

戦略プロポーザル

# 反応・分離を技術革新する 電子・イオンの制御科学

～持続可能な反応プロセスを目指して～

## STRATEGIC PROPOSAL

Science on electronic and ionic control  
for innovative technology of reaction and  
separation

- Aiming for a sustainable reaction process -



研究開発戦略センター（CRDS）は、国の科学技術イノベーション政策に関する調査、分析、提案を中立的な立場に立って行う公的シンクタンクの一つで、文部科学省を主務省とする国立研究開発法人科学技術振興機構（JST）に属しています。

CRDS は、科学技術分野全体像の把握（俯瞰）、社会的期待の分析、国内外の動向調査や国際比較を踏まえて、さまざまな分野の専門家や政策立案者との対話を通じて、「戦略プロポーザル」を作成します。

「戦略プロポーザル」は、今後国として重点的に取り組むべき研究開発の戦略や、科学技術イノベーション政策上の重要課題についての提案をまとめたものとして、政策立案者や関連研究者へ配布し、広く公表します。

公的な科学技術研究は、個々の研究領域の振興だけでなく、それらの統合によって社会的な期待に応えることが重要です。「戦略プロポーザル」が国の政策立案に活用され、科学技術イノベーションの実現や社会的な課題の解決に寄与することを期待しています。

さらに詳細は、下記ウェブサイトをご覧ください。

<http://www.jst.go.jp/crds/about/index.html>

## エグゼクティブサマリー

本プロポーザルは、エネルギー利用や物質生産時に必要になる革新的な化学プロセスに資する反応・分離技術に関する研究開発戦略の提案である。具体的には電気、光、電磁波や低位熱などのエネルギー源を活用した反応や反応場分離を活用した分離など、電子やイオンを能動的に制御することで、反応の速度と選択性の両立を可能にする革新的反応・分離技術の研究開発戦略である。これにより、従来は高温高压条件であった反応を大幅に緩和する、多段であった反応を一段にする、あるいは分離操作を不要にすることで、化学プロセスの簡素化やエネルギー消費の大幅削減を実現するとともに、その先の持続可能な炭素・水素循環社会の実現に資する技術革新につなげることができる。

COP21 合意を受けて、我が国では温室効果ガス排出削減の中期目標として 2030 年度に 2013 年度比 26% 減の水準の達成、また長期的目標として 2050 年までに 80% 削減を目指すことが示された。2050 年を見据えた研究開発としては、「エネルギー・環境イノベーション戦略 (NESTI2050)」で分野別技術が特定されており、これら分野に含まれる物質変換技術についても研究開発の具体化が進められている。一方、欧米における物質変換技術の研究開発では、風力発電や今後のコスト低下が著しいとされている太陽光発電などの再生可能電力の余剰電力を積極的に活用することで、水素やメタン製造を目指した Power-to-Gas、さらには液体燃料や化学品製造を目指した Power-to-X への取り組みが始まっている。

また究極的な持続可能性社会を目指すためには、現状の化石資源に依存したエネルギー・物質利用の流れからの脱却が必要であり、炭素・水素の循環的利用を可能にする技術への取り組みが重要になる。この将来を想定した炭素・水素循環のスキームを考えると、従来とは異なる CO<sub>2</sub> や水などの化学ポテンシャルの低い物質も主原料となるため、大きなエネルギーを必要とするアップヒル型反応（吸熱反応）が必須になる。このようなアップヒル型反応に電気、光などの制御性の高いエネルギー源を活用することは本質的に効率的な方法であり、それに加えて、以下に示す機能・効果を付与・拡充することで、従来の熱的反応では困難であった反応を実現できる可能性がある。

- ◇ 熱的反応では高温条件が必要な活性化エネルギーの高い反応であっても、光や電気を活用することにより中低温条件で触媒機能を最大限活かした反応を実現する
- ◇ 電場・電磁場などの外場効果により反応速度を向上（活性化エネルギー低下）させる
- ◇ 反応場分離により反応と分離を同時達成し単独の分離操作を不要にする
- ◇ 反応場分離により平衡制約の反応を非平衡的に進める

本プロポーザルでは日本および欧米の研究開発動向、長期的な視点、および新しい知見やシーズの芽生えに鑑み、以下に示す研究開発課題の推進を提案する。またこれにより革新的な反応・分離技術の実現を目指すものである。

- ◆ 電気を活用した反応・分離技術：固体イオニクス材料を用いた電気化学

- ◆ 光・電磁波を活用した反応・分離技術：光半導体触媒、光金属錯体触媒、表面プラズモン共鳴、マイクロ波化学とそのための材料開発
- ◆ バイオインスパイアードな反応・分離技術：人工酵素の開発など
- ◆ 熱を含む各種エネルギー源を複合的、融合的に活用する反応・分離技術
- ◆ 電場・電磁場等による外場効果を反応に活用するための研究開発
- ◆ 上記方法に関する新規材料：中低温作動型などの新規イオニクス材料、触媒（電極触媒、光触媒など）、反応場分離のための材料（規則性多孔材料など）
- ◆ 各種反応、外場効果も含めた詳細な反応機構解明などの基礎となる学理の構築

なお本分野は日本が得意とする固体イオニクスの材料分野が大きな役割を持つこと、および近年のオペランド計測技術や計算化学の目覚ましい進展により詳細な反応機構解明が可能になり始めていることなどを考えると、今後上記課題に国として戦略的に取り組むことは、世界を先導できる分野として本分野を育てる良好なタイミングと考えられる。

以下に本プロポーザルが提案する革新的反応・分離技術のコンセプトイメージを示す。

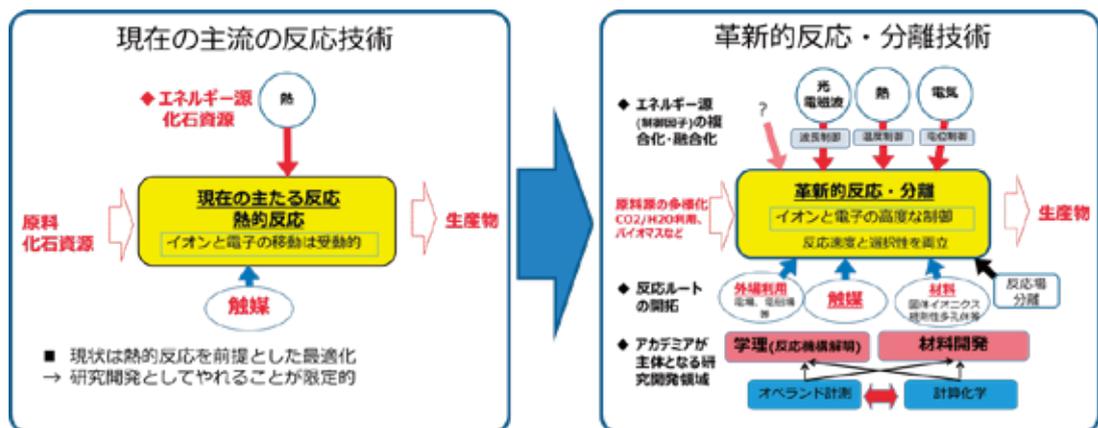


図 革新的反応・分離技術のコンセプトイメージ

本提案の研究開発は長期にわたることから、時間軸でフェーズを分けて考える必要がある。個々の技術はまだ初期段階にあることから、最初の研究開発フェーズ（現在からおよそ2030年頃まで）は将来の本格利用時の基盤となる基礎研究を進めることが重要と考えられる。研究開発において、特にアカデミアの役割としては、①詳細な反応機構の解明などの基礎の学理の確立、そのための計測技術（オペランド計測）と計算化学との協業、②新規イオニクス材料など技術の要となる有用材料の開発、が重要になる。

このような初期フェーズにおいて基礎研究を長期かつ継続的に行うためには、必ずしも最終目標につながらなくても中期的な目標を立てて、基礎研究の成果が要素技術の一部として取りこまれ、何らかの形でその技術のポテンシャルを見せることが重要になる。このためには、初期フェーズでは原料や生産物にこだわらず、産学連携の研究開発体制の中で各個別企業のニーズを集め、比較的小規模プロセス、オンサイト型製造などでメリット・特徴が発揮できる生産物を目指した反応・分離を行い、その中で基盤となる要素技術の研究開発を盛り込んだ形で進めることが重要である。

## Executive Summary

This report is a strategic proposal related to the research and development (R&D) involved in innovation of reaction processes that form the bases of processes such as energy conversion, chemicals synthesis, etc. Specifically, it focuses on an innovative reaction and separation technology that enables active control of electrons and ions by utilizing electricity, and/or light, etc. This makes it possible to simplify the chemical process and greatly reduce energy consumption. And it can lead to technological innovation that will contribute to the realization of a sustainable society.

In response to the COP 21 agreement, Japan is aiming to achieve a mandatory 2030 mid-term target reduction of GHG (greenhouse gas) emission by 26% and a long-term target of 80% reduction. Looking ahead to 2050, Japan has identified innovative technology fields in “Energy and Environmental Innovation Strategy (NESTI 2050)”, including chemical processes. Also, looking to Europe and the United States, by utilizing surplus electric power from renewable sources such as solar and wind, Power-to-Gas program, which is conversion to hydrogen or methane, as well as that of power-to-X program aiming for liquid fuels and chemicals, have begun. In addition, to become the ultimate sustainability society, it is necessary to transform from use of fossil resources to cyclical use of carbon and hydrogen. The production scheme in this future will be characterized by existing chemical processes that requires large energy due to the chemical processes based on CO<sub>2</sub> and water. An efficient method to utilize highly controllable energy sources such as electricity and light for chemical processes required much energy is essential, then additionally the following functions and effect would be expected.

- Realizing a reaction which can accomplish high reaction rate and selectivity, even if it is a reaction with high activation energy
- Increasing a reaction rate (decreasing activation energy) by external electric or electromagnetic field effect
- Simultaneous achievement of reaction and separation by virtue of separated reaction field
- Non-equilibrium reaction by separated reaction field

In this proposal, from the view of R&D trends with a long-term perspective in Japan, Europe and the United States, we aim for innovative reaction technology by promoting research and development tasks shown below.

- Reaction technology utilizing photo- and/or electrochemistry using solid state ionic
- Reaction technology utilizing light and electromagnetic waves: optical

- semiconductor catalyst, photo-metal complex catalyst, surface plasmon resonance, microwave chemistry and material development for them
- Bio-inspired reaction technology: Development of artificial enzymes etc.
  - Reaction technology that combines various energy sources including low grade heat
  - Research to utilize the external field effect such as electric field and electromagnetic field
  - New materials related to the above method: New solid state ionic working at intermediate temperature, electrode catalyst, photocatalyst, material for separated reaction field, etc.
  - Understanding of detailed reaction mechanism elucidation including various reactions and external field effects

The concept image is shown below.

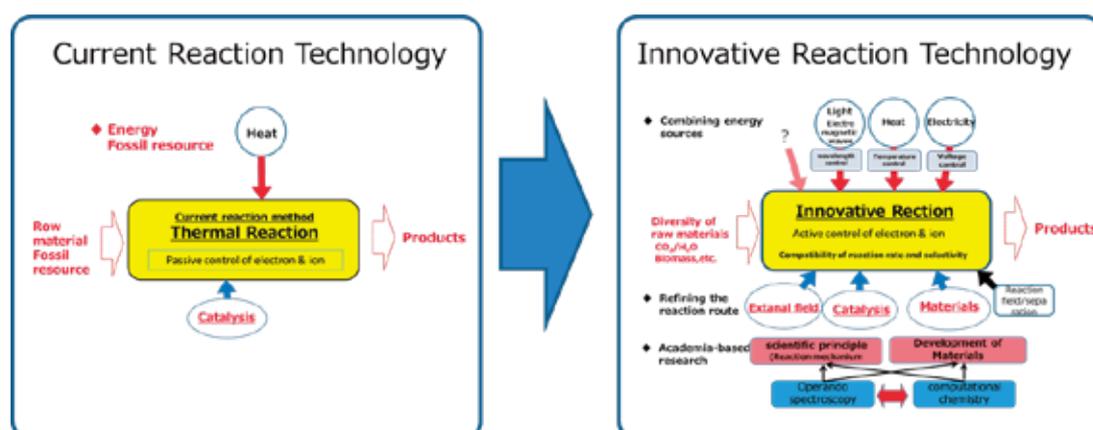


Fig. Concept image of innovative reaction technology

Since the research period for this proposal would be long-term, it is necessary to consider the research phases separately along time. As the current technology would be on early stage, it is important for academic researches to understand detailed reaction mechanisms and to develop useful materials for devices.

In order to continue such basic research for a long term, it is important to demonstrate that the technology from basic research, whether it is a favorite technology or a derivative technology, has become some useful outcome.

## 目 次

エグゼグティブサマリー

Executive Summary

1. 研究開発の内容 .....	1
2. 研究開発を実施する意義 .....	5
2-1. 現状認識および問題点 .....	5
2-2. 社会・経済的効果 .....	12
2-3. 科学技術上の効果 .....	17
3. 具体的な研究開発課題 .....	19
4. 研究開発の推進方法および時間軸 .....	25
付録 1. 検討の経緯 .....	27
付録 2. 国内外の状況 .....	31
付録 3. 専門用語説明 .....	34



# 1. 研究開発の内容

化石資源に依存したこれまでの反応スキームから、持続可能な炭素・水素循環のスキームへの転換のためには、再生可能エネルギー（再生可能電力、太陽光、太陽熱など）を活用しつつ、炭素・水素源についても循環的な利用、例えば CO<sub>2</sub>、H<sub>2</sub>O、バイオマス（セルロース、リグニン、バイオメタン等）の化合物を原料として、H<sub>2</sub>、CH<sub>3</sub>OH、化学品などの有用物質への高効率な物質変換技術が必要になる。このため、対象となる物質の化学ポテンシャルの範囲が現在と比較して広くなり、かつ大きなアップヒル型反応（吸熱反応）を伴うことになる。

電気、光などを活用することは、アップヒル型反応へのエネルギー源として高効率かつ高い制御性を持つ方法であるとともに、今後の研究開発により、従来の熱的反応では達成できなかった反応・分離の技術革新をもたらす可能性がある。以下にそれらを示す。

- ◇ 熱以外のエネルギー源を活用することで、例えば従来高温条件が必要な吸熱反応であっても触媒機能（反応の速度と選択性の両立）を最適化できる中低温条件での反応を実現する（コラム 1 参照）
- ◇ 電場・電磁場などの外場効果により反応速度を向上（活性化エネルギー低下）させる（コラム 2 参照）
- ◇ 反応場分離により反応と分離を同時達成し単独の分離操作を不要にする（コラム 3 参照）
- ◇ 反応場分離により平衡制約のある反応を非平衡的に進める

