

2024年9月10日 15:00 – 15:25

# 化学品生産におけるCO<sub>2</sub>排出量を 最小化する溶媒選択シミュレーション

材料・化学領域 化学プロセス研究部門  
主任研究員 山木 雄大

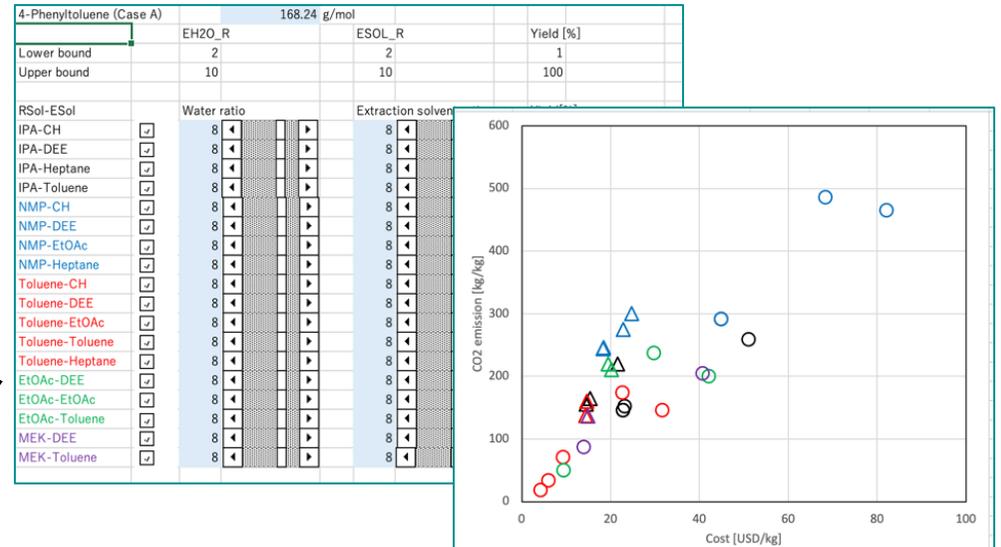
# 本研究のポイント

## 従来技術と問題点

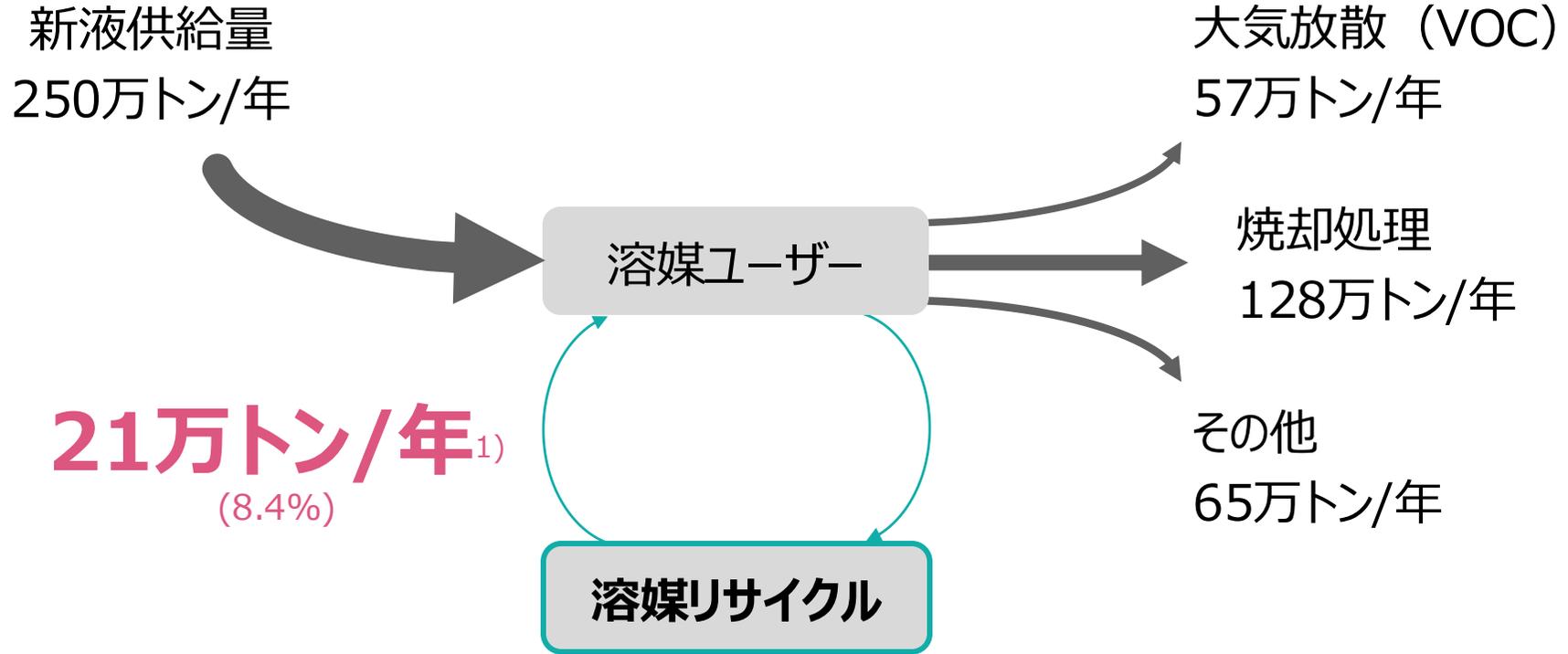
- 溶媒は産業分野において様々な用途で大量に使用されている
- 溶媒選択の方法として、例えば、化学産業では反応収率が重視されている  
Scope1 (CO<sub>2</sub>の直接排出) : ○  
Scope2 (他社から供給された電力等の使用に伴うCO<sub>2</sub>の間接排出) : ○
- 使用した溶媒の処理までは考慮されていない  
Scope3 (Scope1と2以外の間接排出量) : ✕

## 提案する技術の特徴

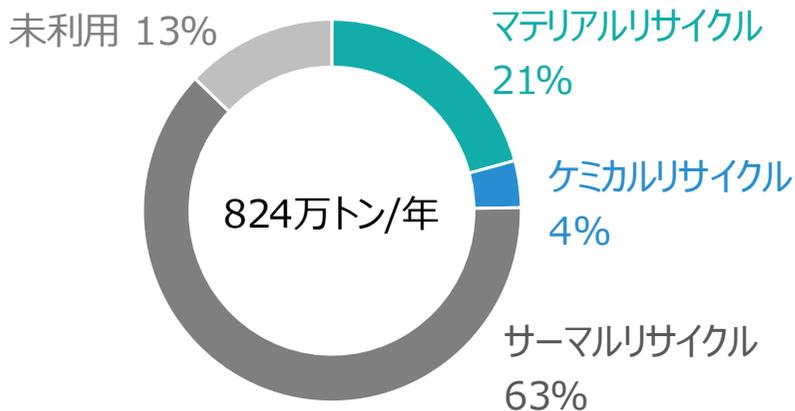
- 化学プロセスを通じてCO<sub>2</sub>排出量と生産コストを最小化する溶媒をシミュレーションにより選択・評価する
- 合成反応の収率だけでなく抽出や溶媒リサイクルまでシミュレーションする
- 溶媒選択を簡易的に行うツールを開発  
※発表内でデモンストレーションあり



