
2.2 回収CO_2ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発の成果
2.2.3 液相法によるPCP複合触媒開発

専門用語	英語記載	専門用語の説明
高角散乱環状暗視野走査透過型電子顕微鏡	HAADF STEM high-angle annular dark-field scanning transmission electron microscopy	電子線を試料に走査させながら当て、透過電子のうち高角に散乱したものを環状の検出器で検出して観察する電子顕微鏡
キャピラリー電気泳動	capillary electrophoresis	100 μm 以下のキャピラリー内で行う電気泳動法で、イオン性化合物の分離に有用な分離分析法。均一相内での試料の荷電、イオン性、イオン半径等に基づく移動度によって分離する。
電解	electrolysis	電気分解の略。化合物に電圧をかけることで、電気化学的に酸化還元反応を引き起こし、化学分解する方法。
走査型透過電子顕微鏡-エネルギー分散型X線分析装置	scanning transmission electron microscopy energy-dispersive X-ray	顕微鏡の観察時に試料から放射される特性X線を検出し、エネルギーで分光することによって、元素分析や組成分析を行う手法。

プロジェクト用語説明集

Ⅲ. 研究開発成果について
2. 研究開発項目毎の成果
2.2 回収CO_2ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発の成果
2.2.4 気相法によるPCP複合触媒開発

専門用語	英語記載	専門用語の説明
気相法	gas phase method	微粒子の合成法の一つ。気体(分子)となった材料を付着させる方法
PCP	porous coordination polymer	多孔性配位高分子:配位高分子のうち、多孔構造を持つもの
複合触媒	hybridized catalyst	化合物と化合物が合わさった触媒
有機溶媒	solvent	固体・液体あるいは気体の溶質を溶かす有機物の液体
水熱合成	hydrothermal	高圧によって、臨界点以上の熱が得られるので、溶解度が増し、反応速度も大きくなることや特殊な結晶変態が安定になることを利用する鉱物の合成
アモルファス	amorphous	結晶のような長距離秩序はないが、短距離秩序はある物質の状態
配位子	ligand	金属に配位する化合物。配位子は孤立電子対を持つ基を有しており、この基が金属と配位結合し、錯体を形成する
キャリアガス	carrier gas	一般に試料を移動するのに用いる不活性の気体をいう。展開ガスともいう。水素、ヘリウム、窒素など
触媒性能	catalytic activity	触媒としての性能:特定の化学反応の反応速度を速める物質で、自身は反応の前後で変化しない
全反射	total reflection	屈折率の大きい透明媒質から小さい透明媒質に光が入射するとき、入射角がある角度以上になると全部反射される現象

Ⅲ. 研究開発成果について
2. 研究開発項目毎の成果
2.2 回収CO_2ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発の成果
2.2.4 気相法によるPCP複合触媒開発

専門用語	英語記載	専門用語の説明
電流効率	current efficiency	電気分解等の反応時に、生成物を得るために電解槽に流した全電気量のうち目的の反応に使われた電気量の割合
電極触媒	electrode catalyst	電極反応の速度はしばしば電極の種類や性状により影響を受けるが、電極自身は通常、反応の前後において変化しない。したがって、電極材料を電極反応における触媒とみなすことができ、この物質を示す

プロジェクト用語説明集

Ⅲ. 研究開発成果について
2. 研究開発項目毎の成果
2.3 プロジェクト共通基盤技術開発の成果
2.3.1 理論化学・計算化学によるPCP設計アプローチ

専門用語	英語記載	専門用語の説明
静電相互作用	electrostatic interaction	プラスとマイナスの電荷の間に生じるクーロン的な相互作用
交換反発相互作用	exchange repulsion interaction	分子同士が接近する際、電子を持っている軌道同士が重なることにより生じる不安定化相互作用
電荷移動相互作用	Charge-transfer interaction	一方の分子の電子が他方の分子に移動することにより生じる安定化相互作用
分極相互作用	polarization interaction	ある分子に他の分子が接近することによりその分子の電子の分布状態が変化することによるエネルギー変化。
分散相互作用	dispersion interaction	ある分子に他の分子が接近すると、それらの分子の電子が同時に占有軌道から空軌道に励起することにより生じる安定化相互作用
Pauli反発	Pauli-exclusion	ある原子、分子内で同時に4つの量子数を持つ電子は存在しえない
密度汎関数理論	density functional theory	原子、分子のエネルギー、電荷分布、性質はそれらの中の電子の分布により一義的に決定されると言う理論
ハートリー・フォック法	Hartree-Fock theory	HartreeとFockが提案した原子、分子の電子状態を行列式で表わし、エネルギーや電子分布を求めようとする方法
1電子励起配置	one-electron excitation configuration	原子、分子の波動関数を考える時、電子が入っている軌道から空軌道への励起するような電子の配置
Post Hartree-Fock法	Post-Hartree-Fock theory	Hartree-Fock法では、例えば、閉殻系では一つの行列式で波動関数を表わすが、それでは不十分で多数の行列式で波動関数を表わす方法の一般的な呼び方
ホフマン型PCP	Hoffmann－type PCP	鉄(II)と白金(II)をシアノ基、ピラジンで架橋したPCP
ピラジン	pyrazine	6員環化合物で、N原子がお互いに1，4位に導入されたもの
Mϕller-Plessetの2次摂動法	Mϕller-Plesset 2'nd order perturbation method	MϕllerとPlessetにより提案された方法であり、電子相関を摂動論で考慮する方法。Hartree-Fock法からスタートする。

Ⅲ. 研究開発成果について
2. 研究開発項目毎の成果
2.3 プロジェクト共通基盤技術開発の成果
2.3.1 理論化学・計算化学によるPCP設計アプローチ

専門用語	英語記載	専門用語の説明
電子相関	electron correlation	電子と電子が空間内の同じ地点を占めることはできないことを考慮することによるエネルギーの安定化、Hartree-Fock法では電子相関を考慮していないので、エネルギーが実際の値よりも高く計算される。
MP2	Mϕller-Plesset 2'nd order perturbation method	Mϕller-Plessetの2次摂動法の略称
MP2.5	MP2.5	Mϕller-Plessetの2次摂動計算と3次摂動計算を行い、エネルギーの平均値を取る方法
CCSD(T)法	CCSD(T) theory	1電子励起および2電子励起の電子配置を考え、波動関数をカップルド・ハートリー・フォック法で求める計算方法で、精度が高いと言われている。
基底関数重ね合わせ誤差	basis set super position error	分子と分子が接近する場合の安定化エネルギーは、計算に用いる原子軌道の表現が不十分なために、過大評価される誤差
四極子能率	quadrupole moment	電荷分布のテンソル量

プロジェクト用語説明集

Ⅲ. 研究開発成果について
2. 研究開発項目毎の成果
2.3 プロジェクト共通基盤技術開発の成果
2.3.2 多孔性金属錯体に関する技術動向

専門用語	英語記載	専門用語の説明
PCP	Porous Coordination Polymer	多孔性配位高分子
JCII	Japan Chemical Innovation and Inspection Institute	財団法人　化学評価研究機構 旧名は、財団法人化学技術戦略推進機構である。
IPC (筆頭IPCサブクラス)	Patent Cooperation Treaty	国際特許分類：世界のほとんどの国が共通に採用している特許分類のことです。5年毎に分類改正があり、西暦2006年からは第8版を使っています。 全技術分野をA～Hの8つのセクションに分け、その下をクラス、サブクラス、メイングループ、サブグループという階層で細分化しています。
FI	File Index	特許庁が、特許審査のための先行技術調査を効率的に行うために、IPCを使いやすくしたもの。
Fターム	File Forming Term	特許庁が、特許審査のための先行技術調査を効率的に行うために、機械検索用に開発した技術項目のことです。
MOF	Metal-Organic Frameworks	金属-有機構造骨格体
Shareresearch	Shareresearch	日立製作所系の特許検索商用データベース
Panapatolics	Panapatolics	パナソニック系の特許検索商用データベース
公表	publication	外国語でされた国際出願(外国語特許出願)については、原則として、優先日から2年6ヶ月後すみやかに、日本語による翻訳文が公報に掲載される(特許法184条の9)。これを国内公表という。また、その公報を公表公報という。

Ⅲ. 研究開発成果について
2. 研究開発項目毎の成果
2.3 プロジェクト共通基盤技術開発の成果
2.3.2 多孔性金属錯体に関する技術動向

専門用語	英語記載	専門用語の説明
優先権	Priority Claim Based on Paris Convention	"優先権"とは、第一国への出願から所定の期間(優先期間)内に第二国に出願することにより、第二国出願を第一国出願の時にしたと同等に扱ってもらうことができる権利をいう。
WIPO	World Intellectual Property Office	世界知的所有権機構
PCT	Patent Cooperation Treaty	特許協力条約
PCT出願	Patent Cooperation Treaty	PCT(特許協力条約)に基づく、国際特許出願

プロジェクト用語説明集

Ⅳ. 実用化、事業化の見通しについて
1. 副生ガス分離・精製用PCP基盤技術開発の実用化見通しについて
1.1 メタン精製用PCP開発

専門用語	英語記載	専門用語の説明
バイオガス	bio gas	バイオ燃料の一種で、生物の排泄物、有機質肥料、生分解性物質、汚水、ゴミ、エネルギー作物などの発酵、嫌気性消化により発生するガス。メタン、CO_2が主成分。
バイオマス	biomass	家畜排せつ物や生ゴミ、木くずなどの動植物から生まれた再生可能な有機性資源。
バイオエタノール	bio ethanol	サトウキビやトウモロコシなどのバイオマスを発酵させ、蒸留して生産されるエタノール。
固定価格買い取り制度	Feed-in Tariff	エネルギーの買い取り価格(タリフ)を法律で定める方式の助成制度。
PSA	PSA	pressure swing adsorption(圧力スイング吸着)の略。圧力を高くすることにより気体を吸着材に吸着させ、圧力を低くすることで吸着材から気体を脱着させることにより、気体の分離・回収を行う方法。
PCP	PCP	Porous Coordination Polymers(多孔性配位高分子)の略。金属イオンと配位子からなる多孔性の金属錯体。
温室効果	greenhouse gas	大気圏を有する惑星の表面から発せられる放射(電磁波により伝達されるエネルギー)が、大気圏外に届く前にその一部が大気中の物質に吸収されることで、そのエネルギーが大気圏より内側に滞留し結果として大気圏内部の気温が上昇する現象。
クリーン開発メカニズム	clean development mechanism	先進国が開発途上国において技術・資金等の支援を行い、温室効果ガス排出量の削減または吸収量を増加する事業を実施した結果、削減できた排出量の一定量を支援元の国の温室効果ガス排出量の削減分の一部に充当することができる制度。

Ⅳ. 実用化、事業化の見通しについて
1. 副生ガス分離・精製用PCP基盤技術開発の実用化見通しについて
1.1 メタン精製用PCP開発

専門用語	英語記載	専門用語の説明
CO_2排出権	CO_2 emission credit	全体の排出量を抑制するため、予め国や自治体、企業などの排出主体間で排出する権利を決めて割振り、その権利を超過して排出する主体と権利を下回る主体との間でその権利の売買をすることで、全体の排出量をコントロールする仕組みを、排出権取引制度と呼ぶ。その際の、予め決める国や自治体、企業などの排出主体が排出する権利のこと。

プロジェクト用語説明集

Ⅳ. 実用化の見通しについて
1. 副生ガス分離・精製用PCP基盤技術開発の実用化見通しについて
1.2 CO_2/エチレン分離用PCP開発

専門用語	英語記載	専門用語の説明
熱炭酸カリ法	hot potassium carbonate acid gas removal system	炭酸カリウムを用いた吸収法。酸性ガスの分圧が高い場合の粗除法に適している。
ハニカム	Honeycomb	薄い二枚の板の間に蜂の巣を輪切りにしたような多孔材をはさんだもの。軽くて強度があり、自動車や航空機の構造部材として使われる。蜂の巣構造。
ブロワー	blower	送風機。
吸着法	adsorption process	CO2 を溶液に吸収させることによって分離する方法。吸収のメカニズムにより化学吸収法と物理吸収法に分類される。
PSA法	pressure swing adsorption method	圧力スイング吸着法の略名。
圧力スイング吸着法	pressure swing adsorption method	圧力切り換えにより吸着と脱着を繰り返してガスを精製する手法。
充填層	packed-bed	吸着塔の吸着材を収める部分。PSA 法でのガス分離・濃縮では一般に、効率性の観点から同一の吸着材を充填した複数の吸着塔を用いて、例えば第1塔で吸着を行う間に第2塔では脱着及びパージを行い吸脱着プロセスの高効率化が図られる。
比揮発度	relative volatility	蒸留作業における蒸発のしやすさを数値で表したもの。
分離膜	separation membrane	膜分離に用いる膜のこと。

Ⅳ. 実用化の見通しについて
1. 副生ガス分離・精製用PCP基盤技術開発の実用化見通しについて
1.3 PCPによる微量ガス分離材開発

専門用語	英語記載	専門用語の説明
活性炭素繊維	Activated Carbon Fiber	繊維状の活性炭のこと。繊維状活性炭とも言う。フェルトや織物等の形状のものがある。
ACF	Activated Carbon Fiber	活性炭素繊維に同じ
VOC	Volatile Organic Compounds	揮発性有機化合物のこと。常温常圧で大気中に容易に揮発する有機化学物質の総称のことである。トルエン、ベンゼン等が挙げられる。
バイオガス	Biogas	生物資源由来の燃料の一つ。排泄物、有機質肥料、生分解性物質、汚水、生ゴミなどの発酵、嫌気性消化により発生するガス。メタン、二酸化炭素が主成分。バイオガスは非枯渇性の再生可能資源であり、下水処理場などから発生するガス等の利用が期待されている。
シロキサン	siloxane	Si-O-Si結合(シロキサン結合)を持つ化合物の総称である。
パイロット設備	pilot plant	工業、農業等において実用的なプラント設計に先立ち、必要な設計データを収集するために試験的に組み立てるプラントのこと。ほ試験室的段階と実用の段階との中間の位置づけとなるプラントであり、ほぼ実用プラントと同様の機能を持つ。
ランニングコスト	running cost	機器やシステムの保守・管理に必要な費用のこと。消耗品の調達費用や保守サービスの料金等が含まれる。
メンテナンスコスト	maintenance cost	維持管理に必要な費用のこと。清掃、保守・点検、修繕、更新、改修、管理等が含まれる。

プロジェクト用語説明集

Ⅳ. 実用化の見通しについて
2. 回収CO_2ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発の実用化見通しについて
2.1 液相法によるPCP複合触媒開発

専門用語	英語記載	専門用語の説明
VOC	Volatile Organic Compounds	揮発性有機化合物と同じ。
浮遊粒子状物質	Suspended Particulate Matter	大気中に浮遊している粒子状物質のこと。代表的な「大気汚染物質」の一つであり、工場の煤煙、自動車排気ガス等の人の活動に伴うもののほか、自然由来(海塩の飛散、火山、森林火災等)のものがある。
SPM	Suspended Particulate Matter	浮遊粒子状物質と同じ。
オキシダント	oxidant	酸化剤(oxidizing agent)の略。窒素酸化物と炭化水素とが光化学反応を起こし生じる光化学オキシダント等が挙げられる。光化学オキシダントは強力な酸化作用を持ち健康被害を引き起こす大気汚染物質の一つであり、光化学スモッグの原因となる。

プロジェクト用語説明集

Ⅳ. 実用化の見通しについて
2. 回収CO_2ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発の実用化見通しについて
2.2 気相法によるPCP複合触媒開発

専門用語	英語記載	専門用語の説明
機能性材料	functional material	すぐれた固有の性質を積極的生かし、エネルギー変換、記憶・記録、物質認識など主として能動的な機能が重視されて使われる材料
CO_2還元触媒	carbon dioxide reduction catalyst	他から電子を受け取ってCO_2を還元する反応を促進する物質
複合粒子	composite particle	2個以上の粒子が結合して出来ている1個の粒子

Ⅰ．事業の位置付け・必要性について

Ⅰ.1. NEDOの関与の必要性・制度への適合性

Ⅰ1.1 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、2007年の出荷額ではアメリカ、中国、ドイツに次ぐ世界第４位である（米国化学工学協会）。また、国内の製造業で比較すると、同じく2007年の出荷額・付加価値額共に第2位となっており、我が国の経済においても非常に重要な産業である（日本化学工業協会）。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20%を排出しており2番目に多く（2006年、産業構造審議会）、産業廃棄物排出量も12.5%で3番目となっている（2005年、環境省）。

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（GSC）」活動を効果的かつ強力に推進している。GSCNには、オブザー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
①ITコア技術の革新 94億円
②省エネ革新 42億円
③情報爆発への対応 44億円
④情報システムの安全性等 63億円
21年度予算 244億円

ナノテク・部材 IPG
①ナノテク加速化領域 36億円
②情報通信領域 28億円
③ライフサイエンス・健康・医療領域 16億円
④エネルギー・資源・環境領域 78億円
⑤材料・部材領域 27億円
⑥共通領域 4億円
21年度予算案 188億円

ロボット・新機械 IPG
①ロボット関連技術開発 38億円
②MEMS関連技術開発 12億円
21年度予算 50億円

健康安心 IPG
①創薬・診断技術開発 102億円
②診断・治療機器・再生医療等の技術開発 28億円
21年度予算 130億円

エネルギー IPG
①総合エネルギー効率の向上 707億円
②運輸部門の燃料多様化 278億円
③新エネルギー等の開発・導入促進 369億円
④原子力等利用の推進とその大前提となる安全の確保 268億円
⑤化石燃料の安定供給確保と有効かつクリーンな利用 479億円
21年度予算 1,281億円※2

環境安心 IPG
①地球温暖化防止新技術 60億円
②3R 33億円
③環境調和産業バイオ 57億円
④化学物質総合評価 11億円
⑤共通領域 4億円
21年度予算案 165億円

航空機・宇宙産業 IPG
①航空機産業の基盤技術力の維持・向上 233億円
②宇宙産業の国際競争力強化 87億円
21年度予算案 320億円

※1 各イノベーションプログラムにおけるプロジェクトの重複を排除した額 ※2各サブプログラムで重複があるため小計と一致しない

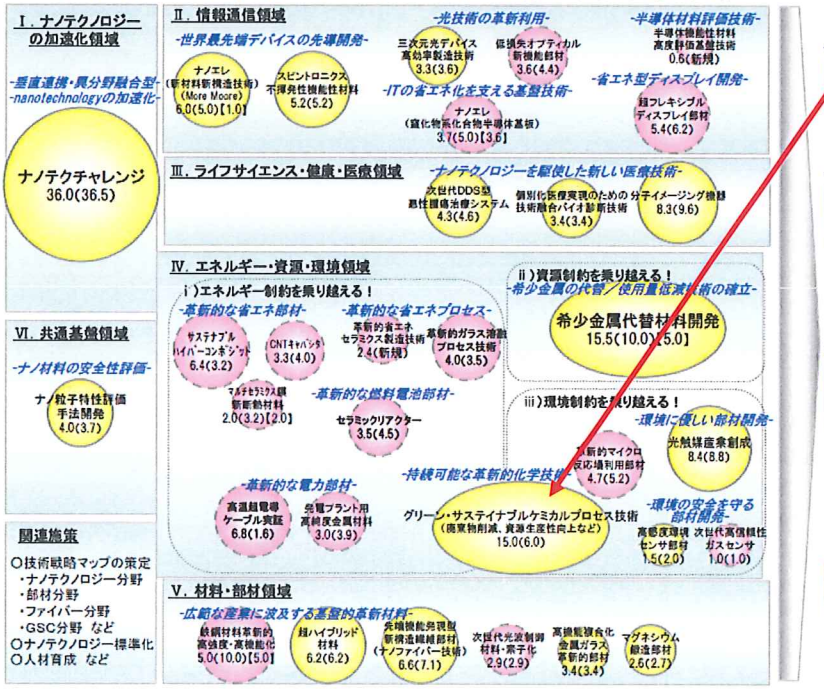
1

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



関連施策
○技術戦略マップの策定
・ナノテクノロジー分野
・部材分野
・ファイバー分野
・GSC分野 など
○ナノテクノロジー標準化
○人材育成 など

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

(3)NEDO が関与することの意義

NEDO では、平成 21 年度から GSC プロジェクトを実施している。本事業では、化学プロセス等の生産プロセスから発生する二酸化炭素等の副生ガスを、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、高純度、低コスト、低エネルギーで精製できる革新的な吸着材料（多孔性金属錯体、以下、PCP と略す）を開発し、濃縮された副生ガスを有用な化学品に転換できるグリーンなプロセスを確立するための基盤技術を開発している。本事業により、我が国の化学産業等の GSC プロセス化への大きな貢献が期待される。

しかしながら、本事業の基盤技術である PCP の開発は、アカデミック分野においては世界を先導している実力を有するものの、産業への応用に関しては欧米にやや遅れをとっており、また未だ実用化例がないため単独企業ではリスクが高く、困難な課題の克服に向けた「産」「学」「官」連携の取り組みが必要である。そのため、NEDO が関与することにより、基盤技術を有する「学」と、実際に実用化を行う「産」の連携を推進し、また「集中研」方式の採用により、「課題」、「得意分野を生かした解決方法」の迅速な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。

Ⅰ.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	１８０	１５２	１５９	４９１
実績（見込）	２４１	４７６	１５９	８７６

平成 21 年度、22 年度に加速資金の投入を行い、実用化の促進を目指している。

(2)効果

基盤技術開発としての定性的効果を中心に記す。

①二酸化炭素削減効果（省エネルギー効果）

分離エネルギーの低減により、化学吸収法や PSA 法等に比べて、大幅な二酸化炭素削減を図る。

②二酸化炭素の化学品原料化

ギ酸、シュウ酸等の生成の検討により基盤技術に目処を立てる。

基盤技術確立により、二酸化炭素の本格的原料化への検討に繋げていく。

③PCP 技術の発展による波及効果

低品位混合ガスの分離・精製による有効利用の拡大

PCP 複合触媒による高効率反応プロセスの開発

Ⅰ.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・目的を以下に記載する。

現在、産業分野から排出される 3.2 億 t -CO_2/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 CO_2 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 CO_2 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、CO_2 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 N_2、 N_2O、CH_4、C_2H_6、 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、CO_2 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グリーンに生産するための基盤技術の確立を行う。

Ⅱ．研究開発マネジメントについて

Ⅱ.1. 事業の目標

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、容易なリ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。

【GSC 基盤技術開発　研究開発目標】

ⅰ）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。

ⅱ）廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発：

・e-ファクター(副生成物量(＝産業廃棄物量)/目的生成物量)の大幅な低減、廃棄物、排水量等に対して大幅な削減が見込めること。

・ライフサイクルに亘り大幅なリサイクル率(カスケードリサイクル含む)向上、軽量化、長寿命化等の大幅な改善が見込めること。

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：

・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リサイクル率(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。

ⅳ）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。

なお、本事業は、上記ⅲ）に該当する。

Ⅱ.2. 事業の計画内容

Ⅱ.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、容易なリサイクル等の観点から、ｉ）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、ⅱ）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、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、ⅳ）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。ｉ）～ⅳ）の研究開発項目を以下に記す。

【GSC 基盤技術開発　研究開発項目】

ｉ）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」

ⅱ）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」

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：

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」

ⅳ）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。

・「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、iii）の内「副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発」に関するもので、その内容は以下の通りである。

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 CO_2)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、高純度、低コスト、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グリーンに生産できるプロセスに繋げる。

【詳細な開発項目】
①副生ガスの分離・精製材料の開発
　①-a　CO_2ガスの分離・精製材料の開発
　①-b メタン精製用多孔性金属錯体の開発
　①-c　CO_2/エチレン分離用多孔性金属錯体の開発
　①-d 多孔性金属錯体による微量ガス分離材の開発
②副生ガスによるグリーンプロセス技術の開発
　②-a 気相法による多孔性金属錯体複合触媒の開発
　②-b 液相法による多孔性金属錯体複合触媒の開発

【事業目標】
中間目標（平成 23 年度末）
①副生ガスの分離・精製材料の開発
・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 CO_2 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（CO_2 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の開発
・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。

Ⅱ.2.2 研究開発の実施体制

(1)実施者の選定

研究開発項目ｉ）及びii）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iii）及びiv）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。

本事業「副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発」に関しては、平成21年度の公募に対し１件の応募があり、外部有識者からなる採択審査委員会を経て１件の事業を採択した。

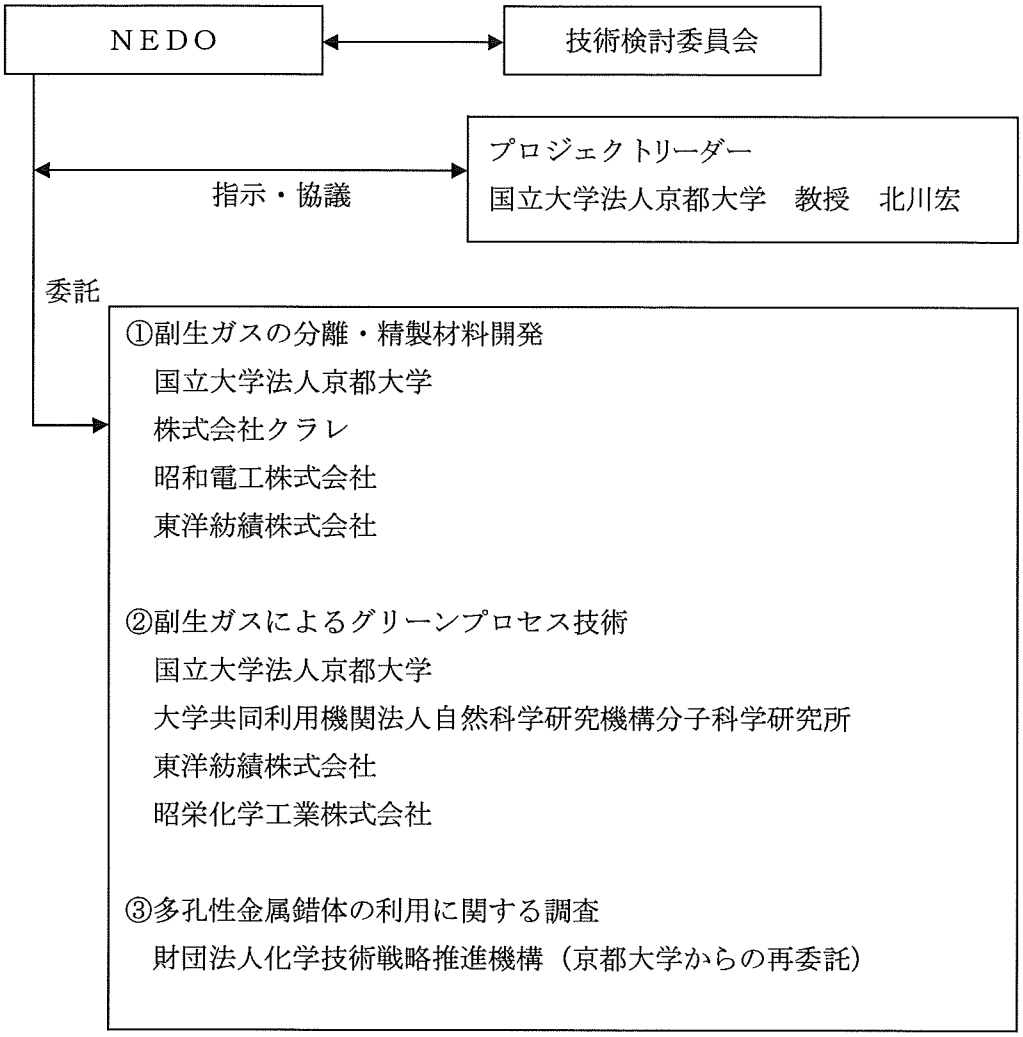
(2)プロジェクトリーダー

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、より的確な指示・判断、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京都大学大学院理学研究科　教授　北川宏をプロジェクトリーダーとして委嘱した。

(3)実施体制

実施体制図を以下に示す。



Ⅱ.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名からなる技術検討委員会を設置している。

委員のリストを以下に示す。

委員名	所属等
戸嶋　直樹（委員長）	山口東京理科大学　教授
指宿　堯嗣	産業環境管理協会　常務理事
北島　昌夫	早稲田大学　客員教授
染宮　昭義	神鋼リサーチ　主席研究員
室井　高城	アイシーラボ　代表

委員会は年２回開催とし、このうち１回は研究開発場所にて実施し、装置等も確認しながら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、京都大学、分子科学研究所、クラレ、昭和電工、東洋紡績、昭栄化学工業、化学技術戦略推進機構

＜平成２２年度＞

第２回　平成２２年９月２４日　於生産開発科学研究所（集中研）

参加法人　NEDO、京都大学、分子科学研究所、クラレ、昭和電工、東洋紡績、昭栄化学工業、化学技術戦略推進機構

第３回　平成２３年３月２５日　於NEDO日比谷オフィス

参加法人　NEDO、METI、京都大学、分子科学研究所、クラレ、昭和電工、東洋紡績、昭栄化学工業、化学技術戦略推進機構

また、プロジェクト実施者側でも３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。

Ⅱ.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、開発初期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及び成果の共有化を図り、プロジェクトリーダー及びサブリーダーを交えた討議を頻繁に実施することにより、短期間で成果を上げてきている。また、月１回開催の進捗報告会等にはNEDOも極力出席して状況の把握に努め、それに基づいて加速資金の投入等の判断を行った。

また、平成２２年度後半からは、各企業の分担研での実用化に向けた開発も強化されてきた。そのため平成２３年３月開催の技術検討委員会のアドバイスも踏まえて、実施者と検討した結果、分担研で発生した課題及び成果に対して、共有化すべき部分と個別対応すべき部

分それぞれに応じた取り組みが図れるよう、プロジェクト内に、企業での経験が豊富で大学の経験もある有識者をアドバイザーとして設置することとした。アドバイザーは、プロジェクトリーダーを補佐し、実用化に向けた検討の促進を図る。

Ⅱ.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対抗すべく、３度に渡り加速財源を投入した。

時期	金額（百万円）	目的及び概要	主な成果
平成２２年２月	６１	開発サイクル高効率化のため、加速により集中研に反応装置及び評価装置を導入	世界で初めて気相法による多孔性金属錯体の合成に成功
平成２２年６月	６９	実用化時の課題検討着手のため、加速により成形装置、評価装置等を導入	成形体による実用性評価に前倒しで着手
平成２２年１１月	２５５	早期実用化のため、中量合成装置及び実ガス想定の評価装置等を導入	実ガス想定の評価装置立ち上げ中

Ⅱ.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．研究開発成果について

Ⅲ.1．事業全体の成果

(1) 中間目標達成状況

副生ガスの分離・精製材料開発及び副生ガスによるグリーンプロセスの開発について、何れも中間目標を達成した。分離・精製材料開発に関しては、理論解析を取り入れながら、中間目標に掲げた性能を凌駕するＰＣＰを開発し、実用化に向けた課題に前倒しで取り組んでいる。また、副生ガスによるグリーンプロセスの開発に関しても、触媒及び複合化手法の開発により、ＰＣＰ複合触媒として目標とする選択率（電流効率）を達成した。

開発テーマ	中間目標	達成状況	達成度
①副生ガスの分離・精製材料開発	副生ガスとしての CO_2 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。 ・吸着エネルギー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）150 以上	以下の性能を有する PCP を開発 CO_2 濃度 98% 吸着エネルギー35kJ/mol 分離度 200	◎
②副生ガスによるグリーンプロセスの開発	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。	選択率（電流効率）60%以上	○

達成度（◎：大幅達成、○：達成、△：達成見込み、×：未達）

各開発テーマにおける個別開発項目毎の達成状況についても、以下に記す。

①副生ガスの分離・精製材料開発

個別開発項目	目標	達成状況	達成度
CO_2 ガスの分離・精製材料の開発	以下の性能を有するＰＣＰの開発（CO_2 濃度≧95%、吸着エネルギー≦40 kJ/mol 分離度≧150）	目標を上回るＰＣＰを開発（CO_2 濃度 98%、吸着エネルギー35kJ/mol、分離度 200）	◎
メタン精製用ＰＣＰの開発	高分離度の達成 脱離の低エネルギー化	分離度、脱離エネルギーの目標値を達成 スケールアップ合成、形態付与、評価装置検討に前倒しで着手	◎
CO_2／エチレン分離用ＰＣＰの開発	基本骨格の探索（候補ＰＣＰ抽出） スケールアップ合成 実施	目標性能を有するＰＣＰに目処 目標以上のスケールでの合成を実施し、形態付与も前倒しで着手	○
ＰＣＰによる微量ガス分離材の開発	活性炭同等以上の候補ＰＣＰ抽出 スケールアップ合成 実施	目標性能を満たすＰＣＰを抽出 スケールアップ合成の装置導入し、形態付与にも前倒しで着手	○

達成度（◎：大幅達成、○：達成、△：達成見込み、×：未達）

②副生ガスによるグリーンプロセスの開発

個別開発項目	目標	達成状況	達成度
触媒基盤技術開発	ＰＣＰ複合触媒により CO_2 からシュウ酸等含酸素化合物の合成において電流効率60％以上の達成	電気化学的安定性の高いＰＣＰを抽出 ＰＣＰと触媒の複合化手法に目処 電流効率 60％以上でギ酸生成に成功	○
液相法によるＰＣＰ複合触媒の開発	ＰＣＰ複合触媒の調製 試設計プロセスの要件検討	液相法によるＰＣＰと触媒の複合化に成功し、触媒単体より大幅に性能を改善 試設計プロセスに関わる要件を抽出	○
気相法によるＰＣＰ複合触媒の開発	ＰＣＰ複合触媒の調製 試設計プロセスの要件検討	気相法によるＰＣＰの合成に世界初で成功し、量産化技術の基盤に 同法によりＰＣＰ複合触媒調製も実施し評価中	○

達成度（◎：大幅達成、○：達成、△：達成見込み、×：未達）

(2)成果の意義

①副生ガスの分離・精製材料開発

・分離・精製材料として世界最高水準の性能を有するＰＣＰの開発に成功した

・実験結果と理論解析の突き合わせにより、今後の開発への理論的指針を得た

※基盤技術開発として、前倒し且つ目標を上回る成果を得たため、実用化に向けた形態付与技術、スケールアップ合成、実ガス類似条件での分離性能評価等の課題に前倒しで着手できた

②副生ガスによるグリーンプロセス技術の開発

・ＰＣＰ複合触媒の調製法に目処を得た

・触媒とＰＣＰの複合化により、電流効率及び反応電位に大幅な効果が得られた

※評価法の確立も進展しており、今後更なる好適化を図っていく

(3)知的財産権の取得、(4)成果の普及

特許出願は１８件（平成２３年５月末時点）。また一部新聞等にも大きく取り上げらた。

区分 年度	特許出願	論　文	研究発表 講演等	新聞等 掲載
平成２１年度	5	2		
平成２２年度	１１	3	3	5
平成２３年度	2	4		

また、開発したＰＣＰの商標登録を行っており、成果の普及に活用を図っていく。

（登録第 5380717 号　ｺｰﾃﾞｨﾌﾚｯｸｽ　及び　登録第 5380718 号　COORDIFLEX ）

（2011 年 5 月末現在）

(5)成果の最終目標の達成可能性

副生ガスの分離・精製材料開発及び副生ガスによるグリーンプロセスの開発について、何れも最終目標は達成できる見込み。

開発テーマ	最終目標	達成見通し
①副生ガスの分離・精製材料開発	副生ガスとしての CO_2 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。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を吸着、脱離できる新規材料を開発する。 （副生ガスの吸着エネルギー　30kJ/mol 以下、 分離度　300 以上）	・数値目標に関しては、今までの知見及び理論的サポートによるファインチューニングで達成可能 ・個別の開発項目についても、改良指針が明確になりつつあり、達成可能な見込み
②副生ガスによるグリーンプロセスの開発	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。	・複合触媒の調製法の最適化等により達成可能な見込み

最終的に実用化を図る上では、性能とコストとのバランスが重要になるため、上記の達成見通しに限定されることなく各社にて必要な工業化技術の検討も進め、今後新たに発生するであろう技術的な課題はアカデミア側にもフィードバックし、一体となって開発を推進していく。

各社とも最終目標を達成した上で、社会状況等も勘案しながら、平成 30～35 年頃の実用化に向け開発を継続していく意向である。

Ⅲ.2. 研究開発項目毎の成果

Ⅲ2.1 副生ガス分離・精製用 PCP 基盤技術開発の成果

Ⅲ2.1.1 CO_2／窒素分離・精製用 PCP 基盤技術開発

(1) はじめに

CO_2／窒素分離・精製用の PCP の開発においては、PCP の高い構造設計性を利用することにより、既存のガス分離材と比較していくつか優位な点を付与した新たな分離材の合成が期待される。特に共同研究企業が様々な混合ガスからの CO_2 分離材を研究開発を行うため、大学としては基盤となる高い CO_2 分離能を持つ PCP の構造・特性を見出し、それらの CO_2 分離能の基礎評価を行うとともに、得られた候補 PCP の合成・構造好適化およびガス分離能の定量的評価法の確立、そして共同研究企業のニーズに合わせた PCP のさらなる設計を担当した。

H23 年度目標（中間目標）の値は、以下を設定しており、本文中で達成度について言及している。

- 吸着ガス中の CO_2 濃度（単成分ガス吸着測定における吸着量を元に算出）：95%以上
- 分離度（混合ガス流通系における CO_2 濃縮度を元に算出）　：150 以上
- 吸着エネルギー（クラウジウスークラペイロン式を元に算出）： 40 kJ/mol 以下

【開発研究課題項目】

(2)-1　CO_2 を選択的に吸着する PCP 化合物の基盤化合物の探索
(2)-2　CO_2／窒素混合ガスのガス流通系下における CO_2 分離能の評価システムの構築
(2)-3　CO_2／メタン混合ガスからの CO_2 分離に適した PCP 化合物の探索
(2)-4　CO_2 吸着開始圧力の精密制御法の開発
(2)-5　ラボ PSA 試験装置の設計と開発

(2) 研究成果内容

(2)-1 CO_2 を選択的に吸着する PCP 化合物の基盤化合物の探索

PCP は金属イオンと有機配位子の組み合わせによって数多くの種類の多孔性骨格を合成でき、これまでも数千の多孔性骨格が報告されている。しかし CO_2 を混合ガス、特に本プロジェクトでターゲットとする窒素やメタン中から選択的に分離・回収できる PCP はその合成指針が確立していなかった。すなわち PCP の報告の多くはより大きな細孔径の合成あるいは高い BET 表面積に特化したものが多く、CO_2 の分離においてこれら報告は効果的で

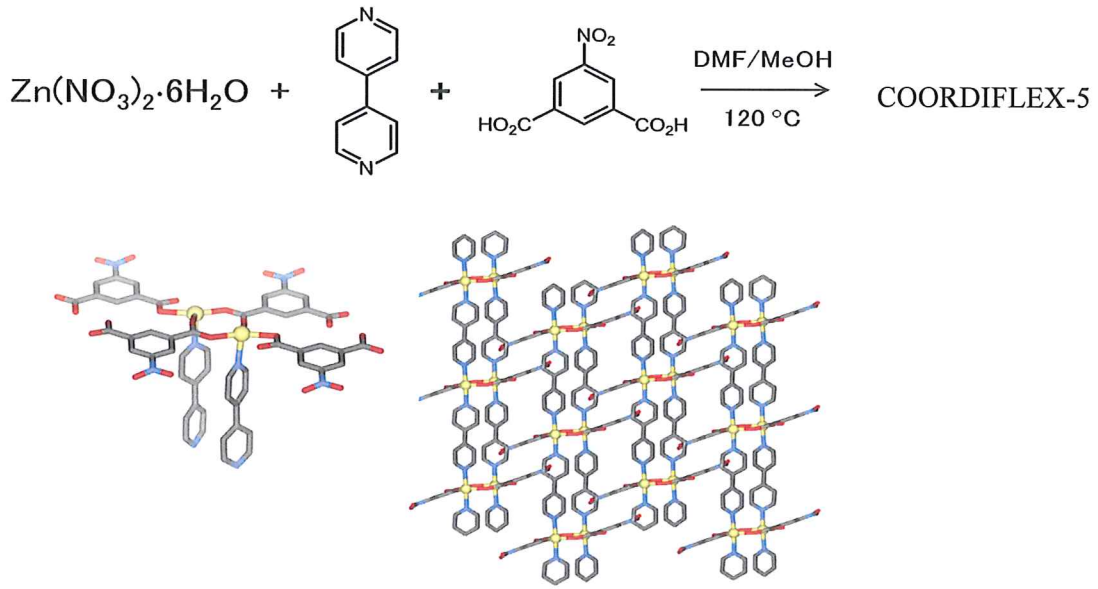
はない。CO_2 の分離を念頭におくと、CO_2 の物理的特性を考慮に入れる必要がある。特に CO_2 の有する弱い酸・塩基点の存在あるいは吸着質として有する熱力学的半径（0.33 nm）といった特性を利用することにより、新たに CO_2 を分離できる PCP の探索・合成を行った。CO_2 分離を行うにあたり、戦略としては

（1） ガス分子のサイズの大小を利用したサイズ選択性の利用

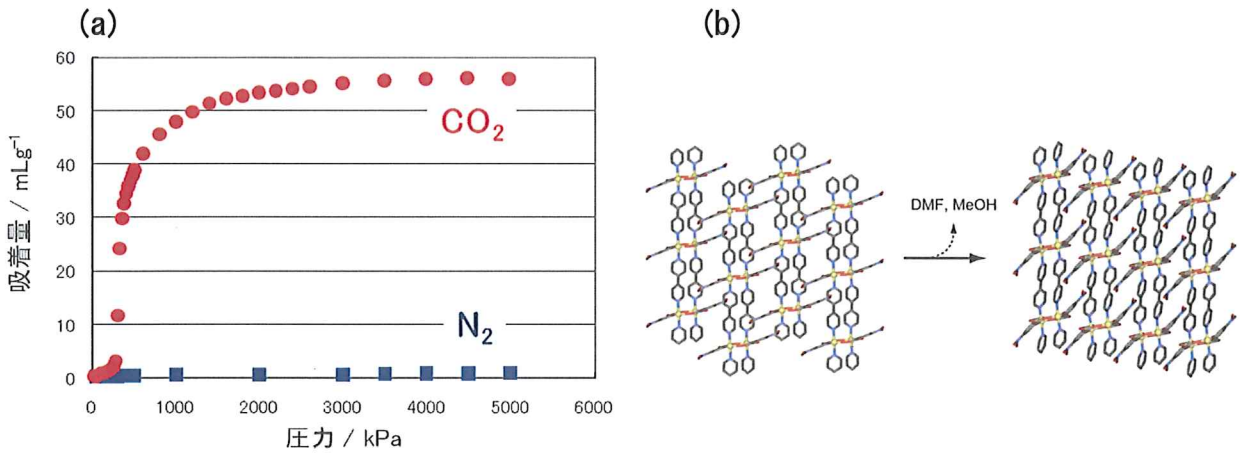
（2） ガス分子と PCP の持つ細孔壁との化学的相互作用を利用した分離

の二点が大きく検討できる。ここではこれらを念頭に置き、金属イオンと有機配位子を様々な組み合わせで反応させることにより PCP 合成をスクリーニングし、得られた PCP 化合物の構造とガス吸着特性を評価することによって CO_2 分離に好適な構造プラットフォームの取得に注力した。特に金属イオンは二価の第一遷移金属イオン、そして有機配位子としてはジカルボン酸系配位子およびジピリジル系配位子を特に選定し、これら組み合わせを各種検討した。

各種有機溶媒、反応温度、反応時間等を調節することにより、数十の新規 PCP の合成に成功した。これら得られた新規 PCP において結晶構造解析、熱重量測定（TGA）、粉末 X 線測定、赤外分光法（IR）等を用いて得られた PCP の熱安定性および結晶性を評価した。またそれぞれの試料について CO_2 ガスおよび窒素ガスの吸着特性をガス吸着装置によって評価した結果、合成したいくつかの PCP の中で特に選択的に CO_2 を吸着するものを見出した。そのひとつが[Zn(5-NO_2ip)(bpy)] （5-NO_2ip = 5-ニトロイソフタレート、bpy = 4,4'-ビピリジル、以後 COORDIFLEX-5 と呼ぶ（図Ⅲ2.1.1-1））である。



図Ⅲ2.1.1-1 [Zn(5-NO_2ip)(bpy)] （COORDIFLEX-5）の合成スキームおよび結晶構造



図Ⅲ2.1.1-2 (a)COORDIFLEX-5 の室温における CO_2 および窒素ガス吸着等温線および(b)ガス吸着前後の結晶構造変化

この COORDIFLEX-5 は図Ⅲ2.1.1-2 に示すように CO_2 においては上記測定下において 60 mLg^{-1} の CO_2 吸着量を示すのに対し、窒素は測定条件下においては吸着を示さない（吸着量が 3mLg^{-1} 以下）ことがわかった。また特徴的な点として、CO_2 の吸着等温線が極低圧から開始するのではなく、比較的高いガス圧力（0.3 MPa）で急激に開始することが挙げられる。すなわち得られた COORDIFLEX-5 は既存のミクロ孔多孔体（ゼオライトや活性炭の一部）とは異なる吸着メカニズムを有することがわかった。この挙動はある圧力で細孔が開吸着を開始することから、「ゲートオープン型」吸着と呼んでいる。COORDIFLEX-5 の単結晶 X 線解析を行ったところ、亜鉛イオンに対してジカルボン酸配位子およびジピリジル配位子がそれぞれ配位することによりできる二次元レイヤー構造がお互いに積層することで構築される多孔性構造を有している。そしてその層間に合成時の溶媒分子が入っていることがわかった。またこの溶媒分子を熱処理により取り除いた結晶について同様の単結晶 X 線測定を行った結果、二次元レイヤー構造自体は不変である一方、レイヤー間の距離が減少した、すなわちより密にパッキングした結晶構造に変化していることが明らかとなった（図Ⅲ2.1.1-2）。このゲストフリーの結晶構造はミクロ孔を有しておらず、いわゆる非多孔体であった。この結晶解析の結果より、COORDIFLEX-5 は非多孔体状態からガス導入に伴い、ある一定のガス圧力が印加されたときに結晶構造が変化し、それに伴い急激にガス吸着を開始する動的な PCP であることがわかった。CO_2 ガスにおいては 0.3 MPa 印加したときに吸着を開始するのに対し、窒素は COORDIFLEX-5 の構造との相互作用が CO_2 に対して弱く、5 MPa 印加しても構造の変化が起きず、吸着が起こらない。すなわち「柔軟な」構造を有する PCP をスクリーニングによって見出すことにより、CO_2 と窒素において CO_2 を選択的に分離・吸着できるプラットフォームを得ることに成功した。

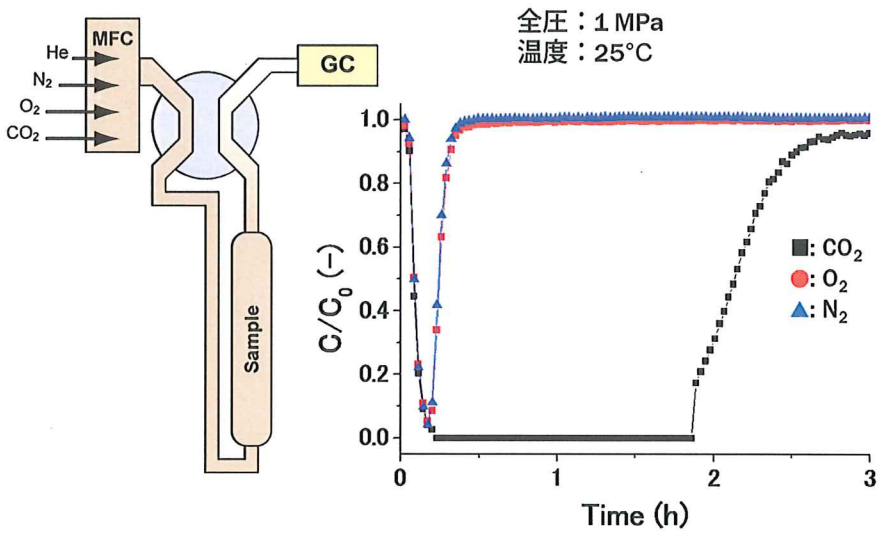
図Ⅲ2.1.1-2 に示すように、常温・高圧ガス吸着測定により、平衡状態における CO_2、窒素それぞれの吸着量から、中間目標のひとつである単ガス吸着量比 95%を達成することを確認した。この柔軟な PCP は上記のように構造の変化（非多孔体から多孔体）をトリガー

として CO_2 分離能を示すため、CO_2 の選択的吸着挙動において多孔性構造と CO_2 分子の間に強い化学的相互作用を利用していない。そのため分離した CO_2 を回収する際に必要なエネルギーを小さくすることが可能であることが示唆され、既存の材料とは一線を画す分離材として評価することが必要である。

(2)-2 CO_2／窒素混合ガスのガス流通系下における CO_2 分離能の評価システムの構築

上記のように、PCP のスクリーニングにより、柔軟な構造を有する PCP の一部が CO_2／窒素において高い分離能を示すことが示されたため、同形の構造を有する PCP を各種合成した。そのなかで配位子にナフタレン部位を有する[Zn(2,7-ndc)(bpy)] （2,7-ndc = 2,7-ナフタレンジカルボキシレート、COORDIFLEX-3）においては、単成分ガスの吸着特性を測定したところ、全圧 1 MPa の条件下において CO_2＝38 mLg^{-1}、窒素＝8 mLg^{-1}、酸素＝6 mLg^{-1} の吸着量を持つことを確認し、その高い CO_2 選択性が確認された。

一方で PCP を用いた分離手法の候補の一つである圧力スイング法（Pressure Swing Adsorption, PSA 法）への応用を念頭に置くと、混合ガスを平衡吸着ではなく、混合ガス流通条件下での CO_2 の選択性の評価も必須である。そこで PCP の粉末試料に対し、ターゲットの混合ガスを流通させた状態で分離能を評価する装置の開発を行った。サンプルとして[Zn(2,7-ndc)(bpy)]（COORDIFLEX-3）を装置内部に充填し、混合ガスとしては CO_2：窒素：酸素＝1:78:21（体積比）の組成を用いた。特にここでは CO_2 の体積パーセントが 1%と微量の混合ガスを用い、流通系における分離能評価を行った。図Ⅲ2.1.1-3 に示すのが本測定によって得られる破過曲線である。下部においてガス種を検出し始める時間をゼロとおき、それぞれのガス種の濃度を時間軸と共に追っていったグラフであるが、CO_2 は 1.5 時間を超えても全く検出していないことが分かる。一方で窒素および酸素はすぐに検出される。すなわち本測定条件下において COORDIFLEX-3 の粉末を密に充填することにより、微量の CO_2 を含む混合ガスの流通系において CO_2 のみを選択的に分離吸着できることがわかった。また CO_2 の吸着量が飽和を迎え、検出を開始する 1.6 時間後（すなわち破過点）以降、検出される CO_2 は速やかに導入量と同じ比率に回復する。これは PCP が充填されたカラム中を通過する CO_2（吸着している CO_2 含む）が破過とともに速やかに放出されることを意味している。この利点も柔軟な構造変化を主な分離機構としていることに由来していると考えられる。一般的な PSA 法による CO_2 と窒素の分離は常温付近、数気圧下で繰り返されることから、様々な候補 PCP において、CO_2 の分圧を変えた混合ガスを用いたガス分離評価の検討を進めている。

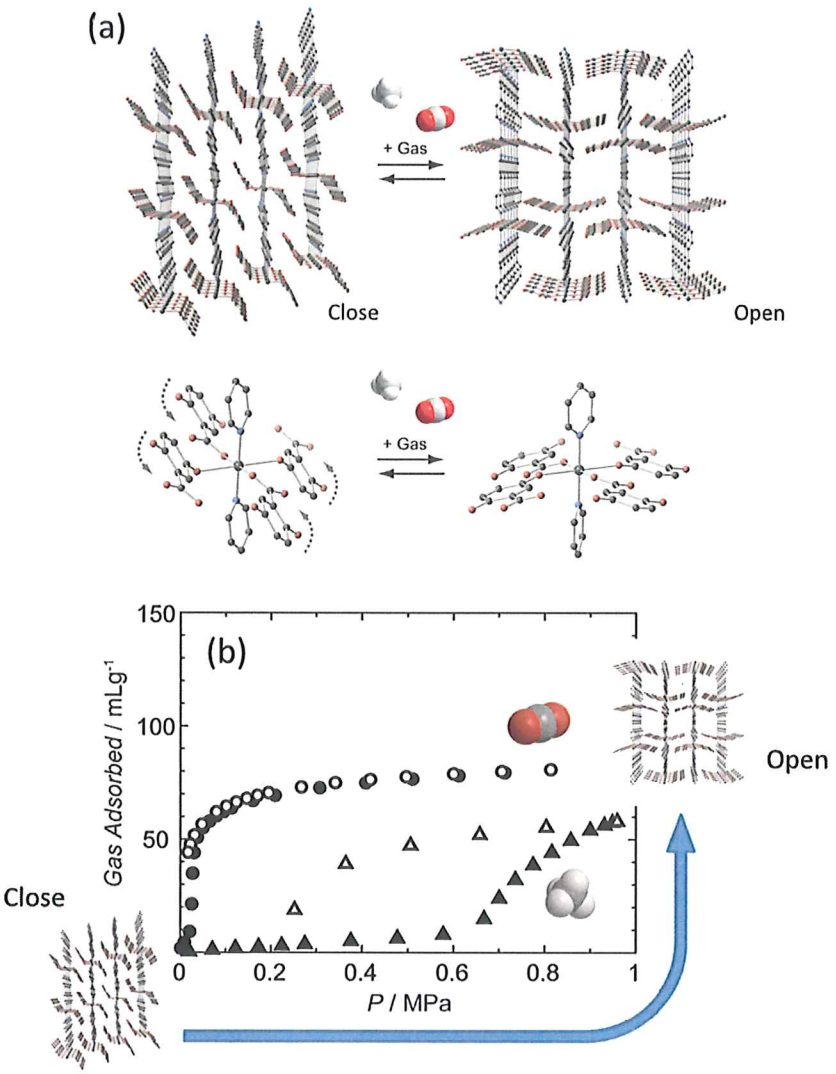


図Ⅲ2.1.1-3　室温、1 MPa（全圧）下における[Zn(2,7-ndc)(bpy)]（COORDIFLEX-3）の CO_2：窒素：酸素＝1:78:21（体積比）混合ガスの流通系ガス破過曲線

また得られた破過曲線から、測定条件（CO_2　1wt%）の混合ガス中において、ガスクロマトグラフィーにおいても感知できないほどの濃度にまで低減させられることがわかったため、CO_2 ガス分離度（破過試験結果における出口ガス組成比／入口ガス組成比）が 200 であり、目標値である 150 以上であることが示された。

(2)-3　CO_2／メタン混合ガスからの CO_2 分離に適した PCP 化合物の探索

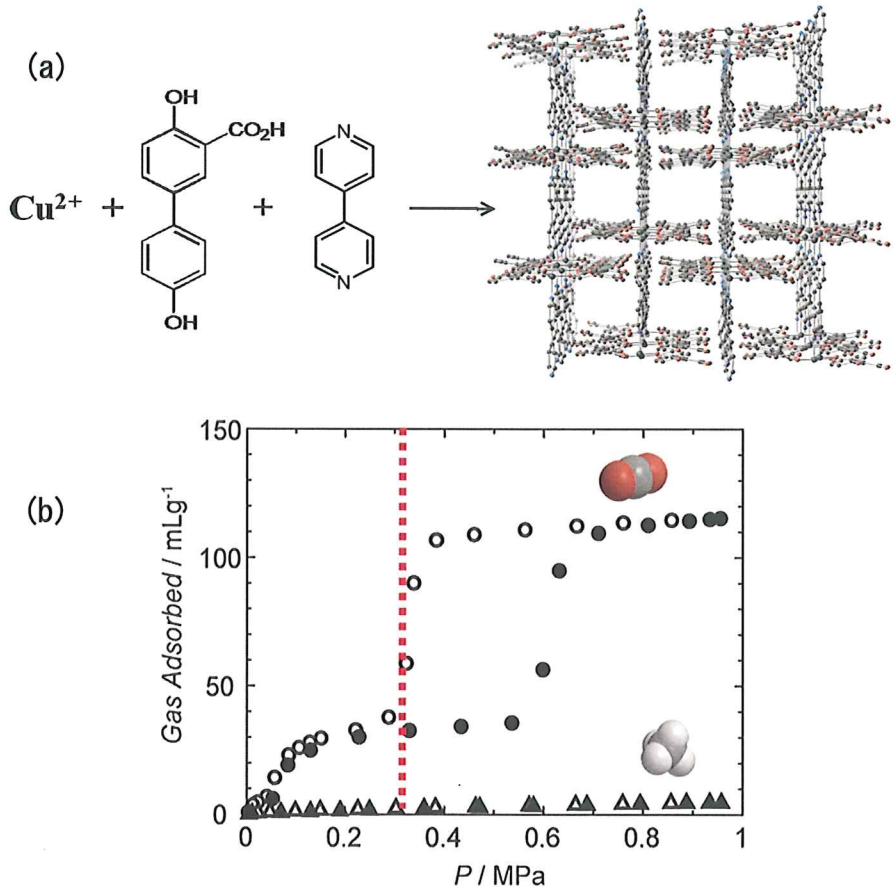
CO_2／メタンの分離において、より精密に、また幅広い測定条件下において CO_2 ガスを分離可能な PCP について合成的知見より改良を検討した。分離特性においては、より幅広いガス分圧、そして作動温度領域において高い分離能を保持できる多孔性材料が求められる。この目的のため、柔軟な構造を持つ PCP においてそれらを構築する有機配位子を修飾することによって PCP の柔軟性を制御し、それに伴う分離能の向上を行った。二次元レイヤー型 PCP の一つである[$Cu(dhbc)_2(bpy)$]（dhbc ＝ 2,5-ジヒドロキシベンゾエート、図Ⅲ2.1.1-4a）は COORDIFLEX-5 と同様、非多孔体から多孔体への構造変化に伴うゲートオープン型吸着挙動を示す。しかし比較的柔軟性が高いため、以下の二点の改良が必要であった。すなわち(1)CO_2 は極低圧で吸着を開始するため、吸着した CO_2 を回収するためには 1 気圧以下への減圧処理が必要となり、回収エネルギーの負担が大きい(2)一方柔軟性が高いことはメタンの吸着開始にもつながり、図Ⅲ2.1.1-4b に示すように 273 K においては 0.6 MPa においてメタンの吸着も引き起こす。そのため当該圧力付近においては CO_2 とメタンの共吸着が起こることから、急激なガス分離能の低下が懸念される。



図Ⅲ2.1.1-4　二次元レイヤー型 PCP[Cu(dhbc)$_2$(bpy)]における(a)ガス吸着前後の結晶構造および(b)273 K におけるメタンおよび CO_2 のガス吸脱着等温線

そこで本 PCP を構成する有機配位子 dhbc を変更することにより、二次元レイヤー由来の構造柔軟性を低下させ、より幅広い条件下での CO_2 分離能の向上を行った。具体的にはサイズを延長した配位子 dhbpc = 4,4'-ジヒドロキシビフェニル-3-カルボキシレートを用い同様の合成を行ったところ、[Cu(dhbpc)$_2$(bpy)]の組成を持つ二次元レイヤー積層型 PCP（図Ⅲ2.1.1-5a）の合成に成功した（COORDIFLEX-11）。[Cu(dhbc)$_2$(bpy)]と異なる点として、配位子への嵩高さの導入により、二次元レイヤー間の柔軟性が低下することが期待される。COORDIFLEX-11 について CO_2 およびメタンのガス吸着等温線を図Ⅲ2.1.1-5b に示すが、CO_2 においては二段階のステップ型吸着等温線を示す一方、メタンに関しては測定範囲（273 K、～1 MPa）において全く吸着を示さない事がわかった。CO_2 に関しては 0.55 MPa 付近より二段階目の吸着が起こり 0.35 MPa 付近の脱着を示すことから、CO_2 回収プロセスにおいて減圧処理の必要がなく、一方でメタンの共吸着の可能性もないことから、有機配

位子を修飾することにより柔軟性を調整し、PCP の持つ CO_2 ガス分離能を大きく向上できることが示された。

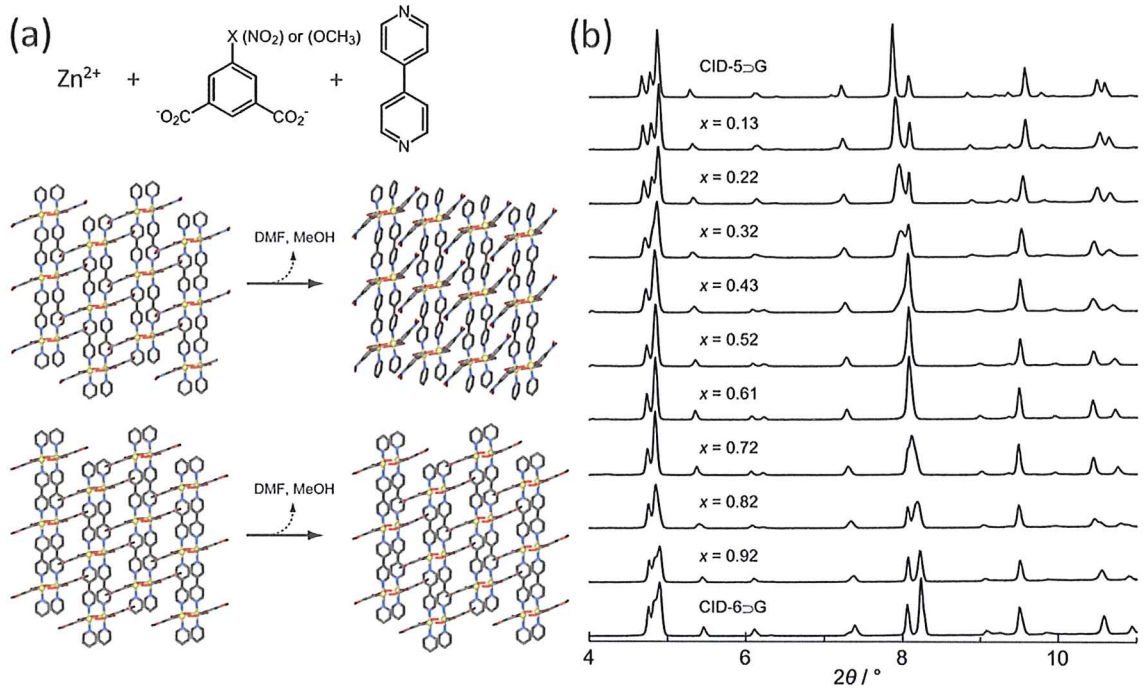


図Ⅲ2.1.1-5　二次元レイヤー型 PCP　[Cu(dhbpc)$_2$(bpy)]　(COORDIFLEX-11) における (a) 合成スキームおよび結晶構造　(b) 273 K におけるメタンおよび CO_2 のガス吸脱着等温線

(2)-4　CO_2 吸着開始圧力の精密制御法の開発

上記のように PSA 法によるガス分離プロセスにおいても対象とする混合ガスは様々であり、含まれている CO_2 の分圧や温度も多岐に渡る。柔軟型 PCP の大きな利点はその柔軟性により様々な条件下における CO_2 に対応出来る分離能を付与できることと考えられる。しかしながらこれまでの研究では、PCP の持つ柔軟性は金属イオンと有機配位子の組み合わせから得られる集積構造を作ってみないと分からないことがほとんどであり、精密に制御する手法が強く必要とされていた。この PCP の持つ構造柔軟性を高度かつ人為的に制御するためには、既存の PCP スクリーニング手法から見出す方法のみならず、異なったアプローチが必要となる。そこでここでは異なる特性を有する複数の PCP を任意の割合で結晶中に混ぜ合わせることにより、その柔軟性を精密に制御することを行った。具体的には高い構造柔軟性を有する PCP である上記 COORDIFLEX-5 と、一方で同様の多孔性構造を有しながらも構造柔軟性を持ち合わせない[Zn(5-MeOip)(bpy)] (5-MeOip = 5-メトキシイソフタレート、以後 COORDIFLEX-6) の二種類の PCP を合成段階で混ぜあわせることにより

PCP 同士を固溶化し、柔軟性を制御する試みを行った（図Ⅲ2.1.1-6a）。これら二種類の PCP はイソフタル酸誘導体の配位子が異なるため、固溶化するためにこれら配位子の割合を変化させながら合成時に同時に導入し、亜鉛イオンと 4,4'-ビピリジルと反応させた。結晶構造が似通っていることに起因し、COORDIFLEX-5 と COORDIFLEX-6 が均一に単一相に混ざり合った固溶体[Zn(5-MeOip)$_x$(5-NO_2ip)$_{1-x}$(bpy)]（COORDIFLEX-5/6, x は 5-MeOip の割合）を系統的に得た。均一に二種類の PCP が固溶していることは粉末 X 線回折、元素分析、単結晶 X 線構造解析等により同定した。特に単結晶 X 線構造解析は上記固溶体において x = 0.5 の試料について行い、二種類の配位子が共存した結晶相を形成していることを確認した。また粉末 X 線回折においてル・ベール解析を行い、すべての得られた固溶体粉末は配位子の割合を変えながら単一結晶相を有していることを確認した（図Ⅲ2.1.1-6b）。