図 1 は提案する革新的反応・分離技術のコンセプトイメージである。

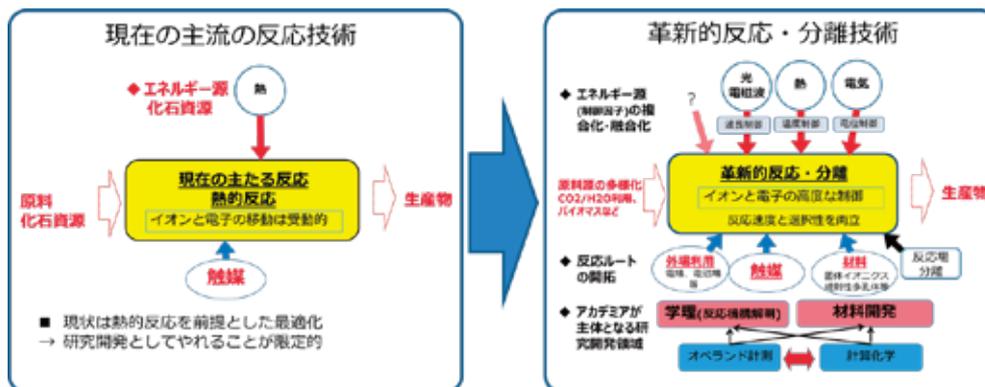


図 1 革新的反応・分離技術のコンセプトイメージ

このような革新的反応・分離技術に関する研究開発課題を以下に示す。

- 電気を活用した反応・分離技術：固体イオニクス材料を用いた電気化学
- 光・電磁波を活用した反応・分離技術：光半導体触媒、光金属錯体触媒、表面プラズモン共鳴、マイクロ波化学とそのための材料開発
- バイオインスパイアードな反応・分離技術：人工酵素の開発など

- 熱を含む各種エネルギー源を複合的、融合的に活用する反応・分離技術
- 電場・電磁波等による外場効果を反応に活用するための研究開発
- 上記方法に関する新規材料：中低温作動型などの新規イオニクス材料、触媒（電極触媒、光触媒など）、反応場分離のための材料（規則性多孔材料など）
- 各種反応における反応機構の解明などの基礎となる学理の構築

これらの技術を実現するためには新たなデバイスの創製やプロセスの構築のための研究開発が必要であるが、現在においては技術的には初期段階にあるため、要素技術としての中低温作動型固体イオニクス材料、触媒（電極触媒、光触媒等）、メソポーラス有機シリカなどの規則性多孔体材料などの材料開発、さらには反応素過程の解明などを目指した学理探求の研究開発が初期段階における重要な課題となる。

このような電気、光等を活用した研究開発により、反応自体に新たな反応ルートを開拓することで、高温高压条件であった反応を大幅に緩和する、多段であった反応を一段にする、さらには分離操作を不要にするなど、化学プロセスの簡素化やエネルギー消費の大幅削減を可能にすることが期待できる。

上記研究開発においては産学連携の研究開発が必須となるが、技術としては初期レベルの段階であることから、最初の研究開発フェーズのアカデミアの役割としては、以下のサイエンスベースの研究や新規材料の研究開発の推進が特に重要になる。

- ① 基礎となる学理：化学反応の制御には、電子とイオンが移動することで起こる酸化還元反応機構の詳細を明らかにする。このためには計算化学およびオペランド計測との協業による推進が必須
- ② 電気化学や光化学などを効果的に用いるための材料開発：例えば中低温作動型固体イオニクス材料、触媒（電極触媒、光触媒等）、メソポーラス有機シリカなどの規則性多孔体材料などの材料開発など、要の技術となる新規材料の研究開発

なお、本提案の究極目標である炭素・水素を循環的に利用する社会の構築には、化石資源からの脱却というエネルギー転換も含まれるため、本格的な対応は2050年以降になると考えられ、現時点では炭素・水素循環に係る反応（CO<sub>2</sub>利用や水分解など）へのニーズは必ずしも高いものではない。一方で本提案の技術は技術的には初期レベルであることから、これを実装していくためには長期的な研究開発として、フェーズを分けて推進する必要がある。まずは第一のフェーズとして2030年頃までは将来の本格利用時の基盤となる基礎研究を進めることが重要と考えられる。このような基礎研究を継続的に行うためには、必ずしも最終目標につながらなくても中期的な目標を立てて、基礎研究の成果が要素技術の一部として、何らかの形でその可能性を見せていることが重要となる。このためには、現時点では原料や生産物にこだわらず、産学連携の研究開発体制の中で各個別企業のニーズを集め、比較的小規模プロセス、オンデマンド型、オンサイト型製造などでメリット・特徴が発揮できる生産物を目指した反応・分離技術の研究開発を行い、その中で基盤となる要素技術の研究開発を盛り込んだ形で進めることが重要である。

また本提案が再生可能エネルギー電力に絡んだエネルギーキャリアや電力CO<sub>2</sub>フリー

化などとも関連するため、国としてのこれら長期目標にかかわる計画と整合性を持たせながら、途中段階でのアウトプットも考えた対応も必要になる。

**【コラム 1】 熱的化学反应における課題と電気化学を用いる利点**

工業的な化学反応においては、生産性に十分な反応速度と高い反応転化率が必要であるとともに、目的生産物への高い反応選択性が求められる。固体触媒を用いた化学プロセスにおける熱的反応の場合、低温側では反応速度が遅い反面、触媒への反応物の選択的吸着により反応選択性が向上する。逆に高温側では反応速度が速くなるため、温度に依存した熱力学的平衡組成となる。また、高温では吸着が弱くなり選択性が下がる。このように熱的反応では低温側では速度論的制約が、高温側では熱力学的平衡制約が課題となる。

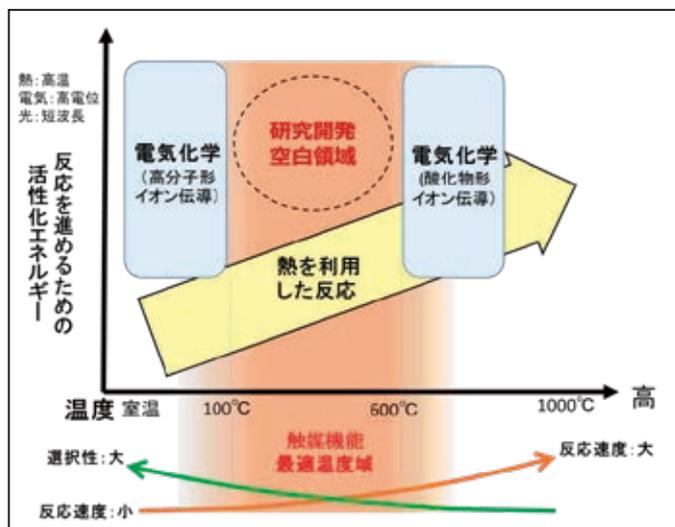


図 C1-1 熱的反応における限界と電気化学との融合の可能性

大きなエネルギーであっても電気（電子エネルギー）として与えることができ、温度条件は独立的に選ぶことができる。このことは今後 100～600°C 程度の中低温域で作動するイオン伝導体、固体イオニクス材料が開発できれば、上図の研究開発がこれまで空白となっている温度領域でのイオン輸送を活かした化学反応が実現でき、革新的な反応・分離技術になる可能性がある。なお、これは電気の例であるが、光などの他のエネルギー源を活用した反応でも同様なことが起きうると考えられる。

【出典】CRDS - FY2014-SP-05 戦略プロポーザル「反応プロセス革新」

また、熱はエネルギー分布（ボルツマン分布）を持つため、熱的反応では目的生産物以外の副次反応も起こりやすい。

さらに、吸熱反応やメタン改質など、大きな活性化エネルギーの必要な反応では、高温条件（例えば 800～1000°C 程度）が必要になり、平衡制約を受けやすい温度域になるなど、反応に必要な活性化エネルギーレベルに対して温度条件は独立的に選ぶことができない。

一方、電気化学による反応の場合、電位の制御により大

【コラム2】 【外場効果】 電場による外場効果の例

- ◆ 電場による反応促進効果(NEMCA,EPOC)が知られている。1)

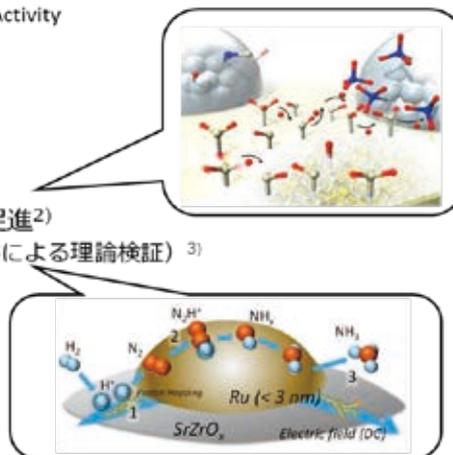
NEMCA: Non-Faradaic Electrochemical Modification of Catalytic Activity  
EPOC: Electrochemical Promotion of Catalysis

- ◆ 効果例：電場中の触媒上で低温(200℃程度)でアンモニアが合成可能

電場印加により

- ・ 触媒表面でプロトンがホッピングし、反応を促進<sup>2)</sup>
- ・ N<sub>2</sub>Hを与える反応ルートが有利になる(計算化学による理論検証)<sup>3)</sup>
- ・ 小型・可搬なアンモニア合成などが可能

オンサイト型として遠隔地での肥料製造プラント、火力発電所における脱硝のためのアンモニア製造プラント、離島などでの風力発電を活用したアンモニア燃料(水素キャリア)合成などを想定



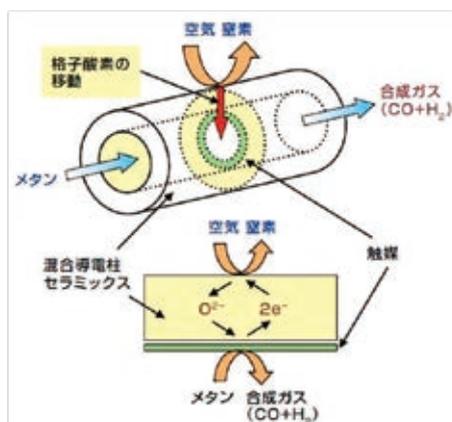
【参考文献】

- 1) M.Stoukides, C.G.Vanenas. Journal of Catalysis. 1981,70,137
- 2) 早稲田大プレスリリース <https://www.waseda.jp/top/news/46989> (2018年3月21日時点)
- 3) JST プレスリリース <http://www.jst.go.jp/pr/announce/20170607-3/> (2018年3月21日時点)

【コラム3】 【反応場分離】 固体イオニクス材料の利用例

- メンブレンリアクター(固体イオニクス材料)によるメタンからの合成ガス製造  $CH_4 + 0.5O_2 \rightarrow CO + 2H_2$

- ・ **反応場分離**：外側と内側の間に固体イオニクス材料を利用
- ・ 外部の空気中の酸素が酸素イオンとして内部に移動し、合成ガスを製造。空気分離操作(純酸素製造)が不要に。
- ・ 固体イオニクス材料としては電子と酸素イオンが伝導する混合伝導体
- ・ 発熱反応(自発的に進む反応系)のため外部からのエネルギーは不要(700℃)



【参考文献】

- 1) 産総研 HP : [http://www.aist.go.jp/Portals/0/resource\\_images/aist\\_j/aistinfo/pamph/full\\_research\\_10.pdf](http://www.aist.go.jp/Portals/0/resource_images/aist_j/aistinfo/pamph/full_research_10.pdf) (2018年3月21日時点)

## 2. 研究開発を実施する意義

### 2-1. 現状認識および問題点

#### <背景：国内外の状況>

2015年12月のCOP21合意を受けて、我が国では「地球温暖化対策計画」を閣議決定した。ここでは温室効果ガス排出削減の中期目標として2030年度に2013年度比26%減の水準の達成、また長期的目標として2050年までに80%削減を目指すことも示されている。また2017年12月には水素基本戦略が策定され、水素社会の実現に向けた2030年までの行動計画が示されている。このような動きの中で2020～2030年あたりまでのエネルギー利用・物質変換に関する具体的な研究開発は既に進行中であるが、2050年を見据えた研究開発は、平成28年4月の「エネルギー・環境イノベーション戦略(NESTI2050)」<sup>1)</sup>で有望分野が特定された段階であり、今後これらの具体策が必要な状況となっている。このNESTI2050におけるエネルギー利用・物質変換に関連する領域としては、①革新的生産プロセス(エネルギー多消費型プロセスから脱却)、②水素等製造・貯蔵・利用(水素社会)、③CO<sub>2</sub>固定化・有効利用、が挙げられており、これらについても研究開発の具体化が進められている。(図2参照)

研究開発を実施する意義  
現状認識および問題点

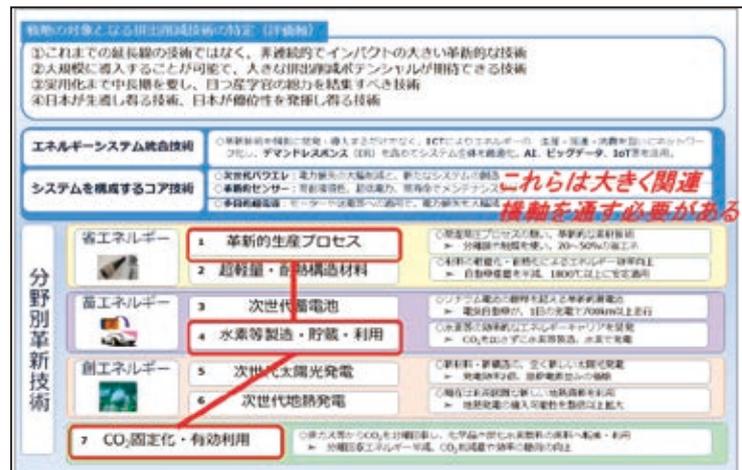


図2 NESTI2050の概要(CRDSにてエネルギー利用・物質変換の関連領域に囲み付与)

一方、欧米では、風力発電や太陽光発電(PV)などの再生可能電力の余剰電力等の新たなエネルギー源を用いた物質変換技術として、水素やメタンを目指したPower-to-Gasの研究開発に加え、液体燃料や化学品を目指した研究開発(ドイツPower-to-Xなど)が始まっており、アカデミアにおいてもこれに呼応したCO<sub>2</sub>還元などの新たな研究が進められている。特に太陽光発電においては今後のコスト低下が著しいとされており、再生可能電力の拡大とその積極的な利用が予想されている<sup>2)</sup>。なお、我が国においてもPV等の自然変動電源型の再生可能電力の拡大およびそれに伴う系統対策の必要性は同様の課題であり、2030年以降は余剰電力の活用が本格的に課題として浮上してくると考えられる。(コラム4参照)

＜炭素・水素循環に向けた技術課題と電気、光等のエネルギー源活用の重要性＞

上記の日欧米の状況、さらには持続可能性社会の構築という究極目標を考えると、エネルギー利用のみならず、化学品生産などの物質変換についても現状の化石資源に依存したフローからの脱却を視野に入れていく必要がある。従来の化学品生産においては、石油や天然ガスなどの化石資源をエネルギー源および炭素源・水素源として用いており、基本的には発熱反応を中心としたダウンヒル型反応により生産されている。一方、持続可能性を考えた場合は、エネルギーとして再生可能エネルギー（再生可能電力、太陽光、太陽熱など）の利用に加え、炭素源・水素源についても循環的な利用が必要になる。図3はそうした炭素・水素循環の新しいスキームとその技術課題について示したものである。

