

2022年11月15日

「数値レオメータ」セミナーご案内

一般社団法人プロダクト・イノベーション協会

機能材料の殆どは固体であり、粒子やポリマーであることが多い。機能を実現するために、様々な物性を有した材料を混合する。材料物性が発現するのはナノサイズ以上であり、これらの組み合わせが重要になる。代表的な製造方法としては、粉碎、混合、練り、塗布、乾燥などの多様な組合せからなり、材料の多様性とあいまって、複雑性が増大している。このような状況下にあって、ものづくりの研究体制や、研究の効率化に注力する必要がある。この生産効率向上のために、AIや人材育成に投資している。しかし、AIでもものづくりの現場の課題を回避することは難しい。

現実的な課題解決の方法として、MAPR (Material And Process Rheology)を提案したい。Mは材料組合せであり、Pはプロセスを組合せて、目標の物性特性値 (R: Rheology)を達成する。つまり、ペーストや塗布液のレオロジーを調整し再現できれば、目標とする製品を実現できるというストーリーである。つまり、MとPから作成したスラリー、ペースト、インクなどのレオロジー物性Rが予測できれば、MやPにフィードバックして望まれるRを再現できる。

コロイド系材料は化粧品、食品、電子デバイスなど様々な分野で用いられているが、このコロイド系の制御が最終製品の性能に大きく関わっている。つまり、微粒子やポリマー、界面活性剤からなるコロイド分散系の物性把握が重要であり、その中でも特にレオロジー特性の考察と制御は不可欠である。しかしながら、レオロジー特性に及ぼす組成とその相互作用の影響、製造プロセスにおけるレオロジー測定データの解釈など、十分に把握されていないことも多い。

これまで、PIA (Products Innovation Association) は10年以上に亘りコロイド分散系の数値シミュレーション、SNAP (Structure of NANO Particles) を開発し学会や、企業から高い評価を受けている。最近さらに、コロイド分散系の「数値レオメータ」の開発に成功した。粒子や溶媒の性質から相互作用パラメータを計算して、粒子間ポテンシャルなどを求め、このコロイド分散系材料のレオロジーシミュレーションが可能になった。実測データの解析、把握が可能となり、企業の研究開発の発展に寄与できると考えている。

今回のセミナーでは、数値レオメータの解説、およびレオロジーと製造プロセスの絡み合いを紹介する。皆様のご参加を願っております。

記

- 【主催】 一般社団法人プロダクト・イノベーション協会 (PIA)
<https://www.product-innovation.or.jp/>
- 【日時】 2022年12月8日 (木)、13時～17時
- 【場所】 東京大学農学部キャンパス (弥生キャンパス)
フードサイエンス棟 2F 中島堇一郎記念ホール
<https://www.a.u-tokyo.ac.jp/campus/overview.html>
- 【定員】 40名 (定員に達し次第受付終了)
「1企業2名様までのご参加」をお願いします。
- 【申込】 専用サイトよりお申し込み下さい。 〆切り：12月5日 (月)
ホームページ： https://www.product-innovation.or.jp/info/pia_seminar20221208/
セミナー担当： seminar@product-innovation.or.jp
- 【費用】 50,000円 (税込み1名様あたり)
銀行振込をお願いします。期日：12月末日 / 翌年1月末日
- 【振込先】
金融機関名：三菱UFJ銀行 本店
口座種別：普通口座
口座番号：1649861
口座名義：一般社団法人プロダクト・イノベーション協会
(シャダンハウジン プロダクト イノベーションキョウカイ)

【プログラム】

① 趣旨説明：13:00～13:20

数値レオメータ開発の取り組み 山口 由岐夫（PIA 代表理事/東京大学名誉教授）

② はじめに：13:20～14:00

数値レオメータに期待すること 瓦家 正英（PIA シニアアドバイザー）

③ 講演 1：14:00～14:30

ものづくりとレオロジー 吉江 建一（PIA 常任理事/主席コンサルタント）

④ 講演 2：14:30～15:10

SNAP、数値レオメータの解説 小池 修（PIA 主任研究員）

⑤ 休憩：15:10～15:30

⑥ 講演 3：15:30～16:15

数値レオメータの事例による解説

辰巳 怜（東京大学環境安全研究センター 特任助教）

質疑応答：16:15～17:00

コロイド系材料の特性 (SNAP によるシミュレーション)

コロイド分散系材料の特性は、粒子の分散状態に大きな影響を及ぼされる。PIA により開発された SNAP によって、微粒子の運動を解析し、構造形成過程を可視化シミュレーションすることができる (図1)。例えば、ある粒子分散系において、分散剤の有無による分散状態の違い、さらに乾燥膜の状態を計算シミュレーションすることができる (図2)。

