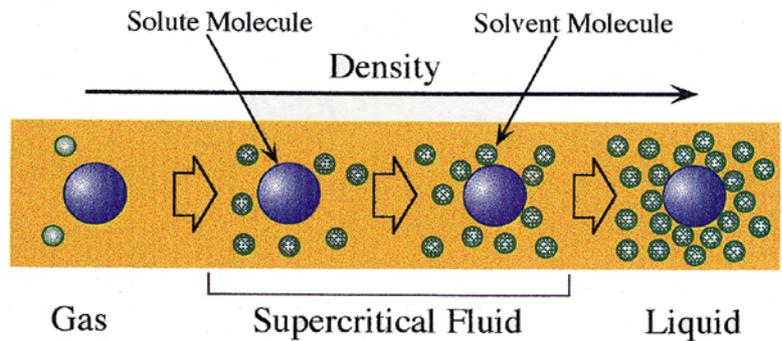
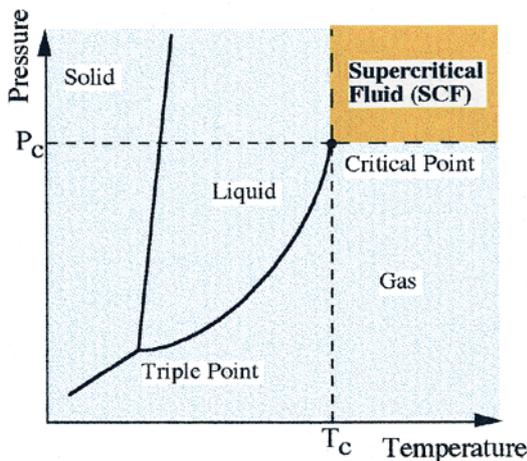


Fundamental Analysis and Design of Reaction and Separation Processes in Supercritical Fluids

超臨界流体中の反応および分離の プロセス構築へ向けた基礎過程解析

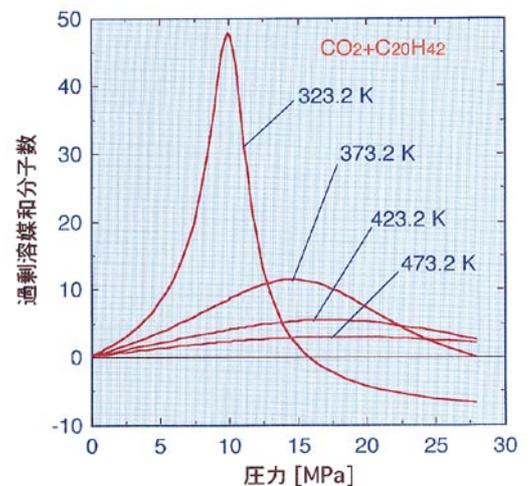
プロジェクトリーダー 荒井 康彦

九州大学 大学院工学研究院 教授



1. 研究の目的

超臨界流体は、圧力の変化に対する密度変化が非常に大きく、熱容量、熱伝導度、動粘度などは臨界点近傍で極値をとるなど、通常の溶媒とは異なり際だった特性を有しています。また、臨界点近傍では溶媒構造に顕著なクラスタリングがみられるなど、その特性は変化に富んでいます。このことが反応や分離に対して、他の追随を許さない革新的なプロセス展開の基盤となりますが、同時に、またそれらの基礎解析と蓄積は容易ではありません。反応においては、反応機構やこれを形成する基礎的な素反応過程、また分離においては溶解特性のような基礎特性に関して、学術上の知見は未だ不十分です。信頼性の高い反応や分離のプロセスを構築していくために、必要な基礎知見を新規な方法論の開発をも含めながら蓄積、解析し、プロセス技術へと集合化していくことを本研究の目的としています。これは工業化学及び化学工学の学術的発展と、その次世代産業技術への展開の要請を満たそうとするものです。たとえば、超臨界流体の化学反応として、超臨界水による産業廃棄物の完全酸化分解やポリマーの加水分解によるケミカルリサイクルなどが期待されています。また超臨界二酸化炭素は、化学合成反応の溶媒として環境の汚染源となる多くの有機溶媒を代替し、あるいは毒性の心配がない分離、抽出溶媒として利用の拡大と新規な環境調和型プロセスの開発への応用が期待されています。



溶質（エイコサン）分子に過剰に溶媒和する超臨界二酸化炭素

2. 研究の内容

超臨界流体の溶媒構造、相平衡などの基礎的研究をふまえて、次世代の分離・反応プロセスの構築を目指しています。

(1) 超臨界混合流体の密度測定と分子シミュレーション

様々な溶質と超臨界流体の混合系に対して密度を精密に測定し、これと溶解度や反応選択性との関係を検討すると共に、分子シミュレーションによってミクロ溶液構造を推定し、分離や反応の機構を解明します。

