

基礎物性部会 NEWS LETTER

No. 2 (January, 2015)

基礎物性部会の News Letter 2 号をお届けします。さて新年に入って、大学関係者にとっては入学試験、卒業・修士論文の審査、卒業と続くこの時期、何かとお忙しいことと思います。また企業でも、3 月末が年度末にあたる方はいつにも増して多忙な毎日をお過ごしではないでしょうか。そのような時期ですが、3 月 19 日（木）～21 日（土）には、化学工学会の第 80 年会が芝浦工業大学の豊洲キャンパスにて開催されます。すでに部会員の皆様には、前回の年会から始まったポスター賞の審査を担当する審査員について、御協力をいただいているところですが、本年会にも多数の部会員に参加いただけるように、この場を借りて部会長より改めてお願い申し上げます。

その年会ですが、学会ホームページ等ですでに告知されているように、今回から、参加費および懇親会費が改定されました。より懇親会に積極的に参加していただくとの趣旨から、正会員の懇親会費は従来の 7,000 円から 5,000 円に値下げ（事前登録時）され、正会員の参加費は逆に 8,000 円から 10,000 円に値上げされました。つまり、参加費と懇親会費を合わせた総額はこれまで同額ということですから、懇親会への参加をお薦めします。また初めての試みとして、19 日の 13 時より産業セッションが企画されています。これは、「産業界がリードする化学工学の未来 – 今日の「夢」を明日の「日常」–」に変えると題して、産業界の会員の発意によりテーマ設定された次のようなセッション群、『忘れてはいけない単位操作』、『現場力の維持向上と安全確保の取り組み』、『産学官コラボレーションによる新たな価値創造』、『新産業域に見る技術イノベーション』、『化学関連産業の経営課題シリーズ』、また総括講演として『日産自動車における電気自動車、燃料電池車の開発と実用化の歴史（仮題）』そしてポスターセッションを併設した名刺交換会が行われるものです。詳細は学会のホームページをご覧くださいと思いますが、部会員の皆様にも興味を持っていただける内容となっておりますので、第 1 日目からの参加をお待ちしています。

合わせて基礎物性部会として、年会時の部会員集会を 20 日（金）の 12 時から 13 時、懇親会を学会前日の 18 日（水）の夕刻に予定していますので、こちらにも奮ってご参加ください。よろしく願いいたします。

なお、年会に止まらず秋季大会についても、従来のシンポジウムとは異なる「シンポジウム」が計画されるなど、新たな企画・運営方針案が本部秋季大会運営委員会から示されておりますので、20 日の部会員集会において報告させていただきます。

最後に、日本大学名誉教授の栃木勝己先生が化学工学会名誉会員に理事会から推薦されることになりました。誠におめでとうございます。

基礎物性部会 部会長 栗原 清文（日本大学）

第7回分子熱力学および分子シミュレーション国際会議 (MTMS 2015) の予告

第7回分子熱力学および分子シミュレーション国際会議 (7th International Symposium on Molecular Thermodynamics and Molecular Simulation, MTMS 2015) が、2015年8月4日～7日に福岡大学にて開催されます。この国際会議は化学工学会基礎物性部会と超臨界流体部会の共同主催で、3年毎に日本で開催されています。日本だけでなく世界各国の研究者により、化工物性や超臨界流体の基礎から実用に至る最新の研究成果が発表される予定です。ホームページを (<http://mtms15.jimdo.com/>) に掲載しています。多くの皆様の発表およびご参加をお願いします。

岩井 芳夫 (九州大学)

大会日程

Tuesday, August 4, 2015	Registration Welcome reception
Wednesday, August 5	Opening session Keynote lecture Scientific session
Thursday, August 6	Scientific session Excursion Banquet
Friday, August 7	Scientific session Closing

締め切り日

Abstract deadline for Orals and posters	March 31, 2015
Early registration	April 1 - June 15, 2015
Intimation about the abstract acceptance	April 30, 2015
Deadline for manuscript submission	June 15, 2015
MTMS'15	August 4-7, 2015