図Ⅲ2.1.1-6 (a)固溶化を行うための二次元レイヤー型 PCP 二種類。それぞれガス吸着前後の構造が柔軟な[Zn(5NO_2ip)(bpy)]（COORDIFLEX-5）および剛直な[Zn(5-MeOip)(bpy)]（COORDIFLEX-6）の結晶構造。(b)配位子を混合して得られる PCP 固溶体[Zn(5-MeOip)$_x$(5-NO_2ip)$_{1-x}$(bpy)]（COORDIFLEX-5/6）の粉末 X 線回折。x は固溶体の組成における 5-MeOip 配位子の割合を指す

すなわち、この手法により柔軟な COORDIFLEX-5 の構造内部に剛直な構造を持つ COORDIFLEX-6 の成分を任意の割合で導入できるようになる。図Ⅲ2.1.1-7 には 298 K における水の吸着等温線および 195 K における CO_2 の吸着等温線を示している。COORDIFLEX-5 のみは高い柔軟性を有している一方、吸着前は非多孔体であることから吸着を開始させるために必要なガス圧力は高い（ゲートオープン型吸着）。反対に COORDIFLEX-6 のみの場合はゼオライトのように剛直な多孔体であるため、極低圧よりガス吸着が進行する。一方これらを混ぜあわせた固溶体 COORDIFLEX-5/6 においては、剛直

な PCP である COORDIFLEX-6 の割合を増やしてゆくことにより、ゲートオープンを示す圧力の低下が観測された。特に CO_2 においては COORDIFLEX-6 の系統的な増加に伴い、ガス吸着開始圧力の低下が連続的に起こり、ある x の値からほぼ COORDIFLEX-6 と同様のミクロ孔由来の一型吸着等温線を持つことが確認された。このことから、PCP を二種類（あるいは複数種類）混ぜあわせる固溶化の手法を柔軟型 PCP に適用することにより、多孔性構造の柔軟性を連続的に制御し、ガスの吸着を開始する圧力を連続的に制御できることがわかった。この固溶体 COORDIFLEX-5/6 を用い、273 K、１気圧の条件において CO_2／メタン＝1:1（体積比）の混合ガスからの分離能の好適化を行ったところ、図Ⅲ2.1.1-8 に示すように $x = 0.12$ のときに特に高い分離能を付与できることがわかった。すなわち CO_2 の吸着量は 40 mLg^{-1} と比較的高い値を維持しつつ、メタンに対しては柔軟性が応答せずほとんど吸着しない PCP の調整に成功した。固溶体の母体 PCP である COORDIFLEX-5、COORDIFLEX-6 はいずれも図Ⅲ2.1.1-8 に示すように非常に低い吸着量あるいはガス選択性を持ち分離能は十分でないため、固溶化手法が CO_2 ガス分離に有用であることが示された。

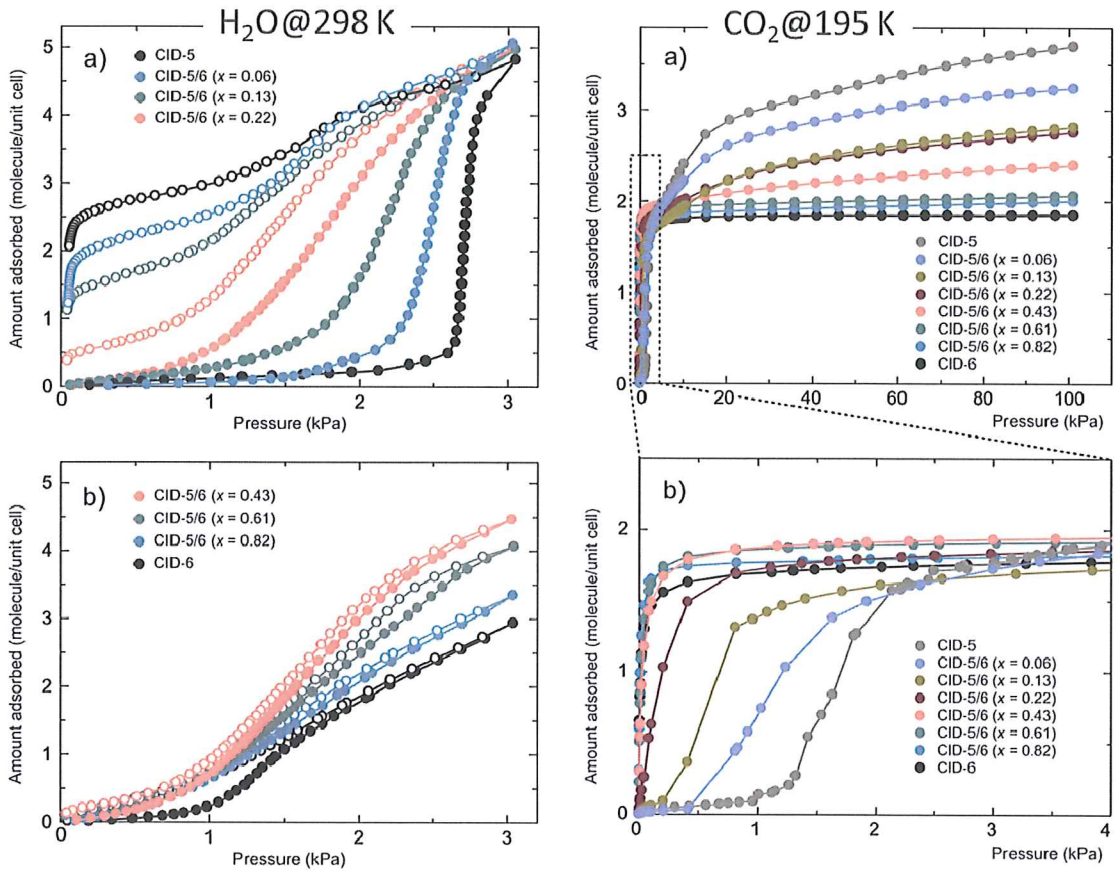
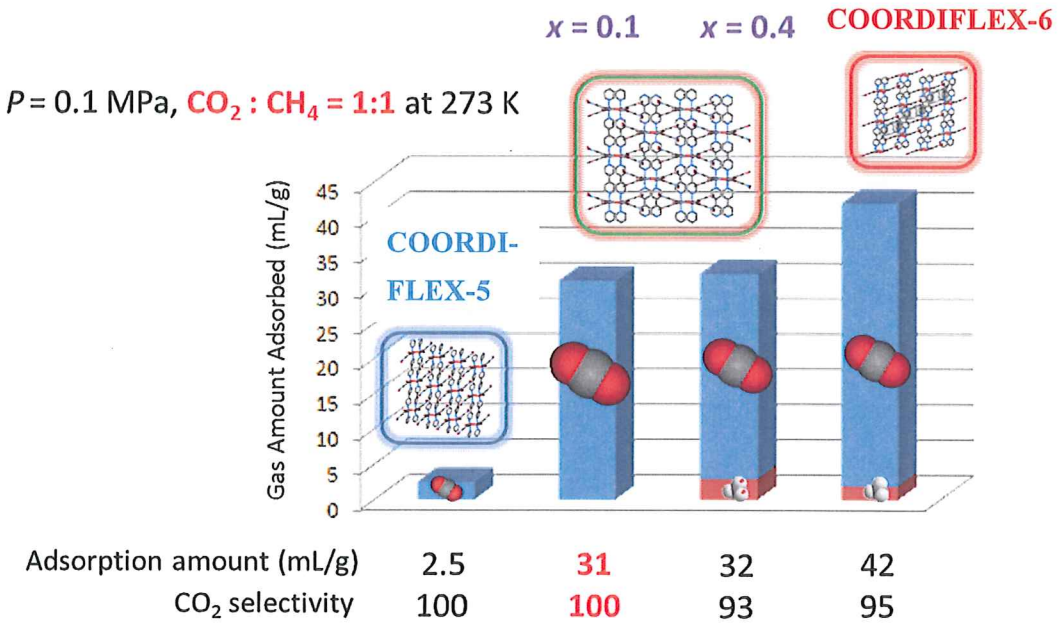


図 Ⅲ 2.1.1-7　x の値を系統的に変化させた固溶体型二次元レイヤー PCP、[Zn(5-MeOip)$_x$(5-NO$_2$ip)$_{1-x}$(bpy)]（COORDIFLEX-5/6）における水吸脱着等温線（左、298 K）および CO_2 吸脱着等温線（右、195 K）



図Ⅲ2.1.1-8　全圧 0.1 MPa の CO_2／メタン＝１：１混合ガスにおける COORDIFLEX-5, COORDIFLEX-6 およびそれらの固溶体 COORDIFLEX-5/6（x = 0.1, 0.4）の各ガス吸着量

(2)-5　ラボ PSA 試験装置の設計と開発

今後、PCP の PSA 装置での利用を考えた場合、吸着測定装置と小型 PSA 装置をつなぐ、可燃ガス用のラボスケールの PSA 装置を使った種々の実用性及び詳細な装置設計を行うための基礎実験が必要である。例えば、PCP ペレットの大きさや形状との関係など、PCP に適したものがあると思われる。そこで、㈱クラレ、昭和電工㈱、京都大学が協力して上記 PCP 用の PSA ラボスケール装置の仕様を種々議論しまとめ、クラレケミカル㈱と共同で、「ラボ PSA 試験装置」を設計・試作した（図Ⅲ2.1.1-9）。引き続き、本装置を用いて PSA 基盤技術の開発を進めていく予定である。なお、この装置を使って、㈱クラレが CO_2／メタン系を中心とした基礎実験を現在進めている。次年度以降、昭和電工㈱に移設し、CO_2／エチレン系での実験を進めていく予定である。

図Ⅲ2.1.1-19　PCP ガス分離評価用ラボ PSA 試験装置の概観（左・右）

(3) まとめと目標の達成度

目標値に対して、以下の成果を得た（表Ⅲ2.1.1-1）。

表Ⅲ2.1.1-1 目標の達成度

	目標	成果	達成度
1.	吸着ガス中の CO_2 濃度 ：95%以上	CO_2 濃度：97.9%	○
2.	分離度：150 以上	分離度：200	◎
3.	吸着熱：40 kJ/mol 以下	35.0 kJ/mol	○

◎大幅達成　○達成

以　上

Ⅲ2.1.2 メタン精製材料開発

(1) 本研究開発の目的

本研究開発では、バイオガスやランドフィルガス由来のメタンを燃料として有効活用するために用いる、メタン精製材料の開発を目的とする。具体的には、メタン中に含まれる CO_2 を選択的に吸着する多孔性金属錯体(以下、Porous Coordination Polymers; PCP と略記)を開発し、その実用化に必要な基盤技術の開発を行う。

環境負荷の低減や循環型社会形成に向けて未利用エネルギーの有効利用が注目される中、その一つとして、下水汚泥、食品工場廃棄物、生ごみ、家畜糞尿などを嫌気性消化処理する際に発生するバイオガスの利用が求められている。

バイオガス事業は、地域での資源循環を通じ、多様な価値を生み出すことが可能である。例えば、環境的な側面としては再生可能エネルギー生産による CO_2 排出量の削減が挙げられる。また、経済的な側面としては廃棄物処理費用の軽減やバイオマスから生成される堆肥、電気などの販売による収入、バイオマスを通じた地域活性化による経済的波及効果などが挙げられる。さらに、社会的な側面としては地域コミュニティの絆の維持・強化などが挙げられる。このように、バイオガス事業はサステイナビリティ(持続可能性)という考え方に合致し、地域の持続可能な社会の形成に大きく貢献すると考えられる。

しかしながら、バイオガスの一部は消化槽の加温やガス発電、焼却炉の補助燃料などとして有効利用されているが、バイオガスは主成分がメタン約 60%、CO_2 約 40%であり、大量の CO_2 含んでいるため発熱量が低く、その利用用途も限られてしまうため、全国のバイオガス発生量のうち約 30%が未利用分として焼却処分されている。そのため、未利用エネルギーの有効利用の観点から、バイオガスの主成分であるメタンと CO_2 の分離が求められている。例えば、メタン濃度を 95%以上にまで濃縮することで、天然ガス代替燃料として利用することができる。

バイオガス中の CO_2 を除去する方法としては、吸着法、吸収法(物理吸収法・化学吸収法)、膜分離法、深冷分離法があり、これらのうち吸着法と吸収法が実用化されている。

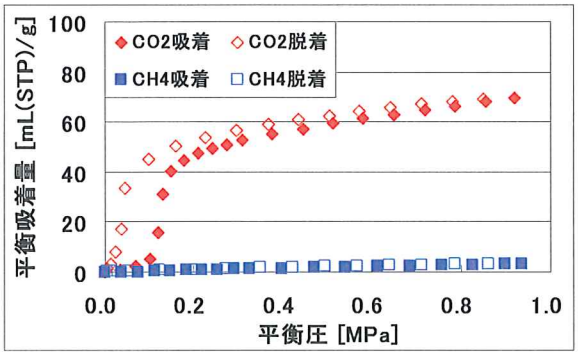
吸着法については、分子篩炭やゼオライトを用いて既に実用化されているが、後述のように解決すべき課題を抱えており、バイオガスの有効利用促進のためにも革新的な分離吸着材の開発が望まれている。そこで、近年、新規多孔性材料として注目を集めている PCP を用いたメタン精製材料の開発を行うことにした。

(2) 本研究開発の概要

分子篩炭を用いた圧力スイング吸着法(以下、Pressure Swing Adsorption; PSA と略記)によるバイオガス精製を考えた場合、分子篩炭は平衡状態におけるメタンと CO_2 の選択性が低いことから、メタンと CO_2 の吸着速度差を利用して分離することになる。しかしながら、吸着速度の差によってメタンと CO_2 を分離する場合、製品メタン純度と製品メタン回収率の間にはトレードオフの関係がある。メタン PSA の場合、原料であるバイオガスの有効利用の観点に加え、可燃性であり、且つ温暖化係数が CO_2 の 21 倍であるメタンをオフガスとして放出することは好ましくない。本トレードオフの関係は分子篩炭の分離機構に起因するため、PSA の運転条件変更では解決できない。このような背景のもと、平衡状態でも高いメタン／CO_2 分離性能を発現する PCP の開発を目指すこととした。

また、分子篩炭は真空から大気圧までの圧力領域における CO_2 吸着量が多く、脱離させるには再度真空近くまでの減圧が必要であるため、かなりのエネルギーを消費することになる。そのため、高いメタン／CO_2 分離性能を発現するのみならず、大気圧以上で多量の CO_2 の吸着と脱離の両方が可能な PCP の開発が重要となる。

さて、活性炭（分子篩炭）やゼオライトなどの既存材料にはない PCP 独自の特徴として、ガス分子の吸着・脱離によって結晶性を維持しながら構造が大きく変化する構造柔軟性が挙げられる。京都大学は構造柔軟 PCP の開発で世界を先導しており、様々な知見を有している。これまでに京都大学において、ある一定の圧力まではガスを吸着しないが、ある一定圧を越えるとガス吸着が始まるという特異な吸着挙動（以下、ゲート・オープン型の吸着挙動と表記）を示す構造柔軟 PCP が開発されており、ガスの種類によって吸着開始圧が異なることが分かっている。一例として、亜鉛イオンと 5－ニトロイソフタル酸（5-NO_2-ip）と 4,4'－ビピリジル（bpy）とからなる構造柔軟 PCP $[Zn(NO_2\text{-ip})(bpy)]_n$ の CO_2 とメタンの吸脱着等温線を示す（図Ⅲ2.1.2-1）。



図Ⅲ2.1.2-1 $[Zn(NO_2\text{-ip})(bpy)]_n$ の CO_2 とメタンの吸脱着等温線

図Ⅲ2.1.2-1 より、構造柔軟 PCP $[Zn(NO_2\text{-}ip)(bpy)]_n$ は CO_2 を選択的に吸着し、メタンは吸着しないことが分かる。この特異な吸着挙動をメタン PSA 用分離吸着材に応用することができれば、前記課題の解決が期待されるので、構造柔軟 PCP に特化して開発を行うことにした。

(3) 開発目標の設定

分離システムとして PSA を選択し、下記開発目標を達成できる構造柔軟 PCP の開発を行うこととした。

≪開発目標（平成 23 年度）≫

①高分離度の達成

製品メタン純度とメタン回収率の両立を念頭に、下記数値目標を設定した。

・分離度　150 以上

・吸着ガスに占める CO_2 の濃度　95%以上

②脱離の低エネルギー化

常圧での再生を可能とし、PSA のランニングコストに占める割合の多い真空ポンプをなくすことを念頭に、下記数値目標を設定した。

・0.1～1.0MPa の圧力範囲における CO_2 の有効吸着量　60mL/g 以上

・CO_2 の吸着エネルギー　40kJ/mol 以下

(4) 開発スケジュール

PCPの性能としての数値目標の達成に向けた検討と並行して、実用化に際して必要となるPCPを使いこなす技術の開発も行うことにした。

平成21～22年度上期

検討課題：

①PCP設計指針の抽出及び体系化

②評価系の構築

平成22年度下期～23年度

検討課題：

①好適構造絞込み（金属イオン・配位子）

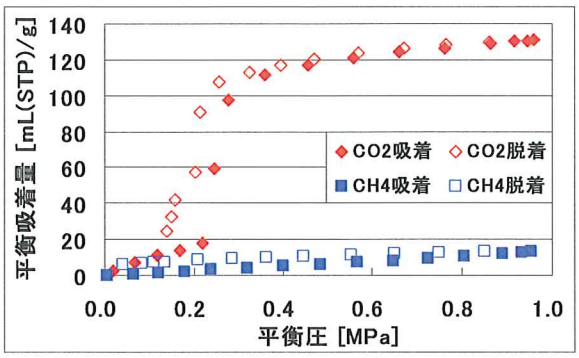
②スケールアップ可能なPCP合成法の検討

③形態付与検討

④ラボ PSA 試験装置の開発とそれを用いた評価

(5) 研究開発内容と成果

既知 PCP をベースに中心金属、配位子を変えた PCP を合成し、メタン及び CO_2 の単成分での吸脱着等温線の比較を中心に、高分離度が期待される PCP のスクリーニングを行い、構造化学的観点、計算化学的観点からのアプローチも加えながら骨格探索を進め、PCP の構造とガス吸着性能との相関に関する知見を得ることに注力した。また、評価系に関しては、PSA での使用を考えた場合、静的吸着特性のみならず動的吸着特性を把握することが重要であることから、流通系ガス分離性能評価装置を構築し、PSA を意識した条件でのメタン／CO_2 分離能評価を行った。種々検討した結果、候補 PCP を 1 種類に絞り込んだ（以下、COORDIFLEX K-11 と呼称)。COORDIFLEX K-11 の CO_2 とメタンの吸脱着等温線を図Ⅲ2.1.2-2 に示す。



図Ⅲ2.1.2-2 COORDIFLEX K-11 の CO_2 とメタンの吸脱着等温線

今回開発した COORDIFLEX K-11 の開発目標に対する達成度について評価した結果を以下に示す。

<u>①高分離度の達成</u>

容量比でメタン:CO_2＝60:40 からなるメタンと CO_2 の混合ガスの分離を全圧 0.8MPa で分離すると仮定した場合、

CO_2 吸着量　　107.0mL(STP)/g@0.32MPa

メタン吸着量　　6.0mL(STP)/g@0.48MPa

であり、吸着ガスに占める CO_2 の割合は 95%となり、平成 23 年度の開発目標を達成した。

続いて、容量比でメタン：CO_2＝60：40 からなるメタンと CO_2 の混合ガスを用いて全圧 0.8MPa で実施した破過試験の結果、

入口ガス組成　メタン：CO_2＝60.4：39.6

出口ガス組成　メタン：CO_2＝99.9：0.1

であり、分離度は 655 となり、平成 23 年度の開発目標を達成した。

②脱離の低エネルギー化

容量比でメタン:CO_2＝60:40 からなるメタンと CO_2 の混合ガスの分離を全圧 0.8MPa で分離すると仮定した場合、

0.10～0.32MPa に圧力範囲における CO_2 の有効吸着量　97mL(STP)/g

であり、平成 23 年度の開発目標を達成した。

続いて、273K、283K、293K における吸着等温線を測定し、各温度における吸着開始圧力の値を Clausius-Clapeyron 式に代入し、計算した結果、CO_2 の吸着エネルギーは 28.6kJ/mol となり、平成 23 年度の開発目標を達成した。

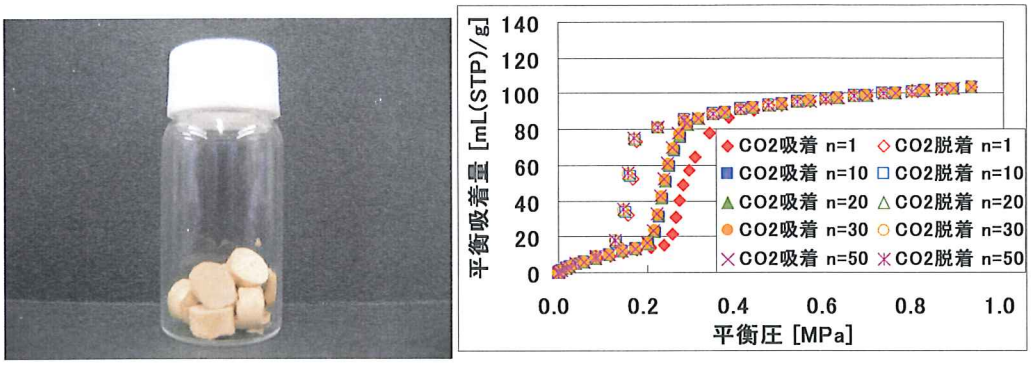
得られた成果について表Ⅲ2.1.2-1 にまとめる。

表Ⅲ2.1.2-1 開発目標達成度

開発目標		成果	達成度
高分離度の達成	①吸着ガス中のCO_2濃度　95%以上	95%	○
	②分離度　150以上	655	◎
脱離の低エネルギー化	①0.1～1MPaにおけるCO_2有効吸着量 60mL/g以上	97mL/g (@0.1～0.32MPa)	◎
	②CO_2吸着エネルギー　40kJ/mol以下	28.6kJ/mol	◎

◎大幅達成　○達成

メタン PSA 用分離吸着材として COORDIFLEX K-11 の有用性が確認できたので、次に、実用化に際して必要となる形態付与技術の開発を分担研にて実施した。バインダーや成形条件について種々検討した結果、50 回の繰り返し吸着試験後も性能を維持し、かつ、粉末の脱落が無い処方を見出した（図Ⅲ2.1.2-3）。引き続き、ペレット化条件の好適化を進める。



図Ⅲ2.1.2-3　ペレットの写真（左）と繰り返し吸着試験結果（右）

並行して、上記の形態付与検討用の材料確保を兼ね、PCP の反応条件の適正化とプロセス検討のための基礎データの取得を行い、12kg/バッチのスケールアップ合成を実施した。引き続き、加速費で購入したフロー式粒子像解析装置（粒径分布や粒子形状の解析を行う装置）等を用いて反応温度や濃度といった合成条件が PCP の粒子形状や性能に与える影響についても確認するなど、製造プロセス設計のための基礎検討を進める予定である。

更に、PSA 基盤技術開発を進めるために、クラレケミカル㈱と共同で、ラボ PSA 試験装置を設計・試作した。装置外観を図Ⅲ2.1.2-4 に示す。これまでに分子篩炭を搭載して運転を行い、発生メタン量と製品メタン純度に関するデータを取得した。引き続き、PCP を用いた際のメリットを明確にしていくと共に、PCP を PSA 用分離吸着材として使用する上での課題抽出を行い、PSA 基盤技術開発を進めていく予定である。

図Ⅲ2.1.2-4　ラボ PSA 試験装置の外観

Ⅲ2.1.3　CO_2/エチレン分離用 PCP 開発

(1)　はじめに

本研究は世界中で注目を集めている日本発の高機能材料である PCP（Porous Coordination Polymer/多孔性金属錯体）の工業的実用化技術を確立し、多大なポテンシャルを秘めている PCP の実用化研究を促進することを目指している。具体的には適度な規模の実用化の成功事例を築くため、当社大分コンビナートで複数保有している酸化反応プロセスの省エネルギー化と資源リサイクルに繋がる高効率 CO_2 分離プロセスの実現を可能にする PCP をベースとする吸着剤を開発し、実用化技術を確立することを目的としている。

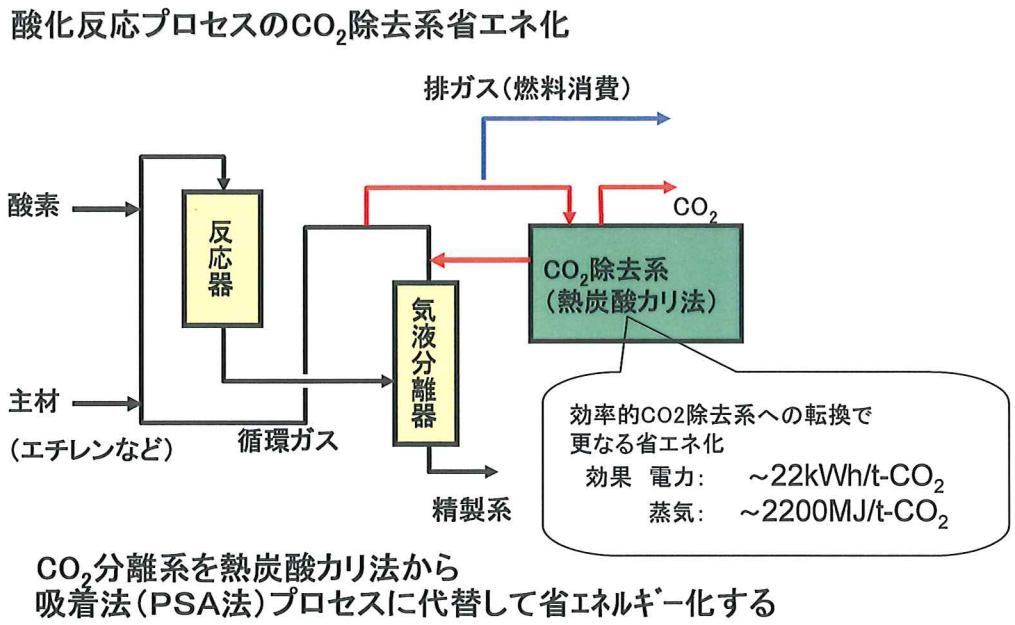
PCP を用いた CO_2 分離プロセス実用化に向けて、酸化反応プロセスである酢酸ビニル製造プロセスをターゲットとして設定している。酢酸ビニルの生成反応は下式による。主な副反応はエチレンの燃焼反応である。

$$C_2H_4 + \tfrac{1}{2}O_2 + CH_3COOH \longrightarrow C_2H_3OCOCH_3 + H_2O$$
$$C_2H_4 + 3O_2 \longrightarrow 2CO_2 + 2H_2O$$

反応器を出た生成物は冷却され気液分離器にて酢酸ビニルを含む凝縮液を分離し、残ったガスは未反応の原料エチレンを含むため循環ガスとしてリサイクルされている。しかし、単純にリサイクルを繰り返すだけでは副反応で生成した CO_2 が蓄積して循環ガス中のエチレン濃度を所定濃度に維持できなくなるため、循環ガスの一部を CO_2 吸収系に送り、CO_2 の除去と系外への抜出しを行いリサイクルラインに再び戻す操作を行っている。この酸化反応プロセスの CO_2 除去系には現在熱炭酸カリ法を採用しており、その原理は下式による。

$$K_2CO_3 + CO_2 + H_2O \underset{\text{放散}}{\overset{\text{吸収}}{\rightleftharpoons}} 2KHCO_3$$

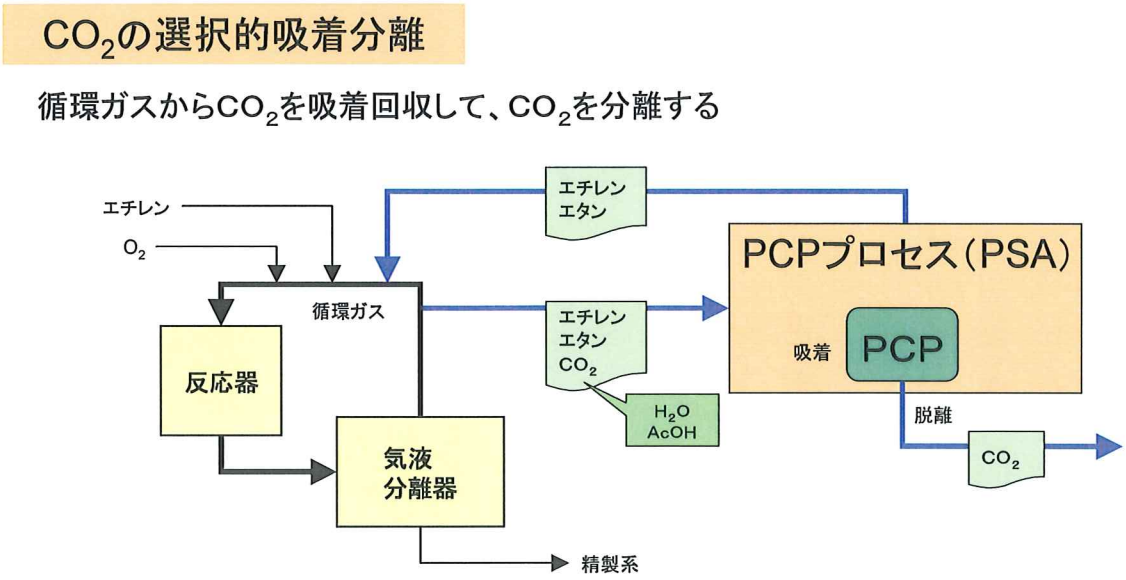
CO_2 を取り除かれたガスは再び反応系に戻されるが、エタン（原料のエチレンに不純物として含まれる）の過度の蓄積を防ぐために一部は系外に抜出される。



図Ⅲ2.1.3-1　酸化反応プロセスの CO_2 除去系の省エネルギー化

この熱炭酸カリ法の吸収液の再生には相当量のスチームを使用しており、この熱エネルギーを削減して更に省エネルギー化を進めたい。高効率の吸着法（PSA 法）プロセスを導入できれば熱炭酸カリ法の CO_2 放散に使う熱エネルギー（スチーム）を削減することが可能になる。図Ⅲ2.1.3-1 に示すように循環ガスは比較的 CO_2 濃度が高く、また、0.6MPaG と高圧なので、吸着法（PSA 法）プロセスに適する条件を備えている。

循環ガス中からエチレンをロスすること無く、CO_2 を除去する必要があり、これを吸着法で実現するためには CO_2 の高効率分離を可能にする新規材料の開発と実用化が必須要件である。（図Ⅲ2.1.3-2）。



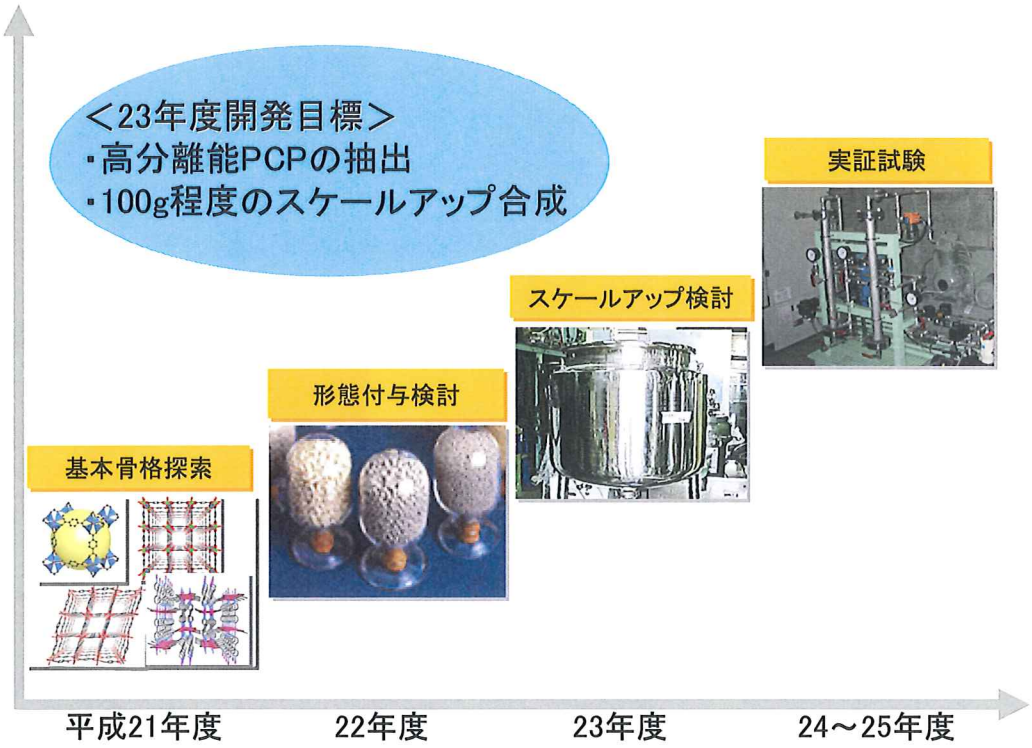
図Ⅲ2.1.3-2　研究の目的

早期に PCP の実用化例を構築するため、できる限り検討を前倒しして、平成 31～35 年度での実用化を目指したいと考えている。平成 24 年度から小型設備を用いた実証試験に着手し、平成 26 年度以降はさらなるスケールアップや大型実証試験を経て、実ガス組成での耐久性やコスト等を明確にしながら本プラントでの実用化につなげたい。そこで、本プロジェクト最初の 3 年間は、高い CO_2/エチレン分離能を有する候補 PCP の開発（基本骨格探索）を目標とし、得られた候補 PCP に関しては、実用化に向けた形態付与検討およびスケールアップ検討に着手し問題点の抽出を行うこととした。

開発目標：

1）CO_2 あるいはエチレンを選択的に吸着し、目標性能を有する候補 PCP を 1 種以上抽出する。

2）100g 程度のスケールアップ合成を行い、実用化の可能性確認を得る。

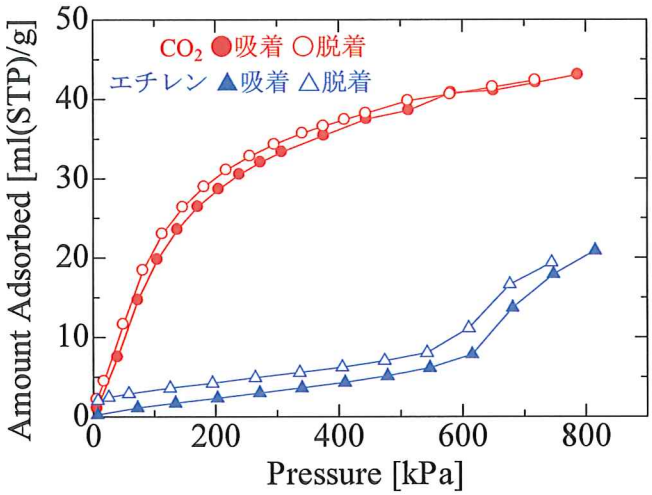


図Ⅲ2.1.3-3 研究開発のスケジュールおよび目標値

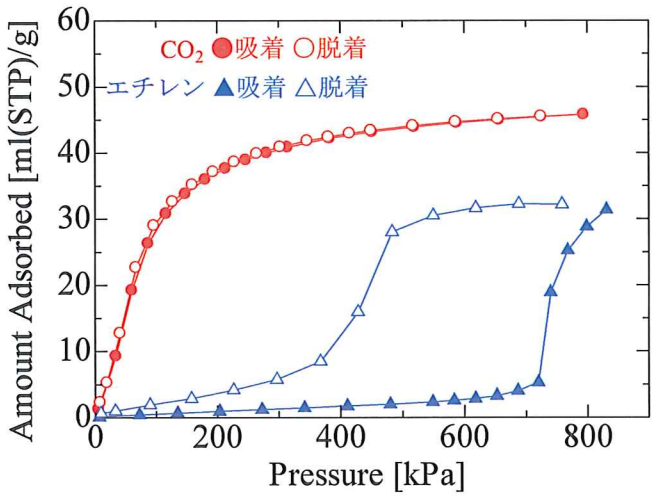
これまで、京都大学集中研において、実用化候補 PCP の開発（＝基本骨格探索）に取り組んできた。検討を開始するにあたり、まず、ガス分離目的の PCP に関する既存技術を調査し、PCP を用いた分離技術の現状把握を行った。得られた調査結果を元に、CO_2/エチレン分離用 PCP 開発に関して、3 つの開発アプローチを設定した。設定したアプローチに従って、既存 PCP の中から検討する PCP を選定し、少量合成および吸着特性評価によるスクリーニングを実施した。スクリーニングの結果は、PCP 選定に反映させ、既存 PCP だけでなく、新規 PCP の検討も合わせて行った。結果、高い CO_2/

エチレン分離能を有する候補 PCP5 種の抽出に至った（図Ⅲ2.1.3-4、図Ⅲ2.1.3-5）。

上記の検討で見出した候補 PCP に関し、単成分ガスの吸着特性評価だけでなく、混合ガスを用いた分離特性の評価に着手した。数グラム程度のサンプル量でも評価できるよう、専用の評価装置を立ち上げた。設置した装置を用い、CO_2 を選択的に吸着する PCP を充填したサンプル管に CO_2/エチレン混合ガス（混合比 30：70）を流通させたところ、CO_2 を選択的に吸着し、エチレンを高濃度に濃縮できることを確認した。現在、動的吸着量を測定に向けて、定量的な吸着量・ガス選択性の評価をできるように、評価装置の改造を進めている。



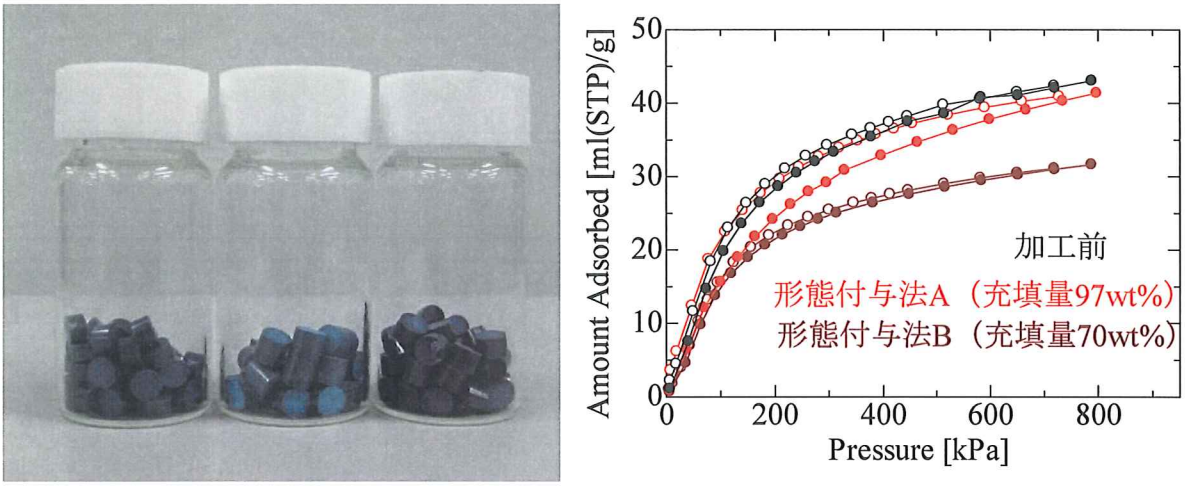
図Ⅲ2.1.3-4 候補 PCP(COORDIFLEX® SD-28)の吸着等温線（298K）



図Ⅲ2.1.3-5 候補 PCP(COORDIFLEX® SD-65)の吸着等温線（298K）

集中研において基本骨格の開発を進める一方、分担研において、実用化に向けた各種検討も開始した。スケールアップに向けた合成条件検討では、100g/バッチスケール合成での検証を実施した。併せて更なるスケールアップの際に予測される課題を抽出

し、加速費によって対策を実施、キログラムスケールでの合成実験を検討可能な環境を整備した。また、形態付与検討にも着手し、打錠成型によるペレット化を実施、吸着特性、耐久性等の評価が可能な一定レベルの圧壊強度を有するペレットが得られる状態になった（図Ⅲ2.1.3-6）。得られた候補 PCP を用い、さまざまな条件で成型することで、形態付与が PCP の吸着特性に与える影響を確認することができた。



図Ⅲ2.1.3-6　形態付与した PCP（左）およびその吸着挙動例（右）

現時点での達成状況を表Ⅲ2.1.3-1 に示す。基本骨格探索においては、高い CO_2/エチレン分離能を有する PCP の開発に成功している。スケールアップ合成に関しては、23 年度目標である 100g/バッチスケールでの実証合成を実施し、キロスケールでの合成への目処をつけた。形態付与検討に関しても、基礎的な検討を通して、形態付与が PCP に与える影響を把握することができた。

表Ⅲ2.1.3-1 目標の達成度と今後の課題

	目標	成果	達成度	今後の課題
1) 基本骨格探索	高分離能 PCP 基本骨格の抽出	目標性能を有する PCP に目処	△ H24 年 2 月 達成見込	既設装置の改造により測定予定。
2) スケールアップ検討	100g 程度のスケールアップ合成	・100 g /バッチスケールでの実証合成 ・1 kg/バッチスケールの合成環境整備	◎	1 kg /バッチスケールでの実証
3) 形態付与検討	実用化に必要な形態を付与する	・成型による吸着性能への影響の把握	○	好適な形態付与方法の決定と具体的な成型方法の確立

◎：超過達成、○：達成、△：達成見込み、×未達

Ⅲ2.1.4　PCP による微量ガス分離材開発

（1）事業の目的

本研究開発では、バイオガス中に含まれる低濃度ガス、主にシロキサン D4 の分離材の開発を目的とする。CO_2 を分離する際に用いられるバイオガス中には、メタン（約 60%）と CO_2（約 40%）の他に、水、硫化水素、シロキサン（5ppm 程度）等の様々な低濃度ガスが含有される。これらの低濃度ガスは、表Ⅲ2.1.4-1 に記載したような問題があることから、除去する必要がある物質である。

表Ⅲ2.1.4-1　バイオガス中の不純物と除去が必要な理由

不純物	除去が必要な理由
水分	CO_2と共吸着し、吸着量の低下を招く。 脱離に要するエネルギーが大きい。
硫化水素	設備の腐食の原因となる。
シロキサン	リンス、シャンプー、化粧品などに含まれるシリコンオイルに由来。 燃焼によりSiO_2が生成し、発電機、ボイラなどの内部に付着し、不具合の原因となる。

メタンや CO_2 等の高濃度ガスの分離は、CO_2 用に設計した分離材で可能だが、低濃度のガスを同時に分離することは困難であり、CO_2 濃縮後もこれらの低濃度ガスを含有することが問題となっている。メタンと CO_2 を通過させ、それ以外の低濃度ガスを吸着除去する手法としては、CO_2 とメタンはほとんど吸着しない常温（293～298K）・常圧（0.1MPa）での吸着が理想であるが、汎用の安価な活性炭では水分や硫化水素（硫化水素は酸化鉄などの脱硫剤で除去）以外のシロキサンは選択吸着できないため、十分な除去ができない。特殊吸着材を用いることで除去性能の向上を達成した例はあるが、吸着材再生に要する熱量を得るためにガス量が多く必要であり、省エネルギー化の観点からも別のシステムを開発する意義は大きい。

東洋紡績㈱は VOC（揮発性有機化合物）などの吸着回収装置・システムを事業化しており、そのシステムでは吸着材再生に水蒸気を利用するため、省エネルギー化を実現している。そこで、東洋紡績㈱保有の微量ガス吸着分離技術と、設計により疎水化や細孔径制御が可能な多孔性金属錯体 PCP とを用いた、シロキサン吸着除去装置・システムを開発し、実用化することで、高選択分離と省エネルギー化を達成する。さらには、他の微量ガス除去用途への水平展開も期待できる。

具体的には、シロキサン D4 の分子サイズや物性に合わせて多孔性金属錯体等の分子設計を行い、約 60%のメタンガスと約 40%の CO_2 ガスからなるバイオガス中のシロキサン、特にシロキサン D4 濃度を 0.01ppm 以下に分離する材料を開発する。

（2）事業の目標

本研究開発の目標は次の 2 段階であり、3 年後の中間目標と 5 年後の最終目標は以下の通りである。

平成 23 年度中間目標：

①シロキサン D4 分離用活性炭 B と同等以上の除去性能を有する PCP 候補を 3 種類程度抽出する。

②数百グラム程度のスケールアップ合成を行う。

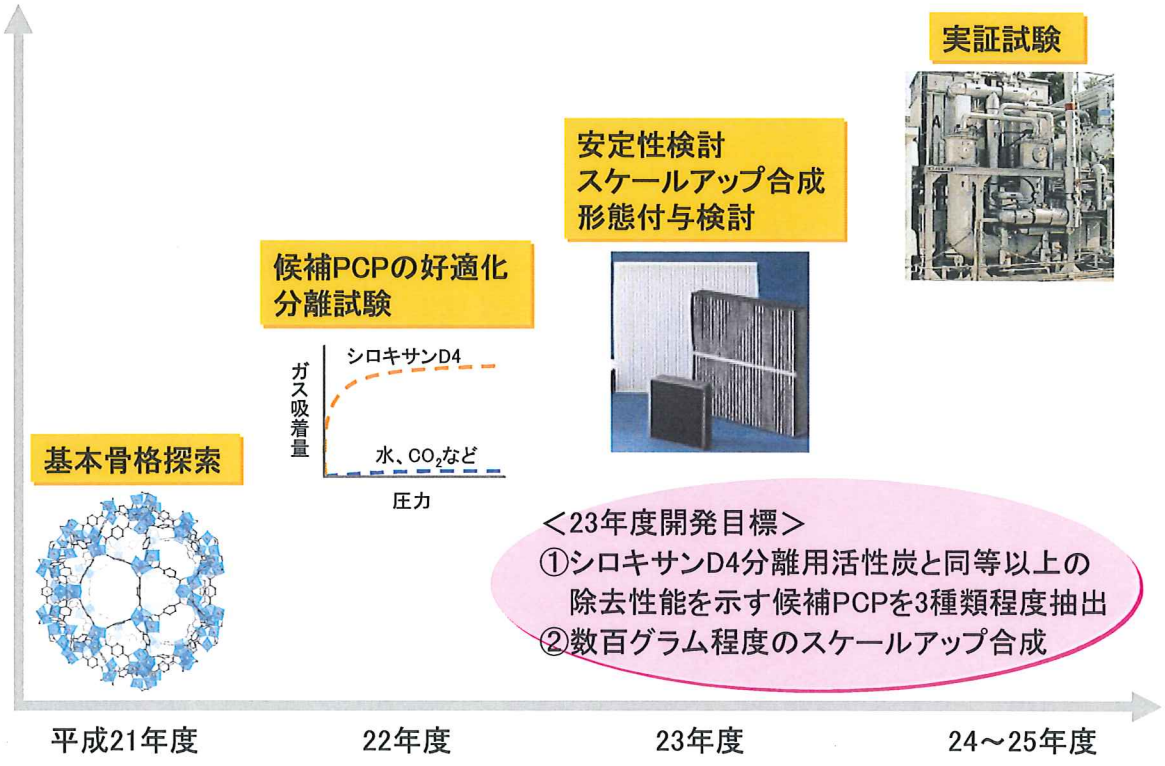
平成 25 年度最終目標：

①シロキサン D4 分離用活性炭 B の 2 倍以上の除去性能を達成する。

②実用化が可能な耐久性、コストであること。

（3）開発スケジュール

図Ⅲ2.1.4-1 に 5 年間の開発スケジュールを示す。平成 21 年度から 23 年度は、シロキサン D4 を吸着する PCP 骨格の探索を中心に行い、順次、分離性能や安定性、繰り返し性を検討してゆく。また、実用化に必須である形態付与は平成 22 年度後半より開始し、形態付与検討に必要な量を得るためのスケールアップ検討も同時期に開始する。PCP の好適化、形態付与、スケールアップ検討を基に、平成 24 年度からプロセス実証試験を開始する。



図Ⅲ2.1.4-1　開発スケジュール

（4）研究開発内容と成果

1）基本骨格探索

PCP 基本骨格の探索として、以下の①～③を繰り返し行い、PCP の好適化を図った。

①（a）既知 PCP からの選定、（b）新規 PCP、（c）シロキサン D4 吸着 PCP の配位子や中心金属の交換、を検討し合成する。

②シロキサン D4 簡易吸着性能評価によるスクリーニングを行う。

③実使用条件に近い流通系でのシロキサン D4 吸着性能評価を行う。

a）PCP の選定および合成

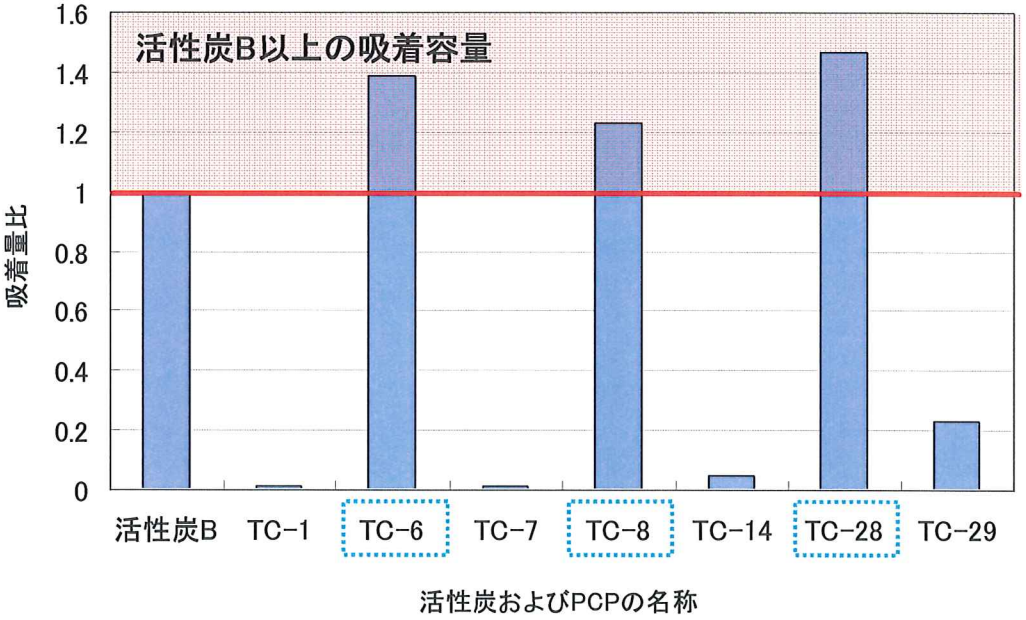
シロキサン D4 を選択的に吸着する PCP をまずは既存の PCP から選定し、合成を行った。次いで既存 PCP からの選定を継続すると共に、シロキサン D4 吸着 PCP をベースに改良を重ね、合計三十数種類の PCP の合成を行った。

b）シロキサン D4 簡易吸着性能評価

合成した PCP について、シロキサン D4 簡易吸着性能評価により、スクリーニングを行った。その結果、9 種類の PCP がシロキサン D4 を吸着することが明らかとなり、候補 PCP を見出すことができた。

c）シロキサン D4 流通系吸着性能評価

簡易評価では、平衡吸着量を測定している。しかしながら、実使用条件を考慮に入れると、速度論的解析が必要不可欠である。そこで、スクリーニングにより抽出した PCP については、実用化に則した評価として流通系での吸着性能評価を行った。



図Ⅲ2.1.4-2　各種 PCP の活性炭 B に対する吸着容量比

評価結果を図Ⅲ2.1.4-2に示す。シロキサンD4分離用活性炭Bと比較したところ、候補PCPのうち、TC-6、TC-8、TC-28という3種のPCPが活性炭Bと同等もしくはそれ以上の吸着性能を有することが明らかとなった。中間目標である候補PCPを3種見出すという目標を達成した。

2) 水分吸着量測定

吸着性能向上と水蒸気脱離時の乾燥時間短縮化のために疎水化が望まれる。そこで、候補PCPの水分吸着性能を評価した。

PCPは活性炭に比べて水分を吸着しやすい物が多いが、TC-8は活性炭の4分の1程度の水分吸着率であり、非常に疎水性が高い他に類のないPCPを見出すことができた。

3) 分離試験

前述のように、実用化にはCO_2やメタン等の混合ガスからシロキサンD4を分離することが必要となる。そこで、各種ガスに対する吸着挙動を把握するため、まず単ガスでの分離試験を実施した。流通系吸着性能評価により見出した3種のPCPのTC-6、TC-8、TC-28について、25℃でCO_2とメタンの吸着性能を評価した結果、いずれのPCPもCO_2やメタンに比べ、シロキサンD4を10～100倍量吸着することが明らかとなった。今後、実ガスでの評価が必要であるが、CO_2、メタン共存下でシロキサンD4吸着阻害が生じる可能性は極めて低いことが示唆される結果が得られた。

4) スケールアップ検討

実用化には無論であるが、形態付与検討を行うためにもスケールアップが不可欠である。そこで、加速費により高圧オートクレーブを導入し、スケールアップを検討できる体制を構築中で、23年度末には完成する見込みである。その前にまずフラスコスケールでのスケールアップ検討に着手し、ラボスケールよりもマイルドな条件で合成できそうな合成条件が得られつつある。また、一部のPCPについては特殊な反応系であることから、当面は、外注にてスケールアップを行っていく。

5) 形態付与検討

PCPは粉末で得られるため、実用化には成形が必須となる。成形するためにはPCPのサンプル量は100g以上必要であるため、まずは市販のPCPを用い、PCPの成形性を検討した。具体的には、圧縮成形と押出成形の検討を行った。

上記の成形では加圧や混練を行うため、成形後のPCPの構造変化が懸念される。そこで、PCPの結晶構造を確認するため、XRD測定を行った。得られたXRDパターンから、いずれもPCPの結晶構造を保持しており、いずれの成形条件でも構造変化が起こっていないことが明らかとなった。

次に吸着性能変化について確認を行った。一般に、成形すると粉体よりも嵩密度が高くなるため、ガスが内部まで浸透し難くなり、吸着性能の低下が懸念される。

そこで、成形前後での吸着性能変化について、窒素ガスを用いて評価を行った。その結果、圧縮成形により窒素吸着量は半減し、押出成形後は、窒素吸着量が 20%減少することが明らかとなった。性能低下を最小限に抑えることができる処方を見出すべく、成形条件検討を推進している。

(5)　まとめと成果の意義

(5)-1　まとめ

以下の成果を達成し、計画通りに研究開発を進捗することができた（表Ⅲ2.1.4-2）。

- シロキサン D4 分離用活性炭 B と同等以上の除去性能を有する PCP 候補を 3 種類見出し、中間目標を達成した。
- 水分吸着量測定の結果、高疎水性の PCP を見出すことができた。
- 検討中の吸着条件では、CO_2 やメタンの吸着量は極めて低く、シロキサン D4 が吸着阻害をほとんど受けることなく分離可能であることが示唆された。
- スケールアップ用にオートクレーブを導入し、数百グラムスケールでの合成を検討できる体制を構築した。平成 23 年度末までに目標達成の見込みである。
- 実用化に必須である形態付与検討を行い、構造変化なく成形できることを明らかにした。吸着性能を維持できる処方を検討することが今後の課題である。

表Ⅲ2.1.4-2　成果のまとめと今後の課題

開発項目	目標	成果	達成度	今後の課題
PCPによる微量ガス分離材の開発	シロキサンD4分離用活性炭Bと同等以上の除去性能を有するPCP候補を3種類程度抽出する	目標性能を満たすPCPを3種見出した	○	現状の2倍の除去性能のPCPを開発する
	数百グラム程度のスケールアップ合成を行う	スケールアップ用オートクレーブを導入し、数百グラムスケールでの合成を検討できる体制を構築した	△（H24年2月達成予定）	数百グラムスケールでの合成を行う

◎大幅達成、○達成、△達成見込み、×未達

(5)-2　成果の意義

得られた成果の意義は以下である。

シロキサン除去 PCP の開発は世界初である。また、高疎水性 PCP を用いることで世界最高レベルの吸着材を提供できる可能性を見出した。同様の検討により、シ

ロキサン D4 以外の微量ガス分離材へも展開が可能である。

（6）最終目標達成の見通し

中間目標はほぼ達成しており、最終目標である除去性能については達成の見通しが得られている（表Ⅲ2.1.4-3）。今後、高耐久化に対する要件を見極め、構造好適化を進めていくことで、高温高湿度条件における耐久性についても最終目標の達成は可能である。同時に安価な材料による高除去性能、高耐久化を検討することで、最終目標コストの達成を目指して研究開発を実施する予定である。

表Ⅲ2.1.4-3　最終目標と達成見通し

研究課題	最終目標（平成25年度末）	達成見通し
除去性能	シロキサンD4分離用活性炭Bの2倍以上の除去性能を達成する	吸着メカニズムを検証し、設計指針を明確化することで達成可能
耐久性 コスト	実用化が可能な耐久性、コストであること	安価な材料による高除去性能、高耐久化を検討することで達成可能

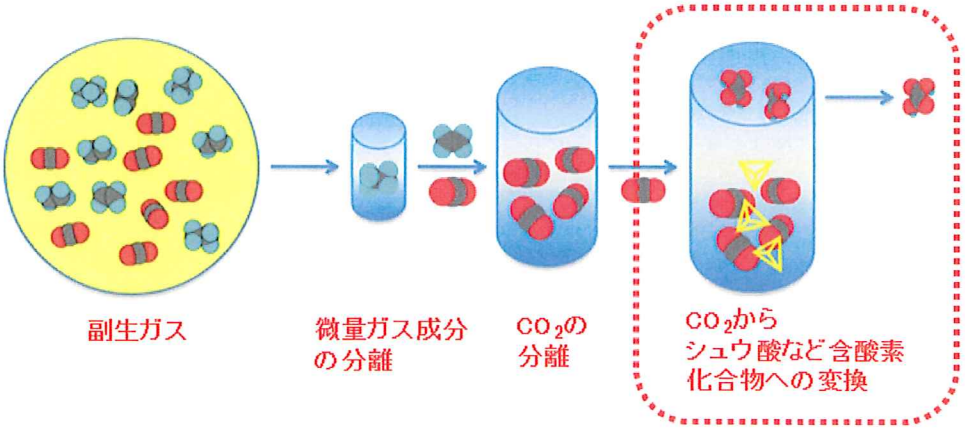
Ⅲ2.2 回収 CO_2 によるグリーンプロセス基盤技術開発の成果

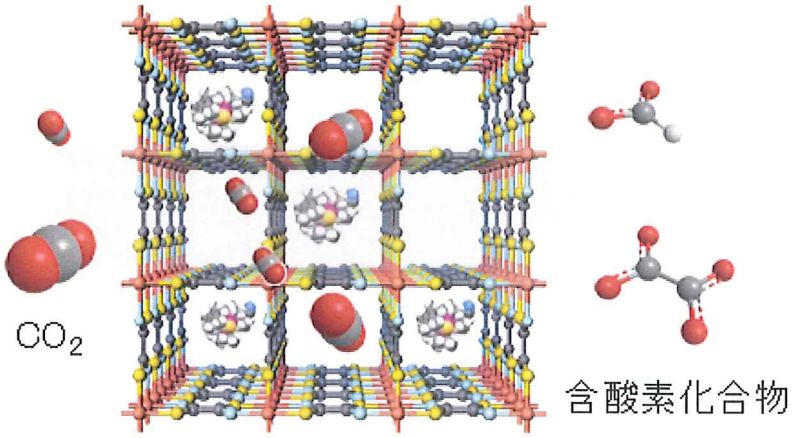
Ⅲ2-2-1 PCP-複合触媒基盤技術開発

(1) はじめに

PCP 複合触媒では、触媒近傍に原料である CO_2 ガスを確保するために、反応効率が格段に向上することが期待される。我々が開発する PCP 系複合触媒では、合目的、合理的な構築手法により、種々の触媒開発研究に広く応用利用可能である。

本項目では、次世代グリーン・サステイナブル・ケミストリー(GSC)技術開発の基盤技術となり得る、多くの基盤技術の開発に総合的に取り組むことを主眼としており、その総合モデルとして CO_2 からシュウ酸等の含酸素化合物を高効率に合成する PCP 複合触媒の研究・開発を行うことである(図Ⅲ2.2.1-1)。





図Ⅲ2.2.1-1 CO_2 からシュウ酸等の含酸素化合物を高効率に合成する PCP 複合触媒の研究・開発

(2) 目標

本研究開発の目標は次の 2 段階であり、3 年後の中間目標と 5 年後の最終目標は以下の通りである。

平成 23 年度中間目標：

① CO_2からの選択率(電流効率)60%以上で合成できる PCP 複合触媒を 2 種類程度調製する。

平成 25 年度最終目標：

② PCP と触媒を担体に構築する方法論の確立

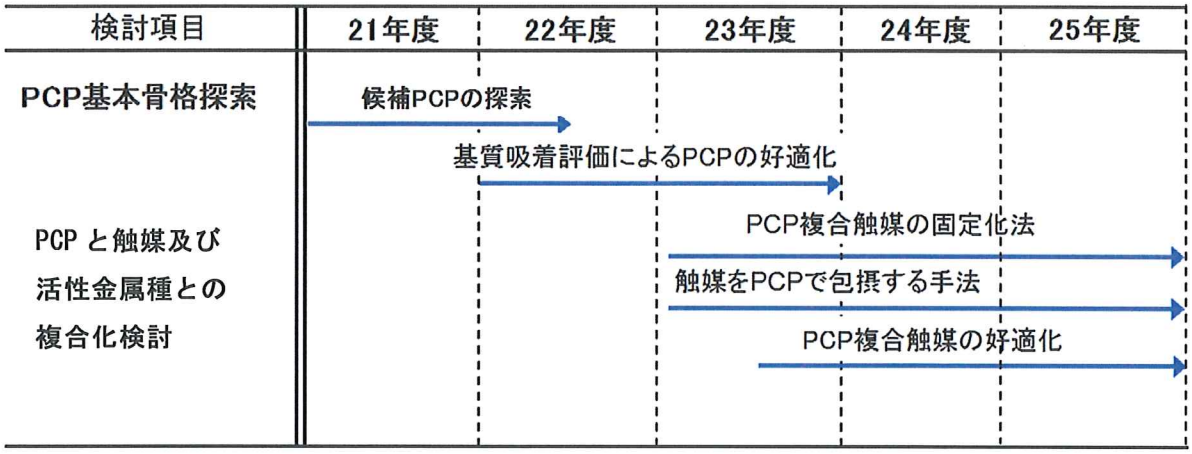
③ 触媒を PCP で包摂する方法論の確立

④ CO_2からの選択率(電流効率)80%以上で合成できる PCP 複合触媒を調製する。

(3) 開発スケジュール

表Ⅲ2.2.1-1 に 5 年間の開発スケジュールを示す。

表Ⅲ2. 2. 1-1 プロジェクト申請時点での 5 年間の開発スケジュール



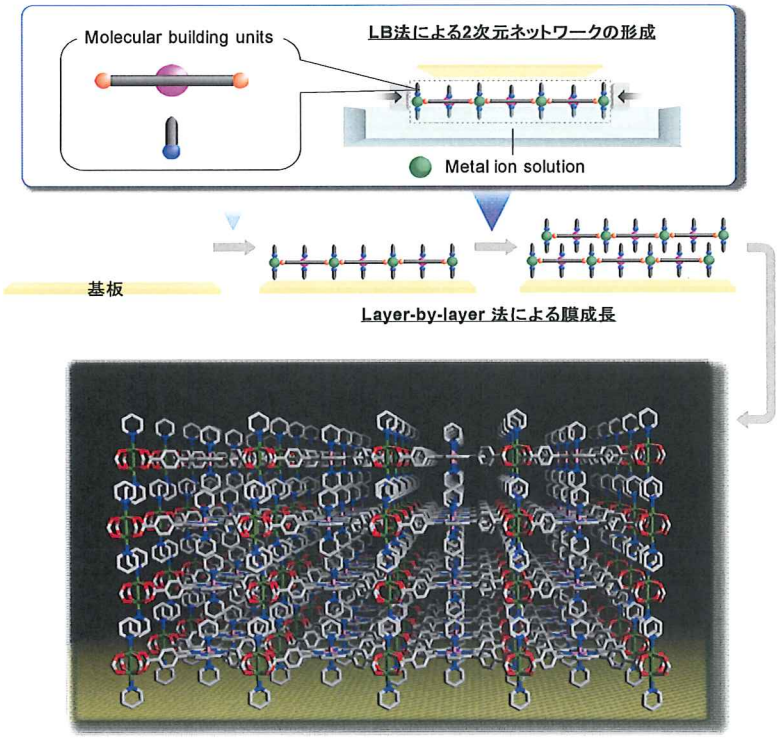
(4) 研究開発内容と成果

(4)-1 PCP を基板上に構築する方法論の確立

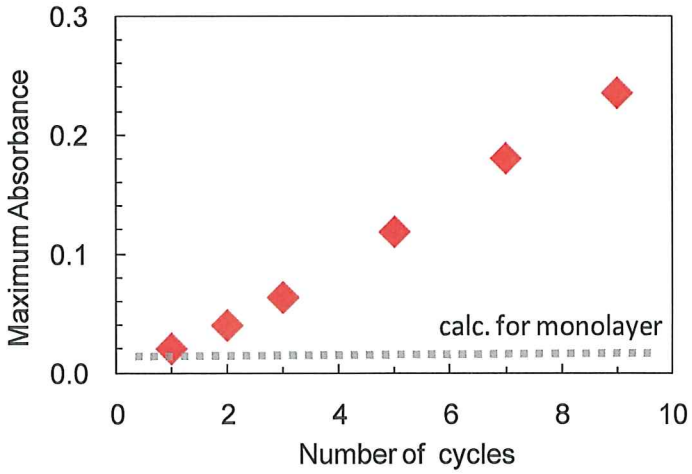
２次元ネットワーク（面内周期構造）を形成するのに優れた Langmuir-Blodgett（LB）法と、分子の積層および逐次成長（面外周期構造）させるのに優れた layer-by-layer 法を巧みに組み合わせた新規手法の開発により、世界で初めて面内、面外ともに結晶性で且つナノスケールで膜厚と構造が制御された多孔性配位高分子薄膜の作製に成功した。

