

ALCA-Next

「資源循環」領域

2024 年度 年次報告書

2023 年度採択

[研究開発代表者名:上高原 浩]

[京都大学大学院農学研究科 教授]

[研究開発課題名:バイオマスの新機能化戦略:植物高分子の2段活用]

主たる共同研究者:

[西尾 直高 (株式会社ダイセル研究開発本部バイオマスイノベーションセンター
主任研究員)]

実施期間 : 2024 年 4 月 1 日～2025 年 3 月 31 日

§1. 研究開発成果の概要

提案者独自の木質三成分分離技術を更に進化させ、位置選択的置換反応を鋸屑の反応に適用し、1次高分子として位置選択的置換セルロース、ヘミセルロース、リグニン誘導体を単離する。次いで、1次高分子を選択的分解反応に低分子化合物に変換し、重合反応により2次高分子を合成する。バイオマス材料のカスケード利用とアップグレードを達成(2段活用)し、*in silico* 合成技術を駆使し、CO₂の長期固定化法を確立することが本研究の目的である。

本年度は、カーボンフットプリントの算出に向けて、合成ルートの最適化を行った。はじめに、木質バイオマス鋸屑の粒子径の違いが溶媒への溶解性に与える影響を検討した。次いで、反応コストを下げるために、テトラブチルアンモニウムフルオライドを含まない溶媒系を探索した。その結果、昨年度よりも反応コストを低減させることに成功した。本年度は木材のエーテル化と分離により得られるエーテル化セルロースフラクションの利用を中心に検討した。セルロースを原料とした *one-pot* 反応により、2,3-di-*O*-ethyl-6-*O*-methoxytrityl cellulose の合成に成功した。その結果、2,3,6-tri-*O*-ethyl cellulose も含め、木材から、様々な置換基パターンを有するエチルセルロースを得る方法の目処が立った。更には、シミュレーションにより、既存の溶解性判断手法(溶解度パラメータなど)とは異なる、より精度の高い計算モデルを構築し、セルロース誘導体の溶媒への溶解性を予測する方法論を確立した。また、分子動力学法による反応性予測では、エチル化反応が分子配置(アルキル化剤とセルロース酸素原子の配置)だけでは実験事実を説明できないことが分かった。

【代表的な原著論文情報】

なし