JACI NEWS LETTER
Japan Association for Chemical Innovation
公益社団法人 新化学技術推進協会

No.86 2023.9

HEADLINE

01 データ駆動型材料開発基盤の構築を目指して
02 JACIトピックス 第12回JACI/GSCシンポジウム報告
05 第22回GSC賞の紹介 経済産業大臣賞
06 第22回GSC賞の紹介 文部科学大臣賞
07 第22回GSC賞の紹介 環境大臣賞
08 第23回GSC賞募集

GSCN Green & Sustainable Chemistry Network

新化学技術推進協会は、人と環境の健康・安全と、持続可能な社会をめざすGSC推進の考え方にたち、技術革新の原動力となる新しい科学技術発展に貢献することを目的とした、公益社団法人です。

データ駆動型材料開発基盤の構築を目指して

国立研究開発法人
物質・材料研究機構
理事長 宝野 和博

データ駆動型の材料開発は、産業界では基礎的な試行から製品開発での工数削減につながるような実践的な取組みにシフトしつつあります。NIMS では 2014 年から内閣府 SIP「革新的構造材料」および「統合型材料開発システムによるマテリアル革命」において、構造材料分野におけるデータ駆動研究に着手し、並行して、2015 年から 5 年間実施された JST イノベーションハブ構築支援事業「情報統合型物質・材料開発イニシアティブ」を通じて、機構内外から計算科学の研究者を集め、データ駆動型材料開発手法の立ち上げを行いました。この間データプラットフォームと手法開発を一体で進める統合型材料開発・情報基盤部門（MaDIS）でデータ駆動型材料開発の環境整備がなされました。本年度から手法開発はマテリアル基盤研究センターに移動した研究者が、データプラットフォーム事業は共用部門のエンジニアが進めていくことになりました。これは、NIMS データプラットフォームを我が国の材料研究におけるデータ中核拠点として活用していただくための組織整備です。このプラットフォームでは、文科省マテリアル先端リサーチインフラ（ARIM）事業やデータ創出・活用型マテリアル研究開発プロジェクト（DxMT）で創出されるデータを自動的に収集する仕組みを構築し、それを AI により解析する API 環境を整備し、一部サービスを DICE として提供し始めております。今後、蓄電池材料、磁性材料、構造材料、高分子材料といった幅広い材料にデータ駆動型研究を展開し、材料開発を加速していきます。

NIMS 創設時には金属と無機材料研究者が多くを占めていましたが、最近では高分子分野の若手研究者が増えてきました。このような背景から、本年度より高分子・バイオ材料研究センターを新設したところですが、多くの研究はまだ基礎研究の段階にあります。今後、社会課題の解決につながる研究に発展させていくためには、化学業界の協力を仰ぐ必要があります。高分子材料データベース PoLyInfo は長年にわたり NIMS が構築してきたデータベースです。これまでは参照データとしての機能を中心に提供してきましたが、機械学習に活用いただけるよう世の中から求められる材料の設計に役立つデータベースとして発展させたいと考えております。そのためには、PoLyInfo をもっと研究開発で活用していただく必用があり、JACI の関連企業の更なるご協力を期待しています。

JACIトピックス

『「シン・化学」－新たな価値を実現する化学－』
第12回JACI/GSCシンポジウム開催報告

開会挨拶の淡輪会長

12回目を迎えたJACI/GSCシンポジウムは、『「シン・化学」－新たな価値を実現する化学－』をテーマに、６月13日にオンライン配信形式、６月14日に一橋講堂における対面形式で開催されました。

化学分野を超えた幅広い分野からの講演等を通じて、今後化学企業が取り組むべき課題などを提示し、持続可能な社会に向けた議論・交流を行うことができました。２日間にわたる開催でのべ約700名の皆様にご参加いただきました。

今回のシンポジウムでは、１日目に事前録画した講演、パネルディスカッションの配信を行いました。基調講演として、折井靖光氏（Rapidus株式会社 専務執行役員）、及川美紀氏（株式会社ポーラ代表取締役社長）、五箇公一氏（国立環境研究所生態リスク評価・対策研究室 室長）に講演をしていただきました。それぞれの講演では、日本の半導体産業の現状と課題・化学業界への期待、企業におけるDEIの必要性、新たな自然共生型社会と持続社会など化学企業が今後取り組むべき課題などについてのお話をいただきました。

