

The JPAPWS Symposium 2023

水・蒸気性質 シンポジウム 2023

2023年11月29日(水)

慶應義塾大学 三田キャンパス 北館ホール
(東京都港区三田2-15-45)

予稿集



口頭講演

IRS1 妹尾 茂樹 (三菱重工業株式会社) 後方散乱光を利用した光学プローブによる試験用蒸気タービン中の粗大液滴計測	1
IRS2 沖田 信雄 (東芝エネルギーシステムズ株式会社) ガスタービン複合発電における硫酸露点	3
PCC1 井田 憲幸 (電力中央研究所) 低圧タービン材の孔食及び応力腐食割れ発生に及ぼす有機酸の影響	4
PCAS1 高橋 英明 (東北大学) 量子化学と統計力学による水溶液中の化学過程の自由エネルギー解析	5
TPWS1 近藤 智恵子 (長崎大学) 分子シミュレーションで貢献する地球温暖化係数が極めて低い冷媒 (熱エネルギー輸送媒体) の開発	7
PCC2 石原 伸夫 (三菱重工業株式会社) 水・蒸気の物性と発電プラントの水質設計・異常診断	9
SCSW1 村田 昌彦 (海洋研究開発機構) 海が吸収するCO ₂ —Ocean-based CDRに向けて—	10
特別講演1 渡部 康一 (慶應義塾大学) わが国の水・蒸気性質研究90年の歩み	12
特別講演2 高木 愛夫 (火力原子力発電技術協会) カーボンニュートラルへ ~ゼロエミッション火力発電への期待と役割~	13
特別講演3 大場 紀章 (ポスト石油戦略研究所) 日本の産業戦略はカーボンニュートラルからGXへ	14

ポスター発表

- P01 配管の無いランキンサイクル発電機の開発 15
田中 勝之 (日本大)
- P02 脱炭素社会を経済的に実現する革新的レトロテクノロジーの蓄熱発電 17
岡崎 徹 (エネ総研)
- P03 相転移に伴う臨界ゆらぎに着目して水の比熱を解釈する新たな枠組み構築の試み 19
梶原 行夫 (広島大)
- P04 表層型メタンハイドレートに関する研究開発および機能活用技術開発 21
室町 実大 (産総研), 鈴木 清史 (産総研), 天満 則夫 (産総研)
- P05 ☆モンテカルロシミュレーションを用いたクラスレートハイドレートの相図と充填率解析 22
岸本 寛隆 (慶應大), Paul E. Brumby (慶應大), 泰岡 顕治 (慶應大)
- P06 ☆機械学習を用いた水分子の結晶構造解析 23
石合 智貴 (慶應大), 遠藤 克浩 (慶應大, 産総研), Paul E. Brumby (慶應大), Amadeu K. Sum (CSM), 泰岡 顕治 (慶應大)
- P07 ☆分子動力学シミュレーションを用いたAQP4を介した水分子透過の方向性に関する研究 25
栗林 直信 (慶應大), 山本 詠士 (慶應大), 平野 秀典 (慶應大), 泰岡 顕治 (慶應大)
- P08 ☆電場の影響下において円筒状ナノ空間に形成される水の構造 26
小野 祐為 (慶應大), 山本 詠士 (慶應大), 泰岡 顕治 (慶應大)
- P09 ☆アルキルアミンの水熱反応: 皮膜形成アミン適用のための生成物と経路のNMR解析 27
土井 彪斗 (徳島大), 吉田 健 (徳島大), 吉岡 春香 (徳島大, 栗田工業), 平野 朋広 (徳島大), 中原 勝 (京都大)
- P10 ☆皮膜形成アミンの銅への吸着および腐食防止に対する温度効果 28
次田 怜央 (徳島大), 木下 郁望 (徳島大), 柴原 梨花 (徳島大), 植木 智之 (徳島大), 野口 直樹 (徳島大), 吉田 健 (徳島大)
- P11 ☆H型メタンハイドレートのLLケージ内のメタンの振動スペクトルの第一原理MD解析 29
須原 慎之助 (徳島大), 吉田 健 (徳島大), 野口 直樹 (徳島大)