# 溶媒リサイクルの現状



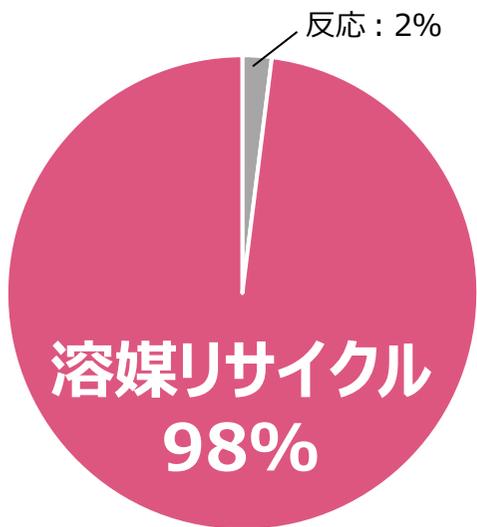
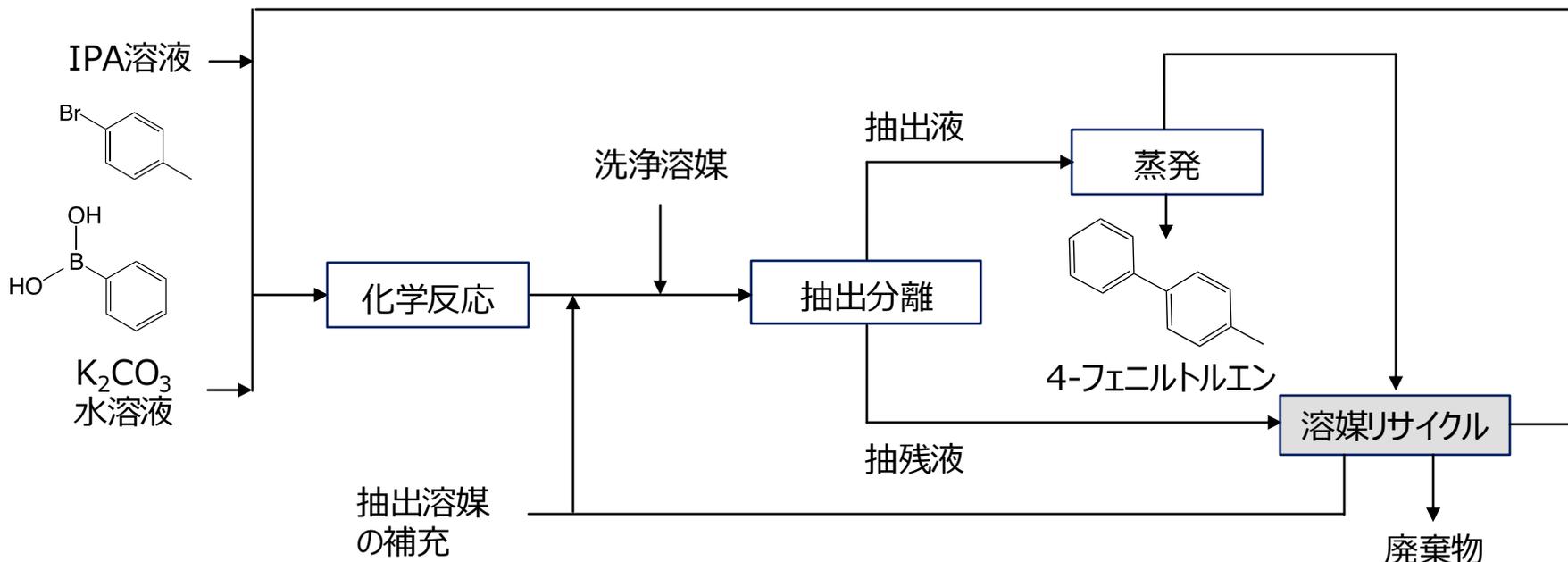
## 【比較例】プラスチックリサイクル<sup>2)</sup>



- プラスチックリサイクルよりも溶媒リサイクルは少ない
- 溶媒を焼却処理すればCO<sub>2</sub>を排出
- 溶媒リサイクルを増やすことでCO<sub>2</sub>排出の削減が見込める

# 溶媒リサイクルのエネルギー消費量の例

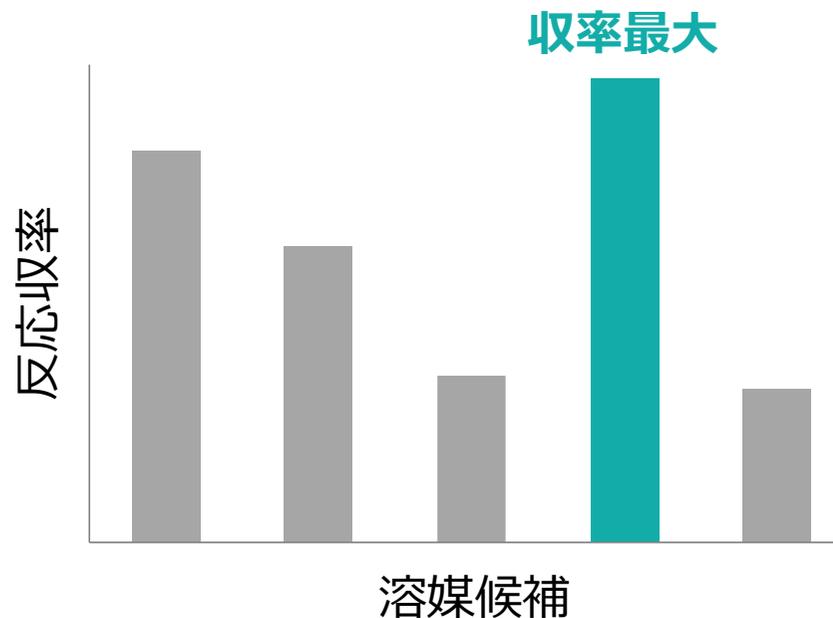
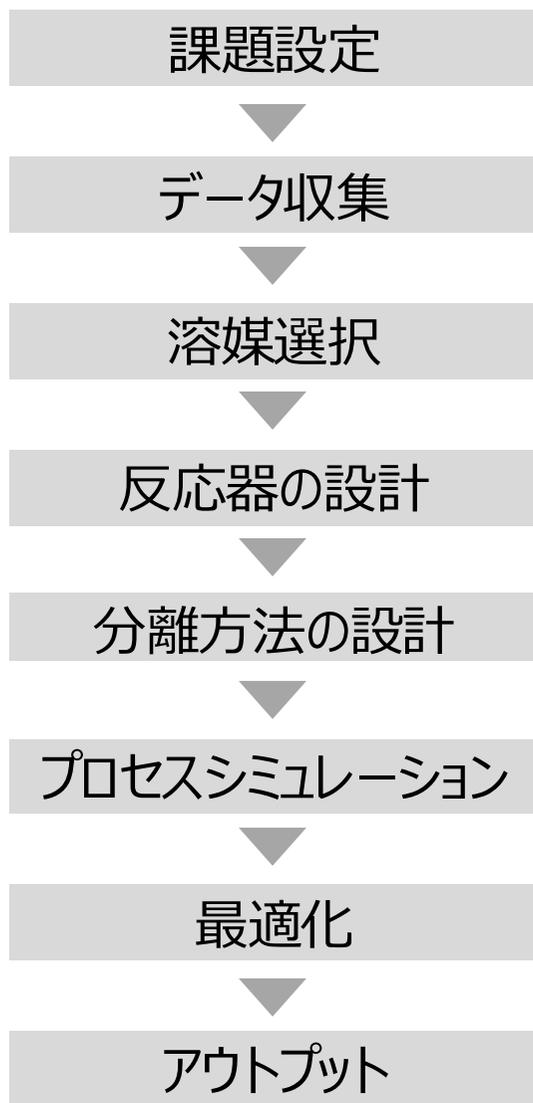
例) 鈴木-宮浦カップリング反応を用いた4-フェニルトルエン合成プロセスの評価結果