化学工学会第 46 回秋季大会シンポジウム報告

2014年9月17日(水)から19日(金)まで九州大学伊都キャンパスで開催された公益社団法人 化学工学会(SCEJ)第46回秋季大会にて、当部会は、「最先端プロセスを支える基礎物性－測定とシミュレーション－」(オーガナイザー:三島健司(福岡大学)・佐々木満(熊本大学)・春木将司(広島大学))と題したシンポジウムを開催した。本シンポジウムは、大会2日目と3日目にU会場にてU204-U221、U303-U309として開催された。分離、精製、反応、材料、環境、エネルギーなど最先端プロセスの実現を図る上で基礎物性研究は必要不可欠である。その対象系は、より複雑で広範囲になってきており、信頼性の高い測定データの蓄積や高精度な推算・シミュレーション技術への要求が増している。本シンポジウムでは、最先端プロセスを支えるために必要となる物性は何かを明らかにし、最新の測定データと推算・シミュレーションがどのように活用されているかを討論することを目的に企画し、2件の展望講演ならびに18件の研究発表があった。

1件目の展望講演は、(株)応用物性研究所の大場茂夫先生に、「プロセス設計に必要な物性値」と題し、実際の化学プラントのプロセス設計に関して、そこで実際に利用されているプロセスシミュレーション・物性値ならびに計算方法について講演いただいた。2件目の展望講演は、東北大学大学院工学研究科附属超臨界溶媒工学研究センターの佐藤善之先生に、「ポリマー+超臨界流体系の相平衡ならびに粘度」と題し、ポリマーと超臨界流体からなる系における相平衡組成ならびに粘度に関する種々の測定方法および状態方程式などを用いたそれらの相関方法ならびに推算方法について講演いただいた。

本シンポジウムでは、10件の学生賞対象講演から最も優秀な発表を行った1名と優秀な発表を行った2名の学生を厳正なる審査によって選び、全ての講演終了後、U会場にて表彰した。学生の発表は例年以上にレベルの高い僅差の争いで、惜しくも受賞を逃した学生の皆さんも受賞者に劣らない素晴らしい発表であった。

[最優秀学生講演賞]

中村 彪 様 (日大院工)

「高圧下における密度・粘度・ガス溶解度測定装置の開発」

[優秀学生講演賞]

佐藤 隆志 様 (関西大環都工)

「有機溶媒に対するガス溶解度の Hansen 溶解度パラメータを用いた相関」

渡邊 正輝 様 (日大院工)

「磁気浮遊天秤を用いたイオン液体のCO₂溶解度に及ぼすアニオン効果の検証」



学生賞受賞者と大場副会長

本シンポジウムでは、学生会員、正会員の発表を問わず大変活発な議論が行われ、基礎物性研究に対する期待の高さを改めて示す結果になった。皆様の多大なるご協力により、本シンポジウムを成功裏に終えることができ、オーガナイザーを代表し、心より御礼申し上げます。

三島 健司 (福岡大学)



【最優秀学生講演賞】

高圧下における密度・粘度・ガス溶解度測定装置の開発

日本大学大学院工学研究科 中村 彪

高圧下における混合物の密度、粘度、ガス溶解度は、分離精製プロセスの設計や操作の際、必要不可欠な基礎物性データである。これらの基礎物性データは、既存の装置で測定が可能であるが、独立した既存の装置では必要試料量が多く、高価な試料の測定には不向きである。

そこで本研究では、高圧下における密度、粘度、ガス溶解度を極めて少ない試料で測定可能な装置の開発を目指した。また実験装置及び実験方法の確認のため、313.15 Kにおける二酸化炭素+メタノール系の飽和圧力をシンセチック法で決定した。得られた測定データから、飽和圧力時の密度、粘度を決定した。

Fig. 1 に開発した装置図を示す。本装置は、6方バルブを切り替えることで密度測定部、粘度測定部、試料調整用体積可変セル部の3つの部分に独立することが可能である。本装置は、振動管式密度計、転落球式粘度計を備え、同一条件下での密度・粘度・ガス溶解度を測定可能である。二酸化炭素+メタノール系 313.15 K における密度、粘度、ガス溶解度の測定結果は文献値と一致し、本装置を用いた密度、粘度、ガス溶解度の測定が可能であることを確認した。今後は新たな物性データの蓄積に力を注ぎたいです。

