



Klimatledande Processindustri, Insatsområde Förnybart: Projekt 4.2.3 Kemikalier från Sockerplattformen via Direkta Kemiska Processer

En öppen sammanfattningsrapport

Författare: RISE AB/Martin Hedberg; Högskolan i Borås/Faranak Bazooyar; Mikael Skrifvars; Chalmers Industriteknik/Johan Bengtsson och IVL Svenska Miljöinstitutet/Josefin Gunnarsson, Maria Hernández Leal och Tomas Rydberg

Med finansiering från Vinnova, Västra Götalandsregionen och Västsvenska Kemi- och Materialklustret.

INNEHÅLLSFÖRTECKNING

1. KORT SAMMANFATTNING AV RAPPORTEN.....	3
2. INTRODUKTION	4
2.1. DELTAGARE I PROJEKTET.....	6
2.2. ARBETSMETODIK	7
2.2.1. Förnyad/kompletterande litteraturstudie inom AP 1 Definition av metodik för rening och isolering av målmolekylerna.....	8
2.2.2. Laborativt arbete inom AP 2 Utveckling och demonstration av vald metodik för rening och isolering av målmolekylerna i lab skala	8
2.2.3. Utredningsarbete inom AP 3 Systemaspekter	9
2.2.4. Utredningsarbete inom AP 4 Framtidsrekommendationer, projekt-koordination/-administration	9
3. RESULTAT OCH DISKUSSION	10
3.1. AP 1. DEFINITION AV METODIK FÖR RENING OCH ISOLERING AV MÅLMOLEKYLERNAS.....	10
3.1.1. Målmolekyl 1	10
3.1.2. Målmolekyl 2	11
3.2. AP 2. UTVECKLING OCH DEMONSTRATION AV VALD METODIK FÖR RENING OCH ISOLERING AV MÅLMOLEKYLERNAS I LABSKALA.....	12
3.2.1. Målmolekyl 1 - inledning.....	12
3.2.2. Målmolekyl 1 – den i projektet framtagna processen	13
3.2.3. Målmolekyl 2 – den valda processen	15
4. AP 3. SYSTEMASPEKTER	16
4.1. INITIAL KARAKTERISERING AV MARKNADSFÖRUTSÄTTNINGAR	16
4.2. INITIAL KARAKTERISERING AV KLIMATPÅVERKAN	17
4.2.1. Resultat av LCA-studierna: processen till målmolekyl 1.....	18
4.2.2. Resultat av LCA-studierna: processen till målmolekyl 2.....	20
4.3. KORT OM PRODUKTIFIERING AV SIDOSTRÖMMAR	21
5. AP 4. FRAMTIDSREKOMMENDATIONER.....	22
5.1. VIDARE TEKNISKA UTVECKLINGSBEHOV.....	22
5.2. VIDARE UTREDNING AV KLIMATPÅVERKAN	23
5.3. BEHOV AV VIDARE ARBETE KRING MARKNADSASPEKTER	24
6. ACKNOWLEDGEMENT	24

1. Kort sammanfattning av rapporten

Detta projekt har tagit vidare stafettpinnen från den färdplan som togs fram i projekt 4.2.1 *Förstudie möjliga målmolekyler från sockerplattformen*¹ som bedrevs inom initiativet Klimatledande Processindsuttri, och har påbörjat nödvändiga ansträngningar för att försöka förbättra de kemiska processer som skulle kunna användas för produktion av utvalda fallstudiemolekyler från sockerplattformen. Detta med särskild relevans för Västsvenska Kemi- och Materialklustret (VKMK) för produktion av specialkemikalier, d v s kemikalier som tillverkas och säljs i årliga volymer om maximalt runt hundra tusen ton. På grund av sekretess går denna rapport inte in på vilka dessa molekyler, här kallade målmolekyl 1 och 2, är i detalj utan kommenterar allmänt kring hur projektet genomförts, vilka processer som laborativt utvecklats och testats och/eller bedömts utifrån data i litteraturen inklusive patentlitteraturen, vilka resultat som erhållits och även vilka slutsatser som dragits med rekommendationer framåt. Målmolekyl 1 tillhör kategorin industriellt intressanta plattformskemikalier d v s intermediet för produktion av en mängd andra relevanta kemiska produkter, medan målmolekyl 2 är både en produkt i sig samt ett intermediet för produktion av en rad andra kemikalier och produkter. Konfidentiell dokumentation som endast kan delges till parterna som skrivit på det projektavtal som finns inom projektet, avrapporterar tillsammans med denna rapport projektet i sin helhet. Projektet har letts av RISE AB, det laborativa forsknings- och utvecklingsarbetet har utförts av Högskolan i Borås och samtliga parter (RISE AB, Chalmers Industriteknik, Chalmers Tekniska Högskola, Högskolan i Borås, IVL Svenska Miljöinstitutet, Perstorp AB och Södra) har bidragit med olika typer av relevant expertis, litteratur- och databasstudier, beräkningar, bedömningar samt intervjuer med näringslivsföreträdare.

Övergripande slutsatser från projektet är följande:

- Det laborativa processutvecklingsarbetet för att utforma en process för framställning av målmolekyl 1 lyckades ta fram processbetingelser (Figur 3 nedan) som ger en så pass ren reaktion att upparbetning och rening av målmolekyl 1 blir relativt enkel utan väldigt avancerade enhetsoperationer. Den enda biprodukt som bildas i signifikant mängd i processen är ett fast, på molekylär nivå relativt odefinierat material som domineras av kolatomer och denna biprodukt kan enkelt separeras från lösningen av målmolekyl 1 genom filtrering eller centrifugering.
- Utvecklingsarbetet och de analyser av klimatpåverkan som gjorts baserat på en kombination av både experimentella data, data från litteraturen och från LCA-databaser, har identifierat tydliga behov av vidareutveckling av processen för tillverkning av målmolekyl 1. Mängden lösningsmedel som används för upparbetningen genom extraktion av målmolekyl 1 har visat sig vara den enskilt största faktorn att minska för att nå en godtagbar klimatpåverkan för processen. Mer detaljerade beskrivningar av vidare utvecklingsbehov finner ni i avsnitten 4-5 i rapporten.
- Processen för konvertering av målmolekyl 1 till målmolekyl 2 fick av budgetskäl inte plats att studeras laborativt inom projektet utan bedömdes i stället utifrån publicerade patent. Den process som identifierades genom att lägga ihop information om själva reaktionen från ett patent och upparbetning och rening från ett annat (se Figur 4 för en schematisk illustration av processen), visar på små ytterligare utvecklingsbehov för detta steg annat än

¹ Detta beskrivs i projektplanen för detta projekt d v s 4.2.3 *Kemikalier från sockerplattformen via direkta kemiska processer*. Färdplanen beskrivs i fotnot 2 nedan.

detaljoptimering för att undertrycka bildandet av en fast förorening som kan filtreras bort men som är molekylärt mycket komplext sammansatt och därmed förmodligen representerar ett relativt lågt värde.

- De jämfört med förstudien (4.2.1 Förstudie möjliga målmolekyler från sockerplattformen) förnyade utredningarna av marknadsförutsättningar som gjordes i projektet visar på att det faktiskt hänt en del sedan förstudien avslutades 2020, och det framför allt för målmolekyl 2 för vilken en signifikant utökning av kommersiell produktionskapacitet har skett. Dock från en nivå som idag ligger långt under de behov som krävs för fullskalig specialkemieproduktion. Arbetet pekar på behovet av att både ta del av resultaten från i vissa EU-projekt utförda teknoekonomiska analyser, men även att utföra egna sådana analyser för att mer i detalj karakterisera vidare utvecklingsbehov av tillverkningsprocesserna för framför allt målmolekyl 1 men även för målmolekyl 2. Intervjuer med företrädare för företag (också andra än Södra och Perstorp som deltagit i projektet har intervjuats) visade att intresse och tidiga planer finns för att driva fram målmolekyl 2 som en råvara för bulkkemikalieproduktion, d v s på produktionsnivån miljontals ton per år. Det senare arbetet har dock inte kommit speciellt långt, sannolikt åtminstone delvis beroende på att både investeringar och kg-pris för bulkkemikalieproduktion går åt fel håll jämfört med specialkemikalieproduktion d v s investeringskostnaderna är stora eller mycket stora och kg-priserna är låga eller mycket låga.

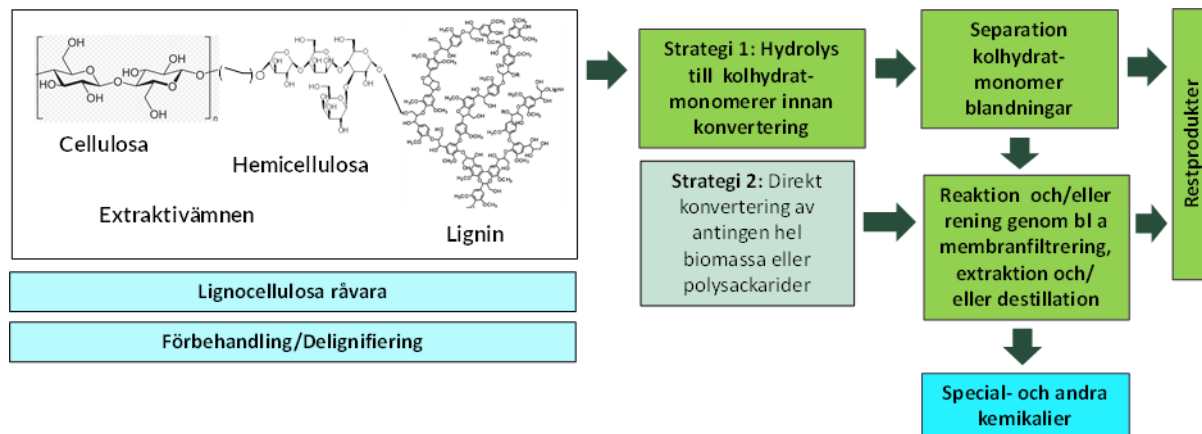
Avsnitten 3-5 nedan redovisar arbetet och resultat i de arbetspaket (APs) som ingått i projektet¹ d v s AP 1. Definition av metodik för rening och isolering av målmolekylerna (3.1 nedan), AP 2. Utveckling och demonstration av vald metodik för rening och isolering av målmolekylerna i labbskala (3.2 nedan), AP 3. Systemaspekter (4 nedan) och AP 4. Framtidsrekommendationer, projektkoordination/-administration (avsnitt 5 gällande Framtidsrekommendationerna).

