

# 機能性化学品の連続精密生産プロセス 技術の開発／「研究開発項目③ 合成 プロセス設計技術の開発」

## ～ 公募説明会 ～

2022年3月1日

- \* ご参加頂き有り難うございます。マイクOFF/カメラOFFにして、開始まで今しばらくお待ちください。
- \* 入退室管理は事務局で行います。

ご参考) 音声聞こえない等のトラブルがある場合には、機器のリスタートやブラウザの変更 (IE⇒Edge, Chrome等) により改善することがあります。

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構  
材料・ナノテクノロジー部

「機能性化学品の連続精密生産プロセス技術の開発」  
研究開発項目③「合成プロセス設計技術の開発」  
に係る公募

# 公募説明会

2022年3月1日(火)

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構

材料・ナノテクノロジー部

1. 事務連絡
2. 事業概要・公募テーマについて
3. 公募要領・提案書に関するご説明
4. 質疑応答

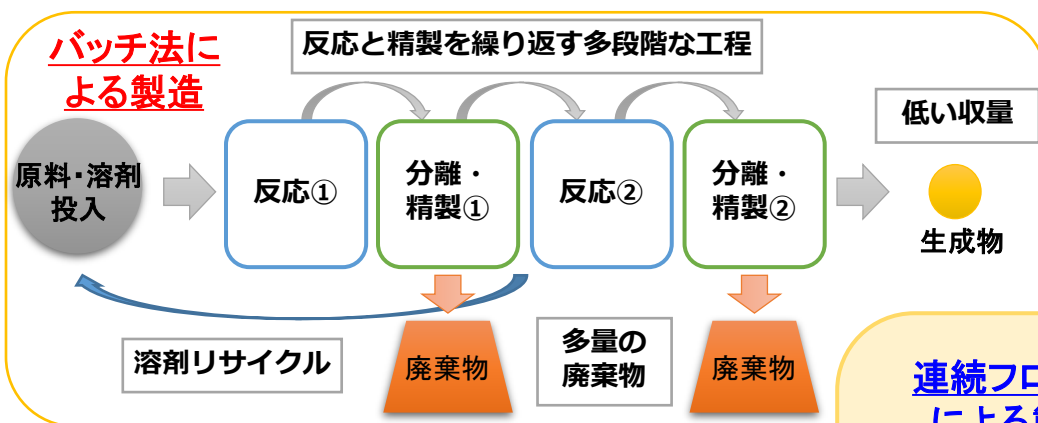
# —事業概要・公募テーマについて—

- 機能性化学品は、電子材料、医薬品・農薬中間体などの製品に適用される。
- 機能性化学品の世界市場規模は、2030年には35.9兆円に成長すると予想される。
- 機能性化学品を原料として作られた機能性材料は、付加価値が高く、衣食住に係る様々な製品のキー材料となっている。

| 機能性化学品<br>(有機合成品のみ) |        |         | 関連する完成品市場        |
|---------------------|--------|---------|------------------|
|                     | 2015年  | 2030年予測 |                  |
| 電子材料                | 0.5兆円  | 1.2兆円   | EV、電化製品、エレクトロニクス |
| 染料・顔料               | 0.4兆円  | 1.0兆円   | 塗料・インク、アパレル      |
| 食品添加剤               | 0.5兆円  | 1.2兆円   | 食品               |
| 医薬品原体               | 11.5兆円 | 25.7兆円  | 医療用医薬品、ジェネリック医薬品 |
| 香料                  | 0.9兆円  | 1.9兆円   | 化粧品、日用雑貨         |
| 農薬原料                | 1.7兆円  | 3.5兆円   | 農業               |
| その他                 | 0.7兆円  | 1.3兆円   | 日用品等             |
| 合計                  | 16.2兆円 | 35.9兆円  |                  |

出典：TSC Foresight Vol.31; <https://www.nedo.go.jp/content/100888375.pdf>

- 現在、機能性化学品の生産の主流はバッチ法であり、1反応工程毎に分離・精製を行うなど効率が悪く、製造に多大なエネルギーを要し、大量の廃棄物を排出するなどの課題がある。
- これに対し、連続フロー法による機能性化学品の製造では、1反応工程毎の分離・精製を必要としないなど、エネルギー、廃棄物量の大幅削減が可能な高効率プロセスである。