招待講演として、大嶋孝志氏（九州大学 教授）、工藤昭彦氏（東京理科大学 教授）、吉江尚子氏（東京大学 教授）、佐藤康司氏（ENEOS株式会社 執行役員）からそれぞれの分野の最先端の研究成果について紹介していただきました。

Webサイト（シンポジウム特設ページ）

パネルディスカッションでは「カーボンニュートラルコンビナート」をテーマに松方正彦氏（早稲田大学 教授）にモデレーターをお願いし、パネリストには小出譲治氏（市原市長）、藤井律子氏（周南市長）、辻純平氏（住友化学株式会社）、辻佳子氏（東京大学）をお招きしました。また、横田浩氏（株式会社トクヤマ）からビデオメッセージをいただきました。京葉臨海コンビナート、周南コンビナートの事例を中心に将来のカーボンニュートラルコンビナートの課題と取り組みなどについて議論が交わされました。

第12回JACI/GSCシンポジウム 基調講演と招待講演（敬称略）

	演　者	所属	演　題	主な内容
基調講演	折井 靖光	Rapidus株式会社 専務執行役員	再び挑む、最先端半導体パッケージ開発の舞台	半導体の基礎、日本の半導体産業の現状と課題、化学業界への期待など。
	及川 美紀	株式会社ポーラ 代表取締役社長	私と企業の可能性を拓く、これからの人的資本経営―DEIの先の組織の持続的成長	企業におけるDEIの必要性とポーラの「挑戦する人材づくり」のケーススタディの紹介。
	五箇 公一	国立環境研究所 生態リスク評価・対策研究室 室長	地球環境問題と私たちの生活～新たな自然共生社会を目指して	新たな自然共生型社会、その根幹にある生物多様性と持続社会について。
招待講演	大嶋 孝志	九州大学大学院薬学研究院 副研究院長／教授	グリーンケミストリー推進のための「デジタル有機合成」の活用	「デジタル有機合成」プラットフォームを活用したグリーンケミストリーの推進事例の紹介。
	工藤 昭彦	東京理科大学 理学部応用化学科 教授	グリーン水素製造および二酸化炭素資源化のための人工光合成光触媒	低コストなグリーン水素製造技術として注目されている粉末光触媒を用いた人工光合成の解説。
	吉江 尚子	東京大学 副学長 生産技術研究所 教授	高分子材料における強い水素結合の可能性	高分子における硬い多重水素結合とは一線を画す、柔軟性を有する多重水素結合の解説。
	佐藤 康司	ENEOS株式会社 執行役員 中央技術研究所所長	グリーン水素サプライチェーン構築に向けたENEOS研究開発進捗	再エネ電力を有機ハイドライドMCHに直接変換する技術Direct MCH®の紹介。

２日目の午前中は一橋講堂においてGSCの推進に貢献する優れた業績を挙げた個人、団体に贈るGSC賞の受賞講演ならびに表彰式が行われました。第22回の受賞者の皆様は以下の通りです。

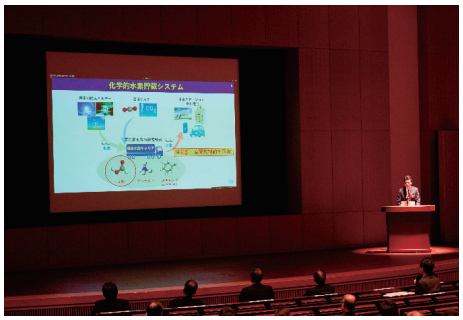
経済産業大臣賞：三井化学株式会社、天津天寰ポリウレタン有限公司、文部科学大臣賞：森浩亮氏（大阪大学）、環境大臣賞：花王株式会社、奨励賞：株式会社ADEKA、東亞合成株式会社、出光興産株式会社、産業技術総合研究所。