構成要素として、安定性が高いポルフィリン分子を選択した。具体的には、図Ⅲ2.2.1-2 に示すように、中心部分にコバルトイオンが配位し、周辺部にカルボキシル基を有する 5,10,15,20-tetrakis (4-carboxyphenyl)porphyrinato-cobalt(II) (CoTCPP) およびピリジン (py) を塩化銅水溶液上に展開し、CoTCPP が銅イオンで架橋された 2 次元ネットワーク (CoTCPP-py-Cu) を作製した (Process 1)。塩化銅水溶液上に形成された CoTCPP-py-Cu 単分子膜を、水平浸漬法により石英もしくは単結晶シリコン基板に移しとった (Process 2)。

その後、薄膜が形成された基板を溶媒中に浸漬させ乾燥を行った (Process 3)。Process 1～3 を 1 サイクルとし、このサイクルを繰り返すことにより薄膜の layer-by-layer 成長を行った。各サイクルにおける吸収スペクトルを図Ⅲ2.2.1-3 に示す。ポルフィリン分子に特徴的な Soret 帯と呼ばれる吸収がサイクル数に応じて増加していることを確認した。サイクル数に対して吸光度が直線的に増加していることから、各サイクルでほぼ同じ量の薄膜が積層されていることがわかる。また、1 サイクルにおける吸光度（実測値）が CoTCPP の吸光係数と 2 次元ネットワークにおける CoTCPP 分子の配列を考慮して算出した 1 層分の値と良い一致を示すことから、基板上に理想的な単分子膜が形成されていることが考えられる。

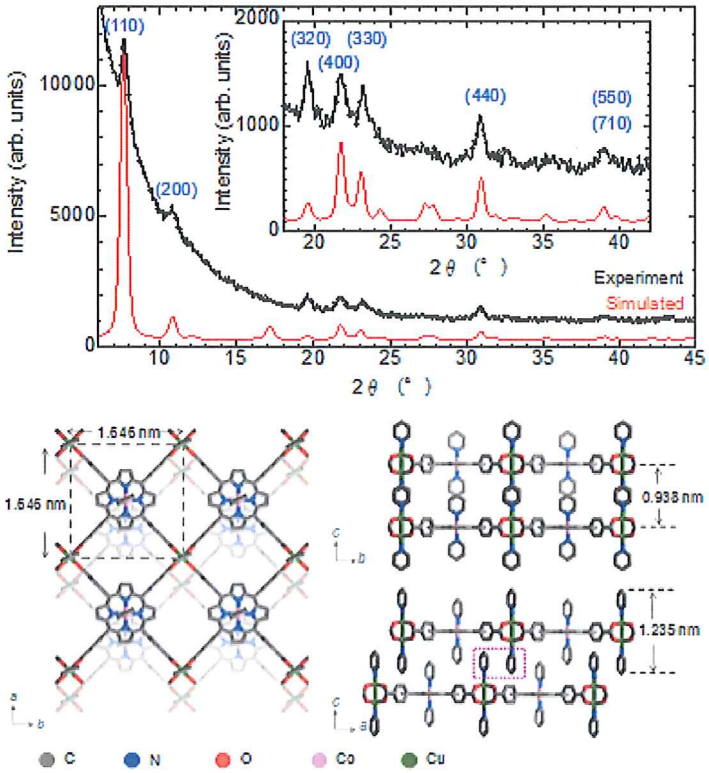


図Ⅲ2. 2. 1-2 ナノ薄膜の新規作製手法

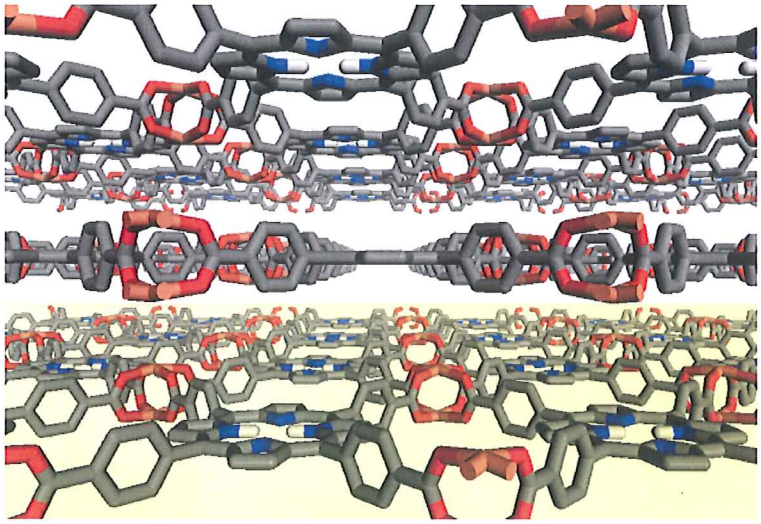


図Ⅲ2. 2. 1-3 吸収スペクトルによる薄膜成長過程の確

SPring-8 における放射光 XRD 手法を用いてその構造の詳細を調べた。PCP ナノ薄膜の XRD 回折パターンにおいて out-of-plane、in-plane 配置共にピークが観測されたことから、薄膜面内、面外共に結晶性であることがわかった(図Ⅲ2.2.1-4)。また、out-of-plane と in-plane



図Ⅲ2. 2. 1-4 (a) PCP ナノ薄膜の in-plane XRD パターン (b) 構造モデル構築による薄膜結晶構造解析



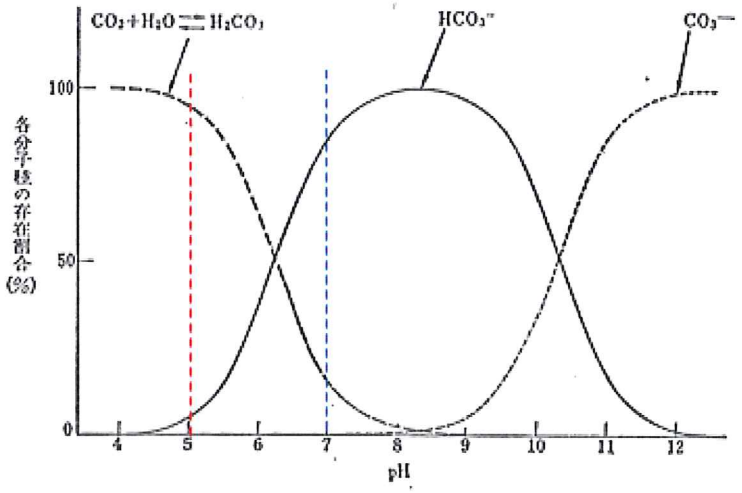
図Ⅲ2. 2. 1-5 結晶配向性 PCP ナノ薄膜の構築とその構造制御

のピーク位置が完全に異なることから、結晶成長方向が完全に制御されていることが明らかとなった。さらに PCP ナノ薄膜の結晶構造を調べるために、バルクで報告されている類似結晶を基に構造モデルを構築し（図Ⅲ2.2.1-4)、その in-plane XRD パターンのシュミレーションを行った。その結果、測定により得られたパターンを良く再現し、構造の詳細を解明することに成功した。さらに、置換基を変えることにより、結晶配向性 PCP ナノ薄膜の構築とその構造制御に成功した(図Ⅲ2.2.1-5)。基板上に構築した PCP に触媒を固定化する方法を検討する予定である。

(4)-2　PCP 複合体として用いる PCP の選定

二酸化炭素は、一旦生成すると反応性が低く安定なガスであるため固定化に必要なエネルギーが大きい。そのため、電気化学的に二酸化炭素を還元させる場合、有機溶媒中で-2.0 V より負側の電位を必要とする。その際、不対スピンは中心炭素に多く存在するため、炭素－炭素のカップリング反応でシュウ酸が生成する。一方、触媒を用いた場合、-2.0 V より正側での定電位電解により、CO_2 から含酸素化合物に変換することができる。そこで、PCP 複合触媒に用いる候補 PCP として、触媒が作動する電位で分解することなく、PCP の骨格を保持できる電気化学的安定性の高いものが要求される。そこで、種々の PCP を合成し、電気化学測定により候補となる PCP の選定を行った。電気化学測定前後での PCP の構造変化の有無を確認できたことから、該手法により電気化学的安定性を評価できることが明らかとなった。そこで、数種の PCP について評価を行い、候補となる電気化学的安定性の高い PCP を数種類抽出した。

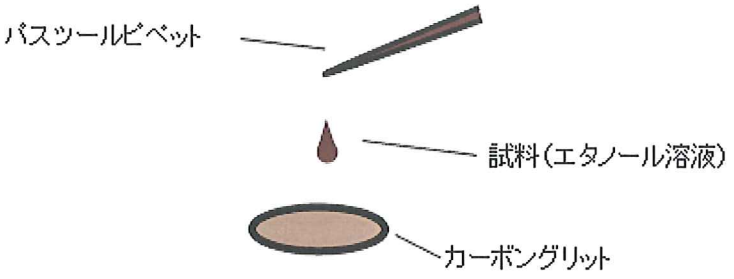
CO_2 還元による含酸素化合物の生成は溶液の CO_2 濃度に比例する。そこで、図Ⅲ2.2.1-6 に示すように pH が異なる溶液中での電気化学的安定性についても検討した。バッファー溶液を用いて水溶液の pH を調整した電解液を用いて、同様な測定手法を行い、抽出された PCP は酸性溶液中でも電気化学的安定性を保持していることを確認した。



図Ⅲ2. 2. 1-6 水中での CO_2 存在割合の pH 依存

(4)-3　PCP 複合体の触媒分散状態

PCP と触媒の複合体の分散状態について調べるため透過型電子顕微鏡観察を行った。構造解析には透過型電子顕微鏡(TEM)観察および高角散乱環状暗視野走査透過型電子顕微鏡(HAADF STEM-EDX)を用いたエネルギー分散型 X 線分光測定を行った。TEM 観察用試料は、カーボン支持膜の上に PCP 複合体の分散液をパスツールピペットで数滴落とし、乾燥させ調製した(図Ⅲ2.2.1-7)。



図Ⅲ2.2.1-7 カーボングリットへの試料の担持方法

エネルギー分散型X線分光測定結果からPCPの構成元素と触媒の構成元素の両元素は局所的にそれぞれ独立して集まって存在しているのではなく、全体にわたって両元素が均一に分布していることがわかった。これらの結果により、得られた複合触媒は PCP に触媒が均一に分散していることが明らかとなった。この PCP 複合体の触媒評価を行ったところ開発目標値を凌ぐ CO_2 変換効率を達成した。

(5)　まとめ

以下の成果を達成し、計画通りに研究開発を進捗することに成功した。

- 電気化学的安定性の高い PCP の抽出
- 開発目標値(電流効率 60%以上)を凌ぐ CO_2 変換効率を達成
- PCP を基板上に構築する方法論の確立

(6)　最終目標達成の見通し

中間目標はほぼ達成しており、電流効率については最終目標達成の見通しが得られている。今後、触媒担持法を検討し、PCP 複合触媒の好適化を行うことで最終目標の達成は可能である。

Ⅲ2.2.2 CO_2還元反応触媒基盤技術開発の成果

工業化社会の到来は化石燃料・天然資源の加速度的な消費の増大をもたらし、その結果として必然的に地球規模での資源の枯渇、大気温度の上昇、環境破壊を引き起こしている。人類がこれまで経験したことのない、これらの難問の解決は現代人に課せられた最重要課題となっている。再生過程がなく天然資源の消費のみで成立している現代工業社会を再生可能な社会に変えるには、唯一の持続性エネルギー源であるが、貯蔵不可能な自然エネルギーから得られる電気エネルギーを固定・貯蔵し、必要に応じてエネルギーを供給できるシステムの構築が必要不可欠である。現在、電気エネルギーの貯蔵は無機イオンの酸化還元反応（蓄電池）と水素生成が最有力とされているが、エネルギー密度（重量当たり）と長距離輸送（海洋を越えて）を含めて考慮すると軽量・安定な有機化合物の化学（結合）エネルギーとして貯蔵する方が圧倒的に有利である。電気・光化学的二酸化炭素還元による有機物の再生・新規燃料形成は理想的な化学エネルギーの固定方法であり、再生可能な社会形成にとって極めて大きな役割を果たすことが期待されている。一方、電気エネルギーを化学エネルギーとして固定・貯蔵することの難しさは還元に必要な分子間での電子移動が1電子過程で起こるのに対して、物質変換に伴う結合生成や結合開裂には少なくとも2電子が必要なことに起因する。たとえば、無機あるいは有機小分子への1電子移動は大きな活性化エネルギーを必要とし、しかも反応性の大きな不対スピンを有するラジカル性の分子が生成し、その結果、望まない副反応が起こり易く反応の制御が困難となる。具体的には、二酸化炭素の1電子還元反応には非常に大きな負の電位が必要であるのに対して、プロトン移動と共役した二酸化炭素還元反応では電子数が2,4,6に増えるにつれて、その生成（平衡）電位は大きく正側にシフトし、エネルギー消費は著しく減少する（表Ⅲ2.2.2-1)。熱力学的に不利な二酸化炭素還元反応を実用レベルで行うにはエネルギー消費の極小化は最重要課題である。最も優れた省エネルギーの二酸化炭素還元反応とは、pH 7付近の水中でその平衡電位近傍で二酸化炭素還元反応を可能にする触媒反応であり、同系の構築である。

表Ⅲ2.2.2-1　pH 7.0でのCO_2還元反応の熱力学的平衡電位（E^0 V vs. Ag/AgCl）

CO_2	+	e^-			→	$CO_2^{\cdot-}$			-2,1 V
CO_2	+	$2e^-$	+	$2H^+$	→	HCOOH			-0.81
CO_2	+	$2e^-$	+	$2H^+$	→	CO	+	H_2O	-0.72
CO_2	+	$4e^-$	+	$4H^+$	→	H_2CO	+	H_2O	-0.68
		$2e^-$	+	$2H^+$	→	H_2			-0.62
CO_2	+	$6e^-$	+	$6H^+$	→	CH_3OH	+	H_2O	-0.58
CO_2	+	$8e^-$	+	$8H^+$	→	CH_4	+	$2H_2O$	-0.44

水中での二酸化炭素還元の難しさは、(i) 有機溶媒に比べて水への二酸化炭素の溶解度が低いこと、(ii) 熱力学的には水の２電子還元（水素発生）が二酸化炭素の２電子還元反応よりも起こり易いこと、(iii) 水中でルイス酸である二酸化炭素を選択的に還元する方法論の欠如が挙げられる。これまで、これらの条件を満たす反応系が知られていなかったことから、単純に溶液中の二酸化炭素濃度上昇とプロトン濃度減少を意図して、高価な有機溶媒に少量の水を添加して二酸化炭素還元反応は行われていた。換言すれば pH 7.0 の水中、活性化エネルギーが極端に少ない熱力学的平衡電位近傍で二酸化炭素を高効率で還元しうる触媒がなかったことが、電気エネルギーの貯蔵と新規炭素資源開発として二酸化炭素還元反応が考慮されなかったと考えられる。

本プロジェクトでは中性の水中、熱力学的平衡電位近傍での二酸化炭素還元の実現を目指して検討を行っている。

以上

Ⅲ2.2.3 液相法によるPCP複合触媒の開発

(1) 事業の目的

本研究開発は濃縮CO_2を高効率に化学品に変換するための触媒開発を要素技術として検討し、様々な触媒開発に結び付けていくことを目的とする。

CO_2を炭素資源として有効活用することは、CO_2の削減だけでなく、資源制約からの脱却にも繋がる。CO_2の有効活用としては、CO_2と水素の触媒反応や超臨界CO_2の利用等による化学品への変換技術が検討されているが、現行のエネルギーシステムを大きく変更することなく、炭素資源として高効率に再生できる例は少ない。数少ない例の一つとして、CO_2の還元反応によるシュウ酸合成が挙げられる。この反応で用いられる触媒は、室温で電気化学的にCO_2を還元することができる画期的な触媒である。また、夜間の膨大な余剰電力や自然エネルギーのような不安定な電力をエネルギー源として使用することが可能であるため、現行のエネルギーシステムを大きく変えることなくエネルギーを確保できる。

しかしながら、室温ではシュウ酸生成速度が遅いため、高いCO_2貯蔵能を有するPCP近傍に触媒を配置させることで、CO_2を高効率に変換できるPCP複合触媒を開発する。得られたPCP複合触媒を用いたCO_2高効率変換システムの実用化を目指す。

さらに東洋紡績㈱はVOC分解触媒を担持させたVOC燃焼処理装置・システムや触媒脱臭フィルターを事業化している。PCPと複合化させることで、触媒量低減による低コスト化、低温度領域での触媒活性向上による省エネ化、触媒固定化による高耐久化とリサイクル性付与を期待しており、VOC分解触媒用途への水平展開を検討し、実用化を目指す。

(2) 事業の目標

本研究開発の目標は次の2段階であり、3年後の中間目標と5年後の最終目標は以下の通りである。

平成23年度中間目標：

①CO_2からの選択率（電流効率）60%以上で合成できるPCP複合触媒を2種類程度調製する。

②スケールアップ検討を行い、PCP複合触媒によるプロセスに関する試設計プロセスとしての要件を明らかにする。

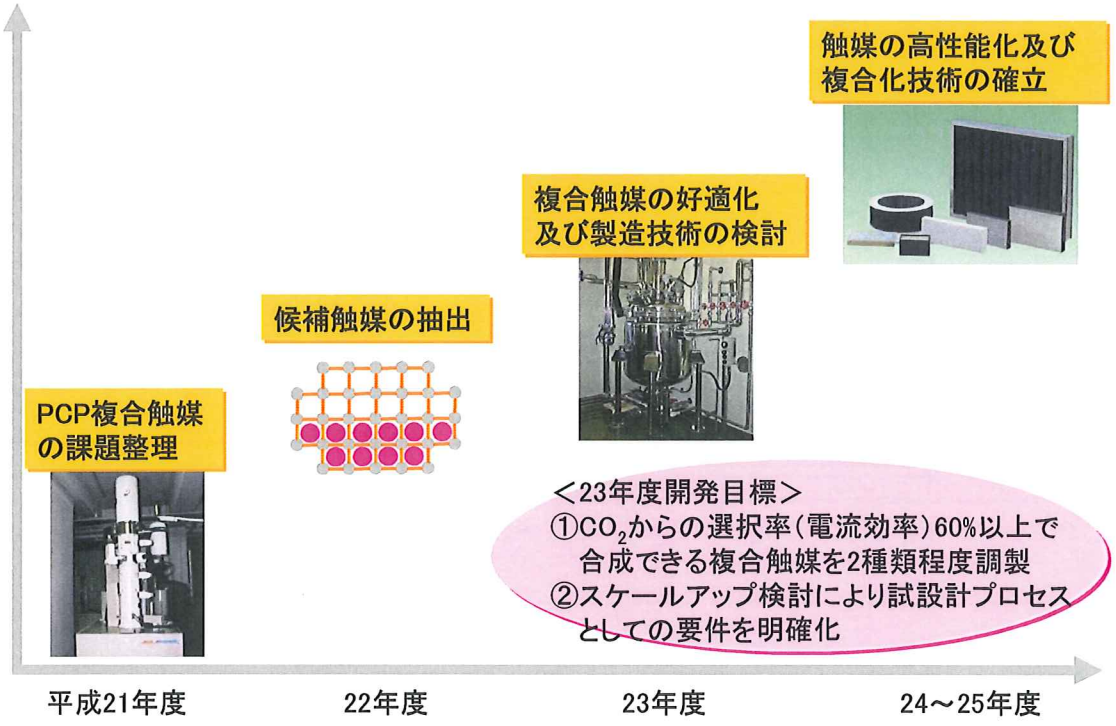
平成25年度最終目標：

①CO_2からの選択率（電流効率）80%以上で合成できるPCP複合触媒を調製する。

②スケールアップの可能性を検討する。

(3) 開発スケジュール

図Ⅲ2.2.3-1に5年間の開発スケジュールを示す。平成21年度から23年度は、触媒と複合化するPCP骨格の探索と並行して触媒との複合化、触媒活性評価を検討することでPCP複合触媒の好適化を進める。平成24年度以降、反応メカニズムの解析を行いながら、実用化検討としてスケールアップの可能性を検討する予定である。



図Ⅲ2.2.3-1　開発スケジュール

（4）研究開発内容と成果

1）基本骨格探索

複合化するPCPの分子設計概念として、電気化学的安定性（触媒が作用する電位に対する構造安定性）、CO_2吸着性能（基質であるCO_2を室温で捕捉するため）を挙げた。PCPの分子設計概念の中でも必須の性質である電気化学的安定性に主眼を置き、PCPを数十種類選出した。PCPの性能評価は京都大学と分担して行い、電気化学的安定性評価は京都大学が、CO_2吸着性能については東洋紡績が実施した（電気化学的安定性評価および結果については、Ⅲ2.2.1を参照）。

電気化学的に安定であることが明らかとなったPCP数種について25℃でCO_2吸着性能評価を行ったところ、いずれのPCPも室温でCO_2吸着性能を有することが明らかとなった。

2）PCPと触媒との複合化および性能評価

上記により選定した数種のPCPを用い、触媒との複合化を検討した。複合化がもたらす効果を早急に確認するため、まずは比較的簡便に調製できる手法として、溶液中での混合による複合化を検討した。

a）PCPと触媒の複合化と構造解析

PCPと触媒を溶液中で複合化した。触媒がPCP細孔内または表面のいずれに存在するか確認するため、IRやXRD測定により構造解析を試みた。結果、XRDで触媒のパターンがほとんど観測されないことから、高分散状態にあると推察される。また、IRでのピークシフトはPCPと触媒の相互作用に由来すると推察されることから、複合化できていると考えている。しかしながら、触媒の存在状態は明確でないため、詳細な構造解析を透過型電子顕微鏡(TEM)観察や高角散乱環状暗視野走査透過型電子顕微鏡-エネルギー分散型 X 線分析(HAADF STEM-EDX)により試みた（Ⅲ2.2.1参照)。

b）PCPと触媒の複合体の触媒性能評価

a）で調製した触媒を用いて、電解反応を行った。生成物をキャピラリー電気泳動装置にて分析した結果、PCP非存在下での収率との優位差は見られず、複合による収率への効果は少なかった。また電解反応液中に触媒が溶出するという課題を抽出した。これに対して、複合化法や反応条件の検討、またPCP共存の意味を見出すため、以降の検討を進めた。

c）電解反応条件の検討

PCPと触媒を溶液中で混合し、PCP複合触媒を調製した。反応溶媒を変更し、同様の電解反応を実施した。その結果、PCPと触媒の複合体では、中間目標を凌ぐ電流効率を達成した。

d）電解反応後のPCP構造確認

電解反応後にPCP構造を保持しているか確認するため、XRD、IR測定および走査型透過電子顕微鏡-エネルギー分散型 X 線分析装置(STEM-EDX)を用い元素マッピングを実施した。

上記測定の解析結果から、電解前後でも分散状態は変わらず、均一に存在していることが明らかとなった。

以上の検討により、CO_2からの選択率（電流効率）60%以上で合成できるPCP複合触媒を1種見出すことができた。

3）スケールアップ検討による試設計プロセスの要件の抽出

PCPと触媒の複合化により大幅な性能向上が確認されたが、スケールアップを考えると、下記の2つの課題が挙げられる。

①触媒を電極に固定化すること

②電流効率（収率）を上げること

(5) まとめと成果の意義

(5)-1 まとめ

以下の成果を達成し、計画通りに研究開発を進捗することができた（表Ⅲ2.2.3-1)。

- 電気化学的に安定なPCPを数種見出すことができた。
- PCP複合触媒を用い、CO_2からの選択率（電流効率）は、中間目標値である60%以上を達成した。
- 電解反応後のPCP複合触媒の構造保持が示唆された。
- スケールアップ検討による試設計プロセスの要件を2点抽出した。

表Ⅲ2.2.3-1 成果のまとめと今後の課題

開発項目	目標	成果	達成度	今後の課題
液相法によるPCP複合触媒の開発	CO_2からの選択率(電流効率)60%以上で合成できるPCP複合触媒を2種類程度調製する	目標性能を満たすPCP複合触媒を1種見出した	○	選択率80%以上で合成できるPCP複合触媒を開発する
	スケールアップ検討を行い、PCP複合触媒によるプロセスに関する試設計プロセスとしての要件を明らかにする	要件を2点見出した	○	スケールアップの可能性を検討する

◎大幅達成、○達成、△達成見込み、×未達

(5)-2 成果の意義

得られた成果の意義は以下である。

PCP複合触媒を用いることで、中間目標を達成。この成果は世界最高レベル。加えて、本技術は、他の触媒反応へも展開が可能である。

(6) 最終目標達成の見通し

中間目標はほぼ達成しており、電流効率については最終目標達成の見通しが得られている（表Ⅲ2.2.3-2)。今後、複合化処方の検討やスケールアップ検討を進めていくことで、最終目標の達成は可能である。

表Ⅲ2.2.3-2 最終目標と達成見通し

研究課題	最終目標(平成25年度末)	達成見通し
CO_2選択率	CO_2からの選択率(電流効率)80%以上で合成できるPCP複合触媒を調製する	PCPの効果を検証し、評価条件を最適化することで達成可能
スケールアップ	スケールアップの可能性を検討する	要件2点を検討することで達成可能

Ⅲ2.2.4 気相法によるPCP複合触媒開発

(1) 本研究開発の目的

昭栄化学工業は電子部品用素材の開発・製造・販売を行っている。これまでに独創的な技術を用いて電子材料の新しい分野に挑戦し、多くの新規材料を開発して市場の要求に答えてきた。本プロジェクトでは、昭栄化学工業が有する素材技術を応用して、PCP と触媒とを複合化したPCP複合触媒の設計/開発/製造技術を構築することを目的としている。触媒反応のターゲットして CO_2 の高効率変換という目標を掲げ、このチャレンジングであるが社会的なインパクトの大きい課題を解決することで、PCP 複合触媒の優位性を実証し、PCP複合機能素材の実用化を加速したいと考えている。

本研究においては、PCP 複合触媒の製造方法として気相法を提案する。昭栄化学工業が有する気相法による粒子製造技術とその量産化で得られた経験やノウハウを生かして研究に取り組み、高機能なPCP複合触媒およびその合成技術の実用化を目指す。気相法は、新規で効率的な製造方法として、PCP複合触媒合成の画期的な方法になると考える。

本研究開発の目標を以下に示す。

平成23年度中間目標

① 気相法によるPCPの合成の実証

② CO_2からの選択率60%以上で、含酸素化合物（シュウ酸など）を効率的に生成できるPCP複合触媒の調製 (2種)

③ 次年度以降のスケールアップ検討の試設計プロセスの要件の解明

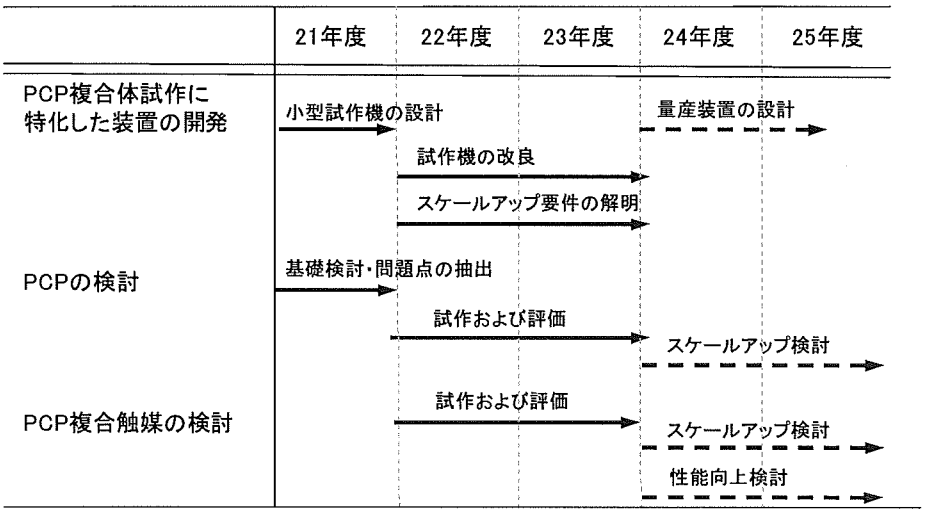
平成25年度最終目標

① 触媒の反応速度向上および目的物をCO_2からの電流効率（選択率）80%以上で含酸素化合物（シュウ酸など）を効率的に生成できるPCP複合電極触媒の開発

② 電極触媒としてのスケールアップの可能性の検証

上記目標に対する開発スケジュールを表Ⅲ2.2.4-1に示す。

表Ⅲ2.2.4-1 研究開発スケジュール



(2) 中間目標の達成度

中間目標の達成度を表Ⅲ2.2.4-2 にまとめる。

表Ⅲ2.2.4-2 中間目標の達成度表

研究開発項目	目標	成果	達成度	今後の課題・対応
気相法による PCP 複合触媒の開発	①気相法による PCP 合成の実証	気相法により PCP を合成するための基礎的な条件を見出した	◎	加速費で導入した新しい試作設備を活用して、試作/評価サイクルのスピードアップを図る
	② CO_2 からの選択率 60%以上で、含酸素化合物(シュウ酸など)を効率的に生成できる PCP 複合触媒の調製(2 種)	気相法により PCP 複合触媒粒子が合成できた(現在触媒能を評価中)	△ 23 年度末達成見込	
	③ 次年度以降のスケールアップ検討の試設計プロセスの要件の解明	PCP 合成に関するスケールアップに対しては見通しがたった	○	得られたサンプルの電極触媒能評価を行い、特性面での問題点を抽出する

◎大幅達成、○達成、△一部未達成(平成 23 年 5 月末)、×未達

中間目標①については、気相法を用いて PCP を試作する基礎的な条件を見出し、十分目標達成ができた。

中間目標②については、すでに「液相法による PCP 複合触媒の開発」検討において目標を達成しており、PCP と触媒の複合化の効果は検証されている。「気相法による PCP 複合触媒の開発」検討においては、PCP 複合触媒の性能評価には至っていない。しかし、合成条件の調整によって、触媒成分との複合化が可能であることを見出した。このことから、23 年度末までには中間目標②が達成可能と判断している。

スケールアップ検討については、量産化を視野に入れた試作設備を分担研に導入し、その検討結果からスケールアップの可能性が確認されたので、PCP 複合触媒粒子を合成するプロセスについては、目標③が達成できたと判断する。今後は、試作した PCP 複合触媒サンプルの電極触媒としての特性評価を進めながら、電極触媒としての使用形態や使用条件に対する調査を行う。

(3) 研究開発成果

(3)-1 小型反応試作機の設計開発

気相法による PCP の合成は世界初の試みであるため、はじめに PCP 合成および触媒複

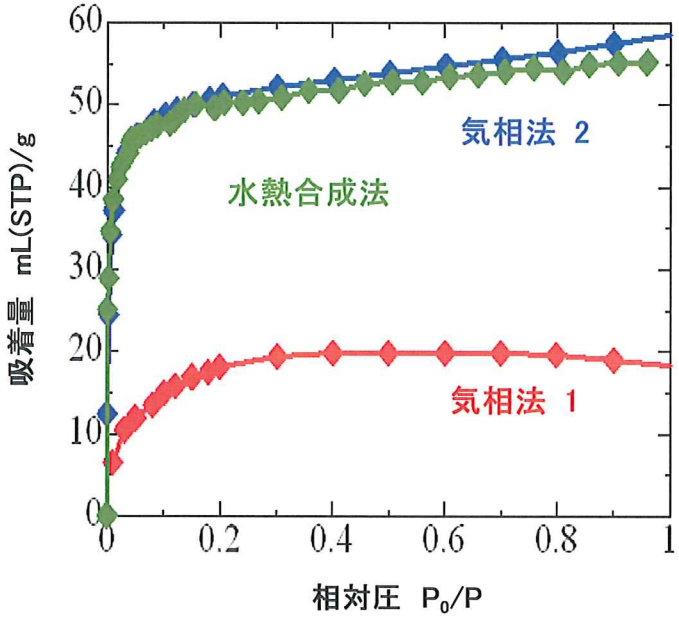
合化に特化した反応装置を設計・開発して集中研に導入した。試作機の設計では、条件設定の自由度の高さ、実験の高効率化、反応の可視化、有機溶媒への対応、安全性などに留意し、実験とともに改良を継続しながら PCP の試作に取り組んだ。

(3)-2 気相法による PCP の生成可能性の検証

気相法による PCP 生成の可能性を検証するにあたり、既存の PCP の耐熱性や耐溶媒性、CO_2 の吸着性等の物性を調査して、PCP SC-1 と PCP SC-2 の 2 種の PCP を主な検討対象として選定した。

(3)-2-1 PCP SC-1 の合成試験

気相法で得られたサンプルは従来の水熱合成法サンプルと同じX線回折パターンを示した。図Ⅲ2.2.4-1 に、試作した PCP SC-1 の 195K での CO_2 吸着測定の結果を示す（サンプル名：**気相法 1、気相法 2**）。



図Ⅲ2.2.4-1 気相法により得られた PCP SC-1 の 195K での CO_2 吸着測定結果

気相法 1 のサンプルの 195K での CO_2 吸着量は、水熱合成法サンプルの半分以下であった。検討の結果、条件を最適化したサンプル（**気相法 2**）は、X 線回折パターンは水熱合成法サンプルと同じ回折パターンになったが、詳しく見ると**気相法 1** とはピーク強度等が異なっていた。そして、CO_2 吸着量は水熱合成法サンプルと同等の吸着量を示し、性能の向上が見られた。

(3)-2-2 PCP SC-2の合成試験

PCP SC-2の初期の検討では、X線的にアモルファスな生成物しか得られなかった。しかし、反応条件を最適化することで、PCP SC-1と同様に、水熱合成法サンプルと同じX線回折パターンを有する生成物が得られた。さらには、195KでのCO_2の吸着量も水熱合成法サンプルと同等のものが得られた。

(3)-3 気相法によるPCP生成プロセスと合成条件

以上に例示したPCPの合成試験の結果から、気相法によるPCP生成のメカニズムを推定し、各種合成条件を適正化することで、非常に短時間の反応時間においてもPCPが合成できることが分かった。そこで、この成果に基づいた試作設備を、平成22年度加速費で改めて分担研に導入した。新しい試作設備を用いて合成したサンプルのX線回折測定結果は、水熱合成法で合成したサンプルと同じX線回折パターンを示した。また、CO_2の吸着測定結果も同等であった。新たな試作機を用いることで、小型反応試作機を使用した時より収量が約100倍になり、格段に試作効率が向上し、今後のPCP複合触媒の試作・評価サイクルの大幅なスピードアップが望める。また、新しい試作機を使用した試験の結果から、気相法によるPCP複合触媒粒子合成のスケールアップについてはほぼ見通しが立った。

(3)-4 PCP複合触媒の合成

気相法によるPCP合成が実証されたことから、現在はPCP複合触媒の合成試験を進めている。PCPに対して、複合化する触媒の配合量は10wt%とした。生成した粉末のX線回折パターンは、PCPと同様のパターンを示した。FT-IR測定結果においては、PCPに相当する吸収が観察された。しかし、STEM/EDXによる元素分析の結果では、PCPの構成元素と触媒の構成元素が、粒子全体に均一に存在していることが確認された。

以上の結果は、小型反応試作機における結果であり、サンプル量が微量なために触媒性能の評価までは至っていない。現在、新しい試験設備を使用したPCP複合触媒サンプルの合成を進めており、早急に触媒性能の評価を実施する予定である。そして、液相法で合成されたPCP複合触媒サンプルとの特性比較も含め、PCP複合触媒粒子の微細構造と触媒性能との関係を明確にすることで、CO_2還元触媒としての性能向上を目指す。以上の取り組みにより、中間目標である「CO_2からの選択率60%以上で、含酸素化合物（シュウ酸など）を効率的に生成できるPCP複合触媒2種類の調製」の達成は可能であると判断する。

(4) 成果の普及

現在までに、論文発表等の情報発信は行っていない。合成法に関する技術については、将来的な事業化における昭栄化学工業の独自性を確保するために、情報発信には慎重にならざるを得ない。PCP複合触媒の組成や微細構造と触媒性能について得られた知見につい

ては、知財的な対応を整えた上で論文発表等の情報発信を行いたいと考えている。

(5) 成果の最終目標の可能性

表Ⅲ2.2.4-3に、最終目標達成に向けた課題と達成見通しをまとめる。

本プロジェクトの最終目標は、CO_2からの選択率（電流効率）の向上とスケールアップの可能性を明らかにすることである。提案書ではCO_2からの選択率の最終目標を80%以上としている。「液相法によるPCP複合触媒の開発」検討においてすでに60%を超える成果を得ており、PCP複合触媒の組成や微細構造制御の解析とその最適化検討によって選択率の向上を目指す。さらに、電極触媒としての検討は始めたばかりであり、今後の電極構造の最適化と電荷移動速度向上のための検討を継続することで高効率な電極触媒が実現できると考える。気相法によるPCP複合触媒合成のスケールアップについては、量産化を踏まえた新たな試作機を導入しPCPの合成条件もほぼ確定されたことから、ほぼ目標は達成できたと判断する。電極触媒としてのスケールアップで最も問題となるのは触媒寿命の向上と考えており、寿命を決定する因子の早急な解明が求められる。

表Ⅲ2.2.4-3 成果の最終目標の可能性

課題	最終目標（平成25年度末）	達成見通し
気相法によるPCP複合触媒の開発	触媒の反応速度向上および目的物をCO_2からの電流効率（選択率）80%以上で含酸素化合物（シュウ酸など）を効率的に生成できるPCP複合電極触媒技術の開発	液相法によるPCP複合触媒開発検討において、すでに電流効率60%を超える成果を得ており、以下の取り組みよって目標を達成できると判断する ① 液相/気相両法におけるPCP複合触媒の組成や微細構造の解析と最適化検討 ② 電極触媒としての電極構造の最適化と電荷移動速度向上のための検討
	電極触媒としてのスケールアップの可能性の検証	・気相法によるPCP複合触媒粒子のスケールアップについては、新たな試作機を導入し、合成条件がほぼ確定されたことで、目標は達成できたと判断する ・電極触媒としてのスケールアップについては、以下の点について検討を重ねることで達成可能と判断する。 ① 電極触媒としての寿命を決定する因子の解明 ② 電荷移動速度を向上させる手段の検討

以上

Ⅲ2.3 プロジェクト共通基盤技術開発の成果

Ⅲ2.3.1 理論化学・計算化学によるＰＣＰ設計アプローチ

(1) ＰＣＰ研究における理論化学・計算化学の役割

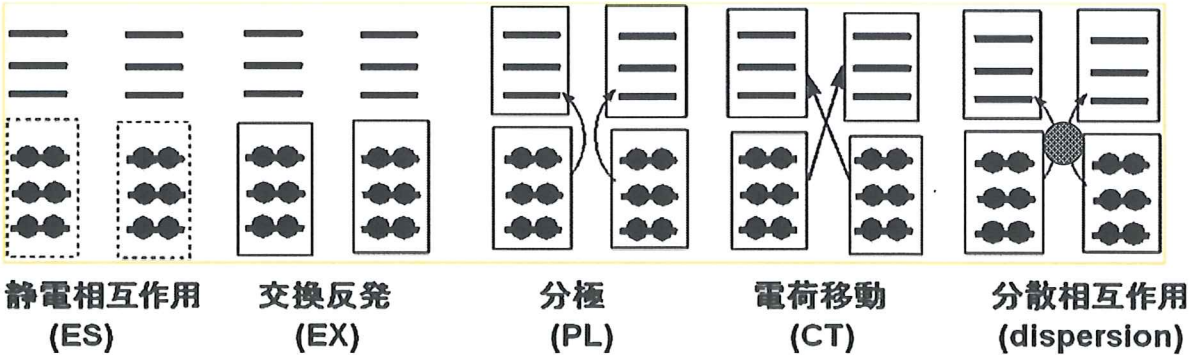
ＰＣＰは金属と有機配位子の組み合わせによる新規物質であるが、その組み合わせは無数にあり、何らかの分子設計の指針が求められていることは周知の事実である。本プロジェクトではＰＣＰによる各種気体分子の分離吸収・吸着が研究開発の中心課題となっている。このような研究開発を効率的に行うためには、ＰＣＰと気体分子の間の相互作用がどのようなものであり、どのような場合にそれが大きくなり、あるいは小さくなるのか、を知ることが必要である。しかし、ＰＣＰと気体分子の相互作用は物理吸着による場合が多く、吸収・吸着メカニズムおよびその強さを知ることは容易ではない。

一方、理論化学・計算化学は最近、著しく発展しており、大きな系の計算や精密な計算が可能となっている。このような現状を考えると、ＰＣＰと気体分子との相互作用に関して、理論化学・計算化学研究が何らかの知見を与えることが出来、PCP への気体分子の吸収・吸着現象について本質的理解、また PCP の分子設計にも貢献することが可能と考えられる。実際、理論計算・計算化学によるアプローチよりＰＣＰと気体分子相互作用の見積もりとその理解が可能か、に関する問い合わせがいくつかの企業から寄せられている。

本節では、そのような企業の問いかけに答えることを目的とし、PCP と気体分子の相互作用に関して理論化学・計算化学研究を行った。主な検討内容は適切な計算方法の選定、相互作用の強さの評価、その支配因子の解明、さらに、PCP の分子設計に資する方針の提案である。

(2) ＰＣＰと気体分子の相互作用計算に適した理論的方法の選定

ＰＣＰと気体分子の相互作用には静電相互作用、交換反発相互作用、電荷移動相互

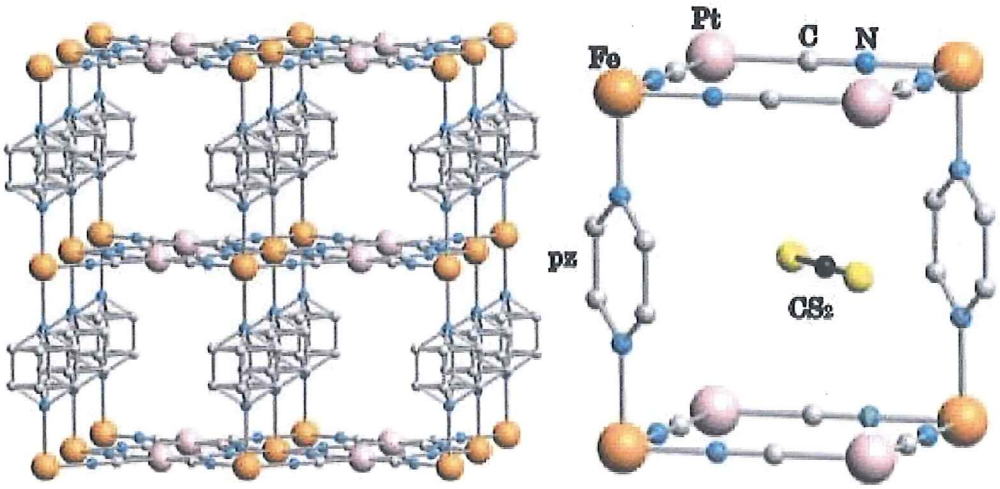


スキーム１． PCP と気体分子間の相互作用

：電子相関を示す（分極相互作用は分散相互作用に似ているように見えるが、電子相関は考慮していない）

作用、分極相互作用、分散相互作用（dispersion相互作用、誘起分極相互作用とも言う）などが含まれていると考えられる（スキーム 1）。静電相互作用はスキーム１に示すように、二つの分子間のクーロン的相互作用である。交換反発相互作用は２つの分子の被占軌道間のパウリ反発に対応する不安定化相互作用である。電荷移動相互作用は一方の分子の被占軌道から他方の分子の空軌道への電荷移動、および、その逆の電荷移動による安定化相互作用であり、分極相互作用は一つの分子にもう一つの分子が接近することによる被占軌道と空軌道の混合による安定化相互作用である。これらは、通常広く使用されている密度汎関数理論（DFT）やHartree-Fock法で計算可能であると考えられている。しかし、分散相互作用は、一つの分子にもう一つの分子が接近して来た場合の全系の波動関数には、各分子内で１電子励起配置が同時に一つずつ考慮された時に計算される。これは安定化に効いてくるが、この相互作用は単参照電子配置を用いる Hartree-Fock 法や DFT 法では考慮できず、多数の電子配置を考慮するPost-Hartree-Fock法でのみ考慮可能である。従って、PCPと気体分子との相互作用において、Post-Hartree-Fock法を用いて、上述した各種相互作用のいずれが寄与しているかを明らかにしなくてはならない。

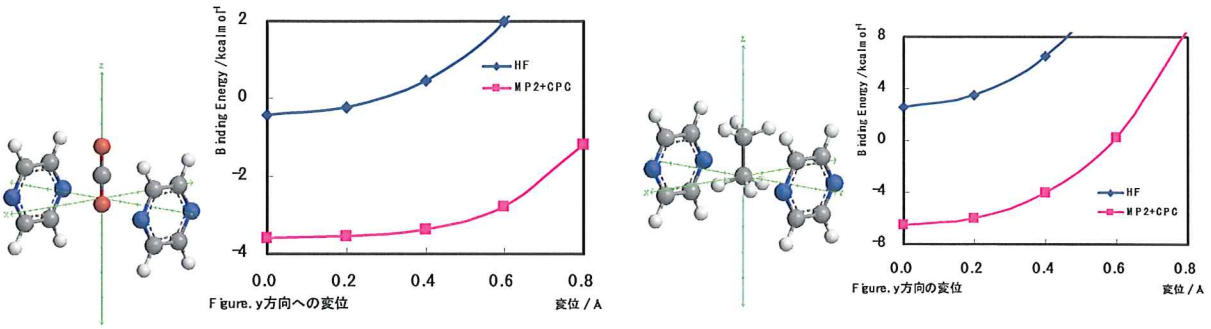
第１段階として、分散相互作用が重要か、否か、を検討する必要がある。検討する系としては気体分子の位置が実験的に報告されている Hoffmann 型 PCP、$[Fe(pyrazine)Pt(CN)_4]_n$を採用し、CO_2、及びエチレン、エタン分子の吸収・吸着を各種方法で検討した。このPCPではCS_2はピラジン２分子にサンドイッチされているように吸着していることが実験的に分かっている（図Ⅲ2.3.1-1）。Hoffmann型PCP全系を



図Ⅲ2.3.1-1 Hoffmann型PCP、$[Fe(pyrazine)Pt(CN)_4]_n$、に吸収・吸着されたCS_2分子

計算に含めることは困難なので、気体分子が接近しているピラジン(pz)配位子２分子の間にCS_2同様CO_2, エチレン、エタンが吸着すると考え、様々な位置で相互作用を計算した。横軸は気体分子をピラジンの中心上からピラジン方向へ移動させた場合の距離であり、縦軸は結合エネルギー(以下、BEと略す)である：BEは気体分子がPCPに相互作用することによるエネルギー変化であり、負の値が安定化を示す。全ての数値的

結果は紙面の都合上、示さないが、図Ⅲ2.3.1-2に示すように、Hartree-Fock計算ではBEが非常に小さいが、Moller-Plessetの２次摂動法（以下、MP2法と略す）ではBEはある程度大きい。このMP2法は上で述べた電子励起状態を波動関数に含めることにより分散相互作用を表わすことが可能である。従って、この結果は、PCPと気体分子間の相互作用には分散相互作用を考慮しなくてはならないことを示している。このため、コストの低いDFT法やHartree-Fock法は適用出来ず、計算コストの高いPost Hartree-Fock法の適用を考える必要がある。



(A) CO_2とピラジン２分子の相互作用　　(B)エタンとピラジン２分子の相互作用

図Ⅲ2.3.1-2　ピラジン２分子にCO_2、エタンが接近した場合の安定化エネルギー
黒線：Hartree-Fock計算　赤線：MP2計算

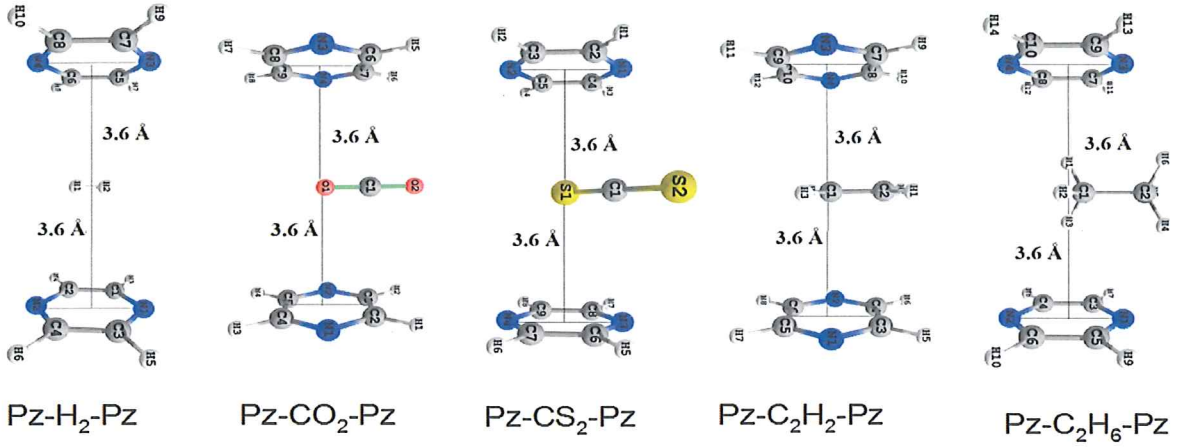
そこで、分散相互作用を評価できるMP2法、MP2.5法、CCSD(T)法に各種既定関数を組み合わせてBEを求め、どの方法と基底関数が正しくBEを与えるかを検討した。ここでは、最近注目されているH_2、CO_2と共に、CO_2類似の電子状態を持つがより分散相互作用の大きいと考えられるCS_2を計算対象として採用した。各種計算方法を検討する必要があることから、ピラジンは１分子とし、それにこれらの気体分子が接近する場合のBEを求めた。これらの計算でも基底関数重ね合わせ誤差(Basis set superposition error)はcounter-poise法で補正している。MP2、MP2.5、およびCCSD(T)法を検討したが、これらはいずれも、励起電子配置を考慮するpost-Hartree-Fock法であり、分散相互作用を含めてBEを計算することが可能である。これらの中で、最も精度が高いのはCCSD(T)法であり、現時点では多参照性が無い系に対してはGold Standardと考えられている。ただ、計算コストが高いことから、大きな基底関数系を使用することは出来ない。従って、比較的小さい基底関数を用いたCCSD(T)計算を行い、基底関数効果はMP2法もしくはMP2.5法で考慮する方法が適切である。同時に、そのような方法と比べて、最近報告されたMP2.5法も適切な方法と考えられる。

これらの方法を比べて、コストと系の大きさを考えて、適切な方法を決め、PCPと気体分子との系に適用して行くべきである。

(3)　ＰＣＰの有機配位子と各種気体分子の相互作用

Hoffmann型PCPでは、スキーム２示すように、ピラジン２分子間に気体分子がサンドイッチされるような形でPCP内に吸収・吸着されていると考えられる。これらの

気体分子とピラジン２分子との相互作用を求めた。計算コストの低いMP2法ではMP2.5法と傾向は一致しているものの、定量的な観点からは相当異なる BE が与えられており、MP2.5 を使用する必要のあることが、ここでも示されている。BE の大小は $H_2 < CO_2 < C_2H_6 \sim C_2H_4 < CS_2$ となっていた。

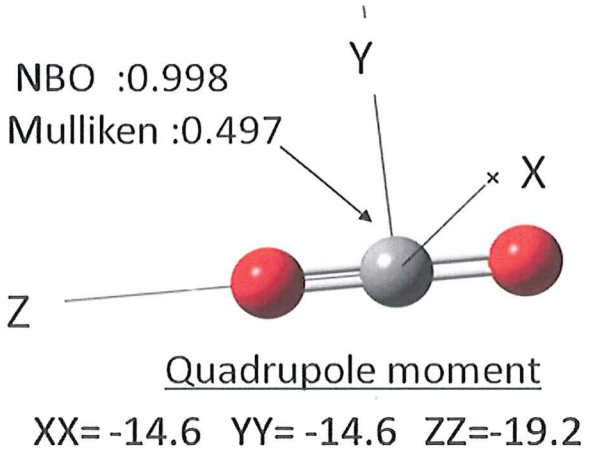


スキーム 2. ピラジン２分子にサンドイッチされた気体分子。Hoffmann 型 PCP に吸収・吸着された気体分子のモデル

次に、この BE の大小関係がどのような相互作用で決定されているか、を北浦 - 諸熊による相互作用エネルギー分割法で検討、それに分散相互作用による安定化エネルギーΔBE_{DIS} も加えて、考察すべきであろう。

(4) まとめ

これまで述べてきたように、理論化学・計算化学は PCP と気体分子の相互作用研究に有用な知見を与えてくれるものであり、今後の PCP の化学の進展に資することが可能と考える。



図Ⅲ2.3.1-4 二酸化炭素の電荷と四極子能率

Ⅲ2.3.2 多孔性金属錯体に関する技術動向

Ⅲ2.3.2.1. 多孔性金属錯体関連公開特許から見た本技術分野の動向

(1) はじめに

本プロジェクトでは、共通基盤的研究に関しては、主に京都大学 PCP 集中研究室（各参加企業から研究員を派遣）およびアカデミアが共同で行い、PCP の応用利用に関しては、主に参加企業の研究所において、それぞれの応用分野に関する検討を進めている。したがって、将来、事業につながるまたは／および障害になる特許情報の調査（以下、縦串的特許調査）は、参加企業が日々実施している。しかしながら、単一組織の場合と比べて、複合組織であるがための改良点があるのもまた事実であり、その課題を克服し、一層活発な議論ができる PCP プロジェクト集中研究室とするために、共通基盤としての特許調査（以下、横串的特許調査）を JCII が中心となりおこなった。

そこで、プロジェクト開始直後に、参加組織が共通的に必要である“多孔性金属錯体(PCP/MOF)そのものに関する特許（物資特許）”に関して、JCII が共通検索式を作成し、検索式やその検索結果をプロジェクトメンバーへ提供した。加えて、日々の公開特許に関しても、1 回／月程度検索し、その結果をメンバーに提供してきた。一方、各研究員からの未ヒット特許に関する情報を受け、一度／半年程度、検索式の修正を行うことにより“共通検索式”の改良を行ってきた。

(2) PCP/MOF 関連公開特許から見た本技術分野の調査の目的

(1)により、ある程度の横串的特許調査はその目的を果たしていると考えている。しかし、プロジェクト開始後、1 年が経過し、共通検索式も固まってきた段階で、過去 20 年間の本分野の特許調査をおこない、そこで得られた技術動向を、各組織のプロジェクトメンバーが把握しておくことは、中間評価（NEDO）や PCP の産業利用を目指したプロジェクト後半での開発の一層のレベルアップ・スピードアップに有益である。そこで、今回、「多孔性金属錯体(PCP/MOF)関連公開特許から見た本技術分野の動向調査」をおこなったので、その結果の一部（主に概論部分）を報告する。

多孔性配位高分子（**P**orous **C**oordination **P**olymers：PCP）または金属-有機構造骨格体（**M**etal-**O**rganic **F**rameworks：MOF）と呼ばれている多孔性金属錯体は、有機配位子を金属イオンに連結して作られる均一なナノ空間（細孔空間）を有する物質で、分離、貯蔵、触媒、輸送、刺激応答などの多様な機能を発揮することがわかってきている。特に、多孔性金属錯体（PCP/MOF）は、細孔空間の大きさや細孔壁の性質を制御することにより、新規な分離材料、ガス吸蔵材料、環境浄化材料、触媒などでの開発が期待されており、近年、アカデミアでの開発研究が大きく進展している。そこで、今後の産業分野での利用を視野に入れ、今回、特許から見た技術動向調査をおこなった。

本調査は、分離・貯蔵関係、反応（触媒）関係領域での多孔性金属錯体（PCP/MOF）の活用を中心に、特許から見た技術動向を調査・解析し、関連特許の出願動向、技術動向を把握することにより、今後の産業利活用開発の推進に資することを目的とした。なお、検

索および調査は、A 社と共同で行った。

(3) 「PCP/MOF 関連母集団特許群」の設定

JCII が中心となりプロジェクトで作成した検索式（検索式①）と検索結果、その中でプロジェクト側が抽出したい特許のリストを A 社に開示し、我々とは異なる着想による検索式（検索式②）の作成と異なる特許データベースを用いての特許検索を依頼した。なお、調査期間は、予備調査段階で、1996 年公開の関連特許を見つけていること、および、1995 年頃から関連論文が出ていることから、1990 年 1 月 1 日から 2010 年 9 月 30 日までとした。

＜JCII＞

- 特許データベース： Shareresearch：㈱日立製作所、http://www.hitachi.co.jp/Prod/comp/app/tokkyo/index.html)
- 調査対象特許： 日本公開、公表、および再公表特許
- 調査対象期間： 1990 年 1 月 1 日～2010 年 9 月 30 日
- 検索式の考え方： 関連 FI、F タームにキーワードや近接演算を利用して作成した検索式（検索式①）

＜A 社＞

- 特許データベース： Panapatlics：パナソニックソリューションテクノロジー㈱ http://panasonic.biz/it/sol/patlics/index.html)
- 検索式の考え方： キーワードを中心とした検索式（検索式②）

＜出願人・発明者指定検索＞

- ところで、上記検索式①および②は、いずれもキーワードや FI・F タームなどのテーマコードを使用した論理的な検索式である。そこで、さらに検索による抽出の網羅性を向上させるため、発表論文や大学との共同研究関係等から PCP/MOF に関して研究が実施されていると推定される主要な企業や発明者について、出願人や発明者指定による追加検索を実施した（検索式③)。

以上の検索式①～③を用いてそれぞれ検索を行い、それらの結果の合計から重複分を削除した特許群を「PCP/MOF 関連母集団特許群」として設定した。

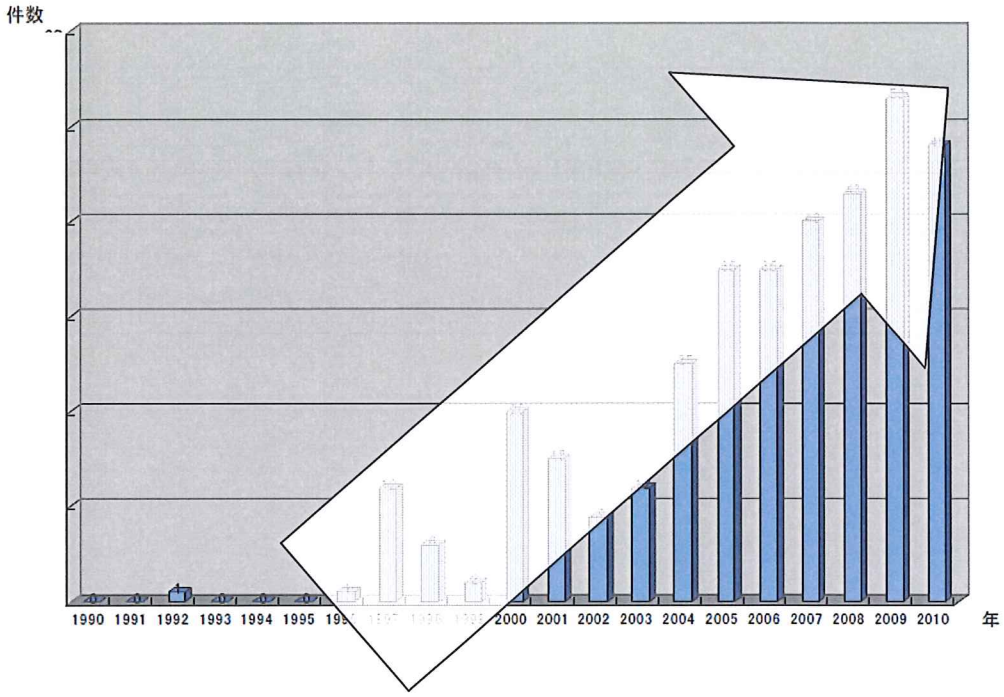
(4) 「PCP/MOF 関連母集団特許群」からの「PCP/MOF 関連特許群」の抽出

(3)で設定した PCP/MOF 関連母集団特許群に対して、A 社担当者、本プロジェクト PCP 集中研究室研究員、JCII 担当者が、特許明細書の内容を確認することにより、「PCP/MOF 関連特許群」を抽出した。

(5) PCP/MOF 関連特許群の全般的出願動向

(5)-1 出願件数の推移

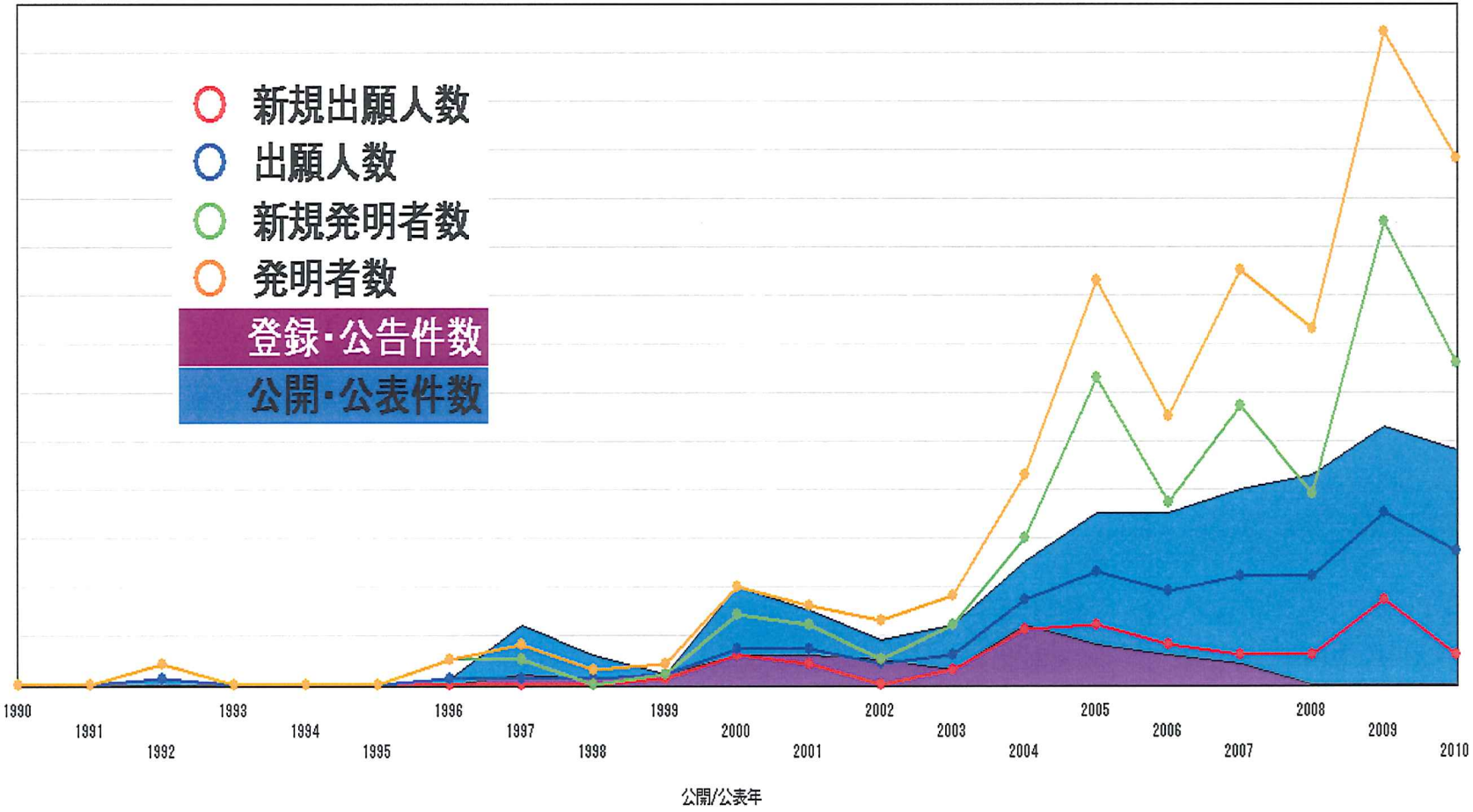
次に、抽出した PCP/MOF 関連特許群に対して、出願件数の推移、技術分野別についてその全般的な傾向を示す。図Ⅲ2.3.2-1 に年度別公開・公表特許件数の推移を示す。



図Ⅲ2.3.2-1 抽出した PCP/MOF 関連特許群年度別公開・公表特許件数の推移
(2010 年度は、9 月 30 日公開分まで)

1997 年から本格的な特許公開が始まっており、2001 年から 2003 年にかけて公開件数が減少するものの、その後は着実に増加傾向にあり、この分野における特許出願が活発化していることがわかる。なお、2010 年の公開・公表件数は、2009 年より減少しているが、これは調査期間が 2010 年 9 月 30 日までであるためである。したがって、2010 年 9 月～12 月の公開・公表件数を加えた 2010 年度の公開・公表特許件数としては、2009 年の件数を上回ることが推測される。

