

バイオエタノールからブタジエンを生成する世界最高の生産性を有する触媒システムを短期間で開発

横浜ゴム（株）は、国立研究開発法人 産業技術総合研究所（産総研）と先端素材高速開発技術研究組合（ADMAT）との共同研究により、インフォマティクス（情報科学）を活用しバイオエタノールからブタジエンを生成する世界最高の生産性を有する触媒システムを開発しました。また、生成したブタジエンを使ったブタジエンゴムの合成に成功しました。タイヤの主原料のひとつである合成ゴムの元となるブタジエンは現在、石油精製の副産物として工業的に生産されていますが、バイオマス（生物資源）からの生産技術の確立により石油への依存度低減やサステナブルな原料調達の促進が期待できます。

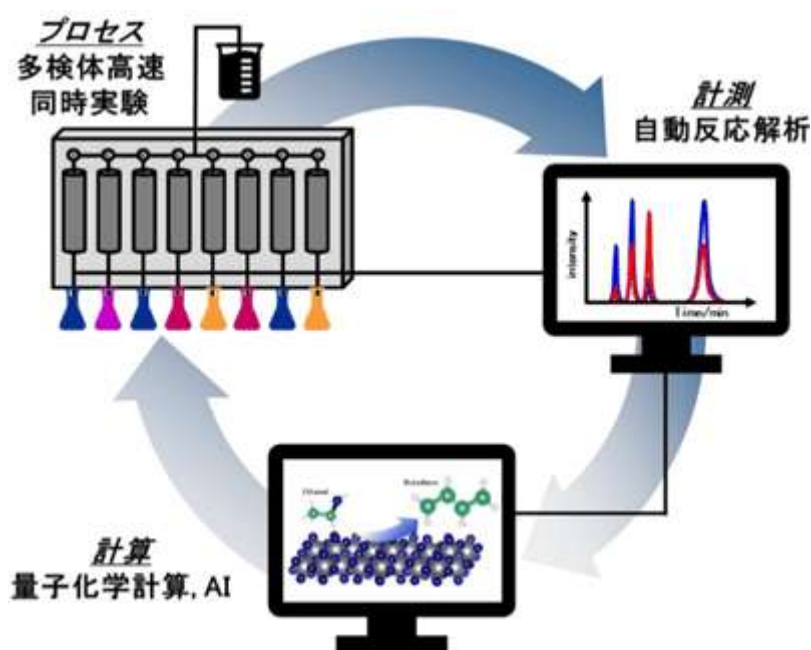


新開発の技術により生成したブタジエンを用いて合成したブタジエンゴム

本開発は国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構（NEDO）の「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト（超超PJ）」の委託事業として実施したものです。超超PJでは計算科学や人工知能（AI）を積極的に活用することで、従来の経験と勘を頼りにした材料開発と比較して開発期間を1/20に短縮することを目指しています。

今回、超超PJが推進する「計算科学技術」「プロセス技術」「先端計測技術」の三位一体での開発を進め、まず「計算科学技術」においてバイオエタノールからブタジエンをより多く生成できる金属酸化物触媒を探るため、AIを使用した量

量子化学計算による一次スクリーニングを行いました。バイオエタノールからブタジエンを生成するには複数段階の反応を経る必要がありますが、それを5段階に分けて各段階の反応を緻密に計算したところ、特定の金属酸化物の組み合わせが最適であることを導き出しました。次にそれらの最適な配合状態や反応条件を探索するため「プロセス技術」「先端計測技術」において、複数の条件下で試験する迅速触媒評価とそれぞれの反応性を高速に計測するハイスループット実験を行い、活性成分の触媒用担体における分布や量などの触媒調製条件や温度などの反応条件における最適解を発見しました。世界最高の生産性を有する非常に高活性な触媒システムの極めて短期間で発見であり、触媒開発におけるインフォマティクスの有用性を実証することにも成功しました。今後はより高度なAI技術による計算科学をベースとしたキャタリストインフォマティクスの基盤を構築するとともに、多検体高速同時評価と高速計測技術を連携させたハイスループット実験を通して、2030年のバイオマス由来の合成ゴム実用化を目指します。



超超PJが推進する「計算科学技術」、「プロセス技術」、「先端計測技術」の開発サイクル

横浜ゴムは、2015年に国連で採択された「持続可能な開発目標（SDGs）」の達成に向けて取り組んでおり、その一環としてサステナブルな原料調達に向けた技術開発を推進しています。バイオマスからの合成ゴム原料の生成では今回の開

発のほかに、2015年にセルロースからブタジエン、2018年に糖からイソプレンとブタジエンを生成する技術開発に成功しています。また、合成ゴムと同じくタイヤの主原料となる天然ゴムについても主要産地であるタイの大学との継続的な共同研究を実施しています。

日文新闻发布全文：

https://www.aist.go.jp/aist_j/press_release/pr2019/pr20190722/pr20190722.html

文：JST 客观日本编辑部翻译整理