

基礎物性部会 *NEWS LETTER*

No. 3 (January, 2016)

巻頭言

皆様にはお健やかに新年をお迎えのことと存じます。新しい年のご活躍とご健康をお祈り申し上げますとともに、本年もどうぞよろしく願いいたします。

さてここに、基礎物性部会の News Letter 3 号をお届けします。本号では、昨年 8 月に開催されました MTMS'15 報告、9 月の第 47 回秋季大会にて開催しました「基礎物性部会シンポジウム」報告、同じく秋季大会にて超臨界流体部会と共催しましたシンポジウム「亜臨界・超臨界を利用した最先端技術」報告を、それぞれ MTMS'15 の実行委員長の岩井先生（九州大学）、「基礎物性部会シンポジウム」のオーガナイザーの 3 名の先生方、東先生（金沢大学）、宮本先生（富山県立大学）、室町様（産総研）、「亜臨界・超臨界を利用した最先端技術」のオーガナイザーの保科先生（日本大学）に執筆していただきました。加えて、両シンポジウムにおいて学生賞を授与された学生の皆さんからの受賞コメントも掲載しておりますので、お目通しください。

また、本年度の AICHe Annual Meeting に参加された栃木先生（日本大学名誉教授）には、「2015 AICHe Annual Meeting に参加して」を寄稿していただきました。この「…参加して」は、25 年以上の長きに渡り AICHe Annual Meeting に参加されてきた栃木先生らしいエッセイ風の内容となっておりますので、こちらも是非、御一読ください（栃木先生は後述するように、この Annual Meeting にて AICHe から Fellow を授与されています）。

話しは変わりますが、3 月 13 日（日）～15 日（火）に、化学工学会の第 81 年会が関西大学の千里山キャンパスにて開催されます。すでに部会員の皆様には、ポスター賞の審査を担当する審査員について、御協力をお願いしておりますが、本年会にも多数の部会員の皆様に御参加いただき、研究発表、質疑応答、懇親会を通して、今後の研究の活性化に繋がっていただければと幸いです。もちろん、基礎物性部会の集会も例年通り、学会中日の 14 日（月）の 12 時～13 時に開催する予定です。今回は私の部会長としての 2 年の任期がこの 3 月に終了することから、次期部会長を選出する大切な集会となります。つきましては、例年にも増して多くの部会の皆様に集会に出席していただき、活発な審議を行っていただけることを期待しております。

なお化学工学会としては、部会の統廃合や分科会の部会への昇格など、今後の部会がどうあるべきかの議論を始めています。本年度は部会の現状把握にとどまっていますが、次年度以降、部会長を中心に部会内でも、基礎物性部会の今後を検討することを求められることになろうかと思っておりますので、部会員の皆様の変わらぬ御支援と御協力を、改めてお願い申し上げます。

基礎物性部会 部会長 栗原 清文（日本大学）

7th International Symposium on Molecular Thermodynamics and Molecular Simulation (MTMS'15)の報告

本国際会議は基礎物性部会と超臨界流体部会の共同主催の大会であり、化工物性や分子シミュレーションなどの基礎物性と、基礎物性の応用として超臨界流体やイオン液体などをトピックスとしている。1994年から3年毎に日本で開催され、7回目となる今回は、九州大学・岩井を実行委員長、福岡大学・三島先生、日本大学・栗原先生、応用物性研究所・大場様を副実行委員長として、平成27年8月4日～7日の4日間の日程で福岡市の福岡大学七隈キャンパスにて開催された。参加者は106名であり、うち、海外からの参加者は27名であった。海外参加者の国別内訳は、韓国8名、アメリカ6名、中国6名、アラブ首長国連邦2名、ドイツ2名、デンマーク1名、ポルトガル1名、マレーシア1名であった。また、国内では仙台から九州まで国内全域から本分野の研究者が集まった。発表件数は口頭発表27件(内、Plenary lecture: 1、Keynote lecture: 5、Invited lecture: 9)、ポスター発表50件であった。

学会では、まず4日夕刻から福岡市天神の東映ホテルにてRegistrationとWelcome partyが開催された。

二日目の5日は朝8時30分からのOpening Remarksで始まり、その中で、MTMSの歴史や大会の趣旨が説明された。続いて、Vanderbilt大学のClare McCabe先生のPlenary Lecture(写真1)を含む16件の講演・口頭発表があり、午後7時まで活発な討論がなされた。その後、福岡大学文系センター棟16階のスカイラウンジにおいて夕食会が行われ、参加者の親睦が深めた。また、16階の会場からは福岡タワーや福岡市街、博多湾などが一望でき、日没の時間と重なり雄大な眺めを楽しめたと思われる。



写真1 Clare McCabe先生のPlenary Lecture

三日目は朝8時30分から3件の口頭発表がなされた後、コーヒブレイクをはさんでポスター発表が行われ、活発な意見交換が行われた(写真2)。午後は集合写真(写真3)を撮り、その後Excursionとしてバスで唐津へ移動し、生の松原、唐津城、曳山展示場などを観光した。暑い時期ではあったが、通訳ガイドの説明に熱心に耳を傾けていた。夜はマリゾンにてBanquetが開かれ、博多の郷土芸能である「博多コマ」が披露された(写真4)。Plenary speakerならびにKeynote speakerの皆様からのスピーチ等、和やかな雰囲気での会であった。参加者には会場からの博多湾を望む海浜の眺望も大変好評であった。



