

Integrated Chemical Process 整合的化学プロセス

プロジェクトリーダー 大 寺 純 蔵

岡山理科大学 工学部 教授



1. 研究の目的

化学合成は通常多段階の化学反応を連結して達成される。各段階はそれぞれ独自に最適化され、それらの組み合わせにより標的化合物に到る最適プロセスが決定される。このような近代科学に固有の解析的アプローチはこれまで目覚ましい成果を挙げてきたが他面ではその限界が見えつつあることも事実である。例えば、化学合成について言えば、旧来のプロセスでは各段階に共通の反応条件を確保することが難しく反応はそれぞれ別の反応器で行われ、必然的に中間生成物の単離・精製工程が不可欠となる。当然そこには資源・エネルギーのロスがあり、さらには有害化合物を取り扱うことを余儀なくされる事態が生じる場合もある。将来にわたってこのようなプロセスが現状のままで存続することが許されないことは自明であり、遠からずエネルギー、環境問題を克服したいわゆるエコプロセスに対する要請が強まるであろう。そのためには素反応工程の効率のみに囚われることなく、プロセス全体を多面的な観点から包括的に評価する新しい概念を導入する必要がある。本研究はこのような視点から、現在多段階に分けて行われている種々の化学反応を同一の反応器で遂行し中間体の単離工程を省略することにより、格段に簡略化されかつ環境に調和した化学製品製造プロセスの創製を目的とする。

本研究により創出されるプロセスは次のような数々の特徴を備えている。すなわち中間体単離工程省略による製造コスト低減、省資源、省エネルギー、非汚染化、ならびにプロセスの自動化による省力化、安全性確保などが挙げられる。当初は3、4段階よりなる比較的短いプロセスが検討の対象となるが、より多段階数のプロセスにも適用できる方法論の確立が最終目標となる。さらに一歩進んで環境調和型無人クローズドプロセスの開発へと展開する。



2. 研究の内容

従来化学プロセスの最適化はすべてエンジニアリング担当者に任されてきた。しかし今後予想される多様な要求を満たすプロセスの開発には反応設計の段階からエンジニアリング的に最適なプロセスを考慮する必要がある。われわれは右に示すような反応設計（合成化学者）とプロセス設計（エンジニア）の相互補完的な概念に立脚する。まず第一にコンピューターの活用による統合的化学プロセス設計のためのアルゴリズムを開発する。すなわち、既存データベースを利用した反応およびその反応条件の検索、各反応の比較、反応条件のマッチングを遂行する。これまでも化学におけるコンピューター利用は広範に検討されてきたが、化学計算を除いては必ずしも成功していない。なかでも合成設計への応用は1960代にCoreyによって始められたが今だに合成化学者の知識と経験のほうが実際的には勝っているのが実情である。ここではコンピューターの専門家の協力を得てより実用的で合成化学者が使い易いソフトの開発を目指す。次には上述のようにして得たプロセスの妥当性を実験により検証し最適プロセスを確立する。さらには目的に沿ったより効率的な新反応を開拓することも極めて重要である。既存の反応だけでは高付加価値製品の合成に必要とされる多様な要求に応えることができないことは明白であり本研究においても新反応開拓に力を注ぐ。ここでは合成化学者が中心的役割を果たすことは当然であるが合成ロボットも導入する。合成ロボットの開発は徐々に進展し一部企業ではすでに省力化の観点から試験的に採用されつつある。しかしその潜在能力が十分に活用されているとは言い難い。本研究では省力化のみならず自動化の特色を活かした新反応の開拓、反応の再現性のチェック、環境の非汚染化等、より一層広い視野から検討し、人間と機械が相補的に作動するシステムを確立する。そのためには既存のロボットを利用するだけでなくシステムエンジニアと協力して新しいロボットの開発も行う。

このような指針に基づいて右に示す二つの合成プロセス簡略化のための概念を新たに創出した。直列型プロセスでは、先ずすべてのステップに共通に適用できる反応条件を設定し、次にこの条件下でそれぞれのステップが最適化される。コンピューターで設計したプロセスを実験により確かめる。これが要求を満足しない場合にはコンピューターデザインに戻り、最適プロセスが得られるまで同じ手順繰り返す。このようにして達成されるプロセスは必然的に全段階がワンボットで進行することになる。

次にParallel Recognition Process（並列型プロセス）について述べる。基質内の複数の反応点に別種の化学変換を施す場合、通常は各変換を段階的に行う。これを一挙に行うことができれば合成の際に頻繁に用いられる官能基の保護、脱保護はもはや必要でなく合成プロセスは格段に簡略化される。当然逐次的な反応に比べて反応時間も短縮される。例えば、図に示す化学変換において、AをXと、BをYとだけ反応させようとしても普通はすべての組み合わせから生じる複数の生成物が得られる。しかし反応の選択性を適切に制御すると目的生成物のみを合成することが可能となる。このような概念をParallel Recognitionと呼ぶことにする。我々はすでに本概念の有効性をいくつかの例で立証した。たとえば識別の難しいケトンとアルデヒドをそれぞれ別種のエノルシリルエーテルと選択的に反応させることができる。他に副生物は一切認められない。

以上述べた新しいワンボット反応はいずれも我々が日頃頻繁に利用する反応を通常の条件で行うことができる点で適用範囲は極めて広い。ここに述べた新概念と自動合成装置を組み合わせると標的化合物が次々と合成される日もそう遠くないと考えている。

以上のように、本研究の特色は強い社会的要請があるにもかかわらず、学術的に従来殆ど未開拓のまま放置されてきた分野に新しい概念を導入し、学際的な取り組みにより革新的プロセス開発のための基盤を築くことにある。

3. 研究の体制

期 間：1996年10月－2001年3月

構 成：プロジェクトリーダー1名、コアメンバー5名、研究協力者7名、そのほか岡山理科大学、東京理科大学の学生多数がこの研究に参加しています。
実施場所：岡山理科大学大寺研究室、東京理科大学櫻井研究室。

