

CHALMERS

**RELATIONEN MELLAN CO₂ OCH
CELLULOSA I EN ALKALISK
LÖSNING**

MARIA GUNNARSSON

AVANCELL

- Forskningsprogram finansierat av Södra Skogsägarnas forskningsstiftelse
- Startade 2005
- Tredje generationen doktorander



LUND UNIVERSITY



CHALMERS
UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FORSKNINGSFOKUS

Upplösning av cellulosa i ett mer hållbart lösningmedel för produktion av textila fibrer

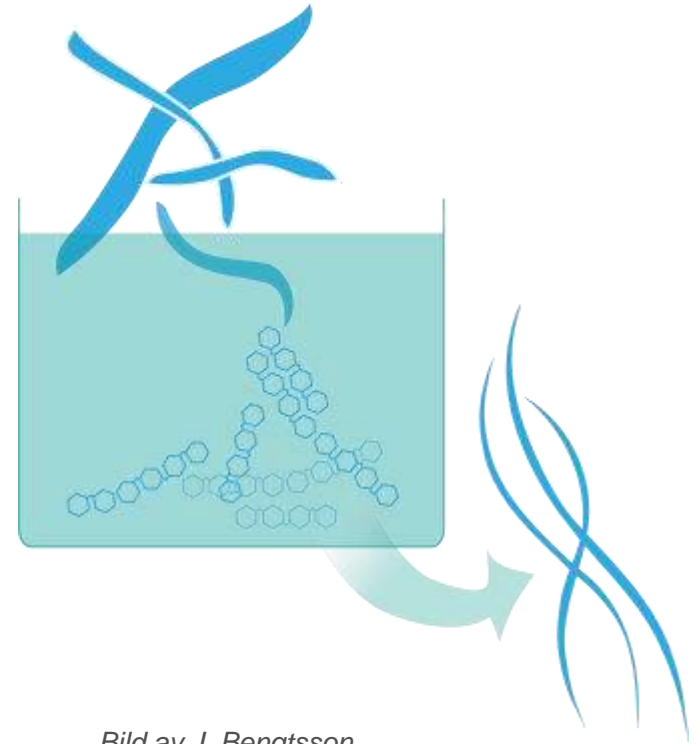


Bild av J. Bengtsson

FORSKNINGSFOKUS

- Fibrer från trä är för korta och tjocka för att spinnas direkt till textila fibrer
- Vanliga lösningsmedel löser inte cellulosa
- Lösningsmedlet måste vara enkelt att hantera i en storskalig process

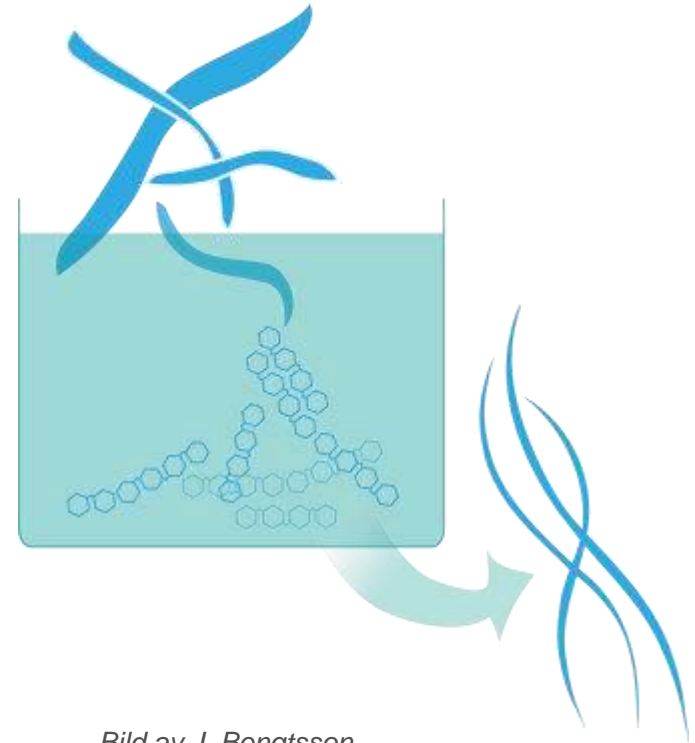
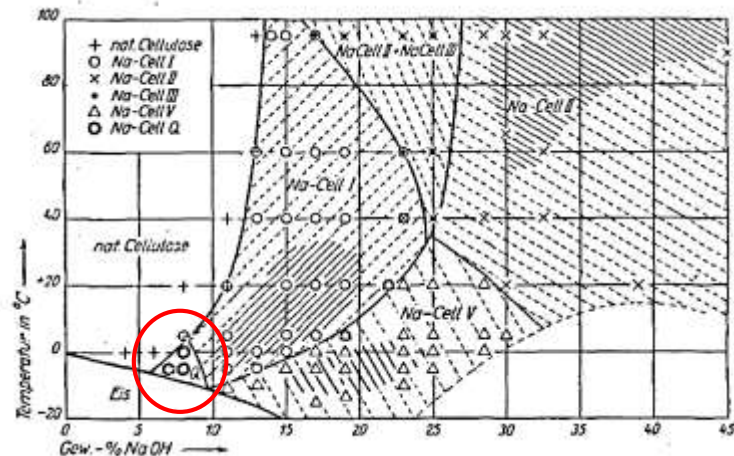