エネルギー消費量の内訳

- エネルギー消費の**98%**は溶媒リサイクル
- 溶媒リサイクル技術の効率化には限度がある
- 反応まで含めたプロセス全体の高効率化が必要

# これまでの溶媒選択の方法

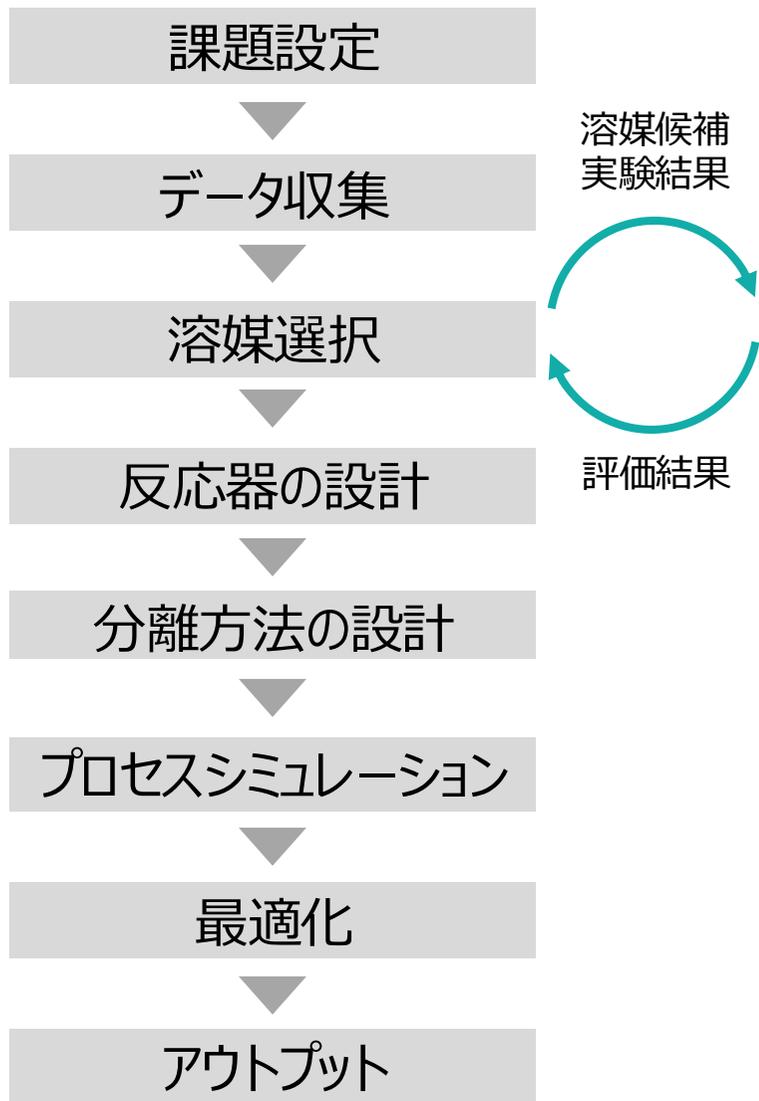


- 反応開発のスキームは一方通行<sup>3)</sup>
- 反応収率が最大となる溶媒を選択
- 使用した溶媒のリサイクルの影響までは考慮されていない

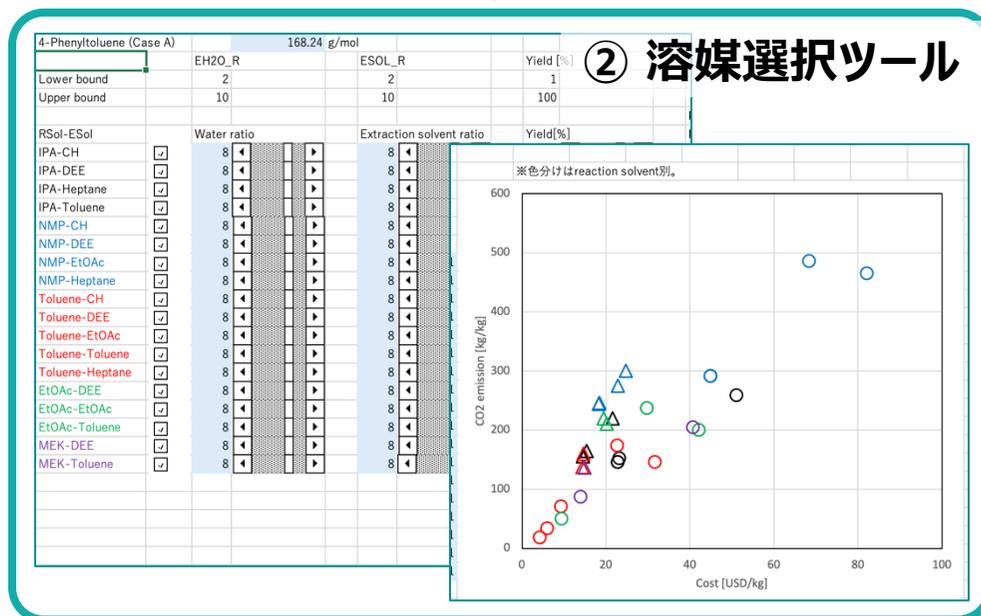
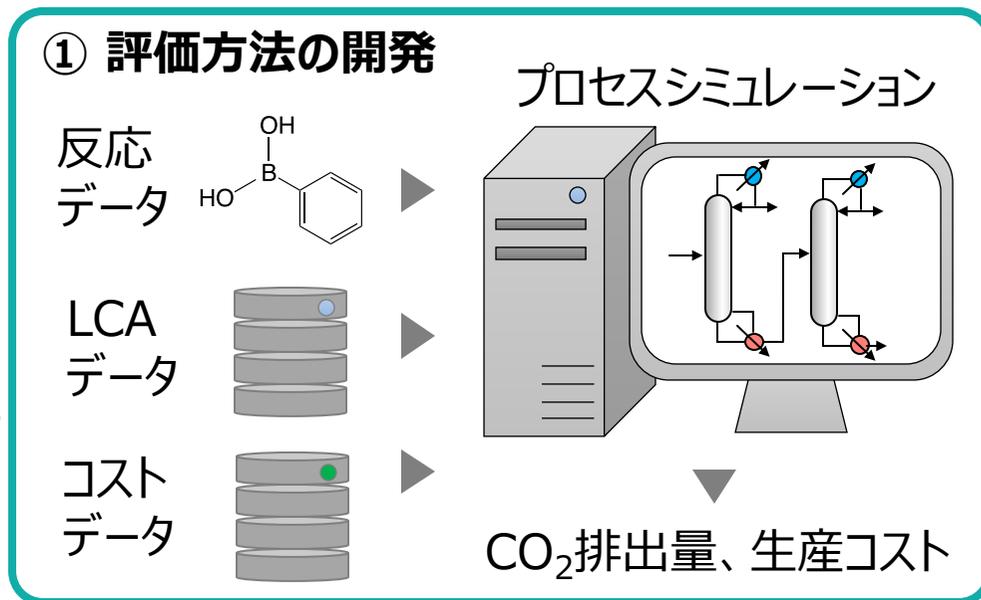
**反応開発段階からプロセス全体を考慮した溶媒選択の技術が必要**

# 開発した溶媒選択シミュレーション技術

これまでの溶媒選択

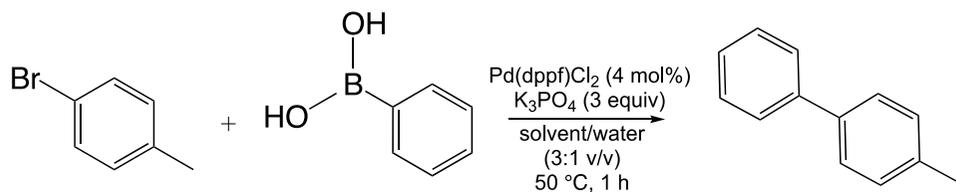


開発した溶媒選択技術

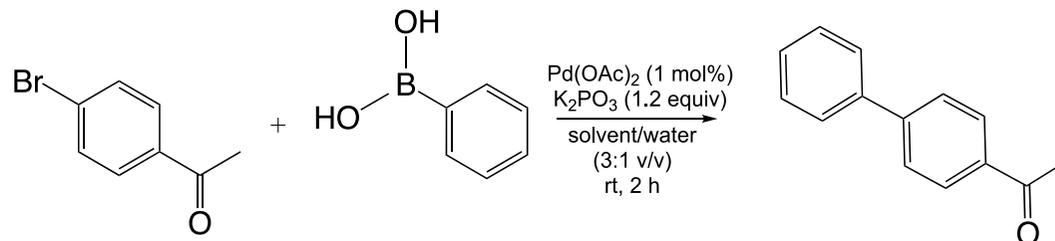


## モデル反応：鈴木-宮浦カップリング

### 反応1：4-フェニルトルエン合成



### 反応2：ビフェニルメチルケトン合成



## 反応溶媒の候補

反応溶媒 <sup>4)</sup>	反応収率 [%]	
	反応1	反応2
N-methyl-2-pyrrolidone (NMP)	85	100
Toluene	94	42
Methyl ethyl ketone (MEK)	92	30
Isopropyl alcohol (IPA)	81	100
Ethyl acetate (EtAc)	76	28