写真2 ポスター発表

最終日である7日は8件の講演・口頭発表があり終始活発な討議がなされた。その後、今回より創設された学生ポスター賞の審査発表、および表彰式(写真5)が行われた。なお、ポス

ター賞の審査は招待講演者 15 名により行われ、学生のポスター発表 30 件の内、10 件を表彰した。

最後に日本大学・松田先生より、日本大学・栗原先生を実行委員長として 2018 年に東京地区で開催予定の第 8 回大会 (MTMS'18) についてのアナウンスがなされ、Closing Remarks として岩井より参加者に謝辞を述べ閉会した。

なお、本会で発表された研究発表の一部は、Fluid Phase Equilibria の本会特集号に掲載される予定である。末筆ながら、MTMS'15 の開催にあたり、基礎物性部会より多大な支援をいただいたことに感謝申し上げます。

MTMS'15 実行委員長 岩井 芳夫 (九州大学)

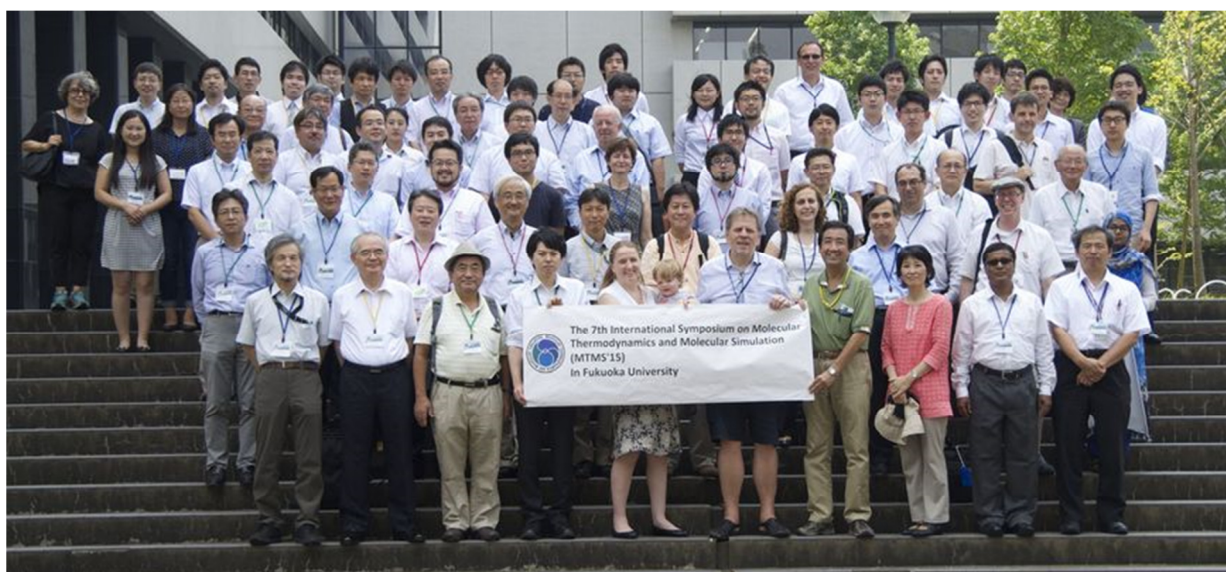


写真 3 集合写真



写真 4 Banquet における博多コマ



写真 5 学生ポスター賞表彰式

化学工学会第 47 回秋季大会基礎物性部会シンポジウム報告

2015 年 9 月 9 日（水）から 11 日（金）まで北海道大学札幌キャンパスにて開催された化学工学会第 47 回秋季大会において、当部会は基礎物性部会セッション（オーガナイザー：東秀憲（金沢大学）・宮本泰行（富山県立大学）・室町実大（産総研））を開催しました。本セッションは、大会 2 日目と 3 日目に H 会場にて H213～H224 および H301～H321 として開催されました。分離、精製、反応、材料、環境、エネルギーなど最先端の持続可能なプロセスの実現には、基礎物性研究は必要不可欠であり、その対象系はより複雑で広範囲になってきている。また、信頼性の高い測定データの蓄積と高精度な推算・シミュレーション技術への要求は増してきており、本セッションでは、次世代技術を支え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技術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 件の招待講演と 2 件の展望講演ならびに 19 件の研究発表がありました。

1 件目の招待講演は、産業技術総合研究所の粥川洋平先生に、「海洋モニタリングのための海水密度・屈折率計測技術」と題し、6桁の精度をもつ高精度海水密度計測技術の開発および海洋中で利用可能な高精度屈折率センサの開発に関してご講演いただきました。2 件目の招待講演は、産業技術総合研究所の竹谷敏先生に、「クラスレートハイドレートによるガス貯蔵と性能評価」と題し、クラスレートハイドレートのガス貯蔵性能に関する紹介とその評価方法についてご講演いただきました。また、2 件の展望講演に関しては、本シンポジウムのオーガナイザーである宮本泰行先生と室町実大先生に依頼し、宮本先生には「混合系熱媒体の Helmholtz 関数型状態方程式の高精度化」と題し、次世代混合系熱媒体の国際標準熱力学モデルの開発に関して、室町先生には「セミクラスレートハイドレートの熱力学的安定性」と題し、比較的環境負荷の低いアンモニウム塩によるメタンハイドレートの生成阻害条件についてご講演をいただきました。急な依頼にもかかわらず講演をご快諾いただきありがとうございました。