Bild av J. Bengtsson

UPPLÖSNING I KALL ALKALI

- Studerat sen tidigt 30-tal¹
- Våldigt smalt upplösningfönster²
- Optimalt förhållande vid 8 v-% och -5°C
- Deprotonering av cellulosan sker i NaOH(aq)³



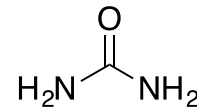
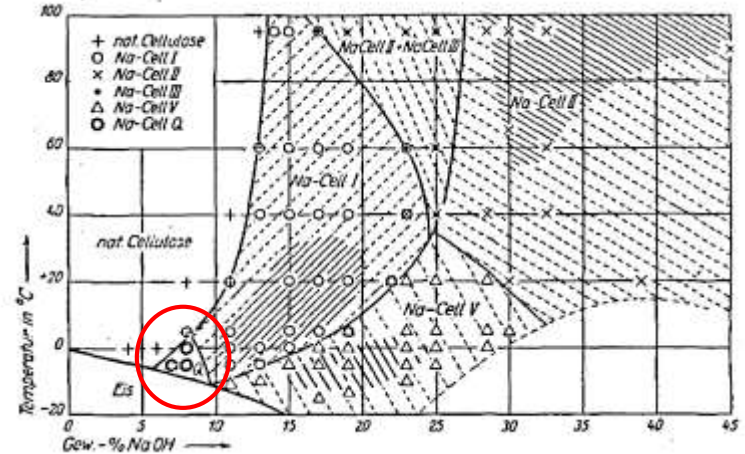
1. Davidson GF, *J Text Inst*, 1934, 25, T174-T196.
Davidson GF, *J Text Inst*, 1936, 27, T112-T130.
Davidson GF, *J Text Inst*, 1937, 28, T27-T44.

2. Sobue H. et al., *Physik Chem B*, 1939, 43, 309-328.

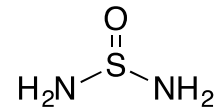
3. Bialik E et al. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2016, 7(24):5044-5048 doi:10.1021/acs.jpcllett.6b02346

