

**「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」**

事業原簿【公開】

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

—目次—

・概要	A-1
・用語集	用語集-1
I. 事業の位置付け・必要性について	
I.1 NEDO の関与の必要性・制度への適合性	
I.1.1 NEDO が関与することの意義	I-1
I.1.2 実施の効果	I-5
I.2 事業の背景・目的・位置付け	I-6
II. 研究開発マネジメントについて	
II.1 事業の目標	II-1
II.2 事業の計画内容	II-1
II.2.1 研究開発の内容	II-1
II.2.2 研究開発の実施体制	II-3
II.2.3 研究開発の運営管理	II-5
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	II-7
II.3 情勢変化への対応	II-7
II.3.1 加速財源の投入	II-7
II.3.2 中間評価への対応	II-8
II.4 評価に関する事項	II-9
II.4.1 事前評価	II-9
II.4.2 中間評価	II-10
II.4.3 事後評価	II-13
III. 研究開発成果について	
III.1 事業全体の成果	III.1-1
III.2 研究開発項目毎の成果	
III.2.1 CO ₂ ガスの分離・精製材料基盤技術開発	
III.2.1.1 CO ₂ /N ₂ 分離用 PCP の開発<京都大学>	III.2.1.1-1
III.2.1.2 メタン精製用 PCP の開発<クラレ、京都大学>	III.2.1.2-1
III.2.1.3 CO ₂ /エチレン分離用 PCP 及び構造異性体混合物からの特定構造 炭化水素分離精製用 PCP の開発<昭和電工、京都大学>	III.2.1.3-1
III.2.1.4 PCP による微量ガス分離材の開発<東洋紡、京都大学>	III.2.1.4-1
III.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	
III.2.2.1 PCP 複合触媒の開発/PCP 複合触媒基盤技術の開発<京都大学>	III.2.2.1-1
III.2.2.2 PCP 複合触媒の開発/ CO ₂ 還元型錯体分子触媒基盤技術の開発<京都大学>	III.2.2.2-1
III.2.2.3 PCP 複合触媒の開発<昭栄化学工業、京都大学>	III.2.2.3-1
IV. 実用化に向けての見通し及び取り組みについて	
IV.1 CO ₂ ガスの分離・精製材料基盤技術開発	
IV.1.1 メタン精製用 PCP の開発<クラレ>	IV.1.1-1
IV.1.2 CO ₂ /エチレン分離用 PCP 及び構造異性体混合物からの特定構造 炭化水素分離精製用 PCP の開発<昭和電工>	IV.1.2-1
IV.1.3 PCP による微量ガス分離材の開発<東洋紡>	IV.1.3-1
IV.2 回収 CO ₂ ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発 /PCP 複合触媒の開発<昭栄化学工業>	IV.2-1

(添付資料)

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

概要

		最終更新日	2014年10月20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 主幹研究員 江口 弘一 2009.08-2010.04 主査 吉田 宏 2009.04-2012.03 主任研究員 岩田 寛治 2010.04-2013.01 主査 新井 唯 2009.04-2012.03 主任研究員 山野 慎司 2013.01-現在 主査 土屋 裕子 2012.04-現在			
0. 事業の概要	<p>化学品の製造プロセスにおけるクリーン化、省エネ化、原材料・資源の多様化・有効利用、廃棄物の減容化等を実現し、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。</p> <p>GSC プロセス研究開発課題としては、i)有害な化学物質を削減、ii)廃棄物、副生成物を削減、iii)資源生産性を向上、iv)化学品原料の転換・多様化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。</p> <p>「副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発」(以降、本事業という)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。</p>			
I. 事業の位置付け・必要性について	<p>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を得ない状況にあり、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。これらの問題に対して、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、持続的社會を実現するために、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。</p> <p>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(PCP)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。</p> <p>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。</p>			

II. 研究開発マネジメントについて

<p>事業の目標</p>	<p>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・アブソープション)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。</p> <p>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。</p> <p>中間目標(平成 23 年度末)</p> <p>①CO₂ガスの分離・精製材料基盤技術開発</p> <ul style="list-style-type: none"> 副生ガスの分子サイズに合わせた多孔性金属錯体等の分子設計を行い、副生ガスとしてのCO₂等を高濃度(95%以上)に濃縮でき、かつ高選択に分離する材料を開発する。具体的には、現在実用化されているゼオライト、活性炭等の分離材料に比べて低い操作エネルギーで高選択的に副生ガス(CO₂等)を吸着・脱離できる新規材料(副生ガスの吸着エネルギーが40kJ/mol以下、分離度(吸着相と気相における目的成分のモル分率比)が150以上である材料)を開発する。 <p>②回収 CO₂ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発</p> <ul style="list-style-type: none"> 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。 <p>最終目標(平成 25 年度末)</p> <p>①CO₂ガスの分離・精製材料基盤技術開発</p> <ul style="list-style-type: none"> 副生ガスの分子サイズに合わせた多孔性金属錯体等の分子設計を行い、副生ガスとしてのCO₂等を高濃度(99.9%以上)に濃縮でき、かつ高選択に分離する材料を開発する。具体的には、現在実用化されているゼオライト、活性炭等の分離材料に比べて低い操作エネルギーで高選択的に副生ガス(CO₂等)を吸着・脱離できる新規材料(副生ガスの吸着エネルギーが30kJ/mol以下、分離度(吸着相と気相における目的成分のモル分率比)が300以上である材料)を開発する。 <p>②回収 CO₂ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発</p> <ul style="list-style-type: none"> 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。 						
<p>事業の計画内容</p>	<p>主な実施事項</p>	<p>H21fy</p>	<p>H22fy</p>	<p>H23fy</p>	<p>H24fy</p>	<p>H25fy</p>	<p>H26fy</p>
<p>①CO₂ガスの分離・精製材料基盤技術開発</p>	<p>←</p>			<p>▼ 中間評価</p>			<p>▼ 事後評価</p>
<p>②回収 CO₂ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発</p>	<p>←</p>						
<p>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)</p>	<p>会計・勘定</p>	<p>H21fy</p>	<p>H22fy</p>	<p>H23fy</p>	<p>H24fy</p>	<p>H25fy</p>	<p>総額</p>
	<p>一般会計</p>	<p>179</p>	<p>152</p>				<p>331</p>
	<p>特別会計 (電源・需給の別)</p>			<p>159</p>	<p>195</p>	<p>139</p>	<p>493</p>
	<p>加速予算 (成果普及費を含む)</p>	<p>61</p>	<p>324</p>		<p>167</p>		<p>552</p>
	<p>総予算額</p>	<p>240</p>	<p>476</p>	<p>159</p>	<p>362</p>	<p>139</p>	<p>1,376</p>
<p>開発体制</p>	<p>経産省担当原課</p>	<p>製造産業局化学課</p>					
	<p>プロジェクトリーダー</p>	<p>国立大学法人京都大学 大学院理学研究科 教授 北川 宏</p>					

	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 (H23fy まで) (株)クラレ 昭和電気(株) 東洋紡(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および評価装置を導入 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 平成24年8月: 実用化候補となるPCPの性能評価迅速化のため、触媒活性評価装置の導入とキログラムスケールでのPCP外注合成を実施 平成24年11月: PCP複合触媒の性能向上と耐久性試験の効率化のため、複合触媒合成装置並びに分析装置の導入と、再度のPCP外注合成を実施	
中間評価への対応	指摘事項に対しては、実用化に即した数値目標の設定、実用化に必要な開発課題およびマイルストーンの明確化を図り、実施方針および実施計画書に反映させる対応を取った。	
評価に関する事項	事前評価	平成20年度実施 担当部 環境技術開発部及びナノテクノロジー・材料技術開発部
	中間評価	平成23年度実施
Ⅲ. 研究開発成果について	最終目標(平成25年度末)とそれに対する成果は以下の通り	
	①CO ₂ ガスの分離・精製材料基盤技術開発	
	項目	最終目標
	選択分離後の濃度	99.9%以上
	吸着エネルギー	30kJ/mol 以下
分離度	300 以上	
<ul style="list-style-type: none"> ・最終目標はすべて達成 ・各企業の個別開発目標についても達成 		
②回収CO ₂ ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発		
項目	最終目標	
選択率(電流効率)	80%以上	
<ul style="list-style-type: none"> ・最終目標は達成 ・企業の個別開発目標についても達成 		
投稿論文	「査読付き」21件、「その他」8件	
特許	「出願済」100件、(うちPCT出願17件)	
その他の外部発表(プレス発表等)	「研究発表・講演」16件、「新聞・雑誌等への掲載」9件	
Ⅳ. 実用化の見通しについて	本事業の結果、CO ₂ 等の副生ガスの分離・精製に好適な高性能PCP材料の開発および、PCPと触媒を複合化させたPCP複合触媒の開発を含むPCP基盤技術を確立することができた。今後はこの基盤技術を基にして、各参画企業それぞれの実用化ターゲットに合わせて自社内で実用化に向けた課題解決等を実施し、本事業終了より3年から5年を目処に実用化を図る。	

V. 基本計画に関する事項	作成時期	21年3月 作成
	変更履歴	21年12月 改訂 (「明日の安心と成長のための緊急経済対策(平成21年度補正予算(第2号))に係る研究開発項目④追加」) 22年8月 改訂 (加速に伴い(別紙)研究開発計画の研究開発項目③-2の達成目標を修正) 23年1月 改訂 (平成22年度補正予算第1号による研究開発項目④-4、④-5追加) 23年7月 改訂 (根拠法改正に伴う改訂) 23年10月 改訂 (中間評価の結果に基づき、(別紙)研究開発計画の研究開発項目③-1の内容を修正) 24年3月 改訂 (研究開発項目③-4追加による改訂) 24年9月 改訂 (研究開発項目②の一部追加実施に伴う改訂) 25年2月 改訂 (研究開発項目③-1の目標修正、研究開発項目④の期間修正、評価に関する事項修正、業務方法書の改正による改訂)

プロジェクト用語集

Ⅲ.2.1.1 CO₂/N₂分離用 PCP の開発 <京都大学>

専門用語	英語記載	専門用語の説明
圧カスウィング法 (PSA 法)	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。またはそれを行う装置。
PCP	Porous Coordination Polymers	金属イオンと配位子からなる多孔性の金属錯体。
BET 表面積	BET surface area	細孔を持つ固体において窒素などのガス分子が吸着できる面積が単位重量あたりどれほどあるかを示した値。
吸着等温線	adsorption- desorption isotherm	横軸に圧力、縦軸に吸着量をとリ、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。
破過曲線	breakthrough curve	吸着材に吸着質を流通する系において、吸着材を通過した吸着質の組成や濃度と流通時間の関係を表す曲線のこと。

プロジェクト用語集

Ⅲ.2.1.2 および Ⅳ.1.1 メタン精製用 PCP の開発 <株式会社クラレ>

専門用語	英語記載	専門用語の説明
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。
バイオガス	Biogas	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。
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。
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。
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。
圧カスイング吸着 (PSA)	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。またはそれを行う装置。
吸着速度	adsorption rate	吸着する速度。
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。
多孔性金属錯体	Porous Coordination Polymers	金属イオンと配位子からなる多孔性の金属錯体。
平衡状態	equilibrium state	一般に系の変化を起こす力が釣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。
吸脱着等温線	adsorption-desorption isotherm	横軸に圧力、縦軸に吸着量を取り、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。

専門用語	英語記載	専門用語の説明
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 ⁵ Pa)。
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。
繰り返し吸脱着試験	repeated adsorption-desorption test	ガスを吸着させるプロセスと脱着させるプロセスを繰り返し替えし、吸着特性や強度の変化を測る試験のこと。
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。
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。
メタン到達純度	methane compassable purify	混合ガスを導入した際の出口でのメタンの純度。
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。
破過曲線	breakthrough curve	吸着材に吸着質を流通する系において、吸着材を通過した吸着質の組成や濃度と流通時間の関係を表す曲線のこと。
空時収量	space-time yield	単位体積及び単位時間当りの生成物の収量
固定費	fixed cost	資本設備を一定としたとき、生産量の変化に関わりなく生じる(一定の)費用
ペレット	pellet	粒子状の成形体のこと。
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。
構造変化	structual change	ガスの吸着・脱離に伴い、結晶の骨格の構造が変化すること。

プロジェクト用語集

Ⅲ.2.1.3 および Ⅳ.1.2 CO₂/エチレン分離用 PCP 及び構造異性体混合物からの特定構造炭化水素分離精製用 PCP の開発 <昭和電工株式会社>

専門用語	英語記載	専門用語の説明
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。
CO ₂ 吸収系	CO ₂ absorption system	酸化反応プラントにおける CO ₂ 除去システム。具体的には、熱炭酸カリ法のこと。
PSA 法	pressure swing adsorption method	圧カスイング吸着法の略称。
構造柔軟	flexibility of framework	PCP 特有のゲストに応答して構造を変化させる特性のこと。
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。
吸着挙動	adsorption property	吸着現象における吸着等温線のパターンのこと。IUPAC により Type I~VI に分類される。
破過	Breakthrough	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	breakthrough experiment	上記の破過状態を調べるための実験。
圧壊強度	crushing strength	材料が持ちこたえることができる最大荷重。
FS	feasibility study	計画されたプロセスの投資額、製造コスト等を試算して実現可能性を検討すること。
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。
抽出蒸留	extractive distillation	原料成分より揮発度が低く、共沸混合物を作らない第 3 成分(溶剤)を添加して、原料の比揮発度を著しく変化させて行う蒸留。

プロジェクト用語集

Ⅲ.2.1.4 および Ⅳ.1.3 PCP による微量ガス分離材の開発 <東洋紡株式会社>

専門用語	英語記載	専門用語の説明
アルデヒド	aldehyde	分子内に、カルボニル炭素に水素原子が一つ置換した構造を有する有機化合物の総称。一般式は、R-CHO で表される。主なアルデヒドとして、ホルムアルデヒド、アセトアルデヒドがある。
添着(活性)炭	impregnated carbon	活性炭に化学的処理を施した機能性活性炭。
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。
細孔径	pore size	多孔質材料が持つ微細な空洞のサイズのこと。
空間速度	space velocity	処理装置内を通過する1時間当たりのガス量を、装置内の触媒または吸着材の体積で除したもの。
流通系吸着性能評価		サンプルにガスをフローさせ、サンプル出口側のガス濃度変化を測定積分し吸着量を測定する方法。速度論的解析ができる。
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。
XRD	powder X-ray diffractometry	X線回折の略。X線が結晶格子で回折を示す現象を利用して物質の結晶構造を調べることができる。
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。
ハニカム	honeycomb	立体図形を隙間なく並べた構造体(3次元空間充填)。
バインダー	binder	物と物を接着する物質。
活性炭素繊維 (ACF)	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。

プロジェクト用語集

Ⅲ.2.2.1 PCP 複合触媒の開発／PCP 複合触媒基盤技術の開発 <京都大学>

専門用語	英語記載	専門用語の説明
PCP 系複合触媒	PCP hybridized catalyst	PCP と触媒を複合化させたもの。
分子触媒	molecular catalyst	触媒作用を持つ分子化合物。
レドックス耐性	redox-resistant	酸化還元反応に対して安定性が高いこと。
標準電極電位	standard electrode potential	ある電気化学反応(電極反応)について、標準状態(反応に関与する全ての化学種の活量が 1)かつ平衡状態となっている時の電極電位。
作用電極	working electrode	目的対象の電気化学反応を起こさせ電気化学計測を行おうとしている電極。
基準電極	reference electrode	電極電位の測定時に電位の基準点を与える電極。
補助電極	reference electrode	カウンター電極のこと。
サイクリックボルタメトリー	cyclic voltammometry	電気化学測定の種類。
Co ₃ S ₂ クラスタ錯体	Co ₃ S ₂ cluster complex	Co 錯体の一種。
三次元トモグラフィー測定	Three-dimensional Electron Tomography	様々な角度から撮影した試料の投影像(TEM 像)をもとにコンピュータ上に三次元像を再構成し、材料の微細な三次元構造を解析する手法。
電流効率	current efficiency	電気化学反応において、どれだけの電気量(電荷)が目的とする反応に利用されたかを百分率で表したものの。
MTO 反応	Methanol to olefins reaction	メタノールからオレフィンを合成する反応。

プロジェクト用語集

Ⅲ.2.2.2 PCP 複合触媒の開発／CO₂還元型錯体分子触媒基盤技術の開発 <京都大学>

専門用語	英語記載	専門用語の説明
DMF	N,N'-dimethylformamide	ホルムアミドの一種。溶剤として使われる。
電解反応	electrolysis	電極により電場を与え、基質または触媒に酸化還元反応を起こして進行させる反応。
過電圧	overpotential	電気化学反応において、反応をスムーズに進行させるために平衡電位(理論的な電位)よりも余剰に与える電圧。
選択率	selectivity	反応によって得られる生成物のうち、目的化合物が含まれる割合。
平衡電位	equilibrium potential	電気化学反応において酸化系と還元系の比が1:1となる電位。
定電位電解	controlled-potential electrolysis	電極電位を一定にして行う電解反応。
ZIF-8	ZIF-8	亜鉛と 2-メチルイミダゾールを構成成分とした PCP の一種。
メチルビオローゲン	methylviologen	2段階の可逆的な酸化還元反応が可能な有機分子。

プロジェクト用語集

Ⅲ.2.2.3 および Ⅳ.2 PCP 複合触媒の開発 <昭栄化学工業株式会社>

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:配位高分子のうち、多孔構造を持つもの。
分子触媒	molecular catalyst	多元素からなる分子で触媒作用を示すもの。
錯形成反応	complex forming reaction	錯体を形成する反応。
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。
水熱合成法	hydrothermal synthesis	高温高圧の熱水の存在下で行われる化合物の合成あるいは結晶成長のこと。
含浸法	impregnation process	触媒担体に無機塩の水溶液を含浸させた後、熱処理を行って担持させる方法。
メディエーター	mediator	媒介物、介在物質のこと。ここでは、メチルビオローゲンをさす。
酸化還元波	oxidation-reduction wave	CV 測定で得られる。電位を負方向に掃引すると還元波(上側)が、正方向に掃引すると酸化波(下側)が生じる。
活性金属種	activated metal	活性化された金属のこと。
マイクロ波合成法	microwave synthesis	化学反応にマイクロ波加熱を利用する方法。マイクロ波の波長に応じて特定の物質のみを内部から急速に選択加熱できるため、反応が速くなり、また副反応が抑制され収率が向上する場合がある。
シンタリング	sintering	焼結。ここでは、焼結による粒成長を示す。
スプレードライ技術	spray dry	噴霧乾燥:液体または液体・固体の混合物を気体中に噴霧して急速に乾燥させ、乾燥粉体を製造する手法。
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。
VOC	volatile organic compound	揮発性有機化合物: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。沸点範囲は50-100℃から240-260℃。
電極ペースト	electrode paste	各種粉末を有機溶媒に均一に分散させてペースト状にした電極材料。さまざまな電子部品の導電体や絶縁体、誘電体として使用されている。

I. 事業の位置付け・必要性について

I.1 NEDO の関与の必要性・制度への適合性

I.1.1 NEDO が関与することの意義

(1) 化学産業と GSC(グリーン・サステイナブルケミストリー)

化学産業は、石油、天然ガスといった原料から、基幹化学品を始めとする中間原料を経て得られた一次製品を最終製品や最新技術に供給しており、様々な分野における不可欠な存在の基幹産業である(図 I-1)。また、我が国の化学産業は高い技術力と競争力を有しており、図 I-2a)に示すように出荷額では中国、アメリカに次ぐ世界第 3 位である。国内での製造業と比較すると、出荷額・付加価値額共に第 2 位となっており(図 I-2b)、c)、我が国の経済においても非常に重要な産業である。その一方で、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。図 I-3 に示すように、二酸化炭素排出量は製造業において国内第 2 位となる年間 5000 万トンであり、その割合は製造業全体の 16%に該当する。また、産業廃棄物排出量は製造業中第 3 位で 13%を占めている。これらのことから、化学産業においては、二酸化炭素排出量の削減や廃棄物排出量の削減が課題となっている。

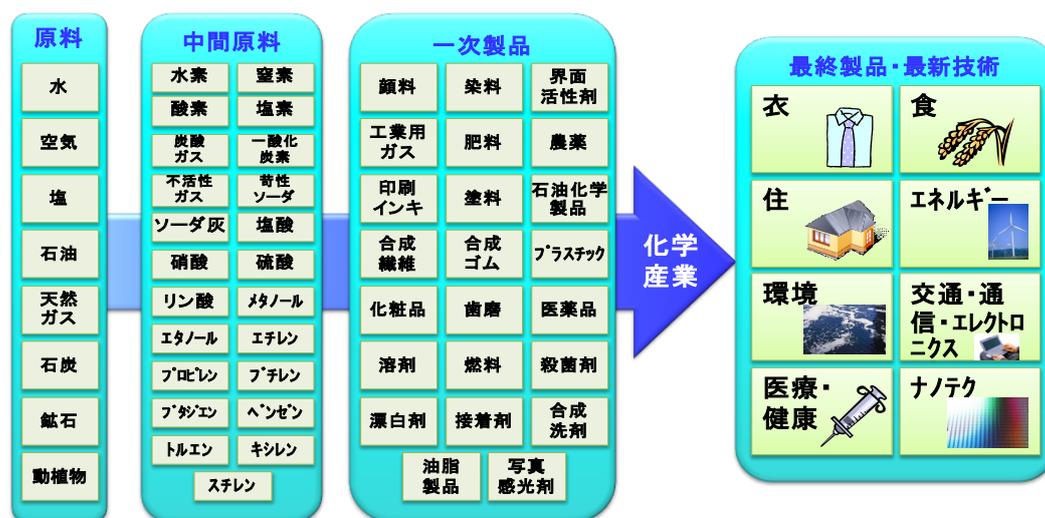


図 I-1 化学産業の位置付け～産業と製品～

上記の課題を解決し、日本の化学産業が持続的に製品を生産・供給するためには、従来の大量消費・廃棄型の生産プロセスを見直し、エネルギー、資源、環境といった問題に対応して持続的な生産を可能とする製造プロセスを構築することが必要となる。このような背景の中で世界的に“エネルギーや資源の制約を克服して環境との共生を図り、安全・安心で持続可能な社会の構築を目指した新しい化学”を目指した様々な取組が行われている(図 I-4)。日本における取組は、一般的にグリーン・サステイナブル・ケミストリー(以下GSCと略す)と呼ばれており、その源流は化学産業界によって 1995 年に設立された日本レスポンシブル・ケア協議会である。また、化学系の学会・団体及び国立研究所により 2000 年 3 月に GSC ネットワーク(GSCN)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「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、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）も関与している。

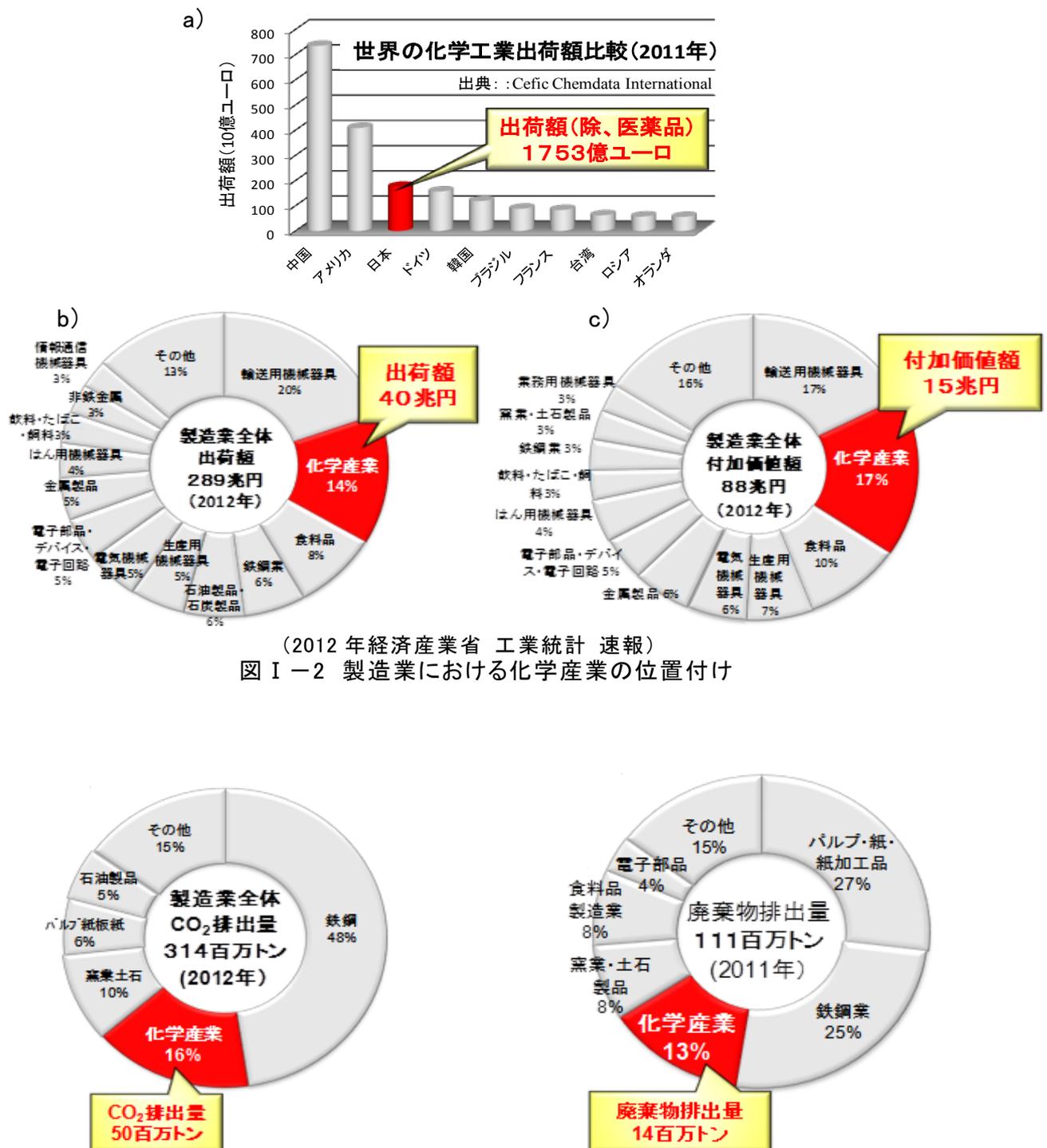


図 I-3 化学産業の CO₂ 及び産業廃棄物排出量(国立環境研究所、環境省データ)

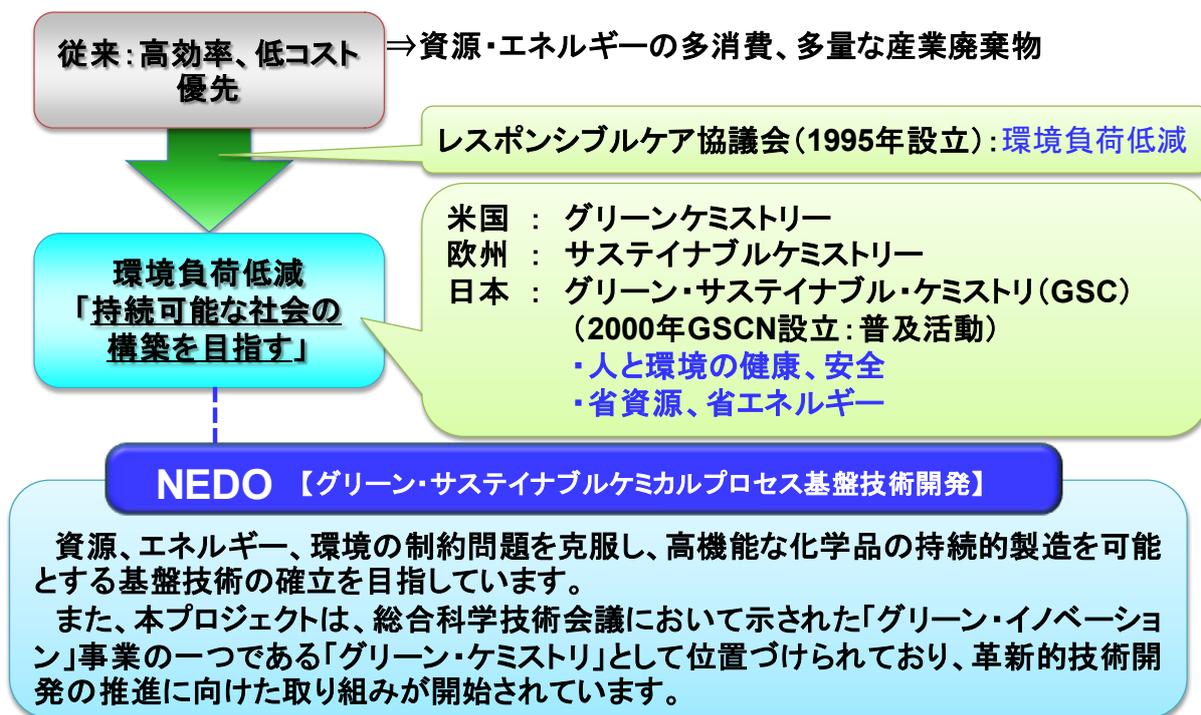


図 I -4 グリーン・サステイナブルケミストリー活動

(2) 本事業に関連する経済産業政策

経済産業省では、実施している研究開発プロジェクトを 7 つの政策目標のもとにまとめ、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)として推進している。

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。

また、本事業は、経済産業省の技術マップ 2010 において、「CO₂分離・回収・利用技術」として位置付けられている。技術戦略マップの該当部分については別添資料とする。

イノベーションプログラムの概要

1. 「イノベーションプログラム」の中での体系的推進 (Inside Management & Accountability)

- 経済産業省の全ての研究開発プロジェクトは、政策目標毎に7つの「イノベーションプログラム」の下で体系的に推進。
 - 各プログラムの中で、政策目標に向けたプロジェクトの位置付けと目標の明確化、市場化に必要な関連施策(規制改革、標準化等)との一体化を図り、イノベーション実現に向け各プロジェクトを効果的に推進。
- ## 2. 「技術戦略マップ」に基づく戦略的企画立案 (Outside Communication & Networking)
- 先端産業技術動向を把握し、国が取り組むべき技術課題とイノベーションの道筋を明確化するため、産学官で協働するロードマッピング手法を導入(『技術戦略マップ 2005/2006/2007/2008』)。
 - 研究開発プロジェクトの選定に当たっては、イノベーションプログラムにおける政策目標を基に技術戦略マップに位置付けられた重要技術課題を抽出し戦略的に企画立案。

イノベーションプログラム(IPG)の21年度予算額 (総額: 1,966億円※1)

IT IPG	ナノテク・部材 IPG	ロボット・新機械 IPG	健康安心 IPG
①ITコア技術の革新 94億円 ②省エネ革新 42億円 ③情報爆発への対応 44億円 ④情報システムの安全性等 63億円 21年度予算 244億円	①ナノテク加速化領域 36億円 ②情報通信領域 28億円 ③ライフサイエンス・健康 16億円 ④エネルギー・資源・環境領域 78億円 ⑤材料・部材領域 27億円 ⑥共通領域 4億円 21年度予算案 188億円	①ロボット関連技術開発 38億円 ②MEMS関連技術開発 12億円 21年度予算 50億円	①創薬・診断技術開発 102億円 ②診断・治療機器・再生医療等の技術開発 28億円 21年度予算 130億円
エネルギー IPG	環境安心 IPG	航空機・宇宙産業 IPG	
①総合エネルギー効率の向上 707億円 ②運輸部門の燃料多様化 278億円 ③新エネルギー等の開発・導入促進 369億円 ④原子力等利用の推進とその大前提となる安全の確保 268億円 ⑤化石燃料の安定供給確保と有効かつクリーンな利用 479億円 21年度予算 1,281億円※2	①地球温暖化防止新技術 60億円 ②3R 33億円 ③環境調和産業バイオ 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	①航空機産業の基盤技術力の維持・向上 233億円 ②宇宙産業の国際競争力強化 87億円 21年度予算案 320億円	

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

2. ナノテク・部材イノベーションプログラム

- 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。



(3) NEDO が関与することの意義

(1)で述べたような化学業界の GSC 活動の一方で、NEDO では国家プロジェクトとして単独企業ではリスクが高く、実施困難な課題の克服に向けた取り組みを実施している。この一つとして、本事業では、化学プラント等で発生するCO₂等の副生ガスを、従来よりも低圧力といったようなマイルドな条件で効率良く吸着、脱離可能な多孔性金属錯体(PCPまたはMOFと略す)からなる革新的な吸着材料及びそれを用いたプロセスの開発を実施した。さらに、分離によって濃縮されたCO₂ガス等の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を実施した。

本事業において PCP を用いた新規な副生ガス分離・精製技術を開発することにより、CO₂の分離プロセスにおける更なる省エネルギー化が可能となるため、本事業は社会的必要性が大きいと言える。また、本事業に参画する各企業それぞれが実用化を念頭において、これまで実用化されていなかったPCPおよびPCP複合材料技術を開発することにより、日本の化学産業の基盤強化が可能となり、将来的な競争力強化に繋がると言える。また本技術は、PCP という新規材料を用いて基盤技術開発から実用化に向けた開発を行う必要があるため、研究開発の難易度が高く開発リスクも大きいことより、産官学の幅広い知見を集約する必要がある。このように本事業はプロジェクトマネジメントの難易度が高いため、効率的に実施するためには NEDO の持つ技術的な知見とプロジェクトマネジメントの経験が必須である。以上より、本事業は NEDO が持つこれまでの知識、実績を活かして推進すべきものと考えられる。

I.1.2 実施の効果

(1) 事業費

事業費の推移を表 I-1 に示す。

表 I-1 事業費の推移 (単位:百万円)

	H21 年度	H22 年度	H23 年度	H24 年度	H25 年度	総額
当初予算	179	152	159	195	139	824
加速予算	61	324		167		552
繰越	—	—	—	—	—	—
実績	240	476	159	362	139	1,376

以下に加速予算の内容について示す。平成 21 年度には加速予算で反応装置及び評価装置を京都大学に設けた集中研に導入し、気相法による多孔性金属錯体の合成に世界で初めて成功した。平成 22 年度には、粉体 PCP の中量合成装置、成型装置及び実ガスを想定した性能評価装置を導入し、実用化に向けた課題抽出の加速を図った。平成 24 年度には、PCP 複合触媒の構造評価装置、触媒活性評価装置を導入し、高性能な PCP 複合触媒の合成に成功した。また、実用化に向けた耐久性評価を加速するために、キログラム単位での PCP 大量合成を外注し、耐久性試験の加速を図った結果、実用化可能なレベルの耐久性を確認できた。

(2) 効果

2030年の時点で、化学プラント等にて発生する副生ガスからのCO₂100万トン分離に対し、本事業で開発したPCPからなる吸着材を用いたCO₂分離システムを導入した場合、省エネルギー効果及びCO₂排出量削減効果として、以下が見込まれる。

- ・省エネルギー効果：原油換算で約2万キロリットル/年
- ・消費エネルギーの削減から換算したCO₂排出削減量：5万トン/年

I.2 事業の背景・目的・位置付け

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。製造においては、有害な添加物(ハロゲン、重金属等)の利用、過度の高機能化追求にともなうプロセスの多段化等によるエネルギー消費の増大、中間工程における廃棄物の大量排出、リサイクルに不向きな製品の大量廃棄(廃棄処分場の不足等)などが問題となっている。一方、生産に必要な多くの原材料等は限られた産出国からの輸入に頼らざるを得ない状況にあり、今後、将来にわたって安定的に化学品が製造できるか危惧されている。さらに、欧州ではRoHS指令、REACH規制の導入や中国などでの自主的な化学物質排出規制の制定など、化学品の製造に関連する環境対策が世界的に強化されている。

このような背景の下、わが国の全産業の基幹となる化学品を持続的に生産、供給していくためには、これまでの大量消費・廃棄型生産プロセスから脱却して、持続的な生産が可能なプロセスによる供給体制の構築が急がれる。そこで、これら資源、エネルギー、環境の制約問題を克服し、高機能な化学品の持続的製造を可能とする基盤技術の確立を目指し、「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してきた。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。」こととされた。

これを受けてNEDOでは、化学品の製造プロセスにおけるシンプル化、クリーン化、省エネ化、原材料・資源の多様化・有効利用、さらに、廃棄物の減容化、容易なりサイクル等を実現し、産業競争力強化、国際規制の先取りを図って、将来にわたっても持続的に化学品を製造するために必要な新規なグリーン・サステイナブルケミカルプロセス(以下「GSCプロセス」という)の研究開発を行ってきた。想定している研究開発課題としては、①有害な化学物質を削減できる、又は使わない、②廃棄物、副生成物を削減できる、③資源生産性を向上できる、④化学品原料の転換・多様化を可能とする等による独創的で革新的な化学プロセスを通じた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している(図I-5)。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。

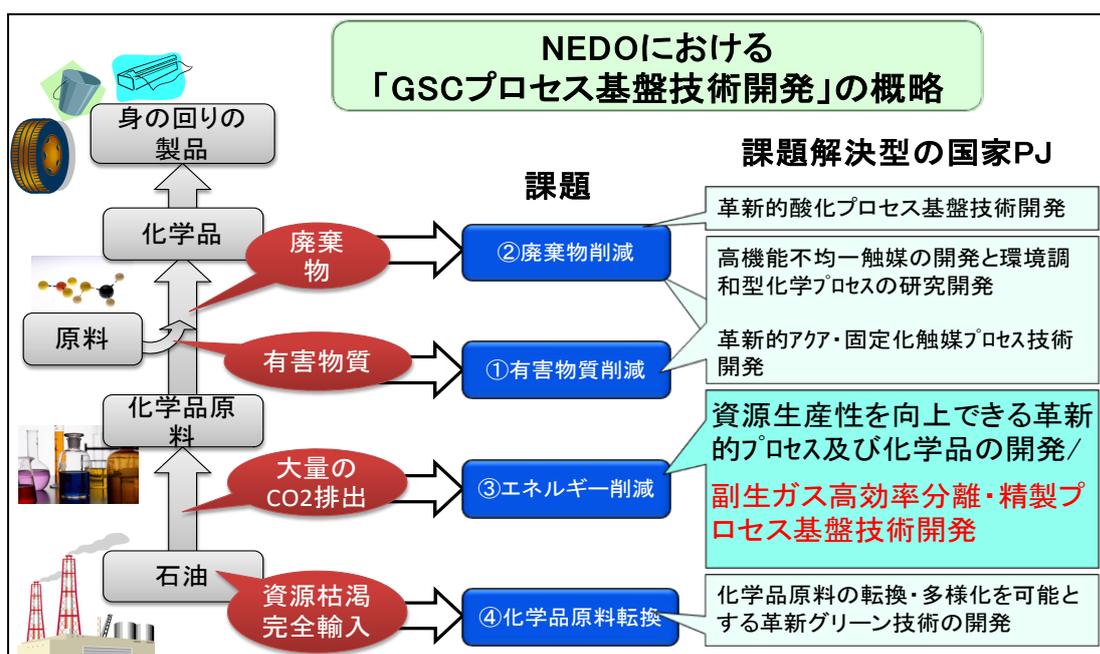


図 I -5 NEDO における GSC プロセス基盤技術開発の概略

本事業の「副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発」は、大量にエネルギーを消費するプロセス等におけるエネルギー削減、それに伴うCO₂排出量削減を目指した「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」に属する研究開発である。現在、産業分野から排出される 3.14 億t-CO₂/年のうち、約 16%が化学産業から排出されている。化学プロセスでは、加熱や蒸留に伴う燃料消費でのCO₂発生がある一方で、化学反応に伴う低濃度の副生ガスとしてのCO₂発生がある。いずれの場合においても、希薄、低温、低圧レベルで発生するため、CO₂の分離は化学吸着、物理吸着、膜分離等により技術的に回収することが可能であっても、従来技術では経済性の観点から困難を極めている。同様に他の化学プロセスでも低濃度の副生ガスとして N₂、N₂O、CH₄、C₂H₆、NO_x、SO_x 等が発生している場合があり、これらの低濃度の副生ガスを取り除くために大量のエネルギーが消費されている。これらの低濃度の副生ガスは、分離・濃縮されれば原料として汎用の基礎化学品へ転換が可能となり、CO₂削減と資源制約からの脱却という我が国の抱える 2 つの課題を同時に解決することが期待できる。

以上の背景より、図 I -6 に概略を示すように、本研究開発では多孔性金属錯体(PCP または MOF)という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を確立した。

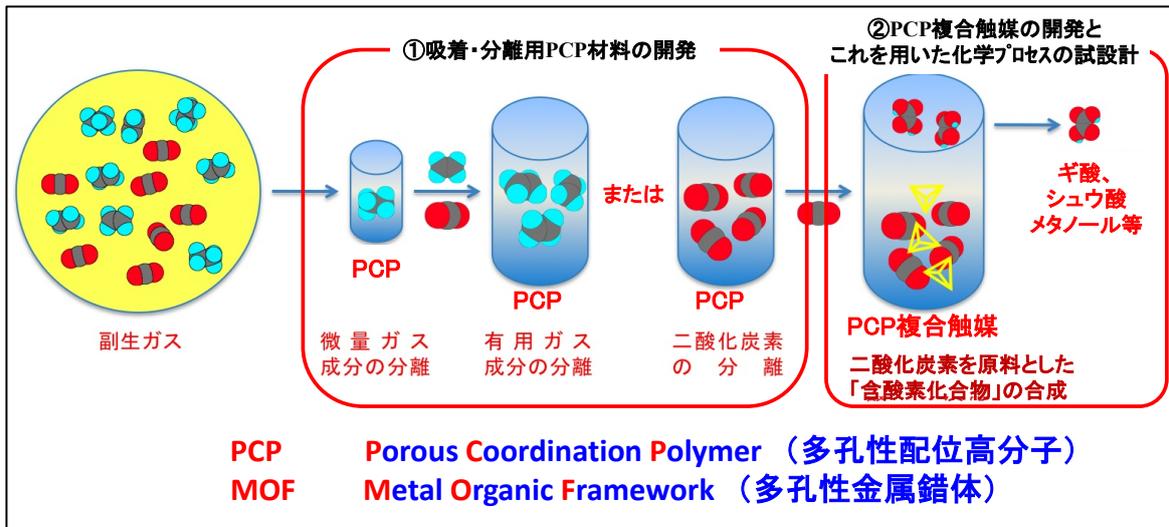


図 I - 6 本事業の概要

PCP/MOF には、「ガス分子の吸着・貯蔵」、「混合ガスからの特定成分の吸着・分離」、「吸着した分子等の化学反応を促進する触媒」の3つの特徴がある。欧米において、この PCP/MOF の特徴を活かしたプロジェクトが政府系ファンドにより実施中である。一例として、欧州委員会における FP7 (Seventh Framework Programme) 中の MACADEMIA (MOF As Catalysts and Adsorbents: Discover and Engineering of Materials for Industrial Applications) プロジェクトでは、大学等の研究機関だけでなく欧州企業の BASF 社や TOTAL 社も参画し、新規な PCP/MOF の製造、特性解析および最適化、工業プロセスでの PCP/MOF 活用の実証等を研究ターゲットとしている。また BASF 社は PCP/MOF の実用化においてはトップランナーであり、主としてメタン吸蔵用の PCP/MOF の実用化を検討中である。

日本における PCP/MOF の研究開発は世界トップレベルである。本事業は、基盤研究シーズを持つ大学と、副生ガス分離や高機能複合材料開発等のニーズがある企業が産学連携による相乗効果で研究開発を進めるものであり、材料基盤技術だけでなく明確な実用化ターゲットということでも世界トップクラスと言える。

II. 研究開発マネジメントについて

II.1 事業の目標

本事業を含む GSC 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、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、使用から廃棄にわたるライフサイクルにおいて、既存の化学品に比べて大幅な省エネ効果、廃棄物の減容化、容易なりサイクル等が実現できる新規な化学品の製造等、今後、持続的に製造可能となるプロセスイノベーション、マテリアルイノベーションに資する革新的な研究開発を行う。GSC プロセスの研究開発項目は下記の通りである。

- ① 有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発
- 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

本事業はこの中で「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」に位置づけられており、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を図るために、化学プロセス等から得られる副生ガスの分離・精製プロセスの省エネルギー化およびそれに伴う CO₂ 排出量削減化を図ることを目標とする。

II.2 事業の計画内容

II.2.1 研究開発の内容

本事業は、社会状況、「GSC 技術戦略ロードマップ」を勘案して NEDO 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したものの一つである。具体的には、化学品等の製造プロセスの中でシンプル化、クリーン化、省エネ化、原材料・資源の多様化・有効利用、廃棄物の減容化、容易なりサイクル等の観点から、上記 4 つの開発目標に該当する開発を委託により実施している。具体的な開発項目を図 II-1 にまとめた。本事業は、「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」の中の「副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発」である。

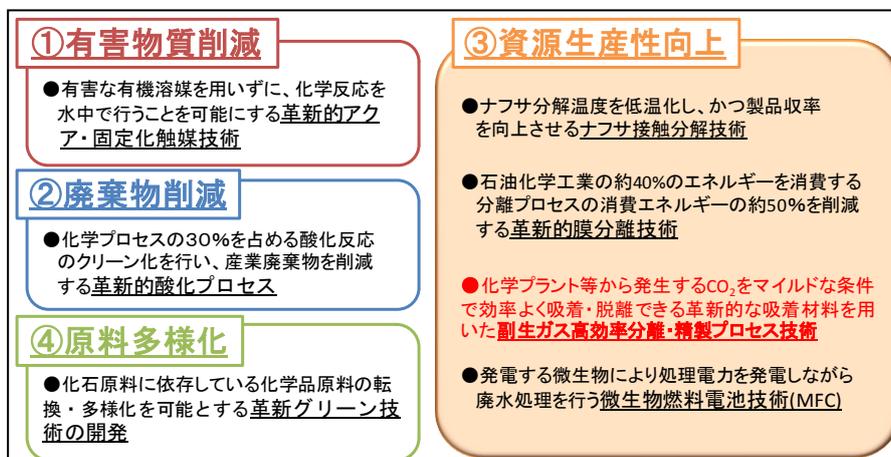


図 II-1 グリーン・サステイナブルケミカルプロセス技術開発

(1) 目的

本事業は、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 CO₂ 等の副生ガスを、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ことを目的とする。

(2) 研究内容

本事業では、以下の 2 つの研究開発項目を実施した。

① CO₂ ガスの分離・精製材料基盤技術開発

本研究開発項目においては、副生ガス中に含まれる CO₂ ガス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 材料を開発した。このため、PCP と CO₂ ガス等の相互作用に適した理論、分子設計技術、in-situ での分離能評価手法、静的及び動的吸着特性評価手法を確立した。また、抽出された数種類の候補 PCP について、スケールアップ合成を行い、材料特性(耐久性、寿命等)、コスト、生産性等の実用化の観点から、分離対象となるガスに対して好適な PCP の絞り込みを行った上で、分離用 PCP の産業利用の可能性を明らかにした。詳細な研究開発項目は下記の 4 点である。

①-1 CO₂/N₂ 分離用 PCP の開発

①-2 メタン精製用 PCP の開発

①-3 CO₂/エチレン分離用 PCP 及び構造異性体混合物からの特定構造炭化水素分離精製用 PCP の開発

①-4 PCP による微量ガス分離材の開発

② 回収 CO₂ ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発

回収 CO₂ ガスを有用な化学品に転換できるグリーンなプロセスのモデル反応として、CO₂ からシュウ酸やメタノール等の含酸素化合物をマイルドな条件で効率的に合成可能な PCP 担持の複合触媒(PCP 複合触媒と称す)を開発した。具体的には、気相または液相中において有機金属錯体や活性金属種等を PCP に担持させる複合触媒作成方法の開発および、触媒反応活性や触媒反応機構の解明を通じた好適な触媒設計指針の確立により、高活性、高選択な PCP 複合触媒プロセス基盤技術を確立した。詳細な研究開発項目として、平成 21~23 年度に実施した下記の②-1 及び②-2 の成果を踏まえて、平成 24 年度以降は 2 項目を統合して②-3 を実施した。

②-1 気相法による PCP 複合触媒の開発(平成 21~23 年度)

②-2 液相法による PCP 複合触媒の開発(平成 21~23 年度)

②-3 PCP 複合触媒の開発(平成 24~25 年度)

(3) 事業目標

(3)-1 中間目標(平成 23 年度末)

① CO₂ガスの分離・精製材料基盤技術開発

・副生ガスの分子サイズに合わせた多孔性金属錯体等の分子設計を行い、副生ガスとしての CO₂ 等を高濃度(95%以上)に濃縮でき、かつ高選択に分離する材料を開発する。具体的には、現在実用されているゼオライト、活性炭等の分離材料に比べて低い操作エネルギーで高選択的に副生ガス(CO₂ 等)を吸着・脱離できる新規材料(副生ガスの吸着エネルギーが 40kJ/mol 以下、分離度(吸着相と気相における目的成分のモル分率比)が 150 以上である材料)を開発する。

② 回収 CO₂ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発

・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。

(3)-2 最終目標(平成 25 年度末)

① CO₂ガスの分離・精製材料基盤技術開発

・副生ガスの分子サイズに合わせた多孔性金属錯体等の分子設計を行い、副生ガスとしての CO₂ 等を高濃度(99.9%以上)に濃縮でき、かつ高選択に分離する材料を開発する。具体的には、現在実用されているゼオライト、活性炭等の分離材料に比べて低い操作エネルギーで高選択的に副生ガス(CO₂ 等)を吸着・脱離できる新規材料(副生ガスの吸着エネルギーが 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 回収 CO₂ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発

・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。

II.2.2 研究開発の実施体制

(1) 実施者の選定

GSC プロセス基盤技術開発に属する各事業については、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、委託して実施した。

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。

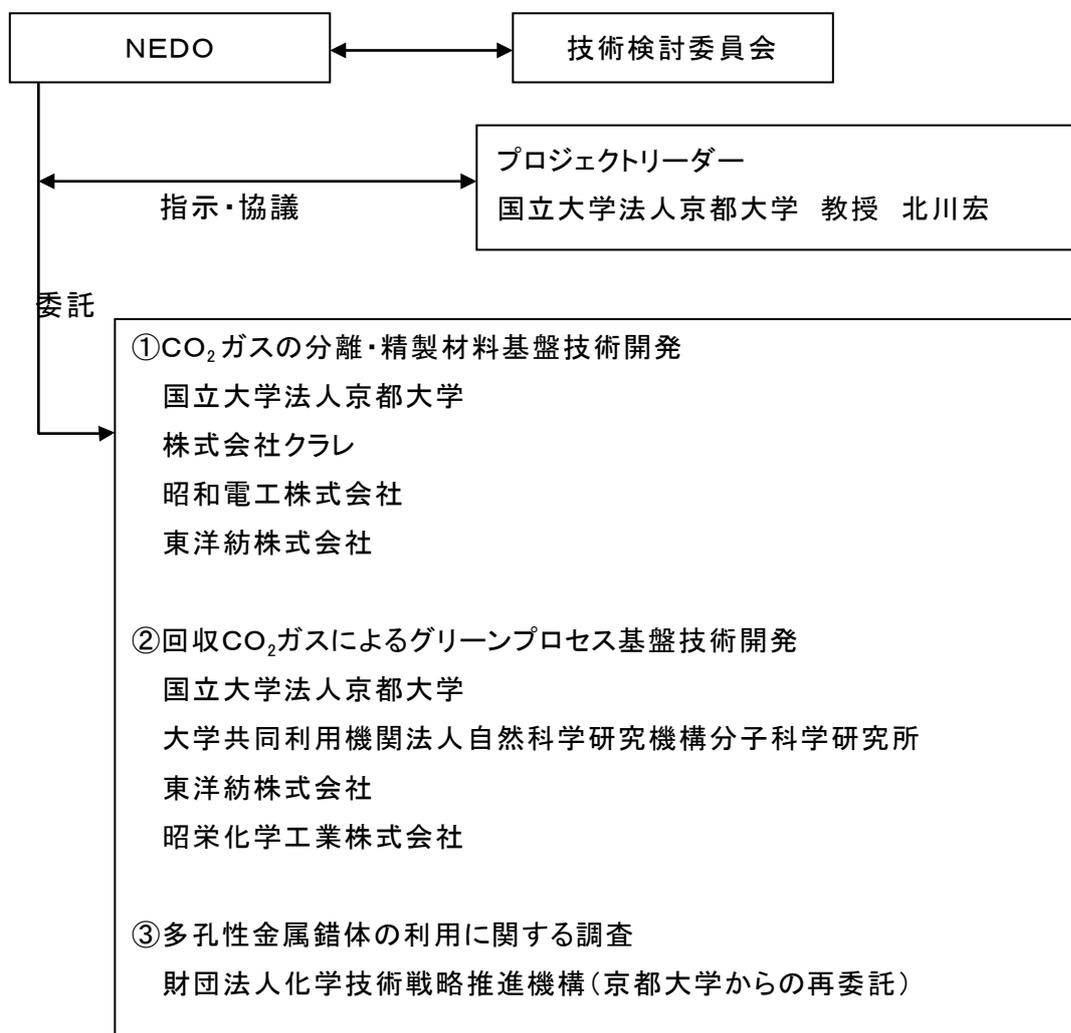
(2) プロジェクトリーダー

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した。本事業では、的確な計画立案・指示・判断・研究開発マネジメントが遂行されるよう、実施者の中から国立大学法人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

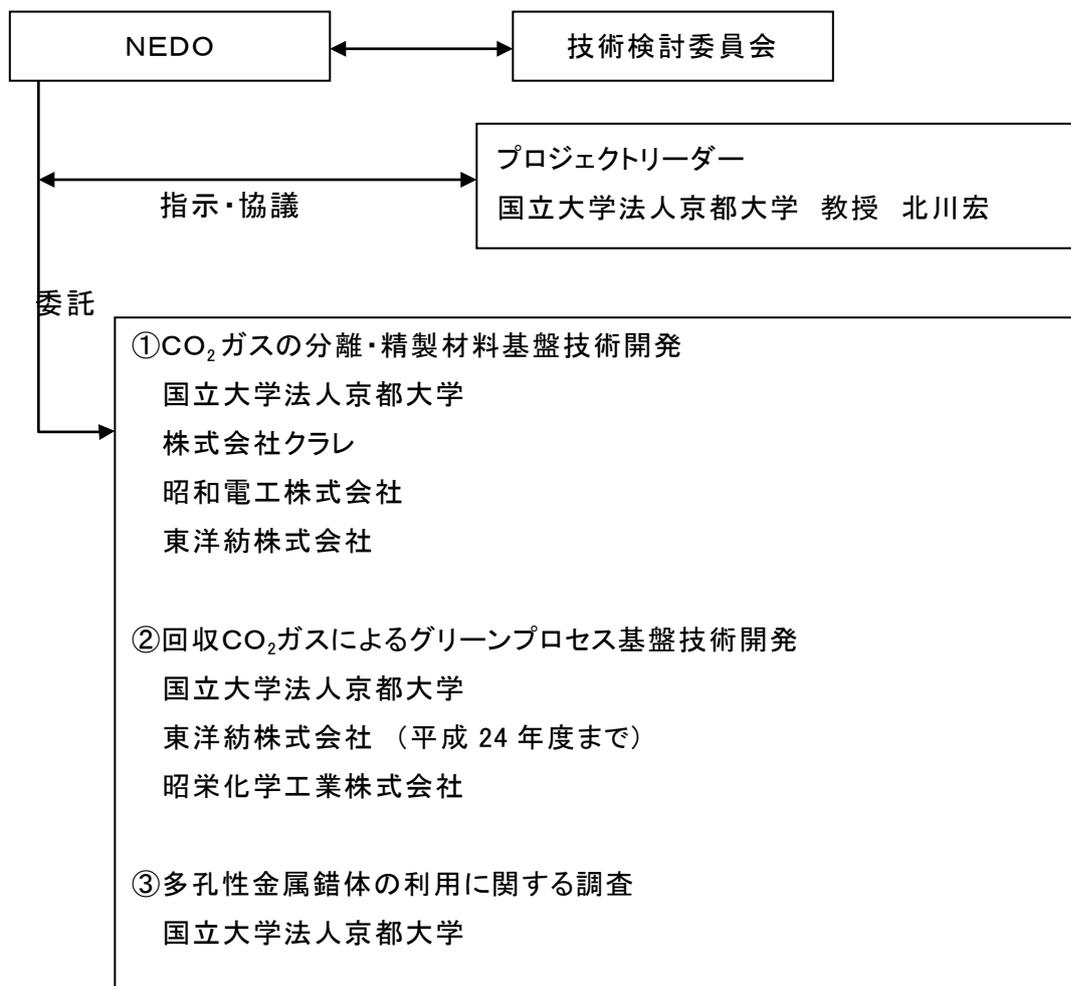
(3)-1 平成 21 年度～23 年度

平成 21 年度から平成 23 年度の実施体制を以下に示す。



(3)-2 平成 24 年度～25 年度

平成 24 年度から平成 25 年度の実施体制を以下に示す。



II.2.3 研究開発の運営管理

(1) 技術検討委員会

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、担当範囲を明確にした。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った。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った。優れた研究成果を上げている研究体に対しては、研究加速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た。

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た。技術検討委員のリストを表II-1に示す。

表Ⅱ－1 技術検討委員

区分	氏名	所属	役職
委員長	戸嶋 直樹	学校法人山口東京理科大学	教授
委員	染宮 昭義	神鋼リサーチ株式会社	主席研究員
委員	北島 昌夫	早稲田大学	招聘研究員
委員	室井 高城	アイシーラボ	代表
委員	指宿 堯嗣	社団法人産業環境管理協会	常務理事

(敬称略・順不同)

技術検討委員会は年2回の開催とし、このうち1回は集中研の設置されている国立大学法人京都大学や、参画企業に設置されている分担研で実施した。技術検討委員会において委員から頂いたご意見を本事業の運営管理に反映させた。具体的な内容としては、実用化に向けた目標等の明確化、実用化に向けた課題解決の強化(粉体PCPに対する形態付与検討、耐久性評価等)、および参画企業のニーズと連動したアカデミアにおけるメカニズム解明といった産学連携の連携強化である。表Ⅱ－2に技術検討委員会の開催履歴を示す。