2. Introduktion

Detta projekt innebär ett inledande experimentellt arbete som utgår från resultaten och färdplanen som togs fram i projektet "4.2.1 Förstudie möjliga målmolekyler från sockerplattformen" inom Klimatledande Processindustri (KPI).² Projektet är/var relativt begränsat både tids- och budgetmässigt och utgör därför ett första steg för att förbättra direkta konverteringsprocesser från kolhydrater till två av de industriellt relevanta målmolekyler som identifierades och valdes ut under förstudien ovan för vidare utvecklingsarbete i detta projekt. Målmolekylerna för arbetet är i det ena fallet (målmolekyl 1) en sedan tidigare känd förnyelsebar plattformskemikalie med stor potential för produktion av andra industriellt relevanta kemikalier inom en rad branscher. Det andra fallet (målmolekyl 2) är både en plattformskemikalie för tillverkning av andra produkter såväl som en produkt i sig inom kategorin specialkemikalier. Den är också känd sedan tidigare och kan tillverkas från målmolekyl 1 men även från andra startmaterial. Båda målmolekylerna valdes ut tillsammans med Perstorp AB och Södra som deltagit aktivt i projektet och enligt projektavtalet kan identiteter/strukturer för målmolekylerna inte redovisas i denna rapport p g a sekretess. Processutvecklingsarbetet som bedrivits med tillhörande litteratur- och systemstudier bedöms dock p g a bland annat de enhetsoperationer som ingår (se nedan) ha generellt värde för konceptet

² Sammanfattningsrapporten "Klimatledande Processindustri, Insatsområde Förnybart: Projekt 4.2.1 Förstudie Möjliga Målmolekyler från Sockerplattformen - En öppen sammanfattningsrapport med föreslagen färdplan" 2020 är tillgänglig via www.klimatledandeprocessindustri.se.

direktkonvertering av kolhydrater från skogs- och jordbruksrester till en rad olika industriellt relevanta specialkemikalier.³



Figur 1. Schematisk illustration av olika strategier för direkt konvertering av kolhydraterna i lignocellulosa till special- eller andra kemikalier. Strategi 1 valdes för experimentellt arbete i detta projekt.

I Figur 1 visas schematiskt de två övergripande strategier som undersöktes i förstudien² för direkt kemisk konvertering av antingen försockrad (hydrolyserad) lignocellulosa (Strategi 1, Figur 1) eller direkt konvertering av hel lignocellulosa respektive icke hydrolyserade polysackarider som cellulosa eller hemicellulosa (Strategi 2, Figur 1), till specialkemikalier som under vissa förutsättningar skulle kunna produceras av aktörer verksamma inom Västsvenska Kemi- och Materialklustret. Strategierna illustreras med lite högre upplösning med mer detaljer i Figur 2 nedan. I detta projekt har vi fokuserat helt på Strategi 1 och det främst av följande orsaker:

- Restprodukter bildas i denna strategi huvudsakligen i förbehandlings- och försockringsstegen och är väl kända från ex vis utvecklingsarbete från andra generationens bioetanolproduktion samt gemensamma för alla molekyler/produkter som kan produceras från försockrad lignocellulosa ex vis med hjälp av SEKAB:s CelluAPP™-process.⁴ Vid direkt omsättning av hel lignocellulosa till en given mål molekyl enligt Strategi 2 erhålls i stället för den specifika processen unika sidosrömmar som eventuellt kan vara (ännu) svårare att konvertera till säljbara produkter, och som dessutom inte har de skalfördelar som ett för framställning av en rad kemikalier och produkter gemensamt försockringssteg enligt Strategi 1 har.
 - Uppkomsten av väldigt specifika sidosrömmar släcker sannolikt ut möjliga fördelar med Strategi 2 i form av potentiellt operationellt enklare processer med totalt sett färre enhetsoperationer.
- Att kostnadseffektivt framställa produkter från sidosrömmar från Strategi 2 och/eller för hydrolysligninet som uppstår i försockringen av lignocellulosa enligt Strategi 1, är en sannolikt generell förutsättning för en ekonomiskt hållbar tillämpning av sockerplattformen över huvud taget. Vi har i detta projekt förutsatt att produktion av relevanta sockermolekyler

³ För en diskussion kring definitionen av specialkemikalier, se fotnot 1 och 2.

⁴ Ett stort antal metoder för försockring av olika typer av lignocellulosa har publicerats där en intressant teknologi är SEKAB:s CelluAPP®-teknologi (<https://www.sekab.com/sv/produkter-tjanster/produkt/celluapp/>). För ett exempel på översiktsartikel som diskuterar syramedierad försockring av lignocellulosa se i T. M. Størker et al. *Energy Procedia*, **2012**, 20, 50.

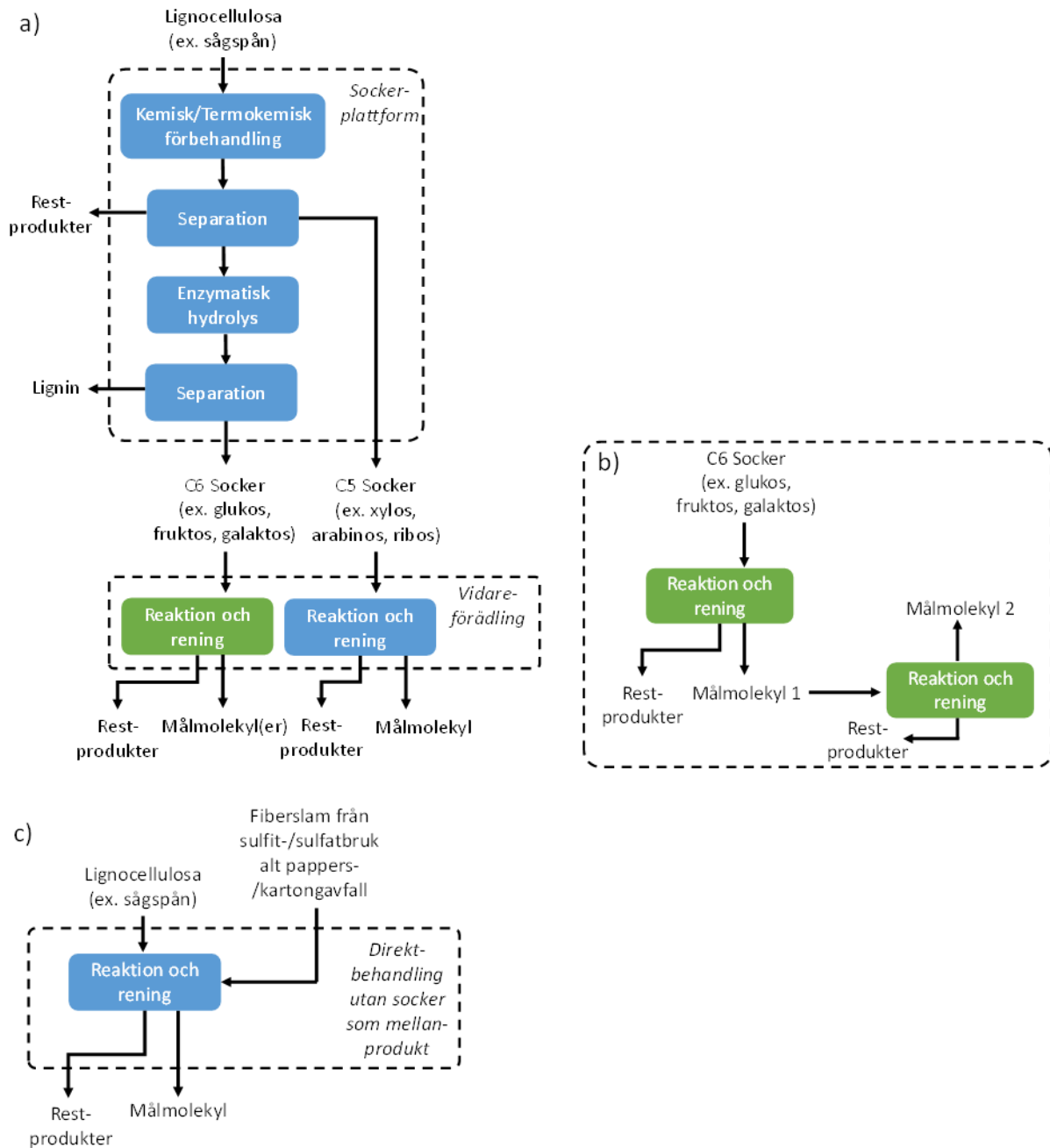
i relevant industriell skala med metoder som inte konkurrerar med livsmedelsproduktion på sikt kan göras ekonomiskt lönsam i jämförelse med miljömässigt ohållbar fossil produktion, tack vare en kombination av uppdaterad/införd lagstiftning och förbättrade metoder att valorisera sidoströmmar som hydrolyslignin.

- Arbete med att hitta effektiva konverteringsstrategier för sidoströmmar från försockringssteget i Strategi 1 pågår även inom KPIs insatsområde Förnybart i form av studier på hydrolyslignin som en möjlig kolkälla för kemisk industri m fl ändamål.⁵
- C6- och C5-socker, använda antingen som pulver eller som lösningar i ex vis vatten, är mer lättintegrerade som råvaror i (befintlig) kemisk industri. En naturlig värdekedja uppstår där försockring av lignocellulosa sker/kan ske integrerat med ex vis ett pappers- och massabruk eller ett sågverk eller andra industrier och att socker/sockerlösningar sedan transporteras till kemisk industri som i bästa fall utan större investeringar kan omsätta sockren till gröna specialkemikalier för marknaden.
- Rening av den framställda målmolekylen blir i många fall mindre krävande eftersom en rad föroreningar eller källor till föroreningar tas bort redan i försockringssteget.
- De två sista punkterna ovan har lett till att vi i det laborativa arbetet i projektet utgått från ren kolhydrat som startmaterial i stället för från hel eller fraktionerad lignocellulosa (se Figur 3 för processdesignen för framställning av Målmolekyl 1).

