



## LCAと経済性評価を統合した 溶媒選択シミュレーション

Solvent selection based on a process simulation by combining LCA and cost evaluation

溶媒リサイクル/プロセスシミュレーション  
Solvent recycle / Process simulation

(国研)産業技術総合研究所

### 研究開発の概要

#### ● 背景

溶媒は化学品生産において大量に用いられていますが、その大半は焼却されCO<sub>2</sub>として排出されています。CO<sub>2</sub>排出削減や資源の有効利用の観点から、溶媒リサイクルが注目されています。その際に、反応収率が高く合成反応に最適とされた溶媒がリサイクルしづらい場合、生産プロセス全体のCO<sub>2</sub>排出と生産コストが最小にならないことがあります。

#### ● 研究開発内容

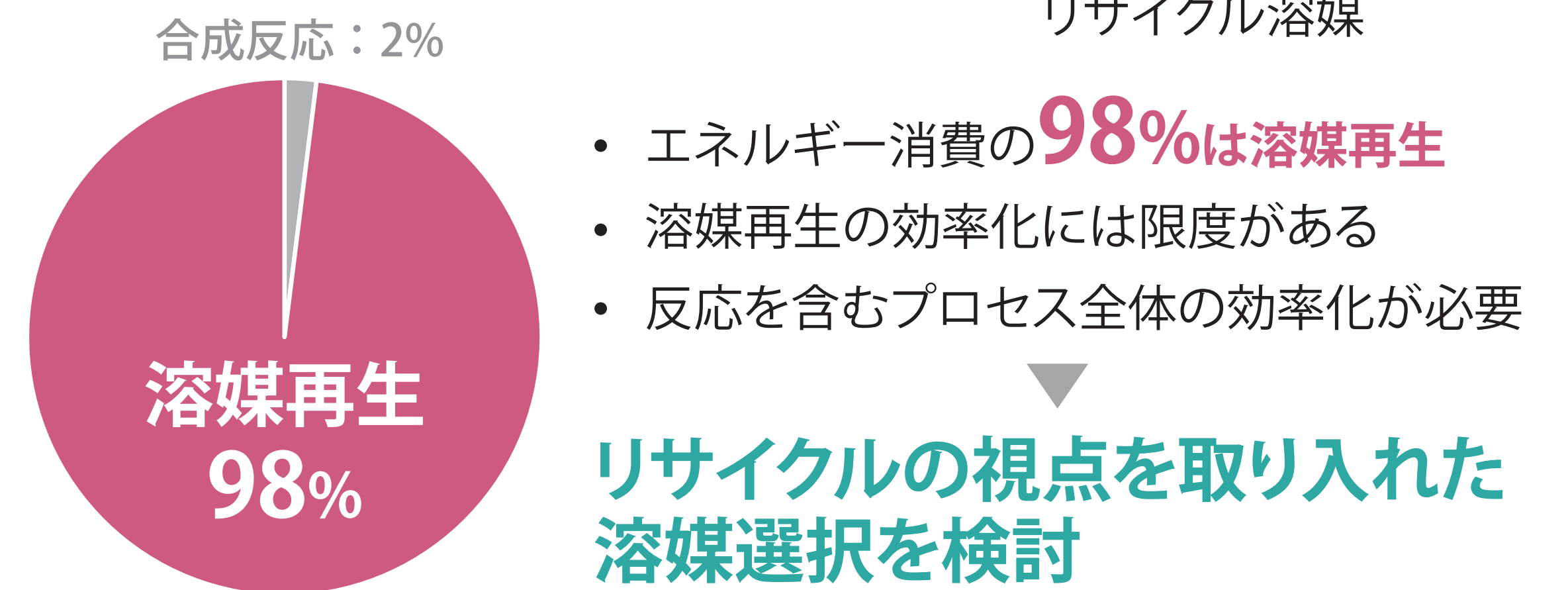
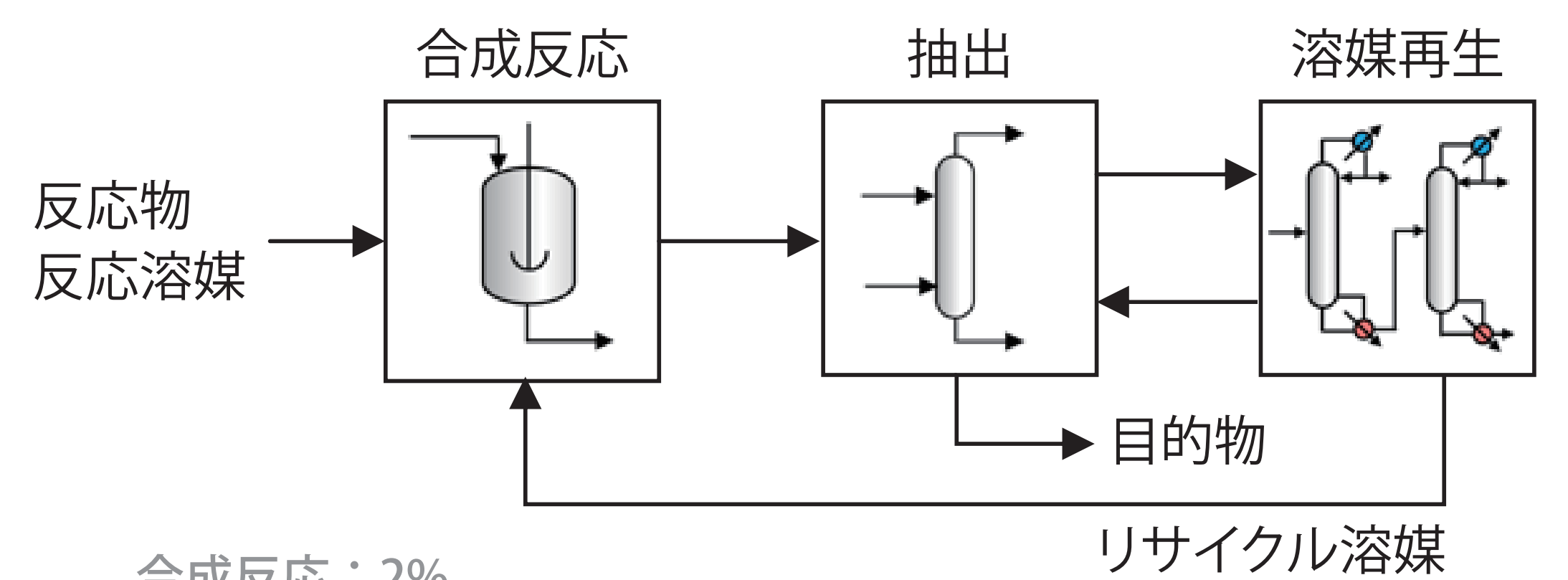
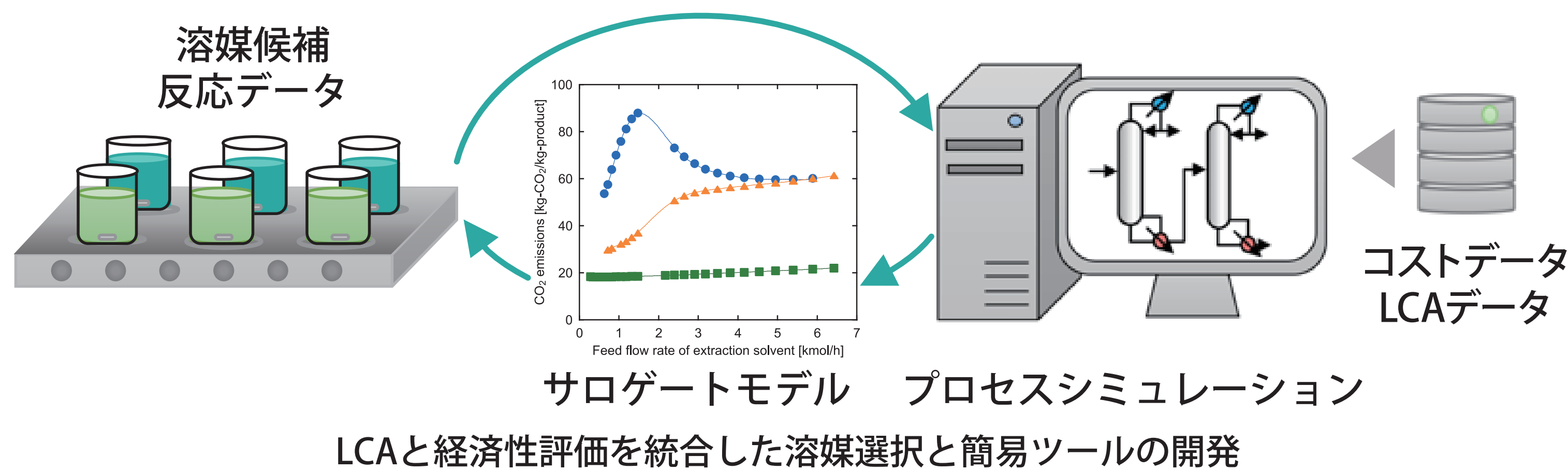
化学プロセス研究部門では、リサイクルを考慮した溶媒選択の方法論を開発しています。この技術は、合成反応の溶媒候補について、反応だけでなく抽出やリサイクルのプロセス設計を行い、プロセスシミュレーションを通して、CO<sub>2</sub>排出量と生産コストが最小となる溶媒を特定します。

