

「有機ケイ素機能性化学品製造プロセス技術開発」

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.1-1
I.1.2 実施の効果	I.1-4
I.2 事業の背景・目的・位置付け	I.2-1
II. 研究開発マネジメントについて	
II.1 事業の目標	II.1-1
II.2 事業の計画内容	
II.2.1 研究開発の内容	II.2-1
II.2.2 研究開発の実施体制	II.2-4
II.2.3 研究開発の運営管理	II.2-6
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.2-7
II.3 情勢変化への対応	II.3-1
II.4 評価に関する事項	II.4-1
III. 研究開発成果について	
III.1 事業全体の成果及び達成度	III.1-1
III.2 研究開発項目毎の達成度と成果の意義	
III.2.1 砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発	III.2.1-1
III.2.1.1 金属ケイ素を経由しない Q 単位構造中間原料製造法の開発	III.2.1.1-1
III.2.1.2 Q 単位構造中間原料からの有機ケイ素原料製造技術の開発	III.2.1.2-1
III.2.1.3 砂から Q 単位構造を基本とするビルディングブロック型有機ケイ素原料製造法の開発(実施事項なし)	III.2.1.3-1
III.2.1.4 高活性ケイ素化学種を経由した有機ケイ素原料製造法の開発	III.2.1.4-1
III.2.1.5 その他の反応	III.2.1.5-1
III.2.2 有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発	III.2.2-1
III.2.2.1 ケイ素-炭素結合形成技術	III.2.2.1-1
III.2.2.2 ケイ素-酸素結合形成技術	III.2.2.2-1
III.2.2.3 ケイ素-ケイ素結合形成技術	III.2.2.3-1
III.2.2.4 触媒固定化技術(実施事項なし)	III.2.2.4-1
III.3 知的財産権の取得と成果の普及	III.3-1
III.3.1 特許出願、論文、外部発表の状況	III.3-1
III.3.2 成果の普及	III.3-1
III.4 最終目標の達成可能性	III.4-1
IV. 実用化に向けての見通し及び取り組みについて	IV-1
IV.1 成果の実用化の見通し	IV-1
IV.2 実用化に向けた具体的取り組み	IV-2
IV.3 波及効果	IV-3

(添付資料)

① プロジェクト実施計画・基本計画

1. 経済産業省「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（革新的触媒）」実施計画 H24.5
2. NEDO「有機ケイ素機能性化学品製造プロセス技術開発」基本計画 H26.2制定、H26.6改訂、H26.7改訂

② 事前評価及びパブリックコメント関連資料

1. 経済産業省「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（触媒を利用した化学品基幹原料等の革新的プロセス技術開発）」事前評価報告書 H23.7
2. 「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（革新的触媒）」実施計画（案）に対する意見募集の結果について H24.5
3. NEDO POST 平成26年度新規/拡充研究開発プロジェクト(案)概要 H26.1
4. NEDO 事前評価書 H26.1
5. 「有機ケイ素機能性化学品製造プロセス技術開発 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 H26.2

概要

最終更新日 2014年 9月 9日

プログラム（又は施策）名	—		
プロジェクト名	有機ケイ素機能性化学品製造プロセス技術開発	プロジェクト番号	P14003
担当推進部/担当者	<p>担当推進部 2012.10-2013.03 経済産業省 製造産業局 化学課機能性化学品室 2014.04-現在 環境部 環境化学グループ</p> <p>経済産業省 担当者氏名 課長補佐（技術担当）松田 正樹 2012.10-2013.03 課長補佐（技術担当）五嶋 俊一 2013.04-2014.03</p> <p>技術係長 山田 智也 2012.10-2013.05 技術企画・調査係長 岡野 泰久 2013.06-2014.03</p> <p>環境部 担当者氏名 主任研究員 山野 慎司 2014.04-現在 主査 高木 雅敏 2014.04-現在</p>		
0. 事業の概要	<p>化学産業は我が国の一大産業であり、高い国際競争力を誇る製品を多数生み出しているが、一方、化石資源を大量に消費し、二酸化炭素排出量も多い。地球温暖化が懸念され、輸入に頼る石油の価格上昇や枯渇リスクに直面する中、化学品製造の革新的イノベーションの実現によりこうした課題を乗り越えていくことが急務となっている。</p> <p>シリコンやシランカップリング剤に代表される有機ケイ素部材は、化学品の中でも比較的高機能な部材であり、その優れた物性のため、一般の化学品よりも高価な材料（平均で¥1000/kg程度といわれている）であるにもかかわらず幅広い産業で用いられている。国内の有機ケイ素部材メーカーは、世界的にも一定の競争力を有しているが、技術開発によってさらに競争力を高めることにより、有機ケイ素工業自体のみならず、それをを用いる幅広い下流産業にもよい影響を与え、日本の産業競争力強化に大きな貢献をすることが期待される。</p> <p>本事業では有機ケイ素部材の生産に用いられる有機ケイ素原料の製造及び有機ケイ素原料からの有機ケイ素部材の製造について、現在抱えている種々の問題を解決するための新たな技術を開発の対象としており、いずれも新たな触媒プロセス及びそれに用いる触媒を開発することにより達成しようとするものである。ここで開発した技術の実用化によって、有機ケイ素原料製法の省エネルギー化とそれによる低価格化を達成するとともに、有機ケイ素部材の製法改良による高機能化を達成し、これらにより有機ケイ素部材の新たな用途を開拓していくことによって、有機ケイ素工業の省エネルギー化と日本の産業競争力強化に貢献することを目的としている。</p>		
I. 事業の位置付け・必要性について	<p>本事業は、2014年6月24日に内閣府より発表された「科学技術イノベーション戦略2014」の第2章「産業競争力を強化し政策課題を解決するための分野横断技術について」の中で、「（5）新たな機能を実現する材料の開発」のコア技術の1つである「革新的触媒技術」の要素技術の1つとして位置づけられており、産業競争力強化を目的とした国家戦略の中に位置づけられた事業である。また、経済産業省が策定した技術戦略マップの「グリーン・サステイナブルケミストリー分野」にも本事業に関連する個別の技術が記載されており、本事業は政策に合致している。</p> <p>有機ケイ素部材は多くの産業で必要とされている重要な部材であり、本事業で行う技術開発は極めて広い産業分野への波及効果があることから、本技術開発により高機能部材を獲得することによって日本の産業競争力が強化される。あわせて、プロセス改良による製造工程の省エネルギー化も達成される。本技術開発はこれら国家的な課題の解決に貢献するものであり、社会的必要性が大きい技術開発である。一方で、本事業で行う技術開発は、触媒の基礎探索から開始して最終的に実用化技術につなげていく、広範囲の内容を含む技術開発であることから、本事業の技術開発は長期間に亘り実施することとなる。そのため、単独の企業にとっては開発リスクが高く、企業による自主的な取り組みに任せては技術開発が進展しない懸念がある。さらに、本技術開発は難度が高いため、国内の産学官のトップランナーの知見を結集して実施することが有効である。以上から、NEDOが培ってきたマネジメントの能力を生かし、NEDOが関与して国家プロジェクトとして実施すべき事業である。</p>		

II. 研究開発マネジメントについて

本事業は、平成24年度から未来開拓研究プロジェクトの1つとして経済産業省直執行事業で開始され、平成26年度からはNEDO事業として実施するものである。本事業の研究開発項目は二つに分けられ、それぞれ以下の内容を実施する。

研究開発項目①「砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発」

- (1) 金属ケイ素を経由しないQ単位構造中間原料製造法の開発
- (2) Q単位構造中間原料からの有機ケイ素原料製造技術の開発
- (3) 砂からQ単位構造を基本構造とするビルディングブロック型の有機ケイ素原料製造法の開発
- (4) 高活性ケイ素化学種を経由した有機ケイ素原料製造法の開発
- (5) その他の反応

研究開発項目②「有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発」

- (1) ケイ素-炭素結合形成技術
- (2) ケイ素-酸素結合形成技術
- (3) ケイ素-ケイ素結合形成技術
- (4) 触媒固定化基盤技術

本事業においては、平成26年度（事業開始から通算して3年目）、28年度（同5年目）、31年度（同8年目）にそれぞれ中間評価を実施する。それぞれの研究開発項目における中間目標及び最終目標を以下のとおり設定している。

研究開発項目①「砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発」

【中間目標（平成26年度末）】

複数の反応経路とそれぞれの反応における触媒の中心元素の種類や配位子構造等について複数の候補を選定する。

【中間目標（平成28年度末）】

ケイ砂を原料に用いる際の技術課題を抽出する。
反応経路と触媒について有望な組合せを絞り込む。

【中間目標（平成31年度末）】

ケイ砂の反応率50%、有機ケイ素原料の選択率50%を達成すると見込まれる反応経路と触媒を選定し、温度や反応媒体等の最適な反応条件について指標を得る。
原料に用いるケイ砂の処理方法等を選定する。

【最終目標（平成33年度末）】

1kgスケールでケイ砂の反応率50%、有機ケイ素原料の選択率50%を達成する。
触媒反応の実用化に向けて必要となるプロセス要素技術を特定し、その工業的实施可能性を1kgスケールで検証する。

研究開発項目②「有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発」

【中間目標（平成26年度末）】

複数の高機能有機ケイ素部材を想定した各種反応に用いられる触媒の活性中心元素や配位子構造等について複数の候補を選定する。

【中間目標（平成28年度末）】

反応経路と触媒について有望な組合せを絞り込む。

【中間目標（平成31年度末）】

有機ケイ素原料の反応率80%、有機ケイ素部材の選択率80%を達成すると見込まれる反応経路と触媒を選定し、温度や反応媒体等の最適な反応条件について指標を得る。

【最終目標（平成33年度末）】

1kgスケールで有機ケイ素原料の反応率80%、有機ケイ素部材の選択率80%を達成する。
有機ケイ素部材中の残留触媒の低減を達成する。
有機ケイ素部材の構造制御技術を確立する。

事業の目標

主な実施事項		H24fy	H25fy	H26fy	H27fy	H28fy	H29fy	H30fy	H31fy	H32fy	H33fy	H34fy
事業の計画内容	研究開発項目① 砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発											
	研究開発項目② 有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発	←		▼ ■ 調査項目の実施	▼ ■ 調査項目の実施	▼ ■ 調査項目の実施			▼ ■ 調査項目の実施			▼ ■ 調査項目の実施
開発予算 (会計・勘定別に 事業費の実績額 を記載) (単位：百万円)	会計・勘定	H24fy	H25fy	H26fy	H27fy	H28fy	H29fy	H30fy	H31fy	H32fy	H33fy	合計
	一般会計	200	200									
	特別会計（需給）			200								
	加速予算 (成果普及費を含む)			10								
	総予算額	200	200	210	(200)	(200)	(200)	(200)	(200)	(200)	(200)	(2,010)
開発体制	経産省担当原課	製造産業局化学課										
	プロジェクト リーダー	産業技術総合研究所 触媒科学融合研究センター 研究センター長 佐藤 一彦										
	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）	委託先 H24. 10-現在 独立行政法人産業技術総合研究所 H26. 4-現在 国立大学法人 群馬大学 公立大学法人 大阪市立大学 学校法人 早稲田大学 学校法人 関西大学 再委託先 H24. 10-H26. 3 国立大学法人 群馬大学 公立大学法人 大阪市立大学 学校法人 早稲田大学 学校法人 関西大学										
情勢変化への対応	平成26年度に本事業を経済産業省直轄からNEDOに移管した。それに伴い、マネジメントを強化する目的で開発体制の変更を行った。											
評価に関する事項	事前評価	産業構造審議会産業技術分科会 評価小委員会 H23. 7 (添付資料②-1) NEDO 環境部 H. 26. 1 (添付資料②-4)										
Ⅲ. 研究開発成果について	本事業で研究開発を進める2つの研究開発項目について、現時点では以下の成果を得た。 研究開発項目① 砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発 ・シリカからテトラメトキシシランを高収率・高選択的に製造可能な複数の触媒系を見いだした。 ・モデル化合物において、水素ガスを還元剤としてヒドロシランを製造する触媒系を見いだした。 研究開発項目② 有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発 ・ヒドロシリル化反応の卑金属（鉄やニッケル）錯体触媒および鉄ナノ微粒子触媒を開発した。 ・無水条件で不安定なシラノールを合成する触媒の手法を開発した。 ・高選択的にアルコシシランを合成するゼオライト触媒系を見いだした。 ・ジシランを効率的に製造可能な遷移金属担持固体触媒を見いだした。											
	投稿論文	「査読付き」 2件										
	特許	「出願済」21件（うち国際出願1件）、「登録」0件、「実施」0件										
	その他の外部発表 (プレス発表等)	41件										

IV. 実用化の見通しについて	<p>本事業では、本研究開発で開発された技術によるサンプルの顧客への提供が開始されることを実用化と定義している。</p> <p>本プロジェクトの最終目標は、研究開発項目①②とも、1kg スケールで所定の目標数値を達成すること等を設定しているが、最終年度終了後数年の実用化に向けた検討を行った後に実用化を達成する予定としている。但し、一部の研究開発については一歩進んですでに実用化が見えてきたレベルまで進んでいる状況にあり、これらについては条件が整えば、プロジェクト終了前に本プロジェクトから離れ、別の枠組みで実用化に向けての独自の研究を進めることも視野に入れる。</p>	
V. 基本計画に関する事項	作成時期	平成26年2月制定
	変更履歴	平成26年6月、プロジェクトリーダーの委嘱に伴う改訂。 平成26年7月、「技術調査の実施」の追記に伴う改訂。

プロジェクト用語説明集（五十音順）

用語	英文表記	用語の説明
アリアル基	aryl group	芳香族炭化水素から誘導された官能基または置換基の総称。
アリル基	allyl group	2-プロペニル基の慣用名（ $-\text{CH}_2\text{CH}=\text{CH}_2$ ）。
アルコキシシラン	alkoxysilane	アルコキシ基（ $-\text{OR}$, R はアルキル基）を有するケイ素化合物
一級シラン	primary silane	シラン SiH_4 の 1 個の水素基が置換基により置換されたものを一級シランと称し、2 個、3 個置換されたものをそれぞれ二級シラン（secondary silane）、三級シラン（tertiary silane）と呼ぶ。
イオン性保護剤	ionic surfactant	分散剤（界面活性剤）の一種で、親水性を示す極性基またはイオン基と疎水性を示す炭化水素鎖からなる両親媒性分子。臭化セチルトリメチルアンモニウム（CTAB）が代表的なイオン性保護剤である。
Wurtz-Fittig 反応	Wurtz-Fittig reaction	日本語ではウルツーフिटティッヒ反応と言う。2 分子の有機ハロゲン化合物がアルカリ金属によりカップリングして C-C 結合が生成する反応であり、金属ナトリウムが良く用いられる。シリルハロゲン化物からジシランを合成する反応にも適応可能である。
Ullmann カップリング反応	Ullmann coupling reaction	遷移金属錯体触媒を用いる炭素-炭素結合形成反応の手法の一つ。一般的には銅を用いてハロゲン化アリアルをカップリングさせる反応を指す。ビアリアル化合物合成の有効な手法である。
オリゴマー	oligomer	比較的少数のモノマーが結合した重合体のこと。明確な重合度があるわけではない。分子量 1000 程度までのものを指す場合が多い。
オレフィン	olefin	炭化水素化合物のうち、 $\text{C}=\text{C}$ 二重結合を一つ持つ不飽和炭化水素。
加水分解	hydrolysis	反応物に水が反応し、分解生成物が得られる反応のこと。
カップリング反応	coupling reaction	2 つの化学物質を選択的に結合させて 1 つの化学物質を作る反応のこと。
カラム精製	purification on column	物質の精製をシリカゲルやアルミナなどの吸着物質を詰めた筒（カラム）で、溶媒等の移動

	chromatography	相を用いて行う方法。
官能基	functional group	置換基のうち、物質の特性や化学反応性に注目した場合に特定される置換基。
官能基交換反応	functional group exchange reaction	化合物の特定の官能基が、別の化合物の特定の官能基と交換する反応
貴金属	precious metal	地球上で存在が希少であり、耐腐食性があることを特徴とする金属。一般には Au、Ag、Pt、Pd、Rh、Ir、Ru、Os を指す。
求核剤	nucleophilic agent	ケイ素、炭素等の原子上にメトキシ基、エトキシ基のように負電荷の化学種になりやすい置換基がある場合、その原子は電子を放出して正電荷を帯びやすくなるが、そのような正電荷性の原子と反応する電子供与性の試剤を示す。
Q 単位構造中間原料	Q unit structure intermediate material	ケイ素原子の周りに 4 つの酸素原子が結合したものを Q 単位構造と呼ぶ。Q 単位構造中間原料は Q 単位構造を持つ有機ケイ素原料を作る際の原料となる化合物であり、加水分解により Q 単位構造を作るテトラアルコキシシラン、およびテトラハロシランのことを指す。
凝集	cohesion	ナノ粒子やコロイドなどの微粒子が分子間引力によって寄り集まってより大きな集合体になる現象。
クロスカップリング反応	cross coupling reaction	2 つの異なる化合物を選択的に結合させる反応。
クロロシラン	chlorosilane	ケイ素 - 塩素 (Si-Cl) 結合を有するケイ素化合物。
ケイ石	silica stone	ケイ酸質の鉱物や岩石を資源として扱う時の鉱石名。
硬化技術	hardening technique	柔軟な物質を硬化させる技術で、ポリマー鎖間を架橋分子でつなぐことにより硬化させることができる。ポリヒドロシラン鎖には多くの Si-H 結合を有するため、ポリヒドロシランとジエンの間でヒドロシリル化反応を起こさせて、ポリマー鎖間にアルキル架橋を構築し、硬化ポリシランを生成する手法は有用である。
交換反応	exchange reaction	化合物中において、特定の原子や置換基が同種または別種の原子や原子団等に置き換わる反応。
後周期遷移金属	late transition metal	周期律表の 8 族から 11 族にあたる遷移金属を

		指す。具体的には、Fe、Co、Ni、Cu、Ru、Rh、Pd、Ag、Os、Ir、Pt、Au が挙げられる。
小杉-右田-Stille クロスカップリング 反応	Kosugi-Migita-Stille cross-coupling reaction	遷移金属錯体触媒を用いる炭素-炭素結合形成反応の手法の一つ。一般的には0価パラジウム錯体を触媒とし有機ハロゲン化物と有機スズ化合物との反応を指す。
固体 NMR 装置	solid-state NMR	固体状の物質のスペクトルを測定できる NMR (核磁気共鳴) 装置。
ジイミン誘導体	diimine derivative	1つの分子中に N=C 結合部位 (イミン部位) を2つもつ化合物で、2つの窒素原子が遷移金属に配位して2座配位子として作用する。種々の置換基をもつジイミンが比較的容易に合成できるので、配位子として広く利用されている。
自己縮合	self-condensation	求核部位と求電子部位の両方の反応部位を持つ分子が、それ自身、分子間で縮合反応をすること。
ジシラン	disilane	ジシランとは Si_2H_6 で示されるケイ素の水素化物である。シランと比較して反応性はジシランの方が圧倒的に高く、熱分解して薄膜シリコンを与える場合に、より低温で熱分解することが可能である。従ってジシランはシランと比較して薄膜シリコンの低温・高速成膜性に優れたとして期待されているが、シランよりも高価格でまだ普及は進んでいない。
ジシロキサン	disiloxane	Si-O-Si 骨格を有する化合物の総称。ケイ素上の置換基は有機置換基でも水酸基でもよい。
ジメチルホルムアミド (DMF)	dimethylformamide	分子式 $\text{C}_3\text{H}_7\text{NO}$ の構造を有するアミン臭を有する無色透明の液体。水、エーテル、アルコール、ケトン、エステル等に可溶性有機溶剤である。加熱すると分解し、一酸化炭素を生ずる。
触媒毒	catalyst poison	触媒作用を阻害させる物質。これにより触媒作用の低下や停止が起こる。
触媒被毒	catalyst poisoning	触媒物質に、その触媒作用を阻害する物質 (触媒毒) が相互作用することにより、本来の触媒活性が失われることを表す。
シラノール	silanol	ケイ素原子に水酸基が結合した化合物の総称。シロキサン (シリコーン) 化合物の中間体。アルコールと異なり、同一原子に水酸基が2個、

		3 個結合した化合物も安定に存在する。
シランカップリング剤	silane coupling agent	トリアルコキシシリル基に種々の炭素置換基が結合した化合物の総称。ハイブリッド材料や、表面修飾など広い用途で用いられている。
シリカ	silica	二酸化ケイ素あるいは二酸化ケイ素によって構成される物質の総称。
シリコーン	silicone	シロキサン結合 (Si-O-Si) を主骨格に有する有機ケイ素高分子の総称。自然界には存在しない。優れた耐熱性、耐酸化性、電気絶縁性、撥水性、消泡性、生体適合性を持つことから様々な分野で使用されている。
シリコーンレジン	silicone resin	分岐度の高い三次元構造を有するシロキサン類の総称。高分子量化すると樹脂状になるためこのように呼ばれる。耐熱性、耐候性、電気絶縁性、撥水性など数々の特性を有する。
シリルトリフラート	silyl triflate	ケイ素上に 1 つ以上のトリフルオロメタンスルホナート(TfO・CF ₃ SO ₃)が置換した化合物。TfO 基の脱離性が高いため置換反応を起こしやすく、シリルハライドと似た性質を持つ化合物とみることができる。
シルセスキオキサン	silsesquioxane	ケイ素原子に酸素原子が 3 つと有機置換基が 1 つ結合した化合物の総称。かご型やはしご型、ランダム構造など、多岐にわたる構造が可能になる。構成単位は T である。
シロキサン結合	siloxane bond	ケイ素 - 酸素 - ケイ素 (Si-O-Si) 結合。
水素化反応	hydrogenation reaction	化合物に対して水素を付加させる還元反応。ここでは脱離基を持ったケイ素化合物のケイ素 - 脱離基の結合を切断して、ケイ素 - 水素結合を形成する反応。
水素受容体	hydrogen acceptor	酸化還元反応において、他物質から水素を受けてそれ自身は還元される物質。
水添反応	hydrogenation	水素が炭素-炭素不飽和結合に付加する反応。水素分子が脱離して炭素-炭素不飽和結合を生成する逆反応は脱水素反応(dehydrogenation)である。
鈴木-宮浦反応	Suzuki-Miyaura reaction	遷移金属錯体触媒を用いる炭素-炭素結合形成反応の手法の一つ。一般的には 0 価パラジウム錯体を触媒とし、有機ホウ素化合物と有機ハロゲン化合物とのクロスカップリング反応を

		指す。多置換アルケンや芳香族基を導入する有用な化学変換反応である。
遷移金属	transition metals	周期表で第 3 族から第 11 族の間に含まれる元素で、すべて金属である。
速度論	chemical kinetics	反応速度を解析して、化学反応の機構や生成物を論ずる手段。
ゾル・ゲル反応	sol-gel reaction	三官能、四官能のアルコキシシランやクロロシランを原料とし、酸または塩基を触媒にして、水を含む条件下で加水分解を行いながら、脱水縮合させ三次元的に成長する高分子量のシロキサン化合物を作る方法。一般に反応の過程で溶解可能なゾルの状態を経由して溶媒に不溶なゲルの状態へと変化するためにこのように呼ばれる。
ターピリジン誘導体	terpyridine derivative	3 つのピリジン誘導体が脱水縮合した化合物で、2 位同士で縮合したターピリジンは遷移金属に対して 3 座で配位するので、有用な配位子となる。
脱水剤	dehydrating agent	ここでは、反応系中に存在する水分子あるいは反応によって生じる水分子と反応して化学的に水を反応系から取り除く物質のことを言う。
脱水縮合	dehydration reaction	縮合する 2 個の分子からそれぞれ水素原子と水酸基 (-OH) を失って水分子が離脱し、新たな化合物をつくる反応。
脱水素カップリング	dehydrogenative coupling	広義には、異なるあるいは同じ物質中の C-H 基から水素が除去されて C-C 結合を生成する反応である。本プロジェクトにおいては、異なるあるいは同じ物質中の 2 個の Si-H 基からあるいは、Si-H 基と C-H 基から水素が除去されて、それぞれ Si-Si あるいは Si-C 結合を生成する反応を意味する。
Ziegler 触媒	Ziegler catalyst	K. Ziegler が見出したトリエチルアルミニウム (Et ₃ Al) と四塩化チタン (TiCl ₄) との反応混合物からなる触媒。それまでのエチレンの重合は高圧を必要としたが、この触媒を使うと常温常圧での重合が可能になった。
辻ートロスト型クロスカップリング	Tsuji-Trost type cross-coupling reaction	遷移金属錯体触媒を用いる炭素-炭素結合形成反応の手法の一つ。一般的には π -アリルパラジウム錯体を触媒とした炭素求核剤との反

		応を指す
TON	turnover number	触媒関係でよく用いる用語で、1分子の触媒が何回触媒作用を示すかを表す数字。日本語ではターンオーバー数あるいは触媒回転数と言い、略号としてTONが用いられる。この値が大きいほど触媒能が高いことを示す。
電気陰性度	electro negativity	ある原子がマイナスの電子を引き付ける相対的な強度を示し、電気陰性度が小さい原子ほど、電子を放出しやすい傾向がある。
電子供与性	electron donative	分子の特定の位置に対して、電子密度を増加させる効果を持つ場合の性質。その結果、求核反応を起こしやすくなる。
内部アルケン	internal alkene	鎖状アルケン分子において、C=C二重結合が分子の末端ではなく、鎖の内部にある構造をもつ物質。
ナノ粒子	nanoparticle	ナノメートル(10 ⁻⁹ m)サイズの大きさの粒子。通常1~100 nm。通常の大きさの粒子に比べて特異な性質を持つようになる。
二座型配位子	bidentate ligand	分子内の2か所で金属と配位する配位子。
白金族	platinum group metals	主に触媒としての性質や、物理的・化学的性質が似ている、周期表8-10族に位置する貴金属の総称。具体的には、白金、パラジウム、イリジウム、ロジウム、オスミウム、ルテニウムなどの金属を指す。
Pd/C	palladium on carbon	活性炭を担体として、0 価のパラジウムを分散、担持させたもの。水素化反応の触媒に用いられる。
ハロゲン化ケイ素	silicon halide	ケイ素上にハロゲンを有する化学種。
反応選択性	reaction selectivity	反応によって、2種類以上の生成物が得られる場合があるにもかかわらず、一つの種類のみが優先的に得られる場合、反応選択性があるという。
卑金属	base metal	貴金属に対する対義語であり、一般的にアルカリ金属、アルカリ土類金属、鉄、銅、亜鉛、鉛などの金属がこれに属する。
ヒドリド	hydride	水素の陰イオン。これが求核剤として求電子的な部位に攻撃して水素が付加する反応がヒドリド還元と呼ばれる。
ヒドロシラン	hydrosilane	ケイ素上に1つ以上Hが結合した化合物。オ

		レフィンとのヒドロシリル化反応によりケイ素-炭素結合に変換できる。
ヒドロシランの脱水素カップリング反応	dehydrogenative coupling reaction of hydrosilane	Si-H 結合を有する化合物(ヒドロシラン)が2分子反応して脱水素反応が起こり、その結果 Si-Si 結合が生成する反応。この反応は通常触媒を必要とする。水素以外の副生成物が生じないクリーンな反応として 注目されている。
ヒドロシリル化反応	hydrosilylation reaction	不飽和結合(アルケンやアルキンは炭素間不飽和結合をもつ化合物) 部位にヒドロシランの Si-H 結合が付加し、C-Si 結合ならびに C-H 結合が形成する反応。この反応は通常は触媒を必要とする。代表的な遷移金属触媒として白金錯体である Speier 触媒や Karstedt 触媒が知られている。
フェニルシラントリオール	phenylsilanetriol	PhSi(OH) ₃ の構造の物質。
不均化反応	disproportionation	不均化とは、同一種類の化学種(分子)が2個以上互いに反応して2種類以上の異なる種類の生成物を与える化学反応である。シリコン化合物の例を挙げると、SiH 基含有ジシロキサン (HMe ₂ Si) ₂ O は Lewis 酸存在下で不均化反応を起こし、 2(Me ₂ HSi) ₂ O → Me ₂ SiH ₂ + Me ₂ HSi(OSiMe ₂) OSiHMe ₂ のように二級シランと直鎖状トリシロキサン化合物を生成する。
frustrated Lewis pair	frustrated Lewis pair	FLP とも略される。立体的に嵩高い置換基を有する Lewis 酸と Lewis 塩基を混合すると立体障害により酸塩基反応が阻害され、Lewis 酸性と Lewis 塩基性が保持される。この特性を利用して、D.W. Stephan は一分子中に Lewis 酸性及び Lewis 塩基性を有する化合物を合成(2006 年)し、水素分子を活性化により水添反応触媒として有望であることを示した。
プラズマ	plasma	気体を構成する分子が電離し、陽イオンと電子に分かれて自由に運動している状態。
分散剤	dispersant	液体中で凝集している固体金属微粒子を液体中に溶解させたり、液体中で安定化させる働きがある試薬。一般には、界面活性剤等がこれに

		あたる。
平衡反応	equilibrium	可逆反応において、順反応と逆反応の速度が釣り合っており、結果として出発物質と生成物の量に変化しない状態にある反応。
ベンジルオキシシラン	benzyloxysilane	ケイ素原子上にベンジルオキシ基 (PhCH ₂ O-基) を有する化学種。
ベンジル保護	benzyl protection	ベンジル基はパラジウム触媒存在下水素添加を行うことで切断される (加水素分解)。この性質を利用し、アルコール等の保護基として利用される。
ポリケイ酸	polysilicic acid	ケイ酸としても知られているもので、ジシロキサン (Si-O-Si) 構造とシラノール (Si-OH) 構造を有する無機ケイ素化合物である。組成的には、オルトケイ酸 (H ₄ SiO ₄)、メタケイ酸 (H ₂ SiO ₃) 等のものが知られている。
ポリシロキサン	polysiloxane	シロキサンの単位が繰り返し結合して生成した高分子化合物。-(Si-O) _n -結合をもつ。
マイクロ波照射	microwave irradiation	化学反応で使用されるマイクロ波の周波数帯は通常 2.45GHz 帯 (電子レンジと同じ周波数帯) で、一般には極性が高い物質ほどマイクロ波を吸収しやすい性質があり、そのような物質の化学反応を促進させる効果がある。
末端基	terminal group	鎖状分子の末端にある置換基。
溝呂木-Heck 反応	Mizoroki-Heck reaction	遷移金属錯体触媒を用いる炭素-炭素結合形成反応の手法の一つ。一般的には0価パラジウム錯体を触媒とし、ハロゲン化アリールと末端オレフィンとの反応によるオレフィンに芳香族置換基を導入する反応を指す。
モノアルコキシシラン	monoalkoxysilane	アルコキシ基を一個有するケイ素化合物のことで、ここでは、ケイ素原子上に複数のメトキシ基またはエトキシ基を有する化合物において、メトキシ基またはエトキシ基の一個だけを他のアルコキシ基で置換した構造のケイ素化合物を示す。
モノシラン	silane	SiH ₄ で示されるケイ素の水素化物であり、シランとも呼ばれる。熱分解してアモルファスシリコンを与える (化学気相成長法) ことから、太陽電池等の材料、特にシリコンウエハーの製造などに応用されている。

有機基	organic group	アルキル基やアリアル基などの主骨格が炭素により形成されている置換基であり、単純なアルキル基やアリアル基以外に官能基を持つものも含んだ総称。
有機マグネシウム試薬	organomagnesium reagent	有機基がマグネシウムに結合した化合物の総称で、Grignard 試薬とも言われる。マグネシウム上の有機基は強い求核性を有するため、有機基導入試薬として広く用いられている。
四座三脚型配位子	tripodal tetradentate ligand	金属に対し4つの結合を形成し、三脚型の構造を有する配位子を示す。
立体障害	steric effect	分子を構成する原子、置換基、原子団が嵩高いために別の部分とぶつかりが起これり、回転や反応等に障害を与える現象。
理論計算	theoretical calculation	コンピュータを使って、原子・分子の電子状態の計算や反応のシミュレーションを行うこと。
Lewis 酸	Lewis acid	Lewis 酸は、電子対を受容して化学結合を形成するあらゆる化学種（電子対受容体）であり、一方、電子対を与えるあらゆる化学種(電子対供与体)が Lewis 塩基である。

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) 事業概要と NEDO が関与する意義

日本の化学産業は出荷額約 40 兆円、従業員数約 88 万人を擁する我が国の一大産業である。基幹化学品から機能性化学品まで様々な高い国際競争力を誇る製品を多数生み出ししており、他の産業に広く貢献している。しかしながら、その製造工程では多量のエネルギーを消費しており、それによる二酸化炭素排出量は、日本の製造業分野の約 16% と大きな割合を占めている。その様な状況において、化学品の製造工程の革新による省エネルギー化は、日本全体での CO₂ 排出量削減を進めていくための課題の 1 つとなっている。また、この省エネルギー化を含め、技術革新による技術力の向上により達成される産業競争力の強化も、今後の日本の産業を維持していく上で重要な課題である。

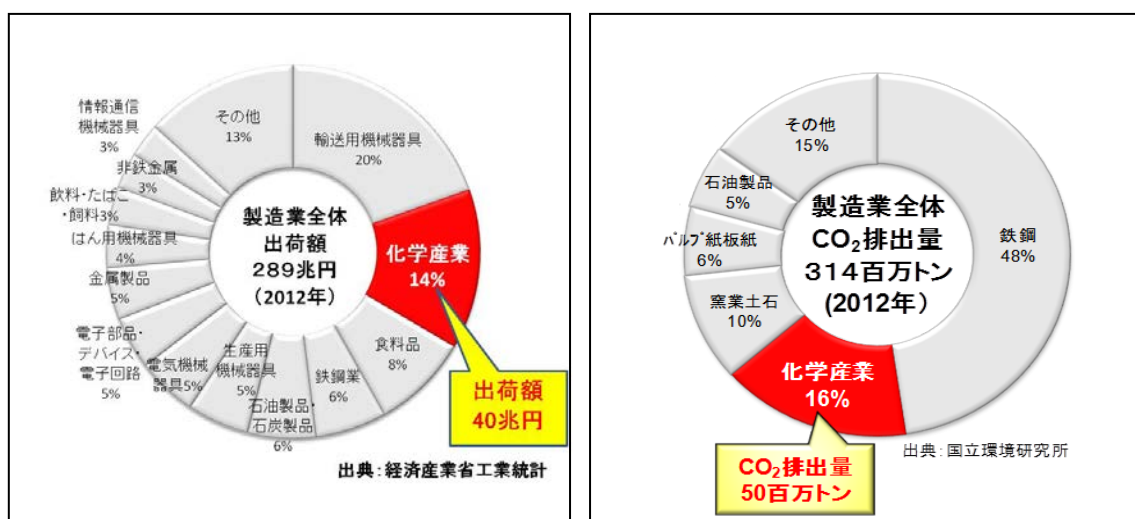


図 I.1.1-1 日本の製造業における出荷額と二酸化炭素排出量 (2012年)

有機ケイ素工業は化学産業の中でもシリコンやシランカップリング剤等の高機能な有機ケイ素部材を幅広い産業に提供する工業であり (図 I.1.1-2)、国内企業による出荷規模は 1900 億円 (2009 年時点) である。一般の化学品と比較して高価な部材であるが、その特徴ある物性 (耐候性、柔軟性、透明性、安定性、絶縁性、撥水性など) により用途は広く、多くの産業分野で使用されており、その波及効果が大きい高機能部材である。

