



Klimatledande Processindustri, Insatsområde Förnybart: Projekt 4.2.1 Förstudie Möjliga Målmolekyler från Sockerplattformen

En öppen sammanfattningsrapport med föreslagen färdplan

Författare: RISE AB/Martin Hedberg; Chalmers Industriteknik/Marie-Louise Lagerstedt Eidrup och Johan Bengtsson; Chalmers Tekniska Högskola/Derek Creaser och Louise Olsson; Högskolan i Borås/Mikael Skrifvars; Perstorp AB/Oleg Pajalic; Södra/Fredrik Solhage och Jim Parkås samt IVL Svenska Miljöinstitutet/Josefin Gunnarsson 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	6
3. MÖJLIGA MÅLMOLEKYLER FRÅN SOCKERPLATTFORMEN – RESULTAT OCH DISKUSSION	7
3.1. STATUS FÖR KEMISKA PROCESSER FÖR TILLVERKNING	7
3.2. APPLIKATIONER FÖR FALLSTUDIEMOLEKYLERNAS.....	8
3.3. MARKNADSANALYSER FÖR FALLSTUDIEMOLEKYLERNAS	9
3.4. RÅVARUTILLGÄNGLIGHET FÖR PRODUKTION AV FALLSTUDIEMOLEKYLERNAS	10
3.5. MILJÖPÅVERKAN AV PROCESSER FÖR FRAMSTÄLLNING AV FALLSTUDIEMOLEKYLERNAS.....	12
4. FÖRESLAGEN FÄRDPLAN GÄLLANDE PRODUKTION AV SPECIALKEMIKALIER VIA DIREKT KEMISK KONVERTERING AV RELEVANTA KOLHYDRATSTRÖMMAR	13
4.1. VIDARE TEKNISKA UTVECKLINGSBEHOV FÖR TILLVERKNINGSPROCESSERNA	13
4.1.1. <i>Vidareutveckling av processkemin/processsteknologier.....</i>	<i>13</i>
4.1.2. <i>Föreslagna aktiviteter för teknisk (vidare)utveckling av processer enligt strategi 1 och 2 i Figur 1</i>	<i>14</i>
4.2. AKTIVITETER KRING EXISTERANDE OCH NYA MÖJLIGA APPLIKATIONER	15
4.3. RÅVARUTILLGÄNGLIGHET, MILJÖPÅVERKAN OCH POTENTIELLA VÄRDEKEDJOR.....	16
4.3.1. <i>Föreslagna aktiviteter för vidare karakterisering av råvarutillgänglighet.....</i>	<i>16</i>
4.3.2. <i>Föreslagna aktiviteter angående utredning av miljöpåverkan för produktionsprocesser</i>	<i>17</i>
4.3.3. <i>Föreslagna aktiviteter kring karakterisering av värdekedjor för valda specialkemikalier</i>	<i>17</i>
5. ACKNOWLEDGEMENT	18

1. Kort sammanfattning av rapporten

Inom denna förstudie har det, med syftet att utforma en färdplan för produktion av prioriterade mål-molekyler från för Västsvenska Kemi- och Materialklustret relevanta kolhydratströmmar inom kategorin *specialkemikalier*, d v s kemikalier som tillverkas i årliga volymer om maximalt runt hundra kton, valts ut tre fallstudiemolekyler att studera och karakterisera. Karakteriseringen gjordes m a p tillverkningsprocessernas processkemiska och -tekniska status, applikationer för molekylerna, marknadsaspekter, miljömässiga aspekter på deras produktion samt en del om förutsättningarna för att försörja produktionsprocesserna med relevanta kolhydratströmmar från skogsråvara eller andra lignocellulosabaserade råvaruströmmar. På grund av sekretess går denna rapport inte in på vilka dessa tre molekyler är i detalj utan kommenterar allmänt kring hur förstudien genomförts, vilka slutsatser som dragits och innehållet i en föreslagen färdplan för den mer generella kategegorin specialkemikalier framställda från relevanta kolydratströmmar. Fallstudiemolekylerna valdes ut så att det finns förhållandevis mycket publicerad information om molekylerna, hur de tillverkas, möjliga applikationer etc. En tillhör kategorin industriellt intressanta plattformskemikalier d v s intermediat för produktion av en mängd andra relevanta kemiska produkter, en är en monomer för tillverkning av förnyelsebara plaster, andra polymerer och kompositer, och den tredje är en produkt i sig samt ett intermediat för produktion av en rad andra kemikalier och produkter. En konfidentiell rapport, som endast parterna som skrivit på det projektrelaterade avtalet kan ta del av, avrapporterar förstudien i sin helhet. Förstudien har letts av RISE AB, och har genomförts tillsammans med expertis inom en rad olika områden från RISE AB, Chalmers Industriteknik, Chalmers Tekniska Högskola, Högskolan i Borås, IVL Svenska Miljöinstitutet, Perstorp AB och Södra.

Övergripande slutsatser från förstudien är följande:

- Resultaten från undersökningen av processkemisk och produktionsteknisk status visar att själva tillverkningsprocesserna, i den form de beskrivs i ett stort antal olika patent och tidskriftspublikationer, inte är tillräckligt mogna för fullskalig industriell produktion och att det finns en rad tekniska vidareutvecklingsbehov. Övergripande skäl till detta diskuteras mer i detalj nedan under avsnitt 3.1 och föreslagna åtgärder för att möta vidareutvecklingsbehoven diskuteras under avsnitt 4.1.
- För att förbättra processernas ekonomi behöver man sannolikt, trots relativt höga priser och vinstmarginaler för kategorin specialkemikalier, se till att ofrånkomliga sidoströmmar som bildas vid processernas olika delsteg (se schematisk illustration i Figur 1 under kapitel 2) också konverteras till säljbara produkter i ett bioraffinaderikoncept, istället för att använda sidoströmmarna för el- och värmeproduktion genom förbränning.
- Gällande applikationer finns ett mycket stort antal varianter att välja bland för specialkemikalier tillverkade från kolhydratströmmar, i vissa fall kombinerat med möjligheter till en grön premie på försäljning.
- Trots ett stort intresse och en förhållandevis omfattande forskning och utveckling kring processer för tillverkning av fallstudiemolekylerna inom akademi och industri som resulterat i många publikationer, patent etc, bekräftar utförda marknadsanalyser bilden att produktionen, sannolikt som följd av underutvecklad tillverkningsteknologi, inte nått relevanta produktionsvolymer. Man bör dock i sammanhanget komma ihåg att jämfört med mängden forskning som lagts på petrokemiska processer från fossil råvara i oljeindustrin, kan investeringarna i forskning och utveckling av förnyelsebara alternativ hittills ses som små till måttliga.

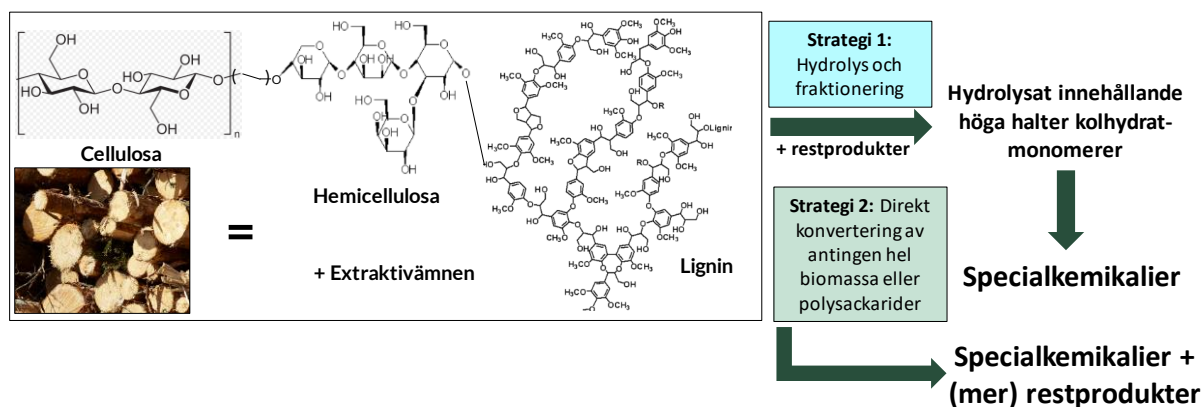
Färdplanen som redovisas i kapitel 4 föreslår en rad åtgärder för att möta vidare tekniska utvecklingsbehov för tillverkningsprocesserna, aktiviteter kring existerande och nya möjliga applikationer för valda specialkemikalier samt en rad aktiviteter på vägen mot fungerande värdekedjor för specialkemikalier från relevanta kolhydratströmmar hela vägen från hel lignocellulosa till färdig produkt.