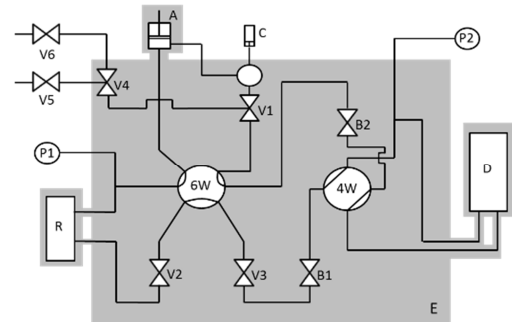


Fig. 1 Schematic diagram of experimental apparatus.

A: variable volume cell, B: variable volume valve, C: circulation pump, D: density meter, E: constant temperature liquid bath, P: pressure gauge, R: rolling ball viscosity meter, V: valve, 6W: six way valve, 4W: four way valve



【優秀学生講演賞】

有機溶媒に対するガス溶解度の Hansen 溶解度パラメータを用いた相関

関西大学大学院理工学研究科 佐藤 隆志

この度は、基礎物性部会主催シンポジウムにおきまして優秀講演賞を頂き、誠に光栄に存じます。今回の受賞を励みに、今後ますます研究に精進していきます。

Hansen 溶解度パラメータ (HSP) は高分子の溶解性や粉体の分散性の評価など幅広い分野で用いられています。液体や固体の HSP について様々な研究が行われていますが、気体の HSP に関する研究はほとんど報告されておらず、実験による算出方法は確立されていません。本研究では、数十種の有機溶媒に対するガス溶解度を用いて相関を行うことによって気体の HSP を

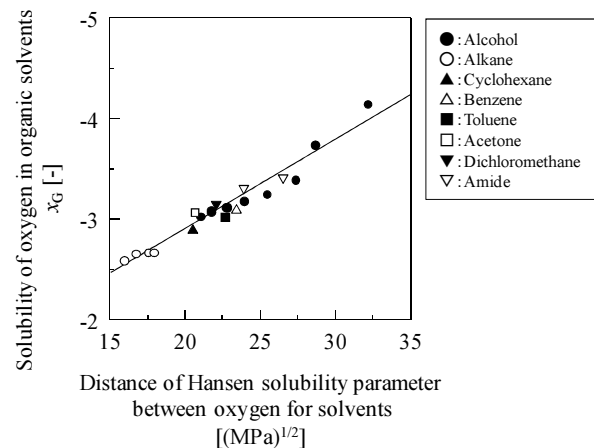


Fig.1 Relationship between distance of Hansen solubility parameter and solubility of oxygen

算出しました。

酸素と溶媒の HSP の差と溶媒に対する酸素の溶解度の関係を Fig. 1 に示します。我々が提案する新しい気体の HSP を算出する方法でアルカンや希ガスを含む 11 種の気体について HSP を算出した結果、気体と溶媒の HSP の差とガス溶解度の対数には相関係数が 0.9 以上の高い相関関係が確認できました。算出したアルカンの HSP は文献値とも良好な一致が確認できました。



【優秀学生講演賞】

磁気浮遊天秤を用いたイオン液体の CO₂ 溶解度に及ぼすアニオン効果の検証

日本大学大学院工学研究科 渡邊 正輝

地球温暖化による気候変動を防止するため、CO₂ などの温室効果ガスを回収する必要がある。近年、イオン液体を用いる CO₂ 物理吸収プロセスが注目されている。そこで、本研究では、イオン液体の CO₂ 溶解度に及ぼすアニオン効果を検証するため、磁気浮遊天秤を用いて 313.2 K における CO₂ 溶解度を測定した。