表Ⅱ－2 技術検討委員会開催履歴

回数	開催年度	開催日	開催場所	参加法人
1	平成21年度	H22.2.12	NEDO 日比谷	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
2	平成22年度	H22.9.24	京大 集中研	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
3	平成22年度	H23.3.25	NEDO 日比谷	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
4	平成23年度	H23.10.3	京大 集中研	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
5	平成23年度	H24.2.10	NEDO 霞が関	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、化学研究評価機構
6	平成24年度	H24.10.10	京大	NEDO、京都大学、クラレ、昭和電工、東洋紡、昭栄化学工業
7	平成24年度	H25.2.28	NEDO 川崎	NEDO、京都大学、クラレ、昭和電工、東洋紡、昭栄化学工業
8	平成25年度	H25.10.11	クラレ くらしき研究センター	NEDO、METI、京都大学、クラレ、昭和電工、東洋紡、昭栄化学工業
9	平成25年度	H26.2.6	NEDO 川崎	NEDO、METI、京都大学、クラレ、昭和電工、東洋紡、昭栄化学工業

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、開発開始当初は基盤技術開発的要素が大きかったため、京都大学に設置した集中研を中心として、情報および成果の共有化を図り、プロジェクトリーダーを交えた討議を頻繁に実施することにより、短期間で成果を挙げた。また、年 2 回開催の進捗報告会(「全体会議」と称する)等には、NEDO も極力出席して状況の把握に努めた。

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

また、本事業では、事業実施前および実施中に、関連技術に関する特許、論文等の開発動向調査を実施し、これらの結果を実施者間で共有して知財創出に役立てた。また、京都大学と参画企業の間で「知的財産権取扱いに関する取り決め」を策定し、実施者間の合意に基づいて、研究開発結果に基づいた戦略的な特許出願、知財権の帰属・譲渡等の実務を行った。また、本研究開発において新規に見出した柔軟構造的 PCP に対して商標登録を実施した。以上のように、本事業では知財マネジメントに関して体制が整えられており、知財創出・管理に関して効率的な運用が図られた。

II.3 情勢変化への対応

II.3.1 加速財源の投入

研究開発の進捗に伴い、粉体として得られる PCP の成形検討(ペレット化等)や、実ガスを想定した性能試験、連続吸脱着による耐久性評価といった実用化に向けた課題抽出および評価試験を加速するために加速財源の投入を行った。投入した加速財源とその目的及び成果を表 II-3 に示す。

表 II-3 加速財源の目的・概要及び主要成果

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した。
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できた。
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	PCP 合成量増加および評価効率向上により、実用化に向けた課題抽出の加速を図ることができた。
平成 24 年 8 月	58	実用化候補となる PCP の性能評価の迅速化のため	複合触媒の性能評価の効率化および、実用化に向けた分離用 PCP

		め、触媒活性評価装置の導入とキログラムスケールでのPCP外注合成を実施	の耐久試験の加速を図ることができた。
平成24年 11月	109	PCP複合触媒の性能向上と耐久試験の効率化のため、複合触媒合成装置並びに分析装置の導入と、再度のPCP外注合成を実施	高性能なPCP複合触媒の合成に成功した。候補PCPにおいて、実用化可能なレベルの耐久性を確認した。

II.3.2 中間評価への対応

(1) 評価結果の概要

平成23年度に実施した中間評価では、PLの強力なリーダーシップのもとに産学連携で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や、世界的水準から見ても優れた成果が得られている等、本事業の意義及び成果が評価された上で、主なものとして次のような事項の検討等が望まれた(中間評価書より抜粋)。

- ・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。

- ・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。

- ・CO₂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。CO₂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。

(2) 対応の概要

これらの指摘事項について、その対応方法を検討し、本事業の基本計画、実施計画書等に反映させて、研究開発を進めた。

- ・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。

→より実用化に即した目標として、動的な吸着挙動(破過試験等)を指標とした目標を設定した。参画企業の想定する混合ガス系に対しても、同様な目標を定め、H24 年度からの実施計画書に反映して研究開発を行った。その結果、目標を達成し、実用化が可能なレベルの性能を持つ吸着材を開発することができた。

・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。

→実用化の判断は、最終的には性能とコストとのバランスとなる。現状の部材コストでは優位性を出すことは難しいため、PCP の製造コスト低減化の検討に加え、既存技術とのプロセスコスト面等に関する比較を行い、実用化に必要な開発課題を明確化することとし、H24 年度以降の実施方針に反映して研究開発を行った。実験とシミュレーションを組み合わせ PCP を用いた分離プロセスのコスト等を検討した結果、既存技術と競合可能なレベルのプロセスの構築可能性を明らかにした。

・CO₂ 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。CO₂ 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。

→CO₂ の原料化はハードルが高く、本事業では試設計との位置付けではあるが、合理的なプロセスとして成立するための要件を明らかにすることとし、H24 年度以降の実施方針に反映した。新規な合成対象として基幹化学品であるメタノールを追加し、気相中で合成したPCP 複合触媒を用いて、ラボレベルではあるがメタノール生成を確認し、PCP 複合触媒の有用性を検証した。

II.4 評価に関する事項

II.4.1 事前評価

(1) 事前評価書

本事業に関しては、GSC 基盤技術開発の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④-1に示す。

(2) NEDO POST3

平成 21 年 2 月 4 日～2 月 17 日の間、本事業の基本計画(案)に関するパブリックコメントを募集した結果、本事業に関係する 2 件の意見が寄せられたが、基本計画(案)の内容に十分反映されているものと考えられたため、基本計画(案)の変更は実施しなかった。パブリック

コメントの内容とそれに対する考え方は添付資料④-2に示す。

(3) 採択審査

平成 21 年 4 月 2 日～4 月 28 日の間、公募を行った結果、本事業において 1 件の応募があり、NEDO 技術開発機構内に設置した 5 名の外部専門家からなる技術審査委員により、5 月 1 日～5 月 15 日の書面審査及び 5 月 21 日のヒアリング審査を実施した。審査結果として、本事業において 1 件を採択した。採択審査委員を表 II-4 に示す。

表 II-4 採択審査委員

区分	氏名	所属	役職
委員長	戸嶋 直樹	学校法人山口東京理科大学 工学部 応用化学科	教授
委員	染宮 昭義	神鋼リサーチ株式会社 先進技術情報センタ ー	主席研究員
委員	北島 昌夫	学校法人早稲田大学 理工学術院 総合研 究所	客員教授
委員	室井 高城	アイシーラボ	代表
委員	指宿 堯嗣	社団法人産業環境管理協会 環境技術部門 環境技術センター 技術室	常務理事

(敬称略・順不同)

II.4.2 中間評価

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、中間評価を事業開始 3 年目に実施した。

- ・実施時期 : 第一回分科会 平成 23 年 6 月 9 日
第 29 回研究評価委員会 平成 23 年 10 月 14 日
- ・評価手法 : 第三者評価
- ・評価事務局 : 評価部
- ・評価項目、基準 : 標準的評価項目・評価基準に基づく
- ・中間評価結果(抜粋):表 II-5 に示す。

表 II-5 中間評価結果(抜粋)

1. 総論
1) 総合評価 わが国がグリーン・サステ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

昼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、CO₂ 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、CO₂ 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 CO₂ 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、CO₂ 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。

・分科会委員 : 表 II-6 に示す。

表 II-6 平成 23 年度中間評価 分科会委員(敬称略、五十音順)

職位	氏名	所属、役職
分科 会長	みねもと まさき 峯元 雅樹	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	たもん はじめ 田門 肇	京都大学 大学院工学研究科 化学工学専攻 教授
委員	かざま しんご 風間 伸吾	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
	かわい まさと 川井 雅人	株式会社テクノマネジメントソリューションズ 取締役
	さとかわ しげお 里川 重夫	成蹊大学 理工学部 物質生命理工学科 教授

	にしはら ひろし 西原 寛	東京大学 大学院理学系研究科 化学専攻 教授
	にしやま たかひと 西山 貴人	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

・研究評価委員会 :表Ⅱ-7に示す。

表Ⅱ-7 平成23年度中間評価 研究評価委員(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 工学部 応用化学科 教授
	伊藤 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

II.4.3 事後評価

NEDO は、技術的及び政策的観点から、事業の位置付け・必要性、研究開発マネジメント、研究開発成果並びに実用化の見通しについて、外部有識者による研究開発の事後評価を平成 26 年度に実施する。

- ・実施時期 : 分科会 平成 26 年 10 月 30 日
研究評価委員会 平成 年 月 日
- ・評価手法 : 第三者評価
- ・評価事務局 : 評価部
- ・評価項目、基準 : 標準的評価項目・評価基準に基づく
- ・評価委員 : 表 II-8 に示す。

表 II-8 平成 26 年度 事後評価 分科会委員(敬称略、五十音順)

	氏名	所属、役職(仮)
分科 会長	にしはら ひろし 西原 寛	東京大学大学院理学系研究科 化学専攻 教授
分科 会長 代理	くろ た やすしげ 黒田 泰重	岡山大学大学院 自然科学研究科 教授
委員	おか のぶき 岡 伸樹	三菱重工業株式会社 長崎研究所
	なかむら たかよし 中村 貴義	北海道大学 電子科学研究所 電子材料物性部門 教授
	まつむら はるお 松村 晴雄	株式会社旭リサーチセンター 常務取締役/主席研究員
	み うら のりお 三浦 則雄	九州大学 総合理工学府 物質理工学専攻 産学連携センター プロジェクト部門 教授
	むか い しん 向井 紳	北海道大学大学院 工学研究院 有機プロセス工学部門 化学工学分野 材料化学工学研究室 教授

Ⅲ. 研究開発成果について

Ⅲ.1 事業全体の成果

(1) 最終目標の達成状況

本事業では、「①CO₂ガスの分離・精製材料基盤技術開発」、および「②回収 CO₂ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発」の 2 つの研究開発項目を実施し、いずれも最終目標を達成することができた。

①CO₂ガスの分離・精製材料基盤技術開発

理論解析を取り入れながら副生 CO₂ ガス等を選択的に分離する PCP 構造の設計を行った結果、最終目標に挙げた数値(分離後の CO₂ 濃度 99.9%以上、CO₂ 吸着エネルギー 130kJ/mol 以下、CO₂ 分離度 300 以上)を超える性能を持つ PCP を開発することができた。

②回収 CO₂ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発

触媒となる材料と PCP との複合化手法を開発し、得られた PCP 複合触媒を用いた化学プロセスの試設計として、原料となる CO₂ からギ酸を生成するプロセスにおいて、選択率(電流効率)80%以上という最終目標を達成できた。

以下に公開されている最終目標に対する成果と達成度を示す。

表Ⅲ.1-1 最終目標に対する成果と達成度(公開されている目標のみ)

研究開発項目	研究開発目標(最終目標)	成果	達成度
①CO ₂ ガスの分離・精製材料基盤技術開発	分離後のCO ₂ 濃度 99.9%以上	99.9%	◎
	CO ₂ 吸着エネルギー 30kJ/mol以下	25kJ/mol	
	CO ₂ 分離度 300以上	655	
②回収CO ₂ ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発	化学プロセスの試設計において 選択率(電流効率) 80%以上	ギ酸生成 95%以上	◎

◎: 大幅達成、○: 達成、△: 達成見込み、×: 未達

(2) 成果の意義

本事業全体として以下の成果が得られ、PCP 基盤技術を確立することができた。

- ・吸着分離に最適な柔軟構造的 PCP の開発
- ・配位子固溶化手法等による吸着制御
- ・理論計算に裏付けられた PCP 材料設計
- ・吸着・分離の定量的評価方法
- ・触媒と PCP の複合化技術

また、各開発項目においては以下の成果が得られた。

①CO₂ガスの分離・精製材料基盤技術開発

- ・実用化可能なレベルのPCPの開発
- ・分離プロセスのフィージビリティ検討、コスト計算等による技術的優位性の検証

②回収CO₂ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発

- ・PCP複合触媒の工業的製法の開発
- ・PCP複合触媒を用いた化学プロセスの試設計（例）CO₂原料からのメタノール合成

本事業で得られた成果がもたらす効果として、第一に、本事業で開発したPCPにより、分離プロセスの高精度化、低コスト化、省エネ化が可能となることが挙げられる。第二に、PCPと他材料の複合化技術は、様々な用途の高機能材料へ展開が可能であり、波及効果が期待できることが挙げられる。本事業では、PCP基盤技術を確立するという大きな成果を上げており、事業終了後に、参画企業が自社内で実用化検討を深めるために十分なレベルに到達している。

(3) 知的財産の取得および成果の普及

以下に本事業で行った特許出願、論文発表、その他外部発表の件数を示す。

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		
	国内	外国	PCT※ 出願	査読 付き	その 他	学会発表・ 講演	新聞・雑誌等 への掲載	その他
H21FY	5件	-	-	3件	-	-	-	-
H22FY	10件	-	1件	3件	1件	3件	2件	-
H23FY	24件	-		6件	2件	2件	2件	-
H24FY	18件	-	7件	3件	2件	5件	2件	-
H25FY	17件	-	6件	3件	2件	2件	2件	
H26FY	9件		3件	3件	1件	4件	1件	

その他、H21FYに商標登録出願2件

(※Patent Cooperation Treaty：特許協力条約)

Ⅲ.2 研究開発項目毎の成果

Ⅲ.2.1 CO₂ガスの分離・精製基盤技術開発

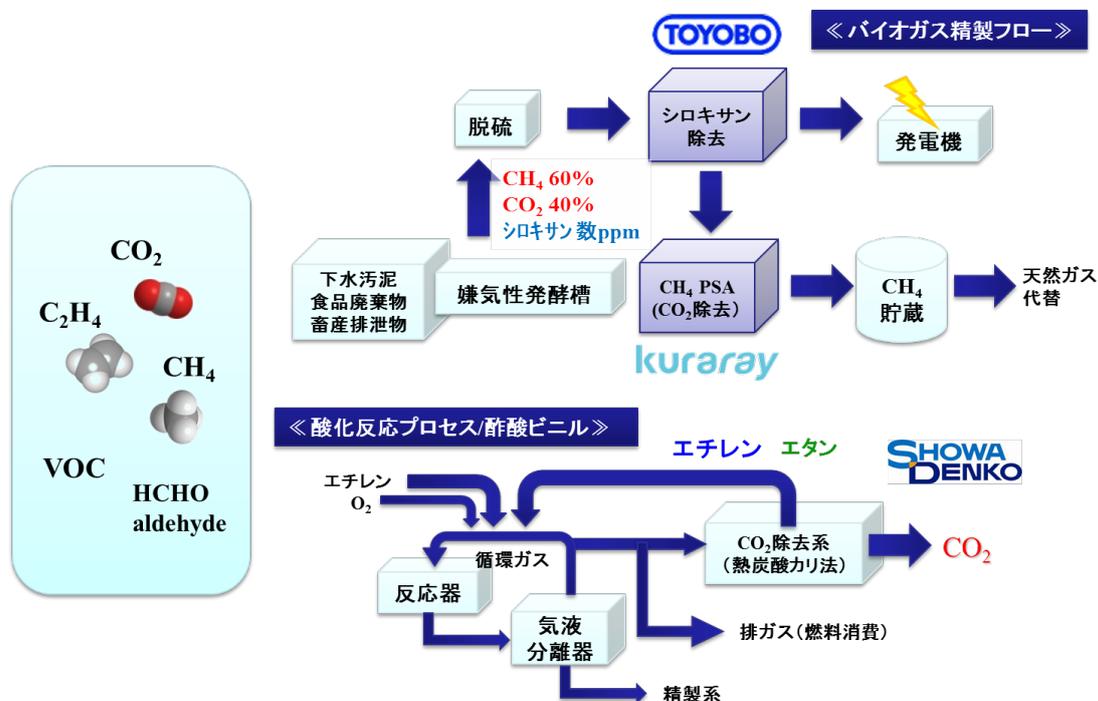
Ⅲ.2.1.1 CO₂/N₂分離用 PCP の開発 <京都大学>

(1) 背景と目的

化学プロセス等の生産プロセスから発生する CO₂ の分離回収技術は、地球温暖化防止等の観点から重要な技術である。例えばバイオガスプラントでは CO₂ とメタン(CH₄)の混合ガスが主だった排出ガスであり、エネルギーガスであるメタンを濃縮するためには効率よく CO₂ を分離しなければならない(図Ⅲ.2.1.1-1)。また燃焼ガスでは CO₂ と CO、あるいは他の C1、C2 ガスが混ざり合い、その中で最も化学的に安定で(すなわち再利用が難しい)CO₂ を取り除くことは排ガスの再利用のためには不可欠な技術である。

従来の CO₂ の分離方法は大きく分けて、アミン溶液などを用いた化学反応を介した分離方法と、活性炭やポリマー等の吸着材料を用いた圧カスウィング法(PSA 法)、そして膜分離法が挙げられる。それぞれ用途によって使い分けられているが、PSA 法による CO₂ 分離においては用いる多孔性材料の分離特性が不十分であるとか、分離した後の CO₂ 回収において多大なエネルギーが必要であるといった多くの課題が残っており、新たな吸着材が求められている。

そこで本研究開発項目では、モデルガス系として CO₂ と N₂ の混合ガス系を用いて、高い CO₂ 分離特性を有する PCP を探索・合成し、またそれらの PCP の分離、吸着のメカニズムを明らかにすることにより、PCP 材料設計における基盤技術を確立することを目的とした。次に、PCP の耐水性や耐圧性などの実用化を念頭においた必要基礎物性の評価を行い、大学と企業との産学連携により PCP を用いた吸着・分離基盤技術を確立することを目的とした。



図Ⅲ.2.1.1-1 一般的なバイオガス精製フローおよび各社の主たる担当

(2) 目標

平成 23 年度の中間目標の達成を踏まえ、CO₂ の高分離度と脱離の低エネルギー化の両立を目指して、最終目標(平成 25 年度)として下記を設定した。この際に、PCP を用いた吸着分離技術において、(1)より大きな CO₂ 吸着量と高い分離能の両立、(2)CO₂ の吸着・脱着が迅速であること、(3)分離した CO₂ を低エネルギーで回収し、吸着材を再利用できることを勘案して目標を設定した。

最終目標：

- ①CO₂ の選択的分離後の濃度：99%以上、
- ②CO₂ 分離度：300 以上、
- ③CO₂ の吸着エネルギー：30kJ/mol 以下、
- ④0.10～0.32MPa の圧力範囲における CO₂ の動的有効吸着量：20mL/mL-PCP

また、本プロジェクトに参加している企業と協同して、各企業の研究開発ターゲットを踏まえた分離向け PCP の基盤技術として、PCP の性能向上とともに、実用化の際に要求される耐水性、コスト、形状制御についても、金属イオンおよび配位子の組み合わせから基礎的な知見を得ることを目指した。

(3) 研究開発成果

(3)-1 CO₂ 分離に適した PCP の構造探索

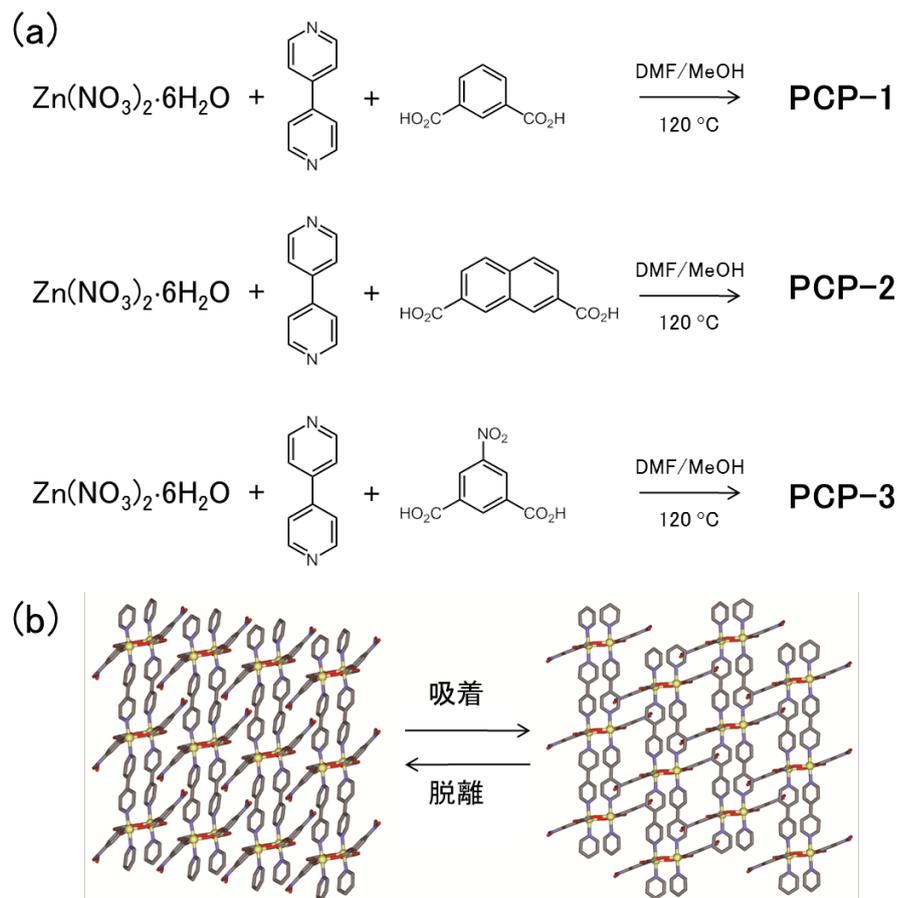
PCP は多彩な金属イオンと架橋性の配位子から組み上がり、無限の結晶構造の可能性を有する多孔性材料である。また PCP は、0.4～6 nm の範囲の細孔径を自在に制御することができ、様々なガス分子を選択的に効率よく吸着することができる。PCP はいずれも高い結晶性を有しており、細孔径分布が小さい。この特徴を用いるとターゲットの分子(ここでは CO₂)のみを選択的に吸着・分離することができる。一方、大きな分子構造を有する配位子を利用することにより、6,000 m²g⁻¹を超える BET 表面積を持つ PCP も合成でき、これまでの多孔性材料では不可能である高い表面積、設計性(化学修飾特性)を持つ。

CO₂ は 3.5Å のサイズを持ち、この小さな分子を選択的に捕捉するためにはそれに適した細孔構造を設計しなければならない。そこでまず CO₂ に適した細孔を有し、高い分離特性が期待できる PCP の構造探索を行った。表 2.1.1-1 にスクリーニングした PCP の例を示す。具体的には、PCP の細孔サイズは 2～20Å、また PCP の構造次元性も一次元構造から三次元構造まで幅広く合成し、CO₂ 分離に最適な構造を探索したところ、有力な候補として Zn²⁺などの二価遷移金属イオン(特に Co, Ni, Cu, Zn)および配位子としてイソフタル酸誘導体と 4,4'-ビピリジルから組み上がる二次元レイヤー状の PCP が抽出された。

表Ⅲ.2.1.1-1 CO₂分離特性を有する PCP の合成スクリーニング表(一部)。合成・結晶構造解析・CO₂吸着実験から CO₂分離向け PCP の選定を行った。

錯体	金属塩	配位子	錯体	金属塩	配位子
[Co(HCOO) ₂]	CoCl ₂ ·6H ₂ O	蟻酸	CuCID-5	Cu(NO ₃) ₂ ·3H ₂ O	5-ニトロインフタル酸
[Ni(HCOO) ₂]	NiCl ₂ ·6H ₂ O	蟻酸	NiCID-tb	Ni(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	5-tert-ブチルインフタル酸
[Zn(HCOO) ₂]	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	蟻酸	MnCID-tb	Mn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	5-tert-ブチルインフタル酸
[Zn(HCOO) ₂]	ZnCl ₂	蟻酸	CoCID-tb	Co(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	5-tert-ブチルインフタル酸
[Mn(HCOO) ₂]	MnCl ₂ ·4H ₂ O	蟻酸	CuCID-tb	Cu(NO ₃) ₂ ·3H ₂ O	5-tert-ブチルインフタル酸
[Mg(HCOO) ₂]	MgCl ₂ ·6H ₂ O	蟻酸	[Zn ₂ (bdc) ₂ (bpy)]	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	テレフタル酸
[Ca(C ₄ O ₄)(H ₂ O)]	CaCl ₂	四角酸	[Cu ₂ (bdc) ₂ (bpy)]	Cu(NO ₃) ₂ ·3H ₂ O	テレフタル酸
[Fe(HCOO) ₂]	FeCl ₂ ·4H ₂ O	蟻酸	[Zn ₂ (bdc) ₂ (bpy)]	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	テレフタル酸
[Mg(HCOO) ₂]	MgCl ₂ ·6H ₂ O	蟻酸	[Mn(HCOO) ₂]	MnCl ₂ ·4H ₂ O	蟻酸
[Mn(HCOO) ₂]	MnCl ₂ ·4H ₂ O	蟻酸	[Ni(HCOO) ₂]	NiCl ₂ ·6H ₂ O	蟻酸
[Zn(HCOO) ₂]	ZnCl ₂	蟻酸	[Zn ₂ (ndc) ₂ (bpy)]	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	2,6-ナフタレンジカルボン酸
[Mn(HCOO) ₂]	MnCl ₂ ·4H ₂ O	蟻酸	Mg(ndc) ₃	Mg(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	2,6-ナフタレンジカルボン酸
[Ni(HCOO) ₂]	NiCl ₂ ·6H ₂ O	蟻酸	HKUST-1	Cu(NO ₃) ₂ ·3H ₂ O	トリメジン酸
[Ni(HCOO) ₂]	NiCl ₂ ·6H ₂ O	蟻酸	[Zn ₂ (bdc) ₂ (bpy)]	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	テレフタル酸
ZnCID-1	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	インフタル酸	[Co(ipa) ₂ Na ₂ (MeOH) ₂]	Co(Oac) ₄ ·4H ₂ O	インフタル酸
[Zn(HCOO) ₂]	ZnCl ₂	蟻酸	ZIF-1	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	イミダゾール
ZnCID-tb	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	5-tert-ブチルインフタル酸	[Zn ₂ (bdc) ₂ (dabco)]	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	テレフタル酸
ZnCID-5	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	5-ニトロインフタル酸	[Zn(HCOO) ₂]	ZnCl ₂	蟻酸
NiCID-1	Ni(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	インフタル酸	[Mn(HCOO) ₂]	MnCl ₂ ·4H ₂ O	蟻酸
MnCID-1	Mn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	インフタル酸	[Ni(HCOO) ₂]	NiCl ₂ ·6H ₂ O	蟻酸
CoCID-1	CoCl ₂ ·6H ₂ O	インフタル酸	HKUST-1	Cu(NO ₃) ₂ ·3H ₂ O	トリメジン酸
CuCID-1	Cu(NO ₃) ₂ ·3H ₂ O	インフタル酸	[Zn ₂ (fma) ₂ (bpy)]	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	フマル酸
OPL-p1	Cu(NO ₃) ₂ ·3H ₂ O	2,5-ジヒドロキシ安息香酸	[Zn ₂ (chd) ₂ (bpy)]	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	trans-1,4-シクロヘキサンジカルボン酸
HKUST-1	Cu(NO ₃) ₂ ·3H ₂ O	トリメジン酸	ZIF-8	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	2-メチルイミダゾール
CoCID-1	Co(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	インフタル酸	ZIF-7	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	ベンズイミダゾール
CuCID-1	Cu(NO ₃) ₂ ·3H ₂ O	インフタル酸	ZIF-8	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	2-メチルイミダゾール
ZnCID-5	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	5-ニトロインフタル酸	[Cu ₂ (chd) ₂ (bpy)]	Cu(NO ₃) ₂ ·3H ₂ O	trans-1,4-シクロヘキサンジカルボン酸
NiCID-5	Ni(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	5-ニトロインフタル酸	[Zn ₂ (bdc) ₂ (dabco)]	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	テレフタル酸
MnCID-5	Mn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	5-ニトロインフタル酸	ZIF-7	Zn(NO ₃) ₂ ·6H ₂ O	ベンズイミダゾール

図Ⅲ.2.1.1-2(a)にその一例を示す。Zn²⁺イオンと、二種類の配位子のうちインフタル酸誘導体および 2,6-ナフタレンジカルボン酸などの 120° の配位結合様式を有するジカルボン酸において、幅広く同形の構造を合成することができ、そのレイヤー間の細孔径は約 4Å であることがわかった。また図Ⅲ.2.1.1-2(b)には Zn²⁺イオンおよび 5-NO₂-インフタル酸、4,4'-ビピリジルを用いた時に得られる PCP-3 の結晶構造を示している。PCP-3 の X 線解析をガス吸着前後において実施したところ、図Ⅲ.2.1.1-2(b)に示すように、重要な特徴として多孔性結晶構造が吸着前後で大きく変化することがわかった。これは PCP-3 の細孔形状が一義的に決まるわけではなく、吸着物質を PCP 細孔が認識して、形状が変化するということを意味する。この挙動は可逆的であり、これまで知られている活性炭やゼオライトといった多孔性材料とは一線を画す特徴である。このため、細孔サイズが CO₂ 吸着に適していることも含め、柔軟な構造を有する PCP 群として次なる評価を行った。



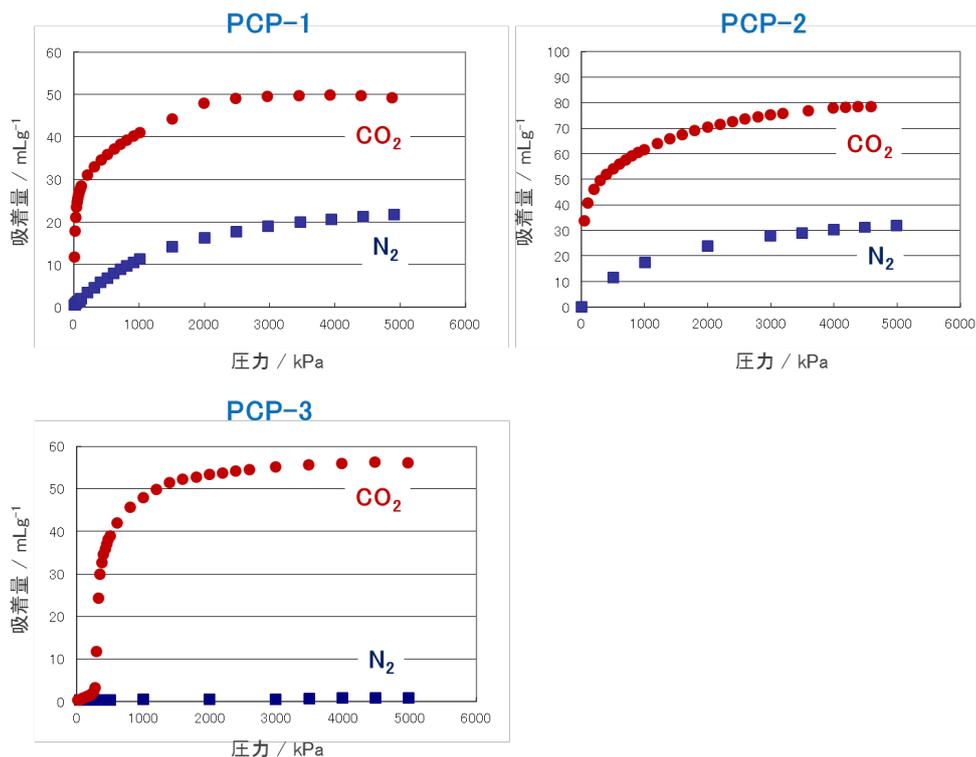
図Ⅲ2.1.1-2 (a) 見出された CO_2 分離向け PCP の合成スキーム。

(b) PCP-3 の CO_2 ガス吸着前後における結晶構造。

(3)-2 柔軟な構造を持つ PCP の CO_2 特性

(3)-1 で述べた構造の可逆的柔軟性は用いる配位子の種類に大きく依存する。図Ⅲ2.1.1-2(a)で示した3つの PCP について、その構造の柔軟性および CO_2 吸着、分離特性を調べるため、273 K における CO_2 および N_2 ガスの吸着特性を評価した(図Ⅲ2.1.1-3)。その結果、構造柔軟性に乏しい PCP-1 および PCP-2 においては、吸着量の差はあるものの低圧より吸着を開始しており、また、 CO_2 と N_2 において共吸着が観測され、高い CO_2 分離能は観測されなかった。

一方、高い構造柔軟性を有する PCP-3 において、 N_2 は 5000 kPa まで全く吸着されず、一方 CO_2 は 300 kPa において急激に吸着が開始される「ゲートオープン効果」と呼ばれる特異的な吸着挙動を示し、2000 kPa においてはほぼ飽和吸着量に達することがわかった。このゲートオープン効果は、 CO_2 の吸着に伴って図Ⅲ2.1.1-2(b)に示す構造変化が起こり、フィットする形で内部に CO_2 分子を選択的に取り込むことにより得られることが分かっている。この PCP-3 を見出したことで、H23 年度中間目標およびそれを踏まえた H25 年度最終目標における選択分離後の濃度、吸着エネルギー、分離度の目標達成の足掛かりを得た。



図Ⅲ2.1.1-3 PCP-1、PCP-2、PCP-3 の CO₂(●)および N₂(■)の 298 K における吸着等温線

(3)-3 CO₂を含む混合ガスからの CO₂分離特性の評価

本プロジェクトで開発した流通系および平衡系における CO₂ 分離特性評価装置を用い、CO₂ を含む混合ガス中からの CO₂ 分離特性についての評価を行った。図Ⅲ2.1.1-2(a)で示した PCP-2 を用い、BEL-VC(平衡系)装置を用いた評価結果を図Ⅲ2.1.1-4(a)に示す。以前の単ガスで測定した各種ガス(CO₂、N₂、O₂)を共に示しているが、単ガス評価で得られたそれぞれのガスの吸着量と比べ、それぞれの混合ガス(CO₂:O₂:N₂ = 1:1:1)を用いた場合、CO₂ 吸着量はほぼ変化ないが、N₂および O₂の吸着量が大幅に低下していることが分かる。すなわち単ガスで予想される分離特性より実際の混合ガスを用いた時の CO₂ 分離特性が高いことが示された。また図Ⅲ2.1.1-4(b)は混合ガスを BEL-Dyna 装置を用いて流通系にて評価した結果を示している。N₂、O₂ ガスは流通開始後速やかに破過をむかえることから PCP-2 の粉末中に吸着することはないことが示される。一方 CO₂ は 1.5 時間後に破過を迎え飽和に達することから、十分な CO₂ 分離を示すことが分かる。これら結果より、PCP-2 においては混合ガスを用いた平衡系・流通系ともに高い CO₂ 分離能が示唆される結果となった。またこれらの成果より単ガスを用いた平衡系の評価からは分からない分離特性やガス拡散速度などのパラメータも抽出でき、PCP 開発に大きく貢献できることが示された。

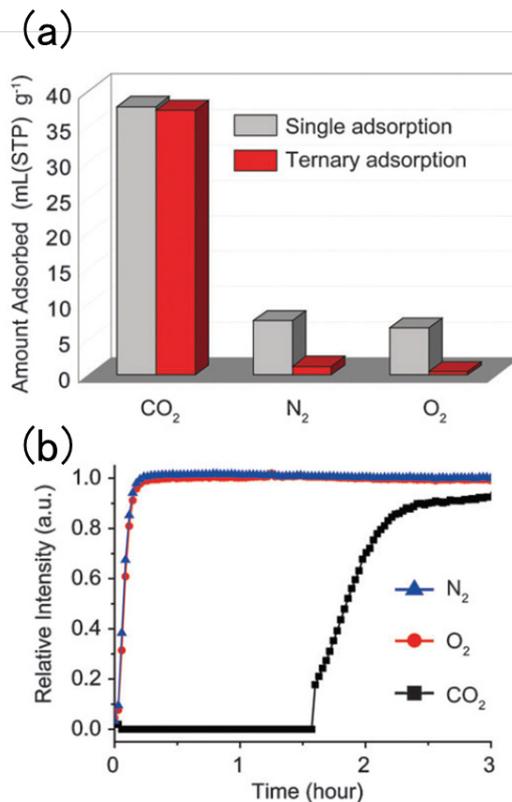


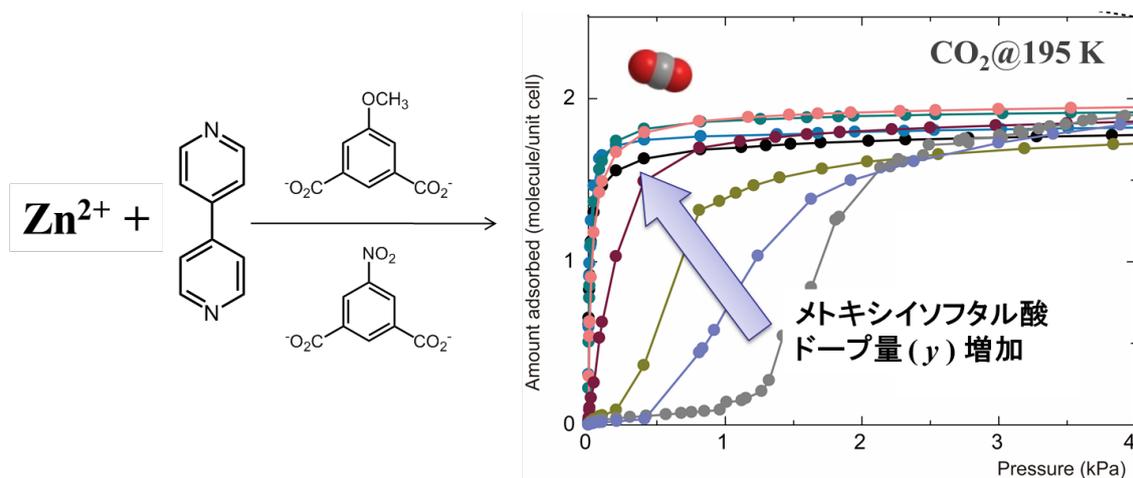
図 III 2.1.1-4 PCP-2: [Zn(26-ndc)(bpy)] (26-ndc = 2,6-ナフタレンジカルボン酸、bpy = 4,4'-ビピリジル)の (a) 平衡系における単成分ガス吸着量および混合ガス中におけるガス吸着量 (CO₂:O₂:N₂ = 1:1:1、全圧 1 MPa) (b) 混合ガス流通系における破過曲線 (CO₂:O₂:N₂ = 1:21:78、全圧 0.5 MPa.)。いずれも測定温度は 298 K。

(3)-4 ゲートオープン型 CO₂ 吸着挙動の精密制御:PCP 固溶体

PSA を念頭においた CO₂ 分離材料の開発においては、様々な混合ガスからの CO₂ 分離特性が必要とされるのと同時に、混合ガス中の様々な CO₂ 分圧において選択的に吸着をする特性も求められる。そこで構造柔軟な PCP を基にし、その構造柔軟性を任意に制御できる手法を検討した。その結果、結晶構造は同形のものであるが、配位子の置換基が異なる 2 つの PCP を一つの結晶中に混ぜあわせる PCP 固溶体の合成が有効であることが分かった。具体例を図 III 2.1.1-5 に示している。Zn²⁺ イオンと 4,4'-ビピリジル配位子に加え、これまでの PCP 合成では一種類のイソフタル酸誘導体配位子を用いていたが、複数の配位子を一度に反応させることによってこれら異なる配位子が結晶中に均一に分散した配位子固溶体が形成することがわかった。ここでは 5-メキシイソフタル酸および 5-ニトロイソフタル酸を用いている。配位子が結晶中に均一に分布し、混ざり合っていることは単結晶 X 線回折、粉末 X 線回折、元素マッピングなどから確認している。

以前の研究において 5-メキシイソフタル酸からなる PCP は構造の柔軟性がほぼなく、また 5-ニトロイソフタル酸からなる PCP(PCP-3) は高い構造柔軟性を有する。これら相反する特性を持つ配位子を結晶中で高分散させることにより、CO₂ 吸着特性の制御を狙った。CO₂

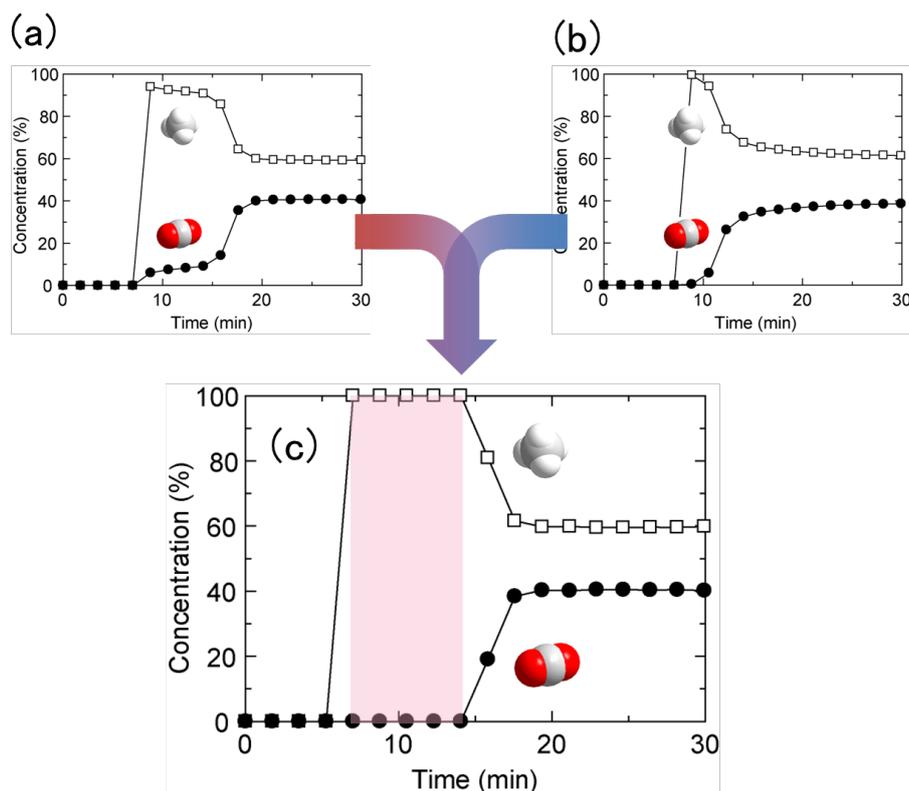
吸着特性の結果を図Ⅲ2.1.1-5に示す。195 KにおけるCO₂吸着等温線を示すが、構造の柔軟性がない5-メトキシイソフタル酸からなるPCPは低圧から鋭く吸着が立ち上がるマイクロ孔材由来の吸着等温線を示す一方、高い構造柔軟性を有するPCP-3は約1.5 kPaまで吸着が開始されずその後速やかに吸着が進行する。そしてこれらの結晶を固溶化することによって、それら2つのちょうど中間を取る吸着等温線が得られることがわかった。すなわち配位子を固溶させることにより、PCP全体の結晶構造のガス吸着前後における構造柔軟性を連続的に変え、その結果任意のCO₂分圧から選択的に捕捉できることがわかった。



図Ⅲ2.1.1-5 異なるイソフタル酸誘導体配位子を同時に混ぜることによって得られるPCP固溶体の合成スキームおよび195 KにおけるCO₂吸着等温線。配位子の固溶量を変えることによってゲートオープン吸着開始圧が連続的に変化する。

また固溶体の手法は流通系においても、ガス分離特性を向上させるために有用である。図Ⅲ2.1.1-6に示すのはCO₂とメタンの混合ガスを用い、流通系でそのCO₂分離特性を評価した結果である。図Ⅲ2.1.1-6(a)は5-ニトロイソフタル酸からなる柔軟なPCP-3、図Ⅲ2.1.1-6(b)は5-メトキシイソフタル酸からなる剛直なPCPの破過曲線である。前者ではゲートオープンに到達する圧力が評価系では足りないためCO₂分離能が向上せず、また後者ではCO₂とメタンが共吸着するため、いずれのPCPでも十分なCO₂分離能は発現しない。一方、5-メトキシイソフタル酸からなるPCPをPCP-3に10%固溶化させたPCP固溶体の評価結果を図Ⅲ2.1.1-6(c)に示しているが、適度な構造柔軟性が発現するため、高いCO₂分離特性が確認された。これら結果より、固溶の割合を変えていくことで、様々な環境における混合ガス中のCO₂を捕捉するのに最適な柔軟性PCPを設計できることが示された。

特筆すべき点として、このような構造柔軟性を利用したCO₂分離はCO₂分子との強い相互作用を必要としない。既存のCO₂分離材は固体材料、液体材料問わず、CO₂と特異的に強い相互作用点を有する分子設計が材料設計の基本であった。このアプローチでは高いCO₂分離特性は期待される一方、分離・回収したCO₂を回収し、分離材を再生するのに必要なエネルギーが非常に大きくなるという課題を有している。この点において構造柔軟なPCPは、高いCO₂分離特性によって回収にかかるエネルギーが非常に小さくすむことから、CO₂分離のトータルプロセスにおいて大きな利点を有することがわかった。

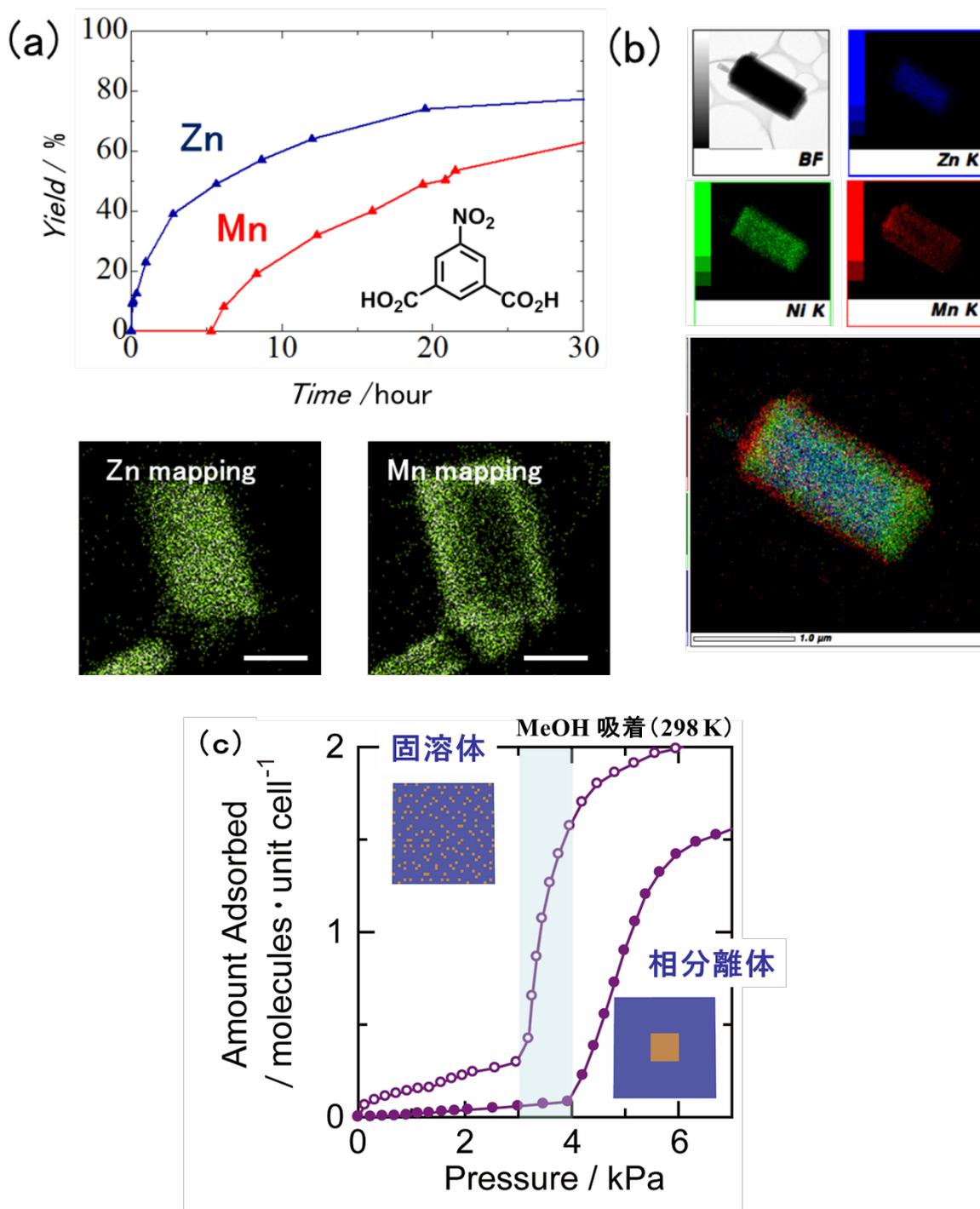


図Ⅲ2.1.1-6 (a) 5-ニトロイソフタル酸(5-NO₂-ip)からなる PCP:[Zn(5-NO₂-ip)(bpy)] (b) 5-メトキシイソフタル酸(5-MeO-ip)からなる PCP:[Zn(5-MeO-ip)(bpy)] および (c) それらを 90:10 で固溶化した PCP 固溶体の CO₂/メタン破過曲線。測定条件はいずれも 273 K、CO₂:メタン= 40:60 (vol)、空間速度は 6 min⁻¹。

また一方で、PCP を構成する成分のうち、配位子ではなく金属イオンを変えると、固溶体のみならず、異なる結晶同士が界面をもって積層するコア・シェル型 PCP 複合体が得られる。例えば PCP-3 が有する Zn²⁺イオンの代わりに Mn²⁺イオンを用いると同形の結晶構造が得られるが、図Ⅲ2.1.1-7(a)に示すように反応過程において結晶生成の速度が大きく異なる。この特性を利用すると、この例では Zn²⁺イオンに基づく結晶がある程度形成され、その表面に Mn²⁺の同形構造が成長し、その結果 Zn²⁺と Mn²⁺がヘテロ界面を持って存在する PCP が合成できる。また同様の手法により、三種類の金属イオンの異なる結晶生成速度を利用することにより、Zn²⁺、Mn²⁺、Ni²⁺などの相分離結晶を合成することができる(図Ⅲ2.1.1-7(b)の TEM 写真)。そしてこれらの場合、図Ⅲ2.1.1-7(c)に示すようにもともとの単成分の金属イオンがはいった PCP の足しあわせとは異なるガス吸着挙動が得られることが分かっており、金属界面を介して構造柔軟性の影響が確認されることがわかった。

これらの成果は、今まで行われてきた PCP 構造の金属イオンと配位子からできる組み合わせにのみ依存してきたガス吸着挙動を異なる視点、すなわち複数の異なる金属イオンや配位子が共存した固溶化による界面形成という手段によって制御できることを意味しており、CO₂ 分離の特性向上において重要な知見を得ることができた。これら一連の柔軟性 PCP と固溶化手法により、H23 年度の間目標である以下を達成した。

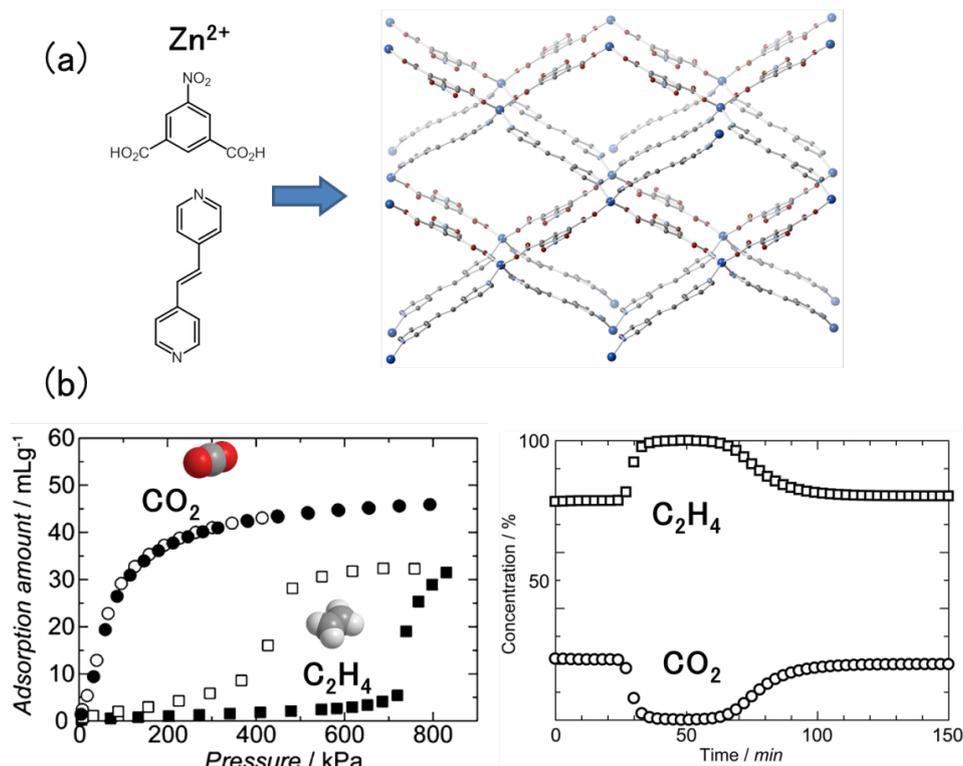
- ・CO₂の選択分離後の濃度 95%以上
- ・CO₂の吸着エネルギー 40 kJ/mol 以下
- ・CO₂の分離度 150 以上



図Ⅲ.2.1.1-7 (a) Zn²⁺イオンおよび Mn²⁺イオンを用いた時の PCP 結晶の形成速度、およびそれらを同時に反応させた後に得られる結晶の TEM による金属イオンマッピング結果。(b) 加えて Ni²⁺イオンを同時に反応させたときに得られる 3 つの金属イオンがコア・シェル構造を取る TEM 写真。(c) Zn²⁺イオンおよび Mn²⁺が異なるドメイン構造に入った結晶を用いたメタノール吸着等温線(298 K)。

(3)-5 CO₂/エチレン分離向け PCP の開発

これまではモデルガスとしての CO₂/N₂ および、本プロジェクトの分離対象の一つである CO₂/メタンからの CO₂ 分離について検討してきた。一方、本プロジェクトの参画企業の要求のひとつとして、より CO₂ と分子特性が似通ったガス、例えばエチレンとの混合ガスからの CO₂ 分離がある。CO₂ とエチレンはサイズ、融点ともに大きく異なるため、現在は熱炭酸カリ法などのエネルギー消費が大きな手法で実施されてきた。構造柔軟な PCP が CO₂/エチレンの分離に適しているかの検討を行うため、様々な柔軟性 PCP を検討したところ、図Ⅲ2.1.1-8(a) に示す PCP を見出した。Zn²⁺ イオン、5-ニトロイソフタル酸および 4,4'-ジピリジルエチレンからなるこの構造は、Zn²⁺ イオン周りが 4 配位構造を持つ三次元ネットワークである。そしてそのネットワーク同士が三重に相互貫入 (Interpenetration) することにより、細孔がほとんど存在しない高密度構造を持つ (図Ⅲ2.1.1-8(a))。この PCP において、298 K における CO₂ およびエチレンガスの吸着等温線を測定したところ、図Ⅲ2.1.1-8(b) に示すように CO₂ は低圧より吸着が観測されるのに対し、エチレンは 700 kPa 付近までほぼ吸着されず、それ以上の圧力で急激に立ち上がるゲートオープン挙動を示した。この CO₂ とエチレンの大きな吸着量の違いは混合ガスを用いても確認されており、高い分離特性を確認した。構造の柔軟性は三次元ネットワークの相互貫入が CO₂ 吸着によってわずかにずれることによって発生していることが粉末 X 線回折の測定より明らかになっている。またガス流通系における評価も図Ⅲ2.1.1-8(b の右) に示しているが、CO₂ のみを吸着する高い分離特性が室温において示された。



図Ⅲ2.1.1-8 Zn²⁺ イオンからなる三重相互貫入型 PCP の結晶構造および (b 左) 平衡系における CO₂ およびエチレンの吸着等温線 (298 K)、(b 右) 流通系における CO₂ とエチレンの混合ガスにおける破過曲線。破過曲線の測定条件は CO₂:エチレン=20:80 (vol)、298 K、全圧 0.74 MPa、空間速度 1.2 min⁻¹。

(4) 目標の達成度と成果の意義

CO₂ 分離における最終目標値の達成度を表Ⅲ.2.1.1-2 に示す。1 番目の項目である「CO₂ の選択分離後の濃度」および 4 番目の項目である「指定圧力範囲における CO₂ 動的有効吸着量」においては、構造柔軟な PCP を幅広く検討した中から見出した[Cd(bpndc)(bpy)] (bpndc = benzophenone-4,4'-dicarboxylate, bpy = 4,4'-ビピリジル)によって達成した。また 2 番目の「CO₂ 分離度」、3 番目の「吸着エネルギー」、および 5 番目の「繰り返し吸着試験後の CO₂ 吸着量保持率」の 3 つの目標においては、本プロジェクトの参画企業である(株)クラレとともに開発した構造柔軟な PCP のひとつである「COORDIFLEX K-19」と呼ばれる材料を用いることによって達成した。

表Ⅲ.2.1.1-2 最終目標の達成度

最終目標	研究開発成果	達成度*
【CO₂ の高分離度と脱離の低エネルギー化の両立】		
① CO ₂ の選択分離後の濃度：99.9%以上	CO ₂ : 78 mL/g, N ₂ : 0.8 mL/g (298 K, 5 MPa) (99.9%)	◎
② CO ₂ の分離度：300 以上	分離度：655	◎
③ CO ₂ の吸着エネルギー：30 kJ/mol 以下	25.0 kJ/mol	◎
④ 0.10~0.32 MPa 範囲における CO ₂ 動的有効吸着量 20 mL/mL (PCP)	30 mL/mL-PCP	◎

◎大幅達成、○達成、△達成見込み、×未達

また、最終目標としての設定はないが、本プロジェクト参画企業と協同で以下を達成した。

表Ⅲ.2.1.1-3 その他の成果

項目	研究開発成果	達成度*
【材料の耐久性】		
56 万回の繰り返し吸着試験後の CO ₂ 吸着量保持率：80%以上	加速試験により達成	◎

(5) 知財と成果の普及

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		
	国内	外国	PCT ※出 願	査読 付き	その 他	学 会 発 表・講演	新聞・雑誌 等 へ の 掲 載	その他
H22FY				3 件		1 件	1 件	
H23FY				6 件		1 件	2 件	
H24FY				5 件		2 件	2 件	
H25FY				4 件		2 件	2 件	
H26HY				3 件		3 件	1 件	

(※Patent Cooperation Treaty :特許協力条約)