#### ● 成果

フロー合成を用いた鈴木-宮浦カップリングを例に、溶媒の種類に対するプロセス全体のCO<sub>2</sub>排出量と生産コストを評価しました。溶媒選択によりCO<sub>2</sub>排出と生産コストの両方を削減できることが分かりました。

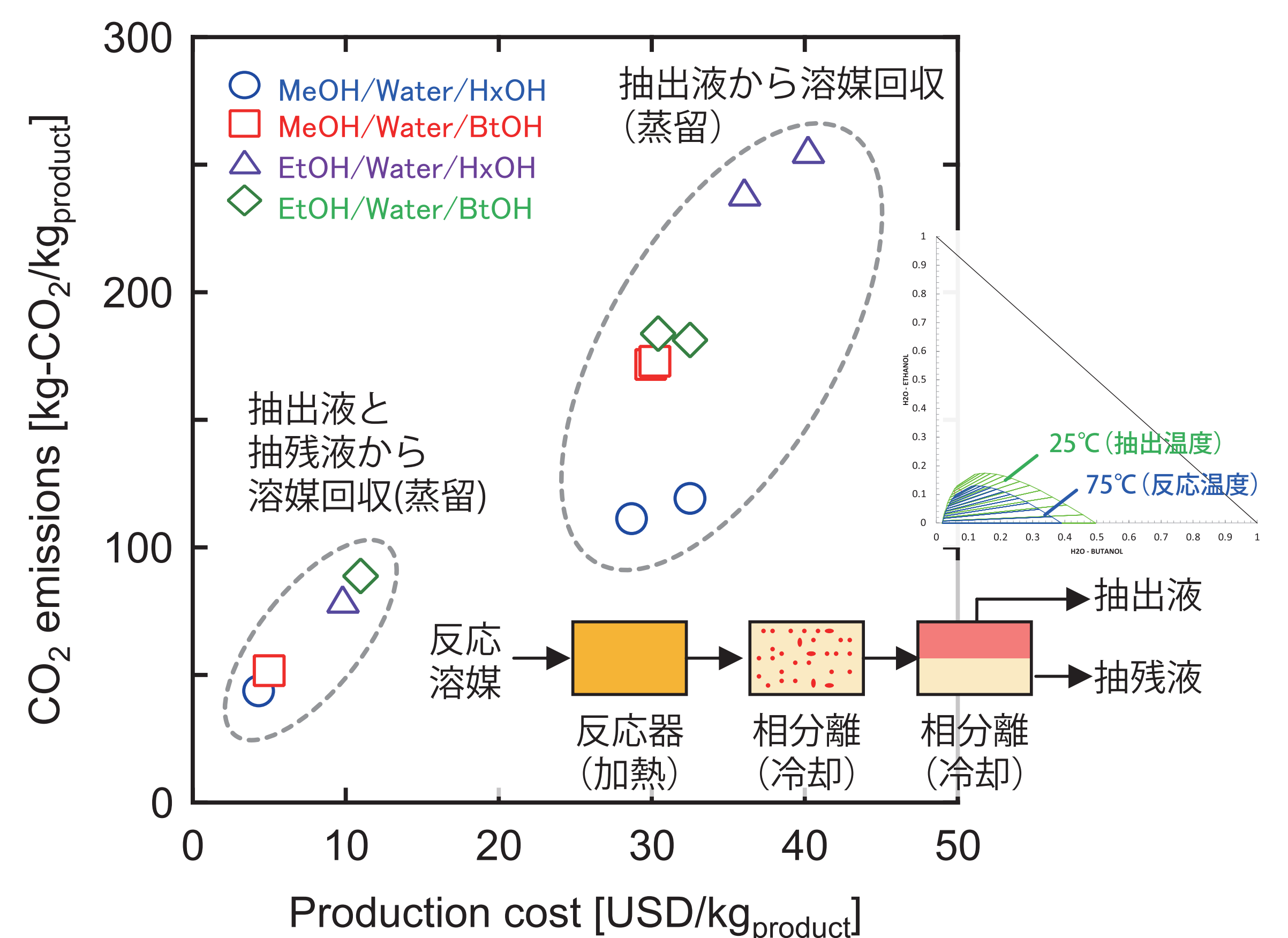
#### ● 今後の展望

この方法をより簡単に活用できるように、合成条件を入力することで、CO<sub>2</sub>排出量と生産コストを推定できるツールの開発も進めています。プロセス評価と実験の連携によりグリーンな反応の実現を目指します。



リサイクルの視点を取り入れた  
溶媒選択を検討

機能性化学品生産プロセスフローとエネルギー消費量の評価例



溶媒の種類を変えた場合のCO<sub>2</sub>排出量と生産コスト

### 来場者へ向けて

- ・プロセス全体のCO<sub>2</sub>排出量や生産コストの観点からグリーンな溶媒選択を支援します。
- ・様々な溶媒の組み合わせや特殊なプロセスにも対応可能です。
- ・CO<sub>2</sub>排出量や生産コストに優れた溶媒を探索するための簡易的な評価ツールも開発しています。

### 関連サイト紹介

●産総研 化学プロセス研究部門 化学システムグループ  
[https://unit.aist.go.jp/cpt/ja/groups\\_outline/005\\_cpt-ecs\\_3.html](https://unit.aist.go.jp/cpt/ja/groups_outline/005_cpt-ecs_3.html)



●産総研 研究成果一覧(プレスリリース)  
[https://www.aist.go.jp/aist\\_j/press\\_release/pr2024/pr20240219/pr20240219.html](https://www.aist.go.jp/aist_j/press_release/pr2024/pr20240219/pr20240219.html)



NEDOプロジェクト名

機能性化学品の連続精密生産プロセス技術の開発

お問い合わせ先

国立研究開発法人 産業技術総合研究所 化学プロセス研究部門 山木 雄大  
E-mail:takehiro-yamaki@aist.go.jp Tel:050-3521-3773