P12 ☆分子動力学シミュレーションによるアルコール水溶液表面における分子構造の解明	30
廣瀬 真由 (富山大), 石山 達也 (富山大)	
P13 ☆流動するアイスラリー中の氷粒子径の変化	31
浦城 仁, 原崎 太希, 浅岡 龍徳 (信州大)	
P14 ☆加水分解酵素の機能制御を目指した共溶媒添加効果の全原子MDによる解析	32
大坂 龍司 (大阪大), 石田 豊和 (産総研), 笠原 健人 (大阪大), 松林 伸幸 (大阪大)	
P15 ☆固液界面での吸着に関する全原子MDを用いた自由エネルギー解析	33
松村 徹平 (大阪大), 笠原 健人 (大阪大), 松林 伸幸 (大阪大)	
P16 ☆ポリマーに対する水の溶解性のMD解析	34
向江 謙心 (大阪大), 小嶋 秀和 (大阪大), 矢ヶ崎 琢磨 (大阪大), 松林 伸幸 (大阪大)	
P17 ☆ペプチド結合主鎖二面角変化の自由エネルギー曲面を特徴付ける反応座標の深層学習による探索 ..	36
岡田 一志 (大阪大), 菊辻 卓真 (大阪大), 岡崎 圭一 (分子研), 森 俊文 (九大先導研), 金 鋼 (大阪大), 松林 伸幸 (大阪大)	
P18 ☆高分子に閉じ込められた水の水素結合状態と動的性質に対する分子動力学解析	38
四方 志 (大阪大), 菊辻 卓真 (大阪大), 八十島 亘宏 (大阪大), 金 鋼 (大阪大), 松林 伸幸 (大阪大)	
P19 ☆不凍タンパク質の添加が方向性凝固過程における溶質掃き出しに及ぼす影響	40
阿部 怜明 (青学大院), 森本 崇志 (青学大), 熊野 寛之 (青学大)	
P20 ☆不凍タンパク質を添加したアイスラリーの氷粒子および流動状態の観察	42
小宮 佑太 (青学大院), 三上 修 (青学大), 森本 崇志 (青学大), 熊野 寛之 (青学大)	
P21 ☆メタステーブル領域における熱力学諸性質の精密測定	44
久津見 朋也 (富山県立大), 宮本 泰行 (富山県立大), 粥川 洋平 (産総研), 赤坂 亮 (九産大)	

後方散乱光を利用した光学プローブによる

試験用蒸気タービン中の粗大液滴計測

Coarse Droplet Measurement in a Model Steam Turbine Using An Optical Backscatter Probe

妹尾 茂樹^{*1}

Senoo, Shigeki^{*1}

^{*1} 三菱重工業株式会社 (〒676-8686 兵庫県高砂市荒井町新浜 2 丁目 1 番 1 号)

Email : shigeki.senoo.yk@mhi.com

要旨 :

Size and velocity distributions in polydisperse coarse droplets are important to estimate and reduce erosion damage and wetness losses in wet steam turbines. Diameters and velocities of coarse droplets are measured by an optical backscatter probe downstream of the last stage stator in a four-stage model steam turbine at the rated condition. Three-dimensional measurement space covers the outer 30% of the stator height for one stator pitch with 30 radial and 15 circumferential points at two axial positions with 2 and 5 mm downstream from the stator trailing edge. The data are acquired for 0.48 s with a sampling frequency of 41.6 MHz at each of the 900 measurement points.

The probe is a "single-particle" instrument. The probe emits a He-Ne laser with the wavelength of 632.8 nm from the probe tip of the diameter of 5 mm and a photodiode embedded in the tip detects scattered light from individual droplets in a distant focal volume. Diameter and velocity are calculated by the amplitude and width respectively of a signal in the scatter light with Mie light scatter theory and calibration curves. The measurement ranges are from 30 to 110 micrometers for diameter and up to 170 m/s for velocity. The focusing distance of 15 mm between the measurement sample volume and the probe front surface avoids interference with the flow.