本シンポジウムでは、12 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 3 名の学生を厳正なる審査によって選び、全講演終了後 H 会場にて表彰しました。学生の発表は、例年以上にレベルの高い非常に僅差の争いで、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した。

【最優秀学生講演賞】

- ・渡邊 正輝（日大院工）
「シアノ系イオン液体の二酸化炭素吸収特性」

【優秀学生講演賞】

- ・Kunanusont Nattanaï（東工大院理工）
「Mass transfer coefficient of organic solvent in supercritical carbon dioxide drying」
- ・市川 貴啓（日大生産工）
「次世代 BDF 製造プロセスの構築を志向した高級脂肪酸+飽和炭化水素系固液平衡測定と推算」
- ・佐藤 和範（日大生産工）
「ジメチルエーテル+クロロホルム+エタノール混合系の誘電率測定と局所組成モデルによる誘電率の推算」



優秀講演賞受賞者と栗原部会長

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りました。今回、オーガナイザー全員が初めてということもあり、準備の遅れなどいろいろと不備などありましたが、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、心より御礼申し上げます。

東 秀憲（金沢大学）

基礎物性部会にオーガナイザーとして初めて参加させていただきました。部会の先輩として準備から進行までを主導してくださった東先生、共に初参加ながら協力し合った室町様、および部会の皆様に心より厚く御礼申し上げます。また、産総研・粥川先生には招待講演として、高精度な密度・屈折率の計測センサに関する興味深いご研究内容をご紹介いただき誠にありがとうございました。私自身も「混合系熱媒体の Helmholtz 関数型状態方程式の高精度化」と題しまして、熱物性の精密測定とそのモデル化に関する展望講演の機会をいただき、感謝いたしております。流体の基礎物性情報は、工業的に価値のある成分の分離・抽出・加工のプロセス設計にはもちろん必要ですが、それをエネルギー変換用熱媒体（冷媒）として用いた際の熱効率や安全計算等にも、不可欠です。冷媒については、2020年の国際的な規制を控えて代替冷媒の開発が喫緊の課題であり、そのためにもより信頼性の高い熱物性計測およびモデル化が急務となっております。そんな中、今回の基礎物性部会では、大変多くの先生方が困難な高精度測定やモデルの推算精度の改善を精力的に進めておられるのを拝見・拝聴し、大変刺激を受けました。また、そうした高い志をもった先生方との定期的な情報交換や熱い議論は大変意義深く不可欠なものであると、今回のセッションに参加して痛感いたしました。皆様の研究への情熱に感銘を受け、私も次世代冷媒の熱物性の解明とモデル化を軸として、工業的に有意義な基礎物性研究を精力的に進めていくべく、決意を新たにしました次第です。今後とも、部会にて切磋琢磨いたしたく、何卒宜しく申し上げます。

宮本 泰行（富山県立大学）

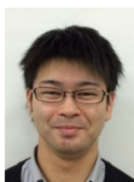
この度、基礎物性部会に入会し、部会セッションのオーガナイザーを担当させていただきました。新入会員であるにもかかわらずオーガナイザーを任せていただいた部会員の方々、また共にオーガナイザーを担当し多くの助言をいただいた東先生、宮本先生に感謝申し上げます。

今回は、ガスハイドレートについて産業技術総合研究所の竹谷様に招待講演をお願いし、私も展望講演と一般講演で発表させていただきました。これまでもガスハイドレートについては発表がありましたが、今回は結晶学的な観点から見た基礎物性ということで、X線によるハイドレートの分析を行っている竹谷様に講演を行っていただきました。また、展望講演ではメタンハイドレートなどのクラスレートハイドレートよりも高温低圧の条件で生成するセミクラスレートハイドレートについても紹介させていただきました。これらの物質はまだ面白い謎が多い物質ですので、今後も継続的にハイドレートの基礎物性について報告していきたいと考えております。

セッションでは学生の発表が大変多く、質疑応答までよく練習していて洗練されていた印象でした。新旧テーマが入り混じり、全体的に議論が活発で物性研究を育てる土壤になっていると感じました。これからも大会等で発表、議論させていただき、勉強していきたいと思っております。今後ともよろしく願いいたします。