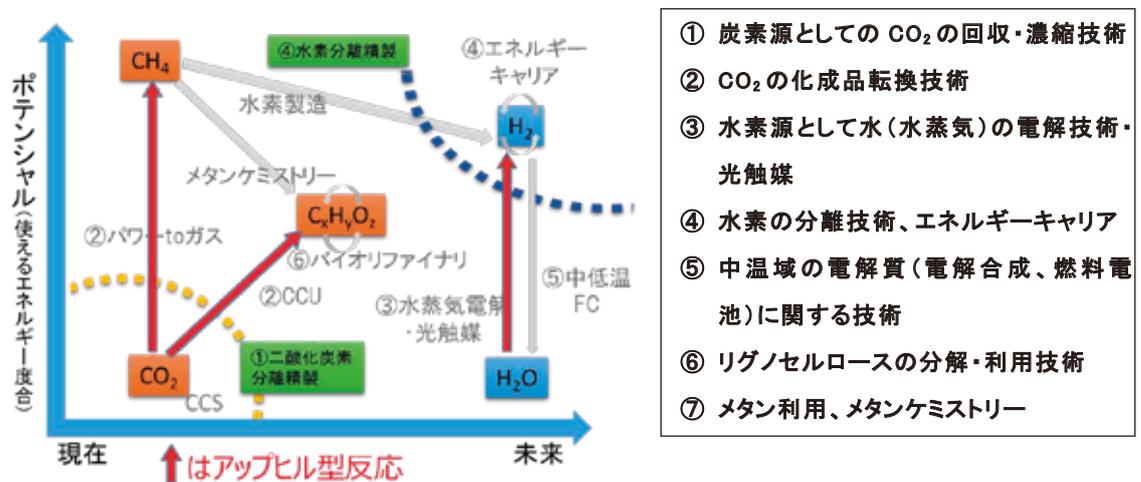


図3 炭素・水素循環的利用のスキームとその技術課題

この炭素・水素循環スキームの特徴は、炭素源・水素源としてCO<sub>2</sub>やH<sub>2</sub>Oなど、取り出せるエネルギーがない物質を出発点とした反応を含むため、対象とする物質の化学ポテンシャル範囲が広く、アップヒル型反応（吸熱反応）の物質変換プロセスが必要になることにある。（コラム5参照）大きな活性化エネルギーが必要な反応においては、電気や光を用いることが有効な方法となる。例えば水分解においては、熱による水の直接分解では2000℃の高温条件でも約1%の水素生成（平衡組成）に対して、電気分解では1.23V以上（光の場合、波長で1000nm以下に相当）で反応が進行する。このことは大きなエネルギーが必要となる反応が存在する高度炭素・水素循環のスキームにおいては、再生可能エネルギーからの電気や光を活用した反応が必要になっていることが考えられる。このため長期的な視点からは、これまで主流ではなかった電気や光などを活用した反応・分離技術の基礎的理解を含めて、その学理を構築・深化していくことが重要になる。

なお、図3に示した反応・分離を中心とした技術課題については現在関連する研究開発が進められているが、いずれも個別システムを対象としており、炭素・水素循環社会に向けた全体像が不十分な上に、これらの共通する基礎研究の連携や深堀の研究、新たな発想からの革新的技術創出が起こりにくいことが課題と考えられる。

### <電気・光などの炭素・水素循環に向けた技術課題>

化学プロセスにおける反応では化合物間で電子とイオンの授受が生じる酸化還元反応が起きている。ここで電子を失う酸化反応と電子を受け取る還元反応が常に対になっており、熱的反応の場合、この対の反応が近接位置で自然に連結して起きている。一方、電気を活用した電気化学反応の場合、酸化反応と還元反応は空間的に遠隔な位置にあり、外部回路より電子を駆動し、電解質をイオンの回路にして連結する反応になっている。このため電子の電位操作、電解質材料を選ぶことで移動するイオンの選択、反応エネルギーの電気としての授受などの利点を有する。図4は反応例として、燃料電池で起きている水素の酸化反応を示すが、このように電気化学では電子とイオンについて、「回路」を通じて外部より能動的かつ高度な制御が可能になる。

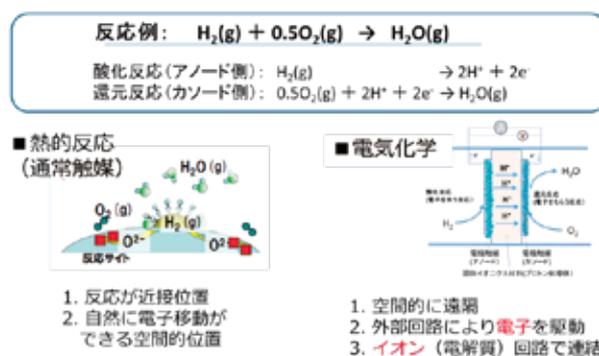


図4 熱的反応と電気化学反応との違い

制御性の高い電気や光をエネルギー源としてアップヒル型反応へ適用する以外にも、従来の熱的反応だけでは達成が困難な新しい機能や効果をもたらす可能性がある。(コラム1, 2, 3 参照) これらを以下に示す。

- ◇ 熱以外のエネルギー源を活用することで、例えば従来高温条件が必要な吸熱反応であっても触媒機能(反応の速度と選択性の両立)を最適化できる中低温条件での反応を実現する
- ◇ 電場・電磁場などの外場効果により反応速度を向上(活性化エネルギー低下)させる
- ◇ 反応場分離により反応と分離を同時達成し単独の分離操作を不要にする
- ◇ 反応場分離により平衡制約のある反応を非平衡的に進める

特に外場効果については、電場印加により表面プロトンの移動や反応ルートの変化など、これまでにない現象、効果が見いだされてきており、これらを積極的に利用することで新しい反応ルートが開拓され、これまで実現が困難であった反応を容易にできることが期待される。

なお上記の研究領域においては、固体イオニクス分野の材料開発および反応機構解明による学理の構築などが重要になる。固体イオニクス分野は日本の科学技術発信力が低下する中で未だに優位性を持っている数少ない分野である。(付録2 参照) また反応機構解明に必須になる計測技術や計算化学においては、近年のオペランド計測技術や計算化学の

進展により化学反応における詳細な反応機構解明への有効な手段としての応用展開が可能になり始めた段階にある。(コラム 6 参照) このことから我が国がこの分野において世界に先駆けて研究開発を行うことで世界を先導できる分野になる可能性が十分見込まれる。

なお電気化学反応については、電気のコストが高いこと以外に、反応が二次元的表面反応のため、空間的利用ができず、スケールアップ効果がないことによる生産性の低さが課題とされてきた。しかし、最近の燃料電池や二次電池の研究開発の目覚ましい進展により、反応場の疑似三次元化などにより単位体積当たりの反応速度(電流密度に相当)は従来の流通式反応装置を凌駕するレベルにまで到達可能になっている。このような近年の電池開発で培われた技術を反応装置に応用展開することで小型でも高効率で生産速度が高い反応装置を実現できる可能性が見え始めている。(コラム 7 参照)

#### 【参考文献】

- 1) 内閣府ホームページ「エネルギー・環境イノベーション戦略」(H28.4.19)  
<http://www8.cao.go.jp/cstp/nesti/honbun.pdf> (2018年3月21日時点)
- 2) CRDS-FY2017-WR-12「高度炭素・水素循環に資する革新的反応・分離のための CxHyOz 制御科学」

#### 【コラム 4】 将来における太陽光発電 (PV) のコスト低下と余剰電力量について

(1) PV システム価格の見通し例<sup>1)</sup>

- ◆米国における発電事業用 PV の設備価格動向として 2010 年に \$3.24/W であったものが、2016 年には \$1.14/W に低下している。2025 年では \$0.7/W の価格になると推定されている。
- ◆米国 DOE Sunshot イニシアティブでは PV コストの目標を以下の通り設定している。
  - ・2030 年: \$ 0.03/kWh (発電事業用) / \$ 0.05/kWh (家庭)
- ◆NEDO の PV コスト目標: 2030 年 7 円 /kWh (基幹電源並) / JST (LCS) での定量的技術評価に基づいたコスト分析により 2030 年 5 円 /kWh が可能と示している。  
(参考情報)
- ・UAE「スワイハン太陽光発電事業」として 2.42 セント /kWh (25 年間) の売電契約締結<sup>2)</sup> (出力 1,177MW (2019 年 4 月 (予定) ~))
- ・現在の電気料金 (東京電力 HP 2017 年 3 月時点)
  - ・高圧電力単価 (500kW 以上) 15.87 円 /kWh (夏季)、14.87 円 /kWh (その他季)
  - ・一般家庭モデル電気料金 (260kWh/月): 6305 円 /月 → 24.25 円 /kWh

(2) 自然変動電源導入拡大による余剰電力量の想定について

2030 年の日本の電源構成を前提としたモデルを用いて、PV6,400 万 kW+ 風力 1,000 万 kW (2030 年目標レベル) の自然変動電源の導入を想定した試算結果として、系統対策 (地域間連系線、揚水発電活用など) がない場合で自然変動電源の発電量に対する余剰割合が 24%、対策ありの場合で 4% との報告がある<sup>2)</sup>。この結果からは 2030 年時点では系統安定化に必要な現状の対策能力が不足し始めることがうかがえ、更なる PV 等の導入量拡大に対しては追加の系統対策が必要となると考えられる。このことから 2030 年以降においては、系統安定化のための余剰電力対策技術、さらには長期的需要変動に対応したエネルギー貯蔵技術として、本提案の電気を活用した技術が重要になることが期待できる。

(参考)

日本における上記の余剰電力割合の値はドイツのように国際連系線が活用できる場合と比較して高い値になる。(上記想定と同程度の自然変動電源導入時におけるドイツでの余剰電力の割合は0.4% (実績値)<sup>3)</sup> このことは国際連系線を持たない日本においては、欧州よりも余剰電力の影響が大きく、その対策が今後大きな課題になると言える。

【参考文献】

- 1) CRDS-FY2016-SP-04 「CRDS 戦略プロポーザル：未来エネルギーネットワークの基盤技術とエネルギー需要科学」
- 2) <https://www.nikkei.com/article/DGXXKZO17663720U7A610C1X93000>  
(2018年3月21日時点)
- 3) 柴田善朗「我が国における Power to Gas の可能性」(日本エネルギー経済研究所)  
<https://eneken.ieee.or.jp/data/6442.pdf> (2018年3月21日時点)

### 【コラム5】 主な炭化水素の化学ポテンシャルと活性化エネルギー

従来の化学プロセスはダウンヒル型反応(発熱反応)で、自発的に進む反応を主体としている。一方、将来の炭素・水素循環社会においては、エネルギーが取り出せないCO<sub>2</sub>やH<sub>2</sub>Oを原料とする反応も存在するため、図C5-1に示すように化学ポテンシャルの範囲は広くなり、かつ必ずアップヒル型反応(吸熱反応)も必要になる。このようなアップヒル型反応では熱的反応を用いる場合、エネルギーを与えるために反応条件として高温化が必要になり、反応選択性が低いという課題が表れてくる。

また熱的反応で高温化が必要になる反応は必ずしも吸熱反応のみではなく、大きな活性化エネルギーが必要な反応、例えばメタン改質やアンモニア合成などの反応などが挙げられる。メタンの場合、C-H結合解離エネルギーが他の炭化水素より大きいことによるものである。

表C5-1に示すように、メタンのC-H解離エネルギーはエタンよりも17kJ、イソブタンよりも36kJ高い。この活性化エネルギーの違いにより、200℃におけるメタンの反応速度はエタンとの比較で0.013倍、イソブタンとでは0.0001倍と非常に遅くなる。このようにメタンはC-H結合解離エネルギーが大きいことにより反応しにくい炭化水素化合物であることがわかる。

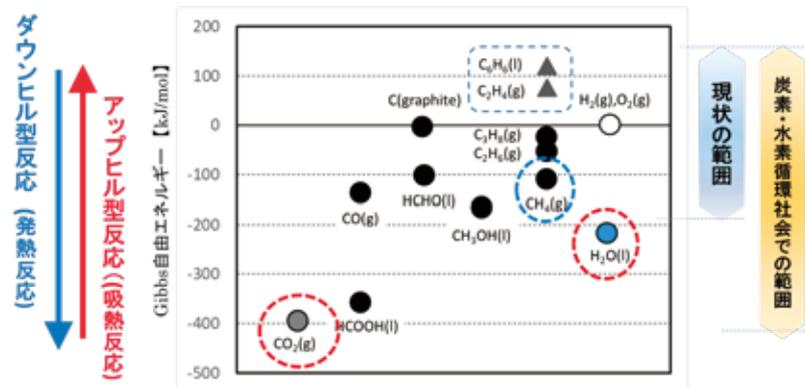


図 C5-1 主な化学種の化学ポテンシャル (Gibbs 自由エネルギー)

表 C5-1 代表的な化学種の C-H 結合解離エネルギー

C-H結合エネルギー	kJ/mol
メタン(1級水素)	440
エタン(1級水素)	423
プロパン(2級水素)	412
イソブタン(3級水素)	404

【コラム 6】 オペランド計測と計算化学の進展

最近のオペランド計測技術と計算化学の進展により反応時の電子やプロトン移動など、これまで見えなかったものが見えるようになってきている。

【オペランド計測技術の進展】

- 準大気圧条件での計測が可能（これまでは真空条件）。また空間分解能と時間分解能の上昇により電子状態などの触媒側の情報のみならず、化学種の情報もわかるようになり、反応機構の理解が進むことが期待される。
- 反応に係る今後の計測技術としては、分光顕微鏡やコヒーレント回折イメージングの発展が重要。後者は一回の計測で広いスペクトル範囲、広い空間領域の情報が一気に入手可能になる。この計測データ解析にインフォマティクス（データ駆動型科学）を利用することでさらなる進展を期待。

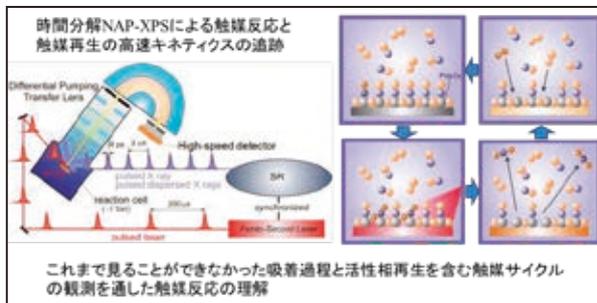


図 C6-1 NAP-XPS による過渡種の観測

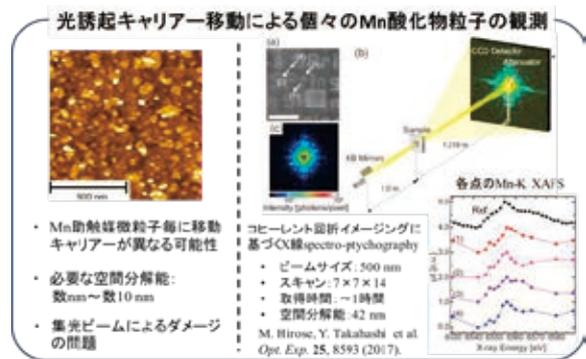


図 C6-2 コヒーレント回折イメージング例

【計算化学の進展】

- 化学反応が扱えない分子動力学シミュレーション（1000 万原子）と化学反応が扱える量子化学計算（数百原子）のサイズギャップが存在していたが、新しい方法（DC-DFTB-MD 法）により量子化学計算を含めた分子動力学シミュレーション（QM-MD）が 10 万原子（京コンピュータ）まで可能に。ポスト京では 100 万原子を目指す
- データ駆動型アプローチ：遍在的なプロトンに着目して、その性質をデータベース化して新しい技術につなげる試みを検討

