

「有機ケイ素機能性化学品製造プロセス技術開発／
有機ケイ素プロジェクト」最終成果報告会

有機ケイ素プロジェクトの概要
—砂を原料とするケイ素化学基幹原料の合成と
次世代有機ケイ素部材への応用—

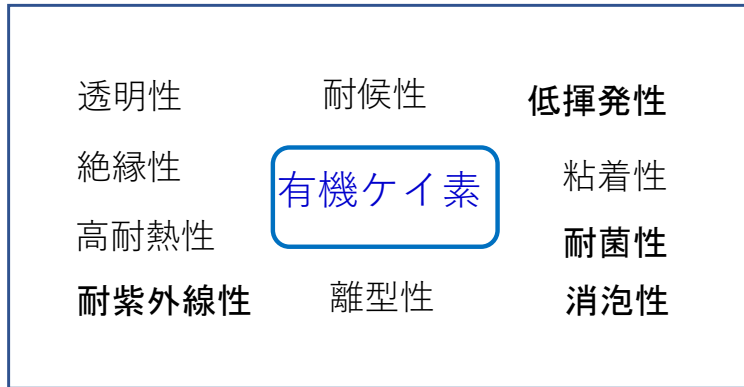
(国研)産業技術総合研究所
触媒化学融合研究センター
プロジェクトリーダー 佐藤 一彦

2022年2月25日

有機ケイ素部材の特徴1 用途・市場規模

シリコーン、シランカップリング剤、ポリシランなどの有機ケイ素部材は、広い分野で使用される高機能化学品

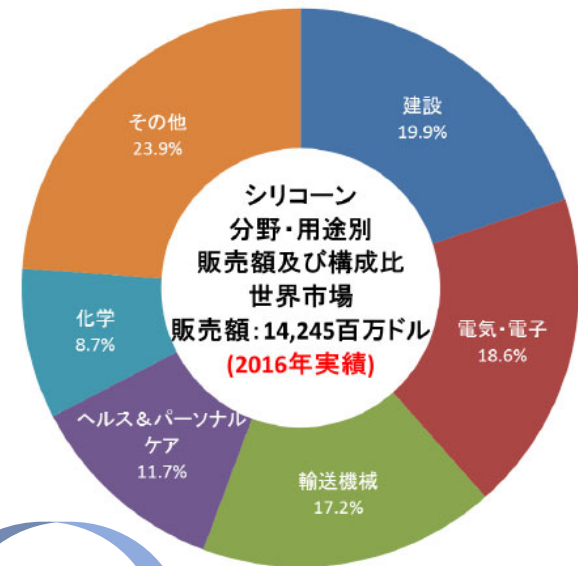
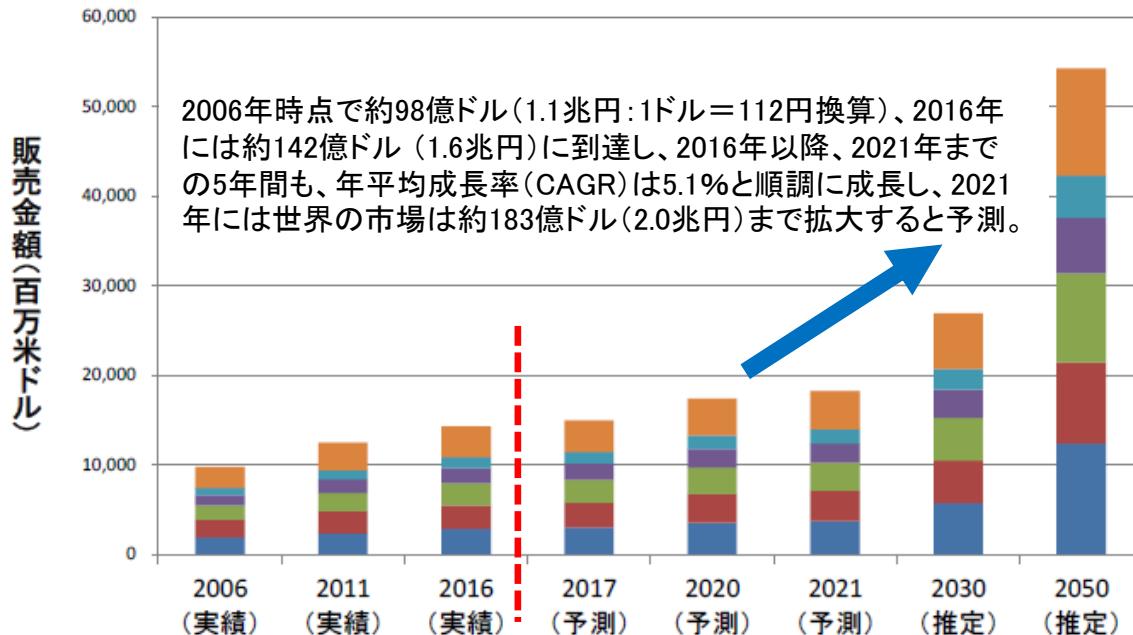
無機と有機の性能を併せ持つ