2. Introduktion

Denna förstudie är tänkt att innebära starten för aktiviteter som ska leda till identifiering av valda industriellt relevanta mål molekyler som kan framställas av aktörer verksamma inom Västsvenska Kemi- och Materialklustret direkt från sockerplattformen d v s från valda kolhydratströmmar från främst vedråvara, restströmmar från pappers- och massaindustri, sågverk och/eller ev annan relevant lignocellulosa. Förstudiens uppgift har varit att generera en färdplan för produktion av prioriterade mål molekyler från relevanta kolhydratströmmar inom kategorin specialkemikalier d v s kemikalier som tillverkas i volymer om maximalt ca hundra kton och som utgörs av en mycket stor grupp rena ämnen eller blandningar som kan användas som ingredienser i exempelvis: Färg, lacker och limmer; agrokemikalier (herbicer, pesticider m fl); surfaktanter; livsmedelstillsatser eller fodertillsatser till djur; mjukgörare av olika slag; olika typer av reologimodifierande ämnen, t ex emulgeringsmedel som kan användas i salvor och kosmetika; doft-, smak- och färgämnen inom livsmedelssektorn; monomerer till specialpolymerer och kompositmaterial; basoljor; kemikalier som används i bygg- och konstruktionssektorn eller inom vattenrening och elektronikindustrin m m. Ämnenas kilopriser samt vinstmarginaler på försäljning kan vara signifikant högre än för bulkkemikalier från ex vis petrokemisk industri, en situation som åtminstone i vissa fall bedöms kunna förbättras ytterligare som följd av möjligheten att ta ut en grön premie. Förstudien har valt att inte studera kemikalier framställda via bioprocesser (fermentation).

I Figur 1 visas schematiskt de två övergripande strategier som undersökts för direkt kemisk konvertering av antingen försockrad (hydrolyserad) lignocellulosa (Strategi 1, Figur 1) eller 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. Perstorp och Södra, båda aktiva deltagare i förstudien, är intresserade av specialkemikalimarknaden och nya möjligheter inom denna bl a tack vare att volymer och affärsmodeller för denna kategori kemikalier passar deras produktionsinfrastruktur. När det gäller framför allt Perstorp AB så är man redan verksam i segmentet, dock i dagsläget utgående från andra typer av råvaror än som diskuteras i denna rapport. Ekonomiskt kan specialkemikalier, framställda genom direkt konvertering av relevanta kolhydratströmmar, utgöra viktiga komplement till produktion av förnyelsebara versioner av för Västsvenska Kemi- och Materialklustret viktiga bulkråvaror från lignocellulosa/sockerplattformen (och/eller från andra källor som ex vis power to chemicals) såsom enkla olefiner (eten, propen etc), metanol och syntesgas. Förutsättningar för att ersätta klustrets nuvarande fossila råvaror för produktion av olefiner, metanol och syntesgas med samma molekyler fast framställda från bioråvaror via sockerplattformen, utreds i andra delprojekt inom Klimatledande Processindustri och har även utretts tidigare ex vis som del av det s k Skogskemiprojektet.¹

¹ a) Projekt 4.2.2 Bioeten Konzeptutveckling inom Klimatledande Processindustri utreder bioeten från förnyelsebar råvara och b) Rapporter från Skogskemiprojektet tillgängliga via



Figur 1. Schematisk illustration av olika strategier för direkt konvertering av kolhydraterna i lignocellulosa till special- eller andra kemikalier. Den första strategin innebär inledande fraktionering och försökring innan vidare konvertering till önskade mål molekyler, medan den andra strategin innebär direkt konvertering av antingen hel biomassa eller fraktioner av polysackariderna cellulosa och/eller hemicellulosa till önskade mål molekyler.

I slutet av 2019 definierades inom förstudien tre kommersiellt relevanta molekyler som kan tillverkas från olika typer av kolhydratströmmar via direkt kemisk konvertering enligt antingen Strategi 1 eller 2 i Figur 1 som lämpliga fallstudier med målet att ta fram en färdplan för specialkemalieproduktion från relevanta kolhydratströmmar (se mer under kapitel 4). Urvalet bland många potentiella kandidater baserades på följande (p g a sekretess så redovisas inte här vilka molekyler det rör sig om):

- Förhållandevis mycket publicerad information finns om fallstudiemolekylerna, hur de hittills tillverkats i akademisk och patentlitteratur, möjliga applikationer etc.
- En av molekylerna tillhör kategorin industriellt intressanta plattformskemikalier d v s intermediet för produktion av en mängd andra relevanta kemiska produkter, en är en monomer för tillverkning av förnyelsebara plaster, andra polymerer och kompositmaterial, med potential att i en framtid bli en storskalig bulkkemikalie, och den tredje är en produkt i sig samt ett intermediet för produktion av en rad andra kemikalier och produkter.

I arbetet ingick en fokuserad kartläggning av dessa tre molekylers status avseende tillverkningsteknologier, befintliga såväl som potentiella applikationer, marknadsaspekter m m. Under avsnitt 2.2 redovisas vilka aspekter som undersökts med syftet att utforma en färdplan, som adresserar vidare behov av utvecklingsarbete för valda mål molekyler inom kategorin specialkemikalier. Slutsatserna och färdplanen anses p g a viktiga likheter gällande kombinationer av enhetsoperationer som används i tillverkningsprocesserna för framställning av en mängd olika specialkemikalier från kolhydratströmmar såsom ett katalytisk reaktionssteg, extraktion, destillation m fl enhetsoperationer, vara av värde även för andra molekyler än fallstudiemolekylerna. Fullständig avrapportering av arbetet kring fallstudiemolekylerna och en mer detaljerad beskrivning av processkemi och -teknikstatus för tillverkning, applikationer, marknads- och råvaruaspekter, miljöpåverkan samt färdplanen, finns i form av en projektintern konfidentiell rapport som endast parterna som skrivit på projektrelaterade avtal kan ta del av.

2.1. Deltagare i projektet

I förstudien arbetade följande parter: RISE Research Institutes of Sweden AB (RISE, representanter Martin Hedberg och Tobias Ankner från avdelningen Kemiska Processer och Läkemedel, RISE KPL), Chalmers Industriteknik (CIT, Marie-Louise Lagerstedt Eidrup och Johan Bengtsson), Chalmers Tekniska Högskola (Chalmers, Derek Creaser och Louise Olsson), Högskolan i Borås (HB, Mikael Skrifvars), Perstorp AB (Oleg Pajalic), Södra (Fredrik Solhage och Jim Parkås) och IVL Svenska Miljöinstitutet (IVL, Tomas Rydberg och Josefin Gunnarsson). Södras och Perstorps roll har främst varit att komma med förslag och feedback på strategier, mål, slutsatser m m i förstudien medan övriga utfört specifika utredningsuppdrag för att leverera helheten. Förstudien har koordinerats av RISE och projektledare Martin Hedberg.