### 【その他の溶媒】

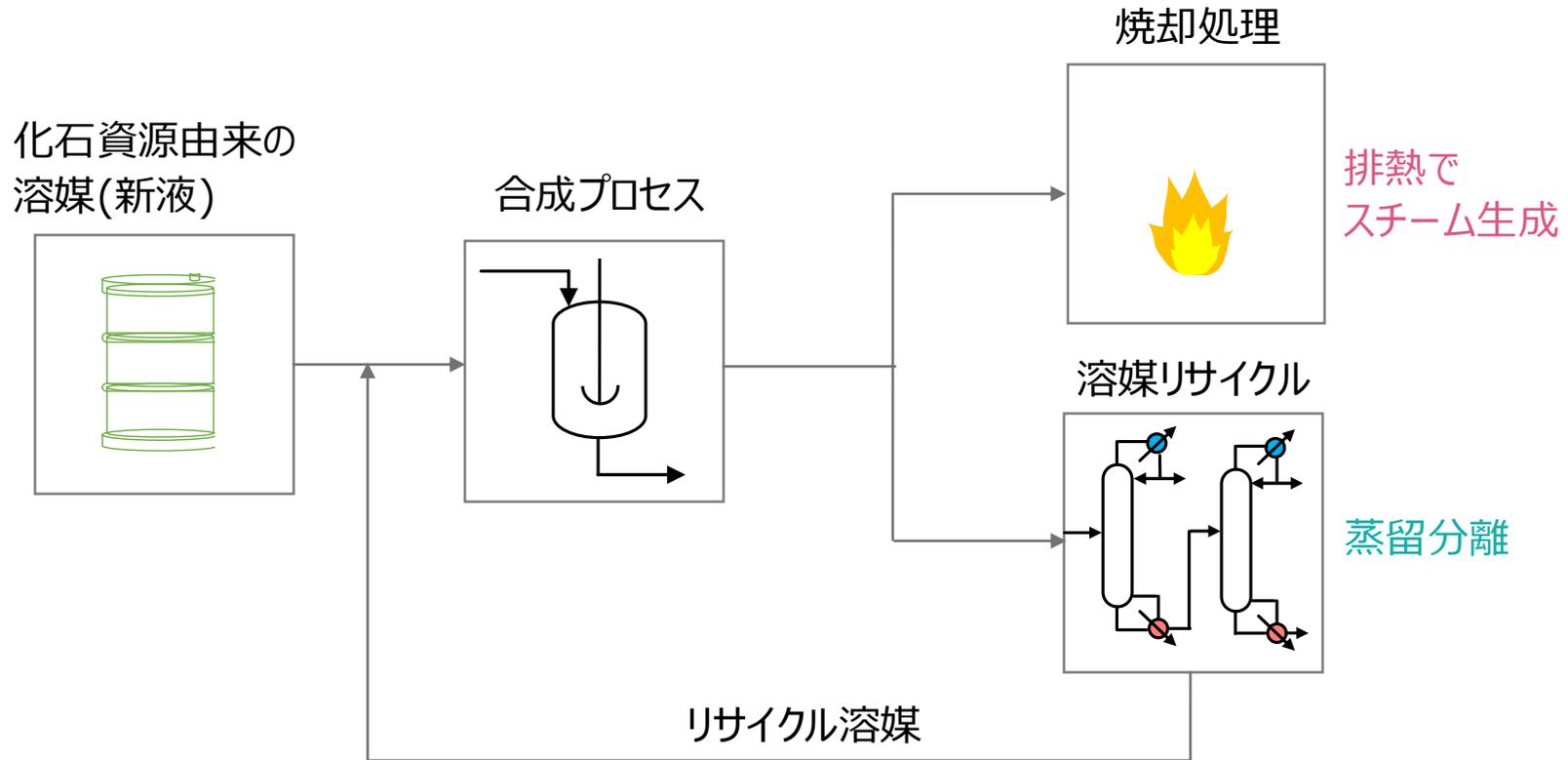
1. 反応溶媒には水も添加  
(反応溶媒と水の容積比は3:1)
2. 目的物を抽出するために  
Diethyl ether (DEE) を使用



**3 成分混合物を分離**

4) James Sherwood, *Beilstein J. Org. Chem.*, **2020**, 16, 1001–1005

# 評価の範囲と指標の設定



## CO<sub>2</sub>排出量評価に含める項目

- 新液の製造に伴うCO<sub>2</sub>排出
- 使用するエネルギー由来のCO<sub>2</sub>排出
- 焼却により発生するCO<sub>2</sub>

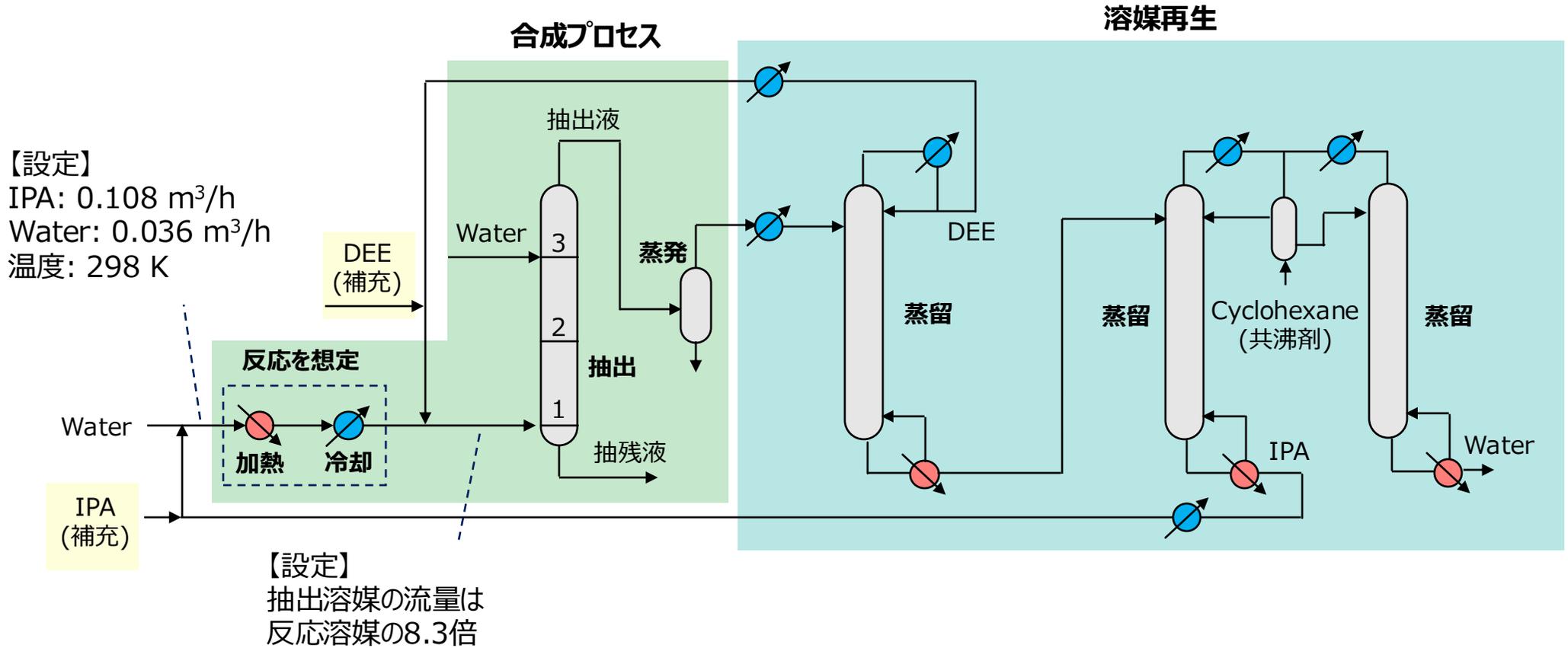
▼  
目的物の単位質量あたりのCO<sub>2</sub>排出量  
[kg-CO<sub>2</sub>/kg-product]

## コスト評価に含める項目

- 新液の購入
- エネルギー使用の運転コストの価格
- 装置の購入コスト

▼  
目的物の単位質量あたりの生産コスト  
[USD/kg-product]