(6) 結論

以上、京都大学がプロジェクトを通して特に基礎的な見地から貢献した成果について以下にまとめる。

- ・CO₂ の吸脱着により構造が可逆的に変化する、既存の吸着材では見られない現象を有する PCP を発見した。この基盤化合物により CO₂/メタン、CO₂/エチレンなど様々な CO₂ 分離機能を実現し、また CO₂ 回収を低エネルギーで実現する利点を兼ね備えることを見出した。
- ・異なる PCP を固溶化し、構造柔軟性を制御する技術を開発した。これにより様々な CO₂ 分圧に対応した分離材料を設計できるようになった。
- ・PCP の耐水性に与える因子の抽出と高耐水性 PCP の合成を行った。応用に際し最も重要な材料安定性の向上における指針を得た。またこれら知見を元に、Fe イオンや Cr イオンなど耐水性的にも有望な金属イオンからなる PCP 合成に展開し、合成法を開拓した。

(7) 今後の展望

本成果で見出したCO₂ガス分離向けPCPは既存材料と比較した時、特に吸着量、吸着速度、選択性などの基礎物性において大きく上回る。今後はこれら利点の更なる向上を分子設計の観点から進めるとともに、この性能を落とさず、耐水性や耐久性を上げるための方策を組み入れていく。また本研究において得られた各種ガスの吸着機構は他のガス分離や吸着に有効であり、より付加価値の高い分離・貯蔵機能のためのPCP設計にフィードバックさせる。

Ⅲ.2.1.2 メタン精製用 PCP の開発 <株式会社クラレ、京都大学>

(1) 背景

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やランドフィル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CO₂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%、CO₂ 約 40%であり、大量の CO₂ を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 CO₂ 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。

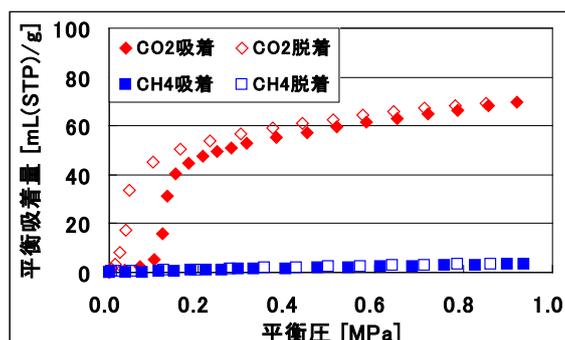
(2) 課題と目標

バイオガス中の CO₂ 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、深冷分離法がある。分子篩炭を搭載した圧カスイング吸着法(Pressure Swing Adsorption; 以下、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 CO₂ の選択性が低いことから、メタンと CO₂ 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 CO₂ 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 において、可燃性であり、且つ温暖化係数が CO₂ 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/CO₂ 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 CO₂ 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、これを解決するためには、高いメタン/CO₂ 分離性能を発現するのみならず、大気圧以上で多量の CO₂ の吸着と脱離の両方が可能な分離吸着材の開発が課題となる。

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・脱離の際に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-NO₂-ip) と 4,4'-ビピリジル (bpy) とからなる構造柔軟 PCP [Zn(NO₂-ip)(bpy)]_n の CO₂ とメタンの吸脱着等温線を示す (図Ⅲ.2.1.2-1 / 測定温度: 273K)。



図Ⅲ.2.1.2-1 [Zn(NO₂-ip)(bpy)]_n の CO₂ とメタンの吸脱着等温線

図Ⅲ.2.1.2-1 より、構造柔軟 PCP [Zn(NO₂-ip)(bpy)]_n は CO₂ 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応用し、PSA 実用時に耐え得る耐久性を有するメタン PSA 用分離吸着材を実現することができれば、前記課題の解決が期待される。以上の理由から、構造柔軟 PCP に特化してメタン精製用の新規材料開発を行うことにした。本研究開発では、平成 23 年度の間目標の達成を踏まえ、最終目標 (平成 25 年度) を以下のように設定した。

1) 高分離度と脱離の低エネルギー化の両立

- ・分離度 300 以上
- ・CO₂ の吸着エネルギー 30 kJ/mol 以下
- ・0.10~0.32MPa の圧力範囲における CO₂ の動的有効吸着量 20 mL/mL-PCP

2) 耐久性

- ・56 万回の繰返し吸着試験後の CO₂ 吸着量保持率 80 %以上

(3) 目標の達成状況

最終目標に対する達成度を表Ⅲ.2.1.2-1 に示す。

表Ⅲ.2.1.2-1 最終目標の達成度

課題	最終目標	研究開発成果	達成度※
①高分離度の達成	分離度 300 以上	分離度 655	◎
②脱離の低エネルギー化	CO ₂ 吸着エネルギー 30kJ/mol 以下	CO ₂ 吸着エネルギー 25.5kJ/mol 以下	◎
③常圧再生時のCO ₂ 動的吸着量の確保	CO ₂ 分圧 0.10~0.32MPa におけるCO ₂ 吸着量 20mL/mL-PCP 以上	CO ₂ 分圧 0.10~0.32MPa におけるCO ₂ 吸着量 26mL/mL-PCP	◎
④PSA 実用時に耐え得る耐久性の確保	56 万回の繰り返し吸着試験後の吸着量保持率 80%以上	60 万回繰り返し後の吸着量保持率 96%	◎

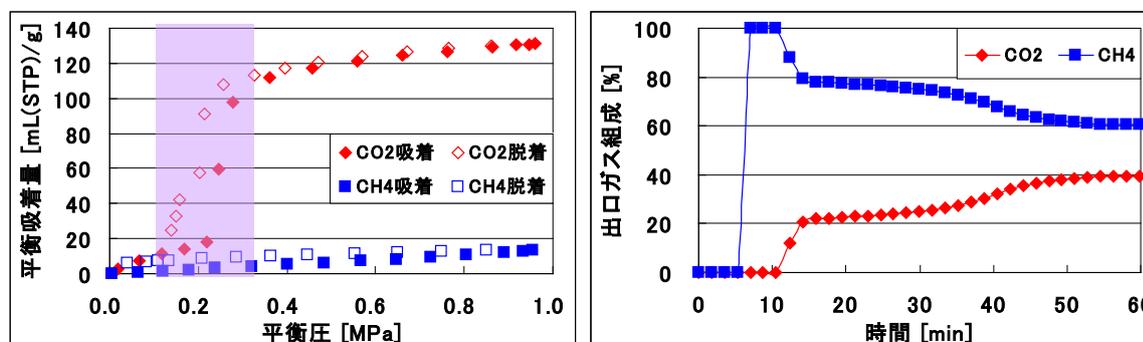
◎大幅達成、○達成、△達成見込み、×未達

(4) 成果詳細

(4)-1 メタン/CO₂ 分離材の開発

(4)-1-A PCP 基本骨格の選定

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 CO₂ 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、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、PSA を意識した条件でのメタン/CO₂ 分離能評価を行った。種々検討した結果、PCP の設計指針について理解が進み、基本骨格として CORRIFLEX K-11 を開発した。CORRIFLEX K-11 の吸着性能評価結果を図Ⅲ.2.1.2-2 に示す。左図より得られた CO₂ 有効吸着量 97mL/g を CO₂ 分圧 0.1~0.32MPa の CO₂ 吸着量に換算すると 26mL/mL-PCP となり、常圧再生時の CO₂ 動的吸着量に関する最終目標を達成した。



CO₂ 有効吸着量 97mL/g

メタン到達純度 >99.9%

図Ⅲ.2.1.2-2 COORDIFLEX K-11 の吸着性能評価結果

(4)-1-B 分離材としての PCP の低コスト化検討

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、COORDIFLEX K-11 と同等以上の吸着性能を有する安価な PCP の探索を進めることにした。COORDIFLEX K-11 は性能面で優れるが、原材料費が高く、実用化を図る上ではコストに難があった。これまでに得られた知見をベースに低コスト化検討を進めた結果、製造原価が COORDIFLEX K-11 の 1/5 以下に抑えられ、かつ COORDIFLEX K-11 よりも性能面に優れる COORDIFLEX K-16 を見出した(図 III.2.1.2-3)。

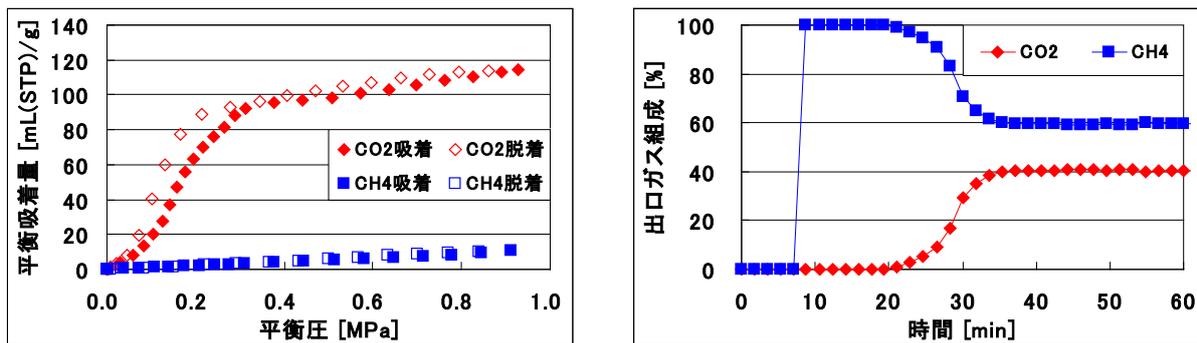


図 III.2.1.2-3 COORDIFLEX K-16 の吸着性能評価結果

(4)-1-C 分離材の耐久性向上検討

PCP のコストに目処を得たので、次に、COORDIFLEX K-16 の耐久性の現状把握を行うことにした。メタン PSA に供給される原料ガス中には水蒸気が数百 ppm 含まれており、配位子と水の交換反応などによる PCP の分解が懸念される。そこで、水蒸気を含む CO₂ を用いた繰返し吸着試験装置を構築し、COORDIFLEX K-16 について評価した結果、3 年間の吸脱着回数に相当する 24 万回終了時点で、CO₂ の動的吸着量保持率が 33%まで低下することを確認した(図 III.2.1.2-4)。COORDIFLEX K-16 は耐水性に課題があることが分かったので、繰返し吸着評価はここまでとし、耐久性向上に向けた材料開発を行うこととした。

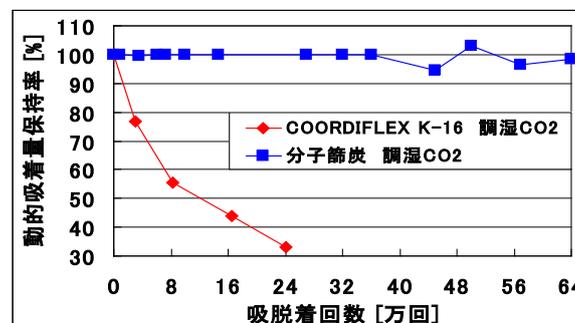
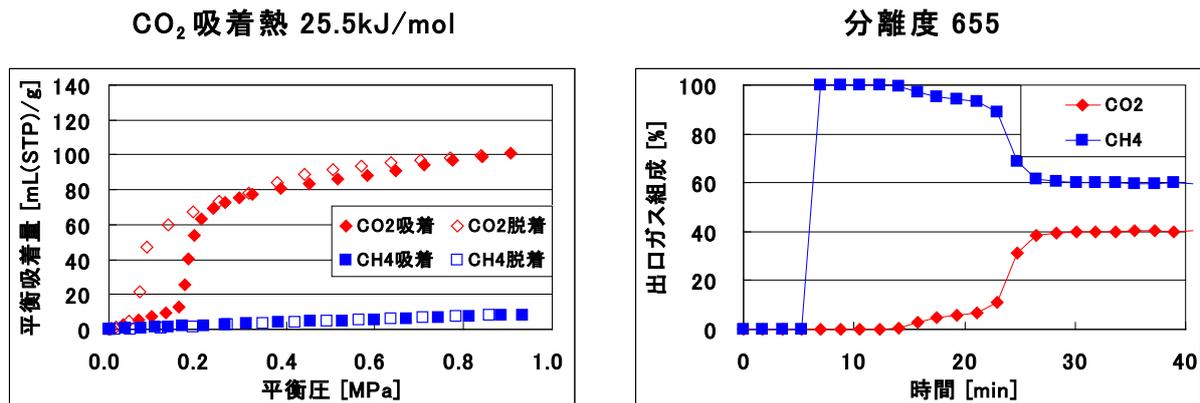
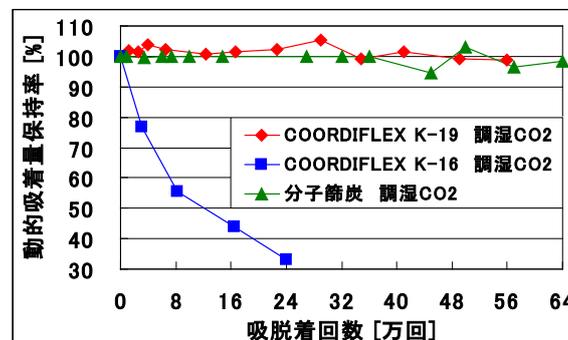


図 III.2.1.2-4 COORDIFLEX K-16 の耐水性評価結果

COORDIFLEX K-16 の分解パスを理解するために、モデル化合物と水との反応について京都大学と共同で計算化学的手法を用いて検証した結果、新たな候補 PCP として COORDIFLEX K-19 を見出した(図Ⅲ.2.1.2-5)。得られたPCPの吸着性能を評価した結果、破過曲線よりメタンとCO₂の分離度は655に達し、CO₂吸着エネルギーは25.5kJ/molであった。これらより、分離度と脱離エネルギーに関する最終目標を達成した。また、COORDIFLEX K-19 は調湿CO₂を用いた60万回の繰返し吸脱着試験後も性能低下は見られなかった(図Ⅲ.2.1.2-6)。本結果より、耐久性に関する最終目標を達成した。



図Ⅲ.2.1.2-5 COORDIFLEX K-19 の吸着性能評価結果



図Ⅲ.2.1.2-6 COORDIFLEX K-19 の耐水性評価結果

(4)-2 量産技術開発

前述の各種評価に供した COORDIFLEX K-19 は、性能の確認を優先し確実に合成できる低収率の製法で合成したものであり、工業的規模での生産を考えると、生産性(空時収量)が著しく低いという課題があった。そこで、COORDIFLEX K-19 の工業的製法について検討を行い、基本処方を確立した。また、該処方に基づいて COORDIFLEX K-19 10kg を得た。

(4)-3 PSA 簡易経済性評価

分子篩炭に対するコストメリットを明確にすべく、簡易経済性評価を行った。このとき、

COORDIFLEX K-19 のコストは試作結果に基づいて算出した。その結果、COORDIFLEX K-19 を用いることで PSA 運転に係るユーティリティー費を分子篩炭に比して 27%削減できることを確認した。また、固定費を含めたメタン精製コストで比較すると、COORDIFLEX K-19 は分子篩炭に対して 17%のコストメリットを有することが分かった

一方、バイオガス中には H₂S が含まれている。そこで、COORDIFLEX K-19 の H₂S 耐性について評価した。その結果、COORDIFLEX K-19 は硫化水素と接触すると速やかに不可逆的に分解することを確認した。検討の結果、酸化鉄を用いた硫化水素の事前除去で解決できることを確認したが、脱硫工程を加味したメタン PSA の簡易経済性評価を行った結果、年間のメタン精製コストは分子篩炭を用いた場合に比して 5.6%しかメリットがないとの概算結果を得た。

(4)-4 造粒検討

汎用 PSA での COORDIFLEX K-19 の使用を考えた場合、圧損低減とバルブへの微粉噛み込み防止の観点から COORDIFLEX K-19 粉末を造粒する必要がある。COORDIFLEX K-19 はガスの吸脱着に伴って体積変化することが分かっているため、構造変化の阻害抑制が期待される低弾性率樹脂をバインダーとして選択し、バインダー樹脂に求められる特性把握に向けた検討を行った。その結果、ある樹脂をバインダーとして用いた際に吸着速度と強度のバランスがとれることを確認した。現在、繰り返し吸脱着試験を継続しているが、現時点のデータからは、56 万回以上の繰り返し吸脱着にも耐え得ることが予想される。

(4)-5 パテントクリアランス

COORDIFLEX K-19 を実用化する上で障害となる特許の有無について調査した。パテントクリアランスの結果、COORDIFLEX K-19 の属否を検討すべき他社特許(出願)が抽出された。現在、対応を協議している。

(5) 特許、論文、外部発表等

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		
	国内	外国	PCT※ 出願	査読付 き	その他	学 会 発 表・講演	新聞・雑誌 等への掲載	その他
H21	5 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件	2 件※※
H22	10 件	0 件	1 件	2 件	1 件	3 件	1 件	0 件
H23	21 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件
H24	12 件	0 件	5 件	3 件	1 件	1 件	0 件	0 件
H25	6 件	0 件	4 件	1 件	1 件	0 件	0 件	0 件
H26	6 件	0 件	0 件	1 件	0 件	0 件	0 件	0 件

(※Patent Cooperation Treaty :特許協力条約、※※商標登録)

(6) まとめと成果の意義

本研究開発では、従来技術(分子篩炭)の問題点を解決し、優れたメタン/CO₂分離性能を示す新規バイオガス精製用 PCP の開発と、その実用化に取り組んだ。従来技術の問題点とは、(A)製品ガス純度と回収率が両立できないこと、並びに、(B)PSA 用いてバイオガス精製時する際、CO₂を脱着させるために真空近くまで減圧が必要であり、かなりのエネルギー消費が必要であること、の2点である。

研究開発の結果、従来技術では両立不可能であった高い製品ガス純度と回収率の両立が期待できる COORDIFLEX K-19 を見出した。また、COORDIFLEX K-19 は常圧での再生が可能であることに加え、狭い圧カスイング幅での PSA の運転が可能であり、PSA 運転時の大幅な省エネルギー化が期待される。COORDIFLEX K-19 を実用化するにはその耐久性が問題となるが、実用条件に基づいたラボ試験にて、56 万回の繰返し吸着試験後の CO₂ 吸着量保持率 80 %以上を達成することを確認した。

以上の結果から、材料の性能には目途が得られたと判断し、COORDIFLEX K-19 の実用化に向け、工業的製法について検討を行った。その結果、基本処方を確立した。また、該処方に基づいて COORDIFLEX K-19 10kg を得た。さらに、PCP のペレット化検討を進めた結果、PSA 実用時に耐え得るペレットの作製技術に目処を得た。構造柔軟 PCP のペレット化は世界初であり、実用化に向けた大きな成果であると考えている。

以上の結果から、本研究開発を通じて PCP の実用化に必要な基盤技術の確立に目処を得たと考えている。

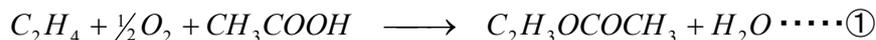
Ⅲ.2.1.3 CO₂/エチレン分離用PCP及び構造異性体混合物からの特定構造炭化水素分離精製用PCPの開発 <昭和電工株式会社、京都大学>

1. CO₂/エチレン分離用 PCP の開発

(1) 背景と目的

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) について、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し、工業的実用化技術を確認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 CO₂ 分離プロセスの実現を可能にする PCP をベースとする新規な吸着剤を開発し、実用化技術を確認することを目的としている。

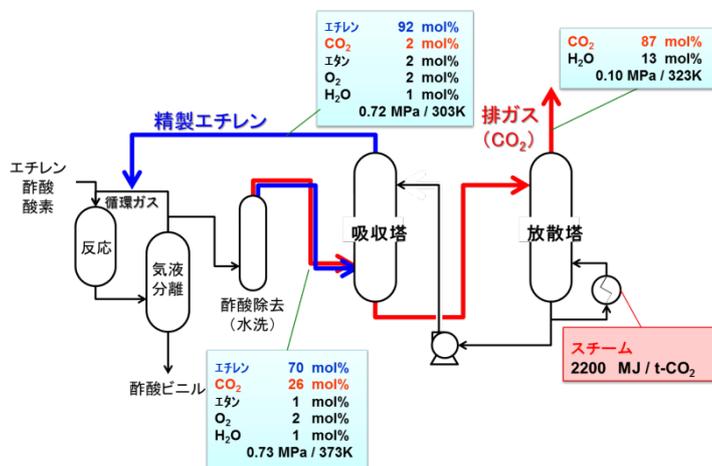
PCP を用いた CO₂ 分離プロセス実用化に向けて、酸化反応プロセスである酢酸ビニル製造プロセスをターゲットとして設定している。酢酸ビニルの生成反応は下式による。主な副反応はエチレンの燃焼反応である。



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 CO₂ 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、図Ⅲ.2.1.3-1 に示すように循環ガスの一部を CO₂ 吸収系に送り、CO₂ の除去と系外への拔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 CO₂ 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。



CO₂ 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拔出される。



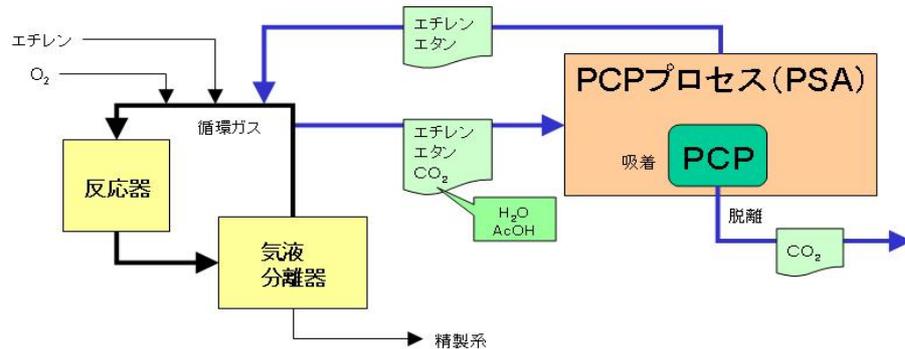
図Ⅲ.2.1.3-1 酸化反応プロセスの CO₂ 除去系の省エネルギー化

上記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。具体的には、高効率の吸着法(PSA法)プロセスを導入することで、熱炭酸カリ法のCO₂放散に使う熱エネルギー(スチーム)を削減し、省エネルギー化を進める。

図Ⅲ.2.1.3-1に示すように循環ガスは比較的CO₂濃度が高く、また、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。実用化においては、循環ガス中からエチレンをロスすること無く、CO₂を除去する必要がある、これを吸着法で実現するためにはCO₂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。CO₂の分離方法としては、CO₂を選択吸着する方法とエチレンを選択吸着する方法の2通りのアプローチが考えられる(図Ⅲ.2.1.3-2)。さらに、ガス成分のリサイクルによって原料のエチレン中の不純物であるエタンが蓄積すると反応効率が低下するため、エタンの過度の濃度上昇を避けるためエチレンを含むガス成分の一部をやむなく系外に排出しているのが現状である。このため、更にエタンとエチレンを分離することが可能になれば、ガス成分に含まれるエチレンを回収できる可能性も出てくる。

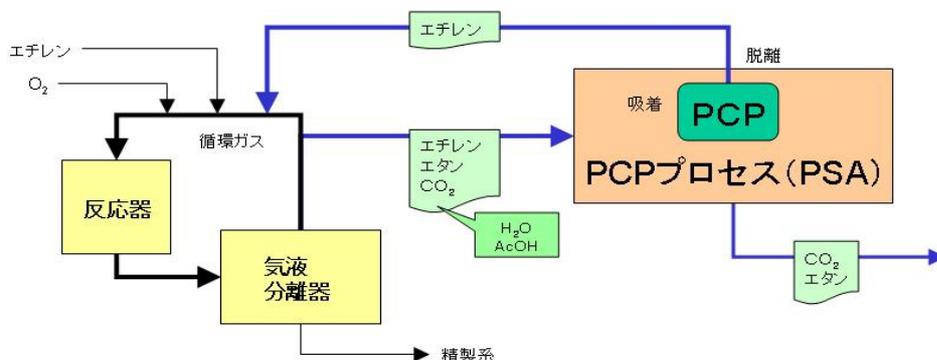
1. CO₂の選択的吸着分離

循環ガスからCO₂を吸着回収して、CO₂を分離する



2. エチレンの選択的吸着分離

循環ガスからエチレンを吸着回収して、CO₂を分離する



図Ⅲ.2.1.3-2 研究の目的

本研究開発では、PCP を用いた PSA プロセスによる CO₂/エチレン分離に向け、まず初めに PCP の設計に取り組み、抽出した候補 PCP に関して、スケールアップ合成検討、形態付与検討を重ねた。並行して、PSA を用いた CO₂/エチレン分離プロセスの設計を実施、求められる分離材性能を明確化し、候補 PCP 設計へとフィードバックを行った。

開発を進めるにあたり、実用化を見据えて以下の目標(H25 年度最終目標)を設定した。

- 1) 60N 以上の圧壊強度を有する成形体の製法の確立。
- 2) 繰返し吸脱着 5 万回で 90%の吸着性能の維持。
- 3) CO₂ 分離プロセスの設計を行い実用化の可能性を確認する。

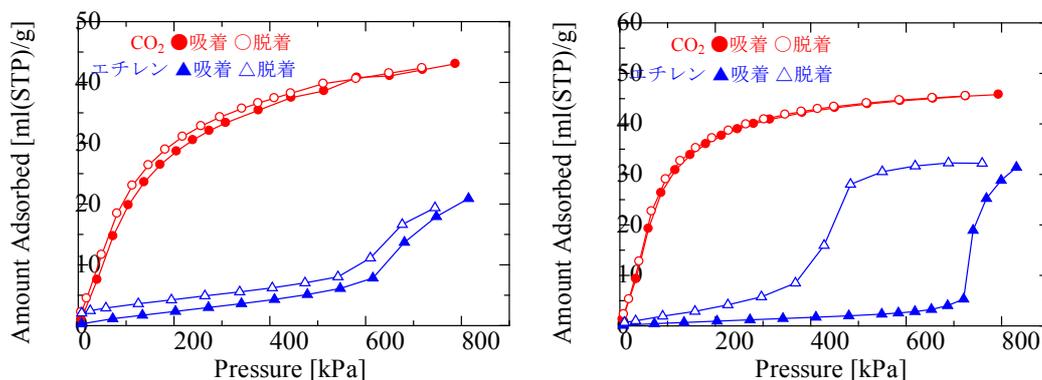
また、これに加え自主目標として以下を設定した。

- 1) 分離度: 混合ガスの分離度 16 以上
- 2) 耐久性: 3 年(≒15 万回)の繰返し吸脱着耐久性
- 3) 分離材コスト: 15,000¥/kg

(2) 基本骨格探索

本プロジェクト開始当初は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)に取り組んだ。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、CO₂/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、適時 PCP 選定案に反映させ、必要に応じ、新規 PCP の合成及び物性評価を実施した。

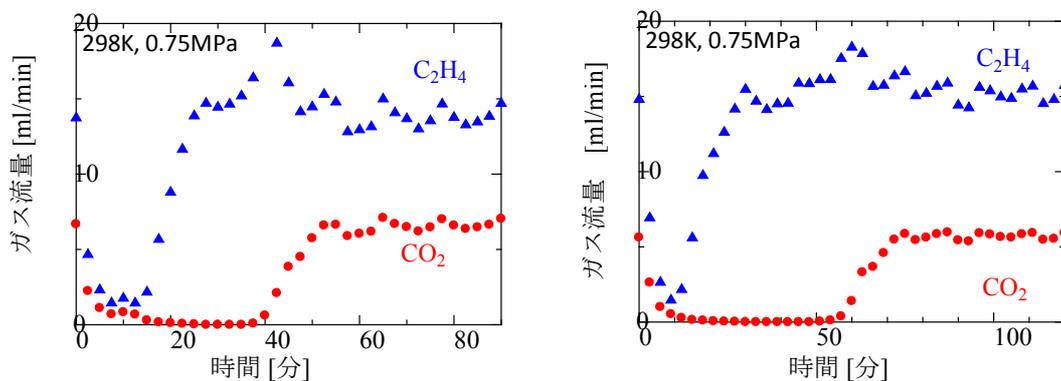
スクリーニングの結果、エチレンよりも CO₂ を選択的に吸着分離する方が有効であることがわかり、高い CO₂/エチレン分離能を有する候補 PCP COORDIFLEX® SD-28 及び COORDIFLEX® SD-65 の開発に成功した(図Ⅲ.2.1.3-3)。



図Ⅲ.2.1.3-3 (左)COORDIFLEX® SD-28 及び(右)SD-65 の吸着等温線(298K)

上記のスクリーニング検討で見出した高い CO₂/エチレン分離能が期待される PCP (SD-28 及び 65) に関し、混合ガスを用いた破過試験結果を図Ⅲ.2.1.3-4 に示す。SD-28 および SD-65 は、ともに分離条

件を最適化することで、目標の分離性能を示した。分離材のコスト等を含め、総合的に判断した結果、SD-28 を候補 PCP とし、以降のスケールアップ検討、形態付与検討に着手した。



図Ⅲ.2.1.3-4 候補 PCP(COORDIFLEX® SD-28(左)及び SD-65(右))の破過試験結果(298K)

(3) スケールアップ合成

上記の基本骨格探索により抽出された候補 PCP(SD-28)について、昭和電工分担研において、スケールアップ検討を行った。スクリーニングの段階では、数100mg～数gのスケールで合成を実験していたため、まず、100g/バッチスケール合成での検証から始め、更なるスケールアップの際に予測される課題を抽出した。その後、加速費を用いて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(図Ⅲ.2.1.3-5)、1kg/バッチスケールでの合成検討を行った。



PCP合成反応装置



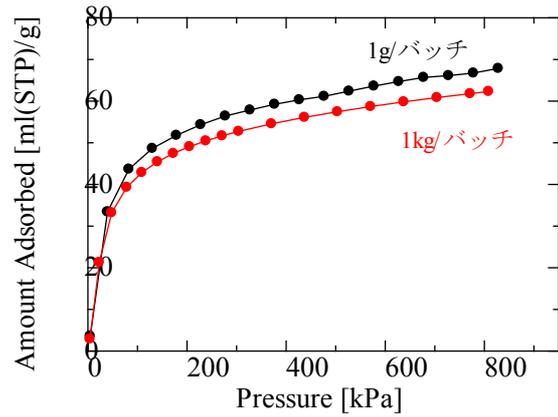
連続高速遠心機



スプレードライヤー

図Ⅲ.2.1.3-5 加速費で導入した機械・装置

候補 PCP(SD-28)の 1kg/バッチスケールで合成したサンプル写真と吸着測定結果を図Ⅲ.2.1.3-6 に示す。吸着測定の結果、吸着量は若干減少しているものの、吸着挙動をおおむね再現することができ、1kg/バッチスケールでの合成が可能であることを確認した。



図Ⅲ.2.1.3-6 1kg/バッチ合成したSD-28(左)およびその吸着挙動(右)

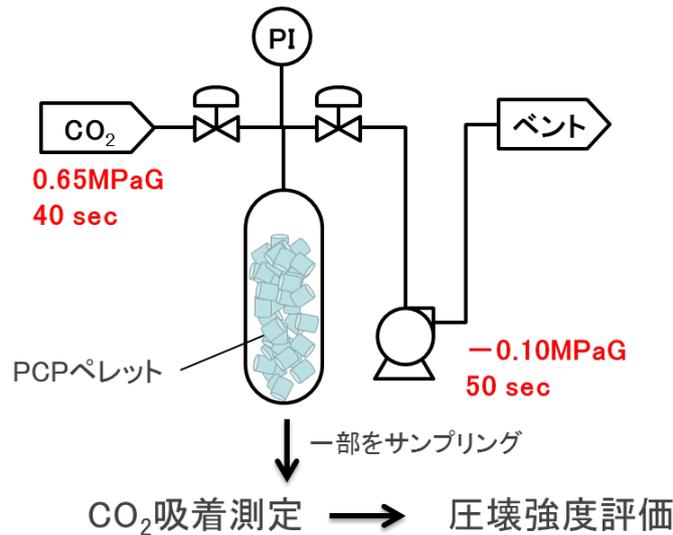
(4) 形態付与検討

上記スケールアップ検討により得られた候補PCPを用いて、形態付与検討を実施した。数種の異なる成形方法を比較検討した結果、最もPCPを高充填できる打錠成形法が最適と判断し、詳細な検討を進めた。打錠成形法において打錠方法、添加材の検討を行い、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した。打錠成形方法のフローを図Ⅲ.2.1.3-7に示す。



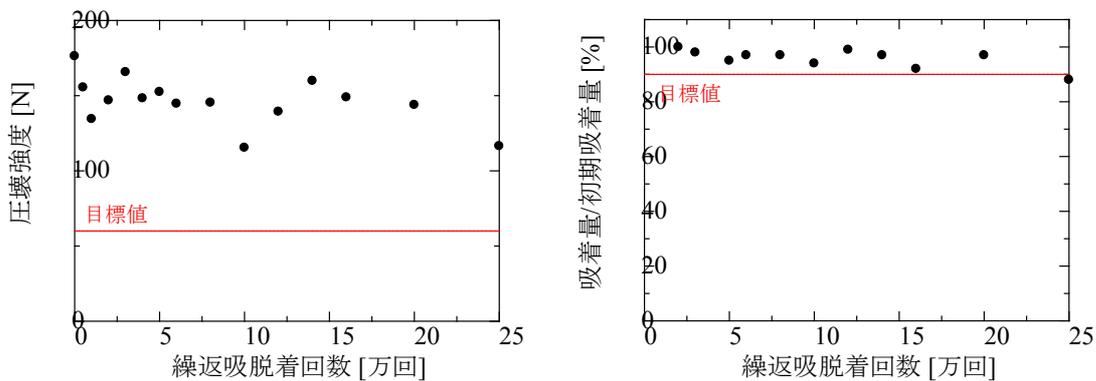
図Ⅲ.2.1.3-7 打錠成形のフローと得られたペレット

次いで得られたペレットに関して、専用装置を用い、繰返しのCO₂吸脱着実験を実施し、ペレット圧壊強度の耐久性評価を行った。定期的にPCPペレットの一部をサンプリングし、吸着量を評価した後、圧壊強度を測定した(図Ⅲ.2.1.3-8)。



図Ⅲ.2.1.3-8 ペレット耐久性の評価方法

連続 CO₂ 吸脱着によるペレットの耐久性評価結果を図Ⅲ.2.1.3-9 に示す。結果、成型法を工夫することで、25 万回の CO₂ の繰返し吸脱着後も、十分な圧壊強度及び吸着性能を保持できることを確認し、成形体の圧壊強度と吸着性能に関する最終目標を達成した。



図Ⅲ.2.1.3- 9 PCP ペレットの長期耐久性評価 (左)圧壊強度 (右)吸着性能

(5) 実用化可能性の評価

上記候補 PCP 開発と並行し、PSA を用いた CO₂/エチレン分離プロセスの設計を行った。分離材を用いた CO₂/エチレン分離プロセスは前例がないため、まず、既存材料の物性をベースにプロセスを設計した。その後、開発した PCP の性能をもとにコスト試算を実施した。

既存材料の物性をベースにプロセス設計を行い、CO₂ 分離コストを試算した結果、既存プロセスの約 2 倍の CO₂ 分離コストがかかることがわかった。その結果を元に自主目標を再設定し、分離条件の最適化、形態付与方法の改良による耐久性の向上により自主目標を達成し、既存プロセスと同程度のコストで CO₂ を分離可能であることを確認し、プロセス設計に関する最終目標を達成することができた。

(6) CO₂/エチレン分離用 PCP 開発の目標の達成状況

最終目標に対する達成状況を表Ⅲ.2.1.3-1に示す。形態付与において、最終目標を大きく上回る圧壊強度及び耐久性をもつペレットを成形する技術を確立した。また、FSの結果、現状プロセスと同レベルのCO₂分離回収コストが見込めることから、最終目標は達成したものとする。また、実用化を念頭において設定した自主目標もほぼ達成できた。

表Ⅲ.2.1.3-1 最終目標の達成度

	最終目標	成果	達成度
形態付与検討	圧壊強度 60N	110N	◎
	15 万回の繰返し吸脱着後、90%以上の性能保持	25 万回で 90%	◎
プロセス設計	実用化の可能性判断	現状プロセスと同程度の CO ₂ 分離コスト	○

◎: 超過達成、○: 達成、△: おおむね達成、× 未達

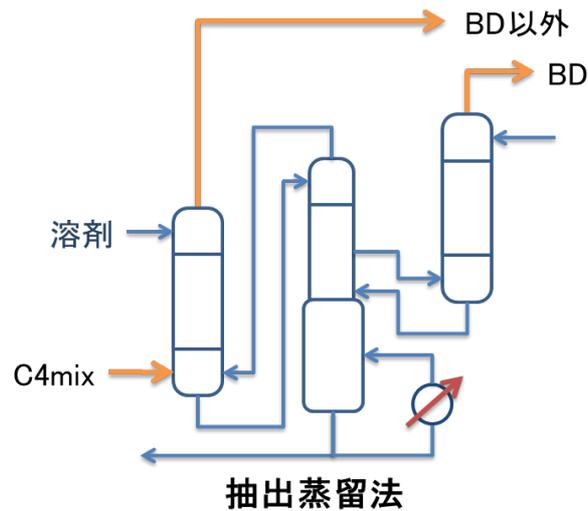
2. 構造異性体混合物からの特定構造炭化水素分離精製用 PCP の開発

(1) 背景と目的

PCP を用いた構造異性体混合物からの特定構造炭化水素分離に向けて、ナフサのクラッキングで得られる炭素数4の炭化水素(C4)の構造異性体の混合物から、合成ゴムの原料となる 1, 3-ブタジエンを選択的に分離することをターゲットとして設定した。

表Ⅲ.2.1.3-2 に示されるように、C4 混合物中には主に、飽和炭化水素であるブタン類が 10%、二重結合を一つ持つブテン類が 48%、二重結合を二つ持つブタジエン類が 40%からなる。特にブタジエンは合成ゴム、ABS 樹脂の重要な原料となり、他の C4 異性体よりも利用価値が高い。しかし、これら C4 混合物中の各成分は、沸点が近く、共沸形成する成分も存在するため、ブタジエンの単離の際には、DMF やアセトニトリルといった有機溶媒を用いた抽出蒸留法が用いられている(図Ⅲ.2.1.3-10)。この方法は、ブタジエンを吸収させた溶媒の蒸留を繰り返す方法であり、多量の熱エネルギーを消費するプロセスである。そこで、C4 留分中から 1, 3-ブタジエンを選択的に分離可能な PCP を開発することで、従来の抽出蒸留法以下のエネルギーでのブタジエン分離および精製の可能性が期待できる。

ブタジエン分離精製用 PCP の開発を進めるにあたり、自主目標として、1)ブタジエン分離用 PCP の基本骨格探索と、2)候補となる PCP に対する形態付与を掲げて開発を進めた。



図Ⅲ.2.1.3-10 抽出蒸留法

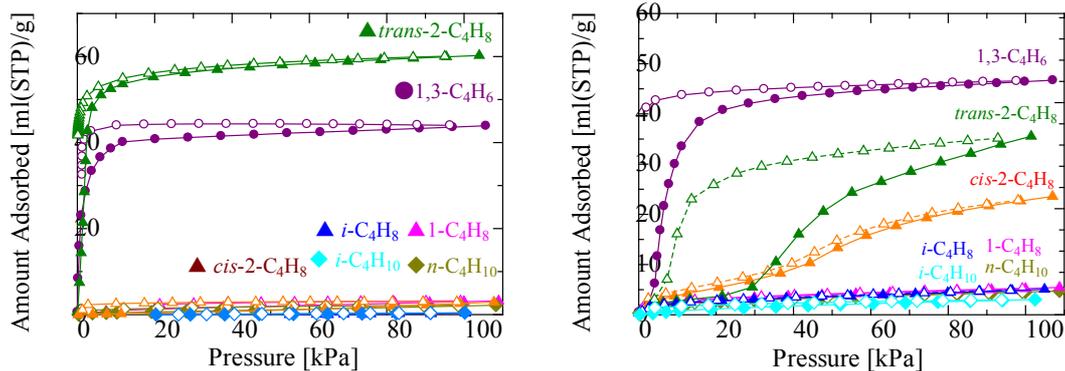
表Ⅲ.2.1.3-2 主な C4 留分組成

成分	wt%	沸点
C3	0.5	-
<i>n</i> -/ <i>i</i> -butane	10.0	-
1-butene	12.0	-6.5
<i>i</i> -butene	26.0	-6.6
1,3-butadiene	40.0	-4.7
<i>trans</i> -2-butene	6.0	0.3
<i>cis</i> -2-butene	4.0	3.7
1,2-butadiene	0.1	18.5
R-acetylene(s)	0.4	-
C5	0.3	-

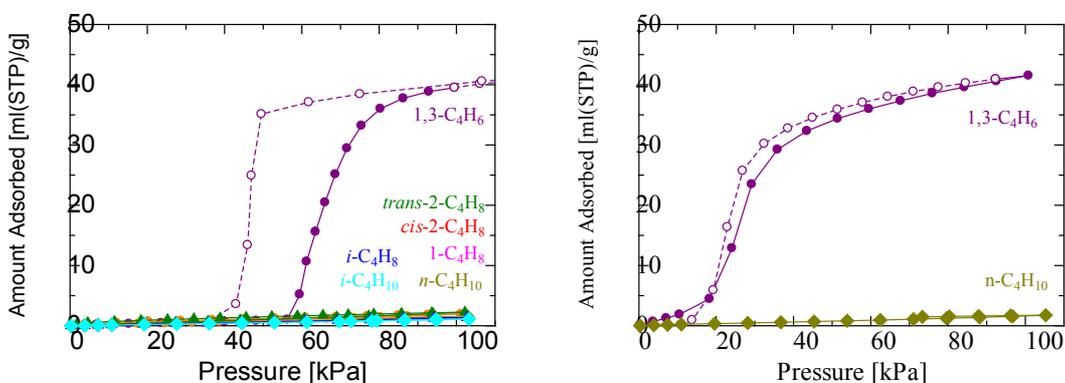
(2) 基本骨格探索

CO₂/エチレン分離で得た候補 PCP 抽出の知見をもとに、ブタジエン分離の PCP のスクリーニングを実施した。既存及び新たに開発した PCP の中から検討する PCP を選定し、少量合成および炭化水素ガス吸着特性評価により、炭化水素ガス分離性能を評価した。得られた結果は、新規 PCP の合成にフィードバックした。

CO₂/エチレン分離用 PCP を検討した際に得られた知見をもとに、種々の検討をした結果、本テーマに適すると思われる 4 種の候補 PCP (SB-1~4) を抽出した。候補 PCP の吸着挙動を図Ⅲ.2.1.3-11 (SB-1 および SB-2) および図Ⅲ.2.1.3-12 (SB-3 および SB-4) に示す。



図Ⅲ.2.1.3-11 候補 PCP の吸着等温線(298K) (左:SB-1、右:SB-2) (ラベル白抜き:脱着、色付:吸着)



図Ⅲ.2.1.3-12 候補 PCP の吸着等温線(298K) (左:SB-3、右 SB-4) (ラベル白抜き:脱着、色付:吸着)

(3) 形態付与検討

CO₂/エチレン分離で得た形態付与法の知見をもとに、ブタジエン分離に適した形態付与方法の検討を実施した。基本骨格探索により得られたブタジエンを選択的に吸着する可能性のある候補 PCP (SB-3) を用いて検討を実施した。CO₂/エチレン分離用 PCP 開発で得られた形態付与方法では、ブタジエンを吸着しないことがわかった。添加剤の検討を進めた結果、吸着性能を保持しつつ、目標以上の圧壊強度をもつ形態付与方法を開発するに至った。また、得られたペレットを用い、C4 混合ガス破過試験を検討した結果、C4 混合ガス中からのブタジエンを選択的に吸着できることを確認した。

(4) 構造異性体混合物からの特定構造炭化水素分離精製用 PCP の開発の目標の達成状況

CO₂/エチレン分離用 PCP 開発で得た知見を活かし、ブタジエン分離に適した候補 PCP 4 種の抽出、及びブタジエン分離に特化した形態付与方法を確立した。

達成状況を表Ⅲ.2.1.3-3に示す。検討の結果、候補PCPを複数抽出し、C4分離に特化した形態付与方法を確立し、自主目標を達成した。

表Ⅲ.2.1.3-3 自主目標の達成度

	目標	成果	達成度
1)基本骨格探索	候補 PCP の抽出	候補 PCP 抽出	○
2)形態付与検討	形態付与技術確立	C4 分離に特化した形態付与技術確立	○

3. 成果の意義

計画通りに研究開発を進め、以下の成果を挙げた。一連の成果の意義について以下にまとめる。

表Ⅲ.2.1.3-4 成果

CO ₂ /エチレン分離	エチレン/CO ₂ 分離用に適した PCP を開発し、最終目標を達成
	1kg スケールでの合成方法を確立
	実用強度を有する形態付与方法を確立、実用的なレベルの耐久性を確認
	エチレン/CO ₂ 分離用プロセス設計とフィージビリティスタディを実施。既存プロセスと同程度の分離コストを達成できることを確認
炭化水素分離精製	ブタジエン分離用に適した候補 PCP を抽出
	C4 分離に適した形態付与方法を確立

表Ⅲ.2.1.3-5 成果の意義

新たな技術領域開拓への期待	従来技術で困難だった分離を PCP 分子設計で可能にした
従来技術に対する優位性	従来法に対するエネルギーコストの優位性を検証
実用レベルの耐久性	構造柔軟 PCP のペレットの実用レベルでの耐久性を確認

4. 知的財産の取得状況

本研究開発で得られた新規PCP、形態付与方法、ガス分離用途等に関して出願を行った。構造異性体混合物からの特定構造炭化水素分離精製用PCPを中心にPCT出願を行った(表Ⅲ.2.1.3-6)

5. 成果の普及

本研究開発で得られた成果について、学会発表並びに論文発表を行った(表Ⅲ.2.1.3-6)。

表Ⅲ.2.1.3-6 特許出願および成果の普及

区分 年度	特許出願			論文		その他外部発表		
	国内	外国	PCT※ 出願	査読付 き	その他	学会発表 ・講演	新聞・雑誌等へ の掲載	その他
H21								
H22	4							
H23	10							
H24	5		2	2	1	1		
H25	3		2					
H26			3	2		2		

(※Patent Cooperation Treaty :特許協力条約、※※商標登録)

Ⅲ.2.1.4 PCPによる微量ガス分離材の開発 <東洋紡株式会社、京都大学>

(1) 事業の目的

本研究開発では、化学品等の製造プロセスから排出される副生ガスに含まれる微量成分である、アルデヒド類の除去材の開発を目的とする。化学品等の製造プロセスでは様々な有機溶剤を使用しており、そこから排出される副生ガスは、使用している有機溶剤を主成分としているが、微量成分としてアルデヒド類が含まれることが多い。微量成分としてアルデヒド類を含んだ状態では、溶剤回収をしても回収溶剤の純度が悪いため、再利用はできない。そのため、多くの副生ガスは回収されず、環境汚染物質としてそのまま大気に放出される、もしくは、焼却処理によりCO₂として排出されるため、問題となっている。

アルデヒド類の除去は、活性炭等の多孔質体、それらにアミン等の薬剤を添着させた薬剤添着多孔質体および貴金属担持触媒により可能であるが、それらの技術にはいくつかの問題がある。具体的には、多孔質体、薬剤添着多孔質体の中でも、活性炭、薬剤添着炭が比較的lowコストであるが、除去容量が十分でないという問題がある。また、貴金属担持触媒は貴金属を使用するため高コストであることと、十分な除去容量を発現させるためには、100℃以上の温度が必要であるという問題がある。これらのことから、比較的低温条件(常温～50℃)で、除去容量とコストのバランス(コストパフォーマンス)に優れた新規な微量ガス分離材を開発する意義は大きい。

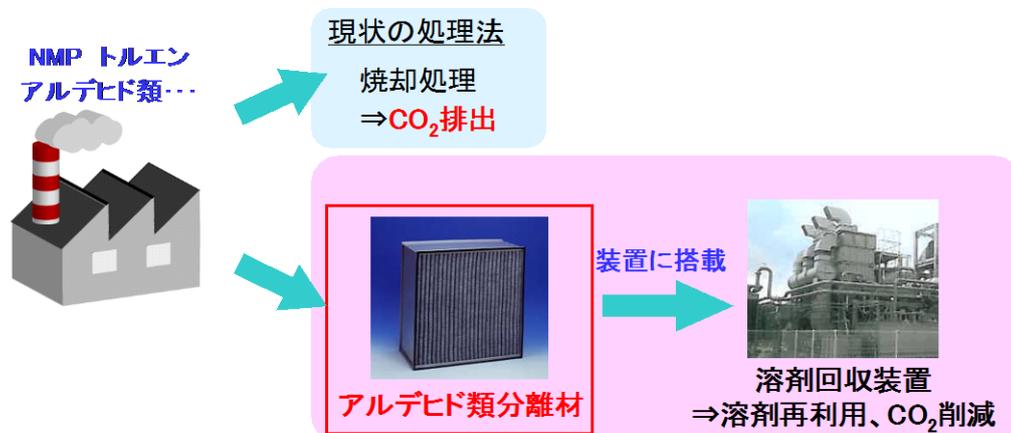
(2) 事業の概要

本研究開発項目では、事業開始となる平成21年度から3年間はバイオガスからのCO₂/メタン分離の前処理として、シロキサン系微量ガス成分(シロキサンD4)を分離対象とした多孔性金属錯体(PCP)を開発し、H23年度の間目標を達成した。しかしながら、コストパフォーマンスの観点で既存品に対する圧倒的な優位性を発揮するには至っておらず、また、そのような基本骨格の再探索にはさらに時間がかかると判断した。残されたプロジェクト期間で最大限の成果をあげるために、これまでの知見を活かしながら、より実用化の可能性の高い用途分野に開発をシフトすることとし、分離対象としてアルデヒド類に変更した。

先に述べたように化学品等の製造プロセスから排出される副生ガスは、有機溶剤が主成分であるが、微量成分としてアルデヒド類が含まれることが多く、それらは回収されず、焼却処理によりCO₂として排出される。東洋紡(株)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、微量成分としてアルデヒド類が含まれる副生ガスから有機溶剤を回収するために、溶剤回収システムの前段にアルデヒド類を分離除去するためのアルデヒド吸着除去装置・システムを設置し、微量成分としてアルデヒド類を含んだ副生ガスから問題ない純度の溶剤が回収できることを既に見出している(図Ⅲ.2.1.4-1)。

そこで、東洋紡(株)保有の微量ガス吸着分離技術と、設計により細孔径を制御でき、機能性官能基を容易に導入可能な多孔性金属錯体(PCP)を組み合わせ、微量ガス分離材としてPCPを用いたアルデヒド吸着除去装置・システムを開発し、実用化することで、大気中に放出されている環境汚染物質の低減を図る。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、ホルムアルデヒドの分子サイズや物性に合わせて PCP の分子設計を行い、化学品等の製造プロセスから排出される副生ガス中のアルデヒド類、特にホルムアルデヒドを分離する材料を開発する。



図Ⅲ.2.1.4-1 アルデヒド類を含む副生ガスの溶剤回収システム

(3) 事業の目標

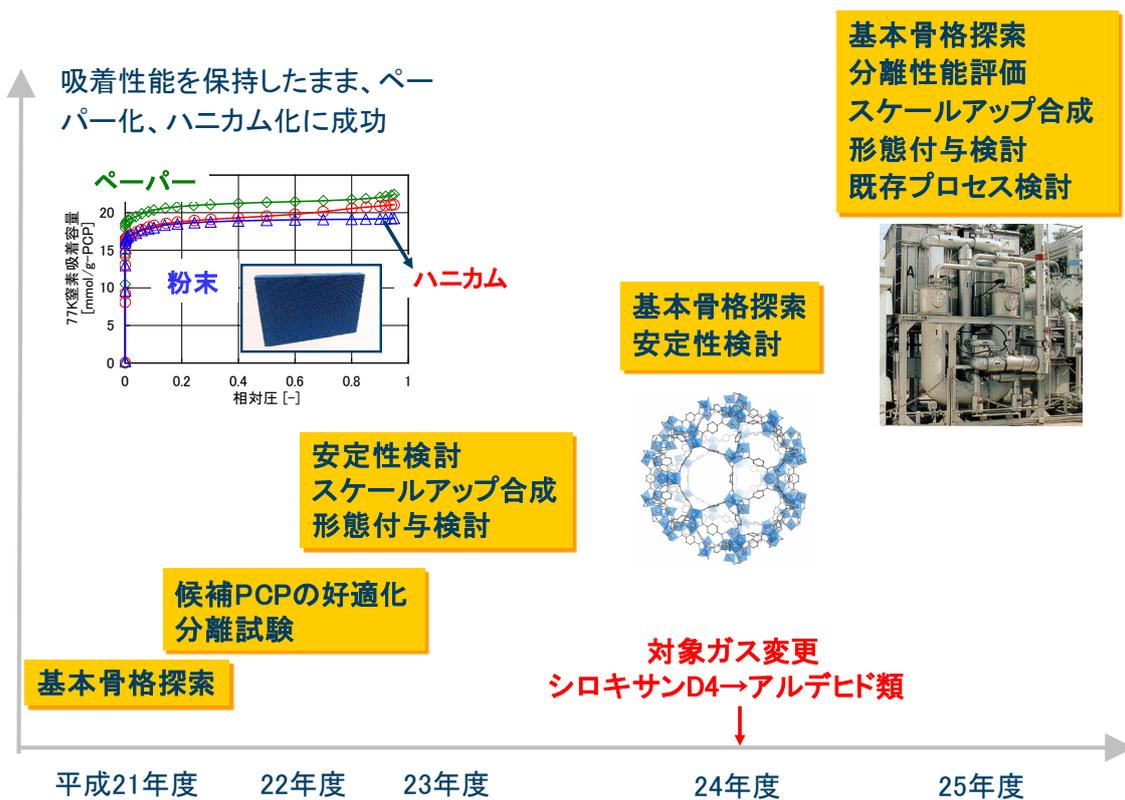
本研究開発は、中間評価後に開始しており、平成 25 年度の最終目標は以下の通りである。

最終目標：

- ①空間速度 $100,000\text{hr}^{-1}$ 、初期濃度 1ppm の条件において、アルデヒド類分離性能を 90% 以上保持した状態で分離できる量が 10mg/g 以上である PCP を開発する。
- ②耐久性試験(温度 80°C 、相対湿度 95%、24 時間)において、アルデヒド類分離性能を 90%以上保持できる PCP を見出す。

(4) 開発スケジュール

図Ⅲ.2.1.4-2 に開発スケジュールを示す。平成 21 年度から 24 年度前半までは、微量ガス成分としてシロキサン D4 吸着用 PCP の開発を進め、形態付与やスケールアップ合成技術を獲得した。これらの技術は対象ガスが異なっても活用できるため、平成 24 年度後半からは、アルデヒド類を吸着できる PCP 骨格の探索に注力し、順次、安定性や分離性能、スケールアップ合成、形態付与を検討する計画で進めた。

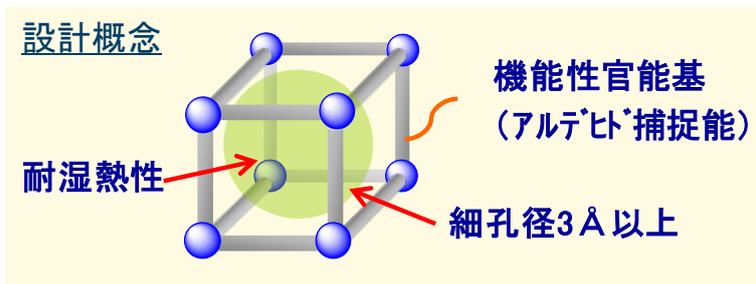


図Ⅲ.2.1.4-2 開発スケジュール

(5) 研究開発内容と成果

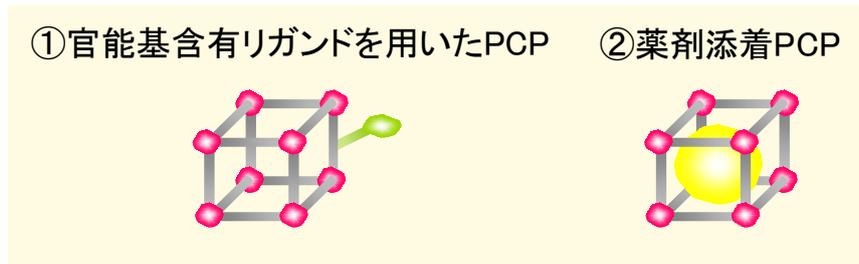
(5)-1 基本骨格探索

アルデヒドを選択的に吸着する吸着材の特性を基に、PCP の設計概念として、①機能性官能基を有する(アルデヒド捕捉能)、②細孔径約 3 Å 以上(ホルムアルデヒドの分子サイズ)、③耐湿熱性、の 3 点を挙げ、検討を開始した(図Ⅲ.2.1.4-3)。



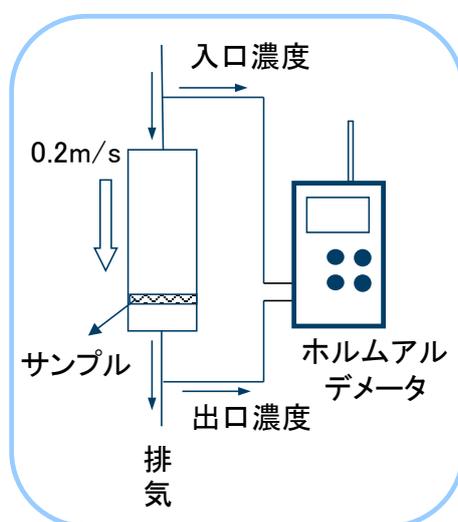
図Ⅲ.2.1.4-3 PCP の設計概念

アプローチは、大きく分けて、①官能基含有リガンドを用いた PCP、②PCP への薬剤添着、の 2 つを検討した(図Ⅲ.2.1.4-4)。



図Ⅲ.2.1.4-4 検討した PCP の概念図

性能評価として、実用化に則した流通系での吸着性能評価を行った。流通系での吸着性能評価に当たっては、まず評価条件を種々検討し、100mg 程度の PCP で評価できる系を構築した。評価系を図Ⅲ.2.1.4-5 に示す。