2.2. Arbetsmetodik

I arbetet med att generera en färdplan gällande att på sikt etablera produktion av kemikalier tillhörande kategorin specialkemikalier framställda från valda kolhydratströmmar genom direkt kemisk konvertering, har huvudsakligen följande aspekter studerats utgående från de valda fallstudiemolekylerna:

- *Litteraturstudier avseende status för kemiska processer för tillverkning*: En mängd olika kemiska processer för tillverkning av fallstudiemolekylerna som antingen beskrivs i patentlitteraturen eller i akademiska tidskriftsartiklar, har kritiskt bedömts m a p processkemisk och produktionsteknisk status och industriell potential för fullskalig produktion. Detta med målet att förstå om det åtminstone delvis finns tekniska/teknoeconomiska orsaker till att molekylerna ännu inte nått kommersiell produktion trots betydande forsknings- och utvecklingsinsatser både inom akademi och industri under de senaste decennierna. Litteratursökningarna har utförts med hjälp av 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. Ansvarig utförare: RISE och Chalmers med input från Södra och Perstorp.
- *Applikationer för fallstudiemolekylerna*: Potentiella och befintliga industriella tillämpningar för fallstudiemolekylerna har undersökts, bedömts och sammanfattats efter litteraturstudier i delvis samma databaser som ovan. Ansvarig utförare: HB med input från Södra och Perstorp.
- *Marknadsanalyser för fallstudiemolekylerna*: Affärs-, utvecklings- och marknadsförhållanden för fallstudiemolekylerna har bedömts med inriktning på den nuvarande situationen. Information om kommersiella producenter, anläggningar, produktionsvolym och pris har inhämtats i den mån sådan information funnits tillgänglig. Bedömningarna baserar sig på öppen information från olika källor men också på förfrågningar om ex vis prisuppgifter från valda leverantörer. Ansvarig utförare: CIT med input från Södra och Perstorp.
- *Råvarutillgänglighet för produktion av fallstudiemolekylerna*: Tillgängligheten på relevanta kolhydratströmmar som kan användas som startmaterial för specialkemikalieproduktion har undersökts, till stor del utifrån data från andra tidigare genomförda projekt.² Ansvarig utförare: IVL med input från Södra och Perstorp.
- *Miljöpåverkan av fallstudiemolekylerna*: Miljöpåverkan av produktionen av fallstudiemolekylerna har preliminärt bedömts genom sammanställning av information från

² Se t ex i *Tillgång på skogsråvara – sammanfattning och scenarier – en förstudie*, skriven av Gustav Sandin, Therese Sahlén Zetterberg och Tomas Rydberg, <https://www.johannebergsciencepark.com/node/17777>.

livscykelanalyser (LCA), tillgängliga som öppen information främst i vetenskapliga tidskriftsartiklar men även andra källor vilka identifierats via databassökningar. Ansvarig utförare: IVL med input från Södra och Perstorp.

3. Möjliga mål molekyler från sockerplattformen – Resultat och Diskussion

3.1. Status för kemiska processer för tillverkning

Huvudsakliga slutsatser efter genomgång av ett stort antal publicerade processer för fallstudiemolekylerna, utförd av RISE KPL och Chalmers, i syfte att analysera processernas potential för fullskalig produktion redovisas kortfattat nedan. Processerna som undersökts följer alla en av de två strategierna beskrivna i Figur 1. Resultaten anses på ett generellt sett liknande krav på processer utgående från antingen hel lignocellulosa (inklusive bark och andra sidoströmmar från skogsbruk, jordbruk och pappers- och massaindustrin, icke hydrolyserade polysackarider som ex vis cellulosa, hemicellulosa) eller från kolhydratmonomer (som ex vis glukos), gälla även för en rad andra möjliga mål molekyler från sockerplattformen. Detta även om förstudiens omfattning inte kan täcka den stora bredd av molekyler som kan produceras från dessa råvaruslag.

- *Technology readiness level (TRL-nivå) för tillverkningsprocesserna:* Resultaten från undersökningen av processkemisk och produktionsteknisk status visar att själva tillverkningsprocesserna som de beskrivs i prior art inte, i den form de redovisas, är tillräckligt mogna för fullskalig industriell produktion. Detta då det finns en rad tekniska vidareutvecklingsbehov för att nå en konkurrenskraftig tillämpning i kommersiell produktionsskala, något som ytterligare stöds av ex vis inhämtade prisuppgifter för inköp av provmängder eller större mängder produkt från tillverkningsprocesserna (se även avsnitt 3.3). Övergripande verkar skälen till de låga TRL-nivåerna vara en kombination av främst följande förhållanden:
 - Processerna är kemiskt förhållandevis komplexa och arbetar i många fall med hög utspädning för att undertrycka en rad möjliga sidoreaktioner och/eller katalysatordeaktivering, vilket leder till relativt låg produktionskapacitet och dålig robusthet för drift under längre perioder. Trots att betydande forsknings- och utvecklingsinsatser genomförts framstår det tydligt att vidareutvecklingsbehov finns för processerna i den form de redovisas i litteraturen. Det framgår också tydligt att behov finns av grundforskning på nya koncept för vidareutveckling, som gör att man kommer ifrån fundamentala problem med ex vis katalysatordeaktivering, låg produktionskapacitet eller behov av komplexa upprenings- och reningsprocesser.
 - Processerna nyttjar i en del fall komplicerade och i sammanhanget relativt kostsamma reningsmetoder för att nå önskad kvalitet hos produkterna. I vissa fall är orsaken till detta åtminstone delvis relativt ogynnsamma fysikalisk-kemiska egenskaper hos produkten, såsom hög vattenlöslighet (vilket kan försvåra extraktiv rening), låg smältpunkt (vilket försvårar rening genom kristallisation), hög kokpunkt i kombination med låg termisk stabilitet (vilket försvårar rening genom destillation). Vidare är orsaken en i vissa fall låg termisk och kemisk stabilitet hos intermediet i processen, som leder till sidoreaktioner som i sin tur leder till utbytesförluster och att upprening av önskad produkt kan bli mer komplicerad. Mer teknoekonomiskt attraktiva uppreningsmetoder har i denna förstudie identifierats som det kanske allra viktigaste fokusområdet för vidare utvecklingsarbete (se mer under kapitel 4).

- Processer för direkt konvertering av framförallt hel biomassa men i viss mån även polysackarider som cellulosa/hemi-cellulosa (strategi två i Figur 1) genererar ofrånkomligen varierande och ibland större mängder avfall/sidoströmmar. Om man först försöcker lignocellulosa³ för vidare konvertering av kolhydratmonomerer enligt Strategi 1, erhålls även en hel del sidoströmmar ex vis från försöckningsprocessen.⁴ Processer enligt båda strategierna, dock kanske allra tydligast för strategi 2, genererar viktmsässigt väsentligt mer avfall per kg produkt än de i dagsläget mer utvecklade och integrerade petrokemiska processer⁵ som målmolekylerna är tänkta att ersätta. Även om specialkemikalier tillverkas i mängder om upp till ca 100 kton, vilket gör att ex vis miljöpåverkan från processerna blir relativt begränsad och att avfallet är förnyelsebart till skillnad från petrokemiskt avfall med fossilt ursprung, behövs utvecklingsarbete för att se till att dessa sidoströmmar oavsett strategi (1 eller 2) kan omvandlas till säljbara produkter. Att använda dessa processrelaterade avfallsströmmar som råvara endast för lokal el- och/eller värmeproduktion bedöms sannolikt ge för dålig lönsamhet.

Sammanfattningsvis är det inte konstigt att mer utvecklingsarbete ser ut att behövas för processerna ovan, eftersom petrokemisk industri från och med tidigt nittonhundratals och framåt har utvecklats och optimerats under många årtionden efter fossila råvarors och produkters egenskaper genom hela värdekedjor.