The droplet diameters distribute in the range from 30 to 90 micrometers. The Sauter mean droplet diameter is about 57 micrometers and the maximum droplet diameter is 88 micrometer. The corresponding Weber numbers are 11.4 and 17.6 respectively in the Sauter mean and maximum diameters. The Weber numbers are generally consistent with calculated values by both Kelvin-Helmholtz and Rayleigh-Taylor instability models. The mass flow rate and number of the coarse droplets is larger in the wake region from the stator, because the coarse droplets might be mainly generated by atomization of water films and rivulets on the stator. The larger droplets in diameter over 60 micrometers tend to axially deflect from steam flows. The Sauter mean diameters are slightly larger downstream from suction surface of the stator. The droplet velocities distribute in the range up to 40 m/s. The smaller droplets have the higher velocities as expected. Mean velocities are also consistent with predictions by the instability models.

The measured number density distributions of coarse droplet diameters and velocities with the spatial resolution could improve the accuracy in models for blade erosion and wetness loss from models based on mean or maximum droplet diameter.

キーワード：機械工学, 熱工学

ガスタービン複合発電における硫酸露点

Sulfuric acid dew point for gas turbine combined cycle power plants

沖田信雄*¹, 木村賢一*²

Okita, N.*¹ and Kimura, K.*²

*^{1,2} 東芝エネルギーシステムズ株式会社 (230-0045 横浜市鶴見区末広町 2-4)

要旨：

気候等により変動する再生可能エネルギー発電の増加に伴い、負荷変動を担うガスタービン複合発電 (GTCC) の役割は益々高まり、高性能運転を維持しながら、信頼性を確保することが重要となる。特に GTCC のエネルギー効率を高めるためには排熱回収ボイラ (HRSG) 出口排ガス温度および給水側入口温度を低く設定する必要があるが、排ガス成分・排ガス温度・給水温度の状態により HRSG 最低温部の伝熱管表面に結露が生じる。この腐食が進行した場合伝熱管損傷に至り GTCC プラント運転に影響を与える可能性がある。そのため、腐食の原因になる結露を防ぐよう酸露点に注意する必要がある。中でも硫酸露点は他の硝酸等の露点よりも高めなので特に重要である。

硫酸露点予測式としては、日本では古くから大塚の式が採用され、海外では Verhoff & Banchemo の式が有名であるが、いずれの式も 20 世紀後半の重油や石炭等の排ガス中に硫黄分を多く (数~100ppmv) 含む従来型火力発電のボイラ用に開発・適用されたもので、最近の硫黄分が少ない精製された天然ガス燃料の GTCC 用ではない。1ppb から 1 ppm レベルを網羅する硫酸露点予測式は存在しないが、これは、極低硫黄分 (SO₃) を含む排ガスの露点を精度良く計測するのが困難であることが一因である。また、従来の式を極低 SO₃ 範囲まで延長すると、露点を過小評価してしまうことになるので安全ではない。

現存の比較的低 SO₃ (H₂SO₄) の排ガスを網羅できる硫酸露点予測法としては、Land の表 (0.08ppm 以上) や、Mueller の理論カーブ、モデルによるシミュレーション計算があるが、根拠や適用範囲が明確ではない。そこで、これらの予測法も比較参照しながら、信頼あるデータや理論から、実用的な範囲を網羅する高精度の統一した硫酸露点予測法や予測式の開発が求められている。

キーワード：凝縮, 酸露点, 熱工学, 熱力学, 熱力学性質

参考文献

- [1] 大塚唯男他, 電中研報告 (化 6100) ,1961, 63p
- [2] Verhoff, E. H., Banchemo, J. T. Chemical Engineering Process, 1974, 70(8), 71p
- [3] Land, T., Journal of the institute of fuel, 1977, 50(403), 68-75pp
- [4] Mueller, P., Chem. Ing. Tech., 1959, 31, 345p

低圧タービン材の孔食及び応力腐食割れ発生に及ぼす有機酸の影響

Effects of Acetic Acid on the Initiation of Pitting Corrosion and Stress Corrosion Cracking on Low Pressure Turbine Material

井田 憲幸, 谷 純一, 河村 浩孝

Ida, N., Tani, J. and Kawamura, H.