室町 実大（産総研）

【最優秀学生講演賞】



シアノ系イオン液体の二酸化炭素吸収特性

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、二酸化炭素 (CO₂) などの温室効果ガスを回収する必要があると、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、シアノ基がイオン液体の CO₂ 溶解度に及ぼす影響を検証するため、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。磁気浮遊天秤による高圧下での測定では浮力が発生するため、これまで CO₂ 雰囲気下に加え、イオン液体は N₂ 吸収しないと仮定して N₂ 雰囲気下でも測定を行い、浮力を補正していた。今回は、測定精度を向上させるため、CO₂ 吸収時におけるイオン液体の密度を Sanchez-Lacombe 式を用いて推算し、浮力を補正を行った¹⁾。Fig. 1 に、[Emim][DCA] の CO₂ 溶解度を示す。本研究で得られた [Emim][DCA] の CO₂ 溶解度は、典型的な物理吸収の圧力依存性を示し、圧力の上昇に伴い増加した。また、既報²⁾ に比べ溶解度は低く、含フッ素置換基を有する [TFSA] と比較すると、[DCA] は [TFSA] より約 38% 低い CO₂ 溶解度を示した。

昨年の優秀学生講演賞に続き、最優秀学生講演賞を受賞できたこと、大変光栄に思います。磁気浮遊天秤の立上げや解析方法についてアドバイスをいただいた佐藤善之先生 (東北大学)、平賀佑也博士研究員 (東北大学) に深く感謝致します。また、指導教員である児玉先生をはじめ、共同研究者の皆様のご指導、研究室の同期、後輩の協力に感謝致します。

【参考文献】 1) Y. Sato et al., *Fluid Phase Equilib.*, 125 (1996) 129-138. 2) J. E. Kim et al., *Fluid Phase Equilib.*, 367 (2014) 151-158.

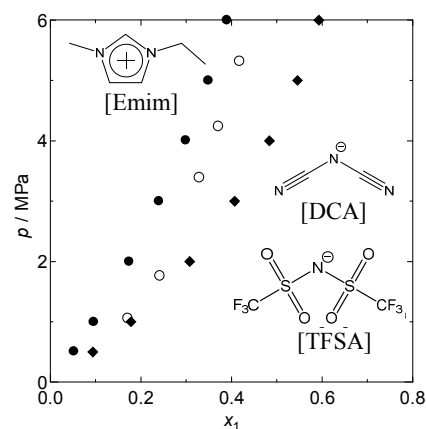


Fig. 1 Solubility of carbon dioxide (1) in ionic liquids at 313.2 K.

●: [Emim][DCA], ◆: [Emim][TFSA], ○: [Emim][DCA]¹⁾

【優秀学生講演賞】



Mass transfer coefficient of organic solvent in supercritical carbon dioxide drying

東京工業大学院理工学研究科化学工学専攻 クナーヌソン ナッタナイ

この度、化学工学会第 47 回秋季大会の基礎物性部会におきまして優秀学生賞を頂き、誠に光栄に存じます。今回の受賞を励みに、今後も研究に貢献したいと思っています。

今回は超臨界乾燥における有機溶媒の物質移動というテーマで発表させて頂きました。ナノ粒子が分散している溶媒を蒸発乾燥する場合、表面張力が高いため、ナノ粒子が凝集してしまいます。一方、超臨界乾燥する場合、超臨界流体が溶媒と均一相形成をし、構造を保ったまま乾燥を行うことが可能となります。ここで、有機溶媒種と超臨界乾燥圧力の違いに従い、均一相形成時間が変化することが確認されました。その変化により、超臨界乾燥におけるメカニズム、及び物質移動挙動のモデルを創造しました。Fig. 1 は有機溶媒種における超臨界乾燥圧力と無次元数 X の関係を示しています。この無次元数 X は超臨界流体のモル量と有機溶媒のモル量の比と定義しました。Fig. 1 から、乾燥圧力が上昇すると、無次元数 X が現象する傾向が見られます。また、有機溶媒の蒸気圧と超臨界流体との親和性の値を利用して、無次元数 X のモデルを立て、結果として AARD 値が約 20% でした。さらに、物質移動挙動のシミュレーションとして、二層膜説の理論を利用し、物質移動抵抗を計算しました。結果として、有機溶媒相での物質移動抵抗が超臨界流体相より非常に大きいことが分かりました。また、有機溶媒相の抵抗値と均一相形成時間をプロットすると直線関係が得られました。すなわち、抵抗値が大きい有機溶媒は均一形成時間が長いということを明らかにしました。

本研究では、超臨界乾燥における基礎物性のデータに貢献しましたので、今後超臨界乾燥の様々なアプリケーションやプロセスの発展に応用したいと思います。

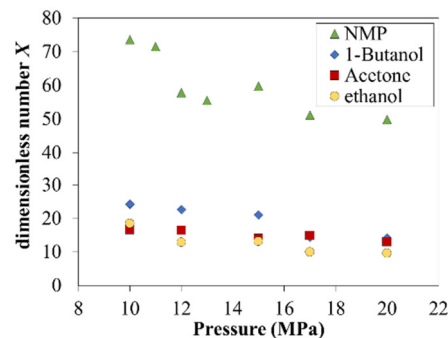


Fig. 1 有機溶媒種における超臨界乾燥圧力と無次元数 X の関係



【優秀学生講演賞】

次世代 BDF 製造プロセスの構築を志向した
高級脂肪酸 + 飽和炭化水素系固液平衡測定と推算

日本大学大学院 生産工学研究科 市川貴啓

この度は、基礎物性部会シンポジウムにおきまして栄誉ある学生講演賞を頂き誠に有難うございます。今後もこの経験を糧にして日々の研究に精進していきます。以下に本研究の概要を紹介致します。