# 溶媒再生まで含めたプロセスフロー



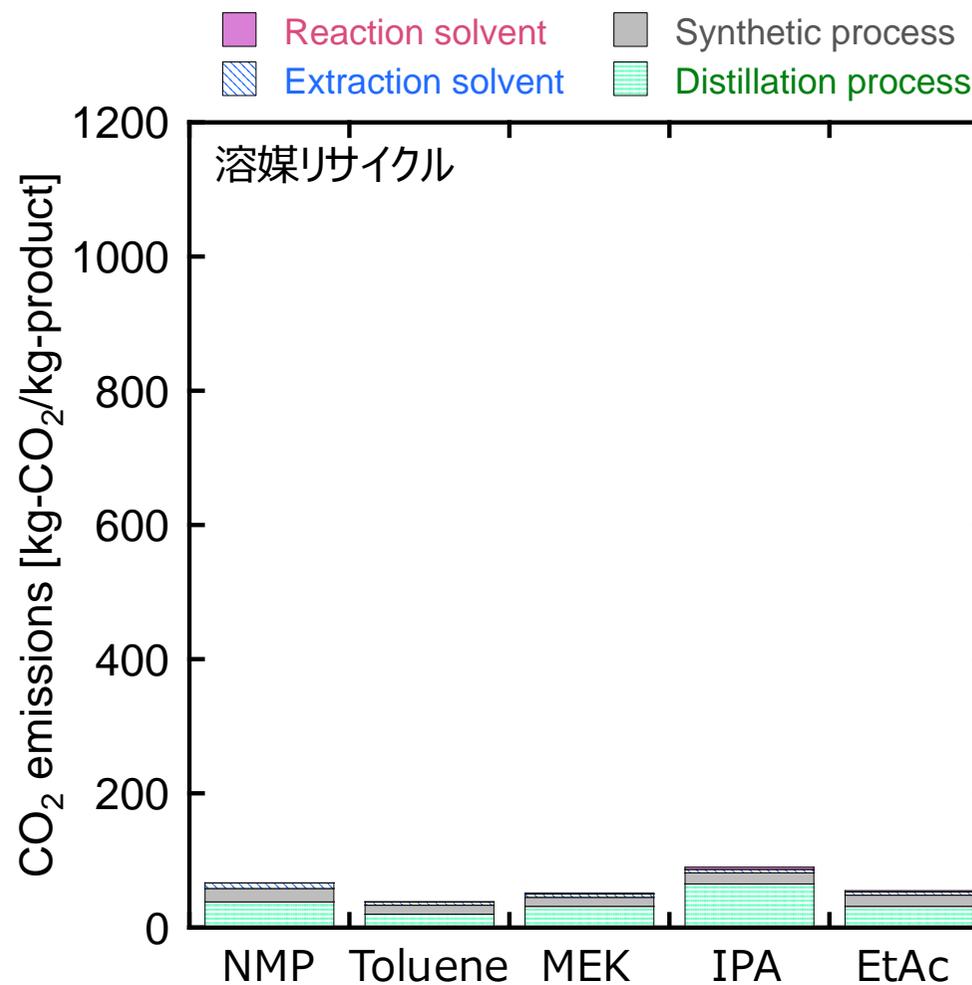
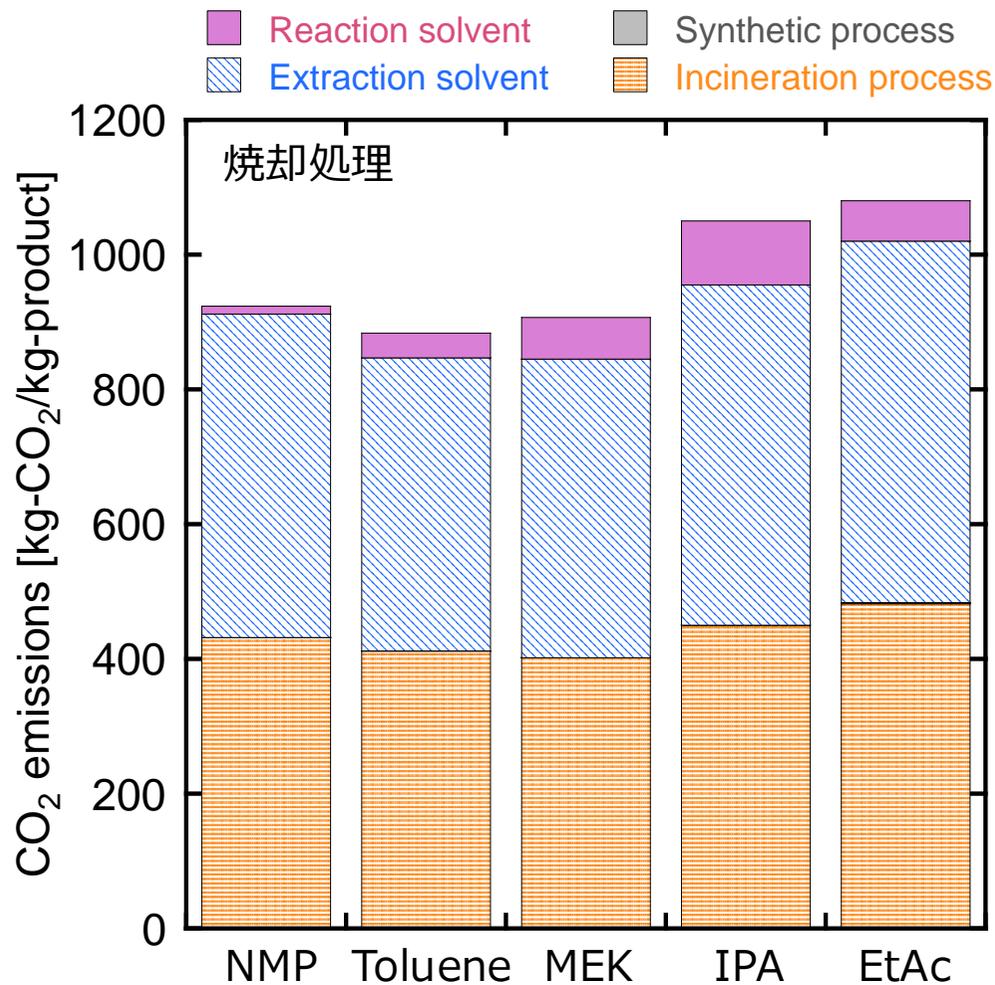
- 合成プロセスは実験手順・実験条件に合わせて設定
- 溶媒リサイクルのプロセスは溶媒の種類に応じて設計
- リサイクル溶媒の純度や回収率も設定

(純度：試薬レベル、回収率：90%以上)

# 本技術のPRポイント

- 使用した溶媒の処理プロセスごとのCO<sub>2</sub>排出量を見える化
- プロセス全体のなかでCO<sub>2</sub>排出量が多い工程を特定
- プロセス全体からのCO<sub>2</sub>排出量が少ない溶媒を特定
- CO<sub>2</sub>排出量と生産コストの両面から好ましい溶媒を特定