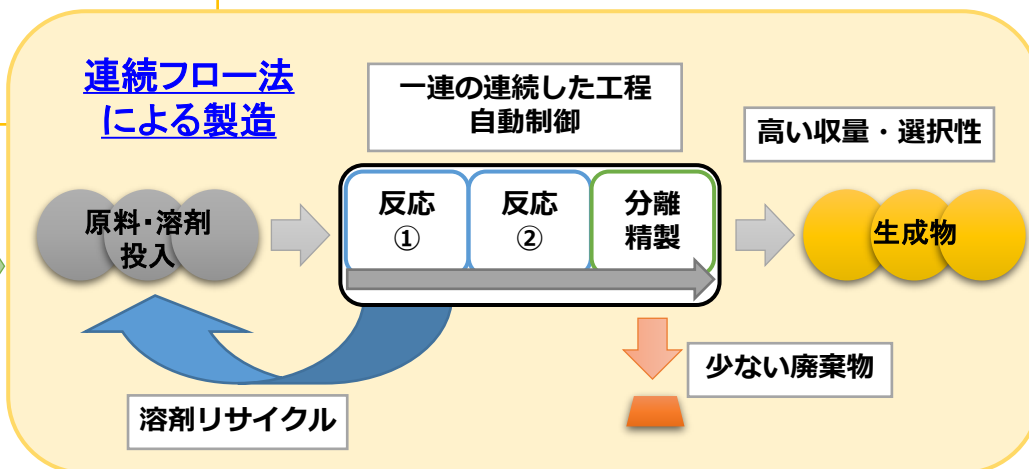


- 省エネルギー
- 効率化
- 多品種少量生産

⇒ CO<sub>2</sub>、廃棄物削減、  
産業競争力の強化

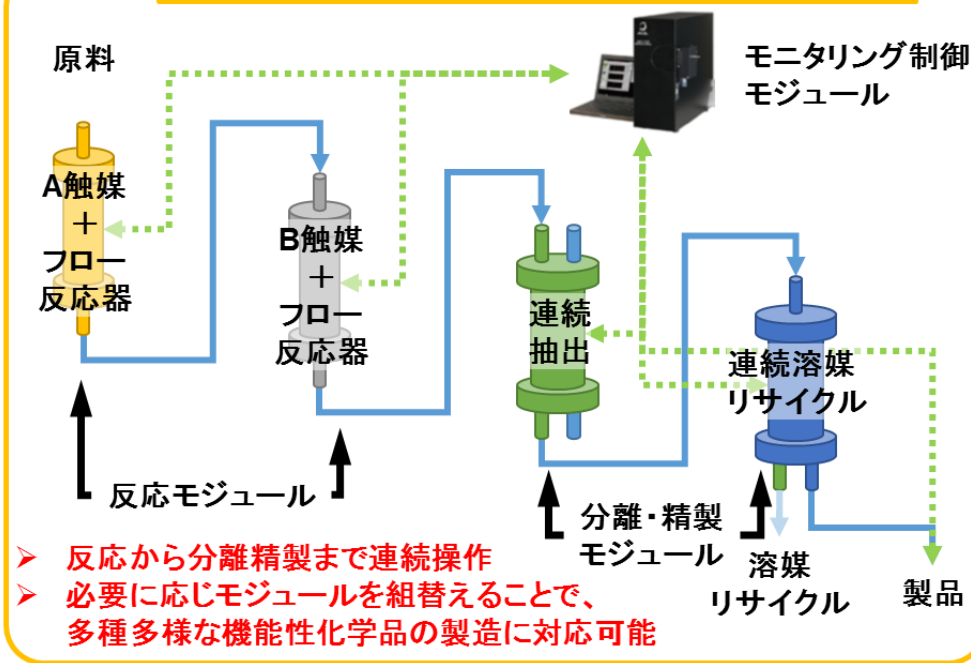
- 多量の廃棄物  
(副生物、触媒、溶剤)
- 低い収量
- 回収溶媒の制限

連続フロー法へ転換



**連結フロー法**による連続精密生産プロセスの構築を目指し、機能性化学品合成のルートにおいて頻出する上位5種類の反応を**基幹5反応**と位置付け、研究開発項目①「高効率反応技術の開発」、研究開発項目②「連続分離精製技術の開発」の技術開発を2019年度より行っている。