一般財団法人 電力中央研究所 エネルギー変換技術研究本部 (240-0196 神奈川県横須賀市長坂 2-6-1)

Email : nori-ida@criepi.denken.or.jp

要旨 :

発電プラントにおけるボイラの給水処理において脱酸素剤や腐食抑制剤として有機系薬剤を使用すると、給水中において種々の分解生成物が生じる可能性がある。ヒドラジン代替剤候補物質の一つであるジエチルヒドロキシルアミンや最近注目されている腐食抑制剤である皮膜形成アミンも、酢酸等の有機酸をはじめとする種々の分解生成物を生じることが報告されている。これらの分解生成物が蒸気系統に移行した場合、湿り蒸気環境に置かれている低圧タービンの腐食に影響を及ぼすことが懸念される。中でも、低圧タービンにおいて孔食や応力腐食割れが生じた場合、タービンの破損に繋がる可能性がある。本研究では、動電位アノード分極による孔食電位の測定及び U ベンド試験により、低圧タービン材の孔食及び応力腐食割れ発生に及ぼす酢酸の影響を検討した。低圧タービン材としては低圧タービンローターに使用される低合金鋼を使用した。酢酸が蒸気系統に移行すると、低圧タービン表面に形成する凝縮水の pH が変化する可能性がある。そこで、代表的な腐食性物質である塩化物イオンを含む pH 緩衝液中において、孔食及び応力腐食割れ発生に及ぼす pH の影響を調査した。その結果、いずれの腐食も低合金鋼が不働態化傾向を示す pH (pH 8 付近) において最も生じやすいことが分かった。応力腐食割れは孔食を起点として発生した。塩化物イオンを含まない溶液の場合、酢酸イオンを添加しても孔食や応力腐食割れが生じることはなかった。また、塩化物イオンを含む溶液に酢酸イオンを添加すると、塩化物イオンを単独で含む場合と比較して、孔食や応力腐食割れは生じにくくなった。以上から、酢酸イオン自体は低合金鋼の孔食や応力腐食割れの発生を助長しないが、凝縮水の pH 変化はそれら腐食に影響を及ぼすことが明らかとなった。

キーワード : 溶液化学, 腐食, 孔食, 応力腐食割れ, 低合金鋼, 酢酸

量子化学と統計力学による

水溶液中の化学過程の自由エネルギー解析

Free energy analyses of chemical events in aqueous solutions
with a quantum chemical method combined with statistical mechanics

高橋 英明*¹

Takahashi, H.*¹

*¹ 東北大学 大学院理学研究科 化学専攻 (980-8578 宮城県仙台市青葉区荒巻 字青葉 6-3)

Email : hideaki.takahashi.c4@tohoku.ac.jp

【序 論】

超臨界水(SCW)は、反応場として極めて高い反応性を持つことから大きな注目を集めた。SCW を溶媒とするダイオキシンなどの難燃性の有害物質の分解反応は特に有名である。ところが、それらの反応の微視的なメカニズムについては、恐らく未だに解明されていない。明らかに、臨界温度 374°C という高温や高い密度が反応性の要因となっているが、それらだけで説明できるものではない。当初、反応セルの金属表面と SCW との界面で起こる反応と、純粋な SCW 中の反応が同じ俎上で議論されることが多く、多様な反応が数多く報告される割には、それらの反応機構の詳細に関する議論はあまり無かった印象がある。界面反応を積極的に利用することは応用上有効であるが、先ず純粋な SCW 中の反応機構を解明することが、SCW 中の化学反応の科学において必須である。

SCW 中で水のイオン解離定数 pK_w が減少することが知られている。一方、通常の水の中で酸触媒によって進行する反応の速度が SCW 中で増大するとの観測結果がある。これらの事実から、水のイオン解離によって酸および塩基触媒反応が活性化されるとの解釈(仮説)がある。ただし、SCW が高温であることを考えると、酸・塩基触媒以外にも様々な反応の経路が可能になると考えられる。従って、 pK_w の減少と反応性の増大との因果を結論付けるのは短絡である。本講演では、SCW の温度 T を固定し、水分子のイオン解離反応($2H_2O \rightarrow H_3O^+ + OH^-$)に伴う自由エネルギー変化 ΔG を、密度 ρ の関数として分子シミュレーションによって算出した[1]。さらに、 ΔG の ρ 依存性の分子論的なメカニズムを明らかにした。