Fig. 1 に、イミダゾリウム系イオン液体に対する CO₂ 溶解度を示す。各イオン液体の CO₂ 溶解度は、圧力の上昇に伴い増加し一般的な物理吸収の挙動を示した。また、アニオンが [BF₄]⁻、[NFBS]⁻、[TFSA]⁻、[BETA]⁻ と変化するにつれ、CO₂ 溶解度は増加した。[TFSA]⁻ や [BETA]⁻ のような対称構造を持つアニオンは、非対称構造の [NFBS]⁻ と比べ高い CO₂ 溶解度を示したが、[BF₄]⁻ はアニオンサイズが他のアニオンに比べて小さく、低い CO₂ 溶解度を示した。これらのことから、CO₂ 溶解度はアニオンの構造や分子量、CO₂ アニオンの相互作用、アニオン-カチオンの相互作用など複数の因子が複雑に関係していると考えられる。

今回の優秀講演賞受賞を励みに、今後、解析方法の改良と更なるデータの蓄積に取り組んでいきます。この度は、どうもありがとうございました。

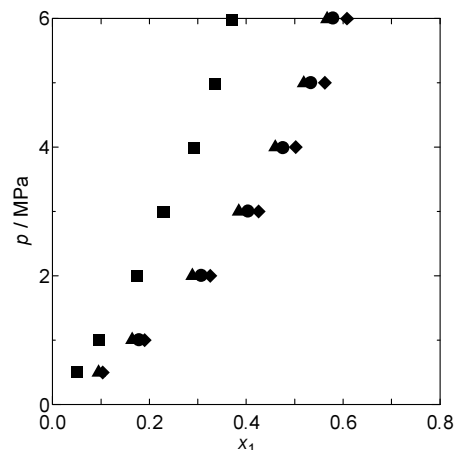


Fig. 1 Solubility of carbon dioxide (l) in imidazolium based ionic liquids at 313.2 K.

●: [Emim][TFSA]¹⁾, ▲: [Emim][NFBS]¹⁾,
◆: [Emim][BETA]¹⁾, ■: [Emim][BF₄]

1) M. Watanabe et al., Preprints of the 16th SECJ Students Meeting, Japan, A16, Tokyo (2014).

化学工学会第 46 回秋季大会シンポジウム 「亜臨界・超臨界流体技術の最先端基礎物性研究」報告

2014年9月17日(水)から19日(金)まで九州大学伊都キャンパスで開催された化学工学会第46回秋季大会において、超臨界流体部会と基礎物性部会のジョイントシンポジウム「亜臨界・超臨界流体技術の最先端基礎物性研究」が、初日の9月17日に開催されました。オーガナイザーは超臨界流体部会より3名：川波 肇様(産総研)・中村 真様(ダイダシ)・秋月 信先生(東京大)、基礎物性部会より筆者1名の合計4名で、本シンポジウムを運営しました。申し込みは一般講演7件、招待講演1件の合計8件でした。相平衡や溶解度、拡散係数などに関する研究内容の発表があり、活発な討論が繰り広げられました。



本シンポジウムのオーガナイザー
(左から松田、川波、秋月、中村)

招待講演は慶応義塾大学の太田 亮先生に「二酸化炭素分離に適したクラスハイドレートの探索と物性」というタイトルで行っていただきました。太田先生は、従来のCO₂分離技術である化学吸収法や、吸着剤や膜などを用いた物理的方法以外の新たな方法として、CO₂含有ガスと水とを物理的に反応させてクラスハイドレートを生成させるハイドレート法に着目され、CO₂分離に適するハイドレートの探索を進めた最近の物性研究の成果について紹介されました。また、太田先生は招待講演後の一般講演に対しても活発な討論をされておりました。

本シンポジウムでは6件の学生発表を対象に学生賞の審査を行いました。どの発表も非常にレベルが高く、上位が僅差であったため、今回は3名が学生賞を受賞しました。学生賞の受賞者と発表題目は次の通りです。

- 伊藤 祥太 様(福岡大工)
「超臨界二酸化炭素の圧力誘起法を用いたpH応答性高分子マイクロコーティング」
- 松川 博亮 様(東京理科大)
「二酸化炭素/シリコンアルコキシド/ポリマー系の相平衡」
- 佐野 恭平 様(信州大院理工)
「超臨界二酸化炭素に対するテオフィリンの溶解度に対する結晶多形の影響」