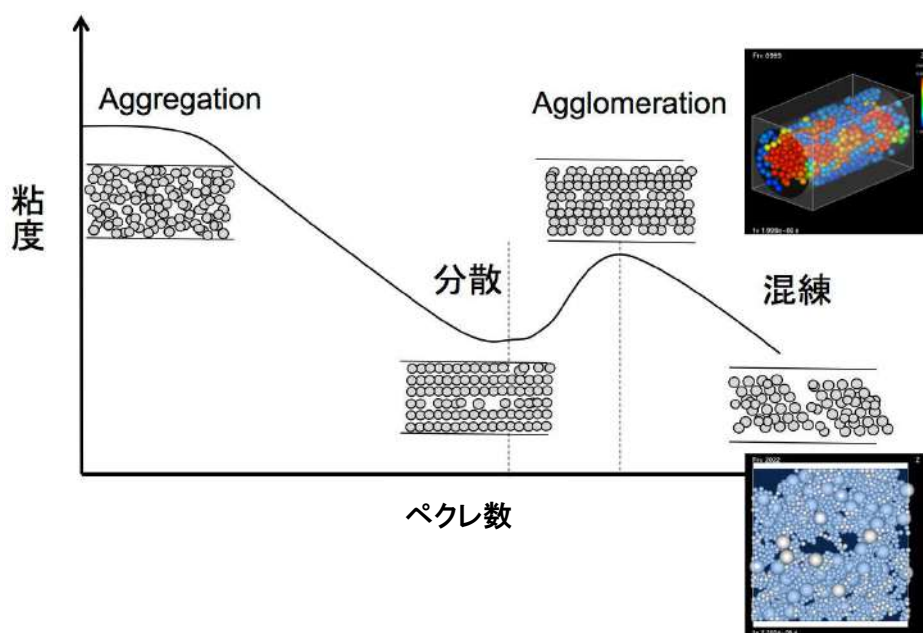


図 1. コロイド分散系におけるペクレ数と粘度の関係

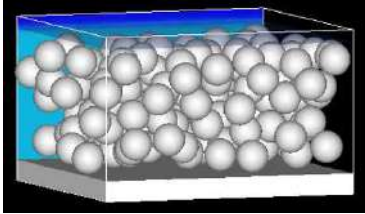
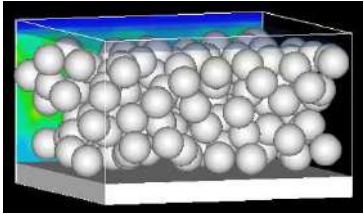
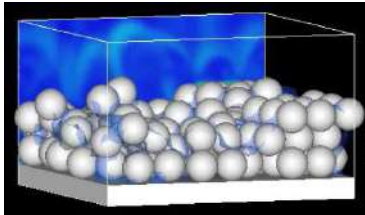
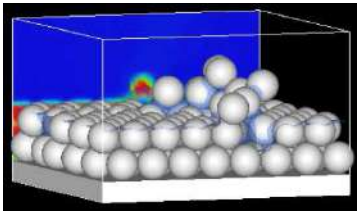
	分散剤なし	分散剤あり
コロイド状態		
乾燥膜状態		

図 2. コロイド分散系における分散剤有無による乾燥膜状態の違い

実際のレオロジー適用分野と利用形態

SNAP によるコロイド分散系の状態、乾燥膜状態の可視化は、開発現場での重要データとなりうるが、さらに大規模な製造現場（スケールアップ）につなげるために、溶液系のレオロジー特性把握は必要不可欠である。レオロジーはそれ自体が化粧品、食品、あるいは医療品などの製品の機能として重要なだけでなく、プロセス設計のパラメータや品質管理の指標として使われる。さらに製品の官能評価にもつながる特性として幅広く利用される。レオロジー特性の測定目的は主に4つであり、その例を示す。

表 1. 製品群とレオロジー測定目的

製品Ⅰ	製品Ⅱ
化粧品 食品 医薬品 塗料	塗料 2次電池電極 セラミックス
塗布液(機能性溶液)の評価	混合・塗布プロセス改善
・分散性, 分散安定性	・塗布欠陥の抑制
・機能性(塗布性, 感触)	・最終構造・品質への影響