## 連結フロー法による連続精密生産プロセス



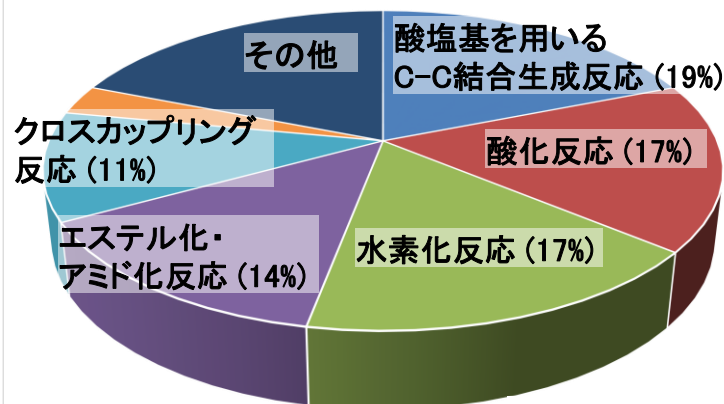
## 研究開発項目

### 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
- II. 高効率反応器モジュールの開発

### 研究開発項目②「連続分離精製技術の開発」

## 5種の反応で化学変換の8割弱が可能



出所: FlowST\* 提供資料

\*FlowST: フロー合成にかかわる技術を、いち早く実生産に結びつけるため、産学官の連携の場を提供、共同研究を推進し、日本の「ものづくり」の新たな力へと発展させることを目的とするコンソーシアム。フロー合成に関連した技術の情報交換・提供等を行っている。法人会員100社以上。(<https://flowst.cons.aist.go.jp/>)

今回、研究開発項目①、②の追加公募はありません。

## 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

- (1) 連続生産に適した反応の開発
- (2) 連続精密生産に適した不均一系触媒の開発

### II. 高効率反応器モジュールの開発

- (1) 一相系反応器モジュールの開発
- (2) 二相系反応器モジュールの開発
- (3) 反応分離用モジュールの開発
- (4) モニタリング技術の開発
- (5) スケールアップ検討

## 研究開発項目②「連続分離精製技術の開発」

- (1) 連続抽出技術の開発
- (2) 連続濃縮分離技術の開発
- (3) 溶媒・ガス類の連続再生技術の開発
- (4) スケールアップ検討

## 参考リンク

[機能性化学品の連続精密生産プロセス技術の開発](#)

[研究評価委員会「機能性化学品の連続精密生産プロセス技術の開発」\(中間評価\)分科会](#)

[機能性化学品製造プロセス分野の技術戦略策定に向けて](#)





### プロジェクト名: 機能性化学品の連続精密生産プロセス技術の開発 (うち研究開発項目③「合成プロセス設計技術の開発」)

#### 研究開発の目的

・「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産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結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。

#### 研究開発の内容

2019年度より実施している以下の研究開発項目①、②を継続実施するとともに、研究開発項目③を拡充し、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
- II. 高効率反応器モジュールの開発

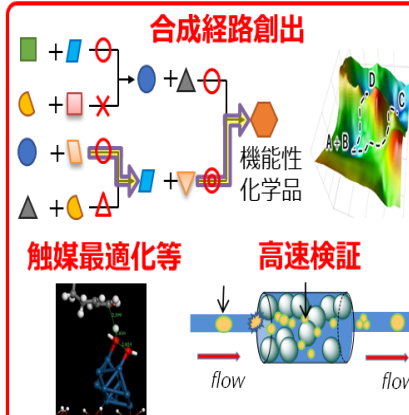
研究開発項目②「連続分離精製技術の開発」

研究開発項目③「合成プロセス設計技術の開発」

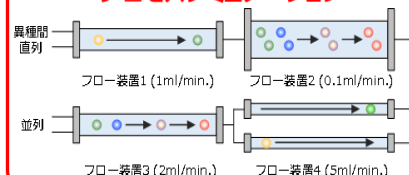
- (1) 合成経路探索技術の開発
- (2) 触媒最適化設計技術の開発
- (3) 合成経路候補の高速検証技術及び生産装置設計への適用技術の開発
- (4) プロセスシミュレーションと実験データの連携による生産装置設計技術の開発