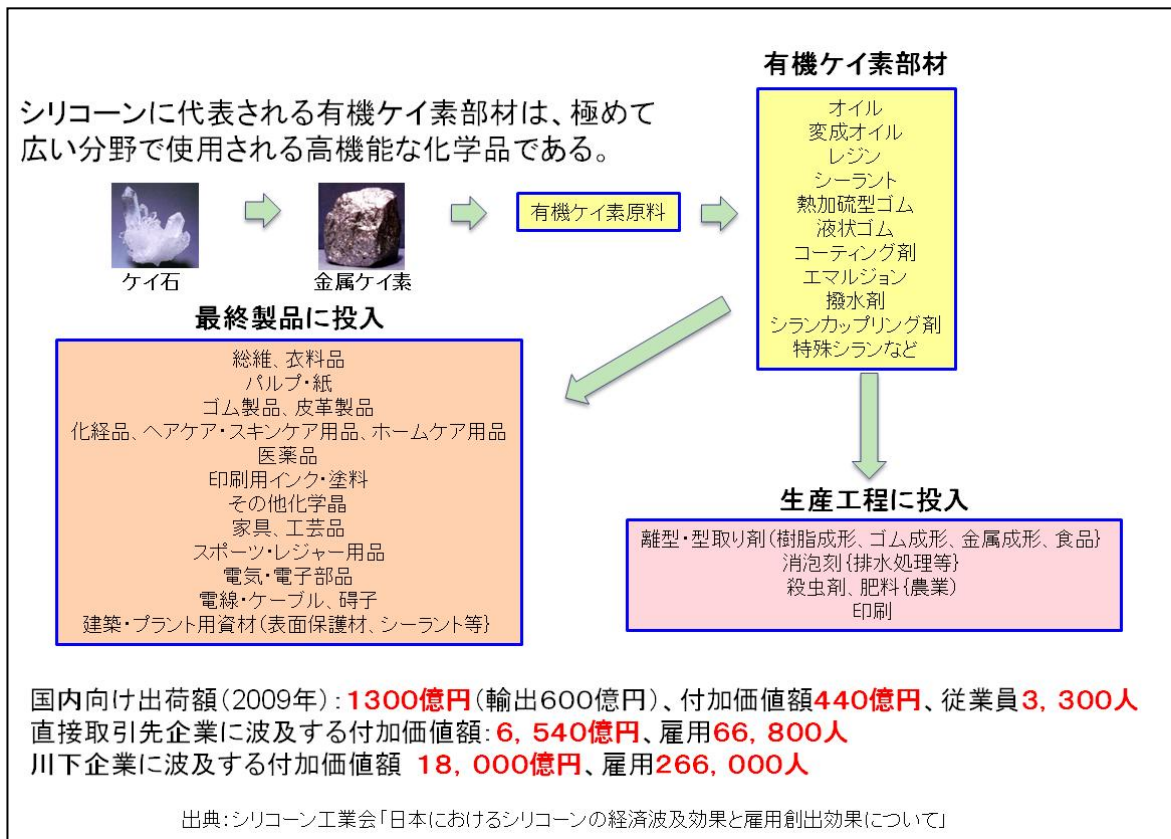


図 I.1.1-2 有機ケイ素工業の概要

しかしながら、I.2 項で詳細に示すように、有機ケイ素工業は、有機ケイ素部材の原料である有機ケイ素原料の製造工程及び有機ケイ素原料からの有機ケイ素部材の製造工程において種々の解決すべき課題（製造工程で多大なエネルギーを使用、希少金属である Pt を触媒として使用、ポリマー構造がランダムである事による性能への悪影響、コンタミによる製品性能への悪影響、など）を抱えている。これらの課題を解決することによって技術レベルが向上し、プロセスの省エネルギー化が達成されるとともに、より高機能な有機ケイ素部材をより安価に供給できるようになる。

本事業では上記の課題解決を目的として、

- ・研究開発項目①「砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発」
- ・研究開発項目②「有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発」を実施する。

有機ケイ素部材は多くの産業で必要とされている重要な部材であり、本事業で行う技術開発は極めて広い産業分野への波及効果があることから、本技術開発により高機能部材を獲得することによって日本の産業競争力が強化される。あわせて、プロセス改良による製造工程の省エネルギー化も達成される。本技術開発はこれら国家的な課題の解決に貢献するものであり、社会的必要性が大きい技術開発である。一方で、本事業で行う技術開発は、触媒の基礎探索から開始して最終的に実用化技術につなげていく、広範囲の内容を含む技術開発であることから、本事業の技術開発は長期間に亘り実施することとなる。そのため、単独の企業にとっては開発リスクが高く、企業による自主的な取り組みに任せては技術開発が進展しない懸念がある。さらに、本技術開発は難度が高いことから、国内の産学

官のトップランナーの知見を結集して実施することが有効である。以上から、NEDO が培ってきたマネジメントの能力を生かし、NEDO が関与して国家プロジェクトとして実施すべき事業である。

2) 本事業に関連する経済産業政策

本事業は、図 I.1.1-3 に示すように、2014年6月24日に内閣府より発表された「科学技術イノベーション戦略2014」の第2章「産業競争力を強化し政策課題を解決するための分野横断技術について」の中で、「(5) 新たな機能を実現する材料の開発」のコア技術の1つである「革新的触媒技術」の要素技術の1つとして位置づけられており、産業競争力強化を目的とした国家戦略の中に位置づけられた事業である。



出典：内閣府「科学技術イノベーション総合戦略2014」
(2014年6月24日) 工程表 p.112

図 I.1.1-3 経済産業政策上の位置づけ

また、経済産業省が策定した技術戦略マップの「グリーン・サステイナブルケミストリー分野」において、技術項目「グリーン製造化学プロセス」の「精密制御高分子製造(高性能機能化学品の製造)」、「低環境負荷型縮合系高分子製造技術(新規触媒等によるプロセス)」、「有機分子触媒」及び技術項目「製造工程廃棄物・副生物の大幅削減」の「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、生成工程変換等を含む副原料削減)」など、本事業に関連する個別の技術が記載されている。

I.1.2 実施の効果

1) 事業費

本事業の事業費の推移を表 I.1.2-1 に示す。なお、H26 年度に加速予算 10 百万円が計上されているが、これは、II.2.4 項で述べる情報収集に係る費用である。

表 I.1.2-1 事業費の推移

(単位：百万円)

	H24 年度*1	H25 年度*1	H26 年度	H24～26 年度 総額	10 年間の 総額(予定)
当初予算	200	200	200	600	2,000
加速予算	—	—	10	10	
繰越	—	—	—	—	
実績	200	200	(210) *2	(610) *2	

*1：経済産業省の直執行

*2：カッコ表示は見込み額

2) 効果

本事業を完遂することにより、従来の製法と比べてエネルギー消費量の少ない有機ケイ素原料及び部材の製法を確立して製造工程の省エネルギー化を達成するとともに、有機ケイ素部材の高機能化を達成することにより、有機ケイ素部材の市場拡大に貢献し、産業競争力強化を達成する。2030 年に本事業によって得られる効果の推定値を図 I.1.2-1 に示す。

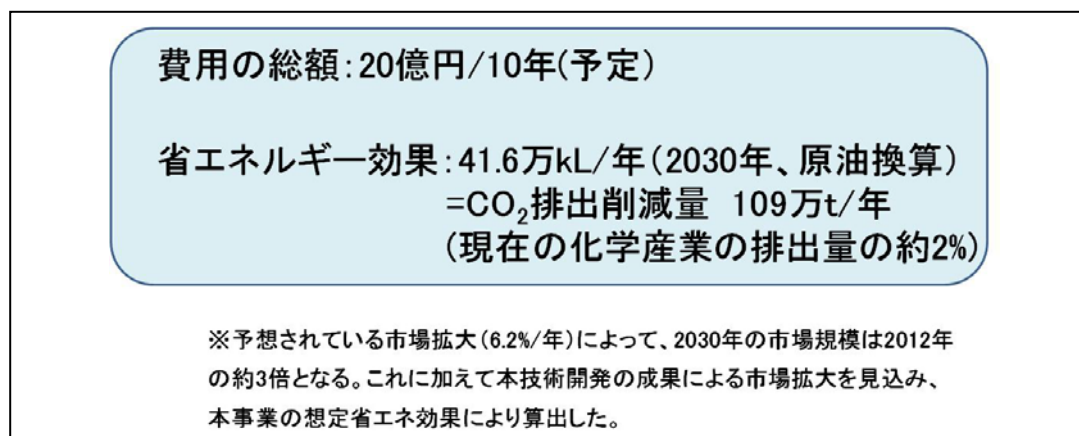


図 I.1.2-1 2030 年における本事業の推定効果

有機ケイ素部材の市場は今後年率 6.2%の伸びが予測されており、これによって 2030 年には 2012 年の日本の出荷量 (約 20 万 t) の約 3 倍に出荷量が拡大することになる。この予測された市場拡大に加えて、本事業の成果の実用化による市場拡大分を加味し、この生産規模において製造プロセスの省エネ化が達成されるとして試算した。その結果、2030 年には、本 PJ で開発される製法による有機ケイ素部材生産において、現在の製法による有機ケイ素部材生産と比較して、原油換算で年間 41.6 万 KL の省エネとそれによる年間約 109 万 t の CO₂削減に貢献することを見込んでいる。但し、現段階では、今後開発される製造

プロセスの詳細が固まっておらず多くの仮定を含んでいるため、これらの数値は、今後プロセスの絞り込みが進んだところで精査する必要がある。

一方で、有機ケイ素部材は、その使用段階における CO₂ 削減効果が他の部材と比較して大きいことが知られている。日米欧の業界団体によって種々の有機ケイ素部材用途における CO₂ 削減効果が調べられており、その平均として、有機ケイ素部材の使用段階において生産及び廃棄の際に発生する CO₂ の約 9 倍の CO₂ 削減効果があるとされている(表 I.1.2-2)。

表 I.1.2-2 有機ケイ素部材使用用途別の CO₂ 削減効果のケーススタディー

ケーススタディーを行った用途	市場(日米欧) トン/年	削減効果 /排出量比	正味GHG 削減効果 1000t-CO ₂
キッチン/浴室用シーラント	79,400	1.1	-54
複層ガラス窓ユニット用シーラント	56,700	27.7	-12,226
エキスパンションジョイント用シーラント	38,900	0.9	16
構造接着用シーラント	10,100	11.7	-925
石造物撥水材-コンクリート用	2,500	25.3	-378
石造物撥水材-レンガ用	10,100	13.2	-650
建築物断熱材用ポリウレタン添加物	9,300	2.7	-80
電気製品断熱材用ポリウレタン添加剤	4,700	17.0	-371
変圧器用オイル	8,700	1.6	-28
電気絶縁体	9,600	2.4	-128
太陽電池グレードシリコン用クロロシラン	360,100	7.5	-9,228
紙製造用消泡剤	10,200	27.1	-2,488
塗料添加剤	1,900	6.8	-5
ガラス繊維処理剤用シラン	1,900	27.1	-167
耐熱産業用コーティング剤	3,200	7.3	-112
コーティング用接着促進剤	1,900	170.1	-731
洗剤用消泡剤	7,800	12.7	-778
哺乳瓶用乳首	1,900	0.3	8
家庭用器具の耐熱コーティング剤	1,600	13.8	-142
加熱調理器具	1,900	1.2	-3
自動車エンジン廻り用エラストマー	33,800	86.3	-19,162
グリーンタイヤ	6,400	66.5	-2,325
ポリカーボネート用コーティング剤	1,800	2.9	-26
車両排気管用コーティング剤	500	9.2	-25
船底塗料	100	182.2	-126
自動車接着剤	5,900	28.4	-1,076
ケーススタディーの合計	670,900	13.7	-51,208
ケーススタディー対象外用途	114,000	8.7	-5,530
GHG削減効果が確認されない用途	357,000	0.0	2,500
全市場/加重平均	1,141,900	8.9	-54,240

シリコン工業会「シリコンのカーボンバランス」より引用

<http://www.siaj.jp/ja/pdf/pamph/carbonbalance.pdf>

たとえば、「複層ガラス窓ユニット用シーラント」の用途では、日米欧で 56,700 トンの有機ケイ素部材の市場があり、この用途で有機ケイ素部材を使用することによって、他の材料を使用した場合と比較して 12,226 千トンの CO₂ 削減効果があるとされている。

調査対象用途における CO₂ 削減効果を合計すると、有機ケイ素部材は、日米欧における使用段階で年間約 5,420 万トン、2012 年の日本の市場規模では約 570 万トンの CO₂ 排出削減に貢献していることになる。今後、本事業の技術開発により新たに開拓される用途でも同程度の CO₂ 削減への貢献があるとすれば、将来的な CO₂ 排出削減への貢献はさらに大きいものとなる。このように、製品の使用段階におけるアウトカムとしても、本事業の成果は CO₂ 排出削減に大きく貢献する。

I.2 事業の背景・目的・位置付け

I.1 項でも述べたように、化学産業は我が国の一大産業であり、高い国際競争力を誇る製品を多数生み出しているが、一方、化石資源を大量に消費し、二酸化炭素排出量も多い。地球温暖化が懸念され、輸入に頼る石油の価格上昇や枯渇リスクに直面する中、化学品製造の革新的イノベーションの実現によりこうした課題を乗り越えていくことが急務となっている。

シリコンやシランカップリング剤に代表される有機ケイ素部材は、化学品の中でも比較的高機能な部材であり、その優れた物性のため、一般の化学品よりも高価な材料（平均で¥1,000/kg 程度といわれている）であるにもかかわらず幅広い産業で用いられている。国内の有機ケイ素部材メーカーは、世界的にも一定の競争力を有しているが、技術開発によってさらに競争力を高めることにより、有機ケイ素工業自体のみならず、それをを用いる幅広い下流産業にもよい影響を与え、日本の産業競争力強化に大きな貢献をすることが期待される。

本事業では有機ケイ素部材の生産に用いられる有機ケイ素原料の製造及び有機ケイ素原料からの有機ケイ素部材の製造について、現在抱えている種々の問題を解決するための新たな技術を開発の対象としており、いずれも新たな触媒プロセス及びそれに用いる触媒を開発することにより達成しようとするものである。ここで開発した技術の実用化によって、有機ケイ素原料製法の省エネルギー化とそれによる低価格化を達成するとともに、有機ケイ素部材の製法改良による高機能化を達成し、これらにより有機ケイ素部材の新たな用途を開拓していくことによって、有機ケイ素工業の省エネルギー化と日本の産業競争力強化に貢献することを目的としている。

本事業の概要を、図 I.2-1 に示す。

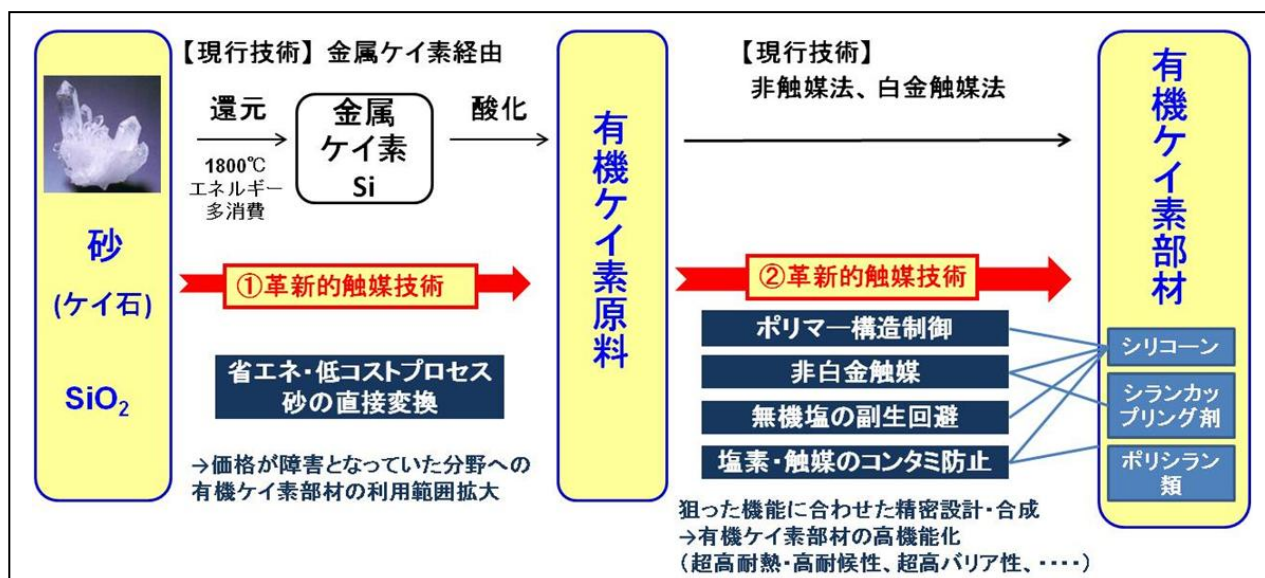


図 I.2-1 本事業の概要

有機ケイ素工業は、製造工程に多くの課題を抱えている。その1つは、有機ケイ素部材の原料である有機ケイ素原料の製造工程において多大なエネルギーを使用していることである。有機ケイ素原料は、現在、金属ケイ素を経由して製造されているが、金属ケイ素の製造工程は、 SiO_2 と炭素を混合して1800℃に加熱するという方法であり、これに多大な電気エネルギーが使われるため、有機ケイ素原料の製造はエネルギー多消費プロセスとなっている。日本は他国と比べてエネルギー価格が高いため、この工程を国内で実施する事は経済的に困難であり、現在では金属ケイ素を海外から輸入して使用している。 SiO_2 は世界的に偏在せず国内での調達が可能であり、金属ケイ素を経由しない有機ケイ素製造プロセスが確立できれば、金属ケイ素の輸入に頼らない国内での有機ケイ素部材製造が可能となる。これに加えて、製造工程における使用エネルギーが大幅削減されることにより、産業競争力の強化に大きく貢献することになる。

他方、有機ケイ素原料からの有機ケイ素部材製造工程においても多くの課題を抱えている。この工程において最も頻繁に用いられるオレフィン類のヒドロシリル化反応では、塩化白金酸 H_2PtCl_6 などの白金化合物が触媒として用いられており、これは50年以上変わらず使用されている。Pt触媒は高活性であるため使用量は微量であるが高価な希少金属を用いるものであり、特にシリコンの硬化の工程で用いられる場合は、製品中に残存するため回収が困難である。このため、オレフィンのヒドロシリル化触媒についてはPt系触媒からの脱却が求められている。

また、有機ケイ素部材の代表であるシリコン類の現在の製造法は、メチルクロロシラン類の加水分解によるものである。この方法では、平均分子量を制御して種々の物性のシリコンを製造しているものの、分子量分布や分子構造の制御を行うことは極めて困難である。現在の製法によるシリコンであってもその優れた物性のため幅広い産業分野で使用されているが、分子量分布や分子構造などが制御されたシリコンが製造できれば、より高い機能やよりよい物性が発現し、有機ケイ素部材の使用分野は大きく広がることが期待される。

さらに、上記製法では、塩素系の有機ケイ素原料が使用されているため塩素のコンタミの回避が難しく、このためシリコンを用いた製品の性能や寿命が十分ではないケースもある。このため、ハロゲンを使用しない新規な有機ケイ素部材の製造方法が求められている。同様に、製品中に残存する触媒成分も有機ケイ素部材の物性面で問題となることがあるため、触媒成分のコンタミを防止する技術も求められている。

加えて、メチルシラン系よりも耐熱性が高いフェニルシラン系のシリコンなど、特定の有機ケイ素部材やその原料の製法において、Grignard試薬などの有機金属化合物を原料とする場合は、製造工程で多量の無機塩が副生する。これは環境負荷の大きい製法であり、また製品が高価になる要因でもあるため、このような特殊な有機金属化合物原料を用いない新たな製法が求められている。

本事業では、上記のような種々の課題を、新規触媒及び新規触媒プロセスの開発によって解決するために、以下の2つの研究開発項目を実施する。

- ・研究開発項目①「砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発」
- ・研究開発項目②「有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発」

研究開発項目①は、極めて安定な SiO_2 を触媒的化学反应によって変換しようとするものであり、いわば「非常識的」なアプローチである。そのためと思われるが、我々が把握している範囲では、実用化を目指してこのような開発を実施している例はない。よってこの部分は、研究開発自体が世界に先駆けた Challenging なものである。

研究開発項目②は、学術的には触媒の研究が精力的に行われている分野である。しかしながら前述したとおり、たとえばオレフィンのヒドロシリル化用 Pt 触媒は 50 年以上変わらずに使用されている状況であり、新たに開発された触媒が実用化された例については、我々は情報を得ていない。よってこの部分は、学術レベルで世の中に蓄積されている多くの知見を参考にしつつ、実用化に結びつき得る触媒の開発を行い、それを触媒反応プロセスに適用して、世界に先駆けて実用化に結びつけることを目的とした開発である。

II. 研究開発マネジメントについて

II.1 事業の目標

本事業は、既存のエネルギー多消費の有機ケイ素原料製造プロセスに代わる新たな革新的省エネプロセスと高機能な有機ケイ素部材の新規製造プロセスを実現するための触媒技術及び触媒プロセス技術を開発するものであり、有機ケイ素工業のエネルギー制約を克服するためには不可欠な技術開発である。さらには、本技術の確立は、我が国の有機ケイ素工業の国際的競争力の強化につながるものである。

本事業は、平成24年度から未来開拓研究プロジェクトの1つとして経済産業省直執行事業で開始され、平成26年度からはNEDO事業として実施するものである。本事業の研究開発項目は二つに分けられる。第一の実施内容は、研究開発項目①「砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発」であり、以下の内容を実施する。

研究開発項目①「砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発」

- ①-1 金属ケイ素を経由しないQ単位構造中間原料製造法の開発
- ①-2 Q単位構造中間原料からの有機ケイ素原料製造技術の開発
- ①-3 砂からQ単位構造を基本構造とするビルディングブロック型の有機ケイ素原料製造法の開発
- ①-4 高活性ケイ素化学種を経由した有機ケイ素原料製造法の開発
- ①-5 その他の反応

本事業における第二の実施内容は、研究開発項目②「有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発」であり、以下の内容を実施する。

研究開発項目②「有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発」

- ②-1 ケイ素-炭素結合形成技術
- ②-2 ケイ素-酸素結合形成技術
- ②-3 ケイ素-ケイ素結合形成技術
- ②-4 触媒固定化基盤技術

本事業においては、平成26年度（事業開始から通算して3年目）、28年度（同5年目）、31年度（同8年目）にそれぞれ中間評価を実施する。それぞれの研究開発項目における中間目標及び最終目標を以下のとおり設定している。

研究開発項目①「砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発」

【中間目標(平成26年度末)】

複数の反応経路とそれぞれの反応における触媒の中心元素の種類や配位子構造等について複数の候補を選定する。

【中間目標(平成28年度末)】

ケイ砂を原料に用いる際の技術課題を抽出する。
反応経路と触媒について有望な組合せを絞り込む。

【中間目標(平成31年度末)】

ケイ砂の反応率50%、有機ケイ素原料の選択率50%を達成すると見込まれる反応経路と触媒を選定し、温度や反応媒体等の最適な反応条件について指標を得る。
原料に用いるケイ砂の処理方法等を選定する。

【最終目標(平成33年度末)】

1kgスケールでケイ砂の反応率50%、有機ケイ素原料の選択率50%を達成する。触媒反応の実用化に向けて必要となるプロセス要素技術を特定し、その工業的实施可能性を1kgスケールで検証する。

研究開発項目②「有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発」

【中間目標(平成26年度末)】

複数の高機能有機ケイ素部材を想定した各種反応に用いられる触媒の活性中心元素や配位子構造等について複数の候補を選定する。

【中間目標(平成28年度末)】

反応経路と触媒について有望な組合せを絞り込む。

【中間目標(平成31年度末)】

有機ケイ素原料の反応率80%、有機ケイ素部材の選択率80%を達成すると見込まれる反応経路と触媒を選定し、温度や反応媒体等の最適な反応条件について指標を得る。

【最終目標(平成33年度末)】

1kgスケールで有機ケイ素原料の反応率80%、有機ケイ素部材の選択率80%を達成する。

有機ケイ素部材中の残留触媒の低減を達成する。

有機ケイ素部材の構造制御技術を確立する。

最終目標及び中間目標の設定の考え方は以下の通りである。

研究開発項目①については、最終目標として1kgスケールでの目標数値(ケイ砂の反応率50%、有機ケイ素原料の選択率50%)の達成を設定している。これは、1kgスケールであれば化学工学的な検証も一定程度可能であり、その後の実用化に向けたスケールアップに進むのに必要な最低限の反応スケールであると考えたためである。なお、目標数値は実施内容の難度を考慮して設定した。

研究開発項目①で実施する研究開発内容は難度が高いものが多く、また類似の研究がほとんどなく参考となる知見も限られているため、最終目標を達成するための研究開発の方針としては、可能性のある反応及びそれに用いる触媒を広く探索した後、順次確度の高いものに絞り込んでいくこととし、この方針により最終目標を達成するために必要なスケジュールに基づき中間目標を設定した。また、ケイ砂を原料として用いるに当たっては、その処理法や取扱いに関する技術開発が必要と考えられるため、ケイ砂の取扱いに関する技術開発について個別の中間目標を設定した。

研究開発項目②についても、最終目標として1kgスケールでの目標数値(有機ケイ素原料の反応率80%、有機ケイ素部材の選択率80%)の達成を設定しているが、その理由は研究開発項目①と同様である。また目標数値は実施内容の難度を考慮して設定した。そのほか、有機ケイ素部材中の残留触媒低減のための技術と、有機ケイ素部材の構造制御技術については、それぞれ個別に最終目標を設定した。

研究開発項目②で実施する開発内容については、学術的には触媒の開発が精力的に行われているため参考になる学術的知見は多いが、我々が知る限り工業的に採用されているも

のではない。そのため、実用化技術として使用可能な触媒及び触媒プロセスの開発は難度が高いものと考え、最初の3年間は触媒の基礎探索を広く実施して触媒の候補を集め、その後順次絞り込みを行って最終目標を達成するという方針としている。この方針に沿ったスケジュールを設定して、必要な中間目標を設定した。なお、本研究開発項目で予定している触媒固定化技術の開発については、個別の中間目標を設定している。

表Ⅱ.1-1に、平成26年度中間評価の目標を再掲し、あわせてその設定根拠を示した。研究開発項目①②とも、最終目標を達成するためには、平成26年度末にはその後絞り込んでいくべき複数の候補が選定されている必要があるため、表記の目標を設定している。

表Ⅱ.1-1 研究開発目標（平成26年度の中間目標）と根拠

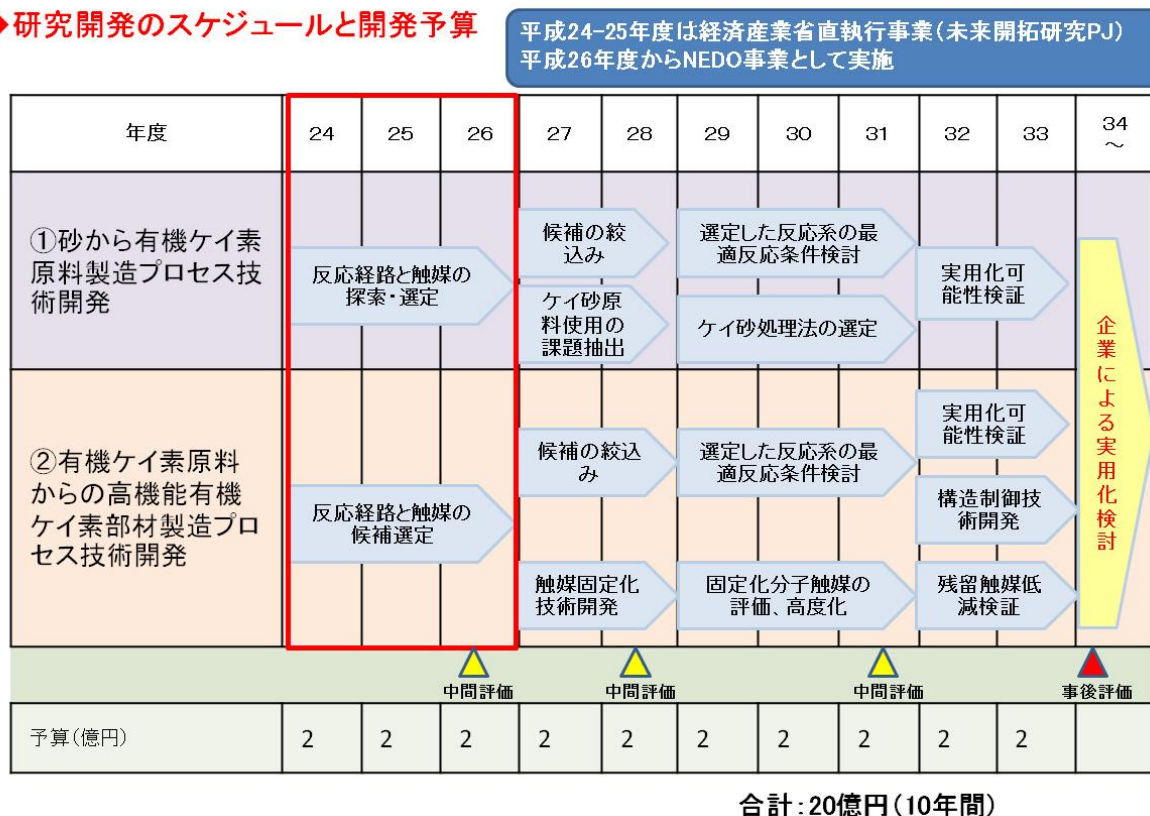
研究開発項目 (個別テーマ)	研究開発目標 (平成26年度の中間目標)	根拠
①砂から有機ケイ素原料製造プロセス技術開発	複数の反応経路とそれぞれの反応における触媒の中心元素の種類や配位子構造等について複数の候補を選定する。	プロジェクト最終目標の達成に向けて、反応経路・触媒の候補の探索を幅広く行い、その後候補を絞り込んで、反応条件等を最適化した後に、1kgスケールで実用化可能性を検証するという開発方針である。
②有機ケイ素原料から的高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発	複数の高機能有機ケイ素部材を想定した各種反応に用いられる触媒の活性中心元素や配位子構造等について複数の候補を選定する。	3年目までに、その後絞り込んでいく対象となる複数の反応経路・触媒候補を選定することとし、研究開発項目①及び②の3年目の中間目標として、当該研究開発目標を設定した。

II.2 事業の計画内容

II.2.1 研究開発の内容

II.1項で示した中間目標及び最終目標に基づく全体スケジュールと、予定している本事業の予算額を図II.2.1-1に示す。本事業は、平成24-25年度は経済産業省直執行事業（未来開拓研究PJ）として実施され、平成26年度からNEDO事業として実施している。

◆研究開発のスケジュールと開発予算



図II.2.1-1 研究開発のスケジュールと開発予算

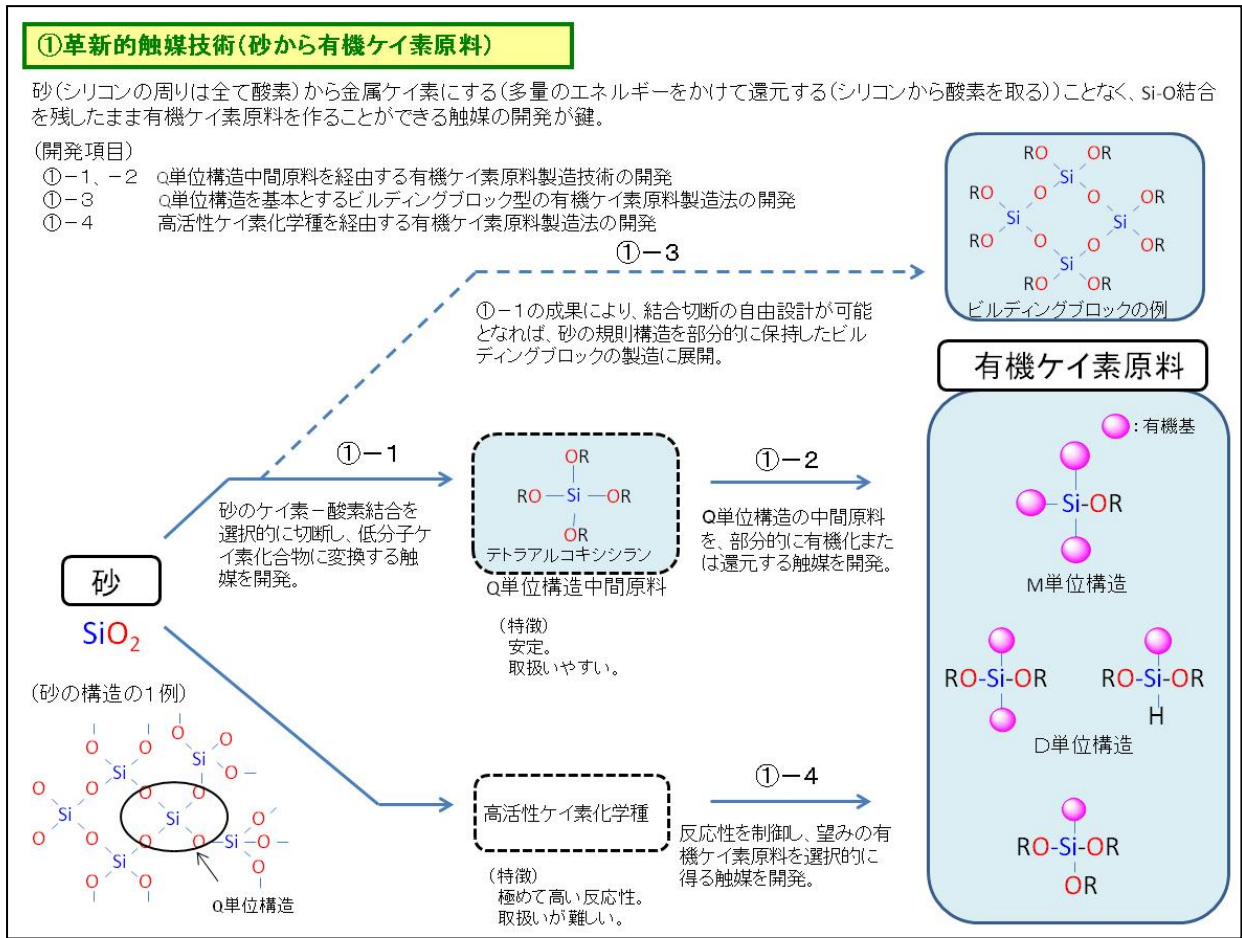
研究開発項目①においては、最初の3年間は、それぞれの反応経路とそれに用いる触媒を広く探索し、その後検討内容を踏まえて、有望な反応経路と触媒を徐々に絞り込み、反応率や選択率の向上等のために反応条件を最適化した上で、最終的に1kgスケールで実用化可能性を検証することとしている。さらに、SiO₂を原料として用いるための技術の開発を行う。

研究開発項目②では、最初の3年間は、それぞれの反応経路とそれに用いる触媒候補を選定し、その後検討内容を踏まえて、有望な触媒に絞り込み、反応率や選択率の向上等のために反応条件を最適化した上で、最終的に1kgスケールで実用化可能性を検証することとしている。さらに、開発した触媒の利用のための技術としての触媒固定化技術や、開発した触媒を用いた生成物の構造制御技術の開発を行う。

各研究開発項目における具体的な研究開発内容を以下に示す。

研究開発項目①「砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発」

概要を図Ⅱ.2.1-2に示した。



図Ⅱ.2.1-2 研究開発項目①の概要

詳細は以下の通りである。

①-1 金属ケイ素を経由しないQ単位構造中間原料製造法の開発

砂からの有機ケイ素原料製造に当たり、固体原料である砂のケイ素-酸素結合を開裂することにより低分子化して、液状もしくは溶媒に可溶なQ単位構造中間原料(テトラアルコキシシランなど)に変換するルートに関する触媒技術の開発を行う。テトラアルコキシシランの合成に関しては、アルコール、金属アルコキシド、炭酸ジアルキル等をケイ砂(シリカ)と反応させる方法等を検討する。

