



報道機関 各位

東北大学多元物質科学研究所

セルロースの非晶質化を計算で予測！ 身近な製品の製造・開発コストの大幅削減に期待

【発表のポイント】

- ・ シャンプーやボディウォッシュの原料となるセルロース^{注1)}の粉碎工程をコンピュータシミュレーションで解析する技術を開発。
- ・ 粉碎時の消費電力、非晶質化度^{注2)}を計算で予測することが可能に。
- ・ 製品開発における時間、コスト、労力を大幅に削減し、より良い製品を速やかに製造する技術への貢献に期待。

【概要】

セルロース繊維は非常に強固な結晶構造を有しており、この結晶構造を壊す（非晶質化）ことで反応性が向上します。セルロースを加工し利用するためには、効率的に非晶質化させることが重要であり、製品の開発コスト削減や製造技術の向上が期待されています。セルロースを部分的に変性したセルロース誘導体はシャンプーやボディウォッシュなど、身近な製品の原料の一つであり、良好な泡立ちや手触り感をもたらすなどの効果があります。セルロースを適切に粉碎加工することにより、セルロース誘導体を低環境負荷で製造することが可能となります。

東北大学多元物質科学研究所 加納純也教授、石原真吾助教、花王株式会社加工・プロセス開発研究所の共同研究グループは、振動ロッドミルにおけるセルロースの粉碎工程をコンピュータシミュレーションで解析および予測する技術の開発に成功しました（図1）。

本研究で開発した手法は、他の粉碎機や他の材料にも適用できるものであり、様々な製品を開発・製造する技術の向上に貢献するものと期待されます。

本研究成果は、Advanced Powder Technologyにて9月10日付けで公開されました。



図1 本研究の概要 振動ロッドミルによるセルロースの非晶質化
<https://youtu.be/W0YED6mHagY> (東北大学多元物質科学研究所 YouTube)

【詳細な説明】

1. 背景

サステナブル社会に貢献するため、環境に優しい材料の開発と利用が求められています。セルロースは地球上に豊富に存在し、植物由来のため環境に優しい材料の一つであるといえます。セルロースの利用法は古くから紙、綿など広く利用されており、さらに近年ではセルロースナノファイバーが新たな素材として注目されるなど、その重要性が増してきています。

セルロース繊維は非常に強固な結晶構造を有していることで知られており、この結晶構造を壊す(非晶質化)ことで反応性が向上するため、セルロースを加工し利用するためには、効率的に非晶質化させることが重要です。非晶質化する方法にはアルカリ水等の薬品を用いる化学的手法と、機械的な力を加えて破壊する物理的手法が存在します。化学的手法では、薬品を大量に利用することによる環境負荷や、反応後に副反応物として発生する中和塩の処理が課題です。一方で物理的手法では、非晶質化させるためには大きな衝撃力をセルロースに加える必要があり、従来では小型機の遊星ボールミル^{注3)}は大量生産できないこと、大型な転動ボールミル^{注4)}を用いる場合でも長時間の粉碎が必要であることが課題でした。

そこで本研究では、転動ボールミルより大きな衝撃力を付与できる振動ロッドミルに着目しました(図2)。粉碎媒体をボールからロッドにすることで、衝突一回あたりの衝撃力が大きくなり、従来は粉碎しにくいとされてきた原料も粉碎できる可能性があります。しかしながら、ロッド媒体を用いた振動ミルでの粉碎に関しては、系統的に解析された報告が少なく、工業的に利用する場合は経験的に試行錯誤を繰り返して最適条件を求めなければならず、大型化を想定した装置設計においては実験で様々な運転条件を試すことは実質的に不可能です。本共同研究グループでは離散要素法(Discrete Element Method: DEM)^{注5)}と呼ばれるシミュレーション手法を用い、振動ロッドミルにおける媒体挙動を計算し、セルロースの非晶質化度を計算から予測するための検討を行いました。

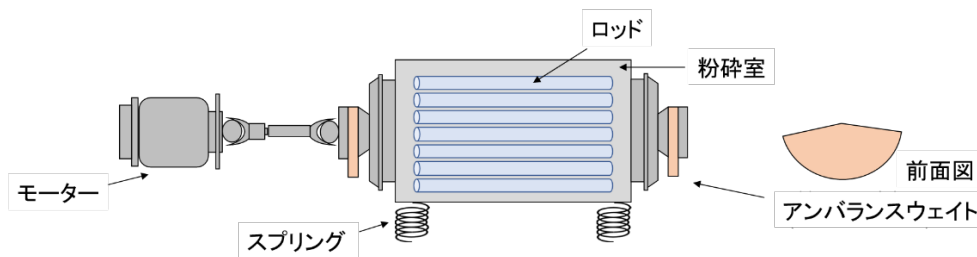


図2 振動ロッドミルの模式図 粉砕室内にロッド媒体を充填し、モーターとスプリングにより粉砕室を高速で円振動させて碎料を粉砕する。

2. 研究手法・成果

振動ロッドミルでセルロースの非晶質化が可能なのか確かめるため、小型の実験機を用いた粉砕実験を行いました。粉砕ポットは円筒形で、内部に粉砕媒体のロッドを6、8、10、13本充填して運転を行いました。各実験において、運転中の電力を計測し、粉砕に使用された動力を測定しました。粉砕後のセルロースの結晶化指数をX線回折装置（X-ray Diffraction: XRD）^{注6）}を用いて測定し、非晶質化度を評価しました。粉砕時間を変化させ、各時間における非晶質化度を求めました。