#### 成果適用のイメージ

##### 拡充研究開発項目: 合成プロセス設計技術の開発



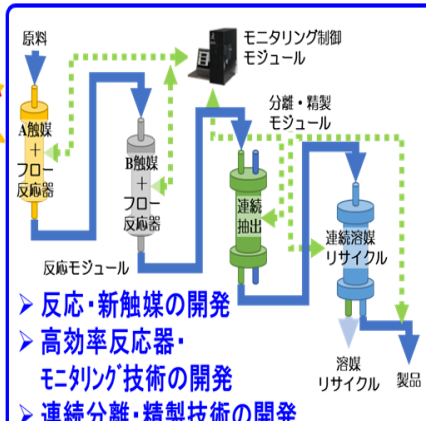
##### プロセスシミュレーション



製造プロセス設計期間短縮



##### 既存PJ:機能性化学品の 連続精密生産プロセス技術の開発



- 反応・新触媒の開発
- 高効率反応器・モニタリング技術の開発
- 連続分離・精製技術の開発

有効活用

材料設計  
マテリアルズ・インフォマティクス

バッチ法から連続生産へ

- バッチ法
- ・製造に多大なエネルギー
- ・効率が悪く大量の廃棄物

#### プロジェクトの規模

- ・事業費総額 84億円(7年間 予定)
- ・NEDO予算総額 84億円(7年間 予定)
- ・実施期間 2019～2025年度(7年間)  
2022～2025年度(拡充項目は4年間)

## 「機能性化学品の連続精密生産プロセス技術の開発」

### 研究開発項目③「合成プロセス設計技術の開発」に係る公募

注) 本公募において③は機種依存文字のため、[3]と表記する場合があるが、その場合は[3]は③と読み替える。

#### 研究開発項目③部分

##### ◆ 実施期間:

2022年度～2025年度(最長4年間)

##### ◆ 当初契約期間:

2022年度～2023年度(2年間)

##### ◆ 2022年度事業規模: 3.4億円程度

\* 事業規模は、審査の結果及び政府予算の変更等により提案額から変動することがあります。

| 年度                              | 2019         | 2020 | 2021 | 2022                                | 2023 | 2024 | 2025 | 2026 |
|---------------------------------|--------------|------|------|-------------------------------------|------|------|------|------|
| 研究開発項目                          |              |      |      |                                     |      |      |      |      |
| ①高効率反応技術の開発<br>Ⅰ 反応・新触媒の開発      | 不均一系触媒の開発    |      |      |                                     |      |      |      |      |
|                                 | 反応連続化の検討     |      |      |                                     |      |      |      |      |
| ①高効率反応技術の開発<br>Ⅱ 高効率反応器モジュールの開発 | 反応器モジュールの開発  |      |      |                                     |      |      |      |      |
|                                 | モニタリング技術の開発  |      |      |                                     |      |      |      |      |
|                                 | スケールアップ検討    |      |      |                                     |      |      |      |      |
| ②連続分離精製技術の開発                    | 分離精製モジュールの開発 |      |      |                                     |      |      |      |      |
|                                 | スケールアップ検討    |      |      |                                     |      |      |      |      |
| ③合成プロセス設計技術の開発                  |              |      |      | 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 |      |      |      |      |
| 評価時期                            |              |      | 中間評価 |                                     | 中間評価 |      |      | 事後評価 |

## 研究開発項目③「合成プロセス設計技術の開発」

### 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経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(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。