2.1. Deltagare i projektet

I förstudien arbetade följande parter: RISE Research Institutes of Sweden AB (RISE, representanter Martin Hedberg från avdelningen Kemiska Processer och Läkemedel), Chalmers Industriteknik (CIT, Johan Bengtsson), Chalmers Tekniska Högskola (Chalmers, Louise Olsson), Högskolan i Borås (HB, Faranak Bazooyar, Mikael Skrifvars, Amir Mahboubi Soufiani och Mohammad Taherzadeh), Perstorp AB (Oleg Pajalic), Södra (Fredrik Solhage och Jim Parkås) och IVL Svenska Miljöinstitutet (IVL, Josefin Gunnarsson, Maria Hernández Leal och Tomas Rydberg). Södras och Perstorps roll har främst varit att komma med förslag och feedback på strategier, mål, slutsatser m m medan övriga utfört specifika utredningsuppdrag för att leverera helheten. Projektet har letts och koordinerats av RISE och projektledare Martin Hedberg. Ett speciellt tack riktas till Faranak Bazooyar, verksam hos HB, som förtjänstfullt utfört det laborativa utvecklingsarbetet i projektet, bidragit till avrapportering och tillhandahållit nyckeldata för AP 3-4.

⁵ För pågående projekt inom KPIs insatsområde Förnybart gällande hydrolyslignin som råvara, se www.klimatledandeprocessindustri.se. I skrivande stund är det senaste projektet på ämnet "4.2.5 Industrial adaptation of lignin value chains".



Figur 2. Mer detaljerad illustration av strategierna i Figur 1 enligt följande: a) och b) Konvertering av lignocellulosa och/eller cellulosaavfall till målmolekyler enligt Strategi 1. Gröna rutor visar de processteg som studerats i detta projekt. I fallet med cellulosa-restströmmar som kartongavfall eller fiberslam som råvara så uppstår inget lignin som sidoström. c) Konvertering av lignocellulosa/cellulosaavfall direkt till målmolekyler enligt Strategi 2.

2.2. Arbetsmetodik

I arbetet med att ta fram en potentiellt förbättrad metodik för framställning av målmolekylerna från kolhydrater syftande till att på sikt etablera produktion av kemikalier tillhörande kategorin specialkemikalier framställda från valda kolhydratströmmar genom direkt kemisk konvertering, har huvudsakligen följande verktyg använts:

2.2.1. Förnyad/kompletterande litteraturstudie inom AP 1 Definition av metodik för rening och isolering av målmolekylerna

Med målet att vidareutveckla och teknoekonomiskt förbättra känd metodik för framställning och rening av målmolekylerna så bedrevs ytterligare litteraturstudier med förstudierapporten² som startpunkt, och processkoncept publicerade i olika patent valdes ut som startpunkt för det laborativa arbetet. Vidare har förnyade litteraturstudier gjorts gällande konvertering av Målmolekyl 1 till Målmolekyl 2, eftersom laborativt arbete på detta steg av budgetskäl inte rymts i projektet, delvis orsakat av komplexiteten hos processen för framställning av målmolekyl 1. Verktygen för litteraturstudierna var desamma som i förstudien "4.2.1 Förstudie möjliga målmolekyler från sockerplattformen", d v s olika sökverktyg i databaser som Scifinder och STN Online, men också i diverse kemiska handböcker såsom Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology och Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry användes. Ansvarig utförare: HB med visst stöd av RISE och Chalmers.

2.2.2. Laborativt arbete inom AP 2 Utveckling och demonstration av vald metodik för rening och isolering av målmolekylerna i labbskala

Det laborativa arbetet har utförts i runt literskala i både reaktorer av metall som klarar höga tryck och har mekanisk omrörning samt i glasreaktorer och annan konventionell glasutrustning för organiskt kemiskt labarbete. För bilder på reaktorer och glasutrustning m m som användes, se nedan.



Bilder på labutrustning: Uppe till vänster: Parr 4520 högtrycksreaktor för reaktioner som kräver upp till 350°C i temperatur och upp till 50 atmosfärs tryck. Uppe till höger: Vanlig trehalskolv med återloppskylare för trycklösa reaktioner. Längst ner: Vätskekromatografiutrustning (HPLC) för analys av reaktionsblandningar och produkter.

Inledningsvis övervägdes användning av membranfiltreringsutrustning som finns hos HB men denna visade sig under arbetets gång vara onödig och för uppberedning av reaktionerna användes i stället utrustning för extraktion och destillation där extraktionerna utfördes i själva reaktorerna och/eller i separertrattar, och destillation utfördes med rotationsindunstare. Vidare användes en frystork för isolering av fast uppenad Målmolekyl 1 i Figur 3. Analyser av reaktionsblandningar och utströmmar har utförts med främst infrarödspektroskopi (FT-IR), gaskromatografi (GC-FID) och vätskekromatografi med olika typer av detektorer (UV och brytningsindexdetektorer, HPLC-UV och HPLC-RI) där målmolekyl(er) och nyckelförörningar identifierats och haltats mot inköpt referenssubstans. Ansvarig utförare: HB med viss input från RISE, Chalmers, Södra och Perstorp.

2.2.3. Utredningsarbete inom AP 3 Systemaspekter

Affärs-, utvecklings- och marknadsförhållanden för målmolekylerna 1 och 2 har på nytt⁶ bedömts med inriktning på den nuvarande situationen. Information om kommersiella producenter, anläggningar och produktionsvolymerna har på nytt inhämtats i den mån sådan information funnits tillgänglig. Nya intervjuer med bl a Södra och Perstorp men även med andra företag har genomförts. Bedömningarna baserar sig på öppen information från olika källor men också på intervjuerna ovan. Inga nya förfrågningar om ex vis prisuppgifter för målmolekylerna 1 och 2 jämfört med förstudiens data² från valda leverantörer gjordes denna gång. Ansvarig utförare: CIT med input från Södra och Perstorp.

Klimatpåverkan av de processer för framställning av målmolekylen 1 (se Figur 3) som tagits fram i projektet och litteraturprocessen för framställning av målmolekyl 2 (illustreras i Figur 4), har preliminärt bedömts genom sammanställning av information och data från det laborativa arbetet i projektet och från vetenskapliga tidskriftsartiklar och databaser, vilka sedan använts som grund för mjukvarustödda analyser av klimatpåverkan för de kemiska processerna i avsnitt 3. Ansvarig utförare: RISE men arbetet har huvudsakligen utförts av IVL med input från HB, RISE, Södra och Perstorp.

2.2.4. Utredningsarbete inom AP 4 Framtidsrekommendationer, projekt-koordination/-administration

Gällande arbetet i AP 4 kring rekommendationer för framtiden så har det bedrivits genom bedömningar av både data från projektet, från öppen information i litteraturen och från andra källor och från förstudien i fotnot 2 samt intervjuerna som genomförts med nyckelpersoner i näringslivet i AP 3. Den samlade projektgruppens kunskaper och erfarenheter gällande allt från kemiskt processutvecklingsarbete, arbete med karakterisering av teknoekonomiska, marknads- och miljöaspekter för kemiska processer och deras produkter inklusive vikten av att skapa värde för eventuella sidoströmmar ut från kemiska processer, har naturligtvis också bidragit till hur arbetet i AP 4 genomförts och till hur rekommendationerna i avsnitt 5 ser ut.

⁶ En första bedömning av affärs-, utvecklings- och marknadsförhållanden för målmolekylerna 1 och 2 utfördes och rapporterades i fotnot 2.

3. Resultat och Diskussion

3.1. AP 1. Definition av metodik för rening och isolering av målmolekylerna

3.1.1. Målmolekyl 1

Förnyade litteraturstudier i AP1 ledde till att några olika processkandidater publicerade i olika patent av olika företag och organisationer, identifierades som startpunkter för vidare laborativt utvecklingsarbete. Naturliga utgångspunkter för bedömningarna av potentialen hos de publicerade processerna var huvudsakligen följande:

- Kan reaktionen i sig från kolhydrat till målmolekyl 1 ge högt utbyte och hög renhet för målmolekyl 1 redan före upprening och kan reaktionen köras kontinuerligt för att nå en tillräcklig effektivitet för industriell produktion av mängder på minst runt 100 Kton årligen.
 - Mängd föroreningar som i mån av data finns rapporterade eller kan finnas har bedömts samt möjlighet att undertrycka deras bildande.
- Huruvida processen använder kostnadseffektiv katalysatorteknologi som medger repetitiv användning av samma katalysatorportion utan komplexa och kostsamma regenereringsprocesser samt om processen sannolikt kan köras i konventionella tubformade flödesreaktorer för att nå lägre investerings- och driftskostnader har bedömts.
- Det har bedömts huruvida kostnads- och miljömässigt rimliga hjälpkemikalier (t ex salt-additivet i Figur 3) används i processkonceptet jämfört med andra publicerade alternativ, eller om svåra reningsproblem och/eller avfallsproblem uppstår som följd av användning av hjälpkemikalien.
- Processkandidaternas volymseffektivitet har bedömts m a p om den i beskrivningen av processen angivna spädningen krävs för att undvika sidoreaktioner eller om en mer koncentrerad variant av processen kan åstadkommas genom processoptimering, något som skulle ge processen ökad kapacitet.
- Val av lösningsmedel har bedömts m a p om lösningsmedlen går att återvinna genom destillation eller med andra tekniker under kostnadsmässigt rimliga förhållanden samt om andra lösningsmedel med fördel ska/kan användas i utvecklingsarbetet i projektet. Risken för förluster av lösningsmedel till utströmmar från processen har också bedömts.
- Möjligheten att utföra extraktiv upparbetning i kontinuerliga extraktionskolonner i stället för som på lab genom batchextraktion, vilket spar stora mängder lösningsmedel, har bedömts.
- Temperaturer och hur dessa varierar i processkoncepten som rapporterats har bedömts eftersom stora variationer i temperatur genom enhetsoperationerna i processen kan innebära problem med energieffektiviteten.
- Möjligheten att isolera målmolekyl 1 som ett kristallint derivat utreddes som en alternativ uppreningsmetod som kan vara mer kostnadseffektiv än ex vis destillation, där den senare reningstekniken i detta fallet behöver utföras vid högt vakuum med korta exponeringstider för värme eftersom målmolekyl 1 är termiskt känslig för nedbrytning.