モデレーター 松方教授

株式会社トクヤマ　横田社長ビデオメッセージ

パネルディスカッション（カーボンニュートラルコンビナート）

JACIトピックス



GSC賞受賞講演

GSC賞受賞者

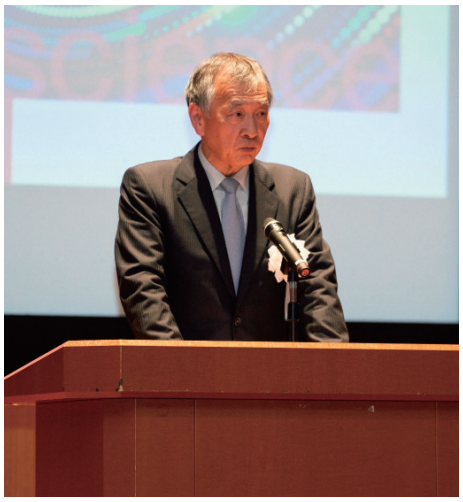
GSC賞表彰式

２日目の午後には産学官の研究者による 140件の学術ポスター発表が行われました。ポスターは「社会的貢献」の観点から、資源、エネルギー、環境、生活、共通基盤の5分野に分類され、それぞれのテーマに基づいて研究成果やアイディアが掲示されました。4年ぶりの対面形式での実施となり、発表者と参加者との間で非常に活発な議論が行われました。ポスター発表が対面で行われたことにより異なるバックグラウンドやスキルを持つ人々が直接コミュニケーションをとることができ、シンポジウムの目的の１つである連携を促進するための手段として効果的であったと思われます。

ポスター発表の様子

また、35歳以下の若手研究員を対象とするポスター賞には108件のエントリーがあり、産学のポスター審査員の厳正な審査の結果、12名の方がポスター賞に選出されました。

GSCポスター賞受賞者



森川副会長の閉会挨拶

第13回JACI/GSCシンポジウムは来年開催予定です。皆様のご参加をお待ちしております。

第22回 GSC賞 グリーン・サステイナブル ケミストリー賞

経済産業大臣賞

バイオ由来C5 イソシアネートおよびその誘導体を用いたポリウレタンの実用化

三井化学株式会社
山崎　聡　　中川　俊彦　　薄井　裕太
龍　昭憲
天津天寰ポリウレタン有限公司
森田　広一
連絡先：Satoshi.Yamasaki@mitsuichemicals.com

2050年までのカーボンニュートラルの実現にむけたCO_2排出量の削減の取り組みとして、化石資源の依存度の低減を目的とした、植物資源を由来とする炭素数5の新規なイソシアネートモノマー「1,5-ペンタメチレンジイソシアネート（商品名：スタビオ® PDI®（STABiO® PDI®）以下、バイオ由来C5イソシアネートと略）を創製した。バイオ由来C5イソシアネートは、既存の脂肪族系イソシアネートと比較して、アルコールとの反応性が高いため、その誘導体は、既存品と比較して、硬化時間の短縮および低い温度での硬化が可能となる速硬化性ならびに低温硬化性を示した。本イソシアネートは高いイソシアネート基濃度を有するため、ポリウレタン中のウレタン結合濃度が増加した結果、既存品を用いた系と比較して高い耐薬品性を示した。さらに、本イソシアネートのバイオマス度は約70%と市販されているイソシアネートモノマーの中で最も高い。これらの特長を市場への提供価値として、日本発にて世界で約30年ぶりの新規なイソシアネートおよびその誘導体の製品化を実現した。

コーティング材、接着剤、メガネレンズなどに用いられるポリウレタン製品のCO_2排出量の削減の要請に対して、再生可能な資源をもとに、低温あるいは短時間で硬化反応が進行する速硬化性や耐薬品性の向上が求められている。これらの課題に対応するには、既存のイソシアネートでは困難であり、新規イソシアネートの創出が不可欠と考えた。

そこで、我々は工業的な実現性を鑑み、炭素数5の新規ジイソシアネートに着目し、バイオマス由来のL-リジンから酵素反応により脱炭酸してジアミンを合成、これをジイソシアネート化する工業的製造法を実用化した。さらには、得られたスタビオ®PDI®およびその誘導体がアルコールとの反応性やポリウレタンのT_gの向上など各種物性において、既存品よりも優れることを明らかとし、日本発にて世界で約30年ぶりの新規なポリイソシアネート（バイオ由来C5イソシアネート）を実用化した。

