

2022年度実施方針

材料・ナノテクノロジー部

1. 件名：(大項目) 機能性化学品の連続精密生産プロセス技術の開発

2. 根拠法

国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構法第15条第1号ニ及び第9号

3. 背景及び目的・目標

3. 1 研究開発の背景・目的

①政策的な重要性

2015年12月フランス・パリにて開催された国連気候変動枠組条約第21回締約国会議(COP21)において採択されたパリ協定では、世界共通の長期目標として気温上昇を産業革命前から2℃未満に抑えることが謳われているが、そのためには、世界全体で抜本的な排出削減を実現するイノベーションの創出が不可欠である。我が国においても、2016年4月、総合科学技術・イノベーション会議において、「エネルギー・環境イノベーション戦略(NESTI2050)」が策定され、温室効果ガスの抜本的削減を実現する革新技術の研究開発を強化する方向が打ち出されている。この戦略の省エネルギー分野においては、創エネルギー技術によって生み出されたエネルギーを社会の様々な局面に利用していく過程で、エネルギーロスを縮小する省エネルギー技術を開発するとし、その解決手段として「革新的生産プロセス」を重点的に開発すべき技術課題として挙げ、省エネ及びCO₂排出削減を実現していくことが謳われている。

また、「革新的環境イノベーション戦略」(2020年1月 統合イノベーション戦略推進会議決定)では目標として、機能性化学品の製造方法の省エネ化・コスト低減の実現に向けたフロー法による連続精密生産技術の確立が記述されている。さらに、「マテリアル革新力強化戦略」(2021年4月 統合イノベーション戦略推進会議決定)ではプロセスインフォマティクス(PI)・計算科学等の活用による目的化学品の最適製造経路設計、及び、化学品製造の環境負荷低減(省エネ・省廃棄物)と高速・高効率なオンデマンド生産を可能とする革新的製造プロセス(フロー合成技術等)の技術開発を実施することが記述されている。

本プロジェクトは、今後成長が期待される機能性化学品(高付加価値、多品種少量生産)の分野において、これまで行われてきたエネルギー多消費で多くの共生成物を排出するバッチ法を、日本が強みを有する不均一系触媒の技術を用いて、省エネで効率的な連続フロー法に置き換えるとともに、プロセス情報、反応データ等を用いた合成プロセス設計技術の開発

を行う。これら研究開発を国内トップレベルの実施主体による産学連携研究体制で進め、従来と異なる生産プロセス・イノベーションを創出するものである。これにより、生産プロセスの大幅な省エネルギー化、及び CO₂ 排出量削減と経済性向上を実現でき、上記課題に資することが期待される。

②我が国の状況

論文発表件数（連続精密生産技術）における国別のシェアでは、欧州が約半数を占め、次いで米国、中国、日本と続いている。一方、東京大学では機能性化学品の一つである医薬原体（ロリプラム）の合成において、連続合成を高収率で実現し、Nature 誌にも掲載され、世界的にも注目される技術が開発されている。そのような状況下、我が国では、革新的生産プロセスの実現に向け産官学が一体となった動きが活発化している。

また、機能性化学品の材料合成プロセスでは、大学、研究機関等においてプロセス条件の情報取得や、データ科学、機械学習システムを適用して反応予測する技術の開発等が行われている。NEDO 先導研究においては、知識データベース及び量子化学計算結果を活用した合成経路探索システムと微細空間反応での高速検証、さらにはこれらのデータを活用したシミュレーションツールとを組み合わせた機能性化学品の合成経路開発に関する研究が行われている。