広い分野で使用される高機能化学品



有機ケイ素部材の市場予測



各分野・用途別の需要の伸びが緩やかに市場を拡大させていくと予想される。

有機ケイ素部材の特徴2

LCAの視点からとらえた有機ケイ素部材の特徴

有機ケイ素部材は、その使用段階において、CO₂削減の大きな波及効果がある。

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、他の材料を使用した場合に比べ、12,226千t-CO₂の削減効果がある。

同様に各用途のCO₂削減効果を考慮すると、有機ケイ素部材の使用により、現在

- ・全世界で約5,420万t/年
- ・日本の市場規模では約570万t/年のCO₂削減に貢献している。

シリコン工業会
「シリコンのカーボンバランス シリコンの温室効果ガス排出量とその利用による温室効果ガス削減効果」より引用

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

有機ケイ素部材の特徴2 つづき

LCAの視点からとらえた有機ケイ素部材の特徴の具体例

有機ケイ素化学品は製品使用に伴って、GHG排出削減に大きく貢献する
【c-LCA (カーボンLC分析) または Avoided emissions (GHG削減貢献)】

*** 自動車エンジン廻り用エラストマー**

シリコンゴムは高温のエンジン作動を可能とする唯一の材料。→エンジン効率の向上に直結。

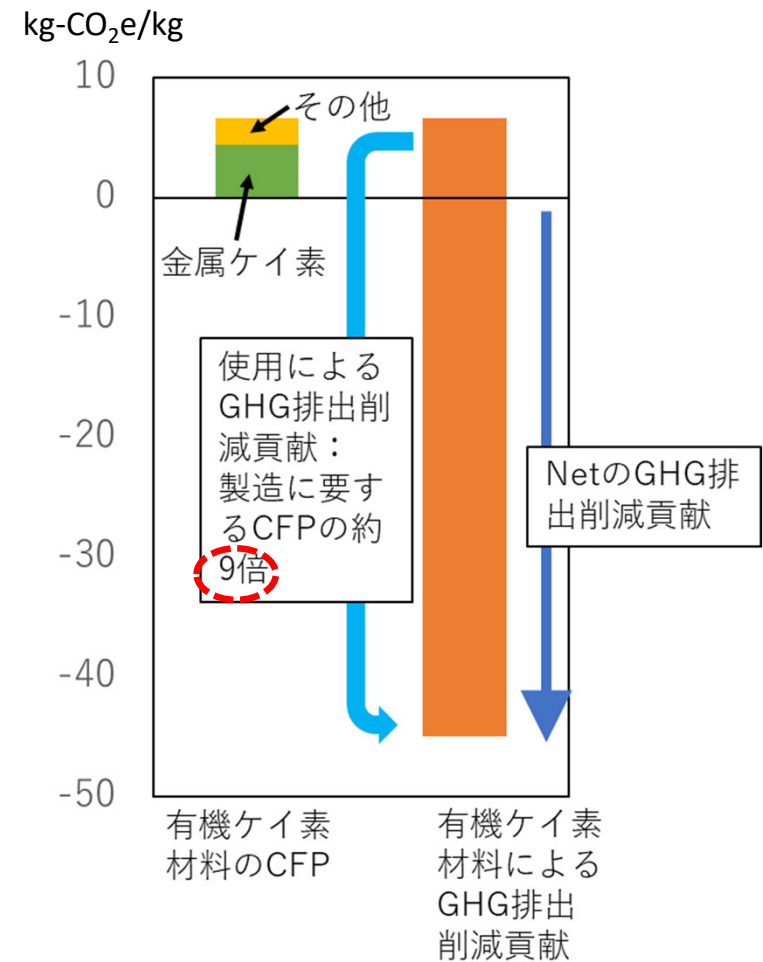
*** 複層ガラス窓ユニット用シーラント**

シリコンシーラントは、紫外線環境下でも脆化せず、複層ガラス窓の断熱性能を長期間保持させる唯一の材料。→空調エネルギーを大幅に低減。

cf. 一般的なプラスチックの場合：

CFPの2.6 倍のGHG排出削減貢献

➡ 優れた有機ケイ素材料の開発を通じた普及拡大



有機ケイ素材料によるGHG削減貢献

有機ケイ素部材：現行製造法の課題

有機ケイ素は無機と有機の性能を併せ持つ特徴的な物性を示すため、幅広い製品で使用され、将来用途も期待されている



原料・部材製造工程での課題

(1) コスト面

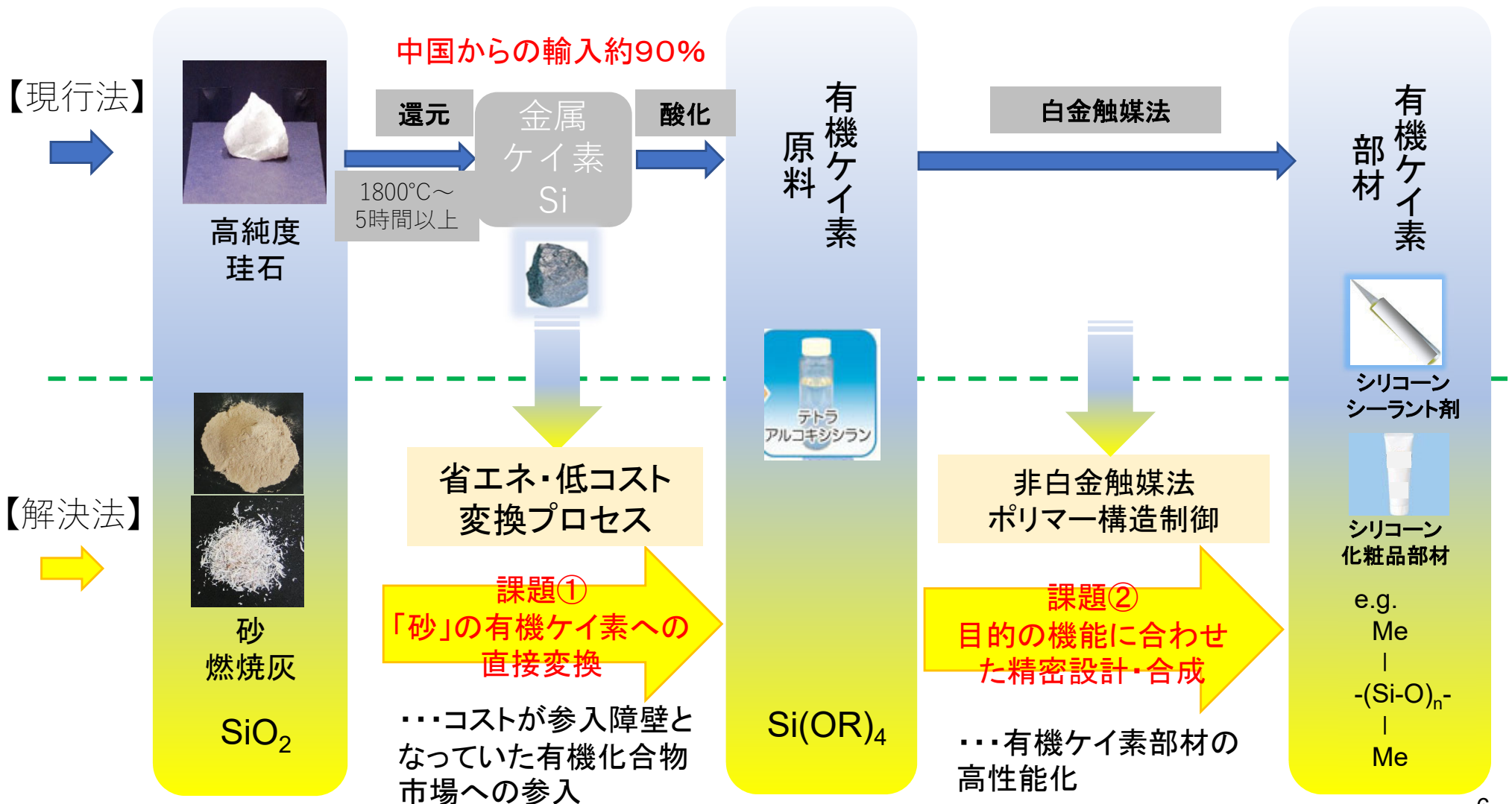
- ・SiO₂から中間原料の金属Siを製造する工程で1800°C程度の還元用熱エネルギーを使用
- ・希少金属である白金(Pt)を触媒として使用
価格例：シリコン系(シリコンオイル原料>¥10,000/kg)、炭素系(流動パラフィン ¥2,000/kg~)