図Ⅲ.2.1.4-5 ホルムアルデヒド流通系吸着性能評価装置図

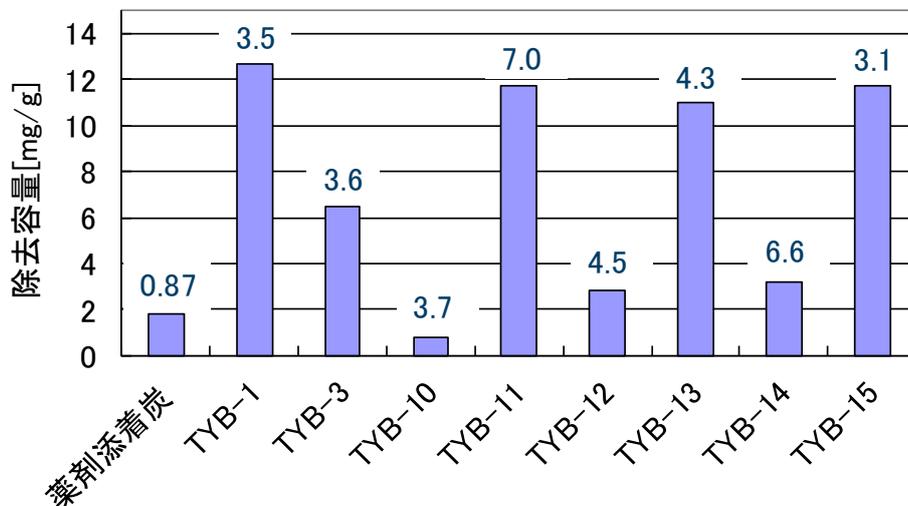
評価では、カラムに粉体サンプルを詰め、ホルムアルデヒドガスをフローしながらガス濃度を計測する。具体的には、嵩密度を一定にしたサンプルを用いて、サンプル通過前のホルムアルデヒド濃度に対し、通過後のガス濃度を測ることで除去率を算出することができる。

a)官能基含有リガンドを用いた PCP

PCP の基本骨格として、図Ⅲ.2.1.4-3 の設計概念を基に、機能性官能基の数が異なる PCP (15 種) の合成を検討した。具体的には、機能性官能基含有リガンドを用いた PCP を既存の PCP から選定し、合成を行った。また、安定性に優れた PCP をベースに、機能性官能基を導入した新規 PCP を検討した。

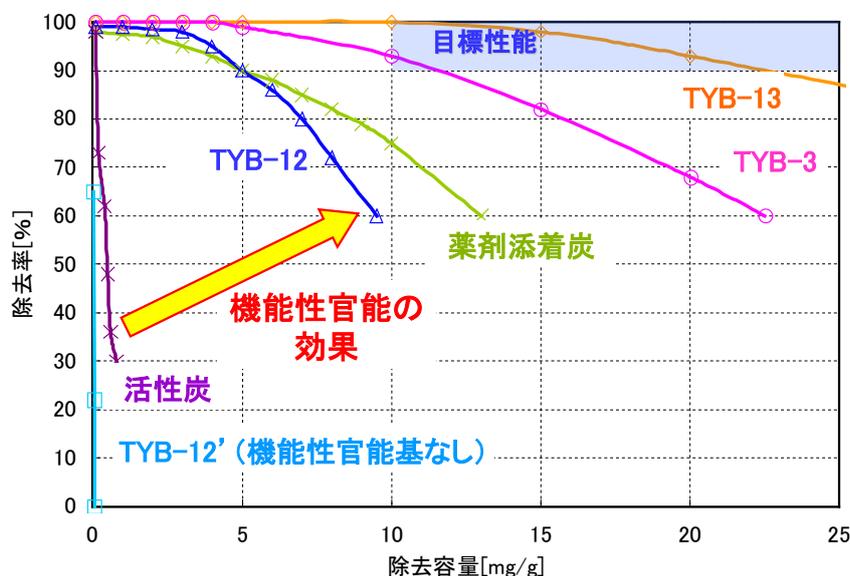
合成できた PCP について、ホルムアルデヒド流通系吸着性能評価を行った結果を図Ⅲ.2.1.4-6 に示す。図中の数値は、機能性官能基のモル数 (mmol/g) を示し、除去容量は、除去率 50% における値を示す。評価条件は、HCHO 濃度 1-3ppm、25°C、50%RH (RH: 相対湿度)、Air、流量 0.2m/s、空間速度 1,500,000hr⁻¹ で行った。多くの PCP は、薬剤添着炭よりも高い性能を示した。機能性官能基のモル数 (mmol/g) は除去容量と相関がなく、機能性官能基を有

効に使用できていないことが判った。



図Ⅲ.2.1.4-6 薬剤添着炭と各種 PCP のホルムアルデヒドに対する除去容量

空間速度 $100,000\text{hr}^{-1}$ でのデータを図Ⅲ.2.1.4-7 に示す。いくつかの PCP (TYB-3、TYB-13) は目標性能を示したことから、アルデヒド分離性能に関する最終目標を達成した。また、TYB-12' (機能性官能基なし)、および、TYB-12 (機能性官能基あり) の例より機能性官能基がないと活性が発現しないことから、ホルムアルデヒド分離において機能性官能基の効果が確認できた。



図Ⅲ.2.1.4-7 ホルムアルデヒド吸着性能評価結果

b) PCP への薬剤添着

薬剤を添着する PCP は、高比表面積で安定性に優れた PCP として、先の TYB-3、および、機能性官能基を持たない PCP である TYB-16、17、18 を選定し、薬剤の種類を薬剤 A に、添

着量を 10wt%に固定して調製を行った。薬剤が PCP 細孔内に添着されていることを確認するため、薬剤添着前後での窒素吸着量の減少率を測定した。その結果、すべての PCP において薬剤添着後の窒素吸着量が減少していることから、薬剤が PCP 細孔内に添着されていると考えられる。そして、多くの PCP において、減少率が理論値よりも大きくなっており、部分的に細孔閉塞が起こっていると考えられる。薬剤添着量の最適化が必要であるが、まずはホルムアルデヒド吸着性能の確認により、PCP の絞り込みを行った。

ホルムアルデヒド流通系吸着性能評価結果を図 III.2.1.4-8 に示す。除去容量は、除去率 50%における値を示す。評価条件は、HCHO 濃度 1-3ppm、25°C、50%RH、Air、流量 0.2m/s、空間速度 1,500,000hr⁻¹で行った。

その結果、薬剤添着炭よりも高い性能を示す PCP として TYB-3、-16、-17 の 3 種類を見出すことに成功した。また、TYB-3 の結果から、薬剤の添着により性能が向上し、薬剤添着の効果があることが判った。性能が低かった PCP については、細孔減少によりホルムアルデヒドを捕捉できなかった、薬剤の分解が起こっていたなどが考えられる。

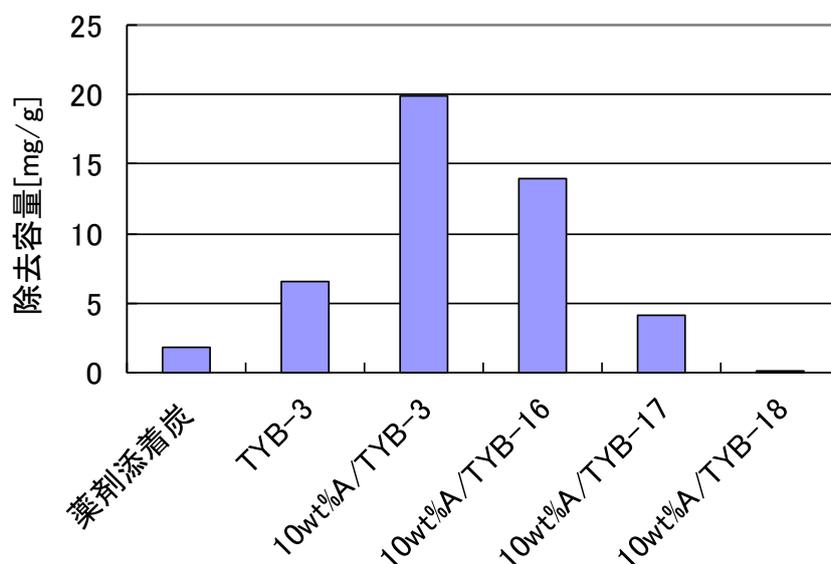


図 III.2.1.4-8 薬剤添着炭と各種薬剤添着 PCP のホルムアルデヒドに対する除去容量

性能が高かった TYB-3 について、添着量を 1~10wt%に変えた検討を行った。評価条件は、HCHO 濃度 1-3ppm、25°C、50%RH、Air、流量 0.2m/s、空間速度 1,500,000hr⁻¹で行った。その結果、5wt%添着時に最も高い性能を示した。除去容量は薬剤添着炭の 20 倍と、かなり高い性能であった。

(5)-2 耐久性試験

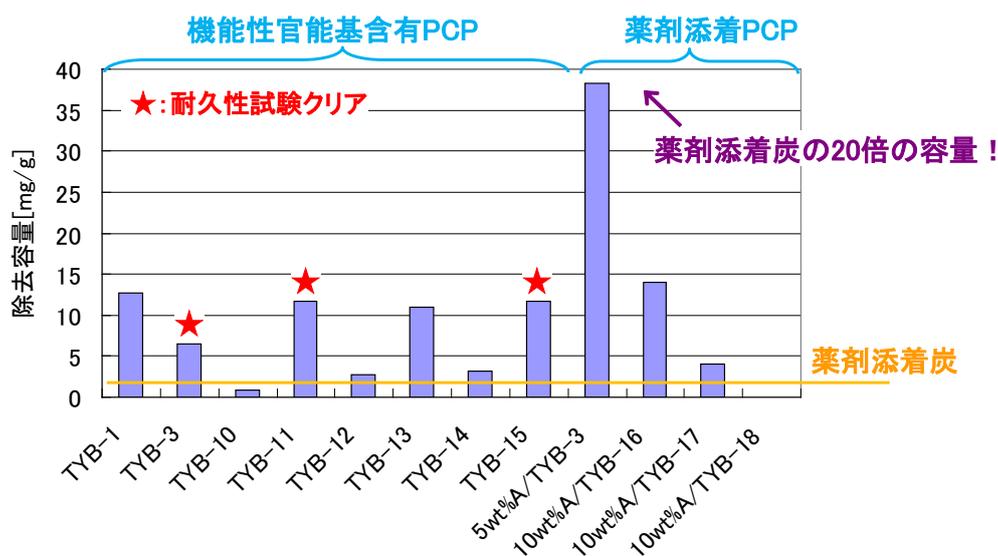
薬剤添着炭よりも高い性能を示す候補 PCP (TYB-1、TYB-3、TYB-11、TYB-13、TYB-15) について、80°C95%RH の雰囲気下に 24 時間静置し、耐久性試験を行い、XRD 測定および窒素吸着測定を行った。XRD 測定の結果より、一部の PCP で強度低下が確認されたが、大きなパターン変化は見られず、顕著な構造崩壊は起こっていないと考えられる。一方、窒素吸着測

定結果からは、いずれの PCP でも窒素吸着量に変化が見られ、部分的な構造変化による吸着量の増加や細孔消失による吸着量の減少が生じていると考えられる。

次に、耐久性試験後でのホルムアルデヒド吸着性能評価を行った。評価条件は、HCHO 濃度 1-3ppm、25°C、50%RH、Air、流量 0.2m/s、空間速度 1,500,000hr⁻¹ で行った。その結果、TYB-3、TYB-11、TYB-15 は性能低下がほとんど見られず、アルデヒド分離性能を 90%以上保持しており、耐久性が高いと言える。これらのことより、耐久性に関する最終目標性能を達成した。

一方、薬剤添着 PCP (5wt%/TYB-3) は、吸着量が 14%低下しており、添着している薬剤が劣化していると考えられる。しかしながら、性能低下後の吸着量も高い値を示しており、優れたアルデヒド除去材と言える。

基本骨格探索と耐久性試験に関する評価結果を図Ⅲ.2.1.4-9 にまとめる。機能性官能基含有 PCP を検討した結果、薬剤添着炭よりも高いホルムアルデヒド分離性能を示す PCP を 7 種見出した。そのうち 3 種は、耐久性にも優れることが明らかとなり、最終目標性能を達成した。また、PCP に薬剤を添着することにより、薬剤添着炭の 20 倍の分離性能を達成した。



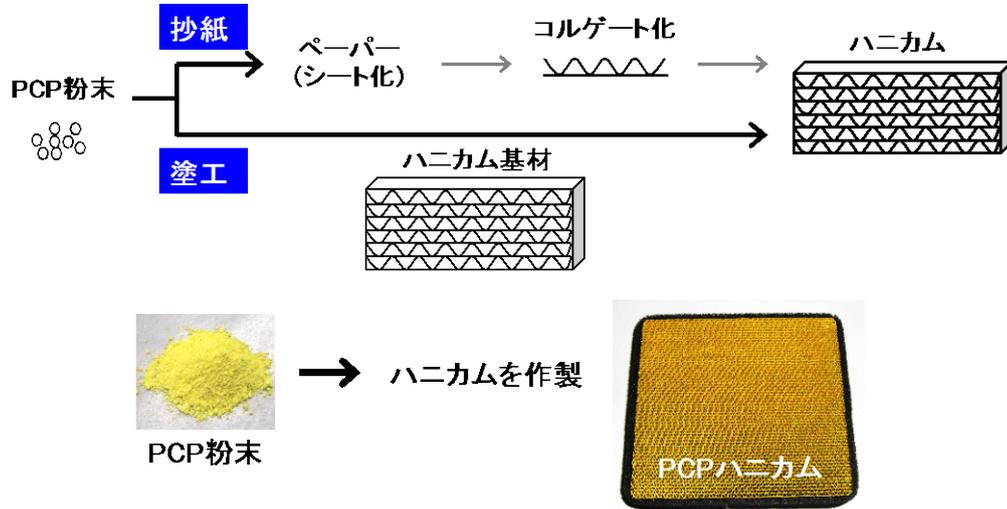
図Ⅲ.2.1.4-9 ホルムアルデヒド吸着性能評価まとめ

(5)-3 スケールアップ検討

スケールアップする PCP は、性能が高く、耐久性にも優れる TYB-3 を選定した。仕込比や圧力、攪拌条件などをフラスコスケールで検討し、合成条件を絞り込んだ。10 倍スケールで実施した結果、問題なく合成できることを確認した。東洋紡(株)保有のオートクレーブでは、キログラム単位の合成ができないため、外注によりスケールアップ合成を実施した。これにより、TYB-3 を 2.3kg 得た。スケールアップ合成品の品質を XRD 測定、窒素吸着測定、ホルムアルデヒド分離性能評価により確認したところ、ラボ品と同等レベルであり、問題なくスケールアップできることを確認した。

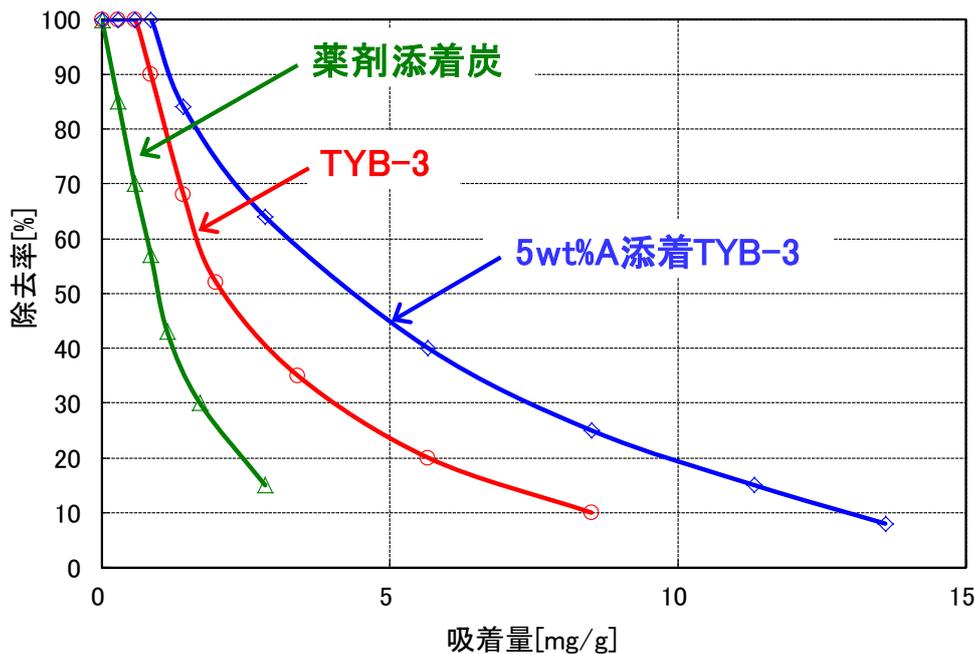
(5)-4 形態付与検討

PCP は粉末で得られるため、実用化に必要な形態へと成形を行った。スケールアップ合成したPCPを用い、ハニカム化を検討した。ハニカム化スキームを図Ⅲ.2.1.4-10に示す。PCP粉末(粒子)、バインダー、および、薬剤を所定量含む水性スラリーを調製し、それをハニカム基材に塗工し、乾燥させることにより、ハニカムを作製した。



図Ⅲ.2.1.4-10 ハニカム化スキーム

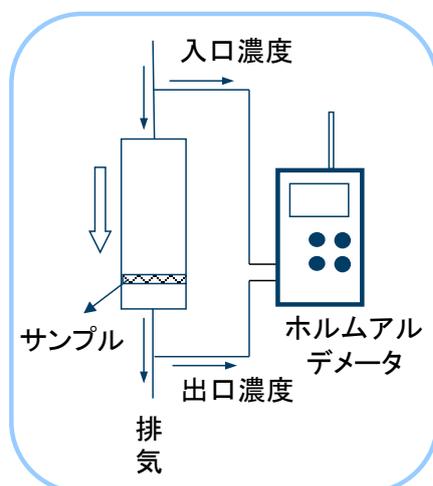
次いで、ホルムアルデヒド濃度 1ppm を含む空気(25℃、50%RH)を使用し、空間速度 100,000hr⁻¹ 条件で、作製したハニカムのホルムアルデヒド除去性能を測定した。結果を図Ⅲ.2.1.4-11に示す。ハニカム化した状態において、PCP 単体でも薬剤添着炭の約 2 倍の吸着性能であり、吸着性能を保持したまま形態付与することができた。さらに、薬剤添着 PCP は薬剤添着炭の約 4 倍の吸着性能を示すことが分かった。



図Ⅲ.2.1.4-11 ハニカム性能評価(単ガス)

(5)-5 混合ガスの分離性能評価

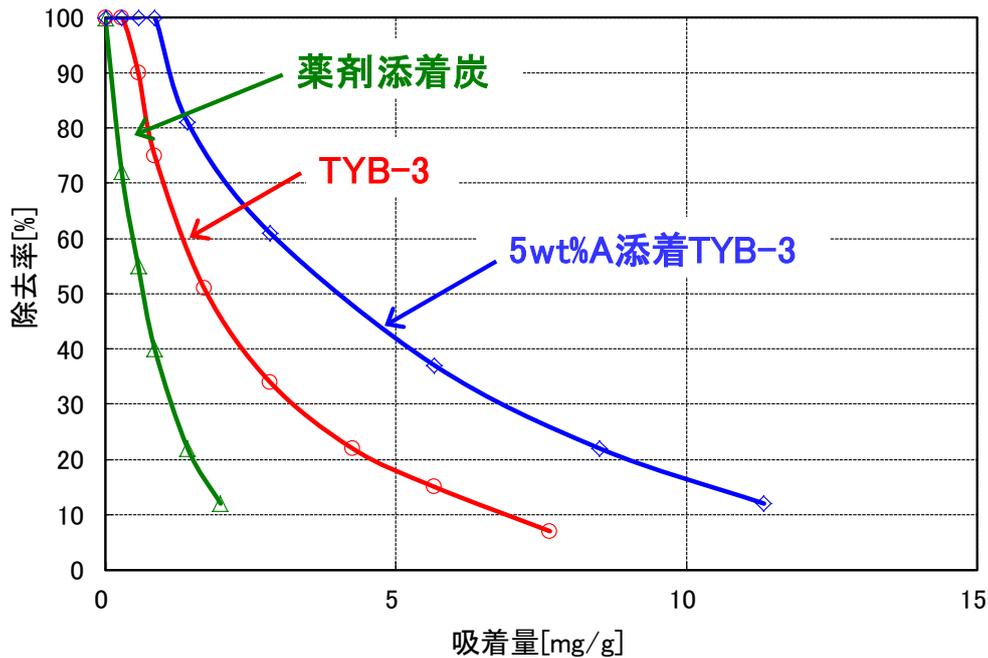
次に、実用化に則した評価として流通系での吸着性能評価を行った。実用化に則した混合ガス組成としてトルエン/ホルムアルデヒド=100ppm/1ppm で評価できる系を構築した。評価系を図Ⅲ.2.1.4-12に示す。



図Ⅲ.2.1.4-12 混合ガス流通系吸着性能評価装置図

実際の評価では、カラムにハニカムサンプルを詰め、トルエン/ホルムアルデヒド(100ppm/1ppm)の混合ガス(25°C、50%RH)をフローしながらガス濃度を計測した。具体的には、サンプル通過前のホルムアルデヒド濃度に対し、通過後のガス濃度を測ることで除去率を算出することができる。

トルエン濃度 100ppm/ホルムアルデヒド濃度 1ppm を含む空気(25°C、50%RH)を使用し、空間速度 $100,000\text{hr}^{-1}$ 条件で、ハニカムのホルムアルデヒド除去性能を測定した。結果を図Ⅲ.2.1.4-13に示す。PCP 単体でも薬剤添着炭の約 3 倍の吸着性能であり、さらに、薬剤添着 PCP は薬剤添着炭の約 5 倍の吸着性能を示した。



図Ⅲ.2.1.4-13 ハニカム性能評価(混合ガス)

(6) 知的財産取得、論文、外部発表状況

特許、論文、外部発表等の件数(内訳)

区分 年度	特許出願			商標登録	論文		その他外部発表		
	国内	外国	PCT※ 出願	国内	査読 付き	その 他	学会発表・ 講演	新聞・雑誌 等への掲載	その他
H21FY	0件	0件	0件	0件	0件	0件	0件	0件	0件
H22FY	1件	0件	0件	2件	0件	0件	0件	0件	0件
H23FY	5件	0件	0件	0件	0件	0件	0件	0件	0件
H24FY	2件	0件	1件	0件	0件	0件	1件	0件	0件
H25FY	7件	0件	0件	0件	1件	0件	0件	0件	0件
H26FY	2件	0件	0件	0件	0件	0件	1件	0件	0件

(※Patent Cooperation Treaty :特許協力条約)

(7) まとめと成果の意義

(7)-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。また、表Ⅲ.2.1.4-1 に最終目標の達成状況をまとめた。

- ・ 機能性官能基含有 PCP を検討し、薬剤添着炭よりも高いホルムアルデヒド分離性能を示す PCP を 7 種見出した。そのうち 3 種は、耐久性にも優れることが明らかとなり、最終目標を達成した。
- ・ 薬剤添着 PCP により、薬剤添着炭の 20 倍の除去容量、および、除去速度向上を達

成した。

- ・ トルエン／ホルムアルデヒド混合ガス分離性能評価により、薬剤添着炭よりもホルムアルデヒドを選択的に分離できることを確認できた。ハニカムでも同様の性能であり、成形性にも問題ないことを確認した。
- ・ キログラムスケールでのスケールアップ合成に成功した。
- ・ コストダウン検討とハニカムでの性能把握により、性能×コストは、薬剤添着炭に十分差をつけられることが明らかとなった。

表Ⅲ.2.1.4-1 成果のまとめ

開発項目	目標	成果	達成度
PCPによる微量ガス分離材の開発	空間速度100,000hr ⁻¹ 、初期濃度1ppmの条件において、アルデヒド類分離性能を90%以上保持した状態で分離できる量が10mg/g以上	目標性能を満たすPCPを見出した	◎
	耐久性試験(80℃、95%RH、24h)において、アルデヒド類分離性能を90%以上保持	目標性能を満たすPCPを見出した	◎

◎大幅達成、○達成、△達成見込み、×未達

(7)-2 成果の意義

得られた成果の意義は以下である。

- ・ 世界初もしくは世界最高レベルの技術

ホルムアルデヒド除去 PCP の開発は世界初。さらに、PCP に薬剤を添着することで、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。

- ・ 汎用性

アセトアルデヒドなどのアルデヒド類をはじめ、他の微量ガス分離材へも展開が可能。

- ・ 競合技術に対する優位性

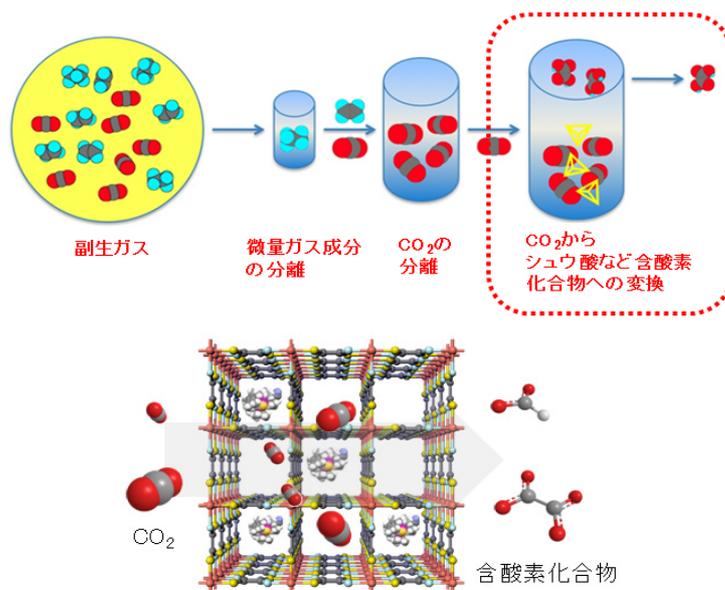
競合技術よりもコストパフォーマンスに優れている。

Ⅲ.2.2 回収 CO₂ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発

Ⅲ.2.2.1 PCP 複合触媒の開発／PCP 複合触媒基盤技術の開発 <京都大学>

(1) 背景と目的

本項目では、次世代グリーン・サステナブル・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、総合モデルとして PCP で吸着・分離した副生ガスである CO₂ から、シュウ酸、ギ酸、メタノール等の含酸素化合物を高効率に合成する PCP 複合触媒の基盤技術の研究開発を行うことを目的とする。さらに、CO₂ を原料とした化学プロセスに関する試設計を行うことを目的とする(図Ⅲ.2.2.1-1)。



図Ⅲ.2.2.1-1 CO₂から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) 最終目標

平成 23 年度の間中間評価の達成を踏まえ、最終目標(平成 25 年度)を以下のように設定した。

CO₂の化学変換をモデル反応として PCP 複合触媒の検討を行い、

1) CO₂からの選択率(電流効率)が 80%以上で、シュウ酸、ギ酸等の含酸素化合物を効率的に生産する PCP 複合触媒を開発する。

さらに、

2) CO₂を原料とした化学プロセスに関する試設計を行う。

上記の最終目標は、電気化学的な CO₂還元によるギ酸生成の選択率 84.5%が最高値 (Chem. Comm. 1987, 131.)であるため、それを踏まえて設定した。また、活性金属種からなる PCP 複合触媒を用いることで、CO₂から基礎化学品へ転換する有用な触媒を開発するため設定した。

(3) 研究開発成果

(3)-1 液相法による PCP 複合触媒の開発

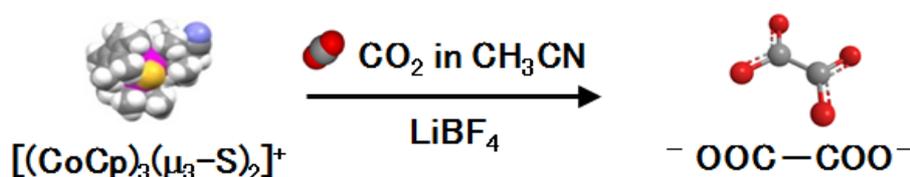
①実験

初めに、触媒反応条件を考慮し、レドックス耐性や熱安定性の高い PCP の選定を行った。その後、

PCP と触媒との複合化手法を検討し、PCP/分子複合触媒や PCP/活性金属種複合触媒を作製した。得られた複合体の構造を調べるため、粉末 X 線回折(XRD)測定および透過型電子顕微鏡(TEM)観察を行った。また、特定のサンプルについては高角散乱環状暗視野走査透過型電子顕微鏡(HAADF STEM)を用いたエネルギー分散型 X 線分光(EDX)測定を行い、PCP と触媒の複合状態を詳細に調べた。PCP の多孔性について調べるため、窒素吸脱着等温曲線測定を行った。PCP/活性金属種複合触媒の二酸化炭素還元反応については固定床流通式反応装置を用いて評価を行った

②電極反応触媒 PCP 複合体として用いる PCP の選定

有機溶媒中では二酸化炭素は-2.0 V より負側の電位で 1 電子還元を受け、一酸化炭素を生成する。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、分子錯体を触媒として用いた場合、pH=7.0 で-1.0 V 付近下での定電位電解により、CO₂ から含酸素化合物に変換することができる (図Ⅲ.2.2.1-2)。



図Ⅲ.2.2.1-2 CO₂ から含酸素化合物へ変換する分子触媒

そこで、複合化に用いる候補 PCP として-1.0 V でも分解しない電気化学的安定性の高い 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。

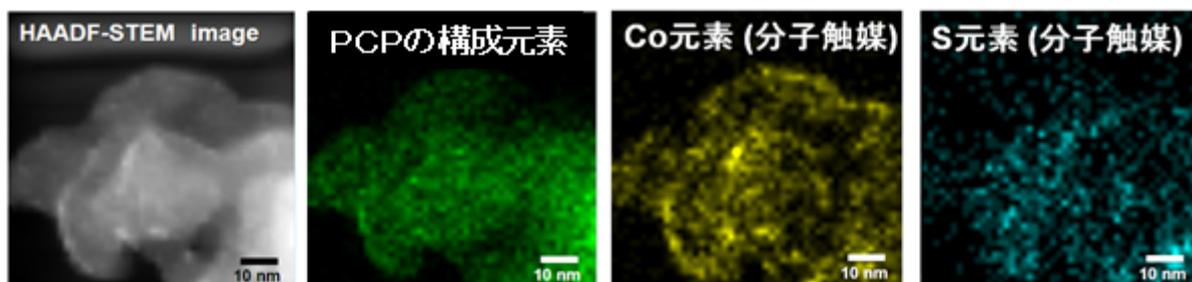
CO₂還元による含酸素化合物生成は溶液の CO₂濃度に比例する。溶液中に溶存する CO₂の濃度を高くし、より高効率に CO₂変換を行う PCP 複合体を開発するため、pH が異なる溶液中での電気化学的安定性についても検討した。H₃PO₄、NaOH のバッファー溶液を用いて水溶液を pH=4 もしくは 5 に調整した電解液を用いて、同様な測定手法を行い、抽出された PCP は酸性溶液中でも電気化学的安定性を保持していることを確認した。

③ 分子触媒との複合化による PCP 複合体の触媒分散状態

分子触媒の一種である Co₃S₂ クラスタ触媒(以下、分子触媒と略す)は、液相系における高効率な CO₂還元反应用触媒として知られており、CO₂を吸着・分離可能な PCP と複合化させることで、CO₂を原料とした還元反応の更なる高効率化が期待できる。このため、分子触媒と、CO₂の吸着・分離が可能な PCP の一種である PCP-1 を複合化して得られた PCP 複合体の触媒分散状態について透過型電子顕微鏡を用いて調べた。なお分子触媒を用いた CO₂還元反応の詳細については、次章Ⅲ.2.2.2 に記載した。

構造解析には高分解能 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

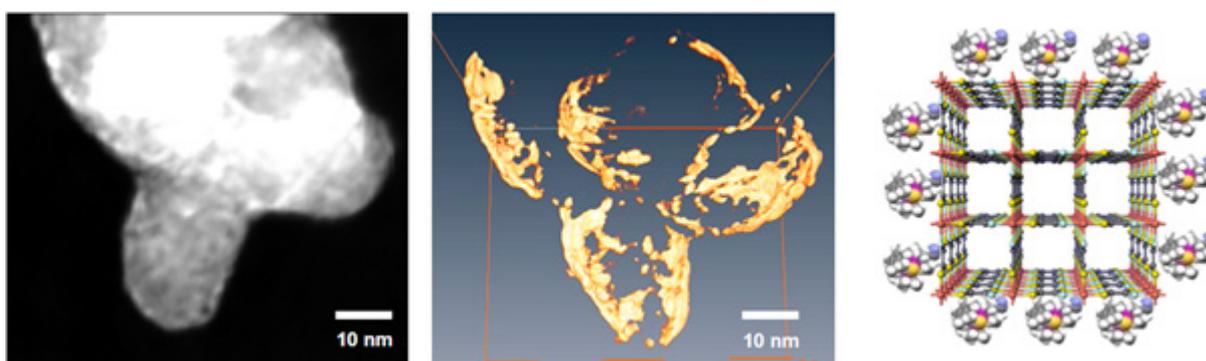
STEM-EDX)を用いたエネルギー分散型 X 線分光測定を行った。試料の調製として、分子触媒と PCP をアセトニトリル中で溶解させ、超音波により均一に分散させた溶液を TEM グリットに滴下した。図Ⅲ.2.2.1-3より、PCPの構成元素と触媒の構成元素の両元素は局所的にそれぞれ独立して集まって存在しているのではなく、全体にわたって両元素が均一に分布していることがわかった。



図Ⅲ.2.2.1-3 PCP 複合触媒の HAADF-STEM イメージおよび STEM-EDX スペクトル

これらの結果により、得られた複合体では PCP に分子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 複合体の粉末 X 線回折測定から、分子触媒に由来する回折ピークが非常に弱いことがわかった。PCP のみと比較して、複合体の N_2 吸着量に大きな差が見られないことから、分子触媒は PCP 表面に存在しており、PCP の細孔は保持されていることが示唆された。

そこで、分子触媒が PCP の表面に存在するのか、PCP の細孔内部に存在しているのか検討するため、TEMを用いた三次元トモグラフィー測定を行った。試料を回転させながら TEM 像を撮影し、再構築を行った結果、数層の触媒分子のレイヤーが PCP の表面に存在していることが明らかとなった。この結果は多孔性材料と分子触媒の複合状態を三次元的に解析し、解明した初めての例である(図Ⅲ.2.2.1-4)。

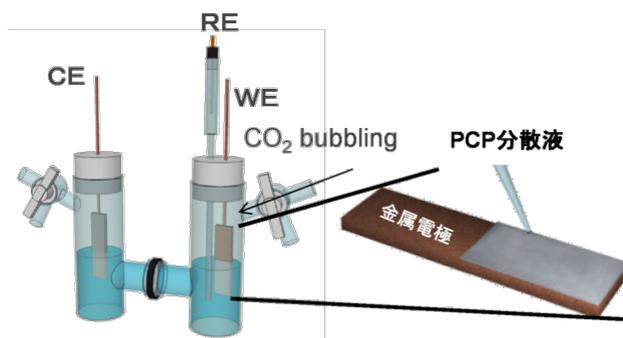


図Ⅲ.2.2.1-4 PCP 複合触媒の HAADF-STEM イメージ(左)、三次元トモグラフィー解析(中)および PCP と分子触媒の分散状態のイメージ(右)

この分子触媒は PCP 表面に薄い層として均一に担持されていることから、高効率に CO_2 を還元する有能な複合触媒となりうることが期待される。また、この複合体は PCP と触媒の相乗効果を十分に発揮できる構造を有していると考えられる。実際、この PCP 複合体の触媒評価を行ったところ CO_2 変換率 95% という、最終目標値を凌ぐ効率を達成した。詳細については、次章Ⅲ.2.2.2 に記載した。

④PCP 修飾活性金属種電極の調整と CO₂還元活性

触媒の高性能化を目指し、活性金属種を用いた PCP 複合触媒の検討に取り組んだ。活性金属種との複合化による PCP の効果を明確にするため、金属基板を用いた PCP との複合触媒の検討を行った。まずは、安価で取り扱いが容易である Cu に焦点を当て、PCP の効果を明確にするため、Cu 基板を用いた PCP との複合化として、PCP 修飾活性金属種電極の検討を開始した。複合化に用いる PCP としては電解反応により PCP が分解せず、かつ室温で CO₂ の吸着能を有するものを選定した。PCP 修飾活性金属種電極の作製は、金属電極に PCP 分散液を塗布し乾燥させることで行った(図Ⅲ.2.2.1-5)。電解反応を行った結果、CO₂ から CO が生成物として得られていることを GC 分析により確認した。電流効率は低いものの、PCP 修飾により CO 生成の電流効率が 4 倍向上し、PCP のエンハンス効果を見出した(表Ⅲ.2.2.1-1)。PCP の種類を検討したところ、PCP-1 や PCP-2 が高い担持効果を示した。PCP-1、PCP-2 はいずれも室温で CO₂ の吸着能を有しており、これらの PCP に関しては CO₂ 濃縮効果により CO 生成がエンハンスされたと考えられる。活性金属種を用いた PCP 複合体を電極触媒として適応することで、PCP によるエンハンス効果を見出すことに成功した。しかしながら、CO までの還元反応しか進行しないことがわかった。そこで、次に PCP 複合体を気相反応用の触媒として用いる検討を行った。気相反応用の触媒としての PCP 複合体の作成および、これを用いた CO₂ を原料とするメタノール生成反応について、次節に述べる。



図Ⅲ.2.2.1-5 PCP 修飾活性金属種電極と電解反応

表Ⅲ.2.2.1-1 PCP 修飾 Cu 電極の CO₂還元活性

PCP	CO ₂ 吸着量 at RT	Potential	Coulomb	電流効率 / %	
なし	-	-1.2V	32.61C (4h)	H ₂ (21.63 %)	CO (0.86 %)
PCP-1	15 ml/g	-1.2V	30.87 C (8h)	H ₂ (24.25 %)	CO (3.41 %)
PCP-2	110 ml/g	-1.2V	33.54 C (6h)	H ₂ (21.70 %)	CO (3.15 %)

(3)-2 気相法による PCP 複合触媒の開発

① PCP と活性金属種の複合化

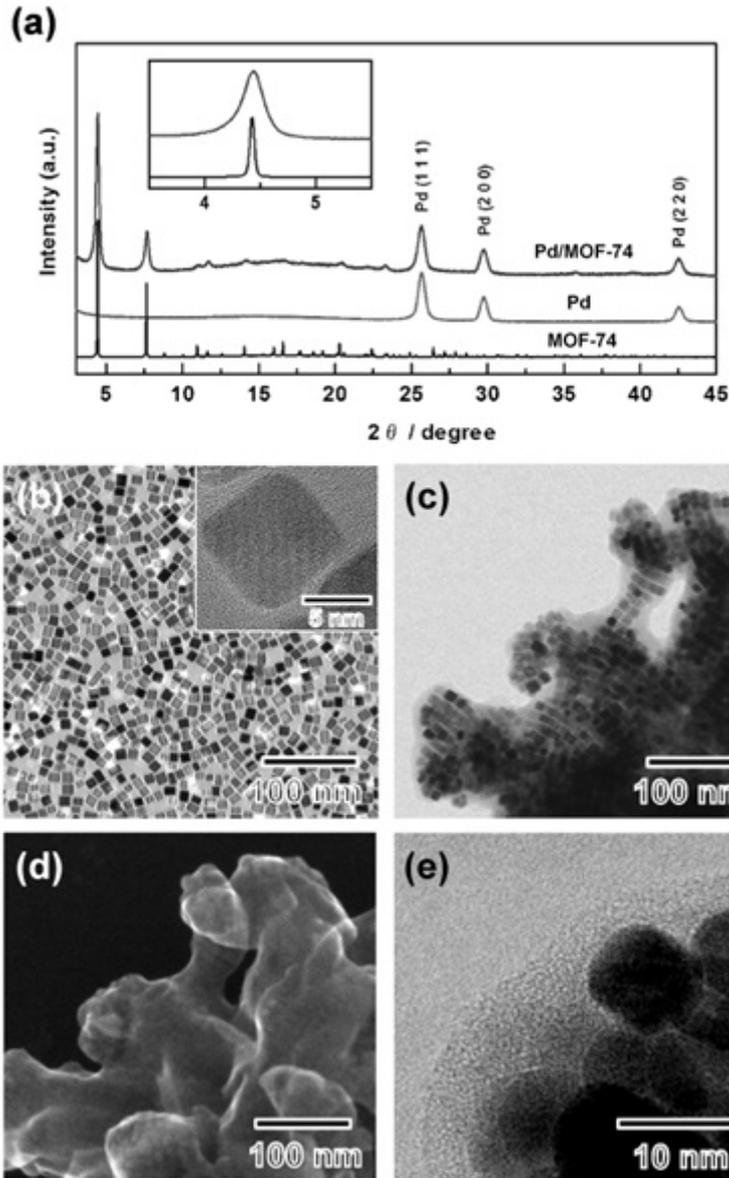
固体触媒である活性金属種の PCP への担持技術は種々の触媒開発に広く応用可能であるため非常に重要である。初めに本プロジェクトでは活性金属種と PCP の複合化法を検討した。具体的には、ナノ

金属表面に PCP のナノ膜を被覆させる新たな複合化手法や昇華性の高い金属錯体を原料に用いることで、PCP 細孔中に金属原料を導入し、その後、還元して複合化させる化学蒸気浸透法、PCP に金属原料の溶液を含浸させた後、熱もしくは水素によって還元する方法を見出した。

② ナノ金属表面に PCP のナノ膜が被覆した複合体(組み上げ法による複合化の検討)

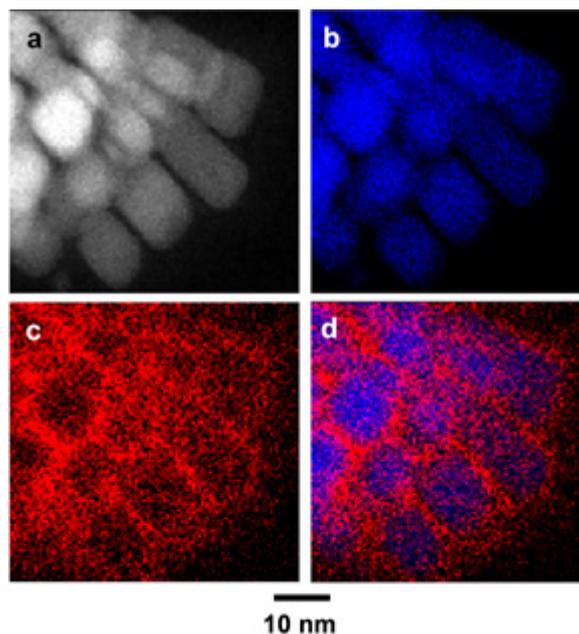
触媒活性化する副生ガスのみを PCP で捕獲し、確実に反応させ、高効率・高選択な反応を実現するためには、ナノ触媒表面に PCP が被覆した構造を有する PCP 複合触媒の開発が必要不可欠である。また、細孔壁が謂わば「仕切り板」になるので、シンタリング(粒成長による活性点の劣化)を防ぐことができる。さらに、細孔が吸着ガスを有することから触媒毒となるガスからの被毒を防ぐことも可能である。しかしながら、確実に PCP の内部へナノ触媒を埋め込んだ、もしくはナノ触媒表面に PCP を被覆したコア・シェルタイプの PCP 複合体に関する報告例は極めて少なく、その活性金属種を PCP で被覆する方法論の確立はなされていない。そこで、金属表面から PCP をボトムアップ法によって組み上げる手法を検討した。一次元細孔を有し、CO₂ の吸着量が多い PCP の一種である MOF-74 を触媒として有用である Pd のナノ結晶の表面に被覆したコア・シェルタイプの PCP ナノ複合体をボトムアップ手法より作製した。合成手法としては、コア部に平面性の高い立方体の形状を有する Pd ナノ結晶を用いた。まず、粒径を制御する保護剤、結晶面を制御するキャッピング試薬を用い、Pd 塩をアスコルビン酸で還元することにより立方体型の Pd ナノ結晶を作製した。得られた Pd ナノ結晶の溶液に PCP の原料を加え、加熱・攪拌することにより、Pd ナノ結晶に PCP ナノ膜が被覆したナノ複合体(Pd/MOF-74)を作製した。

図 III.2.2.1-6a に得られた Pd/MOF-74 ナノ複合体の粉末 X 線回折測定結果を示す。得られた Pd/MOF-74 ナノ複合体の回折パターンは、Pd と MOF-74、それぞれの回折ピークの足し合わせで再現された。ここで、低角度側に観測されている MOF-74 格子に由来する回折ピークに注目する。ナノ複合体の回折ピークは単独の MOF-74 のものに比べブロードニングにしていることがわかった。この結果は、複合物質を構成している MOF-74 の結晶子サイズが小さいことを示しており、MOF-74 のナノシェルが Pd ナノ結晶の表面に形成されたことを示唆している。そこで、Pd と MOF-74 の複合状態についての詳細な知見を得るため、透過型電子顕微鏡(TEM)観察を行った。コア部に用いた Pd ナノ結晶およびナノ複合物質の TEM 写真を図 III.2.2.1-6b, c にそれぞれ示す。TEM 写真から、Pd ナノ結晶と Pd/MOF-74 複合物質の平均粒径はそれぞれ 10.1 ± 0.8 nm、 10.0 ± 0.9 nm と見積もられ、複合化の前後で粒径および形状に変化がないことがわかった。また、MOF-74 との複合化に伴い、Pd ナノ結晶の周りに薄い膜が観測された。走査型電子顕微鏡(SEM)写真から表面状態を調べた結果、Pd ナノ結晶に起因した像が観察されないことから、この薄い膜は Pd ナノ結晶表面を完全に被覆していることが明らかになった(図 III.2.2.1-6 d)。高分解能 TEM 写真(図 III.2.2.1-6e)からこの膜はナノメートルオーダーと非常に薄く、電子線回折結果から結晶性であることがわかった。さらに、環状暗視野(ADF)像による STEM-EDS 分析を用いることで、Pd と MOF-74 の複合状態について詳細に調べた。



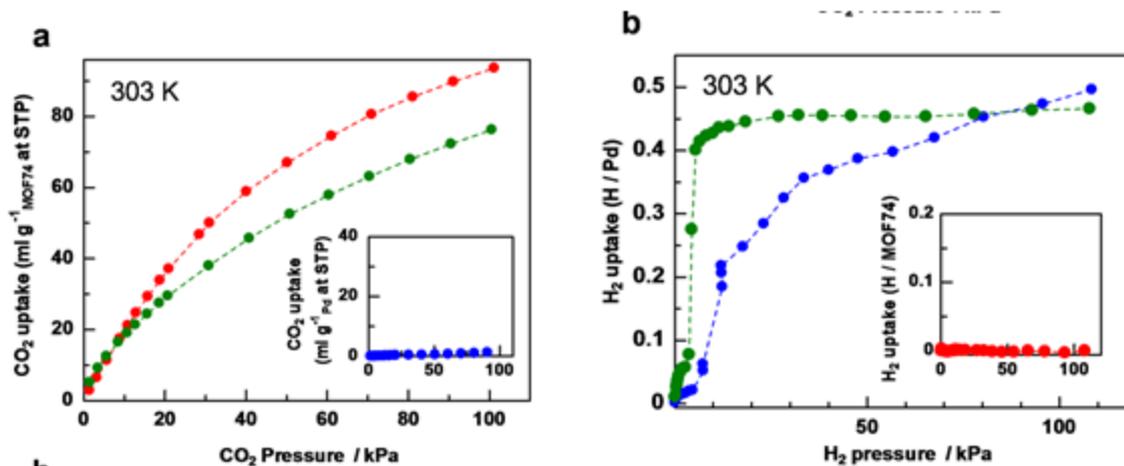
図Ⅲ.2.2.1-6 XRD パターン(a)、TEM 像: Pd ナノ結晶(b)、複合体(c)、複合体の SEM(d) および高分解能 TEM(e)像

HAADF-STEM 像(図Ⅲ.2.2.1-7a)、Pd-L(図Ⅲ.2.2.1-7b)、Zn-L(図Ⅲ.2.2.1-7c)、Pd-L + Zn-L(図Ⅲ.2.2.1-7d)の結果を図Ⅲ.2.2.1-7 に示す。Pd 元素と Zn 元素のマッピングイメージの重ね合わせから、Pd ナノ結晶の表面に PCP の構成成分である Zn がナノメートルオーダーの厚みで形成していることがわかる。これらの結果より、作製された複合物質は Pd ナノ結晶表面に結晶性 MOF-74 ナノ膜が被覆していることが明らかになった。さらに、原料の濃度を調製することで MOF-74 シェルの厚みを系統的に制御可能であることがわかった。



図Ⅲ.2.2.1-7 Pd/MOF-74 ナノ複合体の HAADF-STEM 像(a)、STEM-EDS(Pd 成分; (b)、Zn 成分; (c)、Pd-Zn 成分; (d))

次に、Pd/MOF-74 複合物質の CO₂ および水素吸着特性を調べた。図Ⅲ.2.2.1-8a より、コア部に用いた Pd ナノ結晶では CO₂ を全く吸着しないことがわかるが、この複合物質は単独の MOF-74 と同様、CO₂ を吸着することがわかった。この結果は、吸着された CO₂ は複合物質の MOF-74 シェル部に貯蔵されていることを示している。水素吸着特性については、CO₂ の吸着挙動とは対照的に Pd ナノ結晶と同様、水素圧の加圧に伴い水素を吸着することがわかった(図Ⅲ.2.2.1-8b)。このことから吸着された水素は複合物質の Pd コア部に貯蔵されていると考えられる。得られた PCP ナノ複合物質は CO₂ および水素ガスの分離・貯蔵が可能な系であり、Pd と MOF-74 の高い接触界面の割合を有することから、CO₂ を還元する有用な触媒として期待される。今後、Pd の周りを PCP で被覆した複合物質の CO₂ 還元反応を実施する予定である。



図Ⅲ.2.2.1-8 CO₂ (a) および水素(b)吸着特性 (303 K): Pd (青), MOF-74 (赤)、複合物質 (緑)

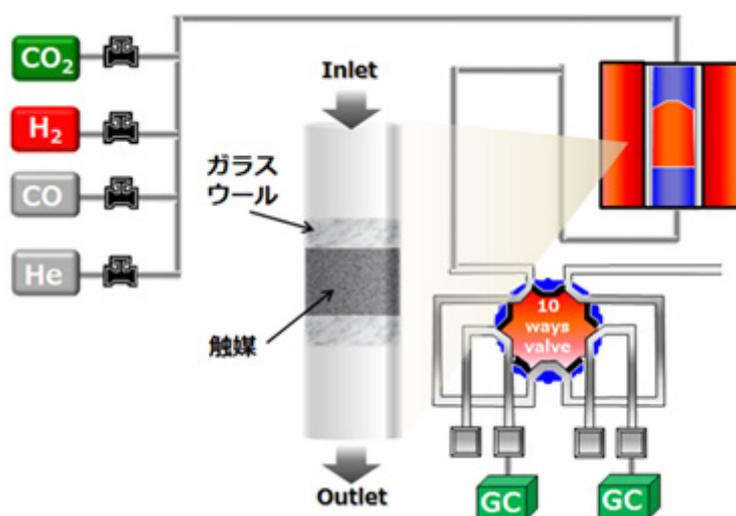
③ PCP と Cu の複合触媒の調整

CO₂ からギ酸などの含酸素化合物を生成する触媒として、上述の Co₃S₂ クラスタ触媒(TANAKA 触媒) に代表される分子触媒の他、活性金属種が報告されている。特に活性金属種として Cu や Cu/ZnO を用いた場合、気相反応により、CO₂ からメタノールを合成することができる。そこで、CO₂ を原料とした化学プロセスに関する試設計を行うため、活性金属種として Cu に着目し、PCP との複合触媒を検討した。気相反応に用いる PCP の選定として、触媒反応条件下においても PCP が分解せず、耐熱性があり、且つ、CO₂ との親和性の高い下記の PCP に着目し、複合化の検討に用いた。

次に、CO₂ を還元する Cu と上記で選定した PCP との複合触媒化の取り掛かりとして、より簡便な熱分解法を用いた複合化により PCP 複合体を作製した。また、比較サンプルとして γ -Al₂O₃ に担持した Cu 触媒を PCP 複合触媒と同じ調整法により作製した。

④ PCP と Cu の複合触媒の同定および評価

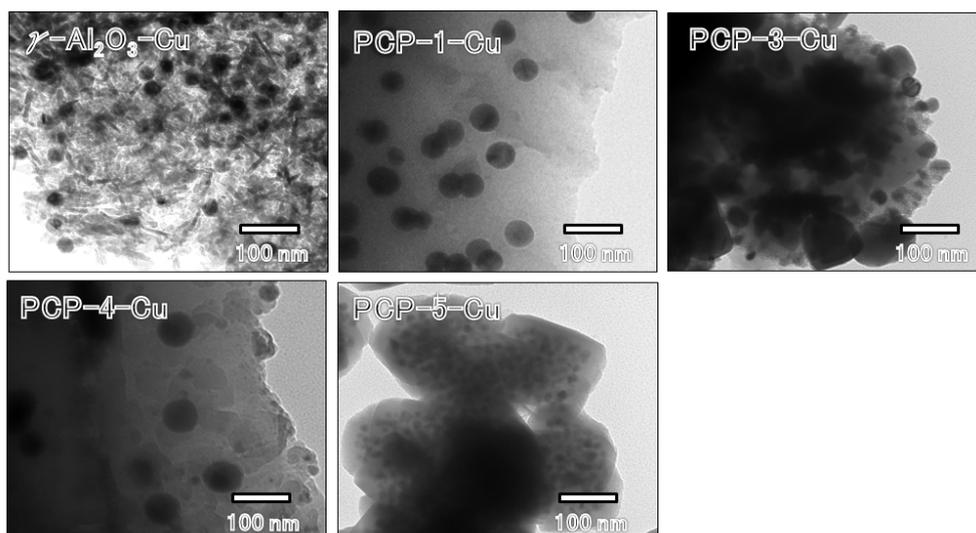
得られた複合触媒については、XRD 測定および TEM 観察により構造および状態観察を行った。また、特注の固定床流通式反応装置を用いて CO₂ 還元反応評価を行った(図Ⅲ.2.2.1-9)。



図Ⅲ.2.2.1-9 固定床流通式反応装置の概略図

Cu/PCP 複合触媒および Cu/ γ -Al₂O₃ 触媒の粉末 X 線回折測定結果から、Cu との複合化後においても PCP の回折パターンに違いがないことから PCP の構造を保持した状態で複合化が進行したことがわかった。また、45° 付近において Cu 格子からの回折に由来するブロードな回折ピークが観測された。

また、複合触媒の TEM 像から、どの複合体も数十ナノメートルの粒子が均一に分散していることがわかった(図Ⅲ.2.2.1-10)。



図Ⅲ.2.2.1-10 γ - Al_2O_3 -Cu および PCP 複合触媒の TEM 像

Cu/PCP 複合触媒および Cu/ γ - Al_2O_3 触媒に対し、 $\text{He}/\text{CO}/\text{CO}_2/\text{H}_2$ の混合ガスを供給し反応させた後の GC チャートにおけるメタノールに由来するピークの積分面積から、 γ - Al_2O_3 、PCP の種類によりメタノールの生成量が異なることがわかった。表Ⅲ.2.2.1-2 にメタノールの生成量を示す。表より Cu/ γ - Al_2O_3 に比べ、PCP-5、PCP-4 の Cu 複合体は 5 倍以上メタノールの生成量が多いことがわかった。PCP および Al_2O_3 のみで評価した際にはメタノール生成は確認できないことから、PCP-5、PCP-4 が高い担持効果を示すことが明らかになった。触媒評価後の粉末 X 線回折パターンから、触媒評価後においても PCP の骨格を保持しており、結晶子サイズおよび TEM 観察からも粒径が変化していないことがわかった。

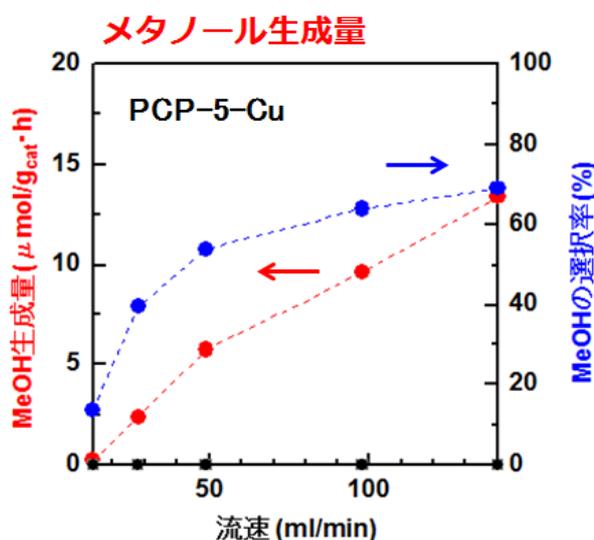
表Ⅲ.2.2.1-2 γ - Al_2O_3 -Cu および PCP 複合触媒のメタノール

MOF-Cu	メタノール生成量 ($\text{nmol}/\text{g}_{\text{cat}} \cdot \text{h}$)	MOF-Cu	メタノール生成量 ($\text{nmol}/\text{g}_{\text{cat}} \cdot \text{h}$)
PCP-5-Cu	225	PCP-1-Cu	34.3
PCP-4-Cu	174		
PCP-3-Cu	16.9	γ - Al_2O_3 -Cu	34.2

CO_2 還元反応メカニズムを詳細に検討するためには反応系をより単純にする必要がある。そこで、 CO_2 と H_2 の二成分の混合ガスを用いメタノール生成触媒反応を検討した。

Cu/PCP 複合体および Cu/ γ - Al_2O_3 複合体について、 $\text{He}/\text{CO}_2/\text{H}_2$ の混合ガスを流速 14 ml/min で供給し反応させた後の GC チャートから、 γ - Al_2O_3 および PCP-1 に担持させた Cu 触媒については、保持時間が 6min 弱のメタノールに由来するピークは観測されなかったのに対し、Cu/PCP-5 ではピークが観測された。さらに、流速を 14 ml/min から 140 ml/min まで上げていくにしたがって、メタノールの生成量は多くなった。流速に対するメタノール生成量をプロットしたものを図Ⅲ.2.2.1-11 に示す。このことから、 CO_2 が

らメタノールを生成する触媒として PCP-5 が優れた担持効果を示すことが明らかになった。さらに、保持時間が 8min までの主成分に対してメタノール生成量の割合を流速に対してプロットすると、流速を上げるにしたがってメタノール生成割合が高くなり、メタノールが選択的に生成したと考えられる。