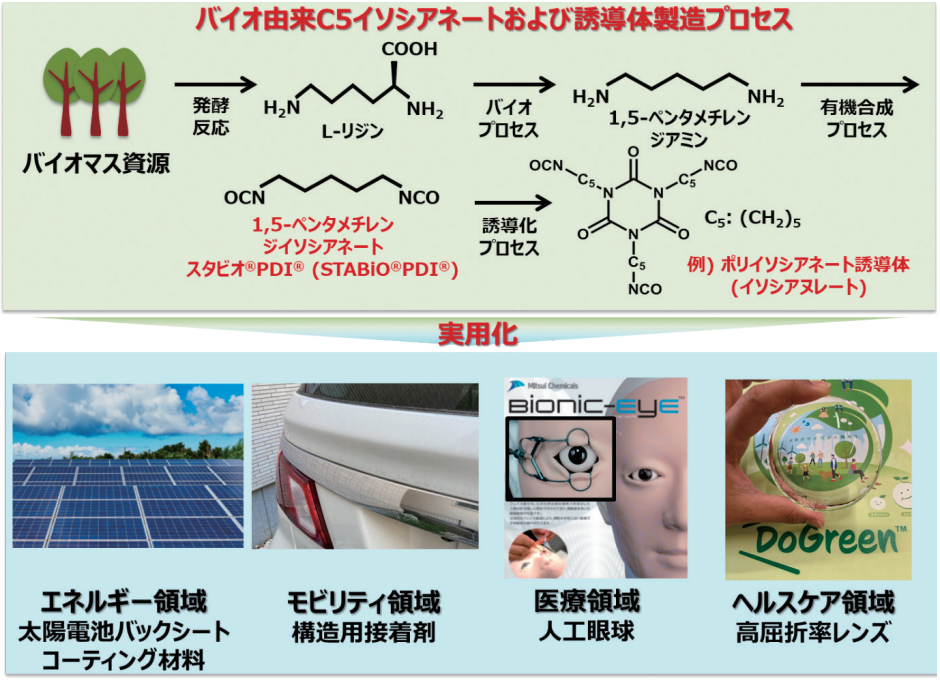
このバイオ由来C5イソシアネートおよび誘導体の特徴を活かして、グローバル市場にて主にエネルギー、モビリティならびに医療・ヘルスケア領域において、環境負荷を低減しつつ人々の快適性の向上を促進するポリウレタン製品を実用化した。

エネルギー領域では、シリコン系太陽電池モジュールのセルを保護するバックシートの省資源および省エネルギー化のため、フッ素ポリオールを用いたコーティングの構成向けに、速硬化性、耐薬品性および耐候性に優れたイソシアネート誘導体を実用化した。

モビリティ領域では、車両重量の低減を図り、燃費や電池の出力負荷を低減するため、超軽量のバックドアの構造接着剤向けに、基材密着性に優れたイソシアネート誘導体を実用化した。

医療・ヘルスケア領域では、世界で初めてバイオマスマークの認定を受けたバイオマス度35%の屈折率1.60のレンズ材料（Do Green™ MR-160DG™）を実用化した。本技術に基づく視力矯正用レンズは、従来の化石資源を用いたレンズよりも耐衝撃性や染色性に優れ、薄くて軽い特長を有している。