(2) 性能面：

- ・有機ケイ素部材の配列構造がランダムであることによる発現性能への影響
- ・Pt触媒コンタミ(残留)による製品性能への影響

本プロジェクトの目的

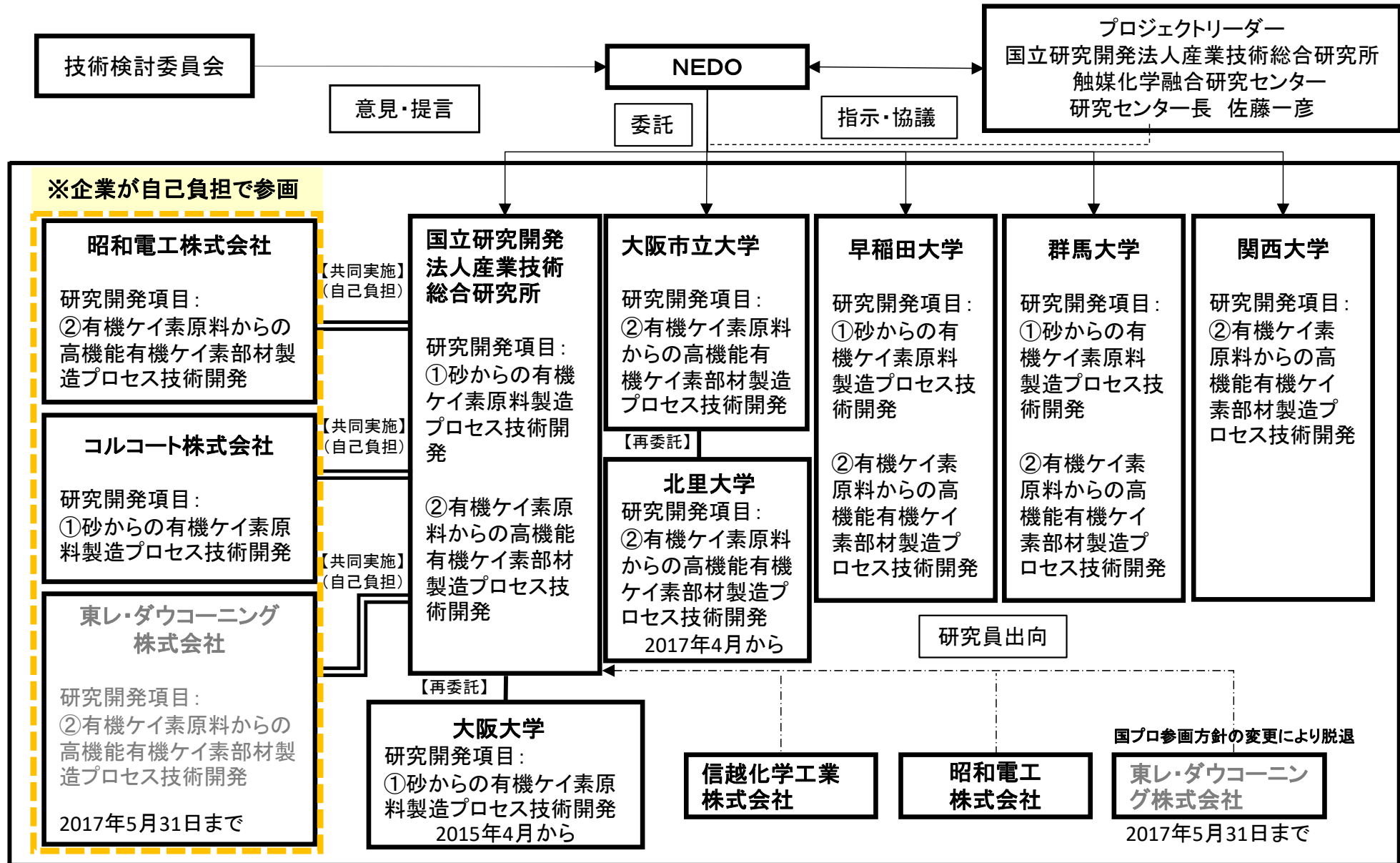
高機能な有機ケイ素部材を安定的に供給することを目的に、砂の直接変換による金属ケイ素を経由しない有機ケイ素原料の製造方法と、有機ケイ素原料から白金触媒を使用しない高機能な有機ケイ素部材の製造方法を開発する。



