触媒の発見、産学連携、触媒研究の未来

(国研) 産業技術総合研究所 触媒化学融合研究センター

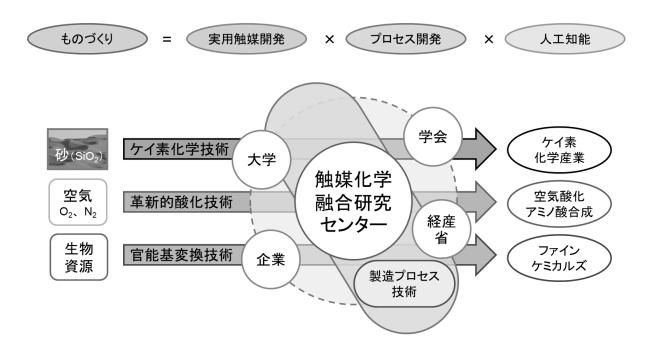
佐藤 一彦

1. はじめに

わが国の化学産業は、出荷額約 42 兆円(製造業中第 2 位)、付加価値額約 17 兆円(同第 2 位)、従業員数約 89 万人を擁する一大産業であり、機能性化学品を中心に、高い国際競争力を誇る製品を多数生み出している。その反面、同産業はわが国産業部門の二酸化炭素排出量において約 22%を占めており、これらの低減のためには、化学産業を支える触媒技術に係る革新的イノベーションが不可欠である。

触媒技術は、現在まで種々の化学反応に関して独自に開発されてきた個別の技術から構成されており、一つの技術分野として整理体系化されているとは言い難い。また、触媒と同様に有効な反応合成プロセスを提供する酵素反応や酵母などの微生物活用反応なども、それぞれ独自に発展してきており、触媒関連技術として一体的に整理されていない。このように幅広い分野にまたがる触媒関連技術について、主に機能性化学品を対象に、実用化に向けた研究の加速および構造的な観点からの整理体系化を通じて、汎用的な高性能化技術を見いだすことが出来れば、化学産業を始めとするわが国産業の競争力を強化し、環境負荷を低減することができる。このため産総研では、触媒関連技術のより一層の高度化、高性能化、広適用化、融合化を目指す触媒化学融合研究センターを 2013 年 4 月に設立した。

触媒化学融合研究センターでは、「ものづくり」を実用触媒開発とプロセス開発と 人工知能の3要素ととらえ、ケイ素化学技術、革新的酸化技術、官能基変換技術、製 造プロセス技術を戦略4課題として研究開発を進めている。

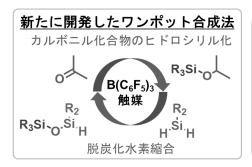


2. ケイ素化学技術、革新的酸化技術、官能基変換技術の主な成果ケイ素化学技術、革新的酸化技術、官能基変換技術に関して代表的な成果を示す。詳細は講演で紹介する。

主な研究成果:ケイ素化学技術

有機ケイ素機能性化学品製造プロセス技術開発(ケイ素PJ)にて実施

1. 配列制御シロキサンのワンポット合成法





2. ガラスの基本単位であるオルトケイ酸を結晶化、構造決定



砂からテトラアルコキシラン高効率合成

プレスリリース(2016年10月25日)「砂や灰などからケイ素化学の基幹原料を高効率に直接合成」

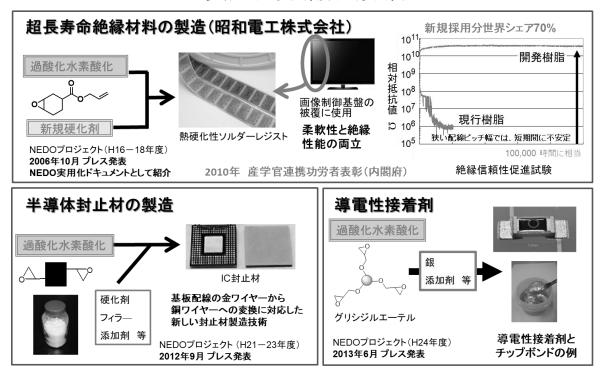


ケイ素源	テトラエトキシシラン の収率(反応時間3h)	原料のSiO ₂ 純度	原料の由来
砂	51%	90%	青森県夏泊半島産 珪質頁岩を粉砕
もみ殻燃焼灰	78%	93%	農業副産物である もみ殻を焼成
産業副産物	72%	95%以上	合成石英製造時の 副生物

テトラアルコキシシランを高効率に合成できる反応プロセスを開発

今後3~5年で反応のスケールアップを実現するための反応条件を整備し事業化を目指す

実用化例(酸化触媒)