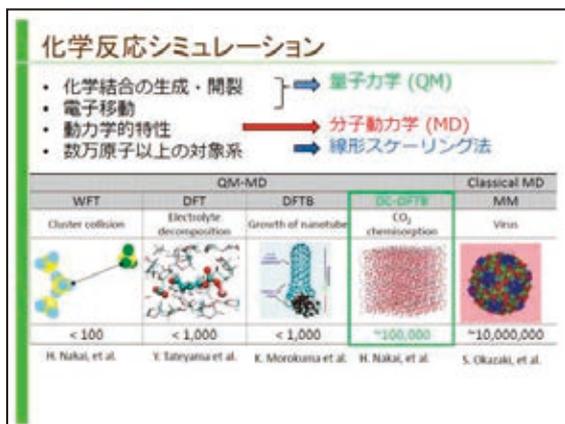


図 C6-3 QM-MD の新しい計算手法開発

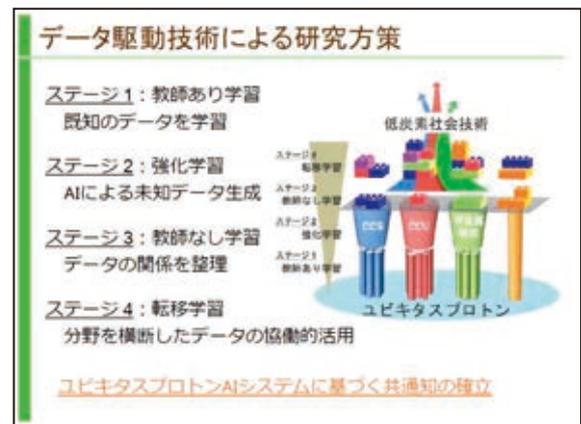


図 C6-4 データ駆動技術の展開

【出典】CRDS-FY2017-WR-12 「高度炭素・水素循環に資する革新的反応・分離のための CxHyOz 制御科学」

【コラム7】 燃料電池型 (PEM) 反応装置のスケール収率の飛躍的向上

通常の電気化学においては H 型セル (図 C7-1 左) を用いているが、これを燃料電池のように固体高分子形電解質を用いた PEM 型反応装置 (図 C7-1 右) として活用することで高効率かつ高いスケール収率の反応装置が可能になる。

【スケール収率】: 反応器 1 L, 反応時間 1 h 当たりの移動電子数 [mol/L・h]

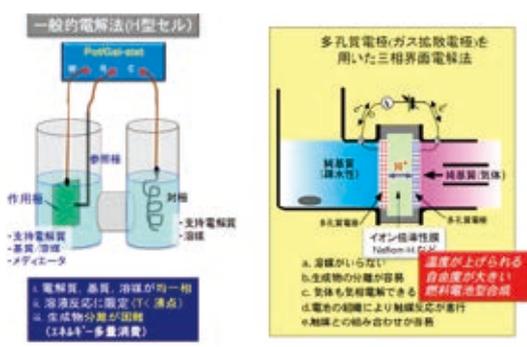


図 C7-1 H型セルとPEM型セル比較

溶液反応(LAH還元)	流通反応(トルエン触媒水添)	燃料電池
LiAlH <sub>4</sub> (37.95) 5g	触媒体積100mL	FCV用PEFCスタック 38L(114kW)
500mL フラスコ	トルエン(92.14, d0.87) 5mL/min	出力密度3.0kW/L, セル電圧0.6V
滴下, 攪拌反応合わせて1h	LHSV=3.0/h	電流密度5000A/L
(4e <sup>-</sup> 移動反応)	(6e <sup>-</sup> 移動反応)	(4e <sup>-</sup> 移動反応)
スケール収率=1.05	スケール収率=169	スケール収率=188*

\* 反応物存在部だけでは1000以上

図 C7-2 各反応器のスケール収率比較

FCV 用 PEFC スタックは、PEM 型反応装置であるが、電流密度すなわちスケール収率を高めるために、界面の疑似三次元化など電気化学デバイスとしてのさまざまな工夫がされている。これにより、この PEM 型反応装置は従来の流通系反応装置をスケール収率で凌駕するレベルになっている。(図 C7-2)

このことは燃料電池や二次電池の電気化学デバイスで培われた技術を電解合成のデバイスとして転用することで、小型でも高効率で高い生産速度を持つ反応装置の実用化が期待できる。

(参考)

- FCV 用 PEFC スタック (容量 38 L/ 出力 114 kW) は、出力 100% で発電すると電気量として一般家庭 315 軒分を賄う出力を持つ。(一般家庭の平均消費電力: 260 kWh/ 月 (出力として平均 0.361kW に相当))
- 反応装置として FCV 用スタックと同じ電流密度で水分解が出来ると仮定すると、水 0.6 トン/ 日の反応量に相当することになる。

【出典】 CRDS-FY2017-WR-12 「高度炭素・水素循環に資する革新的反応・分離のための C<sub>x</sub>H<sub>y</sub>O<sub>z</sub> 制御科学」

研究開発を実施する意義  
現状認識および問題点

## 2-2. 社会・経済的効果

本提案による革新的反応・分離技術が実現した場合、これまでの熱を用いたエネルギー多消費型プロセスが、電気や光等の多様なエネルギー源を用いて、スマートで精密に反応制御できる化学プロセスとなり大きな変革をもたらすと考えられる。これによりバルク品生産の化学工業のみならず、機能性を求めた化学品、さらには医薬なども含めた高い付加価値性を持つファインケミカル分野においてもシンプルなプロセスを実現できる可能性があり、それによる社会・経済的効果として、以下のものが考えられる。

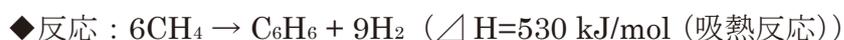
- ◆ 化学産業へのインパクト
  - ◇ 高効率化やプロセス簡略化によるエネルギー消費削減および設備コスト削減効果（以下は例示）
    - ・ 原理的に高い変換効率を持つエネルギー・物質変換技術への転換
    - ・ 多段反応から一段反応へのプロセス簡略化
    - ・ 反応場分離により原料や生成物が反応と同時に分離されることで分離操作の不要化など
  - ◇ 化学品の原料転換に対応
    - ・ ガスシフト：石油から天然ガスへ（原料の多様化に対応可能）
  - ◇ 従来の集中型の大規模プラントから分散型の中小規模プラントへの転換を可能にすることで、地域の特徴を活かしたオンデマンド・オンサイト型生産を可能に
- ◆ ファインケミカル分野などへのインパクト
  - ◇ 複雑な反応からシンプルな反応系への転換により、オンデマンド・オンサイト型のシンプルな中小規模プラントへ
  - ◇ 熱的反応では製造不可能あるいは困難な物質の創製
- ◆ エネルギー利用へのインパクト
  - ◇ 自然変動電源の再生可能エネルギー大量導入（太陽光発電、風力発電）による変動電源対策として利用できる → 太陽光も風力も分散型発電のため、親和性が高い技術になる
  - ◇ 日本が進める水素社会のためのエネルギーキャリア製造技術としても利用可能
- ◆ 持続可能な社会構築に向けた取り組み
  - ◇ 高度炭素・水素循環に必要な CO<sub>2</sub>、H<sub>2</sub>O 利用に適した物質変換技術になる
- ◆ SDGs への貢献（特に目標 12「つくる責任つかう責任：持続可能な消費と生産のパターンを確保する」）

これ以降においては、将来における社会・経済的効果としてインパクトをもたらす可能性のある例を示す。

## <大きなインパクトの可能性のある具体的事例>

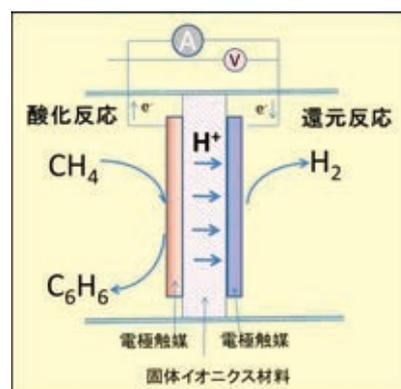
### ●化学品の原料転換：メタンからのベンゼン製造<sup>1)</sup>

メタンからベンゼンを製造する脱水素反応は、以下の通り。



上記の反応は熱力学的平衡制約が厳しく、700°Cの高温条件でもベンゼンの平衡組成割合は12%程度である。

これを右図に示すようなプロトンが移動する固体イオニクス材料を用いて、電気化学における反応場分離を活用した反応にすることで非平衡状態を作り出し、効率の良いベンゼン製造が可能になる。実際にノルウェーの研究グループが固体イオニクス材料を活用した研究開発を進めており、80%以上のベンゼン収率(@700°C, 3bar)を得るとの報告がある。



(サイエンス誌に掲載)<sup>2)</sup> またこの類似技術としてメタンからC2、C3、C4のオレフィンを製造できる可能性もある。

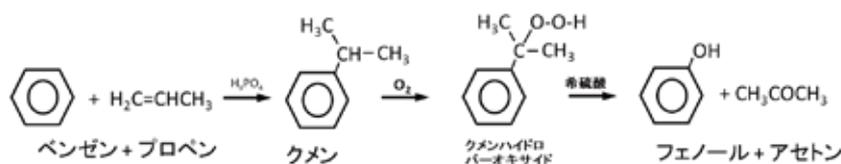
コラム8に示す通り、石油化学の原料となるエチレン、ブテン、さらにはベンゼン等の芳香族類は石油ナフサの熱分解等により連産的に製造している。このためメタンから各石化原料を需要状況に合わせて、単体で個別に製造することができれば、石化原料の生産体制をフレキシブルなものにできる可能性がある。また、将来の天然ガスの価格低下が期待できるとすると、この天然ガスへの原料シフトによる競争力強化をもたらす技術になることも考えられる。

### ●プロセス簡略化 (シンプルな反応)：ベンゼンからのフェノール製造<sup>3)</sup>

光触媒利用により光反応で水とベンゼンからフェノール合成が可能



工業的にはフェノールは以下に示すクメン法が主流であり、以下に示す多段反応になっている。



上記の多段の反応を一段反応にして、シンプルな製造方法が可能になり、プロセス簡略化によるコスト削減等の可能性がある。

### ●オンデマンド・オンサイト型生産：アンモニア合成

化学原料として世界的に生産量の多いアンモニア(2012年世界生産量:1.36億トン)は、製造法開発から100年以上の歴史の中で改良されてきたハーバー・ボッシュ法で製造されている。この反応は25 MPa以上の高压条件が必要であり、アンモニア製造の設備費の9割超が圧縮機と圧力容器の加圧系によるものといわれている。またアンモニア合成に係る全体のエネルギー消費やコストを考えると、原料の水素を製造する部分が大きな割合を占めている。このことからコスト的優位性を高めるために大規模なプラントにより製造されている。

[ハーバー・ボッシュ法]



アンモニアは硝酸などの基礎化学品、硫安などの肥料の原料として用いられているが、最近では水素のエネルギーキャリアとしても注目されている<sup>4)</sup>。この場合、例えば太陽光発電などの再生可能エネルギーから水と空気(窒素)からの電解合成で分散的にアンモニア生産が可能になると、電力系統における変動電源対策としても、また国が推進する水素社会を支援する技術としても、さらには地域密着型の分散エネルギー利用技術の一つとしても非常に有効になると考えられる。

### <本提案の狙いによる将来イメージ>

本提案の狙いは、従来の熱を用いたエネルギー多消費型プロセスが電気や光等の多様なエネルギー源も用いて、スマートで精密に反応制御できる化学プロセスへの大きな変革をもたらすことである。図5に化学プロセスの変革イメージを示す。

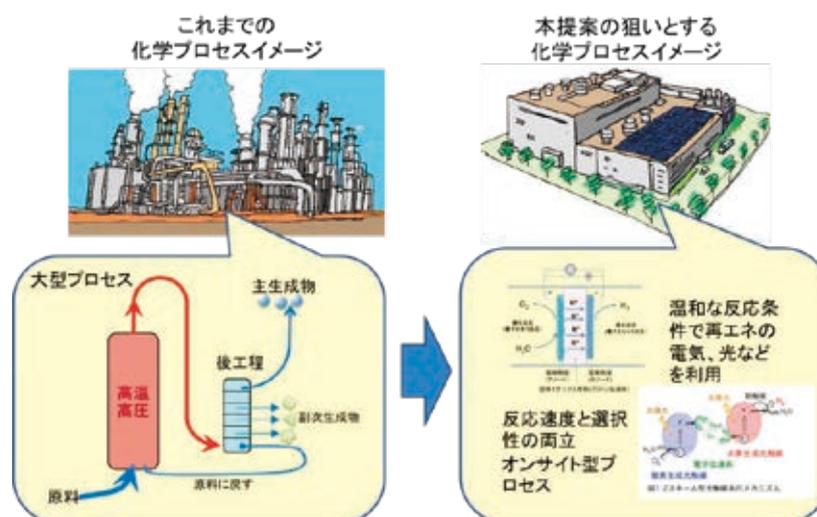


図5 化学プロセスの変革イメージ

また長期的には、持続可能な社会を構築すべく、現在の化石資源中心のエネルギー利用や物質生産の流れを、再生可能エネルギーからの電気、光、熱などを活用し、さらに炭素・水素源もCO<sub>2</sub>、H<sub>2</sub>O、バイオマス(バイオメタン含む)を活用したエネルギー利用や物質

生産に段階的に転換することが必要であり、この高度な炭素・水素循環社会の実現に資する技術として本提案の研究開発戦略が貢献できるものと考えている。以下に高度炭素・水素循環社会のイメージ図を示す。