Efter att ha gått igenom några valda alternativ valdes processkandidater ut för laborativt utvecklingsarbete som har följande övergripande särdrag:

- Reaktionssteget nyttjar lösningsmedel som är blandbara med vatten vilket underlättar inlösning av hjälpkemikalier som ex vis saltadditivet i Figur 3. Reaktionsblandningen blir, så när som på katalysatorn som är olöst och fast, en homogen lösning.
- Katalysatorn är en fast heterogen fas som lätt isoleras efter reaktionen genom filtrering eller centrifugering. Packar man en kolonn med denna katalysator kan processen sannolikt köras i flöde genom att pumpa reaktionsblandningen genom katalysatorbädden inne i den värmda reaktorkolonnen. Utveckling och optimering av en flödesprocess var inte möjligt att genomföra inom detta projektets begränsade budget och utgör därför i stället en rekommenderad vidare utvecklingsaktivitet enl nedan (se avsnitt 5).
- Processalternativet enligt Figur 3 gav en m a p målmolekyl 1 relativt ren reaktionsblandning direkt vilket bäddar för en enklare upparbetning och rening inför isolering. Eventuellt behövs ingen rening alls om målmolekyl 1 direkt konverteras till målmolekyl 2, vilket underlättar eftersom målmolekyl 1 har totalt sett ganska problematiska fysikalisk-kemiska egenskaper för isolering i ren form, t ex hög vattenlöslighet vilket försvårar förlustfri extraktiv rening, låg smältpunkt vilket försvårar rening genom kristallisation, hög kokpunkt i kombination med låg termisk stabilitet vilket försvårar rening genom destillation.
- Det har bedömts huruvida vattenfasen med salt-additiv i kan recirkuleras direkt för att undvika kostsamma separata återvinningsprocesser för salt-additivet.
- Extraktionen av målmolekyl 1 in i en organisk fas där lösningsmedlet sedan separeras genom destillation följt av återvinning och recirkulering in i processen, ser ut att kunna utföras kontinuerligt vilket kraftigt kan sänka lösningsmedelsförbrukningen i stor skala.
- Målmolekyl 1:s begränsade termiska stabilitet gjorde det naturligt att välja ut lösningsmedlen för både reaktionssteget och för efterföljande extraktionssteg så att de har väsentligt lägre kokpunkt än målmolekyl 1 och så pass låg kokpunkt att den senare inte riskerar att termiskt brytas ner under återvinningsprocesser som ex vis vakuumdestillation för återvinning av lösningsmedel inför isolering av rå och/eller uppenad målmolekyl 1.
- Behovet av vattenrening ska vara litet och mängden biprodukter så små som möjligt.

Det laborativa utvecklingsarbetet som följde på aktiviteterna i AP 1 beskrivs nedan under 3.2 och den processdesign som togs fram beskrivs som nämnts ovan schematiskt i Figur 3. Där resoneras det även kring vilka biprodukter som bildas med förslag på användningsområden, något som sedan diskuteras mer under 3.3 och 4.

3.1.2. Målmolekyl 2

Konverteringen av målmolekyl 1 till målmolekyl 2 har även den utsatts för en förnyad genomgång av relevant litteratur avseende processkandidater jämfört med de studier som gjordes i förstudien.² Däremot gjordes inget laborativt utvecklingsarbete på detta processteg orsakat av budgetbegränsningar för projektet.

Övergripande har samma aspekter bedömts för processkandidater som ger målmolekyl 2 som för målmolekyl 1 ovan för att identifiera mer lovande processkandidater för vidareutveckling. Det finns dock viktiga skillnader mellan processerna där målmolekyl 2 kan framställas från målmolekyl 1 i vatten som enda lösningsmedel vid hög temperatur och förhöjt tryck under inverkan av ett vattenlösligt reagens, d v s ingen heterogen fast katalysator används och reaktionsblandningen är en homogen lösning i vatten där det under reaktionen bildas en fast biprodukt som kan filtreras av efteråt.

Den valda processkandidaten, vilken bygger på två olika patent, har följande särdrag (Figur 4):

- Reaktionssteget nyttjar som sagt vatten som lösningsmedel och reaktionen körs med en ganska hög koncentration av startmaterialet vid en temperatur högt över vattens kokpunkt, vilket leder till att reaktionen behöver köras i ett tryckkärl med omrörare monterad i eller i en annan typ av högtrycksreaktor som säkerställer omblandning under reaktionens gång. Steget illustreras schematiskt i Figur 4.
- Den enda signifikanta biprodukten består av fasta olösliga ämnen (ca 15 vikts-% i förhållande till startmaterialets vikt) vilken enkelt kan separeras genom filtrering eller centrifugering.
- Katalysatorn är i detta fallet löslig i vatten och kan eventuellt återvinnas och återföras till processen tillsammans med vattnet efter extraktiv upparbetning som beskrivs nedan och i Figur 4.
- Även för denna process bedöms det som sannolikt att en effektiv flödesprocess kan utvecklas för att nå högre effektivitet (se också under avsnitt 5). Även den extraktiva upparbetningen som illustreras i Figur 4 ser ut att kunna göras kontinuerligt vilket liksom för målmolekyl 1 är ett krav för att i stor skala hålla nere lösningsmedelsförbrukningen på en bra och rimlig nivå.
- Rening av rå målmolekyl 2 löst i vatten görs genom att först filtrera eller centrifugera av den fasta biprodukten och sedan extrahera in målmolekyl 2 i ett ganska polärt förnyelsebart lösningsmedel (lösningsmedel 3), i första hand genom kontinuerlig extraktion i en extraktionskolonn, följt av destillation av lösningsmedlet för att återvinna och återanvända det, vilket lämnar en återstod av relativt ren målmolekyl 2. För att ytterligare rena målmolekyl 2 kan denna sedan utsättas för en fraktionerad destillation eller renas genom kristallisation. Molärt utbyte av målmolekyl 2 rapporterades till 78%.
- Den bildade vattenfasen måste sannolikt efterbehandlas så att rester av lösningsmedel 3 tas om hand och liksom vattenfasen återanvänds i nästa varv av processen.
- Steget från målmolekyl 1 till målmolekyl 2 kräver sannolikt vattenrening av vattenfasen efter ett antal varvs användning, vilket behöver studeras framåt.

3.2. AP 2. Utveckling och demonstration av vald metodik för rening och isolering av målmolekylerna i labskala

3.2.1. Målmolekyl 1 - inledning

Högskolan i Borås har i projektet undersökt en rad betingelser för att bilda målmolekyl 1 i högt utbyte och med hög renhet. Uppreningen från bl a lösningsmedel och föroreningar har sedan studerats och optimerats i den utsträckning det var möjligt med hänsyn till projektets storlek och budget. Förhoppningen är att intresse finns för vidare utvecklingsarbete inom ramen för kommande utvecklingsprojekt. Kortfattat har utvecklingsarbetet bedrivits enligt följande steg:

- Inledningsvis togs analysmetoder fram som bl a använder HPLC för detektion och kvantifiering mot standard av kända substanser i reaktionsblandningarna. För en bild på det analysinstrument som användes, se 2.2.2 ovan.
- En rad olika reaktionsbetingelser (olika temperaturer, reaktionstid och tryck) och lösningsmedelskombinationer testades från reaktioner vid atmosfärstryck till trycksatta betingelser. Valet av lösningsmedel har byggts på en kombination av litteratordata och publicerade beräkningar av stabiliteten hos målmolekyl 1 i olika lösningsmedel. För exempel på använd labutrustning, se bilder under 2.2.2 ovan.

- Mer lovande reaktionsbetingelser optimerades med avseende på temperatur, lösningsmedels- och vattenmängd, koncentration av kolhydrat och salt-additiv, och reaktionstid, där det resulterande trycket sattes av reaktionstemperaturen.
- En reningssekvens testades och optimerades laborativt där stegvis filtrering, extraktion med ett lösningsmedel i vilket målmolekyl 1 har mycket hög löslighet, och destillation samt frystorkning ingått. Reningsprocessen beskrivs mer nedan för stegen i Figur 3.
- Processen demonstrerades med frystorkning som metod för slutrening av målmolekyl 1.

Arbetet har varit utmanande och tidskrävande vilket ledde till behov av prioriteringar, vilket i sin tur ledde till att laborativt utvecklingsarbete för processen till målmolekyl 2 inte rymdes inom projektet.

3.2.2. Målmolekyl 1 – den i projektet framtagna processen

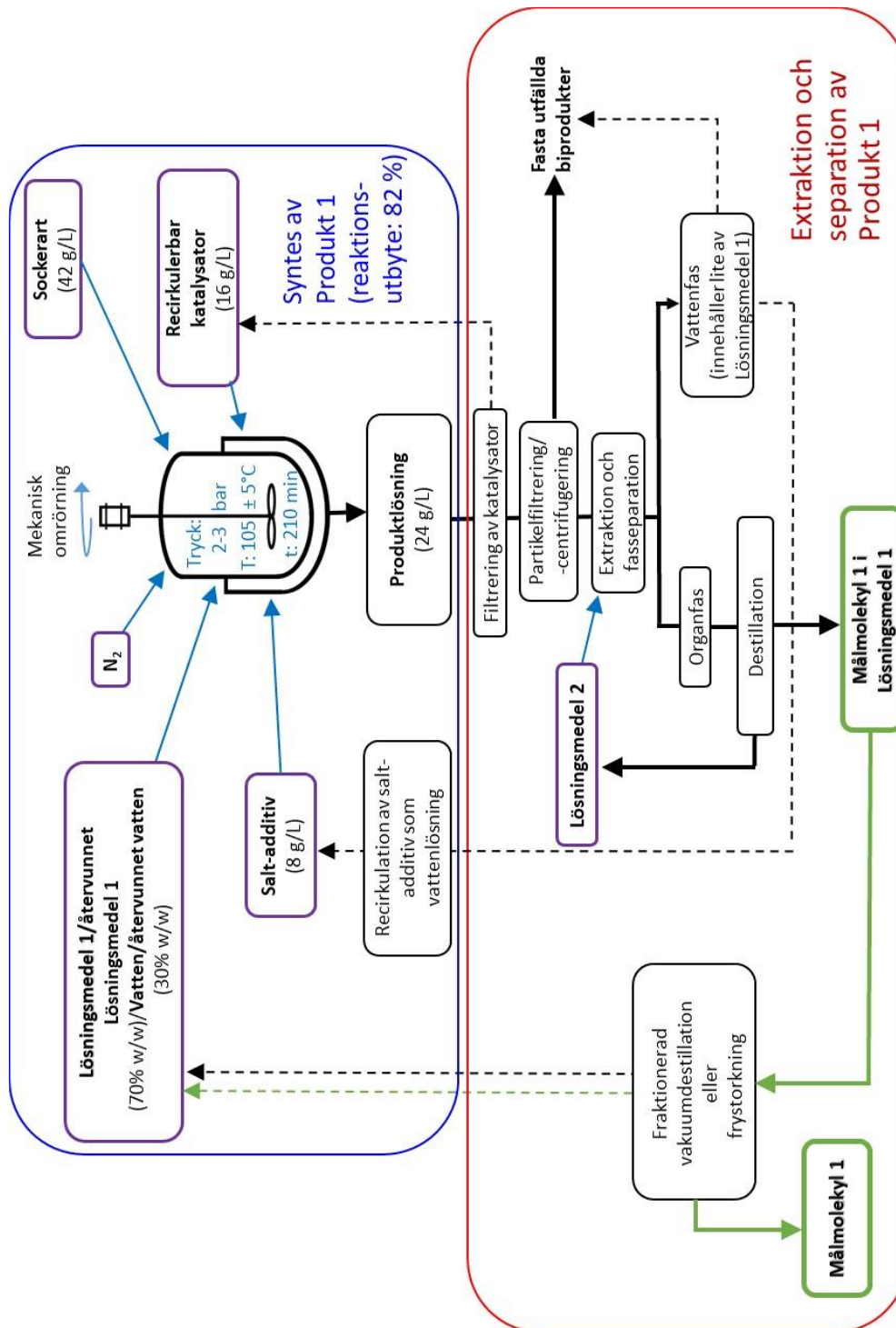
Som nämnt ovan så illustreras den framtagna processen schematiskt i Figur 3 nedan.