- 未活用生物資源から有用な化合物への化学的変換

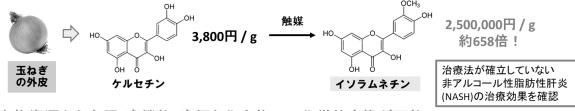


- > メタノールを溶媒とした効率の良いプロセス
- > 原料中のリグニン、ヘミセルロースは反応を阻害しない
- > 安価な金属への代替に成功(触媒コスト<¥10/kg-MeLev)
- ▶ 高濃度下の反応に成功(100g/L)

DOEのトップ12のバイオマスベース基幹化合物の一つ(レブリン酸)

企業・筑波大学との共同研究: 米ぬか、オリーブの葉、ブドウの皮、なども

・安価な化合物から高機能・高価な化合物への化学的変換



生物資源から有用・高機能・高価な化合物への化学的変換が可能

特願2017-188144: 非アルコール性脂肪性肝炎の予防又は治療剤及びその使用

3. 産学連携による実用化

共同研究においては、企業の興味対象は特殊な構造のものが多く、論文をまとめる際には検討しないものが多い。論文の条件を適用してもうまくいかないので、大

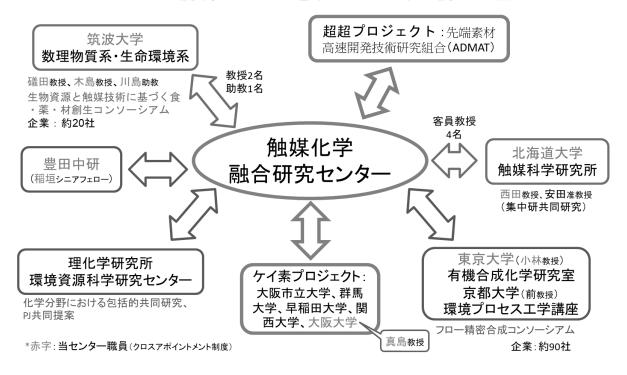
抵は半年から1年程度かけて反応条件や触媒の再検討を行うことになる。論文とは 全く別な触媒系でうまくいくこともあれば、数種類の混合溶媒を用い、撹拌方法を 変えるなど反応条件の工夫で解決したこともあった。

次は、見つかった触媒系の効率を上げつつ、コストダウンやスケールアップをすることになる。目標コストを設定してキログラムスケールでの問題点把握、安全性検討、それをもとにさらに大スケールでの検討を企業と共同で行っていく。場合によっては触媒系をゼロから再検討することになる。事業部の関与が深まり、異分野の研究者との共同作業が増え、研究開発のさらなるスピードアップも求められる。この段階では特許も論文も出すことは困難であるが、ここを一緒に超えることで事業化がようやく見えてくる。

様々な制約が生じるものの、自分の見つけた触媒反応が製品に繋がり、社会の役にたてることの喜びは大きい。研究所には専門性の異なる様々な研究者がいるが、彼らの基礎研究を企業とマッチングさせ、共同研究にも深く関わって製品化につなげたこともある。そのような経験の中で、有機ELやバイオマスなど自分の専門以外に研究の幅も広がった。出口に近い研究開発が、新たな基礎研究の着想を与えてくれたこともあった。また、共同研究を通じて培った企業との「良縁」がもとになり、いくつかの国プロジェクトを立ちあげることもできた。

アカデミアには教育や学術を追究する喜びと覚悟があり、企業は製品を通じて文化を創っていく喜びと責任があると思う。産学官連携に関わる研究者にも前述のような喜びがあり、それを実現するため相応な覚悟も必要である。持続性のある産学官連携を行うには、次の共同研究の芽が出る土壌となる基礎的・基盤的研究のポテンシャルを維持し、さらに向上させるマネジメントや、産学官連携に関わる研究者の評価を論文以外の面でもしっかり行うことが重要である。

アカデミアとの連携、国プロなどを活用した企業連携の基盤づくり



4. 化学と AI

AI が人間に代わって触媒を発見することはできるか?について考え、我々は2014年から触媒化学と情報科学を融合させる「キャタリストインフォマティクス」という概念を提唱してきた。これまで発表された触媒技術の知識を抽出・統合し、ビックデータとして活用することで、コンピューターサイエンスと触媒化学の融合により、目的とする任意の「ものづくり」を実現する触媒を自動的に創造するシステムの開発を目指したものである。