表 2. 目的/課題と測定レオロジー特性

製品	目的/課題	測定レオロジー特性
化粧品乳液	分散性, 分散安定性	シアニング: 定常せん断
塗料インク	塗布欠陥の抑制	粘弾性(周波数依存): SAOS
化粧品クリーム・ゲル	塗布性, 感触	粘弾性(ひずみ依存): LAOS
2次電池電極	最終構造・品質制御	粘弾性(ひずみ依存): LAOS

数値レオメータによる粘弾性計算例

SNAP を核として開発した数値レオメータは、想定する物理量と仮想的に定常/振動せん断流を印加することで、粘度や動的弾性率などのレオロジー特性を計算できる（図3）。また、水/非水系の粒子間相互作用の標準モデルが搭載されており、粒子の凝集・分散を模擬できるので、凝集・分散構造とレオロジーの相関を獲得できる。その結果、手元の測定データに対し構造論的解釈を与え、ポリマーや界面活性剤の効果の推論が可能となる。以下、数値レオメータによる解析例をいくつか挙げる。

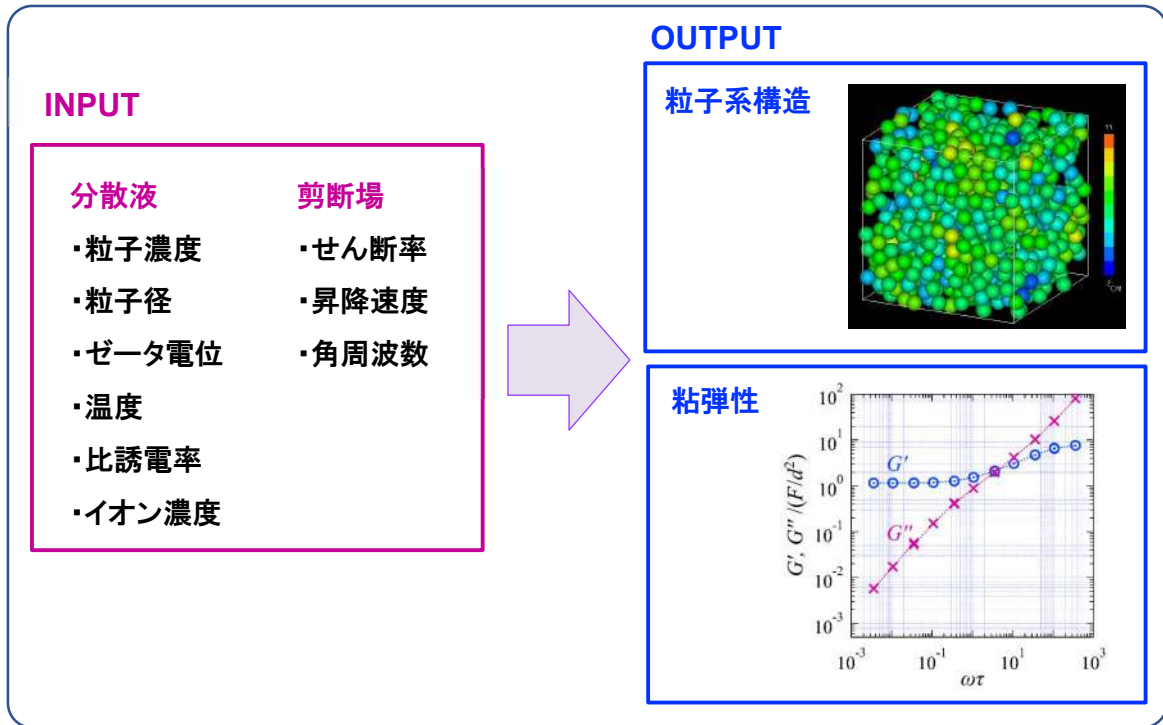
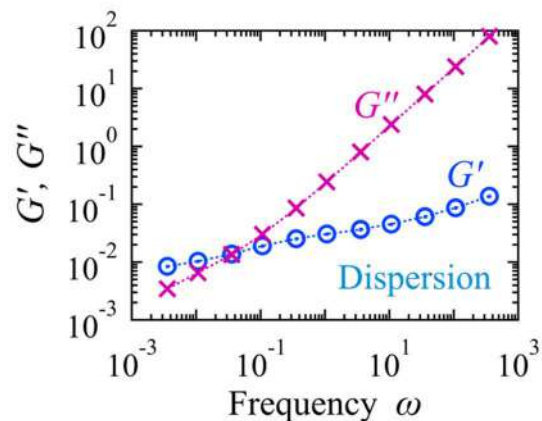
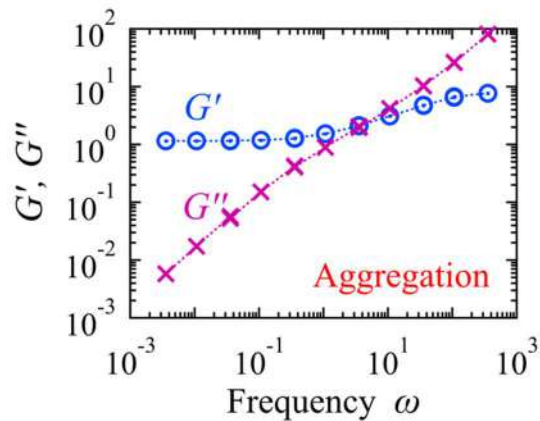


