

平成19年02月28日

氏名

大橋 秀伯



21世紀COEプログラム

拠点：大学院工学系研究科

応用化学専攻、化学システム工学専攻、

化学生命工学専攻、マテリアル工学専攻

“化学を基盤とするヒューマンマテリアル創成”

平成18年度リサーチ・アシスタント報告書

ふりがな 氏名	おおはし ひでのり 大橋 秀伯	生年月日
所属機関名	東京大学大学院工学系研究科	
所在地	〒113-8656 東京都文京区本郷7-3-1	
申請時点での 学年	博士課程2年生	
研究題目	新規ユニバーサル拡散モデルの構築及び生体分子デバイス設計への応用	
指導教員の所属・氏名	東京大学大学院工学系研究科 山口 猛央	

I 研究の成果 (1000字程度)

(図表も含めて分かりやすく記入のこと)

高分子中における分子の拡散性は、分離膜を始めドラッグデリバリーシステムなど広範な応用領域において非常に重要な役割を果たす物性である。このため本研究では、高分子中における分子拡散性を予測するモデルの構築を目指している。従来のモデルはミクロな概念を含まないマクロなモデルであるために拡散性の「予測」は不可能であったが、本研究ではこれに Figure 1 に示す shell-like free volume というミクロな概念を導入することで、予測モデルの構築に成功してきた。本モデルにおいて混合系の拡散性を求めるのに必要なパラメータは、各単成分系のパラメータのみであり、これらは粘度・粘弾性の実験値及び半経験的量子化学計算から求めることができる。すなわち本モデルは完全な予測モデルである。但し、本モデルの適用は高分子-溶媒分子、高分子-気体分子の2成分系にのみ留まっていた。

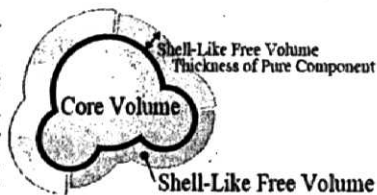


Figure 1. Schematic illustration of shell-like free volume on multi-component system

高分子を含む3成分系以上の系にモデルを拡張することは、高分子溶液中の溶質分子拡散といったより複雑な系における挙動を予測する際には必要不可欠なプロセスであると考えられる。そこで本研究においては shell-like free volume の概念を多成分系へと拡張し(Fig. 1)、このモデルを用いて高分子-溶媒1-溶媒2の3成分系における溶媒1及び溶媒2の自己拡散係数の予測を行った。この結果、Figure 2 に示すとおり非常に良好な予測結果を得た。

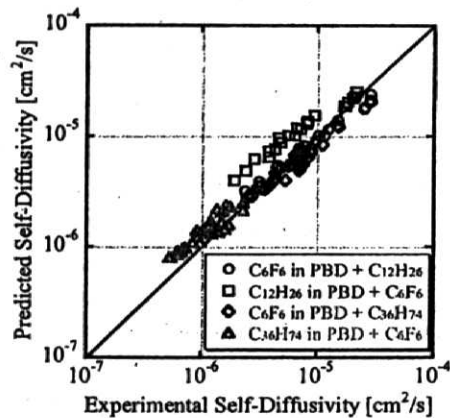


Figure 2. Correlation between experimental and predicted self-diffusivity in ternary system

この3成分系は2つ目の溶媒を溶質と見立てることで、高分子-溶媒-溶質の系、すなわち高分子溶液中の溶質の拡散モデルと見做すこともできる。そこで本研究では、溶質として溶媒分子よりも若干大きな 1,3,5-triisopropylbenzene (TIPB)・1,3-dimethyl adamantane (DMA)・hexafluorobenzene (HFB)を溶質としたときの溶質拡散性の予測を試みた。結果は Figure 3 に示すとおり、これも良好な予測結果を得た。以上の結果より、高分子を含む複雑な多成分系を扱うモデルとしての本モデルの妥当性を確認し、モデルの有効性を大幅に高めた。

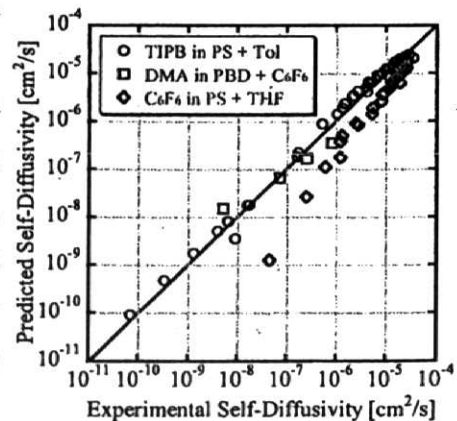


Figure 3. Correlation between experimental and predicted self-diffusivity of solute in polymer solution

氏 名 大橋 秀伯

II (1) 学術雑誌等に発表した論文A (掲載を決定されたものを含む.)

共著の場合、申請者の役割を記載すること.

(著者、題名、掲載誌名、年月、巻号、頁を記入)

Ohashi H, Miyaoi N, Yamaguchi T

“Osmotic pressure expression with several guest ions on a molecular recognition
ion gating membrane”

Journal of Photopolymer Science and Technology, 2006 19 (2) 251-252

申請者は当該論文の実験及び執筆を行い、執筆のためのディスカッションを共著者と
行った。

氏 名 大橋 秀伯

II (2) 学会において申請者が口頭発表もしくはポスター発表した論文
(共同研究者(全員の氏名)、題名、発表した学会名、場所、年月を記載)

○大橋 秀伯・山口 猛央

「ポリマー中の物質拡散性を予測する新規ユニバーサル拡散モデルの構築」

化学工学会第71年会

東京工業大学 大岡山キャンパス 2006年3月28～30日

○Hidenori Ohashi, Takeo Yamaguchi

“A Novel Universal Diffusion Model for Gas and Solvent Molecules in Polymer”

American Institute of Chemical Engineers Annual meeting

San Francisco 2006/11/13-17

○大橋 秀伯・宮負 菜穂子・伊藤 大知・山口 猛央

「Bio-Inspired イオンチャネル：イオン認識ゲート膜の定量的特性評価」

生命科学研究ネットワークシンポジウム

東京大学 安田講堂・工学部2号館 2006年11月25日

○大橋 秀伯・伊藤 大知・山口 猛央

「多成分系における新規ユニバーサル拡散モデルの予測性能」

高分子材料開発のための俯瞰的シンポジウム

東京大学 山上会館 2007年1月15～16日