本シンポジウムの学生賞授与式での様子

最後に、本シンポジウムが成功裏に閉幕したことに対し、発表者・審査員・座長・参加者を含め、関係されたすべての皆様に厚く御礼申し上げます。

松田 弘幸(日本大学)



【学生賞】

超臨界二酸化炭素の圧力誘起法を用いた pH 応答性高分子マイクロコーティング

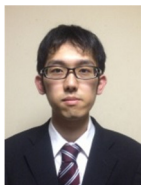
福岡大学大学院工学研究科 伊藤 祥太

この度は荣誉ある学生賞を頂き、誠に有難うございます。この経験を糧に、今後も研究に励みたいと思います。従来、有機溶媒や界面活性剤を用いたカプセル化方法、コーティング方法は数多く存在しますがこれらには有害物質の製品への残留という問題があります。そこで本研究では従来の有機溶媒に変わるものとして、生体毒性が非常に低い超臨界二酸化炭素を機能性溶媒として用いることを検討しました。この方法では有機溶媒を製造プロセスで使用していないため、製品内に残る有害物質の残留を軽減することが出来ます。またドラッグデリバリーシステム(DDS)の観点から、目的の場所にそのカプセルが到達したときに薬剤を放出するという機能を付加させようと考えました。そこでコーティング物質には pH 応答機能性ポリマーとしてオイドラギットを使用し、助溶媒を少量添加することにより超臨界中で直径数マイクロのカプセルを製造することに成功しました。

製造したマイクロカプセルは pH 応答性を有しており、pH の変化によりカプセルからの薬剤の徐放を制御できることが確認されました。また添加剤の濃度や生成温度等の操作因子を変えることでカプセルの粒子径制御が容易であるという点から、将来的には超臨界を用いたマイクロカプセル化が DDS の分野で期待されると思います。

ドラッグデリバリーシステム (DDS) の開発

・薬剤として機能させたい部分に直接機能させるシステム



【学生賞】

二酸化炭素/シリコンアルコキシド/ポリマー系の相平衡

東京理科大学大学院 松川 博亮

近年、環境・エネルギー問題が非常に注目されており、この問題を解決する手段として高性能断熱材の開発が考えられている。高性能断熱材の候補の一つとして気泡内部を高断熱物質であるシリカエアロゲルで満たした高分子複合発泡体があり、商業的に生産するために、発泡とゲル化を連続的に行うプロセスが検討されている。この新規プロセスを確立するためには、二酸化炭素/シリコンアルコキシド/ポリマー系の相挙動を把握することが必要不可欠である。そこで本研究では、二酸化炭素/シリコンアルコキシド/ポリマー多成分系の相平衡の測定を目的とした。

相平衡の測定には一般的な synthetic 法の装置を用

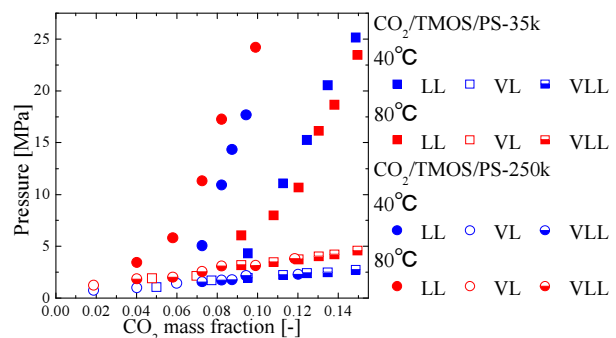
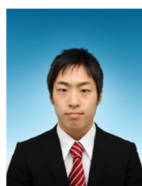


Fig. CO₂/TMOS/PS 三成分系の相図

いて、目視により相境界の決定を行った。実験にはシリコンアルコキシドとしてオルトケイ酸テトラメチル (TMOS)、ポリマーとしてポリスチレン (PS) を用いた。本系では、気液 (VL)、液液 (LL)、気液液 (VLL) 平衡が観測された。系内の温度、組成、ポリマーの分子量の影響を検討し、既往の研究であるポリマーとしてポリメタクリル酸メチル (PMMA) を用いた系との比較を行った。

気相の分離 (VLE・VLLE) にはポリマーの存在が関与していないことがわかった。対して、液液の相分離 (LLE) はポリマーの違いによる影響があらわれており、その理由については検討中である。