# プロセス全体のCO<sub>2</sub>排出量：反応1

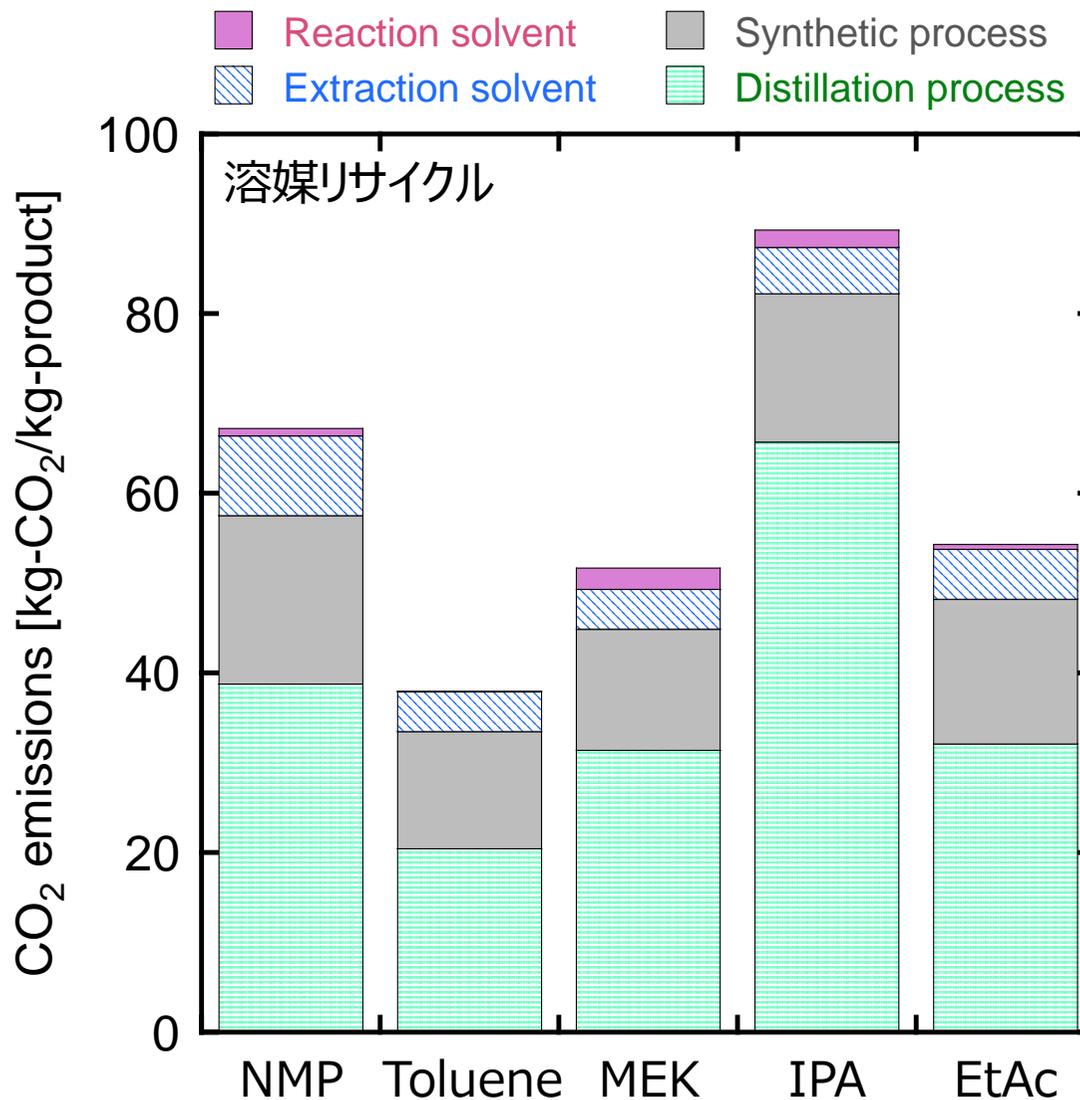


- 使用した溶媒の処理プロセスごとのCO<sub>2</sub>排出量を見る化
- プロセス全体のなかでCO<sub>2</sub>排出量が多い工程を特定

# 反応性能とCO<sub>2</sub>排出量：反応1

反応溶媒	反応収率 [%]
NMP	85
Toluene	94
MEK	92
IPA	81
EtAc	76

反応収率が同程度でも、  
CO<sub>2</sub>排出量は大きく異なる

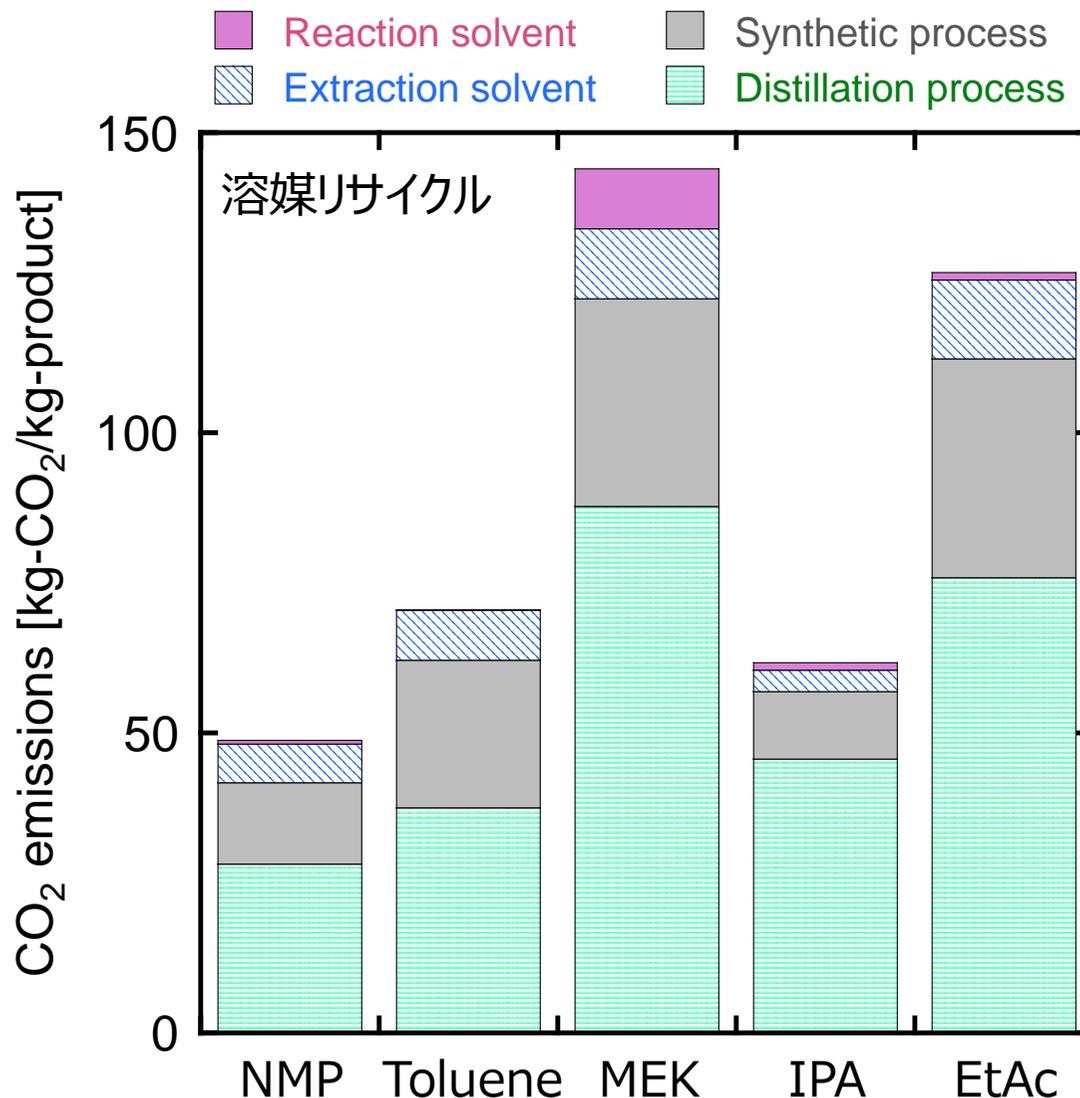


プロセス全体からのCO<sub>2</sub>排出量が少ない溶媒を特定

# 反応性能とCO<sub>2</sub>排出量：反応2

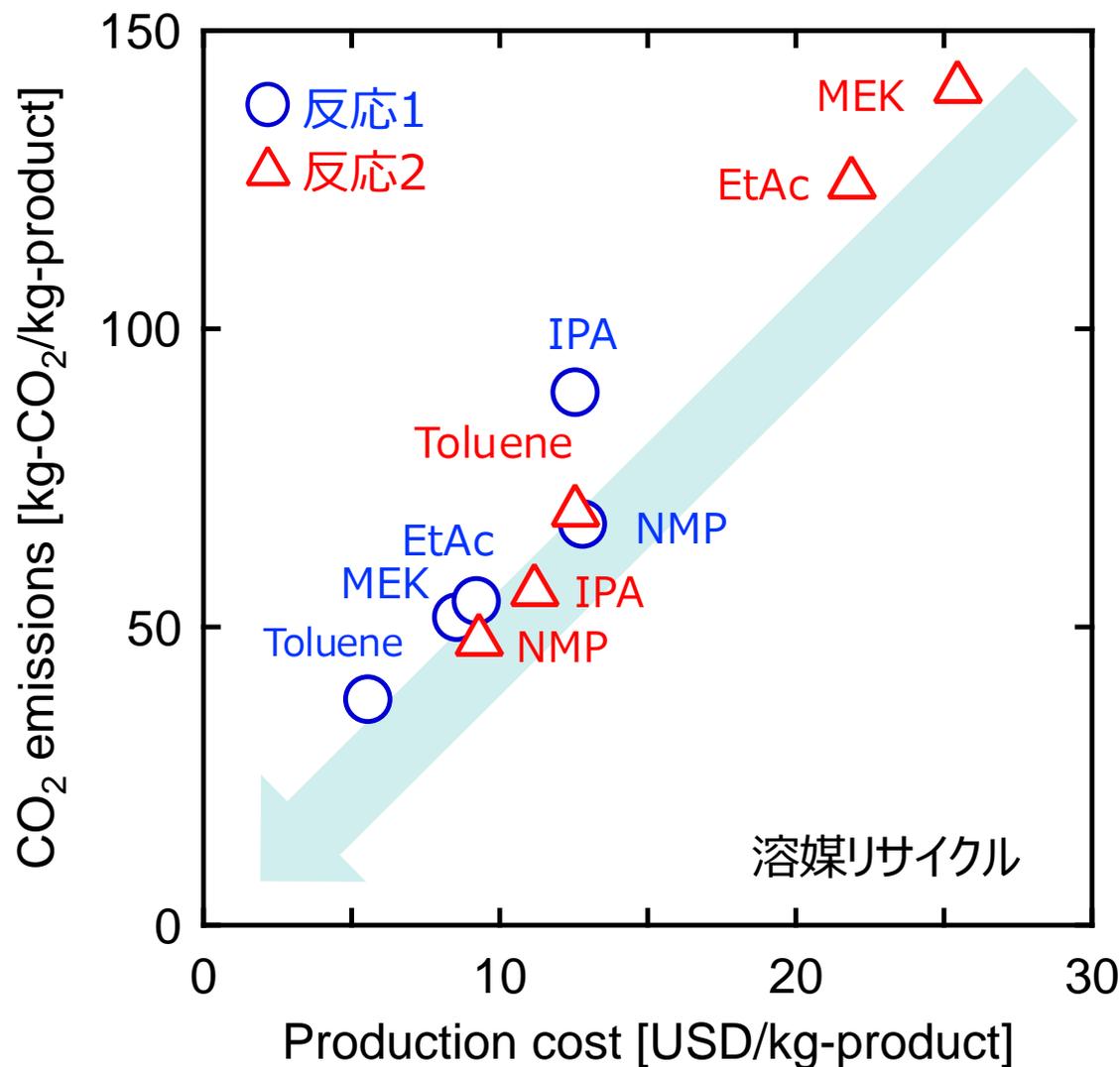
反応溶媒	反応収率 [%]
NMP	100
Toluene	42
MEK	30
IPA	100
EtAc	28