UPPLÖSNING I KALL ALKALI

- Smalt upplösningsfönster → lösningen gellar
- Additiv så som urea och tiourea både ökar upplösningen och hjälper till att stabilisera lösningen



urea



tiourea

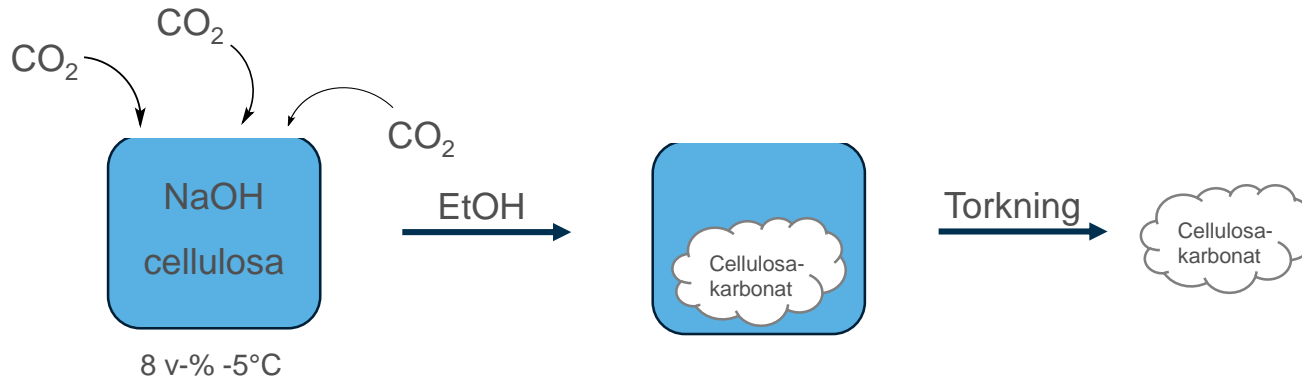
UPPLÖSNING I KALL ALKALI

Två typer av gelningsmekanismer:

- 1) Gelning som en effekt av temperaturhöjning
- 2) Spontan gelning under upplösningen

Kan det finnas externa faktorer som ger spontant gelning?

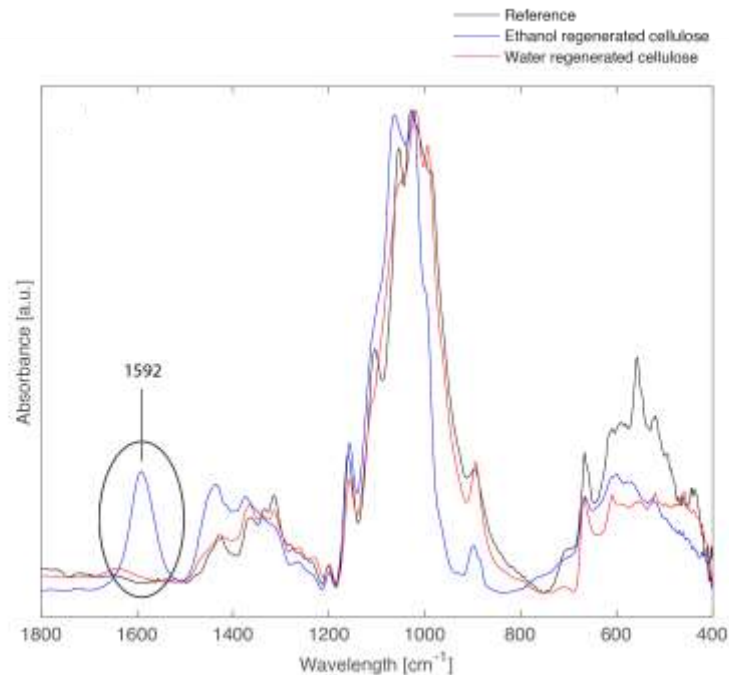
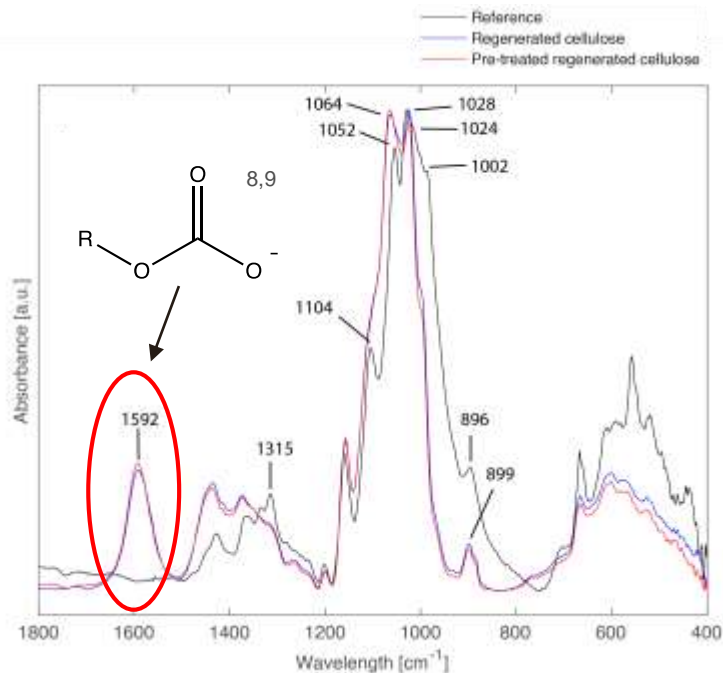
KAN CO₂ FRÅN OMGIVANDE LUFT REAGERA MED CELLULOSA UPPLÖST I KALL ALKALI?