(2) 高温高压水 + 炭化水素系の相平衡測定

高温高压水中では、ペットボトルやPCB等の炭化水素が急速分解することが知られています。しかし、それらの炭化水素が高温高压水中でどのような相状態になるかよくわかっていません。そこで、高温高压に耐える窓ガラス付きの相平衡測定装置を製作し、高温高压水 + 炭化水素系の相挙動を測定しています。

(3) 超臨界二酸化炭素 + シトラスオイル成分系の気液平衡測定

シトラスオイル成分を超臨界二酸化炭素で抽出する装置の合理的な設計には、超臨界二酸化炭素 + シトラスオイル成分系の気液平衡データが不可欠です。そこで、シトラスオイルの主成分であるリモネンとリナロールに着目し、超臨界二酸化炭素 + リモネン + リナロール系の気液平衡を系統的に測定しています。

(4) 向流抽出塔による高度分離精製

超臨界CO₂抽出塔に温度勾配を付与し、目的製品を中間段より取り出すプロセスの分離性能についてシトラスオイルを用いて検討しています。温度勾配による精留効果とワックスの塔底への除去により、目的製品である含酸素化合物が塔の中間段に濃縮され連続的に取り出すプロセスを開発しています。

(5) 環境調和型反応プロセスのための超臨界流体中の反応解析

例えば、超臨界水中での有害廃棄物の完全分解処理プロセスの最適設計には、反応速度や機構が不可欠の基礎情報です。そこで、測定装置を開発し、代表的な有機化合物を対象に研究を進めています。超臨界水だけでなく、超臨界二酸化炭素中でも環境調和型反応プロセスの開発を試みています。

(6) 超臨界流体中の反応の直接追跡

反応機構の解析には速度測定のみではなく、反応場や反応中間体を直接的に観測することが重要です。このため、高温・高压でも測定できるラマン分光法を利用します。ラマン分光装置を試作し、100 atm 下でメタノールラマンスペクトルの温度変化の測定に成功しました。流体の構造と反応の関係を分子論的に理解することを目指します。

(7) 超臨界流体中の反応設計技術の構築

量子化学や分子動力学計算によって、分子同士の相互作用や化学反応の進行過程を解析し、超臨界流体の反応の特徴を知り、新しい反応を開拓したり、実際の複雑な反応を設計する技術を、実験的検討とも併せて開発しています。

3. 研究の体制等

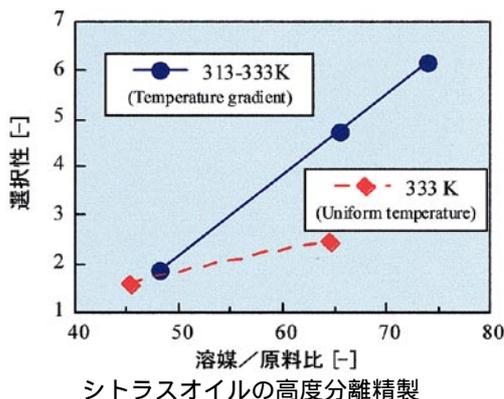
期 間：1996年10月～2001年3月

構 成：プロジェクト・リーダー1名、コアメンバー1名（東京大学 幸田清一郎教授）研究協力者約30名で構成され、反応グループと分離グループが緊密な連絡をとりながら、プロジェクトを積極的に推進しています。

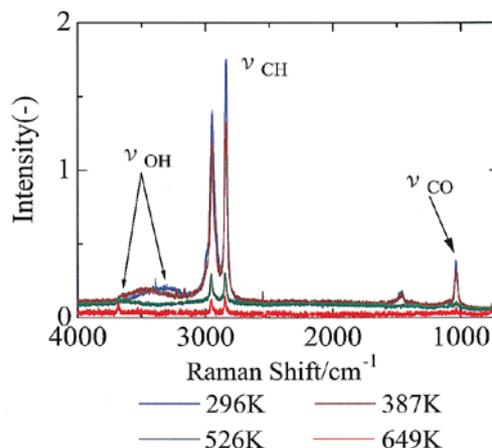
実施場所：研究場所と主な研究者は、次のとおりです。東京大学（幸田清一郎、山下晃一、平尾雅彦、大島義人、高見昭憲）九州大学（荒井康彦、岩井芳夫、東秀憲、佐藤政樹）広島大学（舩岡弘勝、滝島繁樹、佐藤善之）熊本大学（後藤元信、児玉昭雄）。



高温高压水 + 炭化水素系の相平衡測定装置



超臨界流体用ラマン分光装置とその実験



100atm下のメタノールラマンスペクトルの温度変化