①-2 Q単位構造中間原料からの有機ケイ素原料製造技術の開発

テトラアルコキシシラン等のQ単位構造中間原料からの有機ケイ素原料合成法として、有機化剤を用いて有機基をケイ素上に導入する方法、酸素原子を還元剤で取り除く方法等に有用な触媒技術の開発を行う。

①-3 砂からQ単位構造を基本構造とするビルディングブロック型の有機ケイ素原料製造法の開発

砂の規則構造を部分的に保持したQ単位構造を基本構造とするビルディングブロック

を選択的に切り出すための触媒技術の開発を行う。

①-4 高活性ケイ素化学種を経由した有機ケイ素原料製造法の開発

砂から高活性ケイ素化学種を経由して有機ケイ素原料を製造する方法の開発を行う。

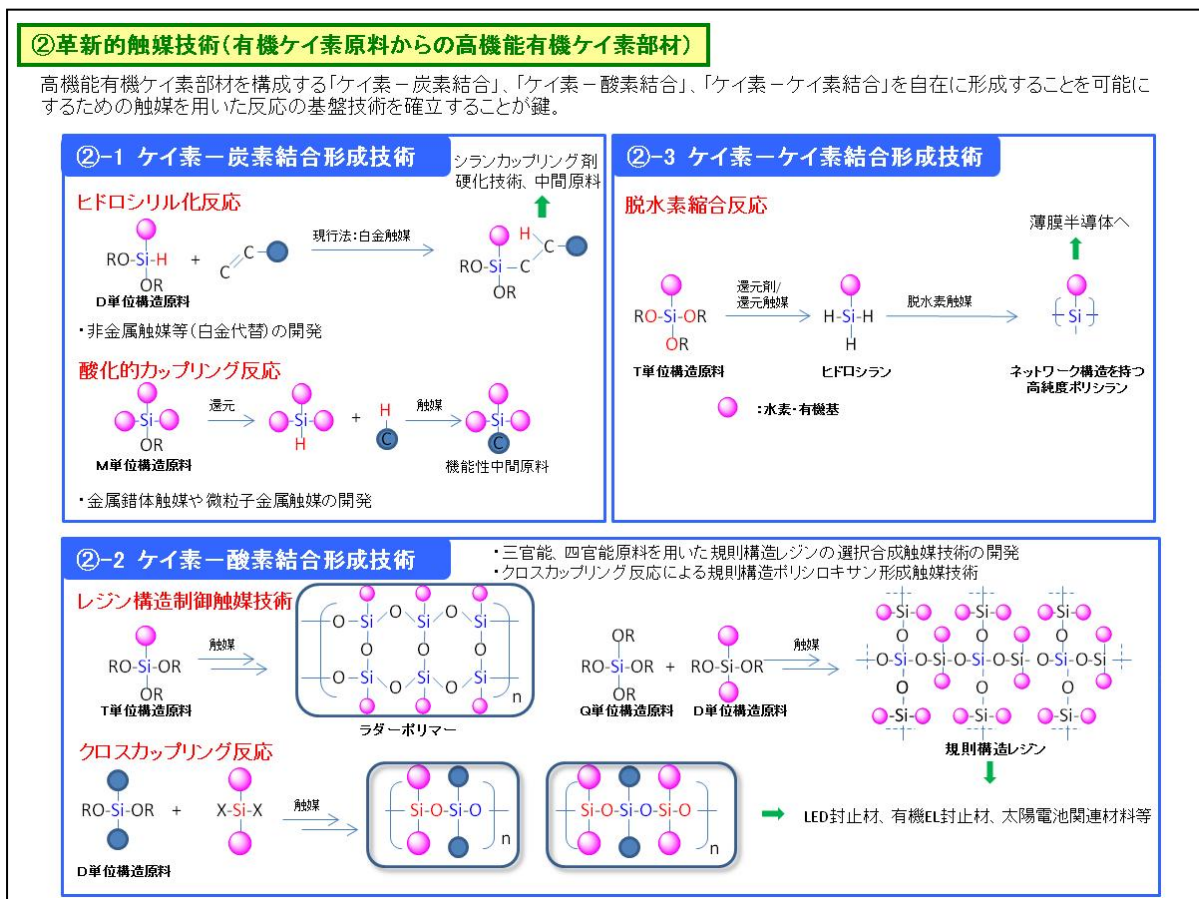
①-5 その他の反応

金属ケイ素を経ずに有機ケイ素原料を効率的に製造する技術の開発は極めて難度が高いことから、①-1～①-4以外の方法についても検討し、必要に応じて開発に着手する。

なお、研究開発項目①の実施項目のうち①-3については、①-1の砂の変換手法を確立した後にその技術を応用して実施するものであることから、少なくとも平成24年度-平成26年度の期間には実施しないこととしている。

研究開発項目②「有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発」

概要を図Ⅱ.2.1-3に示した。



図Ⅱ.2.1-3 研究開発項目②の概要

詳細は以下の通りである。

②-1 ケイ素-炭素結合形成技術

ケイ素-炭素結合形成法として、白金触媒を用いるヒドロシリル化反応や、有機マグネシウム原料を用いる方法が主として用いられているが、前者では触媒コストが高い、白金触媒が製品中に残存して製品品質に悪影響を及ぼす、反応系によっては白金触媒が使用で

きないなどの課題が、後者では、原料のコストが高い、副生マグネシウム塩が多量に発生するなどの課題がある。これらの課題を克服し、更に高効率・高選択的な反応の開発を目指し、ヒドロシリル化反応用の非金属や卑金属触媒の開発及び高価な有機マグネシウムなどの有機金属原料を用いず副生塩が発生しない新規なケイ素－炭素結合形成技術の開発を行う。

②-2 ケイ素－酸素結合形成技術

ケイ素－酸素結合は、原料であるクロロシラン類やアルコキシシラン類の加水分解反応で形成されるのが一般的であるが、ランダムに反応が起こり、結合形成の制御が容易ではない。そこで、反応を制御しつつ、特異的なシリコーン構造を構築するための技術として、ケイ素－酸素結合を選択的に形成できる触媒技術の開発や、シリコーン版のクロスカップリング反応技術の開発を行う。また、これらの技術を、はしご型ポリシロキサンやかご状シロキサンなど構造が制御されたシリコーンや、異なる単位構造が規則的に配列した規則性シリコーンなど、特徴的な物性が期待されるシリコーンの合成の検討に展開する。なお、得られるシリコーンの構造解析手法も検討する。

②-3 ケイ素－ケイ素結合形成技術

ケイ素－ケイ素結合形成に通常用いられる方法は、クロロシランをナトリウム等の金属を用いて還元的にカップリングさせる方法に限定されている。この方法では、構造制御は困難であり、また、塩素化合物やナトリウム塩などが生成物に混入してしまい、電子部材等に用いる場合は性能劣化の原因となる。そこで、ヒドロシランの脱水素縮合等によるケイ素－ケイ素結合形成法の開発とヒドロシラン等の原料の安価な製造法の開発を行う。

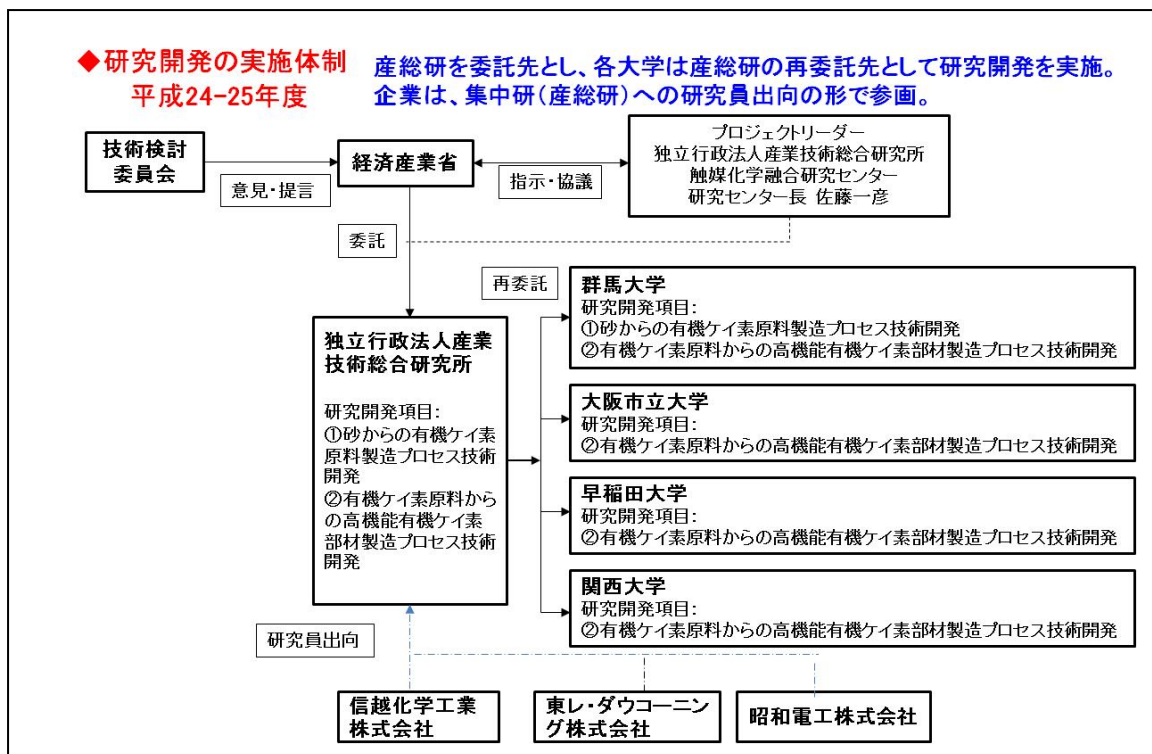
②-4 触媒固定化基盤技術

ケイ素－炭素結合形成やケイ素－酸素結合形成等の有機ケイ素部材合成反応に高活性・高選択性を示す触媒活性種（分子触媒、金属ナノ粒子など）をシリカなどの担体に固定化することにより、有機ケイ素部材製造プロセスにおける触媒の分離・リサイクルを容易にし、製品純度を高めるだけでなく、連続流通プロセスでの生産性向上を実現させるための基盤技術の開発を行う。具体的には、触媒機能を最大化させるための担体の開発、担体への触媒活性種の固定化技術の開発、固定化触媒によるケイ素部材合成技術の開発及びプロセス化に向けた実用化研究について検討する。

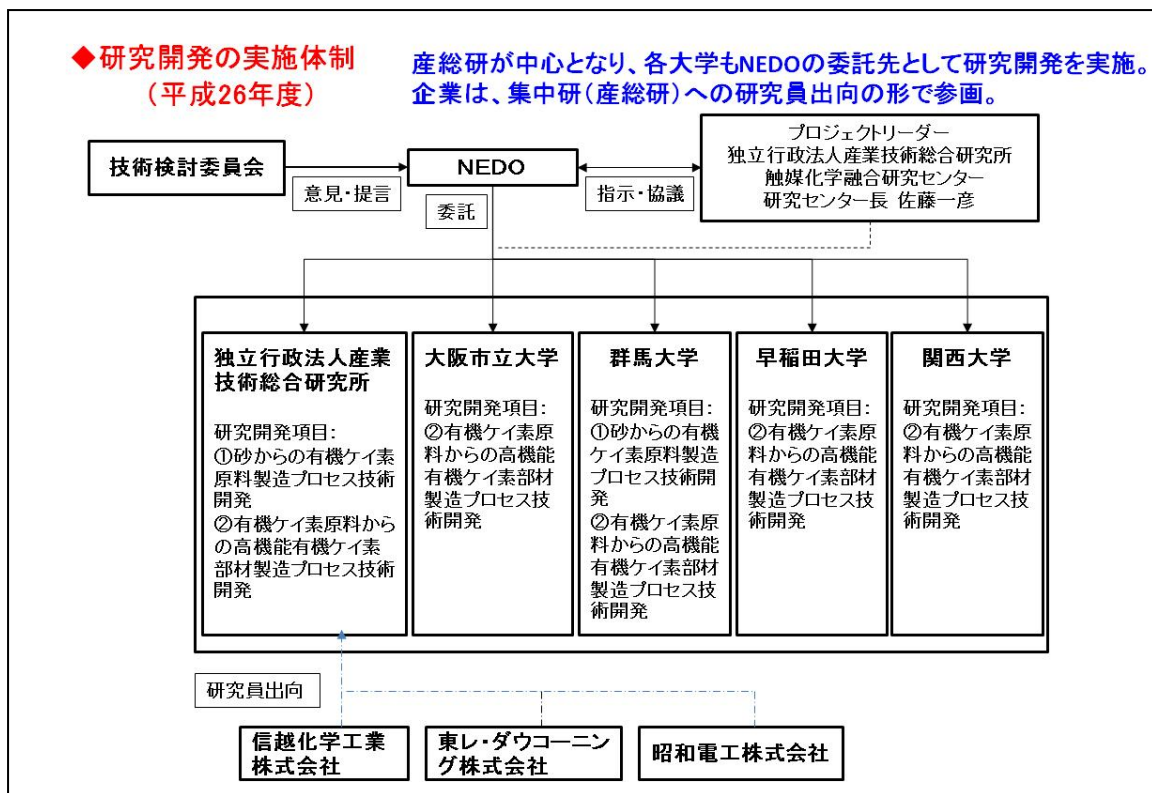
なお、研究開発項目②の実施項目のうち②-4については、②-1～②-3で開発した触媒を固定化するための技術であることから、触媒の開発が進んでから実施すべき内容であり、少なくとも平成24年度-平成26年度の期間には実施しないこととしている。

II.2.2 研究開発の実施体制

本事業における研究開発の実施体制については、平成26年4月に事業をNEDOに移管するにあたり、NEDOのマネジメントを強化する目的で変更を行った。変更前（平成24年度-平成25年度、経産省直執行事業）の体制を図II.2.2-1に、変更後（平成26年度、NEDO事業）の体制を図II.2.2-2に示す。



図Ⅱ.2.2-1 本事業における研究開発の実施体制（平成24-25年度）



図Ⅱ.2.2-2 本事業における研究開発の実施体制（平成26年度）

変更前の体制では、委託先は独立行政法人産業技術総合研究所（産総研）であり、大阪市立大学、群馬大学、早稲田大学、関西大学の4者を産総研の再委託先とした体制で実施

した。有機ケイ素部材の製造企業3社（信越化学工業株式会社、東レダウコーニングシリコン株式会社、昭和電工株式会社）は、産総研に設置された集中研への研究員出向の形で参画した。変更後の体制では、委託先は産総研に加え、変更前は再委託先であった大阪市立大学、群馬大学、早稲田大学、関西大学の計5者であり、有機ケイ素部材の製造企業3社は集中研への研究員出向の形での参画を継続している。

II.2.3 研究開発の運営管理

NEDOは本事業全体の管理・執行に責任を有し、経済産業省及びPL等と連携を図りつつ国内外の類似する研究開発の把握に努め、本事業の目的及び目標に照らして適切な運営管理を行っている。NEDOは外部有識者からなる技術検討委員会を設置し、実施内容や研究開発計画等について外部有識者から助言を得ており、これを活用して、本事業の実施内容を最適化する等の効果的な事業推進を図っている。技術検討委員会は、本事業が経済産業省の直執行であった平成24年度-平成25年度にもNEDOが事務局となって年一回開催し、経済産業省と連携して外部有識者の意見を運営管理に反映した。平成26年度の本事業のNEDO移管を機に、研究開発マネジメントを強化し、進捗状況や外部情勢の変化等をより適切に運営管理に反映することを目的として、技術検討委員会の開催頻度を年二回に増やすこととしている。なお、年二回のうち一回は、設備の見学を兼ねて委託先の研究実施場所で実施する予定である。

(技術検討委員会の開催履歴・予定)

<平成24年度>

第1回 平成25年2月27日 於経済産業省

<平成25年度>

第2回 平成26年1月27日 於経済産業省

<平成26年度>

第3回 平成26年11月19日 於産業技術総合研究所

第4回 平成27年2月頃 於NEDO本部

本事業における技術検討委員会の委員（外部有識者）リストを表II.2.3-1に示す。平成24年度は3名の有識者(持田委員長、寺田委員、室井委員)に委員を委嘱したが、平成25年度には委員2名を増員して5名の体制としており、平成26年度もこの体制を継続することとしている。現段階における技術開発内容に関係する要素技術に係る有識者を広く集めた体制としているが、今後の事業の進捗に応じて、たとえば化学工学や材料科学といった、その時点での開発内容に関係する分野の有識者を増強していくことも検討する

表Ⅱ.2.3-1 技術検討委員会の委員リスト

区分	氏名	所属	役職	専門分野
委員長	持田 邦夫	学習院大学	教授	有機ケイ素化学
委員	寺田 眞浩	東北大学	教授	有機化学
委員	室井 高城	アイシーラボ	代表	工業触媒
委員	辻 康之	京都大学	教授	有機金属化学
委員	松川 公洋	大阪市立工業研究所	研究主幹	有機ケイ素材料

これとは別に、本事業開始時から現在に至るまで PL が定期的開催している「全体会」に、NEDO はオブザーバーとして参加している。技術開発の進捗状況を把握するとともに、必要に応じてプロジェクトリーダー (PL) や委託先からのヒアリングにより研究開発目標に対する達成状況や課題等を把握し、事業の運営管理に反映している。

Ⅱ.2.4 研究開発成果の実用化に向けたマネジメントの妥当性

1) 実用化につなげる戦略

本事業における技術開発は、少なくとも初期段階においては基礎研究の色合いが強いが、実用化を行う企業の関与も重要である。このことから、産総研は集中研を設置し、企業の研究者を産総研特定集中研究専門員として受け入れることにより、企業の研究者が産総研の研究員の立場で、産総研独自の研究員と障壁なく議論を行える体制をとっている。これにより、開発の初期段階から企業の視点も入れた研究開発とし、そのシナジー効果によって、実用化を目指した効率的な成果創出を図っている。

なお、経済産業省直執行、NEDO 事業のいずれの事業においても、産総研・触媒化学融合研究センターの佐藤一彦研究センター長に PL を委嘱している。佐藤 PL は、アカデミアにおける触媒開発の経験と産総研における企業との共同研究による開発技術の実用化の経験を有しており、本事業のような、触媒の基礎探索からプロセス開発や実用化までを見据えて進めていく必要のある技術開発を牽引するのに適任な研究者である。

また、NEDO の今後の研究開発マネジメントに活用する目的で、NEDO の活動として、当該技術における触媒の開発状況や今後開発すべき有機ケイ素部材に関するユーザーニーズに関する情報収集を、平成 26 年度に実施しているところである。

2) 知財マネジメント

研究開発における経済産業省及び NEDO の委託事業では、日本の技術競争力の強化や世界的な市場の獲得を目指して、各々の事業の特徴を活かし、研究開発の成果である知財の創生を重要視した知財マネジメントを実施している。以下に本事業における知財マネジメントについて述べる。

本事業は、平成 24 年度に未来開拓研究プロジェクトの一つとして経済産業省の直施行で開始した。「未来開拓研究プロジェクトの実施に関する基本方針」(経済産業省 平成 24・03・21 産第 5 号)において、「未来開拓研究プロジェクトにおいては、参加者のシナ

ジー効果の発揮等によるプロジェクトの目的（研究開発の成功と成果の事業化による国益の実現）達成を確実にするため、知的財産について適切な管理を行う。」との記載があり、プロジェクトで発生する知的財産が原則として参加者に帰属することを前提に、プロジェクトの推進を阻害する要因を防止し、プロジェクトごとの事情に応じた適切な措置を講ずることが必要とされている。経済産業省直執行期間においては、この考え方に基づいて作成された「産業技術研究開発（有機ケイ素機能性化学品製造プロセス技術開発）知的財産権等取扱規程」を策定の上、「知的財産権の取扱いに関する合意書」を関係者間で取り交わし、これらに従って知財の管理を行っている。

また本事業が平成 26 年度に NEDO へ移管されてからは、上記の「未来開拓研究プロジェクトの実施に関する基本方針」に加えて、NEDO の定める「NEDO プロジェクトにおける知財マネジメント基本方針」にも基づいた知財マネジメントを実施している。具体的には、平成 25 年度までの「産業技術研究開発（有機ケイ素機能性化学品製造プロセス技術開発）知的財産権等取扱規程」の見直しを行い、実施者間で合意書を取り交わした上で、これに基づいた知財管理を行っている。

この規程の概要は以下の通りである。

- ・ 研究開発結果に基づく知財に関する決定機能は、実質的に P L に一元化。
- ・ 知財権はプロジェクト参加者に帰属。
- ・ 参加者は、非参加者よりも有利な条件で知財権を使用。
- ・ 知財権実施等に対する障害の排除。
- ・ 大学への不実施補償なし。

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、効率的な運用が図られている。

II.3 情勢変化への対応

本事業は平成 24 年度に経済産業省の直執行プロジェクトとして開始されたが、3 年目となる平成 26 年度に経済産業省から移管されて NEDO 事業となった。II.2-2 項で述べたとおり、NEDO が本事業の実施機関となるに際し、マネジメントを強化する目的で研究実施体制を変更した。NEDO 移管時の体制変更については、表 II.3-1 に記載の外部有識者による「採択審査委員会」にその妥当性を諮ったうえで行った。

表 II.3-1 NEDO 移管における採択審査委員会委員

区分	氏名	所属	役職
委員長	御園生 誠	東京大学	名誉教授
委員	染宮 昭義	神鋼リサーチ株式会社	主席研究員
委員	府川伊三郎	(元)福井工業大学	教授

II.4 評価に関する事項

本事業は、平成 24 年度に経済産業省の直執行プロジェクトとして開始するにあたり、経済産業省において事前評価及びパブリックコメントを実施した。また、平成 26 年度に本事業を NEDO に移管する際、NEDO 環境部にて事前評価及びパブリックコメント（NEDO POST）を実施し、その結果を踏まえ NEDO が実施する事業として適切であると判断した。

経済産業省及び NEDO における、事前評価書及びパブリックコメントに関する資料を別途添付する。

また NEDO は、技術評価実施規程に基づき、技術的及び政策的観点から、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、外部有識者による中間評価及び事後評価を実施する。経済産業省の直執行事業の開始年度（平成 24 年度）から通算して 3 年目（平成 26 年度）、5 年目（平成 28 年度）、8 年目（平成 31 年度）にそれぞれ中間評価を実施し、事業終了年度（平成 33 年度）の次年度に事後評価を実施する。

Ⅲ. 研究開発成果について

Ⅲ.1 事業全体の成果及び達成度

事業全体としては、表Ⅲ.1-1に示すように目標にそった成果が挙げられている。①砂からの有機ケイ素原料製造技術に関しては、シリカからのテトラアルコキシシラン製造において、収率86%を達成し中間目標を上回る成果を得た。また、②有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素製造プロセス技術開発に関しては、ケイ素-炭素結合形成技術において、卑金属触媒として鉄錯体やニッケル錯体触媒等を開発し、一部の基質においては白金触媒を上回る触媒活性を達成した。ケイ素-酸素結合形成技術においては、シラノール製造法や選択的アルコキシシラン製造技術など、基盤技術として重要な技術の開発に成功した。ケイ素-ケイ素結合形成技術においては、半導体原料として重要なケイ素化合物を脱水素カップリングにより製造する触媒技術を見いだした。この成果は、従来技術に比べ大幅な省エネルギー・低コストプロセスとなると考えられ、将来的な市場の拡大につながるものと期待される。

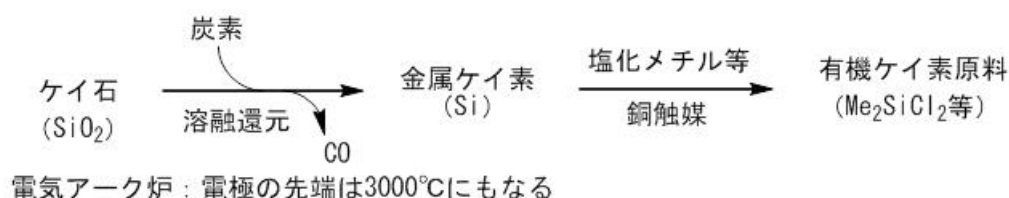
表Ⅲ.1-1 事業全体の成果

目 標	研究開発成果	達成度	課題と解決方針 ※未達の場合のみ
①砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発 複数の反応経路とそれぞれの反応における触媒の中心元素の種類や配位子構造等について複数の候補を選定する。(出典：基本計画 p.3)	<ul style="list-style-type: none"> ・シリカからテトラメトキシシランを高収率・高選択的に製造可能な複数の触媒系を見だし、目標を上回る成果を得た。 ・モデル化合物において、水素ガスを還元剤としてヒドロシランを製造する触媒系を見だし、ほぼ目標を達成した。 	達成	
②有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発 複数の高機能有機ケイ素部材を想定した各種反応に用いられる触媒の活性中心元素や配位子構造等について複数の候補を選定する。(出典：基本計画 p.3)	<ul style="list-style-type: none"> ・ヒドロシリル化反応の卑金属(鉄やニッケル)錯体触媒等を開発し目標を達成した。 ・シラノールを合成する触媒的手法を開発し目標を達成した。 ・高選択的にアルコキシシランを合成する触媒系を見いだす等の成果を挙げ目標を十分に達成した。 ・ケイ素-ケイ素結合形成に有効な複数の触媒候補を見だし、目標を達成した。 	達成	

Ⅲ.2 研究開発項目毎の達成度と成果の意義

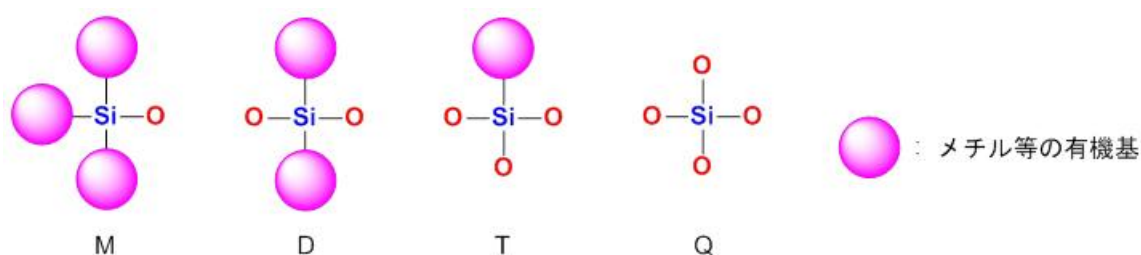
Ⅲ.2.1 砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発

シリコーンの原料である有機ケイ素原料は、1940年代に General Electric 社の研究員であった Rochow 博士により開発された直接法と呼ばれる方法により現在でも生産されている。この方法は、単体ケイ素（金属ケイ素）に塩化メチル等を銅触媒存在下に反応させる方法である。ここで用いられる単体ケイ素は、ケイ石を電気アーク炉で炭素を還元剤として熔融還元して製造される（図Ⅲ.2.1-1）。



図Ⅲ.2.1-1 現行の有機ケイ素原料製造法

一方、シリコーンは主に図Ⅲ.2.1-2に示すM, D, T, Qと呼ばれる4つの基本単位構造の組み合わせからなる高分子化合物である。上記の直接法で製造されるクロロシラン類を加水分解すると、下記の基本単位構造が形成されることになる。Q単位構造を持つテトラアルコキシシラン (Si(OR)₄) は、シリコーンレジン等の重要な原料であるが、やはり金属ケイ素を経由して製造されるのが一般的である。原料であるケイ石の組成式はSiO₂で示されるが、実際には無限の分子量を持つ高分子物質であり、1つのケイ素原子は4つの酸素原子と結合を形成している (Q単位と同じ)。ケイ素-酸素結合は大変強い結合 (結合エネルギー：約 450kJ/mol) であり、その結合を切断するには多くのエネルギーを要する。下記、シリコーンの基本構造を見れば明らかなように、いずれもケイ素-酸素結合を有している。したがって、シリコーンの原料 (基本単位) を製造する際、SiO₂から一旦すべての酸素を取り除くのではなく、選択的に必要な分だけ有機基に置換する触媒技術を開発することができれば、大きな省エネルギー効果が見込まれる。



図Ⅲ.2.1-2 シリコーンの骨格を形成する単位構造

このような試みとして、Si(OCH₃)₄を原料とする反応が General Electric 社より報告されている (Organometallics **2004**, 23, 6202; US Patent 6258971 (2001)など)。この反応では、CH₃Si(OCH₃)₃などの生成が確認されているが、触媒反応ではなく水素化ナトリウムを過剰量用いる必要があり、実用的ではない。このように、直接法を開発した General Electric 社においても、直接法を代替する方法の重要性が認識されており、シリコーンに関連する企業においてはその開発が試みられているものと推察されるが、これまで成功例は全く報告されていない。直接法の代替技術の開発

は重要な課題である一方、極めて難しい課題である。

このような課題を解決するため、本研究項目では、下記に詳細を示す①-1、①-2、①-4、①-5の各課題に取り組んだ。表Ⅲ.2.1-1には、これら研究項目の成果をまとめて示した。また、表Ⅲ.2.1-2には、特許・論文・外部発表の件数を示した。

表Ⅲ.2.1-1 研究開発項目①の成果

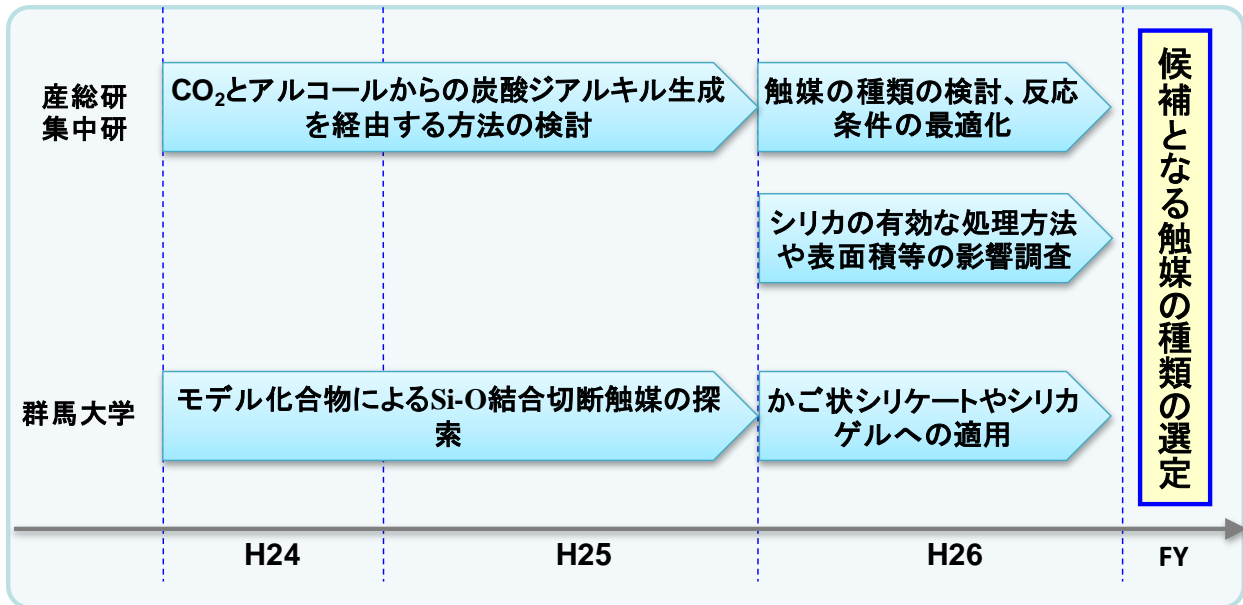
	目標	成果	達成度	今後の課題と解決方針
①-1 金属ケイ素を経由しないQ単位構造中間原料製造法の開発	Q単位構造中間原料製造法について候補となる触媒を選定する	シリカからテトラアルコキシシランを高収率で得る触媒反応系を見だし、目標を大きく上回る成果を得た。	◎	触媒構造等の改良による反応のさらなる効率化、多様なケイ素源への対応
①-2 Q単位構造中間原料からの有機ケイ素原料製造技術の開発	更なる検討を行う反応経路や触媒の候補を選定する	モデル化合物において水素ガスでヒドロシランを合成する触媒反応を見だし、目標をほぼ達成した。	○	Q単位構造中間原料を用いて検討し、候補を絞り込む。
①-4 高活性ケイ素化学種を経由した有機ケイ素原料製造法の開発	更なる検討を行う反応経路や触媒の候補を選定する	高活性ケイ素化学種を発生・反応される装置を開発。やや進捗が遅れている。	△(H26年3月達成見込み)	さらなる検討を実施し、本手法の有用性に見極めをつける。
①-5 その他の反応	実験的な検討を行う反応候補の選定を行う	技術調査を実施するとともに、実験的検討を行う反応候補を選定。目標通りに進捗。	○	メチルシラン類等の製造法として、①-2や①-4より有望な候補を探索し、絞り込む。

表Ⅲ.2.1-2 特許・論文・外部発表の件数

年度	特許出願			論文		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
H24年度	0	0	0	0	0	0	0	0
H25年度	0	0	0	0	0	0	0	0
H26年度	4	0	0	0	0	2	12	0

Ⅲ. 2. 1. 1 金属ケイ素を経由しないQ単位構造中間原料製造法の開発

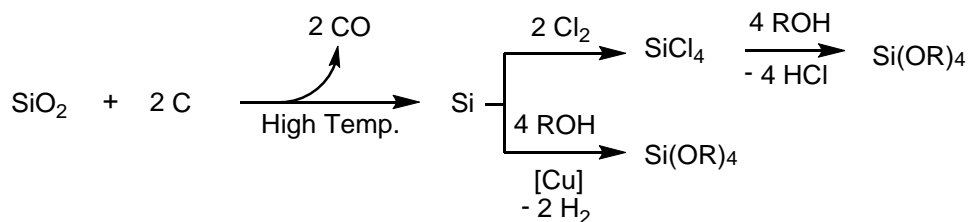
図Ⅲ. 2. 1. 1-1 に研究開発項目①-1 の平成 24-26 年度計画を示した。



図Ⅲ. 2. 1. 1-1 研究開発項目①-1 の平成 24-26 年度計画

Ⅲ. 2. 1. 1. 1. CO₂とアルコールからの炭酸ジアルキル生成を經由するテトラアルコキシシラン合成

本研究開発項目では、砂からの有機ケイ素原料製造に当たり、固体原料であるシリカを液体または溶媒に可溶なQ単位構造中間原料（テトラアルコキシシランなど）に変換するルートに関する触媒技術の開発を行っている。テトラアルコキシシランは、シリコーン樹脂の原料として重要であるとともに、高純度合成シリカや電子デバイス用の保護膜、絶縁膜の原料としても有用であり、幅広い産業分野で使用されているケイ素材料の原料である。テトラアルコキシシランは、工業的には、天然のケイ石（シリカが主成分）を出発原料に、大量の電気エネルギーを用いて高温で熔融し炭素と反応させることで、いったん金属ケイ素に還元したのち、これを塩素と反応させて四塩化ケイ素とし、さらにアルコールと反応させる方法、もしくは金属ケイ素を直接アルコールと反応させる方法により製造されている（図Ⅲ. 2. 1. 1-2）。しかし、いずれの方法も、高温を要する金属ケイ素の製造工程を経るため、典型的なエネルギー多消費プロセスである。またこれが、金属ケイ素から製造されるテトラアルコキシシランなどさまざまなケイ素原料のコスト高の一因ともなっている。そのため、金属ケイ素を経由しないテトラアルコキシシランの製造方法が注目を集めている。