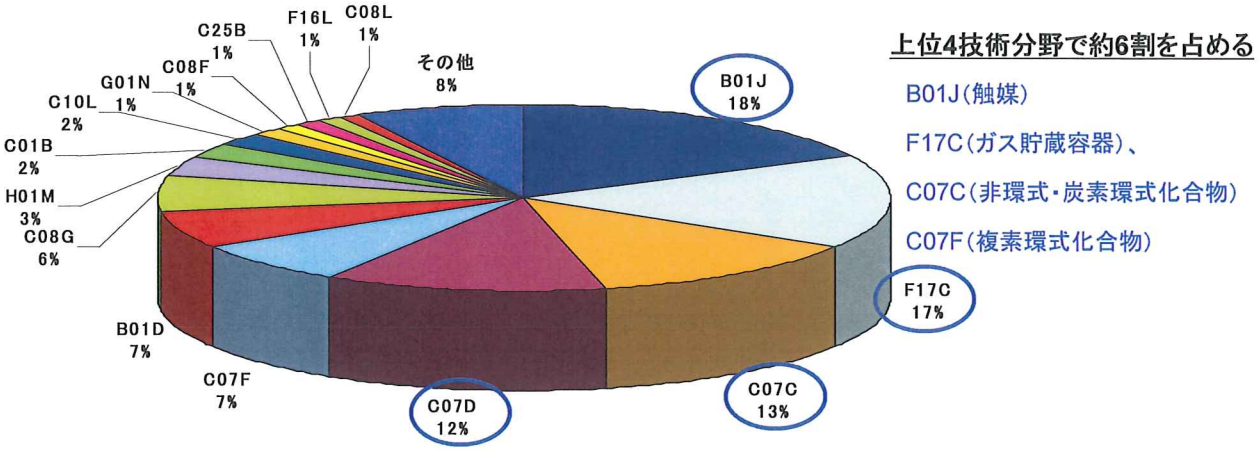
次に、新規出願人数、出願人数、新規発明者数、発明者数及び登録・特許件数の推移を次頁の図Ⅲ2.3.2-2 に示す。新規出願人の数は 2004～2005 年と 2009 年に、ピークを有することが、また、それに伴い新規発明者数も同年に急増していることがわかる。



図Ⅲ2.3.2-2　新規出願人数、出願人数、新規発明者数、発明者数及び登録・特許件数の推移（2010 年 9 月 30 日公開分まで）

(5)-2 出願件数の推移

抽出した「PCP/MOF 関連特許群」に対して、俯瞰的な技術分野別の動向に関して、国際特許分類である IPC を用いて分析をおこなった。筆頭 IPC（サブクラス）から見た技術分野別特許出願割合を図Ⅲ2.3.2-3 に、IPC コードの説明を表Ⅲ2.3.2-1 に示す。



図Ⅲ2.3.2-3 筆頭 IPC(サブクラス)から見た技術分野別特許出願割合

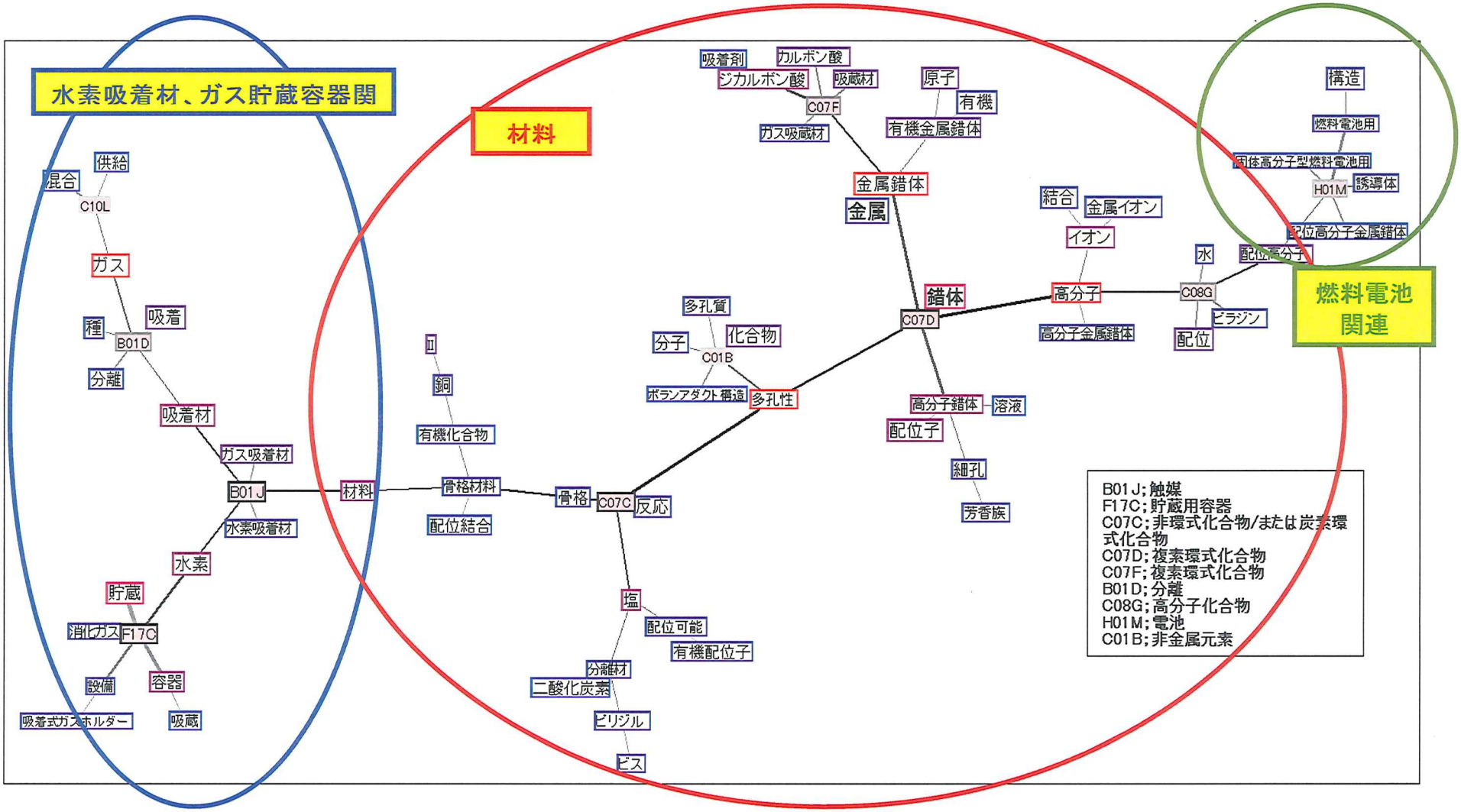
表Ⅲ2.3.2-1 IPC コードの内容

IPC	内容
B01J	化学的または物理的方法, 例. 触媒, コロイド化学;それらの関連装置
F17C	圧縮, 液化または固化ガスの収容または貯蔵用容器;一定容量のガスタンク;圧縮, 液化または固化ガスの容器への充填, または容器からの放出
C07C	非環式化合物または炭素環式化合物
C07D	複素環式化合物
C07F	炭素, 水素, ハロゲン, 酸素, 窒素, 硫黄, セレンまたはテルル以外の元素を含有する非環式, 炭素環式または複素環式化合物
B01D	分離
C08G	炭素ー炭素不飽和結合のみが関与する反応以外の反応によって得られる高分子化合物
H01M	化学的エネルギーを電気的エネルギーに直接変換するための方法または手段, 例. 電池
C01B	非金属元素;その化合物
C10L	他に分類されない燃料;天然ガス;サブクラス C10G または C10K に包含されない工程により得られる合成天然ガス;液化石油ガス;燃料への添加剤の使用;火炎着火剤
G01N	材料の化学的または物理的性質の決定による材料の調査または分析
C08F	炭素ー炭素不飽和結合のみが関与する反応によってえられる高分子化合物
C25B	化合物または非金属の製造のための電気分解または電気泳動方法;そのための装置
F16L	管;管の継ぎ手または取り付け具;管, ケーブルまたは保護管類の支持;熱絶縁手段一般
C08L	高分子化合物の組成物

クラス B01J は、処理操作（セクション B）における“物理的または化学的方法または装置一般”（クラス B01）に属し、触媒などに代表される化学的手法など関する技術である。F17C は機械工学（セクション）における“ガスまたは液体の貯蔵または分配”（クラス F17）に属し、ガスボンベやタンクなどの圧力容器に関する技術である。C07C と C07D はいずれも、化学（セクション C）における“有機化学”（クラス C07）に属し、C07C は非環式化合物または炭素環式化合物、C07D は複素環式化合物に関する技術である。これらの 4 つの技術分野で特許出願件数の 6 割を占めている。

また、抽出した「PCP/MOF 関連特許群」がどのような技術要素（キーワードの組合せ）から成り立っているのかを把握するために、筆頭 IPC の上位 10 分野と明細書中に出現するキーワードとの関連を分析した。分析に際しては、特許分析システムである富士通の ATMS Analyzer を用いた。ATMS Analyzer は、文脈から判断して重要な単語を取り出す意味解析技術（テキストマイニング技術）を応用しているのが特徴である。ATMS Analyzer を用いて分析した結果をスケルトンマップとして、図Ⅲ2.3.2-4(p.7)に示す。なお、スケルトンマップとは項目やキーワードの主要な関連性を MAP 上に表示するもので、関連の強さは線の太さで表されている。また、単語の文字が大きく、太い、さらに枠線が赤色に近づく程、出現頻度が高く、より重要度が高いキーワードであることを表している。

B01J、B01D、C10L 及び F17C の分野では、水素を代表とするガス吸着材や、ガス貯蔵用の容器や設備に関連する内容となっていることがわかる。またこのような吸着材を用いてガスを供給する方法にも関連している。C07C、C07D、C07F 及び C08G の分野は金属と有機配位子（例：テレフタル酸、ピラジン）などが記載されており、主として錯体構造や用途に関連する内容である。C01B は IPC コードでは非金属元素である。H01M の分野は燃料電池用の材料に関する内容である。



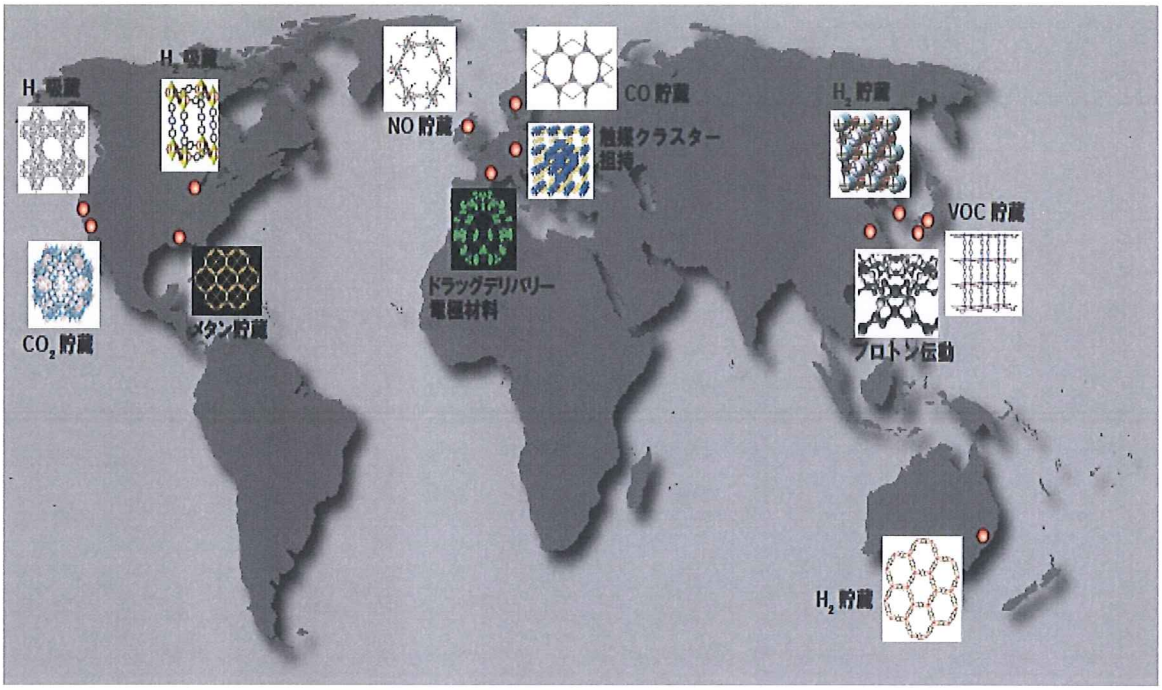
図Ⅲ2.3.2-4　筆頭 IPC の上位 10 分野と明細書中に出現するキーワードとの関連を分析結果（上位 10 分野: IPC コードの内容に関しては、表Ⅲ2.3.2-2 を参照）

*線の太さは関連の強さを示す。単語の文字が大きく、太い、さらに枠線の色が赤色に近づく程、出現頻度が高く、より重要度が高い。

Ⅲ2.3.2.2 PCP 関連の海外ナショナルプロジェクトの動向

(1) はじめに

図Ⅲ2.3.2-5 や表Ⅲ2.3.2-2～3 に示すように、我々は申請書の中（2009 年 4 月段階）で、世界的には、欧米を中心に PCP の基礎から応用に向けた海外ナショナルプロジェクトやコンソーシアムが、国あるいは共同体の単位で進められてきており、それらの多くが 2008 年ごろからスタートしていることを述べた。特に、フランスの Férey 教授のグループは CO_2 の吸収、分離、反応に関する研究を開始しているとの情報があり、加えて、触媒分野では、欧州の MOFCAT (Functional Metal Organic Frameworks as Heterogeneous Catalysts) が、PCP の触媒としての利用可能性に関して、総合的な研究を開始したとの情報を述べている。



図Ⅲ2.3.2-5 世界の PCP 研究状況

しかしながら、これらの情報の多くは、研究者が海外の学会等で入手した情報であり、断片的なものも多く、たとえば、参加企業や同研究者の情報は少なく、プロジェクトの全体像、予算額・期間に関してはさらに少なかった。一方、我々自身、本プロジェクトにおいて、年度末には成果報告書を作成し NEDO に提出しており、時期がくれば NEDO ホームページ上に公開されている。

表Ⅲ2.3.2-2 PCP の分離・貯蔵分野の研究者

研究者	国	内容
S. Qiu	China	大気中からH2以外の分離吸着
G. Ferey	France	柔軟なPCP骨格を用いたCO2/CH4分離
S. Kitagawa	Japan	疎水性PCPおよびルイス塩基性PCPを用いたCO2/N2, CO2/C2H2, VOC分離
S. Takamizawa	Japan	柔軟な1次元鎖PCPを用いたガス分離
J. Li	US	疎水性PCPを用いたガス/VOC分離
O. Yaghi	US	高い電場勾配を持つPCPを利用したCO2/CO分離
H. -C. Zhou	US	疎水性・親水性場を持つPCPを用いた低級アルケンガスの分離
B. Chen	US	柔軟なPCPを用いた低級アルカン分離
A. J. Matzger	US	高表面積PCPを用いた有機スルファ化合物の分離・貯蔵
R. Q. Snurr	US	PCPにおけるアルカンガス分離のメカニズム解析

表Ⅲ2.3.2-3 PCP の触媒分野の研究者

研究者	国	内容
G. Ferey	France	Fe2+,Fe3+によるFriedel-Crafts反応, NH2修飾PCPによるKnoevenagel反応
R. A. Fischer	Germany	基盤上のPCP結晶の異方性配向、CVD法による触媒活性分子のPCP担持
S. Kaskel	Germany	Pt担持PCPを用いたスチレンの水素化反応
S. Kitagawa	Japan	アミド修飾PCPを用いたKnoevenagel反応、ルイス酸性PCPを用いたポリマー重合反応
Q. Xu	Japan	ルイス酸性PCPを用いたCOの酸化反応
K. Kimoon	Korea	不斉塩基点を持つPCPを用いたアルコールのエステル化反応
M. A. Monge	Spain	リナロール酸化反応
M. Eddaoudi	US	ポルフィリンを組み込んだPCPを用いたシクロヘキサン酸化反応
W. Lin	US	ビナフチル誘導体PCPを用いた各種不斉触媒反応
J. R. Long	US	ルイス酸PCPを用いたサイズ選択的向山—アルドール反応
J. T. Hupp	US	サレン骨格PCPを用いたエポキシ化反応

そこで、今回、海外のライバルナショナルプロジェクトの存在やそれぞれの内容等に関する情報をできるだけ網羅的に入手し整理した上で本プロジェクト研究者に提供することができれば、研究者個々人が、一層海外のライバルプロジェクトやライバル研究者の動向を意識して、日々の開発に取り組めるものと考え、各国にある研究開発系ファンディング・エージェンシーのウェブサイト、海外ナショナルプロジェクトへの参加研究者の所属機関サイト、論文・予稿集・PCP 関連シンポジウムの謝辞の部分等を調べることにより、PCP 関連海外ナショナルプロジェクトの現状を調べた。

なお、これらの内容は、京都大学 PCP 集中研究室月次検討会等で発表し、その共有化を行った。

以　上

Ⅳ. 実用化の見通しについて

Ⅳ.1. 副生ガス分離･精製用 PCP 基盤技術開発の実用化見通しについて

Ⅳ.1.1 メタン精製用 PCP 開発

1.1.1 成果の実用化の可能性

①市場のニーズ

国内では精製バイオガスの需要は顕在化していないが、今後 CO_2 削減に各種の規制や経済的なインセンティブが課せられることが予想され、精製バイオガスを燃料として用いる省 CO_2 ビジネスのニーズは確実に高まると考えている。事実、2009 年 7 月にエネルギー供給事業者による非化石エネルギー源の利用及び化石エネルギー原料の有効な利用の促進に関する法律（エネルギー供給構造高度化法）が施行され、ガス業界に対して「2015 年において下水処理場などで発生する余剰バイオガスの 80%以上を利用すること」との目標を課しており、東京ガスと大阪ガスが、バイオガス都市ガス導管注入実証事業を行っている。

一方、海外の動向として、欧州ではバイオガスの普及が進んでおり、中でもドイツやスウェーデンといったバイオマス利用の先進国では化石燃料の代替としてバイオエタノール以上にバイオガスが利用されている。

スウェーデンは一年の間で冬の期間が非常に長く、北部地方では冬季に全く太陽が昇らなくなる期間もあるので、再生可能エネルギーとしては太陽光発電よりも風力発電やバイオガスの活用に関心が高い。スウェーデンでは既に、自動車燃料としては、天然ガスよりもバイオガスの利用の方が上回っている。バイオガスの利用規模をガソリンに換算すると、2006 年で年間 2,600 万 L に達し、さらにはバスや列車、船舶の燃料としてもバイオガスが活用され始めている。

また、ドイツでは、2005 年の電力・ガス供給法（EnWG）の改正によりバイオガス製造プラント操業者がドイツの天然ガスネットワークを利用できるようになったことにより、バイオガスを導管に注入する制度的枠組が用意されている。また、2008 年 3 月には、ドイツの連邦参議院はバイオガスの既存天然ガス供給網への注入を促進するための連邦経済省令の制定を承認した。連邦政府はこの省令の実施により 2030 年までに現在の天然ガス消費量の約 10%程度（100 億 m^3）までをバイオガスによってまかなうことを目標としている。

このようにバイオガス精製のニーズは欧州を中心に近年高まりつつあり、精製ビジネスのチャンスであると考えている。

②実用化イメージ

現在、国内のガス業界には、電力業界における固定価格買い取り制度（以下、Feed-in Tariff; FIT と略記）のような再生可能エネルギーの強制的な買い取り制度はないため、日本において精製バイオガスによる天然ガス代替が急速に進むとは考え難い。今後、FIT で割高な太陽光発電などが急増し、電気料金が値上がりすれば、エネルギー間の競争で電力が不利となるため、ガス会社に対し、天然ガスより割高であってもバイオガスの比率を義務的に増やす動きが出る可能性はあるが、バイオガス精製市場は海外が主体となると考えている。

ビジネスモデルとしては、「PSA のランニングコスト削減」を訴求点に、ガス会社やエンジニアリング会社に対して PCP を販売することを想定している。

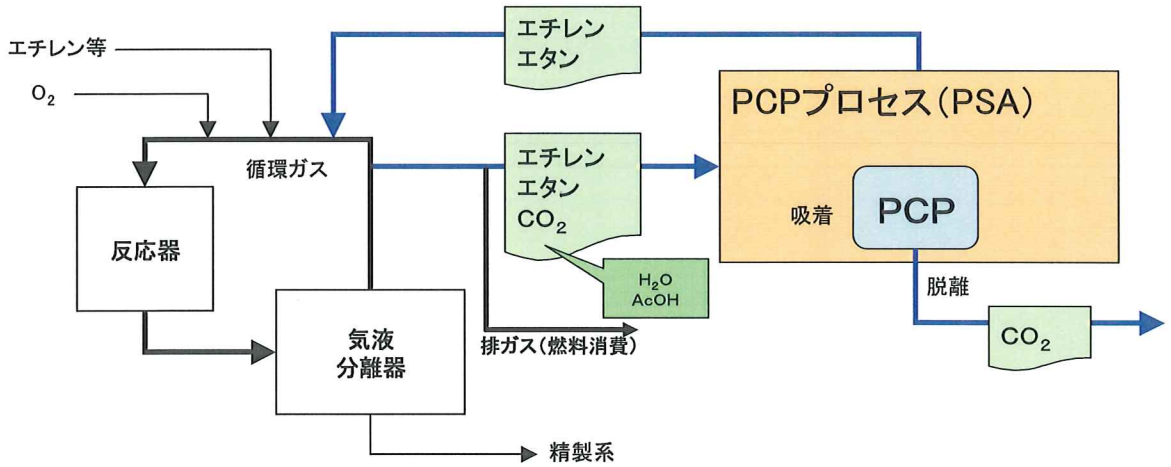
1.1.2 波及効果

メタンはCO_2の21倍の温室効果を持つ温室効果ガスであり、世界の温室効果ガス排出量の16%を占め、CO_2に次ぐ影響力を持っている。また、メタン排出量のうち60%は人類の諸行動により生み出されている。本研究開発で得られたPCPを応用し、メタンを濃縮回収することができれば、有効活用への道が開け、メタンの排出量を削減できると共に、大幅な省エネルギーに寄与することができる。さらには、省エネルギーやエネルギー有効活用技術の提供などにより相手国の環境改善やエネルギー高度利用に貢献することで、クリーン開発メカニズム（CDM）を通じたCO_2排出権の獲得に繋がると期待される。

Ⅳ1.2　CO_2／エチレン分離用 PCP 開発

1.2.1　成果の実用化の可能性

本テーマの実用化として、プロジェクトで開発した CO_2/エチレン分離用 PCP を、必要な形態付与を施して CO_2／エチレン用分離材とし、酸化反応プロセスにおける循環ガスからの CO_2 除去プロセスの分離材として利用することを目指している。本テーマで開発した CO_2/エチレン分離用 PCP を利用した CO_2 除去プロセスの概略を図Ⅳ1.2-1 に示す。



図Ⅳ1.2-1　酸化反応プラント CO_2 除去プロセスの省エネ化

本プロジェクトで開発した CO_2／エチレン分離用 PCP を利用した循環ガスからの CO_2 除去には吸着法（PSA 法）のシステムを想定している。既存プロセスは熱炭酸カリ法を採用しているが、化学吸収なので吸収剤の再生に多大なエネルギーを必要とするため、本プロジェクトで開発した分離材を利用して PSA 法に代替することによってプロセスの省エネ化を図る。

PSA の CO_2 分離材としては一般的にゼオライトが用いられるが、熱炭酸カリ法の代替のためには、経済性の観点から選択性がより高く、脱着性にすぐれた分離材の開発が望まれる。CO_2 吸着エネルギーがより低く脱着性に優れていれば脱着操作時の真空度を緩和できるので真空ポンプのエネルギーを抑え省エネにつながる。更に形態付与に当たって分離材の形状を従来のペレットの粒状からハニカム型吸着材とすることで分離材充填層の圧力損失を小さくして CO_2 吸着脱着の際に必要なブロワー・真空ポンプ等のエネルギーコストの低減に繋げていく。

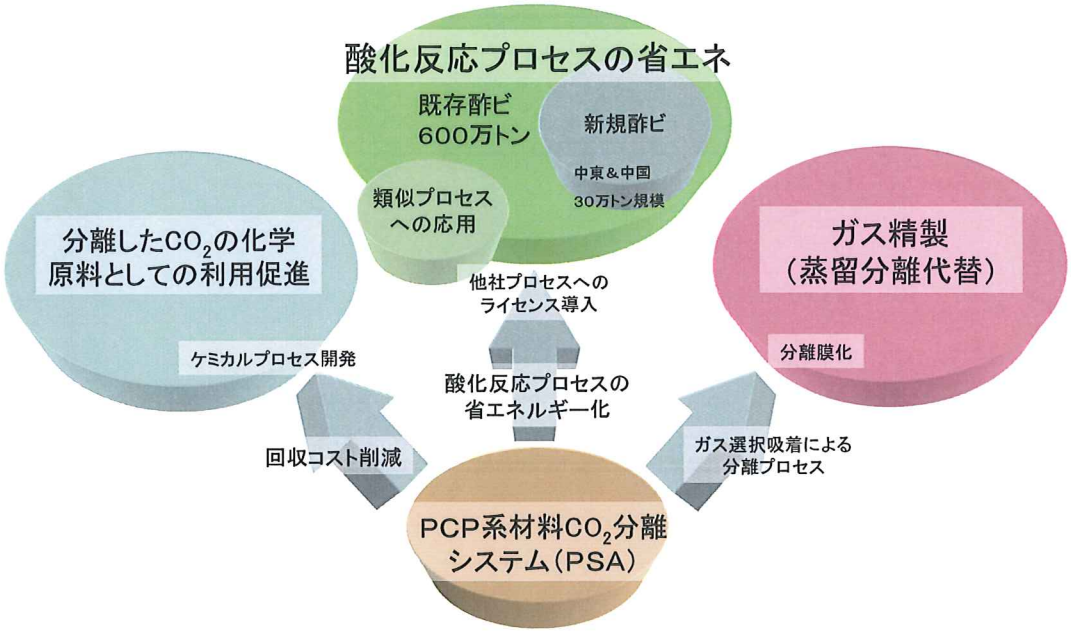
1.2.2　波及効果

当該分野への波及効果として、昭和電工では大分コンビナート内に複数の熱炭酸カリ法を採用しており、類似プロセスに順次展開できるものと考えている。さらに、国内他社の同様の酸化反応プラントへのライセンス導入や、東南アジアを中心とした企業への展開も期待できる。国内の酢酸ビニルプラントは４箇所で、実用化されれば分

離される CO_2 は 4 箇所合計で 6 万 t /年程度と推算される。

CO_2 回収コストを更に削減できれば、ケミカルプロセスの開発と相まって、分離した CO_2 の化学原料への利用促進が期待できる。

さらに、比揮発度が 1 に近い物質の分離への展開が出来ればインパクトは大きい。ガスの分離精製の一部は深冷分離により行われているが、極低温を用いるため多大なエネルギーを必要とする。実用化には、分離材に用いる PCP の基本骨格の最適化に加え、処理量が多いため、本プロジェクトで想定した PSA 法では困難と推測でき、分離膜にするなど、もう一段階の開発が必須と思われるが、蒸留分離代替に適応することで大幅なエネルギーコストの削減が期待できる。



図Ⅳ1.2-3　波及効果

1.2.3　今後の展開

先に述べたように本プロジェクト成果の実用化として、当社の酸化反応プロセスにおける循環ガス中の CO_2 除去系に適用することを計画している。

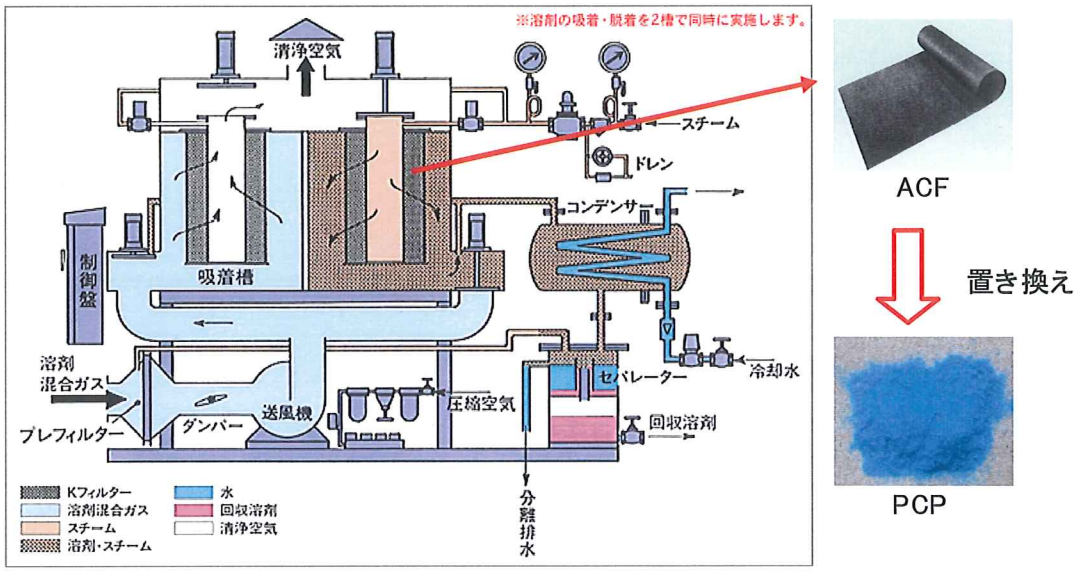
プロセス開発については、本プロジェクト中にプロセス基本設計を行い、小型検証実験装置を用いて必要なデータを採取していく。プロジェクト終了後、実用化までに、大型実証試験装置の設計、建設、装置を用いた実証試験（複数年の連続試験を含む）が不可欠であり、これらに 10 年程度の期間を要するものと想定している。

併せて、これら検証実験、実証試験および本プラント稼動に際して、必要な量の PCP 系組成物およびそれを用いた成型体を得るためのスケールアップ検討、形態付与検討、量産化技術の確立を行う。2012 年には小型検証実験に用いる試験用分離材の試作する予定であり、この結果をフィードバックして耐久性等を向上させて分離材製造技術を確立する。

Ⅳ1.3　PCP による微量ガス分離材開発

1.3.1　成果の実用化の可能性

バイオガス中の微量成分であるシロキサンは、燃焼により SiO_2 が生成し、発電機、ボイラ等の内部に付着し、不具合の原因となることが多く、微量に含まれるシロキサンを高度に分離する技術が望まれている。また、東洋紡績㈱は、活性炭素繊維（ACF）を用いた VOC 吸着回収装置・除湿機の製造・販売、および、自動車・事務機器向け脱臭フィルタの製造・販売の事業を行っており、特に、VOC 吸着回収装置については早くからシステムとして実用化し、今までに多くの分野で採用され、規制対策・省資源（リサイクル）に貢献している。したがって、本事業の成果を東洋紡績㈱の保有技術である VOC 吸着回収装置に組み込み、バイオガスからの微量シロキサン除去装置（バイオガス精製装置、図Ⅳ1.3-1）として成果を実用化することは、市場でのニーズ面、また、実用化に際しての技術面においても、実用化は十分可能であると考えられる。



図Ⅳ1.3-1 実用化イメージ

1.3.2　波及効果

本事業にて開発される多孔性金属錯体（PCP）は、若干の設計変更で、他の VOC にも適用は可能であり、その他 VOC 吸着回収装置、濃縮装置の拡販、および、自動車、事務機器、および、家庭用電化製品向けフィルタ等のフィルタ市場への普及も期待できる。また、GSC 効果として、活性炭素繊維（ACF）から多孔性金属錯体（PCP）に置き換えることにより、CO_2 排出量の大幅な削減が期待できる。

1.3.3　今後の展開

平成 23 年度の中間目標を達成し、平成 25 年度までに最終目標を達成した後の実用化スケジュールを表Ⅳ1.3-1 に示す。最初の 2 年間でパイロット規模の開発を行い、平成 28～29 年での上市を目指す。また、並行して、装置の低コスト化、低ランニングコスト化による装置の導入促進を進め、事業規模の拡大に努める。

下水処理場等からのバイオガス中の微量成分であるシロキサンを除去できることで、燃焼機器へのダメージや触媒の劣化を防ぐことができ、メンテナンスコストの大幅な低減となり、産業界でのバイオガス利用が急速に拡大していくことが期待される。特に、エネルギー資源の乏しい日本、さらには人口密度の高いアジア諸国への普及が期待される。

表Ⅳ1.3-1 実用化スケジュール

年度	H26	H27	H28	H29	H30
開発段階 (パイロット設備導入)	→	→			
製品化段階 (実証試験等)		→			
市場出荷段階			→	→	→

Ⅳ2. 回収CO_2によるグリーンプロセス基盤技術開発の実用化見通しについて

Ⅳ2.1 液相法によるPCP複合触媒開発

2.1.1 成果の実用化の可能性

VOCは、浮遊粒子状物質（SPM)、および、オキシダントの生成に関与していると考えられており、これらを原因とする大気汚染による人の健康への影響が懸念され、VOC除去のニーズは高まっている。また、東洋紡績㈱は、VOC分解触媒を担持させた溶剤燃焼装置や脱臭フィルタを既に実用化しており、様々な工場から排出される溶剤を含む排気、および、循環空気の清浄化用途、高濃度溶剤・悪臭ガスの処理用途や、自動車、事務機器、および、家庭用電化製品向け脱臭フィルタ用途等で事業を展開している。したがって、本事業の成果である多孔性金属錯体（PCP）複合系触媒の設計、および、合成方法に関する知見を利用して、VOC分解触媒を開発し、それを溶剤燃焼装置用途や自動車、事務機器、および、家庭用電化製品向け脱臭フィルタ用途として実用化することは可能であると考えている。

2.1.2 波及効果

本事業にて開発される多孔性金属錯体（PCP）と触媒の複合化技術を用いて、触媒の高効率化・長寿命化・リサイクル性をVOC分解触媒に付与することができれば、反応に要するエネルギーを低下でき、触媒使用量を低減できることから、低エネルギー、低コストに繋がる。

2.1.3 今後の展開

平成23年度の中間目標を達成し、平成25年度までに最終目標を達成した後の実用化スケジュールを表Ⅳ2.1-1に示す。最初の3年間でVOC分解触媒に関する基礎技術の確立を目指す。その後、フィルタ化（形態付与）検討、および、試験販売を行い、平成32年度以降での上市を目指す。

多孔性金属錯体（PCP）系複合触媒の開発は、今後、種々の反応への応用展開が期待できる基盤技術である。基盤技術開発後の実用化に成功すれば、省エネ効果だけでなく、環境に負荷の高い副生成物の削減にも大きく貢献できるものと考えている。

表Ⅳ2.1-1 実用化スケジュール

年度	H26	H27	H28	H29	H30	H31
研究段階 (VOC分解触媒)	→	→	→			
開発段階 (実用化検討)				→	→	
製品化段階 (実証試験等)						→

以上

Ⅳ2.2 気相法によるPCP複合触媒開発

2.2.1 成果の実用化の可能性

本プロジェクトにおける昭栄化学工業にとっての実用化は、各種機能性材料とPCPとを複合化した新規素材を設計/開発/製造する技術を構築することを指す。本プロジェクトの目的であるCO_2還元触媒の開発は、チャレンジングな課題であるが社会的・技術的なインパクトを与えるものであり、それによって得られる技術的な成果は実用化に向けた取り組みに大きく寄与するものと考える。また、本プロジェクトでは、気相法によるPCP複合触媒の合成技術開発に取り組んでいる。気相法は多成分系の複合粒子を製造するための優れた手法であり、昭栄化学工業はその量産化技術を有していることから、本方法によるPCP複合触媒の製造技術が構築できれば、独創的な技術によって製造した機能性PCP複合素材を、世界に先駆けて市場に提供することが可能となる。

現在までの研究によって、気相法でPCPおよびPCP複合触媒を合成するための基本的な条件が明らかとなり、新しい試作機を用いたスケールアップの可能性も示された。これは実用化に向けた大きな成果である。実用化に向けた今後の検討における重要課題の一つは、PCP複合触媒の優位性を実証することにある。そのためには、様々なPCPと触媒を複合化させたサンプルを多数試作し、その特性評価と構造解析によって、触媒性能とPCP複合触媒の微細構造との関係を明確にすることが求められる。平成22年度の加速費で分担研に導入した装置と集中研などで有する各種評価設備を活用することで、効率的に研究を進める環境は整っている。表Ⅳ2.2-1に実用化に向けた課題をまとめる。

2.2.2 波及効果

前述したように、PCP複合触媒によるCO_2還元触媒の開発は社会的・技術的なインパクトを与えるものであり、それを実証することによって様々な波及効果が生じることを期待している。環境/エネルギー/バイオなどへのPCPの応用研究は、海外の研究プロジェクトなどを中心に、すでに検討が始まっている。昭栄化学工業が、いち早くPCP複合素材を研究用サンプルとして提供することで、様々な分野での技術開発が加速されることを期待している。

2.2.3 今後の展開

昭栄化学工業は、本プロジェクトで確立された独創的な技術をもって、高機能で高付加価値な素材を設計/開発/製造/販売することを目的としている。本プロジェクトの終了後は、潜在的な応用分野/市場/顧客に対する調査と素材のサンプルワークを開始する。また、上記の波及効果で示した分野への応用研究も進め、PCP複合素材の事業化に向けた取り組みを開始する。

表Ⅳ2. 2-1 実用化に向けた課題

課題	平成 23 年度	平成 24 年度	平成 25 年度	
PCP 複合触媒の優位性の実証	中間目標達成（選択率 60%）		最終目標達成（選択率 80%）	
PCP 複合触媒の組成および微細構造と触媒性能の関係の解明		特許化	論文等による情報発信	
PCP 複合触媒粒子合成技術のスケールアップ検討	目標達成	（量産化に向けた調査を継続）		
電極触媒技術のスケールアップ検討	選択率向上のための因子を明確にする		触媒寿命向上のための因子を明確にする	

以上

添付資料

・ナノテク・部材イノベーションプログラム基本計画 ……添付資料1
（2009年度イノベーションプログラム基本計画から抜粋）

・プロジェクト基本計画 ……添付資料2

・GSC 技術戦略マップ ……添付資料3
（2010年度技術戦略マップから抜粋）

・事前評価関連資料
・事前評価書 ……添付資料4－1
・NEDO POST ……添付資料4－2
・パブリックコメント募集の結果 ……添付資料4－3

・特許、論文等リスト ……添付資料5

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２１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１６・０７・２７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。

（別添）

ナノテク・部材イノベーションプログラム基本計画

１．目的

このプログラムは、情報通信、ライフサイエンス、環境、エネルギーなど、あらゆる分野に対して高度化あるいは不連続な革新（ジャンプアップ）をもたらすナノテクノロジー及び革新的部材技術を確立するとともに、その実用化や市場化を促進することで、我が国産業の国際競争力の維持・強化や解決困難な社会的課題の克服等を可能とすることを目的とする。

２．政策的位置付け

○第３期科学技術基本計画（２００６年３月閣議決定）

- 「ナノテクノロジー・材料分野」は、特に重点的に研究開発を推進すべき分野（重点推進４分野）の一つに指定、優先的に資源配分することとされている。
- 我が国の材料技術は、基礎研究から応用研究、素材、部材の実用化に至るまでの全ての段階において世界のトップレベルを堅持しており、我が国製造業の国際競争力の源泉となっている。

○「イノベーション２５」（２００７年６月閣議決定）

- 「ナノテクノロジー・材料分野」は、中長期的に取り組むべき課題として、「１．生涯健康な社会形成」、「２．安全・安心な社会形成」、「４．世界的課題解決に貢献する社会形成」、及び「５．世界に開かれた社会形成」の分野に位置付けられている。
- 所要の措置を講じていくことが必要である事項として以下の点が指摘されている。
  - 学際領域・融合領域における教育等人材育成、拠点形成
  - 社会受容を促すための積極的な取り組み
  - 知的財産確保のための戦略的な取り組み

○「経済成長戦略大綱」（２００６年７月財政・経済一体改革会議）

- 「我が国の国際競争力の強化」の取り組みとして、高度な部品・材料産業やモノ作り中小企業の強化が掲げられている。
- 「技術戦略マップ」の活用等により、ユーザー企業との垂直連携による研究開発を推進することを通して、我が国経済発展の基盤である高品質、高性能な部品・材料産業の強化を図ることが今後の取組として記載されている。

○「新産業創造戦略２００５」（２００５年６月経済産業省）

- 部材分野は、新産業群の創出を支える共通基盤技術として位置づけられている。
- 「高度部材・基盤産業」の集積を形成していることが、「ものづくり」に不可欠な基盤技術のネットワーク化を通じた現場レベルでの迅速かつ高度な摺り合わせを可能としており、我が国「ものづくり」の強みの源泉となっていると記載されている。

３．達成目標

- 世界に先駆けて、ナノテクノロジーを活用した不連続な技術革新を実現する。

・我が国部材産業の強みを更に強化することで、他国の追随を許さない競争優位を確保するとともに部材産業の付加価値の増大を図る。
・ナノテクノロジーや高機能部材の革新を先導することで、これら部材を活用した情報通信、ライフサイエンス、環境、エネルギーなどの幅広い産業の付加価値の増大を図る。
・希少金属などの資源制約の打破、圧倒的な省エネルギー社会の実現など、解決困難な社会的課題の克服を目指す。

４．研究開発内容

［プロジェクト］

Ⅰ．ナノテクノロジーの加速化領域

ナノテクノロジーを活用した不連続な技術革新を加速・促進する。

（１）異分野異業種融合ナノテクチャレンジ（運営費交付金）

①概要

革新的なナノテクノロジーの研究開発を促進し、キーデバイスの早期実現を目指すため、大学や研究機関などの川上と企業などの川下の連携、異業種異分野の連携による提案公募によって、ナノテク実用化に向けたチャレンジを支援する。

②技術目標及び達成時期

マテリアル・プロセス研究、加工・計測技術研究、昨今の環境意識向上に対応した研究、社会課題を解決するための基盤技術研究に加え、異分野等の融合研究を推進することにより、２０１１年度までにナノテクノロジーの産業化のための基盤的技術を確立し、実用化を図る。

③研究開発期間

２００５年度～２０１１年度

Ⅱ．情報通信領域

ナノテクノロジーや革新的部材開発技術を駆使して既存技術の微細化の壁を突破し、電子デバイス・光デバイスで世界をリードするとともに、高度化された製造技術の開発を行う。

（１）ナノエレクトロニクス半導体新材料・新構造技術開発ーうち新材料・新構造ナノ電子デバイス（運営費交付金）

①概要

従来の半導体は、性能の向上（高速化、低消費電力化、高集積化）を確保するために微細化が進められてきたが、絶縁性、誘電率等の物理的限界、微細化に伴う製造コストの増大など、集積度向上によるメリットが十分達成されなくなってきている。

本研究開発では、シリコンで培った微細化技術やデバイス原理を活用しながら、シリコン材料の物理的限界を突破するための“新材料”および “新（デバイス）構造”の開発を行い、次世代の電子デバイス技術を確立する。

②技術目標及び達成時期

２０１１年度までに、産業界が１０年後を見据えた将来の電子デバイスを開発する際に、産業技術として活用できるかどうかの実現可能性を見極め、また技術シーズを確立する。

③研究開発期間

２００７年度～２０１１年度

（２）スピントロニクス不揮発性機能技術プロジェクト（運営費交付金）

①概要

将来のエレクトロニクスにおいて中核的な基盤技術となり得るスピントロニクス技術（電子の電荷ではなく、電子の自転＝「スピン」を利用する全く新しいエレクトロニクス技術）を確立するため、強磁性体ナノ構造体におけるスピンの制御・利用基盤技術を開発し、我が国が世界に誇るシーズ技術を核として、産学官の共同研究体制を構築し、将来の中核的エレクトロニクス技術における我が国の優位性の確保を図る。

②技術目標及び達成時期

２０１０年度までに、超高集積で高速な不揮発性メモリとして期待されるスピンメモリのための基盤技術を確立する。また、新ストレージ・メモリデバイス、不揮発性スピン光機能素子、スピン能動素子等の新しい動作原理によるスピン新機能素子の実現のための基盤技術を確立する。

③研究開発期間

２００６年度～２０１０年度

（３）ナノエレクトロニクス半導体新材料・新構造技術開発ーうち窒化物系化合物半導体基板・エピタキシャル成長技術の開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

窒化物系化合物半導体は、パワーデバイス、高周波デバイス、発光デバイス等、重要なデバイスの飛躍的な性能向上と消費電力削減への貢献を期待されている。このため、従来の半導体材料では実現出来ない領域で動作可能なハイパワー・超高効率の電子素子、超高速電子素子等の作成に必要な窒化物系化合物半導体先進技術の国際競争力を強化すべく、高品質かつ大口径単結晶基板、高品質かつ大口径エピタキシャル成長技術等の開発を行う。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

２０１１年度までに、次世代窒化物系半導体デバイスを実現する以下結晶作製技術を開発する。

１）基板技術（ＧａＮ、ＡＩＮバルク結晶作製技術）

・口径２～４インチで高品質エピ成膜を可能とする低コストの単結晶基板作製技術の確立。

２）エピ技術（エピタキシャル成膜及び計測評価技術）

・低欠陥高品質エピ層を実現する成膜技術及び膜成長過程を計測評価する技術の確立。

・高出力かつ高安定動作可能なエピ層の実現

・高耐圧超高速な新しいデバイス構造の開発

③研究開発期間

２００７年度～２０１１年度

（４）三次元光デバイス高効率製造技術（運営費交付金）

①概要

波面制御素子による空間光変調技術を確立し、ガラス中に三次元造形を高精度に一括形成できるプロセス技術を開発する。この技術を用いて、具体的な光デバイスを作製し、当該技術の有効性の確認と市場への早期参入のための基盤技術を確立する。

②技術目標及び達成時期

２０１０年度までに波面制御素子による空間光変調技術を用いたフェムト秒レーザー照射技術等を確立し、高精度の光デバイスを高速に作製できるプロセス技術を開発する。

③研究開発期間

２００６年度～２０１０年度

（５）低損失オプティカル新機能部材技術開発＊（運営費交付金）（再掲）

①概要

近接場光の原理・効果を応用した低損失オプティカル新機能部材技術を開発し、実用化の目処を得ることを目的とする。動作原理に近接場光を用いるオプティカル新機能部材は、従来の材料特性のみに依存した光学部品では不可能な機能・性能を発揮し、液晶プロジェクター・液晶ディスプレイなど情報家電の省エネルギー、高性能・高信頼化を図る上でのキーデバイスとなることが期待できる。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

２０１０年度までに、共通基盤技術として、ナノ構造部材の設計・作製・評価技術を開発するとともに、ナノ構造部材に発現する近接場光の機能を動作原理とする低損失オプティカル新機能部材を検討し機能を確認する。

③研究開発期間

２００６年度～２０１０年度

（６）超フレキシブルディスプレイ部材技術開発＊（運営費交付金）（再掲）

①概要

製造工程等の省エネルギー化を実現するために行う。従来、表示デバイスの製造には、真空蒸着と高温下での焼成と、それに伴う排ガス排水処理が必須であった。これを、ロールｔｏロール方式に代替することで常圧、常温下での製造を実現し、フレキシブルな薄型ディスプレイを製造する。そのために、有機ＴＦＴ材料およびコンタクトプリント技術等を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術的目標及び達成時期

２００９年度までに、実用化に向けた実証のための巻き取り方式ディスプレイのプロトタイプを試作する。またフレキシブルデバイス材料開発に貢献する部材ならびに薄膜複合化技術を開発し、これらをパネル化するための実用化技術を確立する。

③研究開発期間

２００６年度～２００９年度

（７）半導体機能性材料の高度評価基盤開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

情報通信機器の高機能化や低消費電力化等の要求を満たす半導体集積回路を実現するため、新たな機能性材料開発に貢献する評価基盤技術を開発し、さらに開発した機能性材料を半導体及び半導体集積回路に適用できる統合的なソリューション技術を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術的目標及び達成時期

２０１１年度までに、半導体デバイス性能に直結する接合素子の性能性及び信頼性等、半導体製造プロセス全体を俯瞰しつつ、機能性材料開発が可能となる評価基盤技術を開発し、開発した機能性材料を用いた統合的なソリューションが提案できる材料評価基盤を構築する。

③研究開発期間

２００９年度～２０１１年度

Ⅲ．ライフサイエンス・健康・医療領域

ナノテクノロジーを駆使して初めて可能となる診断・治療により革新的な医療を実現する。

（１）次世代ＤＤＳ型悪性腫瘍治療システムの研究開発事業（運営費交付金）

①概要

ＤＤＳのさらなる裾野の拡大、及び早期実用化を目指し、様々な外部エネルギー（機器技術）と薬剤技術を組み合わせることにより、比較的人体の深部にある臓器（肺、消化器）等のがんを対象としたＤＤＳ型治療システムの開発を行う。

②技術目標及び達成時期

光線力学治療システムの前臨床試験の開始及び治療効果・安全性の検証と、超音波診断・治療システムの前臨床試験を可能とする薬剤及び装置の完成に関する開発を難治性がんの治療に向けて行う。

③研究開発期間

２００６年度～２００９年度

（２）個別化医療実現のための技術融合バイオ診断技術開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

我が国が有する微細加工技術・表面処理技術といったナノテク等の強みを活かし、染色体異常を高感度、高精度かつ迅速、安価で非コード領域までを検出するゲノムアレイや解析基盤技術開発を行うとともに、全自動解析システムの開発を行う。

②技術目標及び達成時期

２０１０年度までに、ＢＡＣ（染色体の断片）を用いた非コード領域を含むゲノム全領域を検出できる高精度ゲノムアレイを開発する。さらに、臨床現場において、微量サンプル（数ナノグラム）から、１２時間以内に染色体異常（増幅、欠失、コピー数多型等）を、低コストかつ定量性・再現性を確保して検出ができる自動染色体異常解析シス

テムのプロトタイプを開発する。

③研究開発期間

２００６年度～２０１０年度

（３） 分子イメージング機器研究開発プロジェクト（運営費交付金）

ｉ）生活習慣病超早期診断眼底イメージング機器研究開発プロジェクト

①概要

細小血管の分子レベルでの代謝機能を非侵襲で可視化する細胞代謝イメージングを実現し、代謝異常を細胞レベルで観察することにより、生活習慣病に起因する血管病変等合併症の早期の診断・治療を図る。

②技術目標及び達成時期

２００９年度までに、ナノテクノロジーを活用した光学基盤技術等を確立することにより、細胞やタンパク質レベルの組織診断を可能とする機器を開発する。

③研究開発期間

２００５年度～２００９年度

ii）悪性腫瘍等治療支援分子イメージング機器研究開発プロジェクト

①概要

良性・悪性の区別も含めた腫瘍の超早期診断を実現するため、悪性腫瘍に特異的に反応する標的物質を利用することにより生体細胞の分子レベルの機能変化を抽出・検出できる機器の開発を行う。

②技術目標及び達成時期

２００９年度までに、全身で３㎜、局所で１㎜の分解能を有する分子イメージング機器を開発する。

③研究開発期間

２００５年度～２００９年度

iii）新規悪性腫瘍分子プローブの基盤技術開発

①┌概要

分子イメージングにおいて、病変を可視化する分子プローブの開発を一層強化・促進するため、分子プローブの基盤要素技術と評価システムの開発を行う。

②技術目標及び達成時期

２００９年度までに、新規の近赤外蛍光分子プローブ及び小動物用近赤外蛍光イメージングシステムを試作し、同システムを用いて分子プローブのがん特異性を定量的に評価するための条件等を明らかにする。

③研究開発期間

２００８年度～２００９年度

Ⅳ．エネルギー・資源・環境領域

ナノテクノロジーや革新的部材開発技術を駆使して、エネルギー・資源・環境等の社会的制約を克服すると同時に我が国の強みであるナノテク関連産業・部材産業の競争力を強化する。

（ｉ）エネルギー制約の克服

（１）サステナブルハイパーコンポジット技術の開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

炭素繊維複合材料は、軽量、高強度等の優れた特性を有している。従来の熱硬化性樹脂を用いた炭素繊維複合材料では成形性・加工性に乏しくリサイクルが困難であったため、熱可塑性樹脂を用いた炭素繊維複合材料（ＣＦＲＴＰ）の開発を行う。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

２０１２年度までに、炭素繊維と熱可塑性樹脂との中間基材を開発し、高速成形技術、接合技術及びリサイクル技術を開発する。

③研究開発期間

２００８年度～２０１２年度

（２）マルチセラミックス膜新断熱材料の開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

住宅やビルなどの冷暖房における大幅な省エネを実現する画期的な断熱性能を持つ壁および窓材料を、セラミックスのナノ多孔体構造やポリマー複合化構造などからなるマルチセラミックス膜アセンブリ技術によって開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

２０１１年度までに、熱貫流率（熱の伝わりやすさ）が０．３Ｗ／m^2Ｋ以下、壁厚さ１０ｍｍ程度の超断熱壁材料および熱貫流率が０．４Ｗ／m^2Ｋ以下、光（可視光）透過率が６５％以上（Ｌｏｗ－Ｅガラス使用）、ヘイズ率が１％以下の超断熱窓材料を実現する。

③研究開発期間

２００７年度～２０１１年度

（３）カーボンナノチューブキャパシタ開発プロジェクト（運営費交付金）（再掲）

①概要

高純度、高密度に配向した長尺の単層カーボンナノチューブの大量合成技術を開発するとともに、これを用いた従来よりも格段にパワー（電力）と蓄電量が大きなキャパシタを開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

２０１０年度までに、単層カーボンナノチューブの高度配向技術及び大量生産技術を確立するとともに、キャパシタ製造技術を確立することで、２０Ｗｈ／Ｋｇの高エネルギー密度と耐久性を有する電気二重層キャパシタを開発する。

③研究開発期間

２００６年度～２０１０年度

（４）革新的省エネセラミクス製造技術開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

小型炉設備で生産可能な小型セラミック中空ユニットを複数組みあわせることで、これまでその製造が難しかった複雑形状かつ大型セラミックス部材を省エネで製作することができる革新的なセラミック部材製造技術を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

２０１３年度までに、高機能化された小さな精密ブロックを立体的に組み上げ、高効率で接合、一体化をし、複雑形状や大型の部材を製造可能とする革新的なプロセス技術の基盤を確立し、高耐性部材、高温断熱部材及び高比剛性部材の試作を行う。

③研究開発期間

２００９年度～２０１３年度

（５）革新的ガラス溶融プロセス技術開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

プラズマ等による高温を利用し瞬時にガラス原料をガラス化することにより、極めて効率的にガラスを気中で溶融（インフライトメルティング法）し省エネに資する革新的ガラス溶融プロセス技術を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

２０１２年度までに、インフライトメルティング法により原料を溶解する技術、カレットをガラス原料として利用するため高効率で加熱する技術、カレット融液とインフライトメルティング法による原料融液とを高速で混合する技術を開発する。

③研究開発期間

２００８年度～２０１２年度

（６）高温超電導電力ケーブル実証プロジェクト（運営費交付金）（再掲）

①概要

革新的な高効率送電技術を確立して高温超電導ケーブルの実用化を促進するため、工業生産プロセスで実用化レベルに達している高温超電導線材（ＤＩ－ＢＳＣＣＯ等）を活用し、首都圏の系統に接続する実証試験及び評価を行う。

なお、本事業は、発電用施設による電気の供給の円滑化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

２０１１年度までに、２００ＭＶＡ級の中間接続部を有した三心一括型高温超電導ケーブルを、冷却装置や保護装置などの付帯設備とともに６６ＫＶ実系統に接続して、１２ヶ月以上の長期連系試験を行うことによって総合的な安全性や信頼性を実証する。

③研究開発期間

２００７年度～２０１２年度

（７）発電プラント用超高純度金属材料の開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

超高純度金属材料を発電設備の蒸気配管等に実用化することを目指し、高純度金属材料の高度化に向けた低コスト・量産化製造技術を開発し、実使用環境における超高純度金属材料の耐久性試験等を行う。

なお、本事業は、発電用施設における電気の供給の円滑化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

２００９年までに、不純物総量１００ｐｐｍ未満、溶解量数１００ｋｇ以上での低コスト・量産化技術製造技術を開発するとともに、製造された超高純度材料が発電プラントの各種機器に適用でき、本材料の持つ優れた特性を長期に亘って発揮できることを確認する。

③研究開発期間

２００５年度～２００９年度

（８）セラミックリアクター開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

低温域かつ高効率なエネルギー変換を可能とする次世代型セラミックリアクターの実現のため、世界最高効率の燃料電池ミクロセルの集積構造技術等の開発を行う。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

２００９年度までに、新電解質材料の適用や電極反応の高効率化等による、低温作動時（６５０℃以下）での出力性能を向上させる材料技術と共に、ミクロセルの集積構造化や精緻なインターフェース構築のための製造プロセス技術を開発。そして、これらの技術を統合することにより、次世代型セラミックリアクターとしてのプロトタイプモジュール実証（出力性能２ｋＷ／Ｌ等）を行う。

③研究開発期間

２００５年度～２００９年度

（ⅱ）資源制約の克服

（１）希少金属代替材料開発プロジェクト（運営費交付金）

①概要

ハイテク製品の製造に不可欠であり世界的な需給逼迫が懸念されるレアメタル（タングステン、インジウム、ディスプロシウム）について、ナノテクノロジー等の最先端技術を活用して、代替材料開発・使用量削減を行う。なお、平成２１年度からは、これまでの対象３鉱種に加えて、白金、セリウム、テルビウム等も研究開発の対象とする。

②技術目標及び達成時期

タングステン、インジウム、ディスプロシウムについては２０１１年度までに、白金、セリウム、テルビウム等については２０１３年度までに、使用原単位について現状と比較して削減ができる製造技術を開発し、ユーザー企業、大学等の外部機関に対して機能

評価のためにラボレベルで提供（試料提供）できる水準に至るまでの技術を確立することを目標とする。また、製品の機能や製造コストは現状と同等であることを少なくとも維持することを前提とする。

〔対象元素〕

・超硬工具向けタングステン（W）
・透明電極向けインジウム（Ｉｎ）
・希土類磁石向けディスプロシウム（Ｄｙ）
・排ガス浄化向け白金族（Ｐｔ）
・精密研磨向けセリウム（Ｃｅ）
・蛍光体向けテルビウム、ユーロピウム（Ｔｂ、EU）

③研究開発期間

２００７年度～２０１３年度

（iii）環境制約の克服

（１）グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発

①概要

化学品等の製造プロセスにおけるシンプル化、クリーン化、原材料・資源の多様化・有効利用、更に、廃棄物の減容化、容易な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等を製造するための必要なＧＳＣ（グリーン・サステイナブルケミストリー）プロセスを開発する。

②技術的目標及び達成時期

２０１５年度までに、有害な化学物質を削減できる又は使わない革新的な製造プロセス及び化学品の開発、廃棄物、副生成物を削減できる革新的な製造プロセス及び化学品の開発、資源生産性を向上できる革新的製造プロセス及び化学品の開発を行う。

③研究開発期間

２００８年度～２０１５年度

（２）革新的マイクロ反応場利用部材技術開発＊（運営費交付金）（再掲）

①概要

マイクロリアクター、ナノ空孔などの精密反応場を利用し、反応分子の自由な運動を活性種レベルで制御した革新的な化学反応プロセスと新機能材料創成技術の確立を目指す。さらに、マイクロリアクターとナノ空孔反応場の組み合わせ、各反応場とマイクロ波等のエネルギー供給手段との組み合わせにより協奏的反応場を構成し、さらなる高効率生産等を可能にする基盤技術を開発する。これらの技術の確立により、反応システムの小型化、多段プロセスの簡略化等を通じた化学産業の製造工程等の省エネルギー化を図る。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術的目標及び達成時期

２０１０年度までに、マイクロリアクター技術、ナノ空孔技術を軸とし、これらに更にマイクロ波、超臨界流体等のエネルギー供給手段を組み合わせた協奏的反応場を構成

することにより、これまでにない革新的な化学反応プロセスを確立し、新機能材料創成技術を実現する。さらに、これらの技術を用いて高性能・高機能電子材料、医薬中間体などの部材を開発する。

③研究開発期間

２００６年度～２０１０年度

（３）循環社会構築型光触媒産業創成プロジェクト（運営費交付金）

①概要

我が国で発見された光触媒技術の新産業分野開拓を目指し、サイエンスにさかのぼることにより、紫外光のみならず、可視光レベルでの性能・機能の飛躍的な向上のための技術基盤を構築する。これにより、従来では困難とされてきた医療関連分野や住宅建材分野、環境関連分野等に光触媒技術を導入し、光触媒の最大のメリットである自然エネルギーを利用した安心・安全な環境を提供できる技術を開発する。

②技術目標及び達成時期

２０１１年度までに、材料レベルで紫外光応答型２倍、可視光応答型１０倍の感度向上を達成し、その高感度光触媒を適用した薄膜プロセス技術の基盤技術を確立する。

③研究開発期間

２００７年度～２０１１年度

（４）高感度環境センサ部材開発＊

①概要

ダイオキシンをはじめとする極微量有害有機物質を超高感度で安価かつ簡易に計測するために、高感度セラミックセンシング材料を用いた環境センサーを開発する。

②技術目標及び達成時期

２０１０年度までに、ダイオキシン類、エストラジオール及びビスフェノールＡについて、０．００１ｎｇ・ｍｌの濃度において有意な電気信号として検出し得る小型・携帯型計測器に挿入可能な寸法のセンサ部材の開発を目標とする。

③研究開発期間

２００６年度～２０１０年度

（５）次世代高信頼性ガスセンサ技術開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

一酸化炭素中毒やガス漏れなどのガス事故を限りなくゼロに近づけるため、センサ素子のナノレベルでのメカニズム解析及び開発設計を行い、コードレスで高信頼性を有する次世代高信頼性ガスセンサ（ＣＯセンサ・メタンセンサ）を開発する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

２０１１年度までに、最先端のナノテクノロジー及びＭＥＭＳ技術を導入し、電池駆動で５年以上の長寿命、高信頼性（数百ｐｐｍ以下の故障率）、低コストなＣＯとメタンのセンサを開発する。

③研究開発期間

２００８年度～２０１１年度

Ｖ．材料・部材領域

極めて広範囲な産業領域に波及する材料・部材領域について、ユーザー製造業等との連携（川上・川下連携）を促進し、高度な部材産業群の「すり合わせ力」を一層強化する。

（１）鉄鋼材料の革新的高強度・高機能化基盤研究開発（運営費交付金）（再掲）

①概要

プラント、構造物や自動車等の革新的な高効率化、省エネルギー化、長寿命化、安全・安心化を図るため、最新の科学的知見を導入し、鉄鋼材料及び鋼構造体を超高機能化する基盤的研究開発を行う。具体的には、高強度鋼、高機能鋼の実用化拡大の基盤となる（１）高級鋼厚板（高強度鋼、極低温用鋼、耐熱鋼）溶接部の信頼性・寿命を大幅に向上する溶接施工技術（高密度・清浄熱源溶接技術）、及び金属組織制御技術を基本とする材料技術（クリープ破壊及び水素破壊の機構解明等を踏まえた）の開発、（２）部材の軽量化を図るために強度、加工性等の最適機能傾斜を付与する機械部品鍛造技術（駆動部材の信頼性確保のための耐疲労破壊特性の向上を踏まえた）の開発を行う。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

２０１１年度までに、高級鋼厚板（高強度鋼・極低温用鋼・耐熱鋼）の溶接を予熱・後熱なしに可能とする溶接技術と材料技術を開発するとともに、傾斜機能部材の鍛造技術を開発する。

③研究開発期間

２００７年度～２０１１年度

（２）超ハイブリッド材料技術開発（運営費交付金）

①概要

従来実現が不可能と考えられていた相反する複数機能（トレードオフ機能）を両立できる材料を、異種素材の組合せ（ハイブリッド化）により実現するための技術を開発する。要素技術として、異種材料間の界面挙動をシミュレーション技術等により解明し、ナノレベルよりもさらに微小な原子・分子レベルでのハイブリッド化構造・配列制御のための合成技術を開発する。従来の単一材料では実現困難であったトレードオフの性能を引き出すことで、自動車用構造材料、パワーデバイス用材料、光学材料等を出口イメージとした、高機能革新部材製造に必要な技術基盤を開発する。

②技術目標及び達成時期

２０１１年度までに、電気・電子材料、光学材料、その他工業材料について従来材料では実現できなかった相反機能を解消するとともに、市場評価が可能な成果物を供試し、市場（ユーザー）から、客観的な実用化研究開発課題を抽出する。また、単なる相反機能の解消ではなく、相反機能を制御・実現する技術を開発する。

③研究開発期間

２００７年度～２０１１年度

（３）先端機能発現型新構造繊維部材基盤技術の開発＊（運営費交付金）

①概要

電界紡糸や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。

②技術的目標及び達成時期

２０１０年度までに、電界紡糸法による繊維高機能化、大型装置化技術およびナノ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。

③研究開発期間

２００６年度～２０１０年度

（４）次世代光波制御材料・素子化技術＊（運営費交付金）（再掲）

①概要

ガラス材料に関する精密モールド技術を確立し、機能性の高い光波制御素子を低コストで生産できるプロセス技術を開発することで部材の小型化・高機能化を図りつつ、省エネを実現する。

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

②技術目標及び達成時期

２０１０年度までにサブ波長レベルの微細構造をガラス表面にモールド成形する技術を実現し、実装可能な具体的なデバイスを作製する。

③研究開発期間

２００６年度～２０１０年度

（５）高機能複合化金属ガラスを用いた革新的部材技術開発（運営費交付金）

①概要

複合化金属ガラス（金属ガラスマトリックス中に第二相として微結晶や微粒子または微小空隙等を分散させたもの）を創製して、次世代高密度記録媒体、超微小モータ用部材および高強度・高導電性電気接点部材を開発する。