## 【中間目標(2023年度末)】

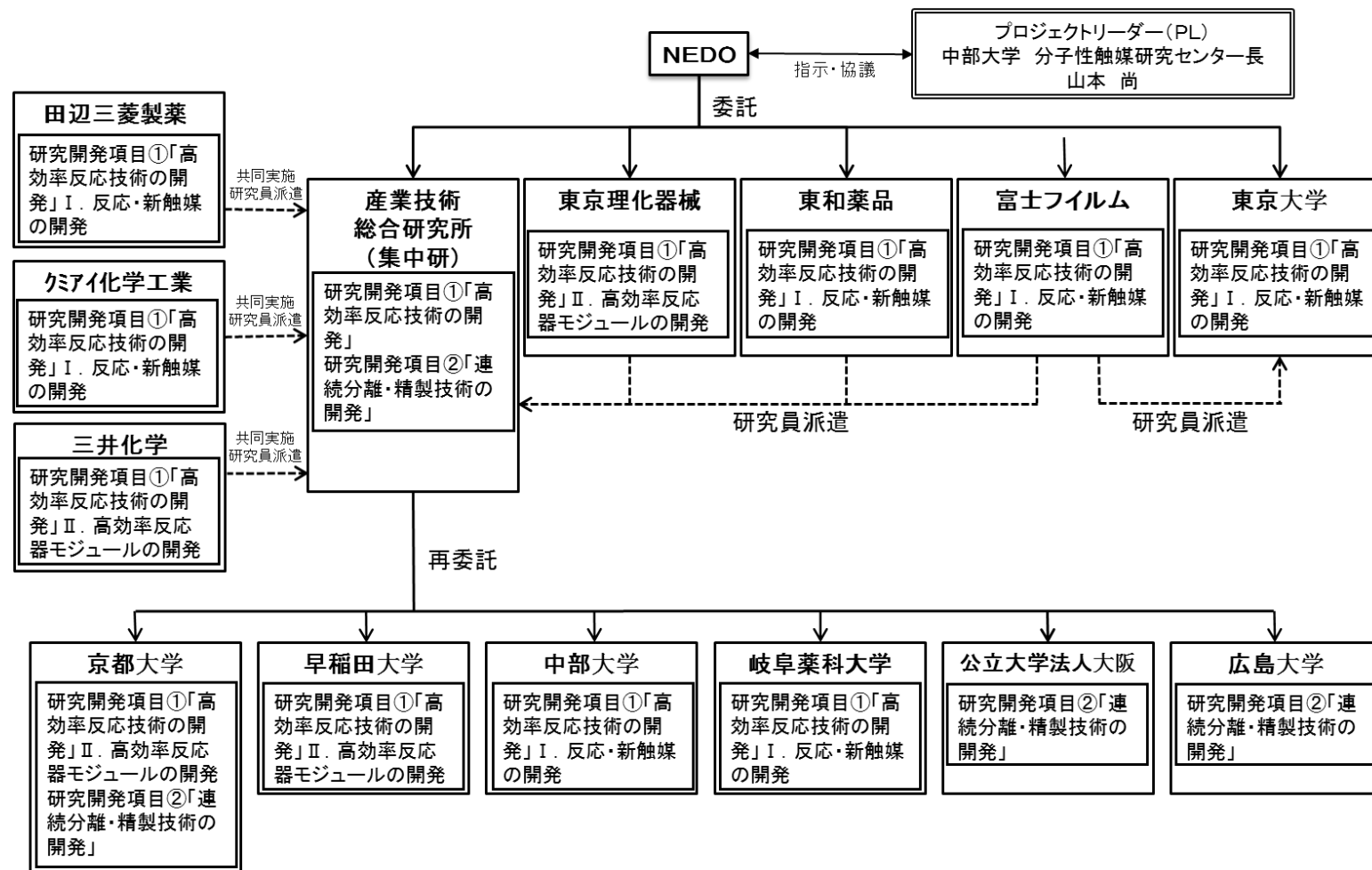
- ・現行の1/5の期間(3ヶ月間程度)で製造プロセス開発を可能とするシステムに必要な要素技術を確立する。
- ・合成過程に基幹5反応が含まれる複数の標的化合物について、要素技術検証を実施する。

## 【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。

研究開発項目③の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。

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



# —公募要領・提案書に関するご説明—



- ◆ 実施期間：2022年度～2025年度（最長4年間）
- ◆ 当初契約期間：2022年度～2023年度（2年間、委託事業）
  - ※ 3年目以降に契約が延長になる場合、委託ではなく助成事業となることがあります。
- ◆ 事業規模：3.4億円程度（2022年度）
  - ※ 事業規模については変動があり得ます。

## 提案に関して

- ◆ 研究開発項目③については、(1)～(4)全体の提案を原則とし、項目③の(1)～(4)を分割した部分提案については認めません。
- ◆ 本事業の既存の研究開発テーマ及びその実施者と連携して研究開発を行うことを条件とします。



- ◆ 応募資格のある提案者は、次の(1)～(7)までの条件、「基本計画」及び「2022年度実施方針」に示された条件を満たす、単独または複数で受託を希望する企業等とします。

公募要領だけでなく基本計画、実施方針の内容も確認ください。

- (1) 当該技術又は関連技術の研究開発の実績を有し、かつ、研究開発目標達成及び研究計画遂行に必要な組織、人員等を有していること。
- (2) 委託業務を円滑に遂行するために必要な経営基盤、資金及び設備等の十分な管理能力を有し、かつ、情報管理体制等を有していること。
- (3) NEDOがプロジェクトを推進する上で必要とする措置を、委託契約に基づき適切に遂行できる体制を有していること。
- (4) 企業等がプロジェクトに応募する場合は、当該プロジェクトの研究開発成果の実用化・事業化計画の立案とその実現について十分な能力を有していること。
- (5) 研究組合、公益法人等が応募する場合は、参画する各企業等が当該プロジェクトの研究開発成果の実用化・事業化計画の立案とその実現について十分な能力を有するとともに、応募する研究組合等とそこに参画する企業等の責任と役割が明確化されていること。
- (6) 複数の企業等が共同してプロジェクトに応募する場合は、実用化・事業化に向けた各企業等間の責任と役割が明確化されていること。
- (7) 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)の特別な研究開発能力、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場合は、国外企業等との連携により実施することができる。

