

## 「数値レオメータ」セミナーのご案内

一般社団法人プロダクト・イノベーション協会 (PIA)

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、十分に解釈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。ご案内に関係の方々にご覧いただき皆様のご参加をお待ちしております。

## 記

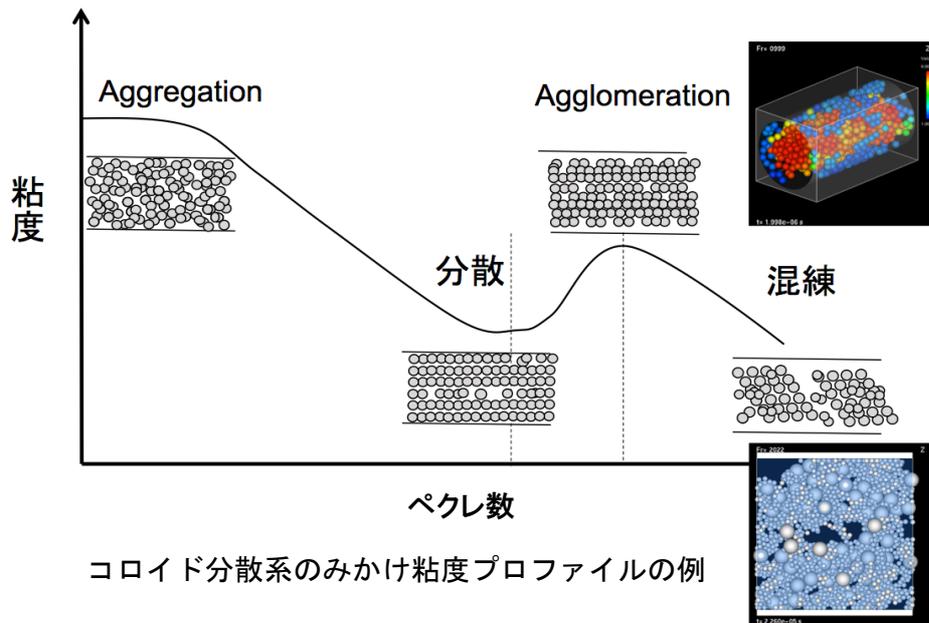
- 【主催】 一般社団法人プロダクト・イノベーション協会 (PIA)  
<https://www.product-innovation.or.jp/>
- 【日時】 2023年3月7日(火) 13:00 – 17:30
- 【場所】 東京大学農学部キャンパス (弥生キャンパス)  
フードサイエンス棟 2F 中島董一郎記念ホール  
<https://www.a.u-tokyo.ac.jp/campus/overview.html>
- 【定員】 40名程度 (定員に達し次第〻切ります)
- 【申込】 専用サイトで必要事項をご記入下さい。 〻切り : 3月3日(金)  
ホームページ : [https://www.product-innovation.or.jp/info/pia\\_seminar20230307/](https://www.product-innovation.or.jp/info/pia_seminar20230307/)  
セミナー担当 : [seminar@product-innovation.or.jp](mailto:seminar@product-innovation.or.jp)
- 【費用】 66,000円 (税込み1名様あたり)  
銀行振込をお願いします。期日 : 3月末日 / 4月末日  
振込先 : お申し込み時の受付完了メールにも記載されます。
- 【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 : 1 6 4 9 8 6 1  
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)
- 【資料】 講師作成の資料、進呈「ものづくりの化学工学」丸善 山口 由岐夫著

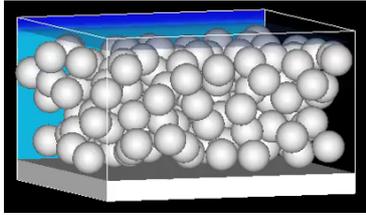
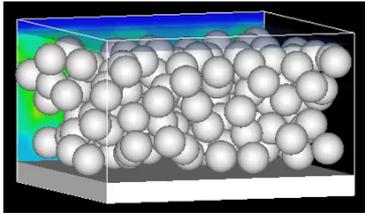
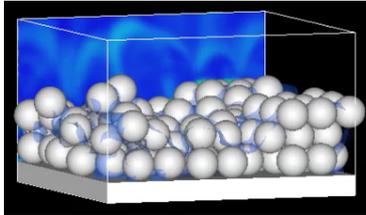
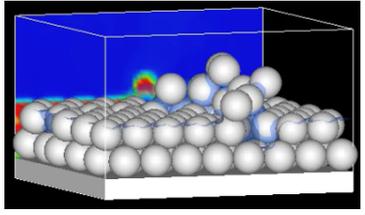
【プログラム】