③世界の取組状況

また世界の動きとしては、1990 年代に、米国 Yale 大の P. T. Anastas 教授がグリーンケミストリーを提唱して以来、欧米を中心に、化学品製造における廃棄物削減や CO₂ 削減に関する研究が活発に行われるようになった。2000 年には、国内でもグリーン・サステイナブル・ケミストリー (GSC) ネットワークが設立され、廃棄物が少なく、省エネルギーを実現する製品と製造プロセスの研究が行われるようになった。なかでも高性能な触媒や省エネルギーな分離精製法に関する研究が活発に行われるようになり、バッチ法を連結フロー法に置き換える革新的な研究開発が日・欧・米を中心に活発化してきた。また、国際学会組織 Flow Chemistry Society が 2010 年に発足し、以後、欧州、米国、インドで国際学会が毎年開催されている。近年、文献ビッグデータ解析による合成経路探索や、微細空間反応による多数の候補物質の平行合成の検討は、欧米を中心に行われている。

④本事業のねらい

本プロジェクトでは、これまでエネルギーの多消費とともに、大量の廃棄物をともなって行われてきたバッチ法による機能性化学品の製造プロセスを、より省エネで廃棄物の排出が少ない触媒反応を鍵とした連結フロー法による革新的製造プロセス（＝連続精密生産プロセス）へ、分離精製技術も含め置き換えることを主眼にする。また、プロセス開発を行う上では、分散型生産、少量多品種生産にも対応可能にするため、モジュールを組み替えることで

「必要なものを、必要なときに、必要な場所で、必要な量だけ」生産することが可能なオンデマンド性を持たせる。それらにより、機能性化学品の製造に伴う消費エネルギーや廃棄物の削減、及び生産効率を飛躍的に向上させることが可能な基盤技術の開発を行い、産業力強化に資することを目的とする。具体的には、単なる省エネ、廃棄物削減の効果による低コスト生産のみならず、海外に依存している機能性化学品生産の国内回帰や類似構造の機能性化学品類が同じ連続精密生産プロセスで生産可能となることによる更なる低コスト生産等が期待される。これに、欧米の文献のみに依存しない合成プロセス設計技術を導入することにより、連続精密生産プロセスによる新規機能性化学品の開発・上市に至る期間の大幅な短縮が期待される。

3. 2 研究開発目標

モジュールを組み替えることで種々の機能性化学品の生産に対応可能なオンデマンド型連続生産プロセスを構築するため、少生産量市場向け装置（生産性：数 g/h 程度）を開発する。また、中生産量市場向け装置（生産性：数 kg/h）へのシームレスなスケールアップに必要な要素技術を抽出・整理する。なお、少生産量市場向け装置については、異なる用途の機能性化学品の中からいくつかをターゲット化合物として設定し、モジュールが連結された、それら連続精密生産プロセスを構築（連続化）する。また、連続精密生産プロセスの開発期間の短縮に資する合成経路候補創出等が可能な合成プロセス設計技術を構築する。

研究開発項目①「高効率反応技術の開発」

I. 反応・新触媒の開発

合理的な指針に基づき連続精密生産に適した触媒反応を開発する。具体的には、共生成物が少なく転化率及び選択率が高い不均一系触媒を開発し、その反応条件の最適化を行う。

【中間目標（2021 年度末）】

- ・ 収率 80%以上の反応を 20 種以上開発する。
- ・ 70 時間以上連続運転可能な不均一系触媒を 10 種以上開発する。

【中間目標（2023 年度末）】

- ・ 150 時間以上連続運転可能な不均一系触媒を用いて、収率 90%以上となる反応を 10 種類以上開発する。
- ・ 70 時間以上連続運転可能な不均一系触媒を 20 種以上開発する。
- ・ 上記の条件を満たす反応を二つ連結して連結して連続合成が可能なことを複数種示す。

【最終目標（2025 年度）】

- ・ 150 時間以上連続運転可能な不均一系触媒を用いて、収率 90%以上となる反応を 20 種類以上開発する。
- ・ 複数のターゲット化合物について、ターゲット化合物の生成を確認して連続精密生産を実証する。

研究開発項目①「高効率反応技術の開発」

Ⅱ. 高効率反応器モジュールの開発

連続精密生産プロセスに適した各種反応器モジュールを開発する。また併せて、迅速に生成物の組成変化がモニタリング可能となる技術の開発を行う。

【中間目標（2021年度末）】

- ・ 少生産量市場向け反応器モジュール（一相系反应用、二相系反应用、反応分離用）を設計する。

【中間目標（2023年度末）】

- ・ 少生産量市場向け反応器モジュール（一相系反应用、二相系反应用、反応分離用）を試作し、機能を確認する。
- ・ 小型光学分析装置と質量分析装置による反応モニタリング技術を開発する。