【計算方法】

本計算において、イオン解離する水分子や解離生成物(H_3O^+ , OH^-)を溶質とみなし、これらを量子化学的(QM)に記述し、溶媒の SCW を古典的力場(MM)で表現する方法(QM/MM 法)を採用した[2]。具体的には、溶質と溶媒を併せた全系のエネルギー E_{tot} を

$$E_{tot} = E_{QM} + E_{QM/MM} + E_{MM} \quad (1)$$

と記述する。式(1)右辺の第二項は、QM 系(溶質)と MM 系(溶媒)との相互作用エネルギーを表す。QM 系は、BLYP を交換相関汎関数とする密度汎関数理論(DFT)によって記述し、MM 系は 255 個の TIP4P モデルの水分子で表現した。また、各溶質の溶媒和自由エネルギーは、溶質周りの溶媒分子の相互作用エネルギーの分布関数を基本変数とする溶液の理論(ER 法)によって計算した[3]。SCW 溶媒の温度 T を 600 K とし、密度 ρ を 0.1~0.6 g/cm³ まで変化させた。

【結果と考察】

計算によれば、イオン解離の自由エネルギー変化 ΔG は、 $\rho = 0.1\sim 0.6 \text{ g/cm}^3$ の範囲において単調に減少する。単純に考えると、この結果はイオン種に対する水和が、SCW が高密度である程、有利であることの帰結であるように見える。これを検証する為に、 $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ の関係をを用いて ΔG をエンタルピー項： ΔH とエントロピー項： $-T\Delta S$ に分解し、それぞれの密度依存性をグラフにした(図1)。面白いことに ΔH は密度の増大と共に若干、増大するのみであるのに対して、 $-T\Delta S$ は顕著に減少する。このことから、 ΔG が ρ について単調に減少するのは、SCW のイオン生成物に対する水和におけるエントロピーの効果によるものと結論できる。

ΔH が大きな密度依存性を示さない理由について考察しよう。例えば、OH⁻が 0.1 g/cm^3 の SCW に水和される時、溶質-溶媒間相互作用は -148.7 kcal/mol にも達する(図2左)。反対に溶媒分子どうしの相互作用は、 32.0 kcal/mol 不安定化する。ダイアグラム中の E_{dist} は溶液中で溶質の電子状態が歪むことによる不安定化エネルギーである。これらの和として OH⁻の溶媒和エネルギー E_{sol} は -112.3 kcal/mol と得られる。SCW の密度を 0.6 g/cm^3 まで増大させると、これらの値の絶対値はいずれも大きくなることが分かる。しかし、これらが互いに相殺することから、その総和 E_{sol} は -111.5 kcal/mol となり、 $\rho = 0.1 \text{ g/cm}^3$ の時と比べて殆ど変化しない。

次に、 $-T\Delta S$ の密度依存性について考える。溶媒中にイオンが生成すると、イオンと水分子との間の強い引力によってイオンを核とするクラスターが形成される。その結果、水分子のとりうる配置の自由度が減少するので溶媒のエントロピーは減少する。ただ、低い密度 $\rho = 0.1$

g/cm^3 でのエントロピーの減少は 0.6 g/cm^3 での減少よりも遥かに大きいことが予想される。このような分子論によって、水のイオン解離の自由エネルギー変化 ΔG が密度に対して単調に減少することが理解できる。つまり、低密度での水のイオン解離は著しく溶媒水の配置の自由度を減少させるので自由エネルギー的に不利になると解釈できる。

序論でも述べたが、SCW における水のイオン積の増大と SCW の特異な反応性との因果関係を結論するのは早計である。本講演では酸・塩基触媒によらない新規な反応経路についても紹介する予定である。

キーワード：物理化学一般，化学反応論，熱力学，統計力学，分子シミュレーション-計算科学

参考文献

- [1] Takahashi, H. et al. J. Chem. Phys. 2005, 122, 044504.
 [2] Takahashi, H., et al., J. Comp. Chem. 2001, 22(12), 1252-1261.
 [3] Matubayasi, N., et al. J. Chem. Phys. 2000, 113, 6070-6081.

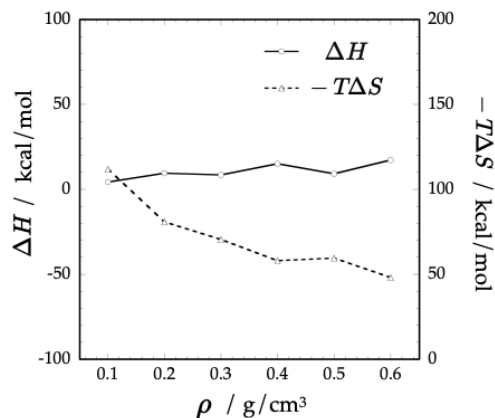


図1. 水のイオン解離反応の自由エネルギー変化のエンタルピー項とエントロピー項の密度依存性[1].