図Ⅲ. 2. 1. 1-2. テトラアルコキシシランの現行製造法

そこで、砂の主成分であるシリカ (SiO₂) のケイ素-酸素結合を開裂させることによる、低分子有機ケイ素原料の合成検討を行った。具体的には、ケイ素化学産業の基幹原料の一つであり、シリコンなどさまざまな有機ケイ素材料の原料としても重要なテトラアルコキシシランを、金属ケイ素を経由することなく、シリカとアルコールとの反応により一段階で効率的に合成するための触媒及び反応条件の検討を行った。その結果、シリカとアルコールとの反応において、副生する水を除去するための有機脱水剤、二酸化炭素、及び触媒として金属アルコキシドとアルカリ金属水酸化物を共存させることにより、目的とするテトラアルコキシシランを高収率で合成することに成功した。また、本反応を効率的に進行させるための必須成分を明らかにした。プロジェクトの中間目標（平成 26 年度末）である、「複数の反応経路とそれぞれの反応における触媒の中心元素の種類や配位子構造等について複数の候補を選定する。」に対して、有力な反応経路の候補を見出すことができ、中間目標を達成できた。今回開発した技術では、シリカとアルコールという安価でありふれた原料から、金属ケイ素を経由せず、テトラアルコキシシランを高効率で合成できるため、有機ケイ素原料の省エネルギー・低コスト製造に繋がると考えられる。また、本研究は従来の金属ケイ素原料中心のケイ素化学から Q 単位構造中間原料を中心とするケイ素化学への一歩であり、今後の有機ケイ素材料の利用拡大が期待される有意義な成果といえる。

今後は、有機脱水剤や触媒の構造を改良することで、反応のさらなる効率化を図る。また、多様なケイ素源やアルコール種への適用性について検証する。さらに、有機脱水剤の再生や触媒のリサイクルについての検討も行い、テトラアルコキシシランの現行製造法に対するコスト優位性を評価するとともに、スケールアップの検討も進めることで、実用化を目指す予定である。

III. 2. 1. 1. 2. モデル化合物による Si-O 結合切断触媒の探索（群馬大学）

「砂からの Q 単位構造中間原料製造法」のモデル反応として、ジシロキサンとシルセスキオキサンを選び、結合開裂反応の最適化を行なった。これらのモデル反応で最適化した反応条件をシリカゲルや鉱物に適用することで、目的とする中間原料合成が行えると考えている。

M 骨格を有するジシロキサンをモデル化合物とし、エタノールとの反応によりアルコキシシランを得る反応について検討した結果（図 III. 2. 1. 1-3）、目的とするアルコキシシランを与える触媒を見出すことに成功した。反応は平衡反応であり、生成物であるアルコキシシランを系外に排出することができれば、平衡がずれて、定量的にアルコキシシランを得ることも期待できる。

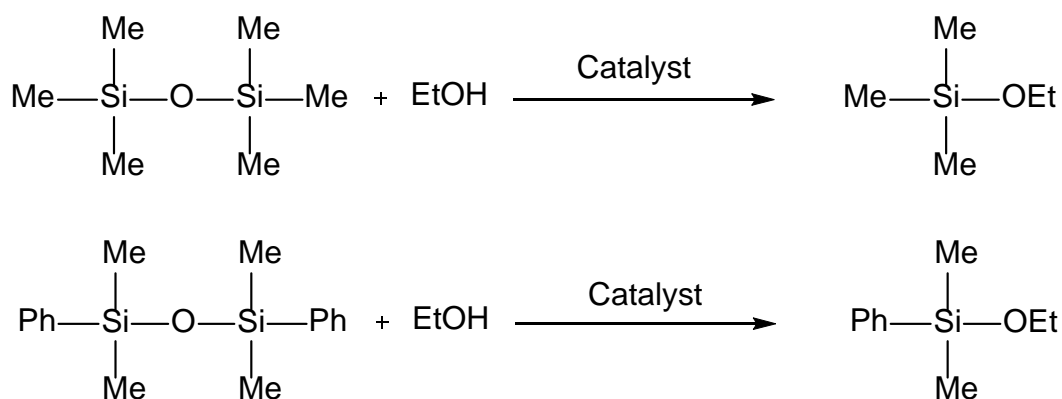
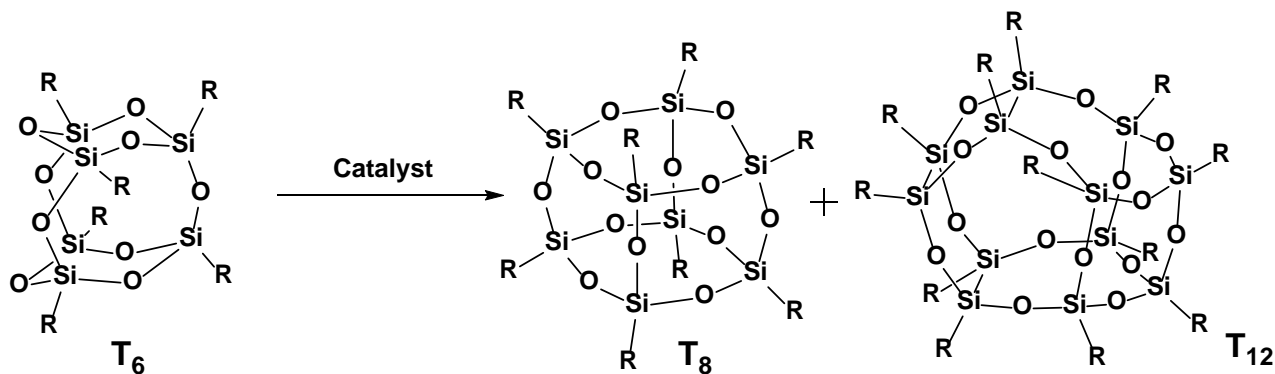


図 III. 2. 1. 1. -3 ジシロキサンをモデル化合物とした検討

続いて、T骨格を有する化合物の結合開裂を検討した（図Ⅲ.2.1.1-4）。原料としてかご型シルセスキオキサンである T_6 を用い、上記で見いだした触媒を用いて反応を行った。その結果、結合が開裂後再結合し、より歪みの少ないかご型シルセスキオキサンである T_8 と T_{12} を得ることができた。これにより、T骨格を有する化合物についても本反応は有効であることが明らかとなった。



図Ⅲ.2.1.1-4 T_6 をモデル化合物とした検討

以上のように、 SiO_2 のSi-O結合切断のためのモデル反応として、ジシロキサンや T_6 のSi-O結合切断反応を取り上げ、Si-O結合切断に有効な触媒を見いだすことに成功した。現在シリカゲルへの適用を行うと同時に、反応のメカニズムを詳細に解析することで収率を向上させる、あるいは更に効率のよい触媒を探索することも並行して行なっている。

今後の課題としては、アルコキシシランを取り出すことで平衡を目的物にずらし、定量的に得ること、また、シリカゲルを原料として用いる場合は溶媒に溶解することができないため、効率よくアルコキシシランを与える反応条件を見出すことを目的として、研究を行っていく予定である。

III. 2. 1. 2 Q単位構造中間原料からの有機ケイ素原料製造技術の開発

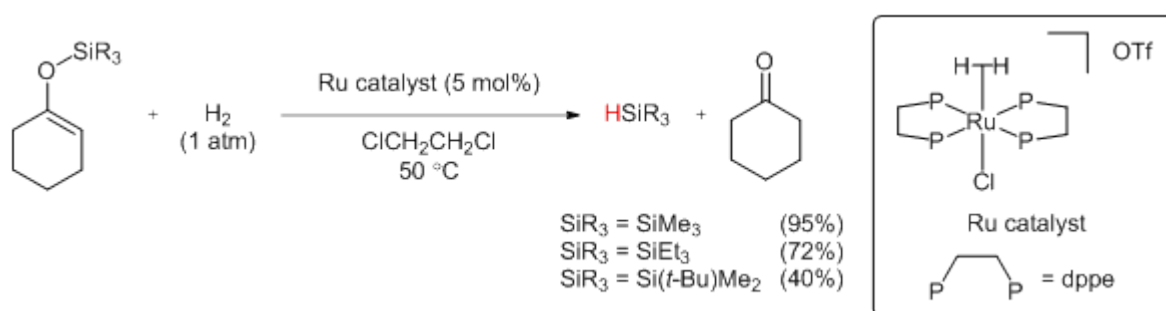
本研究開発項目では、砂からの直接製造が可能と考えられるQ単位構造中間原料であるテトラアルコキシシランや四塩化ケイ素等のケイ素-酸素やケイ素-塩素等の結合を切断し、ケイ素原子上にアルキル基、アール基、水素原子等を持つ化合物を製造するための触媒技術を開発することを目的としている。これまでに、遷移金属錯体触媒を用いた水素ガスによる水素化反応及び有機マンガニ錯体を用いたケイ素原子上への有機基導入反応を検討した。

III. 2. 1. 2. 1. 遷移金属錯体触媒を用いた水素ガスによる水素化反応

ヒドロシランは、ヒドロシリル化反応をはじめとする様々な反応に利用されており、シリコン工業において重要な原料の一つである。メチルジクロロシランやトリクロロシランなどの一部のヒドロシランは金属ケイ素を経由する方法により製造されているが、その他の多くのヒドロシランは、対応するクロロシランやアルコキシシランを金属水素化物で還元することにより製造されている。前者は金属ケイ素を経由することからエネルギー多消費プロセスであり、後者は高価な金属水素化物を一当量以上必要とするとともに金属塩等の廃棄物が多量に発生する問題がある。

本研究開発項目では、ケイ砂等のSiO₂原料から直接製造が可能であると期待されるテトラアルコキシシランや四塩化ケイ素などのQ単位構造中間原料を、水素ガスを水素源として温和な条件下でヒドロシランを製造する触媒反応を開発することを目的としている。本反応が達成できれば、省エネルギーかつ低コストで、廃棄物量の少ないプロセスを実現できることが期待される。なお、本研究開発項目は、②-3「ケイ素-ケイ素結合形成技術」の中のサブテーマである「原料（ヒドロシラン）の安価な製造法開発」と共通課題として位置づけている。

水素ガスを還元剤とするヒドロシラン生成反応としては、Ru錯体を触媒とする図III. 2. 1. 2-1に示す例が報告されていた。この反応は、トリアルキルビニルオキシシランからケトンを生産することを主目的としたものであったが、ヒドロシランも生成することが確認されていた。



図III. 2. 1. 2-1. 報告されている水素を用いた触媒的ケイ素-酸素結合切断反応

この反応では、水素をプロトンとヒドリドとしてheterolyticに開裂させて水素化する反応機構が推定されており、これを参考に触媒探索を行った。

モデル基質として、反応点が一カ所だけであるMe₃SiX（Xはアルコキシ基やハロゲンなど）を用いて触媒の種類や反応条件を種々検討したところ、比較的反応性の高い基質において、水素ガスを水素源としてヒドロシランを生成する触媒・反応条件を見いだすことができた。温和な条件下、水素ガスによりヒドロシランを合成できることを示した点は意義深く、「有望な反応経路や

触媒の種類を選定する」という中間目標を達成できたものと考えている。

今後は、反応効率の大幅な改善やより実用的な反応基質での検討等を進めていく予定である。また、複数の反応点を持つQ単位やT単位の反応基質の水素化において、水素の導入数を制御するような触媒反応技術を開発することも重要な課題として挙げられる。

III.2.1.2.2 マンガン錯体を用いたテトラアルコキシシランのフェニル化反応

砂からの製造が可能と考えられるQ単位構造中間原料としては、テトラアルコキシシランや四塩化ケイ素等が想定される。本研究では、Q単位構造中間原料のケイ素-酸素やケイ素-塩素等の結合を切断し、有機基を導入するための触媒技術を開発することを目的としている。しかし、有機基の触媒的導入は極めて困難な課題であることから、まず、ケイ素原子上に有機基を導入する触媒反応の重要な素過程を調べるため、有機マンガン錯体を用いて、Si-O結合切断及びSi-C結合形成反応を検討した。テトラアルコキシシランのアルキル化・アリール化反応は、通常 Grignard 試薬や有機リチウム試薬を用いた量論反応により行われている。しかし、選択的に特定の数の有機基を導入することは困難であり、反応選択性の制御には大きな課題が残っている。マグネシウムやリチウムに比べ炭素との電気陰性度差が小さく、適度に分極した $Mn(\delta^+)-C(\delta^-)$ 結合を形成する有機マンガン化合物は、温和な求核試薬として働き、反応選択性制御が可能になるものと期待される。さらに触媒反応への展開の可能性も見極めるべく検討を行った。

その結果、フェニル基を有する有機マンガン錯体とアルコキシシランとの反応を検討し、アルコキシシランの選択的なフェニル化が達成できる反応条件を見出した。フェニルマンガン錯体を用いたフェニル化反応では、マンガン上にある支持配位子の電子供与性を適切に変化させることにより反応性を制御できることを見いだした。すなわち、フェニル基を選択的に1つ導入できるフェニルマンガン錯体及び反応条件を見いだすことができた。さらに詳細な速度論的解析から、本反応が会合的な機構で進行することが示唆された。しかし、本反応の触媒化には見通しが立っておらず、今後は、マンガンに限定せず、さらなる探索が必要である。

Ⅲ.2.1.3 砂からQ単位構造を基本とするビルディングブロック型有機ケイ素原料製造法の開発（実施事項なし）

Ⅲ.2.1.4. 高活性ケイ素化学種を経由した有機ケイ素原料製造法の開発

本研究項目では、高い反応性を有する高活性ケイ素化学種に着目し、これを原料とするケイ素原料製造法を開発することを目的に検討を行った。今回着目した高活性ケイ素化学種は、シリコンのD単位やT単位原料製造に利用出来る可能性があるものと期待される。技術調査を行った結果、この高活性ケイ素化学種を用いた反応開発に関する研究は極めて限定されていることが分かった。その中で、各種有機化合物と極低温で反応させることにより種々の生成物を得ている例が報告されていた。生成物の加水分解物を中心に構造解析を行っているため直接の生成物の構造は明らかではないが、炭素-炭素二重結合への付加や炭素-水素単結合への挿入が示唆されている。

はじめに、この高活性ケイ素化学種が多量化した固体状物質について、固体 NMR 等による構造解析を行うとともに、その反応性について検討した。その結果、この固体状物質は、均質な構造を持つ物質ではなく、複数の性質の異なる部分構造からなることが示唆された。また、オレフィン類との反応を試みたが、270℃程度では全く反応せず、元の高活性ケイ素化学種に比べ、反応性の著しく乏しい物質であることが示唆された。

次に、この高活性ケイ素化学種が取り扱いの難しい物質であることから、高活性ケイ素化学種を発生させ、反応基質との反応を効率的に行えるような反応装置を設計・作製した。装置は密閉式で、ガラス球からなる反応容器容器部を持ち、固体、液体、気体の各反応基質との反応が行えるよう設計されている。気体状反応基質は、発生した高活性ケイ素化学種と直ちに反応可能なように気体導入管で適切な位置に導入可能となっている。装置の試運転を実施し、ほぼ想定通り機能することを確認した。

また、高活性ケイ素化学種に関しては、実験的な反応解析が容易でないことから、理論計算による解析を試み、その基本的な反応性に関して重要な知見を得ることができた。

装置の設計・作製に時間を要したため、「さらなる検討を行う反応経路や触媒の候補を選定する」という中間目標に対して、若干進捗が遅れているが、今年度中には目標を達成できるものと見込んでいる。今後は、種々の基質との反応に取り組むことで、高活性ケイ素化学種の基礎的な反応性を理解するとともに、本手法の有効性を見極める。高活性ケイ素化学種は極めて反応性が高いことから、直接反応基質と反応させる方法とともに、高活性ケイ素化学種を適度に安定化させ、高活性ケイ素化学種を反応活性な準安定状態として単離する手法の開発にも取り組む。

III.2.1.5. その他の反応

金属ケイ素を経由しない砂からの有機ケイ素原料製造法は、実用化に向けての道のりも長く、上述の①-1～①-4だけでは、必ずしも最適な反応経路を得られるとは限らないため、その他の可能性についても技術調査等を行った。

SiO₂の金属ケイ素への還元では通常炭素源のみを使用しているが、炭素の他に鉄等を共存させて、比較的低温の1100-1200℃で還元を行い、さらにMeClを反応させることによりMeSiCl化合物を得ることができたという特許が報告されている。反応機構についてはわかっていないが、鉄を添加していることから、Si-Fe結合を含む中間体の存在などが示唆される。そこで、Si-M結合の生成が可能な金属Mを共存させて、現行法よりも低温でSiO₂を還元してSi-M結合等を含む中間体を生成させ、その中間体と有機物を反応させることにより有機ケイ素化合物を製造できないかと考え、酸化還元電位の値などからMの候補を考察した。

また、有機金属によるSiO₂の直接的有機化による有機ケイ素化合物合成の可能性を考えた。そのような反応を実現するためには、Si-O-Si結合を切断してSi-C結合を生成させる必要があるため、モデル反応系としてジシロキサンMe₃Si-O-SiMe₃と有機金属Me-Mの反応を想定し、理論計算により反応前後のエネルギー差に対する金属Mの影響を評価した。また、比較のために、Me-MのかわりにH-Mを用いた反応系についても計算を行った。その結果、Me₃Si-O-SiMe₃とMe-Mの反応系では、金属Mの種類により反応前後のエネルギー差が大きく変化し、Mがアルカリ金属などの場合は発熱的傾向になることが示唆された。また、H-Mの反応系でもほぼ同様の傾向が見られた。さらに、Mの電気陰性度とエネルギー差との相関を調べたところ、Me₃Si-O-SiMe₃とX-M (X = Me, H)の反応系では、Mの電気陰性度が小さくなるほど発熱的傾向が強くなり、反応が進行しやすくなることが示された。そこで、Si-O-Si結合を含むモデル化合物の反応系でSi-O-Si結合の切断・有機化が可能か検討した。その結果、ケイ素上の置換基の種類によっては容易にSi-O-Si結合の切断とSi-C結合の生成が起きることがわかった。

一方、目的物がポリシロキサンの場合は、SiO₂やケイ酸塩等の無機ケイ素化合物から容易に得られるポリケイ酸を利用する方法が考えられる。この方法では、原料の骨格あるいは骨格中の酸素原子を利用でき、基本的には低温のプロセスであるため、ポリケイ酸のシラノール基を効率よく変換できれば、省エネルギー、低コストのポリシロキサン製造法となる可能性がある。ポリケイ酸中のシラノール基の変換については、Si-O結合について見かけ上の変化がないシロキシ基やアルコキシ基への変換がすでに報告されているが、一般には分子量が数千～2万程度で、製膜性、機械的強度等の材料物性や加水分解性等の問題がある。そこで、材料物性等を向上させるために、シラノール基の有機化を考え、Si-O結合の反応性に関する理論的考察とモデル反応系における実験的検討を行った。また、ケイ酸塩からポリケイ酸を生成させる最初の中和過程についても、文献情報に基づき反応条件を検討した。その結果、中和反応で多種類のオリゴマー成分が生成し、抽出条件等によりその分布が変化することがわかった。したがって、構造制御されたポリシロキサンを合成するためには、ポリケイ酸の構造の確認や制御法も含めて検討する必要があると考えられた。

さらに、稲わら由来のSiO₂の利用やプラズマ、電気化学的手法を用いた有機ケイ素化合物合成の可能性についても調査を行った。

以上、複数の経路の可能性について調査と理論的検討を行い、一部の経路については実験的検討を開始し新たな知見を得ていることから、実験的な検討を行う反応候補の選定を行うという中

間評価の目標は達成できたと考えている。本項目では、まだ検討がほとんど行われていなかった反応系について、理論計算や実験的検討を行うことによって、目的の反応を実現するために必要な反応剤等に関する知見が得られた点で重要な意義があると考ええる。今後は、他の候補経路も念頭に入れて、有望な経路の絞り込みや実験的検討を進めることにより、実用的な反応経路や有機ケイ素材料の製造プロセスの開発をめざす予定である。

Ⅲ.2.2 有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発

シリコーンは、主としてケイ素-炭素結合及びケイ素-酸素結合から形成されており、この2種類の結合を自在に形成することができるようになれば、様々な高機能有機ケイ素部材の製造が可能となる。しかし、これらの結合を形成する触媒技術は極めて限定されているのが現状である。また、オリゴシランやポリシランは、特異な電子・光物性を持つケイ素系材料として、あるいは薄膜シリコン半導体の低温形成・塗布形成用材料として注目を集めている。オリゴシランやポリシランはケイ素-ケイ素結合を主体とする材料であり、これらを高効率・高純度・高選択的に製造するためには、ケイ素-ケイ素結合の高度な形成技術が重要となる。本研究では、以上のように高機能有機ケイ素部材製造に欠かせない3つの基本的な含ケイ素結合である、ケイ素-炭素(②-1)、ケイ素-酸素(②-2)及びケイ素-ケイ素(②-3)結合形成のための触媒技術開発を行う。表Ⅲ.2.2-1には、これら研究項目の成果をまとめて示した。また、表Ⅲ.2.2-2には、特許・論文・外部発表の件数を示した。

表Ⅲ.2.2-1 研究開発項目②の成果

	目標	成果	達成度	今後の課題と解決方針
②-1 ケイ素-炭素結合形成技術	それぞれの課題について有効な触媒及び反応条件を選定する	1)ヒドロシリル化反応用の鉄やニッケル系触媒、2)酸化的カップリングによるケイ素-炭素結合形成反応触媒等を見だし、目標を達成した。	○	・ヒドロシリル化触媒に関しては、候補およびターゲットを絞り込む。 ・新規ケイ素-炭素結合形成技術に関しては、基盤拡充・候補絞り込み。
②-2 ケイ素-酸素結合形成技術	構造制御されたレジン構造、ポリシロキサン、オリゴシロキサンの形成に有効な複数の反応経路や触媒候補を選定する	1)不安定なシラノールを合成・安定化する触媒・反応条件、2)非対称アルコキシシラン類を高選択的に合成する反応経路や触媒、3)クロスカップリング型シロキサン合成用触媒等を見だし、目標を上回る成果を達成した。	◎	・シラノールの縮合反応の制御 ・非対称アルコキシシラン等製造技術の高度化 ・シロキサンクロスカップリング反応の問題点の解明・制御・触媒絞り込み
②-3 ケイ素-ケイ素結合形成技術	それぞれの課題について複数の触媒候補を選定する	・ケイ素-ケイ素結合形成に有効な複数の触媒を見だし、目標を十分に達成した。	○	・収率および触媒寿命の向上

表Ⅲ.2.2-2 特許・論文・外部発表の件数

年度	特許出願			論文		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
H24年度	1	0	0	0	0	4	0	0
H25年度	7	0	1	0	0	11	0	0
H26年度	8	0	0	2	0	12	0	0

III. 2. 2. 1 ケイ素－炭素結合形成技術

ケイ素上に有機基を導入するためのケイ素－炭素結合形成反応は、有機ケイ素材料製造のための基幹反応の 1 つである。初めて有機ケイ素化合物が合成された際に用いられたのが、有機金属化合物とクロシランとの反応であり、この反応は有機マグネシウム試薬の開発と共に広く用いられるようになった。直接法が開発されてからは、主原料は直接法で製造されるものの、様々な有機基の導入に利用出来ることから、この方法は現在に至るまで工業レベルでも利用されている。一方、1940 年代にヒドロシランとオレフィンまたはアルキン類との反応であるヒドロシリル化反応が見出され、有機ケイ素部材製造において最も重要なケイ素－炭素結合形成反応の 1 つとなっている（図 III. 2. 2. 1-1）。このように、重要なケイ素－炭素結合形成反応は、いずれも 60 年以上前に開発された反応であり、現在重要となっている省エネルギー・省資源の観点や、より高性能の部材開発といった観点からは多くの問題点を抱えている。

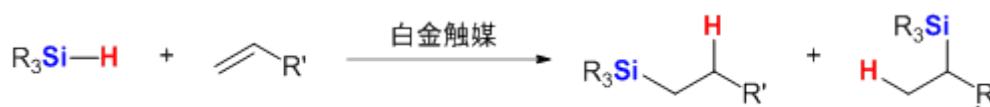


図 III. 2. 2. 1-1. ヒドロシリル化反応

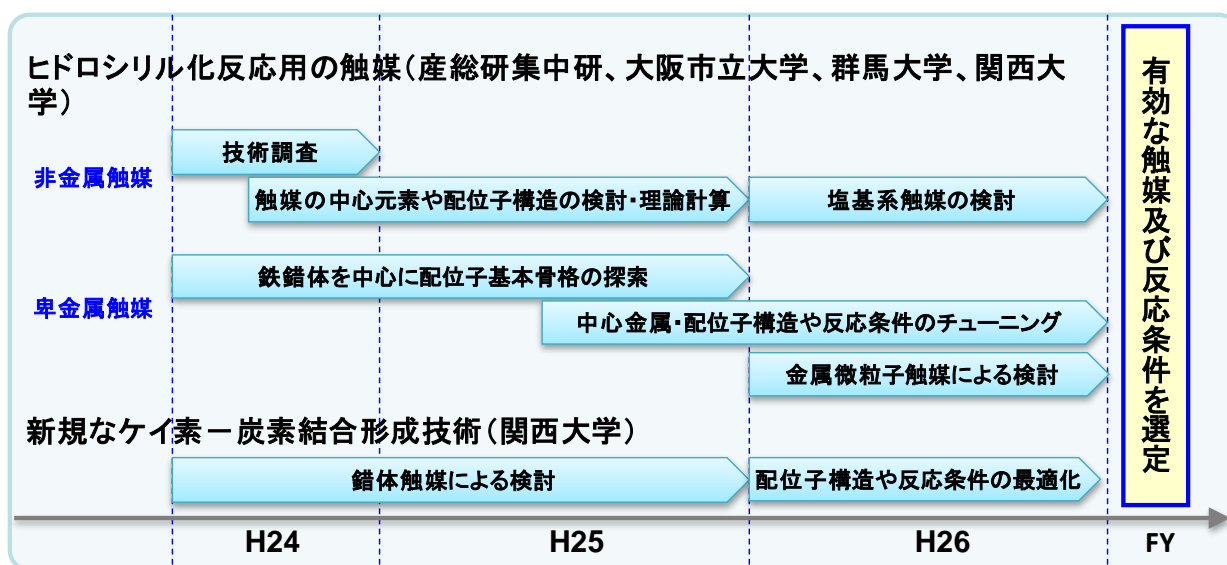
有機マグネシウム試薬を用いる反応は、様々な有機基の導入に幅広く対応できる有用な反応であるが、有機マグネシウム試薬は有機ハロゲン化物と当量以上の金属マグネシウムから調製され、反応後多量のマグネシウム塩が発生すること、また、エーテル系溶媒中で行う必要があることなど高コストな製造法である。また、有機マグネシウム試薬は反応性が高いために共存不可能な官能基があることや副反応の問題なども知られている。

ヒドロシランの不飽和炭素－炭素結合への付加反応であるヒドロシリル化反応は、有機ケイ素部材製造及びその硬化技術（硬化は、シリコンを封止材、ゴム、接着剤などとして利用するために必要となる重要な技術である）として最も重要なケイ素－炭素結合形成反応であり、遷移金属錯体が触媒として利用されてきている。1950年代に白金触媒がこの反応に極めて有効であることが示されて以来、白金触媒が工業的には専ら用いられている。白金触媒は極めて高い触媒活性を示すが、ヒドロシリル化反応がシリコンの硬化反応として多用されるため、多くの場合最終製品に白金が残留し回収することができない。最近のデータでは、世界の白金産出量200トンのうち5%強がヒドロシリル化反応に利用され、その大部分が回収できないということである（A. J. Holwell, *Platinum Metal Review*, 2008, 52, 243.）。

また、白金の使用は、コストや資源的な問題以外にも、イオウ化合物、リン化合物、窒素化合物などの共存により触媒被毒を受けやすいことや着色の原因となること、電子材料用途などでは残留白金が製品性能低下につながる場合があることなどの問題点も抱えている。図 III. 2. 2. 1-1 に示すように、ヒドロシリル化反応では、ケイ素と水素が付加する位置の異なる 2 種類の生成物が可能であり、その選択性の制御も課題となっている。さらに、アリル系化合物など工業的に重要な一部の化合物では、白金触媒を用いると副反応が多く実用的でないことも知られている。以上のように白金を代替するヒドロシリル化触媒の開発は喫緊の課題となっている。

以上のような問題点を克服し、さらに高効率・高選択的な反応を開発することを目指し、本研究項目では、ヒドロシリル化反応用の白金を代替する非金属もしくは卑金属触媒の開発及びヒドロシリル化や有機マグネシウム試薬を用いる方法以外の新規ケイ素－炭素結合生成反応技術につ

いて検討を行っている。図Ⅲ.2.2.1-2 に、平成 24-26 年度計画とヒドロシリル化反応の主な課題を示した。



ヒドロシリル化反応の主な課題

1. 白金を代替する非/卑金属触媒の開発
2. 白金触媒が苦手とする基質(硫黄、窒素、リン官能基を含む基質、アリル系基質など)に適用可能な触媒の開発

図Ⅲ.2.2.1-2 ケイ素-炭素結合形成技術に関する平成 24-26 年度計画

Ⅲ.2.2.1.1 ヒドロシリル化反応用非金属触媒・卑金属触媒の開発

Ⅲ.2.2.1.1.1 ヒドロシリル化用非金属触媒の開発

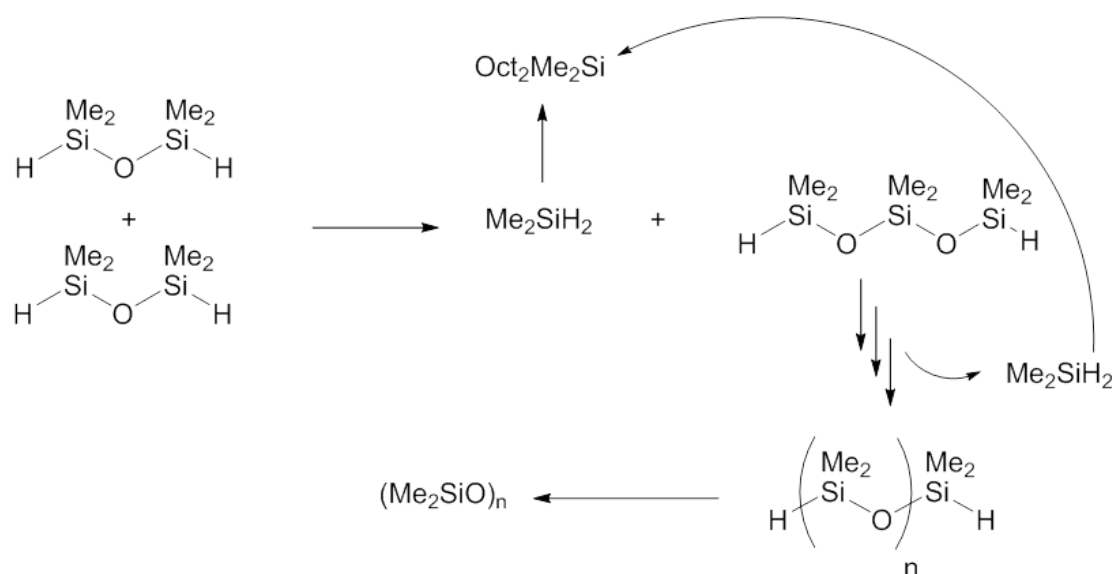
シリコン工業において重要なヒドロシリル化反応には、白金触媒が利用されている。本研究項目では、白金を代替する触媒もしくは白金が苦手とする基質に適応可能な触媒として、非金属触媒の可能性を検討した。

ヒドロシリル化反応に非金属触媒を利用した例としては、Lewis 酸触媒を用いた報告があるが、大部分はケトンやアルデヒド類のヒドロシリル化反応（一般には還元反応）であり、本プロジェクトの目的としているオレフィン類等のヒドロシリル化反応に関しては、ホウ素系 Lewis 酸触媒を用いた例が報告されているのみであった。また、非金属触媒ではないが、関連する反応としてアルミニウム Lewis 酸触媒を用いた SiH 含有有機シランとアルキン類との反応が報告されている。しかし、シリコン工業において重要なシロキサン化合物同士のヒドロシリル化反応についての報告例はこれまでなかった。また、Lewis 酸触媒以外の例としては、トリクロロシランのヒドロシリル化反応に限定されるが、アミンを触媒として用いる例が報告されていた。

以上のように、非金属触媒を用いた例は極めて限られており、工業的に重要な基質への適応可能性も不明であったことから、まず、既知の触媒の性能の確認から着手し、近年注目されている Frustrated Lewis Pair の適応可能性についても検討した。

すでにヒドロシリル化反応に有効なことが知られているホウ素系 Lewis 酸触媒について、工業的に重要な基質への適用可能性を検討したところ、不均化反応が起こってしまうことが

明らかとなった（図Ⅲ.2.2.1-3）。また、理論計算により反応解析を行い、不均化反応が起こる原因について知見を得ることができた。



図Ⅲ.2.2.1-3. ホウ素系 Lewis 酸触媒による不均化反応

また、近年注目を集めている Frustrated Lewis Pairs 触媒について検討したところ、やはり不均化反応が起こること、また、塩基部位の効果が特に見られないことが分かった。一方、トリクロロシランのヒドロシリル化に有効であることが報告されている塩基触媒について検討したが、反応は進行するものの効率が悪いことが判明した。

以上のように、非金属触媒に関しては、「有効な触媒及び反応条件を選定する」という中間目標に対して、現時点では十分な成果が得られていない。今後は、今年度内に非金属触媒の可能性について判断を下したいと考えている。

Ⅲ.2.2.1.1.2 ヒドロシリル化反应用卑金属触媒の開発

Ⅲ.2.2.1.1.2.1 ヒドロシリル化反應用鉄錯体触媒の開発（大阪市立大学）

ヒドロシリル化反応の触媒として、白金以外にも様々な金属を用いた検討がなされているが、安価で入手容易な卑金属を用いた例は限定されている。不飽和炭素結合へのヒドロシリル化反応は、理想的には副生成物を伴わない Si-C 結合生成反応であり、工業的に広く利用されている。白金等の貴金属錯体が高い触媒活性を示すが、この貴金属錯体を卑金属錯体で代替することは重要な課題である。

鉄錯体を触媒とするオレフィンへのヒドロシリル化反応については、既にいくつかの研究例が報告されているが、いずれも低い触媒活性ならびにヒドロシリル化生成物以外の副生成物が生じるといった低い選択性を示したため、実用化には程遠かった。最近になり、Chirik がジイミノピリジン誘導体を配位子とする鉄錯体がオレフィンに対して比較的高い触媒活性を示すことを見出した。

一方、大阪市立大学中沢研究室は、鉄錯体触媒を用いた研究に多くの実績を有しており、

ピアノ椅子型鉄錯体を触媒とする全く新しいタイプのヒドロシリル化反応を見出す等の成果をすでに報告している。本研究開発項目では、これまでの鉄錯体に関する知見を基に、配位子構造や反応条件等を広範かつ詳細に検討し、ヒドロシリル化反応に対して高い触媒活性を有する、安価で無毒な鉄を中心金属とする錯体触媒の開発を目指して検討を行った。

ターピリジン誘導体を配位子とする鉄錯体を種々合成し、非対称置換配位子を有する鉄錯体が一級シランに対して高い触媒活性 (TON = 1533) を示すことを見出した。また、ジイミン誘導体を配位子とする鉄錯体を種々合成し触媒反応を検討したところ、選択的に二級シランに対して高い触媒活性 (TON = 4200) を示すことを見出した。

今後は、配位子構造や反応条件のさらなる検討を行い、より高活性触媒能を有する鉄錯体の開発を行う。また、3級シランに対して高い触媒活性を示す鉄錯体の開発も行っていく。