【最終目標（2025年度末）】

- ・ 少生産量市場向け反応器モジュールを開発する。
- ・ 1%程度の精度で迅速に測定可能な光学分析装置による分析技術を開発する。
- ・ 特定不純物の発生を早期に検出可能な質量分析装置による高感度分析技術を開発する。
- ・ 中生産量市場向け反応器モジュールを開発するのに必要な要素技術を抽出・整理する。

研究開発項目②「連続分離精製技術の開発」

ターゲット化合物の分離精製過程における使用に適合するよう技術（連続抽出技術、連続濃縮分離技術、溶剤・ガス類の連続再生技術）の開発を行い、これら技術を単独又は複合化した各種分離精製モジュールの開発を行う。

【中間目標（2021年度末）】

- ・ 各種基盤技術検討を行い、ターゲット化合物の分離精製過程において使用する少生産量市場向け各種分離精製モジュールを設計する。

【中間目標（2023年度末）】

- ・ 少生産量市場向け各種分離精製モジュールを試作し、機能を確認する。

【最終目標（2025年度末）】

- ・ 反応器モジュールにて生成する目的物質の85%以上を抽出・分離可能な少生産量市場向け分離精製モジュールを開発する。
- ・ 反応及び抽出に使用した溶媒あるいはガス類を回収・再利用可能な少生産量市場向け分離精製モジュールを開発する。
- ・ 中生産量市場向け各種分離精製モジュールを開発するのに必要な要素技術を抽出・整理する。

研究開発項目③「合成プロセス設計技術の開発」

連続精密生産プロセスの開発期間を短縮し効率的かつ生産性の向上ができる生産プロセス設計の実現に向けた技術の開発を行う。

【中間目標（2023年度末）】

- ・ 現行の 1/5 の期間(3 ヶ月間程度)で製造プロセス開発を可能とするシステムに必要な要素技術を確立する。
- ・ 合成過程に基幹 5 反応が含まれる複数の標的化合物について、要素技術検証を実施する。

【最終目標（2025年度）】

- ・ 現行の 1/5 の期間(3 ヶ月間程度)で 80%以上の収率を実現する少生産量市場向け連続精密生産装置での製造プロセス開発を可能とするシステムを確立する。
- ・ 合成過程に基幹 5 反応が含まれる 10 程度の標的化合物について、製造プロセスを確立する。

4. 実施内容及び進捗（達成）状況

プロジェクトマネージャーに NEDO 材料・ナノテクノロジー部 関野雅史専門調査員を任命して、プロジェクトの進行全体を企画・管理を担当させ、そのプロジェクトに求められる技術的成果及び政策的効果を最大化させた。

学校法人中部大学 分子性触媒研究センター長 山本 尚教授をプロジェクトリーダーとし、以下の研究開発を実施した。

4. 1 2021年度事業内容

研究開発項目①「高効率反応技術の開発」

I. 反応・新触媒の開発（実施体制：産業技術総合研究所、東和薬品株式会社、富士フィルム株式会社、東京大学、クミアイ化学工業株式会社（共同実施）、田辺三菱製薬株式会社（共同実施）、岐阜薬科大学（再委託）、中部大学（再委託））

(1) 連続生産に適した反応の開発

多段階反応の後段反応に影響を及ぼさないようにするため、可能な限り共生成物が生じない（あるいは小分子のみが共生成物となる）連続精密生産に適した触媒反応の開発を目指し、基幹 5 反応の開発という指針のもと研究を行った。2020 年度に引き続き、基幹 5 反応の中でも使用頻度の高い十数個の反応を取り上げ検討した。結果、クライゼン縮合反応、アルコールからアミンの合成反応、アルキンからアルケンへの選択的水素化反応、アミドからニトリルの合成反応、アルケニルアールの合成反応等において、収率 80%以上で進行する触媒反応を代表的な基質で開発した。また、イミンからアミンへの変換反応とアミド化反応の連結により農薬（殺菌剤）であるメトラキシルの連結・連続合成に成功した。