まず、産総研内に「触媒創造の自動化を目指す分科会」を設立した。2015年から北海道大学・理化学研究所・産総研の3機関合同でキャタリストインフォマティクスシンポジウムを開催し、2017年からは物質・材料研究機構も加わって4機関合同で開催してきた。このような状況の中、2016年から本格的に研究に取り組み、最近触媒化学におけるAI構築の第一歩となる研究成果を論文に発表した。

本講演では、触媒の発見、産学連携による実用化、国プロジェクトの立ち上げなどに加え、キャタリストインフォマティクスによる触媒の自動発見への期待についても述べる。新しい触媒はこれまで、論文を読み作業仮説を立て、表面科学や計算科学からの知見を得て、実験を繰り返してようやく発見できるものであった。しかし、過去の論文やノウハウなどをビッグデータ化し、人工知能を活用して目的に合った触媒を効率よく見つけることができれば、研究開発の期間は大幅に短縮でき、触媒に関する学術の発展にも貢献できるものと考える。

Chemistry etters

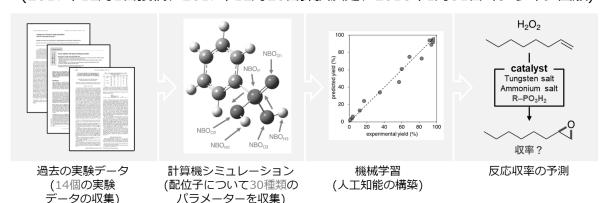
プレスリリース(2018年1月31日)「人工知能(AI)で触媒反応の収率を予測 ーキャタリストインフォマティクスで触媒の発見に道一」

Machine Learning Approach for Prediction of Reaction Yield with Simulated Catalyst Parameters

Akira Yada,*1 Kenji Nagata,2 Yasunobu Ando,3 Tarojiro Matsumura,3 Sakina Ichinoseki,1 Kazuhiko Sato*1

計算機シミュレーションで収集した触媒パラメーターを利用して 機械学習によって反応収率を予測

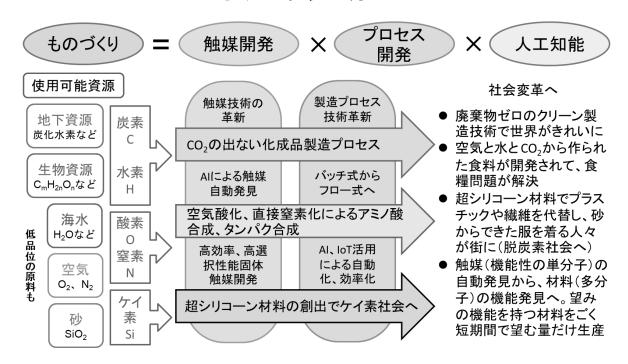
(2017年12月1日投稿、2017年12月26日採択決定、2018年1月31日オンライン出版)



5. おわりに

化学産業は、使用可能資源(低品位も含む)の制約や連続生産プロセスへの転換など、SDGsの観点を取り入れて発展していくと考えられる。廃棄物ゼロのクリーン製造技術や脱炭素社会実現のためには、今後も革新的触媒技術の開発がカギとなる。

化学産業長期ビジョン



参考文献

ケイ素化学

- 1. Matsumoto, K.; Oba, Y.; Nakajima, Y.; Shimada, S.; Sato, K. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2018**, *57*, 4637 (Hot paper).
- 2. Matsumoto, K.; Sajna, KV.; Satoh, Y.; Sato, K.; Shimada, S. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 3168 (Very important paper).
- 3. Igarashi, M.; Matsumoto, T.; Yagihashi, F.; Yamashita, H.; Ohhara, T.; Hanashima, T.; Nakao, A.; Moyoshi, T.; Sato, K.; Shimada, S. *Nature Communications* **2017**, *8*, 140.
- 4. Fukaya, N.; Choi, SJ.; Horikoshi, T.; Kataoka, S.; Endo, A.; Kumai, H.; Hasegawa, M.; Sato, K.; Choi, JC. *New Journal of Chemistry* **2017**, *41* 2224.

酸化

- 5. Noyori, R.; Aoki, M.; Sato, K. Chemical Communications 2003, 16, 1977.
- 6. Tanaka, S.; Kon, Y.; Ogawa, A.; Uesaka, Y.; Tamura, M.; Sato, K. *ChemCatChem* **2016**, *8*, 2930.

バイオマス変換

7. Tominaga, K.; Nemoto, K.; Kamimura, Y.; Yamada, A.; Yamamoto, Y.; Sato, K. RSC Advances **2016**, *6*, 65119.

AIと触媒

8. Yada, A.; Nagata, K.; Ando, Y.; Matsumura, T.; Ichinoseki, S.; Sato, K. *Chemistry Letters* **2018**, *47*, 284.