以上、本製品および技術は、独創的かつ極めて優れた業績をあげており、日本発の新化学にて地球環境との調和を通じて人類の快適性の向上に貢献している。



第22回 GSC賞 グリーン・サステイナブル

文部科学大臣賞

水素キャリアとしてのギ酸の利用に向けたナノ構造触媒の開発

大阪大学大学院工学研究科　准教授
森　浩亮

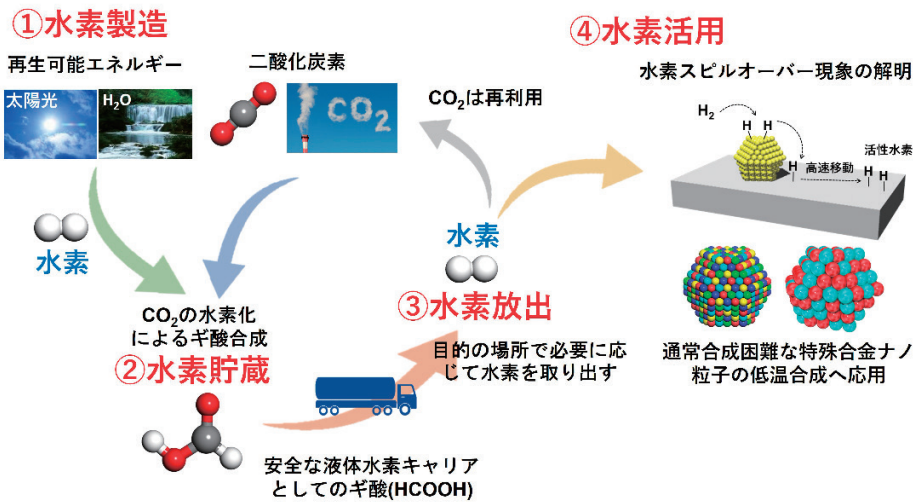
カーボンニュートラル社会の構築によりエネルギー資源革命を達成するには、二酸化炭素資源化や水素生成において新機能を発現する触媒の開発が不可欠である。水素の貯蔵・放出では、水素キャリアとして安全で毒性が低く、常温で液体であるギ酸（HCOOH）をターゲットとし、二酸化炭素を炭素源としたギ酸合成（水素貯蔵）、低温でのギ酸脱水素（水素放出）をそれぞれ促進するPd系合金ナノ粒子担持触媒を開発してきた。さらに、水素エネルギー社会のさらにその先を見据えた次世代技術としての画期的な水素の活用法も提案した。

水素エネルギー社会構築のため、化石燃料に頼らない水素の製造はもとより、水素を貯蔵・輸送可能な形態に変換して需要先へ届け、必要な時に水素を取り出す技術が不可欠である。さらに次世代技術として発展させるためには、これまでとは異なる画期的な水素の活用法を提案する必要がある。

本研究は、①再生可能エネルギーからの光触媒的水素製造、②二酸化炭素を炭素源としたギ酸合成（水素貯蔵）、③低温でのギ酸脱水素（水素放出）、④水素の動的挙動解明と革新的応用分野開拓（水素活用）、を実現すべき重要課題として位置づけ、一連の各過程を駆動する超高活性かつ実用的なナノ構造触媒を新規開拓したものであり、再生可能エネルギーを水素に変換して有効活用する一気通貫の触媒技術開発である。

水素の製造では可視光照射下での水からの水素生成反応を駆動する光触媒を開発した。特に、金属有機構造体や、多孔質材料の細孔に光応答性金属錯体を内包した無機-有機ハイブリッド光触媒の開発による新機能の発現に成功した。水素の貯蔵・放出では、水素キャリアとして安全で毒性が低く、常温で液体であるギ酸（HCOOH）をターゲットとし、その合成、分解反応を促進する世界最高レベルの触媒活性を示すPd系合金ナノ粒子担持触媒を設計・開発した。それにより、ギ酸の水素キャリアとしての利用可能性を世界に示した。さらに、原子状水素が高速拡散する水素スピルオーバー効果を異種金属の還元駆動力に利用すると、通常合成が困難な非平衡特殊合金ナノ粒子やハイエントロピー合金ナノ粒子が低温で合成できることを実証し、水素の新たな利用法を提言した。

開発したナノ構造触媒群は、CO_2資源化反応や、水素生成反応において、温和な条件下既存の触媒を凌駕する優れた性能を示すだけでなく、実用化に有望な固体触媒であるため、今後の利用拡大に大きく貢献する。また、ナノ構造触媒の材料開発と並行して、各過程の動作環境下での触媒表面のその場観察や理論計算を駆使し、触媒活性の根源を解明した。すなわち新材料合成、新機能発現、新原理の創出を成しえた本研究成果は、水素の製造、貯蔵、輸送、利用技術を基盤としたカーボンニュートラル水素エネルギープロセスの構築によるエネルギー資源革命の達成に留まらず、さらにその先を見据えた次世代水素社会のキーテクノロジーとなる可能性を秘めている。