(2) 連続精密生産に適した不均一系触媒の開発

多段階反応の後段反応に影響を及ぼさないようにするため、共生成物が少なく、選択率及

び転化率が高い連続精密生産に適した不均一系触媒の開発を行った。具体的には、クネベナーゲル反応、アルドール反応、光酸化反応、ニトロ基からアミノ基への水素化反応、アリアルアミン化合物の合成反応等において、70 時間を超える連続運転を達成した。

Ⅱ. 高効率反応器モジュールの開発(実施体制:産業技術総合研究所、東京理化学株式会社、三井化学株式会社(共同実施)、京都大学(再委託)、早稲田大学(再委託))

(1) 一相系反応器モジュールの開発

エステル体からの直接アミド化における触媒劣化は、反応中に生じる副生成物が触媒表面に蓄積することが原因であることが示唆された。その場合の経時劣化挙動は $1/(1+\alpha t)$ の関数で表現されることが明らかになった。また、温度を所定の幅に制御可能な反応器の簡易設計法の開発を行った。反応器直径と断熱最大上昇温度の関係式の導出を行い、アルドール反応への適用を検討した。その結果、実測値に合致する反応器内温度上昇の推定がなされ、開発した設計法の有効性が実証された。複数反応の連結を想定した少量生産用反応器モジュール(送液モジュールおよび背圧制御モジュール)の試作を行った。また、前年度までに開発した簡易設計法に基づき、触媒密度分布による発熱量の均一化やフィンの設置による熱伝達性能向上など温度制御性を向上させる方法を提案した。

(2) 二相系反応器モジュールの開発

過酸化水素を酸化剤に用いたベンジルアルコールの酸化とけい皮酸エチルの水素化において、反応シミュレーションに必要な速度定数と活性化エネルギーの取得を行った。少量生産市場向け二相系反応器モジュールに効率混合機構の導入を目指し、反応器導入部に搭載する反応溶液の分散機構の検討・試作を行った。マイクロミキサー式は、主に液液反応における効率混合を目的として、マイクロミキサーを反応器導入部へ搭載する試作を行った。さらに、マイクロミキサー式を気液反応に適応する検討を行ったところ、気液反応においても、効率よく反応溶液を触媒層へ分散導入できることを見出した。また、複数反応の連結を想定した少量生産用反応器モジュールの試作を行った。

(3) 反応分離用モジュールの開発

反応分離用炭素膜の開発では、フロー型の膜反応器開発に取り組み、エステル化反応について、炭素膜の特性、脱水試験条件、反応条件などが脱水性能および反応成績に与える影響を明らかにし、フロー型膜反応器の構造を改良することで炭素膜の脱水性能を向上させ、より少ない膜面積で反応転化率を平衡転化率より向上させることに成功した。また、反応分離用ゼオライト膜の開発では、フロー型エステル化膜反応器における、ゼオライトの構造(種類)や耐酸性、脱水性能のエステル収率に与える影響について検討した。従来の MOR 膜と比較して高い脱水性能を有する AEI 膜を新たに開発した。これを用いることで、これまでよりも低温・低圧条件下でも高いエステル収率が得られることを明らかにした。また、複数反応

の連結を想定した少量生産用反応分離モジュールの試作を行った。

(4) モニタリング技術の開発

反応制御を適切に行うために高精度かつ迅速に反応状況を把握するモニタリング技術の原理として、三次元励起蛍光スペクトル法により有機溶媒反応液中の反応に関わる蛍光活性を有する原料物質、中間生成物質および目的生成物質の蛍光特性を解析し、その知見を基にした反応関与物質のオンライン分析技術を確立した。また、有機溶媒反応液をレーザー照射法および極微小液滴化法により誘導結合プラズマ質量分析装置へオンライン導入し、反応液中の残留触媒金属の高感度検出法を確立した。

