

新技術紹介

3次元SP値による膨潤極値解析技術

Analysis Techniques of Swelling Peak by Three Dimension SP Value

丹 菊 浩 一 *1, 寺 田 洋 平 *2

1. はじめに

近年、地球環境保護の観点等から自動車用燃料動向に変化がみられ、従来から使用されてきたガソリン・ディーゼル燃料に種々の成分を添加・混合するという動きが見られる。既に世界各地で種々の混合燃料が使用されてきているが、大分して2種類に分類される。1つはエタノール等に代表される含酸素成分を混合したガソリン燃料、もう1つはRME等に代表される動植物油のエステル化合物を混合したディーゼル燃料である。各々の混合成分の種類や割合は地域によって様々ではあるが、実態としてエタノール混合燃料の場合ではアルコール成分が0~100%での使用、RME混合ディーゼル燃料の場合ではRME成分が0~7%程度で使用されている。

これらの混合燃料はいわゆるクリーン燃料と言われているが、燃料の混合成分や割合により燃料性状が変化する。そのため、自動車用燃料系部品、特にゴム・樹脂に代表される有機材料への影響が懸念されている。その中でも材料の膨潤現象（材料に燃料が浸透し、結果として材料の体積が大きくなる現象）は、材料物性の低下が懸念されるため、燃料系部品の性能に大きく影響を与える重要

な特性となっている。それゆえ、材料に対する燃料膨潤の影響を調査することは、材料開発において重要な事項となっている。

2. 膨潤特性の予測技術—従来の考え方—

膨潤挙動は一般的には材料と燃料の相溶性で整理される。具体的には、溶解度指数：SP値 (Solubility Parameter)の差で説明されてきた。つまり、材料と溶剤のSP値の差が小さい程、相溶性が良いと言え膨潤が大きくなる。

ここで、簡単にSP値について説明する。SP値は、図-1に示すように3つのパラメーター δd , δp , δh を用いて算出でき、図-2に代表的なポリマー、溶剤のSP値を示す。

この考え方を用いて、NBRのアルコール混合燃料での膨潤挙動とSP値の差について相関を比較してみる。図-3に示すように最大膨潤が現れるエタノールの混合割合は実測値では20~30%であるのに対し、従来のSP値の差の考え方による解析ではSP値差が最小となるのは50%であり、実測の膨潤挙動とSP値の差から推定される挙動に大きなズレが生じており、膨潤挙動の変化が説明できていなかった。

$$SP \text{ 値} = \sqrt{(\delta d)^2 + (\delta p)^2 + (\delta h)^2}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \delta d: \text{分散力に基づくSP値} \\ \delta p: \text{極性効果に基づくSP値} \\ \delta h: \text{水素結合に基づくSP値} \end{array} \right.$$

図-1 SP値 (Solubility Parameter)の計算方法

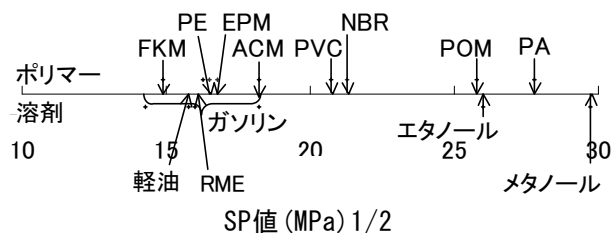


図-2 各種ポリマーおよび燃料のSP値

*1 Koichi Tangiku 材料技術部 第1技術室

*2 Yohei Terada 材料技術部 第1技術室

3. 膨潤特性の予測技術－3次元SP値－

そこで、今回3次元SP値という解析手法を用いたSP値の差と膨潤挙動の実測値の比較を行った。

まず、従来のSP値の差に対する考え方であるが、これは図-4に示すように材料・燃料それぞれのSP値(0点からの距離)の差を用いて解析している。一方、3次元SP値を用いた解析手法では、図-4に示すように材料と燃料について δd , δp , δh の3つのパラメータを3次元座標上に表し、各座標点間の距離を用いて相溶性の解析を実施している。そのため、相溶性について精度よく推定できると考えられる。