3.2. Applikationer för fallstudiemolekylerna

Högskolan i Borås har undersökt möjliga applikationer för fallstudiemolekylerna genom fokuserade litteraturstudier med viss tonvikt mot olika polymermaterial och specialpolymerer. Specialkemikalier är oavsett råvarubas oftast organiska molekyler, dvs kolföreningar vilka som nämns ovan antingen används som rena ämnen eller ingår i blandningar, och de har användningsområden som kortfattat sammanfattas under kapitel 2. De ska uppvisa en önskad prestanda eller funktionalitet som kan utnyttjas i en slutprodukt, och en utmaning för deras tillverkningsprocesser är att olika applikationer för samma molekyl eller blandning kan ha både starkt varierande marknadsförutsättningar och helt olika krav gällande ex vis kvalitetsaspekter (såsom renhet, halt, pris, föroreningsprofil eller volymsbehov). I detta finns också stora möjligheter att utifrån lokala förutsättningar hos ex vis aktörer inom det Västsvenska Kemi- och Materialklustret anpassa val av målmolekyler och tillverkningsprocesser för dessa till såväl nya som mer etablerade och optimerade produktions- och värdekedjor, något som diskuteras i färdplanen i kapitel 4.

Gemensamt för fallstudiemolekylerna i denna förstudie är att de kan framställas från kolhydratströmmar från ex vis olika typer av lignocellulosa eller andra råvaror. Därmed kan applikationerna för molekyler sökas inom de produktområden där det finns störst behov av, och intresse för, att ersätta icke förnybara kemikalier med motsvarande förnybara. Viljan hos marknaden att betala en

³ Ett stort antal metoder för försöckring 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 försöckring av lignocellulosa se i T. M. Størker *et al. Energy Procedia*, **2012**, *20*, 50.

⁴ Ett exempel på sidoström som erhålls vid försöckring av lignocellulosa är sk hydrolyslignin, ett material som är och har varit föremål för en hel del forskning avseende förädlingsstrategier. Ett exempel på en nyare översikts-artikel om olika strategier för ligninförädling anges här: H. Wang *et al. Bioresource Technology*, **2019**, *271*, 449.

⁵ Vissa petrokemiska processer är så pass utvecklade också med avseende på hur eventuella sidoströmmar tas om hand att processerna närmar sig läget att inget kemiskt avfall bildas i produktionsprocessen dvs de har en E-faktor nära noll. E-faktor som mått på processers effektivitet diskuteras ex vis i R. A. Sheldon *The E-factor 25 years on: the rise of green chemistry and sustainability, Green Chem.* **2017**, *19*, 28-43.

grön premie för de produkter som framställs från målmolekylerna behöver också finnas. De flesta produktsegment som kortfattat beskrivs under kapitel 2 är dock intressanta som följd av att de flesta tillverkare idag har egna väl definierade hållbarhetsmål, inklusive att bli koldioxidneutrala inom en nära förestående framtid.

En av de huvudsakliga slutsatserna som dragits efter arbetet med fallstudiemolekylernas applikationer, är att det för vissa molekyler framställda från kolhydratströmmar redan finns en hel del intressant och långtgående forskning och utveckling gjord avseende industriellt relevanta tillämpningar inom olika branscher. En annan slutsats är att det finns stora möjligheter för utveckling av anpassade värdekedjor för specialkemikalier som kan framställas från kolhydratinnehållande restströmmar från skogsbruk, jordbruk, pappers- och massaindustri samt sågverk för hela kedjan från råvaruproducenter, kemikalieproducenter och aktörer som vidareförädlar till kunder för de färdiga slutprodukterna. Ett exempel på en sådan värdekedja skulle t ex kunna vara att en aktör producerar kolhydratströmmar från restprodukter från pappers- och massabruket enligt Strategi 1 i Figur 1, vilken efter ev lokal rening transporteras till nästa aktör i form av en kemikalieproducent som har redan existerande kemisk produktionsinfrastruktur. Där omsätts kolhydratströmmarna till en målmolekyl i form av en förnyelsebar monomer som antingen omsätts vidare lokalt eller som kan transporteras vidare till en producent av ex vis värmehärdande elastomerer för vilka monomeren är ett startmaterial. Alternativt integreras monomerproduktionen direkt med infrastrukturen hos producenten av kolhydratströmmarna via nyinvesteringar i produktionsutrustning. Andra exempel på applikationer som utifrån fallstudiemolekylerna framstår som mer relevanta att studera vidare (se nedan i 4.2 och 4.3) är produktion av intermediet för andra produkter (plattformkemikalier), mjukgörare för plast- och polymermaterial och monomerer för framställning av härdplaster och specialpolymerer.

Val av applikation och tillhörande målmolekyl bör även baseras på synergieffekter, såsom att introduktionen av en ny målmolekyl stödjer redan existerande produktion, och/eller att introduktionen möjliggör samintroduktion av andra nya biobaserade material eller kemikalier. Föreslagna aktiviteter i färdplanen för att definiera fungerande värdekedjor och affärsmodeller beskrivs under avsnitt 4.2 nedan.

3.3. Marknadsanalyser för fallstudiemolekylerna

CIT har som del av arbetet fokuserat undersökt mer eller mindre utvecklade kommersiella tillämpningar av de tre fallstudiemolekyler som förstudien valde ut enligt ovan. Information om aktuella och möjliga framtida kommersiella producenter, produktionsanläggningar, produktionsvolym och pris om det finns tillgängligt har samlats in liksom information om pågående utvecklingsaktiviteter globalt gällande tillverkning och applikationer för molekylerna. Pågående utvecklingsaktiviteter innefattar även delvis offentligt finansierade forsknings- och utvecklingsprojekt och information från dessa. Betydligt mer arbete än förstudien medgivit skulle behövas för en mer fullständig kartläggning, men vissa slutsatser kan dras redan från denna relativt begränsade studie.

De huvudsakliga slutsatserna är att trots det stora intresset och volymen av finansierad forskning kring processer för tillverkning av fallstudiemolekylerna (med pågående verksamhet inom akademi och industri som resulterar i många publikationer, patent etc), så finns det fortfarande starkt begränsad tillgång till kommersiella volymer av målmolekylerna. Övergripande bekräftas bilden som diskuteras under avsnitt 3.1, d v s att förhållandena är en följd av att tillverkningsteknologin ännu inte är mogen och tillräckligt effektiv i förhållande till fossila kemikalier med samma/liknande tillämpningsområden, och därför är viljan att investera i produktionsanläggningar totalt sett

fortfarande liten men på sikt sannolikt växande. Små tillverkningsvolymen leder till höga prisnivåer, vilket minskar intresset från marknaden och därmed motverkar övergången till de förnyelsebara alternativen framställda från kolhydratströmmar. Under kapitel 4 nedan diskuteras möjliga åtgärder för att kunna bryta mönstret och komma vidare.

3.4. Råvarutillgänglighet för produktion av fallstudiemolekylerna

IVL har i denna del av förstudien arbetat med att identifiera möjliga svenska lignocellulosabaserade råvaruströmmar som skulle kunna användas för att producera specialkemikalier från initialt producerade kolhydratströmmar eller direkt från hel biomassa eller cellulosa/hemicellulosa enligt strategierna i Figur 1. Arbetet har genomförts genom att studera publikationer, forskningsrapporter och patent inklusive valda sådana dokument kring fallstudiemolekylerna och dessa har sedan bedömts med avseende på tekniska, ekonomiska och miljömässiga prestanda för möjliga intressanta råvaruströmmar och processvägar varav miljömässiga aspekter diskuteras under avsnitt 3.5. Möjligheten att använda jordbruksprodukter som stärkelse eller sukros som startmaterial i stället har inte utretts p g a förmodade problem att använda dessa typer av råvaror för kemikalieproduktion i konkurrens med livsmedelsproduktion.⁶