②技術目標及び達成時期

２０１１年度までに、複合化金属ガラス合金を創製し、従来の金属ガラス単層合金の持つ優れた特徴に加えて、塑性加工性、硬磁気特性、高電気伝導性等を付与する。この複合化金属ガラスの新規特性を用いて、従来の金属ガラス単層合金では為しえなかった革新的部材の開発を行い、さらに多様な工業製品に応用することで、我が国産業の優位性を確保する。

③研究開発期間

２００７年度～２０１１年度

（６）マグネシウム鍛造部材技術開発プロジェクト＊（運営費交付金）

①概要

マグネシウム合金部材について、製品歩留まりが高く、高耐疲労性を付与する鍛造技術の開発を行う。また、循環型素材としてのマグネシウム合金部材の特性を活かし、リサイクル材の鍛造用ビレット化に係る課題抽出を行う。当該技術開発により、マグネシウム鍛造部材製造技術の基盤を構築し、我が国の家電、自動車等の川下産業の競争力の強化に不可欠な高度部材を供給する。

②技術目標及び達成時期

２０１０年度までに高強度・高耐疲労・加工性に優れたマグネシウム鍛造技術を確立する。

③研究開発期間

２００６年度～２０１０年度

Ⅵ．共通基盤領域

ナノテクノロジー、部材分野の研究開発に必要な加工・計測・解析技術等の共通基盤の確立とともに、リスク不安に対処したリスク管理手法を開発し、社会に貢献する産業化の支援を相互的に推進する。

（１）ナノ粒子の特性評価手法開発（運営費交付金）

①概要

ナノ粒子のキャラクタリゼーション、計測技術の確立とともに、生体影響等評価手法、暴露評価手法及びナノテクノロジーによるリスク不安に対処したリスク管理手法を開発する。

②技術目標及び達成時期

２０１０年度までに、生体影響等評価手法、暴露評価手法及びリスク評価手法を開発し、ナノ粒子のリスク評価及び管理の考え方の提言を行う。

③研究開発期間

２００６年度～２０１０年度

注：＊印のある研究開発プロジェクトは、２００６年度より開始された新産業創造高度部材基盤技術開発の一環として実施しているもの。

５．政策目標の実現に向けた環境整備（関連施策）

ナノテクノロジーは、情報通信、ライフサイエンス、環境、エネルギーなどの分野における科学技術の進歩や課題解決に貢献する重要な技術シーズである。そのため、ナノテクノロジーの研究開発と一体となった関連施策を実施することで、その成果を市場に出していくことが重要である。主な関連施策を、以下に示す。

〔技術戦略マップ〕

・ＮＥＤＯ及び経済産業省では、技術戦略マップを策定、毎年改訂し、ナノテクノロジー・部材分野の将来の方向性を見定めながら、合理的かつ効果的な研究開発プロジェクトを推進している。また、技術戦略マップを活用して、多様な連携（川上川下の垂直連携、異業種間の水平連携など）による研究開発を促進、支援し、当該分野の技術革新を促進している。

〔サンプル提供・実用化促進〕

・ＮＥＤＯでは、実施するナノテクノロジー関連の研究開発プロジェクト成果のサンプルを対象として、それらを活用した用途の開発、実用化ないし製品化提案を有する企業とのマッチングを図ることで、プロジェクトの事業化を促進する取組みを実施している。

〔標準化〕

・経済産業省では、ナノテクノロジー関連の研究開発成果を社会及び市場等に普及するための環境整備として、ナノテクノロジーの標準化活動（ＩＳＯ／ＩＥＣ、ＪＩＳ）を推進している。

〔広報〕

・ナノテクノロジーに関する先端技術及び製品等の世界最大の展示会である「ｎａｎｏ　ｔｅｃｈ」が毎年日本で開催されている。

〔社会受容〕

・ナノテクノロジーの産業化の推進とともに、ナノ粒子のキャラクタリゼーション技術や人の健康や環境に及ぼす影響等の潜在的な課題に関する知見を蓄積する等のナノテクノロジーの社会受容に対する取組みを推進している。

・経済産業省では、２００６年度から「ナノ粒子の特性評価手法開発」を開始し、工業ナノ粒子の有害性評価手法、また、そのリスク評価手法の確立を目標としたプロジェクトを開始しているところ。

・ＯＥＣＤでは、２００６年９月、化学品委員会に工業ナノ材料作業部会（ＷＰＭＮ）が設置され、代表的な１４種の工業ナノ材料について、試験計画の合意と試験実施を目的とする「スポンサーシッププログラム」が実施されている。スポンサーシッププログラム対象物質のうち、カーボンナノチューブ（単層、多層）、フラーレンの３物質については日本が中心となって担当し、「ナノ粒子の特性評価手法開発」等の成果で貢献している。

〔人材育成〕

・経済産業省では、「製造中核人材育成事業」を実施しており、産学連携による波及効果の高い人材育成プログラムを開発、実践している。ナノテクノロジー関連の人材育成プログラムも複数実施している。

（例）ナノテク製造中核人材の養成プログラム

概要：情報家電、燃料電池、ロボット、医療機器、バイオ等の応用分野において、その産業の基盤と創出を支える中堅企業を対象として、「基礎加工技能・技術、特殊な要素技能・技術に習熟し、製造技術の高度化を図る人材」及び「豊富なナノ加工プロセスの知識や先端機器を使いこなすノウハウ等を習熟し、製造現場の技能・技術を統括できす人材」を育成するもの。

・ＮＥＤＯでは、我が国の産業技術の発展のため、先端分野や融合分野の技術を支える人材の育成と、人的交流の面から産学連携を促進するための「場」の形成を促進する取組みを実施している（ＮＥＤＯ特別講座）。具体的には、優れた成果を生み出しつつあり、大学が技術の中核となっている研究開発プロジェクトをコアプロジェクトとし、そのプロジェクトリーダーの所属大学に拠点を設置し、関連技術の人材育成、人的交流の拡大、周辺研究の実施を行うもの。ナノテクノロジー関連の研究開発プロジェクトも複数実施している。

〔関係機関との連携〕

・ナノエレクトロニクス半導体新材料・新構造技術開発ーうち新材料・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。

P09010

（ナノテク・部材イノベーションプログラム）

「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発」基本計画

環境部

電子・材料・ナノテクノロジー部

1. 研究開発の目的・目標・内容

(1) 研究開発の目的

我が国の化学品製造産業は、国際的に高い技術力と競争力を有し、経済社会の発展を支えているが、地球温暖化問題、資源枯渇問題が現実化しつつある中で様々な課題を抱えてもいる。製造に際しては、有害な添加物(ハロゲン、重金属等)の利用、過度の高機能化追求にともなうプロセスの多段化等によるエネルギー消費の増大、中間工程における廃棄物の大量排出、リサイクルに不向きな製品の大量廃棄(廃棄処分場の不足等)などが問題となっている。一方、生産に必要な多くの原材料等は限られた産出国からの輸入に頼らざる得ない状況にあり、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、容易なリ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リサイクル率(カスケードリサイクル含む)向上、軽量化、長寿命化等の大幅な改善が見込めること。

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リサイクル率(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、容易なリ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・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発」として実施された研究開発項目①、②については、平成 21 年度よりNEDOの事業として平成 23 年度まで実施す

る。研究開発項目③については、平成21年度よりNEDOの事業として平成25年度まで実施する。「明日の安心と成長のための緊急経済対策（平成21年度補正予算（第2号））」により実施した研究開発項目④については、平成22年度補正予算(第1号)等による追加予算の充当にともない、研究内容の見直し及び期間延長を行ない平成 21 年度から平成 25 年度までの計画とする。平成24 年度以降の目標・計画については、研究開発費の確保状況、当該研究開発の進捗状況等を総合的に勘案し、見直しを行う。

4. 評価に関する事項

NEDOは、技術的及び産業技術政策的観点から、研究開発の意義、目標達成度、成果の技術的意義並びに将来の産業への波及効果等について、研究開発テーマ(研究開発項目①、②、③-1、③-2、③-3)毎に中間評価を事業開始3年目(5年以上の研究期間を有する研究開発テーマ)に、事後評価を終了年度の次年度にそれぞれ外部有識者により実施する。研究開発項目④－1、④－2、④－3については、平成 23 年度に事後評価を行う。④－4、④－5については、事後評価を終了年度の次年度に外部有識者により実施する。また、本研究開発全体の事後評価は全ての研究開発テーマが終了した次年度に実施する。なお、評価の時期については、当該研究開発に係わる技術動向、政策動向や当該研究開発の進捗状況等に応じて、前倒しする等、適宜見直すものとする。

5. その他の重要事項

(1) 研究成果の取扱い

NEDOは、研究開発実施者に対して、研究成果の広範な導入・普及に努めるものとする。

(2) 知的基盤整備事業又は標準化等との連携

得られた研究開発の成果については、知的基盤整備又は標準化等との連携を図るため、データベースへのデータの提供、標準案の提案等を積極的に行う。

(3) 知的財産権の帰属

研究開発の成果に関わる知的財産権については、「独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構　新エネルギー・産業技術業務方法書」第 25 条の規定等に基づき、原則として、全て受託者に帰属させることとする。

(4) 基本計画の変更

NEDOは研究開発内容の妥当性を確保するため、社会・経済的状況、研究開発動向、産業技術政策動向、第三者による評価結果、研究開発費の状況、当該研究開発の進捗等を総合的に勘案し、達成目標、実施期間、研究体制等、基本計画の見直しを弾力的に行うことができるものとする。

(5) 根拠法

本プロジェクトは独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構法第十五条第1項第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充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(種結晶がつきやすい)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となるデータを収集する。
- 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ムテムの最適化や、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1～8×10^{-9} mol/(m^2 s Pa)であるのに対し、同透過度が 8×10^{-8} mol/(m^2 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/(m^2 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/(m^2 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/(m^2 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 m^2 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 0.3m^2 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-CO_2/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 CO_2 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 CO_2 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、CO_2 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 N_2、N_2O、CH_4、C_2H_6、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、CO_2 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 CO_2)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 CO_2 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（CO_2 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 CO_2 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(CO_2 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て、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て、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

（持続的社会のための環境共生化学）

我が国の素材・部材製造産業は、国際的に高い技術力と競争力を有し、経済社会の発展を支えているが、地球温暖化問題、資源枯渇問題が現実化しつつある中で様々な課題を抱えてもいる。製造に際しては、有害な添加物（ハロゲン、重金属等）の利用、過度の高機能化追求に伴うプロセスの多段化等によるエネルギー消費の増大、中間工程における大量の廃棄物排出、リサイクルに不向きな製品の大量廃棄（廃棄処分場の不足等）などが問題となっている。一方、生産に必要な多くの原材料等は限られた産出国からの輸入に頼らざるを得ない状況にあり、将来にわたって安定に製造できるかどうか危惧されている。さらに、欧州での RoHS 指令、REACH 規制の導入や中国などでの自主的な化学物質排出規制の制定など、化学品等の製造に係わる環境対策が世界的に強化されている。

このような背景の下、我が国の全産業の基幹となる化学品等を持続的（サステイナブル）に生産、供給していくためには、これまでの大量消費・廃棄型生産プロセスから脱却して、持続的な生産が可能なプロセスによる供給体制の構築が急がれる。そこで本ロードマップは、エネルギー、資源制約問題を克服し、環境との共生を図ると同時に生活の質の向上をめざすことで安全・安心で競争力のある持続型社会を構築するための化学技術、すなわちグリーン・サステイナブルケミストリー（GSC）を実現するために必要な要素技術を抽出し、これらの制約条件や競争力や基盤性といった観点から重要技術を選定するとともに、今後の技術の発展を描いた。

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術戦略マップ

Ⅰ．導入シナリオ

（1）GSC 分野の目標と将来実現する社会像

化学産業は、社会のニーズに応えて有用な製品を製造し、資源の不足や枯渇と戦い、環境問題に直面しつつそれを克服してきた。

GSC とは、エネルギー、資源制約を克服して、環境との共生を図ると同時に、生活の質の向上を目指して、安全・安心で競争力のある持続可能な社会を構築するための化学技術の体系【参考資料 1：GSC 概念図】であり、今後の化学産業の発展に大きな役割が期待される。

今後の社会変化の様々な可能性【参考資料 2：GSC を推進させる 2050 年までの背景】に国家として対応できるよう、GSC を国家の将来の化学分野における戦略的テーマに据え、その競争力を担保するための目標と将来社会像について示す。

＜将来の資源・エネルギー制約と GSC の目標＞

世界的に地球温暖化防止への動きが加速している観点から、大幅な CO_2 削減への対応が検討されている。産業界においても、より一層の省エネルギー、CO_2 削減が求められている。この観点から化学産業としても、今まで以上に省エネルギー、CO_2 削減への対応が求められる。一方、これまで依存してきた原油価格は確実に上昇していくことは避けられない。長期的には、現 OECD 諸国のエネルギー需要は、将来、人口の多いアジア・アフリカ地域に追い越されると予想される。このような状況により、今後日本は、これまでどおり高品質の原油を安定的に購入することが難しくなり、重質で硫黄や重金属等の多い低品位の原油を扱っていかなければならないと予想される。

また、原料としては、炭化水素以外の元素も重要であり、高機能部材を支えているものも多い。それらの中には、将来の枯渇が危ぶまれるものや、産出国が偏在しているものがある。これら資源の供給が政変等で止まる事態となれば、高機能部材を収益源とする日本の化学産業の競争力は、言うまでもなく、日本経済自体に打撃を与える恐れがある。希少資源の供給断絶事例は、実際に過去に起きている。

以上を鑑みると、日本としては、地球温暖化防止のために、より一層の省エネルギー技術、CO_2 削減技術や資源安全保障の確保のための資源・エネルギーの効率的利用技術、リサイクル技術、代替技術が必須である。短期的には省エネルギー技術、資源リサイクル技術や、重質化・低品位化する原油をクリーンかつ効率的に利用していく技術が必要である。しかし、リサイクルにも限界があり、中期的には代替技術に移行していくこととなる。また、遠い将来には究極的な CO_2 削減につながる技術や石油資源のピークが訪れることから、原料の革新的な変換技術が必要である。

＜将来の環境との共生と GSC の目標＞

持続可能な開発に関する世界首脳会議において合意されたヨハネスブルグ宣言の

2020年の目標実現に向け、引き続き、大気汚染防止、水質汚濁防止、産業廃棄物処理、土壌汚染防止を進めていくことが求められる。

一方で、欧州のRoHSやREACHに代表される化学物質規制の動きは、日本からの進出企業や輸入品への規制等を通じて我が国にも影響するものであるが、さらに中国等で類似の規制の導入を呼ぶこととなった。今後、この動きが世界に広がって「標準的」な規制になっていくのか、注視が必要である。

日本としても化審法、化管法が改正されたことを受けて、これらの規制に適切に対応するとともに、このような規制を先取りして対応しうる技術開発をしていくことが必要である。

＜将来の生活の質の向上とGSCの目標＞

将来の生活の質の向上について、短期・中期・長期に分けると次のようになる。

短期的にはまず、我々の生活環境のリスクのさらなる低減が望まれる。具体的には、衣食住におけるリスクの低減（例：シックハウス症候群への対応）、交通や通信などのもたらす環境負荷の低減、廃棄物削減（製品の再利用・長寿命化・軽量化等）等が挙げられる。

このような短期的なリスクの低減に加え、中期的にはアメニティを積極的に向上する方向に進んでいくことが望まれる。特に、今後、少子高齢化が進むことから、個人の行動を支援し、充実した暮らしができるようにしていくことが望まれる（バリアフリー化、福祉対応製品等）。

さらに、長期的には、アメニティの向上と言っても快適性や利便性の一方的な追求だけでは過去の大量生産・大量消費・大量廃棄と同じでサステイナビリティを実現できないので、国のレベルでは社会経済システムの変革、個人のレベルではライフスタイルや価値観の転換が求められることとなる。

以上を鑑みると、GSCにおいても、社会ニーズに応えて快適性や利便性を実現していく際に、資源・エネルギーの浪費や環境負荷の増大を招かないような技術開発が不可欠である。

＜将来の化学産業＞

BRICs 台頭の中で国際競争は激化し、“今日のファインは明日のバルク”という状況となってくる。

日本には、ファインケミカルズを中心とする高機能部材の集積と川下産業との摺り合わせにより、強い競争力を有する分野がある。しかし、今後も継続的に、革新的なプロセス、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、より広い視点を化学産業としてとらえ、産業間連携を拡大していく必要がある（これは省エネ・省資源や摺り合わせ強化にも資すると考えられる）。

いまや日本の化学企業の海外移転は不可避の流れであるが、国内はファインケミカルズの新しい技術・製品の発明のセンターとなっていく必要がある。一方で、バルク

ケミカルズは、そこからファインケミカルズが作られていく基礎原料であり、全てを海外移転していくと、生産国の事情で供給が不安定になった場合、日本の化学工業は打撃を受けることとなる。このような事態を防ぐため、バルクケミカルズも一定以上の生産を残し、その生産性を向上させていく必要がある。

＜GSCの短期・中期・長期の目標＞

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

すなわち、短期的には、喫緊の問題として省エネルギー、CO_2削減を考慮しながら、グリーンの方向性（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向性（有害物質、希少元素の代替）、さらに長期的には、グリーン・サステイナブルの方向性（快適でサステイナブルな生活を実現する新しい材料の開発、原料の革新的転換）とした。

なお、これらの目標を達成するために、プロセス(How to make)及びマテリアル(What to make)の両面でイノベーションが必要となる。特にマテリアルは、その機能によって社会の発展や生活の質の向上に直接的に貢献するものであるが、グリーン・サステイナビリティの観点からは、マテリアルを製造するときだけでなく、ユーザに使われるときの効果が重要となる。すなわち、マテリアルの場合、ライフサイクルでみたときの環境への優しさが重要となる。具体的に化学産業における、GSCの典型的な実績を例示した。【参考資料3-1～3-3：GSCの実績例】

（２）研究開発の取組

研究開発の推進については、開発目標を戦略的に設定するとともに、効率的な研究開発体制の構築が重要である。特に、今後予想される様々な社会変化に対応するためには、持続的発展が可能となるプロセス及び製品のイノベーションに資する革新的な化学技術の開発を行うことが必要である。以上に鑑み、経済産業省・NEDOでは、GSCの名称を冠した我が国初の国家プロジェクト「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発」を2008年度より実施するに至った。同プロジェクトの目標として、①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発、②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発、③資源生産性を向上できる革新的プロセス及び化学品の開発、を掲げている。これらの目標を達成することにより、我が国全体の産業競争力強化と環境負荷低減を飛躍的に促進することができ、新産業創造戦略及び世界全体をリードしたサステイナブルな産業構造構築への貢献も期待できる。

（３）関連施策の取組

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の目標や将来像を実現するためには、研究開発と並行して技術を定量的に評価できる基準の開発、産学官連携、国際連携を推進する制度、体制の充実が必要である。

〔基準・標準化〕

GSCの普及を図るためには、感覚に訴える言葉を発するだけではなく、定量的に技術を評価する必要がある。環境負荷、有害性・安全性、経済性・社会性という評価尺度が異なるものを、評価の目的にあわせて正しく評価する必要がある。経済産業省では、GSCの効果を正しく把握するために、グリーン・サステイナブルケミストリーネットワーク(GSCN)を通じ、GSC賞の評価手法に取り入れるなど、実務面の評価を加えつつ、GSC評価手法（例えばi-Messe）の開発と標準化を推進している。

〔産学官連携〕

日本における グリーン・サステイナブルケミストリーの活動を効果的かつ強力に推進するために、2000 年3 月に化学系の学協会、独法研究機関など25団体によって「グリーン・サステイナブルケミストリーネットワーク(GSCN)」が設立された。ここでは、研究開発推進上の諸課題と提言、GSC 賞の贈呈、ワークショップ・シンポジウム開催、教材作成、教育支援、国際交流などを展開している。経済産業省はGSCNにオブザーバーとして参加し、GSC賞における経済産業大臣賞の設置やシンポジウムの支援等を行っている。これら活動を通して、GSCN を産学官連携のコアのひとつとして、GSC の概念だけでなく、GSC技術の産業界への普及を図っている

（4）海外での取組

1992 年のリオ宣言を契機として持続可能な発展（Sustainable Development）のための取組が各国で開始される中、日米欧が中心となって化学分野でのその取組は活発に活動されている。

米国では、1995 年にEPA によりGreen Chemistry（GC）が提案され、GC12カ条が打ち出されている。また、GCの大統領賞が創設されている。

欧州でも、米国とほぼ時を同じくして、産業界を中心としてSustainable Chemistryが推進されている。1994年には、CEFIC（欧州化学工業連盟）によりSUSTECHが設立されている。2004年には、CEFICやEuropaBio（欧州バイオ産業協会）等により、技術開発のプラットホームとして SusChem（The European Technology Platform for Sustainable Chemistry ）が設立され、2007年以降のEUの科学技術5ヵ年計画（FP7）の重点技術分野を策定することとなった。SusChem では、「製品のライフサイクルはどんどん短くなっており、スペシャリティも急速にコモディティになってしまう」 との意識や、このままでは日米アジアに押されてしまうことへの危機感の下、①マテリアルテクノロジー、②反応、プロセス設計、③バイオ工業テクノロジー、④革新のフレームワークと経済的成果、の 4 分野について、目指すべき方向性（ビジョン）が示されている。また、「Strategic Research Agenda 2005」により、具体的に技術開発すべき項目が列挙されている 。

1998 年には OECD で Sustainable Chemistry（SC）活動が開始され、日米欧が中心となって、研究開発のガイダンス作成や教育支援等が行われてきている。欧州委員会

では、規制面においてサステイナブルな生産と消費のための実行計画を検討中、現時点ではいくつかのの規制ツールや、よりソフトなボランティアプログラムを考えている。また、環境技術実行計画のもと国家レベルの環境技術のためのロードマップを現在までに22カ国が策定している。

（5）改訂のポイント

- GSC分野の目標と将来実現する社会像において、最近の情勢を踏まえたCO2削減の必要性について言及した。

Ⅱ．技術マップ

（1）技術マップ

わが国の素材・部材産業が、全産業の基幹となる化学品等を持続的(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、および、持続可能な社会に対応したマテリアルの開発が急がれる。そのためには、プロセス及びマテリアルの両面でイノベーションが必須であることから、2050 年までの中長期における両分野のイノベーションの対象となる技術課題を、目標の実現のために設定したサステイナビリティーに関する4分野、すなわち、エネルギー制約からの脱却（エネルギーと略す)、資源制約からの脱却（資源と略す)、環境との共生（環境と略す)、さらに生活の質の向上（生活と略す)に分別して収録した。また、その抽出の過程で、4分野が相互に重なり合う領域について 4 分野共通というカテゴリーを設け、さらに全ての分野に技術の基盤として関わりをもつものを、新たに共通基盤技術として加えた。共通基盤技術は、昨年度は技術俯瞰図には基盤技術として全分野に共通の枠組みとして取り上げていたが、技術マップには載せていなかったものである。また、本年度の調査として、将来にわたり GSC 技術の波及効果の大きいと思われる分野を抽出した中で、昨年度は重要とされていなかった IT に関する 2 件の技術項目「IT 向け化学品（電子材料)」、「微細構造・精密構造形成技術」について、重要技術項目に加えた。

（2）重要技術の考え方

「クリーン化、シンプル化、省エネルギーを実現するための新規プロセス、マテリアルの創生につながるような国内外の革新的な要素技術」および「廃棄物の減容化、容易なリサイクル、原材料多様化を実現するための新規プロセス、マテリアルの創生につながるような国内外の革新的な要素技術」の観点から広く調査、収集され、分類された2009年度の技術テーマを踏襲し、本年度ローリング作業のベースとした。

技術項目および技術テーマの評価にあたっては、①省エネ効果、②原料多様化、③有害物質削減量、④廃棄物排出減、⑤温室効果ガス削減効果、⑥生活向上度の6つの指標からなる「グリーン・サステイナブルケミストリー(GSC)評価」および①市場規模、

②付加価値率、③コスト削減、④機能向上、⑤他分野への波及効果の5つの指標からなる「産業競争力・創設力評価」を活用した。また、選定された重要技術項目について俯瞰図を作成し、安全・安心で競争力のある持続型社会を構築するための化学技術の役割をわかりやすく表現した。以下は、各分野で抽出した各分野における26件の重要技術項目の一覧である

○ エネルギー
- グリーン製造化学プロセス
- 熱エネルギー高効率変換利用技術
- 再生可能エネルギー
- 高効率水素製造
- IT向け化学品（電子材料）

○ 資源
- 低品位資源利用技術
- 次世代蓄電材料技術
- 稀少金属の有効利用と代替材料技術
- 非枯渇性資源の化学品・材料化
- 易リサイクル加工用材料とプロセス
- CO_2分離・回収・利用技術
- 微細構造・精密構造形成技術

○ 環境
- ハザード管理されたハロゲン製品
- 製造工程廃棄物・副生物の大幅削減
- 環境負荷が小さい製品
- 環境負荷が小さい加工プロセス
- 革新的燃焼による大気環境の保全

○ 生活
- 日用品の快適性向上と低消費化
- 食の安全と量の確保
- 快適な省資源型ロングライフ住宅
- 容易で安全な医療・介護と身体機能補助

○ 4分野共通
- 輸送システム（低環境負荷・高利便性交通輸送システム）
- 水（良質な水資源確保システム）

○ 共通基盤技術
- 分析化学
- 計算科学

・　環境評価

（3）改訂のポイント

- 昨年度の技術マップには載せていなかった技術項目の「共通基盤技術」とそれに関する技術テーマを加えた。
- 本年度の GSC 技術の展望として議論した 6 テーマの中で、IT 関連分野をその一つとし、これに該当する技術項目、技術テーマを新たに重要項目、重要技術テーマに加え、他と同様グレー、ローズ色で示した。
- その他には、研究課題について、適宜追加をおこなった。

Ⅲ．技術ロードマップ

（1）技術ロードマップ

技術マップに記載した技術テーマの中で各重要技術項目における重要技術テーマとして選定したものに関して「GSC 評価」、および「産業競争力・創設力評価」を実施した。評価方法は 2009 年度のデータを参考に 3 段階で再評価を実施した。その結果をレーダー図に示し、技術ロードマップとともに各頁ごとにまとめて掲載した。また「技術の概要」と「技術優位性」についても解説し、技術内容理解のための助けとした。

当該テーマが中期（2020 年以降）、長期（2030 年以降）のいずれの時間軸を前提にしたものであるかを考慮し、記述にもできうる限り反映させた。また、基礎研究から事業化・市場導入の間に必然的に経由する数段階の状況を、現時点で可能な範囲でイメージとして示せるよう心がけた。

（2）改訂のポイント

- 重要技術項目毎に対象となる重要技術テーマを 1 ページにまとめ、内容を理解しやすいものとすることを狙った。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、以下の 4 つの説明のための欄を更新した。
- 各欄の内容は次のとおりであり、評価項目の更新にあわせて、新たな評価を行い、レーダー図を更新した。
  - 「技術の概要」：重要技術テーマについて概要を説明
  - 「技術優位性」：重要技術テーマについての日本あるいは、日本企業の国際的な優位性についてコメント
  - 「GSC 評価」：各重要技術テーマについて 3 段階で各項目につき技術評価し、その結果をレーダー図に表すとともにコメント
  - 「産業競争力・創設力評価」：産業競争力や創設力について 3 段階で各項目について評価し、その結果をレーダー図に表すとともにコメント

Ⅳ．その他の改訂のポイント

○ GSC 技術の展望

GSC 技術によって持続可能な社会を実現していくために、「GSC 技術の展望」として、GSC に関する技術 6 件を以下に取り上げ例示し、わかり易いイメージ図で示した【参考資料 4：GSC 技術の展望】【参考資料 5：革新的重要技術テーマ】。

- Green Agriculture（食糧資源に貢献する環境適応型肥料および農薬）
- Green Biomass（バイオマスからの化学品製造）
- Green Electronic Storage（電気エネルギーの貯蔵）
- Green Information Electronics（半導体製造向け化学製品）
- Green Process（環境負荷の小さい化学品製造プロセス）
- Green Sustainable Housing（快適で長持ちする省エネ型住宅）

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の導入シナリオ

2010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(農業、住居、水、交通、IT等)、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、長寿命製品）

関連施策

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)）
①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
②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
③教育：教材作成、教育支援、
④国際交流

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
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

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

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

目標

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

赤字は 2010 年変更箇所

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（1／11）

サステイナビリティー	技術項目（グレーは重要技術項目）	（ローズ色は重要テーマ）2010	テーマ名（茶色：プロセスイノベーション 青色：マテリアルイノベーション）	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小：数万トン未満 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
エネルギー	グリーン製造化学プロセス	G001	革新的省エネ型化学分離プロセス	・高配向性(ゼオライト、酸化物等)による蒸留、抽出、吸着分離、膜過プロセスへの導入 ・新規炭素系ガス分離材、MOF等有機金属分離材 ・省エネ蒸留塔（HIDiC）適用系等の実用化プロセス技術開発	省エネ、省資源	大	中期	1,000	基礎化学(蒸留、PSA、脱水)プロセス、水処理等広範囲
		G002	グリーン酸化プロセスの開発	・過酸化水素,空気酸化用多成分系触媒 ・直接法フェノール、パラフィン酸化、活性酸素包接化合物利用等 ・直接法過酸化水素製造技術,活性酸素包接化合物利用等 ・ナノ、マイクロバブルを用いた酸化反応	省エネ資源多様化産業競争力	大	短期、中期	1,000	化粧品、医薬品、電子材料、接着剤、封止材、環境浄化触媒
		G003	電磁エネルギー利用高効率化学合成プロセス	・マイクロ波、高周波、プラズマ等の利用 ・誘電体触媒等による無溶媒プロセス	省エネ、省資源	中	短期、中期	500	医薬品原体、電子材料、香料、添加剤、プラスチック等
		G004	分離・反応一体型リアクタープロセス	・界面活性剤型触媒、相間性移動触媒の開発 ・MOF等有機金属錯体の開発 ・非平衡反応分離型（気体分離、液体分離、 イオン交換、電気透析、逆浸透等)プロセス ・分離性能と反応性能のマッチング最適設計	省エネ資源確保産業競争力	大	短期、中期	1,000	化学品製造、医薬品原体、電子材料、香料、添加剤、水処理等広範囲
		G005	マイクロリアクタープロセス	・ナノ空孔、協奏的反応場等反応制御技術 ・マイクロリアクターを利用したプラント技術 ・細溝化技術 ・キャビラリーを用いた無触媒精密重合プロセス	省エネ、省資源	中	中期	100	医薬品原体、電子材料、香料、添加剤等
		G006	精密制御高分子製造	・汎用モノマーの精密重合プロセス：メタロセン触媒、リビング重合などによる重合プロセス設計 ・高性能機能化学品の製造	省エネ、省資源	大	中期、長期	1,000	化粧品、電子材料、接着剤、封止材等高分子関連産業
		G007	低環境負荷型縮合系高分子製造技術	・新規触媒、選択加熱、新媒体利用等によるプロセス ・透明、長寿命、省資源材料プロセス ・新規原料モノマーの利用	資源確保産業競争力	中	中期、長期	500	樹脂成型物（電機電子、自動車等）
		G008	高純度金属ケイ素の省資源省エネ製造プロセスの開発	・非ハロゲン法プロセス ・ノンハロゲン高純度金属ケイ素製造法	省エネ、省資源	大	中期	1,000	太陽電池、半導体、電子産業
		G009	有機分子触媒	・不斉合成、相間移動触媒、水系触媒、酸塩基触媒、酵素触媒等 ・有機合成の触媒反応プロセス(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	・海水からのトリウム捕集材 ・固体分離回収、気体分離、触媒膜等による資源回収	資源確保産業競争力	小	中期、長期	100	化学分離、精製プロセス、金属・非鉄金属、電子材料等
	熱エネルギー高効率変換利用技術	G011	低品位排熱の蓄熱・輸送、回収材料、及び熱変換プロセスの開発	・合成糖類(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、カリーナサイクル ・Ca,Mg塩等の水和・脱水によるオンサイト蓄熱システム	利用効率の向上	大	短期、中期	1,000	熱供給業、ガス業、集合住宅・公共施設、ゴミ処理場における給熱給湯、冷熱
		G012	低温排熱エネルギー変換用熱電変換材料の開発	・ポストBi-Te系、Zn-Sb系、多成分、クラスター系新規材料 ・有機系熱電変換材料開発、無機材料：Mg2Si他 ・熱交換器塗布型高分子、易加工材(無機/有機系複合材料)	利用効率の向上	小	長期	500	製造業(化学、セメント、石油等)、電気業、ゴミ処理場における給熱給湯、冷熱
		G013	化学エネルギー変換高密度蓄熱材料・触媒・プロセスの開発	・アルコール、芳香族、多環芳香族化合物の水素化、脱水素反応用触媒(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	・新規炭素材料（DLC等）、無機・有機ハイブリッド表面コーティング、ナノ潤滑剤等 ・潤滑油のトライボロジーによる省エネ、高寿命材料, ・固体表面のナノレベル分子配向制御	利用効率の向上	中	短期、中期	1,000	機械、エネルギー、一般製造業等広範囲
		G015	高性能デシカント空調用高湿潤吸着材料の開発	・既存除湿冷房とのハイブリット用吸着材料 ・高性能ゼオライト、シリカゲル、高分子ポリマー、多孔性配位高分子等 ・高濃度水溶性塩系材料(アンモニウム塩系等) ・ヒートポンプへの組み込み	利用効率の向上	大	短期、中期	500	空調設備、熱供給業、集合住宅、ショッピングセンター、コンビニ等関連産業
	再生可能エネルギー	G016	風力発電用新規材料の開発	・ポリプロピレン系高強度、軽量材料 ・オンサイト小型発電システム ・メンテ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	・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	オフィース、住宅、オンサイト小型発電、街路灯等
		G018	薄膜シリコン型太陽電池材料の開発	・高効率アモルファス、微結晶シリコン材料 ・オンサイト小型発電システム：系統連携とのマッチング	新エネルギー	中	中期	1,000	照明、電子材料、住宅、オンサイトエネルギー産業

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術マップ（2／11）

サステイナビリティー	技術項目（グレーは重要技術項目）	（ローズ色は重要テーマ）2010	テーマ名（茶色；プロセスイノベーション 青色：マテリアルイノベーション）	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小：数万トン未満 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
エネルギー	再生可能エネルギー	G019	有機半導体型太陽電池材料の開発	・p型半導体ポリマー、n型フラーレン等 ・家電等補助電源用システム ・発電のカスケード利用等材料の開発 ・マルチスケールコーティング＆パターニング技術を用いた周辺技術の開発	新エネルギー	中	中期	1,000	照明、電子材料、住宅、オンサイトエネルギー産業
		G020	燃料電池（PEFC・SOFC）用新規材料の開発	・低価格化、普及を目的にPt代替電極、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	電気産業、ガス産業、住宅、移動体（自動車、バス等）
		G021	ハイブリッド太陽電池材料及び次世代ナノ材料太陽電池材料の開発	・有機系、無機・有機複合化合物、クラスター金属利用高効率半導体（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
	高効率水素製造	G022	高効率水素製造技術の開発	・高温水蒸気電解等 ・改質炉伝熱性向上技術 ・太陽光利用光触媒、原子炉熱利用技術 ・MOF等有機金属錯体の開発 ・オンサイトとオフサイト双方での製造・輸送技術	エネルギー転換	大	短期、中期	1,000	石油化学産業、ガス産業、移動体（自動車、バス等）
		G023	水素貯蔵・輸送技術の開発	・合金ナノ粒子、有機金属材料による高密度貯蔵材料 ・超高圧ガス容器不要の貯蔵、輸送技術 ・水素利用社会インフラ整備のための安全性技術 ・水素/都市ガス共通パイプライン利用技術（膜） ・有機ハイドレート	インフラ整備	大	中期、長期	1000	石油化学産業、電気産業、ガス産業、住宅、移動体（自動車、バス等）
	代替材料（軽量・高強度材料）	G024	新規コンポジット樹脂材料の開発	・CFRP、炭素、無機有機ハイブリット材料 ・セルロースナノファイバの高次構造を活かしたコンポジット樹脂材料 ・軽量・高強度・難燃性かつ成形性・加工性・リサイクル性に優れたコンポジット樹脂材料	省エネ、長寿命	中	短期、中期	1,000	建材、電子材料、機械材料、医療、パソコン等
		G025	超耐熱性、強度等を有する新規材料（ポリオレフィン類等）の開発（再掲）	・ポストメタロセン触媒、コモノマー材料 ・金属・高分子ハイブリット材料 ・高密度、易加工ポリオレフィン材料の開発	省エネ、長寿命	大	短期、中期	1,000	建材、電子材料、機械材料、医療、輸送材料等
		G026	金属代替超軽量材料の開発	・有機無機ハイブリッド材料 ・超高密度高分子材 ・超軽量、超高強度を有する航空宇宙材料 ・導電性高分子材料	代替材料	大	中期、長期	1,000	建材、電子材料、機械材料、航空機及び自動車等筐体等
		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	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）	・コモノマー、ハイブリットモノマー利用材料・樹脂 ・超臨界ガス利用による発泡・加工 ・熱可塑性設計によるリサイクル材料	利用効率の向上	大	中期	1,000	建材、電子材料、機械材料、医療、輸送材料等
		G029	機能性接合、接着剤の開発	・高性能金属一樹脂接合材料 ・表面修飾、界面改質による接着機能向上	機能性向上	小	中期	500	機械材料、金属・樹脂加工等広範囲
		G030	薄膜塗装技術による防食材料の開発	・マグネ表面処理用脂環族モノマー等共重合材料 ・連続加工、塗装プロセス	機能性向上	小	短期	500	電子部品、パソコン・家電筐体、携帯電話、自動車部品等
	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 ・バイオミメティック材料	機能性向上	中	中期、長期	500	医療、電子材料、機械材料、医療、輸送材料等
		G032	ノンフロン断熱・保温・保冷物質の開発（再掲）	・ポスト代替フロン断熱材料 ・超臨界CO_2利用空調システム ・環境への負荷がない新規保冷物質 ・低温暖化係数、低オゾン層破壊、環境適合型新規フロン化合物	ヒートアイランド対策	大	短期、中期	1,000	空調、建材
		G033	多孔質断熱材料の開発（再掲）	・廃土木資材利用による断熱材料 ・廃プラスチック利用多孔質断熱材料 ・廃建材利用による断熱材料 ・多孔質樹脂、バイオマスアロイを利用した断熱材	省エネ、長寿命	大	短期、中期	1,000	空調、建材
		G034	易リサイクル性断熱部材の開発（再掲）	・高断熱性成形樹脂、無機断熱材料 ・バイオ樹脂、バイオマスアロイを用いた易リサイクル性断熱部材 ・材料カスケードプロセス	省エネ、廃棄物削減	中	短期、中期	1,000	製造業（化学、石油、セメント、機械加工等）、空調、建材、
		G035	省電力照明材料の開発（再掲）	・超微量レアメタルによる次世代LED、有機EL、無機EL等材料 ・低価格発光材料の開発による普及：ZnO薄膜、ナノ材料	省エネ	大	短期、中期	1,000	街灯、ビル照明、コンビナート、住宅等
		G036	低摩擦性材料の開発	・添加剤、界面修飾による低摩耗タイヤ ・低摩擦性による省エネ効果 ・低摩擦潤滑剤の長寿命化	長寿命、廃棄物削減	中	短期、中期	1,000	自動車、移動体

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術マップ（3／11）

サステイナビリティー	技術項目（グレーは重要技術項目）	（ローズ色は重要テーマ）2010	テーマ名（茶色：プロセスイノベーション 青色：マテリアルイノベーション）	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小：数万トン未満 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
エネルギー		G037	新型高温超伝導材料の開発	・有機金属化合物系、有機・無機ハイブリット複合材料 ・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
	IT向け化学品（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、パワー半導体等の開発	・無機有機複合材料、ハイブリッド、ナノコンポジット等による高性能IT材料 ・ノンハロゲン系絶縁有機材料 ・SiC、GaN等次世代パワー半導体材料	機能性向上、廃棄物削減	小	短期、中期	500	電気・電子・精密機器関連産業
		G040	超高密度超ナノ情報素子材料の開発	・量子ナノデバイス、統合量子シリコンチップ等 ・スピントロニクス素子材料	機能性向上	小	短期、中期	500	コンピュータ・情報電子関連産業
	原子力	G041	廃棄物の高効率減容化、リサイクル技術の開発	・化学処理、超臨界利用等による放射能被爆材料の減容化	廃棄物削減	大	短期、中期	1,000	電力供給産業
	耐熱・伝熱材料	G042	新規高伝熱材、熱損失抑制用材料の開発	・超合金による複合材の高密度発泡、超耐熱（1000℃超）材料 ・非金属、炭素材料による耐熱材料	省エネ	中	中期、長期	500	建材、プラント、エネルギー
	エネルギー変換・活用材料	G043	高分子アクチュエータの開発	・機能性たんぱく質、機能性ポリマーの開発 ・ナノセンサーとの組み合わせによりマイクロマシン	機能性向上	中	中期、長期	1,000	精密機器・ロボット・マイクロマシン関連産業
資源	低品位資源利用技術	G044	バイオマス、未利用有機資源からの合成ガス・化学品の製造	・環境負荷の小さい原材料前処理技術 ・安定原料確保のための原料供給・利活用モデル ・化学品原料向けGTL（低鎖長留分、オレフィンリッチ） ・DME直接合成/間接合成、エタノール及びエタノール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	・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	・脱硫、脱窒素系触媒 ・低温水素化分解触媒 ・コンデンセート、重質油、石油コークス、オイルサンド等分解プロセス ・蒸留分離以外の分離プロセス（物理吸着・吸収、化学吸着・吸収、分離膜）、 マイクロチャネル伝熱利用分離	資源確保 産業競争力	大	短期、中期	1,000	石化基礎化学品産業
		G047	各種資源の接触法による芳香族、オレフィン等製造	・ナフサ接触分解技術 ・新規ゼオライト、複合貴金属触媒新による収率・選択性向上 ・新規流動相、固定床反応プロセス ・高寿命高性能新規触媒（固体酸・固体塩基）の開発 ・酸化脱水素法にによるオレフィン製造用触媒 ・高効率膜分離プロセス	省エネ 資源確保 産業競争力	大	短期、中期	1,000	石化基礎製品
		G048	化学品、電力、熱のトライジェネレーション	・低温吸熱、発熱発熱用反応対応触媒、及びプロセス ・高度エクセルギー解析技術、製造工場間のエネルギー関連フローの統合化技術 ・コンビナート再生、生産効率向上のためのプロセス設計技術	省エネ、産業競争力	大	中期、長期	1,000	化学産業、鉄鋼産業、エネルギー、コンビナート関連産業
		G049	石炭ガス化発電（IGCC）と化学品の併産	・石炭ガス化発電、化学品併産に資える機能性触媒 ・生産多様化、高効率CO2回収・利用プロセスの構築 ・安価酸素製造技術	省エネ、産業競争力	大	中期、長期	500	火力発電と化学品製造
	次世代蓄電材料技術	G050	超高蓄電型二次電池材料の開発（再掲）	・安全性の高い、正負極活性物質、炭素電極、電解液、セパレータ（膜）等 ・高出力密度汎用型電気二重層キャパシタ ・ナノファイバー電極、セパレータ	省エネ、産業競争力	中	短期、中期	1,000	商用施設、住宅、オンサイト小型発電、自動車等
		G051	新しい電池材料の開発（再掲）	・次世代リチウムイオン電池向け材料：リチウム硫黄系新固体電解質、不燃性有機電解質、非Co系正極 ・新型ニッケル・水素電池、リチウムポリマー電池、リチウム硫黄系電解質等	省エネ、産業競争力	中	短期、中期	1,000	商用施設、住宅、オンサイト小型発電、移動体、パソコン、携帯電話等
		G052	有機ラジカル電池・レドックス高分子材料の開発（再掲）	・非リチウムイオン電解質 ・短時間充電、高容量、高出力で発火や爆発リスクの低い有機/ラジカルポリマー電池	省エネ、産業競争力	小	短期、中期	100	商用施設、住宅、オンサイト小型発電等

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術マップ（4／11）

サステイナビリティー	技術項目（グレーは重要技術項目）	（ローズ色は重要テーマ）2010	テーマ名（茶色：プロセスイノベーション 青色：マテリアルイノベーション）	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小：数万トン未満 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
資源	次世代蓄電材料技術	G053	高蓄電池用電解液の開発（再掲）	・新規な高容量・安全なイオン液体：イミダゾリウムやピリジニュウムのリチウムイオン液体	省エネ、産業競争力	小	中期、長期	100	商用施設、住宅、オンサイト小型発電、移動体、パソコン、携帯電話等
		G054	移動電源、及び固定電源用高蓄電エネルギー材料の開発（再掲）	・新型固体電解質、電解質膜、イオン液体等の開発：不燃性により安全性向上、移動体等への適用	省エネ、産業競争力	大	中期、長期	1,000	電子機器、バス、電車等用エネルギー供給・利用関連産業
		G055	個人用移動システム駆動源の開発（再掲）	・軽量小型電池等の開発：体積および重量あたりの蓄電容量および出力とも大きい高性能電池	省エネ、産業競争力	小	中期、長期	100	機械ロボット、車椅子
	稀少金属の有効利用と代替材料技術	G056	希少元素、貴金属代替新材料の開発	・ニッケル、コバルト、モリブデン、タングステン、リチウム、インジウム、希土類、タンタル、白金族、ホウ素等を代替する新材料 ・カーボンアロイ触媒	資源確保 産業競争力	中	短期、中期	1,000	電子部品、パソコン・家電筐体、携帯電話、自動車部品等
		G057	高耐熱材料の開発	・稀少金属やNi,Co,Wを使わない高耐熱性材料 ・タービン用耐久性新規高耐熱材料 ・熱分解反応器、水蒸気改質反応器、バーナーノズルに使用可能な稀少金属を使わない高耐熱性材料 ・原子炉、核融合炉用高耐熱性材料	資源確保 産業競争力	中	中期、長期	1,000	電子部品、パソコン・家電筐体、携帯電話、自動車部品等
		G058	希少金属、特定元素資源の抽出・リサイクル技術の開発及び代替材料の開発	・低品位鉱物原料・廃棄物（都市鉱山）からの稀少金属資源の分離・回収 ・触媒、製品等に使われる稀少金属資源の分離・回収、代替 ・環境リサイクル型設計	資源確保 産業競争力	中	中期、長期	1,000	電子部品、パソコン・家電筐体、携帯電話、自動車部品等
	非枯渇性資源の化学品・材料化（化学品原料の転換・多様化）	G059	バイオマスからの化学品原料製造技術	・ウレタンポリオール、ファインケミカルズ、中間原料 ・ポリアミド4、リグニン誘導体（熱硬化性樹脂、接着剤、ピロン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
		G063	気体原料や非食糧資源からのプラスチック、モノマー等化学品製造技術の開発	・バイオガス、空気等気体原料を原料とする化学品原料製造技術 ・非食糧資源を原料とするポリ乳酸、PBS等、L-乳酸、D-乳酸、バイオエタノール／ブタノール、BTL等製造 ・セルロースの革新的糖化技術 ・セルロースナノコンポジットを用いた光通信関連部材、ディスプレイ部材等の開発	省エネ 資源確保 産業競争力	大	中期、長期	1,000	化学品原料、自動車、電機電子、日用品等広範囲
	易リサイクル加工用材料とプロセス	G064	積層フィルムの代替材料、及び易リサイクル材料（再掲）	・フィルムの単層化、相溶化等によるリサイクル性の向上：単相化フィルムでのパッケージ性能保持 ・易剥離性積層フィルムと易解体粘着剤の開発 ・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 ・環境適合型薄層製膜プロセス	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イルム ・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
	CO2分離・回収・利用技術	G067	CO2等の分離・回収	・分離方法の確立（化学吸収法、物理吸収/吸着法、膜分離法、未利用低品位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） ・MOF等有機金属錯体の開発	地球環境、リサイクル	大	長期	500	電力供給産業・鉄道・
		G068	超臨界流体の加工プロセスへの利用（再掲）	・超臨界CO2による塗装、表面処理、重合、発泡、複合化、洗浄、めっき等、選択的分解、可溶化等 ・有機溶媒代替反応場	リスク削減	小	短期	500	機械、金属加工産業

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術マップ(5／11)

サステイナビリティー	技術項目（グレーは重要技術項目）	（ローズ色は重要テーマ）2010	テーマ名（茶色：プロセスイノベーション 青色：マテリアルイノベーション）	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小：数万トン未満 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
資源		G069	CO_2を原材料としたポリカーボネート樹脂等化学品製造技術の開発	・脂肪族、芳香族ポリカーボネート等化学品製造技術 ・低温、低濃度CO2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
資源	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
資源	フッ素資源リサイクル（フッ素化学）	G071	廃蛍石、低品位鉱石等からのフッ化水素酸回収・製造技術の開発	・低濃度フッ素含有原料からの濃縮、分離技術：フロン類、フッ素樹脂からのフッ素の回収、再生利用のため高純度CaF_2回収技術	リサイクル、資源確保	中	短期、中期	500	電気電子、鉄鋼、化学品関連産業
資源	フッ素資源リサイクル（フッ素化学）	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
資源	微細構造・精密構造形成技術	G073	印刷法による革新的加工材料開発（プリンタブルエレクトロニクス）	・印刷技術による有機トランジスタ、電子回路製造を可能とする材料・プロセス ・硬化性、絶縁性、耐熱性等の機能を持たせたインク材料開発。 ・大面面、高精細等の精密印刷技術。プロセスの低温化。	省エネ、省資源	大	短期	1,000	情報電子機器製造関連産業
資源	微細構造・精密構造形成技術	G074	分子自己組織化を利用した高性能ナノ・ミクロ材料の開発	・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
資源	微細構造・精密構造形成技術	G075	ナノ三次元構造制御による材料加工プロセスの開発	・熱溶融鋳型、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
資源	微細構造・精密構造形成技術	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
資源	水処理プロセス	G077	工業用超高純度水（再掲）	・次世代NF、RO、耐酸化性非フッ素膜等による水循環 ・オゾン爆気、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
資源	水処理プロセス	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
資源	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
資源	ナノ材料	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
資源	ナノ材料	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 ・ナノ技術のよる高屈折率光学透明材料 ・熱線吸収透明材料 ・ナノファイバー材料	省エネ、省資源	小	中期	100	光学加工、レンズ、医療、分析機器等
資源	バイオポリマー	G082	易リサイクル、カスケードリサイクル材料の開発	・リサイクルし易いバイオ樹脂、コンポジット材料、バイオマスアロイ等の製造 ・モノマー段階からの分子設計と重合技術開発	資源確保 産業競争力	小	長期	100	コンシューマプロダクツ
資源	バイオポリマー	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
資源	海洋開発	G084	化学技術による海洋開発	・造水、メタンハイドレート、CO_2固定、ウラン・リチウム等希少元素の分離、回収技術 ・海洋バイオマス、有用有機・無機資源の効率的回収、利活用技術	資源確保 産業競争力	中	中期、長期	1,000	資源・エネルギー関連産業
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	・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
資源	複合材料処理	G086	化学処理による複合材料・混紡繊維等リサイクル技術の開発	・界面活性型抽出・分離プロセス ・繊維リサイクルのための炭化水素系溶媒分離プロセス	省エネ、省資源	小	短期、中期	100	高分子素材リサイクル関連産業
環境		G087	クリーン再資源化可能な塩化ビニール樹脂	・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使用率アップ ・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

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（6／11）

サステイナビリティー	技術項目（グレーは重要技術項目）	（ローズ色は重要テーマ）2010	テーマ名（茶色：プロセスイノベーション 青色：マテリアルイノベーション）	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小：数万トン未満 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
環境	ハザード管理されたハロゲン製品	G088	過酸化水素酸化を利用した高機能材料製造技術	・過酸化水素等による新酸化プロセス ・ハロゲンを含まない超高機能電子材料	リスク削減、資源多様化	大	中期、長期	1,000	封止材、プラスチック、医薬品、絶縁材料等
		G089	ジクロロメタン代替物質としての機能水	・有害なジクロロメタン代替溶剤としての機能水 ・物理的・化学的方法で機能付与	リスク削減、国際規制	中	短期、中期	500	脱脂洗浄（機械加工、電子材料）、有機合成溶媒
		G090	生活用浄水技術（再掲）	・非塩素系消毒、微量有機物／無機物対策、膜技術、光分解触媒等 ・オンサイト小型浄水処理プロセス	水資源、リサイクル	大	中期、長期	500	下水道、過疎地排水等
		G091	CO_2利用ノンハロゲンプロセスの開発	・CO2をつかったポリカーボネート、ウレタン、イソシアネート等化学品製造プロセス ・合成ガス原料の効率化製造プロセス	リスク削減、資源多様化	中	中期、長期	500	基礎化学品、ファインケミカル製造業
		G092	ノンフロン洗浄剤、溶剤、機能材料の開発	・新規炭化水素系脱フロン代替溶剤(配合技術、添加剤等) ・環境負荷が小さい新規フロン洗浄剤の開発	国際規制産業基盤	小	短期、中期	100	電気・電子機器・機能材料関連産業
		G032	ブロム及びリンフリー新規難燃材料の開発（再掲）	・表面修飾、クラスター加工によるハイブリッド化、微細構造化 ・シリコン系、複合金属系新規難燃剤：ポリカーボネート、発泡ウレタン	リスク削減、国際規制	大	短期、中期	1,000	電気・電子機器・機能材料関連産業
		G093	ノンフロン断熱・保温・保冷物質の開発(再掲)	・ポスト代替フロン断熱材料 ・超臨界CO_2利用空調システム ・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
	製造工程廃棄物・副生物の大幅削減	G094	新規固体酸・塩基触媒による化学プロセスのクリーン化	・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、ナフサ接触分解等 ・新規触媒によるエステル化、骨格異性化反応の効率改善とクリーン化	省エネ 廃棄物削減、資源多様化	大	中期、長期	500	石油化学製品、光学材料、医薬・農薬等製造業
		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）排水の高清澄化・有害成分の高濃縮回収技術（高清澄と高濃縮の両立）	省エネ、省資源	大	中期、長期	1,000	水処理業
	環境負荷が小さい製品	G025	超耐熱性、強度等を有する新規材料（ポリオレフィン類等）の開発（再掲）	・ポストメタロセン触媒、コモノマー材料 ・金属・高分子ハイブリット材料 ・高密度、易加工ポリオレフィン材料の開発	省エネ、長寿命	中	短期、中期	1,000	建材、電子材料、機械材料、医療、輸送材料等
		G098	易リサイクル型高弾性ゴムの開発（再掲）	・高純度モノマー材料による易リサイクル ・配合技術を利用したカスケード利用	省エネ、省資源	中	省エネ、省資源	1,000	建設部材、家電、食器等
		G099	環境安全性が高い添加剤の開発	・ポリオレフィン等向け添加剤材料 ・天然由来添加剤	資源多様化、安全	小	中期	100	レザー製品、壁紙、電線等
		G100	植物由来原料からの高性能防錆剤の開発	・松脂等からの防錆剤 ・新規モノマー／樹脂開発　現行樹脂の改良	資源多様化、安全	小	中期	100	家具、建材、食料品防腐等
		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
	環境負荷が小さい加工プロセス	G102	亜臨界、超臨界流体を利用した表面処理技術	・超臨界CO2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ニング技術の開発	・非VOC型液状硬化性樹脂 ・液状効果性樹脂によるナノインプリントプロセス	リスク削減	中	短期	500	電気・電子・精密機器関連産業
	革新的燃焼による大気環境の保全	G105	クリーン燃料（水素以外）・清浄燃焼技術の開発	・リンバーン燃焼触媒の性能向上、耐熱性、長寿命化 ・高濃度酸素の製造技術による煤煙、NOX等抑制技術 ・重質残油クリーン燃料転換	地球環境、産業競争力	大	短期、中期	1,000	自動車、エネルギー、化学・石油・製鉄プロセス
		G106	燃焼排ガス浄化技術の開発	・NOX直接分解触媒、DPF触媒等による排ガス浄化：EOP向け燃焼触媒	地球環境、産業競争力	大	短期、中期	1,000	セメント、廃棄物処理業、小型発電機等

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術マップ（7／11）

サステイナビリティー	技術項目（グレーは重要技術項目）	（ローズ色は重要テーマ）2010	テーマ名（茶色：プロセスイノベーション 青色：マテリアルイノベーション）	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小：数万トン未満 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
環境	水環境の保全	G107	非金属元素含有排水の高度処理技術の開発	・バイオマス、シリカ系吸着材による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
		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、ハイブリットモノマー利用材料・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、
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（エンプラ等）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

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（8／11）

サステイナビリティー	技術項目（グレーは重要技術項目）	（ローズ色は重要テーマ）2010	テーマ名（茶色；プロセスイノベーション 青色：マテリアルイノベーション）	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小：数万トン未満 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
生活		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
生活	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、金属ハイブリット断熱材等 ・耐紫外線塗料、ペンキ材料 ・光触媒による防汚、浄化材料	生活向上、安全	大	短期、中期	1,000	建材・居住用素材関連産業
生活	快適な省資源型ロングライフ住宅	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 ・有機太陽電池	新エネルギー	大	中期、長期	500	照明、電子材料、住宅、オンサイトエネルギー産業
生活	快適な省資源型ロングライフ住宅	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
生活	快適な省資源型ロングライフ住宅	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
生活	快適な省資源型ロングライフ住宅	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 ・ミニエマルシ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
生活	快適な省資源型ロングライフ住宅	G126	ノンVOC含有建材用材料の開発	・水性、シリコー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
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
生活	快適な省資源型ロングライフ住宅	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
生活	快適な省資源型ロングライフ住宅	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
生活	快適な省資源型ロングライフ住宅	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、構造材、空調設備、ホール等
生活	快適な省資源型ロングライフ住宅	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
生活	快適な省資源型ロングライフ住宅	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
生活	快適な省資源型ロングライフ住宅	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、
生活	快適な省資源型ロングライフ住宅	G131	耐震材料の開発	・軽量、超強度プラスチック材料 ・免震ゴム、 ・耐震工法適合材料	生活向上、安全	大	短期、中期	1,000	建材・居住用素材関連産業
生活	容易で安全な医療・介護と身体機能補助	G132	介護ロボット用構成材料の開発	・新規金属・高分子軽量材料 ・感情変化、触感、臭い検知センサー ・目的に適合した機能ソフト	生活向上、安全	小	短期、中期	1,000	医療・医用材料関連産業
生活	容易で安全な医療・介護と身体機能補助	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
生活	容易で安全な医療・介護と身体機能補助	G134	医薬・診断薬の開発	・独自性の高い医薬品 ・機能性タンパク質検出用簡易キット ・生活習慣病をモニタリングできるデバイス ・簡易で信頼性のある診断薬、キット、診断システムの開発	生活向上、安全	小	短期、中期	1,000	医療・医用材料関連産業
生活	容易で安全な医療・介護と身体機能補助	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
生活	容易で安全な医療・介護と身体機能補助	G136	簡易人工透析システムの開発	・人工透析用新規分離材料：取り扱いやすく安価な透析膜 ・院外で安全に人工透析を行うシステム	生活向上、安全	小	短期、中期	1,000	医療・医用材料関連産業
生活	容易で安全な医療・介護と身体機能補助	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
生活	容易で安全な医療・介護と身体機能補助	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
生活		G051	新しい電池材料の開発（再掲）	・次世代リチウムイオン電池向け材料：リチウム硫黄系新固体電解質、不燃性有機電解質、非Co系正極 ・新型ニッケル・水素電池、リチウムポリマー電池、リチウム硫黄系電解質等	省エネ、産業競争力	中	短期、中期	1,000	商用施設、住宅、オンサイト小型発電、移動体、パソコン、携帯電話等

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術マップ（9／11）

サステイナビリティー	技術項目（グレーは重要技術項目）	（ローズ色は重要テーマ）2010	テーマ名（茶色；プロセスイノベーション 青色：マテリアルイノベーション）	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小：数万トン未満 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
生活	安全・クリーン・省エネで便利な交通機関	G052	有機ラジカル電池・レドックス高分子材料の開発（再掲）	・非リチウムイオン電解質 ・短時間充電、高容量、高出力で発火や爆発リスクの低い有機/ラジカルポリマー電池	省エネ、産業競争力	小	短期、中期	100	商用施設、住宅、オンサイト小型発電等
		G053	高蓄電池用電解液の開発（再掲）	・新規な高容量・安全なイオン液体：イミダゾリウムやピリジニュ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、電車等用ｴﾈﾙｷﾞｰ供給・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	セキュリティー、環境
		G050	超高蓄電型二次電池材料の開発（再掲）	・安全性の高い、正負極活性物質、炭素電極、電解液、セパレータ（膜）等 ・高出力密度汎用型電気二重層キャパシタ	省エネ、産業競争力	大	短期、中期	1,000	商用施設、住宅、オンサイト小型発電、自動車等
		G142	無騒音道路舗装材	・微細構造制御、空隙確保等による無機材料 ・高分子軽量材料：高性能防音壁用材料	生活向上、安全	中	短期、中期	500	道路・都市交通・騒音街区建設・管理関連産業
	きれいな水・空気の確保	G090	生活用浄水技術（再掲）	・非塩素系消毒、微量有機物／無機物対策、膜技術、光分解触媒等 ・オンサイト小型浄水処理プロセス	水資源、リサイクル	大	中期、長期	500	下水道、過疎地排水等
		G111	易生分解性界面活性剤の開発（再掲）	・天然物由来原料（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	中	中期	500	建築土木、自動車、電機電子等
		G098	易リサイクル型高弾性ゴムの開発（再掲）	・高純度モノマー材料による易リサイクル ・配合技術を利用したカスケード利用	省エネ、省資源	中	省エネ、省資源	1,000	建設部材、家電、食器等
		G083	生分解性次世代ゴム材料の開発（再掲）	・エラストマー、コンポジットによる弾性材料 ・バイオマスからの多糖類誘導体等を原料とした弾性体 ・バイオマス、ゴムのハイブリッド型弾性材料	省エネ、省資源	中	省エネ、省資源	1,000	建設部材、家電、食器等
	化粧品材料	G144	未来型化粧品材料の開発	・ナノ技術、界面技術によるアンチエージング機能、安全性等を有した材料開発 ・海洋、天然由来タンパク質材料の大量分離生産プロセス	生活向上、安全	小	短期、中期	500	化粧品・アンチエージング関連産業
共通	輸送システム（低環境負荷・高利便性交通輸送システム）	G145	電池式駆動	・次世代リチウムイオン電池、・新型固体電解質、電解質膜、イオン液体等の開発：不燃性により安全性向上、移動体等への適用	省エネ、産業競争力	大	中期、長期	1,000	電子機器、バス、電車等用ｴﾈﾙｷﾞｰ供給・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・航空機等ｴﾈﾙｷﾞｰ利用産業
		G147	無騒音舗装、低摩擦材料	トライボロジーによる無騒音道路舗装材、低転がり摩擦タイヤ、機械摩擦低減による、駆動エネルギーロス削減	省エネ、産業競争力	大	中期、長期	1,000	自動車道路・タイヤ産業
		G148	高度交通制御・事故防止システム	・超高速移動体通信向け材料 ・暗視対応色素材料、液晶材料 ・センサー用高感度反応化学物質 ・生体情報センサーデバイス	省エネ、産業競争力	小	中期	500	都市空間制御
	水（良質な水資源確保システム）	G077	工業用超高純度水（再掲）	・次世代NF、RO、耐酸化性非フッ素膜等による水循環 ・オゾン爆気、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

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術マップ（10／11）

サステイナビリティー	技術項目（グレーは重要技術項目）	（ローズ色は重要テーマ）2010	テーマ名（茶色：プロセスイノベーション 青色：マテリアルイノベーション）	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小：数万トン未満 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
共通		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
共通基盤技術	分析化学	G150	微細、微量、高速、迅速な化学分析（構造決定、成分分析など）	・様々な技術へ波及する各種分析技術の向上 原子・分子スペクトル分析、レーザー分光分析、X線分析、電気化学分析、質量分析、フローインジェクション分析、クロマトグラフィー・分離科学 、電気泳動分析 、マイクロ・ナノ分析 、顕微鏡 、界面分析 、材料分析・材料解析等		―	―	―	全分野
	計算科学	G151	技術の発展に寄与するための計算科学	・ナノテク分野など特に必要とされる分野へのより適用し易いソフトの開発		―	―	―	全分野
	環境評価	G152	LCA評価	・信頼性の高いLCA（データ・境界条件の共通化による客観性の向上）		―	―	―	全分野
		G153	リスク評価	・リスク初期評価のための有害性評価、暴露評価精度向上		―	―	―	全分野

ーグリーン・サステイナブルケミストリー（GSC）重要技術俯瞰図ー

統合化による化学技術システムの最適化
（2030年を見据えて）

エ：エネルギー重要技術項目
資：資源重要技術項目
環：環境重要技術項目
生：生活重要技術項目
共：共通重要技術項目
重要技術テーマ
★マテリアルイノベーション
☆プロセスイノベーション

エネルギー

エ 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）

エ 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）

エ グリーン製造化学プロセス
☆化学分離プロセス
☆グリーン酸化プロセス（直接過酸化水素製造、過酸化水素酸化、空気酸化等）
☆電磁エネルギー利用合成プロセス
☆分離・反応一体型リアクタープロセス
☆マイクロリアクタープロセス
☆精密制御高分子製造
☆有機分子触媒

エ IT向け化学品（電子材料）
★光利用率向上有機半導体材料の開発
★新規封止材、絶縁材料、パワー半導体等の開発
★超高密度超ナノ情報素子材料

環　境

環 製造工程廃棄物・副生物の大幅削減
☆新規固体酸・塩基触媒による化学プロセスのクリーン化
☆従来型有機合成のシンプル化
☆ナノ空間触媒による新合成プロセス

環 環境負荷が小さい加工プロセス
☆亜臨界、超臨界流体を利用した表面処理技術
☆ジクロロメタン代替としての洗浄プロセス

環 革新的燃焼による大気環境の保全
☆クリーン燃料（水素以外）・清浄燃焼技術

資　源

資 微細構造・精密構造形成技術
★印刷法による革新的加工材料開発
★分子自己組織化を利用した高性能ナノ・ミクロ材料
★ナノ三次元構造制御による材料加工プロセス
★新規リソグラフィー加工技術の開発