III.2.2.1.1.2.2 ヒドロシリル化反应用ニッケル及びチタン錯体触媒の開発

本研究開発項目では、ヒドロシリル化反应用卑金属触媒として、ニッケル及びチタン錯体触媒について検討した。

ニッケル錯体のヒドロシリル化触媒活性は古くから知られてきたものの、これらの触媒によるヒドロシリル化反応は高温を要したり、複数の副生成物が生じるなど、その実用化には多くの課題があるのが現状である。

一方、チタン錯体に関しては、Ziegler 触媒が一般にヒドロシリル化触媒能を有することが知られている。しかしながら、 $\text{Ph}_n\text{SiH}_{4-n}$ と $(\text{CH}_2=\text{CH})\text{Si}(\text{OMe})_3$ を $\text{Cp}_2\text{Ti}(\text{OPh})_2$ 存在下で反応させるとヒドロシリル化反応と同時に脱水素カップリングも同時に起こることが報告されている。また、 RSiH_3 のような一級シランとオレフィン類を Cp_2TiMe_2 存在下で反応させると、ヒドロシリル化反応とともに水添反応も起こることも報告されている。以上のように、チタン錯体はヒドロシリル化反応に対して触媒能を持つことが知られているが、これまでの報告では触媒活性及び選択性に問題がある。

そこで、ニッケルやチタン錯体触媒において、活性・選択性ともに優れた触媒の開発を目指し、新たな触媒の探索に取り組んだ。

今回、種々の配位子を有するニッケル錯体を検討し、室温で速やかにオレフィンのヒドロシリル化が進行し、高選択的に目的物を与える複数の触媒系を見いだした。適切な配位子を選択することにより、一級から三級までの種々のヒドロシランに適応可能であり、窒素などの配位性官能基を有するオレフィンにも適用可能な触媒系も見いだした。また、ジエンの 1,4-位置選択的ヒドロシリル化にも有用であることが分かった。一方、チタン錯体に関しても、従来ヒドロシリル化反応に対する触媒活性が知られていなかったチタン錯体が有用であることを見いだした。

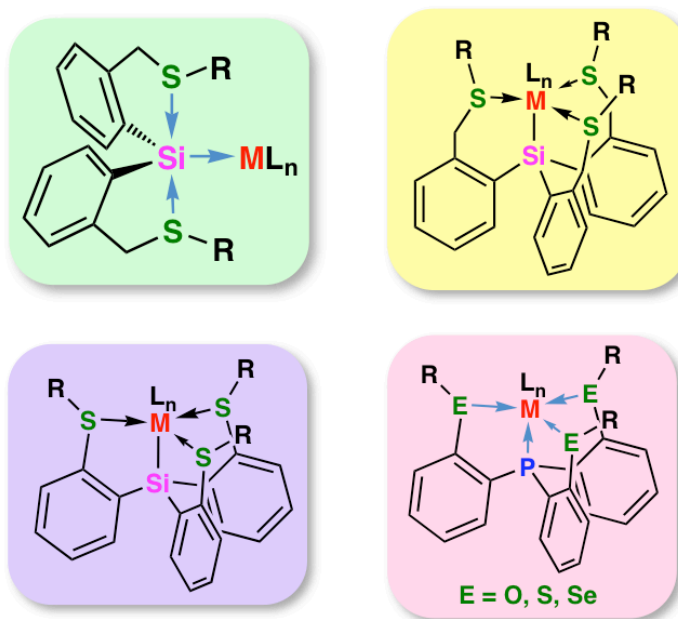
これまで取扱いが困難で、触媒の精密設計が困難とされてきたニッケル錯体を用いて、well-defined なヒドロシリル化触媒系の構築に成功し、複数の触媒候補を選定できた点は大きな進歩である。また、チタン錯体においてもヒドロシリル化反応に触媒活性を示す新たな触媒を見いだしており、「有効な触媒及び反応条件を選定する」という中間目標を達成できたと考えている。

今後は、以上の検討で見出した触媒系を基盤にさらなる触媒設計を行うことで、触媒活性の大幅な向上とともに、白金触媒では適用困難とされる基質にも適用可能な触媒の開発を目指す。

Ⅲ.2.2.1.1.2.3 四座三脚型配位子を持つヒドロシリル化触媒の開発（群馬大学）

群馬大学海野研究室では、図Ⅲ.2.2.1-4 に示すような四座型配位子を設計し、種々の金属錯体を合成してきた。この研究実績を基に、本研究開発項目では、新規なヒドロシリル化反応用触媒として、独自の構造を有する四座三脚型配位子をもつ遷移金属錯体の開発を行っている。

新規配位子の例



図Ⅲ.2.2.1-4 四座型配位子の例

種々のヘテロ原子を中心元素及び配位側鎖として有する四座三脚型配位子を合成し、イリジウム、白金、パラジウムなど多数の金属を含む錯体を合成した。また、鉄錯体についても合成を試みた。このような三脚型配位子錯体は、金属元素上面に空孔を有するため、そこに原料を取り込んで反応を行うことで、高い選択性を示す反応、ならびに小分子の活性化などへの応用が期待できる。

ヒドロシリル化の触媒としてこれらの錯体を評価した結果、特定の配位子を有する錯体触媒が最も優れた結果を与えた。ケイ素が末端に付加した生成物が、高収率・高選択的に得られた。本触媒の特筆すべき点は、通常触媒毒となる元素を含む金属錯体触媒であってもヒドロシリル化を起こすことができる点にある。本触媒は、シランカップリング剤の製造などに応用できる可能性を持っている。

今後は、同様に高効率、高選択性を示す金属触媒で、卑金属を中心金属とするものを探索する。現在、ニッケルや鉄錯体の合成を検討中であり、錯体が合成できれば、ヒドロシリル化反応に適用し、目的物が得られるかを検討する。また、触媒毒を受けない金属錯体触媒の応用を検討するため、シランカップリング剤等への応用が期待される工業的に重要な基質のヒドロシリル化反応についても検討する。

III.2.2.1.1.2.4 ヒドロシリル化用金属微粒子触媒の開発（学校法人関西大学）

ヒドロシリル化反応においては、従来白金族触媒が主に用いられてきたが、貴金属を使用しない鉄錯体等を触媒とする合成法も提案されている。一方、金属塩化物等をジメチルホルムアミド（DMF）中で還元することにより、粒子径が約2 nm以下の金、白金、パラジウム等のナノ粒子を簡便かつ大量に合成することができることが報告されている。このようなナノ粒子は、溶媒であるDMFが保護剤としても機能するため、ナノ粒子の凝集を防ぐための分散剤、イオン性保護剤等を添加することなく、各種媒体に均一に分散することができる優れた特性を有しており、これらのナノ粒子をケイ素化合物合成反応の触媒として利用する試みが行われている。これまでに関西大学大洞研究室においては、DMF還元法で得られたパラジウムのナノ粒子が、鈴木-宮浦反応、溝呂木-Heck反応ならびに小杉-右田-Stilleクロスカップリング反応において高い触媒活性を示すことを報告している。また、同様な手法で合成した銅ナノ粒子が、フェノール類とハロアレーンとのUllmannカップリング反応において有効な触媒として機能することを報告している。

これまでアルケン類のヒドロシリル化反応は、触媒として白金等の貴金属が用いられ、特殊な配位子を有する錯体を用いられ、このため、優れた活性を示す卑金属ナノ粒子触媒を簡便かつ安価に調製することができれば、ヒドロシリル化反応を利用した材料等の製造コスト低減に繋がる優れた技術となり得る。

本開発項目においては、種々の卑金属前駆体を用いたDMF還元法によるナノ粒子合成を試み、ヒドロシリル化触媒としての活性評価を行った。その結果、安価な前駆体錯体を用いてDMF還元法で調製した卑金属ナノ微粒子が、アルケンとフェニルシランとのヒドロシリル化反応において高活性触媒として機能することを見出した。本法は、卑金属前駆体錯体をDMFに溶解し加熱攪拌するのみ、という極めてシンプルな方法で調整した卑金属ナノ微粒子触媒が、ヒドロシリル化反応の触媒として利用出来るという画期的な成果といえる。今後は、卑金属前駆体の構造がヒドロシリル化反応に与える影響をさらに考察するため、様々な卑金属錯体を前駆体とした卑金属ナノ粒子合成を行い、粒子サイズや形状に関する評価を行うとともに、ヒドロシリル化反応における触媒活性を評価する。以上の検討により、ヒドロシリル化反応に有効な微粒子触媒の金属の種類、微粒子調製条件及び反応条件を選定する。また、現在フェニルシランでの検討を中心に行っているが、ヒドロシランならびにアルケンの基質適用範囲の拡張を目指すとともに、ヒドロシリル化体の収率向上のための検討を行っていく予定である。

III.2.2.1.2 酸化的（脱水素）カップリングによる新規ケイ素-炭素結合形成反応の開発（学校法人関西大学）

本開発項目では、工業的利用価値のあるヒドロシリル化反応以外のケイ素-炭素結合形成法の開発を目指した検討を行っている。具体的には、安価な炭素資源を原料としたアリルシラン類及びアリールシラン類の製造法について検討した。

アリルシラン類は、様々な化学変換が可能な官能基であるアリル基とシリル基を有する分子であり、そのため天然物の合成をはじめとした有機合成反応に利用されている。また、Lewis酸の存在のもと、アリルシラン類を、ケトン、アセタール等の種々の求電子剤と反応させることにより、位置選択的に炭素-炭素結合生成反応を形成する細見-櫻井反応が知られており、アリルシラン類は、炭素骨格上にアリル部位を導入するために用いられる有機合成上有用な化合物群である。

従来のアリルシランの合成方法としては、例えばハロゲン化アリルをマグネシウムまたはリチウムなどの化学量論量の金属と反応させ、得られる有機金属アリル化合物をハロシランと反応させる手法が報告されている。しかしながら、この方法を用いた場合には、多量の金属塩が副生するという問題点があった。また、ジシランを用いた辻トスト型クロスカップリングによる合成法も報告されているが、アリル源として、アリル酢酸エステルに代表される、エステル基やハロゲンなどの反応性の高い脱離基を有するアリル化合物を合成して用いる必要があった。

本開発項目では、単純アルケンとジシランの酸化的カップリング反応によるアリルシラン類の新規合成法について検討を行った。その結果、特定の配位子を持つパラジウム錯体触媒を用いると、一気圧の酸素雰囲気下、種々の末端アルケンとヘキサメチルジシランとの酸化的カップリング反応が、高位置・立体選択的かつ高収率で進行することを見いだした。また、反応条件を最適化することにより、内部アルケンからもアリルシラン類が得られることを見出した。

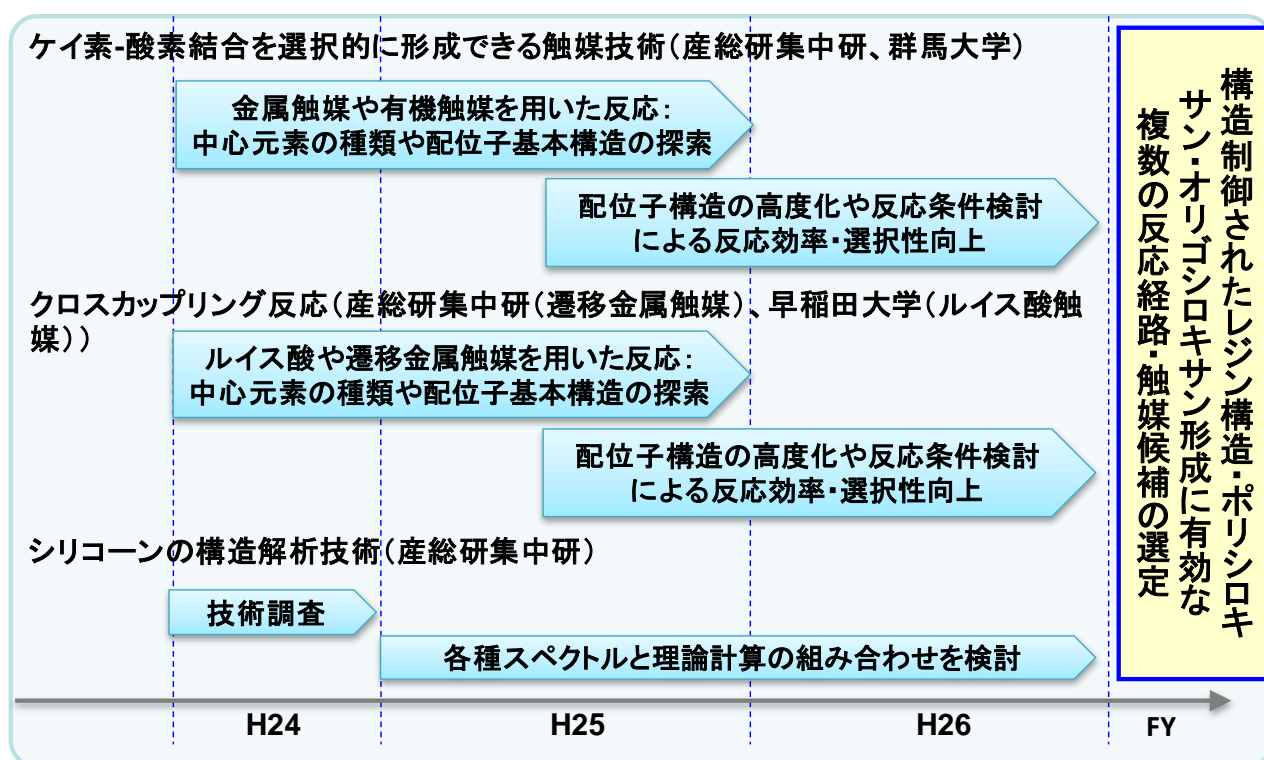
一方、アリールシランはシリコーン原料としても重要なケイ素化合物の一つである。従来の合成法としては、ハロシラン類またはアルコキシシラン類とアリール Grignard 試薬との反応が代表的であり、また、ハロゲン化アリールとシリルリチウムなどの金属化合物との反応も知られているが、いずれも化学量論量の金属塩が副生する。

本開発項目では、ベンゼン等の芳香族炭化水素とヒドロシランとの脱水素カップリング反応(直接シリル化)によるアリールシラン類の合成にも取り組み、高効率な触媒を見いだした。従来の直接シリル化法によるアリールシラン類の合成は、活性化されたシラン化合物あるいは電子吸引力置換基を有する芳香族化合物を用いて反応を行う必要があり、かつ反応は高温(200℃)あるいは光照射条件のもとで行われていた。これらの従来型反応に比べ、今回開発して方法は、二座配位子を有する特定の遷移金属錯体を触媒とし、水素受容体を共存させることにより、70℃から110℃という温和な条件のもと、ベンゼン等の単純な芳香族炭化水素とトリエチルシラン等の単純ヒドロシランを用いた反応に成功した。

以上のように、オレフィンやベンゼン等の単純有機化合物とジシランやヒドロシラン等の汎用ケイ素化合物から、アリルシラン類やアリールシラン類を合成する反応に有効な触媒及び反応条件を見いだしており、「それぞれの反応に有効な触媒及び反応条件を選定する」という中間目標を達成できたと考えている。今後は、ベンゼンとヒドロシランを用いた脱水素カップリング反応によるアリールシラン合成に関して、触媒構造、添加剤の種類、反応温度や基質濃度等の反応条件を検討し、触媒効率の向上と基質適応範囲の拡大を目指す。

Ⅲ.2.2.2 ケイ素－酸素結合形成技術

現在実用的に用いられているほとんどの有機ケイ素部材はシリコンであり、その骨格を形成しているのがケイ素－酸素結合である。したがって、ケイ素－酸素結合形成技術は高機能有機ケイ素部材製造において極めて重要である。ケイ素－酸素結合は、原料であるクロロシラン類やアルコキシシラン類の加水分解反応で形成されるのが一般的であり、その際中間体として生成するシラノールは触媒がなくとも（あるいは副生する塩酸により）容易に自己縮合してケイ素－酸素結合を形成するため、結合生成の制御が容易ではない。これまでも触媒は利用されているものの、一般に用いられてきた触媒は比較的単純な酸や塩基、金属塩であり、種々の構造の混合物を生成する反応がほとんどである。そのため、高度な構造制御を可能とするケイ素－酸素結合形成触媒技術の開発が望まれている。本開発項目では、以下に示す「ケイ素－酸素結合を選択的に形成できる触媒技術」及び「シリコン版クロスカップリング反応」に関する各課題について検討する。また、これらの課題を通して、現段階で十分に確立されているとは言えないシリコンの構造解析技術の開発についても検討する。図Ⅲ.2.2.2-1 に平成 24－26 年度計画を示した。



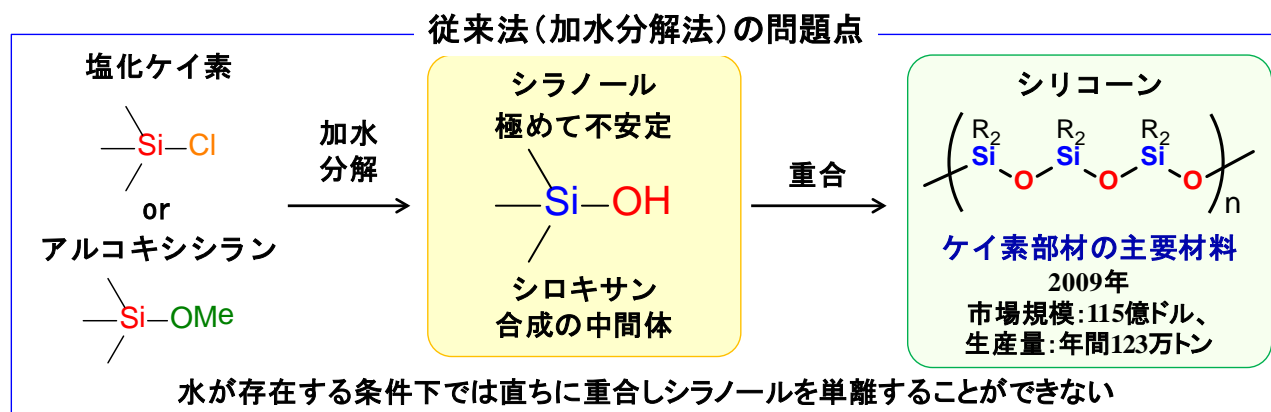
図Ⅲ.2.2.2-1. ケイ素－酸素結合形成技術に関する平成 24－26 年度計画

Ⅲ.2.2.2.1 ケイ素－酸素結合を選択的に形成できる触媒技術

Ⅲ.2.2.2.1.1 無水条件下でのシラノール合成技術

シリコンの主鎖骨格はシロキサン結合 (Si-O-Si) からなる。シロキサン結合は、シラノールの脱水縮合反応により形成されるが、通常はシラノールの前駆体であるクロロシランやアルコキシシランを原料とし、加水分解条件下、シラノールを単離することなくそのまま縮合反応が行われる(図Ⅲ.2.2.2-2)。シラノールは脱水縮合しやすい化合物であり、特に加水分解条件下では直ちに縮合し、シラノールを単離することができない。構造制御されたレジジン構造、ポリシロキ

サン、オリゴシロキサンを選択的に形成するためには、最も基本的な反応であるシラノールの脱水縮合反応を制御する手法の開発は極めて重要である。そのためには、シラノールを安定に合成し、その性質及び縮合過程を解明する事が必須と考えられる。そのため、本開発項目では、シラノールを安定に合成するための新規手法の開発を目的とした。



図Ⅲ.2.2.2-2 シラノール合成における従来法の問題点

シラノールを安定に合成するためには、水が存在せず比較的中性に近い条件が必要と推定した。そこで、アルコールの保護に用いられるベンジル保護を参考に、Pd/C 触媒存在下、ベンジルオキシ基を有するケイ素化合物の水素化分解反応によるシラノール合成を検討した。その結果、無水条件において、シランモノオール、シランジオール、シラントリオール等を合成し単離することができ、有機ケイ素材料の大部分を占めるシロキサン（シリコーン）の基本原料であるシラノールを無水条件で合成する新規触媒技術を開発することに成功した。本法で合成したこれらシラノールを用いることで、規則構造を有するシリコーンレジン合成にも展開可能であると考えられる。以下のⅢ.2.2.2.1.2項、Ⅲ.2.2.2.1.3項、Ⅲ.2.2.2.1.4項、Ⅲ.2.2.2.2.1項では、いずれもシラノールを原料とする触媒反応の開発や、シラノールの縮合反応の詳細な検討を進めている。本開発項目の成果と合わせることで、ケイ素-酸素結合形成技術の大きな進展に繋がることが期待される。したがって、「構造制御されたレジン構造、ポリシロキサン、オリゴシロキサンの形成に有効な複数の反応経路や触媒候補を選定する」という中間目標達成に大きく貢献する成果であると考えている。

今後の課題の一つとして、不安定で単離困難なシラノールの合成・単離のさらなる検討と、その性質の解明が挙げられる。また、本反応は使用できる溶媒が限定されている点が問題であり、シラノールの新たな合成法の開発にも取り組んでいく予定である。

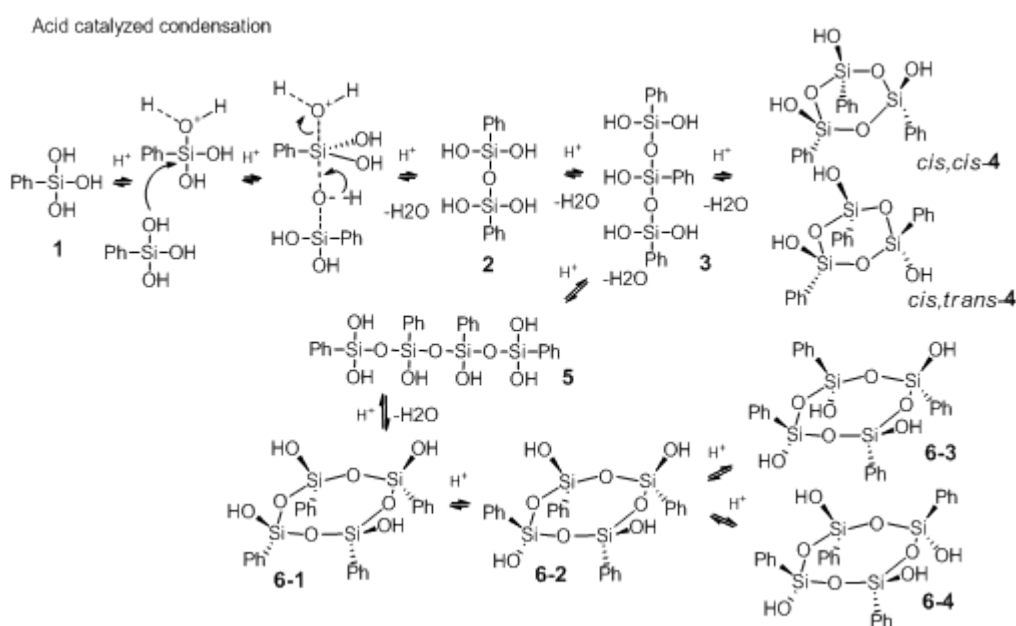
Ⅲ.2.2.2.1.2 酸触媒シラノール脱水縮合反応の初期過程の解明

シラノール間の脱水縮合反応は、シロキサン結合形成反応過程で最も重要な反応であるが現時点でも十分に解明されているとは言い難い状況にある。原因の一つとして、生成するシロキサン化合物においては、一般的に分子が三次元的に成長する事ができ、その骨格構造によって種々の優れた性能が得られるにもかかわらず、その骨格自体を明らかにする方法が極めて限られていることがある。また、シロキサンの合成は、一般的に入手が容易なハロシランやアルコキシシランを原料として加水分解縮合する、いわゆるゾル・ゲル反応によって行われる。しかし、この場合、

段階的な加水分解反応とそれに引き続く縮合反応、さらにはこれら両反応の逆反応が同時に連続して進行するものであるために、反応に関与する分子種が膨大な数になり、そのため中間的に生成する個々の化合物の構造解析や経時変化の追跡が不可能であるという問題がある。これに対し、原料として、加水分解を前もって行いシラノールに変換したものをを用いた場合、生成する分子種はシラノール基のみを末端基として有することになり、これによって解析が容易になるので、比較的low重合状態の分子であれば立体構造を含めて反応系の把握・理解が可能になる。このことは、高度に重合した状態での構造を理解する助けになるものと考えられる。しかし、このようなシラノール類で入手可能なものは限定的である。

置換基を有するトリアルコキシシランのうち工業的に重要なものとしては、メチルトリアルコキシシランとフェニルトリアルコキシシランがある。メチル基を置換基として有するシロキサン類は代表的なものであり、その縮合過程の解明は極めて要求度の高いものであるが、一般に反応性が非常に高いことが知られており、例えばトリオールはこれまで単離されたことはなく、したがってトリオールを用いた研究も極めて限られている。これに対し置換基がフェニル基の場合、条件を制御することでトリオールを合成することができ、しかもこの化合物は結晶として安定である事が知られている。これを原料として用いて縮合プロセスの詳細を解明できれば、従来必ずしも明かに解明されているとは言えないフェニル置換シロキサンの生成プロセスを明らかにできると同時に、より重要性の高いメチル置換シロキサンの生成プロセスや、同じく重要でありながら反応性がさらにも高いために理解が進んでいないシリケート類の形成プロセスの解明手法を構築出来るのではないかと推察される。以上のような考察からフェニルシラントリオールを原料に用いて、その縮合反応を解析することによって、シロキサン生成のプロセスを中間体の立体構造解析を含めて詳細に解明するべく検討を進めた。

その結果、従来非常に不安定で直ちにより高分子量の縮合物に変化するものと考えられていた環状三量体が、50%以上という高い選択率で生成することを明らかにした。この化合物の単離・構造解析に成功するとともに、同時に少量生成する環状四量体についても立体構造を含めて詳細な解析を行い、縮合反応初期過程の全貌を明らかにすることに成功した（図III.2.2.2-3）。



図III.2.2.2.-3. フェニルシラントリオールの縮合経路

これは三官能シリコーンについての初めての例であり、構造制御されたシリコーンレジン形成のための基礎的な知見として重要な成果である。本研究により初めて単離に至った環状三量体は比較的高い反応性を有するため、シルセスキオキサンレジン合成のための新たな原料として興味深い化合物であり、今までに達成できていなかった柔軟でありながら強靱性も備えるといった高性能な材料を製造するための原料としても期待できる。また、この検討を通して、シリコーンの構造解析技術構築のため、種々の反応初期中間体の各種構造データも集積できた。今後は、今回得られた知見をもとに、工業的により広く使われているメチル置換三官能基質や無置換四官能基質の研究へと展開する予定である。

III.2.2.2.1.3 アルコキシシラン等の選択的製造技術

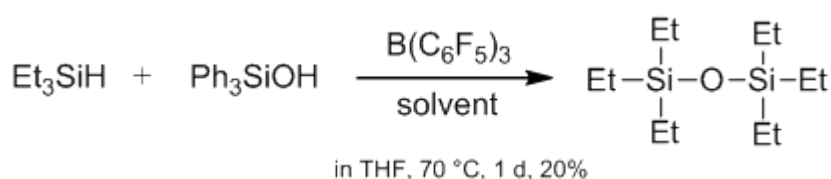
アルコキシシラン類は、有機ケイ素材料の中間原料として極めて重要な化合物である。特に複数のアルコキシ基を有する化合物は重要性が高い。例えば、テトラメトキシシランやテトラエトキシシランはシリコーンレジンの原料であるとともに、ゼオライト等の原料や半導体関連材料の原料として利用されている。また、各種シランカップリング剤も複数のアルコキシ基を有する化合物である。一般に入手できるアルコキシシラン化合物は、同一のアルコキシ基を複数持つものに限られるが、反応性が異なる異種のアルコキシ基を同一ケイ素原子上に導入した化合物は、構造を制御した有機ケイ素材料製造のための原料として有用であると考えられる。しかし、このような化合物を選択的に合成する手法はこれまで知られていない。本開発項目では、テトラメトキシシランやテトラエトキシシラン等の入手容易なアルコキシシラン類を原料に、1つまたは2つのアルコキシ基を選択的に他のアルコキシ基等に変換する手法を開発することを目的に検討を行った。

様々な触媒をスクリーニングした結果、入手容易なメトキシシラン類またはエトキシシラン類をアルコールと反応させることにより、原料中の複数のメトキシ基またはエトキシ基の一部だけを変換して、二種類の異なるアルコキシ基を持つアルコキシシラン類を選択的に合成できる触媒反応系を見出した。原料のアルコキシシラン類やアルコールとしては、C=C結合のような反応性の置換基を含む化合物でも、それらの置換基を残したまま反応させることができた。また、加熱が必要な反応系では、マイクロ波照射により反応が促進されることがわかった。本反応は、精製操作も簡便で、目的のアルコキシシラン類を良好な収率かつ高純度で単離できた。さらに、アルコール以外の求核剤を検討した結果、アシロキシシラン類を良好な収率で与える触媒反応系を見出すとともに、アシロキシシランを利用して、一次配列を制御したトリシロキサンを効率よく合成できることがわかった。

したがって、これらの反応系は構造制御されたオリゴシロキサン合成等への展開も可能で、中間評価の目標は十分達成できたと考える。また、異種のアルコキシ基等を有するシラン類を簡便かつ高選択的に合成できる技術はこれまで例がないもので、アルコキシシラン等を利用した反応開発や材料開発を大幅に促進できる可能性があるという点で大きな意義があると考えられる。今後は、他の求核剤の検討や、生成したアルコキシシラン類、アシロキシシラン類の反応性の検討等を行うことによって、オリゴ/ポリシロキサン合成等への応用を進めていく予定である。

III. 2. 2. 2. 1. 4 構造制御されたオリゴシロキサン形成のための触媒技術開発 (群馬大学)

群馬大学海野研究室では、これまでに構造が高度に規制されたシロキサン類を合成し、その高い物性を明らかにしてきたが、多くの合成において、クロロシランを原料とすることによる問題点が付随していた。すなわち、加水分解による塩化水素の発生は、酸に不安定なシロキサン化合物の分解を招くこと、また、合成中間体としてクロロシラン等を用いる場合は、蒸留や再結晶以外の精製方法がないことなどである。そこで、本開発項目では、不安定なクロロシランに変えて、安定でクロマト精製も可能なヒドロシランに着目し、これを直接シロキサンへと導く反応の開発を行った。特に、高度に構造が規制された化合物の合成には、二種類の原料を高選択的に収率よく反応させる必要がある。



図III. 2. 2. 2-4. ヒドロシランとシラノールとの反応によるケイ素-酸素結合形成反応の例

まず、ヒドロシランとシラノールの脱水素縮合反応が Lewis 酸触媒で進行しないかについて検討した。類似の反応については、図III. 2. 2. 2.-4 に示したように、 $\text{B}(\text{C}_6\text{F}_5)_3$ を触媒とする反応がすでに報告されているが、触媒が高価である、立体障害が大きい系での反応性が低いなどの問題点があり、それらを解決できる触媒を探索した。その結果、ヒドロシランとシラノールの脱水素縮合反応を効率的に進行させる新規 Lewis 酸触媒を見いだした。また、この触媒が、ヒドロシランとメトキシシラン類との脱メタン縮合反応にも有効であることが分かった。また、三脚型 4 座配位子を持つ遷移金属錯体がヒドロシランとアルコールとの脱水素縮合反応の触媒として働くことも見いだした。

また、構造制御されたポリシロキサン、オリゴシロキサン形成に有効な反応経路の開拓において、環状シラノールの高収率合成法を見いだすとともに、環状シラノールを原料にして三環式ラダーシロキサンや 2 種類の置換基を持つかご型シロキサンの合成を達成した。

以上のように、中間目標である「構造制御されたレジン構造、ポリシロキサン、オリゴシロキサンの形成に有効な反応経路や触媒候補を選定する」ことができたと考えている。本反応は比較的安価な触媒を用いて効率よくケイ素-酸素結合を形成でき、立体障害の大きい系にも適用できる。本反応を用いることで、これまでクロロシランを出発物としていたため用いることができなかった置換基を含む化合物の合成や、新規骨格を有する化合物への合成への応用が期待できる。

今後の課題としては、本触媒を用いた反応のさらなる効率向上と適用範囲の拡大を検討するとともに、構造制御されたレジン構造、ポリシロキサン、オリゴシロキサン等の形成に実際に適用していく予定である。

III. 2. 2. 2. 2 シリコーン版クロスカップリング反応

III. 2. 2. 2. 2. 1 遷移金属触媒を用いたシリコーン版クロスカップリング反応

有機ケイ素材料シリコーンは、その骨格がケイ素-酸素結合からなっており、二次元あるいは

三次元の構造を持っている。有機ケイ素材料の性能向上・新機能発現のためには、ケイ素-酸素結合形成を高度に制御し、望みの構造を構築可能な触媒技術の開発が極めて重要である。しかし、現在の製造法は構造制御が困難な加水分解法であり、複雑な混合物になってしまう問題を抱えている。この観点から、近年、クロスカップリング反応に注目が集まっている。クロスカップリング反応としては、遷移金属触媒を用いたシラノールとヒドロシランとの脱水素カップリング反応や Lewis 酸触媒を用いたシロキサンのクロスカップリング反応が開発されてきているが（図 III.2.2.2-5）、シロキサンのクロスカップリング反応は開発の緒に就いたばかりといえ、さらなる研究開発が求められている。そこで、本研究開発項目では、遷移金属触媒を用いた新たなシロキサンのクロスカップリング反応の開発を目的とした。

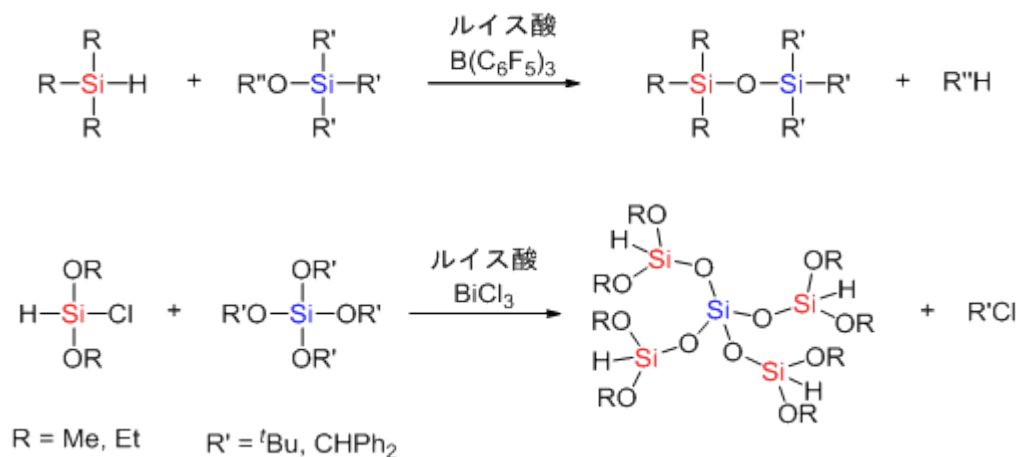


図 III.2.2.2.-5. クロスカップリング反応の例

ベンジルオキシシランとハロゲン化ケイ素をパラジウム触媒存在下反応させることで、クロスカップリング型シロキサンを選択的に合成できることを見出した。本反応は不均一系の遷移金属担持触媒で進行することから、従来の均一系の Lewis 酸触媒系に比較して触媒の除去が容易であることも利点の1つである。

また、シラノールとヒドロシランの脱水素カップリング反応の新規な触媒として卑金属錯体を用いた反応を開発する事に成功した。これまでに報告されている同様の脱水素カップリング反応は Rh、Pt、Pd などの貴金属触媒が用いられていた。

