

E1-10

機能性化学品製造イノベーションにおけるデジタル有機合成への期待

佐藤一彦（産総研触媒センター）

機能性化学品製造は我が国が大きな強みを有する技術領域であり、これまで多くのイノベーションを生み出し、世界経済を大きく支えてきた。近年、コンピュータや人工知能の急速な発展に伴い、機能性化学品の研究開発は従来の仮説駆動型からデータ駆動型へ急速にシフトしてきており、情報技術を駆使することで研究開発の加速が期待されている。すなわち、マテリアルズ・インフォマティクス (MI) により、材料探索から試作に至るまでの「何を作るのか」の研究を加速させ、さらにプロセス・インフォマティクス (PI) によって、材料の試作から工業生産可能な製造方法を確立するまでの「どう作るのか」の研究を加速させることが、今後の機能性化学品製造のイノベーションにつながり、ひいてはこれからの日本のマテリアル産業の競争力の強化につながると期待される。

さて、有機化学は有機化合物の製法、構造、用途、性質について研究する学問であり、有機合成化学も有機化合物の新規な合成方法について研究する学問である。すなわちこれらは、上記の機能性化学品製造における「何を作るか」、「どうやって作るか」の根幹をなす学問であると言える。そのため、機能性化学品製造において情報技術を使った研究開発が進む現在において、その根幹をなす有機化学・有機合成化学においても情報技術やデジタル技術の活用は避けて通れない。むしろ、この学術の根幹における情報技術やデジタル技術の活用を強力に進めることが、機能性化学品製造イノベーションをさらに加速させ、日本の化学産業の更なる強化に貢献できる可能性を大いに秘めている。このような観点から、デジタル有機合成にかかる期待は非常に大きい。

われわれ産業技術総合研究所でも、機能性化学品製造においてイノベーションを起こすべく、NEDO「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」(超超PJ)や「機能性化学品の連続精密生産プロセス技術開発」(フローPJ)を推進してきた。さらに最近では、最先端の製造プロセス装置や評価・分析装置群を全国の研究センターに整備し、マテリアル開発・実装に必要なプロセスデータの取得、技術シーズ・ニーズ・人材育成に関わる機能を総合的に提供するマテリアル・プロセスイノベーション (MPI) プラットフォーム計画も進めている。その中でも特に、マテリアル産業の製造プロセス高度化をデータ駆動型の観点から支援するため、触媒インフォマティクスを活用した触媒探索と製品製造探索を一体的に行うことが可能な先進触媒拠点をつくばに整備し、その運用を開始している。

本講演では、産総研が実施する機能性化学品製造イノベーションのための研究開発について紹介するとともに、学術研究と化学産業との間の橋渡し機能としての役割を果たす産総研の視点から、デジタル有機合成に期待することについて述べる。

PROFILE

佐藤一彦（産業技術総合研究所 触媒化学融合研究センター 研究センター長）

1985年千葉大学理学部化学科卒業、1990年東北大学大学院理学研究科博士課程修了、同年4月名古屋大学大学院理学研究科助手、2000年工業技術院（現・産業技術総合研究所）物質工学工業技術研究所招聘研究官、2005年研究グループ長、2008年主幹研究員、2011年企画本部総括企画主幹を経て、2013年より現職。専門分野は有機合成化学、過酸化水素酸化技術、ケイ素科学技術を含む化学全般。近年は、連続精密生産技術やAI触媒設計技術などの開発にも取り組んでいる。