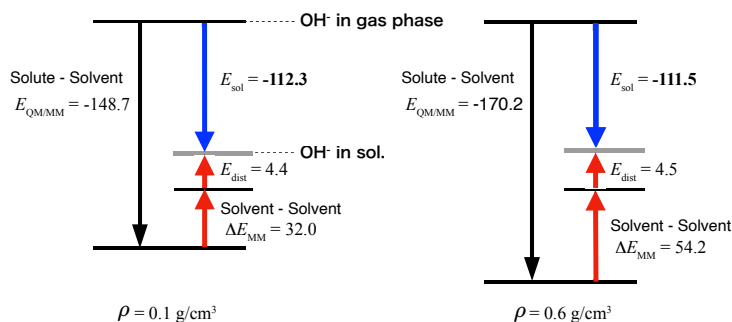


図2. OH⁻の溶媒和エネルギーダイアグラムとその分解項[1]. 左図は密度が 0.1 g/cm^3 , 右図は 0.6 g/cm^3 に対応する。エネルギーの単位は kcal/mol .

分子シミュレーションで貢献する地球温暖化係数が極めて低い冷媒 (熱エネルギー輸送媒体) の開発

How can molecular simulation contribute to the development of low GWP refrigerants?

近藤 智恵子*1, 今井 友暁*1, 川原 豪真*1, 奥村 哲也*1

Kondou, C.*1, Imai, T.*1, Kawahara, T.*1 and Okumura, T.*1

*1 長崎大学 工学研究科 総合工学専攻 (851-2126 長崎市文教町 1-14)

Email : ckondou@nagasaki-u.ac.jp

要旨 :

冷凍空調分野では広く HFC(Hydrofluorocarbon)が冷媒として使用されている。使用温度範囲によって性能が発揮される物質が異なり、超低温域では R23 (HFC23, CHF₃), 空調域では R32 (HFC32, CH₂F₂) などが用いられている。これら HFC 系冷媒の地球温暖化係数はそれぞれ, CO₂ の 14600 倍, 771 倍と高いため, 他の候補物質の探索が急務となっている。

図 1 は Propane と低温域での使用が期待される新冷媒 R1132a (HFO1132a, CH₂=CF₂) の気液共存曲線のデータ数を比較するグラフである。Propane は三重点 85.46 K 付近まで飽和液の測定が網羅されているが[1-11], 現在のところ R1132a は臨界点から 238 K 付近のデータしか提供されていない[12-16]。図 1 右のグラフ中に黄緑の丸で示すのは, 分子シミュレーションの結果である。測定値の存在する 238 K 以上で分子力場を調整し, 低温域へ計算範囲を拡大することで, 使用温度範囲として期待される 170 K までの飽和液密度を得た。計算結果を幾つかの状態方程式と結果を比較したところ, 低温域で乖離した。このように分子シミュレーションは, 測定データの提供に時間がかかる低温度域で活用し, 冷媒選定の支援をすることができる。