反応収率が低い場合でも、  
反応収率ほどCO<sub>2</sub>排出量は  
増加しない溶媒も存在



プロセス全体からのCO<sub>2</sub>排出量が少ない溶媒を特定

# CO<sub>2</sub>排出量と生産コストの評価結果



反応溶媒の選択により最大で

CO<sub>2</sub>排出量 : **59%**削減

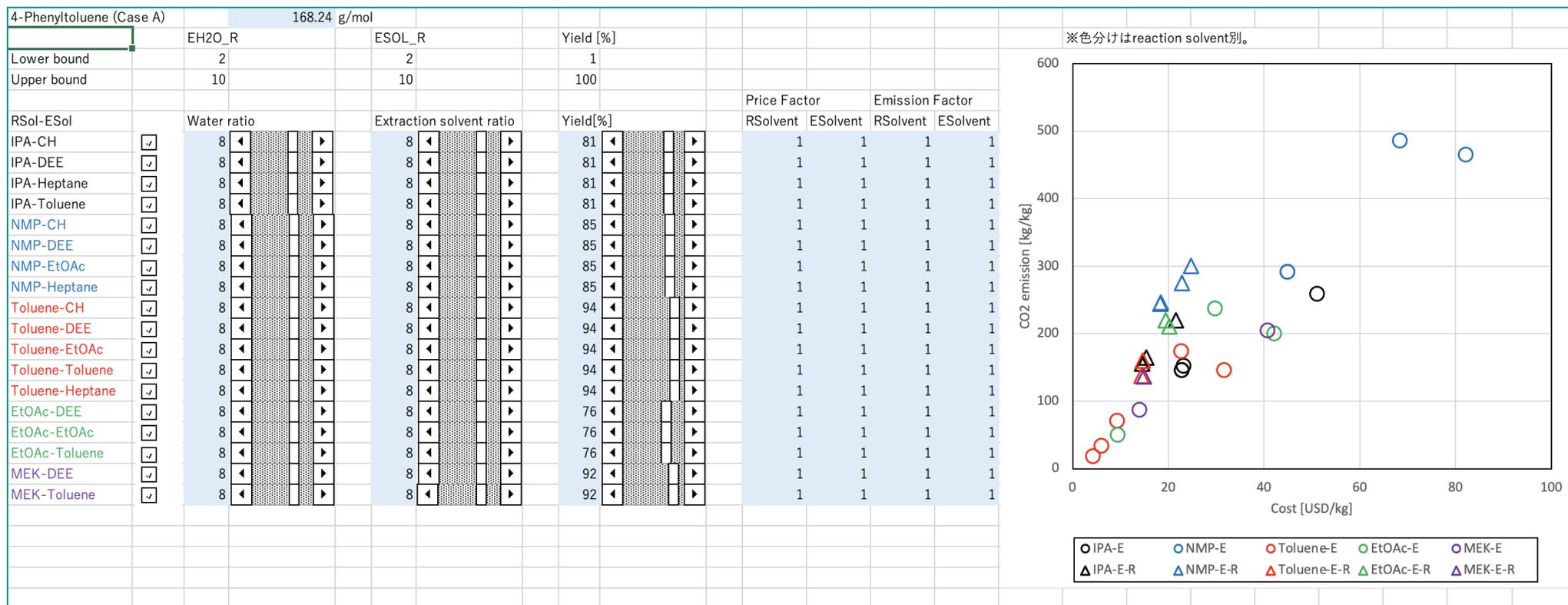
生産コスト : **63%**削減

(今回のモデル反応の評価範囲内)