廃油脂から得られる飽和高級脂肪酸は、Ni-W 系脱硫触媒を用いる水素化脱炭酸反応により飽和炭化水素に転換できます。この精製プロセスには、融点差の大きい飽和炭化水素と飽和高級脂肪酸の正確な固液平衡関係の把握が必要となります。本研究では、新たに装置を開発し、大気圧条件下で飽和高级脂肪酸+飽和炭化水素系の 2 成分系固液平衡を測定し、Redlich-Kister 式による推算法を検討しました。水素化脱炭酸反応に対応する Undecane + Lauric acid、Tridecane + Myristic acid、Pentadecane + Palmitic acid、Dodecane + Lauric acid、Tetradecane + Myristic acid、Hexadecane + Palmitic acid 系の固液平衡測定結果を Fig. 1 に示します。Undecane + Lauric acid 系は単純共晶系と仮定し実測値を Schroder-van Laar 式で相関し、結果を Fig. 1 に実線で示しました。各脂肪酸と炭化水素の結晶形および溶液構造が同一と仮定して、Undecane + Lauric acid 系の実測値より最小二乗法で決定したパラメータ A、B、C を用いて、他の系の固液平衡関係を推算し、その結果を Fig. 1 に破線で示しました。いずれの系も 1 組のパラメータで実測値を良好に表すことが分かりました。また、計算結果を用いて BDF 製造プロセスを想定した場合、反応率を上げなくとも、室温近傍まで冷却することで飽和炭化水素のモル濃度を 90% 以上濃縮可能なことが明らかになりました。晶析プロセスと蒸留プロセスを併用することで高純度の BDF が得られる可能性が示唆されました。今後は、様々な種類の脂肪酸および炭化水素の多成分系固液平衡測定を行い、より有用な BDF 製造プロセスの構築を目指したいと思います。

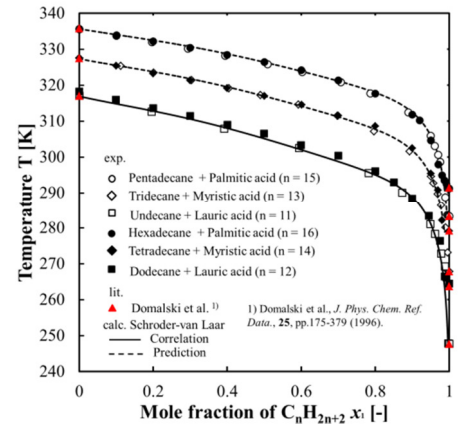
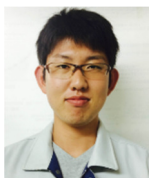


Fig. 1 飽和炭化水素 (1) + 飽和高级脂肪酸 (2) 系の固液平衡関係



【優秀学生講演賞】

ジメチルエーテル+クロロホルム+エタノール混合系の
誘電率測定と局所組成モデルによる誘電率の推算

日本大学大学院 生産工学研究科 佐藤和範

この度は、基礎物性部会優秀学生優秀講演賞を賜り、大変光栄に思います。今後も、研究により一層の努力をして参ります。簡単ではございますが、私の研究内容を説明させていただきます。

液化ジメチルエーテル (以下 DME と記す。) に有機溶媒を混合することで、溶媒の組成に応じて揮発性や極性を高度に制御可能な分離溶媒として期待できます。しかし、ジメチルエーテル+有機溶媒混合系の誘電物性データは極めて僅少です。そこで、本研究では、303.2 K、1 MPa 下における DME + クロロホルム、DME + エタノール、クロロホルム + エタノール、DME + クロロホルム + エタノール混合系に対する複素誘電スペクトルを測定し、得られた誘電物性に対する組成依存性について研究しています。

Figure 1 にクロロホルム + エタノール混合系以外の誘電率の組成依存性と気液平衡から決定したパラメータを用いた局所組成モデルによる誘電率の推算結果を示しました。混合系中のエタノールの割合が増えると誘電率の組成依存性が大きくなることがわかりました。また、局所組成モデルにより、いずれの混合系においても平均相対偏差 10.1% で誘電率を推算できることを確認しました。

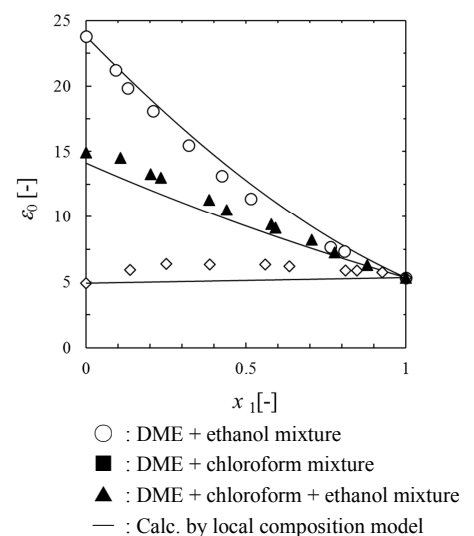


Fig. 1. DME composition dependence of the dielectric constants for DME + organic solvent mixtures at 303.2 K and 1 MPa.