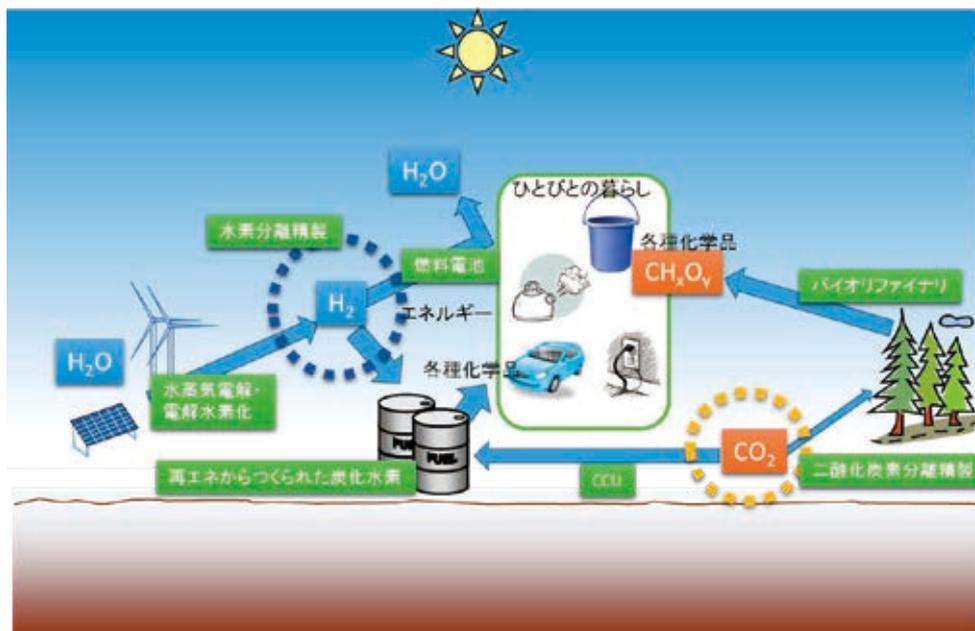


図6 高度炭素・水素循環社会の実現

研究開発を実施する意義  
社会・経済的効果

【参考文献】

- 1) CRDS-FY2017-WR-12 「高度炭素・水素循環に資する革新的反応・分離のための C<sub>x</sub>H<sub>y</sub>O<sub>z</sub> 制御科学」
- 2) S. H. Morejudo et al. Science 2016;353:563-566
- 3) CRDS-FY2015-WR-07 「平成 27 年度エネルギー科学技術分野最新研究開発動向」
- 4) 戦略的イノベーション創造プログラム (SIP) 「エネルギーキャリア」  
<http://www.jst.go.jp/sip/k04.html> (2018 年 3 月 21 日時点)

## 【コラム 8】日本の化学産業の現況

我が国における化学産業（プラスチック・ゴム製品を含めた広義の化学工業）の位置づけを見ると、2014年の出荷額は43兆円で、輸送用機械器具（自動車等）に次いで製造業中第2位であり、世界の化学産業でも中国、アメリカに次いで第3位の位置にある。また、従業員数では86万人で製造業中第3位である<sup>1)</sup>。また、製造業中の化学産業の最終エネルギー消費は2015年度で2,431 PJ（原油換算6,360万kL）であり、このうち原料分である非エネルギー利用分は1,542 PJ、エネルギー利用分は889 PJ（原油換算2326万kL）である<sup>2)</sup>。国内一次エネルギー総供給量は20,213 PJであることから、化学産業のエネルギー利用分だけを取り上げても4.4%と大きな割合を占める。

＜ナフサから他の原料シフトへの動き＞

従来は石油化学原料としてはナフサを原料とし、ナフサクラッカーによる熱分解反応によりエチレン、ブテンや芳香族類の化学原料を製造し、それらを出発点としてさまざまな化学品を製造してきた。しかしながら最近でより安価な原料として米国では天然ガス中のエタンを原料としたエタンクラッカー、中国では石炭から製造したメタノールを原料とした化学品製造が進展しており、石油化学から地域の特性に合わせたさまざまな天然資源化学への転換が起きている。<sup>3)</sup> これらの原料転換の動きは原油（ナフサ）の価格動向により転換速度に加速、減速があるものの、長期的には日本の石油化学の競争力低下は避けられないと考えられる。このため化学会社の機能品化学へのシフト、海外生産へのシフトなどの動きがある。

## 【参考文献】

- 1) グラフでみる日本の化学工業 2015 日本化学工業協会
- 2) 資源エネルギー庁「総合エネルギー統計」
- 3) 旭リサーチセンター「「石油化学」から「天然資源化学」へ」  
<https://www.asahi-kasei.co.jp/arc/service/pdf/998.pdf>（2018年3月21日時点）

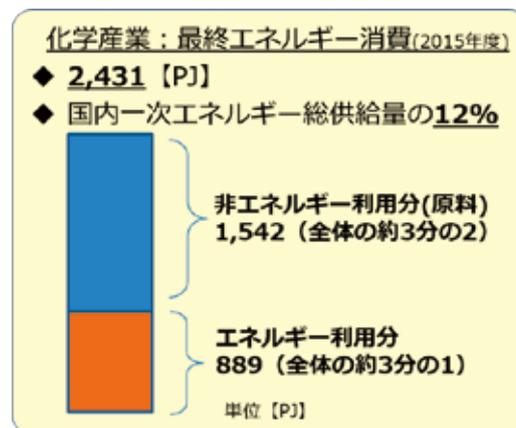


図 C4-1 化学産業のエネルギー消費

### 2-3. 科学技術上の効果

触媒化学、電気化学、光化学、固体イオニクス、さらには有機化学や新たなマイクロ波化学などの研究領域は、電子とイオンによる電荷移動現象という共通の課題を捉える研究領域である。しかしながら、物質生産、電池反応、材料開発といったそれぞれの主な研究目的が異なっていたこともあり、別々の研究領域として独立して発展してきた。近年の燃料電池や二次電池分野の研究開発の進展により、電気化学と固体イオニクスの両分野については研究領域の融合が始まっているが、電子を取り出すことが主な目的のこれら領域と物質生産が目的の領域である触媒化学、光化学や有機化学などとの間では目的が異なることもあり、未だ融合が希薄と言える。本プロポーザルは、これら分野を融合させて、さらには基盤技術を支える計測分析、計算化学、加えて実用展開のために機械工学、化学工学、電気・電子などの広範な研究領域も融合することで、「電子とイオンの制御科学」という共通の視点、共通の基盤に立った新しい複合領域の創成を目指すものである。

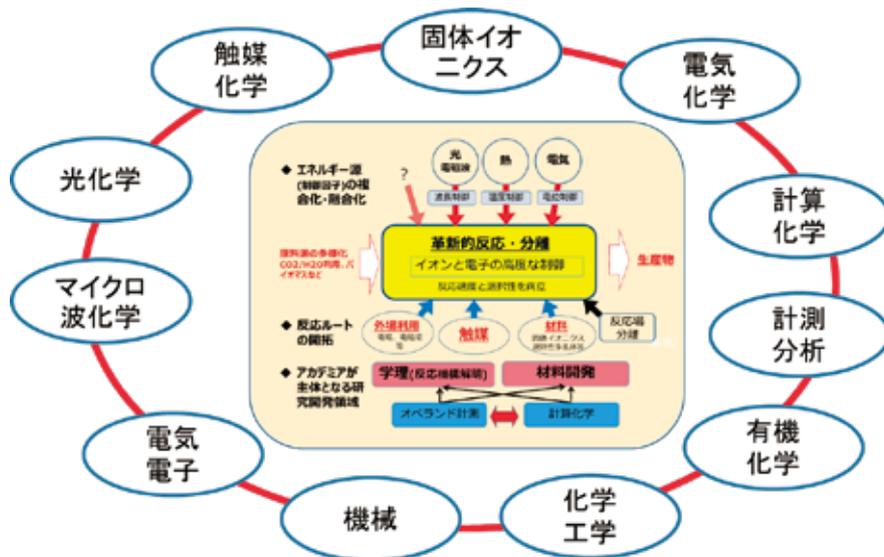


図7 分野融合の促進

また反応における電子とイオンによる電荷移動現象を研究し、詳細な反応過程を明らかにするといった学理の確立・追求を行うためには、計測技術と計算化学との協業が必須となる。表面・界面での化学反応現象における機構の解明には、反応が起きている場 (*in-situ*) における反応の実動作を計測できる技術 (オペランド計測) やそれを理論的に支援する計算化学が重要な役割を果たす。近年のこれらの分野の進展は目覚ましく、実際の反応場において、触媒などの材料側の状態のみならず反応種の状態も見ることができるようになってきている。(コラム6参照) このことは本提案の外場効果、電場・電磁場などによる反応促進効果の機構を解明し、学理を構築する上でこれらの分野の研究が極めて有効な手段になり、研究が加速されることを意味している。これにより理学が目指す未知なるものの学理を探る研究としての面白さだけでなく、その学理を実際の反応場に反映させ、新し

い反応ルート開拓することで、工学が目指す画期的な反応プロセス創出につながることを期待できる。また電気、光などの用いるエネルギー源が異なっても、仮に反応において電子とイオンの電荷移動現象において、共通な原理が見つかることがあれば、学理としてのさらなる発展やエネルギー源の複合的、融合的利用の可能性も期待できる。

なお計測技術として我が国には、SPring-8 や SACLA など放射光による表面分析として大きなポテンシャルを持つ設備があることから、こうした施設をさらに高度化させ、それを最大限に活用することができれば、世界の最先端となる成果を得ることができると考えられる。また、計算化学においても、スーパーコンピュータ京を用いたプロジェクトからの成果をステップアップさせることや、機能から材料を創製するデータ駆動型アプローチにより個々のボトルネック課題にフィードバックすることで革新的、ゲームチェンジングな技術を創出することも可能と考えられる。

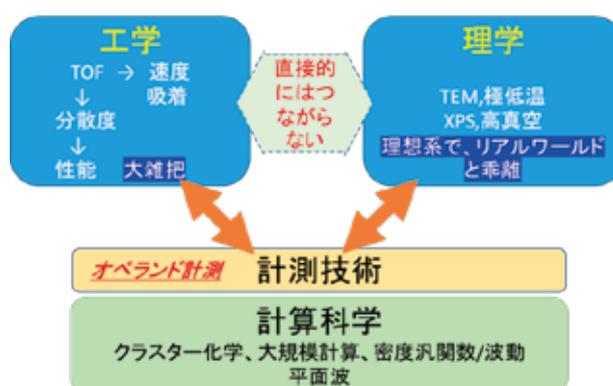


図 8 計測技術・計算化学との協業による工学と理学の連携

長期的な観点からは、本プロポーザルの研究開発を契機として、界面・表面上のイオンと電子の流れを自在に制御できる材料や方法が将来的に確立できれば、電子の流れを制御することで大きなイノベーションをもたらした半導体分野のように、新規のデバイス材料としての工学的利用面で社会に大きな変革と貢献をもたらすほか、学術分野での新たな知の創出と大きな進展も期待できる。

### 3. 具体的な研究開発課題

本提案の革新的反応・分離技術として、電気、光、電磁波、低位熱などを活用した化学、また反応場分離による分離操作など、電子やイオンを高度に制御することを可能にする反応装置、反応プロセスの構築、そしてその要素技術となる材料創製、さらには新しい反応ルートを開拓するための素反応機構解明などの基礎となる学理を深化させるための具体的な研究開発が必要になる。

本提案の研究開発のコンセプトイメージを以下に示す。

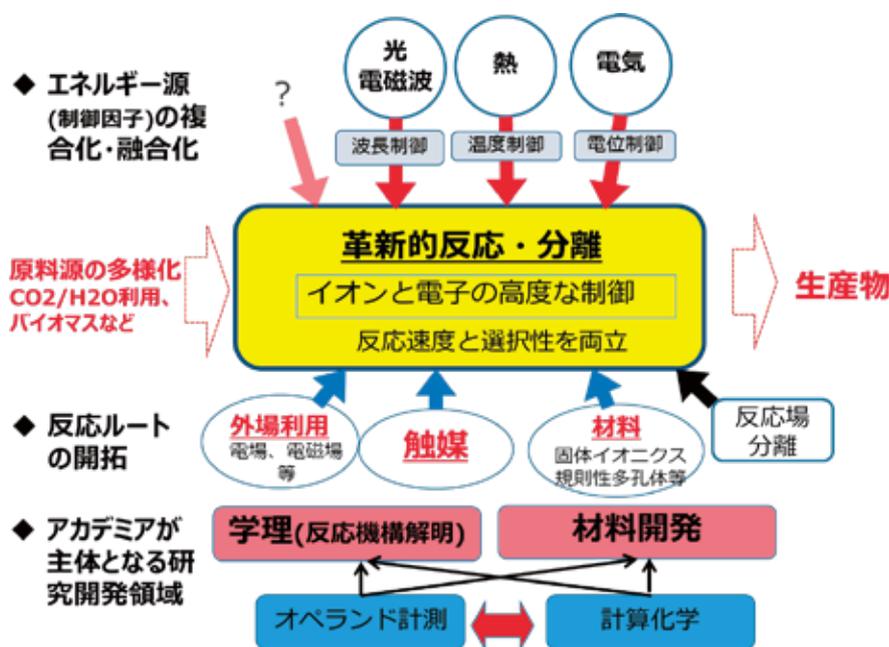


図9 本提案のコンセプトイメージ

現状の技術レベルは初期段階にあり、基盤となる技術の構築が必要となるため、アカデミアの役割として、要素技術となる材料創製、および基礎となる学理の深化が重要になる。

なお長期的には持続可能な炭素・水素循環社会を実現するためには、原料としてCO<sub>2</sub>やH<sub>2</sub>O、バイオマスなどを利用した反応が重要になると考えられるが、現時点においてはこれらの原料にこだわることなく、また生産物についても個別ニーズに応じて目標を設定し、研究開発を進める必要がある。これは少なくとも2030年頃までは従来の熱的反応のコスト面での優位性は変わらないと考えられるためであり（コラム4参照）、現状の出口戦略として、熱的反応では困難な高付加価値の化合物や新規材料創製、オンサイト型製造など、電気や光等を用いることの特徴を活かした反応に関する研究開発を行い、その研究開発の中で将来の基盤となる技術を発展させることが重要となる。

以下に具体的な研究開発事例を示す。

## (1) 新しい反応・分離技術の研究開発

電気、光、電磁波などを用いた反応・分離技術としては以下の研究開発が挙げられる。

- ◆ 電気を活用した反応・分離技術：固体イオニクス材料を用いた電気化学
- ◆ 光・電磁波を活用した反応・分離技術：光半導体触媒、光金属錯体触媒、表面プラズモン共鳴、マイクロ波化学とそのための材料開発
- ◆ バイオインスパイアードな反応・分離技術：人工酵素の開発など
- ◆ 熱を含む各種エネルギー源を複合的、融合的に活用する反応・分離技術

電気化学的反応に利用できる固体イオニクス材料は、現時点では限られているが、これらの各特徴を活用して、個別の反応に適応させた電極触媒の開発や反応装置のシステム開発を行うことになる。また NEMCA (Non-Faradaic Electrochemical Modification of Catalytic Activity) のような非ファラディックな反応として、ナノ粒子などの表面の水和層を介してプロトンが移動する表面プロトニクスを利用するなど、触媒を活性化させる反応を利用した反応装置やシステムに関する研究開発も必要になる。