研究開発の実施体制

産総研を中心に、各大学を委託先として研究開発を実施。

実用化の入り口を見越し、企業は集中研(産総研)への研究員出向に加え共同実施先としても参画。



主な成果事例①：砂や灰からテトラアルコキシシラン直接合成

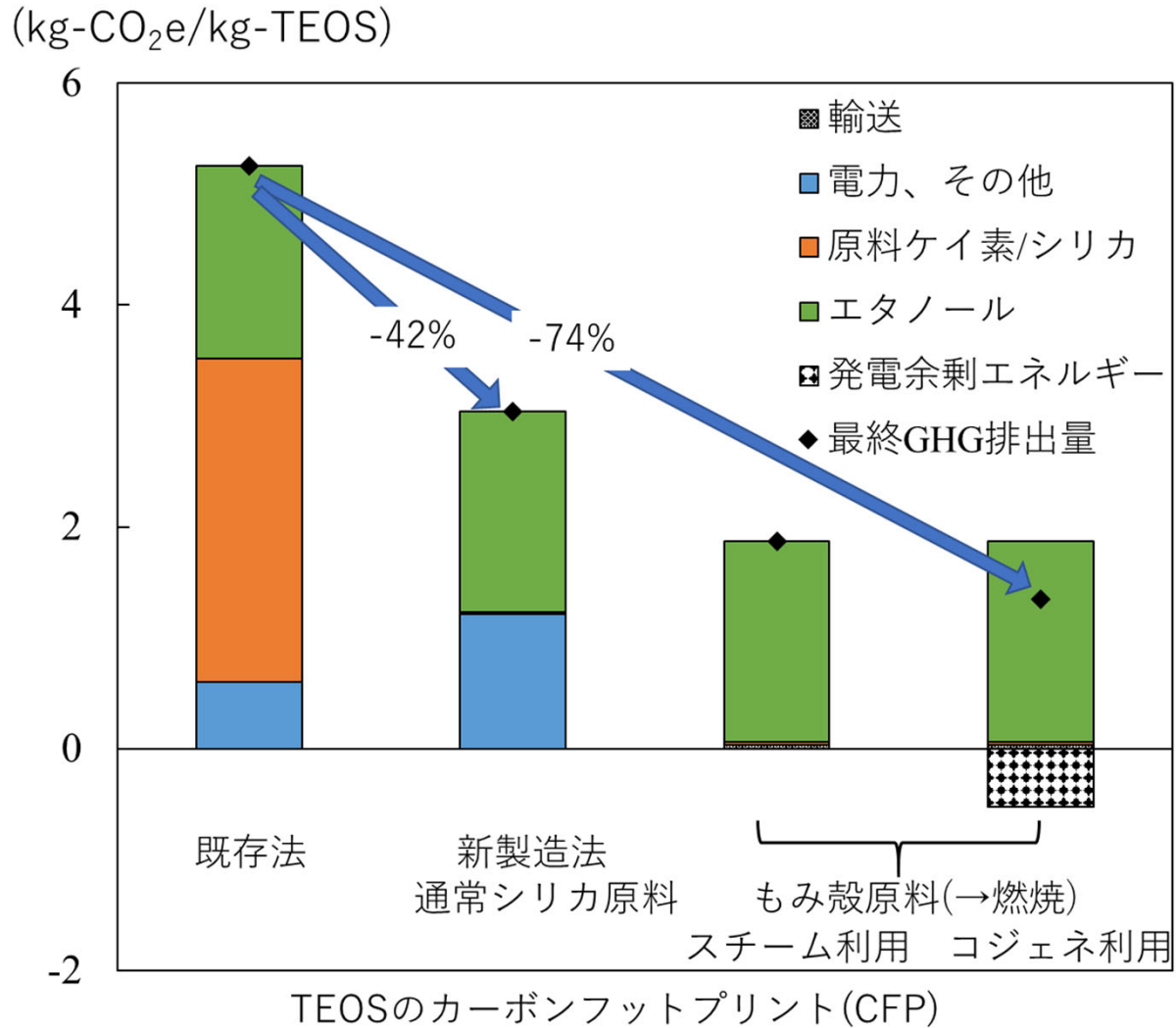


- ケイ素化学の基幹原料であるテトラアルコキシシランを短時間に高収率で合成
- 無機脱水剤を使うことで分離・回収・再利用が容易となり、コスト面でも優位に
- 砂、灰、産業副産物など、安価で豊富にあるさまざまなケイ素源が利用可能



主な成果事例①：砂や灰からテトラアルコキシシラン直接合成

既存法と新製造法についてのLCA(CO₂排出量)



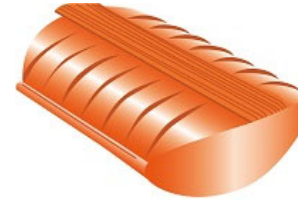
T. T. H.Nguyen, et al., Bioresource Technology, 344 (2022), 126188.