ギ酸を利用したカーボンニュートラル水素エネルギープロセス

ケミストリー賞

環境大臣賞

低品位廃PETを活用したアスファルト舗装の高耐久化技術

花王株式会社　白井　英治、秋野　雄亮、橋本　良一、垣内　宏樹、柏木　啓孝

アスファルト舗装は快適な社会生活の為に欠く事が出来ない交通インフラであるが、劣化により燃費悪化・タイヤ摩耗・工事渋滞等　環境負荷を誘発する存在でもある。アスファルト舗装を大幅に高耐久化出来る改質剤を廃PETを活用して開発する事によりこれらの環境負荷の低減に挑戦した。他の手法では活用の難しい産業用廃PETをその骨格を活かしながらケミカルリサイクルにより改質剤へと変換する事により、アスファルト舗装の耐熱･耐圧･耐水･耐油性を高める事を実現した。本技術は既に500を超える駐車場・工場敷地・一般道で活用されており、今後更に拡大に取り組んでいく。

アスファルト舗装は熱可塑性であるアスファルトを使用する事により、比較的簡単にしっかりした舗装が実現できるため広く使用されている。一方で夏場・重車両により凹んでしまう、わだち掘れと言う課題を抱える。近年の温暖化で路面温度が上がり、電気自動車化で車両が重くなり、自動運転で一定の路面のみが荷重を受けるという条件ではこの課題がより一層深刻になるものと予想される。

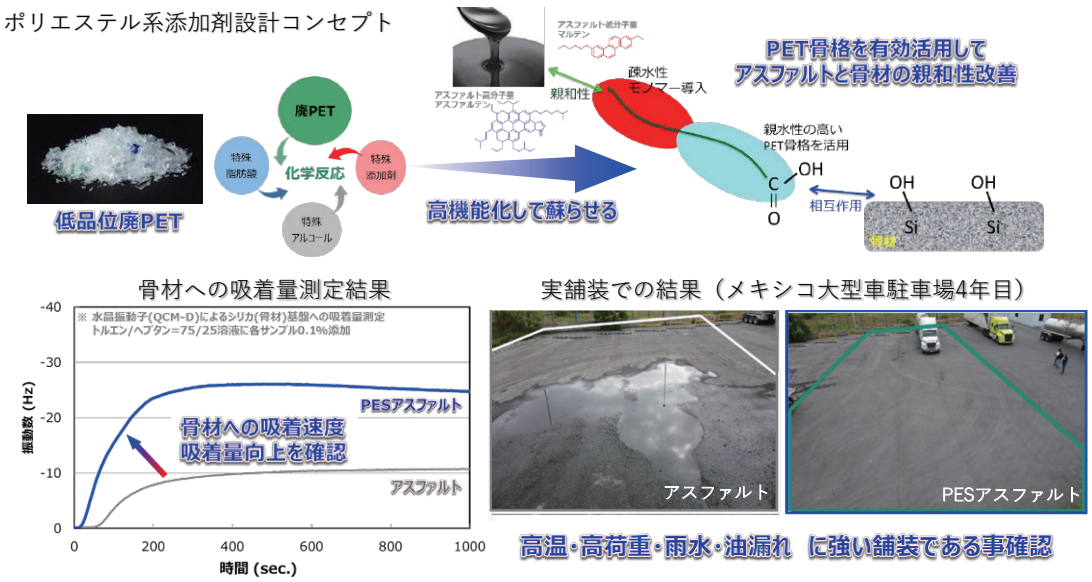
舗装は劣化すると張り替え・補修等の工事が必要になり、劣化した路面は燃費悪化・タイヤの摩耗が促進されるなど環境負荷が大きくなる。

このような課題を解決するために、アスファルトの使い易さをそのままに舗装の高耐久化を実現できるポリエステル系添加剤“ニュートラック”の開発による課題解決に挑戦した。