図Ⅲ.2.2.1-11 PCP 複合触媒(Cu/PCP-5)のメタノール生成量

これまでの検討結果から、PCP 複合体の中でも PCP-5 を用いた場合、最もメタノール生成量が多いことがわかった。そこで、PCP-5 に置換基を導入したものを合成し、PCP-5 と比較することで触媒活性メカニズムを検討した。作製は置換基がない PCP-5 の場合と同様な合成手法を用い、PCP-5 誘導体-Cu 複合体を作製した。PCP-5 誘導体と Cu との複合触媒の粉末 X 線回折測定結果から、Cu との複合化後においても PCP の回折パターンに違いがないことから PCP の構造を保持した状態で複合化が進行していることがわかった。45° 付近において Cu 格子からの回折に由来するブロードな回折ピークが観測された。

また、複合触媒の TEM 像から、どの複合体も数十 nm の粒子が均一に分散していることがわかった。メタノール生成量に対して He/CO₂/H₂ 混合ガスの流速をプロットした結果、PCP-5-Cu の置換基を変えることにより、メタノール生成量が異なり、置換基効果を有することを見出した。

触媒評価後の粉末 X 線回折パターンから、触媒評価後においても PCP の骨格を保持しており、結晶子サイズおよび TEM 観察からも粒径が変化していないことがわかった。

CO と CO₂ の混合ガスからメタノールを生成する PCP 複合触媒の先行研究として、MOF-5-Cu が報告されている (Chem. Mater., 2008, 20, 4576)。本プロジェクトによって得られた置換基を導入した PCP-5 と Cu 複合触媒は、MOF-5-Cu よりもメタノールの生成量は高く、世界最高性能を有するメタノール生成 PCP 複合触媒を開発することに成功した。

(4) 最終目標の達成状況と成果の意義

以下に最終目標の成果と達成状況を示す。

研究開発項目	開発目標	成果	達成度
PCP-複合触媒の基盤技術開発の成果	① CO ₂ からの選択率80%以上で、含酸素化合物を効率的に合成するPCP複合触媒の開発	PCP/分子触媒複合体において電流効率95%を達成(辛酸生成)	◎
	② CO ₂ を原料とした化学プロセスに関する試設計の確立	世界最高性能のPCP複合触媒を開発	◎

◎大幅達成、○達成、△達成見込み、×未達

また、本研究の成果は以下の意義がある。第一に、活性金属種とPCPの複合化手法の開発に成功した。具体的には活性金属種の周りにPCPナノ膜が被覆した複合触媒や、PCPの表面や内部に活性金属種を選択的に担持させる手法を見出した。第二にCO₂とH₂からメタノールを生成する世界最高性能ハイブリッドPCPを開発することに成功した。この成果は、CO₂還元触媒にかかわらず他の有用な反応の触媒に適応できる可能性が高いことから、産業への波及効果は大きいと考えられる。

(5) 知的財産権、成果の普及

区分 年度	特許出願			論文		その他外部発表		
	国内	外国	PCT 出願	査読 付き	その他	学会発表・講演	新聞・雑誌等 への掲載	その他
H21FY								
H22FY								
H23FY	1件							
H24FY						2件		
H25FY								
H26FY								

(6) まとめ

次世代グリーン・サステナブル・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、その総合モデルとしてPCPで分離したCO₂からシュウ酸、ギ酸、メタノール等の含酸素化合物を高効率に合成するPCP複合触媒基盤技術の研究開発を行った。さらに、CO₂を原料とした化学プロセスに関する試設計の確立を行った。PCPと複合化させる触媒として分子触媒や活性金属種に着目し、研究開発を推進した。初めに、反応条件を考慮し、レドックス耐性や熱安定性の高いPCPの選定を行った。PCPと触媒との複合化手法を検討し、PCP/分子複合触媒やPCP/

活性金属種複合触媒を作製した。PCP/分子複合触媒については、PCP と分子複合触媒の三次元可視化に初めて成功し、数層の分子触媒のレイヤーが PCP の表面に存在していることを明らかにした。この PCP 複合体の触媒評価を行ったところ CO₂ 変換率 95% という、最終目標値 (80% 以上) を凌ぐ効率を達成した。PCP/活性金属種複合触媒については、活性金属種の周りに PCP ナノ膜が被覆した複合触媒や、PCP の表面や内部に活性金属種を選択的に担持させる手法を見出した。さらに、CO₂ と H₂ からメタノールを生成する世界最高性能 PCP 複合触媒を開発することに成功した。この成果は、CO₂ 還元触媒にかかわらず他の有用な反応の触媒に適応できる可能性が高く、産業への波及効果は大きいと考えられる。

PCP 複合触媒の基盤技術開発を推進し、以下のことを達成した。

<分子触媒と PCP の複合化手法の開発>

- ・電気化学的安定性の高い PCP の抽出
- ・PCP-分子複合触媒の三次元可視化に初めて成功し、
数層の分子触媒のレイヤーが PCP の表面に存在することを確認 (世界初)

<活性金属種と PCP の複合化手法の開発>

- ・組み上げ法による複合化 (世界初)
- ・金属原料の熱分解による複合化
- ・化学蒸気浸透法による複合化

また、CO₂ と H₂ からメタノールを合成する固定床流通式反応装置を設計・開発し、CO₂ と H₂ からメタノールを生成する世界最高性能 PCP 複合触媒を開発することに成功した。

PCP/金属ナノ粒子複合触媒の開発は液相反応触媒の開発が先行しており、気相反応触媒に関する研究例はほとんどなかった。このたび、PCP 基盤技術開発を推進することで、他の担持体にはないエンハンス効果を PCPI により発現できることがわかった。

Ⅲ.2.2.2 PCP 複合触媒の開発／CO₂還元型錯体分子触媒基盤技術の開発 <京都大学>

(1) 研究の背景と目的

現代のエネルギー問題、資源問題は、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の根幹技術に問題がある。この問題を根本的に解決するためには、消費の結果得られる排出物を再生する技術の開発が必要であり、新技術を基にした再生可能な社会を構築しなければならない。化石資源の消費により排出されるCO₂はその代表であり、現在ではCO₂還元反応により有機分子に変化して、エネルギー物質または資源の再生を企図した研究が盛んに行われている。

CO₂還元反応の難しさは、電気や光化学反応による分子間電子移動が1電子過程であるのに対して、有機分子生成に必要な結合生成や結合開裂を伴う酸化還元反応には少なくとも2電子が必要なことに起因する。CO₂の1電子還元反応には大きな負の電位が必要であるのに対して、シュウ酸は・COOのカップリング反応と信じられている。ところが、プロトン移動と共役したCO₂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)電位は著しく正側にシフトし、エネルギー消費は著しく減少する(表Ⅲ.2.2.2-1)。熱力学的に不利なCO₂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事項であり、表Ⅲ.2.2.2-1の平衡電位近傍でCO₂還元反応を可能にする触媒の開発が急がれている。

表Ⅲ.2.2.2-1 pH 7.0でのCO₂還元反応の熱力学的平衡電位(E₀ V vs. Ag/AgCl)

						E ⁰ at pH 7.0 (Ag/AgCl)	
CO ₂	+	e ⁻	→	CO ₂ ^{•-}		-2.1 V	
CO ₂	+	2e ⁻	+	2H ⁺	→	HCOOH	-0.81
CO ₂	+	2e ⁻	+	2H ⁺	→	CO + H ₂ O	-0.72
CO ₂	+	4e ⁻	+	4H ⁺	→	H ₂ CO + H ₂ O	-0.68
		2e ⁻	+	2H ⁺	→	H ₂	-0.62
CO ₂	+	6e ⁻	+	6H ⁺	→	CH ₃ OH + H ₂ O	-0.58
CO ₂	+	8e ⁻	+	8H ⁺	→	CH ₄ + 2H ₂ O	-0.44

CO₂還元反応の溶媒系としては、環境にやさしく、かつ、溶媒自身がプロトン源として働く、水中での反応系が望ましい。ところが、表Ⅲ.2.2.2-1からわかるように、水中でのCO₂還元の難しさは、水の2電子還元(水素発生、-0.62V)が熱力学的にはCO₂の2電子還元反応よりも起こり易いことである。また、有機溶媒に比べて水へのCO₂の溶解度が低く、水中では溶解したCO₂の大部分が還元反応に不利なHCO₃⁻またはCO₃²⁻の形態をとっていることも水中でのCO₂還元反応開発の障害となっている。一般的には、CO₂濃度上昇とプロトン濃度減少を意図して、これまでCO₂還元反応は有機溶媒に水を添加して行われている。

本研究開発では中性の水中、熱力学的平衡電位近傍でのCO₂還元反応の実現と、それによるギ酸、シュウ酸等の含酸素化合物の効率的な合成を目的とし、錯体触媒分子の反応サイト周辺のCO₂濃度増加とプロトン濃度減少を目指した反応場としてのPCPを利用したPCP-

錯体複合触媒の開発を計画した。反応サイトとして用いる分子触媒は、固体触媒と比べて、反応機構の解明が容易であり、機構解明の結果を分子触媒の設計及び改良に活かすことが出来るところに利点がある。本研究では、触媒として機能する分子錯体は、我々のグループが報告した、無水アセトニトリル中-0.75 V vs. SCE の定電位電解で CO₂ をシュウ酸に還元する能力を有する Co₃S₂ クラスタ-触媒 [(Cp' Co)₃S₂]⁺ (Cp' = C₅H₄CH₃) (図 III.2.2.2-1) を用いた。PCP としては、pH 7.0 の水中、-1.20 V (vs. Ag/AgCl) の電解還元条件下でも酸化還元反応や加水分解を受けることなく安定な反応場を保持可能な ZIF-8 (Zn(MeIm)₂, C₈H₁₂N₄Zn) (図 III.2.2.2-2) を選択した。両者を複合した水に不溶な触媒 (Co₃S₂/ZIF-8) と、電極間の電子キャリアーとしてメチルピオローゲン ((CH₃NC₅H₄-C₅H₄NCH₃)²⁺, MV²⁺) を用いて、pH 7.0 の水中で電気化学的に CO₂ 還元反応を行った。

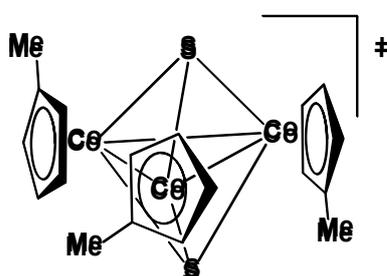
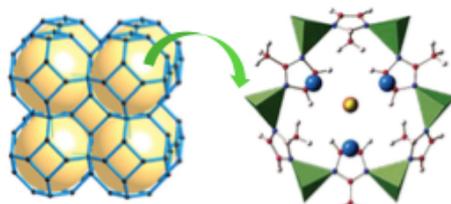


図 III.2.2.2-1 Co₃S₂ クラスタ-([(Cp' Co)₃S₂]⁺ (Cp' = C₅H₄CH₃)) の構造

Zn(MeIm)₂: 組成式 C₈H₁₂N₄Zn
(MeIm : 2-methylimidazole)



(PNAS, 103, 10186; JACS, 129, 5314)

図 III.2.2.2-2 ZIF-8 の構造

(2) 目標

平成 23 年度の間目標の達成を踏まえて、最終目標(平成 25 年度)として以下を設定した。

最終目標: CO₂ からの選択率(電流効率)が 80%以上で、シュウ酸、ギ酸等の含酸素化合物を効率的に生産する PCP 複合触媒を開発する。

(3) 研究開発の成果

(3)-1 Co₃S₂/ZIF-8 複合触媒による還元反応

Co₃S₂/ZIF-8 複合触媒の調製は、Co₃S₂ クラスタ-錯体が水に難溶なことを利用して、物

理吸着法で合成した。調整法を以下に示す。 Co_3S_2 クラスター錯体 ($[(\text{Cp}'\text{Co})_3\text{S}_2](\text{BF}_4)$) と、水に不溶な ZIF-8 とアセトニトリル中で混合した。超音波を 30 分間照射後、アセトニトリルを除去・乾燥して、 $\text{Co}_3\text{S}_2/\text{ZIF-8}$ 複合触媒を灰色粉末として得た。

続いて、 $\text{Co}_3\text{S}_2/\text{ZIF-8}$ 複合触媒の CO_2 還元能を調べるため、水中での電気化学的な CO_2 還元反応を行った。調製した複合触媒は水に不溶であるため、水中に分散して使用し、電子キャリアとしてメチルビオローゲン(MV^{2+})を添加して電解反応を行った。

1 気圧の CO_2 雰囲気下、pH 7.0 の水中で、 MV^{2+} を還元可能な電極電位 $-0.75 \text{ V vs. Ag/AgCl}$ で、電気化学的 CO_2 還元反応を行ったが、触媒電流はほとんど得られず、 CO_2 還元生成物も得られなかった。水中では CO_2 の濃度が足りないと考え、 CO_2 の圧力を上げて同様の反応を行った。その結果、 CO_2 の圧力の増加と共に触媒電流も増加し、 CO_2 圧力 15 気圧でほぼ最大値を示した。生成物を分析したところ、ギ酸が電流効率 70% で生成していることが判った。PCP の効果を確認するため、ZIF-8 の代わりにモレキュラーシーブ、アルミナ、活性炭素を共存させて、同様な二酸化炭素還元反応を行ったところ、反応速度は極端に遅くなり、二酸化炭素還元への添加効果は観察されなかった。この結果、ZIF-8 近傍でのみ CO_2 還元の加速効果があることが判り、 CO_2 還元による含酸素化合物の生成に対して、分子触媒と PCP の複合化の効果があることがわかった。

上記の通り、 $\text{Co}_3\text{S}_2/\text{ZIF-8}$ 複合触媒を用いると、15 気圧以上の CO_2 下で水中で CO_2 還元反応が進行し、ギ酸を $\eta = 70\%$ で与えたが、目標値である選択率 80% には至らなかった。 CO_2 の圧力依存性の結果を考えると、 CO_2 の濃度が未だならず、また水 100% ではプロトンの濃度も高く、現状の PCP 複合触媒でも最適な反応場を与えていない可能性が考えられる。そこで、 CO_2 のアセトニトリルへの溶解度が水の約 10 倍であることを考慮して、 CO_2 15 気圧下でアセトニトリルを水に添加して CO_2 還元反応を試みた。

その結果、アセトニトリル濃度が 90% までは、ギ酸の生成量は約 70% で変化はなかったが、90% を超えたあたりからギ酸の生成量が向上し、アセトニトリル濃度 95% ではギ酸の生成の選択率 95% を達成した。アセトニトリル 100% になるとギ酸の生成量は低下したが、代わりにシュウ酸の生成が確認された。100% アセトニトリル中、1 気圧 CO_2 下での電解反応では、シュウ酸のみが生成したが、加圧下ではシュウ酸の選択的な生成は確認できなかった。本分子触媒を用いた反応でのシュウ酸生成には、厳密な脱水条件が必要であるが、 CO_2 加圧下での反応では、 CO_2 ボンベの中に含まれる水分を除去することが難しいため、選択的なシュウ酸生成は達成できなかった。

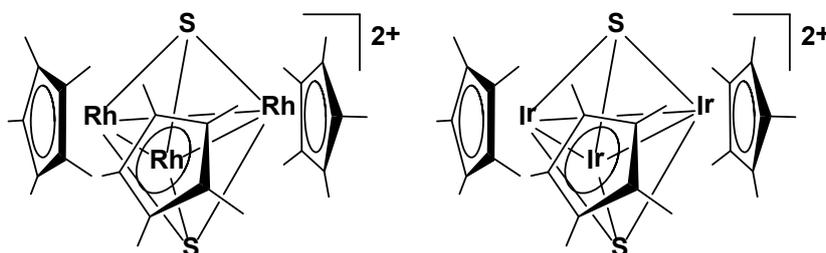
本反応での ZIF-8 の効果については、電流効率の向上にはほとんど反映されておらず、 CO_2 還元生成物の選択性の向上にはほとんど寄与していない。ところが、電流密度は約 1.5 倍に増大することが判った。電流密度は反応速度に比例することから、系中の CO_2 の濃度が ZIF-8 の存在により増加したために反応速度が上昇したと考えられる。以上のことより、この系では PCP(ZIF-8) は CO_2 濃縮に貢献していると考えられる。表 III.2.2.2-2 に本系における実験結果をまとめた。

表Ⅲ.2.2.2-2 CO₂ 15atm 下における Co₃S₂/ZIF-8 複合触媒を用いた CO₂ 還元反応のアセトニトリルの効果

アセトニトリル濃度	ZIF-8	電気量 / C	電流密度 / mA/cm ²	電流効率 / %	
				HCOOH	(COOH) ₂
100%	×	45	0.20	85	11
	○	51	0.24	86	11
95%	×	37	0.17	95	—
	○	55	0.25	95	—

(3)-2 Rh₃S₂/ZIF-8 または Ir₃S₂/ZIF-8 複合触媒による pH7.0 の水中での CO₂ 還元反応

Co₃S₂ と同様な金属三角クラスター構造を有する CO₂ 還元触媒として、図Ⅲ.2.2.2-3 に示す Rh₃S₂ ([[Cp*Rh]₃S₂]²⁺ (Cp* = C₅(CH₃)₅) 及び Ir₃S₂ ([[Cp*Ir]₃S₂]²⁺ を我々はこれまでに報告している。そこで、Co₃S₂ の代わりに Rh₃S₂ 及び Ir₃S₂ クラスターを用いて ZIF-8 との複合系を調製し、CO₂ 還元反応を試みた。MV²⁺ 存在下、CO₂ 15atm、-0.75 V vs. Ag/AgCl で電解反応を行った結果を表Ⅲ.2.2.2-3 に示す。



図Ⅲ.2.2.2-3 [[Cp*Rh]₃S₂]²⁺ (Cp* = C₅(CH₃)₅) 及び Ir₃S₂ ([[Cp*Ir]₃S₂]²⁺ の構造

表Ⅲ.2.2.2-3 CO₂ 15atm 下での M₃S₂/ZIF-8 複合触媒(M = Co, Rh, Ir)を用いた CO₂ 還元反応

Cluster	Conc. / mM	MV ²⁺ / mM	Charge / C	Current / mA	Product / %	
					HCOOH	CO
Co ₃ S ₂	1.0	5.0	141	2.5	70	0 %
Rh ₃ S ₂	0.5	2.5	211	1.0	3	6 %
Ir ₃ S ₂	0.5	2.5	99	0.45	9	12 %

Co₃S₂/ZIF-8 複合触媒に比べて、Rh₃S₂/ZIF-8 及び Ir₃S₂/ZIF-8 系では、ギ酸だけでなく一酸化炭素の生成が確認されたが、全体として CO₂ 還元生成物の収量は大幅に減少した。この結果については次のように考えた。

M₃S₂ クラスタ触媒 (M = Co, Rh, Ir) は、クラスタの価数が 0 価 ([M₃S₂)⁰) となった時に、一つの M-M 結合が開裂して CO₂ と相互作用し触媒反応が進行するため、電極電位が触媒の活性化電位よりも負でないとは基本的には反応は進行しない。M₃S₂/ZIF-8/MV²⁺ 系の場合、電極電位 -0.75 V で還元されて生成した MV⁺ が複合触媒の還元剤として働くため、系中の M₃S₂/ZIF-8 が得られる還元力は、MV^{2+/+} の酸化還元に基づく -0.65 V である。それぞれのクラスタで 0 価が生成する電位は、[Co₃S₂)⁺⁰ が -0.34 V vs. Ag/AgCl、[Rh₃S₂)⁺⁰ では -0.86 V、[Ir₃S₂)⁺⁰ では -0.98 V であることを考慮すると、MV⁺ の還元力で活性化されるクラスタは Co₃S₂ のみと考えられる。しかしながら、本来、MV⁺ の還元力では活性化されないはずの Rh₃S₂ 及び Ir₃S₂ クラスタでも反応は少量ながらも進行している。このことについては次のように考えた。

メチルビオローゲンの 1 電子還元体 MV⁺ は、疎水界面で二量化した後に不均化し、水相に酸化体 (MV²⁺)、油相に 2 電子還元体 (MV⁰) を与えることが知られている (図 III.2.2.2-4)。即ち、水中に疎水場を設ければ、水と疎水場の界面で不均化反応が起こり、水中の MV⁺ の還元力 -0.65 V を、疎水場中では MV⁰ の還元力 -1.1 V に変換して使用可能である。従って、本研究で用いた ZIF-8 の内部空間は疎水性であるため、水中に分散させれば、ZIF-8 と水の界面で不均化が起こり、ZIF-8 の内部には -1.1 V の還元力が蓄積されると考えられる。今回用いた M₃S₂ クラスタは水に難溶であるため、ZIF-8 の表面に吸着していると考えられる。そのため、ZIF-8 の疎水場中から MV⁰ が還元剤として供給されて、[Rh₃S₂)⁰ または [Ir₃S₂)⁰ が生成し、CO₂ を還元したため少量のギ酸、CO を生成したと考えられる。

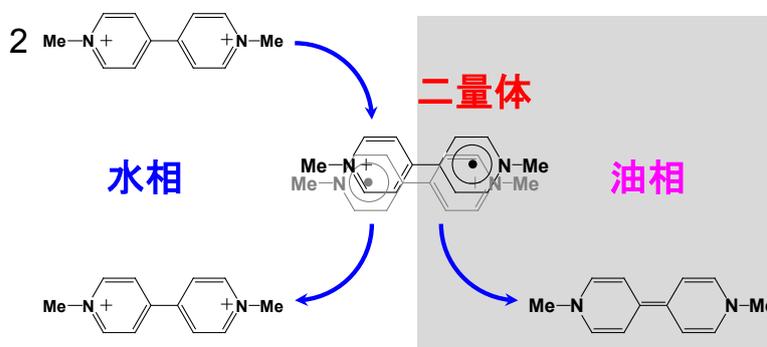
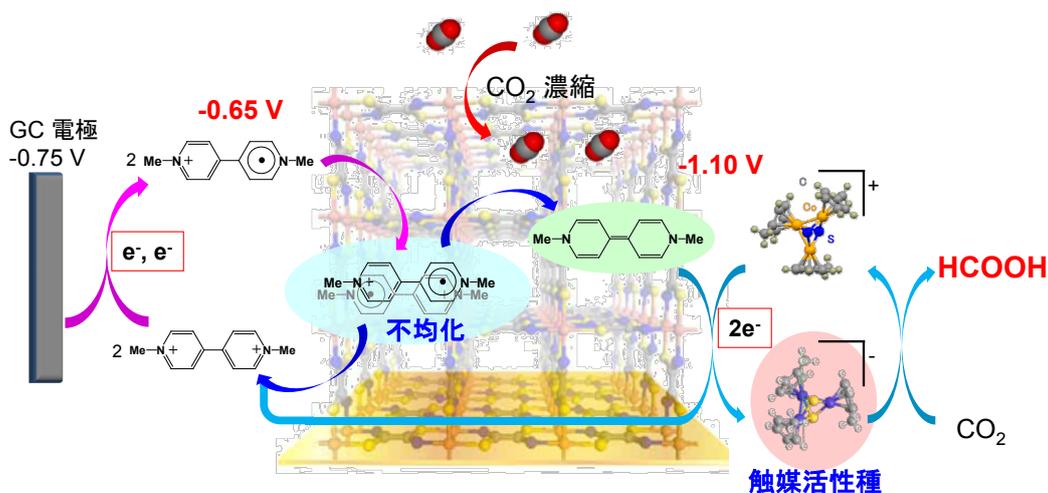


図 III.2.2.2-4 疎水界面でのメチルビオローゲンの不均化反応

以上のことから、本触媒反応の全反応スキームを図 III.2.2.2-5 に示す。GC 電極に -0.75 V の電位をかけると、液中の MV²⁺ が還元されて MV⁺ が生成する。水溶液中の MV⁺ は分散された複合触媒 M₃S₂/ZIF-8 の ZIF-8 表面で二量化・不均化し、ZIF-8 内部に MV⁰ を生成し、もう一分子の MV²⁺ を水中へ放出する。ZIF-8 表面に吸着した M₃S₂ クラスタ触媒は、ZIF-8 内部の MV⁰ により還元されて、CO₂ 還元触媒として機能する。このとき MV⁰ が有する還元力は、-1.1 V であり、電極電位 -0.75 V よりもはるかに負であるため、見かけ上は -0.75 V の還元エネルギーで -1.1 V 以上の還元反応を進行させていることになる。これらのことから、本触媒系における ZIF-8 の役割としては、水中での CO₂ の濃縮だけでなく、メチルビオローゲンの不均化を起こす

ための疎水場を与えることが考えられる。



図Ⅲ.2.2.2-5 $M_3S_2/ZIF-8/MV$ 触媒系の反応機構

(4) 目標の達成状況と成果の意義

個別開発項目	最終目標	研究開発成果	達成度※
PCP 複合触媒の開発	CO_2 からの選択率(電流効率)が80%以上で、シュウ酸、ギ酸等の含酸素化合物を効率的に生産するPCP複合触媒を開発する。	ギ酸の生成において CO_2 の選択率 95%を達成した。	◎

プロジェクトの最終目標である「 CO_2 からの選択率(電流効率)が80%以上で、シュウ酸、ギ酸等の含酸素化合物を効率的に生産する PCP 複合触媒を開発する。」については、 $Co_3S_2/ZIF-8$ 複合触媒系で、 CO_2 15atm、アセトニトリル 95%溶液中で、-0.75 V vs. Ag/AgClでの電解反応により、選択率 95%で達成された。同複合触媒の水中での CO_2 還元反応は、ギ酸の選択率 70%であるが、有機溶媒を含まない水中で CO_2 還元を行った数少ない実施例であり、-1.0 V よりも正側で CO_2 還元を行った唯一の例である。一般に、 CO_2 の水への溶解度は高くなく、pH7.0 の中性の水中では溶けた CO_2 はほとんどが HCO_3^- として存在している。アニオンとなった HCO_3^- の還元は難しく、水中での CO_2 還元反応開発の障壁となっている。 $Co_3S_2/ZIF-8$ の PCP 複合触媒系では、この問題を PCP の一種である ZIF-8 で解決した。

数値目標の達成以上に、学術的、技術的に意義の大きい点は、「-1.0 V よりも正側で CO_2 還元を行った」ことである。図Ⅲ.2.2.2-6 に pH7.0 での CO_2 還元反応の平衡電位、水素発生の平衡電位、 Co_3S_2 クラスターの酸化還元電位、及びメチルビオローゲンの酸化還元電位を示す。

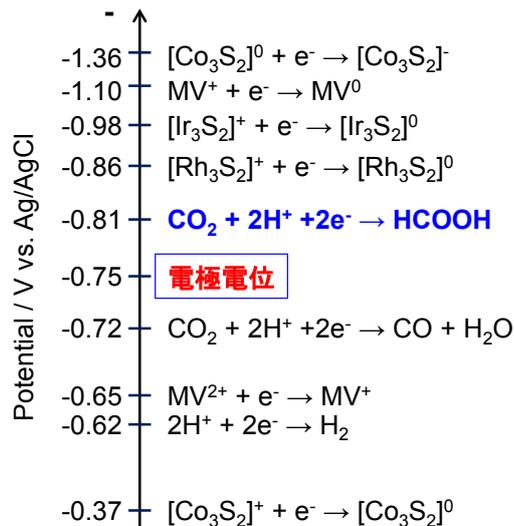


図 III.2.2.2-6 pH7.0 における CO_2 還元、 Co_3S_2 クラスター、MV の酸化還元電位

電極電位は $-0.75 \text{ V vs. Ag/AgCl}$ で反応を行ったため、 MV^{2+} は MV^+ に還元される。水素発生反応や CO 発生反応も熱力学的には起こりうるが、それぞれの反応の触媒が無い条件では、両者を発生させるためには大きな過電圧が必要なため、実際には水素も CO も発生しない。ところが、 $\text{Co}_3\text{S}_2/\text{ZIF-8}$ 複合触媒では、 MV^{2+} 存在下で CO_2 還元生成物としてギ酸が得られた。ギ酸生成の電位は $\text{MV}^{2+/+}$ の電位よりはもとより、電極電位よりも負であるため、熱力学的には進行しない反応である。すなわち、本反応は -1.0 V よりも正側で CO_2 還元を行った唯一の例であるだけでなく、熱力学的な電位よりも正側で CO_2 還元を行った唯一の例である。この反応が進行するために重要な役割を担っているのが、 ZIF-8 とメチルビオローゲンである。メチルビオローゲンの一電子還元体 MV^+ は、水中で疎水場が存在すると、疎水界面で二量化→不均化が起こり、疎水空間に二電子還元体 MV^0 を生成する。 MV^0 の還元力は -1.1 V であるため、 MV と疎水場の組み合わせは、還元エネルギーのアップコンバージョンを行うことが可能と考えられる。本系で用いた ZIF-8 は内部に疎水空間を有しているため、メチルビオローゲンが不均化するための疎水場を水中に与えていると考えられる。

疎水界面でのメチルビオローゲンの不均化反応は、水中に分散させたベシクルなどで報告されているが、構造の不安定かつ物質輸送に障害の大きいベシクルに対し、構造が安定で多孔質の PCP は、電子メディエーター(メチルビオローゲン)の輸送を利用した反応に関しては有利と考えられる。この機構は、従来知られている PCP の CO_2 吸蔵能と共に、 PCP の新しい機能として、本研究で初めて見出された。

上記の知見は、疎水空間を有する PCP を水中で用いれば、メチルビオローゲンの一電子還元体の不均化反応が起こることを示し、これを利用すれば、メチルビオローゲンの第一還元電位 (-0.65 V) を与えれば、 PCP 周りに局所的にメチルビオローゲンの第二還元電位 (-1.1 V) の還元力を生じさせることを示す。従って、見かけ上の反応電位(電極電位)が、 $-0.65 \sim -0.75 \text{ V}$ にも関わらず、 -1.1 V までの反応を起こせる可能性を示している。この結果は、 CO_2 の還元反

応のみならず、その他のどのような溶液中の電気化学的な触媒反応に使用可能と考えられ、学術的・技術的な価値は極めて高く、今後の一般的な応用が期待できる。

(5) 知財と成果の普及

区分 年度	特許出願			論文		その他外部発表		
	国内	外国	PCT 出願	査読 付き	その 他	学 会 発 表・講演	新聞・雑誌 等への掲載	その他
H23FY	0件	0件	0件	0件	0件	1件	0件	0件
H25FY	0件	0件	0件	0件	0件	1件	0件	0件
H26FY	0件	0件	0件	1件	0件	1件	0件	0件

(6) まとめ

- ・PCP と錯体触媒を複合化することで、水中での CO₂ 還元によるギ酸生成反応に成功した（選択率 70%）
- ・含水アセトニトリル系で、CO₂ の加圧下(15 atm)でギ酸生成の選択率 95%を達成した。
- ・本反応は、-1.0 V vs. Ag/AgCl よりも正側の電位 (-0.75 V) で CO₂ 還元反応を行った唯一の例である。
- ・ZIF-8 と水の疎水界面で、メチルビオローゲンの一電子還元体の不均化に由来する還元電位のアップコンバージョンを発見した。本反応の電極電位 (-0.75 V) は、ギ酸生成の平衡電位 (-0.81 V) よりも正側であるため、熱力学的には進行し得ないが、メチルビオローゲンの 1 電子還元体 (-0.65 V) が疎水界面で不均化することにより、PCP 内部の疎水空間にメチルビオローゲンの 2 電子還元体 (-1.1 V) を生ずる。この還元力を用いて、本来反応が進行しない電極電位でも、ギ酸生成が進行していることを発見した。

光または電気化学的な CO₂ 還元反応では、溶媒の効果は極めて大きく、アセトニトリルやアルコール類よりも、DMF や DMA、DMSO などの溶媒の方が効率よくギ酸や CO を生成することが知られている。CO₂ 還元反応にはプロトンが必要であることから、環境にやさしくプロトン源となりうる水中での反応が望ましいが、水中で CO₂ 還元反応を行った例はほとんどない。その原因として、CO₂ の水に対する溶解度が低いこと、水中の CO₂ の大部分が HCO₃⁻ か CO₃²⁻ のようなアニオンの形態を取っており、還元反応に極めて不利であることの 2 点があげられる。そこで本研究では、これらの問題を解決するために、金属錯体触媒と PCP を複合化して、水中に CO₂ 吸収可能な反応場を与え、水中での CO₂ 還元反応を実現することを目的とした。まず、複合触媒の試設計として、数値目標はギ酸の選択率を 80% に設定した。

PCP の一種である ZIF-8 とコバルト三角クラスターを複合化した触媒では、メディエーターとしてメチルビオローゲン存在下、pH7.0 の水中で CO₂ 圧力下(15 atm)、-0.75 V vs. Ag/AgCl での電解反応により、電流効率 70% でのギ酸の生成に成功した。この結果は、水中で CO₂ 還元

を行った数少ない例である。最近では、様々な PCP-錯体複合触媒による CO₂ 還元反応が報告されているが、その全てが有機溶媒中で行ったものであり、本報告が水中で行った唯一の例である。しかしながら、水中での反応では数値目標を達成することができず、アセトニトリルを系中に添加することで、CO₂ 15atm 下でギ酸の選択率 95%を達成することができた。水中での効率が向上しなかった原因は未だ不明であるが、CO₂ の濃縮、物質の輸送等が問題となっている可能性がある。

一方で、還元電位 -0.75 V による CO₂ の還元反応は、現在、世界で唯一の -1.0 V よりも正側の電位のギ酸生成反応である。pH7.0 でのギ酸生成の平衡電位は -0.81 V であり、電極電位よりも負側であるため、本来はこの電極電位でのギ酸の生成は熱的に起こりえない。本研究で、この反応が進行している原因が、ZIF-8 と水の疎水界面でのメチルビオローゲン 1 電子還元体の不均化反応にあることを発見した。不均化反応とは、2 分子の 1 電子還元されたメチルビオローゲンが、疎水界面上で 2 量化し、酸化体と 2 電子還元体を生成する反応である。不均化の結果、系中の -0.65 V の還元力を有するメチルビオローゲンの還元体が、-1.1 V の還元力を有する 2 電子還元体に変換されて PCP 内部に蓄積される。そのため、電極電位が -0.75 V にもかかわらず、PCP 近傍では -1.1 V の反応が進行することが示唆された。

上記のメチルビオローゲンの不均化の機構は、ビシクルの界面で報告されているが、物質輸送に不利なビシクル界面では化学反応には応用されていない。今回、疎水界面として、リジッドな骨格を有する PCP を用いることで、物質の輸送とメチルビオローゲンの不均化を両立し、化学反応に応用することが可能となったと考えられる。

疎水性の PCP 界面でのメチルビオローゲンの不均化反応は、CO₂ 還元だけでなく、一般化が可能で、-1.0 V vs Ag/AgCl までの還元電位で起こりうる、全ての電解反応で応用可能と考えられる。従って、本研究の成果としては、「疎水性の PCP 界面でのメチルビオローゲンの不均化反応」の発見は数値目標の達成以上に、学術的・技術的な意義が大きい。

今後は、この機構を利用して実用可能で有用な反応系を構築していくことが必要と考えられる。

Ⅲ.2.2.3 PCP 複合触媒の開発 <昭栄化学工業株式会社、京都大学>

(1) 本研究開発の背景と目的

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合成技術を応用して、PCP に分子性触媒やナノ粒子などを複合化した 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、さらには設計した PCP 複合触媒を用いて、分離した CO₂ 等の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ことを目的としている。

PCP 複合触媒の製造方法として、われわれは気相法による粒子製造技術である「噴霧反応法」を提案する。昭栄化学工業は、噴霧反応法によって金属粒子や多成分系酸化物粒子、複合粒子などを量産する技術を有しており、そこ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。

まず初めに、噴霧反応法を用いて、高い CO₂ 貯蔵能力を有する PCP と触媒を効率よく高分散状態で複合化することを目標とした。噴霧反応法は原料となる金属化合物の溶液あるいは懸濁液を噴霧して微細な液滴とし、それを高温の雰囲気中に供給して瞬間的な溶媒の蒸発と金属化合物の反応によって粒子を合成する方法であり、出発原料の溶液組成を保った単分散な粒子を瞬時に得ることが可能である。この方法を PCP 複合触媒の合成に応用することで、目的とする PCP 複合粒子を瞬時に合成できると考え検討を進めた。一般的に錯形成反応による PCP の形成には、ある程度長い反応時間を要すると考えられており、これまでにはほぼ例がない噴霧反応法による PCP 合成は難易度がかかなり高いが、同時に新規でかつ効率的な製造方法として PCP 複合触媒の合成の画期的な方法になると考えた。また、瞬間的な反応であるので、熱力学的に不安定な空孔サイズの大きい PCP が効率良く合成できるなどの特徴も期待され、検討を進めた。

(2) 研究開発の目標

平成 23 年度の間目標の達成を踏まえ、本研究開発の最終目標(平成 25 年度)を以下に設定した。

- ① CO₂ からの選択率 80%以上で、シュウ酸、ギ酸等の含酸素化合物を効率的に合成する PCP 複合触媒を開発する。
- ② CO₂ を原料とした化学プロセスに関する試設計を行う。

上記目標に対する研究開発スケジュールを表Ⅲ.2.2.3-1 に示す。平成 23 年度までの前半は、PCP 複合触媒の特異性・優位性を実証することを課題とし、反応条件の最適化、候補 PCP の選択を行った。また、平成 24 年度以降は実用化をめざし、PCP 複合触媒の工業的製法を確立することを課題に検討を進めた。

表 III.2.2.3-1 研究開発スケジュール

検討項目	21年度	22年度	23年度	24年度	25年度
①噴霧反応法を用いたPCPの合成	小型試作機的设计	試作機の改良 スケールアップ要件の解明		スケールアップ検討	
②触媒反応に最適なPCPの選定	基礎検討・問題点の抽出	試作および評価		スケールアップ検討	
③噴霧反応法を用いたPCP複合触媒の合成			試作および評価	スケールアップ検討	性能向上試験
④CO ₂ 還元試設計プロセス候補の抽出			市場・動向調査	試作および評価	

(3) 研究開発成果

(3)-1 噴霧反応法を用いた PCP の合成

噴霧反応による PCP 複合触媒の合成に先立ち、PCP のみの噴霧反応による作成条件を検討した。(1)でも述べたが、噴霧反応は溶媒の蒸発と自己組織化による複合粒子生成の瞬間的な反応であり、PCP の合成条件を最適化できれば、触媒と PCP が均一に分散した複合体を合成する方法になり得ると考えた。初めに、PCP 合成に特化した小型の試作機的设计・開発を行い、PCP の生成メカニズムを考慮し、錯形成反応が瞬間的に起こる条件を探した。検討を重ねた結果、原料溶液の調製条件と噴霧した霧の加熱条件を適切に制御することにより噴霧反応による PCP の合成条件を見出した。

噴霧反応法による PCP 生成の可能性の検証にあたっては、既存の PCP の耐熱性や耐溶媒性、CO₂ の吸着性等の物性を調査して、PCP SC-1 と SC-2 の 2 種の PCP にて検証した。噴霧反応法によって作成したサンプルは SEM によりその形状を確認し、また、X 線回折測定や FT-IR の測定から構造が従来の水熱合成法と同じであることを確認した。また、ガス吸脱着の測定を実施し、空孔の存在を確認した。その後も種々の PCP の合成に取り組み、噴霧反応法による種々の PCP の合成に成功した。一例として噴霧反応法で作成した PCP SC-1 の CO₂ 吸脱着測定結果を図 III.2.2.3-1 に示す。

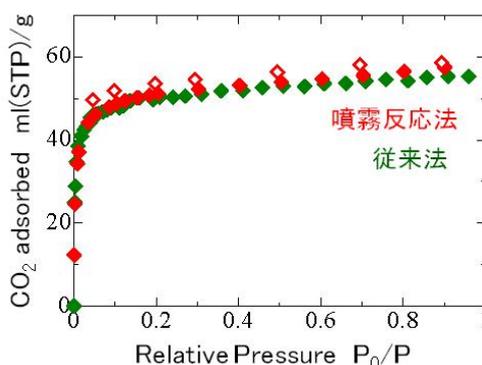


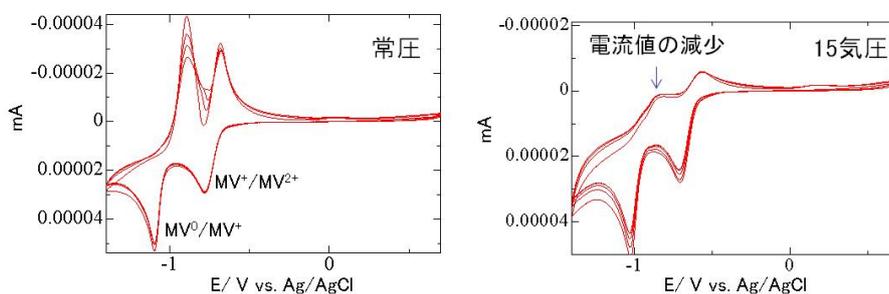
図 III.2.2.3-1 PCP SC-1 の 195K での CO₂ 吸脱着測定結果

PCP SC-1 は従来の水熱合成法と同様に反応溶媒に有機溶媒を用いて合成したが、次に工業化、スケールアップを視野に入れて、水溶液からのPCP合成に取り組んだ。反応溶媒を水にすることで、コストダウンにつながり、さらには量産化時の初期設備投資にかかる費用も有機溶媒を用いる場合に比べて大幅に減らすことが可能である。水溶液より合成したPCP SC-2 は数 μm の球状粒子であることが分かった。また、X線回折とFT-IRの結果から、従来の水熱合成法と同様の回折パターン、ピークパターンを示していることが確認できた。さらにガス吸脱着測定結果より空孔の存在を確認し、水溶媒を用いてもPCPの生成が確認できた。噴霧反応法で得られたPCPでは吸着量が従来法よりも少ない値であったが、反応条件を最適化することで、吸着量の増加は見込めると考える。以上の結果から、実用化の際に有利な水溶媒を用いた噴霧反応法によるPCPの合成に成功し、簡便に大量合成が可能な新たな手法を見出した。また、スケールアップ検討を始めていくと、多くのPCPに関して噴霧反応に必要な温度が 250°C 以下であったため、汎用機器を用いることで、中量試作が可能であることが分かり、一時間以内に数gのサンプルを回収可能になり、試作の効率が上がった。

(3)-2 噴霧反応法を用いたPCP複合触媒の合成

はじめに、 CO_2 を原料とした含酸素化合物の合成を目指してモデル反応を検討した。 CO_2 の変換反応触媒としては分子触媒が既知である。このため、触媒反応の候補となるPCPを抽出し、分子触媒との複合化を行った。はじめに含浸法でPCP SC-3と分子触媒Aを複合化したサンプルにおいて、 CO_2 の変換効率が非常に高い活性を示し、またマイルドな条件での反応が進行する非常に興味深い触媒特性を示した。次に、噴霧反応法にてPCP SC-3-A複合体の合成を行い、FT-IR、SEM/EDX分析から複合体が得られていることを確認した。

得られたサンプルの電気化学特性を測定したところ、常圧測定にてメディエーターの二つの酸化還元波を観測した。次に高圧条件にて酸化還元のサイクルを回すと酸化波のピークの減少が見られた。酸化波のピークの減少がみられるにも関わらず可逆的な還元ピークを観測していることから、系内にてメディエーターが還元され、得た電子を電気化学的な酸化の前に渡していることが分かり、メディエーターを介した反応が起こっていることが確認できた(図Ⅲ.2.2.3-2)。



測定条件

触媒 1mM メディエーター 5mM NaPO_4 0.1M buffer solution

Working Electrode ; GC, Reference Electrode ; Ag/AgCl, Counter Electrode ; Pt wire

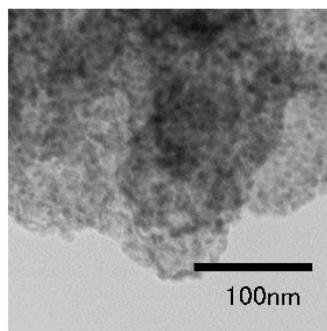
CO_2 測定時の圧力 ; 常圧, 5 気圧, 10 気圧, 15 気圧

図Ⅲ.2.2.3-2 PCP SC-3-A のサイクリックボルタモグラムと測定条件

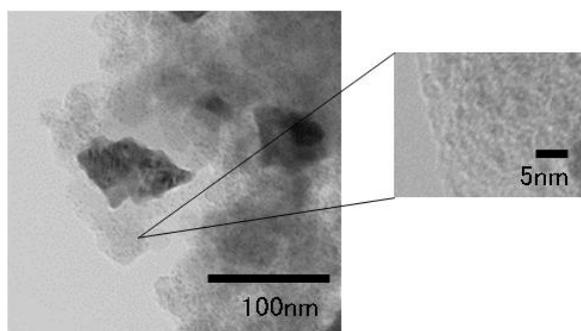
また、生成物を分析するとギ酸、シュウ酸の存在が確認できた。しかしながら、この PCP SC-3-A 複合体で生成するギ酸やシュウ酸は、基幹化学品としての需要が少なく、残念ながら実用化に向いていないため、他の触媒反応を調査した。

CO₂ から有用な含酸素化合物を合成する触媒としては、分子触媒のほかにも活性金属種も知られているので、活性金属種の可能性を調査した。CO₂ 変換の技術動向調査を実施した結果、これまでの検討例として 1900-1999 年の地球環境産業技術機構の CO₂ 固定化プロジェクトが挙げられ、このプロジェクトによって三井化学がメタノール合成プラントを建設していることが周知であり、関連特許も多く出願されていることが分かった。そこで使用されているメタノール合成用の触媒は金属と酸化物の二成分型もしくは多成分型のものである。我々は PCP 複合触媒を用いれば、CO₂ の濃縮分離と触媒反応に有利に働くと考えた。また、PCP 複合触媒の先行研究としてはドイツの R. A. Fisher の MOF-5 と金属や酸化物の複合化の例がある。以上より、我々は、CO₂ を原料とした化学プロセスの試設計として、PCP 複合触媒を用いて CO₂ からのメタノール合成に取り組むことを決定した。

PCP/ナノ粒子複合体の工業的な製法として、PCP とナノ金属粒子を一度に合成する方法の検討を行った。京都大学の先行研究の例や、貴金属 Pd が安定して合成できることもあり、合成のターゲットを PCP SC-4-Pd に絞って、まず噴霧反応法、さらにはマイクロ波合成法にて合成手法の検討を行った。マイクロ波合成法も従来の水熱合成では数時間必要としていた合成時間を短縮することが可能であり、さらにはナノ粒子の合成方法としても知られているため、PCP/ナノ粒子複合体の工業的な製法となる可能性があると考えて検討を進めた。噴霧反応法、マイクロ波合成法どちらの方法からも、PCP SC-4-Pd 複合体を得ることができた。噴霧反応法により得られた PCP SC-4-Pd の TEM 像を図Ⅲ.2.2.3-3 に、マイクロ波合成法を用いた PCP SC-4-Pd の TEM 像を図Ⅲ.2.2.3-4 に示す。



図Ⅲ.2.2.3-3 噴霧反応法により得られた PCP SC-4-Pd の TEM 像



図Ⅲ.2.2.3-4 マイクロ波合成法により得られた PCP SC-4-Pd の TEM 像

X線回折の結果より、噴霧反応法、マイクロ波合成法どちらも PCP SC-4 と Pd の存在を確認することができた。図Ⅲ.2.2.3-3, 4 の TEM 像の結果から、噴霧反応法で得られた PCP SC-4-Pd は Pd 粒子が均一に分散しているのに対して、マイクロ波合成法により得られた PCP SC-4-Pd は数十 nm サイズの Pd が局在化しており、目的としている触媒を高分散状態で保持することは達成できなかった。おそらく、マイクロ波反応において、金属塩の還元が PCP の生成より速い速度で起こったため、あるいはナノ粒子の生成において十分な分散剤が存在していなかったために、Pd が局在化して大きな粒子となったと思われる。以上の結果から、我々は PCP 複合触媒を合成するにあたっては、噴霧反応法による合成を主に検討を進めることを決定した。

まず初めに触媒として最適な PCP 複合体の選定を熱分解法にて行った。具体的には、種々の PCP/ナノ粒子複合触媒を合成し、得られたサンプルをガス流通系の反応装置にて $\text{CO}_2/\text{CO}/\text{H}_2/\text{He}$ もしくは $\text{CO}_2/\text{H}_2/\text{He}$ を反応ガスとして生成物の分析を行い、最適な PCP 複合触媒候補を決定した(詳細はⅢ.2.2.1 章に記載)。初めに過去の検討例を参考にし、 $\text{CO}_2/\text{CO}/\text{H}_2/\text{He}$ の系で実施したところ、数種類の PCP 複合触媒が高活性を示すことが分かった。しかしながら、複雑系の合成ガスでは、 CO_2 の効果か CO の効果であるかが明確ではない。したがって、 CO_2 の反応性をわかりやすくするために、反応ガスから CO を取り除いて評価を進めた。

複合化するのに最適な PCP の選定を行い、PCP SC-5 と Cu を複合化したサンプルが高活性を示すことが分かった。この PCP SC-5-Cu 複合体を噴霧反応法にて作製し、TEM 像から、得られたサンプルは数 nm の PCP 粒子と Cu 粒子が複合化していることがわかった。X線回折の結果、噴霧反応法で得られた PCP のピークは水熱合成により得られたサンプルに比べてブロードニングを起こしていたが、これは PCP の一次粒子が小さい影響であると考えられる。また、ガス吸脱着測定の結果から細孔の存在は確認できており、得られたサンプルが多孔性の物質であることが分かった。

さらには二成分型触媒と PCP との複合化を実施した。先述しているが、三井化学はメタノール合成触媒を二成分型もしくは多成分型のものとしているため、Cu 単独の触媒より高活性が期待できる。まず、初めに噴霧熱分解法にて複合化する二成分型触媒を合成し、得られたサンプルの物性評価を行った。X線回折と TEM-EDX の測定を行って 2 種類の酸化物が均一に分散した複合体になっていることが確認された。

この噴霧熱分解で作製した酸化物触媒(以後触媒 B とする)と PCP の原料を混合し、噴霧反応で PCP を組み上げた。得られた複合体サンプルの TEM 像から、触媒 B と PCP が均一に存在していることを確認した。また、X線回折の結果からは、PCP と触媒 B 両方のピークが得られたことより、複合触媒の合成を確認した。以上のことから、PCP と触媒が複合化された粒子を得たことを確認した。この二成分型触媒について、触媒と PCP 原料のモル比を変えて数種類の複合体を合成し、組成の最適化を行った。触媒能評価測定に関しては(3)-3 に記載する。

(3)-3 触媒能評価測定

得られたサンプルの触媒活性の測定を行った。反応ガスは $\text{CO}_2/\text{H}_2/\text{He}$ で実施した。まず初めに噴霧反応法で作製した PCP SC-5-Cu の測定を行ったところ、熱分解法にて作成した複合触媒

PCP SC-5-Cu を上回る活性を示した(図 III.2.2.3-5)。PCP-SC-5'-Cu は PCP SC-5 の配位子の官能基違いのものである。

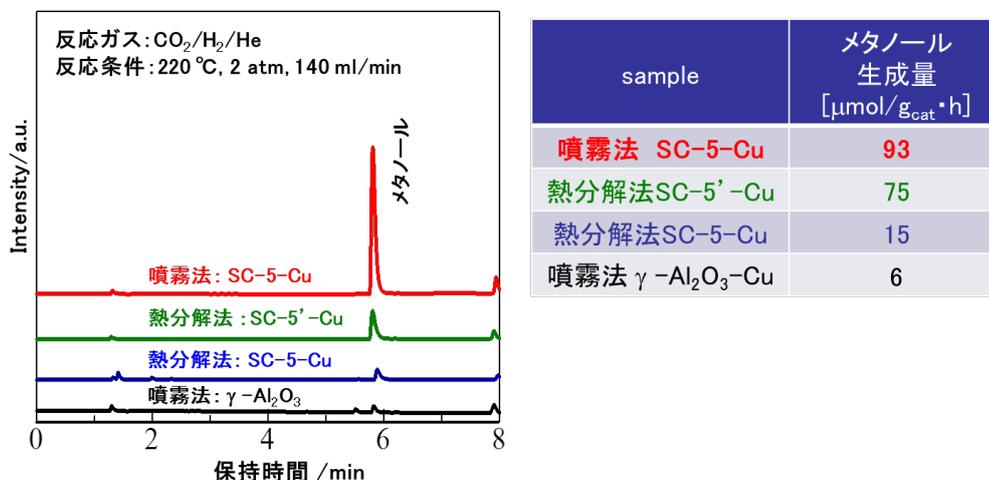


図 III.2.2.3-5 PCP SC-5-Cu の触媒能測定結果

噴霧反応法で作製したPCP SC-5-Cuが高活性となった理由を考察するために、サンプルの断面観察を行って微細構造の解析を実施したところ、Cu は数 nm の粒子で存在することが確認された。Cu ナノ粒子の粒子サイズが熱分解法により合成したサンプルよりも小さいことで、触媒活性が高い可能性が考えられる。また、一部に 100nm 程度の Cu 粒子も観測されており、還元処理時に Cu のシンタリングが起こったと思われる。これより、還元条件の見直しが必要であることがわかり、改善すればさらなる触媒活性の向上が期待できる。

次に、二成分型の複合触媒 PCP SC-6-B の触媒活性測定を行った。触媒能評価結果を図 III.2.2.3-6 に示す。

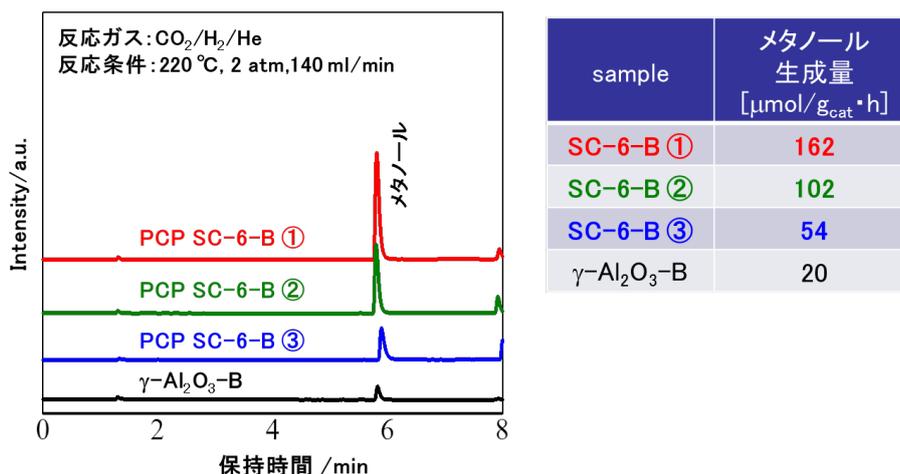


図 III.2.2.3-6 PCP SC-6-B の触媒能測定結果

①-③のサンプルはいずれも噴霧反応法で作製したサンプルで、触媒の組成比を変えたものである。また、PCP SC-6 の効果を確認するため、 $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ と触媒 B を複合化したサンプルを測定し

て比較を行った。

γ - Al_2O_3 との複合化サンプルよりもPCP SC-6と複合化したサンプルのメタノール生成量が多くっており、PCP の存在が触媒活性を上げていると思われる。PCP-6-B 複合触媒はいずれも活性を示し、なかでもCuとZnをほぼ1:1でPCP SC-6と複合化したサンプル①が最も高い活性を示した。これは、先ほどのPCP SC-5-Cu 複合触媒を上回る値であった。

次に先ほどと同様に噴霧反応法で作成した粉末の断面観察を実施した結果、電子線回折とEDX から触媒二成分が1つの粒子として存在している部分と一成分のみで粒子を形成している部分を確認した。さらには、PCP SC-6の一次粒子が数nmサイズで網目状になっていることが確認された。この結果から、噴霧熱分解で作製した触媒粒子Bをより均一に二成分粒子として合成し、次のステップのPCPとの複合化反応でも、触媒のすべてを二成分型の状態でPCPに保持できれば、さらなる活性向上が望まれる。

(3)-4 まとめ

以上、検討により以下のことを達成した。

1. 安価で大量合成が可能な気相法(噴霧反応法)によるPCPの合成に世界で初めて成功した。
2. 分子触媒や金属ナノ粒子、酸化物が均質に分散したPCP複合触媒粉末の合成に成功した。
3. CO_2 を原料にした化学プロセスに関する試設計として、噴霧反応法により CO_2 からメタノールを合成する新たな触媒を作製し、既存の触媒と比較しても高いメタノール生成量を示すことを確認した。

(4) 目標の達成度と成果の意義

最終目標の達成度を表Ⅲ.2.2.3-2にまとめる。

表Ⅲ.2.2.3-2 最終目標の達成度

最終目標	成果	達成度
① CO_2 からの選択率80%以上で、含酸素化合物を効率的に合成するPCP複合触媒の開発	PCP/分子触媒複合体において電流効率95%を達成(ギ酸生成)	◎
② CO_2 を原料にした化学プロセスに関する試設計の実施	PCP SC-6とBを複合化することで世界最高性能のPCP複合触媒を見出した	◎

◎大幅達成、○達成、△達成見込み、×未達

最終目標①については、PCPと分子触媒の複合体において目標を達成しており、複合化の効果が検証された(詳細はⅢ.2.2.2章に記載)。最終目標②については、反応条件を最適化した噴霧反応法によって調製したPCPとナノ粒子との複合体が高性能な触媒活性を有することを確認した。PCP複合触媒の合成法として噴霧反応法が有効な手法であることが確認でき、この成果に関して製法特許を出願し、学会での発表を行った。

(5) 知的財産権、成果の普及

噴霧反応法による PCP および PCP 複合触媒の合成は、現時点での特許等を調査する限り前例のない新規な技術であり、製法に関する特許を 3 件出願した。

合成法に関する技術については、将来的な実用化における昭栄化学工業の独自性を確保するために、論文等での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おり、論文に関しては現在執筆中である。また、MOF2014 にて学会発表を行った。以下に出願特許と学会発表の件数を示す。

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		
	国内	外国	PCT ※ 出願	査読 付き	その 他	学 会 発 表・講演	新 聞・雑 誌等への 掲載	そ の 他
H21FY	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件
H22FY	1 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件
H23FY	3 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件
H24FY	1 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件
H25FY	1 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件
H26FY	0 件	0 件	0 件	0 件	0 件	1 件	0 件	0 件