Organiska karbonater hydrolyseras i vatten men kan bevaras med alkohol⁸

8. Franchimont, APN., KNAW Proceedings, 1910, 12, 303.

KAN CO₂ FRÅN OMGIVANDE LUFT REAGERA MED CELLULOSA UPPLÖST I KALL ALKALI?

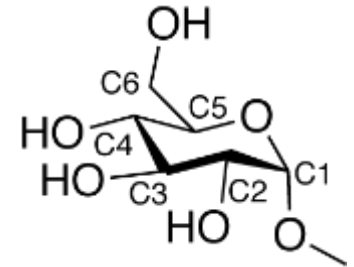


8. Oh, S. Y. et al., *Carbohydrate Research*, 2002, 340, 417-428.

9. Zhbakov, R.G., *Infrared Spectra of Cellulose and its Derivatives*, Springer US, Boston, 117-130.

KAN CO₂ FRÅN OMGIVANDE LUFT REAGERA MED CELLULOSA UPPLÖST I KALL ALKALI?

- Undersöka reaktionen mellan CO₂ (från gastub) och cellulosa upplöst i kall alkali med hjälp av NMR
- Methyl α -D-glucopyranoside (MeO-Glcp) som modellsubstans



KAN CO₂ FRÅN OMGIVANDE LUFT REAGERA MED CELLULOSA UPPLÖST I KALL ALKALI?