Experimentell beskrivning

En 2 L Parr modell 4520 bänkaoklav i rostfritt stål (Parr Instrument Company, Moline, IL, USA, se 2.2.2 ovan för bild) användes för reaktionen. Reaktorn är utrustad med en tryckmätare och en U-formad kylspole samt en omrörare som drivs av en motor monterad i ställningen som håller reaktorn. En styrenhet (modell 4848, Parr Instrument Company, Moline, IL, USA) styr temperaturen i reaktorn, läser av trycket och omrörarens hastighet. Reaktorn är försedd med inlopps- och utloppsrör med ventiler genom vilka gaser och/eller vätskor/vätskeformiga blandningar kan tillsättas och tas ut. Utrustningen medger därmed provuttag för analys under körning. Reaktionsblandningen framställdes genom upplösning av 3,6 vikts-% kolhydrat och 0,72 vikts-% salt-additiv i avjoniserat vatten i reaktorn. Den resulterande lösningen blandades med Lösningsmedel 1 (förhållande lösningsmedel 1/vatten 70/30) och 3,6 vikts% av fast recirkulerbar katalysator tillsattes. Inert atmosfär i reaktorn etablerades efter att reaktorn förslutits genom en kvävgasström in i ett inledningsrör och ut genom ett annat rör i toppstycket. Omröraren startades (300 varv/min) och temperaturen i reaktorn ökades snabbt till 105°C, varefter reaktionsblandningen hölls vid denna temperatur i 4 h. Trycket i reaktorn hölls konstant på ca 3 bar genom applicering av ett mottryck av kvävgas. Provtagning och analys av reaktionsblandningen med HPLC gjordes var 30:e minut, och förändringar i koncentrationen av kolhydrat och målmolekyl 1 samt bildandet av ev föroreningar (däribland små mängder av målmolekyl 2) under reaktionens gång kunde därmed följas. Produktblandningen kylde sedan ner till rumstemperatur och filtrerades för att separera den fasta katalysatorn från lösningen. Mängden finkornig fast biprodukt (ca 9,9 vikts-% av mängden kolhydrat som gick in som startmaterial eller 17 vikts-% av produktvikten i reaktionslösningen) filtrerades av, torkades och vägdes. Den erhållna filtrerade lösningen togs vidare in i uppberbetningen enligt nedan:

- Den filtrerade rumstempererade reaktionslösningen överfördes till en separertratt och lösningsmedel 2, vilket har låg löslighet i vatten och därför bildar en separat fas, tillsattes.
- Blandningen skakades kraftigt och faserna tilläts sedan separera. Den övre fasen är den organiska fasen (orange färg) och den lägre en mörk vattenfas.
- De två faserna separerades genom att tömma ut bottenfasen (vattenfasen) först och toppfasen sedan till separata kärl. Vattenfasen fördes tillbaka till separertratten flera varv för repeterad extraktion av målmolekyl 1 med mer lösningsmedel 2. Industriellt görs en sådan extraktion kontinuerligt med en extraktionskolonn i stället för satsvis, vilket konsumerar mycket mindre lösningsmedel vilket kontinuerligt återvinns och recirkuleras efter destillation.

- De organiska faserna poolades och rå målmolekyl 1 erhöles som en lösning i lite kvarvarande lösningsmedel 1, som har högre kokpunkt än lösningsmedel 2 och vatten, genom vakuumdestillation.
- Efter frystorkning erhöles renad målmolekyl 1. Målmolekyl 1 har av andra även renats genom vakuumdestillationstekniken tunnfilmsindunstning men ingen sådan utrustning fanns tillgänglig.



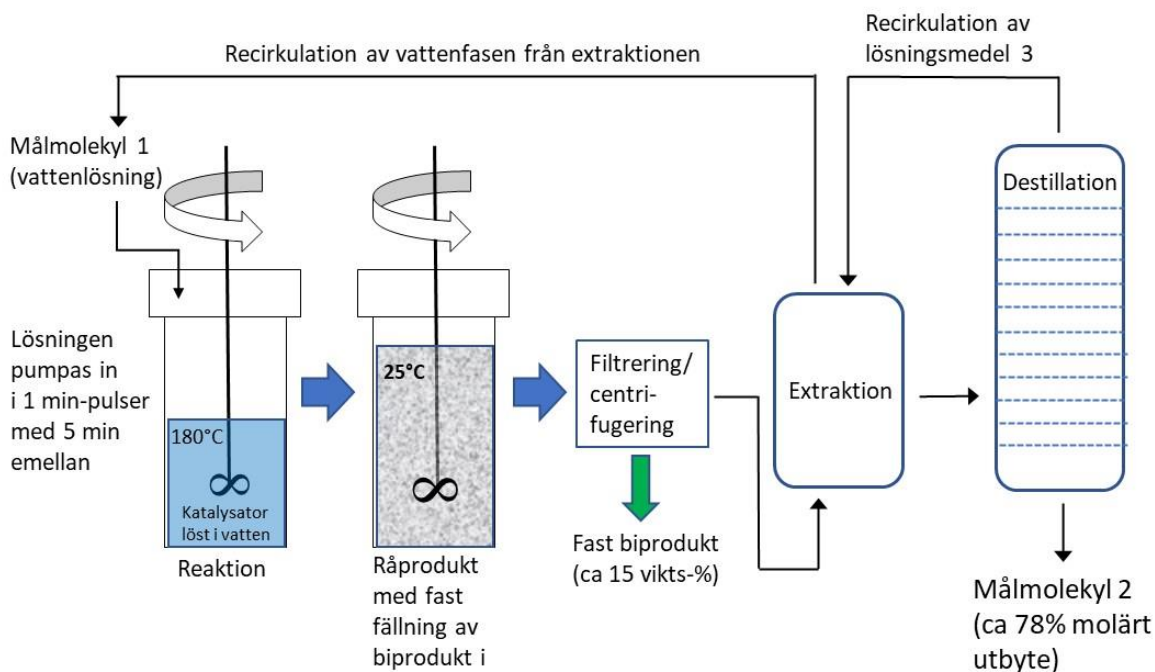
Figur 3. Schematisk illustration av den i labbskala framtagna processen för framställning och rening av målmolekyl 1.

Den viktigaste slutsatsen från arbetet är att man med den process som tagits fram kan undvika en mer komplicerad reningsmetodik tack vare en jämfört med litteraturen selektiv och relativt ren reaktion till målmolekyl 1 som ger endast en signifikant biprodukt som är olöslig och fast och som därför kan tas bort med filtrering (som beskrivet ovan erhålls ca 17 vikts-% fast biprodukt i förhållande till vikten målmolekyl 1 i reaktionslösningen). Den fasta biprodukten är sannolikt för komplext sammansatt på molekylär nivå för att den ska kunna användas för någon högvärdesapplikation. Användning som jordförbättringsmedel kan fungera tack vare ett högt kolinnehåll eller annars får man förbränna den för energiutvinning lokalt. Eftersom denna biprodukt betingar ett lågt eller mycket lågt värde är det naturligt att inrikta eventuellt ytterligare processutvecklingsarbete på att minimera mängden fast biprodukt och i stället nå ett högre utbyte av målmolekyl 1.

Data från det laborativa arbetet och från litteraturen fördes in i den LCA-studie som utförts av IVL som del av AP 3 (se 3.3). Utbytet av målmolekyl 1 nådde som bäst 81-84% i relation till antalet mol kolhydrat som startmaterial.

3.2.3. Målmolekyl 2 – den valda processen

IVL, RISE och HB har i projektet på nytt undersökt en rad publicerade betingelser för att framställa och rena målmolekyl 2 i högt utbyte, denna gång med än mer fokus på upparbetnings- och reningsmetodik jämfört med de litteraturstudier som gjordes i förstudien i fotnot 2 ovan. Som nämnts ovan under 3.1.2 rymdes inte laborativt utvecklingsarbete för steget från målmolekyl 1 till målmolekyl 2 i detta projekt av budgetskäl. Motivet till valet av processen till målmolekyl 2 och dess olika steg samt särdrag beskrivs ovan under 3.1.2 och nedan följer en schematisk illustration av processen (Figur 4).



Figur 4. Schematisk illustration av processen för framställning av målmolekyl 2 från målmolekyl 1 med valda data i.

Den viktigaste slutsatsen från arbetet är även i fallet med målmolekyl 2 att man med den process som identifierats i litteraturen kan undvika en mer komplicerad reningsmetodik tack vare en relativt selektiv och ren reaktion (enda biprodukten i signifikanta mängder är ett blandat fast olösligt

material som kan avlägsnas genom filtrering, ca 15% w/w av startmaterialmängden) följt av en operationellt visserligen energikrävande men relativt enkel destillation för återvinning och reciklering av lösningsmedel 3 (Figur 4). Den bildade fasta fällningen ovan är molekylärt sannolikt för komplext sammansatt för att kunna användas för någon högvärdesapplikation. Lokal energiutvinning eller möjligen, tack vare det relativt höga kolinnehållet, användning som jordförbättringsmedel kan vara exempel på möjliga applikationer för att på något sätt ta vara på denna biprodukt efter filtrering.

Data för processen i Figur 4 hämtade från litteraturen fördes in i den LCA-studie som utförts av IVL som del av AP 3 (se under 4.2). Utbytet av målmolekyl 2 rapporterades som bäst ha nått 78% i relation till antalet mol startmaterial.