13:00～13:20	(1) 趣旨説明： 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)
13:20～14:00	(2) 展望1： 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)
14:00～14:30	(3) 展望2： 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)
14:30～15:10	(4) 解説1： SNAP と数値レオメータの解説 小池 修 (PIA 主任研究員)
15:10～15:30	休憩
15:30～16:15	(5) 解説2： 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)
16:15～17:00	(6) 解説3： 非水系の分散剤と溶媒による分散効果と流動の影響 久保 正樹 (東北大学 大学院工学研究科 化学工学専攻 教授)
17:00～17:30	(7) Q&A 普段から抱えておられる疑問も歓迎いたします

## 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しイメージすることができる。例えば、分散剤を考慮した粒子分散系における分散状態の違い、さらには乾燥膜の構造を計算しイメージすることができる。



	分散剤：無し	分散剤：有り
コロイド状態		
乾燥膜状態		

コロイド分散系における分散剤有無による乾燥膜構造の違い

## 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。

### 製品群とレオロジー測定目的

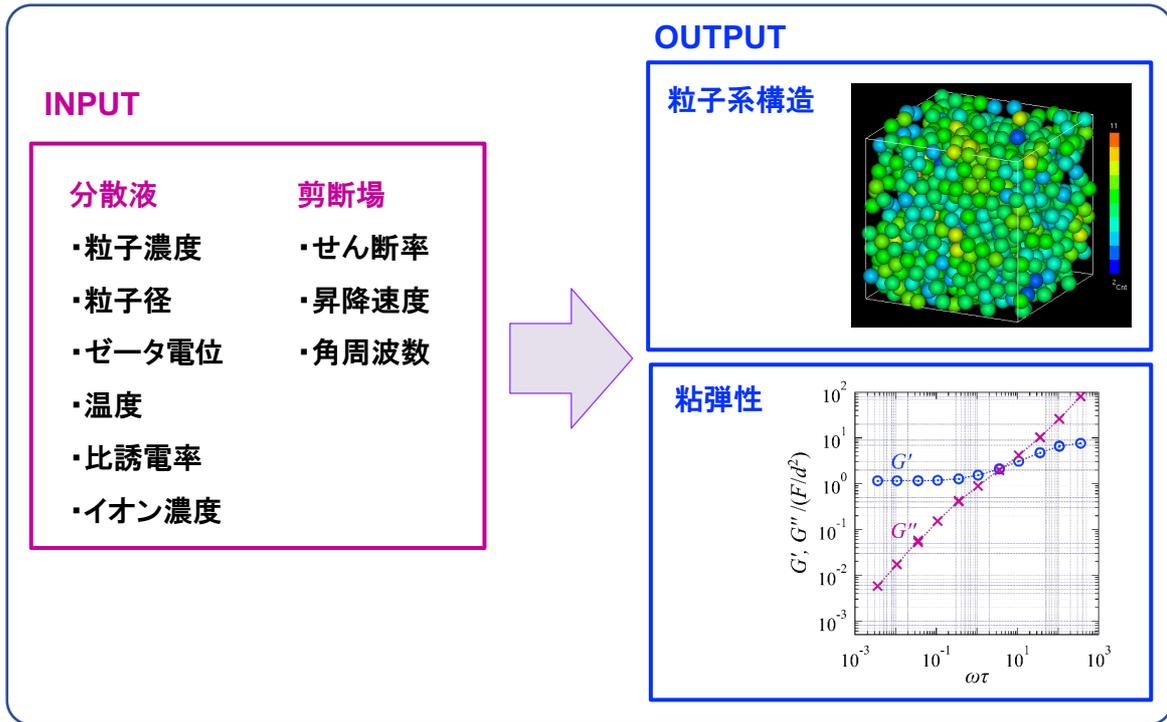
<u>製品 I</u>	<u>製品 II</u>
化粧品 食品 医薬品 塗料	塗料 2次電池電極 セラミックス
塗布液（機能性溶液）の評価 ・分散性，分散安定性 ・機能性（塗布性，感触）	混合・塗布プロセス改善 ・塗布欠陥の抑制 ・最終構造・品質への影響