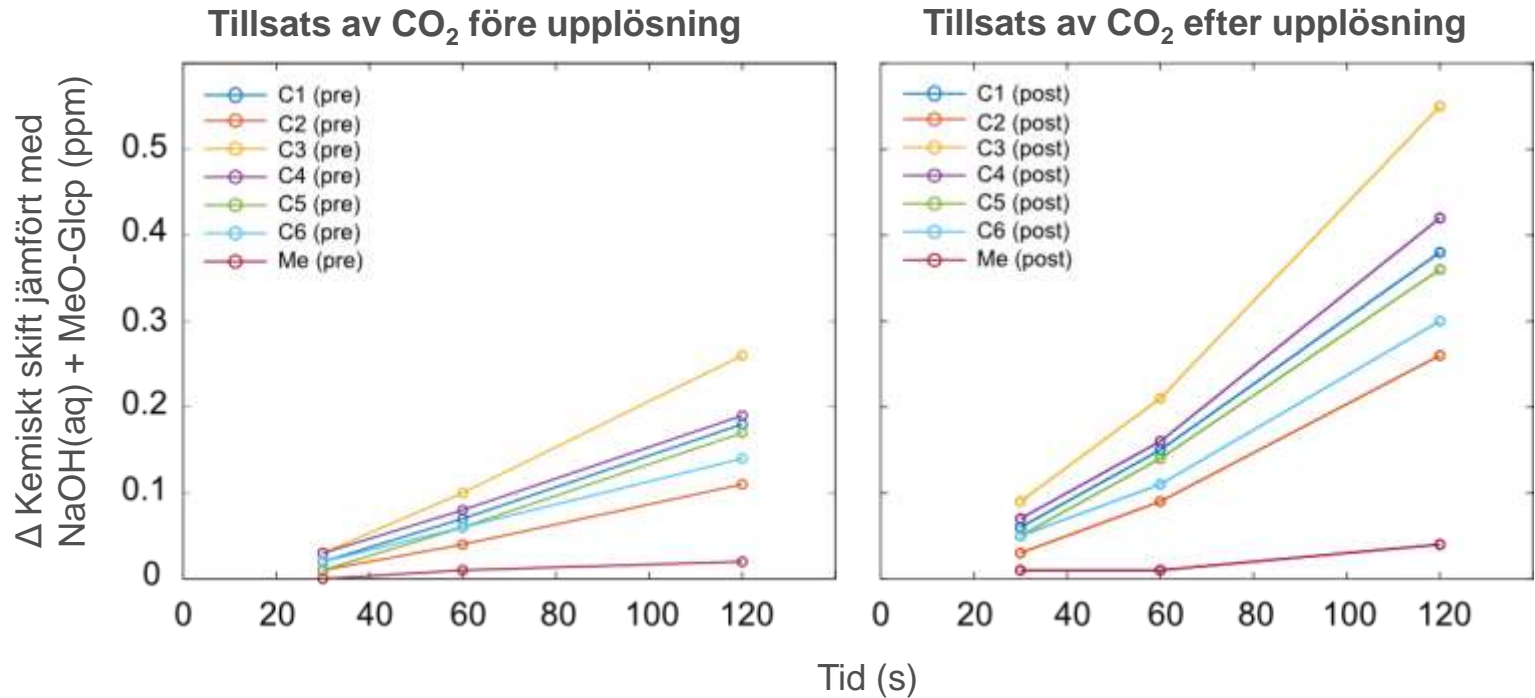
- Identifiera den organiska karbonaten som en ny top vid 150 ppm i ¹³C NMR spektrum
- Utvärdera effekten av att tillsätta CO₂ (från gastub) före eller efter upplösningen av modellsubstanten