(※Patent Cooperation Treaty :特許協力条約)

IV. 実用化に向けての見通し及び取り組みについて

本事業における実用化の定義は以下とする。

「当該研究開発で開発した『PCP/MOFを用いた分離技術』、または『PCP/MOFと触媒の複合化技術』を利用した実証レベルの技術を確立することを言う。」

IV.1 CO₂ガスの分離・精製材料基盤技術開発

IV.1.1 メタン精製用 PCP の開発 <株式会社クラレ>

(1) 実用化に向けた課題

実用化に向けた残る課題として、ペレット量産プロセスの確立が挙げられる。今後は、PCPペレットのスケールアップ試作を実施し、量産時の問題点抽出と、その結果に基づいた量産プロセスの具体化を行う。また、既存技術に対するPCPの競争力を向上させるためには、さらなる吸着性能向上、耐久性向上、低コスト化が求められる。PCP基本骨格の改良により、COODIFLEX K-19を凌駕するPCPが得られるかについては、引き続き検討を行う予定である。

(2) 事業化の可能性

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。

市場調査の結果、バイオガスの最大市場はドイツであり（欧州の70%程度）、政府援助（FIT）があれば今後もバイオガス生産量は伸びると予想されている。バイオガス精製におけるPSAシェアは設置台数ベースで30%程度であり、それぞれメリット・デメリットがあり、設置環境により棲み分けがなされていると考えられる。

バイオガス精製市場は、今後もドイツを中心に成長を続けると予想されるが、新規事業としてみた場合、その市場規模は決して大きくない。そこで、事業立上げ時の生産量を確保する観点からも、バイオガス精製用途以外への展開可能性について検討している。一部の潜在ユーザーに対してはサンプルワークを開始した。

IV.1.2 CO₂/エチレン分離用 PCP 及び構造異性体混合物からの特定構造炭化水素分離精製用

PCP の開発 <昭和電工株式会社>

(1) 成果の実用化の見通し

実用化の定義:当該研究開発で開発した『PCP/MOF を用いた分離技術』または『PCP/MOF と触媒の複合化技術』を利用した実証レベルの技術を確立することをいう。

(1)-1 CO₂/エチレン分離用 PCP の開発

本テーマの製品イメージは、本プロジェクトで開発した候補PCPを使用したCO₂/エチレン用分離材およびこれを用いたPCP-PSA分離プロセスである。この分離材およびPCP-PSAプロセスを当社の酸化反応プロセスにおける循環ガスからのCO₂除去プロセスの代替プロセスとして適用することを計画しており、既存プロセス(熱炭酸カリ法)と比較してエネルギーコストが少ないという優位性があり、プロセス代替により省エネ効果が期待される。

検討の結果、PCP-PSAプロセスは、既存の熱炭酸カリ法プロセスと同程度のCO₂分離回収コストレベルになった。実用化までに、小型検証装置によるデータ採取とプロセス詳細設計、大型実証試験装置の設計、建設、実証試験(複数年の連続試験を含む)が不可欠であり、これらに相応の期間を要すると想定している。これらパイロット設備の設置と検証実験と合わせ、低コスト化の検討を行い、実用化を目指す。

(1)-2 構造異性体混合物からの特定構造炭化水素分離精製用PCPの開発

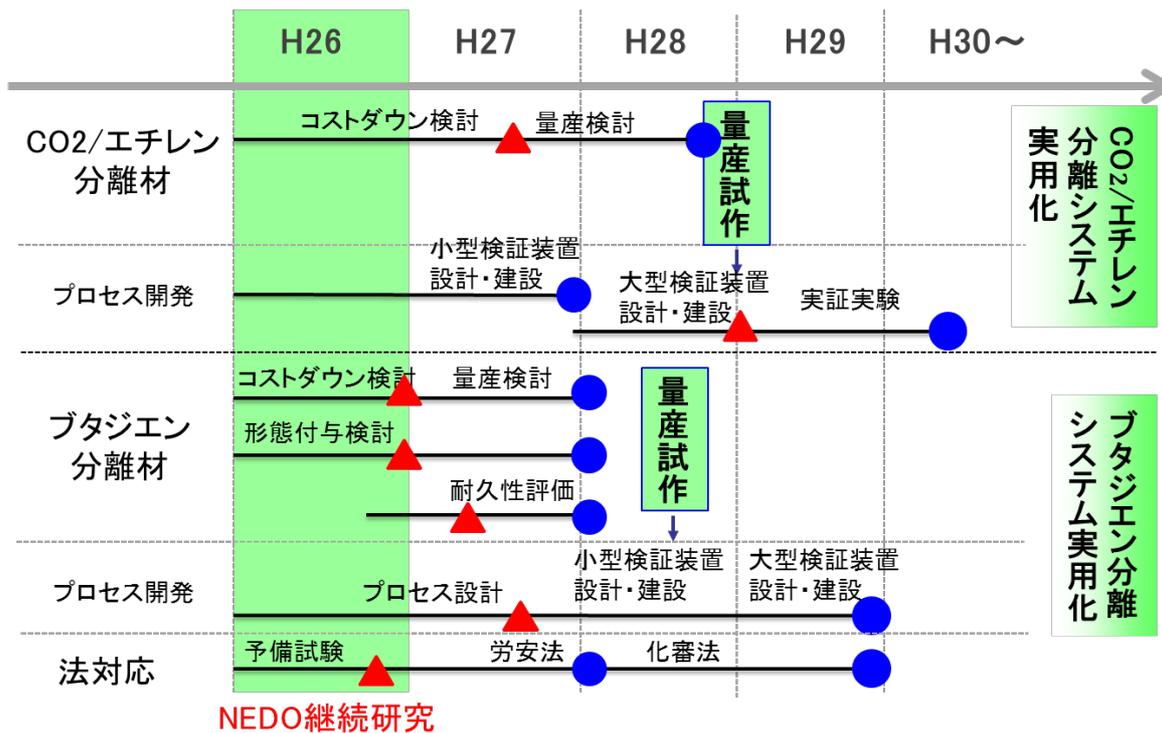
本テーマの製品イメージは、本プロジェクトで開発されたブタジエン分離用PCPおよびその形態付与に関する技術あるいはブタジエン分離材およびこれを用いたPCP-PSA法プロセスである。PCPを用いた国内外の抽出蒸留プラントへの展開、非ナフサ分解由来のブタジエン製造プロセスにおけるブタジエン分離への応用が考えられる。競合技術である抽出蒸留に対する優位性は、省エネルギーであることと比較的小規模から導入可能であることである。抽出蒸留法からの代替を想定した場合、ブタジエンの分離精製に要するエネルギーの削減が期待される。

実用化に向けて、より実プロセスに近い条件での評価が今後の課題である。

(2) 実用化に向けた具体的な取り組み

本プロジェクト終了後、継続研究を実施中である。継続研究の中で、先に述べた課題の検討を実施している。

図IV.1.2-1に今後の開発スケジュールを示す。今後は、実用化に向けて分離・精製プロセスを検討し、ブタジエン濃縮プロセスを設計する。コストダウン検討と量産検討を実施した後に量産試作を行い、小型および大型検証装置による実証実験を行い実用化を目指す。



図IV.1.2-1 分離精製用 PCP 開発スケジュール

(3) 波及効果

現在、1,3-ブタジエンの製造法の多くは、ナフサ分解留分からブタジエンを抽出する、エネルギー多消費型プロセスである抽出蒸留法が用いられている。一方で PCP-PSA 法による分離プロセスは、省エネルギー型のプロセスであるメリットが期待される。したがって、PCP を用いたブタジエン分離精製プロセスが実用化されれば、波及効果として、今後新設されるナフサクラッカーとの組合せ、現在稼働中の抽出蒸留法プロセスの更新等置換え等、全世界のブタジエン精製プロセスへの展開が期待される。

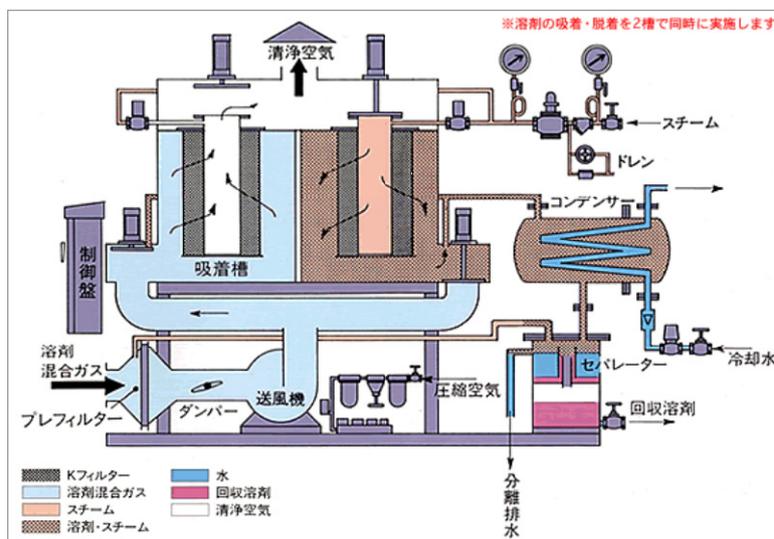
IV.1.3 PCP による微量ガス分離材の開発 <東洋紡株式会社>

(1) 実用化の見通し

(1)-1 東洋紡(株)のビジネス

東洋紡(株)は、世界で初めて活性炭素繊維(ACF)の工業化に成功し、活性炭素繊維(ACF)の製造・販売だけでなく、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いる。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。

東洋紡(株)のVOC吸着回収装置の概略図を図IV.1.3-1に示す。活性炭素繊維(ACF)を吸着材として使用した吸着槽が2槽あり、一方の吸着槽でVOCを吸着除去すると同時に、もう一方の吸着槽では、吸着したVOCを水蒸気処理(スチーム処理)により脱離させ、VOCを回収するという装置である。2槽で吸着と脱離を交互に繰り返すことで効率的にVOCを吸着回収することができ、また、水蒸気処理で吸着したVOCを脱離させるので、エネルギーロスが少ないことが特徴である。



図IV.1.3-1 VOC吸着回収装置の概略図

VOC吸着回収装置は化学品等の製造プロセスから排出される副生ガスからの溶剤回収を目的としているが、化学品等の製造プロセスによってはそれら副生ガスに微量成分としてアルデヒド類が含まれることがある。微量成分としてアルデヒド類を含んだ状態では、溶剤回収をしても、回収溶剤の純度が悪いため、再利用はできない。そのため、多くの副生ガスは回収されず、環境汚染物質として大気に放出される、もしくは、焼却処理によりCO₂として排出されるため、問題となっている。

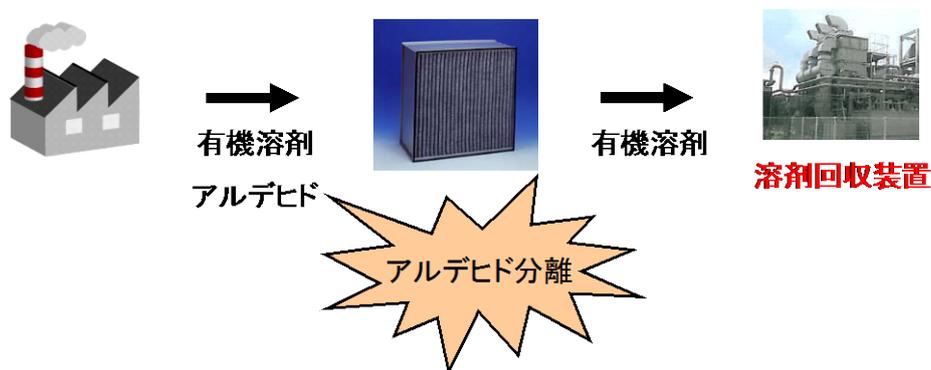
東洋紡(株)ではVOC吸着回収装置の前段にアルデヒド類を分離除去するためのアルデヒド吸着除去装置・システムを設置することにより、微量成分としてアルデヒド類を含んだ副生ガスから問題ない純度の溶剤が回収できることを既に見出している。

(1)-2 実用化イメージ

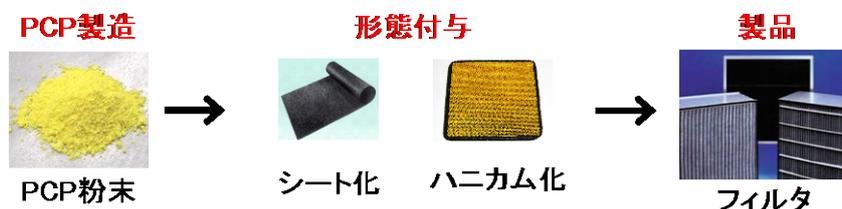
本研究開発の成果の実用化イメージについては、本成果である新規 PCP を用いたアルデヒド吸着除去システムとして、東洋紡(株)保有技術である VOC 吸着回収装置の前段に組み込み、化学品等の製造プロセスから排出される副生ガス処理分野において実用化することを考えている。

アルデヒド吸着除去システムのイメージ図を図IV.1.3-2に示す。PCPを吸着材として使用したフィルタを溶剤回収装置の前段に設置し、化学品等の製造プロセスから排出される副生ガスからアルデヒドを選択的に分離した後に、有機溶剤成分のみを溶剤回収装置に送り込み、溶剤回収することを考えている。

フィルタの製造プロセスを図IV.1.3-3に示す。粉末状の多孔性金属錯体(PCP)に形態付与(シート化、ハニカム化)を行った後、フィルタ化することを考えている。



図IV.1.3-2 アルデヒド吸着除去システム(イメージ)



図IV.1.3-3 製造プロセス

(1)-3 競合技術との比較

アルデヒド類の除去は、活性炭等の多孔質体、それらにアミン等の薬剤を添着させた薬剤添着多孔質体、および、貴金属担持触媒により可能であるが、それらの技術にはいくつかの問題がある。具体的には、多孔質体、薬剤添着多孔質体の中でも、活性炭、薬剤添着炭が比較的低コストであるが、除去容量が十分でないという問題がある。また、貴金属担持触媒は貴金属を使用するため高コストであることと、十分な除去容量を発現させるためには、100℃以上の温度が必要であるという問題がある。これらの中で、比較的低温条件(常温～50℃)において、除去容量とコストのバランス(コストパフォーマンス)に最も優れている薬剤添着炭が最も汎用的に広く用いられている。

本研究開発の成果である TYB-3、および、薬剤添着 TYB-3 は、薬剤添着炭よりもコストパフォーマンスに優れている。特に、薬剤添着 TYB-3 は薬剤添着炭の2倍以上のコストパフォーマンス

である。これらのことから、本研究開発の成果はこれら競合技術に対して十分に優位性があり、シェア向上、および、新市場開拓につながると期待できる。

また、GSC 効果として、薬剤添着炭から PCP に置き換えた際に発生する CO₂ 排出量の大幅な削減が期待できる。

(1)-4 実用化に対する課題と今後の方針

実用化に対する課題、および、今後の方針を表IV.1.3-1 に示す。課題は、法対応、量産化(PCP 製造・形態付与)である。今後の方針について、法対応に関しては、原料、PCP 自身の安全性試験、化審法、安衛法について対応方法を検討していく予定である。量産化に関しては、原料の調達先の確保、PCP 製造・形態付与に関する量産化を検討していく予定である。

表IV.1.3-1 実用化に対する課題、および、今後の方針

実用化に対する課題	今後の方針
法対応	<ul style="list-style-type: none"> ・原料、PCPの安全性試験 ・化審法、安衛法の対応方法の検討
量産化(PCP製造、形態付与)	<ul style="list-style-type: none"> ・原料の調達先確保 ・量産化の検討(PCP製造、形態付与)

(2) 実用化に向けた具体的取り組み

(2)-1 実用化スケジュール

本事業での基盤技術開発終了後(平成 26 年度以降)の実用化スケジュールを表IV.1.3-2 に示す。平成 27～28 年度で実証試験などを行い、平成 29 年度以降の上市を想定している。いずれも東洋紡(株)が主体となり、取り組んでいく予定である。

表IV.1.3-2 実用化スケジュール

検討項目	H26	H27	H28	H29	H30
開発段階 (パイロット設備導入)					
製品化段階 (実証試験など)					
市場出荷段階					

(3) 波及効果

本研究開発にて開発された PCP は、他の除塵、脱臭材料と組み合わせる等のフィルタ設計の変更により脱臭フィルタ分野に適用可能と考えられ、具体的には、工場空調、自動車、空気清浄機等向けの脱臭フィルタ市場への普及が期待できる。

IV.2 回収 CO₂ガスによるグリーンプロセス基盤技術開発／

PCP 複合触媒の開発 <昭栄化学工業株式会社>

(1) 成果の実用化の見通し

本研究開発項目における実用化とは、当該研究開発で開発した「PCP/MOF と触媒の複合化技術」を利用した実証レベルの技術を確立することをいう。昭栄化学工業は分子触媒やナノ粒子などの機能性材料と PCP を複合化し、優れた特性を持つ新規素材の設計・開発に努めてきた。量産化を視野に入れた製造方法を検討した結果、噴霧反応によって触媒を高い分散状態で保持することが可能になり、非常に高活性な複合触媒を作製するのに使用できることが分かった。したがって、本法による PCP 複合触媒の量産化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を有する素材を、世界に先駆けて市場に提供することが可能となる。本研究によって、噴霧反応法で 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、その条件を満たすことで、工業的に確立されているスプレードライ技術を流用できることが分かり、実用化に向けた大きな成果となっている。現在の試験条件では、原料溶液の処理速度約 400ml/h で、約 6g/h の生成速度で PCP が合成できている(収率 99%)。スプレードライヤーを製造するメーカーのカタログ等を見れば、少量の生産機でも 40kg/h の原液処理量を達成でき、大型プラントでは 1200kg/h 程度の処理も可能である。これは、現在の試験結果を単純にスケールアップしても 600g/h および 18kg/h に相当し、合成条件の最適化を図ることで、さらに収量増加が可能である。スプレードライプロセスにおける有機溶媒の使用に関しては、設備をクローズド化して N₂ をリサイクルする技術も確立されており、さらに使用した有機溶媒が回収/再利用できれば、初期の設備投資は高くなるものの、ランニングコストは通常のスプレードライプロセスと大差無くできると考えている。

(2) 実用化に向けた具体的取り組み

実用化に向けた課題とタイムスケジュールを表 IV.2-1 に示す。まず、引き続き PCP 複合触媒の優位性の実証を行う。噴霧反応法で作製したナノ粒子/PCP 複合触媒の断面観察結果から、ナノ粒子が高分散状態で保持できていること、また PCP 一次粒子もナノ粒子として存在していることが確認できている。このナノスケールでの複合化が高活性につながっていると考えられるが、触媒性能と PCP 複合触媒の微細構造との関係に関しては、PCP の有する官能基等の効果を含め、詳細な要因の解明が必要であり、引き続き考察する。そして、本プロジェクトにて開発した CO₂還元触媒の取引先を探し、サンプル試作と評価を繰り返し、2020 年度の実用化を目指す。

また、本プロジェクトで開発されたナノ粒子の複合化技術は、安価で大量合成が可能な方法であり、昭栄化学工業の主な製品である電子部品材料の分野でも新たな機能性ナノ粒子複合体の製造方法になり得る可能性が高い。昭栄化学工業が、いち早く複合素材を提供することで、技術開発が加速されることが期待できる。まずは早急に潜在的な応用分野を調査する必要があり、調査結果をもとにサンプル試作を進める。作製したサンプルは速やかに評価を依頼し、2018 年度を目標にサンプルの原料コスト試算、安全面等を精査して合成条件の最適化を行う。その後複合粒子合成技術のスケールアップ検討を実施し、2020 年度の実用化を

目指す。

表 IV.2-1 プロジェクト終了後のスケジュール

課題 \ 年度	2014	2016	2018	2020
PCP複合触媒の優位性の実証 (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)	 <p>京都大学と研究開発継続中</p>			
CO ₂ 還元触媒				
機能性ナノ粒子複合体の開発				
機能性ナノ粒子複合体合成の スケールアップ検討				

イノベーションプログラム 基本計画

平成21年4月
経済産業省

経済産業省

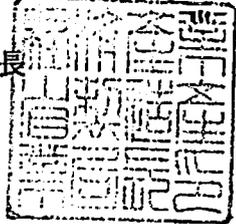
平成 21・03・25 産局第 1 号

平成 2 1 年 4 月 1 日

経済産業省産業技術環境局長



経済産業省製造産業局長



ナノテク・部材イノベーションプログラム基本計画の制定について

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

ナノテク・部材イノベーションプログラム基本計画

1. 目的

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

2. 政策的位置付け

第3期科学技術基本計画（2006年3月閣議決定）

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

「イノベーション25」（2007年6月閣議決定）

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

「経済成長戦略大綱」（2006年7月財政・経済一体改革会議）

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

「新産業創造戦略2005」（2005年6月経済産業省）

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

3. 達成目標

- ・世界に先駆けて、ナノテクノロジーを活用した不連続な技術革新を実現する。

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

4．研究開発内容

[プロジェクト]

．ナノテクノロジーの加速化領域

ナノテクノロジーを活用した不連続な技術革新を加速・促進する。

(1) 異分野異業種融合ナノテクチャレンジ(運営費交付金)

概要

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

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2005年度～2011年度

．情報通信領域

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

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

概要

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

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

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2007年度～2011年度

(2) スピントロニクス不揮発性機能技術プロジェクト(運営費交付金)

概要

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

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2006年度～2010年度

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

概要

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

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

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

1) 基板技術(GaN、AlNバルク結晶作製技術)

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

2) エピ技術(エピタキシャル成膜及び計測評価技術)

- ・低欠陥高品質エピ層を実現する成膜技術及び膜成長過程を計測評価する技術の確立。
- ・高出力かつ高安定動作可能なエピ層の実現
- ・高耐圧超高速な新しいデバイス構造の開発

研究開発期間

2007年度～2011年度

(4) 三次元光デバイス高効率製造技術(運営費交付金)

概要

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

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2006年度～2010年度

(5) 低損失オプティカル新機能部材技術開発*(運営費交付金)(再掲)

概要

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

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2006年度～2010年度

(6) 超フレキシブルディスプレイ部材技術開発*(運営費交付金)(再掲)

概要

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

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術的目標及び達成時期

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

研究開発期間

2006年度～2009年度

(7) 半導体機能性材料の高度評価基盤開発(運営費交付金)(再掲)

概要

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

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術的目標及び達成時期

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

研究開発期間

2009年度～2011年度

・ライフサイエンス・健康・医療領域

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

(1) 次世代DDS型悪性腫瘍治療システムの研究開発事業(運営費交付金)

概要

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

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2006年度～2009年度

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

概要

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

技術目標及び達成時期

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

テムのプロトタイプを開発する。

研究開発期間

2006年度～2010年度

(3) 分子イメージング機器研究開発プロジェクト(運営費交付金)

)生活習慣病超早期診断眼底イメージング機器研究開発プロジェクト

概要

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

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2005年度～2009年度

)悪性腫瘍等治療支援分子イメージング機器研究開発プロジェクト

概要

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

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2005年度～2009年度

)新規悪性腫瘍分子プローブの基盤技術開発

「概要

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

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2008年度～2009年度

・エネルギー・資源・環境領域

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

() エネルギー制約の克服

(1) サステナブルハイパーコンポジット技術の開発 (運営費交付金) (再掲)

概要

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

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2008年度～2012年度

(2) マルチセラミックス膜新断熱材料の開発 (運営費交付金) (再掲)

概要

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

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

2011年度までに、熱貫流率 (熱の伝わりやすさ) が $0.3 \text{ W/m}^2\text{K}$ 以下、壁厚さ 10 mm 程度の超断熱壁材料および熱貫流率が $0.4 \text{ W/m}^2\text{K}$ 以下、光 (可視光) 透過率が 65% 以上 (Low-E ガラス使用)、ヘイズ率が 1% 以下の超断熱窓材料を実現する。

研究開発期間

2007年度～2011年度

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

概要

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

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2006年度～2010年度

(4) 革新的省エネセラミクス製造技術開発(運営費交付金)(再掲)

概要

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

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2009年度～2013年度

(5) 革新的ガラス溶融プロセス技術開発(運営費交付金)(再掲)

概要

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

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2008年度～2012年度

(6) 高温超電導電力ケーブル実証プロジェクト(運営費交付金)(再掲)

概要

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

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

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2007年度～2012年度

(7) 発電プラント用超高純度金属材料の開発(運営費交付金)(再掲)

概要

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

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

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2005年度～2009年度

(8) セラミックリアクター開発(運営費交付金)(再掲)

概要

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

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2005年度～2009年度

() 資源制約の克服

(1) 希少金属代替材料開発プロジェクト(運営費交付金)

概要

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

技術目標及び達成時期

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

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

〔対象元素〕

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

研究開発期間

2007年度～2013年度

（ ）環境制約の克服

（1）グリーン・サステナブルケミカルプロセス基盤技術開発

概要

化学品等の製造プロセスにおけるシンプル化、クリーン化、原材料・資源の多様化・有効利用、更に、廃棄物の減容化、容易なりサイクル等を実現し、産業競争力強化、国際規制の先取りを図って、将来にわたっても持続的に化学品等を製造するための必要なGSC（グリーン・サステナブルケミストリー）プロセスを開発する。

技術的目標及び達成時期

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

研究開発期間

2008年度～2015年度

（2）革新的マイクロ反応場利用部材技術開発*（運営費交付金）（再掲）

概要

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

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術的目標及び達成時期

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

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

研究開発期間

2006年度～2010年度

(3) 循環社会構築型光触媒産業創成プロジェクト(運営費交付金)

概要

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

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2007年度～2011年度

(4) 高感度環境センサ部材開発*

概要

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

技術目標及び達成時期

2010年度までに、ダイオキシン類、エストラジオール及びビスフェノールAについて、 $0.001 \text{ ng} \cdot \text{ml}$ の濃度において有意な電気信号として検出し得る小型・携帯型計測器に挿入可能な寸法のセンサ部材の開発を目標とする。

研究開発期間

2006年度～2010年度

(5) 次世代高信頼性ガスセンサ技術開発(運営費交付金)(再掲)

概要

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

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2008年度～2011年度

・材料・部材領域

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

（1）鉄鋼材料の革新的高強度・高機能化基盤研究開発（運営費交付金）（再掲）

概要

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

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2007年度～2011年度

（2）超ハイブリッド材料技術開発（運営費交付金）

概要

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

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2007年度～2011年度

(3) 先端機能発現型新構造繊維部材基盤技術の開発 * (運営費交付金)

概要

電界紡糸や溶融紡糸等により創製される極微細な繊維状材料に対してナノオーダーの成形加工や微細な界面加工ならびに複合化することで材料を高機能化した革新的部材を創出する。高機能新材料を求めるユーザーの要望を満たす繊維の極微細加工と高次複合化を解決する基盤技術開発を行う。

技術的目標及び達成時期

2010年度までに、電界紡糸法による繊維高機能化、大型装置化技術およびナノ溶融分散紡糸法による超極細炭素繊維製造技術を開発し、これら基盤技術を活用して、高性能・高機能電池用部材、高性能・高機能フィルター用部材、高性能・高機能医療衛生用・産業用部材を開発する。

研究開発期間

2006年度～2010年度

(4) 次世代光波制御材料・素子化技術 * (運営費交付金) (再掲)

概要

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

なお、本事業は、エネルギー需給構造の高度化を図る観点から行うものである。

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2006年度～2010年度

(5) 高機能複合化金属ガラスを用いた革新的部材技術開発 (運営費交付金)

概要

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

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2007年度～2011年度

(6) マグネシウム鍛造部材技術開発プロジェクト* (運営費交付金)

概要

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

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2006年度～2010年度

共通基盤領域

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

(1) ナノ粒子の特性評価手法開発 (運営費交付金)

概要

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

技術目標及び達成時期

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

研究開発期間

2006年度～2010年度

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

5. 政策目標の実現に向けた環境整備（関連施策）

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

〔技術戦略マップ〕

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

〔サンプル提供・実用化促進〕

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

〔標準化〕

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

〔広報〕

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

〔社会受容〕

- ・ナノテクノロジーの産業化の推進とともに、ナノ粒子のキャラクタリゼーション技術や人の健康や環境に及ぼす影響等の潜在的な課題に関する知見を蓄積する等のナノテクノロジーの社会受容に対する取組みを推進している。
- ・経済産業省では、2006年度から「ナノ粒子の特性評価手法開発」を開始し、工業ナノ粒子の有害性評価手法、また、そのリスク評価手法の確立を目標としたプロジェクトを開始しているところ。
- ・OECDでは、2006年9月、化学品委員会に工業ナノ材料作業部会（WPMN）が設置され、代表的な14種の工業ナノ材料について、試験計画の合意と試験実施を目的とする「スポンサーシッププログラム」が実施されている。スポンサーシッププログラム対象物質のうち、カーボンナノチューブ（単層、多層）、フラーレンの3物質については日本が中心となって担当し、「ナノ粒子の特性評価手法開発」等の成果で貢献している。

〔人材育成〕

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

（例）ナノテク製造中核人材の養成プログラム

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

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

〔関係機関との連携〕

- ・ ナノエレクトロニクス半導体新材料・新構造技術開発 - うち新材料・新構造ナノ電子デバイスプロジェクト、希少金属代替材料開発プロジェクトにおいては、文部科学省との合同会議を設置するなど、連携しつつプロジェクトを推進している。

〔他省庁との連携〕

- ・ 総合科学技術会議 / 連携施策群において、「ナノバイオテクノロジー」「ナノテク研究推進と社会受容」等が設置され、関係省庁と連携して実施している。

6．研究開発の実施に当たっての留意事項

事業の全部又は一部について独立行政法人の運営費交付金により実施されるもの（事業に（運営費交付金）と記載したもの）は、中期目標、中期計画等に基づき、運営費交付金の総額の範囲内で、当該独立行政法人の裁量によって実施されるものである。

7．改訂履歴

- (1) 平成12年12月28日付け制定。
- (2) 平成14年2月28日付け制定。材料ナノテクノロジープログラム基本計画（平成12・12・27工総第16号）は、廃止。
- (3) 平成15年3月10日付け制定。ナノテクノロジープログラム基本計画（平成14・02・25産局第8号）は、廃止。
- (4) 平成16年2月3日付け制定。ナノテクノロジープログラム基本計画（平成15・03・07産局第1号）は、廃止。
- (5) 平成17年3月31日付け制定。ナノテクノロジープログラム基本計画（平成16・02・03産局第7号）は、廃止。
- (6) 平成18年3月31日付け制定。ナノテクノロジープログラム基本計画（平成17・03・25産局第4号）は、廃止。
- (7) 平成19年4月2日付け制定。ナノテクノロジープログラム基本計画（平成18・03・31産局第13号）は、廃止。
- (8) 平成14年2月28日付け制定。
- (9) 平成15年3月10日付け制定。革新的部材産業創出プログラム基本計画（平成14・02・25産局第9号）は、廃止。
- (10) 平成16年3月7日付け制定。革新的部材産業創出プログラム基本計画（平成15・03・07産局第5号）は、廃止。
- (11) 平成17年3月31日付け制定。革新的部材産業創出プログラム基本計画（平成16・03・07産局第5号）は、廃止。
- (12) 平成18年3月31日付け制定。革新的部材産業創出プログラム基本計画（平成17・03・25産局第3号）は、廃止。
- (13) 平成19年4月2日付け制定。革新的部材産業創出プログラム基本計画（平成18・03・31産局第14号）は、廃止。
- (14) 平成20年4月1日付け、ナノテク・部材イノベーションプログラム基本計画制定。ナノテクノロジープログラム基本計画（平成19・03・20産局第1号）および革新的部材プログラム基本計画（平成19・03・19産局第4号）は、本イノベーションプログラム基本計画に統合することとし、廃止。
- (15) 平成21年4月1日付け制定。ナノテク・部材イノベーションプログラム基本計画（平成20・03・24産局第1号）は、廃止。

(ナノテク・部材イノベーションプログラム)
「グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発」基本計画

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、中間工程における廃棄物の大量排出、リサイクルに不向きな製品の大量廃棄(廃棄処分場の不足等)などが問題となっている。一方、生産に必要な多くの原材料等は限られた産出国からの輸入に頼らざるを得ない状況にあり、今後、将来にわたって安定的に化学品が製造できるか危惧されている。さらに、欧州ではR o H S 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、我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、更に、廃棄物の減容化、容易なりサイクル等を実現し、産業競争力強化、国際規制の先取りを図って、将来にわたっても持続的に化学製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、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持続可能な産業構造への貢献が期待できる。

(2) 研究開発の目標

本研究開発では、既存の化学品等の製造において、これまでにないシンプル化(高い原子効率)、クリーン化、原材料・資源の多様化・有効利用が実現できる新規プロセスや既存の化学品に比べて、使用から廃棄にわたるライフサイクルにおいて、大幅な省エネ効果、廃棄物の減容化、容易なりサイクル等が実現できる新規な化学品の製造等、今後、持続的に製造可能となるプロセスイノベーション、マテリアルイノベーションに資する革新的な研究開発を行う。研究開発目標は下記のとおりである。

【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。
 - ・ライフサイクルにわた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。
 - ・ライフサイクルにわたり大幅なりサイクル率(カスケードリサイクル含む)向上、軽量化、長寿命化等の大幅な改善が見込めること。
- ③資源生産性を向上できる革新的プロセス及び化学品の開発：
 - ・石油化学品、機能性化学品合成、生成物分離、副生ガス分離など、大量エネルギー消費に関わる単位操作のプロセスにおいて大幅な消費エネルギー削減が見込めること。
 - ・ライフサイクルにわたり大幅なりサイクル率(カスケードリサイクル含む)、安全性、軽量化、長寿命化等の大幅な改善が見込めること。
- ④化学品原料の転換・多様化を可能とする革新グリーン技術の開発：
 - ・化学品に使用される石油由来原料について、気体原料や植物由来原料等への大幅な転換・多様化が見込めること。
 - ・ライフサイクルにわた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・持続可能なケミストリー技術戦略ロードマップ」を勘案して独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(以下、「NEDO」という。)及

び経済産業省が協議して政策的に重要と判断した研究開発テーマを優先的に実施する。具体的には、化学品等の製造プロセスの中でシンプル化、クリーン化、省エネ化、原材料・資源の多様化・有効利用、廃棄物の減容化、容易なりサイクル等の観点から、①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発、②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発、③資源生産性を向上できる革新的プロセス及び化学品の開発、④化学品原料の転換・多様化を可能とする革新グリーン技術の開発を委託により実施する。なお、研究開発項目①～④に関する具体的な研究開発テーマについては、別紙の研究開発計画に基づいて実施するものとする。

【研究開発項目】

[委託事業]

①有害な化学物質を削減できる、又は使わない革新的プロセス及び化学品の開発：

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

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

②廃棄物、副生成物を削減できる革新的プロセス及び化学品の開発：

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

- ・「新規な触媒固定化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術」
- ・「高選択酸化技術による生産プロセス技術に関する共通基盤技術」

③資源生産性を向上できる革新的プロセス及び化学品の開発：

石油化学品、機能性化学品合成、生成物分離、副生ガス分離等に対して大幅な消費エネルギー削減が可能となるクリーンプロセスを開発するために必要な触媒、膜材料、分離材料、吸着剤、選択加熱法による革新的な技術を開発する。

- ・「触媒を用いる革新的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」
- ・「微生物触媒による創電型廃水処理基盤技術開発」

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。

- ・「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、又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、研究体ごと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27年度までの7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。

なお、研究開発項目②については平成23年度までに、従来のハロゲン等を含む酸化剤に対して、クリーンな酸化剤である過酸化水素の活用を実現するために三元系触媒反応プロセスを確立し、選択的な酸化が容易な単純な構造の多官能オレフィンを高効率で酸化することで、電子部材等の商品化につながる化合物合成の実用化にめどをつけた。しかし、平成23年度までに実用化にめどをつけた過酸化水素酸化技術では、加水分解し易い構造の多官能オレフィンについては実用化に要する水準までは酸化できない。これら高難度基質を高反応率、高選択率で酸化する酸化触媒プロセスの開発と、これを用いた廃棄物、副生成物を抜本的に削減できる触媒反応プロセス及び化学品の開発を行うことで、ハロゲン化物等の有害な化学物質を用いないクリーンな酸化プロセスの適用範囲を一層拡大させるため、平成24年度に一部を追加的に実施する。

研究開発項目③-1～3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。研究開発項目③-4については、平成24年度から平成27年度までの計画とする。「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伴い、研究内容の見直し及び期間延長を行い平成21年度から平成24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、成果の技術的意義及び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）ごと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、③-4は除く）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。④については、制度評価指針に基づき、制度評価を終了年度の次年度に、原則、内部評価により実施する。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、普及促進策としての国内外の強制規格の把握・対応、及び標準化戦略

について、初期の段階からその必要性を十分に確認・検討した上で、必要な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。

なお、開発したシステムの事業化を見据えた知財戦略を構築し、適切な知財管理を実施する。

(4) 基本計画の変更

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

(5) 根拠法

本プロジェクトは独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構法第十五条第1項第一号ニ及び第二号に基づき実施する。

(6) その他

①～④以外の研究開発テーマで、社会状況等の緊急性を勘案して、産業競争力強化、大きな波及効果が期待できる革新的なプロセス及び化学品に関する研究開発についても実施する場合がある。なお、研究開発目標は共通基盤技術、実用化技術の確立の点から十分なものと想定されるが、本事業では数多くの独創的なGSCプロセスによる高機能な素材・部材製造に関する研究開発テーマの提案が期待されることから、適宜、最新の技術情報、有識者のヒアリング等を通じて柔軟に研究開発目標の変更を行う。また、①～④以外の研究開発を実施する場合には、①～④に対する研究開発目標と同等以上とし、顕著な効果(副生成物削減、未利用/低品位資源の活用、長寿命化、省エネ化、軽量化、リサイクル率向上等)が期待できる数値目標を立てることとする。

6. 基本計画の改訂履歴

平成21年 3月、制定。

平成21年12月、「明日の安心と成長のための緊急経済対策(平成21年度補正予算(第2号))」に係る研究開発項目④追加による改訂。

平成22年 8月、加速に伴い、(別紙)研究開発計画の研究開発項目③-2の達成目標を修正。

平成23年 1月、平成22年度補正予算第1号による研究開発項目④-4、④-5追加による改訂。

平成23年 7月、根拠法改正に伴う改訂。

平成23年10月、中間評価の結果に基づき、(別紙)研究開発計画の研究開発項目③-1の内容を修正

平成24年 3月、③-4追加による改訂。

平成24年 9月、研究開発項目②の一部追加実施に伴う改訂。

平成25年 2月、研究開発項目③-1の目標修正、研究開発項目④の期間修正、評価に関する事項修正、業務方法書の改正による改訂。

(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

- ・反応物から触媒及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、及び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、更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。

平成24年度追加実施目標 (平成24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

- ・加水分解しやすい構造の多官能オレフィンに対して高活性、高選択性を有する酸化触媒プロセスを開発する。これら高難度基質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年代以降は横ば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等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つながることを期待できる。

本研究開発では、ナフサ分解プロセスにおいて、石油化学品の高収率、高選択、省エネルギー化が可能となる新規な触媒を用いた接触分解プロセスに関する基盤技術を確立する。

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、触媒劣化メカニズムの解析を行うことにより長寿命化を図る。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。
- ・触媒の反応・再生については、再生サイクル(連続反応時間)48時間、再生時間8時間を達成する。

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：5kg/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わた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。あわせて、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。
- ・ 構造欠陥のない分離膜の合成方法を確立する。
- ・ 工業需要を満たすため、製造設備の制御因子 (反応器の形状、加熱・加圧方法、結晶母液供給方法等) について明らかにする。

(2) 分離膜評価技術

- ・ 分離特性を支配する構造要因を明らかにする手法を開発する。
- ・ 複雑な膜形状を有する分離膜の構造解析を支援するため、評価用モデル膜を用いて、分離膜の構造と分離特性の関係を明らかにする。
- ・ 分離膜の分離・吸着特性評価法を開発し、膜製造プロセスの開発を支援する。

③-2-2 分離膜用セラミックス多孔質基材の開発

(1) セラミックス多孔質基材の開発

研究開発項目③-2-1の目標分離性能を達成するために必要なセラミックス多孔質基材特性（形状精度、表面平滑性、蒸気透過性、最適細孔径、機械的強度、耐化学特性等）を満足する基材を開発する。具体的には、原料の材質、粒子形状及びサイズ等の適正化と基材作製技術（成形、乾燥、焼成）等の改良により、高性能なセラミックス多孔質基材を開発する。

(2) 多チャンネル型セラミックス多孔質基材の開発

膜を集積化した構造を持つ多チャンネル型大面積基材を作製するための押出成形、乾燥、焼成技術を開発する。安定した基材品質を維持する作製プロセスと評価技術を開発する。多チャンネル型基材においては内管被覆となるので、内管被覆がしやすい(種結晶が付きやすい)内管表面の構造を具備する多チャンネル型基材を開発する。

③-2-3 モジュール化技術の開発

(1) 管状基材を用いたモジュール化技術

研究開発項目③-2-1、③-2-2で開発された分離膜部材を用い、接合部の熱的・化学的・物理的安定性を保持しつつ管状基材を複数本束ねたマルチエレメントの格納形状を決定し、その有効利用率を最大にする格納容器設計をする。

(2) 多チャンネル型基材を用いたモジュール化技術

多チャンネル型基材を格納容器に接続できるよう、使用条件に耐えるシール材料の選定及びその塗布方法を開発する。

(3) 膜分離解析モデル・シミュレーターの開発

膜のモジュール化技術を支援するための膜分離解析シミュレーターの開発のため、規則性ナノ多孔体分離膜の分離膜特性（透過度、分離係数）を定量的に表現するための数学モデルの導出、分離膜特性の透過分離挙動の解析シミュレーターの開発、膜モジュールシミュレーターの開発、膜モジュール設計手法と設計ツール等の開発を行う。

③-2-4 試作材の実環境評価技術の開発

(1) 実環境評価検討

- ・ 分離膜モジュールを、実稼動しているイソプロピルアルコール製造プラントの蒸留塔に付設し、イソプロピルアルコールと水の混合実流体で分離試験をし、実用化技術の確立に向けての課題を抽出する。その際、分離流体の組成、単位面積あたりの処理量、モジュールの差圧等の実用化技術の開発に必要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ステムの最適化や、既存の蒸留プロセスと比較した場合の省エネ化、低コスト化を定量的に評価する。
- ・ 上記検討結果を、適宜膜開発にフィードバックし、分離膜製造基盤技術の最適化を図る。

3. 達成目標

③-2-1 分離膜製造基盤技術及び分離膜評価技術の開発

(1) 分離膜製造基盤技術

イソプロピルアルコール脱水用：

中間目標（平成23年度末）

現行の市販無機膜の水の透過度が $1 \sim 8 \times 10^{-9} \text{ m o l} / (\text{m}^2 \text{ s Pa})$ であるのに対し、同透過度が $8 \times 10^{-8} \text{ m o l} / (\text{m}^2 \text{ s Pa})$ 、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 $2 \times 10^{-7} \text{ m o l} / (\text{m}^2 \text{ s Pa})$ 、分離係数200以上の分離膜を工業的に製造できる技術を開発する。

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 $8 \times 10^{-9} \text{ m o l} / (\text{m}^2 \text{ s Pa})$ 、水と酢酸の分離係数が100以上であり、耐酸性を有する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 $2 \times 10^{-7} \text{ m o l} / (\text{m}^2 \text{ s Pa})$ 、水と酢酸の分離係数が200以上であり、耐酸性を有する分離膜を工業的に製造できる技術を開発する。

(2) 分離膜評価技術

中間目標（平成23年度末）

- ・ 膜組織と分離特性の関係及び膜組織と合成条件の関係を明らかにする。
- ・ 開発材の支援を可能とする評価法を確立する。
- ・ 分離特性を支配する構造欠陥を評価するための評価法を確立する。

最終目標（平成25年度末）

- ・ 評価技術を高度化し、より微細な構造解析を可能とする技術を確立する。
- ・ 実環境評価によって試作材に関する技術課題を抽出し、それらを解決するための指針を示す。

③-2-2 分離膜用セラミックス多孔質基材の開発

(1) セラミックス多孔質基材の開発

中間目標（平成23年度末）

- ・ 水熱法等のケミカルプロセスによる分離膜製膜技術及びイソプロピルアルコール及び酢酸の脱水プロセス条件下で大幅な強度劣化の生じない多孔質材料を開発する。
- ・ 目標分離性能を実現する分離膜を担持可能な細孔径、蒸気透過性、表面平滑性、耐化学特性を有する基材を開発する。

最終目標（平成25年度末）

- ・ イソプロピルアルコール及び酢酸の脱水分離膜として長期使用した際に、大幅な強度劣化が生じない多孔質材料を開発する。

（2）多チャンネル型セラミックス多孔質基材の開発

中間目標（平成23年度末）

- ・ 内管表面構造を制御する製造技術を開発する。
- ・ 多チャンネル型基材 長さ1m（管状 外径30mm）当たり0.2 m²の膜面積を実現する。

最終目標（平成25年度末）

- ・ 種結晶が均一に付着しやすい内管表面構造を有する多チャンネル型基材の製造技術を開発する。
- ・ 多チャンネル型基材 長さ1m（管状 外径30mm）当たり0.3 m²の膜面積を実現する。

③-2-3 モジュール化技術の開発

（1）管状基材を用いたモジュール化技術

中間目標（平成23年度末）

マルチエレメントモジュールを想定し、モジュール化した際に、研究開発項目③-2-1、③-2-2で開発する分離膜性能（透過度、分離係数）を最大限に引き出すためのマルチエレメント格納容器の設計をし、その構造実現に必要な要素技術を見極める。

最終目標（平成25年度末）

検討項目③-2-1で開発する分離膜特性（透過度、分離係数）の60%以上を有するモジュール製造のための基盤技術を確立する。

（2）多チャンネル型基材を用いたモジュール化技術

中間目標（平成23年度末）

使用条件に耐えるシール材料を選定する。

最終目標（平成25年度末）

管状型分離膜と同等のシール性能を確認する。

（3）膜分離解析モデル・シミュレーターの開発

中間目標（平成23年度末）

- ・ 分離膜の簡易的な1次元モデル・シミュレーターを開発する。
- ・ 膜モジュールシミュレーター開発のベースとなる3次元解析用モデルを開発する。

最終目標（平成25年度末）

- ・ 膜モジュールの設計手法を開発し、設計ツールを開発する。
- ・ 管状型膜モジュールシミュレーター及び多チャンネル型膜モジュールシミュレーターを開発

する。

③-2-4 試作材の実環境評価技術の開発

(1) 実環境評価検討

中間目標（平成23年度末）

- ・ 開発する分離膜モジュールの性能を十分に引き出せるサイズを確定し、配置場所、流体の流路方向、気体状態を維持するための効率的な保温、液体発生時の対策等を考慮し、モジュールの製造とリンクさせた実環境試験フローを設計する。

最終目標（平成25年度末）

- ・ 200時間連続運転によるモジュールの耐用性能評価を可能とするシステムを開発し、実用化のための技術課題を抽出する。
- ・ プロセスシミュレーションにより、膜分離システムを組み込んだ分離プロセスを提案する。

(2) プロセスシミュレーターの開発

中間目標（平成23年度末）

- ・ 既存の蒸留システムに分離膜モジュールを組み合わせたHybridなプロセスシステムを対象としたプロセスシミュレーターを開発する。

最終目標（平成25年度末）

- ・ 既存の蒸留システムとのエネルギー効率、コストの比較を容易に行えるようなシステムを開発する。
- ・ プロセスシミュレーターを用いて、イソプロピルアルコール系を対象として最適な高効率・低コスト分離プロセスを設計する。

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

研究開発項目③-3 「資源生産性を向上できる革新的プロセス及び化学品の開発」
(副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発)

1. 研究開発の必要性

現在、産業分野から排出される3.2億t-CO₂/年のうち、約20%が化学工業から排出されている。化学プロセスでは、加熱や蒸留に伴う燃料消費でのCO₂発生がある一方で、化学反応に伴う低濃度の副生ガスとしてのCO₂発生がある。いずれの場合においても、希薄、低温、低圧レベルで発生するため、CO₂の分離は化学吸着、物理吸着、膜分離等により技術的に回収することが可能であっても、従来技術では経済性の観点から困難を極めている。同様に他の化学プロセスでも低濃度の副生ガスとしてN₂、N₂O、CH₄、C₂H₆、NO_x、SO_x等が発生している場合があり、これらの低濃度の副生ガスを取り除くために大量のエネルギーが消費されている。これらの低濃度の副生ガスは、分離、濃縮されれば、汎用の基礎化学品へ転換、CO₂削減と資源制約からの脱却という我が国の抱える2つの課題を同時に解決することが期待できる。

本研究開発では、多孔性金属錯体等のような革新的な材料を用いて、燃焼や化学反応に伴う低濃度の副生ガス(以下「副生ガス」という。)を、低温、低圧で効率よく吸着、脱離する技術を開発し、高濃度に濃縮された副生ガスにより有用な化学品をクリーンに生産するための基盤技術の確立を行う。

2. 研究開発の具体的内容

(1) 副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発

研究開発目標を達成するため、具体的に下記の内容の研究開発を実施する。

副生ガスの回収は、化学吸着、物理吸着、膜分離等により技術的に可能であるものの、現在使用されている化学吸着材料では、脱離プロセスで高温エネルギーが必要であったり、物理吸着材料や膜分離材料では、吸着量が小さかったり、分子透過に伴う膜設計が困難であったりと、現状では、基礎基盤的な開発段階にある。

本研究開発では、化学プロセス、石油化学プロセス等の生産プロセスから発生する副生ガス(主としてCO₂)を、マイルドな条件で効率よく吸着、脱離することで、高濃度に濃縮された副生ガスを、①高純度、②低コスト、③低エネルギーで精製できる革新的な材料を開発し、濃縮された副生ガスを原料として有用な化学品をクリーンに生産できるプロセスにつなげる。

3. 達成目標

(1) 副生ガスの高効率分離・精製プロセス基盤技術開発

中間目標(平成23年度末)

①副生ガスの分離・精製材料開発

- ・副生ガスの分子サイズに合わせた多孔性金属錯体等の分子設計を行い、副生ガスとしてのCO₂等を高濃度(95%以上)に濃縮でき、かつ高選択に分離する材料を開発する。具体的には、現在実用されているゼオライト、活性炭等の分離材料に比べて低い操作エネルギーで高選択的に副生ガス(CO₂等)を吸着・脱離できる新規材料(副生ガスの吸着エネルギーが40kJ/

m o l 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 1 5 0 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

- ・ 9 5 % 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 6 0 % 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 2 5 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 C O ₂ 等を高濃度 (9 9 . 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 (C O 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 3 0 k J / m o l 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 3 0 0 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

- ・ 9 9 . 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 8 0 % 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③-4 「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」

(微生物触媒による創電型廃水処理基盤技術開発)

1. 研究開発の必要性

化学産業のCO₂排出量は我が国産業中第2位（全排出量の約5%）であり、このうち約16%が石油化学プラントで排出されているが、製造プロセスの他産業廃水の処理に伴って多大なエネルギーが消費され、発生する大量の汚泥処理も含め大量のCO₂発生源となっている。

このため、本研究開発では、廃水中の有機物を微生物が分解する際に生ずる電気エネルギーを効率よく取り出し、廃水処理システム自体の運転に活用し、併せて汚泥の大幅削減を図るための微生物燃料電池の実用化に必要な基盤技術を開発する。

2. 研究開発の具体的内容

(1) 微生物触媒による創電型廃水処理基盤技術開発

研究開発目標を達成するため、ベンチスケールの微生物燃料電池を開発し、実証試験を行って安定した廃水処理、省エネルギーのための運転技術を確立する。具体的には、下記の内容の研究開発を実施する。

①触媒の開発

微生物燃料電池のカソード（陽極）に適した安価な酸素還元触媒の開発、及び微生物アノード（陰極）の電気化学的解析を行う。

②カソードの開発

安価な電極基板材料を開発することにより、ベンチスケールの微生物燃料電池のカソード用空気拡散電極を開発する。

③アノードの開発

微生物親和性が高く安価な電極基板材料を開発することにより、ベンチスケールの微生物燃料電池のアノードを開発する。

④微生物制御技術の開発

電流生成微生物の代謝経路の網羅的解析を行って、廃水に適合した発電微生物集団を迅速に形成させる技術、及び微生物集団を安定に機能させるための技術を開発する。

⑤効率化システムの開発

廃水処理前後工程を考慮した効率化システムの開発を行う。

⑥実証試験

①～⑤で開発した小型実証装置（1立方メートル程度）を用い、安定した廃水処理、省エネルギー化を実証し、安定した廃水処理、省エネルギーのための最適な運転技術を確立する。

3. 達成目標

(1) 微生物触媒による創電型廃水処理基盤技術開発

最終目標（平成27年度末）

開発した小型実証装置（1立方メートル程度）により、廃水処理率が現行の活性汚泥処理と同等以上で、かつエネルギー消費が20%以下となることを確認する。

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、ライフサイクルにわた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、更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実に伴い、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22～24年度】

④-1 及び既存の転換・多様化プロセスを組み合わせ、石油由来原料からの転換・多様化を、より多角的に進めるため、豊富に存在する気体（メタン、水素、二酸化炭素等）の利用技術の開発を行う。具体的には、高効率な分離・精製技術等により、従来は原料としての利用が困難であった低品位の気体（バイオメタン等の混合ガス）を利用するための分離・精製プロセスや、既存のプロセスと比較して、低環境負荷で、かつ、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、コストあるいはその他の要素（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22～24年度】

④-2、④-3 及び既存の転換・多様化プロセスを組み合わせ、非可食性植物由来原料から化合物・部材までを省エネルギー・高効率に製造する一貫生産プロセスの開発を行う。

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、油脂等の特徴をいかした製品・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いかすこと等により、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、テーマ選定に当たっては、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実に伴い、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24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い、ポリマーの試作・評価を行うとともに、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い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24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いかした材料を用いた自動車、家電等へ適用する部材の製造・加工プロセスの開発を行い、代替する実部材と比較して、性能・コスト面での優位性を確認する。

本開発終了後、実用化技術として、コスト低減、早期の市場導入に対して大きな寄与が期待できる技術レベルを確立することとする。

なお、詳細な目標・計画については採択者が決定した後、NEDO、研究開発責任者及び採択者との間で協議の上、実施期間において実現可能なものを定めるものとする。

グリーン・サステイナブル ケミストリー（GSC）分野

（持続的社會のための環境共生化学）

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

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

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術戦略マップ

I. 導入シナリオ

(1) GSC 分野の目標と将来実現する社会像

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

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

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

<将来の資源・エネルギー制約と GSC の目標>

世界的に地球温暖化防止への動きが加速している観点から、大幅な CO₂ 削減への対応が検討されている。産業界においても、より一層の省エネルギー、CO₂ 削減が求められている。この観点から化学産業としても、今まで以上に省エネルギー、CO₂ 削減への対応が求められる。一方、これまで依存してきた原油価格は確実に上昇していくことは避けられない。長期的には、現 OECD 諸国のエネルギー需要は、将来、人口の多いアジア・アフリカ地域に追い越されると予想される。このような状況により、今後日本は、これまでどおり高品質の原油を安定的に購入することが難しくなり、重質で硫黄や重金属等の多い低品位の原油を扱っていかなければならないと予想される。

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

以上を鑑みると、日本としては、地球温暖化防止のために、より一層の省エネルギー技術、CO₂ 削減技術や資源安全保障の確保のための資源・エネルギーの効率的利用技術、リサイクル技術、代替技術が必須である。短期的には省エネルギー技術、資源リサイクル技術や、重質化・低品位化する原油をクリーンかつ効率的に利用していく技術が必要である。しかし、リサイクルにも限界があり、中期的には代替技術に移行していくこととなる。また、遠い将来には究極的な CO₂ 削減につながる技術や石油資源のピークが訪れることから、原料の革新的な変換技術が必要である。

<将来の環境との共生と GSC の目標>

持続可能な開発に関する世界首脳会議において合意されたヨハネスブルグ宣言の

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

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

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

<将来の生活の質の向上とGSCの目標>

将来の生活の質の向上について、短期・中期・長期に分けると次のようになる。

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

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

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

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

<将来の化学産業>

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

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

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

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

<GSCの短期・中期・長期の目標>

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

すなわち、短期的には、喫緊の問題として省エネルギー、CO₂削減を考慮しながら、グリーンの方角性（廃棄物を減らす、今ある資源・エネルギーを効率的に利用）、中期的には、サステイナブルの方角性（有害物質、希少元素の代替）、さらに長期的には、グリーン・サステイナブルの方角性（快適でサステイナブルな生活を実現する新しい材料の開発、原料の革新的転換）とした。

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

(2) 研究開発の取組

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

(3) 関連施策の取組

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

〔基準・標準化〕

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

〔産学官連携〕

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

(4) 海外での取組

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

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

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

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

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

(5) 改訂のポイント

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

II. 技術マップ

(1) 技術マップ

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

(2) 重要技術の考え方

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

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

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

○ エネルギー

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

○ 資源

- ・ 低品位資源利用技術
- ・ 次世代蓄電材料技術
- ・ 稀少金属の有効利用と代替材料技術
- ・ 非枯渇性資源の化学品・材料化
- ・ 易リサイクル加工用材料とプロセス
- ・ CO₂分離・回収・利用技術
- ・ 微細構造・精密構造形成技術

○ 環境

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

○ 生活

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

○ 4分野共通

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

○ 共通基盤技術

- ・ 分析化学
- ・ 計算科学

- ・ 環境評価

(3) 改訂のポイント

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

Ⅲ. 技術ロードマップ

(1) 技術ロードマップ

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

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

(2) 改訂のポイント

- 重要技術項目毎に対象となる重要技術テーマを 1 ページにまとめ、内容を理解しやすいものとするを狙った。配置としては 2050 年までの技術ロードマップを中心に置き、以下の 4 つの説明のための欄を更新した。
- 各欄の内容は次のとおりであり、評価項目の更新にあわせて、新たな評価を行い、レーダー図を更新した。
 - 「技術の概要」：重要技術テーマについて概要を説明
 - 「技術優位性」：重要技術テーマについての日本あるいは、日本企業の国際的な優位性についてコメント
 - 「GSC 評価」：各重要技術テーマについて 3 段階で各項目につき技術評価し、その結果をレーダー図に表すと同時にコメント
 - 「産業競争力・創設力評価」：産業競争力や創設力について 3 段階で各項目について評価し、その結果をレーダー図に表すと同時にコメント