化学工学会第 47 回秋季大会シンポジウム 「亜臨界・超臨界を利用した最先端技術」報告

2015 年 9 月 9 日（水）から 11 日（金）まで北海道大学札幌キャンパスで開催された化学工学会第 47 回秋季大会において、超臨界流体部会セッション「亜臨界・超臨界を利用した最先端技術」の初日の 9 月 9 日に、基礎物性部会のジョイントセッションとして開催されました。オーガナイザーは超臨界流体部会より 2 名：牧野貴至様（産総研）・後藤敏晴様（日東紡績）、基礎物性部会より筆者 1 名の合計 3 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 16 件、招待講演 1 件、展望講演 1 件の合計 18 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。

招待講演は大阪大学の松林伸幸先生に「溶媒和概念の普遍化に基づくソフト分子集合系の自由エネルギー解析」というタイトルで行っていただきました。松林先生は、溶質・溶媒の概念を普遍化し、溶液・ミセル・脂質膜・タンパク質のようなソフト分子（集合系）に対する分子分配を溶媒和として理解することを目指した研究をされており、溶媒和自由エネルギーを解析のためのエネルギー表示の溶液分布関数理論の定式化と MD 計算との融合について、エネルギー表示溶液理論の考え方と、イオン液体系へのガス吸収、タンパク質の全原子自由エネルギー解析、脂質膜やミセルへの異種分子の結合などの適用例について、ご自身の研究成果をご紹介いただきました。また、松林先生は本セッションでの座長もお引き受けいただき、一般講演に対しても活発なご討論をされておりました。

展望講演では日本大学の松田弘幸先生に「グリーンケミストリーのための代替溶媒の相平衡」というタイトルで行っていただきました。松田先生は、CO₂ 吸収プロセスとして液晶に着目し、CO₂ とネマティック液晶を有する液晶物質の混合系の相平衡、フルオラス溶媒+有機溶媒系の液液平衡および上部臨界溶解温度の測定、再生可能溶媒としての乳酸エチルを用いた酢酸メチル+メタノール+乳酸エチル並びにその構成 2 成分の気液平衡測定についての研究成果について紹介されました。松田先生も本セッションでの座長もお引き受けいただき、一般講演に対しても活発なご討論をしていただきました。

本シンポジウムでは 11 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 2 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。

- 菅原 啓 様（東北大院工）
「超臨界流体精留塔を用いた天然物抽出エキス分画に対する操作因子の効果」
- 和佐田 温彦 様（広大院工）
「超臨界二酸化炭素中におけるポリイミドの高圧蒸着重合」

最後に、本シンポジウムが成功裏に閉幕したことに對し、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。

保科 貴亮（日本大学）



【学生賞】

超臨界流体精留塔を用いた天然物抽出エキス分画に対する操作因子の効果

東北大学大学院 菅原 啓

本研究では超臨界流体精留塔による天然成分の効率的分離を目的としている。本手法の特徴は充填塔に温度勾配等の外的制御により、それに伴う成分の溶解性や気液平衡比の変化を利用して精留効果を高めることである。本発表では超臨界 CO₂ 抽出の実用例のあるホップをモデルとした。

試料には市販のホップエキスを用いた。成分は GC-FID、HPLC-UV により定量した。実験条件は仕込み部温度 313 K、精留塔温度分布 313 ~ 333 K、圧力 10 MPa、溶媒 CO₂ + ethanol (10 mol%)とした。結果は式(1)、(2)で定義した留出物収率と分離度により評価した。

Fig. 1 に主要成分 (Table 1) の留出物挙動を示す。横軸は塔頂からの留出量を示し、縦軸の分離度が大きいほど塔底との差が大きく、分画可能であることを示す。これより、塔頂から Caryophyllene および Humulene が選択的に留出したが、留出量が少ないことが課題である。これは塔頂で気液二相を形成し、気相に分配しやすい成分以外は液相とともに流下したためと考える。今後は温度の最適化を行い、同時に溶質の気液平衡比に基づく精留シミュレーションを行う。

$$\text{Total yield}[-] = \frac{\text{Total mass of fraction}}{\text{Total mass of feed}} \quad (1)$$

$$\text{Separation factor}[-] = \frac{\text{Total mass of each component in Top}}{\text{Total mass of each component in Bottom}} \quad (2)$$

Table 1 主要成分と略称

flavor		bitter	
① 1,5-heptadiene,3,3,6-trimethyl-	(fHep)	⑤ cohumulone	(bCoh)
② β-myrcene	(fMyr)	⑥ humulone, adhumulone	(bHum)
③ caryophyllene	(fCar)	⑦ colupulone	(bCol)
④ humulene	(fHum)	⑧ lupulone, adlupulone	(bLup)

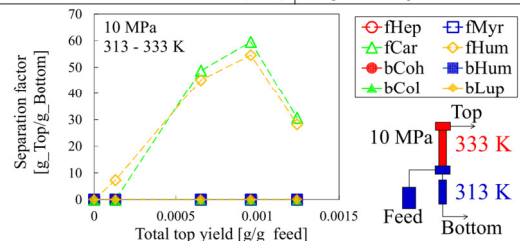


Fig.1 塔頂留出物挙動 (CO₂+ethanol 系)