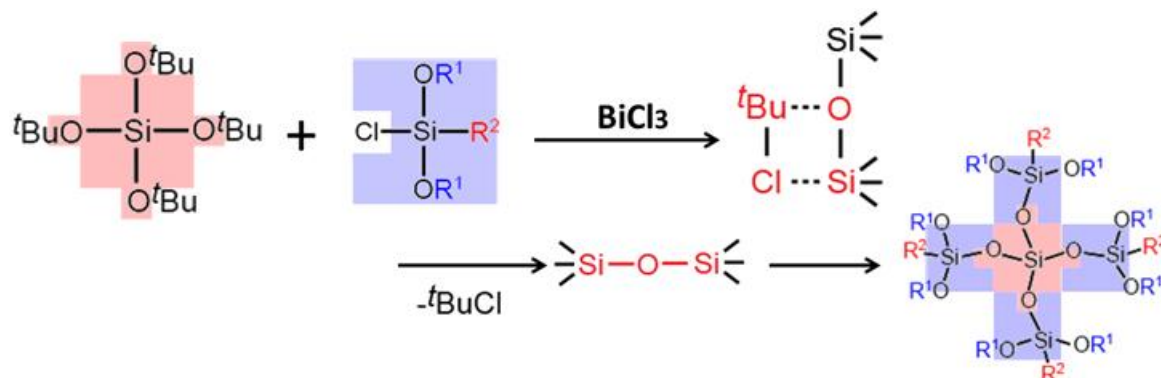
これらは、構造制御されたポリシロキサンやオリゴシロキサンの形成に有用であると考えられ、複数の反応経路と触媒候補の選定という中間目標を十分に達成したと考えている。

Pd/C 触媒による反応を追跡すると、原料間において置換基の交換反応が進行し、選択性が低下することが明らかとなった。今後の課題は、交換反応を抑制し反応の選択性を向上させることである。そのためには、交換反応の機構や条件等を調査するとともに、その抑制法（触媒、溶媒、添加剤の種類等）を探索する必要がある。

一方、卑金属触媒によるヒドロシランとシラノールとの脱水素型クロスカップリング反応においても、ヒドロシランとシラノールの H と OH の交換反応が副反応として起こっていることが明らかとなっており、その抑制が課題である。そのために、触媒や種々の反応条件を探索する必要がある。

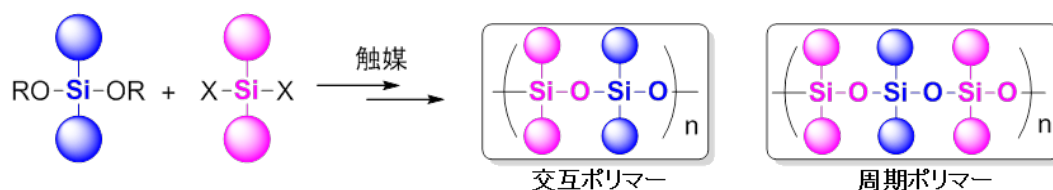
III.2.2.2.2 Lewis 酸触媒を用いたシリコン版クロスカップリング反応（早稲田大学）

本研究開発項目では、クロスカップリング反応による規則構造ポリシロキサンの合成法開発を目的としている。早稲田大学黒田研究室では、Lewis 酸触媒による非水ゾル・ゲル法に基づいたシロキサンオリゴマーの合成を報告している（図III.2.2.2-6）。¹



図III.2.2.2-6 SiOtBu と SiCl のクロスカップリングによるシロキサンオリゴマーの合成

この報告では BiCl₃ を触媒とし、安定なカルボカチオンを放出するアルコキシ基 (*tert*-ブトキシ、ジフェニルメトキシ) を有するアルコキシシランとクロロシランから、シロキサン結合を形成する。この反応は、アルコキシシランとクロロシランのクロスカップリング反応と見なすことができ、出発物質としてジアルコキシジオルガノシランとジクロロジオルガノシランを用いることにより、ポリシロキサンの合成に適用できると考えられる。例えば、ジアルコキシジオルガノシランとジクロロジオルガノシランの有機基をそれぞれ別の有機基とすれば、図III.2.2.2-7 に示した交互ポリマーが形成すると期待できる。また、ジクロロジオルガノシランとして、モノマーではなくダイマー(ジシロキサン)を用いれば、図III.2.2.2-7 に示した周期ポリマーを形成することも期待できる。このように、クロスカップリング反応を用いたポリシロキサン合成では、出発物質の構造を制御することにより形成するポリシロキサンの構造を制御することができると考えられる。



図III.2.2.2-7 クロスカップリング反応による規則構造ポリシロキサンの形成

そこで、クロスカップリング反応による規則構造ポリシロキサンの合成に有効な反応経路・触媒の選定を行うため、(1)触媒の種類及び量、(2)ジアルコキシジオルガノシランのアルコキシ基の種類について検討した。

ジ-*tert*-ブトキシジメチルシランとジクロロジメチルシランとのクロスカップリング反応を複数の Lewis 酸触媒を用いて検討し、Lewis 酸触媒の種類が反応に与える影響を調査した。その結果、BiCl₃ がクロスカップリング反応の触媒として適していることが明らかとなった。また、Lewis 酸触媒として BiCl₃ を用いて Lewis 酸触媒の量がクロスカップリング反応に与える影響を調査し

た。その結果、触媒量が 1 mol%及び 0.1 mol%どちらの場合においても前駆体の消失、副生成物である $t\text{-BuCl}$ の生成及びクロスカップリング反応の進行が確認された。また、1 mol%と 0.1 mol%で反応速度を比較したところ、1 mol%、0.1 mol%ともに同じ反応時間(24 h)において前駆体が全て反応により消失していた。以上の結果から、クロスカップリング反応は Lewis 酸触媒の量が Si に対して 0.1 mol%でも十分に進行することが明らかになった。

アルコキシ基の種類についての検討に関しては、ジアルコキシジオルガノシランを用いて調査した。その結果より、アルコキシ基の種類がクロスカップリング反応によるポリシロキサンの形成に大きく影響を与えることを明らかにした。また、ポリシロキサンの原料には *tert*-ブトキシ基を有するアルコキシシランが適していることを明らかにした。ただし、クロスカップリング反応に官能基交換反応が競合してしまうため、規則構造ポリシロキサンの形成を妨げてしまう。そのため原料の有機基や反応条件などを検討し、官能基交換反応の抑制が必要となることが明らかとなった。

以上のように、構造制御されたポリシロキサンの形成に有効な複数の反応経路や触媒候補を選定でき、当初想定外の出発物質も提案できたことから、中間目標は達成できたと考えている。今後の課題としては、規則構造ポリシロキサンの合成における環化の抑制が挙げられる。また、合成に成功したシロキサンオリゴマーを用いた規則構造ポリシロキサンの合成も検討する予定である。

Ⅲ.2.2.3 ケイ素-ケイ素結合形成技術

図 2.2.3-1 にケイ素-ケイ素結合形成技術に関する平成 24-26 年度計画を示した。なお、「原料（ヒドロシラン）の安価な製造方法」に関しては、①-2 の一部と共通課題として検討しており、成果については、Ⅲ.2.1.2.1 項に記載した。

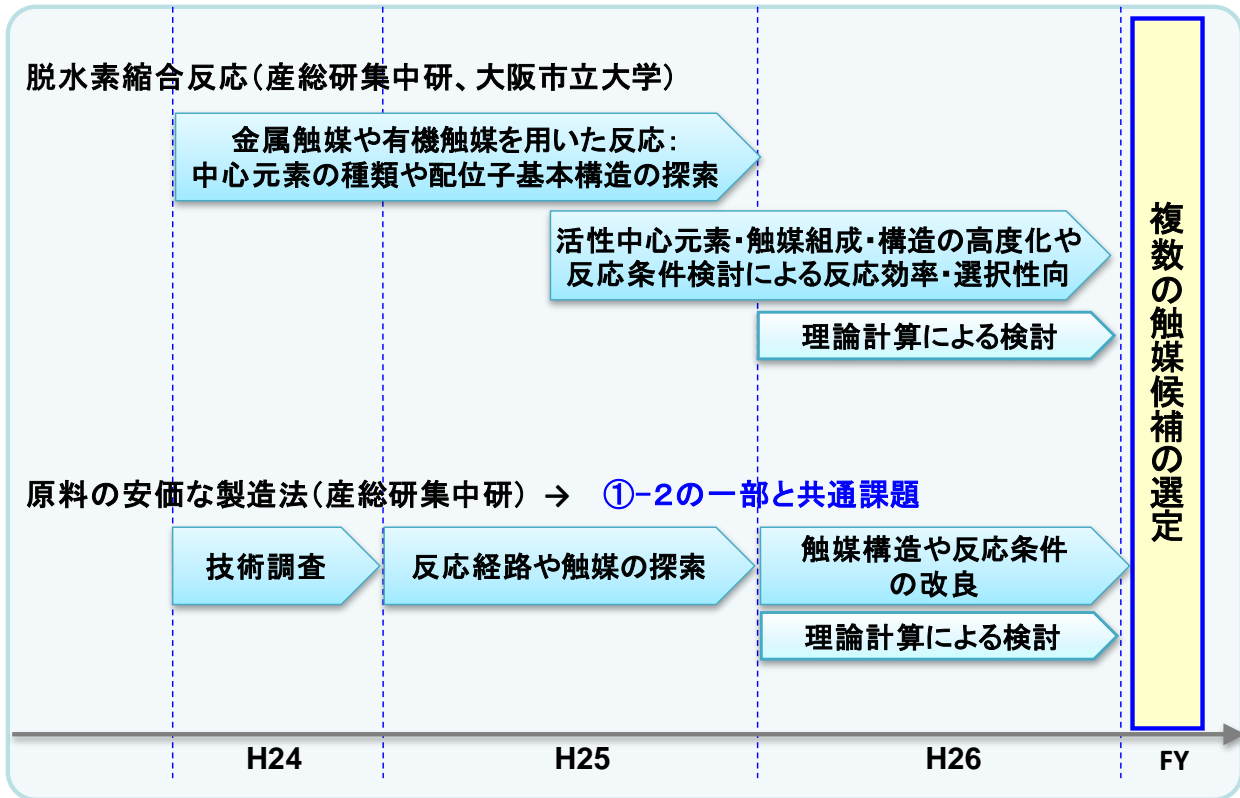


図 2.2.3-1 ケイ素-ケイ素結合形成技術に関する平成 24-26 年度計画

Ⅲ.2.2.3.1 脱水素縮合反応によるジシランの製造

ケイ素-ケイ素結合を有する化合物のひとつであるジシランは、現在主流の半導体原料であるモノシランに比べ、薄膜シリコンの低温・高速成膜性に優れた材料である。しかし、モノシランと比べて非常に高価であり、世の中ではまだ広く使われていない。本開発項目では、ジシランをより安価に製造するために、安価な原料であるモノシランの脱水素カップリングによりジシランを製造することを目指し検討を行った。

原料のモノシラン、生成物のジシランともに気体であるため、反応装置は、固定床の気相反応装置を設計することとした。これらのシラン類は危険性の高い物質であることから、ガス検知器に連動した自動閉止弁等の安全装置について十分考慮した反応装置の設計、製作を実施し、試運転により不具合が無いことを確認した。

製作した反応装置を用いて、種々の固体触媒をスクリーニングした結果、遷移金属または遷移金属化合物を用いることで、モノシランの脱水素反応が進行し、固体状ポリシランが生成することがわかったが、ジシランはほとんど生成しなかった。また、ある種の塩化物系触媒を用いたときに、ジシランは得られなかったが、モノクロロシランが高収率、高選択率で得られることを見いだした。この知見に関しては特許出願を行った。

触媒探索を継続した結果、ジシランを生成する触媒を見いだした。さらに、触媒構造等を種々

検討し、無触媒（400℃以上でない）とジシランは生成しない）と比較して大幅に低い反応温度かつ高収率でジシランを生成する触媒を見いだした。本成果に関しては特許出願を行った。

実用化のためには、ジシランの収率の更なる向上や触媒の高寿命化が必要であり、触媒改良検討を継続する予定である。

III.2.2.3.2 鉄錯体触媒による脱水素縮合反応（大阪市立大学）

ケイ素-ケイ素結合をもつ化合物は天然には存在しないが、この結合を持つ化合物は、有機化合物にはない物性を有しており、特に電子材料や光機能材料などとして期待されている。しかし、ケイ素-ケイ素結合形成技術は極めて限られており、合成可能な構造も限定されている。

通常用いられる方法は、クロロシランをナトリウム等の金属を用いて還元的にカップリングさせるWurtz-Fittig反応に限定されていると言って良く、この合成法では構造制御はほとんどできない。また、主鎖がケイ素-ケイ素結合からなる高分子化合物であるポリシランは、特に電子材料等への利用が期待されているが、Wurtz-Fittig反応では塩素化合物やナトリウム塩などの混入をさけることは難しい。

ケイ素-ケイ素結合を形成するもう一つの方法は触媒を用いたヒドロシランの脱水素カップリング反応である。この反応によりケイ素-ケイ素結合を生成したのは、尾島らによるロジウム触媒を用いた報告が最初である。脱水素カップリング法がポリシラン合成に用いられるようになったのは、Harrodらによりチタン錯体がフェニルシラン（PhSiH₃）の重合に有効であることが見出されて以来である。その後、4族遷移金属を中心とした触媒による研究が行われてきたが、その多くはフェニルシランからの直鎖状ポリシラン(PhSiH)_n合成に関するものに限定されている。また、これまでの触媒では高分子量体の合成が困難であるという問題も抱えている。

本開発項目では、卑金属の代表である鉄錯体を触媒として用いたヒドロシランの脱水素カップリング反応の開発を検討した。その結果、特定の配位子を有する鉄錯体が一級シランに対して触媒作用（TON = 45）を示すことを見出した。

今後は反応条件の検討、ならびに最適な配位子の検討を行い、高い触媒活性を示す系を探索していく予定である。

Ⅲ.2.2.4 触媒固定化技術（実施事項なし）

Ⅲ.3. 知的財産権の取得と成果の普及

Ⅲ.3.1. 特許出願、論文、外部発表の状況

表Ⅲ.3.1-1 に特許、論文、外部発表等の件数（内訳）を示した。初年度である平成 24 年度は特許出願、外部発表共に数が少なかったが、平成 25 年度以降、特許出願と外部発表の件数は確実に増加している。特許出願を優先的に行っているために論文発表は少ないが、この先、論文数も増加していくものと思われる。

平成 26 年 5 月 20 日に「砂の主成分であるシリカからケイ素化学産業の基幹原料を効率的に合成—有機ケイ素原料の省エネルギー・低コスト製造に新たな道—」というタイトルで NEDO と同時プレス発表を行った。この発表内容は、新聞記事や WEB でも取り上げられ、いくつかの会社から問い合わせがあり反響が大きかった。

表Ⅲ.3.1-1 特許、論文、外部発表等の件数（内訳）

年度	特許出願			論文		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
H24 年度	1	0	0	0	0	4	0	
H25 年度	7	0	1	0	0	11	0	
H26 年度	12	0	0	2	0	14	12	

(※Patent Cooperation Treaty：特許協力条約)

平成 26 年 9 月 20 日現在

Ⅲ.3.2. 成果の普及

1) 新聞報道

平成 26 年 5 月 20 日に NEDO と同時にプレス発表を行ったことを受けて、5 月 22 日付け化学工業日報から「テトラアルコキシシラン 1 段階で高効率合成 金属ケイ素経由せず」、同日付け日刊産業新聞から「NEDO 有機ケイ素原料 シリカから直接合成 省エネ・低コスト化推進」、同日付けゴムタイムスから「NEDO 有機ケイ素材料の原料の効率的製造技術を開発」、5 月 23 日付け日刊工業新聞から「有機ケイ素原料安く合成 シリカから 1 段階で」の記事が掲載された。また、「工業材料」（日刊工業新聞刊）2014 年 8 月号において、「産総研、有機ケイ素原料をシリカから一段階で安く合成」として紹介された。

その他、紙面には掲載されなかったものの、WEB 版の記事として、J-Net21、PTRONICS、環境ビジネスオンライン、マイナビニュース、サイエンスポータル、つくばサイエンスニュースにおいて、本プレス発表の内容が紹介された。

2) 座談会広告記事掲載

ケイ素プロジェクトを広く知ってもらうために、佐藤一彦プロジェクトリーダーが経済産業省茂木正製造産業局化学課長、三菱化学浦田尚男執行役員経営戦略部門長と「「脱石油依存」の可能性秘める触媒技術」に関して座談会を行った。この内容は平成 25 年 10 月 22 日の日経産業新聞の広告記事として掲載された。

3) ホームページでの情報発信

産業技術総合研究所触媒化学融合研究センターのホームページの中にケイ素プロジェクトのホームページを作成し (<http://irc3.aist.go.jp/silicon>)、ケイ素プロジェクトの概要について紹介している。また、現在、研究成果等を含めたさらに詳細なホームページの準備を進めており、平成 26 年 9 月中の公開を予定している。

4) 学会誌でのプロジェクト紹介

本プロジェクトが開始するにあたり、平成 24 年 10 月号ケイ素化学協会誌のトピックス記事において、佐藤一彦プロジェクトリーダー・島田茂サブプロジェクトリーダーによる「昨日今日そして明日のケイ素化学」と題したプロジェクトの意義についての紹介記事が掲載された。

Ⅲ.4. 最終目標の達成の可能性

表Ⅲ.4-1に各研究項目について最終目標の達成の可能性をまとめた。①「砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発」に関しては、すでに現在までの成果によりシリカからの反応において、テトラアルコキシシランの製造における反応経路や触媒についての目処がついた。したがって、このまま研究を推進していけば最終目標の達成は可能である。一方、メチルシラン等の製造においては、工業的実施可能性のある反応系は見つかっておらず、最終目標達成のためには候補反応を見いだすためにブレイクスルーとなる反応系の発見が必要である。②「有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発」に関しては、選択的アルコキシシラン製造技術・シラノール製造法などに目処をつけており、今後具体的な部材候補へ適応させることにより目標達成が可能であると考えられる。一方、モノシランからジシランの製造においては、反応経路と触媒候補を既に見いだしており、今後の研究進捗状況により十分最終目標の達成が可能であると思われる。

	最終目標(平成33年度末)	達成見通し
① 砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発	<ul style="list-style-type: none"> ・1kgスケールでケイ砂の反応率50%、有機ケイ素原料の選択率50%を達成する。 ・触媒反応の実用化に向けて必要となるプロセス要素技術を特定し、その工業的実施可能性を1kgスケールで検証する。 	<ul style="list-style-type: none"> ・テトラアルコキシシランに関しては、反応経路・触媒に目処がついており目標達成が可能。 ・メチルシラン等の製造に関しては、候補反応を見いだすためのブレイクスルーが必要。
② 有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素製造プロセス技術開発	<ul style="list-style-type: none"> ・1kgスケールで有機ケイ素原料の反応率80%、有機ケイ素部材の選択率80%を達成する。 ・有機ケイ素部材中の残留触媒の低減を達成する。 ・有機ケイ素部材の構造制御技術を確立する。 	<ul style="list-style-type: none"> ・選択的アルコキシシラン製造技術・シラノール製造法などに目処をつけており、今後具体的な部材候補へ適用することにより、目標達成が可能と見込まれる。 ・ジシランの製造に関して、反応経路と触媒候補を見いだしており、十分目標達成が見込まれる。

表Ⅲ.4-1. 最終目標の達成の可能性

IV. 実用化に向けての見通し及び取り組みについて

本プロジェクトにおける「実用化」の考え方は以下の通りである。

当該研究開発で開発された技術によるサンプルの顧客への提供が開始されることである。

なお、ここでの「サンプル」とは、製法が確立しており顧客の要求があれば繰り返し提供できるものであり、一回の供給のみが可能な「試作品」とは異なる。

IV.1 成果の実用化の見通し

これまでの研究開発の状況をもとに、主だったものについて成果の実用化の見通しを以下に記載する（図IV.1-1）。

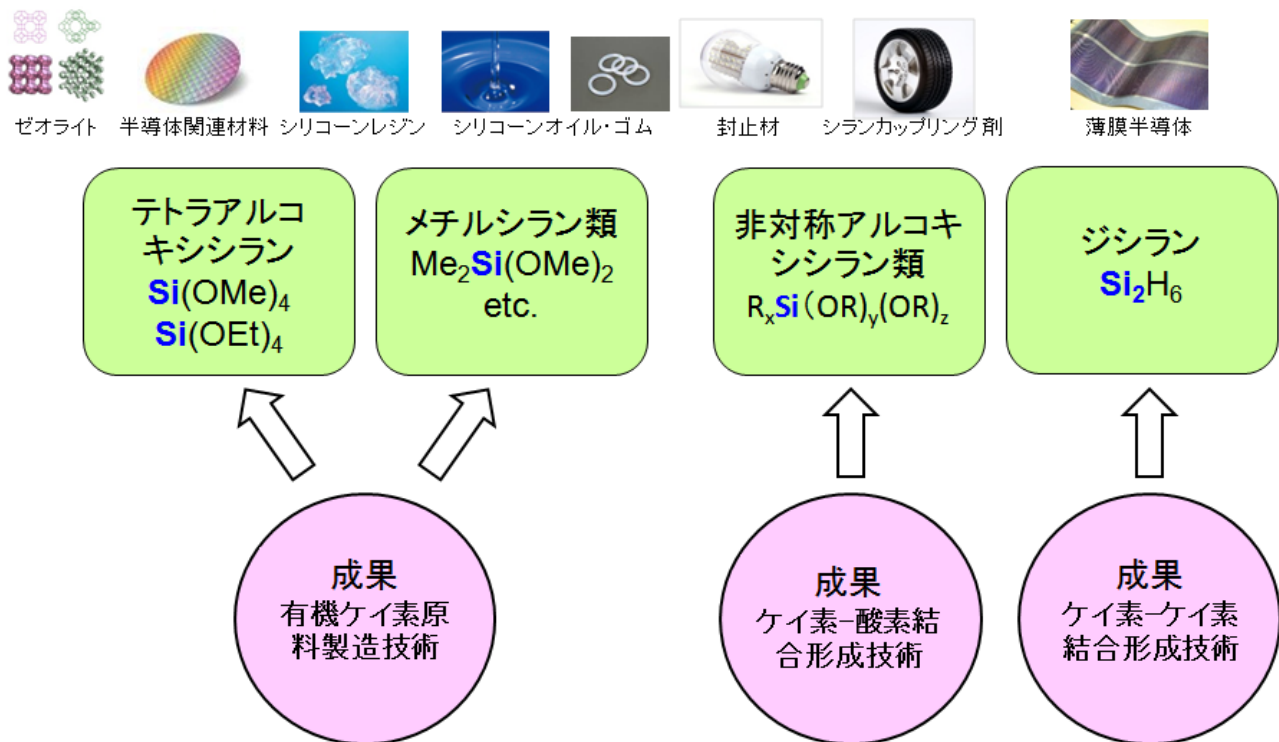
テトラメトキシシランやテトラエトキシシラン等のテトラアルコキシシラン類は、シリコーンレジン原料として重要であるとともに、高純度合成シリカや電子デバイス用の保護膜、絶縁膜の原料としても有用であり、幅広い産業分野で使用されている重要なケイ素化合物である。現在、これらテトラアルコキシシラン類は、工業的には天然のケイ石を出発原料に、大量の電気エネルギーを用いて製造される金属ケイ素を経由して製造されている。そのため典型的なエネルギー多消費プロセスであり、テトラアルコキシシラン類のコスト高の一因ともなっている。本研究プロジェクトのうち、有機ケイ素原料製造技術において開発されるシリカから直接テトラアルコキシシラン類を製造するプロセスは、金属ケイ素の製造に比べ大幅に低い温度で実施可能であり、使用エネルギーを大きく低減することが可能である。そのため、安価に製品を供給することができるので、最終製品の価格も大幅に安くなり、さらなる製品の普及にも貢献できる。現在、テトラアルコキシシランの製造における反応経路や触媒についての目処がついたので、さらなる開発を続けてスケールアップにつなげる。最終年度までに1kgで所定の技術レベルを確立することを目標として掲げているが、小スケールながら反応率・選択率の数値は達成していることから、この最終目標は前倒しで達成できる可能性があり、その後スケールアップ等の検討を数年間実施し、実用化を達成する。

メチルシラン類は、シリコーン工業の根幹をなす原料であるが、現行法を置き換える手法の開発は最難関の課題である。現在、メチルシラン類の製造は金属ケイ素と塩化メチルとの反応により行われており、金属ケイ素を経由することから典型的なエネルギー多消費プロセスとなっている。本プロジェクトでは、現行法に比べ大幅な省エネルギープロセスの開発を目指している。現在、工業的実施可能性のある反応系が見つかっていないので、さらなる開発を続け、最終年度までには当初の目標通り1kgで所定の技術レベルを確立することを目指している。その後スケールアップ等の検討を数年間実施し、実用化を達成する。

一方、ケイ素-酸素結合形成技術において開発される非対称アルコキシシラン類は、封止剤の原料やシランカップリング剤等としての用途が期待される。特に、非対称アルコキシシラン類には従来開発されていなかった化合物群が多く含まれ、高機能を有する新規物質の創成につながる。すなわち、これらの化合物を原料として用いることにより、構造制御された新たなシリコーン類を製造することが可能となり、従来製品の性質を凌駕できる新規材料の開発につながることを期待される。現在、選択的非対称アルコキシシラン製造技術に目処をつけており、今後具体的な部材候補へ適応させることを検討していく。その後、最終年度までに1kgスケールで所定の数値

目標を達成し、その後スケールアップ等の検討を数年間実施し、実用化を達成する。

ケイ素-ケイ素結合形成技術において開発されるジシラン類は、現在、薄膜半導体原料の主流となっているモノシランに比べ、薄膜シリコンの低温・高速成膜性に優れた材料として期待されている原料である。しかし、ジシランはモノシランに比べ非常に高価であり、世の中ではまだ広く使われていないのが現状である。本プロジェクトでは、安価な原料であるモノシランを用いた脱水素カップリングによるジシランの製造をめざしている。この技術開発が成功すれば、ジシランの安価な供給が実現でき、高性能薄膜半導体を安価に製造することができるようになる。これまでの研究開発により、反応経路と触媒候補を既に見いだしており、最終年度までに1kgスケールで所定の数値目標を達成し、その後スケールアップ等の検討を数年間実施し、実用化を達成する。



図IV.1-1 研究開発成果の実用化の見通し

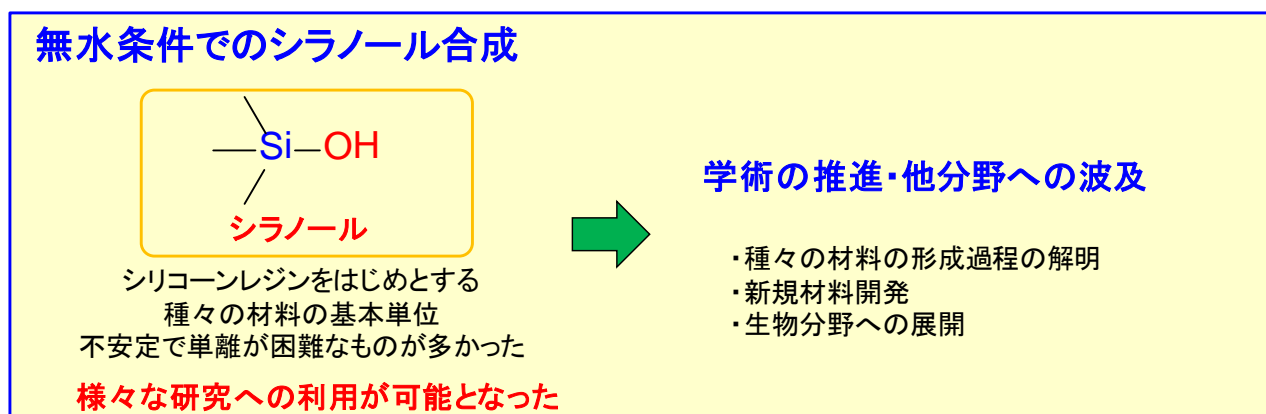
IV.2 実用化に向けた具体的取り組み

Ⅲ項で述べたように、本プロジェクトで開発を進めている有機ケイ素原料の新規製造技術や有機ケイ素部材製造法の開発は多岐に渡っている。一部の研究開発課題においては、一歩進んで既に実用化が見えてきたレベルまで進んでいる状況にあり、このような技術に関しては、企業側の強い要望があるなどの条件が整えば、プロジェクトの終了を待たずに本プロジェクトから離れ、別の枠組みで実用化に向けての独自の研究を進めることも視野に入れる。他の研究開発課題においては、プロジェクト終了時まで最終目標を達成できるよう、プロジェクトで設定したスケジュールに従い着々と技術開発を進めていくこととしている。

IV.3 波及効果

1) 学術の推進・他分野への波及

本プロジェクトの研究開発において、研究開発項目②「有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発」の中の「ケイ素-酸素結合を選択的に形成できる触媒技術」において、無水条件でのシラノール合成に成功した。この技術で製造可能なシラノール類はシリコーンをはじめとする様々な材料のの基本単位となる重要な化合物である。しかし、通常シラノール類は含水条件で合成されるため重合しやすく、単離が困難な化合物が多い。そのため、純粋な化合物としての物性はあまり知られておらず、詳細な反応性も知られていなかった。したがって、今回無水条件下でシラノール類を合成し単離する技術に目処が立ったことにより、これまでわからなかったシラノール類の物性に関する情報が得られるだけでなく、様々な材料化学研究への展開が可能であり、学術の推進・他分野への波及効果が大きいと考えている（図IV.3-1）。



図IV.3-1 波及効果の例

2) 人材育成

本プロジェクトは、企業から集中研に出向している研究者との日常的な共同研究を通して、産総研所属の研究員・博士研究員・テクニカルスタッフ等の産業人材育成に大きく貢献している。

「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（革新的触媒）」 実施計画

平成24年5月30日
産業技術環境局
製造産業局

1. 未来開拓研究プロジェクトの目標及びその研究開発の内容

(1) 研究開発の概要

化学産業は我が国の一大産業であり、高い国際競争力を誇る製品を多数生み出している。一方で、同産業は化石資源を大量に消費し、二酸化炭素排出量も多い。地球温暖化が懸念され、輸入に頼る石油の価格上昇や枯渇リスクに直面する中、化学品製造の革新的イノベーションの実現により、こうした課題を乗り越えていくことが急務となっている。

太陽エネルギーにより水から水素を製造する光触媒のエネルギー変換効率を30倍以上に飛躍的に向上させることにより、二酸化炭素と水を原料に太陽エネルギーでプラスチック原料等基幹化学品の製造が可能となる。これにより、2030年頃にはオレフィンの原料であるナフサを17%程度削減できると推測される。また、ケイ素に適用可能な新たな触媒を開発することにより、有機ケイ素部材の高性能化等が可能となり、これら高機能有機ケイ素部材を活用した次世代LED、有機EL、太陽電池等の高付加価値で省エネに大きく寄与する製品の市場拡大や新市場の創造に大きく貢献する。

本プロジェクトでは、無尽蔵な太陽エネルギーを利用して水等の分解により得られる水素等（以下「ソーラー水素等」という。）を高効率で製造する「革新的光触媒」や「分離膜」等を研究開発し、また水素と二酸化炭素等からプラスチック原料等基幹化学品を製造する「合成触媒」及び「反応プロセス」等の研究開発を行うことにより、将来にわたる基幹化学品の持続的な確保を実現する。また、金属ケイ素を経ない砂（ケイ砂）からの有機ケイ素原料や、同原料からの高機能有機ケイ素部材を製造する「触媒」等の研究開発を行うことにより、有機ケイ素部材の高性能化や製造プロセスの省エネ化（低コスト化）による高機能有機ケイ素部材（次世代LED封止材、有機EL封止材、太陽電池用部材等）を活用した製品の市場拡大等を実現する。

(2) 各研究開発テーマの内容

①二酸化炭素原料化基幹化学品製造プロセス技術開発

(i) ソーラー水素等製造プロセス技術開発（革新的光触媒）

「水」又は「水と二酸化炭素」を原料に太陽エネルギーによりソーラー水素等を製造することを目的に、光触媒や助触媒、水素分離膜、及びこれらのモジュール化技術等の研究開発を行う。

具体的には、光触媒のバンド準位の制御による吸収波長の長波長化や欠陥の少ない触媒の合成、光触媒と助触媒の界面の設計等の研究開発を行い、スラリー型、電極型及びそれらのハイブリッド型のモジュールを想定し、大表面積と物質拡散性を両立するモジュールの設計等を行う。この際、大規模な展開を考慮して希少金属を使用しない元素戦略的な触媒設計を目指す。また、水素分離膜については、より小さい開孔径を有する薄膜の生成機構の解明やそれを踏まえた薄膜合成法等の研究開発や水素を安全に分離可能なモジュールの設計等を行う。

これにより、後述(ii)の二酸化炭素資源化プロセスに必要な不可欠なソーラー水素等を低コストで安全に製造するプロセス基盤を確立する。

(ii) 二酸化炭素資源化プロセス技術開発（プラスチック原料等基幹化学品への変換触媒）

(i)で得られるソーラー水素等を原料として、プラスチック原料等基幹化学品を高選択的に製造することを目的に、合成触媒及び反応プロセスの研究開発、小型パイロットでの実証試験等を行う。

具体的には、触媒の組成探索による炭素数2～4のオレフィン選択性の高い合成触媒の研究開発やプロセスのコストシミュレーションによる反応プロセスの最適化の検討及び小型パイロットでの連続運転による触媒寿命の長期化等の検証等を行う。

これにより、(i)の研究開発と組み合わせることで、石油資源に依存しない二酸化炭素と水を原料とした太陽エネルギーによるプラスチック原料等の基幹化学品を製造するプロセス基盤を確立する。

②有機ケイ素機能性化学品製造プロセス技術開発

(i) 砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発

砂から金属ケイ素を経由せずに有機ケイ素原料を製造することを目的に、触媒等の研究開発を行う。

具体的には、ケイ砂を効率的に反応させるための処理方法の検討や不純物の影響の解析等、触媒の中心元素の種類や配位子構造の検討等を行う。更に、温度や反応媒体等の反応条件についても検討し、触媒反応のプロセス化に向けた要素技術の検証等を行う。これらを複数の反応経路を想定して実施する。

これにより、有機ケイ素原料を金属ケイ素を経ずに製造する触媒反応プロセス基盤を確立する。

(ii) 有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発

有機ケイ素原料から高機能有機ケイ素部材を製造することを目的に、現行の白金触媒を代替する非金属系等の触媒や有機ケイ素部材の高度な構造制御を可能とする触媒等の研究開発を行う。

具体的には、複数の高機能有機ケイ素部材を想定し、触媒の活性中心元素や配位子構造の検討等を行い、更に触媒反応のシミュレーションを実施する等、触媒の高活性化や反応の高効率化を検討する。また、有機ケイ素部材中の残留触媒を低減するため、触媒の固定化等を行う他、得られる有機ケイ素部材の構造解析等を行う。