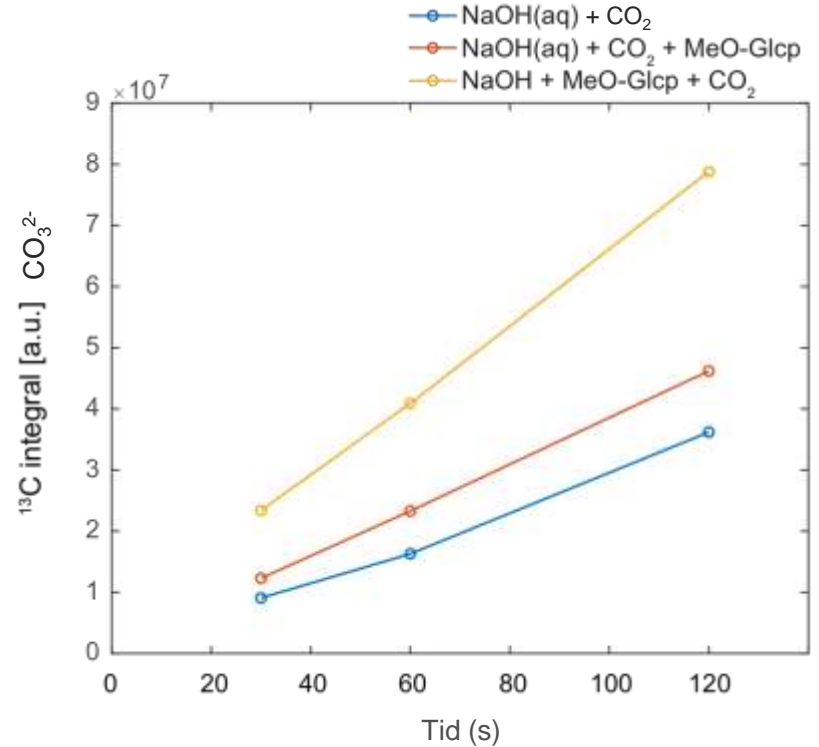
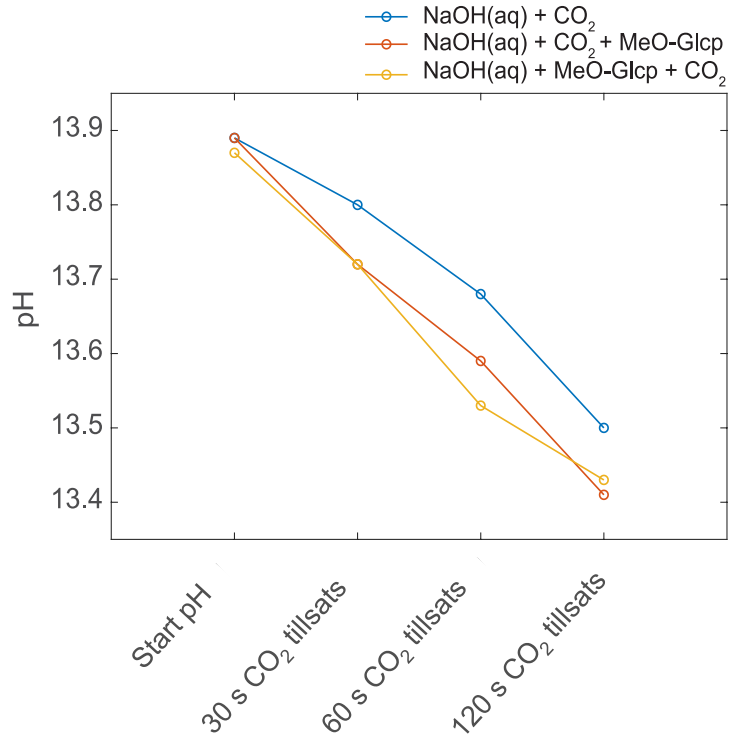
^{13}C NMR SPEKTROSKOPI

- Ingen ny topp vid 150 ppm i NMR spektrumet – ingen reaktion mellan modellsubstanten och CO_2 ?