Ⅳ. その他の改訂のポイント

- GSC 技術の展望

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

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

グリーン・サステ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	技術項目 (グレーは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色:プロセスイノベーション 青色:マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小:数万吨未満 中:数十万吨以下 大:100万吨以上	実用時期 短期:2016年以降 中期:2020年以降 長期:2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
		2010							
エネルギー	グリーン製造化学プロセス	G001	革新的省エネ型化学分離プロセス	・高配向性(ゼオライト、酸化物等)による蒸留、抽出、吸着分離、濾過プロセスへの導入 ・新規炭素系ガス分離材、MOF等有機金属分離材 ・省エネ蒸留塔(HIDIC)適用系等の実用化プロセス技術開発	省エネ、省資源	大	中期	1,000	基礎化学(蒸留、PSA、脱水)プロセス、水処理等広範囲
		G002	グリーン酸化プロセスの開発	・過酸化水素、空気酸化用多成分系触媒 ・直接法フェノール、パラフィン酸化、活性酸素包接化合物利用等 ・直接法過酸化水素製造技術、活性酸素包接化合物利用等 ・ナノ、マイクロバブルを用いた酸化反応	省エネ資源多様化産業競争力	大	短期、中期	1,000	化粧品、医薬品、電子材料、接着剤、封止材、環境浄化触媒
		G003	電磁エネルギー利用高効率化学合成プロセス	・マイクロ波、高周波、プラズマ等の利用 ・誘電体触媒等による無溶媒プロセス	省エネ、省資源	中	短期、中期	500	医薬品原体、電子材料、香料、添加剤、プラスチック等
		G004	分離・反応一体型リアクタープロセス	・界面活性剤型触媒、相間性移動触媒の開発 ・MOF等有機金属錯体の開発 ・非平衡反応分離型(気体分離、液体分離、イオン交換、電気透析、逆浸透等)プロセス ・分離性能と反応性能のマッチング最適設計	省エネ資源確保産業競争力	大	短期、中期	1,000	化学品製造、医薬品原体、電子材料、香料、添加剤、水処理等広範囲
		G005	マイクロリアクタープロセス	・ナノ空孔、協奏的反応場等反応制御技術 ・マイクロリアクターを利用したプラント技術 ・細薄化技術 ・キャピラリーを用いた無触媒精密重合プロセス	省エネ、省資源	中	中期	100	医薬品原体、電子材料、香料、添加剤等
		G006	精密制御高分子製造	・汎用モノマーの精密重合プロセス:メタロセン触媒、リビング重合などによる重合プロセス設計 ・高性能機能化学品の製造	省エネ、省資源	大	中期、長期	1,000	化粧品、電子材料、接着剤、封止材等高分子関連産業
		G007	低環境負荷型縮合系高分子製造技術	・新規触媒、選択加熱、新媒体利用等によるプロセス ・透明、長寿命、省資源材料プロセス ・新規原料モノマーの利用	資源確保産業競争力	中	中期、長期	500	樹脂成型物(電機電子、自動車等)
		G008	高純度金属ケイ素の省エネ製造プロセスの開発	・非ハロゲン法プロセス ・ノンハロゲン高純度金属ケイ素製造法	省エネ、省資源	大	中期	1,000	太陽電池、半導体、電子産業
		G009	有機分子触媒	・不斉合成、相間移動触媒、水系触媒、酸塩基触媒、酵素触媒等 ・有機合成の触媒反応プロセス(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	・合成珪酸(エリスリトール等)、ゼオライト、粘土鉱物、クラスレート等蓄熱材 ・アンモニウム塩、代替溶媒、アンモニウム等による各種ヒートポンプ、カーナサイクル ・Ca、Mg塩等の水和・脱水によるオンサイト蓄熱システム	利用効率の向上	大	短期、中期	1,000	熱供給業、ガス業、集合住宅・公共施設、ゴミ処理場における給熱給湯、冷熱	
	G012	低温排熱エネルギー変換用熱電変換材料の開発	・ポストBi-Te系、Zn-Sb系、多成分、クラスター系新規材料 ・有機系熱電変換材料開発、無機材料:Mg2Si他 ・熱交換器塗布型高分子、易加工材(無機/有機系複合材料)	利用効率の向上	小	長期	500	製造業(化学、セメント、石油等)、電気業、ゴミ処理場における給熱給湯、冷熱	
	G013	化学エネルギー変換高密度蓄熱材料・触媒・プロセスの開発	・アルコール、芳香族、多環芳香族化合物の水素化、脱水素反応用触媒(単金属系) ・アンモニウム塩、Br系水和反応系蓄熱プロセス ・可逆的分子骨格変換触媒(光または熱)	利用効率の向上	大	長期	500	製造業(化学、セメント、石油等)、オンサイト熱供給業、給熱給湯、冷熱関連	
	G014	低摩擦表面素材/潤滑物質の開発	・新規炭素材料(DLC等)、無機・有機ハイブリッド表面コーティング、ナノ潤滑剤等 ・潤滑油のトライボロジーによる省エネ、高寿命材料、 ・固体表面のナノレベル分子配向制御	利用効率の向上	中	短期、中期	1,000	機械、エネルギー、一般製造業等広範囲	
	G015	高性能デシカント空調用高湿潤吸着材料の開発	・既存除湿冷房とのハイブリッド用吸着材料 ・高性能ゼオライト、シリカゲル、高分子ポリマー、多孔性配位高分子等 ・高濃度水溶性塩系材料(アンモニウム塩系等) ・ヒートポンプへの組み込み	利用効率の向上	大	短期、中期	500	空調設備、熱供給業、集合住宅、ショッピングセンター、コンビニ等関連産業	
再生可能エネルギー	G016	風力発電用新規材料の開発	・ポリプロピレン系高強度、軽量材料 ・オンサイト小型発電システム ・メンテナンス処理がしやすい環境適合型部材 ・低損失潤滑剤	新エネルギー	大	中期、長期	1,000	照明、機械、住宅、オンサイトエネルギー産業	
	G017	色素増感型太陽電池材料の開発	・チタニア色素増感型、プラスチック基板型等 ・建材一体型太陽光利用材料:屋根以外の曲面構造部分への装着 ・安価(非Ru)色素増感剤開発	新エネルギー	中	中期、長期	1,000	オフィス、住宅、オンサイト小型発電、街路灯等	
	G018	薄膜シリコン型太陽電池材料の開発	・高効率アモルファス、微結晶シリコン材料 ・オンサイト小型発電システム:系統連携とのマッチング	新エネルギー	中	中期	1,000	照明、電子材料、住宅、オンサイトエネルギー産業	

グリーン・サステナブルケミストリー分野の技術マップ(2/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グレーは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色: プロセシノベーション 青色: マテリアリノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小: 数万吨未満 中: 数十万吨以下 大: 50万吨以上	実用時期 短期: 2016年以降 中期: 2020年以降 長期: 2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
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	<ul style="list-style-type: none"> p型半導体ポリマー、n型フラーレン等 家電等補助電源用システム 発電のカスケード利用等材料的開発 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	<ul style="list-style-type: none"> 低価格化、普及を目的にPt代替電極、Pt代替膜 CO選択酸化触媒、水素製造装置等 高信頼性: 酸化還元によるダメージの改善 	コスト低減	大	中期、長期	1,000	電気業、ガス業、住宅、移動体(自動車、バス等)
	G021		ハイブリッド太陽電池材料及び次世代ナノ材料太陽電池材料の開発	<ul style="list-style-type: none"> 有機系、無機・有機複合化合物、クラスター金属利用高効率半導体(GIGSなど) オンサイト小型発電システム 量子ドット太陽電池システム マルチエキシトン太陽電池システム 	新エネルギー	中	中期、長期	500	照明、電子材料、住宅、オンサイトエネルギー産業
	G022		高効率水素製造技術の開発	<ul style="list-style-type: none"> 高温水蒸気電解等 改質炉伝熱性向上技術 太陽光利用光触媒、原子炉熱利用技術 MOF等有機金属錯体の開発 オンサイトとオフサイト双方での製造・輸送技術 	エネルギー転換	大	短期、中期	1,000	石油化学産業、ガス業、移動体(自動車、バス等)
	G023		水素貯蔵・輸送技術の開発	<ul style="list-style-type: none"> 合金ナノ粒子、有機金属材料による高密度貯蔵材料 超高压ガス容器不要の貯蔵、輸送技術 水素利用社会インフラ整備のための安全性技術 水素/都市ガス共通パイプライン利用技術(膜) 有機ハイドレート 	インフラ整備	大	中期、長期	1000	石油化学産業、電気業、ガス業、住宅、移動体(自動車、バス等)
	G024		新規コンポジット樹脂材料の開発	<ul style="list-style-type: none"> CFRP、炭素、無機有機ハイブリッド材料 セルロースナノファイバの高次構造を活かしたコンポジット樹脂材料 軽量・高強度・難燃性かつ成形性・加工性・リサイクル性に優れたコンポジット樹脂材料 	省エネ、長寿命	中	短期、中期	1,000	建材、電子材料、機械材料、医療、パソコン等
代替材料(軽量・高強度材料)	G025		超耐熱性、強度等を有する新規材料(ポリオレフィン類等)の開発(再掲)	<ul style="list-style-type: none"> ポストメタロセン触媒、モノマー材料 金属・高分子ハイブリッド材料 高密度、易加工ポリオレフィン材料の開発 	省エネ、長寿命	大	短期、中期	1,000	建材、電子材料、機械材料、医療、輸送材料等
	G026		金属代替超軽量材料の開発	<ul style="list-style-type: none"> 有機無機ハイブリッド材料 超高密度高分子材 超軽量、超高強度を有する航空宇宙材料 導電性高分子材料 	代替材料	大	中期、長期	1,000	建材、電子材料、機械材料、航空機及び自動車等車体等
	G027		光機能を有するプラスチック材料の開発	<ul style="list-style-type: none"> ポリカーボネート、ポリメタクリレート等の高機能光ファイバ材料等 複合材料による光透過性向上、低減衰、高速応答等 	機能性向上	中	中期、長期	1,000	建材、電子材料、機械材料、窓ガラス、パソコン、照明材料等
	G028		省エネ成形、易リサイクル型硬化性樹脂の開発(再掲)	<ul style="list-style-type: none"> モノマー、ハイブリッドモノマー利用材料・樹脂 超臨界ガス利用による発泡・加工 熱可塑性設計によるリサイクル材料 	利用効率の向上	大	中期	1,000	建材、電子材料、機械材料、医療、輸送材料等
	G029		機能性接合、接着剤の開発	<ul style="list-style-type: none"> 高性能金属-樹脂接合材料 表面修飾、界面改質による接着機能向上 	機能性向上	小	中期	500	機械材料、金属-樹脂加工等広範囲
	G030		薄膜塗装技術による防食材料の開発	<ul style="list-style-type: none"> マグネ表面処理用脂環族モノマー等共重合材料 連続加工、塗装プロセス 	機能性向上	小	短期	500	電子部品、パソコン・家電筐体、携帯電話、自動車部品等
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	<ul style="list-style-type: none"> 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)	<ul style="list-style-type: none"> ポスト代替フロン断熱材料 超臨界CO₂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)	<ul style="list-style-type: none"> 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)	<ul style="list-style-type: none"> 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)	<ul style="list-style-type: none"> 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	<ul style="list-style-type: none"> 添加剤、界面修飾による低摩擦タイヤ 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・サステナブルケミストリー分野の技術マップ(3/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グレーは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色:プロセスイノベーション 青色:マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小:数万吨未満 中:数十万吨以下 大:100万吨以上	実用時期 短期:2016年以降 中期:2020年以降 長期:2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
		2010							
エネルギー	IT向け化学品 (電子材料)	G037	新型高温超伝導材料の開発	・有機金属化合物系、有機・無機ハイブリッド複合材料 ・革新的原理に基づく新規高温超伝導材料 ・超伝導材料の革新的インフラ技術	省エネ、産業競争力	中	中期、長期	1,000	半導体関連産業 (太陽電池等)、住宅・ビル照明、電卓等
		G038	光利用率向上有機半導体材料の開発	・フラーレン系等新規材料 ・機能性ポリマーによる新規液晶材料	利用効率の向上	大	短期、中期	1,000	半導体関連産業 (太陽電池等)、住宅・ビル照明
		G039	新規封止材、絶縁材料、パワー半導体等の開発	・無機有機複合材料、ハイブリッド、ナノコンポジット等による高性能IT材料 ・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曝材料の減容化	廃棄物削減	大	短期、中期	1,000	電力供給産業
	耐熱・伝熱材料	G042	新規高伝熱材、熱損失抑制用材料の開発	・超合金による複合材の高密度発泡、超耐熱(1000℃超)材料 ・非金属、炭素材料による耐熱材料	省エネ	中	中期、長期	500	建材、プラント、エネルギー
	エネルギー変換・活用材料	G043	高分子アクチュエータの開発	・機能性たんぱく質、機能性ポリマーの開発 ・ナノセンサーとの組み合わせによりマイクロマシン	機能性向上	中	中期、長期	1,000	精密機器・ロボット・マイクロマシン関連産業
資源	低品位資源利用技術	G044	バイオマス、未利用有機資源からの合成ガス・化学品の製造	・環境負荷の小さい原材料前処理技術 ・安定原料確保のための原料供給・利活用モデル ・化学品原料向けGTL(低鎖長留分、オレフィンリッチ) ・DME直接合成/間接合成、エタノール及びエタノール經由エチレン製造等 ・バイオマスから基幹中間原料の一貫製造プロセス ・合成・バイオリアファイナリーの展開	資源確保 産業競争力	大	中期、長期	1,000	石化基礎品産業、 液体燃料関連産業
		G045	低品位ガス系化石資源、メタンハイドレート、コールベットメタン等からのオレフィン、芳香族化合物製造技術の開発	・脱硫、脱窒素系触媒 ・低温水素化分解触媒 ・各種化学品変換触媒 ・メタンホモゲネーション ・エタン酸化脱水素 ・高密度酸化によるエチレン製造 ・酸化脱水素触媒	資源確保 産業競争力	大	中期、長期	1,000	液体燃料関連産業、 基礎化学品産業、 電力供給関連産業
		G046	低品位固体系化石資源からのナフサ留分、オレフィン等の製造	・脱硫、脱窒素系触媒 ・低温水素化分解触媒 ・コンデンサート、重質油、石油コークス、オイルサンド等分解プロセス ・蒸留分離以外の分離プロセス(物理吸着・吸収、化学吸着・吸収、分離膜)、 マイクロチャネル伝熱利用分離	資源確保 産業競争力	大	短期、中期	1,000	石化基礎化学品産業
		G047	各種資源の接触法による芳香族、オレフィン等製造	・ナフサ接触分解技術 ・新規ゼオライト、複合貴金属触媒新による収率・選択性向上 ・新規流動相・固定床反応プロセス ・高寿命高性能新規触媒(固体酸・固体塩基)の開発 ・酸化脱水素法によるオレフィン製造用触媒 ・高効率膜分離プロセス	省エネ 資源確保 産業競争力	大	短期、中期	1,000	石化基礎製品
		G048	化学品、電力、熱のトリジェネレーション	・低温吸熱、発熱発熱用反応対応触媒、及びプロセス ・高度エクセルギー解析技術、製造工場間のエネルギー関連フローの統合化技術 ・コンビナート再生、生産効率向上のためのプロセス設計技術	省エネ、 産業競争力	大	中期、長期	1,000	化学産業、鉄鋼産業、 エネルギー、 コンビナート関連産業
		G049	石炭ガス化発電(IGCC)と化学品の併産	・石炭ガス化発電、化学品併産に使える機能性触媒 ・生産多様化、高効率CO2回収・利用プロセスの構築 ・安価酸素製造技術	省エネ、 産業競争力	大	中期、長期	500	火力発電と化学品製造
	次世代蓄電材料技術	G050	超高蓄電型二次電池材料の開発(再掲)	・安全性の高い、正負極活性物質、炭素電極、電解液、セパレーター(膜)等 ・高出力密度汎用型電気二重層キャパシタ ・ナノファイバー電極、セパレーター	省エネ、 産業競争力	中	短期、中期	1,000	商用施設、住宅、 オンサイト小型発電、 自動車等
G051		新しい電池材料の開発(再掲)	・次世代リチウムイオン電池向け材料:リチウム硫黄系新固体電解質、不燃性有機電解質、非Co系正極 ・新型ニッケル・水素電池、リチウムポリマー電池、リチウム硫黄系電解質等	省エネ、 産業競争力	中	短期、中期	1,000	商用施設、住宅、 オンサイト小型発電、 移動体、パソコン、 携帯電話等	
G052		有機ラジカル電池・レドックス高分子材料の開発(再掲)	・非リチウムイオン電解質 ・短時間充電、高容量、高出力で発火や爆発リスクの低い有機/ラジカルポリマー電池	省エネ、 産業競争力	小	短期、中期	100	商用施設、住宅、 オンサイト小型発電等	

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術マップ(4/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グリーンは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色:プロセスイノベーション 青色:マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小:数万吨未満 中:数十万吨以下 大:50万吨以上	実用時期 短期:2016年以降 中期:2020年以降 長期:2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
		2010							
資源	次世代蓄電材料技術	G053	高蓄電池用電解液の開発(再掲)	・新規な高容量・安全なイオン液体:イミダゾリウムやピリジニウムのリチウムイオン液体	省エネ、産業競争力	小	中期、長期	100	商用施設、住宅、オンサイト小型発電、移動体、パソコン、携帯電話等
		G054	移動電源、及び固定電源用高蓄電エネルギー材料の開発(再掲)	・新型固体電解質、電解質膜、イオン液体等の開発:不燃性により安全性向上、移動体等への適用	省エネ、産業競争力	大	中期、長期	1,000	電子機器、バス、電車等用エネルギー供給・利用関連産業
		G055	個人用移動システム駆動源の開発(再掲)	・軽量小型電池等の開発:体積および重量あたりの蓄電容量および出力とも大きい高性能電池	省エネ、産業競争力	小	中期、長期	100	機械ロボット、車椅子
	稀少金属の有効利用と代替材料技術	G056	希少元素、貴金属代替新材料の開発	・ニッケル、コバルト、モリブデン、タングステン、リチウム、インジウム、希土類、タンタル、白金族、ホウ素等を代替する新材料 ・カーボンアロイ触媒	資源確保 産業競争力	中	短期、中期	1,000	電子部品、パソコン・家電筐体、携帯電話、自動車部品等
		G057	高耐熱材料の開発	・稀少金属やNi,Co,Wを使わない高耐熱性材料 ・タービン用耐久性新規高耐熱材料 ・熱分解反応器、水蒸気改質反応器、バーナーノズルに使用可能な稀少金属を使わない高耐熱性材料 ・原子炉、核融合炉用高耐熱性材料	資源確保 産業競争力	中	中期、長期	1,000	電子部品、パソコン・家電筐体、携帯電話、自動車部品等
		G058	希少金属、特定元素資源の抽出・リサイクル技術の開発及び代替材料の開発	・低品位鉱物原料・廃棄物(都市鉱山)からの稀少金属資源の分離・回収 ・触媒、製品等に使用される稀少金属資源の分離・回収、代替 ・環境リサイクル型設計	資源確保 産業競争力	中	中期、長期	1,000	電子部品、パソコン・家電筐体、携帯電話、自動車部品等
	非枯渇性資源の化学品・材料(化学品原料の転換・多様化)	G059	バイオマスからの化学品原料製造技術	・ウレタンポリオール、ファインケミカルズ、中間原料・ポリアミド4、リグニン誘導体(熱硬化性樹脂、接着剤、ピロジカルボン酸等)化学品 ・高選択的プロセス、完全水添触媒プロセス ・マイクロ構造を活かした機能性樹脂、バイオマスアロイ	資源確保 産業競争力	中	中期	500	化粧品、食品、接着剤、洗剤、医薬品、合成繊維等高分子関連産業
		G060	構造保持セルロースによる機能化学品製造技術	・セルロース繊維のシングルナノファイバーへの転換 ・触媒酸化技術によるセルロース変換 ・軽量高強度材料 ・機能性バイオマス樹脂、バイオマスアロイ	資源確保 産業競争力	小	中期、長期	500	化粧品、医薬品、自動車、建材、合成繊維等高分子関連産業
		G061	新規酵素等を利用したバイオマスの利用技術	・酸化還元酵素による高分子モノマー、ファインケミカルズ製造 ・酵素モジュール触媒プロセス	資源確保 産業競争力	中	長期	500	化粧品、食品、洗剤、医薬品、合成繊維等高分子関連産業
		G062	油脂等からの化学品原料・液体燃料製造技術	・グリセリン副生抑制プロセス ・油脂系バイオマスからの有効成分の高効率抽出、分離プロセス	資源確保 産業競争力	中	中期、長期	500	化粧品、食品、接着剤、洗剤、医薬品、合成繊維等高分子関連産業
		G063	気体原料や非食糧資源からのプラスチック、モノマー等化学品製造技術の開発	・バイオガス、空気等気体原料を原料とする化学品原料製造技術 ・非食糧資源を原料とするポリ乳酸、PBS等、L-乳酸、D-乳酸、バイオエタノール/ブタノール、BTL等製造 ・セルロースの革新的糖化技術 ・セルロースナノコンポジットを用いた光通信関連部材、ディスプレイ部材等の開発	省エネ 資源確保 産業競争力	大	中期、長期	1,000	化学品原料、自動車、電機電子、日用品等広範囲
	易リサイクル加工用材料とプロセス	G064	積層フィルムの代替材料、及び易リサイクル材料(再掲)	・フィルムの単層化、相溶化等によるリサイクル性の向上:単相化フィルムでのパッケージ性能保持 ・易剥離性積層フィルムと易解体接着剤の開発 ・光配線フィルム材料 ・リサイクル可能な同時多層積層成膜製造技術 ・環境適合型重層製膜プロセス	資源確保、リサイクル	中	短期、中期	500	包材、建材、日用品
		G065	解体性接着材料と易リサイクル加工法	・機能性マイクロカプセル、エポキシ樹脂等材料の改良 ・多機能多成分性接着剥離用フィルム ・新たな剥離プロセス:熱、通電、発泡などによる接着材料の剥離プロセス構築	省エネ、省資源	小	短期、中期	500	包材、建材、文房具、等
		G066	易リサイクル、易分解性粘着剤及び自己剥離材料の開発(再掲)	・非エポキシ系樹脂等のリサイクル材料:リサイクルが困難な熱硬化性樹脂であるエポキシ樹脂を代替 ・熱可塑性樹脂の活用によるリサイクル性の向上	資源確保、リサイクル	小	中期	500	建築土木、自動車、電機電子等
	CO2分離・回収・利用技術	G067	GO2等の分離・回収	・分離方法の確立(化学吸収法、物理吸収/吸着法、膜分離法、未利用低品位熱利用による吸収液再生法) ・化学吸収(未利用廃熱利用、低再生エネルギー吸収液開発) ・膜分離(高選択性膜開発、分離膜の大型化、連続製造) ・MOF等有機金属錯体の開発	地球環境、リサイクル	大	長期	500	電力供給産業・鉄道
		G068	超臨界流体の加工プロセスへの利用(再掲)	・超臨界CO2による塗装、表面処理、重合、発泡、複合化、洗浄、めっき等、選択的分解、可溶化等 ・有機溶媒代替反応場	リスク削減	小	短期	500	機械、金属加工産業

グリーン・サステナブルケミストリー分野の技術マップ(5/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グレースは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色:プロセスイノベーション 青色:マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小:数万吨未満 中:数十万吨以下 大:100万吨以上	実用時期 短期:2016年以降 中期:2020年以降 長期:2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
		2010							
資源	フッ素資源リサイクル(フッ素化学)	G069	CO ₂ を原材料としたポリカーボネート樹脂等化学品製造技術の開発	・脂肪族、芳香族ポリカーボネート等化学品製造技術 ・低温、低濃度CO ₂ 活性触媒	資源確保 リスク削減	中	中期、長期	500	電機電子、包材、窓、封止材等
		G070	フッ素系機能化学品代替材料の開発	・低温硬化係数、低オゾン層破壊、新規環境適合型含フッ素化合物 ・冷媒、発泡剤、噴射剤、絶縁材、半導体/液晶用代替材料 ・炭化水素系、ヘテロ化合物系代替物質	資源確保 産業競争力	中	中期、長期	500	機能性化学品・樹脂関連産業、電機電子等
		G071	廃蛍石、低品位鉱石等からのフッ化水素酸回収・製造技術の開発	・低濃度フッ素含有原料からの濃縮、分離技術:フロン類、フッ素樹脂からのフッ素の回収、再生利用のため高純度CaF ₂ 回収技術	リサイクル、資源確保	中	短期、中期	500	電機電子、鉄鋼、化学品関連産業
		G072	フッ素樹脂リサイクル技術の開発	難リサイクル材からの再利用、リサイクルプロセス ・カスケード利用プロセス	リサイクル、資源確保	小	短期、中期	500	樹脂リサイクル関連産業
	微細構造・精密構造形成技術	G073	印刷法による革新的加工材料開発(プリンタブルエレクトロニクス)	・印刷技術による有機トランジスタ、電子回路製造を可能とする材料・プロセス ・硬化性、絶縁性、耐熱性等の機能を持たせたインク材料開発。 ・大画面、高精細等の精密印刷技術、プロセスの低温化。	省エネ、省資源	大	短期	1,000	情報電子機器製造関連産業
		G074	分子自己組織化を利用した高性能ナノ・マイクロ材料の開発	・電子材料、記憶素子用熱硬化性、光硬化性樹脂 ・核酸やコラーゲン、抗体などの選択的結合を模した機能性高分子複合体)	省エネ、省資源	小	短期	500	情報電子機器製造関連産業
		G075	ナノ三次元構造制御による材料加工プロセスの開発	・熱溶解鋳型、溶媒溶解鋳型高分子材料 ・微小重力、光加工プロセス	省エネ、省資源	中	短期	1,000	情報電子機器・精密機器製造関連産業
		G076	新規リソグラフィ加工技術の開発	・ナノインクプリントを利用した電気化学法、表面処理等による加工技術:ナノレベルのインクによるリソグラフィ技術	省エネ、省資源	小	短期	500	情報電子機器・精密機器製造関連産業
	水処理プロセス	G077	工業用超高純度水(再掲)	・次世代NF、RO、耐酸化性非フッ素膜等による水循環 ・オンプレ、MBR等による難分解物質分解プロセス ・酸化剤、硫化物沈殿による汚泥削減プロセス ・汚染湖沼河川浄化用バイオマス由来大量安価な浄化膜	資源確保 産業競争力	大	短期、中期	1,000	めっき業、化学・石油、医薬品、コンドナート等広範囲の製造業
		G078	洗浄機能水の開発	・機能水の安定化(長寿命化) ・機能水、超純水の安価製造プロセス ・不純物回収分離膜プロセス	資源確保 産業競争力	中	短期	1,000	航空機、電気・電子・精密機器関連産業
	ナノ材料	G079	エレクトロニクス・マイクロマシン用ナノ実装材料の開発	・無機有機ハイブリッドナノ材料 ・電気化学プロセスによる新規ナノ材料製造技術:新規磁性ナノ粒子などを組み込んだ高次機能性ハイブリッド材料・プロセス	省資源 産業競争力	小	短期	500	電気・電子・精密機器関連産業
		G080	新規低誘電率ナノ材料の開発	・新規メソポーラス体材料の開発(誘電率1.3以下) ・次世代半導体製造技術	省エネ、省資源	小	中期	100	電気・電子・精密機器関連産業
		G081	光学機能用材料の開発	・ケイ素系ナノコンポジット有機無機等透明材料 ・ナノ技術による高屈折率光学透明材料 ・熱線吸収透明材料 ・ナノファイバー材料	省エネ、省資源	小	中期	100	光学加工、レンズ、医療、分析機器等
	バイオポリマー	G082	易リサイクル、カスケードリサイクル材料の開発	・リサイクルし易いバイオ樹脂、コンポジット材料、バイオマスアロイ等の製造 ・モノマー段階からの分子設計と重合技術開発	資源確保 産業競争力	小	長期	100	コンシューマプロダクト
		G083	生分解性次世代ゴム材料の開発(再掲)	・エラストマー、コンポジットによる弾性材料 ・バイオマスからの多輪型誘導体等を原料とした弾性体 ・バイオマス、ゴムのハイブリッド型弾性材料	省エネ、省資源	中	中期	1,000	建設部材、家電、食器等
	海洋開発	G084	化学技術による海洋開発	・造水、メタンハイドレート、CO ₂ 固定、ウラン・リチウム等希少元素の分離、回収技術 ・海洋バイオマス、有用有機・無機資源の効率的回収、利活用技術	資源確保 産業競争力	中	中期、長期	1,000	資源・エネルギー関連産業
	元素資源の確保	G085	めっきスラッジ等からの金属回収、減容化技術の開発	・新規凝集材、固化材による汚泥削減と有用資源(Ni,Zn,Cr他)の回収 ・油水分離プロセスによる金属イオン回収 ・微生物を利用した金属分離回収	省資源 産業競争力	大	短期、中期	1,000	金属資源リサイクル関連産業・金属加工業・電機電子産業
複合材料処理	G086	化学処理による複合材料・混紡繊維等リサイクル技術の開発	・界面活性型抽出・分離プロセス ・繊維リサイクルのための炭化水素系溶媒分離プロセス	省エネ、省資源	小	短期、中期	100	高分子素材リサイクル関連産業	
環境	G087	クリーン再資源化可能な塩化ビニル樹脂	・有機溶剤の回収再利用 ・塩化ビニル樹脂および可塑剤の回収再使用率アップ ・有害安定剤を使用しない塩化ビニルの開発	リスク削減、資源多様化	大	中期、長期	1,000	資源リサイクル関連産業・化学・電機電子等の製造業	

グリーン・サステナブルケミストリー分野の技術マップ(6/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グレーは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色:プロセスイノベーション 青色:マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小:数万吨未満 中:数十万吨以下 大:100万吨以上	実用時期 短期:2016年〜中期:2020年以降 長期:2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
環境	ハザード管理されたハロゲン製品	G088	過酸化水素酸化を利用した高機能材料製造技術	・過酸化水素等による新酸化プロセス ・ハロゲンを含まない超高機能電子材料	リスク削減、資源多様化	大	中期、長期	1,000	封止材、プラスチック、医薬品、絶縁材料等
		G089	ジクロロメタン代替物質としての機能水	・有害なジクロロメタン代替溶剤としての機能水 ・物理的・化学的方法で機能付与	リスク削減、国際規制	中	短期、中期	500	脱脂洗浄(機械加工、電子材料)、有機合成溶媒
		G090	生活用浄水技術(再掲)	・非塩素系消毒、微量有機物/無機物対策、膜技術、光分解触媒等 ・オンサイト小型浄水処理プロセス	水資源、リサイクル	大	中期、長期	500	下水道、過疎地排水等
		G091	CO ₂ 利用ノンハロゲンプロセスの開発	・CO ₂ をつかったポリカーボネート、ウレタン、イソシアネート等化学品製造プロセス ・合成ガス原料の効率化製造プロセス	リスク削減、資源多様化	中	中期、長期	500	基礎化学品、ファインケミカル製造業
		G092	ノンフロン洗浄剤、溶剤、機能材料の開発	・新規酸化水素系脱フロン代替溶剤(配合技術、添加剤等) ・環境負荷が小さい新規フロン洗浄剤の開発	国際規制産業基盤	小	短期、中期	100	電気・電子機器・機能材料関連産業
		G032	ブロム及びリンフリー新規難燃材料の開発(再掲)	・表面修飾、クラスター加工によるハイブリッド化、微細構造化 ・シリコン系、複合金属系新規難燃剤:ポリカーボネート、発泡ウレタン	リスク削減、国際規制	大	短期、中期	1,000	電気・電子機器・機能材料関連産業
		G093	ノンフロン断熱・保温・保冷物質の開発(再掲)	・ポスト代替フロン断熱材料 ・超臨界CO ₂ 利用空間システム ・環境への負荷がない新規保冷物質 ・低温硬化係数、低オゾン層破壊、環境適合型新規フロン化合物	リスク削減、国際規制	大	短期、中期	500	建材・食品保管・輸送関連産業
	製造工程廃棄物・副生物の大幅削減	G094	新規固体酸・塩基触媒による化学プロセスのグリーン化	・塩化アルミニウム、硫酸、硝酸等の代替触媒(ゼオライト、Ti系触媒、ヘテロポリ酸) ・カボラクタム、MMA、ニトロ化合物プロセスのグリーン化	廃棄物削減、資源多様化	大	中期、長期	1,000	医薬品、香料、石油製品、潤滑油、電子材料、農業、防食剤等
		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 ・新規触媒による大型生産プロセスへの転換(医薬原体、電子材料等) ・マイクロリアクター(流体特性)と触媒(分子特性)の最適化探索	廃棄物削減、資源多様化	大	中期、長期	1,000	医薬品、香料、石油製品、潤滑油、電子材料、農業、自動車部品、建材、液晶材料等
		G096	ナノ空間触媒による新合成プロセス	・石油化学プロセス用触媒、ナフサ接触分解等 ・新規触媒によるエステル化、骨格異性化反応の効率改善とグリーン化	省エネ、廃棄物削減、資源多様化	大	中期、長期	500	石油化学製品、光学材料、医薬・農業等製造業
		G097	低環境負荷型廃水処理の開発	・化学/物理ハイブリッド処理によるバイオプロセスの効率化 ・汚泥の減量、再利用等のための新規処理剤 ・(工場)排水の高清浄化・有害成分の高濃縮回収技術(高濃縮と高濃縮の両立)	省エネ、省資源	大	中期、長期	1,000	水処理業
	環境負荷が小さい製品	G025	超耐熱性、強度等を有する新規材料(ポリオレフィン類等)の開発(再掲)	・ポストメタロセン触媒、コモノマー材料 ・金属、高分子ハイブリッド材料 ・高密度、易加工ポリオレフィン材料の開発	省エネ、長寿命	中	短期、中期	1,000	建材、電子材料、機械材料、医療、輸送材料等
		G098	易リサイクル型高弾性ゴムの開発(再掲)	・高純度モノマー材料による易リサイクル ・配合技術を利用したカスケード利用	省エネ、省資源	中	省エネ、省資源	1,000	建設部材、家電、食器等
		G099	環境安全性が高い添加剤の開発	・ポリオレフィン等向け添加剤材料 ・天然由来添加剤	資源多様化、安全	小	中期	100	レザー製品、壁紙、電線等
		G100	植物由来原料からの高性能防錆剤の開発	・松脂等からの防錆剤 ・新規モノマー/樹脂開発 現行樹脂の改良	資源多様化、安全	小	中期	100	家具、建材、食料品防食等
		G101	アスベスト代替シール材の開発	・膨張黒鉛の改良 ・つなぎ目のない配管材料の開発 ・粘土鉱物等とのハイブリッドシール材	国際規制産業基盤	大	短期、中期	500	化学・石油プラント、製鉄、発電所等大型プラント、配管設備施工関連産業
	環境負荷が小さい加工プロセス	G102	亜臨界、超臨界流体を利用した表面処理技術	・超臨界CO ₂ による塗装、表面処理、重合、発泡、複合化、洗浄、めっき等	リスク削減	中	短期	500	機械、金属加工産業
		G103	ジクロロメタン代替としての洗浄プロセス	・超臨界流体による半導体、機械等の精密洗浄 ・洗浄プロセスの開発	リスク削減、国際規制	中	短期、中期	500	脱脂洗浄(機械加工、電子材料)、有機合成溶媒
G104		脱VOCリソグラフィエターニング技術の開発	・非VOC型液状硬化性樹脂 ・液状効果性樹脂によるナノインプリントプロセス	リスク削減	中	短期	500	電気・電子・精密機器関連産業	
革新的燃焼による大気環境の保全	G105	クリーン燃料(水素以外)・清浄燃焼技術の開発	・リンバーン燃焼触媒の性能向上、耐熱性、長寿命化 ・高濃度酸素の製造技術による煤煙、NOx等抑制技術 ・重質残油クリーン燃料転換	地球環境、産業競争力	大	短期、中期	1,000	自動車、エネルギー、化学・石油・製鉄プロセス	
	G106	燃焼排ガス浄化技術の開発	・NOx直接分解触媒、DPF触媒等による排ガス浄化:EOP向け燃焼触媒	地球環境、産業競争力	大	短期、中期	1,000	セメント、廃棄物処理業、小型発電機等	

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術マップ(7/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グリーンは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色:プロセスイノベーション 青色:マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小:数万吨未満 中:数十万吨以下 大:50万吨以上	実用時期 短期:2016年〜2019年 中期:2020年以降 長期:2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
環境	水環境の保全	G107	非金属元素含有排水の高度処理技術の開発	・バイオマス、シリカ系吸着材によるBF回収 ・アナモックス菌による硝酸性窒素等分解プロセス	水資源、リサイクル	中	中期、長期	500	金属加工、化学プラント、医薬品、上下水処理
		G108	難分解性物質含有排水の高度処理技術の開発	・オゾン曝気、MBR等による高効率分解プロセス ・油水分離プロセスによる分離	水資源、リサイクル	中	中期、長期	500	金属加工、化学プラント、医薬品、上下水処理
		G109	植物・バイオマス起源生分解性溶剤の開発	・天然物起源生分解性溶剤:乳酸エステルなどの環境対応溶媒	資源多様化、リスク削減	小	中期、長期	100	洗剤、香料、プラスチック容器、化粧品等
		G110	環境調和型潤滑油添加剤、及び生分解性潤滑油の開発	・天然物由来原料(誘導體化)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(誘導體化)による生分解性界面活性剤:アミノ酸や脂肪酸系界面活性剤	資源多様化、リスク削減	小	中期、長期	500	洗剤、香料、食品加工、洗浄剤、化粧品等
		G112	リン資源の高効率回収、代替技術の開発	・排水や機能性製品等に含まれるリン回収 ・土壌からの残存P回収プロセス ・非リン系農薬、PFOS,PFOA対応	国際規制、資源確保	中	短期、中期	500	農薬、消化剤、プラスチック等
		G113	重金属含有排水、汚泥の新規高度処理技術の開発	・回収重金属のカスケード利用:精練、精製 ・回収汚泥のカスケード利用:スラッジからの重金属回収、精練、精製	省エネ、省資源	大	中期、長期	1,000	無機系資源リサイクル関連産業・化学・電機電子等の製造業
	リサイクル促進	G114	無機系副生物・廃棄物のリサイクル、及びカスケードリサイクル技術の開発	・金属イオン回収材、磁性プロセスの効率化 ・酸化物固化、廃棄材による汚泥減容等 ・廃酸・廃アルカリ含むリサイクル技術	省エネ、省資源	大	中期、長期	1,000	無機系資源リサイクル関連産業・化学・電機電子等の製造業
		G115	易リサイクル型コンポジット材料の開発	・GFRP、ナノファイバー等コンポジット材料 ・ナノテクの応用などでコンポジット率を低減化 ・バイオ樹脂、バイオアロイをベースとした易リサイクル型コンポジット材料	省エネ、省資源	中	中期、長期	1,000	自動車、電機電子、建材等
		G028	省エネ成形、易リサイクル型硬化性樹脂の開発(再掲)	・コモノマー、ハイブリッドモノマー利用材料・樹脂 ・超臨界ガス利用による発泡・加工 ・熱可塑性設計によるリサイクル材料	省エネ、省資源	中	中期、長期	500	電機電子等広範囲
		G064	積層フィルムの代替材料、及び易リサイクル材料(再掲)	・フィルムの単層化、相溶化等によるリサイクル性の向上:単相化フィルムでのバックージ性能保持 ・易剥離性積層フィルムと易解体粘着剤の開発 ・光配線フィルム材料 ・リサイクル可能な同時多層積層成膜製造技術 ・環境適合型重層製膜プロセス	資源確保、リサイクル	中	短期、中期	500	包材、建材、日用品
		G033	多孔質断熱材料の開発(再掲)	・廃土木資材利用による断熱材料 ・廃プラスチック利用多孔質断熱材料 ・廃塗材利用による断熱材料 ・多孔質樹脂、バイオマスアロイを利用した断熱材	省エネ、長寿命	大	短期、中期	1,000	空調、建材
		G034	易リサイクル性断熱部材の開発(再掲)	・高断熱性成形樹脂、無機断熱材料 ・バイオ樹脂、バイオマスアロイを用いた易リサイクル性断熱部材 ・材料カスケードプロセス	省エネ、廃棄物削減	中	短期、中期	1,000	製造業(化学、石油、セメント、機械加工等)、空調、建材、
		G116	高機能繊維材料の開発	・新ポリウレタン材料(体感向上素材、温湿度コントロール、撥水、耐熱・耐薬) ・天然由来原材料の高度化利用	資源多様化、生活向上	小	短期、中期	500	繊維、装飾品等
		G027	光機能を有するプラスチック材料の開発(再掲)	・ポリカーボネート、ポリメタクリレート等の高機能光ファイバ材料等 ・複合材料による光透過性向上、低減減、高速応答等	機能性向上	大	中期、長期	1,000	建材、電子材料、機械材料、窓ガラス、パソコン、照明材料等
生活	日用品の快適性向上と低消費化	G117	軽量化素材	・有機無機コンポジット、バイオマス原料による高度製造技術 ・金属代替材料(エンブラ等)の低価格化	省エネ、省資源	大	短期、中期	1,000	自動車、寝具、家具等
		G035	省電力照明材料の開発(再掲)	・超微量レアメタルによる次世代LED、有機EL、無機EL等材料 ・低価格発光材料の開発による普及:ZnO薄膜、ナノ材料	省エネ	大	短期、中期	1,000	街灯、ビル照明、コンビナート、住宅等
		G118	電気製品の汎用修理可能な機能材料	・製造容易でリサイクル可能な材料開発(例えばCPUボードの換装)	リサイクル、産業競争力	小	短期、中期	500	電気製品、電子材料、太陽光発電、液晶材料等
	G119	高機能性食品包材	・保冷・酸化防止・脱水・保温・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	
	食の安全と量の確保	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・サステナブルケミストリー分野の技術マップ(8/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グレーは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色:プロセスイノベーション 青色:マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小:数万吨未満 中:数十万吨以下 大:100万吨以上	実用時期 短期:2016年〜 中期:2020年 長期:2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野		
		2010									
生活	快適な省資源ロングライフ住宅	G122	水分、養分保持材料の開発	・高性能吸水性材料(長期保存) ・エチレン吸収剤	生活向上、安全	中	短期、中期	500	食品加工・包装・流通・輸送関連産業		
		G123	200年住宅用外装・内装材料・断熱材	・高分子、金属ハイブリッド断熱材等 ・耐紫外線塗料、ペンキ材料 ・光触媒による防汚、浄化材料	生活向上、安全	大	短期、中期	1,000	建材・居住用素材関連産業		
		G124	高効率太陽電池材料	・負荷変動対応型高密度蓄電材料(家庭用) ・高効率かつ低価格な太陽電池 ・家庭の形状に適応可能な柔軟性材料 ・有機太陽電池	新エネルギー	大	中期、長期	500	照明、電子材料、住宅、オンサイトエネルギー産業		
		G035	省電力照明材料の開発(再掲)	・超微量レアメタルによる次世代LED、有機EL、無機EL等材料 ・低価格発光材料の開発による普及:ZnO薄膜、ナノ材料	省エネ	大	短期、中期	1,000	街灯、ビル照明、コンビニナート、住宅等		
		G032	フロム及びリンフリー新規難燃材料の開発(再掲)	・表面修飾、クラスター加工によるハイブリッド化、微細構造化 ・シリコン系、複合金属系新規難燃剤:ポリカーボネート、発泡ウレタン	リスク削減、国際規制	中	短期、中期	1,000	電気・電子機器・機能材料関連産業		
		G125	重塗装用完全水性塗料の開発(再掲)	・新規オリゴマー高分子材料による硬化剤、基剤塗料 ・ミニエマルション材料による新塗料	地球環境、産業競争力	大	短期、中期	1,000	建材、道路、大型構造物(ビル、橋)等		
		G126	ノンVOC含有建材用材料の開発	・水性、シリコン系接着剤及び接合材料 ・接着剤を使わない接合技術	リスク削減、生活向上	大	短期、中期	1,000	建材・居住用素材関連産業		
		G127	ノンVOC系塗料・インキの開発	・完全水性塗料、インキ材料 ・非溶剤型塗料、インキ	リスク削減、生活向上	中	短期、中期	500	文具、建材、組み立て加工関連産業		
		G128	安全性殺虫防虫剤・防かび剤・除菌剤の開発	・光触媒、ナノ触媒型抗菌剤(Ag/TiO ₂) ・天然物由来触媒	リスク削減、生活向上	小	短期、中期	500	農業、食品加工、衛生関連素材・管理関連産業		
		G129	完全防臭・消臭材料の開発	・ナノ触媒型消臭剤として(ZnO/TiO ₂) ・ナノ孔型消臭剤(ナノゼオライト他) ・高寿命消臭分解型材料	リスク削減、生活向上	中	短期、中期	500	農業、食品加工、衛生関連素材・管理関連産業		
		G130	遮音、遮熱、断熱、電磁波遮蔽材料の開発	・遮音、遮熱、断熱可能な新規ガラス、新規建材 ・断熱効果が高く安全な塗料等 ・電磁波を効率的に遮断する材料	リスク削減、生活向上	大	短期、中期	1000	建材、構造物、空調設備、ホール等		
		G032	ノンフロン断熱・保温・保冷物質の開発(再掲)	・ポスト代替フロン断熱材料 ・超臨界CO ₂ 利用空調システム ・環境への負荷がない新規保冷物質 ・低温暖化係数、低オゾン層破壊、環境適合型新規フロン化合物	ヒートアイランド対策	大	短期、中期	1,000	空調、建材		
		G033	多孔質断熱材料の開発(再掲)	・塵土木質材利用による断熱材料 ・廃プラスチック利用多孔質断熱材料 ・廃建材利用による断熱材料 ・多孔質樹脂、バイオアロイによる断熱部材	省エネ、長寿命	大	短期、中期	1,000	空調、建材		
		G034	易リサイクル性断熱部材の開発(再掲)	・高断熱性成形樹脂、無機断熱材料 ・バイオ樹脂、バイオマスアロイを用いた易リサイクル性断熱部材 ・材料カスケードプロセス	省エネ、廃棄物削減	大	短期、中期	1,000	製造業(化学、石油、セメント、機械加工等)、空調、建材、		
		G131	耐震材料の開発	・軽量、超強度プラスチック材料 ・免震ゴム、 ・耐震工法適合材料	生活向上、安全	大	短期、中期	1,000	建材・居住用素材関連産業		
		生活	容易で安全な医療・介護と身体機能補助	G132	介護ロボット用構成材料の開発	・新規金属・高分子軽量材料 ・感情変化、触感、臭い検知センサー ・目的に適合した機能ソフト	生活向上、安全	小	短期、中期	1,000	医療・医用材料関連産業
				G133	身体補助材料の開発	・(人工筋肉など)高性能身体補助材料 ・人体に親和性の高い機能を実現する材料 ・拒絶反応のない長期安定材料	生活向上、安全	小	短期、中期	1,000	医療・医用材料関連産業
				G134	医薬・診断薬の開発	・独自性の高い医薬品 ・機能性タンパク質検出用簡易キット ・生活習慣病をモニタリングできるデバイス ・簡易で信頼性のある診断薬、キット、診断システムの開発	生活向上、安全	小	短期、中期	1,000	医療・医用材料関連産業
G135	長寿命ペースメーカー用電池の開発			・高密度小型電池材料(次世代リチウム電池等) ・軽量化、安全性向上	生活向上、安全	小	短期、中期	1,000	医療・医用材料関連産業		
G136	簡易人工透析システムの開発			・人工透析用新規分離材料:取り扱いやすく安価な透析膜 ・院外で安全に人工透析を行うシステム	生活向上、安全	小	短期、中期	1,000	医療・医用材料関連産業		
G137	細胞(骨髄等)代替担体材料の開発			・2次元/3次元の成形性・体内への親和同化性・目的細胞の培養プロセス ・高機能性ステント、人工骨等	生活向上、安全	小	短期、中期	100	医療・医用材料関連産業		
G138	体内埋め込み型の超小型システム			・埋め込み型の診断システムやインスリンなどの投与システム、人工臓器など	生活向上、安全	小	短期、中期	1,000	医療・医用材料関連産業		
G051	新しい電池材料の開発(再掲)			・次世代リチウムイオン電池向け材料:リチウム硫黄系新固体電解質、不燃性有機電解質、非Co系正極 ・新型ニッケル・水素電池、リチウムポリマー電池、リチウム硫黄系電解質等	省エネ、産業競争力	中	短期、中期	1,000	商用施設、住宅、オンサイト小型発電、移動体、パソコン、携帯電話等		

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術マップ(9/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グレーは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色:プロセスイノベーション 青色:マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小:数万吨未満 中:数十万吨以下 大:100万吨以上	実用時期 短期:2016年中 中期:2020年以降 長期:2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野
生活	安全・クリーン・省エネで便利な交通機関	G052	有機ラジカル電池・レドックス高分子材料の開発(再掲)	・非リチウムイオン電解質 ・短時間充電・高容量・高出力で発火や爆発リスクの低い有機/ラジカルポリマー電池	省エネ、産業競争力	小	短期、中期	100	商用施設、住宅、オンサイト小型発電等
		G053	高蓄電池用電解液の開発(再掲)	・新規な高容量・安全なイオン液体:イミダゾリウムやピリジニウムのリチウムイオン液体	省エネ、産業競争力	小	中期、長期	100	商用施設、住宅、オンサイト小型発電、移動体、パソコン、携帯電話等
		G054	移動電源、及び固定電源用高蓄電エネルギー材料の開発(再掲)	・新型固体電解質、電解質膜、イオン液体等の開発:不燃性により安全性向上、移動体等への適用	省エネ、産業競争力	中	中期、長期	1,000	電子機器、バス、電車等用エネルギー供給・利用関連産業
		G055	個人用移動システム駆動源の開発(再掲)	・軽量小型電池等の開発:	省エネ、産業競争力	中	中期、長期	100	機械ロボット、車椅子
		G139	交通制御システム	・超高速通信移動体向け材料 ・暗視対応色素材料、液晶材料の開発	生活向上、安全	大	短期、中期	500	交通、電子材料、ソフト、液晶等
		G140	生体情報センサー・デバイス	・有機ハイブリッドセンサー材料 ・生体の温度、動作等の自動感知センサーシステム ・衝突防止システム用センサー材料	生活向上、安全	小	短期、中期	100	医療・医用材料関連産業
		G141	高機能化学センサー	・高感度反応化学物質 ・新機能デザイン	生活向上、安全	中	短期、中期	500	セキュリティ、環境
		G050	超高蓄電型二次電池材料の開発(再掲)	・安全性の高い、正負極活性物質、炭素電極、電解液、セパレーター(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
	きれいな水・空気の確保	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
		G090	生活用浄水技術(再掲)	・非塩素系消毒、微量有機物/無機物対策、膜技術、光分解触媒等 ・オンサイト小型浄水処理プロセス	水資源、リサイクル	大	中期、長期	500	下水道、過疎地排水等
		G111	易生分解性界面活性剤の開発(再掲)	・天然由来原料(誘導体化)による生分解性界面活性剤:アミノ酸や脂肪酸系界面活性剤	資源多様化、リスク削減	中	中期、長期	500	洗剤、香料、食品加工、洗浄剤、化粧品等
	廃棄物の削減	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
		G064	積層フィルムの代替材料、及び易リサイクル材料(再掲)	・フィルムの単層化、相溶化等によるリサイクル性の向上:単相化フィルムでのパッケージ性能保持 ・易剥離性積層フィルムと易解体粘着剤の開発 ・光記録フィルム材料 ・リサイクル可能な同時多層積層成膜製造技術 ・環境適合型重層製膜プロセス	資源確保、リサイクル	小	短期、中期	500	包材、建材、日用品
		G066	易リサイクル、易分解性粘着剤及び自己剥離材料の開発(再掲)	・非エポキシ樹脂等のリサイクル材料:リサイクルが困難な熱硬化性樹脂であるエポキシ樹脂を代替熱可塑性樹脂の活用によるリサイクル性の向上	資源確保、リサイクル	中	中期	500	建築土木、自動車、電機電子等
G098		易リサイクル型高弾性ゴムの開発(再掲)	・高純度モノマー材料による易リサイクル ・配合技術を利用したカスケード利用	省エネ、省資源	中	省エネ、省資源	1,000	建設部材、家電、食器等	
化粧品材料	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	
	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、電車等用エネルギー供給・利用関連産業
		G146	車体軽量化、高機能内装	高強度・軽量・超耐熱性に加え、遮音、断熱、紫外線吸収、アレルゲン削減、導電性等の機能を高めた構造材用新規コンポジット樹脂材料	省エネ、産業競争力	大	中期、長期	1,000	陸上車両・航空機等エネルギー利用産業
		G147	無騒音舗装、低摩擦材料	トライボロジーによる無騒音道路舗装材、低転がり摩擦タイヤ、機械摩擦低減による、駆動エネルギーロス削減	省エネ、産業競争力	大	中期、長期	1,000	自動車道路・タイヤ産業
	G148	高度交通制御・事故防止システム	・超高速移動体通信向け材料 ・暗視対応色素材料、液晶材料 ・センサー用高感度反応化学物質 ・生体情報センサーデバイス	省エネ、産業競争力	小	中期	500	都市空間制御	
	水(良質な水資源確保システム)	G077	工業用超高純度水(再掲)	・次世代NF、RO、耐酸化性非フッ素膜等による水循環 ・オン曝気、MBR等による難分解物質分解プロセス ・酸化剤、硫化物沈殿による汚泥削減プロセス ・汚染湖沼河川浄化用バイオマス由来大量安価な浄化膜	資源確保 産業競争力	大	短期、中期	1,000	めっき業、化学・石油、医薬品、コンピュータ等広範囲の製造業
G090		生活用浄水技術(再掲)	・非塩素系消毒、微量有機物/無機物対策、膜技術、光分解触媒等 ・オンサイト小型浄水処理プロセス	水資源、リサイクル	大	中期、長期	500	下水道、過疎地排水等	

グリーン・サステイナブルケミストリー分野の技術マップ(10/11)

サステイナビリティ	技術項目 (グレーは重要技術項目)	(ローズ色は重要テーマ)	テーマ名 (茶色:プロセスイノベーション 青色:マテリアルイノベーション)	研究課題	キーワード	CO2削減効果 小:数万吨未満 中:数十万吨以下 大:50万吨以上	実用時期 短期:2016年ごろ 中期:2020年以降 長期:2030年以降	期待される市場規模 (億円/年)	関連市場分野		
		2010									
共通		G149	排水の高度処理技術	・高濃縮と高濃縮の両立する排水のリサイクル技術	水資源、リサイクル	小	中期、長期	500	金属加工、化学プラント、医薬品、下水処理		
	共通基盤技術	分析化学	G150	微細、微量、高速、迅速な化学分析(構造決定、成分分析など)	・様々な技術へ波及する各種分析技術の向上 原子・分子スペクトル分析、レーザー分光分析、X線分析、電気化学分析、質量分析、フローインジェクション分析、クロマトグラフィー・分離科学、電気泳動分析、マイクロ・ナノ分析、顕微鏡、界面分析、材料分析・材料解析等		—	—	—	全分野	
		計算科学	G151	技術の発展に寄与するための計算科学	・ナノテク分野など特に必要とされる分野へのより適用し易いソフトの開発		—	—	—	全分野	
		環境評価	G152	LCA評価	・信頼性の高いLCA(データ・境界条件の共通化による客観性の向上)		—	—	—	—	全分野
			G153	リスク評価	・リスク初期評価のための有害性評価、暴露評価精度向上		—	—	—	—	全分野

ーグリーン・サステイナブルケミストリー(GSC)重要技術俯瞰図ー

統合化による化学技術システムの最適化
(2030年を見据えて)

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

エネルギー

工 熱エネルギー変換利用技術

- ☆低品位排熱の蓄熱・輸送・回収材料およびプロセス
- ★低温排熱エネルギー変換用熱電変換材料
- ★低摩擦表面素材/潤滑物質
- ★高性能デシカント空調用高湿潤吸着材料
- ☆化学エネルギー変換高密度蓄熱材料・プロセス(触媒他)

工 再生可能エネルギー

- ★風力発電用新規材料
- ★太陽電池材料
(色素増感型、薄膜シリコン系、有機半導体型、ナノ材料)

水素製造

- ☆高効率水素製造技術(水蒸気改質、及び水電気分解等)

資 微細構造・精密構造形成技術

- ★印刷法による革新的加工材料開発
- ★分子自己組織化を利用した高性能ナノ・マイクロ材料
- ★ナノ三次元構造制御による材料加工プロセス
- ★新規リソグラフィ加工技術の開発

資 低品位資源利用技術

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

資 次世代蓄電材料技術

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

資 稀少金属の有効利用と代替材料技術

- ★希少元素、貴金属代替新材料
- ★稀少金属やNi,Co,Wを使わない高耐熱材料

資 非枯渇性資源の化学品・材料化

- ☆バイオマスからの化学品原料製造技術
- ☆構造保持セルロースによる機能化学品
- ☆非食糧資源からのプラスチック、モノマー等化学品製造技術

資 易リサイクル加工用材料・プロセス

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

資 CO2分離・回収・利用技術

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

資源

工 グリーン製造化学プロセス

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

工 IT向け化学品(電子材料)

- ★光利用率向上有機半導体材料の開発
- ★新規封止材、絶縁材料、パワー半導体等の開発
- ★超高密度超ナノ情報素子材料

4分野共通

共 水

(化学技術利用による良質な水資源確保システム)

- ☆工業用超高純度水
- ☆生活用浄水技術
- ☆排水の高度処理技術

共 輸送システム

(低環境負荷・高利便性交通輸送システム)