これにより高機能有機ケイ素部材の性能向上や製造プロセスの省エネ化（低コスト化）を可能とするプロセス基盤を確立する。

(3) 各研究開発テーマの目標

①二酸化炭素原料化基幹化学品製造プロセス技術開発

(i) ソーラー水素等製造プロセス技術開発（革新的光触媒）

【中間目標（26年度末）】

光触媒等の変換効率（太陽エネルギーが水素等の生成に寄与する率）1%を達成する。

光触媒等の変換効率を最大限引き出すモジュール化に向けた技術課題の抽出を行う。

水素と窒素系で高い透過係数を持つ複数の分離膜を開発し、水素・酸素分離膜候補を抽出する。

【中間目標（28年度末）】

光触媒等の変換効率3%を達成する。

光触媒等のモジュール化の個別要素技術を確立する。

水素・酸素系での分離膜性能を確認し、分離膜を確定する。また、安全に分

離できるモジュールの仕様を明確にする。

【中間目標（31年度末）】

光触媒等の変換効率7%を達成する。

小型バッチ式で変換効率を最大限引き出すモジュールを設計する。

モジュールベースで水素を安全に分離する技術を確立する。

【最終目標（33年度末）】

光触媒等の変換効率10%（現在の30倍）を達成する。

小型フロー式で変換効率を最大限引き出し、長期耐久性も兼ね備えたモジュールを設計する。

水素を安全に分離可能な長期耐久性も兼ね備えたモジュールを設計する。

(ii) 二酸化炭素資源化プロセス技術開発（プラスチック原料等基幹化学品への変換触媒）

【中間目標（26年度末）】

投入された水素又は二酸化炭素由来の炭素のオレフィンへの導入率として70%（ラボレベル）を達成する。

プロセスのコストシミュレーションによる反応プロセスの最適化を行い、小型パイロットの仕様を確定する。

【最終目標（28年度末）】

投入された水素又は二酸化炭素由来の炭素のオレフィンへの導入率として80%（ラボレベル）を達成する。

小型パイロット規模でのプロセスを確立する。

②有機ケイ素機能性化学品製造プロセス技術開発

(i) 砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発

【中間目標（26年度末）】

複数の反応経路とそれぞれの反応における触媒の中心元素の種類や配位子構造等について複数の候補を選定する。

【中間目標（28年度末）】

ケイ砂を原料に用いる際の技術課題を抽出する。

反応経路と触媒について有望な組合せを絞り込む。

【中間目標（31年度末）】

ケイ砂の反応率50%、有機ケイ素原料の選択率50%を達成すると見込まれる反応経路と触媒を選定し、温度や反応媒体等の最適な反応条件について指標を得る。

原料に用いるケイ砂の処理方法等を選定する。

【最終目標（33年度末）】

1kgスケールでケイ砂の反応率50%、有機ケイ素原料の選択率50%を達成する。

触媒反応の実用化に向けて必要となるプロセス要素技術を特定し、その工業的実施可能性を1kgスケールで検証する。

(ii) 有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発

【中間目標（26年度末）】

複数の高機能有機ケイ素部材を想定した各種反応に用いられる触媒の活性中心元素や配位子構造等について複数の候補を選定する。

【中間目標（28年度末）】

反応経路と触媒について有望な組合せを絞り込む。

【中間目標（31年度末）】

有機ケイ素原料の反応率80%、有機ケイ素部材の選択率80%を達成すると見込まれる反応経路と触媒を選定し、温度や反応媒体等の最適な反応条件について指標を得る。

【最終目標（33年度末）】

1kgスケールで有機ケイ素原料の反応率80%、有機ケイ素部材の選択率80%を達成する。

有機ケイ素部材中の残留触媒の低減を達成する。

有機ケイ素部材の構造制御技術を確立する。

2. 未来開拓研究プロジェクトの成果を事業化するための取組その他未来開拓研究プロジェクトの内容に関する事項

(1) 推進体制の構築

1. (2)に掲げる各研究開発テーマに関する研究開発及び事業化の段階において優れた技術、知見を有し、相互補完的な関係にある企業、大学、公的研究機関等から構成される事業推進体制（以下「推進体制」という。）を構築する。推進体制を構成する企業等の選定に当たっては公募を実施し、採択決定後、参加企業等がそれぞれどのような役割を担うのか、他の参加企業等とどのように連携するのか分かるよう、体制図を定めることを求める。

(2) 推進体制の効果的な運用

①知的財産権の取扱い

委託研究開発の成果に関わる知的財産権については、「産業技術力強化法（平成12年4月19日法律第44号）」第19条及び同法施行令第11条の規定等に基づき、同法令を遵守することを条件に原則として、委託先に帰属させることとする。

また、推進体制を構成する企業等が相互に連携しつつ、研究開発及び事業化を効果的に推進するために、知的財産管理規程等を定めることを求める。

②大学における人材の流動化等に係る取組

大学の研究者の企業等への出向を容易にするための取組や守秘義務を課した形での大学院生やポスドク等のプロジェクトの参加などの本プロジェクトを活用した実践的人材の育成への取組を促すこととする。また、大学側も、これらの取組を促進する方策について検討するものとする。

(3) 関連独立行政法人の協力

①新エネルギー・産業技術総合開発機構の協力

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。）では本プロジェクトに関連する光触媒や化学プロセス関連の各種技術開発を実施してきており、当該分野での実施主体、事業内容に係る知見、ノウハウ等を有することから、経済産業省は、必要に応じて、NEDOに対して協力を求めるものとする。協力を求める場合、具体的には、事業者公募時の採択審査における審査委員の選定、実施計画に沿った具体的な研究計画等の策定、推進体制の構築、進捗状況の把握・分析等を行うに際し、支援を求めるものとする。

②産業技術総合研究所の協力

独立行政法人産業技術総合研究所では、光触媒による水分解、二酸化炭素の化学変換、ケイ素系高分子材料等に関する研究開発を実施してきており、本プロジェクトに関する技術的知見等を有することから協力を求めるものとする。また、技術的な難易度が高く、本プロジェクトでは対象としていない、二酸化炭素及びケイ素等から機能性化学品を製造する技術について、将来のプロジェクト化に向けた触媒・プロセス技術に関する基盤研究を行うこととしているが、その成果について定期的に意見交換を行い、本プロジェクトの研究開発又は事業化の方向性を検討する等連携を行うものとする。

③工業所有権情報・研修館の協力

本プロジェクトにおける知的財産に関する戦略策定や管理方法の検討に当たって、必要に応じて、独立行政法人工業所有権情報・研修館に知財プロデューサーの派遣を求めることとする。

(4) 他省庁の施策との連携体制の構築

経済産業省は、必要に応じて、文部科学省の「元素戦略プロジェクト」や独立行政法人科学技術振興機構の「先端的低炭素化技術開発」など基礎研究及び基盤的研究開発の実施体制と緊密に連携するため、各プロジェクトの統括者、主要参加企業、大学等の責任者、所管省庁等の課室長等から構成される連携体制を構築する。当該連携体制では、プロジェクト間の、事業計画の調整、成果の共有や取扱いの調整、設備の共用や研究人材交流の促進等について協議を行うものとする。

(5) その他事業化促進の取組

研究開発段階から新技術の安全性・性能に係る評価基準の策定、当該基準に基づく認証の活用、知的基盤の質的向上を検討する等、研究開発から事業化まで一貫した推進体制を構築する。

また、事業戦略と一体となった国際標準化を進めるとともに、諸外国に先んじて国際標準を獲得するため、業界団体等の内部でのコンセンサス形成を必須としない「トップスタンダード制度」を活用する等、国際標準提案に係る戦略的かつ迅速な国際標準獲得等のための体制を整備する。

3. その他実施計画に関する事項

(1) 担当課

本実施計画の作成責任課は、製造産業局化学課及び産業技術環境局研究開発課である。

(2) 実施計画の改定

①随時の見直し

経済産業省は、関連技術や市場の動向を随時把握し、最新の技術や知見を取り込むこととし、必要に応じて、実施計画に掲げられた研究開発プロジェクトの目標や研究開発の内容を変更するものとする。

②中間評価を踏まえた見直し

経済産業省は、外部有識者による評価を原則として平成26年度、28年度、31年度に実施することとし、内外の研究開発動向の変化、社会・経済情勢の変化、政策動向の変化その他の情勢の変化を踏まえ、本プロジェクトの必要性、目的、目標、研究開発の内容、推進体制等について見直しを行い、必要に応じて、実施計画又は基本方針の別添を改定するものとする。

(3) 実施計画の改定履歴

平成24年5月、制定。

「有機ケイ素機能性化学品製造プロセス技術開発」基本計画

環境部

1. 研究開発の目的・目標・内容

(1) 研究開発の目的

① 政策的な重要性

化学産業は我が国の一大産業であり、高い国際競争力を誇る製品を多数生み出している。一方で、同産業は化石資源を大量に消費し、二酸化炭素（CO₂）排出量も多い。地球温暖化が懸念され、輸入に頼る石油の価格上昇や枯渇リスクに直面する中、化学品製造の革新的イノベーションの実現により、こうした課題を乗り越えていくことが急務となっている。

本プロジェクトは、エネルギー多消費の既存の有機ケイ素原料の製造プロセスに代わる新たな革新的省エネプロセスと高機能な有機ケイ素部材の製造プロセスを実現するための触媒技術及び触媒プロセス技術を開発するものであり、有機ケイ素工業のエネルギー制約を克服するためには不可欠な技術開発である。さらには、本技術の確立は、我が国の有機ケイ素工業の国際的競争力の強化につながるものである。

本プロジェクトは、我が国が抱える環境・エネルギー制約等の構造的課題を克服するために、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る長期プロジェクトである未来開拓型研究として実施しているものであり、また、内閣府総合科学技術会議が策定した、「科学技術イノベーション総合戦略（平成25年6月6日）」において、クリーンで経済的なエネルギーシステムの実現のために重点的に取り組むべき技術開発として位置付けられている。

② 我が国の状況

有機ケイ素工業は化学産業の中でもシリコン等の高機能な部材を提供するものであり、炭素系材料と比べて高価ではあるものの、電子材料分野や塗料分野等、幅広い産業で使用されている。しかし、現在の有機ケイ素工業は、主原料のSiO₂をSi金属に変換する工程を含むプロセスに依存しており、この工程で多大なエネルギーを必要とする。このことが、シリコン等の有機ケイ素部材が高価となっている要因の一つである。このため、Si金属を経由しない有機ケイ素製造プロセスの確立が求められている。

また、有機ケイ素工業においてシリコンの硬化や有機ケイ素化合物の製造に広く用いられるヒドロシリル化触媒は、古くから利用されているPt触媒であり、使用量が微量ではあるものの、高価である、供給不安がある、部材中に残存する使用法の場合は回収が困難である、残存による製品性能が低下する、等の問題があり、これを代替する触媒の開発が求められている。加えて、有機ケイ素工業の主製品であるシリコンは、安定性、耐候・耐熱性、透明性といった特性から、有機ポリマー部材に比べて高価であるにもかかわらず広い産業分野で使用されているが、より性能を向上させることが求められており、これには構造制御やコンタミの防止が重要な課題である。さらに、特定の構造を有する有機ケイ素部材は、その

製造工程で大量の無機物が排出され、環境面・コスト面で問題があるため、このような問題の無い製造プロセスが求められている。

以上のように、有機ケイ素工業がエネルギー面、コスト面等の問題を解決し、安定的に高機能な有機ケイ素部材を安価に提供するための革新的製造プロセスの確立が求められている。

③ 世界の取組状況

有機ケイ素部材の世界市場は2010年調査で推定1兆円であり、年率6.2%の成長が見込まれている。日本企業のシェアは出荷額ベースで約17%を占める。世界でも屈指の生産規模を有する信越化学工業、高付加価値用途であるSi系LED封止材でトップシェアを有する東レ・ダウコーニングなど、この分野の日本企業は高い技術力を有している。本プロジェクトで解決を目指す技術課題は世界的にも解決が求められており、有機ケイ素部材の製造にかかる触媒については、企業や大学等で主に基礎的レベルでの個別の技術開発が進められている。一方、 SiO_2 から金属ケイ素を経由しない有機ケイ素の製造プロセスについては、世界的に見ても例がない状況である。

④ 本事業のねらい

本プロジェクトでは、有機ケイ素製造に係る新たな触媒技術及び触媒プロセス技術を開発することにより、前述した課題を解決することを目的とする。これにより、有機ケイ素原料製造プロセスを確立し、大幅な省エネルギー化を実現させる。また、有機ケイ素部材の製造コストの低減と性能の向上を図り、その市場を拡大させるとともに、我が国の産業競争力を強化させる。

(2) 研究開発の目標

① アウトプット目標

本事業の終了時及び中間時点におけるアウトプット目標は以下のとおりとする。

【最終目標】

研究開発項目① 砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発

- ・1kgスケールでケイ砂の反応率50%、有機ケイ素原料の選択率50%を達成する。
- ・触媒反応の実用化に向けて必要となるプロセス要素技術を特定し、その工業的实施可能性を1kgスケールで検証する。

研究開発項目② 有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発

- ・1kgスケールで有機ケイ素原料の反応率80%、有機ケイ素部材の選択率80%を達成する。
- ・有機ケイ素部材中の残留触媒の低減を達成する。
- ・有機ケイ素部材の構造制御技術を確立する。

【中間目標】

研究開発項目① 砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発

【平成26年度末】

複数の反応経路とそれぞれの反応における触媒の中心元素の種類や配位子構造等について複数の候補を選定する。

【平成28年度末】

ケイ砂を原料に用いる際の技術課題を抽出する。

反応経路と触媒について有望な組合せを絞り込む。

【平成31年度末】

ケイ砂の反応率50%、有機ケイ素原料の選択率50%を達成すると見込まれる反応経路と触媒を選定し、温度や反応媒体等の最適な反応条件について指標を得る。

原料に用いるケイ砂の処理方法等を選定する。

研究開発項目② 有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発

【平成26年度末】

複数の高機能有機ケイ素部材を想定した各種反応に用いられる触媒の活性中心元素や配位子構造等について複数の候補を選定する。

【平成28年度末】

反応経路と触媒について有望な組合せを絞り込む。

【平成31年度末】

有機ケイ素原料の反応率80%、有機ケイ素部材の選択率80%を達成すると見込まれる反応経路と触媒を選定し、温度や反応媒体等の最適な反応条件について指標を得る。

② アウトカム目標

新規有機ケイ素原料製造プロセスの実用化により、従来プロセスによる製造と比較して大幅な使用エネルギー削減とそれに伴うCO₂排出量削減を達成する。また、高機能有機ケイ素部材製造プロセスの実用化により、高機能有機ケイ素部材の提供が可能となり、LEDや太陽電池等、さまざまな製品の性能向上で省エネルギー化に貢献する。もって、有機ケイ素部材の提供価格の低下や性能の向上等によって適用分野を広げ、2030年には、有機ケイ素部材の日本の出荷額を1兆円規模に拡大することを目指し、産業競争力強化を達成する。

③ アウトカム目標達成に向けての取組

本プロジェクトで開発した成果を基に、プロジェクト終了後に参画企業が実用化に向けた検討を行い、事業化する見込みである。NEDOは、実用化が早期に達成されるよう、本プロジェクトの成果目標が着実に達成されるべく進捗管理を行うとともに、必要に応じて、各企業が主体的に実施する実用化に向けた技術開発への支援を行う。

(3) 研究開発の内容

上記目標を達成するために、以下の研究開発項目について、別紙の研究開発計画に基づき研究開発を実施する。

【委託事業】

研究開発項目① 砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発

研究開発項目② 有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発

本研究開発は、実用化まで長期間を要するハイリスクな「基盤的技術」に対して、産学官の複数事業者が互いのノウハウ等を持ちより協調して実施する研究開発であり、委託事業として実施する。

2. 研究開発の実施方式

(1) 研究開発の実施体制

本研究開発は、我が国の将来の成長の糧となるイノベーションを創出する未来開拓研究プロジェクト「革新的触媒」において実施されるものであり、平成24年度に経済産業省が、企業、大学等の研究機関（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を選定し、共同研究契約等を締結する研究体を構築して開始したものである。平成26年度よりNEDOが本研究開発の運営・管理を承継するに当たっては、その時点までの進捗状況を踏まえて研究開発を実施する。

なお、各実施者の研究開発能力を最大限に活用し、効率的かつ効果的に研究開発を推進する観点から、NEDOは研究開発責任者（プロジェクトリーダー）として、独立行政法人産業技術総合研究所・触媒化学融合研究センターの佐藤一彦研究センター長を選定し、各実施者はプロジェクトリーダーの下で研究開発を実施する。

(2) 研究開発の運営管理

NEDOは、研究開発全体の管理、執行に責任を負い、研究開発の進捗のほか、外部環境の変化等を適時に把握し、必要な措置を講じるものとする。運営管理に当たっては、効率的かつ効果的な方法を取り入れることとし、次に掲げる項目を実施する。

①研究開発の進捗把握・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。また、外部有識者で構成する技術検討委員会を組織し、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。

②技術調査の実施

NEDOは、本技術開発に関する調査を実施し、その調査結果を適宜研究開発に反映させる。これにより、研究開発がより有効なものになるように、本事業の運営管理を行うこととする。

3. 研究開発の実施期間

平成26年度から平成33年度までの8年間とする。

なお、本プロジェクトは、平成24年度から平成25年度までは経済産業省により実施したが、平成26年度からNEDOが実施する。

4. 評価に関する事項

NEDOは、技術評価実施規程に基づき、技術的及び政策的観点から、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、外部有識者による評価を実施する。

評価の時期は、中間評価を経済産業省での事業開始から通算して3年目（平成26年度）、5年目（平成28年度）、8年目（平成31年度）、事後評価を終了年度の次年度（平成34年度）とし、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、前倒しする等、適宜見直すものとする。

また、中間評価結果を踏まえ、必要に応じ研究開発の加速・縮小・中止等の見直しを迅速に行う。

5. その他重要事項

(1) 研究開発成果の取扱い

①共通基盤技術の形成に資する成果の普及

研究開発実施者は、研究成果を広範に導入・普及するように努めるものとする。また、NEDOは、研究開発実施者による研究成果の広範な普及・導入を促進する。

②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。

③知的財産権の帰属

本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、全て委託先に帰属させることとする。

(2) 基本計画の変更

NEDOは、当該研究開発の進捗状況及びその評価結果、社会・経済的状況、国内外の研究開発動向、政策動向、研究開発費の確保状況等、プロジェクト内外の情勢変化を総合的に勘案し、必要に応じて目標達成に向けた改善策を検討し、達成目標、実施期間、実施体制等、プロジェクト基本計画を見直す等の対応を行う。

(3) 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. 基本計画の改訂履歴

平成26年2月、制定。

平成26年6月、プロジェクトリーダーの委嘱に伴う改訂。

平成26年7月、「技術調査の実施」の追記に伴う改訂。

(別紙) 研究開発計画

研究開発項目① 「砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発」

1. 研究開発の必要性

有機ケイ素原料の製造プロセスの省エネ化を実現するためには、砂から金属ケイ素を経由せずに製造する基盤技術が必要となる。砂はケイ素原子の全てが酸素と結合しており、これら全てのケイ素-酸素を開裂するのではなく、必要な分だけを選択的に開裂させて有機基に置換した有機ケイ素原料を合成する反応経路を確立する。すなわち、反応経路として、砂から、テトラアルコキシシラン等のQ単位構造中間原料を経由し、そのケイ素-酸素結合の一部をケイ素-炭素結合に変換することによる、有機ケイ素原料製造法の開発や、高機能有機ケイ素部材の原料として期待されているビルディングブロック型の有機ケイ素原料製造法の開発、高活性ケイ素化学種を経る有機ケイ素原料製造法の開発等に取り組む。

2. 研究開発の具体的内容

(1) 金属ケイ素を経由しないQ単位構造中間原料製造法の開発

砂からの有機ケイ素原料製造に当たり、固体原料である砂のケイ素-酸素結合を開裂することにより低分子化して、液体又は溶媒に可溶なQ単位構造中間原料（テトラアルコキシシランなど）に変換するルートに関する触媒技術の開発を行う。テトラアルコキシシランの合成に関しては、アルコール、金属アルコキシド、炭酸ジアルキル等をケイ砂（シリカ）と反応させる方法等を検討する。

(2) Q単位構造中間原料からの有機ケイ素原料製造技術の開発

テトラアルコキシシラン等のQ単位構造中間原料からの有機ケイ素原料合成法として、有機化剤を用いて有機基をケイ素上に導入する方法、酸素原子を還元剤で取り除く方法等に有用な触媒技術の開発を行う。

(3) 砂からQ単位構造を基本構造とするビルディングブロック型の有機ケイ素原料製造法の開発

砂の規則構造を部分的に保持したQ単位構造を基本構造とするビルディングブロックを選択的に切り出すための触媒技術の開発を行う。

(4) 高活性ケイ素化学種を経由した有機ケイ素原料製造法の開発

砂から高活性ケイ素化学種を経由して有機ケイ素原料を製造する方法の開発を行う。

(5) その他の反応

金属ケイ素を経ずに有機ケイ素原料を効率的に製造する技術の開発は極めて難度が高いことから、(1)～(4)以外の方法についても検討し、必要に応じて開発に着手する。

3. 達成目標

【中間目標(平成26年度末)】

複数の反応経路とそれぞれの反応における触媒の中心元素の種類や配位子構造等について複数の候補を選定する。

【中間目標(平成28年度末)】

ケイ砂を原料に用いる際の技術課題を抽出する。
反応経路と触媒について有望な組合せを絞り込む。

【中間目標(平成31年度末)】

ケイ砂の反応率50%、有機ケイ素原料の選択率50%を達成すると見込まれる反応経路と触媒を選定し、温度や反応媒体等の最適な反応条件について指標を得る。
原料に用いるケイ砂の処理方法等を選定する。

【最終目標(平成33年度末)】

1kgスケールでケイ砂の反応率50%、有機ケイ素原料の選択率50%を達成する。
触媒反応の実用化に向けて必要となるプロセス要素技術を特定し、その工業的实施可能性を1kgスケールで検証する。

研究開発項目② 「有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発」

1. 研究開発の必要性

有機ケイ素工業においてシリコーンの硬化や有機ケイ素化合物の製造に広く用いられるヒドロシリル化触媒は、古くから利用されている白金触媒であり、使用量が微量ではあるものの、高価である、供給不安がある、用途によっては回収が困難である、残存による製品性能が低下する、等の問題があり、これを代替する触媒の開発が求められている。また、有機ケイ素工業の主製品であるシリコーンは、安定性、耐候・耐熱性、透明性といった特性から、有機ポリマー部材に比べて高価であるにもかかわらず広い産業分野で使用されているが、更に性能を向上させることが求められており、これにはコンタミの防止や構造制御が重要である。さらに、特定の構造を有する有機ケイ素部材は、その製造工程で大量の無機物が排出され、環境面・コスト面で問題があるため、このような問題の無い製造プロセスが求められている。

これらの技術課題を解決するため、有機ケイ素部材の代表であるシリコーンの主要構造である「ケイ素－炭素結合」及び「ケイ素－酸素結合」、特異な電子・光物性を持つ有機ケイ素部材であるポリシランの主要構造である「ケイ素－ケイ素結合」の3つの基本的な含ケイ素結合形成のための触媒技術開発に取り組む。

2. 研究開発の具体的内容

(1) ケイ素－炭素結合形成技術

ケイ素－炭素結合形成法として、白金触媒を用いるヒドロシリル化反応や、有機マグネシウム原料を用いる方法が主として用いられているが、前者では触媒コストが高い、白金触媒が製品中に残存して製品品質に悪影響を及ぼすなどの課題が、後者では、原料のコストが高い、副生マグネシウム塩が多量に発生するなどの課題がある。これらの課題を克服し、更に高効率・高選択的な反応の開発を目指し、ヒドロシリル化反応用の非金属や卑金属触媒の開発、及び高価な有機マグネシウムなどの有機金属原料を用いず副生塩が発生しない新規なケイ素－炭素結合形成技術の開発を行う。

(2) ケイ素－酸素結合形成技術

ケイ素－酸素結合は、原料であるクロロシラン類やアルコキシシラン類の加水分解反応で形成されるのが一般的であるが、ランダムに反応が起こり、結合形成の制御が容易ではない。そこで、反応を制御しつつ、特異的なシリコーン構造を構築するための技術として、ケイ素－酸素結合を選択的に形成できる触媒技術の開発や、シリコーン版のクロスカップリング反応技術の開発を行う。また、これらの技術を、はしご型ポリシロキサンやかご状シロキサンなど構造が制御されたシリコーンや、異なる単位構造が規則的に配列した規則性シリコーンなど、特徴的な物性が期待されるシリコーンの合成の検討に展開する。なお、得られるシリコーンの構造解析手法も検討する。

(3) ケイ素－ケイ素結合形成技術

ケイ素－ケイ素結合形成に通常用いられる方法は、クロロシランをナトリウム等の金属を用いて還元的にカップリングさせる方法に限定されている。この方法では、構造制御は困難であり、また、塩素化合物やナトリウム塩などが生成物に混入してしまい、電子部材等に用いる場合は性能劣化の原因となる。そこで、ヒドロシランの脱水素縮合等によるケイ素－ケイ素結合形成法の開発とヒドロシラン等の原料の安価な製造法の開発を行う。

(4) 触媒固定化基盤技術

ケイ素－炭素結合形成やケイ素－酸素結合形成等の有機ケイ素部材合成反応に高活性・高選択性を示す触媒活性種（分子触媒、金属ナノ粒子など）をシリカなどの担体に固定化することにより、有機ケイ素部材製造プロセスにおける触媒の分離・リサイクルを容易にし、製品純度を高めるだけでなく、連続流通プロセスでの生産性向上を実現させるための基盤技術の開発を行う。具体的には、触媒機能を最大化させるための担体の開発、担体への触媒活性種の固定化技術の開発、固定化触媒によるケイ素部材合成技術の開発及びプロセス化に向けた実用化研究について検討する。

3. 達成目標

【中間目標(平成26年度末)】

複数の高機能有機ケイ素部材を想定した各種反応に用いられる触媒の活性中心元素や配位子構造等について複数の候補を選定する。

【中間目標(平成28年度末)】

反応経路と触媒について有望な組合せを絞り込む。

【中間目標(平成31年度末)】

有機ケイ素原料の反応率80%、有機ケイ素部材の選択率80%を達成すると見込まれる反応経路と触媒を選定し、温度や反応媒体等の最適な反応条件について指標を得る。

【最終目標(平成33年度末)】

1 kgスケールで有機ケイ素原料の反応率80%、有機ケイ素部材の選択率80%を達成する。

有機ケイ素部材中の残留触媒の低減を達成する。

有機ケイ素部材の構造制御技術を確立する。

「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（触媒を利用した化学品基幹原料
等の革新的プロセス技術開発）」
事前評価報告書

平成23年7月
産業構造審議会産業技術分科会
評 価 小 委 員 会

はじめに

研究開発の評価は、研究開発活動の効率化・活性化、優れた成果の獲得や社会・経済への還元等を図るとともに、国民に対して説明責任を果たすために、極めて重要な活動であり、このため、経済産業省では、「国の研究開発評価に関する大綱的指針」(平成20年10月31日、内閣総理大臣決定)等に沿った適切な評価を実施すべく「経済産業省技術評価指針」(平成21年3月31日改正)を定め、これに基づいて研究開発の評価を実施している。

今回の評価は、グリーン・サステイナブルケミカルプロセス基盤技術開発(触媒を利用した化学品基幹原料等の革新的プロセス技術開発)の事前評価であり、評価に際しては、当該研究開発事業の新たな創設に当たっての妥当性について、省外の有識者から意見を収集した。

今般、当該研究開発事業に係る検討結果が事前評価報告書の原案として産業構造審議会産業技術分科会評価小委員会(小委員長:平澤 冷 東京大学名誉教授)に付議され、内容を審議し、了承された。

本書は、これらの評価結果を取りまとめたものである。

平成23年7月

産業構造審議会産業技術分科会評価小委員会

産業構造審議会産業技術分科会評価小委員会
委員名簿

委員長	平澤 冷	東京大学 名誉教授
	池村 淑道	長浜バイオ大学 バイオサイエンス研究科研究科長 バイオサイエンス学部学部長 コンピュータバイオサイエンス学科 教授
	大島 まり	東京大学大学院情報学環 教授 東京大学生産技術研究所 教授
	太田 健一郎	横浜国立大学 特任教授
	菊池 純一	青山学院大学法学部長・大学院法学研究科長
	小林 直人	早稲田大学研究戦略センター 教授
	鈴木 潤	政策研究大学院大学 教授
	中小路 久美代	株式会社S R A先端技術研究所 所長
	森 俊介	東京理科大学理工学部経営工学科 教授
	吉本 陽子	三菱UFJリサーチ&コンサルティング株式会社 経済・社会政策部 主席研究員

(委員敬称略、五十音順)

事務局:経済産業省産業技術環境局技術評価室

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
(触媒を利用した化学品基幹原料等の革新的プロセス技術開発)
の事前評価に当たり意見をいただいた外部有識者

大久保 達也 国立大学法人 東京大学 大学院工学系研究科
化学システム工学専攻 教授

佐藤 一彦 独立行政法人 産業総合研究所 総括企画主幹

御園生 誠 国立大学法人 東京大学 名誉教授

(敬称略、五十音順)

事務局：経済産業省製造産業局化学課

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
(触媒を利用した化学品基幹原料等の革新的プロセス技術開発)
の評価に係る省内関係者

【事前評価時】

製造産業局 化学課機能性化学品室長 山崎 知巳(事業担当室長)

産業技術環境局 産業技術政策課 技術評価室長 秦 茂則

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
(触媒を利用した化学品基幹原料等の革新的プロセス技術開発)
事前評価

審 議 経 過

- 新規研究開発事業の創設の妥当性に対する意見の収集(平成23年5月)

- 産業構造審議会産業技術分科会評価小委員会(平成23年7月22日)
 - ・事前評価報告書(案)について

目 次

はじめに

産業構造審議会産業技術分科会評価小委員会 委員名簿

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(触媒を利用した化学品基幹原料等の革新的プロセス技術開発)の事前評価に当たり意見をいただいた外部有識者

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(触媒を利用した化学品基幹原料等の革新的プロセス技術開発)の評価に係る省内関係者

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(触媒を利用した化学品基幹原料等の革新的プロセス技術開発)事前評価 審議経過

ページ

第1章 技術に関する施策及び新規研究開発事業の概要

1. 技術に関する施策の概要 1
2. 新規研究開発事業の創設における妥当性等について 1
3. 新規研究開発事業を位置付けた技術施策体系図等 3

第2章 評価コメント 4

第3章 評価小委員会のコメント及びコメントに対する対処方針 6

参考資料 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(触媒を利用した化学品基幹原料等の革新的プロセス技術開発)の概要(PR資料)

第1章 技術に関する施策及び新規研究開発事業の概要

1. 技術に関する施策の概要

化学産業は、技術面から環境・エネルギー及び安全・安心の問題解決に貢献できるキーテクノロジーを有する産業であり、2009年12月に閣議決定された「新成長戦略（基本方針）」において掲げられた「グリーン・イノベーション（環境・エネルギー分野革新）」及び「ライフ・イノベーション（医療・介護分野革新）」を推進していくことが期待される。

このような背景から、化学分野の研究開発を進める上で、

- I. 原料のグリーン化
- II. 製造工程のグリーン化
- III. グリーン・イノベーションに資する先端ケミカル部材・材料の提供
- IV. 排水、廃棄物等の処理工程のグリーン化
- V. 素材・部材としての化学分野の共通評価基盤の整備

の5つの視点から研究開発を行う。

2. 新規研究開発事業の創設における妥当性等について

化学分野を含むナノテク・部材分野においては、①ナノテクノロジー及び革新的部材技術の確立、②エネルギー消費効率の改善、③安心安全な国民生活の実現、の3つの視点からの施策が必要とされており、このうち①及び②について、「環境に貢献するエネルギー制約の克服」、「環境に貢献する環境制約の克服」及び「環境に貢献する資源制約の克服」が目標として挙げられている（別添「新規要求事業の位置付け」を参照。）。

現状では、化学産業は石油製品の18.9%を原料として使用しているとともに、全産業の約13%、日本全体の約5%のCO₂を排出している。このため、製造段階でのエネルギー利用効率化、製造プロセスでのCO₂削減、バイオマスや気体原料の利用など非石油由来資源への転換といった課題を克服する必要がある。さらに、触媒技術の抜本的高度化により、レアメタルの代替や、水質等の汚染物質の発生抑制の効果も大いに期待されている。

本事業は、具体的には、以下のテーマを実施する予定としている。

- ① 石油化学品の革新的製造プロセス基盤の開発及びこれを更に発展させた太陽光と水と空気から化学品基幹原料を製造する技術開発
- ② 新・機能性化学品の革新的製造プロセス基盤の開発
(スーパー反応場、高機能有機ケイ素反応触媒)
- ③ 微生物触媒を活用した革新的発電プロセス技術の開発

これらのテーマは、エネルギーや資源制約からの脱却、地球温暖化の主要因と考えられるCO₂の排出抑制に貢献するために、触媒を利用した化学品基幹原料等の革新的プロセス技術を開発するものであり、1.のうち「I.原料のグリーン化」、「II.製造工程のグリーン化」、「IV.排水、廃棄物等の処理工程のグリーン化」に該当する。また、別添の体系図における目標との関係が明確で、その目標を達成するために必要不可欠であり、適切にマッチングしていると言える。

(1) 事業の目的及び実施によるアウトプット、アウトカムについて（研究開発の定量的目標、社会的課題への解決や国際競争力強化への対応等）

本事業においては、それぞれのサブテーマごとに、それぞれ以下のような目的をターゲットとして取り組む予定である。

- ① 基幹化学品の製造では、最先端の光触媒技術の開発により、原料の脱石油化（原料は空気中のCO₂と水）を実現する（2030年）。
- ② 機能性化学品の製造では、多段階生産工程をワンパス化し、反応温度の低温下等のプロセスイノベーションを実現し、また、白金触媒を代替する新規触媒開発による製造コストの抜本的な改善と製品性能の高性能化を実現する（2020年）。
- ③ 微生物触媒を活用した発電では、汚泥を原料（えさ）とする微生物触媒により革新的発電プロセスを確立し、下水・排水処理施設の使用電力の削減、自立系システムを確立する（2030年）。

これにより、化学産業の中長期的な競争力強化、更には化学技術を活用した抜本的省エネルギー・省電力化が実現する。

さらに、化学産業の大規模かつ省エネプロセスでの基礎化学品等の製造が可能となるのみならず、フィルム、繊維、ゴム、医薬品、香料等、様々な製品への波及効果も極めて大きい。

(2) 事業の必要性について（出口を見据え成果を社会へ普及させる戦略（研究開発のみならず、実証や性能評価・標準化等を含む実用化に向けた取組等））

本事業は、単に研究成果を挙げることにとどまらず、それぞれ次のような実用化に向けた具体的な取組を想定した上で、プロジェクトをスタートさせる予定である。

- ① 基幹化学品の製造では、プロジェクト期間中の 2016 年度までに中規模パイロットプラントにおける実証を行い、更にその時点での経済環境に応じて、国内外の各社のエチレンプラントに適用してビジネス展開を図る。その間開発された分離膜の製造方法等については、実プラントへ適用される部分で膜モジュールの標準化を行うことで、本技術の普及を図る。
- ② 機能性化学品の製造では、ユーザー企業を巻き込んで、知的財産権と標準化の棲み分けをしつつ、実用化に向けた取組を推進する。
- ③ 微生物触媒を活用した発電では、電極触媒、電極構造、リアクター構成などの各要素技術を確立・パッケージ化して、国内の下水処理場、工場の排水処理工程を始めとするビジネス展開を図る。

(3) 次年度に予算要求する緊急性について

革新的触媒技術は、省エネルギー・省電力の大きな可能性を秘めた未開拓化学技術であり、本年3月に発生した東日本大震災により、電力需給の逼迫が産業空洞化を左右する中においては、その徹底活用を知を集結し着手することにより、化学産業の国内残留、中長期的な競争力強化、抜本的省エネルギー・省電力化を通じた災害対応力の強化に早急に着手する必要がある。

また、2010年の鈴木・根岸両教授のクロスカップリング触媒技術に関するノーベル化

学賞のダブル受賞により、アカデミア、産業界ともに改めて触媒技術に注目が集まっている。このタイミングで革新的触媒技術に着目した非連続型の大規模ナショナルプロジェクトを開始することは、本分野の人材育成、ひいては20年後、30年後にも引き続き国際的に強みを持つ化学技術の基盤を引き続き維持する意味でも極めて重要である。