金属ケイ素を経由する現行製造法よりも大幅なCO₂排出量削減のポテンシャル

有機ケイ素材料

シリコンレジンの基本単位

調理器具

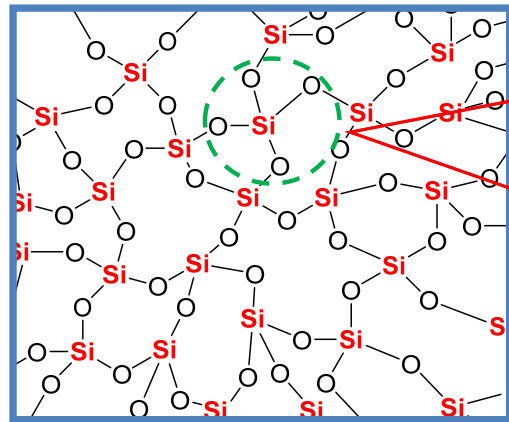


シーリング剤

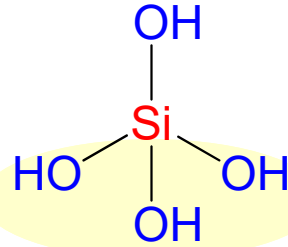


LED封止剤

ガラス



ガラスの基本単位



オルトケイ酸

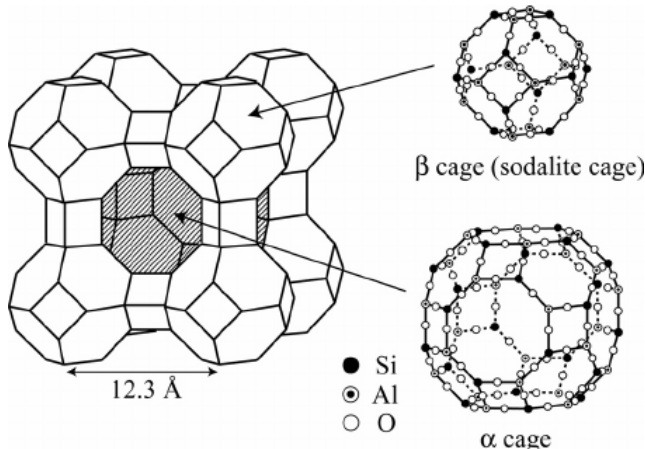
本PJ成果

M. Igarashi et al., *Nature Communications* 8, 140 (2017).

M. Igarashi et al., *Nature Communications* 12, 7025 (2021).

無機材料（触媒、吸着材料など）

ゼオライトの基本単位



イオン交換・吸着



石油改質触媒

植物・藻類

稲

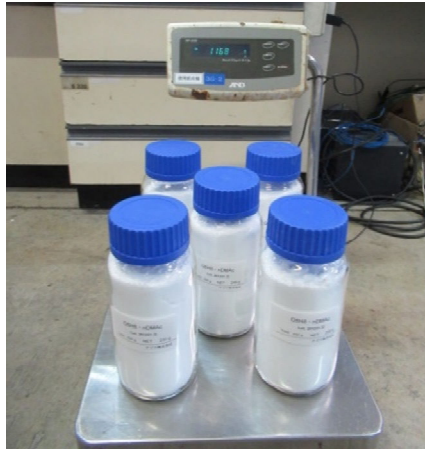
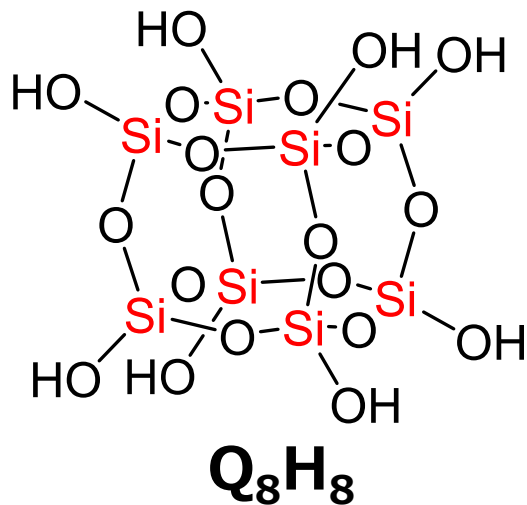


ケイ素成分

珪藻



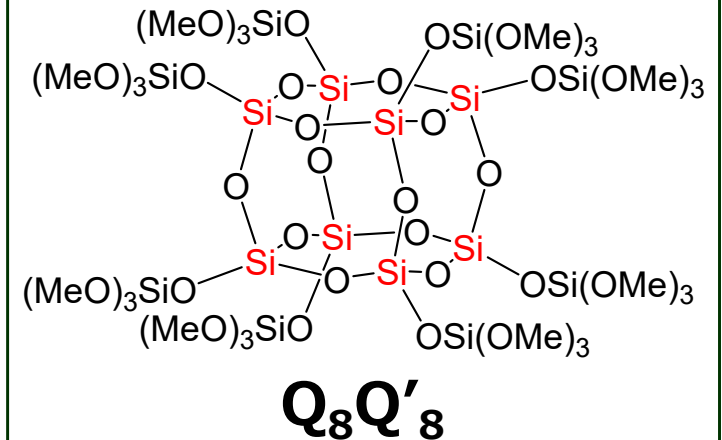
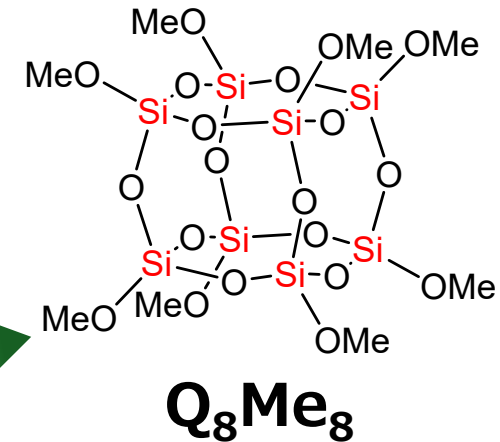
ケイ酸質の被殻に覆われている

超微小シリカナノ粒子 (Q₈H₈)

オルトケイ酸のかご型8量体

1 kg/バッチでの合成を実証

Q単位かご型シロキサン



- 超微小シリカナノ粒子である、オルトケイ酸のかご型8量体 (Q₈H₈) の1 kgスケールで合成
- Q₈H₈を前駆体として、種々Q単位かご型シロキサン化合物の合成・単離に成功
- 構造が精密に制御された高性能かつ高機能なSiO₂材料の開発に期待

【高分子】

分子量、分子量分布、分岐度
架橋の密度，均一さ など



力学強度、粘弾性、熱物性
光特性、電気特性、結晶性

例) ポリエチレン...

重合法 (触媒) に応じて
物性の異なる構造を作り分けている



多分岐, 低密度



直鎖状, 高密度

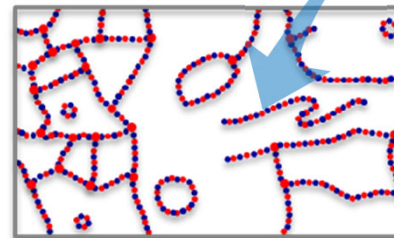
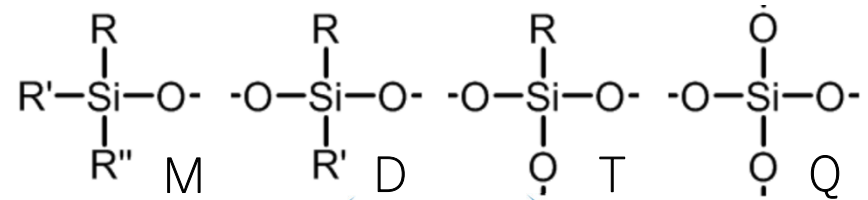


超高分子量

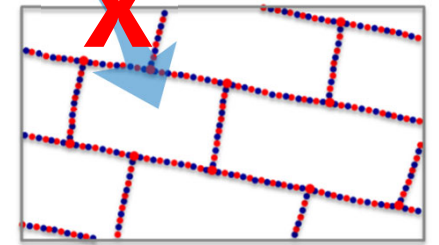


ポリシロキサン...