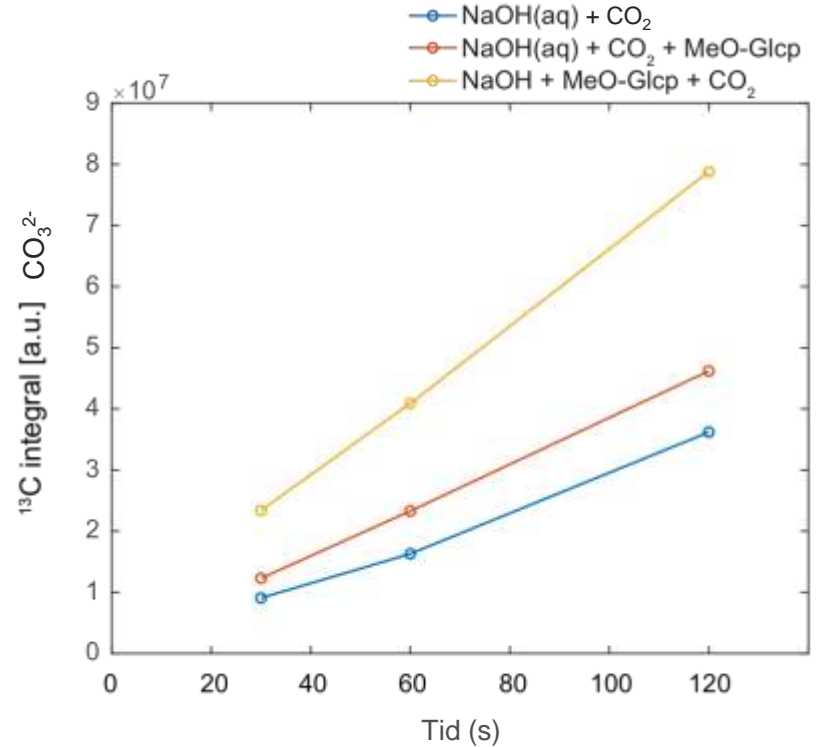
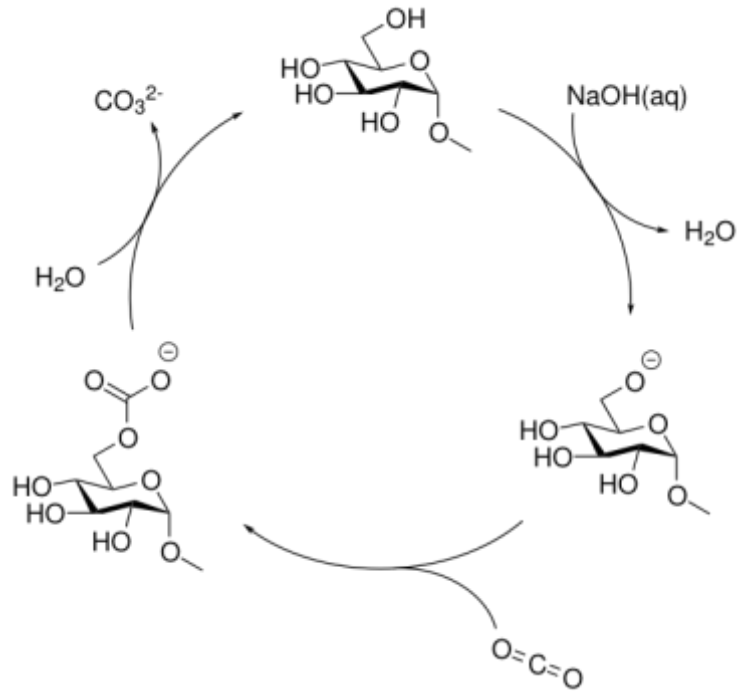
^{13}C NMR SPEKTROSKOPI