(5) スケールアップ検討

ナンバリングアップによるスケールアップ検討を行った。これまでに開発した手法では、閉塞などの異常時に生じる圧力変化や流量変化が異常モジュールに固有の値となる特徴を利用している。このとき、圧力変化を用いた手法は、圧力が正にシフトする変化しか示さないため、流量変化を用いた手法に比べて検出性能が低いという問題があった。本年度は、並列モジュールの下流部に、圧力計を備えた流体収集装置を用いる新たな手法を開発し、上記の問題点を解決した。

研究開発項目②「連続分離・精製技術の開発」

(実施体制：産業技術総合研究所、公立大学法人大阪(再委託)、京都大学(再委託)、広島大学(再委託))

(1) 連続抽出技術の開発

「非相溶の液体間で短時間での連続的な物質移動を促進するための混合技術の開発」においては、高圧液-液分離デバイスの改良、抽出速度の算出手法の確立、機械学習による分配係数の予測モデルの構築を行った。「非相溶の液体間で短時間での連続的な物質移動を促進するための流動状態を制御する技術の開発」においては、液-液分離率 98%以上の連続液-液分離デバイスの開発に成功した。動的制御方式のデバイスにおいては、吐出圧を 400 倍に高め、かつ、流動状態を表す主要な 2 つのパラメーターを独立に変更可能に改良した。「相制御による均一相と二相分離を利用することで物質移動と分離を連続的に可能とする技術の開発」においては、排出制御弁を必要としない液-液分離デバイスを開発し、反応との連続化において目的化合物の抽出率 85%以上を達成した。以上を含めたこれまでの結果より目的化合物を抽出媒体に連続抽出・分離する少生産量市場向けモジュールの設計を行った。

(2) 連続濃縮分離技術の開発

分離係数 1000 以上で極性有機溶剤を他の有機溶剤から分離可能なゼオライト膜を開発した。また、膜分離デバイスを設計した。シリカ膜については、有機溶剤分離に適した細孔径

分布制御技術を確立し、細孔径が溶剤分離に及ぼす影響を明らかにした。コンパクトな蒸留装置の設計指針を得るため、装置構造が分離性能に及ぼす影響に関するデータを昨年度に引き続いて取得した。また、モデル溶液を用いた濃縮分離を行って装置性能を評価した。

(3) 溶媒・ガス類の連続再生技術の開発

膜分離とコンパクトな蒸留装置による蒸留分離を組合せた溶媒の連続再生シミュレーションモデルを用いて、対象溶液である水／エタノール系において小生産量市場向けスケールでの必要な装置サイズと投入エネルギーを評価した。また、二酸化炭素分離デバイスを設計、試作して、二酸化炭素の透過速度が5～20 MPaの範囲で圧力に依存せず、ほぼ一定であることを見出した。

(4) スケールアップ検討

中生産量市場向けモジュールの設計に必要な取得すべきデータを選定した。

研究開発項目③「合成プロセス設計技術の開発」

本研究開発項目は公募後に2022年度より実施するため2021年度は実施していない。

4. 2 実績推移

	2019年度	2020年度	2021年度
示達額			
需給会計（百万円）	289	436	632
特許出願件数（件）	1	2	6
論文発表数（件）	6	8	13
学会・フォーラム等（件）	17	13	10

実績は年度末見込み。

5. 事業内容

プロジェクトマネージャーに NEDO 材料・ナノテクノロジー部 関野雅史専門調査員を任命して、プロジェクトの進行全体を企画・管理や、そのプロジェクトに求められる技術的成果及び政策的効果を最大化させる。