Tillgängligheten av lignocellulosabaserade strömmar för att producera specialkemikalier avgörs liksom för alla andra möjliga råvaror, fossila eller förnyelsebara, förutom av fysisk tillgång mycket av vilka priser för råvarorna som med rimlig lönsamhet kan tolereras av de värdekedjor som genererar säljbara produkter. En naturlig analys i dagsläget åtminstone för lignocellulosabaserade restströmmar som grenar, rötter och toppar (GROT), stubbar eller andra restströmmar (se nedan i Tabell 1 för i förstudien undersökta råvaror), är att användningen av kolhydratinnehållet i lignocellulosa för specialkemikalieproduktion kommer ske i konkurrens med ex vis energiproduktion genom direkt förbränning av hel biomassa där priset för råvarorna sätts främst baserat på energiinnehåll och energipriser. Möjligheter till att kunna ta ut högre priser för användningen av råvaran för andra ändamål innebär dels ex vis att sågspån som idag till stor del används för direkt förbränning eller för tillverkning av pellets för förbränning, p g a sin låga askhalt och relativt höga halt av kolhydrater, i stället kan användas för direkt konvertering till specialkemikalier enligt strategi 1 eller 2, men även att idag till stor del outnyttjade råvaruströmmar som ex vis visserligen tillgänglig men geografiskt relativt utspridd GROT i Norrland,² kan bli lönsamma att exploatera. Mängderna av den senare råvaran har i en relativt nyligen genomförd studie uppskattats på nationell nivå till ca 10–17 TWh (motsvarar ungefär 3-4 miljoner ton), mängder som idag lämnas kvar i skogen.² Tillsammans med ex vis GROT kan biflöden och restflöden i produktionssystemet som idag inte blir sågat virke, massa eller papper, samt även vissa avfallsströmmar (se Tabell 1), läggas till poolen av möjliga råvaruströmmar för försökring eller direkt användning i kemikalieproduktion enligt strategierna i Figur 1.

IVL har i förstudien fallstudier fokuserat på framställning av målmolekylerna via strategi 1 i Figur 1, d v s där startmaterialen för det steg som framställer vald specialkemikalie utgörs av blandade hexoser som framställts från lignocellulosa via olika vägar från främst barrved genom hydrolys som ett separat produktionssteg. Naturligt blir då halten av cellulosa och hemicellulosa också en viktig parameter för vilka råvaruströmmar som i första hand rekommenderas för användning inom

⁶ Food vs Chemicals diskuteras till exempel i följande dokument: Michael Carus och Lara Dammer från Nova-Institut GmbH *Food or non-food: Which agricultural feedstocks are best for industrial uses?*, tillgänglig via <http://bio-based.eu/> och https://www.corbion.com/media/255503/13-07_food_or_non-food_nova-paper2.pdf.

kemikalieproduktion. Lövträd som björk och asp finns också tillgängliga i stora mängder men utgör ett specialfall eftersom hemicellulosabaserade reströmmar från användning av dessa i pappers- och massaindustri främst ger femkolssocker (pentoser) i stället för hexoser, något som begränsar deras användning för specialkemikalieproduktion till ett mindre men fortfarande relevant urval produkter.

Sammanfattningsvis, så pekar förstudiens bedömning mot användandet av fiberslam, pappers- och kartongavfall som bra råvarualternativ vilka tillsammans finns tillgängliga i tillräckliga mängder för produktion av relevanta volymer av två till fyra specialkemikalier i ett första steg. Rekommendationen bygger, förutom på en i dagsläget låg konkurrens om dessa sidovfallströmmar, på att förhållandevis lite förbehandling krävs och att förhållandevis högt utbyte kan erhållas för processer enligt Figur 1. Fiberslam som enskild ström finns tillgänglig för produktion av relevanta årsvolymer av endast ca en specialkemikalie och därför finns det ett behov av kompletterande strömmar med liknande relativt enkla förbehandlingsbehov som pappers- och kartongavfall. Krävs sedan ytterligare volymer till attraktiva priser kan sågspån, GROT och bark vara bra alternativ i nämnd ordning där sågspån har högre kolhydrathalt och lägre askhalt än ex vis GROT.

Tabell 1: I nuläget teoretiskt tillgängliga cellulosa-/hemicellulosaströmmar, givet i kiloton per år. I referenserna finns mer detaljer kring råvaruströmmarna.

Råvara	Tillgänglig råvara (kiloton/år)	Tillgängliga kolhydrater (kiloton/år)	Referenser
Fiberslam från sulfittmassabruk	14	7 ^(a)	7
Vätskeströmmar från sulfittmassabruk	1300	21 ^(b)	7
Fiberslam från sulfatmassabruk	154	77 ^(a)	8, 9
Papper- och kartongavfall	1100	550 ^(a)	10
Bark	1200	300 ^(c)	11
Träavfall	2000	1000 ^(a)	10
Kommunalt fast avfall och liknande	5400	1350 ^(d)	10
Restflöden från sågverk (spån och flis)	4320	2160 ^(a)	12

^a Antagande om 50% kolhydrater. ^b 8% fasta ämnen, 20% av den fasta fraktionen är kolhydrater. ^c Antagande om 25% kolhydrater. ^d Antagande om 50% biobaserat avfall, och 50% kolhydratinnehåll i detta.

⁷ Miljörapport för massabruken vid Nymölla, Säffle, Domsjö.

⁸ *Massaproduktion och handel*, Skogsindustrierna, available at: <https://www.skogsindustrierna.se/om-skogsindustrin/branschstatistik/massa-produktion-och-handel/>.

⁹ Björn, A., Borgström, Y., Ejlertsson, J., Karlsson, A., Nilsson, F., Svensson, B. Biogasproduktion inom svensk pappers- och massaproduktion. Syntes av möjligheter och begränsningar samt teknisk utvärdering. Available at: <https://liu.diva-portal.org/smash/get/diva2:919578/FULLTEXT01.pdf>

¹⁰ Rydberg, T., Nilsson, J. (2019) *Cirkulär bioekonomi – omvärld och trender*. IVL Svenska miljöinstitutet, C388.

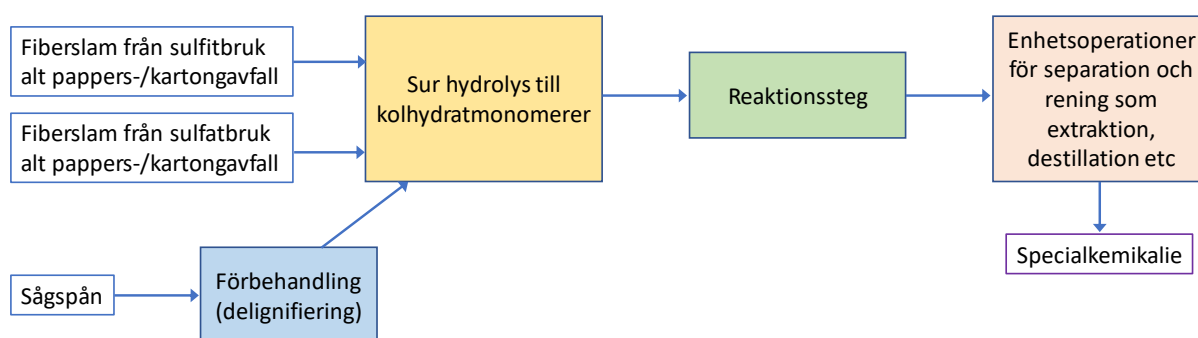
¹¹ Franko, B, Galbe, M & Wallberg, O 2015, *Influence of bark on fuel ethanol production from steam-pretreated spruce* Biotechnology for Biofuels, vol. 8, 15. <https://doi.org/10.1186/s13068-015-0199-x>.