図 3. 分散系物理量と操作条件による構造と粘弾性特性の予測例

【分散性と粘弾性特性（周波数依存性）】

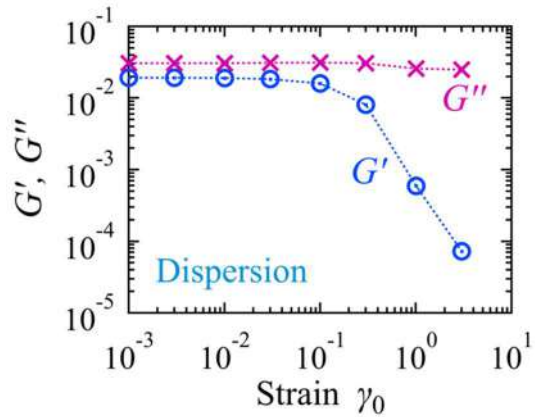
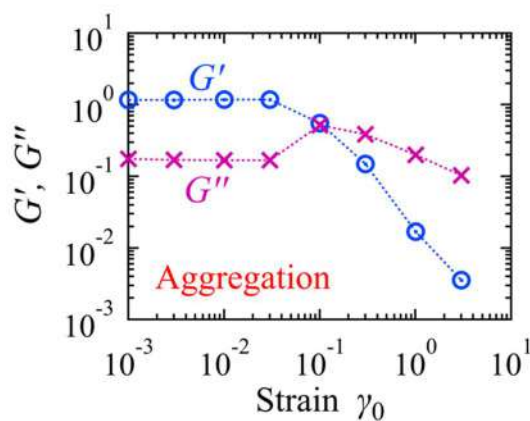
角周波数とひずみ（振幅）をパラメータとした振動せん断を加えると、動的弾性率（貯蔵弾性率 G' 、損失弾性率 G'' ）が計算できる。溶媒は水を想定し、粒径 $1 \mu\text{m}$ 、粒子濃度 45 vol%、ゼータ電位が 0 mV と 20 mV として凝集系と分散系の比較を行う。

G' 、 G'' は角周波数に対して単調増加するが、凝集系の方が比 G'/G'' が大きく弾性の程度が強い。また、凝集系の G' は低周波数で一定値に向かっており、粘弾性固体の特徴を示す。一方、分散系の G' は凝集系よりも全体的に低い。（ G'' の絶対値は同等）この差異は粒子の連結構造の有無に由来すると考えられる。



【凝集性と粘弾性特性（ひずみ依存性）】

周波数は固定して、ひずみ（振幅）に対する依存性を示す。尚、前掲と同じ条件で凝集系・分散系を想定する。凝集系・分散系で共通した特徴として、ひずみが3%以下では動的弾性率は一定だが、それ以上になるとひずみ依存性が見られる。この挙動が粒子の構造変化と対応することは数値レオメータで確認できる。分散系と異なる凝集系の特徴として、①分散系よりも G' 、 G'' がともに大きい、②低ひずみ領域で $G' > G''$ のゲル状態が存在する、③ G'' の極大値が現れる、が分かる。これらの解析結果から、粒子間相互作用に応じた動的弾性率の絶対値変化だけでなく、ゲル状態の有無やゾル-ゲル状態の転移点を推論できる。



【粒子径と粘弾性特性（各周波数依存性）】

分散粒子サイズが 50nm と 100nm での角周波数に対する依存性を示す。ゼータ電位を -20mV として G' 、 G'' の変化を計算すると、50nm の方が G' 、 G'' とともに大きな値となっている。さらに $\tan \delta$ (G''/G') で解析すると、全体的に 50nm の方が弾性 (G') 支配となっており、100nm の角周波数 ~ 1 の付近で $\tan \delta$ のピークが現れる。限定的な範囲での G' 、 G'' の急激なバランス変化は、例えば塗布プロセスでの不適正条件の回避、あるいは最適条件の把握に役立つ情報を含んでいる可能性がある。