- ★電池式駆動
- ★車体軽量化、高機能内装
- ★無騒音舗装、低摩擦材料
- ★高度交通制御・事故防止システム材料

環境

環 製造工程廃棄物・副生物の大幅削減

- ☆新規固体酸・塩基触媒による化学プロセスのクリーン化
- ☆従来型有機合成のシンプル化
- ☆ナノ空間触媒による新合成プロセス

環 環境負荷が小さい加工プロセス

- ☆亜臨界、超臨界流体を利用した表面処理技術
- ☆ジクロロメタン代替としての洗浄プロセス

環 革新的燃焼による大気環境の保全

- ☆クリーン燃料(水素以外)・清浄燃焼技術

環 ハザード管理されたハロゲン製品

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

環 環境負荷が小さい製品

- ★超耐熱性、強度等を有する新規ポリオレフィン類
- ★易リサイクル型高弾性ゴム

生 日用品の快適性向上と低消費化

- ★高機能繊維材料
- ★光機能(材料透明化、低減衰、高速応答等)プラスチック
- ★軽量化素材
- ★省電力照明

生 容易で安全な医療・介護と身体機能補助

- ★介護ロボット用構成材料(センサー等)
- ★身体補助材料(人工筋肉等)

生活

GSC概念図

参考資料1

安全・安心で競争力ある持続可能社会の創生

グリーン・サステイナブル ケミストリーの実現

社会環境の変化

プロセスイノベーション

(省エネ、廃棄物最小、資源有効利用製造技術)

マテリアルイノベーション

(安全・安心で高機能製品)

エネルギー

- 省エネルギー
- エネルギーの効率的利用
- 新エネルギー・未利用エネルギー利用

資源

- 化石資源の高度利用
- 原料の多様化(天然ガス、石炭、バイオ等)
- 未利用、低品位資源の有効活用

環境

- 環境負荷物質の低減
- 廃棄物・副生物の低減
- 危険物質等を使わない、作らない

生活

- 衣食住の向上
- 健康増進
- アメニティ増進

大量生産・消費・廃棄社会

グリーン・サステイナブルケミストリー (GSC)

サステイナブル社会

2010年

2020年

2030年

2050年

エネルギー

増え続ける世界のエネルギー需要
(日本のエネルギー自給率6%、石油の中東依存度86%) 非在来型化石資源、石炭、バイオマス等の利用拡大

さらなる省エネルギー推進 自然エネルギー利用拡大(太陽光、風力等)

大幅なCO2削減圧力 原子力発電の利用拡大(高レベル廃棄物処理処分) 水素エネルギー

資源

原油価格・供給変動への対応

原油重質化低品位化 資源の多様化(石油、天然ガス、バイオマス、石炭等) 石炭の環境適合型高効率利用技術

石油資源の高度利用、省資源 世界的な水資源の不足

希少元素の偏在・枯渇 水の高度利用、国際貢献

資源リサイクル 省資源技術、代替物質の開発 希少元素代替・リサイクルの革新的技術

環境

大気汚染防止、水質汚濁防止、産業廃棄物処理、土壌汚染防止等規制強化(化審法・化管法の改正)

リスクの高い物質の回避 低環境負荷・低リスク・長寿命材料の開発

環境負荷物質削減 廃棄物・副生物の削減
欧州規制の強化(Rohs法、REACH法) 新興国への波及 環境調和型製品への転換

国際規制を先取りした製品の開発

生活関連

生活環境場のリスク最小化対応

衣食住、交通・通信の環境負荷低減
廃棄物縮減(再利用、長寿命化、軽量化)

アメニティ増進

低環境負荷ライフスタイル適合製品
バリアフリー化・福祉対応製品

ライフスタイルの転換

価値観の転換
快適でサステイナブルな社会の実現

GSCの実績例

1) 自動車・航空機の軽量化を進めるプラスチック

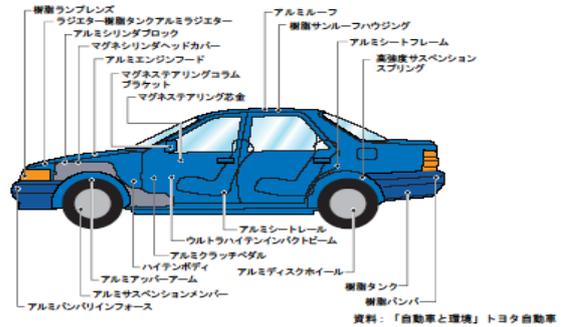
自動車の軽量化は、燃費向上の重要なポイントである。車体の約7割をしめる鉄の比重が7.8であるのに対して、プラスチックでは比重が1であることから軽量化に大きな寄与が期待できる。乗用車の場合、**プラスチックが占める重量構成比は1973年で2.9%**であったものが、**2007年には、8~10%**と向上しており、体積比ではほぼ1:1にまでなり大幅な省エネに貢献している。

航空機においても高靱性炭素繊維複合材料等が利用され始めている。

自動車に使用されるプラスチック類

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

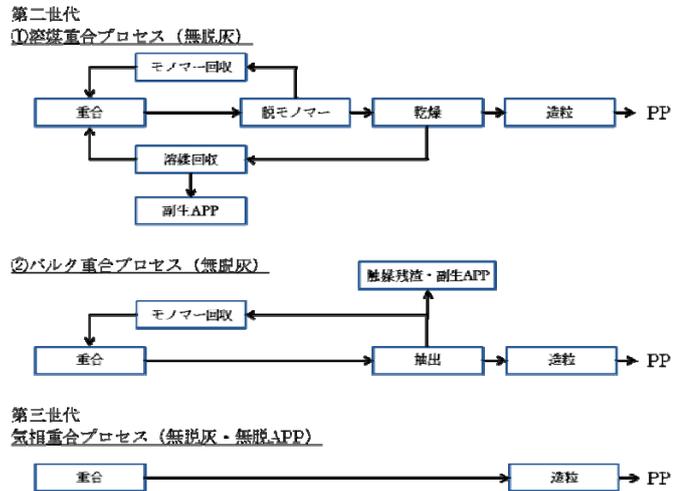
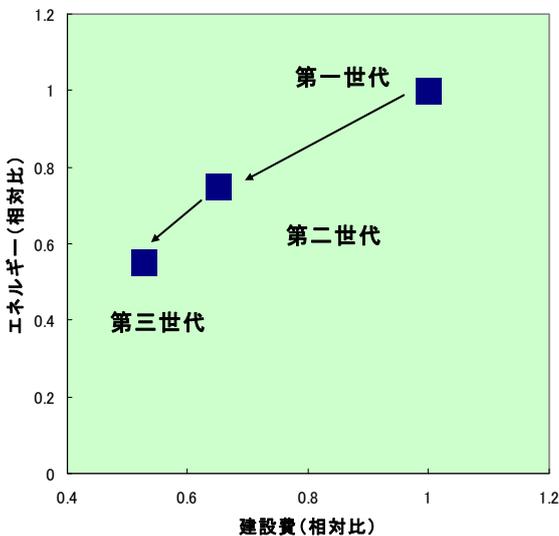
●自動車の軽量化部品例



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

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

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



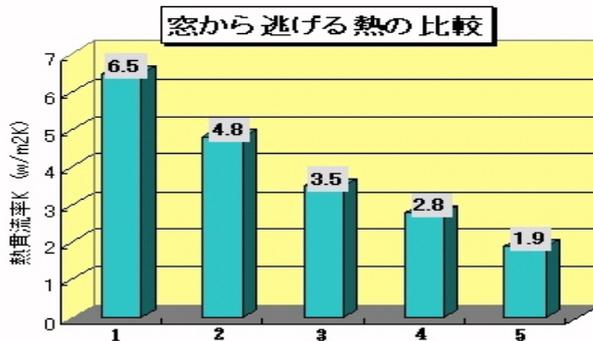
GSCの実績例

2) 冷暖房エネルギーの大幅削減を果たす高断熱建材

GSCのマテリアルイノベーション（製品による大幅省エネへの貢献）

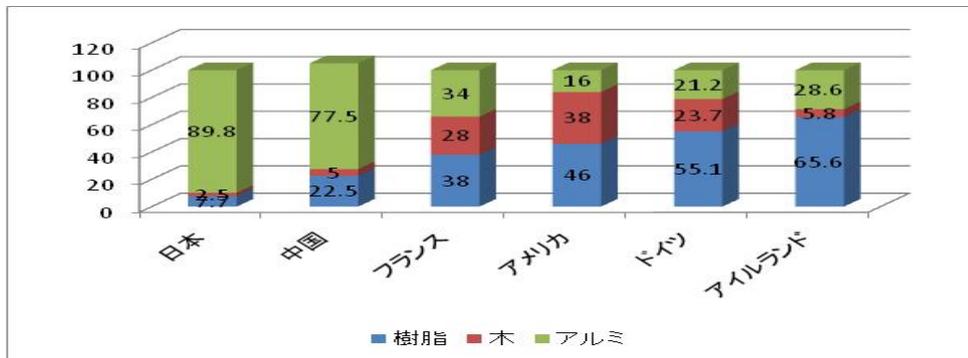
★窓枠部分に塩化ビニル樹脂（塩ビ）を使用し、間に空気層を備えた2層のガラスを用いる「複層ガラス塩ビサッシ」は、従来のアルミサッシ（単層ガラス）と比べると、**断熱性が非常に高い。**

★従来と比べ、**冷暖房費は3割～4割減少**



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

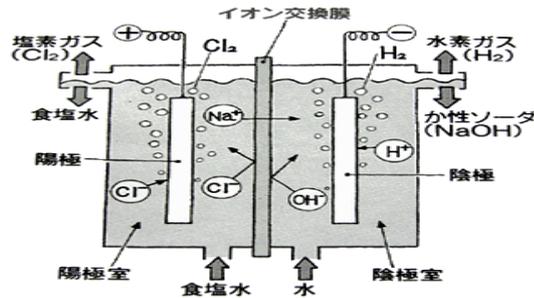
★日本は、アルミサッシが90%近くで、諸外国に較べても、樹脂サッシの比率が低い。



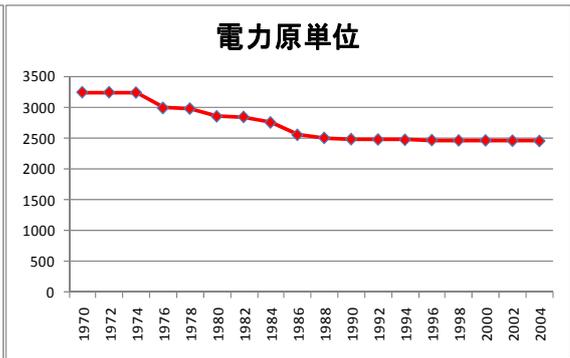
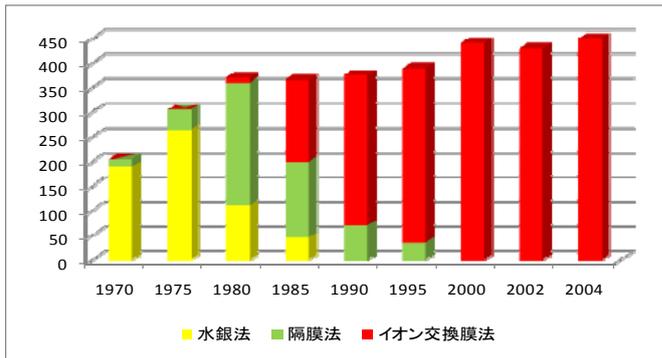
3) 省エネとリスク削減を同時に果たした食塩電解

GSCプロセスイノベーション (大幅な省エネと環境との調和プロセス)

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



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



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

出典: 日本ソーダ協会

食塩電解における水銀使用廃止の動き

	2000	2010	2012	2020
日本	全廃	全廃	全廃	全廃
アメリカ	全廃	全廃	全廃	全廃
EU	全廃	全廃	全廃	全廃

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

GSC技術の展望

～GSCが拓く持続可能な社会～

参考資料4

Green Agriculture

- ◎安全で高活性な農薬の創生
- ◎省エネ型肥料製造プロセス等



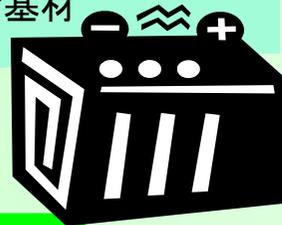
Green Sustainable Housing

- ◎高性能断熱材
- ◎窓枠、遮蔽塗料等の省エネ化学品



Green Electronic Storage

- ◎高性能蓄電池向け基材



Green Information Electronics

- ◎半導体向け化学品
- ◎リソグラフィー技術への化学品部材



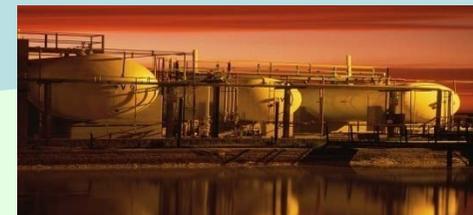
Green Biomass

- ◎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



革新的重要技術テーマ

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

革新的技術テーマ	理由	研究課題(例)
Green Agriculture (食糧資源に貢献する環境適応型 肥料および農薬)	食料資源の確保のために化学製品である肥料や農薬の役割は大きい	<ul style="list-style-type: none"> ・安全性が高く高活性な農薬の創生 ・省エネ型肥料製造プロセスの開発
Green Biomass (バイオマスからの化学品製造)	脱化石原料による化学品製造体系の構築は資源面で重要	<ul style="list-style-type: none"> ・バイオマス原料の糖化技術開発 ・バイオプロセスの開発
Green Electronic Storage (電気エネルギーの貯蔵)	電気自動車や自然エネルギーの活用のために電気貯蔵技術は重要である	<ul style="list-style-type: none"> ・高性能蓄電池向け機材の開発
Green Information Electronics (半導体製造向け化学製品)	大きな省エネルギー効果があるGreen ITの推進のためには高性能な半導体が必須であり、製造には化学製品が重要である	<ul style="list-style-type: none"> ・半導体製造向け化学品の開発 ・リソグラフィ技術の要である化学品の開発
Green Process (環境負荷の小さい化学品製造プロセス)	化学製品の製造プロセスにおいて、廃棄物が少なく省エネルギーなものとするために触媒・反応の開発は常に重要である	Eファクターに優れた省エネ型プロセスの開発
Green Sustainable Housing (快適で長持ちする省エネ型住宅)	高性能な断熱材などを使用した省エネルギー住宅は地球温暖化防止対策への貢献が大きい	<ul style="list-style-type: none"> ・高性能断熱材 ・窓枠、遮熱塗料等の省エネ化学品の開発

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	<p>(1)概要:</p> <p>本事業では、化学品の製造プロセスにおけるシンプル化、クリーン化、省エネ化、原材料・資源の多様化・有効利用、さらに、廃棄物の減容化、容易なリサイクル等を実現し、産業競争力強化、国際規制の先取りを図って、将来にわたっても持続的に化学品を製造するために必要な新規なグリーン・サステイナブルケミカルプロセス(以下「GSC プロセス」という)の研究開発を行う。想定される研究開発課題としては、i)有害な化学物質を削減できる、又は使わない、ii)廃棄物、副生成物を削減できる、iii)資源生産性を向上できる、等による独創的で革新的な化学プロセスを通じた化学品の開発であり、これら研究開発を通じてプロセスイノベーションやマテリアルイノベーションを早期に実現することを目指すものである。これにより、わが国全体の産業競争力強化と環境負荷低減を飛躍的に促進することができ、新産業創造戦略及び世界全体をリードしたサステイナブルな産業構造への貢献が期待できる。</p> <p>(2)平成 21 年度予算額: 15 億円の内数(予定)</p> <p>(3)事業期間: 平成 21 年度～平成 25 年度(5 年間)</p>		
4. 評価の検討状況			
(1)事業の位置付け・必要性			
①事業自体の必要性			
<p>地球温暖化問題、資源枯渇問題が現実化しつつある中、地球及び人類のサステナビリティ(持続性)をいかに確保しつつ、かつ将来も持続的に高機能な素材、部材を生産、供給できるかが喫緊の課題となっている。欧州では RoHS、REACH の導入、米国ではグリーンケミストリーの大統領表彰の創設、中国などでは自主的な排出規制の制定など、化学品製造プロセスに関わる環境対策が強化されている。実際、国内メーカーの海外進出において、有害物質の利用、廃溶剤の多さから、操業停止に追い込まれる企業が出ている。また、これまでは素材・部材の高機能化を過度に追求するあまり、プロセスの多段化によるエネルギー消費の増大、廃棄物の激増、原材料の確保に伴う製造コスト(特に後処理)の高騰が起きている。今後、わが国の全製造業を支えるためには、高機能な素材、部材の開発が不可欠であり、有害な化学物質を削減、使用しない、リサイクルが容易、未利用な資源を利用できる等、独創的な省エネルギー型化学プロセスによる素材、部材の開発が急がれる。本事業は、これらの問題点を抜本に解決し、日本の産業競争力の強化の源泉となる化学プロセス基盤技術の保有を後押しする革新的な技術開発である。</p>			
②上位政策との関係から見た位置付け			
<p>本事業は、第3期科学技術基本方針の重点推進 4 分野のうちの環境分野に位置づけられる。また、基本方針の中で、目指すべき国の姿として「国際競争力があり持続的発展ができる国」と示されており、本</p>			

事業の目的はこれと合致する。

政策的な位置付けとしては、新経済成長戦略『経済財政改革の基本方針 2008』（平成 20 年 6 月 27 日閣議決定）第 2 章 成長力の強化 1. 経済成長戦略 III 革新的技術創造戦略 ② 環境・エネルギー技術等のトップランナー構想：我が国の環境・エネルギー技術は世界のトップ水準にあるが、革新的技術により世界をリードするとともに我が国の経済を支えるため、トップ水準の堅持に資する。“また、『経済成長戦略大綱』（平成 20 年 6 月 27 日改定）第 1. 国際競争力の強化 3. 資源・エネルギー政策の戦略的展開(1)省エネルギーフロントランナー計画：「省エネルギー技術戦略」に基づく重点的な技術開発に“該当する重要な研究開発テーマである。

さらに、NEDO 技術開発機構と経済産業省が 2007 年度に策定した「グリーン・サステナブルケミストリー(技術戦略マップ)」では、エネルギー分野における「各種資源の接触分解による芳香族、オレフィン等製造」、「低利用石油関連資源を利用したナフサ留分、オレフィン等製造技術の開発」、「選択透過膜を用いた非平衡分離・省エネ化と反応分離同時処理技術」、環境分野における「CO₂を用いる新規ノンクロルプロセスの開発」、2002 年度に策定された「革新的部材産業創出プログラム」では、「メンブレンリアクターを利用した化学合成プロセスの省エネ・高効率化に関する調査(2006 年度)」及び「無機規則性ナノ多孔体薄膜を利用したプロセスの省エネ・高効率化に関する調査(2007 年度)」、2008 年版「化学物質総合管理プログラム(リスク削減分野)」では、CO₂固定化・有効利用分野の「CO₂有効利用技術」などが関連する。

(2) 研究開発目標の妥当性

本事業では、以下の開発課題を克服することができ、持続的に高機能な素材・部材が製造可能となる革新的な化学プロセスの研究開発を行い、目標達成を目指す。

【研究開発課題】

「資源生産性を向上できる革新的プロセス及び化学品の開発」

石油化学品、機能性化学品合成、生成物分離、副生ガス分離等に対して大幅な消費エネルギー削減が可能となるクリーンプロセスを開発するために必要な触媒、膜材料、分離材料、吸着剤、選択加熱法による革新的な技術を開発する。

③-1 「触媒を用いる革新的ナフサ分解プロセス基盤技術開発」

新規触媒によるナフサ接触分解を実用化するため、触媒の開発・評価を行い、触媒の性能向上、長寿命化を図る。ナフサ分解から得られる目的生成物に対する収率、選択性を高めると共に、プロセス内のエネルギーバランス、分離工程におけるエネルギー消費の最適化を行い、既存熱分解プロセスを代替し得る、触媒を用いたナフサ分解プロセスに関する基盤技術を確立する。

③-2 「規則性ナノ多孔体精密分離膜部材基盤技術の開発」

蒸留操作による分離・精製プロセスは、化学・石油関連産業分野の消費エネルギーの約40%を占めるエネルギー多消費型プロセスのひとつとなっている。省エネ型分離・精製プロセスのひとつに、膜分離プロセスがあり、中でも炭化水素用分離膜としては耐熱性、耐化学薬品性などの観点から無機多孔膜が有望であることから、新規ナノ構造材料を用いた革新的な分離・精製プロセスを開発する。

③-3 「副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発」

化学プロセス、石油化学プロセス等の生産プロセスから発生する副生ガス(主としてCO₂)を、マイルドな条件で効率よく吸着、脱離することで、高濃度に濃縮された副生ガスを、①高純度、②低コスト、③低

エネルギーで精製できる革新的な材料を開発し、濃縮された副生ガスを原料として有用な化学品をクリーンに生産できるプロセスに繋げる。

【研究開発目標】

③-1 「触媒を用いる革新的ナフサ分解プロセス基盤技術開発」

(1)高性能触媒による高収率、高選択プロセスの開発

- ・エチレン、プロピレン、ブテン、BTX の収率の向上、及び低温化を図れる触媒プロセスを開発する。
上記4成分への生成物収率 66%以上(対熱分解比 10%向上)又は、
エチレン、プロピレンの収率 50%以上(対熱分解比 10%向上)とする。
- ・触媒寿命については、再生 5 回後の初期活性 90%以上を達成する。

(2)高性能触媒による実証規模プロセスに関する設計・開発

- ・国内外で稼動している実プラントレベルの生産量を想定し、セミベンチスケール装置により、ナフサ処理量: 1kg/日以上を達成し、実証規模プロセスの概念設計を行う。

③-2 「規則性ナノ多孔体精密分離膜部材基盤技術の開発」

(1)分離膜製造基盤技術および分離膜評価技術の開発

- ・イソプロピルアルコール脱水用: 透過度が $2 \times 10^{-7} \text{ mol}/(\text{m}^2 \text{ s Pa})$ 、分離係数200以上の分離膜を工業的に製造できる技術を開発する。
- ・酢酸脱水用: 水透過度 $2 \times 10^{-7} \text{ mol}/(\text{m}^2 \text{ s Pa})$ 、水と酢酸の分離係数が100 以上であり、耐酸性を有する規則性ナノ多孔体化合物を見出し、製膜できる技術を確認する。

(2)分離膜用セラミック多孔質基材の開発

- ・分離膜としての長期使用による大幅な特性劣化が生じない多孔質材料を作製開発する。
- ・多チャンネル型基材で長さ1m(管状 外径30mm)当たり0.3m²の膜面積を実現する。

(3)モジュール化技術の開発

- ・多チャンネル型基材を用いたモジュールについて管状型分離膜と同等のシール性能を確認する。

(4)試作材の実環境評価技術の開発

- ・200時間連続運転によるモジュールの耐用性能評価を可能とするシステムを開発し、実用化のための技術課題を抽出する。

③-3 「副生ガス高効率分離・精製プロセス基盤技術開発」

(1)副生ガスの分離・精製材料開発

- ・副生ガスの分子サイズに合わせた吸着材料の分子設計を行ない、CO₂等の濃度が 30%以下の副生ガス濃度を 99.9%以上に濃縮できる高選択吸着材料を開発する。
- ・既存の吸着剤、吸収剤に比べ、吸着した吸着体からの副生ガス(CO₂等)の脱離エネルギーが小さい新規材料を開発する。

(2)副生ガスによるグリーンプロセス技術

- ・高濃度に濃縮された副生ガスから目的物を選択率 80% 以上で得られるプロセスを設計し、実用化が可能となるプロセスの概念設計を行う。

など製造原単位が既存プロセス/製品製造に対して同等以上であること。また、これらの技術の普及、波及により、CO₂換算で、920万トン/年削減(2030年)が期待できる。

* 革新的な技術開発に対し妥当な目標とするが、今後、妥当性を検討する。

【研究開発目標の妥当性】

化学産業は全製造産業中、鉄鋼産業に次いで第2のエネルギー多消費産業である。化学産業の消費エネルギー(年間約7,200万トンをCO₂換算)のうち、基礎化学品を製造するナフサ分解炉が約1,200万トン、蒸留塔に代表される分離・精製プロセスが約3,000万トン占めており、分解炉及び分離・精製プロセスにおける省エネルギー化は化学産業の重要な研究開発テーマとなっている。グリーン・サステナブルケミカルプロセス*(GSC)基盤技術開発では、エコイノベーションの一環として、我が国の強みとされる高度部材開発における化学プロセスのシンプル化、クリーン化、資源の多様化を図って産業競争力強化、国際規制の先取りを目指すものである。本研究開発は、GSC分野のサステナビリティ目標分野の「資源制約からの脱却」、「エネルギー制約からの脱却」等の重点課題を解決するためのプロセス、材料に関するイノベーションを実現するものであり、具体的には、機能性化学品の安定供給、及びCO₂排出量の大幅削減が可能となる革新的な資源生産性の向上に資する革新的な化学プロセスの開発を行い、化学産業のCO₂排出量約900万トンの削減を図ることが期待できる。

本研究開発では、日本の産業競争力の強化の源泉となるGSCプロセス基盤技術の保有を後押しするものであり、具体的な開発課題は以下の通り。

- 重質化、低品位化する化石原料に対応し、収率を大幅改善する省エネ型接触分解炉技術の開発。
- 石油化学工業の約40%のエネルギーを消費する分離プロセスの消費エネルギー約50%削減する革新的膜分離技術の開発。
- 化学工場より大量に排出されるCO₂を高濃度回収及びCO₂を有用化学品へ変換する技術の開発。

(3) 研究開発マネジメント

① 事前評価におけるマネジメント

平成17年度に「化学産業における革新的技術戦略とロードマップ作成に関する先導調査」(次世代グリーン・サステナブルケミストリー技術開発)の中で、将来、国内の化学産業が持続的に高品位な機能性化学品を安定的に供給するためには、1)環境対応、2)規制の先取り、3)資源の枯渇、4)未利用資源、原料の多様化に対応した、安定供給、省資源・省エネルギー等が実現できる革新的な化学プロセスへの変革が求められていると提言した。また、平成19年度には「グリーン・サステナブルケミストリーの体系化に関する戦略調査(戦略ロードマップ)」において、GSCに関連する最新動向調査を行って、2030年ごろまでにNEDO技術開発機構と経済産業省が積極的に研究開発すべき技術体系を作成した(委員長:NITE理事長、東京大学名誉教授 御園生誠)。さらに、平成20年度には、GSCに関する研究開発を行うことによるGSC効果(エネルギー生産性、環境負荷、リサイクル等)、産業競争力(市場規模、他産業への波及効果等)について、半定量的な分析を行いながら、昨年度作成したロードマップのローリング作業を行っている。

本事業では早期に実用化を実現するために必要な優れた技術開発スキームを構築するため、当該関連技術に関する調査結果「革新的省エネルギー化学プロセスに関する先導調査」(平成20年度NEDO技術開発機構で実施)、及び「無機規則性ナノ多孔体薄膜を利用したプロセスの省エネ・高効率化に関する調査」(平成19年度NEDO技術開発機構で実施)を基本計画の策定及び事業の実施に反映させるものとする。

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・サステナブルケミストリー戦略ロードマップ」において、優先的に実施すべき研究開発テーマであり、具体的には①触媒を用いた低温接触分解プロセス、②規則性ナノ多孔体膜分離膜プロセス、③高濃度 CO₂ 精製・回収プロセスに関する研究開発テーマである。これらの研究開発テーマ以外に関しても、引き続き、技術戦略ロードマップのローリングを通じてNEDO技術開発機構、経済産業省が政策的に重要と判断した独創的なプロセスについて研究開発することで、持続的、高機能な素材・部材の製造が可能となるプロセスイノベーションやマテリアルイノベーションの実現が達成できることになる。

これらの研究開発により、開発成果を欧米を始め諸外国の取組に先んじて出すことで、我が国全体の産業競争力強化と環境負荷低減を飛躍的に促進することができ、新産業創造戦略及び世界全体をリードした産業面・環境面でのサステナブルな仕組み作りへの貢献が期待できる。

(5) 実用化・事業化の見込み

製造業の中でエネルギー多消費である化学分野において、2020 年～30 年での実用化を目指し、地球温暖化問題や石油由来原料の高騰・低品位化への抜本的な対応を図る。具体的な、研究開発は下記の通り。なお、本研究開発では、研究開発終了後、5 年以内の実証レベルのプラントが稼動して、10 年以内に本格的な実用化、事業化が見込める技術開発を優先的に行う。

- 接触分解炉技術の開発により、重質原料収率改善及び低温化が可能となり、目的生成物に要する製造エネルギーの約20%を削減可能。本技術開発成果を全ナフサ分解プロセスに適用した場合、CO₂換算で、120万トン／年の削減。
- 炭化水素用分離膜の開発により、石油化学産業の蒸留塔10,000基のうち、5,000基に導入された場合、分離プロセスで消費されているエネルギー約3000万トン／年 のうち25%、約750万トン／年の削減。
- CO₂ のように、非石油系原料からの化学品製造技術の確立は、長期にわたり安定的な材料提供の観点から、部材産業、ユーザー産業の競争力強化、持続的発展可能なものづくり産業の確立に貢献。

接触分解による機能性化学品製造(プラスチック製品、電子材料、基礎化学品等)における直接的効果1000 億円以上、間接的効果で 5000 億円以上、高効率分離膜プロセスの導入により、基礎化学品、水処理プロセスでの利用により2000 億円以上、高純度 CO₂ 精製・回収プロセスによる機能性化学品(ポリカーボネート)、合成ガス原料、新規 CO₂ プロセス(塗装、洗浄等)での利用により、2000 億円以上の市場効果が期待されている。また、本研究開発の成果により、ファインケミカル等の製造プロセスにおける大幅な省エネルギーが期待され、研究開発終了 10 年程度で商用プラントが稼動すれば CO₂ 換算で、920 万トン／年削減効果が期待できる。

(6)その他特記事項

本事業は、欧州、米国、中国等における研究開発動向に留意し、適宜関係者間(国内外を問わず)との連携を図りつつ、効率的なプロジェクト運営に努める。

5. 総合評価

NEDO の実施する事業として適切であると判断する。

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。

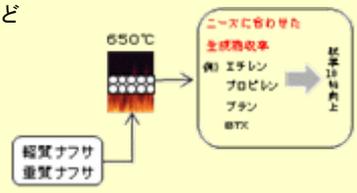
プロジェクトの規模

○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

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。



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:CO₂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、CO₂換算で、920万ト/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CO₂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。

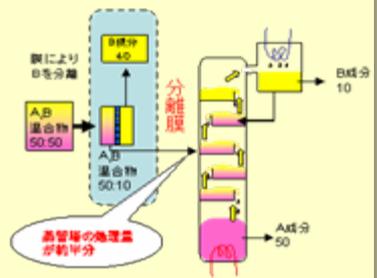
技術戦略マップ上の位置付け

※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

(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

CO₂を原料とする化学品製造技術の根幹となる高濃度CO₂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		
<p>[意見 1]</p> <p>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と考えます。</p> <p>①ジメチルエーテルと炭酸ガスの反応によるジメチルカーボネートの一段合成 $\text{CH}_3\text{OCH}_3 + \text{CO}_2 \rightarrow \text{CH}_3\text{OCOOCH}_3$</p> <p>②ジメチルエーテルと酸化エチレンの反応によるエチレングリコールジメチルエーテルの一段合成 $\text{CH}_3\text{OCH}_3 + \text{C}_2\text{H}_4\text{O} \rightarrow \text{CH}_3\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_3$</p> <p>③エチレンと酸化エチレンより直接テトラヒドロフランの合成および THF より 1,4-ブタンジオールの合成 $\text{CH}_2\text{CH}_2 + \text{C}_2\text{H}_4\text{O} \rightarrow \text{THF} \rightarrow 1,4\text{-ブタンジオール}$</p>	<p>[考え方と対応]</p> <p>副生ガスとして CO2, C2H4O を想定した場合の、化学プロセスへの応用と理解しております。基本計画の中に、副生ガスを化学品に転換するためのフィージビリティスタディーに関する研究開発がありますので、新規吸着剤の開発とあわせて革新的な化学プロセスに関するご提案をお待ちしております。</p>	<p>[反映の有無と反映内容]</p> <p>基本計画に十分反映しているものと考えており、特に変更することは致しません。</p>

ご意見の概要	ご意見に対する考え方	基本計画への反映
全体について		
<p>[意見 2]</p> <p>CO2の分離回収技術が含まれているのに、CO2の利用に関する研究が対象になっていない。いくらCO2を集めて精製しても使うことができなければ価値は半減することは明白。</p> <p>CO2の化学原料としての活用は難しいテーマだが、それだからこそNEDOにおいて長期プロジェクトとして推進するべきものだと考える。</p>	<p>[考え方と対応]</p> <p>ご意見有り難うございます。CO2や極微量副生を利用するには、大容量、低コストで回収することが必須を考えております。これまでにCO2を原料とした研究開発が数多く行われてきましたが、実用化された物はごく一部に限られています。今回の研究開発では、これまでにない新しい吸着材を開発することで、CO2等の回収に係るエネルギーを大幅に削減して、これまでにないCO2の利用を拡大しようとする物です。そのため、吸着材の開発と併せて、CO2を原料とした化学プロセスに関するフィージビリティスタディーを行うこととしております。このような観点から、新規吸着剤の開発とあわせて革新的な化学プロセスに関するご提案がございましたら、是非、ご提案いただくことをお待ちしております。</p>	<p>[反映の有無と反映内容]</p> <p>基本計画に十分反映しているものと考えており、特に変更することは致しません。</p>

以上

添付資料

Ⅲ.2.1.1 CO₂/N₂分離用 PCP の開発 <京都大学>

【特許】 出願なし

【論文】

番号	発表者	所属	タイトル	発表誌名、ページ番号	査読	発表年月
1	Kanokwan Kongpatpanich, Satoshi Horike, Masayuki Sugimoto, Tomohiro Fukushima, Daiki Umeyama, Yosuke Tsutsumi, Susumu Kitagawa	京大	Synthesis and Porous Properties of Chromium Azolate Porous Coordination Polymers	Inorg. Chem. 2014, accepted.	有	2014/8/22
2	Keisuke Kishida, Yumiko Watanabe, Satoshi Horike, Yoshihiro Watanabe, Yoshikuni Okumura, Yuh Hijikata, Shigeyoshi Sakaki, Susumu Kitagawa	京大・昭和 電工	DRIFT and Theoretical Studies of Ethylene/Ethane Separation on Flexible Microporosity of [Cu ₂ (2,3-pyrazinedicarboxylate) ₂ (pyrazine)] _n	Eur. J. Inorg. Chem. 2014	有	2014/4/24
3	Keisuke Kishida, Satoshi Horike, Yoshihiro Watanabe, Mina Tahara, Yasutaka Inubushi, Susumu Kitagawa	京大・昭和 電工・クラレ	Structural Optimization of Interpenetrated Pillared-Layer Coordination Polymers for Ethylene/Ethane Separation	Chem. Asian J. 2014, 9, 1643-1647.	有	2014/4/1
4	Kanokwan Kongpatpanich, Satoshi Horike, Masayuki Sugimoto, Shinji Kitao, Makoto Seto, Susumu Kitagawa	京大	A porous coordination polymer with a reactive diiron paddlewheel unit	Chem. Commun. 2014 50, 2292-2294.	有	2013/12/4
5	Yasuko Mito-oka, Satoshi Horike, Yusuke Nishitani, Tadao Masumori, Munehiro Inukai, Yuh Hijikata, Susumu Kitagawa	京大・東洋紡	Siloxane D4 Capture by Hydrophobic Microporous Materials	J. Mater. Chem. A. 2013, 1, 7885-7888.	有	2013/5/21
6	Maw Lin Foo, Satoshi Horike, Jingui Duan, Wenqian Chen, Susumu Kitagawa	京大	Tuning the Dimensionality of Inorganic Connectivity in Barium Coordination Polymers via Biphenyl Carboxylic Acid Ligands	Cryst. Growth. Des. 2013, 13, 2965-2972.	有	2013/6/17
7	Yuh Hijikata, Satoshi Horike, Masayuki Sugimoto, Munehiro Inukai, Tomohiro Fukushima, Susumu Kitagawa	京大	Pore Design of Two-Dimensional Coordination Polymers Toward Selective Adsorption	Inorg. Chem. 2013, 52, 3634-3642.	有	2013/5/15
8	Keisuke Kishida, Satoshi Horike, Susumu Kitagawa	京大・昭和 電工	Soft 2D Layer Porous Coordination Polymers with 1,2-Di(4-pyridyl) ethane	Aust. J. Chem. 2013, 66 4, 464-469.	有	2013/1/29
9	Satoshi Horike, Masayuki Sugimoto, Kanokwan Kongpatpanich, Yuh Hijikata, Munehiro Inukai, Daiki Umeyama, Shinji Kitao, Makoto Seto, Susumu Kitagawa	京大	Fe ²⁺ -Based Layered Porous Coordination Polymers and Soft Encapsulation of Guests via Redox Activity	J. Mater. Chem. A. 2013, 1, 3675-3679.	有	2013/1/21

番号	発表者	所属	タイトル	発表誌名、ページ番号	査読	発表年月
10	Tomohiro Fukushima, Satoshi Horike, Hirokazu Kobayashi, Masahiko Tsujimoto, Seiji Isoda, Maw Lin Foo, Yoshiki Kubota, Masaki Takata, Susumu Kitagawa	京大・理研・大阪府立大	Modular Design of Domain Assembly in Porous Coordination Polymer Crystals via Reactivity-Directed Crystallization Process	J. Am. Chem. Soc. 2012, 134, 13341-13347.	有	2012/7/20
11	Maw Lin Foo, Satoshi Horike, Tomohiro Fukushima, Yuh Hijikata, Yoshiki Kubota, Masaki Takata, Susumu Kitagawa	京大・理研・大阪府立大	Ligand-based Solid Solution Approach to Stabilisation of Sulphonic Acid Groups in Porous Coordination Polymer $Zr_6O_4(OH)_4(BDC)_6$ (UiO-66)	Dalton Trans. 2012, 41, 13791-13794.	有	2012/7/17
12	Satoshi Horike, Keisuke Kishida, Yoshihiro Watanabe, Yasutaka Inubushi, Daiki Umeyama, Masayuki Sugimoto, Tomohiro Fukushima, Munehiro Inukai, Susumu Kitagawa	京大・昭和電工・クラレ	Dense Coordination Network Capable of Selective CO ₂ Capture from C1 and C2 Hydrocarbons	J. Am. Chem. Soc. 2012, 134, 9852-9855.	有	2012/6/5
13	Maw Lin Foo, Satoshi Horike, Yasutaka Inubushi, Susumu Kitagawa	京大・クラレ	An Alkaline Earth I ³ O ⁰ Porous Coordination Polymer: [Ba ₂ TMA(NO ₃) ₃](DMF)] (H3TMA = trimesic acid)	Angew. Chem. Int. Ed. 2012, 51, 6107-6111.	有	2012/6/18
14	Keisuke Kishida, Satoshi Horike, Keiji Nakagawa, Susumu Kitagawa	京大・昭和電工	Synthesis and Adsorption Properties of Azulene-Containing Porous Interdigitated Framework	Chem. Lett. 2012, 41, 425-426	有	2012/4/4
15	Satoshi Horike, Yasutaka Inubushi, Takashi Hori, Tomohiro Fukushima, Susumu Kitagawa	京大・クラレ	A Solid Solution Approach to 2D Coordination Polymers for CH ₄ /CO ₂ and CH ₄ /C ₂ H ₆ Gas Separation: Equilibrium and Kinetic Studies	Chem. Sci. 2012, 3, 116-120.	有	2011/10/6
16	Maw Lin Foo, Satoshi Horike, Susumu Kitagawa	京大	Synthesis and Characterization of a 1-D Porous Barium Carboxylate Coordination Polymer, [Ba(HBTB)] (H3BTB = Benzene-1,3,5-trisbenzoic Acid)	Inorg. Chem. 2011, 50, 11853-11855.	有	2011/11/1
17	Yuh Hijikata, Satoshi Horike, Daisuke Tanaka, Juergen Groll, Motohiro Mizuno, Jungeun Kim, Masaki Takata, Susumu Kitagawa	京大・アーヘン工科大・理研	Differences of Crystal Structure and Dynamics Between Soft Porous Nanocrystal and Bulk Crystal	Chem. Commun. 2011, 47, 7632-7634.	有	2011/6/9

番号	発表者	所属	タイトル	発表誌名、ページ番号	査読	発表年月
18	Yuh Hijikata, Satoshi Horike, Masayuki Sugimoto, Susumu Kitagawa	京大	Relationship between Channel and Sorption Properties in Coordination Polymers with Interdigitated Structures	Chem. Eur. J. 2011, 17, 5138-5144.	有	2011/3/23
19	Yasutaka Inubushi, Satoshi Horike, Tomohiro Fukushima, George Akiyama, Ryotaro Matsuda, Susumu Kitagawa	京大・クラレ	Modification of Flexible Part in Cu ²⁺ Interdigitated Framework for CO ₂ /CH ₄ Separation	Chem. Commun. 2010, 46, 9229-9231.	有	2010/11/1
20	Tomohiro Fukushima, Satoshi Horike, Yasutaka Inubushi, Keiji Nakagawa, Yoshiki Kubota, Masaki Takata, Susumu Kitagawa	京大・クラレ・理研・大阪府立大	Solid Solutions of Soft Porous Coordination Polymers for the Fine-Tuning of Gas Adsorption Properties	Angew. Chem. Int. Ed. 2010, 49, 4820-4824.	有	2010/5/20
21	Keiji Nakagawa, Daisuke Tanaka, Satoshi Horike, Satoru Shimomura, Masakazu Higuchi, Susumu Kitagawa	京大	Enhanced Selectivity of CO ₂ from a Ternary Gas Mixture in an Interdigitated Porous Framework	Chem. Commun. 2010, 24, 4258-4260.	有	2010/5/11

【外部発表】

(a) 学会発表・講演

番号	発表者	所属	タイトル	会議名	発表年月
1	堀毛悟史	京大	「多孔性配位高分子の合成と用途展開」	サイエンス&テクノロジー株式会社 技術・市場動向セミナー	2014/8/29
2	堀毛悟史	京大	Solid Solution MOFs for CO ₂ Separation and Regeneration with Low Energy Consumption	ACS annual meeting	2014/8/10
3	堀毛悟史	京大	「動的な錯体フレームワークの合成法の開拓と材料展開」	日本化学会年会第 93 春季年会	2014/3/30
4	堀毛悟史	京大	「配位高分子のダイナミクスの理解と制御による機能創製」	第 63 回錯体化学討論会	2013/11/4
5	堀毛悟史	京大	Dynamic coordination framework materials for new energy resources	International meeting " Nanomaterial Futures " of Bristol Centre for Functional Nanomaterials	2013/2/18
6	堀毛悟史	京大	「錯体集積体の結晶化学を用いた環境・エネルギー固体材料の開発」	新化学技術推進協会 先端化学・材料技術部会 新素材分科会 講演会	2012/1/19
7	堀毛悟史	京大	「多孔性錯体の動的結晶化学を用いた環境・エネルギー固体材料の開発」	日本化学会年会第 92 春季年会	2012/3/26
8	堀毛悟史	京大	"Design and Synthesis of Porous Coordination Frameworks for Low Energy Consumption CO ₂ Separation"	International Symposium on Active Polymer Patterning and Nanogrid Materials, Jeju, Korea	2011/2/10
9	堀毛悟史	京大	「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」	第 59 回高分子討論会	2010/9/15

(b) 新聞・雑誌等への掲載

番号	所属	タイトル	掲載誌名	発表年月
1	堀毛悟史、北川進、 魚谷信夫 (京大)	多孔性錯体の開発動向およびガス分離機能	分離技術 2014. 第 44 巻 第 4 号	2014
2	堀毛悟史、北川進 (京大)	多孔性金属錯体が生み出す研究開発テーマとその可能性	研究開発リーダー 10(9), 36-41, 2013-12 技術情報協会	2013
3	魚谷信夫、堀毛悟史、 小林宏和、北川進、 北川宏 (京大)	多孔性錯体材料(PCP)を用いた新しい CO ₂ 分離・変換の化学	ゼオライト 30(3), 73-84, 2013	2013
4	堀毛悟史、坂本裕俊、 杉本雅行、福島知宏、 岸田圭輔、梅山大樹、 北川進 (京大・昭和電工)	多孔性配位高分子(PCP)/金属有機構造体(MOF)の基礎	材料科学の基礎 第 7 号 2012 刊行 シグマ アルドリッチ ジャパン株式会社	2012
5	堀毛悟史、犬伏康貴 (京大・クラレ)	空間の「柔らかさ」を利用した CO ₂ 分離	現代化学 2012 年 4 月号 東京化学同人	2012
6	Satoshi Horike, Susumu Kitagawa (Kyoto Univ.)	Part 1 - Design of Porous Coordination Polymers/Metal-Organic Frameworks: Past, Present and Future	Metal-Organic Frameworks : Applications from Catalysis to Gas Storage Wiley-VCH July 2011.	2011
7	福島知宏、堀毛悟史、 北川進 (京大)	多孔性錯体による混合気体中からの二酸化炭素分離	配管技術 53(9), 27-31, 2011-07 日本工業出版	2011
8	堀毛悟史、犬伏康貴、 北川進 (京大・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 10(7), 23-28, 2010-07 エヌ・ティー・エス	2010

添付資料

Ⅲ.2.1.2 メタン精製用 PCP の開発 <株式会社クラレ>

【特許】

年度	区分	特許出願		
		国内	外国	PCT*出願
H21		5 件	0 件	0 件
H22		10 件	0 件	1 件
H23		21 件	0 件	0 件
H24		12 件	0 件	5 件
H25		6 件	0 件	4 件
H26		6 件	0 件	0 件

(※Patent Cooperation Treaty :特許協力条約)

【論文】

番号	発表者	所属	タイトル	発表誌名、ページ番号	査読	発表年
1	S. Horike(1), Y. Inubushi(2), S. Kitagawa(1), <i>et al</i>	(1) 京都大学 (2) 株式会社クラレ	Solid Solutions of Soft Porous Coordination Polymers for the Fine-Tuning of Gas Adsorption Properties	<i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> 2010, 49 , 4820-4824	有	2010年
2	堀毛 悟史(1) 犬伏 康貴(2) 北川 進(1)	(1) 京都大学 (2) 株式会社クラレ	多孔性錯体を利用したCO ₂ の選択的分離	未来材料、2010年7月号、23~28頁	無	2010年
3	Y. Inubushi(1), S. Horike(2), S. Kitagawa(2), <i>et al.</i>	(1) 株式会社クラレ (2) 京都大学	Modification of flexible part in Cu ²⁺ interdigitated framework for CH ₄ /CO ₂ separation	<i>Chem. Commun.</i> 2010, 46 , 9229-9231	有	2010年
4	S. Horike(1), Y. Inubushi(2), S. Kitagawa(1), <i>et al.</i>	(1) 京都大学 (2) 株式会社クラレ	A solid Solution approach to 2D coordination polymers for CH ₄ /CO ₂ and CH ₄ /C ₂ H ₆ gas separation: equilibrium and kinetic studies	<i>Chem. Sci.</i> 2012, 3 , 116-120	有	2012年
5	堀毛 悟史(1) 犬伏 康貴(2)	(1) 京都大学 (2) 株式会社クラレ	空間の「柔らかさ」を利用したCO ₂ 分離	現代化学、2012年、4月号、38-39	無	2012年
6	S. Horike(1), Y. Inubushi(2) S. Kitagawa(1) <i>et al</i>	(1) 京都大学 (2) 株式会社クラレ	An Alkaline Earth I ³ O ⁰ Porous Coordination Polymer: [Ba ₂ TMA(NO ₃)(DMF)]	<i>Angew. Chem. Int. Ed.</i> 2012, 51 , 6107-6111	有	2012年
7	S. Horike(1) K. Kishida(2) Y. Watanabe(2) Y. Inubushi(3) S. Kitagawa(1) <i>et al</i>	(1) 京都大学 (2) 昭和電工(株) (3) 株式会社クラレ	Dense Coordination Network Capable of Selective CO ₂ Capture from C1 and C2 Hydrocarbons	<i>J. Am. Chem. Soc.</i> , 2012, 134 , 9852-9855	有	2012年
8	S. Horike(1) Y. Inubushi(2) S. Kitagawa(1) <i>et al</i>	(1) 京都大学 (2) 株式会社クラレ	High CO ₂ /CH ₄ and C2 Hydrocarbons/CH ₄ Selectivity in a Chemically Robust Porous Coordination Polymer	<i>Adv. Func. Mater.</i> , 2013, 23 , 3525-3530	有	2013年
9	犬伏 康貴(1) 北川 進(2)	(1) 株式会社クラレ (2) 京都大学	低コストでCO ₂ 回収・再利用可能な多孔性金属錯体の開発	株式会社NTS企画書籍「二酸化炭素の直接利用最新技術」第2章 二酸化炭素分離・回収技術の最新動向 第2節	無	2013年

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
10	K. Kishida(1) S. Horike(2) Y. Watanabe(1) Y. Inubushi(3) S. Kitagawa(2) <i>et al</i>	(1)昭和電工(株) (2) 京都大学 (3) (株)クラレ	Structural Optimization of Interpenetrated Pillared-Layer Coordination Polymers for Ethylene/Ethane Separation	<i>Chem. Asian J.</i> 2014, accepted	有	2014年

【外部発表】

(a)学会発表・講演

番号	発表者	所属	タイトル	会議名	発表年月
1	○犬伏康貴(1)、 堀毛悟史(2)、 北川 進(2)、	(1) (株)クラレ (2) 京都大学	Gas Separation Properties of Interdigitated Porous Frameworks	PCP2010 (国際学会／ポスター)	2010/09/07
2	○堀毛悟史(1) 犬伏康貴(2)、 北川 進(1)、	(1) 京都大学 (2) (株)クラレ	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	第59回高分子討論会 (国内学会／口頭／招待発表)	2010/09/15
3	○堀毛悟史(1)、 犬伏康貴(2)、 北川 進(1)、	(1) 京都大学 (2) (株)クラレ	Preparation of Solid Solutions of Porous Coordination Layer for Efficient Gas Separation	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)	2010/09/28
4	○岸田圭輔(1) 堀毛悟史(2) 渡邊賢広(1) 犬伏康貴(3) 北川 進(2)	(1) 昭和電工(株) (2) 京都大学 (3) (株)クラレ	Gas Separation Properties of Interpenetrated Pseudo-Diamondoid Framework	PCP2012 (国際学会／ポスター)	2012/9/17

(b)新聞・雑誌等への掲載

番号	所属	タイトル	掲載誌名	発表年月
1	京都大学 (株)クラレ	CO ₂ 吸収 低コストで 新素材開発、室温で	日経産業新聞	2010/11/04

(c)その他

番号	内容	出願人	商標	提出日
1	商標登録願	(株)クラレ/昭栄化学工業(株)/昭和電工(株)/東洋紡績(株)	COORDIFLEX	2010/1/1
2	商標登録願	(株)クラレ/昭栄化学工業(株)/昭和電工(株)/東洋紡績(株)	コーディフレックス	2010/1/1

添付資料

Ⅲ.2.1.3 CO₂/エチレン分離用PCP及び構造異性体混合物からの特定構造炭化水素分離精製用PCPの開発 <昭和電工株式会社>

【特許】

年度	区分	特許出願		
		国内	外国	PCT*出願
H21				
H22		4		
H23		10		
H24		5		2
H25		3		2
H26				3

(※Patent Cooperation Treaty :特許協力条約、※※商標登録)

【外部発表】

番号	発表者	所属	タイトル	会議名	発表年月
1	岸田圭輔 奥村吉邦 渡邊賢広 ほか	昭和電工株式会社	ブタジエン分離用多孔性 金属錯体	JACI/GSCシンポジウム (国内学会・ポスター発表)	2014/5/23
2	岸田圭輔 堀毛悟史 渡邊賢広 北川進	昭和電工株式会社 国立大学法人京都大学	Gas Separation Properties of Interpenetrated Pseudo- Diamondoid Framework	MOF2012 (国際学会・ポスター発表)	2012/9/17
3	岸田圭輔 奥村吉邦 渡邊賢広 ほか	昭和電工株式会社	An Interpenetrated Pseudo - Diamondoid Framework for Separating 1,3- Butadiene from C4	MOF2014 (国際学会・ポスター発表)	2014/9/30

【文献】

番号	著者	所属	タイトル	発表誌名、 ページ番号	査読	発表年月
1	岸田圭輔 渡邊由美子 榊茂好 北川進 ほか	昭和電工株式会社 国立大学法人京都大学	DRIFT and Theoretical Studies of Ethylene/Ethane Separation on Flexible Microporosity of [Cu ₂ (2,3- pyrazinedicarboxylate) ₂ (pyraz ine)] _n	<i>Eur. J. Inorg. Chem.</i> 2014 , 17, 2747-2752 (invited on Cover Picture and Profile)	有	2014/5
2	岸田圭輔 堀毛悟史 渡邊賢広 北川進 ほか	昭和電工株式会社 国立大学法人京都大学	Structural Optimization of Interpenetrated Pillared- Layer Coordination Polymers for Ethylene/Ethane Separation	<i>Chem. Asian J.</i> 2014 , 9,1643-1647 (highlighted on Chemistry Views)	有	2014/5
3	堀毛悟史 岸田圭輔 渡邊賢広 北川進 ほか	昭和電工株式会社 国立大学法人京都大学	Dense Coordination Network Capable of Selective CO ₂ Capture from C1 and C2 Hydrocarbons	<i>J. Am. Chem. Soc.</i> 2012 , 134, 9852-9855	有	2012/6
4	岸田圭輔 堀毛悟史 北川進 ほか	昭和電工株式会社 国立大学法人京都大学	Synthesis and Adsorption Properties of Azulene- Containing Porous Interdigitated Framework	<i>Chem. Lett.</i> 2012 , 41, 425-426.	有	2012/4
5	堀毛悟史 岸田圭輔 北川進 ほか	昭和電工株式会社 国立大学法人京都大学	多孔性配位高分子(PCP)/ 金属有機構造体(MOF)の基 礎	シグマーアルドリッチ 「材料科学の基礎」第 7号	無	2012/9

添付資料

Ⅲ.2.1.4 PCP による微量ガス分離材の開発 <東洋紡>

【特許および商標登録】

年度	区分	特許出願			商標登録
		国内	外国	PCT*出願	国内
H21FY		0 件	0 件	0 件	0 件
H22FY		1 件	0 件	0 件	2 件
H23FY		5 件	0 件	0 件	0 件
H24FY		2 件	0 件	1 件	0 件
H25FY		7 件	0 件	0 件	0 件
H26FY		2 件	0 件	0 件	0 件

(※Patent Cooperation Treaty :特許協力条約)

【論文】

番号	発表者	所属	タイトル	発表誌名、ページ番号	査読	発表年月
1	水戸岡靖子 他	東洋紡(株)	Siloxane D4 capture by hydrophobic microporous materials	<i>J. Mater. Chem. A</i> , 2013, 1 , 7885-7888	有	2013/05/21

【外部発表】

(a)学会発表・講演

番号	発表者	所属	タイトル	会議名	発表年月
1	水戸岡靖子 他	東洋紡(株)	PCP/MOFs as materials for siloxanes adsorption	MOF2012(国際学会/ポスター)	2012/09/18
2	澤田有希 他	東洋紡(株)	新規多孔質材料を用いた除去材の開発	2014 年電気化学会秋季大会	2014/09/27

添付資料

Ⅲ.2.2.1 PCP 複合触媒の開発/PCP 複合触媒基盤技術の開発 <京都大学>

【特許】

年度	区分	特許出願		
		国内	外国	PCT*出願
H21FY				
H22FY				
H23FY		1 件		
H24FY				
H25FY				
H26FY				

(※Patent Cooperation Treaty :特許協力条約)

【発表】

#	発表者	所属	発表タイトル	発表媒体	発表年月日
1	○小林浩和、 北川 宏	京都大学	Pd ナノ結晶/多孔性配位高分子ナノ複合物質の合成とガス吸着特性	錯体化学会第 62 回討論会(国内学会/ポスター)	平成 24 年 9 月 21 日
2	○小林浩和、 北川 宏	京都大学	Pdナノ結晶/多孔性配位高分子コア・シェル型ナノ複合物質の水素吸蔵特性	日本物理学会第68回年次大会(国内学会/口頭)	平成25年3月27日

添付資料

Ⅲ.2.2.2 PCP 複合触媒の開発／CO₂還元型錯体分子触媒基盤技術の開発 <京都大学>

【特許】なし

【論文】

番号	発表者	所属	タイトル	発表誌名	査読	発表年月
1	Katsuaki Kobayashi, Takashi Kikuchi, Susumu Kitagawa, Koji Tanaka	京大 iCeMS	Selective Generation of Formamides through Photo- catalytic CO ₂ Reduction Catalyzed by Ru Carbonyl Compounds	Angew. Chem. Int. Ed., in press	有	In press

【外部発表】

(a)学会発表・講演

番号	発表者	所属	タイトル	会議名	発表年月
1	中根大輔、 Ni Yang、 小林克彰、 小林宏和、 水戸岡靖子、 北川宏、 田中晃二	分子研 東洋紡 京大理	水中での三核金属クラスターに よる二酸化炭素還元反応	錯体化学会第 61 回 討論会	2011/9/18
2	小林克彰、 田中晃二	京大 iCeMS	Ru 錯体触媒を用いた光および 電気化学的な CO ₂ 還元によるホ ルムアミド類の生成反応	日本化学会第 94 春 季年会	2014/3/29
3	小林克彰、 田中晃二	京大 iCeMS	Ru カルボニル錯体を触媒とする 光化学的 CO ₂ 還元反応による選 択的ホルムアミド及びギ酸生成 反応	第 26 回配位化合物 の光化学討論会	2014/8/8

添付資料

Ⅲ.2.2.3 PCP 複合触媒の開発 <昭栄化学工業株式会社>

【特許】

年度	区分	特許出願		
		国内	外国	PCT※出願
H21FY		0 件	0 件	0 件
H22FY		1 件	0 件	0 件
H23FY		3 件	0 件	0 件
H24FY		1 件	0 件	0 件
H25FY		1 件	0 件	0 件
H26FY		0 件	0 件	0 件

(※Patent Cooperation Treaty :特許協力条約)

【発表】

#	発表者	所属	発表タイトル	発表媒体	発表年月日
1	三津家由子 高石雄太 橋村ゆき子 家田秀康 永島和郎 小林浩和 北川 宏	昭栄化学工業(株) 京都大学	Facile large-scale synthesis and catalytic property of metal nanoparticles/MOF composite by spray reaction method	MOF2014 (国際学会/ ポスター)	平成 26 年 9 月 30 日