**CO<sub>2</sub>排出量と生産コストの両面から好ましい溶媒を特定**

# 溶媒選択ツールの開発

溶媒候補、溶媒使用量、反応収率を入れるだけで、  
プロセス全体のCO<sub>2</sub>排出量と生産コストを推算



## 反応開発における溶媒候補のスクリーニングにご活用ください

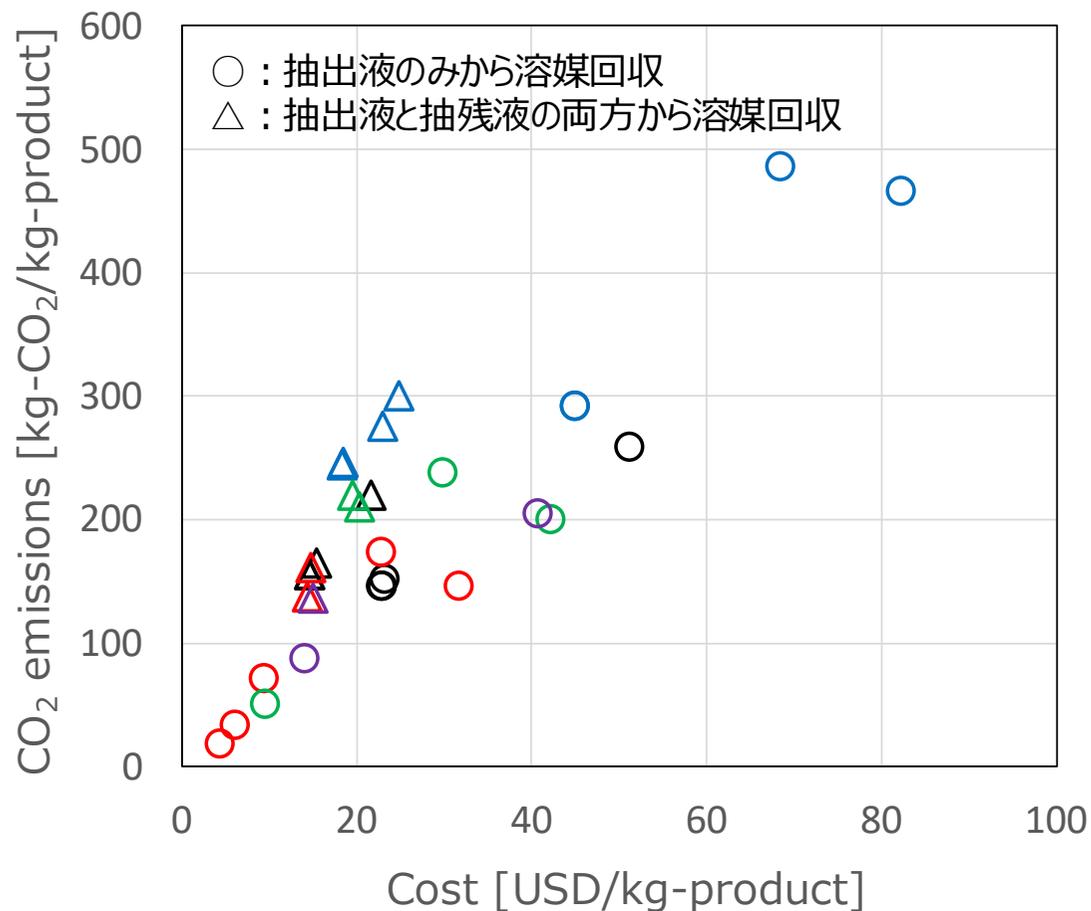
### 想定する連携先

- 有機合成の研究者
- プロセス化学の研究者
- 生産技術のエンジニア

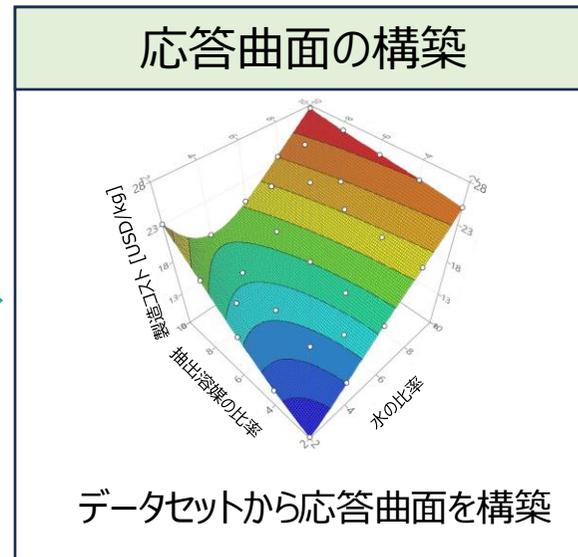
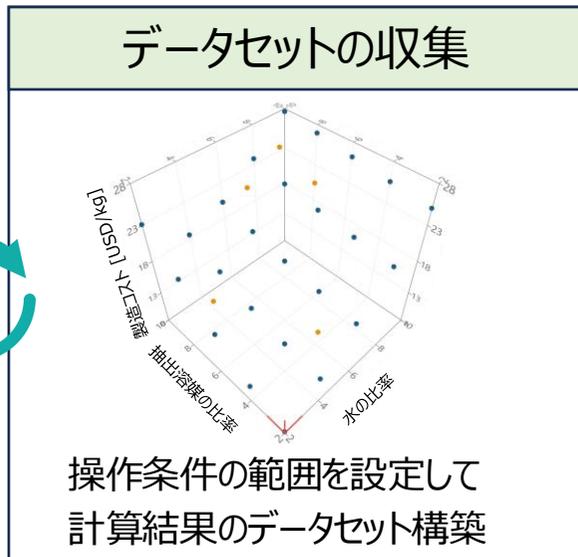
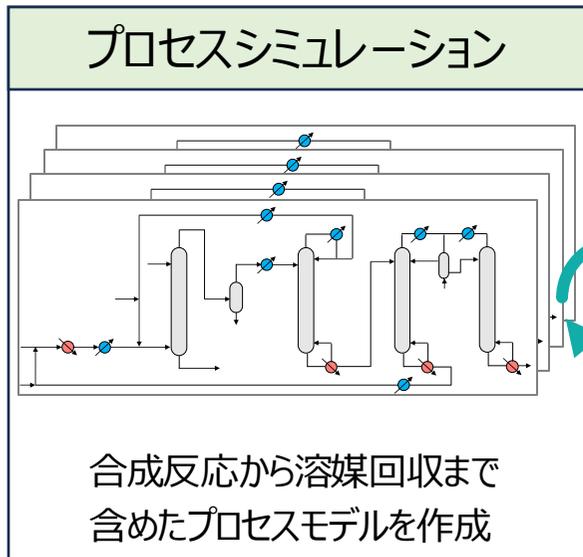
### 入力条件

- 反応収率
  - 反応溶媒の種類と使用量
  - 抽出溶媒の種類と使用量
  - 水の使用量
  - 溶媒回収の対象
    - 抽出液のみから回収
    - 抽出液と抽残液の両方から回収
- 
- 新液の溶媒価格
  - 新液のCO<sub>2</sub>排出係数
  - ユーティリティの価格
  - ユーティリティのCO<sub>2</sub>排出係数

### 出力結果



# 溶媒選択ツール開発のアプローチ



応答曲面を計算エンジンとして格納

## 溶媒選択ツール

4-Phenyltoluene (Case A)		168.24 g/mol		Yield [%]		Price Factor		Emission Factor	
Lower bound	Upper bound	EH2O_R	ESOL_R	RSolvent	ESolvent	RSolvent	ESolvent	RSolvent	ESolvent
2	10	2	10	1	1	1	1	1	1
		Water ratio		Extraction solvent ratio		Yield[%]			
RSol-ESol									
IPA-CH	<input checked="" type="checkbox"/>	8	8	81	1	1	1	1	1
IPA-DEE	<input checked="" type="checkbox"/>	8	8	81	1	1	1	1	1
IPA-Heptane	<input checked="" type="checkbox"/>	8	8	81	1	1	1	1	1
IPA-Toluene	<input checked="" type="checkbox"/>	8	8	81	1	1	1	1	1
NMP-CH	<input checked="" type="checkbox"/>	8	8	85	1	1	1	1	1
NMP-DEE	<input checked="" type="checkbox"/>	8	8	85	1	1	1	1	1
NMP-EtOAc	<input checked="" type="checkbox"/>	8	8	85	1	1	1	1	1
NMP-Heptane	<input checked="" type="checkbox"/>	8	8	85	1	1	1	1	1
Toluene-CH	<input checked="" type="checkbox"/>	8	8	94	1	1	1	1	1
Toluene-DEE	<input checked="" type="checkbox"/>	8	8	94	1	1	1	1	1
Toluene-EtOAc	<input checked="" type="checkbox"/>	8	8	94	1	1	1	1	1
Toluene-Toluene	<input checked="" type="checkbox"/>	8	8	94	1	1	1	1	1
Toluene-Heptane	<input checked="" type="checkbox"/>	8	8	94	1	1	1	1	1
EtOAc-DEE	<input checked="" type="checkbox"/>	8	8	76	1	1	1	1	1
EtOAc-EtOAc	<input checked="" type="checkbox"/>	8	8	76	1	1	1	1	1
EtOAc-Toluene	<input checked="" type="checkbox"/>	8	8	76	1	1	1	1	1
MEK-DEE	<input checked="" type="checkbox"/>	8	8	92	1	1	1	1	1
MEK-Toluene	<input checked="" type="checkbox"/>	8	8	92	1	1	1	1	1

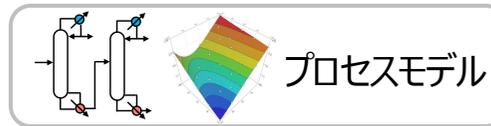
※色分けはreaction solvent別。

プロセスシミュレータがなくても簡易的な評価可能

プロセス設計に基づく溶媒選択を簡易的に行えます

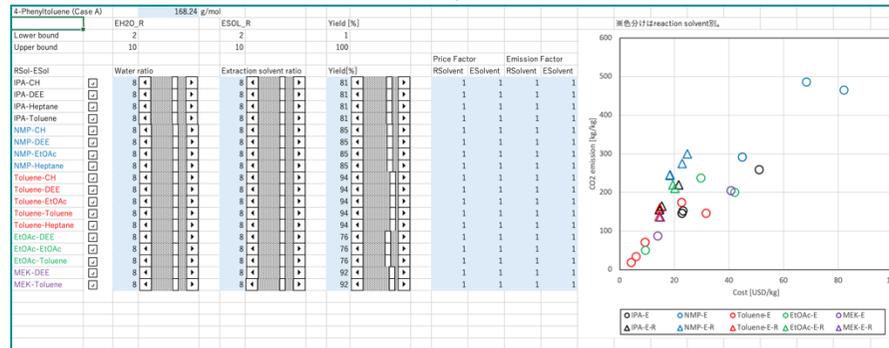
# 溶媒選択の用途

- 反応開発における溶媒候補のスクリーニング
- 反応溶媒と抽出溶媒の組み合わせの評価
- 化石由来からバイオマス由来の溶媒へ変更した際の影響評価
- 新規な溶媒を開発する際の目標設定

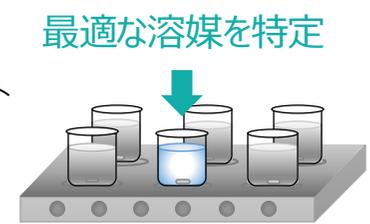


## 溶媒選択ツール

溶媒候補  
実験条件  
反応収率



アウトプット



## 反応開発における溶媒選択シミュレーションにより 化学プロセスのCO<sub>2</sub>排出量削減に貢献

- 使用した溶媒の処理プロセスごとのCO<sub>2</sub>排出量を見える化
- プロセス全体のなかでCO<sub>2</sub>排出量が多い工程を特定
- プロセス全体からのCO<sub>2</sub>排出量が少ない溶媒を特定
- CO<sub>2</sub>排出量と生産コストの両面から好ましい溶媒を特定
- 溶媒選択ツールにより簡易的に溶媒のスクリーニングも可能

# 本技術に関する知的財産権

発明の名称 : 反応開発支援方法、支援システム及び支援プログラム  
出願番号 : 特願2023-172357  
出願人 : 産業技術総合研究所  
発明者 : 山木 雄大、片岡 祥、Nguyen Thi Hong Thuy、  
原 伸生、谷口 智

---

発明の名称 : 反応開発支援方法、支援システム及び支援方法  
出願番号 : 特願2024-074061  
出願人 : 産業技術総合研究所  
発明者 : 山木 雄大、片岡 祥、Nguyen Thi Hong Thuy、  
原 伸生、谷口 智

# お問い合わせ先

AIST Solutions

知的財産本部 知財戦略渉外部

e-mail: [aisol-syougai-all-ml@aist-solutions.co.jp](mailto:aisol-syougai-all-ml@aist-solutions.co.jp)