【学生賞】

超臨界二酸化炭素に対するテオフィリンの溶解度に対する結晶多形の影響

信州大学大学院理工学研究科 佐野 恭平

このたびは化学工学会第 46 回秋季大会において学生賞を頂き、誠に有難うございます。指導教員の内田先生を始めとする共同研究者の皆様のご指導ご鞭撻の賜物だと思っております。今後も今回の受賞を励みに研究に精進していきます。

本研究では、超臨界二酸化炭素に対するテオフィリンの溶解度測定を試みました。その際、溶解度測定後の溶質溶解容器内のテオフィリンの結晶構造を分析し、結晶構造の差異 (結晶多形) が溶解度に与える影響について検討しました。図 1 に、温度 338.2 K の超臨界二酸化炭素に対するテオフィリンの溶解度 y_2 を示します。これから、圧力 22.0 MPa では、同じ温度下で 3 つの溶解度データ (Run No.1~3) が得られることがわかります。この理由として、テオフィリンが結晶多形転移を起こしたことが考えられます。そこで、原薬と溶解度測定後 (Run No. 2 および 3) のテオフィリンに対して粉末 X 線回折 (XRD) 分析を行いました。その結果、テオフィリン原薬は速度論的室温安定形 (Form II) であるのに対して、溶解度測定後のテオフィリンは Form II と熱力学的室温安定形 (Form IV) の混合物であることがわかりました。つまり、超臨界二酸化炭素存在下において、Form II のテオフィリンの一部が Form IV へ結晶多形転移を起こすことが判明しました。さらに、Form IV の割合が多いほど超臨界二酸化炭素に対するテオフィリンの溶解度が大きくなることがわかりました。本研究では、超臨界二酸化炭素によりテオフィリンの結晶多形転移が生じ、さらに超臨界二酸化炭素に対する溶解度に影響を与えることを明らかにしました。

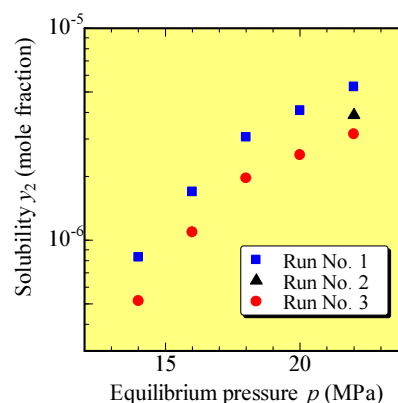


図 1 超臨界二酸化炭素に対するテオフィリンの溶解度 (338.2 K)

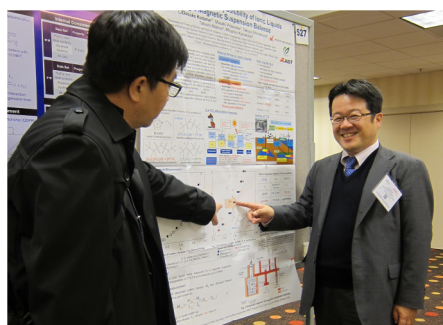
2014 AIChE Annual Meeting 参加報告

2014年11月16～21日に、アメリカ合衆国・ジョージア州・アトランタの Atlanta Marriott Marquis 及び Hilton Atlanta で開催された 2014 AIChE Annual Meeting に参加した。ジョージア州の州都アトランタには、CNN や Coca-Cola、デルタ航空などアメリカを代表する企業の本社があり、アメリカ合衆国南部の商業・経済の中心地である。1996年に夏季オリンピックが開催されたことで、アトランタをご存知の方も多と思う。また、アトランタには、アメリカを代表する工科大学のひとつの Georgia Institute of Technology (Georgia Tech)があり、私自身 2005～2006年の1年間留学した懐かしい地でもある。