4. AP 3. Systemaspekter

4.1. Initial karakterisering av marknadsförutsättningar

CIT har som del av arbetet genomfört en, jämfört med förstudien i fotnot 2, förnyad genomgång av mer eller mindre utvecklade kommersiella tillämpningar för målmolekyl 1 och 2 vilken denna gång mestadels bygger på intervjuer med nyckelpersoner i kemiindustrin, inklusive företrädare för Södra och Perstorp men även med företrädare för andra företag verksamma i Europa. Vidare har projekt kring sockerplattformen som är igång inom EU:s ramverksprogram undersökts. Studierna kan på grund av sekretess inte redovisas i detalj men de huvudsakliga slutsatserna är som följer:

- Företagsparterna i projektet, Södra och Perstorp, har sedan förstudien visserligen sett ett ökat intresse för målmolekylerna 1 och 2 men också att behoven av processutveckling för att nå rimliga kg-priser är fortsatt stora med viss aktivitet i pågående forskning och utveckling internationellt. Det verkar fortfarande² vara så att produktionen inte riktigt tagit fart och priserna är fortfarande alltför höga för att molekyler ska nå en bredare tillämpning och försäljning på marknaden och det främst på grund av behov av teknoekonomiska förbättringar för tillverkningsprocesserna.
 - En nyhet jämfört med förstudien² är att det nu finns ett företag på kontinenten som planerar bygga en produktionsanläggning för produktion av mer relevanta volymer av målmolekyl 1, vilket kan göra molekylerna betydligt mer intressanta som råvara för förnyelsebar specialkemikalieproduktion.
- De kvaliteter av målmolekylerna 1 och 2 som idag går att få tag i kommersiellt bedöms varierande och otillförlitliga så till vida att väl definierade kvalitetskrav enligt i förväg utformade specifikationer avseende renhet, halt m m inte över tid hålls av leverantören. Detta hämmar utvecklingsarbetet på nya produkter från båda dessa molekyler.
 - Målmolekyl 1 har till skillnad från målmolekyl 2 en ganska dålig kemisk och termisk stabilitet och mer studier på hur den ska lagras och transporteras för att hålla stabil kvalitet bedöms behövas.
- Som nämndes i förstudierapporten² så finns redan etablerad produktion inom EU av målmolekyl 2, eventuellt helt eller delvis tillverkad via målmolekyl 1 utan isolering av den senare som del av processen. Produktionsvolymerna är visserligen betydligt lägre än de volymer som krävs för fullt ut kommersiell specialkemikalieproduktion, men bedöms av åtminstone en aktör som intervjuades ändå som intressanta för exempelvis utveckling av processer för tillverkning av specialkemikalier. Sedan förstudien har det tillkommit en ny produktionsanläggning hos den tidigare verksamma producenten i Europa som kan

producera ca tre gånger så mycket produkt per år som tidigare anläggning, vilket tyder på ökad efterfrågan.

- En aktör på kontinenten meddelade i en intervju att de är intresserade av att använda målmolekyl 2 som plattformskemikalie för bulkkemikalieproduktion d v s på nivån miljontals ton per år. Detta kräver dock att priserna per kg sjunker kraftigt och bulkkemikalier är i nuläget av mindre intresse för företagsparterna i projektet p g a att de kräver mycket stora investeringar för att nå de låga kg-priser och stora volymer som marknaden skulle kräva.²
- Det finns ett antal pågående initiativ kring produktion av målmolekyl 2 och diverse derivat av denna i form av både EU-projekt, institutssamarbeten i USA och joint ventures mellan företag. Dessa har varierande planer från byggandet av demopilotanläggningar i tonskala till väldigt storskalig produktion av diverse idag redan existerande plattform-/bulkkemikalier för att ersätta det fossila utgående från målmolekyl 2 och valda derivat av denna. Om några år kanske bilden klarnar hur långt man egentligen kommit med arbetet och anläggningsinvesteringarna.
- Någon analys av biprodukterna från stegen till målmolekyl 1 och 2 (se Figur 3 och 4 och 3.1.1, 3.1.2, 3.2.2 och 3.2.3) ur ett marknadsperspektiv gjordes inte eftersom dessa är strukturellt blandade och så här långt i båda fallen inte fullt ut definierade fasta material som löser sig mycket dåligt i både lösningsmedel och vatten. Eftersom det dominerande elementet i de fasta fällningarna i båda fallen är kol så kan det vara så att de skulle kunna användas som jordförbättringsmedel, eller som tillsats för tillverkning av betong men annars får man ex vis förbränna dessa biprodukter för att delvis energiförsörja tillverkningsprocesserna. På grund av att dessa odefinierade biprodukters begränsade värde utöver energivärdet så behöver eventuellt vidare optimeringsarbete leda till att mängderna av dem signifikant minskas.

Rekommenderade aktiviteter framåt gällande marknadsaspekter handlar främst om följande:

- Man behöver dels undersöka möjligheten att få ta del av inom vissa EU-projekt redan utförda teknoekonomiska analyser för tillverkningsprocesserna till målmolekylerna 1 och 2 samt derivat av den senare, men även förmodligen utföra egna teknoekonomiska analyser utifrån en blandning av data från i projektet utförda experiment, eventuellt kommande utvecklingsarbete och data från litteraturen samt tidigare teknoekonomiska studier enligt ovan.
- Man bör genom ytterligare intervjuer och via litteratur- och omvärldsbevakning följa hur de initiativ som diskuteras ovan går framåt samt göra intervjuer med företrädare för fler aktörer som inte ingick i de som intervjuades inom ramen för detta specifika projekt.

4.2. Initial karakterisering av klimatpåverkan

Klimatpåverkan för processerna till målmolekyl 1 och 2 mätt som kg koldioxidekvivalenter per kg producerad produkt, exkluderande eventuell bildad biobaserad koldioxid, har bedömts för dels den i labbskala experimentellt framtagna och verifierade processen till målmolekyl 1 i Figur 3 och dels för den i litteraturen publicerade processen som utvärderats mer i detalj för produktion av målmolekyl 2 i Figur 4. Arbetet bedrevs huvudsakligen av IVL i några olika steg:

- Datainsamling avseende mängder av ingående råvaror, lösningsmedel etc, energikonsumtion för processen och dess olika steg med destillation, värmning o s v, mängder av förluster av ex vis lösningsmedel samt mängd produkt och biprodukter per varv av processen.
 - Datamängden består både av data från det experimentella arbetet i projektet för målmolekyl 1 och av data från litteraturen. I fall där data saknas har efter diskussion

inom projektet antaganden gjorts baserat på processkemisk och annan erfarenhet samt i LCA-databaserna (se nedan vilka dessa är) sedan tidigare befintliga data.

- Exempel på förluster som antagits baserat på en kombination av litteratordata och experimentella data för processen i Figur 3, är att 95% av lösningsmedel 2 kan återvinnas och recirkuleras och resten går till atmosfär som följd av en icke perfekt kylning och kondensering i återvinningsprocessen. En förlust av katalysator per varv i Figur 3 på ca 5% kopplat till mekaniska förluster i filtreringen och hanteringen har antagits i beräkningarna.
- Lösligheten för lösningsmedel 2 i vattenfasen i extraktionen i Figur 3 (och i Figur 4 men då gäller det ett annat lösningsmedel) är inte noll och baserat på dess vattenlöslighet vid rumstemperatur så har det antagits att 6% av lösningsmedlet hamnar i vattenfasen i extraktionen och behöver vakuumdestilleras bort från densamma.
- Lösningsmedel 1 i Figur 3 fördelar sig mestadels till vattenfasen och kan återföras direkt till nästa varv av processen men en betydande andel hamnar i organfasen tillsammans med lösningsmedel 2 och huvuddelen av målmolekyl 1. Här har data bestämts experimentellt d v s mängderna i resp fas har mätts av HB.
- En mindre mängd målmolekyl 1 löser in sig i vattenfasen vid extraktion och återförs då till nästa varv av reaktionen i stället för att isoleras som produkt. Denna mängd har mätts experimentellt.
- Data för produktion av de kemikalier, katalysatorer och lösningsmedel som används i processerna i Figur 3 och 4 kommer från GaBi LCA-mjukvara och från Ecoinvent-databasen (se <https://gabi.sphera.com/databases/gabi-databases/> resp <https://ecoinvent.org/the-ecoinvent-database/>).

Processerna i Figur 3 och 4 har sedan utsatts för simuleringsberäkningar i IVL:s verktyg vilket givit resultaten nedan i 4.2.1 och 4.2.2 för målmolekyl 1 resp 2.

4.2.1. Resultat av LCA-studierna: processen till målmolekyl 1

Stapeldiagrammen i Figur 5 a) och b) visar den beräknade klimatpåverkan för processen från kolhydrat till målmolekyl 1 uttryckt som kg koldioxidkvalenter per producerad kg målmolekyl.