その結果、いずれのロッド本数においても、非晶質化度は粉砕に使用された動力で一意的に決定できることがわかりました。（図3）

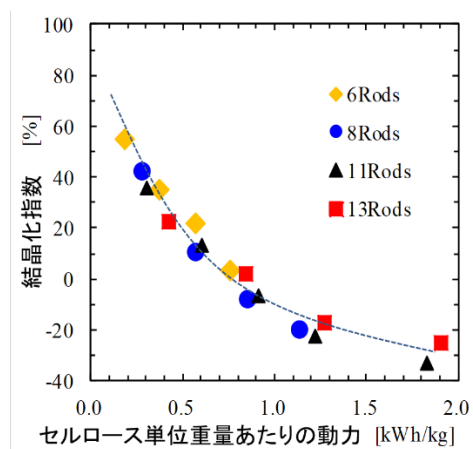


図3 動力と非晶質化度の関係 動力が増加するほど結晶化指数は減少し、非晶質化が進行していることがわかる。

粉砕実験により、セルロースの非晶質化度と動力の関係が得られたため、動力をシミュレーションから予測することができれば、セルロースの非晶質化度を予測できることになります。そこで固体粒子群の挙動を計算できるDEMを用いて、振動ロッドミルにおける媒体挙動の計算から動力を算出することを試みました。

実験機を用いた粉砕実験の際のロッドの運動挙動を高速度カメラで撮影し、

シミュレーションで計算されたロッド挙動と比較することで計算の妥当性を確認しました (図4)。また、シミュレーションで計算された散逸エネルギー^{注7)}の値が実験における動力と一致することを明らかにし、シミュレーションパラメータである摩擦係数および反発係数を適切に設定することで実際のロッド挙動や動力を予測可能であることを示しました (図5)。



図4 振動ロッドミルの実験とシミュレーション 実験との比較から計算が正しくロッド挙動を再現していることを確認した。

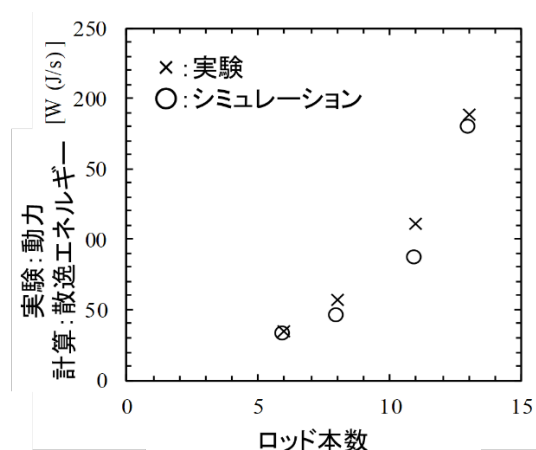


図5 ロッド本数と動力の関係 いずれの条件においても、シミュレーションで予測された動力値は実験結果を良好に再現している。

3. 波及効果、今後の展望

本研究では、振動ロッドミルにおけるロッド挙動および動力をシミュレーションで予測することに成功しました。本手法は他の粉砕機、材料の粉砕に適用することが可能であるため、広範な粉砕プロセスの技術向上に役立つことが期待されます。特に、粉砕したセルロースを原料とするシャンプーやボディウォッシュ等の製品は多岐にわたるため、これら製品開発の高度化ならびに高速度化が達成されることで、我々の生活に直結する製品が高品質かつ安価に手に入るようになると期待されます。今後は本研究で構築したシミュレーション手法を用いて装置の大規模化、最適条件設定等を進めていく予定です。

【論文情報】

タイトル： Prediction of power of a vibration rod mill during cellulose
decrystallization processing by DEM

著者： Tomoya Wada, Takafumi Uematsu, Hiroyuki Shiomi, Kazutomo Osaki, Shingo
Ishihara, Junya Kano

掲載誌： Advanced Powder Technology

DOI： 10.1016/j.appt.2021.08.027

【用語説明】

注1. セルロース：植物細胞壁の主要構成成分。自然界に多く存在する有機化合物。

注2. 非晶質化度：規則的な結晶構造と、それが破壊された非晶質な部分との割合。

注3. 遊星ボールミル：内部にボールを入れたポットの自転運動と、ポットを載せたステージの回転（公転運動）により粉砕を行う粉砕機。

注4. 転動ボールミル：内部にボールを入れたポットを回転させ、持ち上げられたボールが重力により落下する衝撃で粉砕を行う粉砕機。

注5. 離散要素法：固体粒子に働く接触力等の力を逐次計算し、ニュートンの第2法則に従い各粒子の動きを予測する手法。

注6. X線回折装置：対象試料にX線を照射し、結晶構造に応じた回折パターンを得る装置。回折パターンを解析することで結晶化度を評価することができる。

注7. 散逸エネルギー：接触等によって減少する運動エネルギー。DEMでは摩擦スライダーや粘性ダッシュポットによって散逸するエネルギーに相当する。

【問い合わせ先】

(研究に関すること)

東北大学多元物質科学研究所

助教 石原真吾(いしはら しんご)

電話:022-217-5136

E-mail: ishihara@tohoku.ac.jp

(報道に関すること)

東北大学多元物質科学研究所

広報情報室

電話:022-217-5198

E-mail: press.tagen@grp.tohoku.ac.jp