

Title	Surfactant Micelles in Flows
Author(s)	小井手, 祐介
Citation	大阪大学, 2024, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/96107
rights	
Note	やむを得ない事由があると学位審査研究科が承認したため、全文に代えてその内容の要約を公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、 〈a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed"〉 大阪大学の博士論文について 〈/a〉 をご参照ください。

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

論文内容の要旨

氏 名 (小 井 手 祐 介)

論文題名

Surfactant Micelles in Flows
(流動場における界面活性剤ミセルのふるまい)

論文内容の要旨

本論文では、流動場における界面活性剤ミセルのふるまいについて述べる。界面活性剤は1つの分子内に親水基と疎水基を併せ持つため、溶液中で自己組織化して、球状ミセル、棒状ミセル、ひも状ミセル、ベシクルなど多岐にわたる構造を形成する。本論文の主な対象であるひも状ミセルは、高分子と同様に溶液に粘弾性をもたらす、乱流を劇的に抑制する。乱流は大きな壁面摩擦抵抗をもたらすため、界面活性剤添加による乱流抑制は、省エネルギーを促進する技術として期待される。しかし、ひも状ミセルの大きさは高々数 μm であり、流れの特徴長さに比べて極めて小さいため、ミセルの微視的なふるまいには未解明な点も多い。そのため、界面活性剤添加による乱流抑制の根本的な物理機構については未だ議論の余地がある。そこで本論文では、粗視化分子シミュレーションにより、分子スケールでのミセル特有のふるまいを微視的な観点から詳細に示した。

はじめに、一様せん断流における界面活性剤ミセルの分裂に注目した。ミセルの平均寿命のせん断速度依存性は温度に依存して変化するが、ミセルの回転緩和時間と平均寿命から定まる最長緩和時間を用いることで、平均寿命を統一的に整理できることを示した。

次に、一様せん断流中のミセルの配向について調べた。高分子の場合には、せん断速度の増加に伴い高分子は流れ方向へと配向する。しかし、界面活性剤ミセルの場合には、あるせん断速度を超えると、ミセルの配向が抑制されることを発見した。分裂と配向のせん断速度依存性を比較することで、流れによる分裂促進がミセルの配向抑制の起源であることを明らかにした。

ミセルのふるまいを理解するうえで、分裂だけでなく結合も重要な役割を担う。そこで、平衡状態における界面活性剤ミセルの結合の統計則について調べた。ミセルの結合を、分裂によって生成された2つのミセル同士の結合である自己再結合と、それ以外の非自己再結合に分類して解析することで、それぞれの結合に要する時間が定性的に異なる分布に従うことを明らかにした。さらに、ミセルが結合に要する平均的な時間は、温度や界面活性剤の体積分率に依存して変化するが、界面活性剤の拡散性とミセルの空間配置に着目することで、平均結合時間を統一的に記述するスケール則を発見した。

最後に、乱流中でのふるまいを調べるため、高分子の単純なモデルである2粒子をばねで結合したダンベルモデルを対象とし、乱流中のダンベルの伸長と配向について調べた。乱流中の秩序的な渦の階層構造に注目し、スケール分解を用いて各スケールの流れ場がダンベルに及ぼす影響を系統的に評価した。ダンベルの緩和時間が乱流中の最小スケールの渦の特徴時間であるコルモゴロフ時間より短い場合は、最も大きな速度勾配を有する最小スケールの渦がダンベルのふるまいに最も影響を及ぼすのに対し、緩和時間がコルモゴロフ時間より長くなると、速度勾配の大きさは小さいが持続時間が長い大きなスケールの渦の影響が顕著に現れる。

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 (小 井 手 祐 介)			
	(職)	氏 名	
論文審査担当者	主 査	教 授	後藤 晋
	副 査	教 授	杉山 和靖
	副 査	教 授	松林 伸幸
	副 査	教 授	玉野 真司 (名古屋工業大学)

論文審査の結果の要旨

水に微量の界面活性剤や高分子を添加すると、その流動状態が劇的に変化することが古くから知られる。本論文には、この特異な現象の物理機構の解明と工学応用に向けた基盤作りを目的とした研究成果がまとめられている。主な成果は以下の四つである。(一) 一様せん断流中で界面活性剤がひも状ミセルを形成する状況を想定し、粗視化分子動力学シミュレーションを実行するとともに、ミセルの分裂過程の平均寿命を同定する方法を提案した。さらに、ミセルの回転緩和時間と平均寿命に基づく最長緩和時間を考えることで、ミセルの平均寿命のせん断速度依存性を系統的に記述できることを示した。(二) 次に、せん断流中における界面活性剤のひも状ミセルの流動場への配向の統計を定量的に解析し、流れのせん断速度が大きくなると、分裂の影響によりミセルの配向が、高分子のそれとは質的に異なることを数値シミュレーションにより発見するとともに、界面活性剤ミセルの切断によりその配向が抑制されるという物理機構を定量的に確かめた。(三) 次に、平衡状態における界面活性剤の結合の統計を調べ、それが二種類の結合、つまり、分裂によって生成された二つのミセルの再結合(自己再結合)と、それ以外の非自己再結合に分類されることを示し、これら二種類の結合に要する時間は質的に異なる統計則に従うことを発見した。さらに、界面活性剤の拡散性などに着目することでこれらの統計則の背後にある物理機構を明らかにした。(四) さらに、高分子の添加による乱流低減現象の物理機構を解明するために、高分子をダンベルモデルにより表現した数値シミュレーションを実行し、乱流中におけるその配向および伸長現象を詳細に調べた。とくに、乱流をスケール分解することでダンベルが最も伸長を受けるスケールを明らかにし、分子緩和時間と乱流中の渦旋回時間の大小関係に着眼すれば結果を系統的に整理できることを示した。以上、(一) から (四) のいずれの成果も、分子と流れの相互作用に関する基盤的な知見を与えると同時に、広範な工学応用への礎を構築するものである。したがって、博士(工学)の学位論文として十分な価値があるものと認める。