従来解析手法での膨潤とSP値

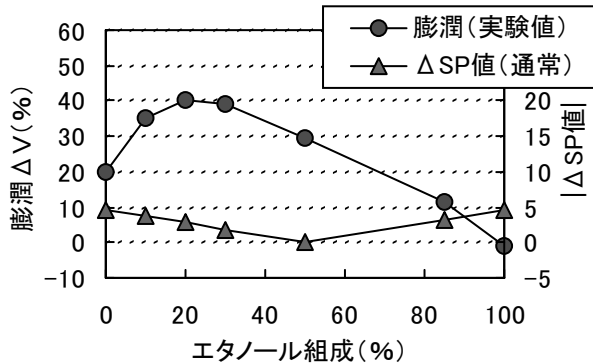
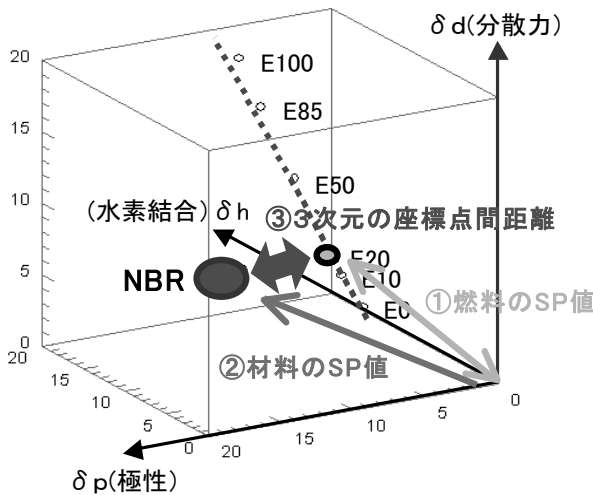


図-3 従来解析手法での膨潤値とSP値の差の比較



従来の考え方： |①燃料のSP値－②材料のSP値|
3次元SP値での考え方： ③3次元の座標点間距離

図-4 3次元SP値による解析手法の考え方

4. 3次元SP値を用いた解析結果

3次元SP値の解析手法を用いて、前述のNBRについてアルコール混合燃料での膨潤挙動とSP値の差の相関を比較してみる。図-5に示すようにエタノール混合割合が20～30%のところで実測膨潤値のピークと3次元SP値を用いて算出したSP値の差のピークはほぼ一致している。よって、3次元SP値を用いたSP値差解析技術は材料の膨潤挙動を精度よく予測することができるといえる。

5. おわりに

今回紹介した3次元SP値による膨潤挙動解析技術は、従来手法に比べ予測精度をあげることが可能な解析手法になっている。

今後新規に出てくると予想されるバイオディーゼル燃料等の各種新規燃料での膨潤挙動解析へも適用可能であり有用な解析手法として考えられる。また、一部の分子構造ではパラメーターが未知であるため、解析NG領域が残されているが、これについても継続して検討を実施していく。

3次元SP値解析手法での膨潤とSP値

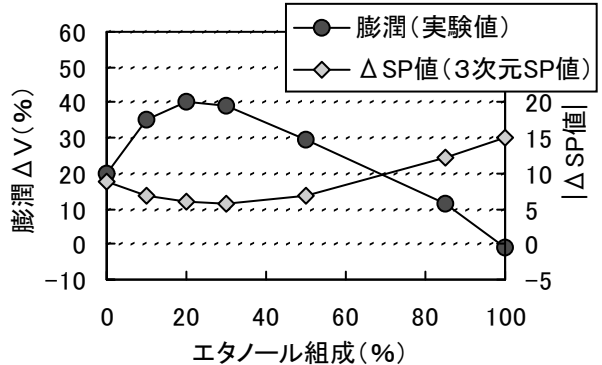


図-5 3次元SP値解析での膨潤値とSP値差の比較