また反応場分離により分離を不要にする、また平衡制約のある反応に対して非平衡化することで反応を進行させるなどの効果が期待できる反応系がある。例えば 2.2 項に記載したメタンからのベンゼン製造では、メタンの脱水素反応によるプロトンが電解質膜を介して反対側に移動することで純水素の製造とベンゼン合成が可能になる。しかも本来は平衡制約の強い反応系であるが、水素の分離により非平衡化され、反応が進行する利点もある。またコラム 3 に記載したメタンからの合成ガス製造では、電解質膜を介して空気中の酸素のみが酸素イオンとして反対側に移動し、メタンを酸化できるなど、反応系によってはプロセスを大幅に簡略化できるメリットを持つケースがある。このように反応場分離でメリットが現れる反応系の特徴を考えながら、反応装置やプロセスを構築していくことも重要になる。

さらにファインケミカル分野においてはフローマイクロリアクター技術の研究開発が活発化している。光反応についてはマイクロ流路で光を効率的に利用できることから、リアクターユニットとして既に採用されているが、光に限らず、電気等を用いて新しい反応を可能にする装置としての展開も考えられる。このようにフローマイクロリアクター技術を用いたファインケミカル、有機合成などへの適用も考えた研究開発も有効と考えられる。

## (2) 有用材料の研究開発

### ● 固体イオニクス材料などの研究開発

〔中低温作動固体イオニクス材料〕

現在実用化された固体イオニクス材料の作動温度は、プロトン伝導体が 100°C 以下、酸素イオン伝導体が 600°C 以上である。このため、プロトン伝導体については高温作動化、酸素イオン伝導体については低温作動化の研究開発が必要である。最近ではプロトン伝導ガラスが見つかったが、見出された材料の実用化に向けた改良に加え、さらなる材料探索も重要である。また酸化物系材料においては、図 10 に示した結晶格子に引張応力を与えた格子ひずみ効果により、酸素イオン伝導度の上昇や触媒の活性向上が見出されており、この効果を利用した材料開発も今後の可能性がある。

界面応力がイオン伝導および表面組成に及ぼす効果

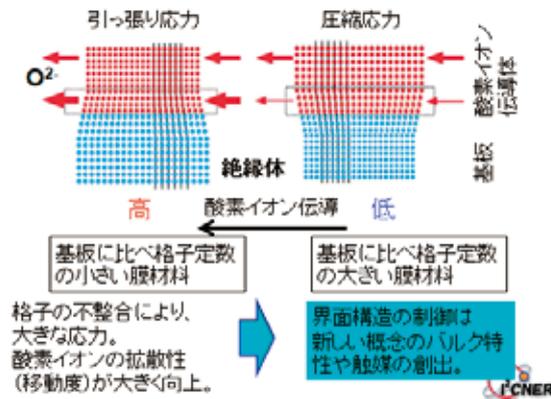


図 10 格子ひずみ効果（界面応力）の効果<sup>1)</sup>

[新規イオニクス材料]

反応においては移動するイオン種が重要であり、プロトン、酸素イオンのみにこだわらず、全く新しいイオン伝導体を研究開発することも今後重要と考えられる。例えば、 $NH_4^+$  や  $H^-$  などのイオンを移動させるための無機/有機ハイブリッド型やMOF（金属有機構造体）などのユニークな構造体を設計・開発することも新たな観点からの研究開発として重要になる。なお、この材料開発においても分析技術や計算科学の基礎的な支援の重要性が言われており、データ駆動技術を発展させることで新規材料創製を加速化させる必要がある（コラム 6 参照）。

●規則性多孔材料の研究開発 PMO や MOF など

規則性多孔材料としては、金属有機構造体（MOF）、ゼオライトなどがあるが、最近ではメソポーラス有機シリカ（PMO）のような共有結合により分子触媒などを構造体に固定できる物質も創製されている。このような規則性多孔材料は分離においても、反応場分離を可能にする材料としても今後の研究開発が必要と考えられる。

メソポーラス物質の機能の拡張

有機基の骨格内導入 ⇒ さまざまな機能の発現



図 11 PMO の機能拡張<sup>1)</sup>

- 電極触媒、光触媒など

触媒としては、各反応に最適な触媒開発を行う必要があることは従来と同様である。ただ、従来以上にこれらの研究においても計測技術と計算化学との協業、データ駆動型技術の支援により研究の加速が必要になる。

### (3) 反応機構解明などの基礎となる学理の構築

- 電場・電磁場等による外場効果を反応に活用するための研究開発

電気化学的反応における触媒作用については、反応系に応じて適切な電極触媒を探索する必要がある。熱のみを用いた化学反応では、反応駆動、すなわち反応を進めるために高温条件が必須の化学反応も多く存在するが、これらは触媒機能を有効に利用する観点での研究対象から外れていた。本プロポーザルで示した化学反応では、反応駆動に電気アシストが可能になることから、これまで研究対象外であった反応系に対しても触媒作用に最適な中低温域での化学反応が可能になる。このため、これまで考えがおよばなかった全く新しい化学反応が生み出される可能性がある。さらに、触媒作用においても外部電位という新しい制御因子が追加されることから、触媒の高機能化をさらに拡大できる可能性がある。反応系に関しては、現行プロセスに用いられている反応のみならず、原点に戻ってさまざまな反応への適用の可能性を検討する必要がある。また、併せてこれらの電極触媒における外部電位による化学反応への影響を調べることも必要となる。なお、このような研究を効率的に進めるためには、基礎的な支援として化学反応時の触媒表面における素反応機構の解明など、理論構築のための研究も重要であり、後述する分析技術や計算科学の基礎的な支援が非常に重要となる。

- 各種反応における反応機構の解明などの基礎となる学理の構築

前述のとおり、電極触媒や固体イオニクス材料の研究開発においては、表面・界面での化学反応における機構の解明が重要となる。この解明のためには、反応が実際に生じている場 (*in-situ*) における反応の実動作 (*operando*) を対象とした分析技術や、それを理論的に支援する計算科学が重要な役割を果たす。このため、国内で分析、計算科学の分野を含めたチームを組織することが必要となる。また、日進月歩の分野でもあるので、国際的なコミュニティ、ネットワークも合わせて必要である。このような分析技術や計算科学による基礎研究により理論構築ができれば、例えばデータ科学を活用したスクリーニング方法などの全く新しい探索方法が可能になることも考えられる。このような方法ができれば、新規固体イオニクス材料や新規電極触媒の探索や開発を行う上で、従来の試行錯誤的な方法と比較して格段のスピードで研究開発が進展できることになる。

また、外場に関する研究については NEMCA/EPOC (コラム 2 参照) のような反応促進効果、新たな触媒作用現象を分析と理論で解明することで、全く新しい触媒機構の発見につながる可能性も考えられる。これにより、触媒化学分野への大きな波及効果もありうる。その意味でも機構解明のための研究は重要であり、それには分析技術、計算科学の基礎的な支援が鍵となる。

#### (4) その他

本プロポーザルで提案する革新的化学反応を推進するに当たっては、研究開発の初期段階よりプラントにおける全体のプロセス、あるいはライフサイクルアセスメント（LCA）のように原料から製品利用までを含めたエネルギー効率や CO<sub>2</sub> 排出などに関する評価研究が必要となる。すなわち、本プロポーザルで取り上げる革新的化学反応の出口として、プラント全体あるいは物質生産のライフサイクルでの効果について評価することも重要な研究開発課題である。このためには、本プロポーザルの革新的化学反応の特徴を理解することと、さらには現状の反応プロセスを十分理解して進めることも必要となる。また、この革新的化学反応を複数の化学反応が組み合わさった反応プロセスに適用し、仕事と熱の相互融通を最大限に発揮させプロセス革新につなげるためには、エネルギー効率の点のみならずエクセルギーの観点から全体プロセスを見据えた効率評価も重要となる。

さらに、研究室スケールで得られた要素技術をベースとして、パイロットスケールから商業スケールまで社会実装できる技術に仕上げていく必要があり、この段階では機械工学、化学工学、プラント工学などが重要な役割を果たす。

#### 【参考文献】

- 1) CRDS-FY2017-WR-12 「高度炭素・水素循環に資する革新的反応・分離のための C<sub>x</sub>H<sub>y</sub>O<sub>z</sub> 制御科学」

#### 【コラム9】 バイオマス「再生可能な炭素源」からの化学品製造<sup>1) 2)</sup>

バイオマスは再生可能な炭素資源であり、これを単にエネルギーとして使うよりも、その構造をうまく活用することで高い付加価値を持つ有用な資源となるポテンシャルを持つ。植物バイオマスは広葉樹、針葉樹、草木類があり、その主な組成はセルロース（30～55%）、ヘミセルロース（15～40%）、リグニン（10～35%）に分類される。

セルロースは、紙を始め、機能性高分子、最近ではナノファイバー、あるいは糖化、発酵して、いろいろなバイオ燃料や化学品をつくる研究が活発である。またヘミセルロースも発酵原料、オリゴ糖、最近では、特に欧米でガスバリア材などの機能性高分子として利用する研究が盛んになっている。これに対して、リグニンは、燃やす以外に有効な利用法がなく、莫大な再生可能な芳香族資源でありながら、有効に利用していないのが現状である。

リグニンの構造自身は C<sub>6</sub>C<sub>3</sub> ユニットが基本であるが、ラジカルカップリングのため、結合式には不規則な高分子である。ユニット同士はエーテル結合か炭素・炭素結合でつながっており、分解も難しい。

リグニンの変換利用としては、一つは分離したリグニンの構造特性を正確に理解して、特徴化した高分子体として利用する方法がある。もう一つは、選択

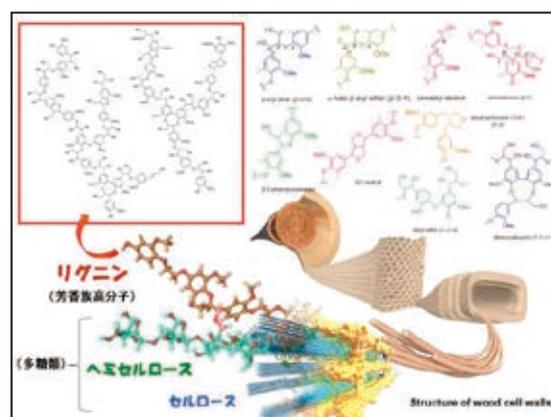


図 C9-1 植物バイオマスの構造

的分解により、芳香族化学品や生理活性物質などを生産する方法がある。この選択的分解に関しては、元の構造の違いや分解過程で容易に構造を変えてしまうため、その過程の制御とその構造の理解が非常に重要になる。反応場の制御、触媒への効率的なエネルギーの供与のために例えば、マイクロ波を用いて選択的分解反応を低温で進める方法などが研究開発されている。本提案における反応・分離技術はバイオマスのような反応性の高い物質の反応制御にも有効と考えられ、今後適用検討が期待される。

なお、バイオマス利用はその構造を理解しながら体系的に利用していくことが、再生可能な炭素資源として、あるいは付加価値を持つ資源として、さらには地球環境からも重要と考えられる。原油が燃料から化学品原料・アスファルトまで全体利用・全体最適化がなされているように、バイオマス資源についても同様に適材適所を考えた総合的利用を進めていくことが必要と考えられる。欧米では、既にバイオテクノロジーと経済活動を一体化させた「バイオエコノミー」という概念に基づく総合的な戦略のもとに政策が推進されている。我が国のバイオマス利用の研究開発については、特に非可食性バイオマスの利用に関して総合的な研究開発戦略が必要と考えられる。

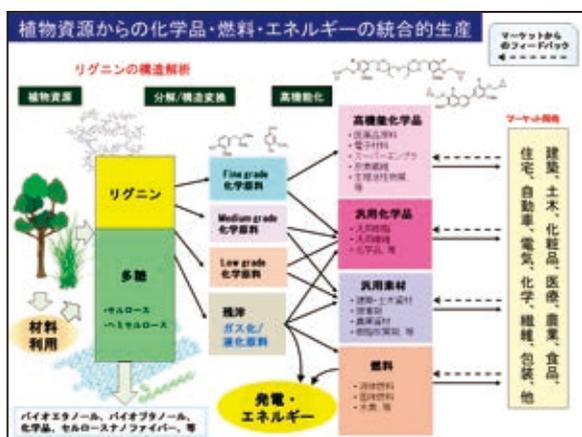


図 C9-2 植物資源からの統合的生産

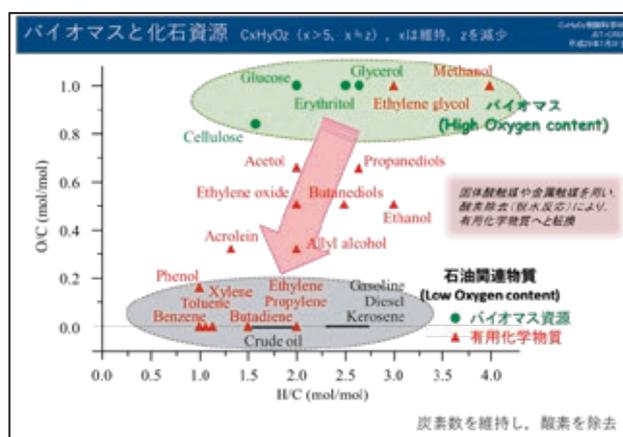


図 C9-3 バイオマスと化石資源

【参考文献】

- 1) CRDS-FY2017-WR-12 「高度炭素・水素循環に資する革新的反応・分離のための  $C_xH_yO_z$  制御科学」
- 2) NEDO TSC Foresight Vol.22 「バイオマスからの化学品製造分野の技術戦略策定に向けて」（2017年11月）  
<http://www.nedo.go.jp/content/100870192.pdf> (2018年3月21日時点)

## 4. 研究開発の推進方法および時間軸

本提案は気候変動対策やエネルギー転換などの国が進めている長期的戦略を考慮して展開する必要がある。このため、時間軸に沿った社会状況の変化を想定しながら、それに合わせて短中期的な視点、長期、超長期的な視点からの研究開発フェーズを考えていくことが重要になる。

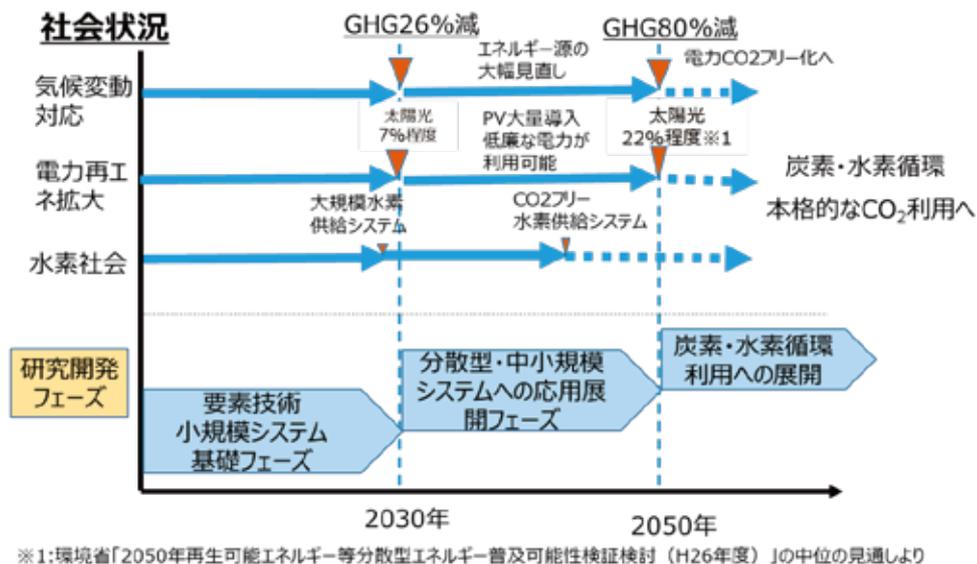


図12 研究開発の時間軸と研究開発フェーズ

国の施策として考慮すべきものは、気候変動対応（地球温暖化対策計画）、電力への再生可能エネルギー導入に関する動き、エネルギー対策として水素社会に向けた施策（水素基本戦略など）が挙げられる。これらの計画に鑑みると、およそその時期として2030年頃および2050年頃は研究開発のフェーズが切り替わる時期と言える。