AIChE Annual Meeting への参加は今回初めてで、毎日驚きの連続であった。化学工学会の年会や秋季大会と比較にならないほど規模が大きく、私の専門でもある化学工学熱力学や超臨界流体、イオン液体に関するセッションが、同時に複数走っていた。イオン液体関係では、“Ionic Liquids: Thermodynamics and Properties”、“Ionic Liquids: Phase Behavior to Applications”、“Interfacial Phenomena in Energy Systems and Ionic Liquids”といったセッションがあり、その内容が、物性、相平衡、エネルギー、材料など多岐に渡ることがわかる。プログラムを見ても、演題に“ionic liquid”とある発表だけで200件近くあり、発表会場が分散していることから全てを聴講することは、事実上不可能であった。夜には、大学や企業ごとのパーティーが会場内のあちこちで開催された。化学工学会主催のパーティーでも、用意されていた寿司があつという間になくなるなど100名近い参加者があり、盛会であった。なお、このパーティーの様子は、化学工学会の公式 Facebook (<https://www.facebook.com/scej.org>)に紹介されているので、是非、ご覧ください。

11月17日には、流体の分子モデリングなどで著名で、日本にも度々来日され講演いただいている Prof. Peter Cummings (Vanderbilt University)の榮譽を讃える特別セッションが開催され、栃木勝己先生(日本大学名誉教授)が co-chair を務められた。また、“Thermodynamics and Transport Properties (Area 01A)”などのポスターセッションがあり、私は、“Effect of Anions on CO₂ Solubility of Ionic Liquids Using a Magnetic Suspension Balance”と題し、発表した。同セッションでは、その他46件の発表があり、当部会関係では、栃木勝己先生が、“Prediction of Kinematic Viscosities and Vapor-Liquid Equilibria for Ternary Systems Using Activity Coefficient Model”と題し、口頭でのフラッシュ発表も含めポスターにて発表された。また、11月19日には、“Thermophysical Properties and Phase Behavior IV (Area 01A)”において、8件の口頭発表 co-chair を Dr. Erik E. Santiso (North Carolina State University) とともに務めた。

次回の AIChE Annual Meeting は、2015年11月8～13日にユタ州・ソルトレイクシティで開催される。本部会から、多くの参加発表者があることを期待したい。



ポスター発表中の筆者



フラッシュ発表中の栃木先生

児玉 大輔 (日本大学)

部会活動功労賞（部会 CT 賞）受賞式

NEWS LETTER 1 号および部会員集会において紹介の通り、広島大学の春木将司先生が昨年度の部会 CT 賞を受賞され、その表彰式が第 79 年会時に行われた基礎物性部会の部会員集会（平成 26 年 3 月 19 日(水)）終了後に執り行われました。式には増田隆夫部会 CT 長においでいただき、部会 CT 長から表彰していただきました。春木先生には改めて、部会活動に対する多大なご貢献に対して厚く御礼申し上げます。

基礎物性部会 部会長 栗原 清文（日本大学）



（部会 CT 賞）受賞式

これからの行事予定

平成 27 年 3 月 18 日夕刻	部会懇親会（東京）
平成 27 年 3 月 20 日昼	化学工学会第 80 年会 部会集会（芝浦工業大学）
平成 27 年 5 月 29～30 日	分離技術会年会 2015（明治大学生田キャンパス）
平成 27 年 8 月 5～7 日	MTMS 2015（福岡大学）
平成 27 年 9 月 8 日夕刻（予定）	部会懇親会（札幌）
平成 27 年 9 月 10 日昼（予定）	化学工学会第 47 回秋季大会 部会集会（北海道大学）
平成 27 年 9 月 9～11 日	化学工学会第 47 回秋季大会 シンポジウム（北海道大学）
平成 27 年 11 月 8～13 日	2015 AIChE Annual Meeting（ソルトレイクシティ）

基礎物性部会 部会長

栗原 清文

〒101-8308 東京都千代田区神田駿河台
1-8-14

日本大学理工学部物質応用化学科

TEL: 03-3259-0822

E-mail: kurihara.kiyofumi@nihon-u.ac.jp

基礎物性部会ホームページ <http://www2.scej.org/pp/>

基礎物性部会 事務局担当

松田 弘幸

〒101-8308 東京都千代田区神田駿河台
1-8-14

日本大学理工学部物質応用化学科

TEL: 03-3259-0814

E-mail: matsuda.hiroyuki@nihon-u.ac.jp