資 低品位資源利用技術
☆バイオマス・混合有機資源からの合成ガス・化学品の製造
☆低品位ガス系化石資源（メタンハイドレート等）からの基礎化学品製造
☆低品位固液系化石資源（オイルサンド等）からのナフサ、オレフィン製造

資 次世代蓄電材料技術
★超高蓄電型二次電池材料
★新しい電池（リチウム代替等）材料
★有機ラジカル電池・レドックス高分子材料

資 稀少金属の有効利用と代替材料技術
★ 希少元素、貴金属代替新材料
★稀少金属やNi,Co,Wを使わない高耐熱材料

資 非枯渇性資源の化学品・材料化
☆バイオマスからの化学品原料製造技術
☆構造保持セルロースによる機能化学品
☆非食糧資源からのプラスティック、モノマー等化学品製造技術

資 易リサイクル加工用材料・プロセス
★解体性接着材料と易リサイクル加工法
★積層フィルムの代替材料・易リサイクル材料

資 CO2分離・回収・利用技術
☆CO2等の分離・回収技術
☆CO2を原材料としたポリカーボネート樹脂等化学品製造技術

4分野共通

共 水
（化学技術利用による良質な水資源確保システム）
☆工業用超高純度水
☆生活用浄水技術
☆排水の高度処理技術

共 輸送システム
（低環境負荷・高利便性交通輸送システム）
★電池式駆動
★車体軽量化、高機能内装
★無騒音舗装、低摩擦材料
★高度交通制御・事故防止システム材料

環 ハザード管理されたハロゲン製品
☆クリーン再資源化可能な塩化ビニール樹脂
☆過酸化水素酸化を利用した高機能材料
☆CO2利用ノンハロゲンプロセスの開発
★ジクロロメタン代替物質としての機能水

環 環境負荷が小さい製品
★超耐熱性、強度等を有する新規ポリオレフィン類
★易リサイクル型高弾性ゴム

生　活

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

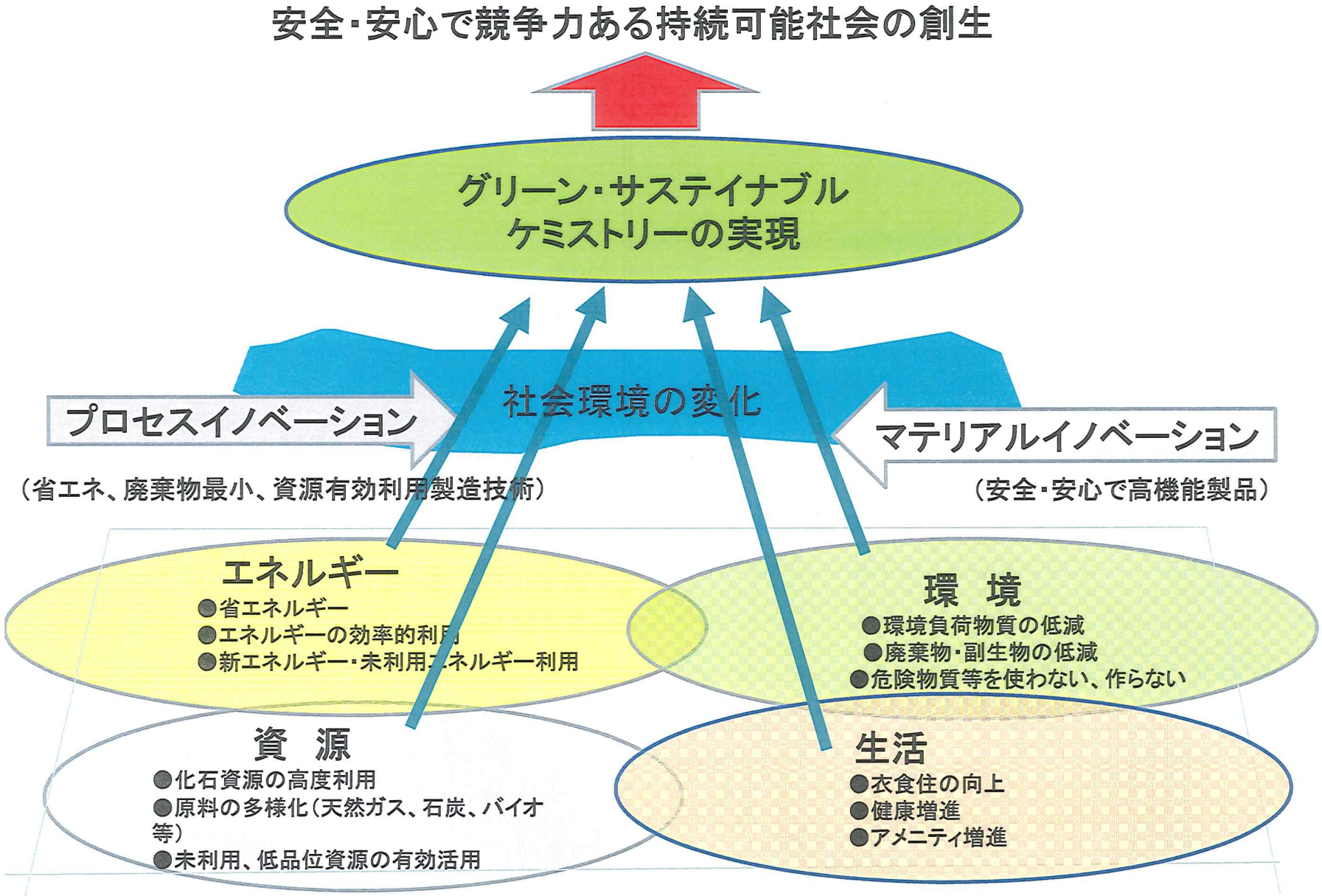
生 容易で安全な医療・介護と身体機能補助
★介護ロボット用構成材料（センサー等）
★身体補助材料（人工筋肉等）

共通基盤技術

合成（触媒・有機・無機・バイオ）｜計算科学・構造相関｜共通基盤技術｜成形・配合・製剤・界面｜分析化学｜リスク評価・LCA

参考資料1

GSC概念図



参考資料2

大量生産・消費・廃棄社会 → グリーン・サステイナブル ケミストリー（GSC） → サステイナブル社会

2010年　2020年　2030年　2050年

エネルギー

増え続ける世界のエネルギー需要
（日本のエネルギー自給率6%、石油の中東依存度86%）
非在来型化石資源、石炭、バイオマス等の利用拡大
さらなる省エネルギー推進
自然エネルギー利用拡大（太陽光、風力等）
大幅なCO2削減圧力
原子力発電の利用拡大（高レベル廃棄物処理処分）
水素エネルギー

資　源

原油価格・供給変動への対応
原油重質化低品位化
資源の多様化（石油、天然ガス、バイオマス、石炭等）
石炭の環境適合型高効率利用技術
石油資源の高度利用、省資源
世界的な水資源の不足
希少元素の偏在・枯渇
水の高度利用、国際貢献
資源リサイクル
省資源技術、代替物質の開発
希少元素代替・リサイクルの革新的技術

環　境

大気汚染防止、水質汚濁防止、産業廃棄物処理、土壌汚染防止等規制強化（化審法・化管法の改正）
リスクの高い物質の回避
低環境負荷・低リスク・長寿命材料の開発
環境負荷物質削減
廃棄物・副生物の削減
欧州規制の強化（Rohs法、REACH法）
新興国への波及
環境調和型製品への転換
国際規制を先取りした製品の開発

生活関連

生活環境場のリスク最小化対応
衣食住、交通・通信の環境負荷低減
廃棄物縮減（再利用、長寿命化、軽量化）
アメニティ増進
低環境負荷ライフスタイル適合製品
バリアフリー化・福祉対応製品
ライフスタイルの転換
価値観の転換
快適でサスティナブルな社会の実現

参考資料3－1

GSCの実績例

1）自動車・航空機の軽量化を進めるプラスチック

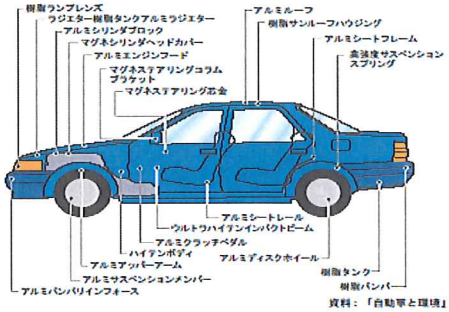
自動車の軽量化は、燃費向上の重要なポイントである。車体の約7割をしめる鉄の比重が7.8であるのに対して、プラスチックでは比重が1であることから軽量化に大きな寄与が期待できる。乗用車の場合、プラスチックが占める重量構成比は1973年で2.9％であったものが、2007年には、8～10％と向上しており、体積比ではほぼ1：1にまでなり大幅な省エネに貢献している。

航空機においても高靭性炭素繊維複合材料等が利用され始めている。

自動車に使用されるプラスチック類

PP（ポリプロピレン）
PE（ポリエチレン）
ABS樹脂
PVC（ポリ塩化ビニル）
PA（ポリアミド、ナイロン）
POM（ポリアセタール）
PBT（ポリブチレンテレフタレート）
PC（ポリカーボネート）
PPS（ポリフェニレンサルファイド）
CFRP（炭素繊維強化複合材料）

●自動車の軽量化部品例

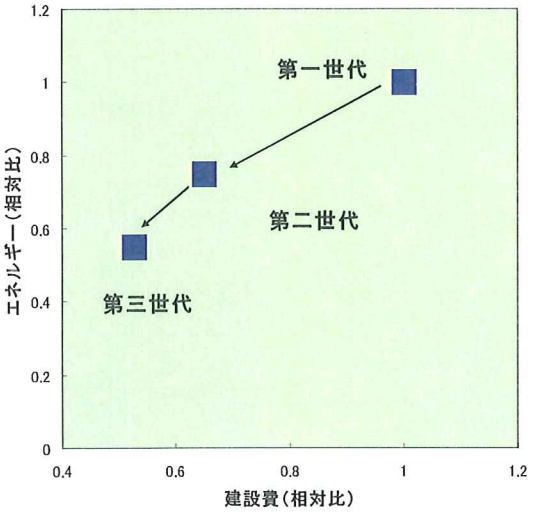


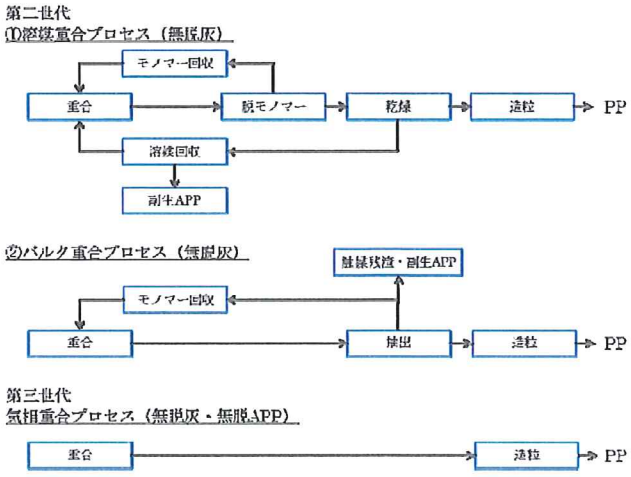
資料：「自動車と環境」トヨタ自動車

樹脂系材料は、形状の出し易さやコストダウンにも繋がることから、内外装部品はもとより、エンジンルーム内の機能部品やエレクトロニクスシステム、燃料システム、エアバッグ、シートベルト等の安全システム、更に駆動・シャシ系にも採用されている。さらに強度、剛性、耐熱性などが改良されれば、さらにその比重を増す可能性が残されている。

ポリプロピレン（PP）の製造法でも、大幅な省エネとプロセスの簡略化を達成している

自動車の軽量化に貢献する樹脂系材料の中でも、その比重が高いポリプロピレンの製造法においても、プロセスの簡略化や新規触媒の開発により、大幅な省エネとコスト削減を達成している。





参考資料3－2

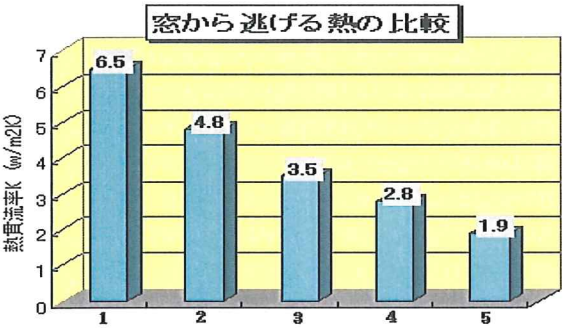
GSCの実績例

2）冷暖房エネルギーの大幅削減を果たす高断熱建材

GSCのマテリアルイノベーション（製品による大幅省エネへの貢献）

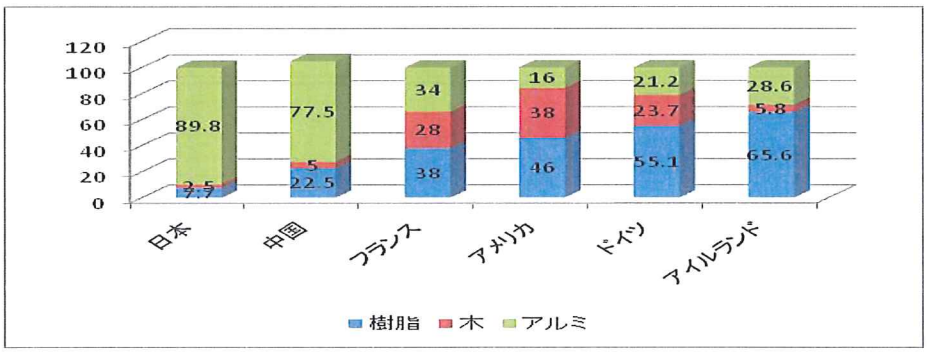
★窓枠部分に塩化ビニル樹脂（塩ビ）を使用し、間に空気層を備えた2層のガラスを用いる「複層ガラス塩ビサッシ」は、従来のアルミサッシ（単層ガラス）と比べると、　断熱性が非常に高い。

★従来と比べ、冷暖房費は3割～4割減少



1. アルミサッシ1重ガラス（従来使われていたもの）
2. アルミサッシ2重ガラス（ガラスとガラスの間隔・空気層が6mm）
3. アルミ・樹脂の複合断熱サッシ2重ガラス（空気層12mm）
4. 樹脂（又は木製）サッシ2重ガラス（空気層12mm以上）
5. 樹脂（又は木製）サッシ2重ガラス（空気層12mm以上）
   Solar Shield（高性能Low-Eガラス入り樹脂サッシ）

★日本は、アルミサッシが 90%近くで、諸外国に較べても、樹脂サッシの比率が低い。



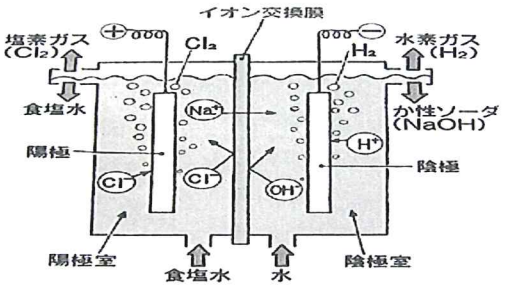
GSCの実績例

参考資料3－3

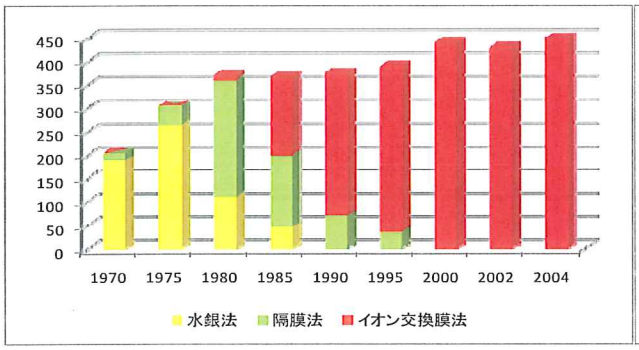
3）省エネとリスク削減を同時に果たした食塩電解

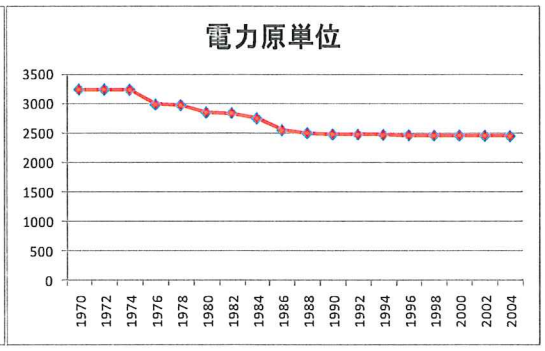
GSCプロセスイノベーション（大幅な省エネと環境との調和プロセス）

食塩水を電気分解して、塩素と苛性ソーダを得るプロセスは、化学工業にとって重要なプロセスであるが、日本はリスクの大きな水銀を使う水銀法からリスクのないイオン交換法への転換を世界に先駆けて2000年に完了している。



さらにイオン交換法はそれまでの水銀法、隔膜法と較べて大幅な消費電力の削減を果たすことができた。水銀というリスクの高い物質を使わない方法への転換と大幅な省エネルギーにも貢献したイオン交換は法は、GSCに理念にかなった製造方法の転換で、プロセスイノベーションの成果といえる。

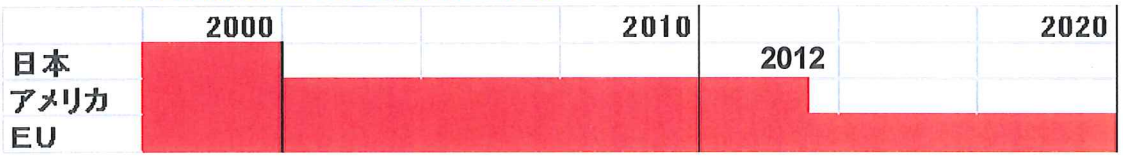




日本の食塩電解プロセスの変遷（縦軸：生産量千トン）　食塩電解の電力原単位の推移

出典：日本ソーダ協会

食塩電解における水銀使用廃止の動き



我が国は、2000 年に水銀法からイオン交換法への全面転換を果たしたが、諸外国の状況をみてみると、アメリカではアスベストを利用する隔膜法が依然として主流となっており、水銀法については、オバマ政権になって転換の方針に変わり、2012 年までに全廃となる予定である。これに対して、ヨーロッパでは、2008 年でもイオン交換法は 46%、水銀法が 38%,それに隔膜法が 14%となっており、EU全体としては 2020 年までに全廃とする目標を掲げている。

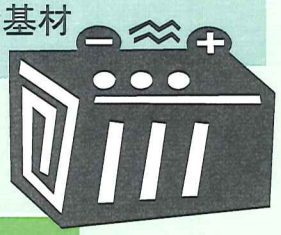
GSC技術の展望
～GSCが拓く持続可能な社会～

参考資料4

Green Agriculture
◎安全で高活性な農薬の創生
◎省エネ型肥料製造プロセス等

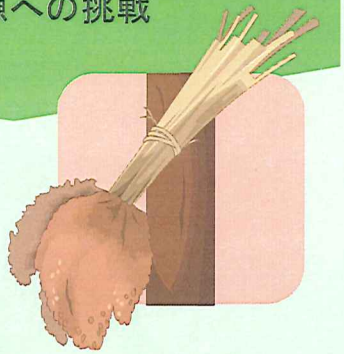
Green Sustainable Housing
◎高性能断熱材
◎窓枠、遮蔽塗料等の省エネ化学品

Green Electronic Storage
◎高性能蓄電池向け基材



Green Information Electronics
◎半導体向け化学品
◎リソグラフィー技術への化学品部材

Green Biomass
◎バイオマス原料の糖化技術
◎脱化石資源への挑戦



Green Process
◎Eファクターに優れた省エネ型プロセス

参考資料5

革新的重要技術テーマ

GSC技術として特に重要と評価された
6テーマを革新的技術テーマとした。評価はGSC委員会での審議によった

革新的技術テーマ	理由	研究課題(例)
Green Agriculture (食糧資源に貢献する環境適応型肥料および農薬)	食料資源の確保のために化学製品である肥料や農薬の役割は大きい	・安全性が高く高活性な農薬の創生 ・省エネ型肥料製造プロセスの開発
Green Biomass (バイオマスからの化学品製造)	脱化石原料による化学品製造体系の構築は資源面で重要	・バイオマス原料の糖化技術開発 ・バイオプロセスの開発
Green Electronic Storage (電気エネルギーの貯蔵)	電気自動車や自然エネルギーの活用のために電気貯蔵技術は重要である	・高性能蓄電池向け機材の開発
Green Information Electronics (半導体製造向け化学製品)	大きな省エネルギー効果があるGreen ITの推進のためには高性能な半導体が必須であり、製造には化学製品が重要である	・半導体製造むけ化学品の開発 ・リソグラフィー技術の要である化学品の開発
Green Process (環境負荷の小さい化学品製造プロセス)	化学製品の製造プロセスにおいて、廃棄物が少なく省エネルギーなものとするために触媒・反応の開発は常に重要である	Eファクターに優れた省エネ型プロセスの開発
Green Sustainable Housing (快適で長持ちする省エネ型住宅)	高性能な断熱材などを使用した省エネルギー住宅は地球温暖化防止対策への貢献が大きい	・高性能断熱材 ・窓枠、遮熱塗料等の省エネ化学品の開発

事前評価書

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	(1)概要: 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。 (2)平成 21 年度予算額:15 億円の内数(予定) (3)事業期間:平成 21 年度～平成 25 年度(5 年間)

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

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イナビリティ(持続性)をいかに確保しつつ、かつ将来も持続的に高機能な素材、部材を生産、供給できるかが喫緊の課題となっている。欧州では RoHS、REACH の導入、米国ではグリーンケミストリーの大統領表彰の創設、中国などでは自主的な排出規制の制定など、化学品製造プロセスに関わる環境対策が強化されている。実際、国内メーカーの海外進出において、有害物質の利用、廃溶剤の多さから、操業停止に追い込まれる企業が出ている。また、これまでは素材・部材の高機能化を過度に追求するあまり、プロセスの多段化によるエネルギー消費の増大、廃棄物の激増、原材料の確保に伴う製造コスト(特に後処理)の高騰が起こってきている。今後、わが国の全製造業を支えるためには、高機能な素材、部材の開発が不可欠であり、有害な化学物質を削減、使用しない、リサイクルが容易、未利用な資源を利用できる等、独創的な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。

②上位政策との関係から見た位置付け

本事業は、第3期科学技術基本方針の重点推進 4 分野のうちの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

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・サステイ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「CO_2 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、CO_2 固定化・有効利用分野の「CO_2 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CO_2)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2×10^{-7} mol/(m^2 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2×10^{-7}mol/(m^2 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立する。

(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0.3m^2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、CO_2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(CO_2 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、CO_2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-CO_2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・サステイ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分野のサステイ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、マテリアル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CO_2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CO_2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CO_2を高濃度回収及びCO_2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・サステイ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・サステイ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。

②研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・サステイ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 CO_2 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・環境面でのサステイナブルな仕組み作りへの貢献が期待できる。

(5)実用化・事業化の見込み

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、CO_2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。

○CO_2 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 CO_2 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 CO_2 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。

NEDO POST 3 21年度新規研究開発プロジェクト（案）概要

NEDO 技術開発機構

研究テーマ名 「グリーン・サステナブルケミカルプロセス基盤技術開発

2009 年 2月 現在

研究目的

背景、目的、必要性（政策的位置付け、市場ニーズ、技術ニーズ）

①背景:製造業の中でエネルギー多消費である化学分野の中で主要な位置を占める石油化学工業において、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・低品位化へ対応し、抜本的な資源生産性の向上を図る。

②市場ニーズ(目的):今後も持続的に我が国の全製造業を支えるためには、これまでにない高機能な素材、部材を、未利用な資源等を利用して製造するクリーンで高効率化学プロセスの開発が望まれている。

③技術ニーズ:高機能な素材、部材をグリーンで持続的に製造する技術ニーズとして、(1)有害な化学物質を削減、(2)廃棄物、副生成物の削減、(3)ライフサイクルにおける消費エネルギー削減 (4) 未利用／低品位資源の利用、(5) リサイクル容易、(6)希少資源の代替を実現する独創的な化学プロセスの技術開発が求められている。

プロジェクトの規模

○事業費と研究開発期間

21年度事業費（予定）15億円、研究開発期間：5年

※平成20年度は経済産業省事業として実施

研究内容※

○開発課題（目的達成のための技術課題）

持続的に高機能な素材・部材を製造するための革新的な省エネルギープロセスを実現するため、下記の(1)、(2)の課題を解決できる独創的なプロセスに関する要素技術を開発する。

(1)消費エネルギー削減：目的物の収率向上、反応温度の低温化、付加価値材料への転換率向上、分離効率向上。

(2) 未利用／低品位資源利用：CO_2, 等の副生ガスを高効率に分離・精製できる革新的な吸着材料・プロセスの開発。これにより、CO_2換算で、920万ﾄﾝ/年削減(2030年)を目指す。

○キーテクノロジー、ブレークスルーのポイント、オリジナリティ

上記の開発課題を早期に実現するため、新規触媒、膜分離材料、新規吸着剤等を開発し、持続的にグリーンな製造が実現できる独創的な材料及び高効率プロセスを開発する。

(1) 触媒を用いる革新的ナフサ分解プロセス基盤技術の開発

(2) 規則性ナノ多孔体精密分離膜部材基盤技術の開発

(3) 副生ガス高効率分離・精製基盤技術の開発

○目標値とその条件及び設定理由

(1) 革新的ナフサ分解プロセスでは、対熱分解比で10%以上の収率向上、(2) ナノ多孔体精密分離膜では水分除去80%以上 (3) 副生ガスの分離・精製では、30%以下のCO_2等の副生ガスを99.9%以上に濃縮。 なお、革新的な技術開発であるため、今後の社会状況により目標値が変更することもある。

技術戦略マップ上の位置付け

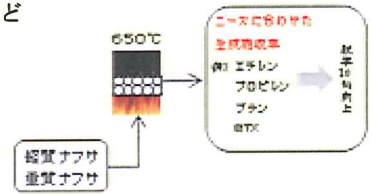
※平成21年度に公募を予定している研究開発課題に関する項目のみ

化学プロセス、素材・部材のプロセスイノベーション、マテリアルイノベーションを実現するための「グリーン・サステナブルケミストリー」(2008年版)戦略ロードマップに重要技術として掲載

その他関連図表※

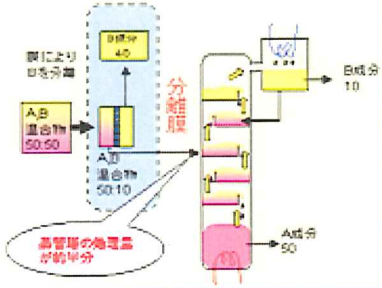
(1) 触媒を用いる革新的ナフサ分解プロセス基盤技術の開発

現行の無触媒プロセスを、触媒反応化することにより(1) プロピレン、プロピレン、BTXなど有用化学品の収率を改善、(2) 反応温度の低温化、さらに、(3) 将来原料の多様化が可能となる新規触媒プロセスを開発。



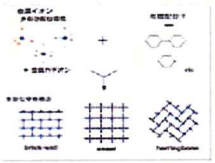
(2) 規則性ナノ多孔体精密分離膜部材基盤技術の開発

分離・精製プロセスは、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。新規な分離膜技術の導入により、蒸留塔の負荷を平均50%低減でき、大幅な省エネを実現。



(3) 副生ガス高効率分離・精製基盤技術の開発

CO_2を原料とする化学品製造技術の根幹となる高濃度CO_2を、新規な多孔性金属錯体により(1)高純度(99. 9%以上)、(2)低コスト、(3)低エネルギーで分離・精製する技術を開発。



「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		
[意見1] 回収されたCO2などは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。 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 CH3OCH3+CO2→CH3OCOOCH3 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 CH3OCH3+C2H4O→CH3OCH2CH2OCH3 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 CH2CH2+C2H4O→THF→1,4-ブタンジオール	[考え方と対応] 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ー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。	[反映の有無と反映内容] 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。

01

添付資料-4-3

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		
[意見２] 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。 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。	[考え方と対応] 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ー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。	[反映の有無と反映内容] 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。

以上

添付資料－５

● 特許論文等リスト

１．①【産業財産権（特許）リスト】
特許、論文、外部発表等の件数（内訳）

区分 / 年度	特許出願**			論文		その他外部発表（プレス発表等）
	国内	外国	PCT*出願	査読付き	その他	
H. 21FY	５件	０件	０件	２件	０件	０件
H. 22FY	１０件	０件	１件	２件	１件	８件
H. 23FY**	２件	０件	０件	３件***	１件	０件

*： Patent Cooperation Treaty ：特許協力条約）　　**： H. 23FY は、2011 年 5 月 30 日現在
***：3 件中 1 件はアクセプト段階

１．②【産業財産権（商標）リスト】

番号	出願者	出願番号	国内/外国/PCT	出願日	状態	名　　称
1	㈱クラレ／昭栄化学工業㈱／昭和電工㈱／東洋紡績㈱	商願 2010-405 ↓ 【登録番号】第5380717号	国内	2010/01/06 ↓ 【登録日】2011/01/07	公開 ↓ 登録	コーディフレックス（第 1 類: 化学品、原料プラスチック）
2	㈱クラレ／昭栄化学工業㈱／昭和電工㈱／東洋紡績㈱	商願 2010-411 ↓ 【登録番号】第 5380718 号	国内	2010/01/06 ↓ 【登録日】2011/01/07	出願 ↓ 登録	COORDIFLEX（第 1 類: 化学品、原料プラスチック）

□ 我々が開発している柔軟型 PCP に対して、特許ではないが、産業財産権の一つである商標申請を 2 件(コーディフレックスと COORDIFLEX)行い、平成 23 年 1 月 7 日付けで登録となった。(商標登録番号第 5380717 号および第 5380718 号）今後、本プロジェクトの成果を普及する場合等に活用していく予定。

商標登録証
登録第5380717号
株式会社クラレ
昭栄化学工業株式会社
岩井良行
昭和電工株式会社
東洋紡績株式会社

商標登録証
登録第5380718号
COORDIFLEX
株式会社クラレ
昭栄化学工業株式会社
岩井良行
昭和電工株式会社
東洋紡績株式会社

2．【論文リスト】

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	S. Horike(1), S. Kitagawa(1), *et al.*	(1)京都大学	Enhanced Selectivity of CO_2 from a Ternary Gas Mixture in an Interdigitated Porous Framework	*Chem. Commun.*, 2010, **46**, 4258-4260	有	2010 年
2	S. Horike(1), Y. Inubushi(2), S. Kitagawa(1), *et al.*	(1)京都大学 (2)㈱クラレ	Solid Solutions of Soft Porous Coordination Polymers for the Fine-Tuning of Gas Adsorption Properties	*Angew. Chem. Int. Ed.*, 2010, **49**, 4820-4824	有	2010 年
3	堀毛悟史(1), 犬伏康貴(2), 北川　進(1)	(1)京都大学 (2)㈱クラレ	多孔性錯体を利用したCO_2の選択的分離	未来材料、7 月号、2010 p.23-28	無	2010 年
4	Y. Inubushi(1), S. Horike(2), S. Kitagawa(2), *et al.*	(1) ㈱クラレ (2) 京都大学	Modification of flexible part in Cu^{2+} interdigitated framework for CH_4/CO_2 separation	*Chem. Commun.*, 2010, **46**, 9229-9231	有	2010 年
5	H. Kitagawa (1), *et al.*	(1)京都大学	Surface Nano-Architecture of A Metal-Organic Framework	*Nature Mat.*, 2010, **9**, 565-571	有	2010 年
6	H. Kitagawa (1), *et al.*	(1)京都大学	Highly-crystalline Nanofilm by Layering Porphyrin MOF Sheets	*J. Am. Chem. Soc.*, 2011, **133**, 5640-5643	有	2011 年
7	S. Horike (1), S. Kitagawa (1), *et al.*	(1) 京都大学	Relationship between Channel and Sorption Properties in Coordination Polymers with Interdigitated Structures	*Chem. Eur. J.*, 2011, **17**, 5138-5144.	有	2011 年
8	樋口　雅一(1), 北川　進(1)	(1)京都大学	金属錯体が魅せる空間科学（夢を実現にする新しい空間材料～多孔性配位高分子）	化学と工業、**64**、2011、p.397-399	無	2011 年
9	S. Horike(1), S. Kitagawa(1), *et al.*	(1)京都大学	Differences of crystal structure and dynamics between soft porous nanocrystal and bulk crystal	*Chem. Commun.*, 2011, accepted	有	—

特許論文等リスト（公開版）

３．【外部発表リスト】

番号	発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者	所属
1	2010/09/07	MOF2010 （国際学会／ポスター）	Gas Separation Properties of Interdigitated Porous Frameworks	○犬伏康貴(1)、 堀毛悟史(2)、 北川　進(2)、	(1) ㈱クラレ (2) 京都大学
2	2010/09/15	第59回高分子討論会 （国内学会／口頭／招待発表）	多孔性配位高分子のダイナミクスを利用した CO_2 ガス分離材の開発	○堀毛悟史(1) 犬伏康貴(2)、 北川　進(1)、	(1) 京都大学 (2) ㈱クラレ
3	2010/09/28	第60回錯体化学討論会・第60回記念錯体化学OSAKA国際会議 （国際学会／口頭／一般発表）	Preparation of Solid Solutions of Porous Coordination Layer for Efficient Gas Separation	○堀毛悟史(1)、 犬伏康貴(2)、 北川　進(1)、	(1) 京都大学 (2) ㈱クラレ

４．【新聞掲載リスト】

番号	発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者
1	2010/05/31	日本経済新聞	CO_2吸収膜開発 ～5年後実用化へ　アルコールなど合成～	京都大学 九州大学
2	2010/06/11	科学新聞	多孔性配向ナノ結晶薄膜開発 ～表面構造解析に成功～	九州大学
3	2010/07/05	日本経済新聞 （電子版）	2人の「京大・北川教授」が相次ぎ開発　～CO_2吸収材に注目～	京都大学
4	2010/08/02	THE NIKKEI WEEKLY	Seeing double: Promising advances in materials for CO_2 absorption	京都大学
5	2010/11/04	日経産業新聞	CO_2吸収　低コストで 新素材開発、室温で	京都大学 ㈱クラレ

２．分科会における説明資料

次ページより、プロジェクト推進・実施者が、分科会においてプロジェクトを説明する際に使用した資料を示す。

ナノテク・部材イノベーションプログラム
グリーン・サステイ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

「副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発」（中間評価）

（2009年度～2013年度　5年間）

プロジェクトの概要（公開）

(独)新エネルギー・産業技術総合開発機構
環境部

2011年 6月 9日

公開

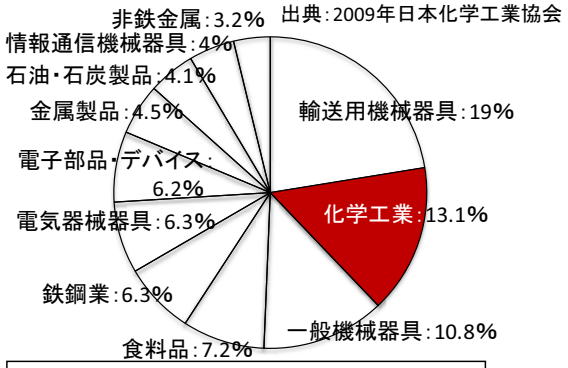
背景1　我が国の化学産業の特長（出荷額・世界シェア）

我が国の製造業の中で出荷額、付加価値額は共に第2位

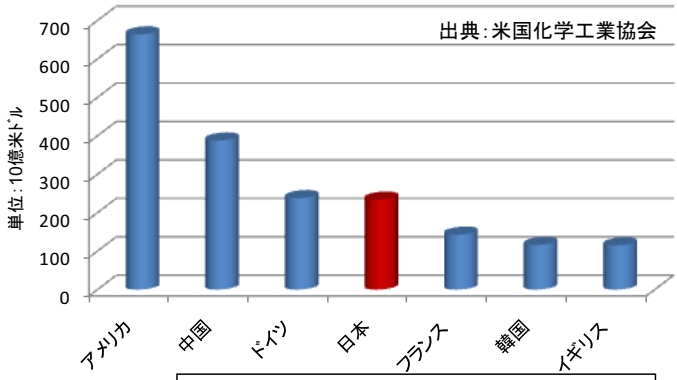
- **出荷額**は約40兆円で製造業全体の約13%
  輸送機器製造業に次ぐ**第2位**
- **付加価値額**は約17兆円で製造業全体の約16%　**製造業第2位**
- 1人当たり、付加価値額でも第2位

世界の中で、日本の化学工業の出荷額は世界第4位
高度部材では、圧倒的な世界シェアを確保

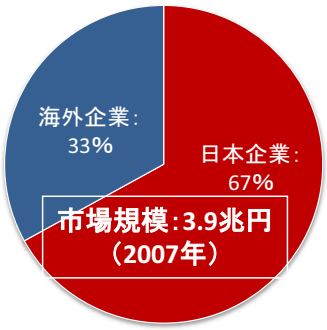
- 日本の化学工業の出荷額は、2,340億ドルであり、アメリカ、中国、ドイツに次いで**世界第4位**（2007年）
- 半導体用材料、液晶用材料等の高度部材産業において、日本企業 は**世界シェアの65～100%**を占める
- 例えば、半導体用封止材は、世界市場1,145億円でシェア100%
  液晶用カラーフィルターは世界市場4,270億円でシェア100%



製造業全体出荷額：337兆円（2007年）



世界の化学工業出荷額比較（2007年）



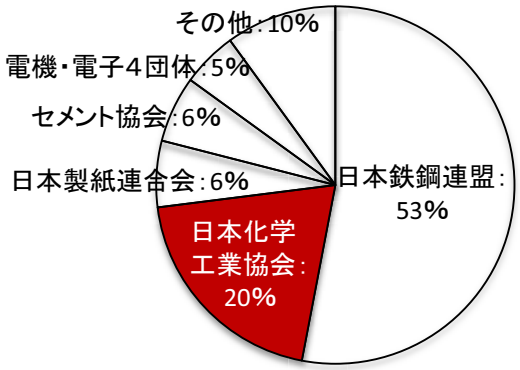
半導体製造用日系企業シェア
出典：2008半導体材料データブック

背景2　化学産業の課題【エネルギー消費、産業廃棄物】

化学産業は、エネルギー多消費であり、かつ廃棄物大量排出型産業である。

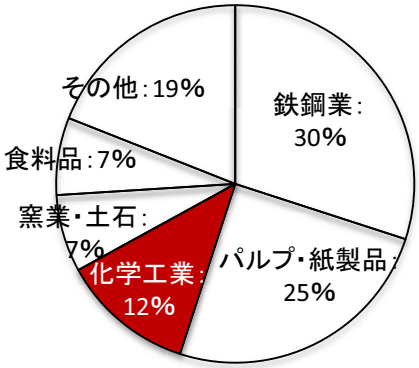
- **化学産業のCO_2排出量**は、年間0.7億トンで、製造業全体の約20%　→　鉄鋼産業に次ぎ**2番目に多い**
- **化学産業の産業廃棄物排出量**は　年間0.17億トンで製造業全体の約12%　→　鉄鋼産業、パルプ・紙産業に続き、**製造業で3番目**

産業部門全体の排出量：363百万t-CO_2



業種別二酸化炭素排出量
（2006年度実績）
出典：産構審

製造業全体：1.41億トン



産業廃棄物の業種別排出量
（2005年度実績）
出典：環境省調べ

背景3　化学業界に関する環境負荷低減の動向

化学産業

従来：高効率、低コスト優先

資源・エネルギーの多消費、多量な産業廃棄物排出

1995年

レスポンシブル・ケア
環境負荷低減
「**持続可能な社会の構築を目指す**」

米国　：　グリーンケミストリー
欧州　：　サステイナブルケミストリー
日本　：　グリーン・サステイナブル・ケミストリ（GSC）
（2000年GSCN設立：普及活動）
・人と環境の健康、安全
・省資源、省エネルギー

2009年

NEDO　【グリーン・サステイナブルケミカル プロセス基盤技術開発】

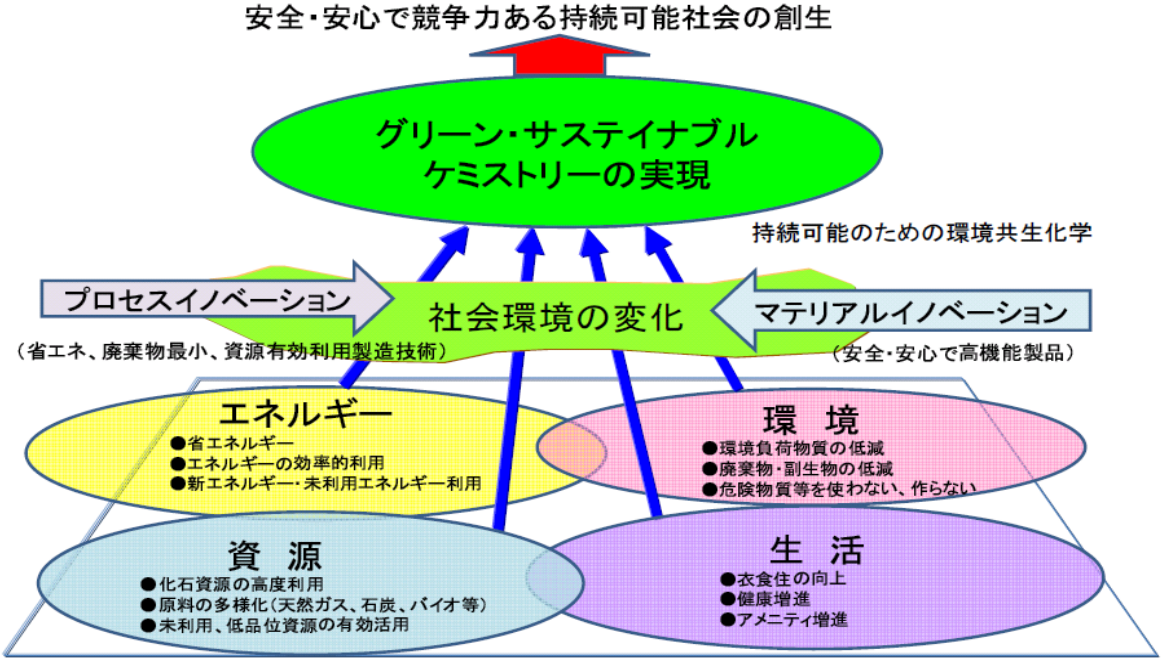
資源、エネルギー、環境の制約問題を克服し、高機能な化学品の持続的製造を可能とする基盤技術の確立を目指す

また、本プロジェクトは、総合科学技術会議において示された「グリーン・イノベーション」事業の一つである「グリーン・ケミストリ」として位置づけられており、革新的技術開発の推進に向けた取り組みを開始

位置付け1　グリーン・サステイナブルケミカルプロセス（GSC）とは

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



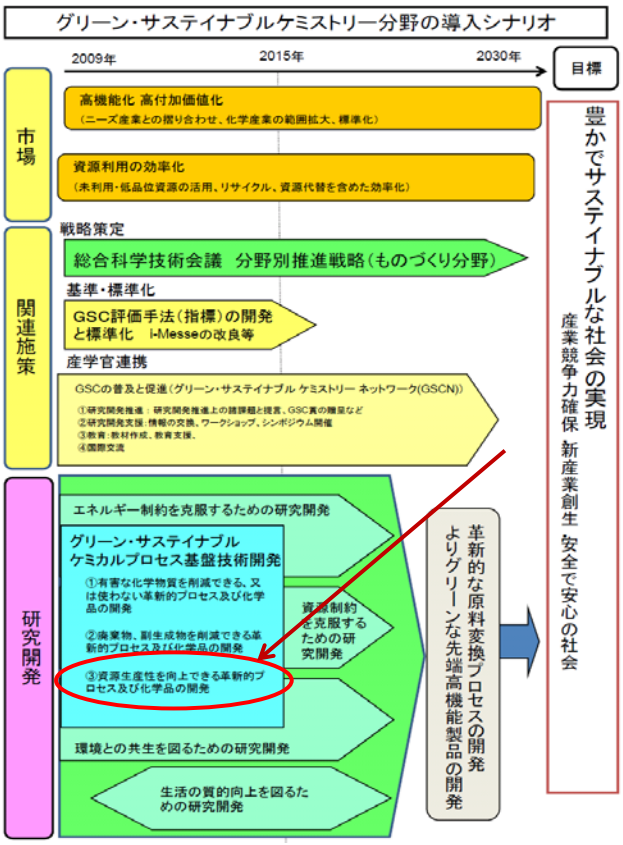
位置付け2　経済産業政策（ｲﾉﾍﾞｰｼｮﾝﾌﾟﾛｸﾞﾗﾑ）におけるGSC

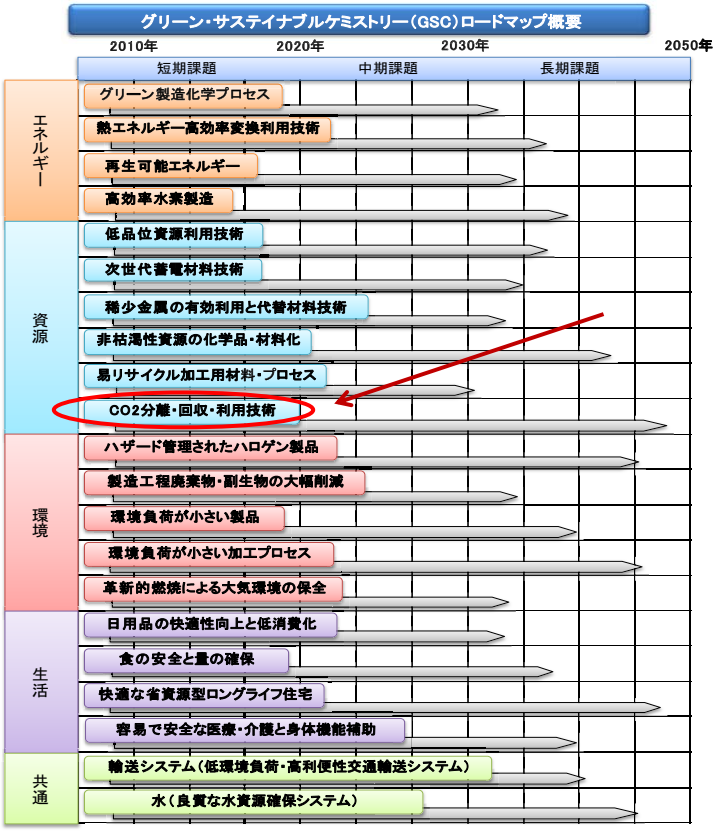
2. ナノテク・部材イノベーションプログラム

【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。

位置付け3　GSCの導入シナリオとロードマップ





位置付け4　NEDOで実施中のGSCプロジェクト

廃棄物削減

●化学プロセスの30%をしめる酸化反応のクリーン化を行い、産業廃棄物を削減する
革新的酸化プロセス

CO_2削減

●低品位化する化石原料に対応、かつ収率を高効率化する**ナフサ接触分解炉技術**

●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の約50%削減する**革新的膜分離技術**

●化学工場や製鉄所より大量に排出されるCO_2等の**高濃度回収技術**

有害物質削減

●有害な有機溶媒を用いずに、化学反応を水中で行うことを可能にする
革新的アクア・固定化触媒技術

原料多様化

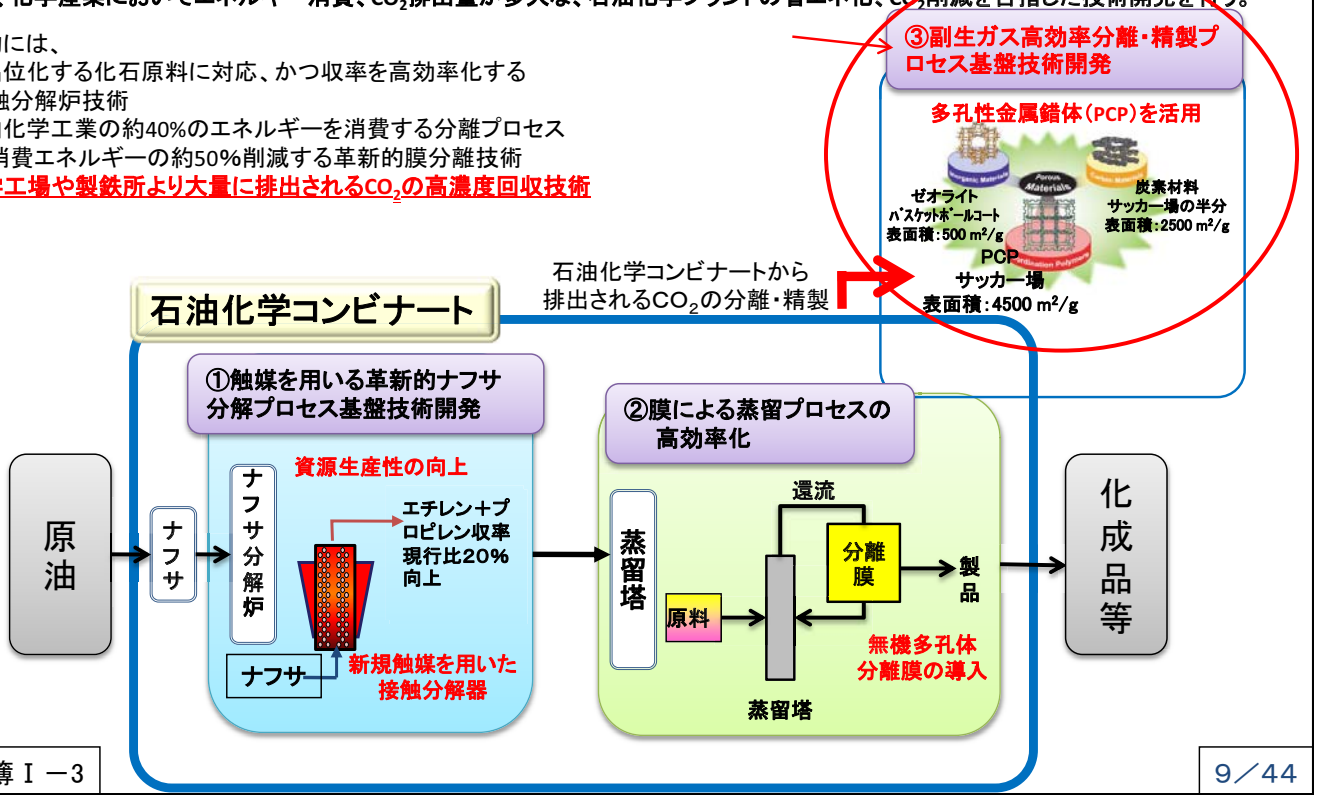
●化石原料に依存している化学品原料の転換・多様化を可能とする
革新グリーン技術の開発

位置付け5

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（CO_2削減）

化学合成、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を削減できるクリーンプロセスを開発するために必要な膜材料、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。
特に、化学産業においてエネルギー消費、CO_2排出量が多大な、石油化学プラントの省エネ化、CO_2削減を目指した技術開発を行う。

具体的には、
①低品位化する化石原料に対応、かつ収率を高効率化する
　接触分解炉技術
②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
　の消費エネルギーの約50%削減する革新的膜分離技術
③化学工場や製鉄所より大量に排出されるCO_2の高濃度回収技術



事業の妥当性

CO_2の削減は、重要且つ喫緊の課題であり、CO_2の利用含めた対策はこれまでも種々検討されているが、決定的な方策は見出せていない。

本事業は、革新的な材料である多孔性金属錯体（PCP/MOF）を用いて、以下の開発を行う。

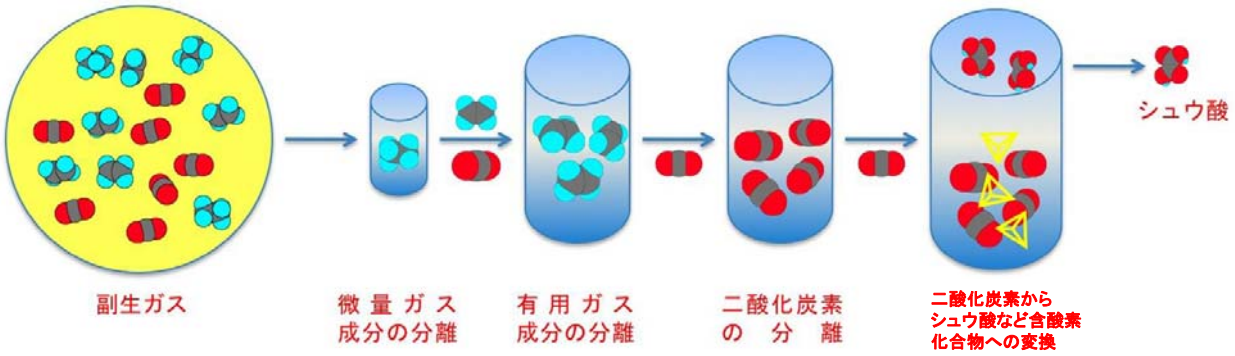
①CO_2等副生ガスの高効率な分離・回収技術

②副生ガス中CO_2のグリーンな反応プロセス技術

事業の目的

①副生ガスの分離・精製材料の開発

②副生ガスによるグリーンプロセス技術の開発



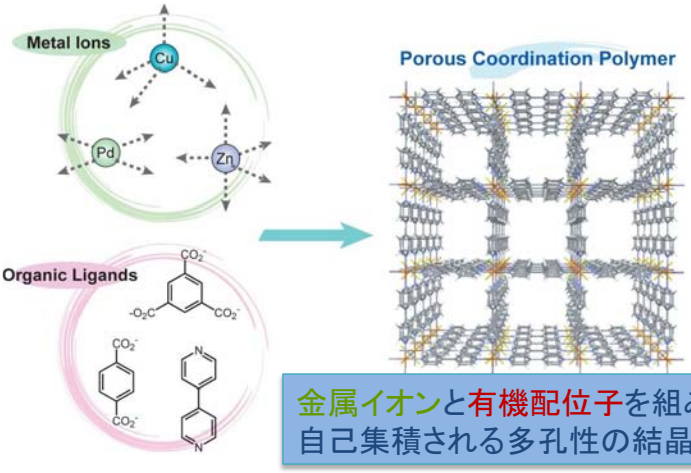
事業の内容

①マイルドな条件で効率良く吸着・脱離できる革新的な分離材料（多孔性金属錯体：PCP/MOF）の開発

②高濃度に濃縮された副生ガスから有用な化学品をグリーンに生産する基盤技術の開発

PCPとは？

Porous Coordination Polymer
（多孔性配位高分子）
又は
Metal Organic Framework
（多孔性金属錯体）



金属イオンと有機配位子を組み合わせて自己集積される多孔性の結晶性の固体

意　義

NEDOが 関与する意義

革新的な材料として期待されているPCPは、アカデミック分野においては世界を先導しているが、産業への応用についてはコンソーシアムによる検討が開始された欧米の先行を許している。

我が国の化学産業の基盤強化のため、以下の理由からもNEDOが産学官連携体制で推進すべき事業と考えられる。

○　大学のみでは実用化への結び付けが困難

○　実用化例がなく単独企業では投資リスクが大きい

効　果

実施の効果　（費用対効果）

○費用の総額　　9億円（3年間）

○効果

①分離・精製材料の開発

・既存のプロセスと比較し、分離に要するエネルギーを大幅に低減

②グリーンプロセス技術の開発

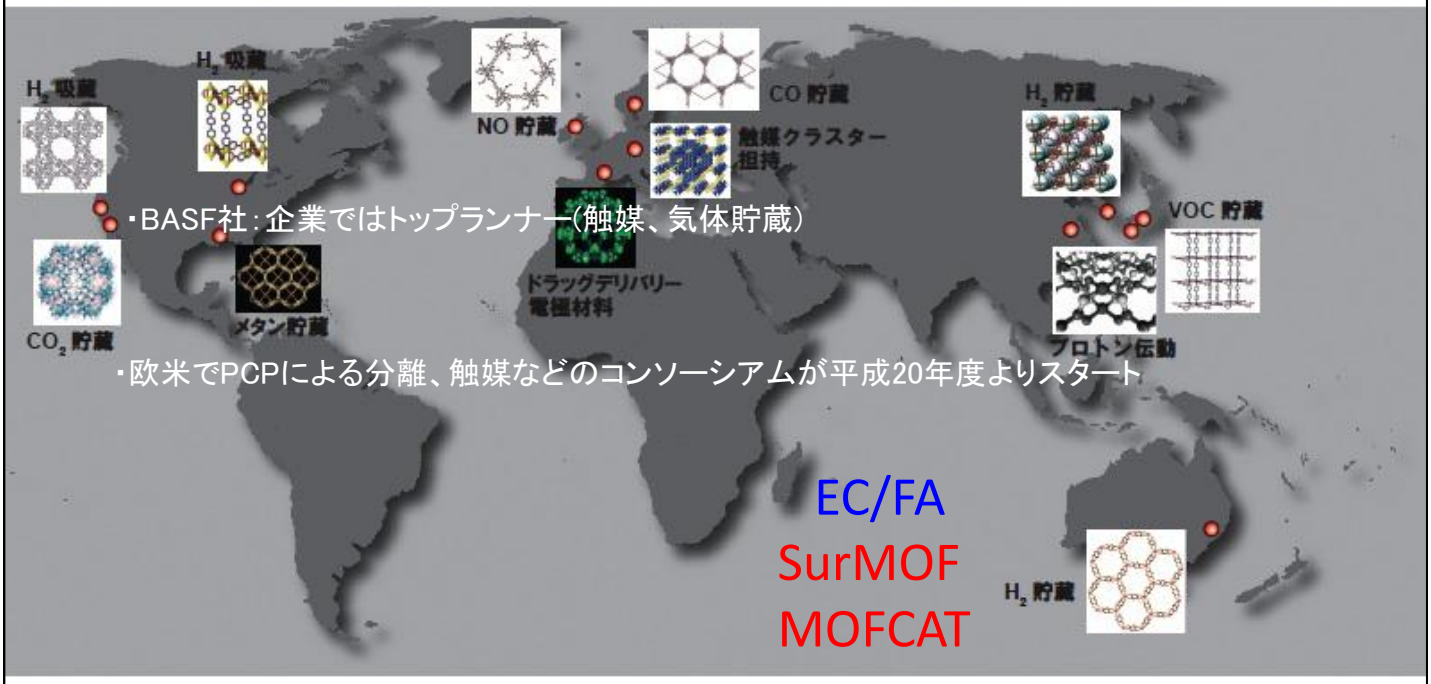
・二酸化炭素を原料とした化学品製造の新たな基盤技術

③波及効果

・低品位ガスの資源化

・PCP複合触媒による高効率反応プロセス

海外動向1　PCPを取り巻く世界の潮流



海外動向2　海外におけるコンソーシアムの一例

DeSANNS（Design Synthesis and Application of Novel Nanoporous Sorbents）
2006年～2008年　348万ユーロ（約3.8億円）　英・仏他各国の大学、国研等多数参加

後継プロジェクト

MACADEMIA　（Metal-organic frameworks As Catalysts and Adsorbents: Discovery and Engineering of Materials for Industrial Applications）
2009年～2013年　1156万ユーロ（約13億円）
大学、国研等に加えBASF（独）、TOTAL（仏）等の企業も参加

MACADEMIAの課題・目的

気相分離	プロペン/プロパン分離、酸性ガス分離、水素精製等
液相分離	キシレン分離、炭化水素からの窒素、硫黄化合物の回収等
触媒反応	エポオキサイドの重合触媒、水素自動酸化触媒等

目的の妥当性1

CO_2の分離・濃縮技術

既存技術	概　　要	長　所	短　所	適用例
アミン法	混合ｶﾞｽ中のCO_2をｱﾐﾝ溶液で吸収。吸収液を加熱してCO_2を分離・回収	・回収率が高く、比較的低濃度のCO_2の回収可能 ・大型化が比較的容易	・吸収液の再生に多量の熱ｴﾈﾙｷﾞｰが必要 ・吸収液が高価 ・SO_X,NO_X等による吸収液の劣化	石油精製ﾌﾟﾗﾝﾄ
熱炭酸カリ法	混合ｶﾞｽ中のCO_2を炭酸ｶﾘｳﾑ溶液で吸収。吸収液を加熱してCO_2を分離・回収	・アミン法に比べCO_2の回収ｴﾈﾙｷﾞｰが小さい	・吸収液の反応性が低い ・加圧下での運転が必要	ｱﾝﾓﾆｱ合成ﾌﾟﾗﾝﾄ
PSA法	吸着剤で混合ｶﾞｽ中のCO_2を選択的に吸着。吸着後に減圧しCO_2を放出させ回収	・吸収法よりﾗﾝﾆﾝｸﾞｺｽﾄが安い ・比較的装置が簡単	・CO_2回収率が低い ・SO_X,NO_X等の前処理が必要 ・CO_2回収のための所要動力が大きい	ｺｰｸｽ炉ｶﾞｽ

革新的吸着材料の開発により改善へ

目的の妥当性2

回収CO_2によるｸﾞﾘｰﾝﾌﾟﾛｾｽ技術

CO_2を化学品の原料として利用することも種々検討されているが、CO_2は極めて反応性の低い物質であり、反応に要するエネルギー等も考慮すると、トータルでCO_2が削減できる実用的なプロセスは未だ確立されていない。

本事業では、CO_2からシュウ酸等の合成をモデル反応として検討することにより、CO_2を原料とした新規プロセスの試設計を行う。

事業の目標（2011年度　中間目標）

化学プロセス等から発生する副生ガスをマイルドな条件で効率良く吸着、脱離することで、高純度、低コスト、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グリーンに生産できるプロセスの開発を目指す。

①副生ガスの分離・精製材料の開発
・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CO_2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。

②副生ガスによるグリーンプロセス技術の開発
・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。

プロジェクトとしての目標・根拠（基本計画）

研究開発項目	研究開発目標	根　拠*)
①副生ガスの分離・精製材料の開発	**分離後のCO_2濃度**　**95%以上** （2013年度末目標　99．9%以上）	化学品原料として用いる際の純度を考慮
	CO_2吸着エネルギー　**40kJ/mol以下** （2013年度末目標　30kJ/mol以下）	実用的な材料として、既存材料を凌駕する世界最高のレベル
	CO_2分離度　**150以上** （2013年度末目標　300以上）	実用的な材料として、世界最高のレベル
②副生ガスによるグリーンプロセス技術の開発	**選択率（電流効率）**　**60%以上** （2013年度末目標　80%以上）	世界最高レベルの効率

*)基本的に中間目標は最終目標（2013年度末目標）に対するマイルストーンであり、最終目標の根拠を記す

個別開発項目及び目標 (各企業の実用化を考慮)

	項　目	目　標
①副生ガスの分離・精製材料の開発	1) CO_2ガスの分離・精製材料の開発	CO_2濃度≧95%、分離度≧150、吸着ｴﾈﾙｷﾞｰ≦40kJ/mol
	2) メタン精製用多孔性金属錯体の開発	高分離度の達成 脱離の低ｴﾈﾙｷﾞｰ化
	3) CO_2/エチレン分離用多孔性金属錯体の開発	基本骨格の探索（候補PCP抽出） ｽｹｰﾙｱｯﾌﾟ合成
	4) 多孔性金属錯体による微量ガス分離材の開発	活性炭同等以上の候補PCP抽出 ｽｹｰﾙｱｯﾌﾟ合成
②副生ガスによるグリーンプロセス技術開発	1,2) 触媒基盤技術の開発	選択率（電流効率）≧60%
	3) 液相法による多孔性金属錯体複合触媒の開発	PCP複合触媒の調製 試設計ﾌﾟﾛｾｽの要件検討
	4) 気相法による多孔性金属錯体複合触媒の開発	PCP複合触媒の調製 試設計ﾌﾟﾛｾｽの要件検討

公開

開発スケジュール及び予算

▲:基本原理確認　●:基本技術確立

	H21年度	H22年度	H23年度	中間目標	H24～H25年度	最終目標
①副生ガスの分離・精製材料の開発	⇒	▲ 当初計画より前倒し	⇒	CO_2≧95% 分離度≧150 吸着ｴﾈﾙｷﾞｰ≦40kJ/mol	⇢	● CO_2≧99.9% 分離度≧300 吸着ｴﾈﾙｷﾞｰ≦30kJ/mol
②副生ガスによるグリーンプロセス技術の開発	⇒		▲ ⇒	選択率（電流効率）≧60%	⇢	● 選択率（電流効率）≧80%

予算

年　度	H21年度	H22年度	H23年度	合計
予算額（百万円）	241	476	159	876

体制1

研究開発の実施体制(H22年度)