- ◆ 2030年頃：エネルギー転換（再生可能エネルギー拡大）が進み始め、太陽光発電（PV）などの余剰電力、さらには廉価なPV電力など再生可能電力が大量に出始める時期。このころから余剰電力を用いた系統対策技術、さらには長期的需要変動に対応したエネルギー貯蔵技術として、本提案での技術を本格的に展開できる外部環境が整い始める。
- ◆ 2050年頃：エネルギー転換（再生可能エネルギー拡大）が本格化した後において、CO<sub>2</sub>のさらなる排出削減のために、炭素を循環的に利用することの重要性が意識される時期。CO<sub>2</sub>フリーのエネルギー源の大量導入、CO<sub>2</sub>回収・貯留（CCS）の導入など、CO<sub>2</sub>利用が展開しやすい外部環境が整い始める。

以上のことから2030年以降は本提案の技術への社会的ニーズが高まると想定され、その本格的な展開に向けて、基盤となる基礎研究と実用化に向けた研究開発を進めるための推進策が今後重要になる。しかし現状では、特に2030年頃までは廉価な電力もなく、利用できる原料としてのCO<sub>2</sub>も当たり前が存在しないことから、電気や光を用いることの

ニーズが決して高くないことが課題となる。このため、研究開発施策への国の積極的関与が非常に重要となり、特に研究開発フェーズの初期においては、将来の本格的展開時の基盤技術となるようにあらかじめ基礎研究も含めた研究開発の推進が必要になる。基礎研究を継続的に行うためには、必ずしも最終目標につながらなくても具体的な中期的な目標を立てて、基礎研究の成果が要素技術の一部として、何らかの形につながり、派生技術であってもその技術のポテンシャルを見せることが重要になる。

このことから当初の研究開発においては文科省や JST が推進する戦略的な基礎研究など、化学的な基盤の構築・強化も重視した事業での支援からスタートし、その技術をより実用化フェーズに近い JST の未来社会創造事業、さらには経産省、NEDO あるいは内閣府（SIP など）の事業に橋渡しし、実用化を推進することが重要である。まずは、産学連携の中で各個別企業のニーズを取り込み、何を生産するか、何を原料にするかは現時点では特段こだわらず、電気や光を活用することでメリット・特徴が何らかの形で発揮できる化学品とその製造技術、例えば新規物質製造や高付加価値の物質製造、あるいは小規模プロセスでも高効率であることを活かしたオンサイト型製造などを目標としつつ、その研究開発の中に基盤となる要素技術の研究開発を盛り込んだ形で進めることが重要である。

なお中長期的には本提案が再生可能エネルギー由来電力に絡んだエネルギーキャリアや電力 CO<sub>2</sub> フリー化と密接に関連してくることから、これらの国としての長期目標にかかわる計画と整合性を持たせながらアウトプットを出すとともに、時間経過とともに社会動向の不確実性も解消されてくることから、計画の見直しや組み換えも含めて対応することが重要になる。

## 付録 1. 検討の経緯

- 本プロポーザル作成に係る検討は、平成 29 年 5 月より「高度炭素・水素循環に資する革新的反応・分離技術のための C<sub>x</sub>H<sub>y</sub>O<sub>z</sub> 制御科学」（チーム名：CHO 制御科学）としてスタートした。調査活動としては有識者へのインタビュー（25 名）に加え、平成 29 年 7 月 31 日（月）および 11 月 29 日（水）の 2 回に渡り、科学技術未来戦略ワークショップ（招聘者合計 24 名）を開催した。（報告書：CRDS-FY2017-WR-12）これらの結果を踏まえ、本プロポーザルを平成 30 年 3 月に発行した。
- なお本プロポーザルは、平成 26 年度発刊の「反応プロセス革新」（CRDS-FY2014-SP-05）で提案した、電気を活用した反応プロセスの提案内容をスタート点としている。今回の検討においては、最近の動向や新たな視点を盛り込み、研究開発領域の拡大・融合を行うことで、社会的にも科学技術的にもさらに大きなインパクトを生み出す可能性を示している。

【科学技術未来戦略ワークショップ「高度炭素・水素循環に資する革新的反応・分離技術のための C<sub>x</sub>H<sub>y</sub>O<sub>z</sub> 制御科学」について】

当日のプログラムおよび参加者は以下の通り。

### ◆第 1 回ワークショップ

日時：2017 年 7 月 31 日（月）13:00～18:00

会場：JST 東京本部別館 2 階会議室 A ①

13:00～13:20 開会挨拶 佐藤 順一（JST-CRDS）

ワークショップ趣旨説明 尾山 宏次（JST-CRDS）

13:20～16:15 発表（1 件発表 15 分，質疑 5 分）（発表順 / 敬称略）

- ・「固体電解質を用いた C-H-O (-N) 選択反応化学の新しい展開」山口 周（東京大学）
- ・「高度炭素・水素循環に資する革新的反応・分離のための CHO 制御科学：実験と計算科学の連携」吉澤 一成（九州大学）
- ・「電気化学反応を利用した高効率・高分離システム開発 ～オペランド解析を用いた機構解明に基づく材料・デバイス開発～」内本 喜晴（京都大学）
- ・「Model catalyst studies using surface science techniques -Active sites of Cu/ZnO catalysts for methanol synthesis」中村 潤児（筑波大学）
- ・「高度炭素・水素循環に向けた中低温での電気化学的活性化」石原 達己（九州大学）
- ・「メソポーラス有機シリカを用いた革新的触媒の開発」稲垣 伸二（豊田中央研究所）
- ・「生体触媒による二酸化炭素還元・資源化 ～人工補酵素による生体触媒機能制御～」天尾 豊（大阪市立大学）
- ・「植物バイオマス社会に向けた新しいリグニン変換反応と応用展開」渡辺 隆司（京都大学）

16:30～17:00 コメンテータからのコメント・発表（1 件 6 分） 発表順

- ・多湖 輝興（東京工業大学）

- ・ 常木 英昭 (日本触媒)
- ・ 瀬戸山 亨 (三菱ケミカル)
- ・ 田中 祐一 (JXTG エネルギー)
- ・ 堂坂 健児 (本田技研工業)

17:00 ～ 17:55 総合討議 モデレータ 関根 泰 (JST-CRDS/ 早稲田大学)

17:55 ～ 18:00 閉会挨拶

氏名	所属	役職
招聘者 講演者・コメンテータ順 / 五十音順		
天尾 豊	大阪市立大学 複合先端研究機構	教授
石原 達己	九州大学工学研究院 応用化学分野	主幹教授
稲垣 伸二	(株) 豊田中央研究所 稲垣特別研究室	室長・シニアフェロー
内本 喜晴	京都大学大学院 人間・環境学研究所	教授
中村 潤児	筑波大学 数理物質系	教授
山口 周	東京大学大学院 工学系研究科マテリアル工学専攻 教授	教授
吉澤 一成	九州大学 先端物質化学研究所	副所長 教授
渡辺 隆司	京都大学 生存圏研究所	教授
瀬戸山 亨	三菱ケミカル (株)	執行役員/フェロー
多湖 輝興	東京工業大学 物質理工学院 応用化学系 教授	教授
田中 祐一	JXTG エネルギー (株) 中央技術研究所技術戦略室 室長	室長
堂坂 健児	本田技研工業 (株) 日本本部地域事業企画部 部長	部長
常木 英昭	(株) 日本触媒 事業創出本部 技監	技監
傍聴登録者 (府省関係者)		
守隨吉将	文部科学省研究開発局環境エネルギー課	係長
吉田有希	文部科学省研究開発局環境エネルギー課	行政調査員
田村 泰嗣	文部科学省研究振興局参事官 (ナノテクノロジー・物質・材料担当) 付	係長
坂元 亮介	文部科学省研究振興局参事官 (ナノテクノロジー・物質・材料担当) 付	係員
梅北 栄一	経済産業省研究開発課エネルギー・環境イノベーション戦略室長/内閣府	室長 / 企画官
染矢 聡	経済産業省 研究開発課 エネルギー・環境イノベーション戦略室	調査官
坂口 雅一	経済産業省 研究開発課 エネルギー・環境イノベーション戦略室	係長
山口 有朋	経済産業省 製造産業局素材産業課	研究開発専門職
松原 珠	内閣府総合科学技術・イノベーション会議事務局エネルギー・環境担当	上席調査員
榊 貴彦	内閣府総合科学技術・イノベーション会議事務局エネルギー・環境担当	政策調査員
石田 勝昭	NEDO 技術戦略研究センター 環境・化学ユニット	ユニット長
室井 高城	NEDO 技術戦略研究センター 環境・化学ユニット	フェロー
増田 美幸	NEDO 技術戦略研究センター エネルギーシステム・水素ユニット	職員
服部 元隆	NEDO 技術戦略研究センター マクロ分析ユニット	職員
チームメンバー (JST)		
佐藤 順一	CRDS 環境・エネルギーユニット	ユニット長 / 上席フェロー
尾山 宏次	CRDS 環境・エネルギーユニット	フェロー
小名木 伸晃	CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット	フェロー
川原 隆幸	産学連携展開部	イノベーション推進マネージャー
島津 博基	CRDS ライフサイエンス・臨床医学ユニット	ユニットリーダー/フェロー
杉浦 晃一	環境エネルギー研究開発推進部	調査員
関根 泰	CRDS 環境・エネルギーユニット / 早稲田大学理工学院	フェロー / 教授
中村 亮二	CRDS 環境・エネルギーユニット	ユニットリーダー/フェロー

丹羽 洋	産学連携展開部	イノベーション推進マネージャー
傍聴登録者 (JST)		
大平 竜也	CRDS 環境・エネルギーユニット	フェロー
高橋 玲子	CRDS 環境・エネルギーユニット	フェロー
松田 一夫	CRDS 環境・エネルギーユニット	フェロー
松本 麻奈美	CRDS 環境・エネルギーユニット	フェロー
永野 智己	CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット	ユニットリーダー/フェロー
古賀 明嗣	環境エネルギー研究開発推進部	部長
小林 恵	環境エネルギー研究開発推進部	主査
伊藤 哲雅	環境エネルギー研究開発推進部	主任調査員
永田卓司	戦略研究推進部	主任調査員
工藤 慶子	戦略研究推進部	主任調査員
酒部 健一	戦略研究推進部	主任調査員
沼澤 修平	戦略研究推進部	主査
岩崎 博	低炭素社会戦略センター 上席研究員	上席研究員
坂井琢磨	低炭素社会戦略センター 主査	主査

◆第2回ワークショップ

日時：2017年11月29日（水）13:00～18:00

場所：TKP市ヶ谷カンファレンスセンター 7階カンファレンスルーム7C

13:00～13:20 開会挨拶 佐藤 順一 (JST-CRDS)

ワークショップ趣旨説明 尾山 宏次 (JST-CRDS)

13:20～16:30 発表者からの発表・質疑 発表15分+質疑5分

- ・「人工光合成研究の意義と現状」 石谷 治 (東京工業大学)
- ・「半導体光触媒材料を用いた人工光合成」 工藤 昭彦 (東京理科大学)
- ・「半導体と分子触媒の複合系によるCO<sub>2</sub>の資源化反応」 森川 健志 (豊田中央研究所)
- ・「水と電気を用いた化学品合成」 山中 一郎 (東京工業大学)
- ・「固体イオニクス材料の動向と光イオニクス」 河村 純一 (東北大学)
- ・「遍在的なプロトンを操る技術の確立」 中井 浩巳 (早稲田大学)
- ・「触媒反応のオペランド計測」 近藤 寛 (慶應義塾大学)
- ・「マイクロ波技術の現状と展望」 和田 雄二 (東京工業大学)

16:30～17:00 コメンテータからのコメント・発表 (1件5～8分)

- ・石田 勝昭 (NEDO)
- ・佐藤 康司 (JXTG エネルギー)
- ・鈴木 賢 (旭化成)

17:00～17:55 総合討議 モデレータ 関根 泰 (JST-CRDS/早稲田大学)

17:55～18:00 閉会挨拶

氏名	所属	役職
招聘者 講演者・コメンテータ順 / 五十音順		
石谷 治	東京工業大学 理学院 化学系	教授
河村 純一	東北大学 多元物質科学研究所	教授
工藤 昭彦	東京理科大学理学部応用化学科	教授
中井 浩巳	早稲田大学 先進理工学部 化学・生命化学科	教授
森川 健志	株式会社豊田中央研究所・森川特別研究室	室長
近藤 寛	慶應義塾大学 理工学部 化学科	教授
山中 一郎	東京工業大学物質理工学院応用化学系	教授
和田 雄二	東京工業大学物質理工学院 応用化学系	教授
石田 勝昭	NEDO 技術戦略研究センター 環境・化学ユニット	ユニット長
佐藤 康司	JXTG エネルギー (株) 中央技術研究所先進エネルギー研究所 水素・基盤研究グループ	グループマネージャー
鈴木 賢	旭化成 (株) 化学・プロセス研究所 無機・フッ素化学開発部	部長/プリンシパルエキスパート
傍聴登録者 (府省関係者)		
守随吉将	文部科学省研究開発局環境エネルギー課	係長
吉田有希	文部科学省研究開発局環境エネルギー課	行政調査員
神 貴彦	内閣府 総合科学技術・イノベーション会議事務局 エネルギー・環境担当	政策調査員
梅北 栄一	経済産業省 研究開発課 エネルギー・環境イノベーション戦略室/内閣府	室長/企画官
伊藤 香織	経済産業省 研究開発課 エネルギー・環境イノベーション戦略室	室長補佐
坂口 雅一	経済産業省 研究開発課 エネルギー・環境イノベーション戦略室	係長
越野 雅至	経済産業省 研究開発課 エネルギー・環境イノベーション戦略室	研究開発専門職
山口 有朋	経済産業省 製造産業局素材産業課	研究開発専門職
定兼 修	NEDO 技術戦略研究センター 環境・化学ユニット	研究員
林 直之	NEDO 技術戦略研究センター 環境・化学ユニット	研究員
チームメンバー (JST)		
佐藤 順一	CRDS 環境・エネルギーユニット	ユニット長/上席フェロー
尾山 宏次	CRDS 環境・エネルギーユニット	フェロー
小名木 伸晃	CRDS ナノテクノロジー・材料ユニット	フェロー
川原 隆幸	産学連携展開部	イノベーション推進マネージャー
島津 博基	CRDS ライフサイエンス・臨床医学ユニット	ユニットリーダー/フェロー
杉浦 晃一	環境エネルギー研究開発推進部	調査員
関根 泰	CRDS 環境・エネルギーユニット / 早稲田大学理工学院	フェロー/教授
中村 亮二	CRDS 環境・エネルギーユニット	ユニットリーダー/フェロー
丹羽 洋	産学連携展開部	イノベーション推進マネージャー
傍聴登録者 (JST)		
大平 竜也	CRDS 環境・エネルギーユニット	フェロー
高橋 玲子	CRDS 環境・エネルギーユニット	フェロー
松田 一夫	CRDS 環境・エネルギーユニット	フェロー
松本 麻奈美	CRDS 環境・エネルギーユニット	フェロー
古賀 明嗣	環境エネルギー研究開発推進部	部長
伊藤 哲雅	環境エネルギー研究開発推進部	主任調査員
中村 幹	戦略研究推進部	調査役
内山 浩幹	戦略研究推進部	主査
小川 ゆい	戦略研究推進部	主査
岩崎 博	低炭素社会戦略センター	上席研究員
坂井 琢磨	低炭素社会戦略センター	主査
橋山 富樹	研究プロジェクト推進部	主任調査員