単位骨格... 形成反応の制御が難しい



現状



制御された構造

シロキサン骨格の精密合成法が不足

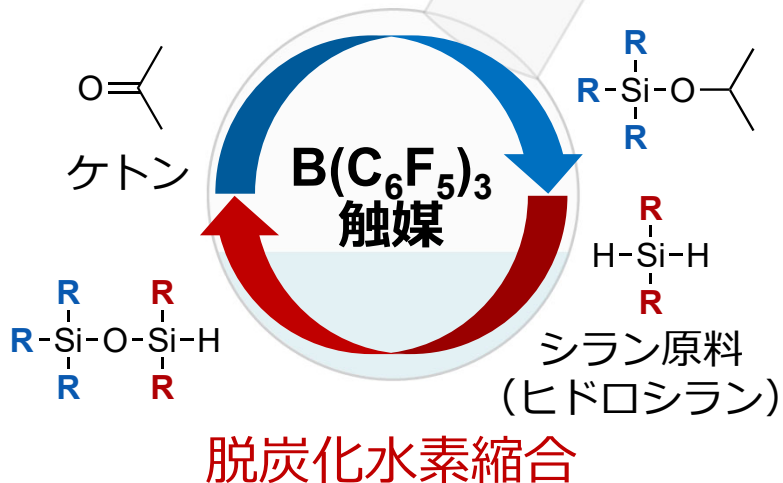


構造制御により未知の物性を引き出す

主な成果事例③：
シロキサン分子構造制御（配列制御オリゴシロキサン）

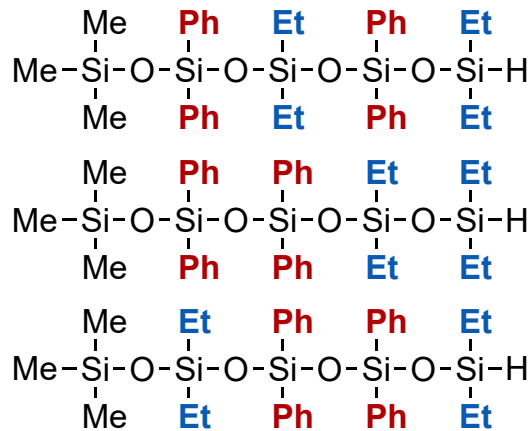
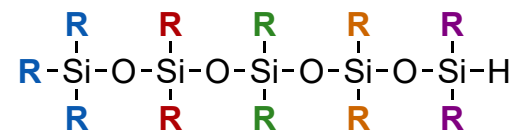
ワンポット配列制御合成法

カルボニル化合物のヒドロシリル化

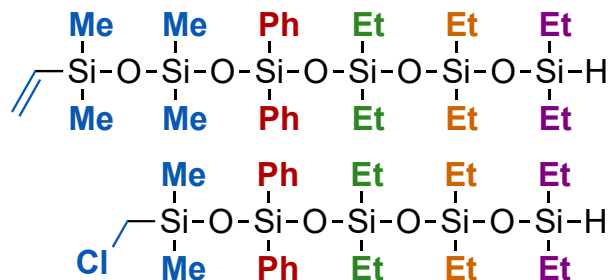


Si ⇒ Si ⇒ Si ⇒ Si ⇒ Si の順に
原料投入

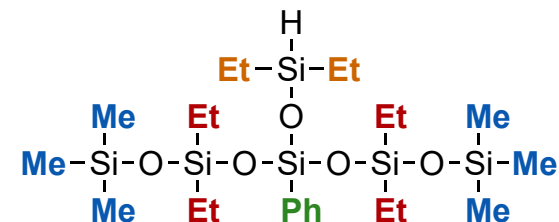
順番通りにシロキサン結合伸長



配列異性体の作り分け



官能基許容性
(オレフィン・クロロアルキル基)

