

シミュレーションによるリグニンからの1,3-ブタジエン合成プロセス評価

(バイオベース材料化学グループ) ○花岡寿明

- シミュレーションにより未知のプロセスの生成物収率、投入エネルギー、収入、支出を評価
- 現状プロセスと理想プロセス、あるいは競合プロセスとの定量的な差を検証することが可能
- 有望なプロセス実現に向け、開発の優先順位が最も高い単位操作の抽出が可能

研究のねらい

1,3-ブタジエン (1,3-BD) は、汎用性のゴムやプラスチックの原料であり、今後需要が増加すると予想されています。現在1,3-BDは、ナフサからエチレンを製造する際の副産物です。今後、ナフサより安価なシェールガスからエチレン製造が盛んになると予想されています。シェールガスからの1,3-BD製造は困難であるため、**供給量が不足するリスクがあります**。本研究では、**リグニンからの1,3-BD合成プロセス**を複数提案し、シミュレーションにより**実現可能性の高いプロセス**を選定しました。さらに、**開発の優先順位が最も高い単位操作**を選定し、今後の開発対象とします。

研究内容

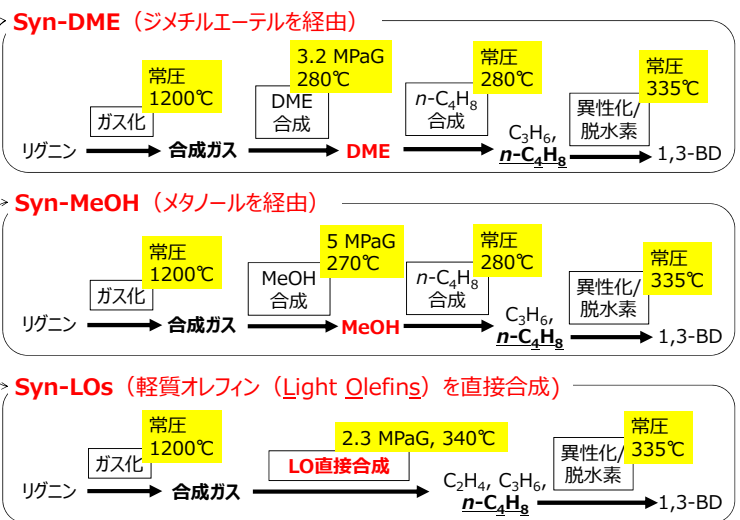
・提案する3つの1,3-BD合成プロセス

バイオマスガス化による**合成ガス製造**は、発電利用を目的として既に工業化されています。***n*-ブテンの異性化/脱水素による1,3-BD合成**は、工業化に近い技術です。

合成ガスから***n*-ブテン**を合成について、異なる単位操作から成る3つのプロセスを提案します。



各プロセスについて、**現状プロセス**と**理想プロセス**の1,3-BDおよび副生成物の収率、投入エネルギー、収入、支出、収支を評価しました。



・シミュレーション結果：どのプロセスが有望？ どの単位操作の開発を進めるべき？

プラント規模：
 リグニン 200 t-wet/d
 含水率 50 wt%

表1 提案するプロセスの現状と理想：1,3-BD収率と収支

プロセス	1,3-BD		<i>n</i> -C ₄ H ₈ 合成		製品販売による収入 \$/d	エネルギー購入による支出 \$/d	収支 \$/t-リグニン
	収率 wt%	DME/MeOH/LOs 収率 wt%	<i>n</i> -C ₄ H ₈ 収率 wt%	<i>n</i> -C ₄ H ₈ 収率 wt%			
Syn-DME	現状プロセス	3.2	27.6	15.2	10571	11558	-5
	理想プロセス	13.4	38.1	33.7	28042	14512	68
Syn-MeOH	現状プロセス	1.2	15.6	10.9	4117	14544	-52
	理想プロセス	4.6	19.9	26.6	9443	14668	-26
Syn-LOs	現状プロセス	1.5	1.8		5040	11881	-34
	理想プロセス	4.0	3.8		11598	11774	-1

1,3-BD: \$1500/t
 C₃H₆: \$800/t
 C₂H₄: \$300/t
 電気: \$0.1/kWh
 熱 (C重油): \$0.04/kWh

結果1：合成ガス、DME、*n*-ブテンを経由するプロセスは1,3-BD収率が最も高く、有望です。

結果2：DMEから*n*-ブテンを合成する単位操作は現状と理想の差が大きく、最優先に開発すべきです。

収入と支出の差をリグニン供給量で除したものです。単位重量当たりのリグニンを処理した時の収入に相当します。

結果3：Syn-DMEの理想プロセスは収支が唯一正となり、結果1を支持しています。