## 付録2. 国内外の状況

### 【国外動向】

#### (1) ドイツ：Power-to-X（コペルニクス・プロジェクトの一つ）<sup>1) 2)</sup>

2016年4月に、ドイツ連邦教育研究省（BMBF）が、「エネルギー転換に関するコペルニクス・プロジェクト」を発表。プロジェクトはマックスプランク研究所により発案され、①新ネットワーク構造、②余剰電力の貯蔵“Power-to-X”、③社会的受容も含めた産業化プロセス、④エネルギーシステム・インテグレーションの4つの領域からなっている。本プロジェクトにより、今後10年でアーヘン工科大などのアカデミア、シーメンス社などの産業界、市民が連携してエネルギーシステムの転換に必要な技術的、経済的解決策を生み出すことを目指している。また2018年までの最初の3年間の資金調達段階で、BMBFは最大120百万ユーロを提供する予定になっている。

このプロジェクト領域の一つであるPower-to-Xでは、余剰な再生可能エネルギーの90%以上を化学的原料、ガス燃料、または燃料の形で貯蔵するプロセスの研究などを実施することになっている。実施母体はアーヘン工科大、ユーリヒ総合研究機構（FZJ）、DECHEMAのコンソーシアムである。Power-to-Xの最初の3年間の予算は38百万ユーロであり、電解と触媒作用の基礎研究について、「水電解」、「低温共電解<sup>\*1</sup>」、「高温共電解」、「水素キャリア」、「燃料と化学物質（メタン、炭化水素、長鎖アルコールなど）」、「代替ディーゼル燃料やプラスチック合成（オキシメチレンエーテル、ポリオキシメチレンエーテル）」の6つのクラスターで研究を進め、最終的にどのような形で再生可能エネルギーを蓄え、持続可能なバリューチェーンを電気、運輸、化学物質の分野でどのように創造できるかを検討することになっている。また2017年10月にDECHEMAがPower-to-Xに関連するフォーラムを開催しており、バイオメタンや空気中のCO<sub>2</sub>回収（DAC）などのテーマも含めた幅広い発表内容になっている<sup>3)</sup>。

なお、EUとしては、Power-to-Xを自動車用燃料に適用することへの期待が大きい。EUにおいては2020年を目標に、輸送分野での10%再生可能エネルギー導入を目指した再生可能エネルギー指令（RED）、および自動車用燃料分野でGHG6%削減を目指した燃料品質指令（FQD）の二つの指令があり、その対応が必要な状況にある。その一方で、間接的土地利用変化を考慮して、食料と競合する第一世代バイオ燃料の混合率について、2015年に上限7%が新たに規定されている。このためバイオマスを起源としない液体燃料、ガス燃料（水素含む）が定義され、その導入の必要性（目標は0.5%）が高まっている状況である。なお、このような先進的な燃料はインセンティブとして、量的値をダブルカウントできるルールになっている<sup>4)</sup>。

\*1 共電解：CO<sub>2</sub>とH<sub>2</sub>Oの同時電気分解

- 1) JST-CRDS 俯瞰報告書「エネルギー分野（2017年）」CRDS-FY2016-FR-02
- 2) コペルニクス・プロジェクト HP <https://www.kopernikus-projekte.de/>  
(2018年3月21日時点)
- 3) DECHEMA PRAXISforum: Power-to-X  
[http://dechema.de/en/Power\\_to\\_X\\_Programme.html](http://dechema.de/en/Power_to_X_Programme.html) (2018年3月21日時点)

4) European Framework for Power-to-X

<https://ec.europa.eu/jrc/sites/jrcsh/files/Blondelle%20DG%20RTD.pdf>

(2018年3月21日時点)

(2) 米国 DOE : REBELS (ARPA-E プログラムの一つ) <sup>1) 2)</sup>

REBELS (Reliable Electricity Based on ELectrochemical Systems) では、中温域作動の電解質材料を開発し、燃料電池のコストを \$1,500/kW 以下に下げることが狙いとするとともに、中温域電解質材料を用いて化学品の電解合成を狙う研究開発である。

1) JST-CRDS 俯瞰報告書「エネルギー分野 (2017年)」CRDS-FY2016-FR-02

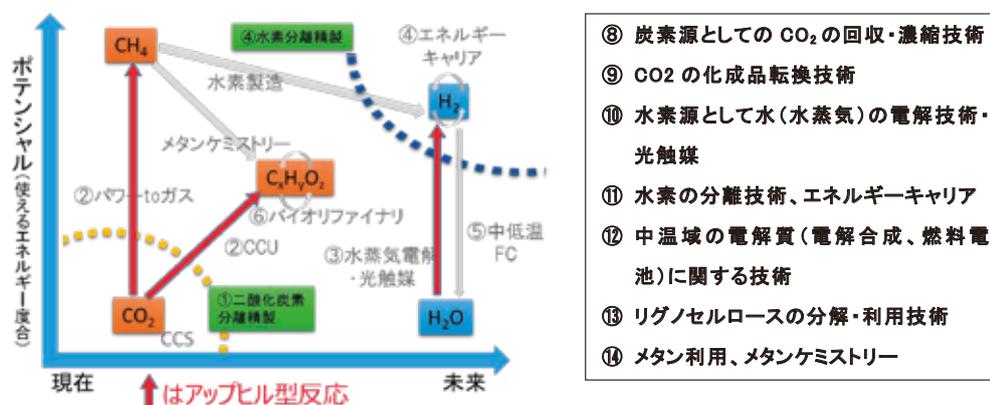
2) ARPA-E REBELS Program Overview

[https://arpa-e.energy.gov/sites/default/files/documents/files/REBELS\\_ProgramOverview.pdf](https://arpa-e.energy.gov/sites/default/files/documents/files/REBELS_ProgramOverview.pdf)

(2018年3月21日時点)

【国内動向】

炭素・水素の循環的な利用を考えた研究開発 (下図 (本文中の図3の再掲)) としては以下に示す研究開発が実施されている。ただし現状の研究開発の出口は個別システムを対象としたものであり、システム全体を考えたものにはなっておらず、循環的な利用を実現するには十分とは言えない。



- ◆ 戦略的イノベーション創造プログラム (SIP) 「エネルギーキャリア」(2014年度～2018年度)
- ◆ NEDO 「二酸化炭素原料化基幹化学品製造プロセス技術開発 (人工光合成プロジェクト)」(2014年度～2021年度)
- ◆ JST
  - CREST 「再生可能エネルギーからのエネルギーキャリアの製造とその利用のための革新的基盤技術の創出」(2013年度～2020年度)
  - CREST 「多様な天然炭素資源の活用に資する革新的触媒と創出技術」(2015年度～2022年度)

- ALCA「ホワイトバイオテクノロジー」(ALCA：2010年度～2025年度)
- ◆ JSPS 新学術領域「人工光合成による太陽光エネルギーの物質変換」(2012年度～2016年度(終了済))

【論文動向】

- ◆ 文献情報データベースを用いた国別論文数の集計結果を下図に示す。ここでは対象期間を2014年から2017年までの4年間とした。また「電極触媒」、「光触媒」、「水素製造」、「固体イオニクス」の4分野ごとに、それぞれ検索語として「Electrocatal\*」「Photocatal\*」「Hydrogen production」「Solid state ionics」を用いた。なお、固体イオニクスについては、抽出数が少なかったため、この分野において最も著名なジャーナルである SSI (Solid State Ionics) の論文動向についても調べた。結果を下図に示す。(SSIの結果は右端)

電極触媒		光触媒		水素製造		固体イオニクス	
国名	論文数	国名	論文数	国名	論文数	国名	論文数
China	4646	China	14809	China	3642	China	28
US	1018	India	2700	US	1207	US	18
India	774	US	1721	S. Korea	628	日本	17
S. Korea	581	Iran	1477	日本	590	India	6
Iran	523	S. Korea	1373	India	583	S. Korea	6
日本	274	日本	1296	Canada	460	Australia	5
Taiwan	269	Germany	683	Spain	431	Russia	5
							「Solid State Ionics」論文数 <sup>*2</sup>
	「Electrocatal」論文数 <sup>*1</sup>		「Photocatal」論文数 <sup>*1</sup>		「Hydrogen production」論文数 <sup>*1</sup>		「Solid State Ionics」論文数 <sup>*1</sup>

\*1： Scopusにて期間を「2014-2017」で検索した結果、

\*2： Journal「Solid State Ionics」の掲載論文数

- ◆ いずれも中国が論文数としてはトップにある。ここでは主たる比較対象として米国との比較を行った。
- ◆ 電極触媒については2014～2017年において9,173件あるが、そのほとんどが酸素還元反応。被引用論文でもバークレー大学やチューリッヒ工科大学、大連化学物理研究所等が世界をリードしていた。
- ◆ 日本の得意分野とされる光触媒については、近年は世界的にも研究が盛んに実施されている。数では他国には劣るが、被引用論文では依然高順位を維持していた。国内では、大阪大学、東京工業大学、東京大学、東京理科大学、京都大学、近畿大学等の論文の被引用数が多かった。
- ◆ 固体イオニクス分野は、数少ない日本が強いと言い切れる分野と言える。
  - ◇ SSI 最近5年間で1591報のうち日本298報で国別2位
  - ◇ 国内では東北大学・京都大学・東京大学などの被引用が多い

## 付録 3. 専門用語説明

### ・ イオニクス (ionics)

イオン (ion) の動きを活用 (化学反応などへの活用) する学問・工学分野。電子 (electron) の動きを活用する学問・工学分野をエレクトロニクス (electronics) と呼ぶことの類似。

### ・ 表面プラズモン共鳴

入射光によって誘導される固体あるいは液体中の電子の集団振動を指す。この原理を応用した太陽光発電などが研究開発されている。

### ・ 人工酵素

酵素は生体内代謝系で温和な条件で高効率に化学反応を進めるための触媒作用を持った物質。人工酵素はこの酵素の持つ機能を人工物で置き換えたもの。

### ・ オペランド計測

オペランド (Operando) はラテン語で “working”, “operating” という意味を持ち、触媒研究の分野にて使われ始めたのは 2002 年と比較的新しい言葉である。より広義な意味を持つ In situ (その場) という言葉がそれ以前から使用されていたが、オペランド観測は真の触媒動作条件下で触媒の分光学的評価と触媒活性・選択性の測定を同時に行う手法と定義されている

(参考) [https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/docs/tayori54-4\\_Part13.pdf](https://www.issp.u-tokyo.ac.jp/maincontents/docs/tayori54-4_Part13.pdf)

### ・ 光半導体触媒、光金属錯体触媒

光触媒は光を照射することにより触媒作用を示す物質の総称であり、半導体を用いたものが光半導体触媒、金属錯体を用いたものが光金属錯体触媒である。一般的に半導体型は光酸化力 (水分解など) に強みがあり、弱みは還元力 (CO<sub>2</sub> 還元など) である。一方、金属錯体型の強み、弱みは半導体型と逆になる。このため両方の強みを活かす形として金属錯体 / 半導体ハイブリッド光触媒の開発なども進められている。

### ・ マイクロ波化学

電磁波であるマイクロ波 (周波数 300MHz ~ 3THz 程度) を用いて、特定の分子のみにエネルギーを与えることによる反応方法を用いた物質合成を指す。我が国で広範に利用可能な波長は電波法で許可されている 933.92MHz, 2.45GHz (電子レンジに使用), 5.8GHz, 24.125GHz になる。

### ・ 規則性多孔材料

ゼオライト、金属有機構造体 (MOF)、メソポーラス有機シリカ (PMO) のようにサブナノメートルから数十ナノメートルの規則的な細孔をもつ物質群。固体酸・塩基触媒、触媒担体あるいは吸着・分離剤としての基礎および応用研究が活発に進められている。

- ・ 反応場分離

反応では化合物間で、電子を失う酸化反応と電子を受け取る還元反応が常に対になっており、通常の反応では近接位置で自然に連結して起きている。これを電気化学反応のように、酸化反応と還元反応の反応場を空間的に分離させたもの。

## ■戦略プロポーザル作成メンバー■

佐藤 順一	上席フェロー・総括責任者	(環境・エネルギーユニット)
尾山 宏次	フェロー・リーダー	(環境・エネルギーユニット)
小名木 伸晃	フェロー	(ナノテクノロジー・材料ユニット)
川原 隆幸	イノベーション推進マネージャー	(産学連携展開部)
島津 博基	フェロー	(ライフサイエンス・臨床医学ユニット)
杉浦 晃一	調査員	(環境エネルギー研究開発推進部)
関根 泰	フェロー	(環境・エネルギーユニット)
中村 亮二	フェロー	(環境・エネルギーユニット)
丹羽 洋	イノベーション推進マネージャー	(産学連携展開部)

※お問い合わせ等は下記ユニットまでお願いします。

CRDS-FY2017-SP-04

### 戦略プロポーザル

## 反応・分離を技術革新する電子・イオンの制御科学

～持続可能な反応プロセスを目指して～

### STRATEGIC PROPOSAL

Science on electronic and ionic control for innovative technology of reaction and separation

- Aiming for a sustainable reaction process -

平成 30 年 3 月 March 2018

ISBN 978-4-88890-597-8

国立研究開発法人科学技術振興機構研究開発戦略センター  
環境・エネルギーユニット

Environment and Energy Unit, Center for Research and Development Strategy,  
Japan Science and Technology Agency

---

〒102-0076 東京都千代田区五番町 7 番地

電 話 03-5214-7481 (代表)

ファックス 03-5214-7385

<http://www.jst.go.jp/crds/index.html>

©2018 JST/CRDS

許可無く複写/複製することを禁じます。

引用を行う際は、必ず出典を記述願います。

No part of this publication may be reproduced, copied, transmitted or translated without written permission.

Application should be sent to [crds@jst.go.jp](mailto:crds@jst.go.jp). Any quotations must be appropriately acknowledged.

---