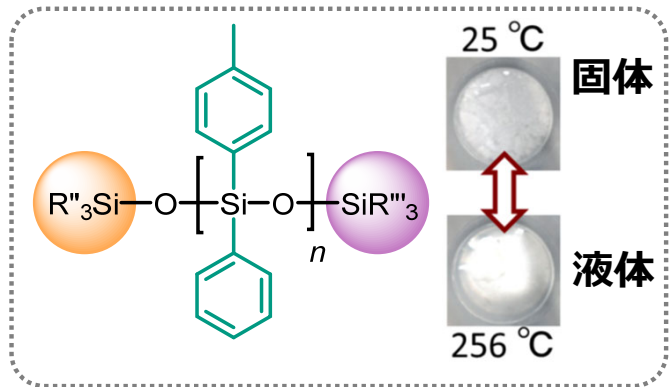
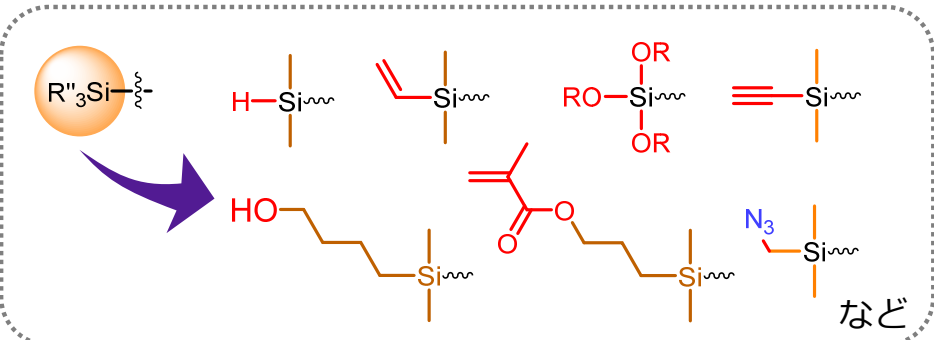
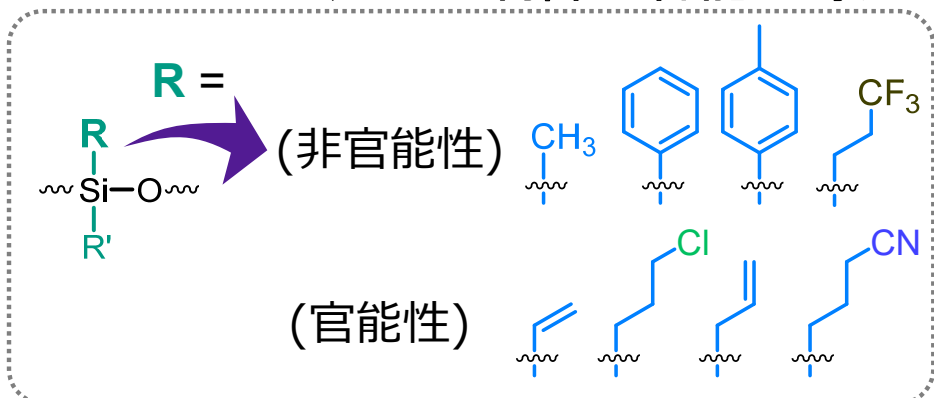


分枝構造制御

多種多様な配列制御シロキサンを短時間で簡便に合成可能

主な成果事例④：

分子量制御・官能基導入ポリシロキサンの簡便な精密合成



➤ (1) 様々な側鎖構造を持つポリシロキサン

- 側鎖構造に応じて物性を調節可能
- 側鎖構造の変換や架橋反応により機能化が可能

➤ (2) 末端に有用な官能基を持つポリシロキサン

- 他の分子, 高分子, 材料との高效率結合形成が可能となった

➤ (3) ポリ(フェニル-*p*-トリルシロキサン) (可溶性, 可融性)

- 「熱可塑性ポリシロキサン」の基材として提案

合成した各種ポリシロキサンの分子量と分子量分布

PDMS: $M_n = 2000-100000$ 以上, $M_w/M_n = 1.03-1.14$
 その他: $M_n = 2000-60000$, $M_w/M_n = 1.05-1.18$

ポリシロキサンの子設計と精密合成により、シリコーン材料、シリコーン変性有機高分子材料、有機-無機複合材料の高性能・高機能化に貢献

まとめ

有機ケイ素原料製造技術

Si-C結合 形成技術

Si-O結合 形成技術

Si-Si結合 形成技術

テトラアル
コキシシラ
ン製造技術
 Si(OR)_4

有機・ヒドロシ
ラン類製造技術
 $\text{Me}_2\text{Si(OMe)}_2$
 $\text{H}_n\text{Si(OMe)}_{4-n}$

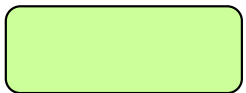
ヒドロシリル化
触媒技術
Fe・Co触媒
アリル系用触媒

ビルディングブ
ロック技術
ポリシロキサン
構造制御技術

高次シラン
製造技術
 Si_2H_6



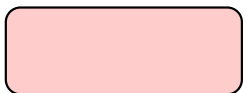
実用化に向けての検討が具体化した技術



実用化が有望な技術



実用化が期待される技術



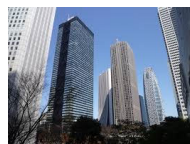
実用化の可能性が出てきた技術



シリコーン
レジン



シリコー
ンゴム



シーリング剤
コーティング剤



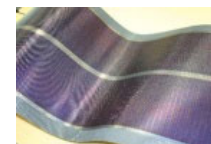
はく離紙



シランカッ
プリング剤



封止材



薄膜シリコン



半導体関連材料

～本プロジェクトの成果の活用にご関心のある産業界からのコンタクトをお待ちしております～

謝辞

本発表の研究は、

経済産業省未来開拓研究プロジェクト

「産業技術研究開発（革新的触媒による化学品製造プロセス技術開発プロジェクト）」（2012～2013）

および

国立研究開発法人 新エネルギー・産業技術総合開発機（NEDO）

「有機ケイ素機能性化学品製造プロセス技術開発」（2014～2021）

の一環として行われた。