【学生賞】

超臨界二酸化炭素中におけるポリイミドの高圧蒸着重合

広島大学大学院 和佐田 温彦

本研究では、微細な空間におけるポリイミド(PI)の加工技術を確立することを目的とし、scCO₂ 中での Kapton 系とフッ素系モノマーの重合挙動ならびに PI の蒸着方法について検討した。

蒸着に用いたモノマーは、Kapton 系 PI のモノマーである 4,4'-Oxydianiline (ODA)と 1,2,4,5-Benzenetetracarboxylic anhydride (PMDA)、フッ素系のモノマーである 4,4'-Diamino-2,2'-bis(trifluoromethyl)biphenyl (TFMB)、4,4'-(Hexafluoroisopropylidene)diphthalic anhydride (6FDA)である。また、助溶媒として N,N-dimethylformamide (DMF)を用いた。

まず Kapton 系-フッ素系モノマーの組合せとなる ODA-6FDA 系、TFMB-PMDA 系の 2 つの反応について、scCO₂ 中において、モノマーからポリアミド酸(PAA)への反応挙動の検討 (50°C、30 MPa、DMF 濃度 20 mol%)を行った。その結果、ODA-6FDA 系の場合、反応性は Kapton 系同士と同様高く、TFMB-PMDA 系の場合、フッ素系同士と同様に低いことが分かった。そこで、scCO₂ 重合の知見を基に、幅 5 μm、深さ 30 μm のトレンチをレール状に付したシリコン基板に対し、TFMB-PMDA 系 PI の蒸着を行った。セル内供給モノマー濃度 1×10⁻⁵ mol/cm³ (それぞれ)において、1.5 時間蒸着した基板断面の SEM 画像を Fig. 1 に示す。図のように PI が埋め込めた部分と表面部で閉塞している部分も見られたが、充填量はモノマーから PAA への反応速度が大きい Kapton 系に比べ大きく向上した。

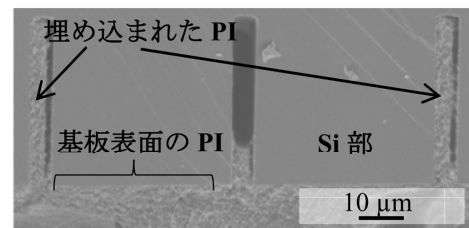


Fig. 1 TFMB-PMDA 系の蒸着後の基板断面の SEM 画像

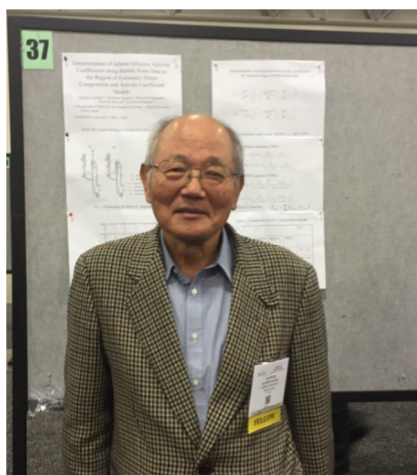
2015 AIChE Annual Meeting に参加して

平成 27 年 11 月 8 日（日）から 15 日（金）まで、AIChE の Annual Meeting がソルトレイクシティのコンベンションセンターで開かれた。グループ 01A（熱力学と輸送物性）が関係する 29 セッションのうち、私が出席したセッションを中心に述べてみたい。

まず、日曜日、午後の”Thermodynamics Needs of Chemical Industry (chair: Prof. Richard Elliott, Jr. (University of Akron))”セッションでは 4 件の発表があり、Prof. Chau-Chyun Chen (Texas Tech University), Dr. Dabit Hill (Chemstation, Inc.), Dr. Seiya Hirohama (Schneider Electric), Dr. Paul M. Mathias (Fluor Corporation) の講演者を興味深く聞くことができた。Aspen Tech.から転職した Prof. Chen は eNRTL モデルを用いた研究を、また Dr. Mathias は私達が測定したアセトン+クロロホルム+メタノール系の構成 2 成分系気液平衡データを用いた residual curve などのお話であり、広浜さんも石油回収と精製について講演され、Prof. Chen, Dr. Mathias と肩を並べて、堂々と話されていたのが印象的でした。

月曜日の“In Honor of Stanley Sandler I, II”セッションは、今年 65 歳となった Sandler 先生を祝うセッションであり、前半は Prof. Chau-Chyun Chen, Prof. Cor J. Peters (The Petroleum Institute), Prof. James Wei (Princeton University), Prof. Theo W. de Loos (Delft University of Technology) 等が講演され、後半は Sandler 先生の弟子たちの講演が並んでいた。Sandler 先生も後半になると、いろいろご自分で発言されていた。火曜日からは、基礎物性部会や超臨界流体部会の会員がたびたび co-chair を務めていた”Thermophysical Properties and Phase Equilibrium I, II, III, IV”セッションも行われた。