NEDO ↔ 技術検討委員会（外部有識者5名）

NEDO → 委託 → ①②③

NEDO ↔ 指示・協議 ↔ プロジェクトリーダー 国立大学法人京都大学　教授　北川宏

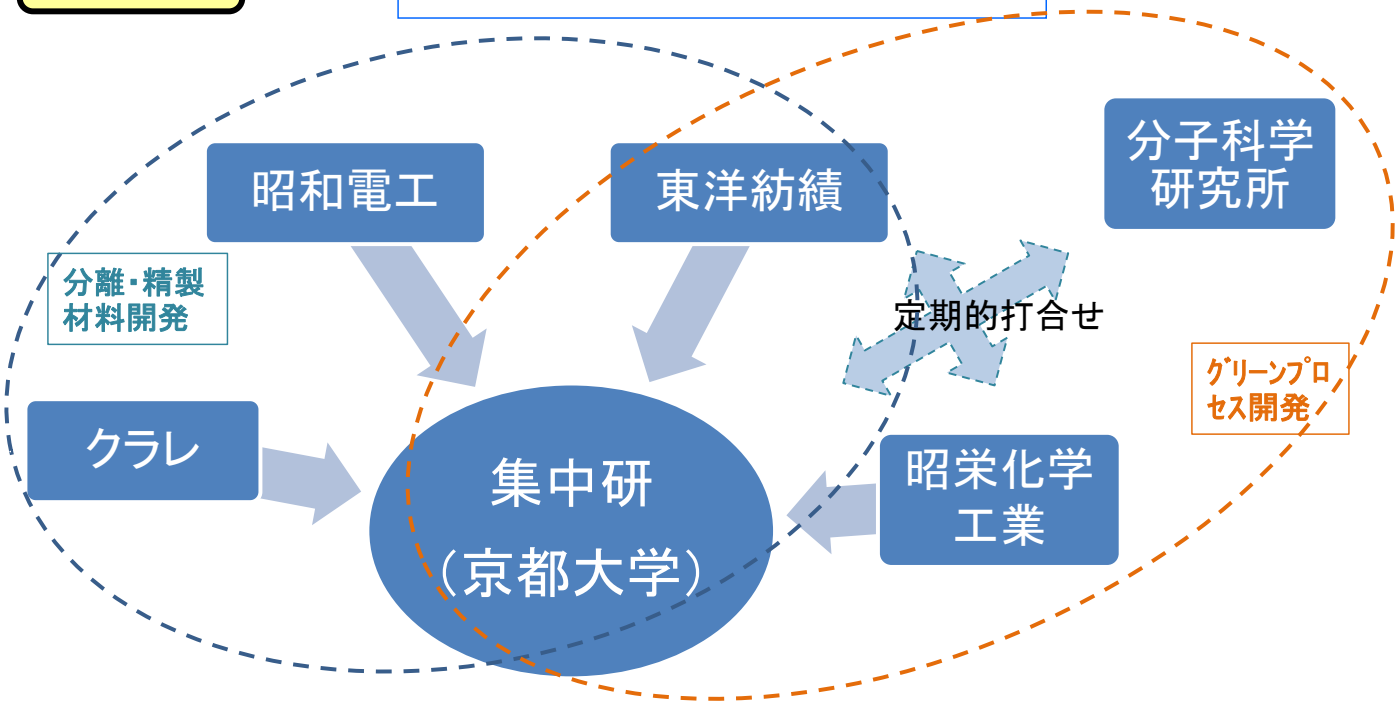
①副生ガスの分離・精製材料開発
- 国立大学法人京都大学
- 株式会社クラレ
- 昭和電工株式会社
- 東洋紡績株式会社

②副生ガスによるグリーンプロセス技術の開発
- 国立大学法人京都大学
- 大学共同利用機関法人自然科学研究機構分子科学研究所
- 東洋紡績株式会社
- 昭栄化学工業株式会社

③多孔性金属錯体の利用に関する調査
- 財団法人化学技術戦略推進機構（京都大学からの再委託）

体制2

集中研方式による基盤技術開発



京都大学及び各社の研究員が共同で基盤技術を開発

各社ニーズの開発は各分担研でも実施し、集中研でフォロー

マネジメント

本開発におけるNEDOのマネジメント

○実施者と外部有識者との連携の強化

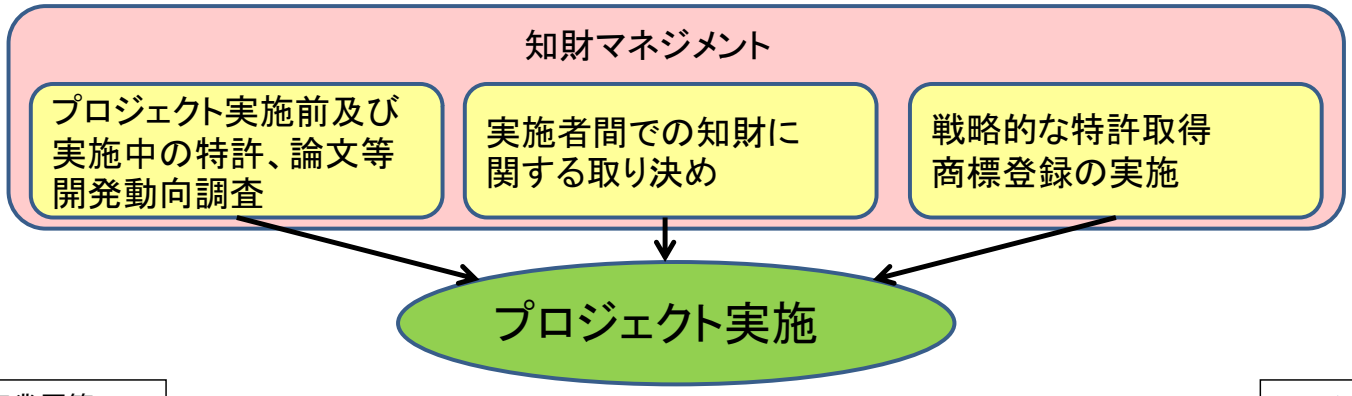
・技術検討会等にて外部有識者から効果的な指導、助言を受けられるよう、実施者との連絡を密に行いﾌﾟﾛｼﾞｪｸﾄの課題の明確化と共有化を図った

・技術検討会での指導、助言をﾌﾟﾛｼﾞｪｸﾄに反映すべく、ﾌｫﾛｰの充実を図った

○効率的な資金投入による開発加速

・基盤技術開発として当初計画以上の成果を得たため、実用化の前倒しを目指して加速資金の投入を行った

実施者による知財等のマネジメント



委員会等

○NEDO主催「技術検討委員会（年2回）」を開催

外部有識者（下記）の意見を運営管理に反映

委　員　名	所　属　等
戸嶋　直樹（委員長）	山口東京理科大学　教授
指宿　堯嗣	産業環境管理協会　常務理事
北島　昌夫	早稲田大学　客員教授
染宮　昭義	神鋼リサーチ　主席研究員
室井　高城	アイシーラボ　代表

運営管理への主な反映内容

・基盤技術開発の成果を受け、実用化検討としてPCPの成形方法及び成形体での評価を強化

・今後予想される分担研での課題対応への強化を図り、ﾌﾟﾛｼﾞｪｸﾄﾘｰﾀﾞｰを補佐して実用化の支援を図るｱﾄﾞﾊﾞｲｻﾞｰを設置

○プロジェクト側主催　技術推進委員会（年3回程度）、進捗報告会（月1回程度）

NEDOからも極力出席し、進捗管理を図った

加速

加速財源投入実績

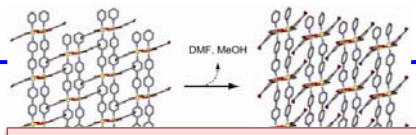
時期	金額（百万円）	目 的 及 び 概 要	主 な 成 果
平成22年2月	61	開発サイクル高効率化のため、集中研に反応装置及び評価装置を導入	世界で初めて気相法による多孔性金属錯体の合成に成功
平成22年6月	69	実用化時の課題検討着手のため、成形装置、評価装置等を導入	成形体による実用性評価に前倒しで着手
平成22年11月	255	早期実用化のため、中量合成装置及び実ガス想定の評価装置等を導入	実ガス想定の評価装置立ち上げ中

①-1　CO_2ガスの分離・精製材料の開発

CO_2分離における目標値の達成、および
より実際のニーズに近いガス分離向けPCPの検討開発を実施

(I) ガス分離向けPCP（ガス平衡系）の基礎探索

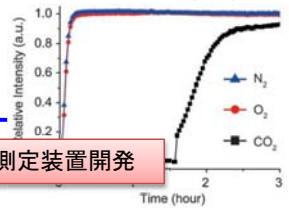
1. CO2高分離能を有する PCP基礎構造の探索
2. 常温・常圧でCO2を回収できる PCPの合成



柔軟性PCPによる高いCO2分離能の発現

(II) ガス流通系の分離評価

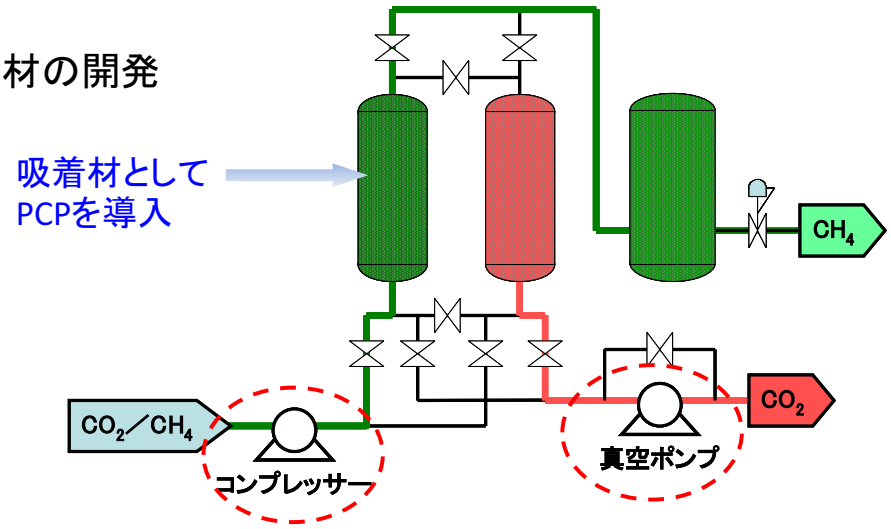
3. CO2分離向けPSA法に向けた ガス吸着圧力の精密制御
4. 流通系CO2/N2混合ガスから のCO2分離能の好適化・評価法 の確立



破過曲線測定装置開発

①-2　メタン精製用PCPの開発

次世代分離吸着材の開発



PSAで用いる吸着材を既存材料からPCPに置換え、省ｴﾈﾙｷﾞｰを図る

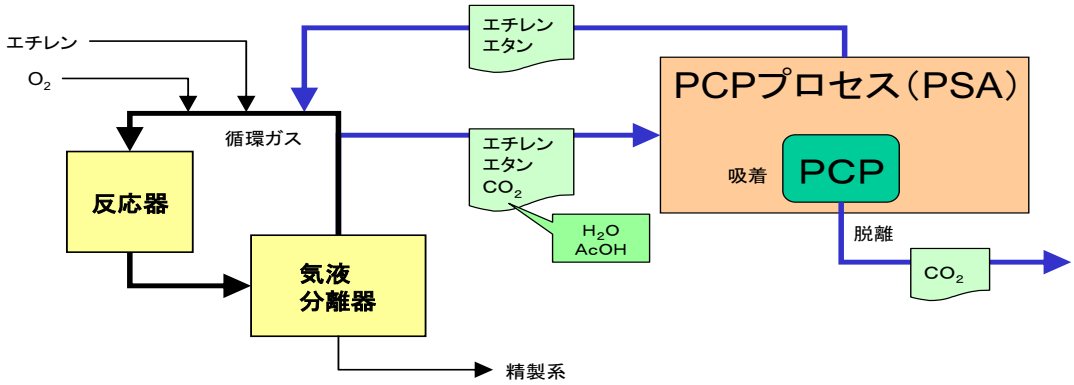
消費電力の削減
- 常圧での再生 → 真空ポンプ不要
- 高いCO_2分離度 → コンプレッサー小型化
- 圧力スイング幅狭化 → ブロワへの変更

①-3　CO_2/エチレン分離用PCPの開発

酸化反応プロセスのCO_2除去プロセスの省エネルギー化

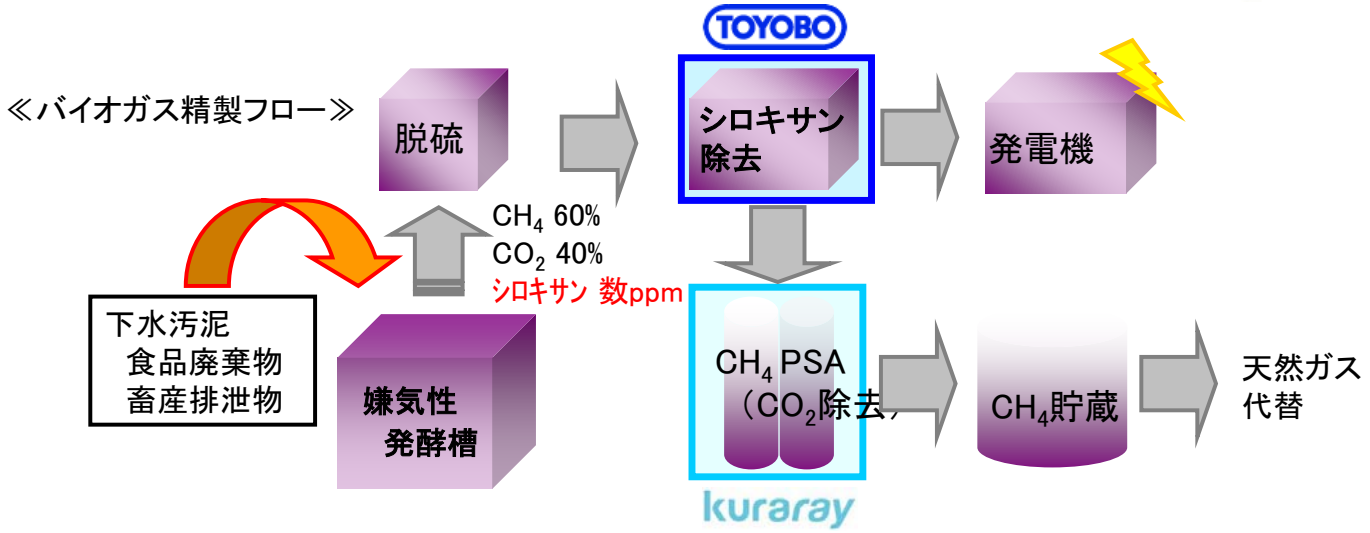
CO_2の選択的吸着分離

循環ガスからCO_2を吸着回収して、CO_2を分離する



熱炭酸カリ法からPCPを吸着材としたPSA法プロセスに代替し、省ｴﾈﾙｷﾞｰ化を図る

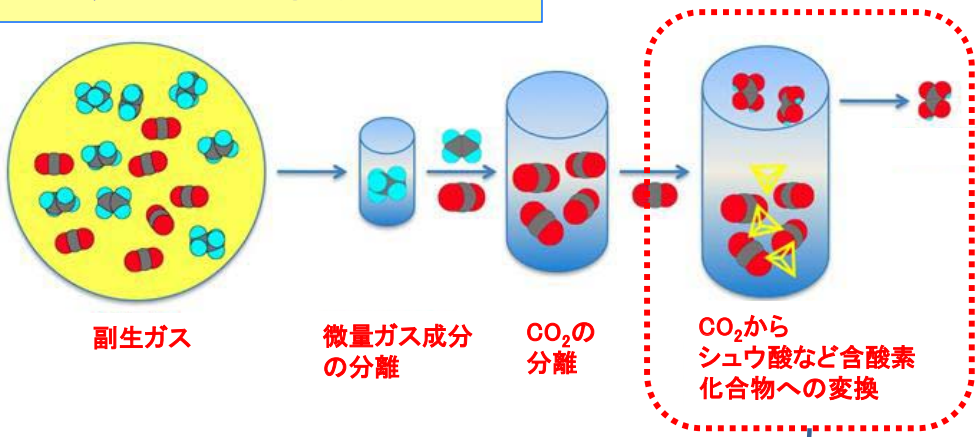
①-4　PCPによる微量ガス分離材の開発



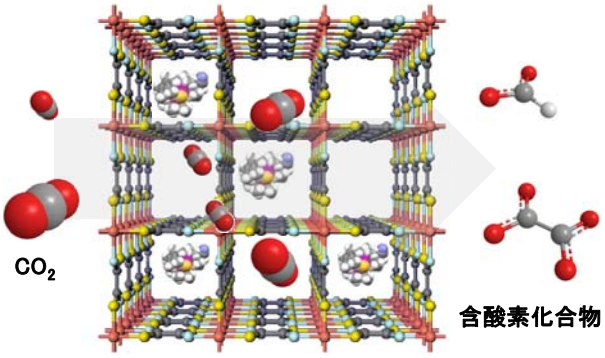
シロキサンD4除去の狙い　発電機、ボイラ等の発電効率低下を抑制

微量ガス吸着分離技術を活用し、シロキサン除去の実用化を狙う
他の微量ガス除去用途への展開も

②　副生ガスによるｸﾞﾘｰﾝﾌﾟﾛｾｽ開発



PCP複合触媒



× TOYOBO × SHOEI ×

高効率にCO_2から含酸素化合物へ変換するPCP複合触媒の開発

②-1,2　基盤技術開発
②-3　液相法による複合触媒開発
②-4　気相法による複合触媒開発

プロジェクト全体の目標の達成状況

開発テーマ		目　標	達成状況	達成度
①	副生ガスの分離・精製材料の開発	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CO_2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（吸着エネルギーが40kJ/mol以下、分離度が150以上である材料）を開発する	新規開発したPCPにて以下の性能を達成 ・CO_2濃度　98% ・吸着ｴﾈﾙｷﾞｰ　35kJ/mol ・分離度　200	◎
②	副生ガスによるグリーンプロセス技術の開発	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	PCPとの複合化により、CO_2からの選択率（電流効率）60%以上を達成	○

達成度（◎：大幅達成、○：達成、△：達成見込み、×：未達）

個別開発項目の目標達成状況

①副生ガスの分離・精製材料開発

個別開発項目	目標	達成状況	達成度
CO_2ガスの分離・精製材料の開発	・以下の性能を有するPCPの開発 （CO_2濃度≧95%、 吸着エネルギー≦40　kJ/mol 分離度≧150）	・目標を上回るPCPを開発 （CO_2濃度　98%、 吸着エネルギー　35kJ/mol 分離度　200）	◎
メタン精製用PCPの開発	・高分離度の達成 ・脱離の低エネルギー化	・分離度、脱離エネルギーの目標値を達成 ・スケールアップ合成、形態付与、評価装置検討に前倒しで着手	◎
CO_2／エチレン分離用PCPの開発	・基本骨格の探索（候補PCP抽出） ・スケールアップ合成実施	・目標性能を有するPCPに目処 ・目標以上のスケールでの合成を実施し、形態付与も前倒しで着手	○
PCPによる微量ガス分離材の開発	・活性炭同等以上の候補PCP抽出 ・スケールアップ合成実施	・目標性能を満たすPCPを抽出 ・スケールアップ合成の装置導入し、形態付与にも前倒しで着手	○

達成度（◎：大幅達成、○：達成、△：達成見込み、×：未達）

個別開発項目の目標達成状況

②副生ガスによるグリーンプロセスの開発

個別開発項目	目標	達成状況	達成度
触媒基盤技術開発	・PCP複合触媒によりCO_2からシュウ酸等含酸素化合物の合成において電流効率60%以上の達成	・電気化学的安定性の高いPCPを抽出 ・PCPと触媒の複合化手法に目処 ・電流効率60%以上でギ酸生成に成功	○
液相法によるPCP複合触媒の開発	・PCP複合触媒の調製 ・試設計プロセスの要件検討	・液相法によるPCPと触媒の複合化に成功し、触媒単体より大幅に性能を改善 ・試設計プロセスに関わる要件を抽出	○
気相法によるPCP複合触媒の開発	・PCP複合触媒の調製 ・試設計プロセスの要件検討	・気相法によるPCPの合成に世界初で成功し、量産化技術の基盤に ・同法によりPCP複合触媒調製も実施し評価中	○

達成度（◎：大幅達成、○：達成、△：達成見込み、×：未達）

研究開発全体としての成果

・柔軟構造性PCPの適用、理論計算の裏付けによる配位子の選定、固溶化手法の開発、触媒との複合化等、PCPの基盤技術として世界最高水準の開発成果を得ており、我が国の競争力強化への寄与が期待される

・ｼｰｽﾞとﾆｰｽﾞが融合し開発が促進された、オープンイノベーションのモデル

個別開発項目毎の成果

①副生ガスの分離・精製材料の開発

・CO_2等の濃縮及び個別ニーズに対応した分離・精製用PCPを開発

・分離性能に目処が立ったため、実用化を睨んだ性能評価、成形方法等について当初計画より前倒しで着手

②副生ガスによるグリーンプロセス技術の開発

・世界初の気相法によるPCP合成に成功し、大量合成が視野に

・触媒とPCPの複合化により活性が大幅に向上し、新たな高効率プロセス開発への適用が期待される

知財状況１

年度	H21	H22	H23	計
出願特許	5	11＊)	2	18件
論文投稿	2	3	4	9件
研究発表・講演		3		3件
新聞・雑誌等への掲載		5		5件

＊)PCT出願1件含む

※　平成21年度に商標登録を実施し、活用を図っている
（ｺｰﾃﾞｨﾌﾚｯｸｽ、COORDIFLEX）

※　平成23年5月末現在

知財状況２　論文等

論文リスト

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	S. Horike(1), S. Kitagawa(1), *et al.*	(1)京都大学	Enhanced Selectivity of CO_2 from a Ternary Gas Mixture in an Interdigitated Porous Framework	*Chem. Commun.*, 2010, **46**, 4258-4260	有	2010年
2	S. Horike(1), Y. Inubushi(2), S. Kitagawa(1), *et al.*	(1)京都大学 (2)㈱クラレ	Solid Solutions of Soft Porous Coordination Polymers for the Fine-Tuning of Gas Adsorption Properties	*Angew. Chem. Int. Ed.*, 2010, **49**, 4820-4824	有	2010年
3	堀毛悟史(1), 犬伏康貴(2), 北川　進(1)	(1)京都大学 (2)㈱クラレ	多孔性錯体を利用したCO_2の選択的分離	未来材料、7月号、2010 p.23-28	無	2010年
4	Y. Inubushi(1), S. Horike(2), S. Kitagawa(2), *et al.*	(1) ㈱クラレ (2) 京都大学	Modification of flexible part in Cu^{2+} interdigitated framework for CH_4/CO_2 separation	*Chem. Commun.*, 2010, **46**, 9229-9231	有	2010年
5	H. Kitagawa (1), *et al.*	(1)京都大学	Surface Nano-Architecture of A Metal-Organic Framework	*Nature Mat.*, 2010, **9**, 565-571	有	2010年
6	H. Kitagawa (1), *et al.*	(1)京都大学	Highly-crystalline Nanofilm by Layering Porphyrin MOF Sheets	*J. Am. Chem. Soc.*, 2011, **133**, 5640-5643	有	2011年
7	S. Horike (1), S. Kitagawa (1), *et al.*	(1) 京都大学	Relationship between Channel and Sorption Properties in Coordination Polymers with Interdigitated Structures	*Chem. Eur. J.*, 2011, **17**, 5138-5144.	有	2011年
8	樋口　雅一(1) 北川　進(1)	(1)京都大学	金属錯体が魅せる空間科学（夢を実現にする新しい空間材料～多孔性配位高分子）	化学と工業、**64**, 2011 p.397-399	無	2011年
9	S. Horike(1), S. Kitagawa(1), *et al.*	(1)京都大学	Differences of crystal structure and dynamics between soft porous nanocrystal and bulk crystal	*Chem. Commun.*, 2011, accepted	有	—

知財状況3　研究発表、新聞等への掲載

研究発表リスト

番号	発表年月日	発表媒体	発表タイトル	発表者	所属
1	2010/09/07	MOF2010 （国際学会／ポスター）	Gas Separation Properties of Interd igitated Porous Frameworks	○犬伏康貴(1) 堀毛悟史(2) 北川　進 (2)	(1) ㈱クラレ (2) 京都大学
2	2010/09/15	第59回高分子討論会 （国内学会／口頭／招待発表）	多孔性配位高分子のダイナミクスを利用したCO_2ガス分離材の開発	○堀毛悟史(1) 犬伏康貴(2) 北川　進(1)	(1) 京都大学 (2) ㈱クラレ
3	2010/09/28	第60回錯体化学討論会・第60回記念錯体化学OSAKA国際会議 （国際学会／口頭／一般発表）	Preparation of Solid Solutions of Porous Coordination Layer for Efficient Gas Separation	○堀毛悟史(1) 犬伏康貴 (2) 北川　進(1)	(1) 京都大学 (2) ㈱クラレ

新聞等掲載リスト

番号	発表年月日	掲載媒体	タイトル
1	2010/05/31	日本経済新聞	CO_2吸収膜開発 ～5年後実用化へ　アルコールなど合成～
2	2010/06/11	科学新聞	多孔性配向ナノ結晶薄膜開発 ～表面構造解析に成功～
3	2010/07/05	日本経済新聞 （電子版）	2人の「京大・北川教授」が相次ぎ開発 ～CO_2吸収材に注目～
4	2010/08/02	THE NIKKEI WEEKLY	Seeing double: Promising advances in materials for CO_2 absorption
5	2010/11/04	日経産業新聞	CO_2吸収 低コストで 新素材開発、室温で

知財状況4　商標登録

商標登録証
登録第5380717号
商標　標準文字　コーディフレックス
指定商品又は指定役務並びに商品及び役務の区分
第1類　化学品，原料プラスチック
商標権者　岡山県倉敷市酒津1621番地
株式会社クラレ
東京都新宿区西新宿2丁目1番1号
昭栄化学工業株式会社
出願番号　商願2010－000405
出願日　平成22年1月6日
登録日　平成23年1月7日
この商標は，登録するものと確定し，商標原簿に登録されたことを証する。
平成23年1月7日
特許庁長官
岩井良行
商標登録証
登録第5380717号
商標権者　東京都港区芝大門1丁目13番9号
昭和電工株式会社
大阪府大阪市北区堂島浜2丁目2番8号
東洋紡績株式会社
［以下余白］

商標登録証
登録第5380718号
商標　標準文字　COORDIFLEX
指定商品又は指定役務並びに商品及び役務の区分
第1類　化学品，原料プラスチック
商標権者　岡山県倉敷市酒津1621番地
株式会社クラレ
東京都新宿区西新宿2丁目1番1号
昭栄化学工業株式会社
出願番号　商願2010－000411
出願日　平成22年1月6日
登録日　平成23年1月7日
この商標は，登録するものと確定し，商標原簿に登録されたことを証する。
平成23年1月7日
特許庁長官
岩井良行
商標登録証
登録第5380718号
商標権者　東京都港区芝大門1丁目13番9号
昭和電工株式会社
大阪府大阪市北区堂島浜2丁目2番8号
東洋紡績株式会社
［以下余白］

最終目標と見通し

開発テーマ		最終目標（平成25年度末）	達成見通し
①	副生ガスの分離・精製材料の開発	・副生ガスとしてのCO_2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。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を吸着、脱離できる新規材料を開発する。 （副生ガスの吸着エネルギー　30kJ/mol以下、分離度　300以上）	・数値目標に関しては、今までの知見及び理論的サポートによるファインチューニングで達成可能 ・個別の開発項目についても、開発指針が明確になりつつあり、達成可能な見込み
②	副生ガスによるグリーンプロセス技術の開発	・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。	・複合触媒の調製法の最適化等により達成可能な見込み

本事業の実用化とは

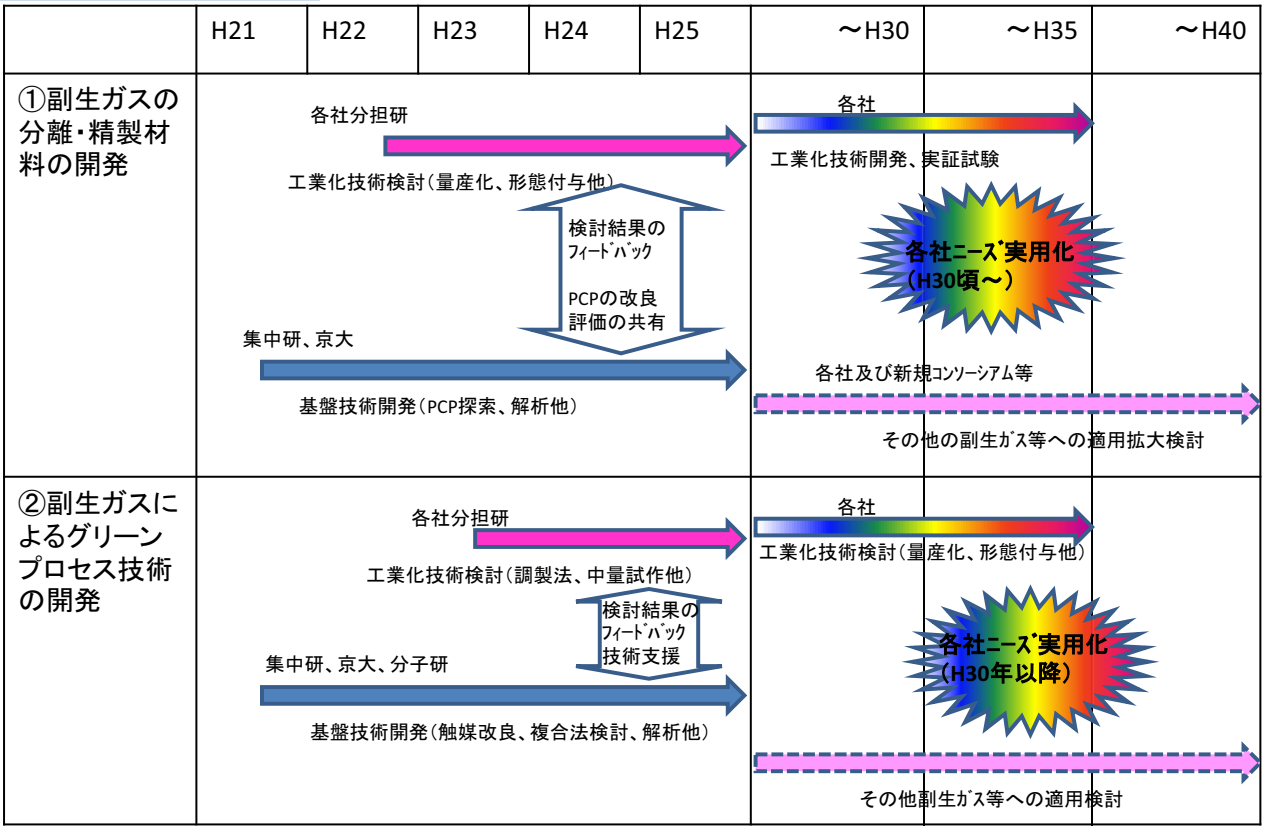
①各企業のニーズ実現としての実用化

各企業の具体的な開発ターゲット ＋ これまでの技術開発の成果 ＋ アカデミアによる継続的なバックアップ → 各企業による実用化

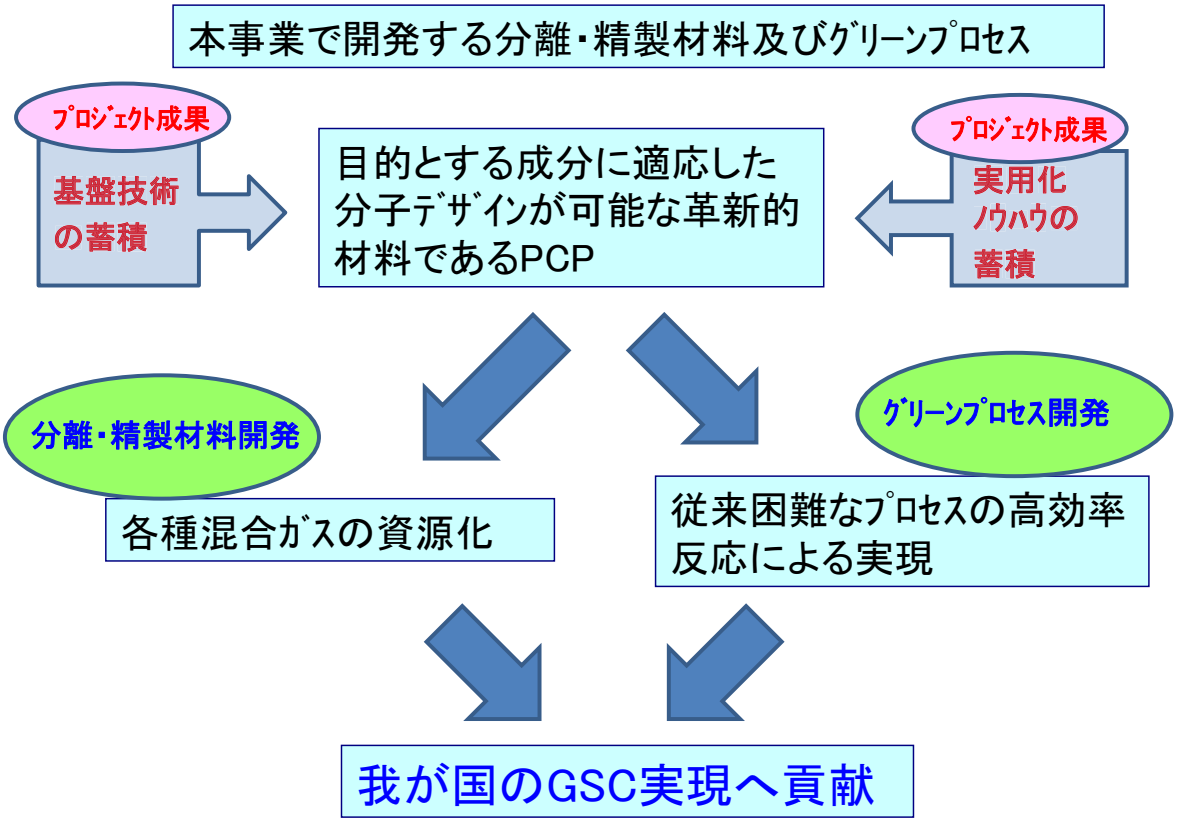
②革新的な分離材料、及びグリーンプロセス技術の開発による グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術の強化

PCPライブラリーの充実 ＋ 理論と評価実績に基づく改良指針 ＋ 開発企業からのフィードバック → 基盤技術力の強化

実用化スケジュール



波及効果



Ⅲ.2. 研究開発項目毎の成果

公開

Ⅲ2.1　副生ガス分離・精製用PCP基盤技術開発の成果
- 2.1.1　CO_2／窒素分離・精製用PCPの開発
- 2.1.2　メタン精製用PCPの開発
- 2.1.3　CO_2／エチレン分離用PCPの開発
- 2.1.4　PCPによる微量ガス分離材の開発

Ⅲ2.2　回収CO_2によるグリーンプロセス基盤技術開発の成果
- 2.2.1　PCP複合触媒の基盤技術開発
- 2.2.2　CO_2還元反応触媒基盤技術開発
- 2.2.3　液相法によるPCP複合触媒の開発
- 2.2.4　気相法によるPCP複合触媒の開発

公開

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

「副生ガス高効率分離・精製プロセス
基盤技術開発」（中間評価）

CO_2／窒素分離・精製用
PCP基盤技術開発の成果
（公開）

２０１１年６月９日（木）

国立大学法人京都大学

事業原簿　Ⅲ-2.1.1

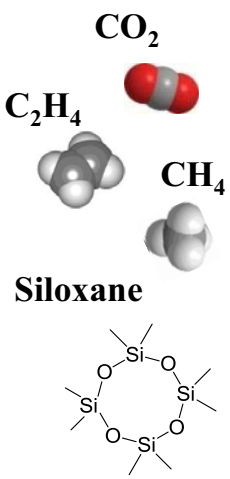
Ⅲ2.1.1 CO_2／窒素分離・精製用 PCP基盤技術開発の成果

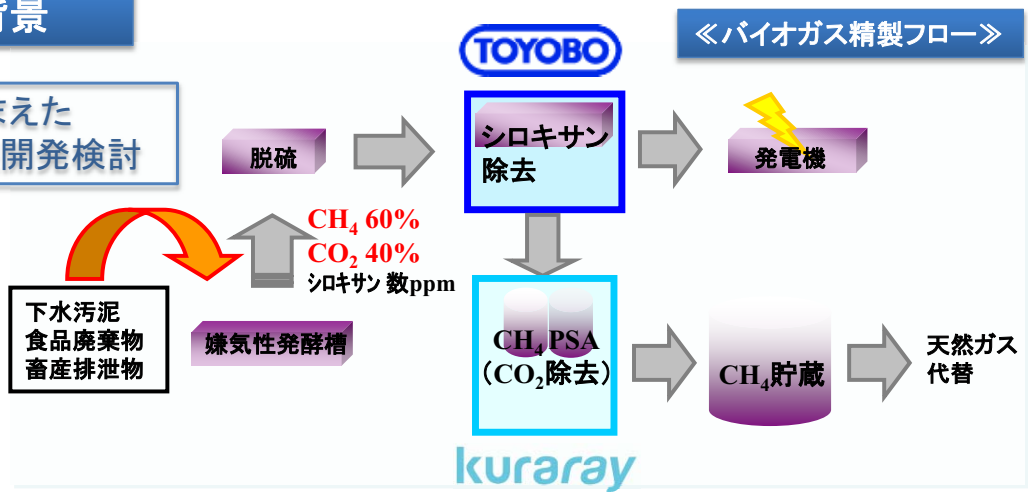
国立大学法人 京都大学

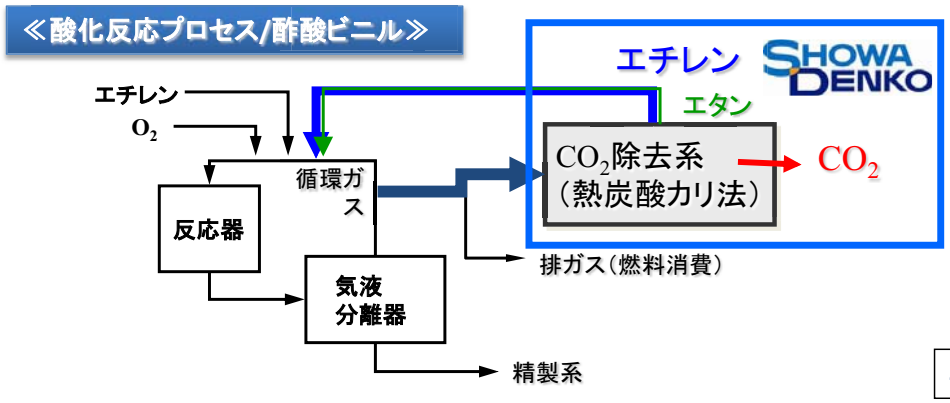
1. 基盤技術開発の成果について
   (1) 研究の背景
   (2) 検討内容
   (3) 中間目標の達成度
   (4) 成果の意義

(1) 研究の背景

各企業の目的を踏まえた
分離向けPCPの基礎開発検討







(2)　検討内容

CO_2分離における目標値の達成、および
より実際のニーズに近いガス分離向けPCPの検討開発を行った

(I) ガス分離向けPCP（ガス平衡系）の基礎探索

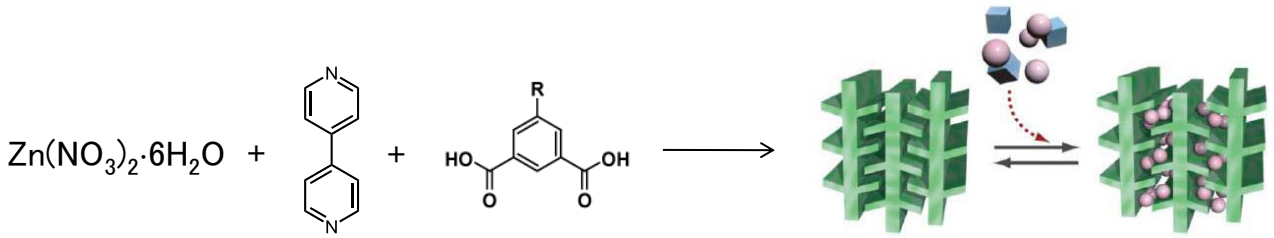
1. CO_2高分離能を有するPCP基礎構造の探索
2. 常温・常圧でCO_2を回収できるPCPの合成

(II) ガス流通系の分離評価

3. CO_2分離向けPSA法に向けたガス吸着圧力の精密制御
4. 流通系CO_2/N_2混合ガスからのCO_2分離能の好適化・評価法の確立

1. CO_2高分離能を有するPCP基礎構造の探索

二次元レイヤー型PCP : COORDIFLEX

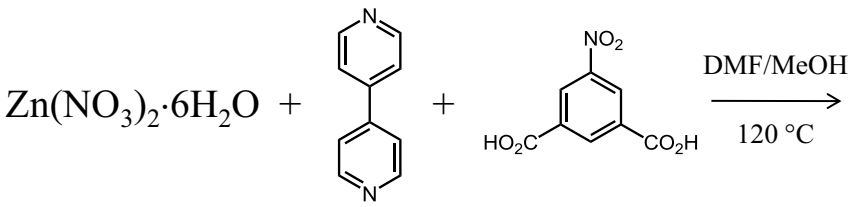


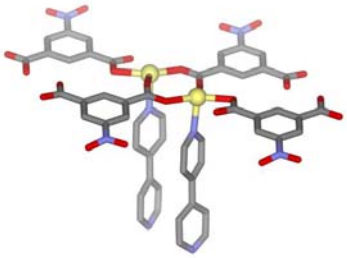
CO_2ガスに選択的分離能を示すPCPの候補構造の1stスクリーニングを行った

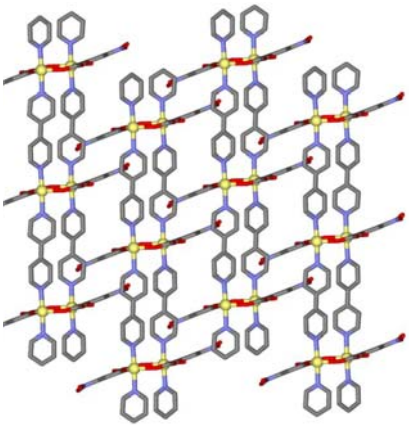
↓

置換基を様々変化できる二次元レイヤー型構造

CO_2高分離能を示す柔軟なPCP構造：COORDIFLEX-5



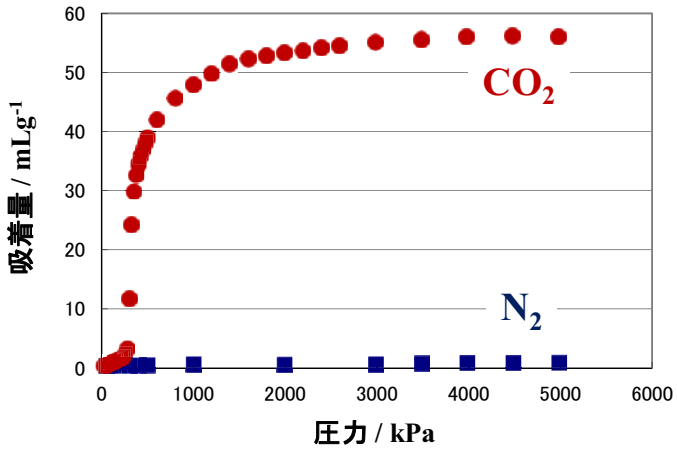




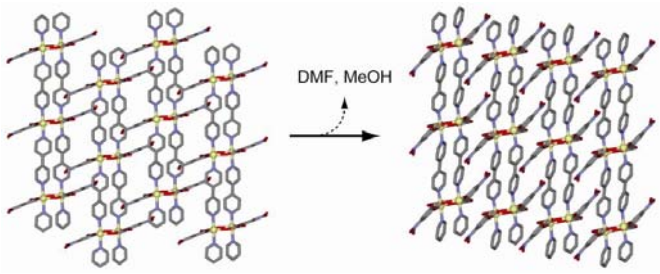
既存の吸着材とは異なる特徴：
構造の柔軟性に着目した

COORDIFLEX-5のCO_2およびN_2ガス吸着特性

室温におけるCO_2/N_2吸着等温線



結晶構造解析



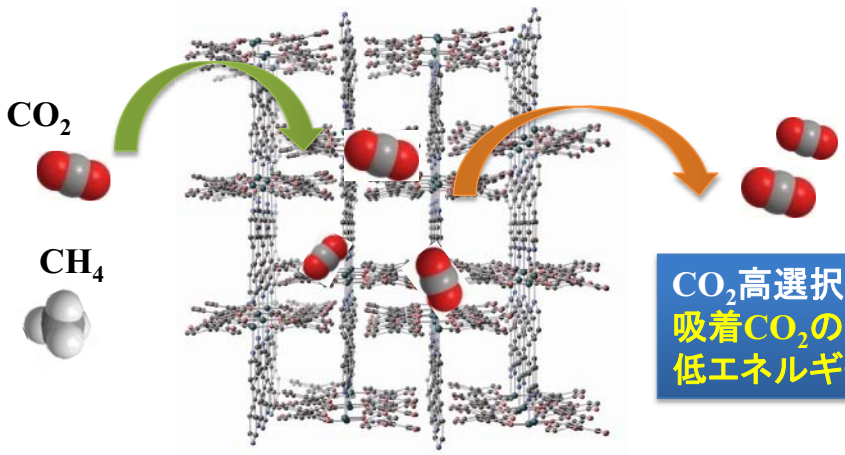
非常に大きな構造柔軟性を持つPCPが
高いCO_2選択性を持つことがわかった

吸着ガス中のCO_2濃度：95%以上
CO_2吸着エネルギー　：35 kJ/mol
（<40kJ/mol）を達成

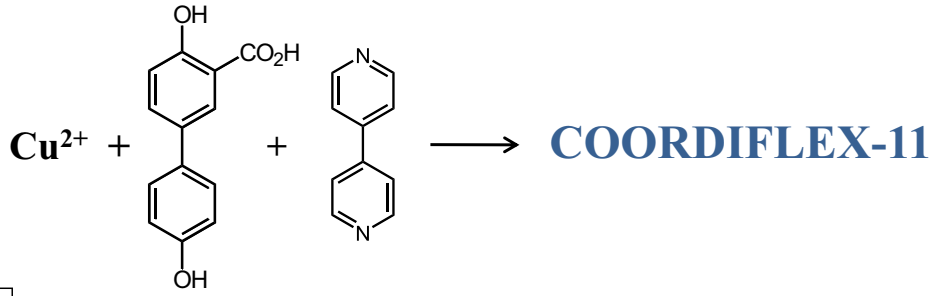
→

CO_2の高濃度濃縮
分離吸着CO_2の温和条件下における
回収を可能とする

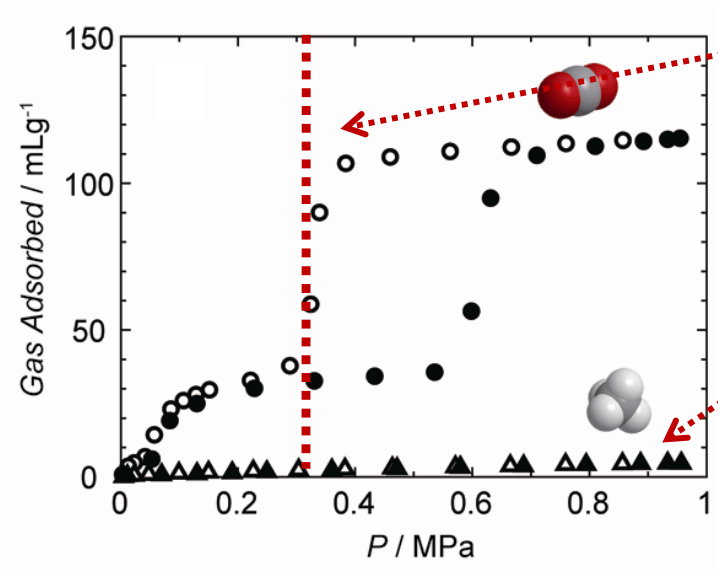
2. 常温・常圧でCO_2を回収できるPCPの合成



CO_2高選択性のみならず、
吸着CO_2の回収が
低エネルギーで可能なPCPが必要



COORDIFLEX-11のCH_4およびCO_2ガス吸着等温線



CO_2の脱着は
1気圧以上で可能

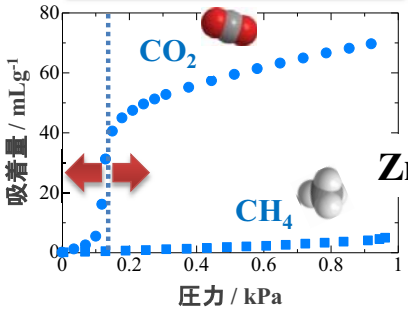
CH_4はほぼ吸着しない

CH_4/CO_2において高いCO_2分離能を持ち、かつ
1気圧以上でCO_2を放出できる構造柔軟性を付与した

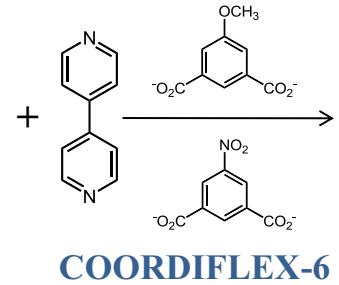
Inubushi, Horike, Kitagawa *et al.*, *Chem. Commun.* 2010.

3. CO_2分離向けPSA法に向けたガス吸着圧力の精密制御

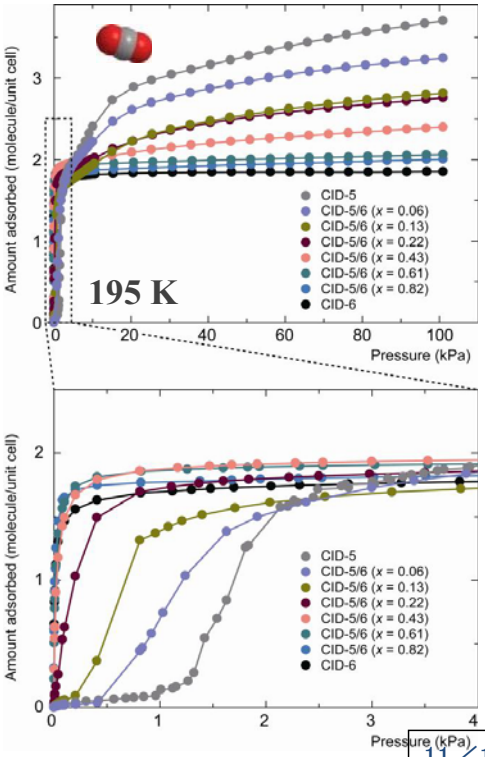
COORDIFLEX-5のみ



PCP固溶体の合成



COORDIFLEX-5/6



あるCOORDIFLEXのみではCO_2吸着開始圧がPSA運転において最適ではない

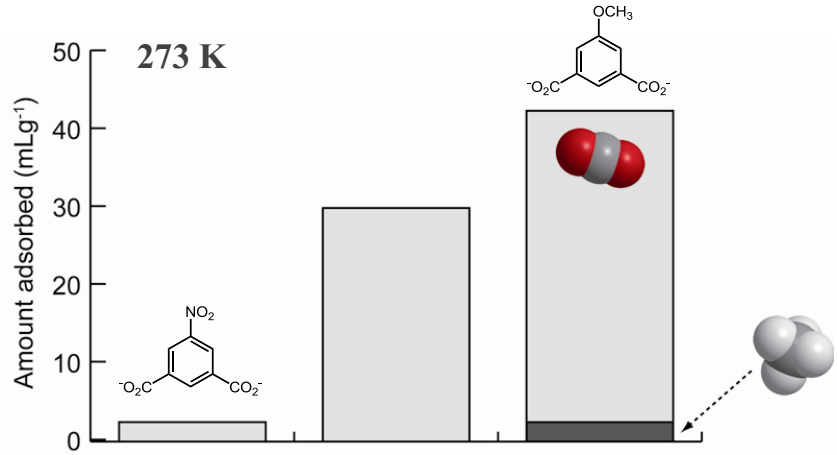
↓

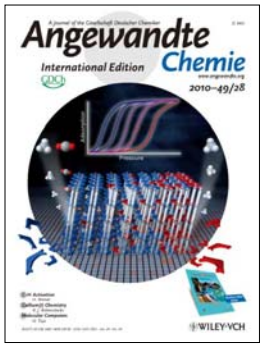
PCPの固溶化によってCO_2吸着開始圧を自在に変える手法を開発

事業原簿　Ⅲ-2.2.4　p.8～10

固溶体 COORDIFLEX-5/6 を用いたCO_2分離能の好適化

× kuraray



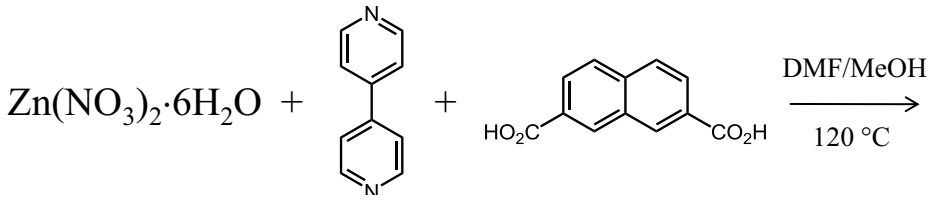


PCPの柔軟性を自在に変え、最適なCO_2分離能を付与

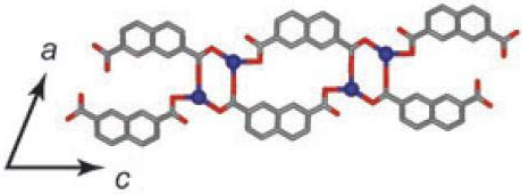
Horike, Inubushi, Kitagawa, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2010.

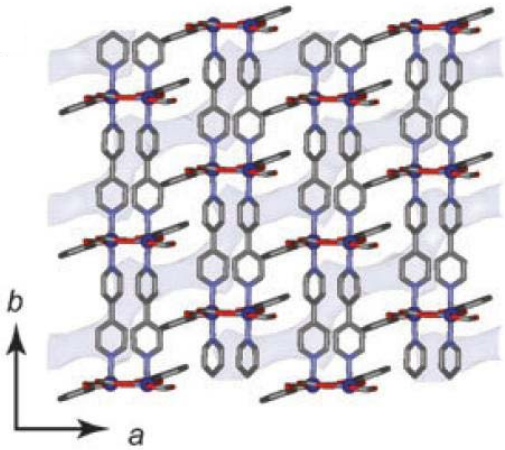
事業原簿　Ⅲ-2.2.4　p.8～10

5. 流通系CO_2/N_2混合ガスからのCO_2分離能の好適化・評価法の確立



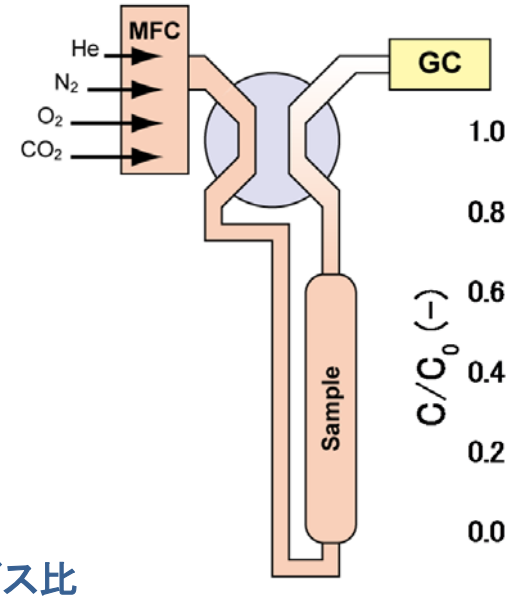
[Zn(27ndc)(bpy)]
COORDIFLEX-3

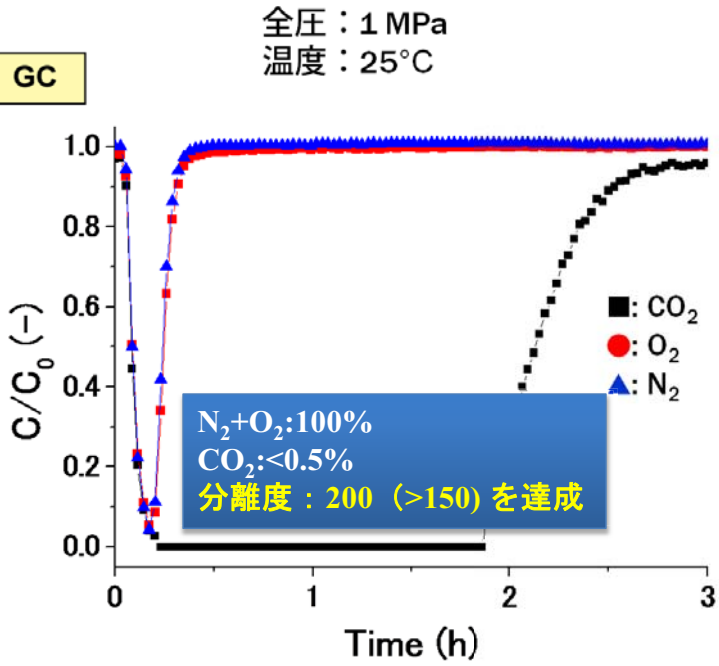




平衡状態における高分離能のみでなく、混合ガス流通系において高い分離能を示すPCPの検討開発を行った

COORDIFLEX-3の流通系ガス分離能評価：破過曲線測定





混合ガス比
$CO_2:O_2:N_2$ = 1:21:78 (vol)

流通系におけるガス分離評価装置を開発するとともに目標値を超える分離度を有するPCP開発に成功

(3)　中間目標の達成度表

研究開発項目	目標	成果	達成度
CO_2／窒素分離・精製用PCP基盤技術開発の成果	吸着ガス中のCO_2濃度：95%以上	CO_2：56mL/g N_2:1.2mL/g @298K, 5MPa CO_2濃度：97.9%	○
	分離度：150以上	CO_2:100% N_2:<0.5% 分離度：200	◎
	吸着熱：40 kJ/mol以下	35.0 kJ/mol	○

◎　大幅達成、○達成、△達成見込み、　×未達

(4)　成果の意義

目標値の達成

(I) ガス分離向けPCP（ガス平衡系）の基礎探索

1. CO_2高分離能を有するPCP基礎構造の探索
2. 常温・常圧でCO_2を回収できるPCPの合成

各企業のターゲットに応じたPCP基礎検討の実施

(II) ガス流通系の分離評価

3. CO_2分離向けPSA法に向けたガス吸着圧力の精密制御
4. 流通系CO_2/N_2混合ガスからのCO_2分離能の好適化・評価法の確立

グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発プログラム

「副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発」（中間評価）

Ⅲ2.1.2＆Ⅳ1.1
メタン精製用PCP開発の成果と実用化
（公開）

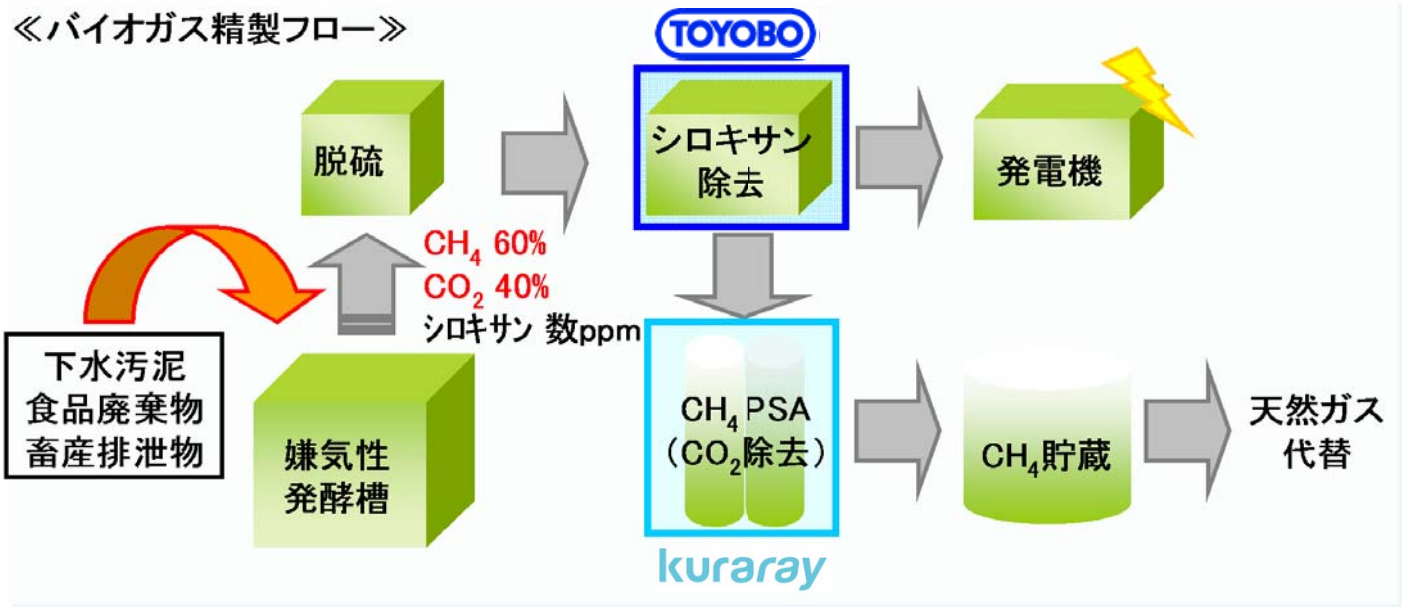
株式会社クラレ

2011年6月9日（木）

kuraray

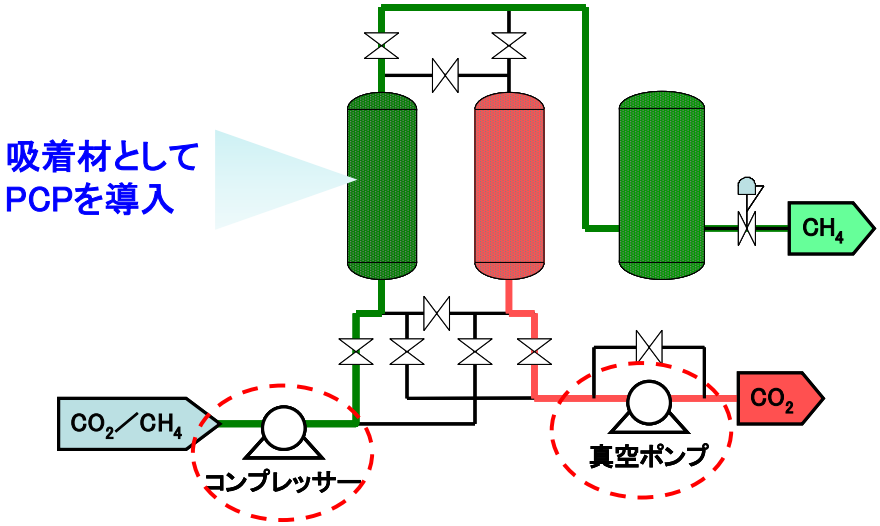
本研究開発の背景

環境・エネルギー分野の新事業創出を目指しCO_2分離回収技術に注目
欧米を中心に市場が立ち上がりつつあるバイオガス精製について検討



本研究開発の目的

メタンPSA用次世代分離吸着材の開発



分離吸着材にPCPを用いることで消費電力削減を目指す

- 常圧での再生 → 真空ポンプ不要
- 高いCO_2分離度 → コンプレッサー小型化
- 圧力スイング幅狭化 → ブロワへの変更

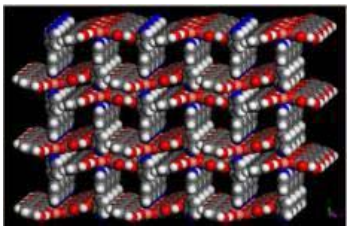
＜23年度開発目標＞
- 分離度 >150
- 吸着ガスに占めるCO_2濃度 >95%
- 0.1～1.0MPaの圧力範囲におけるCO_2有効吸着量 >60mL/g
- CO_2吸着エネルギー <40kJ/mol

実証試験

ラボPSA試験

形態付与検討

基本骨格探索



PCPの性能としての数値目標達成に向けた検討と並行して
PCPを使いこなすための技術開発も実施

平成21年度　22年度　23年度　24～25年度

3. 研究開発成果について　（1）目標の達成度

公開

開発目標		成果	達成度
高分離度の達成	①吸着ガス中のCO_2濃度　95%以上	95%	○
	②分離度　150以上	655	◎
脱離の低エネルギー化	①0.1～1.0MPaにおけるCO_2有効吸着量　60mL/g以上	97mL/g（@0.1～0.32MPa）	◎
	②CO_2吸着エネルギー　40kJ/mol以下	28.6kJ/mol	◎