¹² Staffas, L. Hansen, K. Sidvall, A. Munthe, J. (2015) Råvaruströmmar från skogen – tillgång och samband. IVL Svenska Miljöinstitutet (Rapport nr. C116)

3.5. Miljöpåverkan av processer för framställning av fallstudiemolekylerna

En initial kvalitativ miljöbedömning har gjorts av IVL, där effekterna av processrelaterade parametrar som typ av råvara, förbehandling och/eller efterbehandlingskrav, utbyte både för förbehandlings- och produktionsprocesserna för fallstudiemolekylerna samt processbetingelser (temperatur, katalysatormängd och reaktivitet, effekter av reagens och lösningsmedel m m) har studerats tillsammans med ett livscykelperspektiv. Jämförande miljöpåverkan gentemot fossil produktion av motsvarande molekyler har inte utförts som del av denna förstudie. Studier på effekter av olika scenarios för integration av processalternativen i Figur 1 med befintlig industriell infrastruktur har heller inte studerats.

Figur 2 illustrerar schematiskt processtegen enligt Strategi 1 i Figur 1 som ingått i bedömningen där pappers- och massabruk alternativt sågverk står för strömmar erhållna från lignocellulosa. Det framgår av Figur 2 att det som skiljer processerna åt sinsemellan är om mer eller mindre omfattande förbehandling krävs eller inte. Resten av stegen i processerna är beroende på hur de integreras med befintlig industriell infrastruktur likartade för samtliga processer enligt strategi 1 i Figur 1. Detaljerade data för hur bedömningarna gjorts kan inte visas i denna rapport eftersom de rör de konfidentiella fallstudiemolekylerna som omfattas av sekretess enligt ovan.



Figur 2. Schematisk exempel på processteg som bedömts kvalitativt m a p miljöaspekter utgående från olika råvarualternativ som ger olika effekter. Figuren väljer inte mellan scenarios där alla stegen görs på samma industri-site eller på olika sites med transporter emellan.

För fiberslam som råvara vid tillverkningen av specialkemikalier i Figur 2 så är uppströms påverkan försumbar, kopplat till att fiberslam är en avfallsström från pappers- och massaproduktion. Påverkan uppströms för restflöden från sågverk kan också anses vara liten då det är rimligt att hävda att det som driver processen är produktion av sågad trävara, och att den största delen av miljöpåverkan därmed snarast bör belasta den sågade trävaran. Restflöden från sågverk behöver förbehandlas för att separera cellulosa från lignin (delignifiering, Figur 2) medan väsentligt mindre förbehandling krävs vid användning av fiberslam eller pappers- och kartongavfall.

För en vald fallstudiemolekyl så visar data från litteraturen att processtemperaturen vid produktion av molekylen från olika kolhydratströmmar är ungefär densamma. Det finns osäkerheter kring utbytesberäkningar för olika processer som använder olika katalysatorer och/eller reagens men utbytesskillnader mellan olika råvarualternativ är ganska stora och styrs till stor del av vilka förbehandlingsbehov som finns och om förbehandling som ger relevanta utbytesförluster behöver räknas in som del av processtegen fram till specialkemikalieprodukten, vilket gäller ex vis för fallet

med sågspån i Figur 2. Utbytesskillnader har förstås stor påverkan på mängden råvara som behövs per kg produkt och produktionsprocessernas kapacitet vilket i sin tur även påverkar produktionskostnad, miljöpåverkan m m. De högsta utbytena erhålls vid användning av fiberslam som råvara (upp till 70-76% beräknat molärt utbyte) och utbytet för en given fallstudiemolekyl visade sig vid användning av träavfall eller sågspån som råvara bli ca 20 % lägre delvis kopplat till behovet av delignifiering av råvaran som del av processteget mot användbara kolhydrater. Den korresponderande mängden avfall i processkedjan blir motsvarande högre och pekar också på behovet av att göra säljbara produkter av sidoströmmarna från (även) produktionskedjan i Figur 2. Sammantaget bedöms preliminärt miljöeffekterna vara lägst för fiberslam och papper- och kartongavfall som råvaror för specialkemikalieproduktion.

Djupare analyser ingår i åtgärder som rekommenderas i färdplanen under kapitel 4 och bör ingå som ett värdefullt nästa steg i ett eventuellt kommande projekt. Sådana analyser är nödvändiga för att mer i detalj bestämma miljöpåverkan av att producera specialkemikalier från kolhydratströmmar enligt strategi 1 och 2 i Figur 1 .

4. Föreslagen färdplan gällande produktion av specialkemikalier via direkt kemisk konvertering av relevanta kolhydratströmmar

Utifrån resultaten från utredningarna som beskrivs under kapitel 3, har en föreslagen färdplan genererats för hur företag inom Västsvenska Kemi- och Materialklustret potentiellt kan gå vidare med att etablera produktion av utvalda specialkemikalier. Detta från ur ett svenskt perspektiv "lokala" kolhydratströmmar inklusive hel eller fraktionerad lignocellulosa. Färdplanen beskrivs nedan under avsnitten 4.1-4.3. Arbetet med Färdplanen tas eventuellt delvis vidare inom ramen för Klimatledande Processindustri genom projektet 4.2.3 'Kemikalier från sockerplattformen via direkta kemiska processer', ett projekt vars innehåll definieras mer i detalj under hösten 2020.

4.1. Vidare tekniska utvecklingsbehov för tillverkningsprocesserna

Nedan anges föreslagna aktiviteter som anses nödvändiga som en förberedelse inför uppskalning av processer för framställning av valda specialkemikalier från relevanta kolhydratströmmar eller hel/fraktionerad lignocellulosa. Dessa aktiviteter kan potentiellt utföras av nyckelaktörer verksamma inom Västsvenska Kemi- och Materialklustret.

4.1.1. Vidareutveckling av processkemin/processsteknologier

Som ett resultat av utvärderingen av olika processer för tillverkning av fallstudiemolekylerna med bedömd relevans för en rad andra intressanta specialkemikalier från rena eller blandade kolhydratströmmar (se kapitel 3), föreslås följande: Att mer utvecklade processkandidater enligt strategierna 1 och 2 i Figur 1 med potential för användning för produktion av valda mål-molekyler, jämförs teknoeconomiskt inför nödvändig vidareutveckling mot högre TRL-nivå genom ett iterativt forsknings- och utvecklingsprogram med laborativ forskning och utveckling samt pilotskaldemonstrationer.

För strategi 1 i Figur 1 så är grundscenariot att anrikade och åtminstone delvis reade kolhydratströmmar används för produktion av specialkemikalier och då i jämförelsevis högre utbyte jämfört med direkt konvertering av hel biomassa enligt strategi 2 (utbytesförlusten för strategi 1 tas i större utsträckning i försockringssteget). Produktionen av kolhydratströmmarna föreslås i scenarioräkningar/-simuleringar i första hand integreras med pappers- och massaindustri och/eller

sågverk. Sedan kan kolhydratströmmarna antingen (som följd av investeringar i lokal produktionsinfrastruktur) konverteras direkt lokalt till specialkemikalier, eller transporteras för vidare konvertering till befintlig kemisk industriinfrastruktur inom Västsvenska kemi- och Materialklustret och dessa olika lösningar jämförs teknoeconomiskt. I detta arbete behöver det också ingå att identifiera och utveckla konverteringsprocesser för sidoströmmarna från processtegen till säljbara produkter.

Grundscenariot för processer enligt strategi 2 bedöms av förstudien vara integration av produktionen med pappers- och massaindustri och/eller sågverk, då hel biomassa för direkt konvertering till specialkemikalier preliminärt bedöms som mer svårintegrerad i befintlig kemisk industriinfrastruktur. Det senare kan dock för valda målmolekyler komma att ändras på ett sätt som motiverar investering i nödvändig förbehandlingsutrustning lokalt snarare än att förlita sig på existerande förbehandlingsinfrastruktur inom pappers- och massaindustrin. Även för strategi 2 behöver man som del av arbetet identifiera och utveckla konverteringsprocesser för sidoströmmarna från processtegen till säljbara produkter.