また、学校法人中部大学 分子性触媒研究センター長 山本 尚教授をプロジェクトリーダーとして、以下の研究開発を実施する。

5. 1 2022年度事業内容

研究開発項目①「高効率反応技術の開発」

本研究開発項目では、機能性化学品の連続生産に必要な反応を行うための反応・触媒開発と反応器モジュールの開発を行う。

I. 反応・新触媒の開発（実施体制：産業技術総合研究所、東和薬品株式会社、富士フィルム株式会社、東京大学、クミアイ化学工業株式会社（共同実施）、田辺三菱製薬株式会社（共同実施）、岐阜薬科大学（再委託）、中部大学（再委託））

（1）連続生産に適した反応の開発

2021年度までの検討をもとに、多段階反応の後段反応に影響を及ぼさないようにするため、可能な限り共生生成物が生じない（あるいは小分子のみが共生生成物となる）連続精密生産に適した触媒反応の開発を継続して行う。さらに2021年度までに開発した触媒反応の基質適応範囲を広げると共に、収率90%以上の反応を10種以上開発する。また複数の反応を連結した連結・連続合成を二種以上行う。

（2）連続精密生産に適した不均一系触媒の開発

多段階反応の後段反応に影響を及ぼさないようにするため、2021年度までに開発した反応を中心に、共生生成物が少なく、選択率及び転化率が高い連続精密生産に適した長寿命な不均一系触媒の開発を行う。150時間以上連続運転可能な不均一系触媒を5種類以上開発する。

II. 高効率反応器モジュールの開発（実施体制：産業技術総合研究所、東京理化学器械株式会社、三井化学株式会社（共同実施）、京都大学（再委託）、早稲田大学（再委託））

（1）一相系反応器モジュールの開発

試作した少生産量市場向け反応器モジュールにおいて連結反応を実施し、反応器の連結時に想定される試料調整の課題を抽出、多段階反応に必要な試料調整モジュール群の策定を行う。具体的には、連結間の温度管理機構の検討を行う。加えて、反応器には、長期運用による内部の触媒偏りを緩和する構造を搭載する。工程間に大きな温度差を伴う反応をモデルとして、モジュールの有用性を実証する。なお、II-(2) 二相系反応器モジュールの開発と共通要素がある為、統一的に開発を進める。また、2021年度に提案した温度制御性向上手法を実証するとともに、簡易設計法の2相系へ拡張を試みる。

（2）二相系反応器モジュールの開発

試作した少生産量市場向け反応器モジュールにおいて連結反応を実施し、反応器の連結時に想定される試料調整の課題を抽出、多段階反応に必要な試料調整モジュール群の策定を行う。特に、異相系同士の連結を想定して、相転換を実施するため気液分離、液液分離機構の検討を行う。加えて、反応器には、発熱の大きい反応を想定して内部温度の偏りを緩和する構造を搭載する。二相系から一相系に転換する反応をモデルとして、モジュールの有用性を実証する。なお、II-(1) 一相系反応器モジュールの開発と共通要素がある為、統一的に開発を進める。

(3) 反応分離用モジュールの開発

反応分離用炭素膜の開発においては、エステル化反応について少生産量市場向け反応分離用モジュールの試作に向けて、スケールアップの検討と反応転化率向上効果の確認を行う。さらに、アミド化反応等の新たな反応系への炭素膜の適用を検討し、反応系から水を選択分離することで平衡転化率を超える転化率が得られることを明らかにする。また、ゼオライト膜を用いて、フロー型エステル交換膜反応器を構築する。エステル交換膜反応器が安定的に動作することを示すとともに、熱力学的平衡転化率を超える収率が得られることを実証する。

(4) モニタリング技術の開発

2021 年度に確立したモニタリングの原理技術の高精度化のため、反応関与物質については、オンライン三次元励起蛍光スペクトル法により有機溶媒反応溶液中に混在する複数の蛍光活性反応関与物質の分別定量法を確立する。また、反応制御に関与する残留触媒等の金属不純物については、レーザー照射法および極微小液滴化法によるオンライン ICP 質量分析法により有機溶媒反応液中の金属不純物を高感度に定量できる技術を確立する。