- ◆ 提出期限: **2022年3月22日(火)正午アップロード完了**
- ◆ 提出先: 下記リンクから必要事項を入力し、提出書類をアップロードしてください。  
<https://app23.infoc.nedo.go.jp/koubo/qa/enquetes/ntuskuu814cl>
- ◆ 応募状況等により公募期間を延長する場合があります、公募期間を延長する場合は、ウェブサイトにてお知らせを掲載します。  
NEDO公式 Twitter をフォローいただくと、ウェブサイトに掲載された最新の公募情報に関するお知らせを Twitter で確認できます。  
是非フォローいただき、御活用ください。  
【参考】NEDO公式 Twitter  
<https://www.nedo.go.jp/nedomail/index.html>

- ① 提案書(別添1、別添2)
- ② 研究開発責任者候補及び業務管理者の研究経歴書(詳細は別添3)
- ③ 若手研究者(40歳以下)及び女性研究者数の記入について
- ④ ワーク・ライフ・バランス等推進企業に関する認定等の状況(詳細は別添4)
- ⑤ 事業遂行上に係る情報管理体制等の確認票(詳細は別添5)
- ⑥ e-Rad応募内容提案書  
※応募に際し、併せて府省共通研究開発管理システム(e-Rad)へ応募内容提案書を申請することが必要。⇒ **3月5日～3月14日までシステム停止**
- ⑦ 会社案内(会社経歴、事業部、研究所等の組織等に関する説明書)(提出先のNEDO部課と過去1年以内に契約がある場合は不要)
- ⑧ 直近の事業報告書
- ⑨ 財務諸表(原則、円単位:貸借対照表、損益計算書、キャッシュフロー計算書)(3年分)  
(なお、審査の過程で、必要に応じて財務に関する追加資料の提出を求める場合があります。)
- ⑩ NEDOが提示した契約書(案)(本公募用に特別に掲載しない場合は、標準契約書を指します)  
に合意することが提案の要件となりますが、契約書(案)について疑義がある場合は、その内容を示す文書
- ⑪ 国外企業等と連携している、又はその予定がある場合は当該国外企業等が連携している、若しくは関心を示していることを表す資料

- ◆ 採択審査委員会とNEDO内の契約・助成審査委員会の二段階で審査します。
  - ・採択審査委員会（外部有識者からなる委員会。採択決定後、メンバーは公表します）  
提案者には[ヒアリング審査（プレゼンテーション）](#)の準備をお願いする予定です。
  - ・契約・助成審査委員会（NEDO内部委員会）  
委託事業者を決定します。
- ◆ 審査基準
  - I. 研究開発計画について（技術面）
  - II. 実用化・事業化について（事業面）
  - III. その他

詳細は公募要領をご確認ください。

## 委託先の公表及び通知

- ◆ 附帯条件 を付すことがあります。  
採択に当たって条件（提案した再委託は認めない、他の機関との共同研究とすること、再委託研究としての参加とすること、NEDO負担率の変更等）を付す場合があります。

公募要領P.11、別添6

- ◆ 本プロジェクトは、知財マネジメント基本方針を適用し、産業技術力強化法第 17 条(日本版バイ・ドール規定)が適用されます。
- ◆ 本プロジェクトの成果である特許等について、「特許等の利用状況調査」(バイ・ドール調査)に御協力をいただく場合があります。

## データマネジメントについて

公募要領P.11、別添7

- ◆ 本プロジェクトはデータマネジメント基本方針のうち【委託者指定データを指定しない場合】を適用します。

## 国立研究開発法人の契約に係る情報の公表

公募要領P.15、別添8

- ◆ 「独立行政法人の事務・事業の見直しの基本方針」(平成22年12月7日閣議決定)に基づき、採択決定後、NEDOとの関係に係る情報をNEDOのウェブサイトで公表することがありますので御了知ください。なお、本公募への応募をもって同意されたものとみなします。

## 2022年

2月21日：公募開始

3月 1日：公募説明会（オンライン開催）

3月14日：本事業に関する問合せ締切（メールのみ受付）

3月22日：公募締切 正午必着（アップロード完了）

4月13日（予定）：採択審査委員会（外部有識者による審査）

4月下旬（予定）：契約・助成審査委員会

5月上旬（予定）：委託先決定

5月中旬（予定）：公表

6月ごろ（予定）：契約

以 上