舗装に用いる骨材（石・砂）（親水性）へのアスファルト（疎水性）の吸着速度・吸着力が低い事に着目し、骨材とアスファルトの親和性を高めるポリエステルを新たに設計した。骨材との親和性の高いPET骨格と、アスファルトと親和性の高い疎水性骨格により、骨材とアスファルトの親和性を高めることに成功したが、このPET骨格についてはポリエステル合成時にPETボトルなどの廃PETを反応中間体として活用することにより、モノマーから製造するより高効率でポリエステルに組み込むことに成功した。

ポリエステル系添加剤“ニュートラック”を用いた舗装は、わだち掘れの発生が1/5になり耐水性・耐油性の向上も確認されている。これら価値により、多くの道路会社で工法化され、舗装実績も積んでいる。この舗装技術はLCAで従来比70％のCO_2削減と、100㎡あたり500ml PETボトル約1400本相当の廃PETを活用できるため環境貢献が大いに期待できる。

活用する廃PETは、当初、廃PETボトルを用いていたが、現在、他の手法では再利用の難しい産業用廃PETや着色した低品位廃PETの積極的活用の推進を行っている。本技術は、国内のみならず、北米・アジアでも展開を進めており、グローバルでの環境負荷低減が期待できる。



アップサイクル技術で新価値創造

第23回 GSC賞募集

第23回 グリーン・サステイナブル ケミストリー賞 候補業績募集が、始まっています。

- GSC賞は、グリーン・サステイナブル　ケミストリー(略称:GSC)分野の推進に貢献する優れた業績を挙げた個人、団体にお贈りしております。
その内訳は以下の業績になります。

1．**経済産業大臣賞は産業技術の発展に貢献する社会実装されたもの**
2．**文部科学大臣賞は学術の発展・普及に貢献するもの**
3．**環境大臣賞は環境負荷低減に貢献する社会実装されたもの**
4．**ベンチャー・中小企業賞はGSCの推進に貢献する中小規模事業体による社会実装されたもの**
5．**奨励賞はGSCの推進においてその貢献が将来期待できるもの**

- 応募期間
締切は、**Web申請入力が11月17日（金）、応募書類提出が11月20日（月）**です。
協会ホームページから、奮ってご応募ください！　再応募も歓迎いたします。

申請入力
https://www.jaci.or.jp/gscn/page_03.html
応募書類送付
gscn23@jaci.or.jp

編集後記

夏の風物詩ともいえるお祭りや花火大会では多くの人出があり、コロナ以前と変わらないような賑わいを見せておりましたが、皆さまはどのような夏を過ごされましたか？

JACIでは、8月よりSTGA、9月よりGSC賞をそれぞれ募集しており、大きく変化を続ける世の中で新たな挑戦に臨む方々の一助となるべく努めてまいります。引き続き協会活動へのご理解とご協力をお願い申し上げます。

JACIニュースレター
発行
公益社団法人新化学技術推進協会（JACI）
〒102-0075 東京都千代田区三番町2
三番町KSビル2F
TEL：03-6272-6880
https://www.jaci.or.jp/
編集　JACI　総務部

JACIのGSCネットワークは、次の団体で構成されています。
(国研)科学技術振興機構、(一財)化学研究評価機構、(公社)化学工学会、(一社)化学情報協会、関西化学工業協会、(一社)近畿化学協会、合成樹脂工業協会、(公社)高分子学会、(公社)高分子学会高分子同友会、(公財)相模中央化学研究所、(国研)産業技術総合研究所、(一社)触媒学会、(国研)新エネルギー・産業技術総合開発機構、(独行)製品評価技術基盤機構、石油化学工業協会、(公社)石油学会、(公財)地球環境産業技術研究機構、(公社)電気化学会、(地独)東京都立産業技術研究センター、(公社)日本化学会、(一社)日本化学工業協会、日本吸着学会、(公社)日本セラミックス協会、(一社)日本塗料工業会、日本バイオマテリアル学会、(一社)日本分析機器工業会、(一社)日本膜学会、(一財)バイオインダストリー協会、(国研)物質・材料研究機構、(一社)プラスチック循環利用協会、(公社)有機合成化学協会、(国研)理化学研究所

禁無断転載