Att siffrorna för utsläpp av koldioxidkvalenter för processen i Figur 3 blir så pass förhållandevis höga beror enligt de analyser som gjorts på följande (och samlat pekar data på vissa utvecklingsbehov som även beskrivs i avsnitt 5 Framtidsrekommendationer nedan):

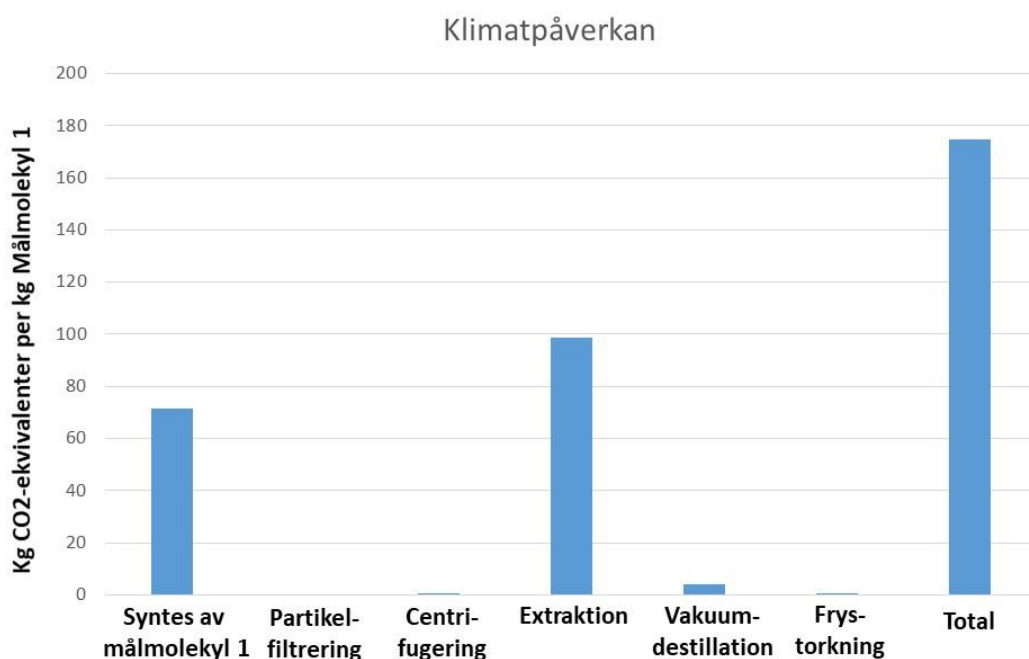
- Mängden lösningsmedel 2 som användes i det experimentella arbetet är väldigt stor, till största delen beroende på att extraktionen p g a tillgänglig utrustning utfördes i batch och inte kontinuerligt med kontinuerlig lösningsmedelsåtervinning som skulle vara en mer effektiv och långsiktig lösning för storskalig produktion. Data för produktion av lösningsmedel 2 kommer ifrån Ecoinvent-databasen och resultaten visar att produktionen av lösningsmedel 2 utgör 57% av den totala klimatpåverkan för hela processen, orsakat av en förhållandevis stor använd mängd. Vidare utvecklingsarbete behöver alltså dels sänka mängden lösningsmedel i extraktionen men också se över om ett annat lösningsmedel som ger lägre klimatpåverkan när det produceras och mindre förluster i återvinningen, kan användas i stället.
- Produktionen av råvaror för själva reaktionssteget har också en betydande klimatpåverkan (ca 41% av totalen). Av den senare påverkan utgörs enligt beräkningarna 73% av påverkan av användningen av lösningsmedel 1 i reaktionen och 16% av användningen av salt-additivet som används i processen (se Figur 3). Hur dessa produceras idag leder till det avtryck som reaktionssteget i processen i Figur 3 ger och även här behöver vidare optimeringsarbete

trimma ner mängderna av lösningsmedel och se om annat lösningsmedel som produceras under bättre förhållanden kan användas. Även mängd och typ av salt-additiv behöver optimeras.

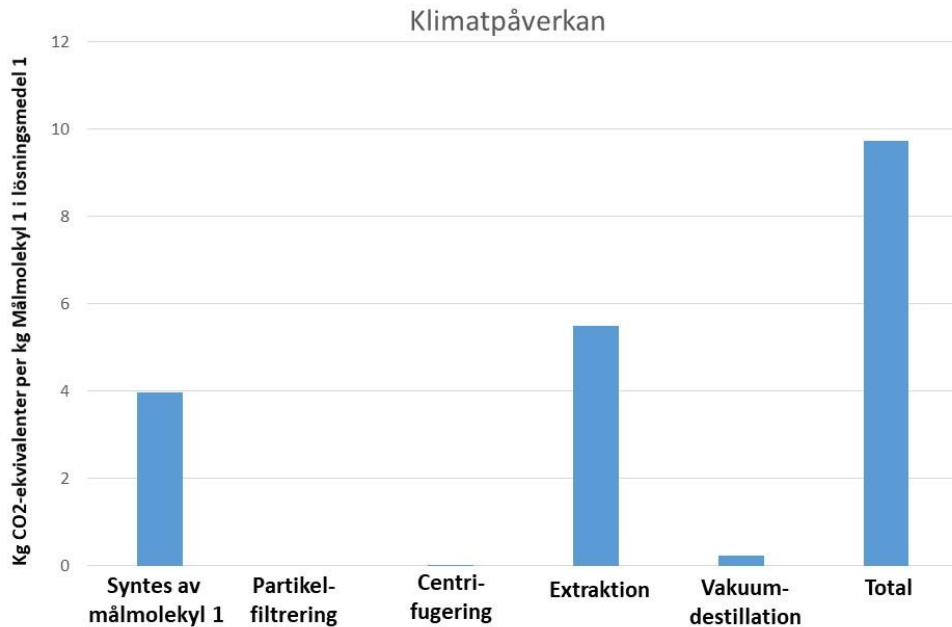
- Det faktum att reaktionen till målmolekyl 1 från kolhydrat enligt Figur 3 gynnas av en förhållandevis hög spädning, för att undvika sidoreaktioner och nå rätt selektivitet och högt utbyte av ren målmolekyl 1, står i visst motsatsförhållande till att använda små mängder lösningsmedel och nå hög volymseffektivitet för processen vilket alltid är en naturlig ambition i allt kemiskt processutvecklingsarbete. Vidare optimeringsarbete behöver hitta rätt balans mellan spädning och kapacitet samt klimatpåverkan för både reaktion och upparbetning.

Rekommendationer kring framtida utvecklingsarbete diskuteras vidare under avsnitt 5 nedan.

a)



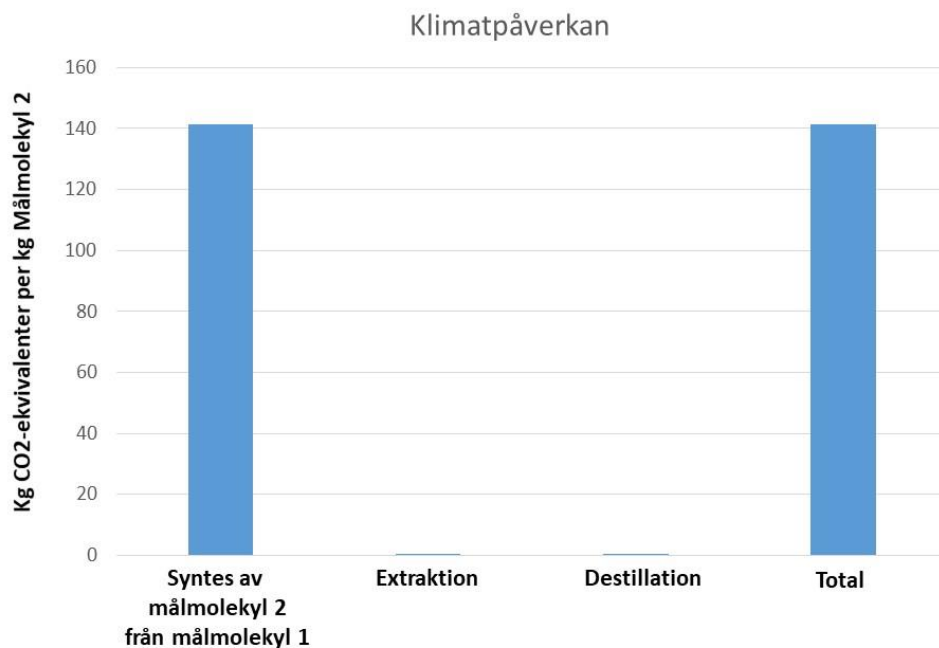
b)



Figur 5. a) Beräknad klimatpåverkan för ren, lösningsmedelsfri målmolekyl 1 framställd enligt processen i Figur 3. b) Beräknad klimatpåverkan för lösningen av målmolekyl 1 i lösningsmedel 1 i Figur 3 d v s före frystorkning alternativt vakuumdestillation.

4.2.2. Resultat av LCA-studierna: processen till målmolekyl 2

Stapeldiagrammet i Figur 6 visar den beräknade klimatpåverkan för processen från målmolekyl 1 till målmolekyl 2 uttryckt som kg koldioxidkvivalenter per producerad kg målmolekyl.



Figur 6. Beräknad klimatpåverkan för ren, lösningsmedelsfri målmolekyl 2 framställd enligt processen i Figur 4.

Att siffrorna för utsläpp av koldioxidekvivalenter för processen i Figur 4 även liksom i fallet med målmolekyl 1 blir så pass höga beror enligt de analyser som gjorts på följande:

- Klimatpåverkan för produktion av målmolekyl 2 från målmolekyl 1 med den valda processen domineras inte överraskande helt av produktionen av målmolekyl 1 med en låg eller mycket låg påverkan av produktionen av lösningsmedel 3 och destillationen av detsamma för att isolera upprepad målmolekyl 2. Själva operationerna som utförs i denna process har alltså en förhållandevis bra miljöprofil i sig. Skälen till detta är huvudsakligen följande:
 - Volymen lösningsmedel 3 som används i den extraktiva upparbetningen är förhållandevis låg, något som projektet bedömer beror på att extraktionsmetodiken är mer optimerad än i fallet med den extraktion i labbskala av målmolekyl 1 som gjorts i detta projekt och som beskrivs och diskuteras i 3.2.2 och 4.2.1.
 - Eftersom volymerna av lösningsmedel 3 som används i processen är låg så påverkas både extraktion och destillation positivt tack vare lägre klimatpåverkan av produktionen av lösningsmedlet på båda dessa enhetsoperationer samt möjligen också en lägre energiförbrukning som följd av förbättrad volymseffektivitet.
- Kan man som följd av ytterligare utvecklingsarbete signifikant förbättra klimatpåverkan för produktionen av målmolekyl 1, exempelvis tack vare åtgärder som kort diskuteras i 4.2.1 och under avsnitt 5 nedan, så kommer bidraget från tillverkning av målmolekyl 2 från målmolekyl 1 vara lågt eller mycket lågt avseende klimatpåverkan.
- Behovet av ytterligare processutveckling för steget från målmolekyl 1 till 2 avseende klimatpåverkan bedöms totalt sett vara litet men processens påverkan kommer sannolikt sänkas ytterligare som följd av naturliga ambitioner att av teknoekonomiska orsaker pressa effektiviteten hos processen ytterligare med bl a minimering av bildandet av biprodukter för maximering av utbyte, ökad startmaterialkoncentration för förbättrad kapacitet, konvertering av processen till en kontinuerlig process, möjligen med en fast heterogen i stället för vattenlöslig katalysator m m. Varje procent förbättring kommer i storskalig produktion spela roll och förändringarna bedöms kunna göras så att de går hand i hand med en proportionerligt sänkt klimatpåverkan som följd av en samtidigt förbättrad teknoekonomi. För bakgrund och ett bredare resonemang kring detta med synergier mellan förbättrad teknoekonomi och klimatpåverkan för kemiska processer, se fotnot 2.⁷

Rekommendationer kring framtida utvecklingsarbete diskuteras vidare under avsnitt 5 nedan.