私は”Poster Session: Thermodynamics and Transport Properties (Area 1A)”で、”Evaluation of Infinite-Dilution Activity Coefficients and Vapor-Liquid Equilibria in the Region of Extremely Dilute Compositions Using NRTL Equation”の発表を行った。45 年程前にエブルオメータ法で無限希釈活量係数を測定し、いくつかの論文にも発表してきたが、今回その沸点データを用いて、NRTL パラメータを決定してから無限希釈活量係数を求めると、通常無限希釈における沸点曲線の勾配から求めた無限希釈活量係数とどの程度一致するかを検討したものである。写真は広浜さんに撮って頂いたものである。



AIChE の年会には 25 年以上前から参加しているが、最近日は日曜日に出発し、グループ 1a のポスター・セッションで発表し、化学工学会主催のパーティーで友人と歓談し、金曜日に帰国する日程を組んでいる。今回も日曜日、夜の Welcome Party で国際交流委員長の山本修一先生（山口大）からパーティーの招待券を数枚頂き、月曜日の夕方にはポスター発表をし、火曜日のパーティーには Prof. Peter Cummings (Vanderbilt University) や Prof. de Loos と懇親を深めることができました。

来年はサンフランシスコで開かれますので、皆様方のご参加を心待ちにしております。

栃木 勝己（日本大学）

東秀憲先生、平成 26 年度化学工学会優秀論文賞を受賞される！

平成 27 年度の第 47 回秋季大会のオーガナザーをお願いした金沢大学の東秀憲先生が、平成 26 年度の化学工学会優秀論文賞を受賞され、その表彰式が秋季大会における懇親会（平成 27 年 9 月 10 日(木)、於キリンビール園）の会場にて執り行われました。論文タイトルは、「**静電噴霧による液滴分裂とイオン放出過程におよぼす溶液濃度の影響**、化学工学論文集、40 巻 1 号、pp.5-11」であり、その表彰は本年度から表彰式が懇親会の冒頭、乾杯の前に行われることになり、表彰の際には懇親会参加者全員から、東先生の業績を讃える盛大な拍手が贈られました。

基礎物性部会 部会長 栗原 清文（日本大学）



受賞式（右が東先生）

栃木勝己先生、AIChE より Fellow を授与される！

日本大学名誉教授であり化学工学会の名誉会員でもある栃木勝己先生は、2015 AIChE Annual Meeting において、AIChE より **Fellow** を授与されました。栃木先生、おめでとうございます。栃木先生の栄誉を、部会員の皆様とともに讃えたいと思います。

基礎物性部会 部会長 栗原 清文（日本大学）



【講習会開催告知】最近の化学工学講習会 65「物性推算とその応用」

平成 28 年 1 月 21～22 日 東京理科大学森戸記念館 1 階第 2 フォーラム

最近の化学工学講習会 65「物性推算とその応用」(化学工学会関東支部と基礎物性部会との共催)を、平成 28 年 1 月 21～22 日に東京理科大学にて開催します。開催にあたりましては、多くの部会メンバーの皆様のご協力をいただきました。この場をお借りして厚く御礼申し上げます。

本講習会では、プロセス産業における基盤である「物性」に着目し、その基礎から、物性推算を活用してプロセス産業の経済的な価値を高める方法について紹介します。初日(1/21)は「導入編」と「基礎編」と題して、これまでの物性測定法の進歩、物性データ集積の充実、および物性推算法の進歩とそれに伴う応用範囲の拡大について解説します。2 日目(1/22)には「産業応用編」として、エネルギー産業・石油化学・セメント・医薬などの各分野において、シミュレータで物性推算を行うことによって得られるプロセスの優位性や経済効果などについて紹介します。また、シミュレータのベンダ側の講師より、最新のプロセスシミュレータの物性推算システムを紹介します。

講習会で使用するテキスト「物性推算とその応用(化学工学会編)」は、物性測定・推算の基礎から各種プロセスにおける応用まで網羅されており、内容充実の一冊です。皆様奮ってお申込みいただきますようお願い申し上げます。どちらか 1 日のみの参加も可能です。講習会の詳細・お申し込みにつきましては、化学工学会関東支部ホームページをご覧ください。

化学工学会関東支部ホームページ <http://www.scej-kt.org>



松田 弘幸 (日本大学)

これからの行事予定

平成 28 年 1 月 21～22 日	最近の化学工学講習会 65「物性推算とその応用」 (東京理科大学森戸記念館 1 階第 2 フォーラム)
平成 28 年 3 月 12 日夕刻 (予定)	部会懇親会 (第 81 年会前日)
平成 28 年 3 月 14 日昼 (予定)	化学工学会第 81 年会部会集会 (関西大学千里山キャンパス)
平成 28 年 5 月 22～26 日	PPEPPD2016 (ポルトガル・ポルト)
平成 28 年 5 月 27～28 日	分離技術会年会 2016 (日本大学生産工学部大久保キャンパス)
平成 28 年 9 月 5 日夕刻 (予定)	部会懇親会 (第 48 回秋季大会前日)
平成 28 年 9 月 7 日昼 (予定)	化学工学会第 48 回秋季大会部会集会 (徳島大学)
平成 28 年 9 月 6～8 日	化学工学会第 48 回秋季大会部会シンポジウム (徳島大学)
平成 28 年 11 月 13～18 日	2016 AIChE Annual Meeting (サンフランシスコ)

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