

審査の結果の要旨

氏名 草場 敏彰

近年、我が国の石油化学産業における開発の中心は、エチレン、プロピレン、ベンゼン等の汎用化学品から、電子材料や液晶材料、光学材料に代表される高機能化学品へとシフトしている。高機能化学品の特徴として、構造が複雑、分子量が大きい、高沸点、固体、重合性を有するといった点が挙げられる。また、高機能化学品は求められる純度や不純物のスペックが汎用化学品に比べて厳しいことが多い。高機能化学品の分離を考えた場合、このような特徴のため蒸留が適用できない場合がある。そこで高機能化学品の分離方法として、擬似移動層クロマト分離（SMB）が着目されている。

本論文は、「擬似移動層クロマト分離装置の設計手法の開発」と題し、SMBをなるべく短い期間でかつ高い確度で設計するため、SMBの設計手順を標準化することを目的としている。特に、SMBの設計において最も重要となる吸着剤と溶媒の組合せの選定においては、従来の「勘」と「経験」に頼った実験的な選定方法を改善するため、分離対象系の構造情報から吸着量を推算することで、分離に適した吸着剤と溶媒の組合せを選定するシステムの開発について検討している。さらに、吸着等温線と吸着速度の測定方法と測定条件の標準化、また、SMBの運転条件の最適化方法の標準化についても検討している。本論文は以下の全6章から構成されている。

第1章では、本研究の背景とSMBの設計検討の流れについて述べるとともに、そこから浮かび上がる課題を示すことで、本研究の位置付けならびに目的を明らかにしている。

第2章では、SMBの設計に関する既往の研究例を解説している。

第3章では、本研究で開発した吸着剤-溶媒選定システムについて記述している。選定システムの開発において最も重要となる分配係数予測モデルについて、溶質61種、ゼオライト14種、溶媒13種を対象に分配係数を測定し、モデルの学習データとしている。次に、吸着質の構造情報を説明変数、分配係数を目的変数として、分配係数の予測値と実験値が一致するように回帰モデルを構築する。GAPLS法によりゼオライト-溶媒の組合せ別に回帰モデルを構築した結果、全182通りの組合せについて、予測性に優れたモデルを構築することができている。2-アダマンタノン (2-ADO) と2-アダマンタノール (2-AdOH)、ならびにメタキシレンとパラキシレンの分離を対象に本システムの有効性を評価した結果、システムにより選定された組合せと実測値から選定した組合せは概ね一致しており、本シ

システムの有効性が確認されている。選定システムを利用することで、分離に適したゼオライトと溶媒の組合せを瞬時に選択でき、検討期間の大幅な短縮が期待できる。

第4章では、SMB の設計に必要な種々の物性ならびにパラメータについて、解析上あるいは測定上の留意点について論ずるとともに、測定条件と測定方法を標準化している。吸着量に関しては、回分吸着法により真の吸着量を算出する上で、単位吸着剤当たりの全吸着容量 S を考慮する必要があることを述べるとともに、適切な全吸着容量 S の値について明らかにしている。また、単カラム法により吸着量を求める上で必要となる空隙率についても適切な値を明らかにしている。さらには、回分吸着法における全吸着容量 S と単カラム法における空隙率が空隙率の定義から求まる両者の関係を満たす限り、吸着における各相の考え方は両測定方法で同じとなり、得られる吸着量が同じになることを証明している。一方の総括物質移動容量係数について、容量係数に影響を与える各種因子の測定条件ならびに解析方法の標準化について実験結果を交えて論じている。これらの研究成果は、同じ炭化水素系の溶媒・溶質、ならびにゼオライトを対象とした液相吸着において一般的に適用できるものであり、パラメータ測定の効率化ならびに高精度化に繋がる。

第5章では、アダマンタン酸化体混合物からの 2-ADO の分離を対象に、SMB ラボ機の運転、さらにはスケールアップ時の運転条件の最適化について論じている。ゼオライトに NaY100、溶媒に 2-メチル-2-ブタノールの組合せを用いることで、2-ADO を高純度、高回収率で分離可能であること、また、スケールアップを想定した際の運転条件の最適化について検討した結果、最適条件における SMB の変動費は全体の製造コストに比べて十分に小さく、経済的に十分に成り立つレベルであることを述べている。学術的新規性という観点においては、蒸留等、従来の方法では分離できなかった 2-ADO と 2-AdOH を高純度・高回収率で分離できたことの意義は大きく、2-ADO の用途拡大に大きく貢献するものと期待される。運転条件の最適化方法の標準化という観点では、最も重要な操作パラメータである Γ パラメータ（流体相速度と固相速度の比）と製品純度・回収率の関係について論じている。

第6章では、本研究で得られた結果を総括している。

以上、本論文の主たる成果は、吸着剤と溶媒の選定システムを構築したこと、SMB の設計に必要な種々の物性とパラメータの測定条件と測定方法を標準化したこと、更には Γ パラメータと製品純度・回収率の関係について論じることで、SMB の運転条件の最適化方法を標準化したことである。以上の成果は、擬似移動層クロマト分離装置の工業化に要する検討期間の短縮と設計確度の向上、ならびに吸着現象の本質的な理解に寄与するものであり、工学的に高い価値を有し、分離工学および化学システム工学への貢献は大きい。

よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。