(5) スケールアップ検討

並列モジュール数の増加 (10 器以上) に備えて、2021 年度までに検討したナンバリングアップ構造を 2 次元から 3 次元に拡張する。1 入力 3 出力あるいは 1 入力 4 出力の基本流路構造を繰り返す装置の最適設計問題を定式化する。また、ナンバリングアップ手法を実証する。さらに、均相系の流体分配から混相系の流体分配に系を拡張し、装置入口圧力などの間接的な計測データを利用し、統計的性質を示す諸量に基づいて監視する方法を開発する。

研究開発項目②「連続分離・精製技術の開発」

(実施体制：産業技術総合研究所、公立大学法人大阪 (再委託)、京都大学 (再委託)、広島大学 (再委託))

本研究開発項目においては、「連続抽出技術」、「連続濃縮分離技術」、「溶媒・ガス類の連続再生技術」の各種基盤技術および「スケールアップ技術」の開発を行う。

(1) 連続抽出技術の開発

反応器モジュールとの連結に必要なデバイスの試作、評価を行い、小生産量市場向け抽出・分離モジュールの試作を行う。

(2) 連続濃縮分離技術の開発

膜分離デバイスを試作、2021 年度までに開発した分離膜を用いた連続濃縮分離試験を実施し、膜分離モジュールの運転条件が分離機能に与える影響を調査する。また、コンパクトな蒸留装置の操作条件が分離性能に及ぼす影響を引き続き調査するほか、蒸留モジュールの試

作を行う。

(3) 溶媒・ガス類の連続再生技術の開発

有機溶媒と水の分離を対象に、小生産量市場向けスケールに対応する溶媒の分離回収プロセスをシミュレーションにより検討し、設計条件、運転条件等の仕様を提示する。また、対象流体である有機溶媒等が溶解した二酸化炭素流体を用いて、流体の透過、濃縮特性に関する二酸化炭素分離デバイスの評価を行う。

(4) スケールアップ検討

デバイス類のスケールアップに必要なデータ取得等を検討し、中生産量市場向けモジュールの設計を進める。

研究開発項目③「合成プロセス設計技術の開発」

(実施体制：追加公募により採択された委託先により 2022 年度から実施する。)

1. 研究開発の必要性

機能性化学品の製造プロセスの設計は、研究者の経験と勘、そして試行錯誤に基づいて行われている。こうした中、近年、AI を用いた合成経路設計システムが実用化されているが、現在のシステムは、欧米が強みを持つ文献データに依存し、合成困難な前駆体を經由するなど反応の進行が保証されない複数の経路が提案されるため、実験による多くの検証を必要とするなどの課題を持つ。

このため、連続精密生産プロセスの開発期間を短縮し効率的かつ生産性の向上ができる生産プロセス設計の実現に向けて「合成経路探索技術の開発」、「触媒最適化設計技術の開発」、「合成経路候補の高速検証技術及び生産装置設計への適用技術の開発」、「プロセスシミュレーションと実験データの連携による生産装置設計技術の開発」に取り組む。

当該項目では、研究開発項目①、②で対象としている、機能性化学品の約 80% を製造可能な基幹 5 反応* を含めて、一貫性を持って技術開発を行うこととする。

* 基幹 5 反応：C-C 結合生成反応、酸化反応、水素化反応、エステル化・アミド化反応、クロスカップリング反応

2. 具体的研究内容

(1) 合成経路探索技術の開発

合成経路の検討に要する時間を大幅に短縮するため、合成経路候補創出技術及び最適経路探索技術の開発を行う。

(2) 触媒最適化設計技術の開発

連続精密生産に向けて、合成経路候補の生産性の向上に資する固体触媒および固定化触媒探索技術、触媒反応条件の最適化技術の開発を行う。

(3) 合成経路候補の高速検証技術及び生産装置設計への適用技術の開発

連続精密生産装置設計に向けて、合成経路候補を高速で検証する技術、反応条件の最適化技術、連続精密生産の反応・分離装置の高度設計に資する実験データとシミュレーションデータの統合インターフェース技術の開発を行う。