### 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。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。以下では、数値レオメータによる解析例をいくつか挙げる。

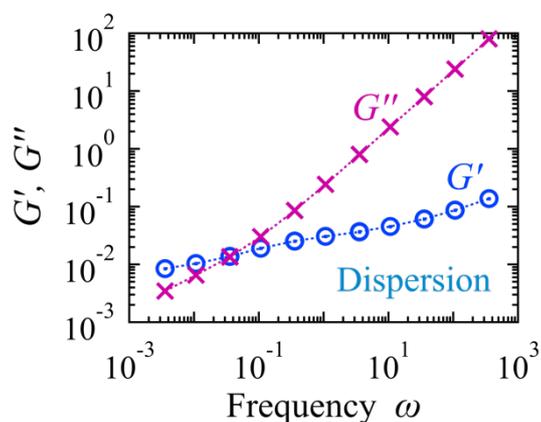
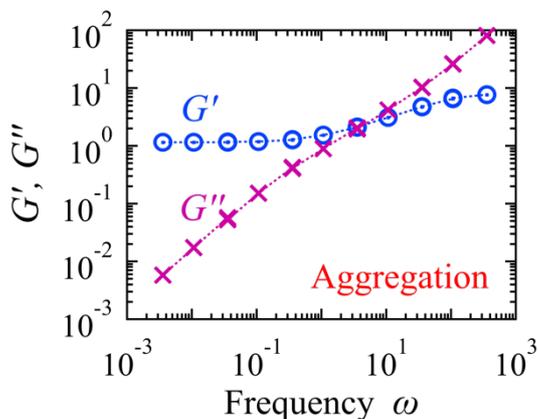


分散液の物理量と操作条件による粒子系構造と粘弾性特性の予測

【分散性と粘弾性特性（角周波数依存性）】

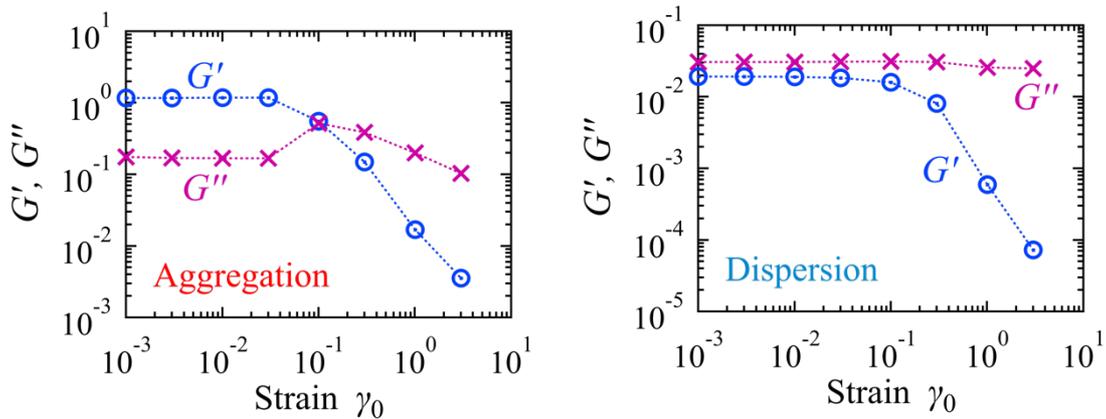
角周波数とひずみ（振幅）をパラメータとした振動せん断を加えると、動的弾性率（貯蔵弾性率  $G'$ 、損失弾性率  $G''$ ）が計算できる。溶媒は水を想定し、粒径  $1\ \mu\text{m}$ 、粒子濃度 45 vol%、ゼータ電位が 0 mV と 20 mV として凝集系と分散系の比較を行う。

$G'$ 、 $G''$ 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）】

角周波数は固定して、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（角周波数依存性）】

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  $\tan \delta$  ( $G''/G'$ ) に変換すると、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。