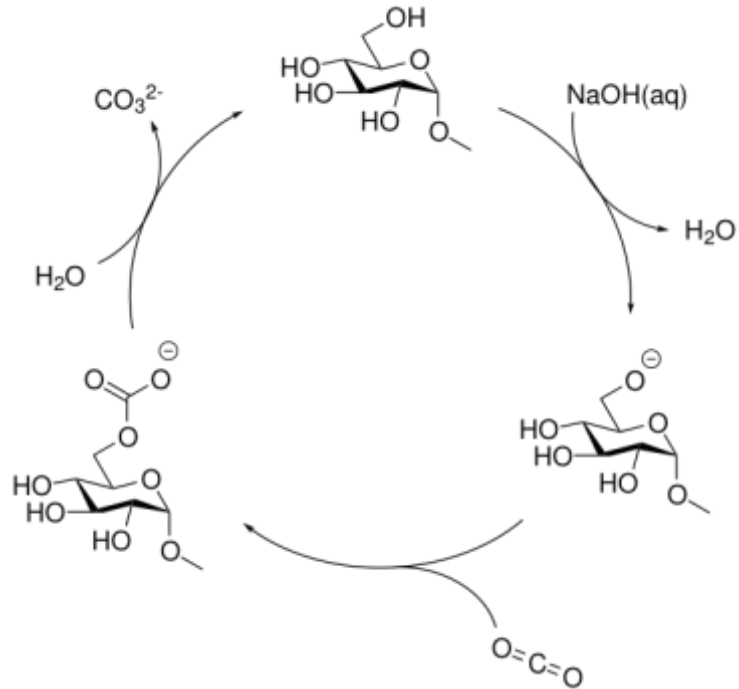
^{13}C NMR SPEKTROSKOPI



^{13}C NMR SPEKTROSKOPI



KATALYTISK CYKEL



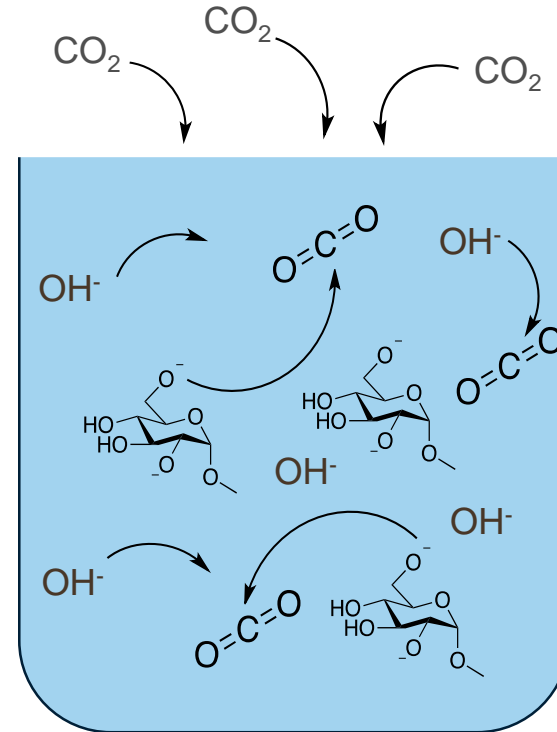
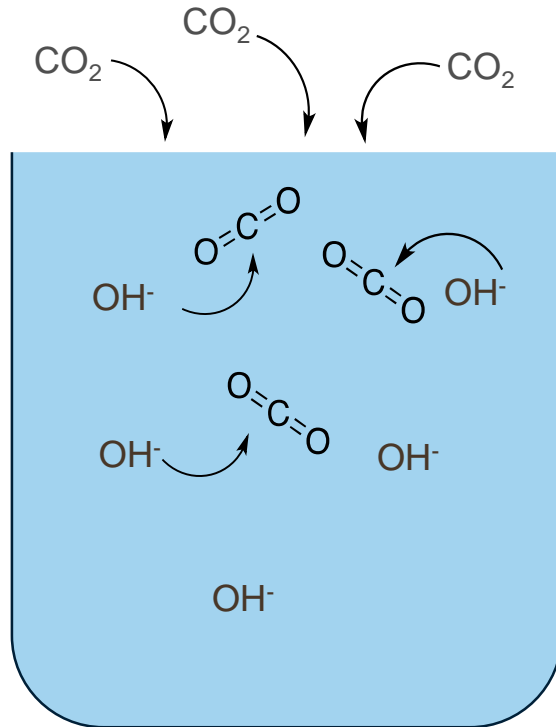
- Deprotonerad methyl α -D-glucopyranoside ingår i en katalytisk cykel för att omvandla CO_2 till CO_3^{2-}
- Alkykarbonater kan syntetiseras genom reaktion av CO_2 med en alkohol i NaOH ^{10,11}
- Reaktionshastigheten är 6-7 gånger snabbare mellan glyceroxid och CO_2 än mellan OH^- and CO_2 ¹²

10. C. Faurholt, *Z. Physik Chem B.*, 1927, **126**, 85-104.

11. B. O. Heston, O. C. Dermer and J. A. Woodside, *Proc. Okla. Acad. Sci.*, 1943, **23**, 67-68.

12. D. Song and G. T. Rochelle, *Chem. Eng. Sci.*, 2017, **161**, 151-158.

SAMMANFATTNING



SAMMANFATTNING

För industriella applikationer kommer mängden CO_2 som omvandlas till karbonat i systemet vara viktig att kontrollera för att undvika försämrade kvalitet på lösningsmedlet och gelning av den upplösta cellulosan.

TACK TILL:

- Södra Skogsägarnas stiftelse för forskning, utveckling och utbildning för finansiering
- Alla som varit del av Avancell projektet
- Mina handledare and medförfattare:
 - Diana Bernin
 - Merima Hasani
 - Åsa Östlund
 - Hans Theliander





CHALMERS

AMOUNT OF ABSORBED CO₂