(4) プロセスシミュレーションと実験データの連携による生産装置設計技術の開発

上記2.(3)の技術を活用しつつ連続精密生産装置の設計のため、検証データのフィードバックによる最適化機能を有するプロセスシミュレーション技術、機械学習などを用いた装置設計用データの精緻化技術並びにプロセスシミュレーション結果に基づく装置設計最適化指針の開発を行う。

5. 2 2022年度事業規模

委託事業

需給勘定

1,200百万円(継続)

※事業規模については、変動があり得る

6. 事業の実施方式

研究開発項目③に関しては、継続事業である研究開発項目①、②に追加して、以下の通り公募を行い実施する。

6. 1 実施体制

経済産業省

↓ 運営費交付金

NEDO

委託事業の公募・審査・採択

↓ 委託

委託事業者

6. 2 公募

(1) 掲載する媒体

NEDO ホームページで行う。

(2) 公募開始前の事前周知

公募開始前の1ヶ月前にNEDO ホームページで行う。本事業は、e-Rad 対象事業であり、

e-Rad 参加の案内も併せて行う。

(3) 公募時期

2022 年 1 月以降に行う。

(4) 公募期間

原則 30 日間とする。

(5) 公募説明会

必要に応じ、NEDO において、もしくはオンラインで開催をする。

6. 3 採択方法

(1) 審査方法

e-Rad システムへの応募基本情報の登録は必須とする。

審査は、公募要領に合致する応募を対象に、事前書面審査を行い、必要に応じて外部有識者による採択審査委員会及び契約・助成審査委員会を経て、採択の可否について決定する。また、必要に応じて申請者に対してヒアリング等を実施する。

(2) 公募締切りから採択決定までの審査等の期間

特段の事情がある場合を除き、公募締切りから原則 45 日以内での採択決定を行う。

(3) 採択結果の通知・公表

採択者については、採択通知を行うとともに、原則として、NEDO ホームページ等にて公表する。また、不採択者については、不採択理由を明記して不採択通知を行う。

6. 4 本プロジェクトは非連続ナショナルプロジェクトとして取扱う。

7. その他重要事項

(1) 評価の方法

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への波及効果等について、技術評価実施規程に基づき、プロジェクト評価を実施する。外部有識者による中間評価を 2021 年度及び 2023 年度、事後評価を 2026 年度に実施し、当該研究開発に係る技術動向、政策動向や当該研究開発の進捗状況等に応じて、前倒しするなど、適宜見直すものとする。また、中間評価結果を踏まえ必要に応じて研究開発の加速・縮小・中止等の見直しを迅速に行う。

(2) 運営・管理

NEDOは、主としてプロジェクトリーダーを通して研究開発実施者と緊密に連携し、研究開発の進捗状況を把握する。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、運営管理に反映する。また、優れた研究成果を上げるために、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。さらに、外部有識者で構成する技術推進委員会を組織し、定期的に技術評価を受け、目標達成の見通しを常に把握することに努める。

(3) 複数年度契約の実施

委託先に対して複数年度の契約を行う。

(4) 継続事業に係る取扱いについて

研究開発項目①および②の委託先は2021年度と変更はない。

(5) 知財マネジメントに係る運用

本プロジェクトは、「NEDOプロジェクトにおける知財マネジメント基本方針」を適用する。

(6) データマネジメントに係る運用

本プロジェクトは、「NEDOプロジェクトにおけるデータマネジメント基本方針（委託者指定データを指定しない場合）」を適用する。

(7) 標準化施策等との連携

本研究開発で得られた成果については、標準化等との連携を図るため、標準案の提案等を必要に応じて実施する。

8. スケジュール

8. 1 本年度のスケジュール

2022年1月以降 研究開発項目③に関する追加公募開始（予定）

2022年7～12月 技術推進委員会（予定）

9. 実施方針の改定履歴

2022年1月、制定。

(別紙) 2022年度「機能性化学品の連続精密生産プロセス技術の開発」実施体制図

研究開発項目③の追加公募により採択された実施者を下記の従来の体制に加え、一体で運営する。