Jämförelse av de två strategierna föreslås för initialt valda målmolekyler inledas innan påbörjandet av praktiskt utvecklingsarbete inför en övergripande prioritering av målmolekyler och strategier för vidare utveckling där hänsyn förstås tas till marknads- och värdekedjeanalyser m m enligt nedan. Mer precisa processkemiska utvecklingsaktiviteter för processer enligt strategi 1 och 2 i Figur 1 har identifierats och redovisas under 4.1.2 nedan.

4.1.2. Föreslagna aktiviteter för teknisk (vidare)utveckling av processer enligt strategi 1 och 2 i Figur 1

- Fördjupade litteraturstudier behövs för att mer exakt definiera vilken typ av process som är mest effektiv teknoeconomiskt för vidare optimering per vald målmolekyl och kolhydratström (hel biomassa, fraktionerad biomassa eller monomerer/oligomerer erhållna genom inledande försockring). Litteraturstudier behövs även för att kartlägga nuläget avseende konvertering av sidoströmmarna till säljbara produkter. Mer utvecklade och volymseffektiva processer från litteraturen (patent, tidskriftsartiklar etc) som är mer nära teknisk mognad för industriell produktion men som fortfarande har behov av ytterligare förbättring av robusthet och effektivitet har som följd av arbetet i förstudien redan identifierats och följer strategi 1 i Figur 1. Detta betyder dock inte att vidareutvecklade versioner av dessa specifika processer innebär de i slutändan mest effektiva lösningarna för att producera valda molekyler. Det bedöms dessutom som högst sannolikt att man framgent kommer fokusera även på andra målmolekyler än de industriellt relevanta fallstudiemolekylerna, vilket ytterligare motiverar mer arbete med sammanställning och utvärdering av prior art än vad denna relativt begränsade förstudie medgivit.
- Teknoekonomiska studier baserade på processimuleringar i Aspen och andra programvaruverktyg kan/bör utföras redan innan något praktiskt utvecklingsarbete påbörjas, utgående från mer utvecklade och mogna i litteraturen rapporterade processer enligt ovan. Detta inkluderar 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 scenarier och processer för konvertering av sidoströmmar till säljbara produkter etc. Arbetet bör sedan förfinas i iteration med processutveckling och optimering från lab- till pilotskala.

- Vidare optimering av katalysator typer, katalysatorladdning och reaktionsbetingelser för nyckelsteg i konverteringen av valda kolhydratströmmar (hel biomassa, fraktionerad biomassa eller monomerer/oligomerer erhållna genom inledande försockring). Detta först i labbskala, sedan validering i <10 L-skala följt av uppskalning i pilotskala. Sådana analyser kan ses som ett generellt utvecklingsbehov för specialkemikalier då ett stort antal av dem framställs från kolhydratströmmar med katalytiska processer, något som ofta också är kostnadsmässigt att föredra jämfört med reaktioner som kräver stökiometriska mängder fasta eller flytande tillsatta reagens av varierande ursprung och miljömässig påverkan, vilket i regel leder till högre miljöbelastning och sämre teknoekonomi. Valet av katalysatorer kan handla om allt från olika typer av Brønstedt- eller Lewis-syror, metallkatalysatorer eller i vissa fall immobiliserade eller fria enzymer. Optimering bör utföras med stöd av optimeringsmjukvaror som Modde™ för experimentell design och utvärdering.
- Optimering av upprepningsmetoder för att erhålla rena målmolekyler vare sig de framställs från hel, fraktionerad eller försockrad lignocellulosa behöver utföras. Exempel på relevanta enhetsoperationer för upprening är ex vis extraktion, membranfiltrering, destillation eller kristallisation. Olika kombinationer av dessa har identifierats som det kanske viktigaste förbättringsområdet för samtliga inom förstudien studerade processer. Olika sätt att optimera användningen av kombinationer av reningstekniker för att hålla ned kostnaderna undersöks för tillverkningsprocesserna, också med syftet att få ut sidoströmmar i en form som kan konverteras till säljbara produkter. Sådana studier kan utföras genom att processerna stegvis screenas och optimeras i labbskala följt av demonstration i pilotskala. I detta ingår val av eventuella derivat av målmolekylerna som har förbättrade egenskaper (se avsnitt 3.1 för resonemang kring problematiska fysikalisk-kemiska egenskaper hos vissa målmolekyler) som medger enklare reningsprocesser och sedan optimering av dessa i vissa fall helt nya upprepningsprocesser.
- Produktion av kg-skaleprover för applikationstester alternativt utveckling av nya produkter för vilka specialkemikalierna antingen utgör ingredienser eller startmaterial, kan/bör utföras med identifiering av exempelvis renhets- och haltkrav i förhållande till applikation.
- För strategi 1 bör det definieras vilka de mest intressanta och redan utvecklade produktionstekniker för produktion av anrikade och åtminstone delvis renade kolhydratströmmar från lignocellulosa som i sin tur kan användas för produktion av specialkemikalier. Teknoekonomisk karakterisering bör göras vilken delvis kan bygga på redan utförda studier internt hos företag och/eller andra organisationer/projekt. Detta för att underlätta jämförelser mellan produktionsprocesser enligt strategierna i Figur 1.
- Möjligheter för licensiering av intressanta teknologier kan/bör undersökas, antingen som en del av oavsett utvecklingsstrategi nödvändiga freedom to operate (FTO)-utredningar genom patentombud för de processer man önskar vidareutveckla, eller separat. Båda dessa aktiviteter kan bedrivas som del av den inledande fördjupade litteraturstudien föreslagen i första punkten ovan.
- Om arbetet resulterar i nya processlösningar för tillverkning av valda specialkemikalier så behöver patenterbarhet utredas i samarbete med patentombud med syftet att skydda intellektuell egendom.

4.2. Aktiviteter kring existerande och nya möjliga applikationer

Specialkemikalier framställda från förnyelsebar råvara har ett mycket stort antal möjliga applikationer i olika produkter i en rad branscher som kortfattat beskrivs under kapitel 2. Behov av aktiviteter inom detta område som identifierats för arbetet framåt i färdplanen för de tre

fallstudiemolekylerna beskrivs kortfattat nedan. Likt aktiviteterna föreslagna i avsnitt 4.1 bedöms även dessa vara av generellt värde för den bredare kategorin specialkemikalier från kolhydratströmmar.

- Fördjupade marknadsanalyser bör utföras per vald målmolekyl med inriktning på valda applikationer och produktkategorier. En strategi kan sedan tas fram baserad på resultaten från arbetet, som bör definiera vilka (befintliga eller inte) specialkemikalier och slutprodukter man kan/ska fokusera på. Det finns ett mycket stort antal applikationer som skulle kunna komma ifråga men preliminärt föreslår förstudien specialkemikalier för tre applikationsområden: intermediat för andra produkter (plattformskemikalier), mjukgörare för plast- och polymermaterial och monomerer för härdplaster och/eller specialpolymerer som värmehärdande elastomerer. Framtagandet av strategin bör ske i iteration med utvecklings- och andra aktiviteter beskrivna ovan och nedan i detta kapitel. Analyserna inkluderar både produkter där målmolekylen är en produkt själv med varierande kvalitetskrav, samt fall där målmolekylen är ett intermediat på vägen mot andra produkter.
- Testmaterial för valda målmolekyler, som tillverkats i pilotskala eller mindre skala mot relevanta specifikationskrav (avseende renhet, halt m m) för de potentiella applikationerna, bör utsättas för applikationstester internt hos företag och organisationer verksamma inom Västsvenska Kemi- och Materialklustret, möjligen också i samarbete med tredje part. Testerna kan sätta representativ kvalitet för målmolekylen per vald applikation, och nya batcher med material som möter identifierade förbättringsbehov avseende kvaliteten kan behöva produceras och testas igen.
- Nya potentiella applikationer för valda specialkemikalier bör undersökas, med eller utan stöd från det laborativa utvecklingsarbetet inklusive processvalidering och provframställning i pilotskala. För eventuella nya applikationer kommer patenterbarhet och freedom to operate att behöva utredas i samarbete med patentombud för att skydda intellektuell egendom.