4.3. Kort om produktifiering av sidoströmmar

Det övergripande valet av strategi för den kemiska processutvecklingen i detta projekt var som diskuteras ovan i inledningen (avsnitt 2 och Figur 1 och 2) att huvudmängden biprodukter totalt sett bildas i ett försockringssteg för lignocellulosa enligt strategi 1 i Figur 1, en strategi som har vissa möjliga fördelar som också diskuteras i avsnitt 2 ovan men som också bygger på att man parallellt med utveckling av processer från sockerplattformen identifierar processer som gör det möjligt att använda i försockringsprocessen bildat hydrolyslignin som startmaterial för användbara kemiska produkter.⁵

De enda biprodukter som i här praktiskt intressanta mängder observerats i processerna till målmolekyl 1 och 2 i Figur 3 och 4, är som nämnt ovan fasta fällningar som visserligen lätt separeras

⁷ Fotnot 2 och fotnot 5 i den rapporten resonerar en del kring kopplingen mellan låg klimatpåverkan och god teknoekonomi för kemiska processer i allmänhet med exempel.

bort från produktlösningen men som tyvärr består av en blandning av mer eller mindre polymera olösliga material som domineras av elementet kol och vars möjliga applikationsområden kräver ytterligare utredningsarbete som tyvärr inte rymts inom detta begränsade projekt. Utöver möjlig användning som jordförbättringsmedel eller för lokal förnyelsebar energiproduktion via förbränning, så kan det vara så att dessa fasta material kan användas som del av startmaterial som går in i katalytiska sk slurryvätebehandlingsprocesser för produktion av kolväten tillsammans med hydrolyslygninet från försöckningsprocessen vilka när det gäller hydrolyslygnin som startmaterial inledningsvis studerats inom Klimatledande Processindustris projektportfölj.⁵ Mer utvecklingsarbete krävs dock för att se om det är möjligt att förvätska de fasta biprodukterna från processerna enligt Figur 3 och 4 till kolväten under betingelser som liknar de som verkar fungera för hydrolyslygnin.⁵

5. AP 4. Framtidsrekommendationer

I detta avsnitt redovisas vidare utvecklingsbehov och andra aktiviteter som bedöms krävas för att komma vidare med de processer för tillverkning av målmolekylerna 1 och 2 som studerats i projektet. En hel del av de aktiviteter som föreslogs redan under förstudien² återstår att utföra och beskrivs delvis i denna rapport igen. Förstudien pekar också på en del andra aktiviteter som krävs för att optimera den totala processen, som vilka råvaror som ska användas för försöckring m m. Det har sedan tillkommit några föreslagna aktiviteter som följd av detta aktuella utvecklingsprojekt vars kanske viktigaste resultat är en mer detaljerad och precis förståelse av vidare utvecklingsbehov för processerna.

5.1. Vidare tekniska utvecklingsbehov

Nedan anges föreslagna aktiviteter som av projektgruppen bedömts nödvändiga för vidareutveckling av processerna för att nå en både förbättrad teknoekonomi och sänkt klimatpåverkan:

- Teknoekonomiska studier baserade på processsimuleringar i Aspen⁸ och andra simuleringsmjukvaror bör utföras för processerna i Figur 3 och 4 vare sig man får tillgång till redan utförda teknoekonomiska beräkningar och -utvärderingar från tidigare eller idag pågående EU-projekt (se 4.1 ovan) eller inte. Detta inkluderar som tidigare känslighetsanalyser mot olika parametrar såsom utbyte i förhållande till hemicellulosa/cellulosa/kolhydratmonomerhalten i utgångsmaterialet, typ av lignocellulosa som processen utgår ifrån, beräknade kapaciteter för valda processer, predikterad livstid för eventuella katalysatorer som används, effekten av möjliga produktionsscenarioer och processer för konvertering av sidoströmmar till säljbara produkter etc. Arbetet bör sedan förfinas i iteration med processutveckling och optimering från lab- till pilotskala. Modellerna som tas fram kan sedan tillåtas styra processutvecklings-arbetet mot optimal kostnadseffektivitet.
- Vidare optimering av katalysatorer, katalysatorladdning, lösningsmedelsval och -mängder samt reaktionsbetingelser för stegen i processerna i Figur 3 och 4 behövs. Detta kan ske först i labbskala, sedan validering i <10 L-skala följt av uppskalning i pilotskala iterativt med detaljerade teknoekonomiska studier. Optimering bör utföras med stöd av optimeringsmjukvaror som Modde™ för experimentell design och utvärdering.

⁸ För information om Aspen Plus kemisk processsimuleringsmjukvara, se <https://www.aspentech.com/en/products/engineering/aspen-plus>.

- Eventuellt bör studier på användning av en heterogen fast katalysator i steget till målmolekyl 2 som till skillnad från den vattenlösliga katalysator som används i processen i Figur 4 eventuellt är lättare att kvantitativt återvinna och recirkulera i processen utföras.
- Lösningssmedel 1 i Figur 3 bör sannolikt bytas ut mot ett mer termiskt stabilt lösningssmedel som dessutom är lättare att separera från målmolekyl 1 genom extraktion och/eller destillation som följd av en lägre kokpunkt.
- Design och optimering av flödesprocesser i rörformiga reaktorer med en antingen fast eller inlöst katalysator som pumpas tillsammans med reaktionslösningen genom en uppvärmd trycksatt zon bör undersökas för att nå en maximal kapacitet för båda processtegen och i och med det minimera investeringskostnaderna.
- Optimering av upprepningsmetoden för målmolekyl 1 framstår som det tydligaste vidare utvecklingsbehovet där möjligheten att utföra extraktionen i Figur 3 i kontinuerliga extraktionskolonner i stället för som på lab genom batchextraktion, har högsta prioritet. Med tanke på de data som erhållits under projektet bör detta fungera väl och kan då lösa problemet med stort behov av lösningssmedel 2, vars produktion verkar orsaka den klart största enskilda klimatpåverkan av samtliga studerade faktorer (se 4.2.1 och Figur 5).
 - Att hitta alternativ till lösningssmedel 2 ex vis i form av det förnyelsebara lösningssmedel 3 som används i processen till målmolekyl 2 i Figur 4 kommer sannolikt ytterligare sänka klimatpåverkan även om den viktigaste förändringen är att sänka lösningssmedelans användningen i processen enligt ovan.
 - Optimala lagrings- och transportbetingelser för den ganska känsliga målmolekyl 1 behöver tas fram. I det arbetet behövs även undersökas vidare om molekylerna helst ska transporteras som en lösning eller i ren form, renad antingen som den är eller som ett derivat där det senare kan vara mer värmetåligt och lagringsbeständigt.
- Produktion av kg-skaleprover för applikationstester som ex vis användning av erhållna kvaliteter av målmolekylerna 1 och 2 för produktion av önskade specialkemikalier tänkta att säljas på marknaden kan behöva utföras för att tidigt ringa in lämpliga kvalitetskrav och eventuella behov av förbättrad reningsmetodik.
- Freedom to operate (FTO) samt patenterbarhet kommer behöva utredas i samarbete med patentombud med syftet att skydda eventuell intellektuell egendom både kring processerna för tillverkning av målmolekylerna 1 och 2 men även för eventuella specialkemikalier som tillverkas från dessa.

5.2. Vidare utredning av klimatpåverkan

Följande aktiviteter föreslås:

- Djupare analyser av klimatpåverkan krävs för respektive steg i processerna i Figur 3 och 4 där emissioner, energiförbrukning, användning och distribution av råvaror inklusive katalysatorer, reagens, eventuella lösningssmedel och hjälpkemikalier, möjligheter för och krav på recirkulation av katalysatorer, lösningssmedel och kemikalier i processerna samt massbalanser och utströmmar utreds på nytt, gärna iterativt med processutvecklingsarbetet. Vidare behöver eventuella miljökonsekvenser av processer för konvertering av de fasta biprodukterna som kommer ut från processerna till säljbara produkter utredas och jämföras med att i stället använda dessa för lokal el- och värmeproduktion.
- Jämförande studier av klimatpåverkan för valda processer enligt Figur 3 och 4 mot processer som nyttjar fossil råvara för produktion av samma kemikalie kan eventuellt behöva utredas.

Miljökonsekvenserna av användning av förnyelsebar råvara från lignocellulosa i stället för fossil råvara är i många fall redan kända och väldigt positiva, där ett exempel är bioetanolproduktion på motsvarande volymsmässiga nivå som för produktion av kategorin specialkemikalier.⁹ I händelse av att specialkemikalien framställd från kolhydratströmmar ska ersätta en helt annan fossil kemikalie för samma applikation behöver man eventuellt jämföra tillverkningsprocesserna för dessa båda i stället.

- Jämförande analyser av miljökonsekvenser för olika scenarios för integration av processerna i existerande industriinfrastruktur behöver sannolikt utföras. I detta ingår förstås effekter av eventuella nödvändiga anläggningsinvesteringar för att genomföra integrationen.

5.3. Behov av vidare arbete kring Marknadsaspekter

Utöver de föreslagna aktiviteterna under 4.1 listas viktiga aktiviteter, som återstår att utföra och som inte rymdes inom detta projekt, i avsnitt 4.3 och mer specifikt i 4.3.1 och 4.3.3 i förstudierapporten i fotnot 2.

6. Acknowledgement

Projektets medlemmar tackar Johanneberg Science Park och satsningen Klimatledande Processindustri som finansieras av Vinnova, Västra Götalandsregionen och medlemmarna inom det Västsvenska Kemi- och Materialklustret för möjligheten att genomföra arbetet. Projektet tackar även Högskolan i Borås, RISE AB, IVL Svenska Miljöinstitutet, Chalmers Industriteknik, Chalmers Tekniska Högskola, Perstorp AB och Södra som lagt in egen tid i projektet, något som också varit nödvändigt för genomförandet.

⁹ Se exempelvis i Jönsson, L.J., (Ed), Skogskemi – Sugar Platform. Sub project report to the Skogskemi project. The Skogskemi Project, Örnsköldsvik, Sweden: SP Processum AB, 2014. På sidan 42 i rapporten anges minskningen i växthusgasutsläppen till 73% för produktion och användning av bioetanol från lignocellulosa på volymnivån 100 Kton per år jämfört med fossila alternativ. Rapporten finns tillgänglig via https://www.processum.se/images/dokument/Ovrigt/Sugar_platform.pdf.