海外に目を向けてみても、近年、BASF（独）がCO/H₂からオレフィン製造技術の検討を開始し、欧米では太陽光からのエネルギー変換技術開発の大型プロジェクトが幾つもスタートしており、日本リードの本技術分野で急速な追い上げが見られる。また、微生物触媒関連分野については、米国（DOE）は2000年以降、約50億円を投じて研究開発を進めている。

日本は、触媒分野での基本的な技術的強みを有しているが、我が国技術、企業の国際的優位性を確保するため、政府としても早急に取り組む必要がある。

（4）国が実施する必要性について（非連続型研究、民間とのデマケの整理等）

本技術開発は技術面・投資面で民間単独で取り組むにはハードルが高く、基盤技術の確立については国の一定の関与が必要である。さらに、化学品原料を石油資源から非石油由来資源に転換することは、温暖化対策という観点から政策的にも重要な課題であり、基礎化学品、機能性化学品の製造等の基幹産業におけるプロセスの簡素化・省エネルギー等に資する基盤技術の開発は、その技術的波及効果が大きい点からも、国家プロジェクトとして実施する事業として適切であると判断される。

なお、本事業が対象とする技術はリスクが極めて高く、国が支援する必要があるが、個別の製品化への応用については企業単独の取組とすることにより、民間とのデマケを整理している。

（5）省内又は他省庁の事業との重複について

現時点では省内又は他省庁との事業の重複はなく、当面は化学産業特有の技術ということで化学課が研究開発課と連携して研究に取り組んでいく予定である。

特定の応用分野が見えてくるにつれて、当該応用分野の省内担当課や、他省庁との強力な連携体制を取る予定。

3. 新規研究開発事業を位置付けた技術施策体系図等（上記1. 技術に関する施策の体系的整理図）

（別添「新規要求事業の位置付け」を参照。）

第2章 評価コメント

事業の目的・政策的位置付け（新規研究開発事業の創設）の妥当性等に対するコメント

化学関連分野では触媒や微生物など、大きなポテンシャルを有する新しい技術の創出が不可欠である。基礎化学品製造技術、機能性化学品製造技術は重要な柱であり、触媒開発の難易度は高いが、革新的触媒技術によって両者のプロセス革新を同時に国主導で進める本事業は化学産業全体に大きく貢献する。

ソーラー水素は日本が基礎研究で先行しており、これが実現した場合のインパクトは非常に大きく、我が国の優位性を確保するためにも、緊急に予算化し、長期ビジョンを持って取り組むことが極めて重要である。また、微生物発電技術は自立的に下水処理を進めるポテンシャルを有した技術であり、ともに緊急なプロジェクト化が望まれる。

ケイ素系部材開発は、炭素-ケイ素、ケイ素-酸素結合等を精密に構築する触媒技術開発が鍵であり、難易度は高いが、画期的な新機能性材料の開発に繋がる可能性が高い。

なお、全体計画の成否はソーラー水素次第であり、太陽光発電と水電解を組み合わせた水素製造システムとの競合に勝つことが必要。そのための技術課題と実現可能性をより明確にする必要がある。また、微生物発電は、目標に到達するための具体的技術課題とその解決法を明確にすべきである。

○肯定的意見

- ・震災後の今日、長期ビジョンをもった戦略的な取組が、ますます重要になっている。化学関連分野では触媒や微生物など、大きなポテンシャルを有する新しい技術の創出が不可欠である。
- ・GSCは化学産業及びそれを基盤とする様々な産業が持続的に発展するための鍵である。
- ・基礎化学品製造技術、機能性化学品製造技術は重要な柱であり、革新的触媒技術によって両者のプロセス革新を同時に国主導で進める本事業は化学産業全体に大きく貢献する。
- ・ソーラー水素を二次エネルギー源として捉えた取組は増えているものの、化学品原料に用いる検討例は依然として限られており、国として取り組むことは極めて重要である。光触媒関連、ソーラー水素触媒は日本発の、我が国がこれまでに世界をリードしてきた分野であるが、ここ数年で米国や欧州が大きなプロジェクトを次々に発足させている。我が国の優位性を確保するためにも、緊急に予算化し、長期ビジョンを持って取り組むことが極めて重要である。
- ・太陽光／水／空気からの基礎化学品製造技術開発はインパクトが大きく、タイムリーな提案である。触媒開発の難易度は高いが、事業実施により基幹原料のプロセス革新が期待される。
- ・ソーラー水素は日本が基礎研究で先行しており、成績も顕著に改善している。これが実現した場合のインパクトは非常に大きい。技術的課題がある程度具体的になっており、実現可能性が期待される。したがって、長期的・持続的研究課題としてふさわしいと言える。後段のCO₂利用の化学品製造は、要素技術（膜技術、触媒）がかなり進んでいるようなので、実現可能性は十分にある。これについては、ソーラー水素とは別にしても、

十分な意義が見いだせる。

- ・製造プロセスを抜本的に削減することは大きな省エネ・低炭素化につながり、また微生物発電は自立的に下水処理を進めるポテンシャルを有した技術であり、ともに緊急なプロジェクト化が望まれる。
- ・ケイ素系部材開発は、炭素—ケイ素、ケイ素—酸素結合等を精密に構築する触媒技術開発が鍵であり、難易度は高いが、画期的な新機能性材料の開発に繋がる可能性が高い。
- ・スーパー反応場技術による省エネ効果は理解できる。
- ・微生物発電は微生物触媒技術が鍵となる。高難易度ではあるが技術課題も明確である。

○問題点・改善すべき点

- ・Neo Sunshine Project に関しては、触媒技術を中心に据えることは当然であるが、更には反応と分離を組み合わせた技術の開発なども組み込むことで、より大きな展開が期待される。
- ・太陽光／水／空気からの基礎化学品製造技術開発について、出口の一つとして $\text{CO}_2 + \text{H}_2 + \text{オレフィン}$ による機能性化学品製造等も入れたらどうか。
- ・全体計画の成否はソーラー水素次第であり、太陽光発電と水電解を組み合わせた水素製造システムとの競合に勝つことが必要。そのための技術課題と実現可能性をより明確にする必要がある。
- ・スーパー反応場プロジェクトに関しては、高分子反応場の化学的耐久性に関する視点、微生物発電に関しては、下水処理における速度論（出力）に関する視点を加える必要があるのではないか。
- ・高分子担持金属触媒及び類似の触媒には長い研究の歴史があり、これらと比較して、“スーパー反応場”触媒の「オリジナリティー」と「高機能性」を明確に示す必要がある（触媒構造、物性、触媒性能を具体的データで比較。）。解決すべき技術要素をはっきりさせてほしい。
- ・次世代封止材に関する企業ニーズは多いので、ケイ素系部材開発の中でも中心的な位置づけにしてはどうか。
- ・省エネ高機能ケイ素系部材は技術的課題と出口（用途）の具体的説明が不十分に思える。内容を整理して、技術課題と応用の強調点を明確にすることが必要。
- ・微生物発電技術の現状が不明（定量的に示すべき。）。下水処理に応用可能か否かも不明である。まず、現状の性能データと下水処理に必要な性能との比較を定量的に行うべきである。目標値までの距離が相当ありそうだが、どの程度か分からない（性能を何ケタ上げる必要があるのか、基質依存性は大丈夫か、どの程度の規模の装置になるのか、など）。その次に、目標に到達するための具体的技術課題とその解決法を明確にすべき。

第3章 評価小委員会のコメント及びコメントに対する対処方針

本研究開発事業に対する評価小委員会のコメント及びコメントに対する推進課の対象方針は、以下のとおり。

(コメント①)

水素製造触媒による基幹化学品製造技術については、太陽光発電と水分解を組み合わせた既存のシステムに対する優位性を十分検討した上で、技術課題を明確にして取り組むことが必要である。

(コメント②)

微生物触媒による発電技術についても、メタン発酵－熔融炭酸塩型燃料電池による発電等、既存の技術に対する優位性を十分検討した上で、当該構想の実用化に当たっての技術課題を明確にして取り組むことが必要である。

(コメント③)

一般的に、触媒探索のような研究開発は、既にある競争的な技術やプロセスに対抗できる有効な要素技術が未だ不明な段階においては、多額の資金を集中的につぎ込むのではなく、分散的・試行的に取り組んだ上で、有望な物質を絞り込んでいく手法が有効であることから、その実施方法についても十分検討することが望まれる。

(対処方針①)

一般的に、現状の太陽光発電の発電コストは高く、かつ、水素を太陽光発電と水電気分解で作る場合、光触媒により直接水素を製造するよりもプロセスが複雑になる。光触媒を用いた可視光による水の直接分解において、5パーセント超の光エネルギー変換効率が達成できれば、現行プロセス(ナフサクラッカーからオレフィン製造)と比較して経済的に十分な競争力が見込まれるのみならず、省エネ性、CO₂削減効果においても優位性があることから技術開発を行う意義は十分あると考えられる。指摘も踏まえ、技術課題を明確にしつつ、最大限の効果を得られるように事業に取り組む。

(対処方針②)

メタン発酵－熔融炭酸塩型燃料電池による発電は、廃棄物から直接電力取り出しが可能な微生物発電システムと比較してプロセスが複雑になってしまう。また、生ごみ及び都市ガスのエネルギーを補足しなければ、エネルギー収支が取れない。他方、微生物触媒による発電は新しい科学的発見を基礎とした革新的プロセスであり、非常にシンプルであり、現状の下水処理場の反応槽に電極を設置するだけでよいため、運転コストの面でも有利と考えられる。技術開発によりシステム効率が向上すれば、自立型の下水処理システムの構築が可能となり、研究開発を行う意義は十分にあると考えられ、指摘も踏まえ、技術課題を明確にしつつ、最大限の効果を得られるように事業に取り組む。

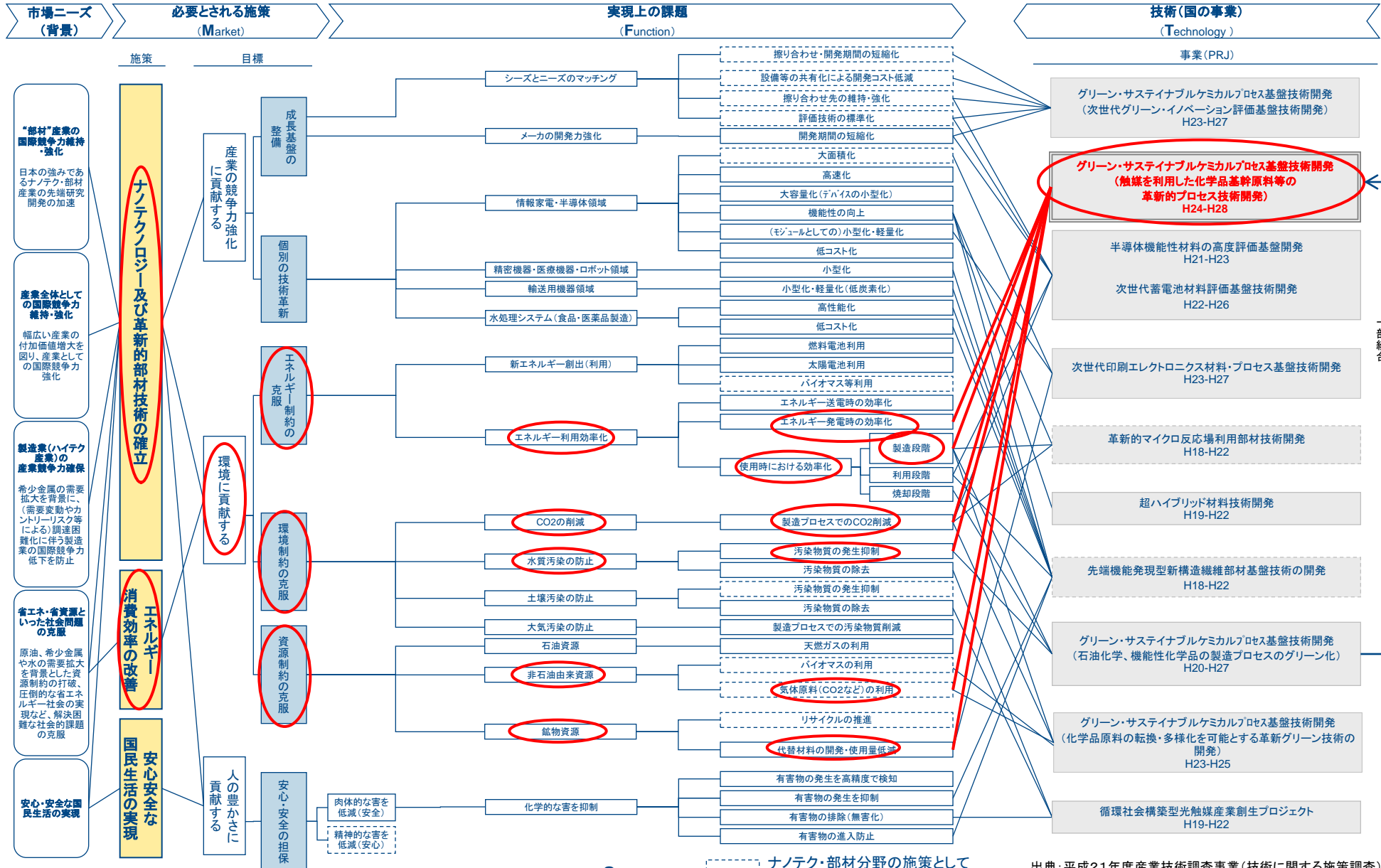
(対処方針③)

既存技術の延長線上にない、夢のある非連続型の技術革新によって日本再生を果たすべく、国が研究開発で新たな道を切り開く分野を絞り込み、研究開発投資を重点化すべきである。指摘も踏まえ、産学官の関係者が入る強者連合等を活用し、最大限の効果を得られるよう事業に取り組む。

新規要求事業の位置付け

トップダウン

ボトムアップ



ナノテク・部材分野

一部統合

ナノテク・部材分野の施策として着手されていない課題

出典：平成21年度産業技術調査事業（技術に関する施策調査）、委託先：アーサー・D・リトル（ジャパン）株式会社

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 (触媒を利用した化学品基幹原料等の革新的プロセス技術開発)

事業の内容

事業の概要・目的

○グリーン・サステイナブルケミストリー(GSC)は、化学品原料、石油化学、機能性化学、材料評価までの川上～川下までを通じ、人と環境への負荷を低減する概念であり、いわばグリーン・イノベーションを化学技術で実現していくものです。

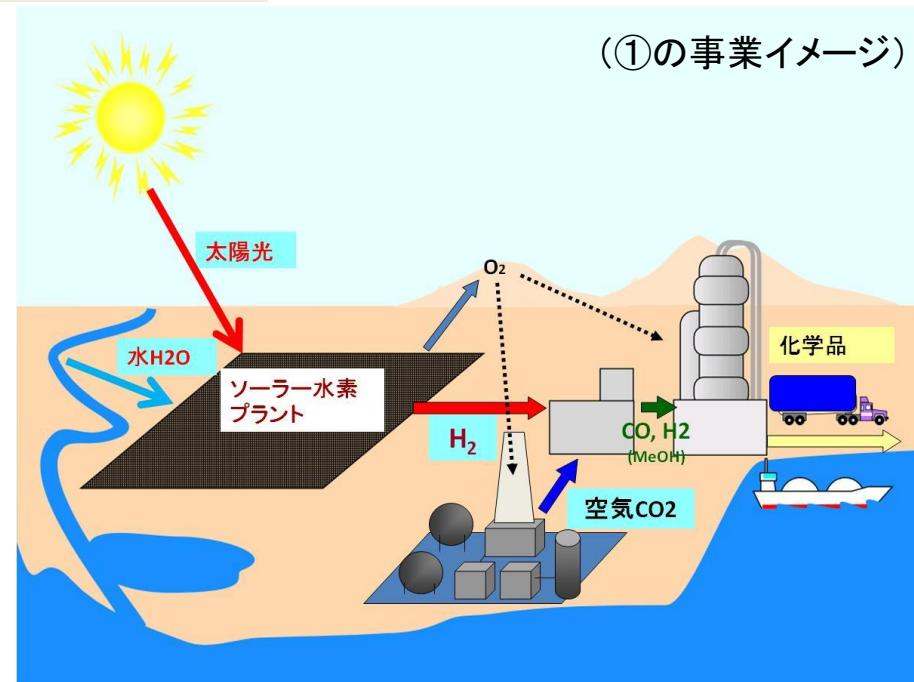
○特に24年度からは、触媒、微生物機能など省エネルギー、省電力の大きな可能性を秘めた未開拓化学技術の徹底活用に着手することにより、化学分野等の抜本的省エネルギー・省電力化を通じた震災対応力の強化を図ることとし、「触媒を利用した化学品基幹原料等の革新的プロセス技術開発」に取り組みます。

条件(対象者、対象行為、補助率等)



事業イメージ

(①の事業イメージ)



○具体的には、以下のテーマを実施。

- ①石油化学品の革新的製造プロセス基盤の開発及びこれを更に発展させた太陽光と水と空気から化学品基幹原料を製造する技術開発
- ②新・機能性化学品の革新的製造プロセス基盤の開発
- ③微生物触媒を活用した革新的発電プロセス技術の開発

「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（革新的触媒）」
実施計画（案）に対する意見募集の結果について

平成24年5月30日
経済産業省
製造産業局化学課

平成24年4月27日付けで、「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（革新的触媒）」実施計画（案）に対する意見の募集を行った結果、以下のとおり御意見をいただきました。御意見の概要及び御意見に対する考え方を取りまとめましたので公表いたします。

御協力をいただきありがとうございました。

1. 意見公募の実施期間等

- (1) 募集期間：平成24年4月27日（金）～5月10日（木）
- (2) 実施方法：電子政府の総合窓口（e-Gov）及び
経済産業省ホームページにおける掲載
- (3) 意見提出方法：郵送、FAX、電子メール、e-Govホームページ

2. 御意見の到達件数

3件（1名）

3. 御意見の概要及び御意見に対する考え方

別紙のとおりです。

4. 本件に関するお問い合わせ先

経済産業省 製造産業局 化学課
電話：03-3501-1737

(別紙)

御意見の内容及び御意見に対する考え方

番号	御意見の内容	御意見に対する考え方
1	目標値は、理解できるがそれに要する投資額を合わせて示していただきたい。少なくとも投じられる税金の上限を明らかにしていただきたい。上限のない事業を国の事業とすることには賛同致しかねます。	平成24年度から平成33年度の10年間で、事業規模は170億円程度を想定しております。ただし、中間評価等の結果を勘案し、事業規模・内容は必要に応じて見直すこととしております。限られた予算を活用し、本研究開発を効果的かつ効率的に推進してまいります。
2	現在の太陽電池で生産された電力による電気分解で得られた水素と比較してどの程度高い目標であるのかなど、現在実現可能な技術との優劣を示していただきたい。	現状では、太陽光発電による電気分解では発電コストが高くプロセスが複雑であり、光触媒により直接水素を製造することで効率化が期待されます。光触媒を用いた可視光による水の直接分解において10%の変換効率が達成できれば、現行プロセス(ナフサクラッカーからオレフィンを製造)と比較して経済的に十分な競争力が見込まれるのみならず、省エネ性、CO ₂ 削減効果においても優位性があると考えており、本研究開発においては、更なる将来を見据えた検討を進めてまいります。
3	目標値が達成できなかった場合、他の技術に対して優位性を失った場合の中止の判断基準を示していただきたい。	本研究開発は外部有識者による定期的な評価を行うこととしており、目標と成果に相当程度の乖離が認められるなど、評価結果を踏まえ、実施計画、研究開発の内容、事業化の戦略等について適切な見直しを行ってまいります。



プロジェクト名：有機ケイ素機能性化学品製造プロセス技術開発

研究開発の目的

化学産業は我が国の一大産業であり、高い国際競争力を誇る製品を多数生み出しているが、一方で、同産業は化石資源を大量に消費しており、その削減が求められている。また、省エネ等の観点から、最終製品の機能向上を達成するため、化学産業が提供する部材の更なる高機能化が求められている。このため、化学産業においては、革新的イノベーションの実現により、こうした要求を実現していくことが急務となっている。

本プロジェクトは、エネルギー多消費の有機ケイ素原料の製造プロセスに代わる新たな革新的省エネプロセスと高機能な有機ケイ素部材の製造プロセスを実現するための触媒技術及び触媒プロセス技術を開発するものであり、有機ケイ素工業のエネルギー制約を克服するためには不可欠な技術開発である。さらには、本技術の確立は、我が国の有機ケイ素工業の国際的競争力の強化につながるものである。

研究開発の内容

(1) 砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発

砂から、テトラアルコキシシラン等の中間原料を経由し、そのケイ素－酸素結合の一部をケイ素－炭素結合に変換することによる、有機ケイ素原料製造法の開発や、高活性ケイ素化学種を経る有機ケイ素原料製造法の開発等に取り組む。

<ポイント>

- ・安定なSiO₂を反応させる製造プロセス及びそれに用いる触媒の開発
- ・高活性ケイ素化学種の取扱い技術の開発

(2) 有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発

有機ケイ素部材の代表であるシリコンの主要構造である「ケイ素－炭素結合」及び「ケイ素－酸素結合」、特異な電子・光物性を持つ有機ケイ素部材であるポリシランの主要構造である「ケイ素－ケイ素結合」の3つの基本的な含ケイ素結合形成のための触媒技術開発等に取り組む。

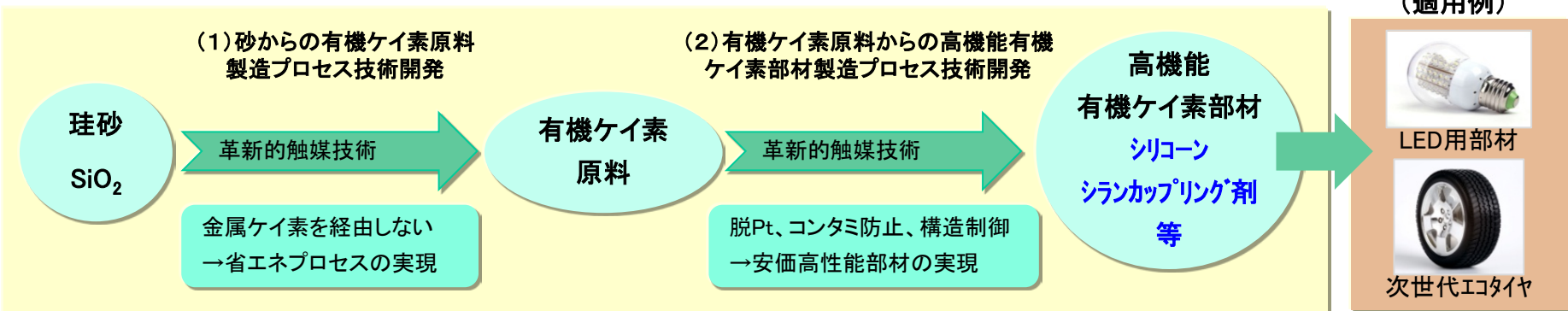
<ポイント>

- ・白金触媒を代替する卑金属触媒の開発
- ・構造制御された有機ケイ素部材の製造プロセス及びそれに用いる触媒の開発
- ・大量の無機塩が副生しない有機ケイ素部材製造プロセス及びそれに用いる触媒の開発
- ・有機ケイ素部材製品中の残存触媒を低減する技術の開発

プロジェクトの規模

- ・事業費総額 16億円（予定）
- ・NEDO予算総額 16億円（予定）
- ・実施期間 平成26～33年度（8年間）

成果適用のイメージ



事前評価書

	作成日	平成 26 年 1 月 22 日
1. プロジェクト名	有機ケイ素機能性化学品製造プロセス技術開発	
2. 推進部署名	環境部	
3. プロジェクト概要 (予定)		
<p>(1) 概要</p> <p>1) 背景</p> <p>化学産業は我が国の一大産業であり、高い国際競争力を誇る製品を多数生み出している。一方で、同産業は化石資源を大量に消費し、二酸化炭素排出量も多い。地球温暖化が懸念され、輸入に頼る石油の価格上昇や枯渇リスクに直面する中、化学品製造の革新的イノベーションの実現により、こうした課題を乗り越えていくことが急務となっている。</p> <p>有機ケイ素工業は、化学産業の中でもシリコン等の高機能な部材を幅広い産業に提供する工業である。現在の有機ケイ素工業では、有機ケイ素原料を製造するに当たり、二酸化ケイ素 (SiO₂) を金属ケイ素 (Si) に変換する工程に頼らざるを得ず、この工程では、多大なエネルギーを必要とする状況である。Siを経由しない有機ケイ素原料製造プロセス技術が確立できれば、経済性の高い省エネルギーの製造プロセスが実現し、我が国の産業競争力は格段に高まる。</p> <p>一方、高機能な有機ケイ素部材の製造において広く用いられているヒドロシリル化触媒は、白金 (Pt) 触媒であり、これを代替する触媒の開発が求められている。また、有機ケイ素工業の主製品であるシリコンは広い産業分野で使用されているが、より性能を向上させることが求められており、これにはコンタミの防止技術や構造制御技術が必要である。更には、特定の構造を有する有機ケイ素部材は、その製造工程から大量の無機物が排出されるため、このような物質を排出しない環境に優しい製造プロセスの開発が求められている。</p> <p>2) 目的</p> <p>本プロジェクトでは、有機ケイ素工業における上記課題を解決するために、高機能な有機ケイ素を製造する触媒技術・触媒プロセス技術を確立し、もって有機ケイ素工業における省エネ化を促進させるとともに、有機ケイ素工業の国際的産業競争力を強化させることを目的とする。</p>		

3) 実施内容

有機ケイ素機能性化学品製造プロセスに係る技術開発として、以下の研究内容に取り組む。

(i) 砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発

反応経路として、砂から、テトラアルコキシシラン等の中間原料を経由し、そのケイ素－酸素結合の一部をケイ素－炭素結合に変換することによる、有機ケイ素原料製造法の開発や、高機能有機ケイ素部材の原料として期待されているビルディングブロック型の有機ケイ素原料製造法の開発及び高活性ケイ素化学種を経る有機ケイ素原料製造法の開発等に取り組む。

(ii) 有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発

有機ケイ素部材の代表であるシリコーンの主要構造である「ケイ素－炭素結合」及び「ケイ素－酸素結合」、特異な電子・光物性を持つ有機ケイ素部材であるポリシランの主要構造である「ケイ素－ケイ素結合」の3つの基本的な含ケイ素結合形成のための触媒技術・触媒プロセス技術開発に取り組む。

(2) 規模 総事業費 (需給) 16 億円／8 年 (委託) を想定

平成 24、25 年度 (経済産業省 (METI) 直執行) 予算：各 2 億円 (一般)

平成 26 年度予算：2 億円 (需給)

(3) 期間 平成 26 年度～33 年度 (8 年間)

[平成 24、25 年度は METI 直執行。]

[平成 26～33 年度の 8 年間で NEDO 執行予定。]

4. 評価内容

(1) プロジェクトの位置付け・必要性について

1) NEDOプロジェクトとしての妥当性

本プロジェクトの研究開発は、民間企業はシーズとなる技術を有しておらず、学術レベルでの基礎技術を元に民間企業が実用化技術とする必要があり、現段階において民間に任せて開発を進めるのは困難である。

本プロジェクトは、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る長期プロジェクトである未来開拓型研究として平成24年度から経産省直執行プロジェクトとして実施されているものである。また、内閣府総合科学技術会議が策定した、「科学技術イノベーション総合戦略 (平成25年6月6日)」において、クリーンで経済的なエネルギーシステムの実現のために重点的に取り組むべき技術開発として位置づけられている。さらに「独立行政法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 第3期中期計画」において、「化石

資源からの脱却や低炭素社会の実現のためのキーテクノロジーであり、我が国が世界トップレベルの技術を有する触媒技術を活用し、国際的優位性を確保しながら、資源問題・環境問題を同時に解決することを目指して新規なGSCプロセスの技術開発を実施する。」と明記しており、本プロジェクトはこの計画に基づき、NEDOが実施することが適当である。

2) 目的の妥当性

この分野の日本企業は高い技術力を有しているが、生産プロセスにかかる問題（SiO₂からのSiの生産において多大なエネルギーが必要でその製造コストが高い点、硬化触媒として白金触媒を使用しており、高価であると共に今後の供給に不安がある点、Si-C結合やSi-H結合を形成するプロセスで原料由来の多量の無機塩が副生し、原料が高価であると共に環境負荷が高い点）や、製品の品質にかかる問題（製造工程で使用する触媒成分や塩素が製品中に残存することにより製品の劣化が起こる点、有機ケイ素製品の構造制御が不十分なため、耐熱性等の物性が不十分である点）を抱えており、解決が望まれている。

(i) のSiを経由しない有機ケイ素原料の触媒技術が開発されれば、従来法と比べてコスト競争力の高い技術となるため、十分に開発する意義がある。また、(ii) の触媒技術が開発されれば、有機ケイ素製品の高性能化、製品の安価・安定供給、用途の拡大等に資するため、その産業上の意義は大きく、有機ケイ素工業の省エネ化、産業競争力の強化に繋がるものである。

(1) プロジェクトの位置付け・必要性についての総合的評価

本プロジェクトは、国内トップクラスの実施主体により実施される長期プロジェクト(未来開拓型研究)として平成24年度から経産省直執行プロジェクトとして実施されており、また、内閣府総合科学技術会議が策定した「科学技術イノベーション総合戦略」にもクリーンで経済的なエネルギーシステムの実現のために重点的に取り組むべき技術開発として位置づけられている重要な研究開発である。有機ケイ素工業の産業競争力低下のリスクを避けるためにも必要性が高い。また研究開発の難度が高いため民間に任せるのは困難な基盤技術開発を実施するものであり、NEDOプロジェクトとして実施すべき基盤的技術開発である。

(2) プロジェクトの運営マネジメントについて

1) 成果目標の妥当性

本プロジェクトの成果目標は以下の通りである。

- (i) 砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発
 - ・1 kgスケールでケイ砂の反応率50%、有機ケイ素原料の選択率50%を達成する。

- ・触媒反応の実用化に向けて必要となるプロセス要素技術を特定し、その工業的実施可能性を1 kg スケールで検証する。
 - （ii）有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発
 - ・1 kg スケールで有機ケイ素原料の反応率80%、有機ケイ素部材の選択率80%を達成する。
 - ・有機ケイ素部材中の残留触媒の低減を達成する。
 - ・有機ケイ素部材の構造制御技術を確立する。
- 以上の通り具体的な成果目標を設定している。

2) 実施計画の想定と妥当性

上記最終目標を達成するために中間年度に達成することが求められる中間目標を3、5、8年目に設定している。

（i）砂からの有機ケイ素原料製造プロセス技術開発

【中間目標（26年度末）】

複数の反応経路とそれぞれの反応における触媒の中心元素の種類や配位子構造等について複数の候補を選定する。

【中間目標（28年度末）】

ケイ砂を原料に用いる際の技術課題を抽出する。
反応経路と触媒について有望な組合せを絞り込む。

【中間目標（31年度末）】

ケイ砂の反応率50%、有機ケイ素原料の選択率50%を達成すると見込まれる反応経路と触媒を選定し、温度や反応媒体等の最適な反応条件について指標を得る。

原料に用いるケイ砂の処理方法等を選定する。

（ii）有機ケイ素原料からの高機能有機ケイ素部材製造プロセス技術開発

【中間目標（26年度末）】

複数の高機能有機ケイ素部材を想定した各種反応に用いられる触媒の活性中心元素や配位子構造等について複数の候補を選定する。

【中間目標（28年度末）】

反応経路と触媒について有望な組合せを絞り込む。

【中間目標（31年度末）】

有機ケイ素原料の反応率80%、有機ケイ素部材の選択率80%を達成すると見込まれる反応経路と触媒を選定し、温度や反応媒体等の最適な反応条件について指標を得る。

また各目標を達成するために適切な年度予算を設定する。既存技術の改良では対応できない新たな技術開発項目を計画に盛り込み、また、目標を達成

<p>するために、国内で蓄積された基礎技術を取り込み、プロセス開発までを視野に入れた計画としている。</p>
<p>3) 評価実施の想定と妥当性</p> <p>外部有識者による評価として、プロジェクト期間の 3、5、8 年目に中間評価を、また終了後に事後評価を、NEDO にて作成している標準的評価項目・評価基準（基礎的基盤的研究開発）に則して行う予定である。</p>
<p>4) 実施体制の想定と妥当性</p> <p>本プロジェクトで実施する研究開発の基礎となる個別の要素技術を保有する大学・研究機関と、技術の実用化において事業主体となる有機ケイ素工業に関わる国内企業が参画し、相互の連携により技術開発を実施する、オールジャパンの技術開発体制を想定している。なお、触媒開発や有機ケイ素化学の分野において豊富な経験を有する研究者に、プロジェクトリーダーを委嘱する予定である。</p>
<p>5) 実用化・事業化戦略の想定と妥当性</p> <p>プロジェクト終了後に参画企業が成果を持ち帰り、実用化に向けた技術開発を実施することを想定しているが、研究開発項目の進捗によっては、プロジェクトの終了を待たずに実用化に着手させることを想定している。</p>
<p>6) 知財戦略の想定と妥当性</p> <p>委託研究開発の成果に関わる知的財産権については、「産業技術力強化法（平成 12 年 4 月 19 日法律第 44 号）」第 19 条及び同法施行令第 11 条の規定等に基づき、同法令を遵守することを条件に原則として、委託先に帰属させることを想定している。</p>
<p>7) 標準化戦略の想定と妥当性</p> <p>必要に応じて、国際標準提案に係る戦略的かつ迅速な国際標準獲得等のための体制を整備することを想定している。</p>
<p>(2) プロジェクトの運営マネジメントについての総合的評価</p> <p>成果目標とそれに至る道筋を定めた中間目標を設定しており、また新たに開発することが必要な技術開発項目を設定している。また、評価は、プロジェクト開始後 3、5、8 年度目と終了後に、標準的評価項目・評価基準に即して外部評価を実施する予定であり、マネジメントは妥当である。</p>
<p>(3) 成果の実用化・事業化の見通しについて</p>
<p>1) プロジェクト終了後における成果の実用化・事業化可能性</p> <p>計画の策定に当たっては、事業化の観点で必要な技術開発を開発項目として設定し、各々の技術開発成果は具体的なアウトプットを想定しているため、技術開発が目標通り達成されれば事業化につながることを期待される。課題は明確であり、課題解決の方針もある。</p>

2) 成果の波及効果

技術的には、世界的にも強い日本の触媒分野の更なる技術レベル向上に貢献する。

本開発で得られる技術で製造するシリコン等の有機ケイ素部材は、LEDや太陽電池等の電子工業分野の他、塗料、ゴム（エコタイヤ）など幅広い産業に用いられており、その技術レベルが向上することにより、更に多くの産業分野への波及効果が期待できる。

(3) 成果の実用化・事業化の見通しについての総合的評価

アウトプットは明確であり、事業化の可能性は高い。技術開発の課題は明確であり、その解決方針もある。プロジェクトの技術開発により、錯体触媒を中心とした触媒技術のレベル向上に資するとともに、人材育成も期待される。また、本プロジェクトで開発する技術が事業化されると、シリコン等の有機ケイ素部材のユーザー全般に影響を与えることになり、その波及効果は多くの産業分野に及ぶことが期待される。

様式3

「有機ケイ素機能性化学品製造プロセス技術開発 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26年2月12日
NEDO
環境部

NEDO POST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。

1. パブリックコメント募集期間
平成26年1月30日～平成26年2月12日
2. パブリックコメント投稿数<有効のもの>
計0件

以上