4.3. Råvarutillgänglighet, miljöpåverkan och potentiella värdekedjor

Efter de begränsade inledande studier som gjorts så står det klart att en del aktiviteter rekommenderas för vidare karakterisering av råvarutillgänglighet, miljöpåverkan och möjliga värdekedjor för valda processer och specialkemikalier enligt strategi 1 respektive 2 i Figur 1, hela vägen från råvara till specialkemikalieprodukt. I avsnitt 4.3.1-4.3.3 nedan redovisas föreslagna aktiviteter för respektive område med en kortfattad motivering.

4.3.1. Föreslagna aktiviteter för vidare karakterisering av råvarutillgänglighet

Följande aktiviteter föreslås:

- Konkurrensituationen om råvaruströmmarna i Tabell 1 behöver utredas mer kopplat till vilka priser för råvarorna som bedöms rimliga i förhållande till det pris som kan tas ut för specialkemikalieprodukten producerad enligt någon av processkoncepten i Figur 1, men även eventuell lagstiftning och regelverk som reglerar råvaruströmmarnas användning idag och framåt. Hur höga råvarupriser som specialkemikalieprodukten kan bära föreslås utredas som del av 4.3.3 nedan.
- Insamling, transporter, hantering i produktionsanläggningar inklusive säkerhetsaspekter, eventuella relevanta lagar och regelverk och mer precisa behov av förbehandling inför användning utreds för valda råvaror i Tabell 1. Fiberslam och pappers- och kartongavfall som råvaror föreslås utredas i ett första steg följt av ytterligare råvaror som blir aktuella beroende på värdekedja och produktionsvolym för valda specialkemikalier. Som framgår under 3.4

ovan så räcker råvaruströmmarna fiberslam och pappers- och kartongavfall inom Sverige till produktion av kanske två till fyra specialkemikalier totalt och sedan behöver man föra in ytterligare råvaror.

4.3.2. Föreslagna aktiviteter angående utredning av miljöpåverkan för produktionsprocesser

Följande aktiviteter föreslås:

- Djupare analyser av miljöpåverkan krävs för respektive steg i processerna som väljs ut enligt strategierna i Figur 1 där emissioner, energiförbrukning, användning och distribution av råvaror inklusive katalysatorer, reagens, eventuella lösningsmedel och hjälpkemikalier, möjligheter för och krav på recirkulation av katalysatorer, lösningsmedel och kemikalier i processerna samt massbalanser och utströmmar utreds för hela processkedjorna. Vidare utreds miljökonsekvenser av processer för konvertering av sidoströmmarna som kommer ut från processerna till säljbara produkter och jämförs med att i stället använda sidoströmmarna för lokal el- och värmeproduktion.
- Jämförande studier av miljöpåverkan för valda processer enligt Figur 1 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.¹³ 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 enligt strategierna i Figur 1 med existerande industriinfrastruktur (se under 4.1.1) behöver utföras. I detta ingår förstås effekter av eventuella nödvändiga anläggningsinvesteringar för att genomföra integrationen.

4.3.3. Föreslagna aktiviteter kring karakterisering av värdekedjor för valda specialkemikalier

Efter utredning av fallstudiemolekylerna och deras redan delvis utforskade samt potentiella applikationer enligt 3.2 och 4.2 ovan så föreslås att möjliga värdekedjor karakteriseras för produktion av mer attraktiva produktkategorier för åtminstone fallstudiemolekylerna. Exempel på relevanta produktkategorier är intermediat för andra produkter (plattformkemikalier), mjukgörare för plast- och polymermaterial och monomerer för hårdplaster och/eller specialpolymerer som ex vis värmehärdande elastomerer. Ett teoretiskt exempel på en värdekedja beskrivs ovan under 3.2.

Följande aktiviteter föreslås:

- Möjliga prisbilder för valda mål molekyler framställda via strategierna i Figur 1 karakteriseras genom ex vis analys av marknadsrapporter för idag existerande sannolikt fossila specialkemikalier för användning inom ett eller flera valda applikationsområden. I detta ingår förstås karakterisering av var marknaderna finns, totalvolym som behövs för specifika applikationer, vilka applikationer som kan passa när det gäller kvalitetskrav på

¹³ 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.

specialkemikalien och vilka möjligheter till grön premie som finns eller kan finnas m fl aspekter. Prisbilden sätter sedan ramarna för hur mycket produktionskedjans olika steg får kosta samt vilka råvarukostnader som kan tolereras med rimlig vinst på produktionen av specialkemikalien. Resultaten kan sedan modelleras och användas i arbetet med teknoekonomisk karakterisering av processalternativ för produktionssteget till specialkemikalien enligt strategi 1 eller 2 i Figur 1 för vidare utveckling alternativt inlicensierade eller helt nya produktionsprocesser.

- Olika möjliga produktionskedjor för valda scenarior för integration av produktionssteg i befintlig industriell infrastruktur enligt 4.1.1 konstrueras och karakteriseras med målet att nå högsta effektivitet med hänsyn till prisbilden ovan, minimera miljöpåverkan, transporter m m. Produktionskedjorna förutsätts i färdplanen oavsett var applikationerna för de producerade specialkemikalierna har sin marknad globalt, kunna konstrueras så att de till största delen bedrivs inom Sverige med åtminstone ett till två produktionssteg utförda hos aktörer verksamma inom Västsvenska Kemi- och Materialklustret där ett av stegen är antingen råvaruproduktion och/eller försockring av lignocellulosaråvara och där det andra (tredje) produktionssteget är steget där själva specialkemikalien produceras. Exempel på aspekter som föreslås karakteriseras är följande:
 - Val av lignocellulosabaserade råvara/råvaror och hur produktionskedjan påverkas av detta med hänsyn till de faktorer som beskrivs under 4.3.1 ovan. I detta ingår även hur förbehandlingsbehoven för råvaran/råvarorna bäst tillgodoses och hur detta eventuellt påverkar hur processen bäst integreras med existerande industriell infrastruktur.
 - Val av försockringsprocess av lignocellulosaråvaran/råvarorna för processer som körs enligt strategi 1 i Figur 1 enligt 4.1.2 ovan och hur detta eventuellt påverkar hur processen bäst integreras med existerande industriell infrastruktur föreslås utredas.
 - Val av process för konvertering av kolhydratströmmar eller hel lignocellulosa, cellulosa eller hemicellulosa till specialkemikalier enligt antingen strategi 1 eller 2 i Figur 1 och hur produktionen bäst integreras med existerande industriell infrastruktur föreslås utredas. I detta tas hänsyn till en stor mängd aspekter som ex vis om nödvändiga katalysatorer, kemikalier, gaser och andra råvaror som används i processen redan finns tillgängliga på det produktions-site som är tänkt för produktion eller inte, processbetingelser och upprepningsmetodik och hur dessa passar in i existerande produktionsutrustning, säkerhet, hälsa och miljö inklusive om befintlig utrustning har rätt konstruktion för produktionsprocessen (ATEX-klassning¹⁴ etc), om nödvändiga tillstånd för produktionen kan erhållas utan eller med rimliga investeringar och om anläggningskostnader för befintliga produktionsanläggningar kan bäras av produktionsprocessen.

5. Acknowledgement

Förstudiens 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. Förstudien tackar de parter som lagt in egen tid i projektet (RISE AB, IVL, Chalmers Tekniska Högskola, Perstorp AB och Södra), något som också varit nödvändigt för genomförandet.

¹⁴ Vid hantering av brandfarliga gaser och vätskor ställs krav på utrustning och rutiner som bl a beskrivs här: <https://www.msb.se/sv/amnesomraden/skydd-mot-olyckor-och-farliga-amnen/brandfarligt-och-explosivt/explosionsfarlig-miljo-atex/>.