◎大幅達成　○達成

PCPの性能としての数値目標を達成

↓

実用化に向けた課題の抽出・解決のための技術開発に注力

≪検討項目≫
①形態付与検討
②スケールアップ合成検討
③ラボPSA試験装置製作

事業原簿　Ⅲ2.1.2－4～6/6

3. 研究開発成果について　（2）検討内容

公開

開発の流れ

先行技術調査 → 追試験課題抽出 → 材料設計仮説検証 → 候補PCP開発

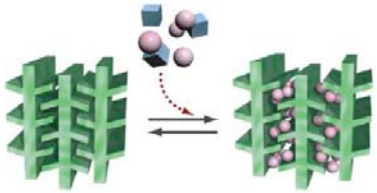
材料・情報を共有することで開発効率化@集中研

①細孔径の制御
分子篩効果による選択吸着

②細孔表面の修飾
細孔表面との相互作用による選択吸着

既存材料と同じ設計思想
↓
PCPのコストに見合う効果発現期待薄

③構造柔軟性の付与
吸着開始圧の制御
有効吸着量の増加



既存材料にはない特徴
↓
現行PSAの課題を解決？

PCP独自の特徴である構造柔軟性に特化して検討

事業原簿　Ⅲ2.1.2－2～3/6

バイオガス精製は欧州を中心に市場が立ち上がりつつある状況

例:ドイツは天然ガス供給網への注入を法律化（2008年）
2030年までに天然ガスの10%を代替
（100億m^3=約700万t）

「精製」ビジネスのチャンス

ビジネスモデルはガス会社・エンジニアリング会社へのPCP販売を想定

≪波及効果≫

本研究開発の成果をバイオガス以外のメタン濃縮回収へと展開

①天然ガス代替によるCO_2排出量削減（カーボン・ニュートラル）
②クリーン開発メカニズム（CDM）を通じたCO_2排出権の獲得

公開

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

「副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発」（中間評価）

Ⅲ2.1.3＆Ⅳ1.2
CO_2/エチレン分離用PCP開発の成果と実用化（公開）

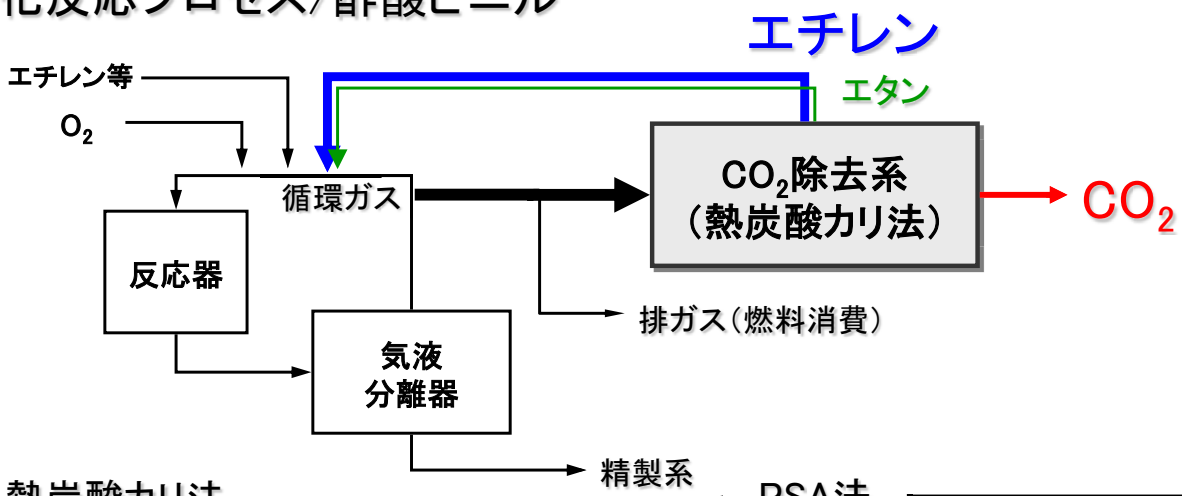
昭和電工株式会社

2011年6月9日（木）

事業原簿　Ⅲ2.1.3－1

公開

酸化反応プロセス/酢酸ビニル



熱炭酸カリ法

$$K_2CO_3 + CO_2 + H_2O \underset{\text{放出}}{\overset{\text{吸収}}{\rightleftharpoons}} 2\ K_2HCO_3$$

再生に多量の熱エネルギーが必要

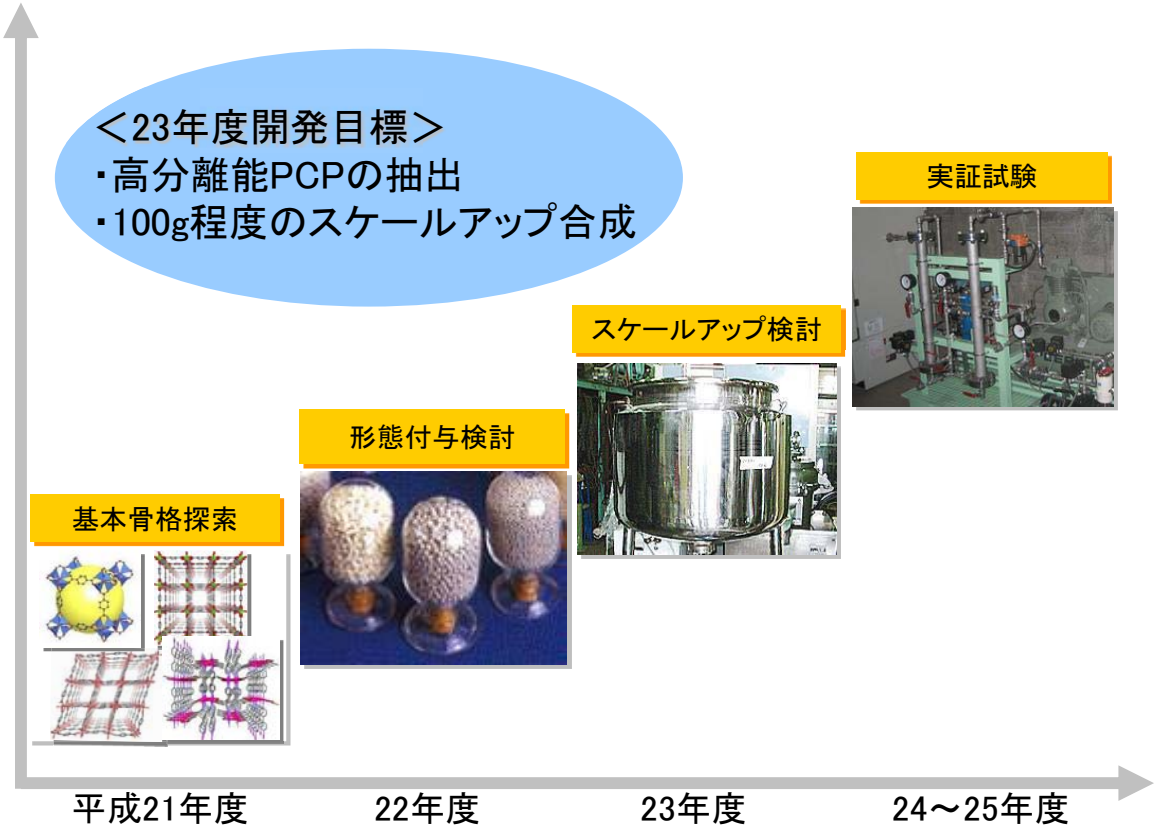
PSA法

・多量の熱エネルギーを削減可能
電力：～22kWh/t-CO_2
蒸気：～2200MJ/t-CO_2

・エチレンの選択吸着が可能になれば、エタンの過剰蓄積の問題も解決

事業原簿　Ⅲ2.1.3－1

開発目標およびスケジュール

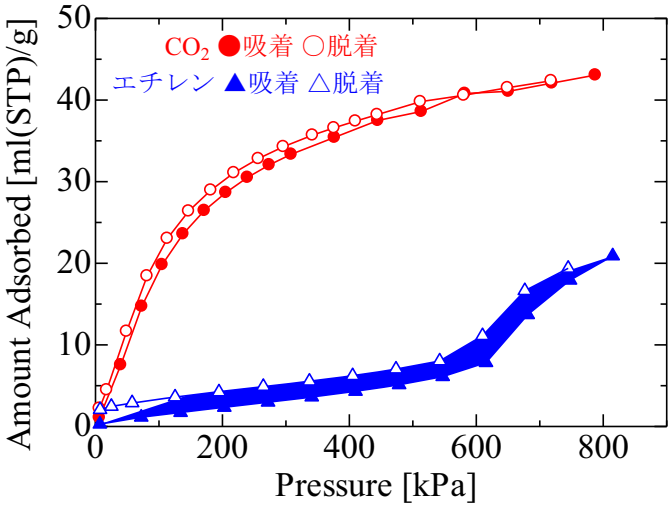


CO_2/エチレン分離用PCPの開発目標と達成状況

	目標	成果	達成度	今後の課題
1) 基本骨格探索	高分離能PCP基本骨格の抽出	目標性能を有するPCPに目処	△ 平成24年2月達成見込み	既設装置の改造により測定予定。
2) スケールアップ検討	100g程度のスケールアップ合成	・100g/バッチスケールでの実証合成 ・1kg/バッチスケールの合成環境整備	◎	1 kg/バッチスケールでの実証
3) 形態付与検討	実用化に必要な形態を付与する	成型による吸着性能への影響の把握	○	好適な形態付与方法の決定と具体的な成型方法の確立

◎　大幅達成、○達成、△達成見込み、×未達

開発成果



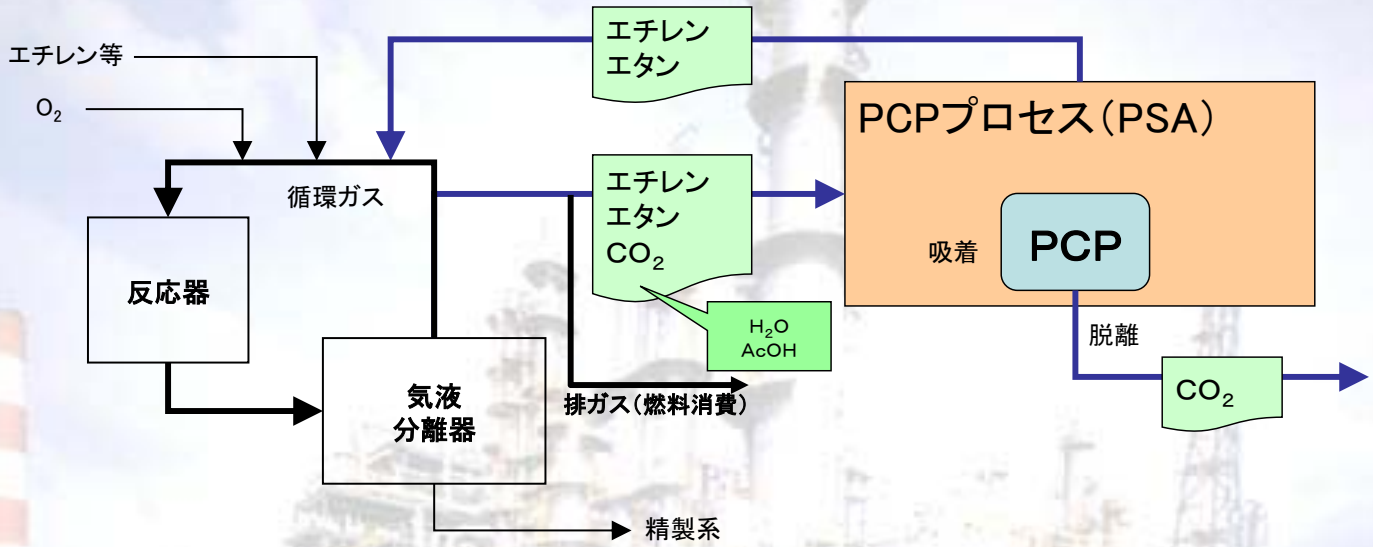
高いCO$_2$選択性を有するPCPの開発

形態付与の基礎検討を実施

公開

（Ⅳ1.2）CO$_2$/エチレン分離用PCPの開発

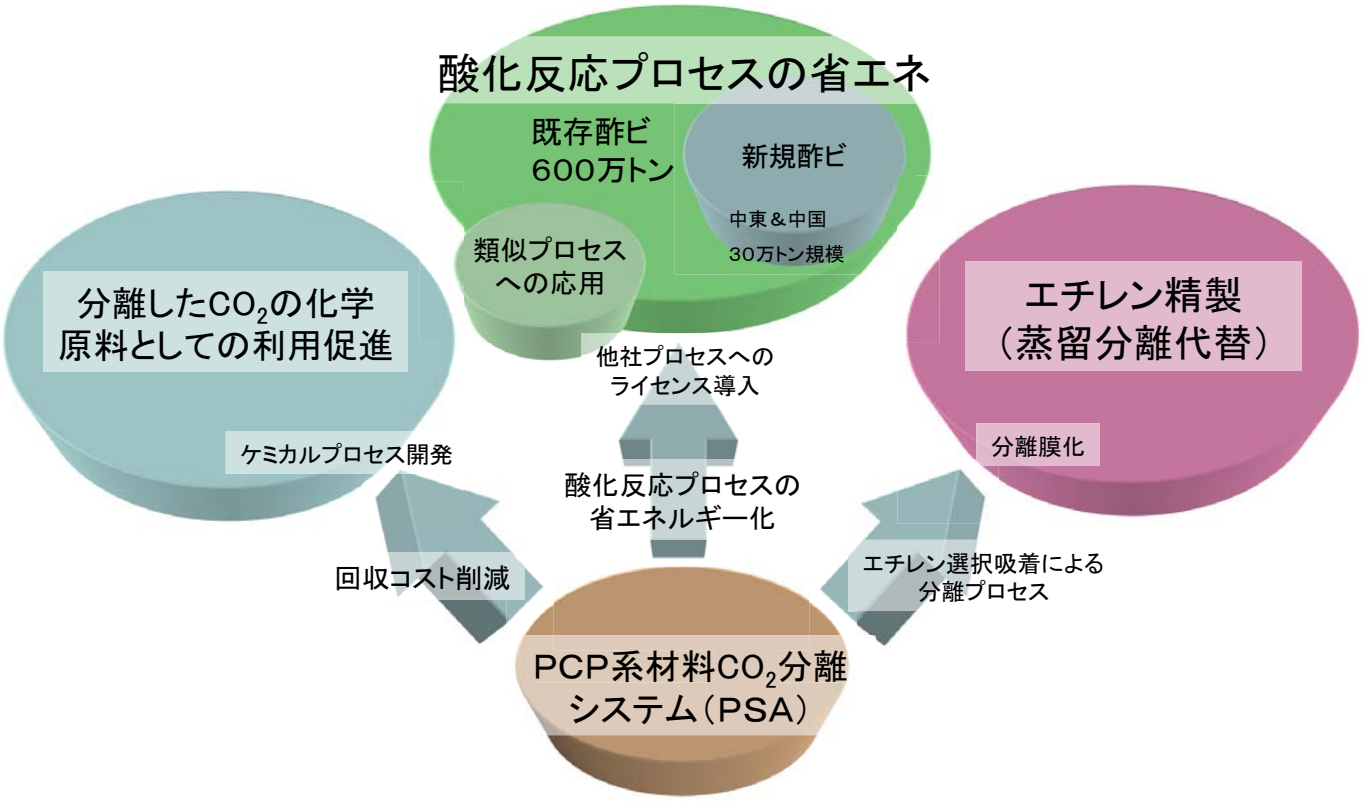
自社の酸化反応プロセスのCO$_2$除去プロセスの省エネルギー化



CO$_2$分除去系を熱炭酸カリ法から吸着法（PSA法）プロセスに代替して省ｴﾈﾙｷﾞｰ化する

公開

研究開発成果の効果



事業原簿　Ⅳ1.2－2

公開

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

「副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発」（中間評価）

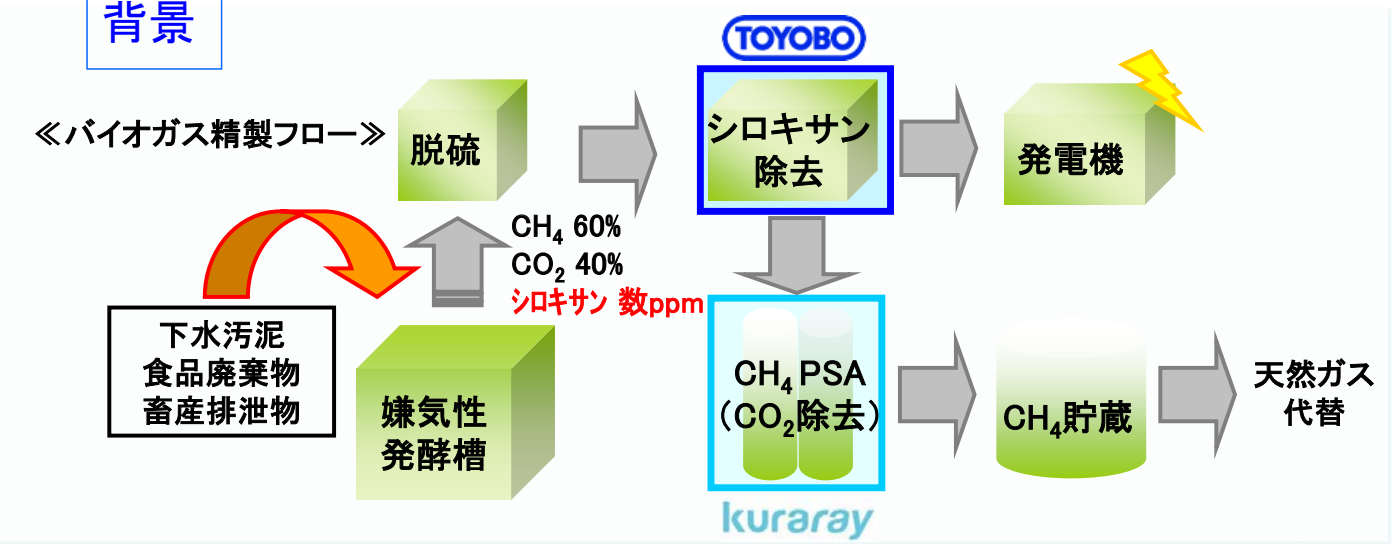
Ⅲ2.1.4＆Ⅳ1.3
PCPによる微量ガス分離材開発の成果と実用化（公開）

東洋紡績株式会社

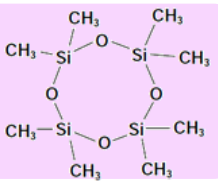
2011年6月9日（木）

公開

背景



シロキサンD4除去の狙い
発電機、ボイラ等の発電効率の低下を抑制



東洋紡保有の微量ガス吸着分離技術を活用し、シロキサン除去で実用化を狙う
波及効果：他の微量ガス除去用途への展開

公開

(1)研究開発項目の目標と達成状況

開発項目	目標	成果	達成度	今後の課題
PCPによる微量ガス分離材の開発	シロキサンD4分離用活性炭Bと同等以上の除去性能を有するPCP候補を3種類程度抽出する	目標性能を満たすPCPを3種見出した	○	現状の2倍の除去性能のPCPを開発する
	数百グラム程度のスケールアップ合成を行う	スケールアップ用オートクレーブを導入し、数百グラムスケールでの合成を検討できる体制を構築した	△(H24年2月達成予定)	数百グラムスケールでの合成を行う

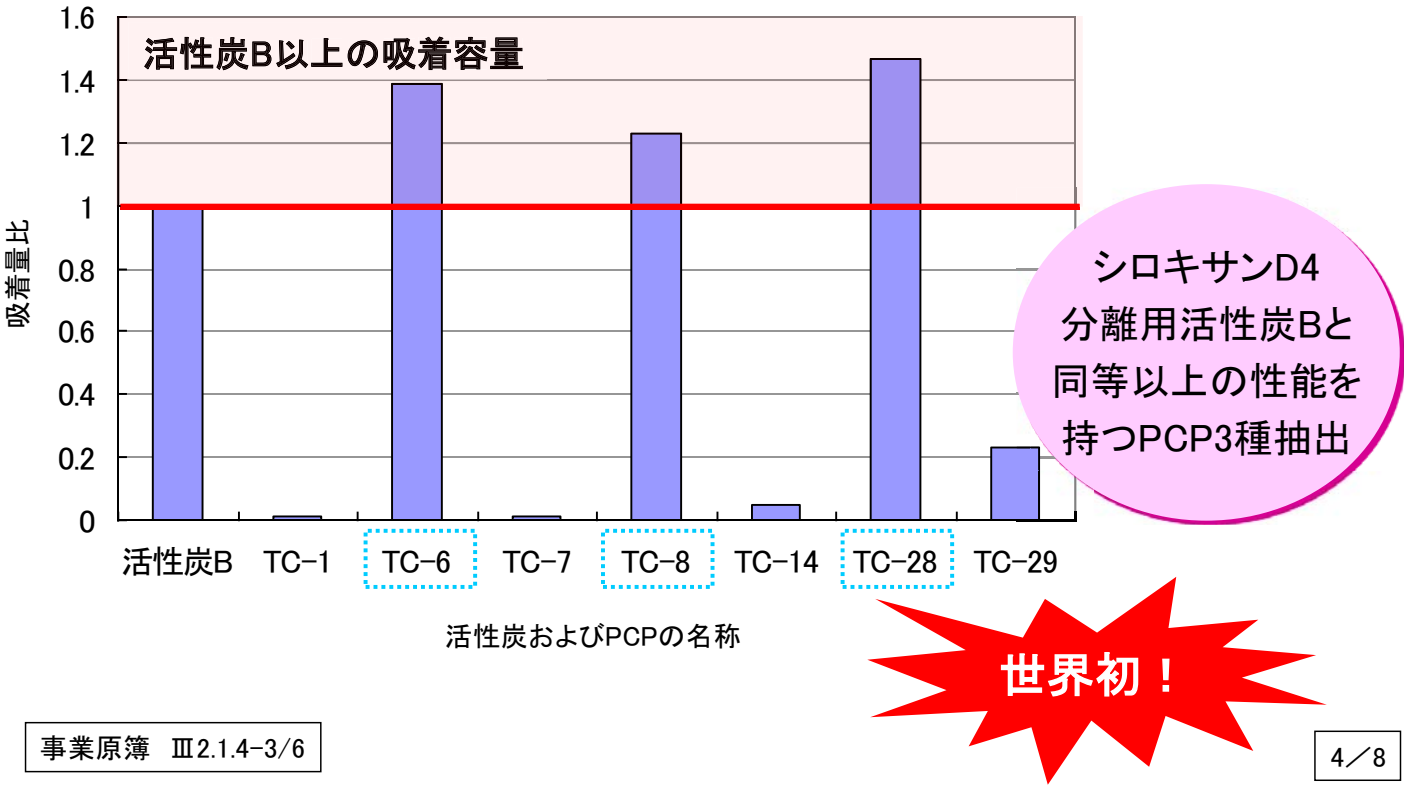
◎大幅達成、○達成、△達成見込み、×未達

事業原簿　Ⅲ2.1.5-5/6

公開

(2)－1　PCPの合成とシロキサンD4吸着性能評価

設計概念に基づきPCPを合成、シロキサンD4流通系吸着性能評価



事業原簿　Ⅲ2.1.4-3/6

（2） 成果の意義

シロキサン除去PCPの開発は世界初。また、高疎水性PCPを用いることで世界最高レベルの吸着材を提供できる可能性を見出した。同様の検討により、シロキサンD4以外の微量ガス分離材へも展開が可能である。

(5)成果の最終目標の達成可能性

研究課題	最終目標(平成25年度末)	達成見通し
除去性能	シロキサンD4分離用活性炭Bの2倍以上の除去性能を達成する	吸着メカニズムを検証し、設計指針を明確化することで達成可能
耐久性 コスト	実用化が可能な耐久性、コストであること	安価な材料による高除去性能、高耐久化を検討することで達成可能

公開

（1）成果の実用化可能性、および、波及効果

東洋紡のビジネス

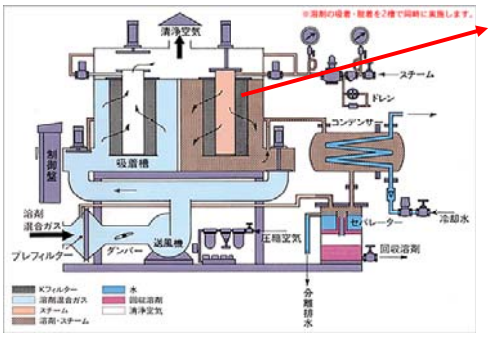
① 活性炭素繊維（ACF）の製造、販売
② VOC吸着脱離装置・濃縮装置・除湿機などの製造、販売
③ 自動車・事務機器向け脱臭フィルタの製造、販売

弊社保有技術　　本事業の成果

＋

バイオガス精製装置での実用化

実用化イメージ



ACF

⇩ 置き換え

PCP

波及効果

- **その他VOC吸着回収装置、フィルタ市場への普及**
- **CO_2排出量の大幅削減**

公開

（2）今後の展開

パイロット設備導入（H26～27）

⇩

試験販売から上市（H28～）

⇩

低コスト化、拡販

事業規模の拡大

⇩

年度	H26	H27	H28	H29	H30
開発段階（パイロット設備導入）	→	→			
製品化段階（実証試験等）		→			
市場出荷段階			→	→	→

- **産業界でのバイオガス利用の拡大**
- **特に、エネルギー資源の乏しい日本、アジア諸国への普及**

公開

グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発プログラム

「副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発」（中間評価）

Ⅲ2.2.1 & Ⅲ2.2.2
PCP複合触媒の基盤技術開発

（公開）

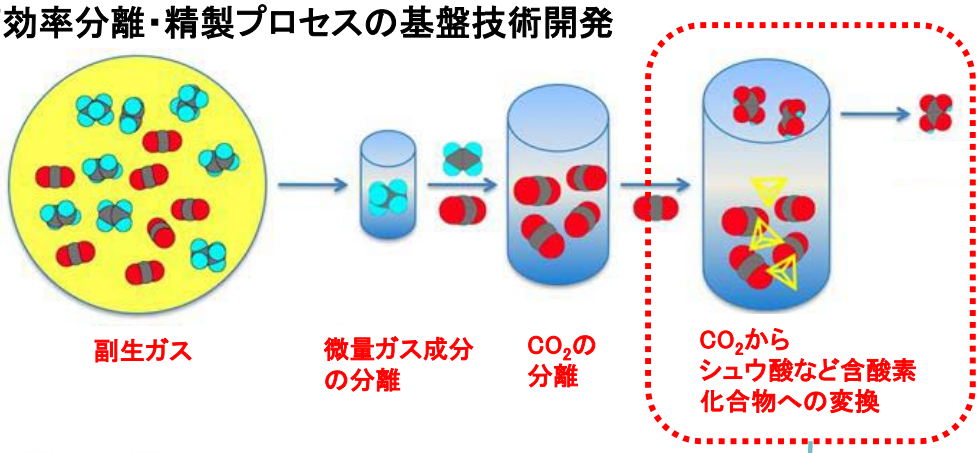
国立大学法人京都大学

2011年6月9日（木）

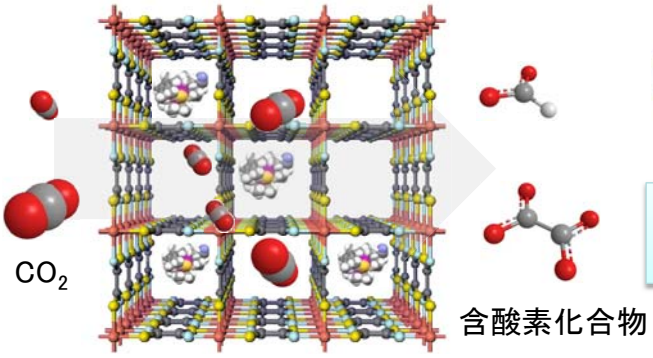
公開

背景

多孔性金属錯体（PCP）を利用した
CO_2の高効率分離・精製プロセスの基盤技術開発



PCP複合触媒



× TOYOBO × SHOEI ×

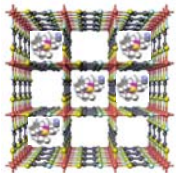
高効率にCO_2から含酸素化合物へ変換するPCP複合触媒の研究・開発

- PCPの選択
- PCPと触媒の複合化法の検討
- PCP複合触媒の基本構造評価
- PCP複合触媒の基本反応評価

複合触媒の好適化

＜25年度開発目標＞
CO_2からシュウ酸等の
含酸素化合物
電流効率80%以上の達成

＜23年度開発目標＞
CO_2からシュウ酸等の
含酸素化合物
電流効率60%以上の達成



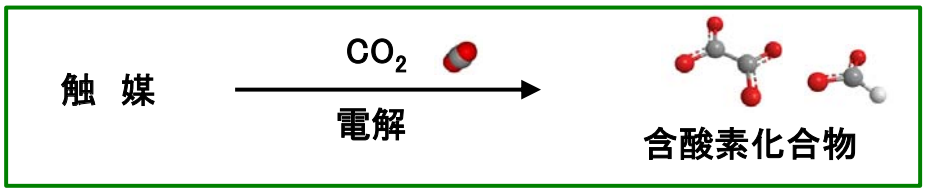
平成21年度　22年度　23年度　24～25年度

研究開発項目の中間目標と達成状況

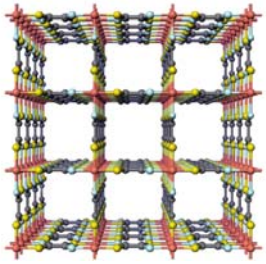
研究開発項目	目標	成果	達成度	今後の課題
PCP-複合触媒の基盤技術開発の成果	PCPと触媒の複合化の方法論と評価系の基盤技術開発	PCPの選択、PCPと触媒の複合化法の検討、PCP複合触媒の基本構造評価、PCP複合触媒の基本反応評価を行った	○	触媒の複合化法を検討し、PCP複合触媒の好適化を行う
	CO_2からの選択率60%以上で、含酸素化合物を効率的に生成できるPCP複合触媒の調製(2種類)	PCP複合触媒(選択率60%以上)を1種見出した	○	選択率80%以上で合成できるPCP複合触媒の開発

◎　大幅達成、○達成、△達成見込み、×未達

PCP複合体として用いるPCPの選定



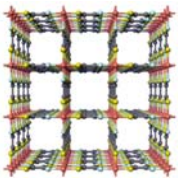
電解により分解しない電気化学的安定性の高いPCPを検討



電気化学測定前後でのPCP構造を調べた結果、
PCPの構造変化の有無を確認

**触媒との複合体として用いることが
できる候補PCPを数種類抽出**

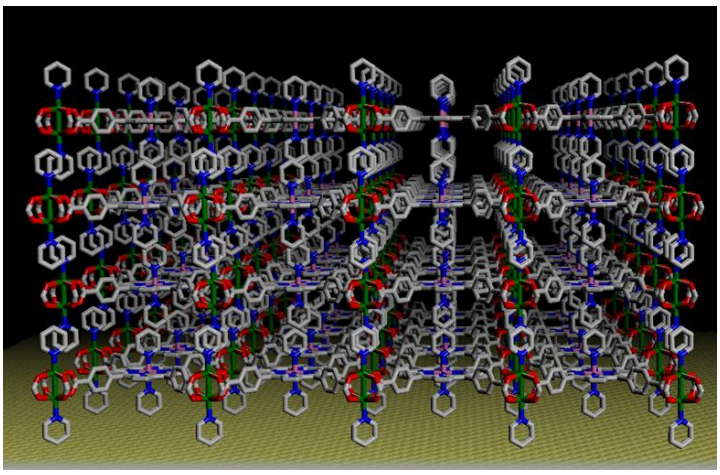
PCP複合体のCO_2還元性能

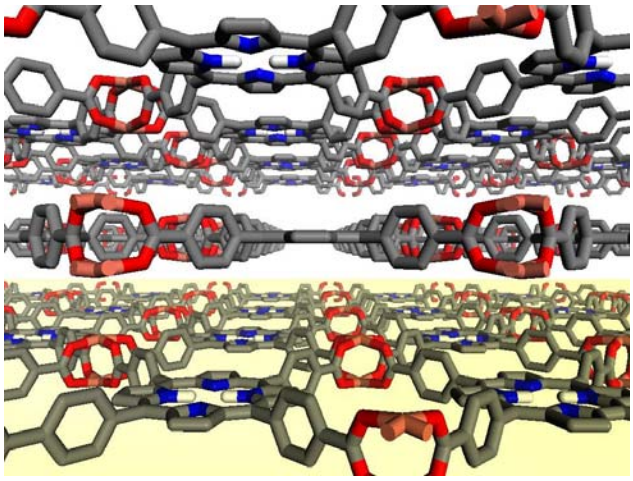
PCP  ＋　触　媒 $\xrightarrow[\text{電解}]{CO_2}$

**PCP複合体の触媒評価の結果、
開発目標値(電流効率60%以上)を凌ぐCO_2変換効率を達成**

公開

PCPを基板上に構築する方法論





結晶配向性PCPナノ薄膜の構築とその構造制御に成功（世界初）

基板上に構築したPCPに触媒を複合化する方法を検討する予定

公開

成果の最終目標の達成可能性

研究開発項目	最終目標	今後の課題・対応
PCP-複合触媒の基盤技術開発の成果	CO_2からの選択率80%以上で、含酸素化合物を効率的に生成できるPCP複合触媒の調製	触媒の複合化法を検討し、PCP複合触媒の好適化を行うことで最終目標の達成

公開

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

「副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発」（中間評価）

Ⅲ2.2.3＆Ⅳ2.1
液相法によるPCP複合触媒開発の成果と実用化（公開）

東洋紡績株式会社

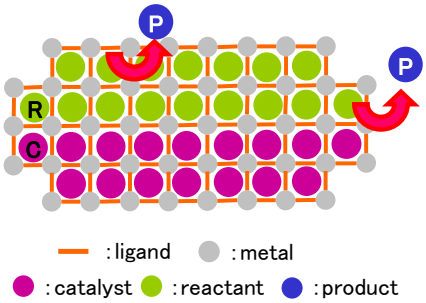
2011年6月9日（木）

公開

背景

東洋紡は自動車、事務機用フィルターや溶剤処理装置（VOC分解触媒担持）を製造・販売

PCPとの複合化による期待効果
- 触媒量低減による低コスト化
- 低温度領域での触媒活性向上による省エネ化
- 触媒固定化による高耐久化とリサイクル性付与



CO_2からの化学変換をモデル反応として、PCPと触媒の複合体を設計・合成する基盤技術を確立する

公開

(1)研究開発項目の目標と達成状況

開発項目	目標	成果	達成度	今後の課題
液相法によるPCP複合触媒の開発	CO_2からの選択率(電流効率)60%以上で合成できるPCP複合触媒を2種類程度調製する	目標性能を満たすPCP複合触媒を1種見出した	○	選択率80%以上で合成できるPCP複合触媒を開発する
	スケールアップ検討を行い、PCP複合触媒によるプロセスに関する試設計プロセスとしての要件を明らかにする	要件を2点見出した	○	スケールアップの可能性を検討する

◎大幅達成、○達成、△達成見込み、×未達

公開

(2)－1　PCPの合成と触媒の複合化、触媒性能評価

PCP複合触媒と触媒単体を用い、触媒性能評価を実施

CO_2からの選択率(電流効率)

PCP＋触媒・・・中間目標値60 %以上
触媒のみ・・・・約10 %

PCPとの複合化により、触媒活性が発現
⇒PCPの効果については解析中

PCPに優位性あり！

公開

（2） 成果の意義

PCP複合触媒を用いることで、CO_2還元を達成。この成果は世界最高レベル。また、PCPと複合化することで相乗効果が得られたことから、他の触媒反応へも展開が可能である。

公開

(5)成果の最終目標の達成可能性

研究課題	最終目標（平成25年度末）	達成見通し
CO_2選択率	CO_2からの選択率（電流効率）80%以上で合成できるPCP複合触媒を調製する	PCPの効果を検証し、評価条件を最適化することで達成可能
スケールアップ	スケールアップの可能性を検討する	要件2点を検討することで達成可能

公開

（1）成果の実用化可能性、および、波及効果

東洋紡のビジネス

① 活性炭素繊維（ACF）の製造、販売
② VOC吸着脱離装置・濃縮装置・除湿機などの製造、販売
③ 自動車・事務機器向け脱臭フィルタの製造、販売

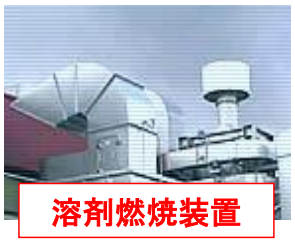
＋

基盤技術（成果）

PCP系複合触媒の基盤技術
①設計技術
②合成方法

VOC分解触媒への適用

実用化イメージ



溶剤燃焼装置

脱臭フィルタ

VOC分解触媒分野での実用化（溶剤燃焼装置、脱臭フィルタ）

波及効果

・VOC分解触媒への適用により、**低エネルギー、低コスト化**

事業原簿 Ⅳ2.1-1/1

公開

（2）今後の展開

基礎技術の確立

（VOC分解触媒、H26～29）

⇩

実用化検討、実証試験

（フィルタ化検討等、H29～31）

⇩

上市（H32～）

基盤技術の実用化に成功

⇩

年度	H26	H27	H28	H29	H30	H31
研究段階（VOC分解触媒）	→	→	→			
開発段階（実用化検討）				→	→	
製品化段階（実証試験等）						→

省エネ効果、環境に負荷の高い副生成物の削減に大きく貢献

事業原簿 Ⅳ2.1-1/1

公開

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

「副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発」（中間評価）

Ⅲ2.2.4＆Ⅳ2.2
気相法によるPCP複合触媒開発の成果と実用化（公開）

昭栄化学工業株式会社

2011年6月9日（木）

SHOEI

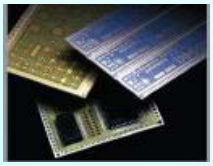
事業原簿　Ⅲ-2.2.4

公開

昭栄化学工業の事業

独創的な技術を用いた電子部品用材料の開発・製造・販売

・導電ペースト
・抵抗ペースト
・各種金属粉末、酸化物
・ナノ金属粉末
・金属触媒　　など



電子部品、デバイス

電子機器

昭栄化学工業としてのニーズ

既存事業で蓄積された技術を応用した新規な機能性材料の開発と
それによる新規市場の開拓

本プロジェクトの目的

・PCP複合触媒の設計/開発/製造技術を構築する
・PCP複合触媒によるCO_2の高効率変換技術を開発し、その優位性を実証する

事業原簿　Ⅲ-2.2.4　p.1

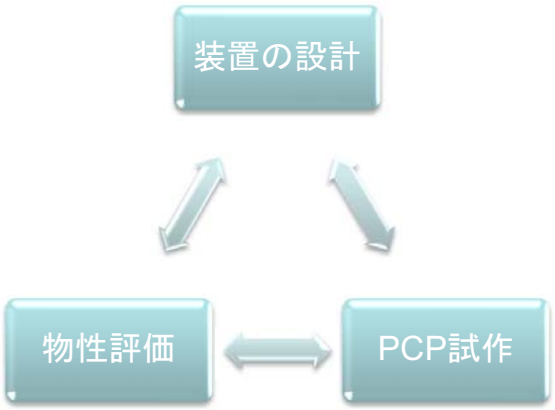
中間目標の達成度表

研究開発項目	目標	成果	達成度	今後の課題・対応
気相法によるPCP複合触媒の開発	①気相法によるPCP合成の実証	気相法によりPCPを合成するための基礎的な条件を見出した	◎	加速費で導入した新しい試作設備を活用して、試作/評価サイクルのスピードアップを図る
	②CO_2からの選択率60%以上で、含酸素化合物(シュウ酸など)を効率的に生成できるPCP複合触媒の調製 (2種)	気相法によりPCP複合触媒粒子が合成できた(現在触媒能を評価中)	△ 23年度末達成見込	
	③次年度以降のスケールアップ検討の試設計プロセスの要件の解明	PCP合成に関するスケールアップに対しては見通しがたった	○	得られたサンプルの電極触媒能評価を行い、特性面での問題点を抽出する

◎ 大幅達成、○達成、△達成見込み、 ×未達

小型反応試作機の設計開発

PCPの試作に適した小型反応試作機の設計を行い、
実際に試作を繰り返しながら改良を進めた



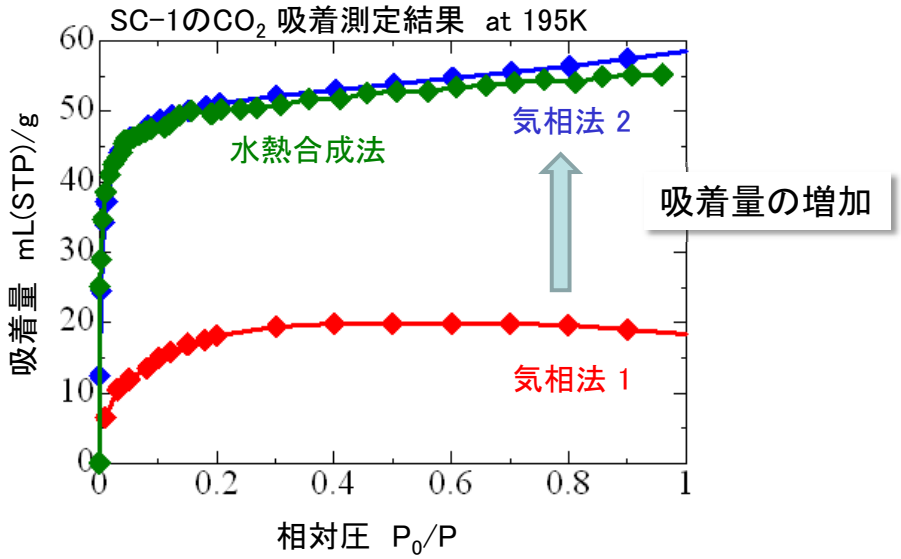
装置設計のポイント(例)

1. 条件設定の自由度の高さ
2. 実験の高効率化
3. 反応の可視化
4. 有機溶媒への対応
5. 安全性

試作機の改良を重ねることにより、多様な条件での試作検討が可能になり CO_2を吸着するPCPの検討が可能になった

気相法によるPCPの生成可能性の検証 【PCP SC-1, SC-2】

既存PCPの耐熱性や耐溶媒性、CO_2吸着性能等を考慮して、検討するPCPを抽出
PCP SC-1, SC-2の試作に取り組んだ



反応条件を最適化することで、水熱合成法と同等のCO_2吸着量を持つPCPを気相法を用いて合成できた（世界初）

PCP複合触媒の合成

PCP原料　＋　触　媒　→（小型試作機使用）→　PCP複合触媒

各種分析

XRD測定
PCPの存在を確認

FT-IR測定
触媒の存在を確認

STEM/EDX分析
PCPと触媒の構成元素の存在を確認

TG-DTA測定
複合触媒においても
触媒の分解挙動を確認

↓

PCP/触媒の複合体の生成を確認

公開

本プロジェクトにおける昭栄化学工業にとっての**実用化**は、触媒やナノ粒子などの機能性材料とPCPを複合化した**新規素材を設計/開発/製造する技術を構築する**ことを指す

CO_2還元触媒の開発 （本プロジェクトの目的）

→ **チャレンジングで社会的・技術的なインパクトが大きい**

気相法によるPCP複合触媒の合成技術開発（昭栄化学工業の目標）

→ **昭栄化学工業が量産技術を有しており、独創的な技術によって製造した機能性PCP複合素材を、世界に先駆けて市場に提供できる**

- 環境/エネルギー/バイオなどへのPCPの応用研究は、海外の研究プロジェクトなどを中心に検討が始まっている
- 昭栄化学工業が、いち早くPCP複合素材を研究用サンプルとして提供することで、日本における各分野での技術開発が加速されることを期待している。

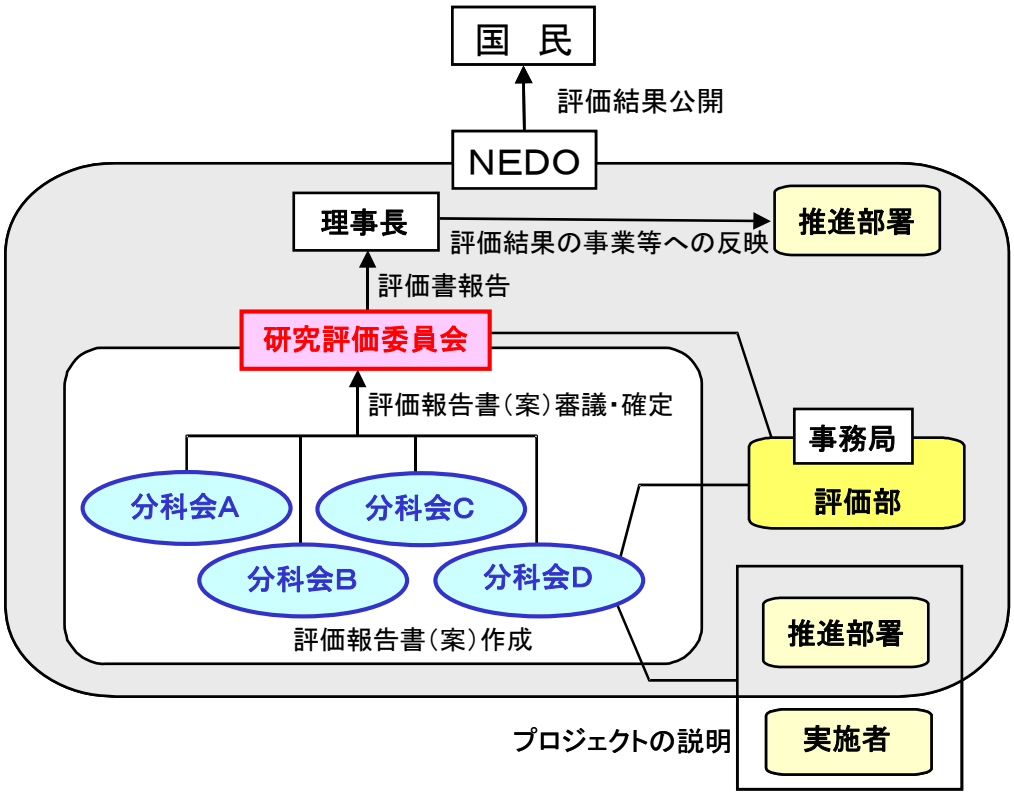
【メモ】

参考資料１　　評価の実施方法

本評価は、「技術評価実施規程」（平成 15 年 10 月制定）に基づいて研究評価を実施する。

独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）における研究評価の手順は、以下のように被評価プロジェクトごとに分科会を設置し、同分科会にて研究評価を行い、評価報告書（案）を策定の上、研究評価委員会において確定している。

- 「NEDO 技術委員・技術委員会等規程」に基づき研究評価委員会を設置
- 研究評価委員会はその下に分科会を設置



１．評価の目的

評価の目的は「技術評価実施規程」において。

- 業務の高度化等の自己改革を促進する
- 社会に対する説明責任を履行するとともに、
  経済・社会ニーズを取り込む
- 評価結果を資源配分に反映させ、資源の重点化及び業務の効率化を
  促進する

としている。

本評価においては、この趣旨を踏まえ、本事業の意義、研究開発目標・計画の妥当性、計画を比較した達成度、成果の意義、成果の実用化の可能性等について検討・評価した。

２．評価者

技術評価実施規程に基づき、事業の目的や態様に即した外部の専門家、有識者からなる委員会方式により評価を行う。分科会委員選定に当たっては以下の事項に配慮して行う。

- 科学技術全般に知見のある専門家、有識者
- 当該研究開発の分野の知見を有する専門家
- 研究開発マネジメントの専門家、経済学、環境問題、国際標準、その他
  社会的ニーズ関連の専門家、有識者
- 産業界の専門家、有識者
- ジャーナリスト

また、評価に対する中立性確保の観点から事業の推進側関係者を選任対象から除外し、また、事前評価の妥当性を判断するとの側面にかんがみ、事前評価に関与していない者を主体とする。

これらに基づき、分科会委員名簿にある７名を選任した。

なお、本分科会の事務局については、独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構評価部が担当した。

３．評価対象

平成２１年度に開始された「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発／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」プロジェクトを評価対象とした。

なお、分科会においては、当該事業の推進部署から提出された事業原簿、プロジェクトの内容、成果に関する資料をもって評価した。

４．評価方法

分科会においては、当該事業の推進部署及び研究実施者からのヒアリングと、それを踏まえた分科会委員による評価コメント作成、評点法による評価及び実施者側等との議論等により評価作業を進めた。

なお、評価の透明性確保の観点から、知的財産保護の上で支障が生じると認められる場合等を除き、原則として分科会は公開とし、研究実施者と意見を交換する形で審議を行うこととした。

５．評価項目・評価基準

分科会においては、次に掲げる「評価項目・評価基準」で評価を行った。これは、研究評価委員会による『各分科会における評価項目・評価基準は、被評価プロジェクトの性格、中間・事後評価の別等に応じて、各分科会において判断すべきものである。』との考え方に従い、第 1 回分科会において、事務局が、研究評価委員会により示された「標準的評価項目・評価基準」（参考資料 1-7 頁参照）をもとに改定案を提示し、承認されたものである。

プロジェクト全体に係わる評価においては、主に事業の目的、計画、運営、達成度、成果の意義や実用化への見通し等について評価した。各個別テーマに係る評価については、主にその目標に対する達成度等について評価した。

評価項目・評価基準

１．事業の位置付け・必要性について

(1)ＮＥＤＯの事業としての妥当性

- 「ナノテク・部材イノベーションプログラム」の下で、当該施策・制度の目標達成のために寄与しているか。
- 民間活動のみでは改善できないものであること、又は公共性が高いことにより、ＮＥＤＯの関与が必要とされる事業か。
- 当該事業を実施することによりもたらされる効果が、投じた予算との比較において十分であるか。

(2)事業目的の妥当性

- 内外の技術開発動向、国際競争力の状況、エネルギー需給動向、市場動向、政策動向、国際貢献の可能性等から見て、事業の目的は妥当か。

２．研究開発マネジメントについて

(1)研究開発目標の妥当性

- 内外の技術動向、市場動向等を踏まえて、戦略的な目標が設定されているか。
- 具体的かつ明確な開発目標を可能な限り定量的に設定しているか。
- 目標達成度を測定・判断するための適切な指標が設定されているか。

(2)研究開発計画の妥当性

- 目標達成のために妥当なスケジュール、予算（各個別研究テーマ毎の配分を含む）となっているか。
- 目標達成に必要な要素技術を取り上げているか。
- 研究開発フローにおける要素技術間の関係、順序は適切か。
- 継続プロジェクトや長期プロジェクトの場合、技術蓄積を、実用化の観点から絞り込んだうえで活用が図られているか。

(3)研究開発実施の事業体制の妥当性

- 適切な研究開発チーム構成での実施体制になっているか。
- 真に技術力と事業化能力を有する企業を実施者として選定しているか。
- 全体を統括するプロジェクトリーダー等が選任され、十分に活躍できる環境が整備されているか。

・ 目標達成及び効率的実施のために必要な実施者間の連携が十分に行われる体制となっているか。
・ 実用化シナリオに基づき、成果の受け取り手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、関与を求める体制を整えているか。

(4)研究開発成果の実用化に向けたマネジメントの妥当性
・ 成果の実用化につなげる戦略が明確になっているか。
・ 成果の実用化につなげる知財マネジメントの方針が明確に示され、かつ妥当なものか。

(5)情勢変化への対応等
・ 進捗状況を常に把握し、社会・経済の情勢の変化及び政策・技術動向に機敏かつ適切に対応しているか。
・ 計画見直しの方針は一貫しているか（中途半端な計画見直しが研究方針の揺らぎとなっていないか）。計画見直しを適切に実施しているか。

３．研究開発成果について

(1)中間目標の達成度
・ 成果は目標値をクリアしているか。
・ 全体としての目標達成はどの程度か。
・ 目標未達成の場合、目標達成までの課題を把握し、課題解決の方針が明確になっているか。

(2)成果の意義
・ 成果は市場の拡大或いは市場の創造につながることが期待できるか。
・ 成果は、世界初あるいは世界最高水準か。
・ 成果は、新たな技術領域を開拓することが期待できるか。
・ 成果は汎用性があるか。
・ 投入された予算に見合った成果が得られているか。
・ 成果は、他の競合技術と比較して優位性があるか。

(3)知的財産権等の取得及び標準化の取組
・ 知的財産権等の取扱（特許や意匠登録出願、著作権や回路配置利用権の登録、品種登録出願、営業機密の管理等）は事業戦略、または実用化計画に沿って国内外に適切に行われているか。

(4)成果の普及

- 論文の発表は、研究内容を踏まえ適切に行われているか。
- 成果の受取手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、適切に成果を普及しているか。また、普及の見通しは立っているか。
- 一般に向けて広く情報発信をしているか。

(5)成果の最終目標の達成可能性

- 最終目標を達成できる見込みか。
- 最終目標に向け、課題とその解決の道筋が明確に示され、かつ妥当なものか。

４．実用化の見通しについて

(1)成果の実用化可能性

- 実用化イメージ・出口イメージが明確になっているか。
- 実用化イメージ・出口イメージに基づき、開発の各段階でマイルストーンを明確にしているか。それを踏まえ、引き続き研究開発が行われる見通しは立っているか。

(2)波及効果

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

標準的評価項目・評価基準（中間評価）

２０１０．３．２６

【中間評価　標準的評価項目・評価基準の位置付け（基本的考え方）】

標準的評価項目・評価基準は、第２５回研究評価委員会（平成２２年３月２６日付）において以下のとおり定められている。（本文中の記載例による１･･･、２･･･、３･･･、４･･･が標準的評価項目、それぞれの項目中の(1)･･･、(2)･･･が標準的評価基準、それぞれの基準中の・ ･･･が視点）

ただし、これらの標準的評価項目・評価基準は、研究開発プロジェクトの中間評価における標準的な評価の視点であり、各分科会における評価項目・評価基準は、被評価プロジェクトの性格等に応じて、各分科会において判断すべきものである。

１．事業の位置付け・必要性について

(1)ＮＥＤＯの事業としての妥当性

- 特定の施策（プログラム）、制度の下で実施する事業の場合、当該施策・制度の目標達成のために寄与しているか。
- 民間活動のみでは改善できないものであること、又は公共性が高いことにより、ＮＥＤＯの関与が必要とされる事業か。
- 当該事業を実施することによりもたらされる効果が、投じた予算との比較において十分であるか。

(2)事業目的の妥当性

- 内外の技術開発動向、国際競争力の状況、エネルギー需給動向、市場動向、政策動向、国際貢献の可能性等から見て、事業の目的は妥当か。

２．研究開発マネジメントについて

(1)研究開発目標の妥当性

- 内外の技術動向、市場動向等を踏まえて、戦略的な目標が設定されているか。
- 具体的かつ明確な開発目標を可能な限り定量的に設定しているか。
- 目標達成度を測定・判断するための適切な指標が設定されているか。

(2)研究開発計画の妥当性

・ 目標達成のために妥当なスケジュール、予算（各個別研究テーマ毎の配分を含む）となっているか。
・ 目標達成に必要な要素技術を取り上げているか。
・ 研究開発フローにおける要素技術間の関係、順序は適切か。
・ 継続プロジェクトや長期プロジェクトの場合、技術蓄積を、実用化の観点から絞り込んだうえで活用が図られているか。

(3)研究開発実施の事業体制の妥当性
・ 適切な研究開発チーム構成での実施体制になっているか。
・ 真に技術力と事業化能力を有する企業を実施者として選定しているか。
・ 研究管理法人を経由する場合、研究管理法人が真に必要な役割を担っているか。
・ 全体を統括するプロジェクトリーダー等が選任され、十分に活躍できる環境が整備されているか。
・ 目標達成及び効率的実施のために必要な実施者間の連携 and／or 競争が十分に行われる体制となっているか。
・ 実用化シナリオに基づき、成果の受け取り手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、関与を求める体制を整えているか。

(4)研究開発成果の実用化、事業化に向けたマネジメントの妥当性
・ 成果の実用化、事業化につなげる戦略が明確になっているか。
・ 成果の実用化、事業化につなげる知財マネジメントの方針が明確に示され、かつ妥当なものか。

(5)情勢変化への対応等
・ 進捗状況を常に把握し、社会・経済の情勢の変化及び政策・技術動向に機敏かつ適切に対応しているか。
・ 計画見直しの方針は一貫しているか（中途半端な計画見直しが研究方針の揺らぎとなっていないか）。計画見直しを適切に実施しているか。

３．研究開発成果について

(1)中間目標の達成度
・ 成果は目標値をクリアしているか。
・ 全体としての目標達成はどの程度か。
・ 目標未達成の場合、目標達成までの課題を把握し、課題解決の方針が明確になっているか。

(2)成果の意義

- 成果は市場の拡大或いは市場の創造につながることが期待できるか。
- 成果は、世界初あるいは世界最高水準か。
- 成果は、新たな技術領域を開拓することが期待できるか。
- 成果は汎用性があるか。
- 投入された予算に見合った成果が得られているか。
- 成果は、他の競合技術と比較して優位性があるか。

(3)知的財産権等の取得及び標準化の取組

- 知的財産権等の取扱（特許や意匠登録出願、著作権や回路配置利用権の登録、品種登録出願、営業機密の管理等）は事業戦略、または実用化計画に沿って国内外に適切に行われているか。
- 国際標準化に関する事項が計画されている場合、得られた研究開発の成果に基づく国際標準化に向けた提案等の取組が適切に行われているか。

(4)成果の普及

- 論文の発表は、研究内容を踏まえ適切に行われているか。
- 成果の受取手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、適切に成果を普及しているか。また、普及の見通しは立っているか。
- 一般に向けて広く情報発信をしているか。

(5)成果の最終目標の達成可能性

- 最終目標を達成できる見込みか。
- 最終目標に向け、課題とその解決の道筋が明確に示され、かつ妥当なものか。

４．実用化、事業化の見通しについて

(1)成果の実用化可能性

- 産業技術としての見極め（適用可能性の明確化）ができているか。
- 実用化に向けて課題が明確になっているか。課題解決の方針が明確になっているか。
- 国際標準化に関する事項が計画されている場合、国際規格化等、標準整備に向けた見通しが得られているか。

(2)事業化までのシナリオ

・成果は市場やユーザーのニーズに合致しているか。
・市場の規模や成長性、コストダウン、競合技術との比較、導入普及、事業化までの期間、事業化とそれに伴う経済効果等の見通しは立っているか。

(3)波及効果

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

※基礎的・基盤的研究及び知的基盤・標準整備等の研究開発の場合は、以下の項目・基準による。

＊基礎的・基盤的研究開発の場合

２．研究開発マネジメントについて

(1)研究開発目標の妥当性

- 内外の技術動向、市場動向等を踏まえて、戦略的な目標が設定されているか。
- 具体的かつ明確な開発目標を可能な限り定量的に設定しているか。
- 目標達成度を測定・判断するための適切な指標が設定されているか。

(2)研究開発計画の妥当性

- 目標達成のために妥当なスケジュール、予算（各個別研究テーマ毎の配分を含む）となっているか。
- 目標達成に必要な要素技術を取り上げているか。
- 研究開発フローにおける要素技術間の関係、順序は適切か。
- 継続プロジェクトや長期プロジェクトの場合、技術蓄積を、実用化の観点から絞り込んだうえで活用が図られているか。

(3)研究開発実施の事業体制の妥当性

- 適切な研究開発チーム構成での実施体制になっているか。
- 真に技術力と事業化能力を有する企業を実施者として選定しているか。
- 研究管理法人を経由する場合、研究管理法人が真に必要な役割を担っているか。
- 全体を統括するプロジェクトリーダー等が選任され、十分に活躍できる環境が整備されているか。
- 目標達成及び効率的実施のために必要な実施者間の連携 and／or 競争が十分に行われる体制となっているか。
- 実用化シナリオに基づき、成果の受け取り手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、関与を求める体制を整えているか。

(4)研究開発成果の実用化に向けたマネジメントの妥当性

- 成果の実用化につなげる戦略が明確になっているか。
- 成果の実用化につなげる知財マネジメントの方針が明確に示され、かつ妥当なものか。

(5)情勢変化への対応等

- 進捗状況を常に把握し、社会・経済の情勢の変化及び政策・技術動向に機敏かつ適切に対応しているか。
- 計画見直しの方針は一貫しているか（中途半端な計画見直しが研究方針の揺らぎとなっていないか）。計画見直しを適切に実施しているか。

３．研究開発成果について

(1)中間目標の達成度

- 成果は目標値をクリアしているか。
- 全体としての目標達成はどの程度か。
- 目標未達成の場合、目標達成までの課題を把握し、課題解決の方針が明確になっているか。

(2)成果の意義

- 成果は市場の拡大或いは市場の創造につながることが期待できるか。
- 成果は、世界初あるいは世界最高水準か。
- 成果は、新たな技術領域を開拓することが期待できるか。
- 成果は汎用性があるか。
- 投入された予算に見合った成果が得られているか。
- 成果は、他の競合技術と比較して優位性があるか。

(3)知的財産権等の取得及び標準化の取組

- 知的財産権等の取扱（特許や意匠登録出願、著作権や回路配置利用権の登録、品種登録出願、営業機密の管理等）は事業戦略、または実用化計画に沿って国内外に適切に行われているか。
- 国際標準化に関する事項が計画されている場合、得られた研究開発の成果に基づく国際標準化に向けた提案等の取組が適切に行われているか。

(4)成果の普及

- 論文の発表は、研究内容を踏まえ適切に行われているか。
- 成果の受取手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、適切に成果を普及しているか。また、普及の見通しは立っているか。
- 一般に向けて広く情報発信をしているか。

(5)成果の最終目標の達成可能性

- 最終目標を達成できる見込みか。

・ 最終目標に向け、課題とその解決の道筋が明確に示され、かつ妥当なものか。

4．実用化の見通しについて

(1)成果の実用化可能性

・ 実用化イメージ・出口イメージが明確になっているか。
・ 実用化イメージ・出口イメージに基づき、開発の各段階でマイルストーンを明確にしているか。それを踏まえ、引き続き研究開発が行われる見通しは立っているか。
・ 国際標準化に関する事項が計画されている場合、国際規格化等、標準整備に向けた見通しが得られているか。

(2)波及効果

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

＊知的基盤・標準整備等の研究開発の場合

2．研究開発マネジメントについて

(1)研究開発目標の妥当性

・ 内外の技術動向、市場動向等を踏まえて、戦略的な目標が設定されているか。
・ 具体的かつ明確な開発目標を可能な限り定量的に設定しているか。
・ 目標達成度を測定・判断するための適切な指標が設定されているか。

(2)研究開発計画の妥当性

・ 目標達成のために妥当なスケジュール、予算（各個別研究テーマ毎の配分を含む）となっているか。
・ 目標達成に必要な要素技術を取り上げているか。
・ 研究開発フローにおける要素技術間の関係、順序は適切か。
・ 継続プロジェクトや長期プロジェクトの場合、技術蓄積を、実用化の観点から絞り込んだうえで活用が図られているか。

(3)研究開発実施の事業体制の妥当性

・ 適切な研究開発チーム構成での実施体制になっているか。

・ 真に技術力と事業化能力を有する企業を実施者として選定しているか。
・ 研究管理法人を経由する場合、研究管理法人が真に必要な役割を担っているか。
・ 全体を統括するプロジェクトリーダー等が選任され、十分に活躍できる環境が整備されているか。
・ 目標達成及び効率的実施のために必要な実施者間の連携 and／or 競争が十分に行われる体制となっているか。
・ 実用化シナリオに基づき、成果の受け取り手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、関与を求める体制を整えているか。

(4)研究開発成果の実用化に向けたマネジメントの妥当性
・ 成果の実用化につなげる戦略が明確になっているか。
・ 成果の実用化につなげる知財マネジメントの方針が明確に示され、かつ妥当なものか。

(5)情勢変化への対応等
・ 進捗状況を常に把握し、社会・経済の情勢の変化及び政策・技術動向に機敏かつ適切に対応しているか。
・ 計画見直しの方針は一貫しているか（中途半端な計画見直しが研究方針の揺らぎとなっていないか）。計画見直しを適切に実施しているか。

３．研究開発成果について

(1)中間目標の達成度
・ 成果は目標値をクリアしているか。
・ 全体としての目標達成はどの程度か。
・ 目標未達成の場合、目標達成までの課題を把握し、課題解決の方針が明確になっているか。

(2)成果の意義
・ 成果は市場の拡大或いは市場の創造につながることが期待できるか。
・ 成果は、世界初あるいは世界最高水準か。
・ 成果は、新たな技術領域を開拓することが期待できるか。
・ 成果は汎用性があるか。
・ 投入された予算に見合った成果が得られているか。
・ 成果は公開性が確保されているか。

(3)知的財産権等の取得及び標準化の取組

- 研究内容に新規性がある場合、知的財産権等の取扱（特許や意匠登録出願、著作権や回路配置利用権の登録、品種登録出願、営業機密の管理等）は事業戦略、または実用化計画に沿って国内外に適切に行われているか。
- 国際標準化に関する事項が計画されている場合、得られた研究開発の成果に基づく国際標準化に向けた提案等の取組が適切に行われているか。

(4)成果の普及

- 論文の発表は、研究内容を踏まえ適切に行われているか。
- 成果の受取手（ユーザー、活用・実用化の想定者等）に対して、適切に成果を普及しているか。また、普及の見通しは立っているか。
- 一般に向けて広く情報発信をしているか。

(5)成果の最終目標の達成可能性

- 最終目標を達成できる見込みか。
- 最終目標に向け、課題とその解決の道筋が明確に示され、かつ妥当なものか。

４．実用化の見通しについて

(1)成果の実用化可能性

- 整備した知的基盤についての利用は実際にあるか、その見通しが得られているか。
- 公共財として知的基盤を供給、維持するための体制は整備されているか、その見込みはあるか。
- 国際標準化に関する事項が計画されている場合、国際規格化等、標準整備に向けた見通しが得られているか。
- ＪＩＳ化、標準整備に向けた見通しが得られているか。注）国内標準に限る
- 一般向け広報は積極的になされているか。

(2)波及効果

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

本研究評価委員会報告は、独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）評価部が委員会の事務局として編集しています。

平成２３年１０月

NEDO 評価部
部長　竹下　　満
主幹　三上　　強
担当　室井　和幸

＊研究評価委員会に関する情報は NEDO のホームページに掲載しています。

（http://www.nedo.go.jp/introducing/iinkai/kenkyuu_index.html）

〒212-8554 神奈川県川崎市幸区大宮町1310番地
ミューザ川崎セントラルタワー20F
TEL 044-520-5161　　FAX 044-520-5162