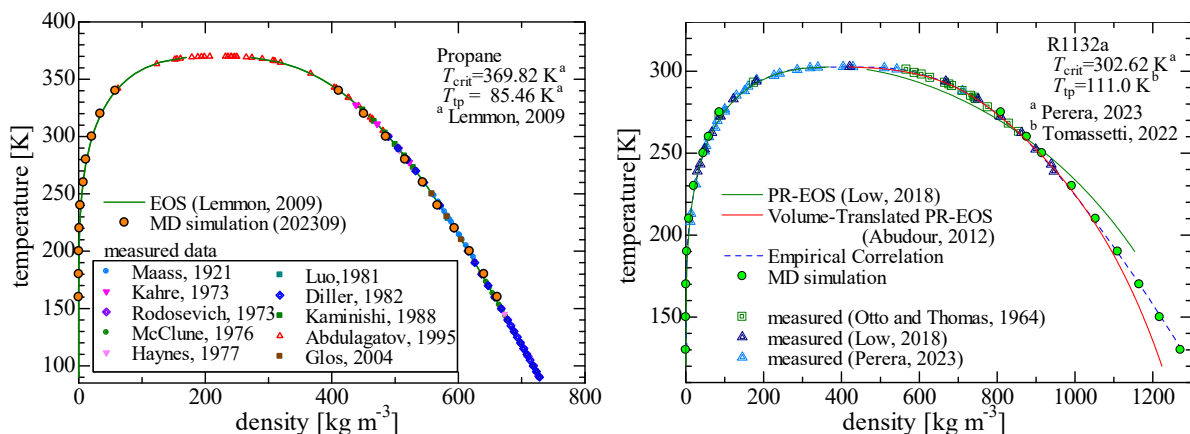


図 1 Propane (左) と低温用 HFO 系冷媒 R1132a (右) の気液共存曲線。

冷媒の選定には、地球温暖係数の低減の他、成績係数の維持、安全性の担保にも配慮しなければならない。単一物質では全てを解決することは難しく、候補物質を混合し最適な組成を見出すことが求められている。分子シミュレーションは、様々な混合組合せ、広い組成範囲の物性を予測することに貢献し得る。図 2 の左のグラフは R32/CF₃I 二成分混合系の気液界面の局所密度分布を示しており、横軸は界面に垂直な z 軸方向位置を示す。バルク液の密度を基準として、青色が R32、オレンジ色が CF₃I の成分密度を示しており、気液界面では低沸点成分である R32 の濃度が局所的に高くなるよう平衡化する。図 2 の右のグラフは CF₃I の気液界面の CF₃I の配向をバルク液と比較した確率密度分布で、縦軸が規格化された確率、横軸は z 軸との角度 θ を示す。完全にランダムな場合は $\sin \theta$ で示される確率分布を取り、バルク液は完全にランダムであることが分かる。一方、気液界面の分子配向は 60° ほどでピークを示し、配向に偏りが生じていることが分かった。このような混合系の気液界面の局所密度や分子配向の特徴は、表面張力などの物性が均一に混合していると仮定した計算値から乖離する可能性を示す。分子レベルの混合状態の観察は理想混合からの乖離の要因を裏付け、物性予測向上に資する物理的背景も示すことが出来る。

キーワード：熱工学，熱力学，分子シミュレーション-計算科学，冷媒，地球温暖化緩和策

参考文献

- [1] Lemmon, E. W., et al., J. Chem. Eng. Data, 2009, 54 (12), 3141–3180.
- [2] Maass, O., et al., J. Am. Chem. Soc. 1921, 43 (5), 1098–1111.
- [3] Kahre, L. R. C., J. Chem. Eng. Data, 1973, 18 (3), 267–270.
- [4] Rodosevich, J. B., et al., AIChE J. 1973, 19 (4), 729–735.
- [5] McClune, C. R., Cryogenics (Guildf). 1976, 16 (5), 289–295.
- [6] Haynes, W. M., et al., J. Chem. Thermodyn., 1977, 9 (2), 179–187.
- [7] Luo, C. C., et al., Cryogenics, 1981, 21 (2), 85–93.
- [8] Diller, D. E., J. Chem. Eng. Data, 1982, 27 (3), 240–243.
- [9] Kaminishi, G., et al., J. Japan Pet. Inst., 1988, 31 (5), 433–438.
- [10] Abdulgatov, I. M., et al., J. Chem. Thermodyn., 1995, 27 (12), 1385–1406.
- [11] Glos, S., et al., J. Chem. Thermodyn., 2004, 36 (12), 1037–1059.
- [12] Perera, U., et al., Int. J. Thermophys., 2023, 44 (6), 84.
- [13] Tomassetti, S., et al., Int. J. Refrig. 2022, 133, 172–180.
- [14] Low, R., “Evaluation of potential use of R-1132a as a Refrigerant blend component”, 1st IIR Int. Conf. Appl. HFO Refrig. Birmingham, UK, 2018.
- [15] Abudour, A. M., et al., Fluid Phase Equilib., 2012, 335, 74–87.
- [16] Otto, J., et al., Int. J. Heat Mass Transf. 1964, 7 (1), 41–47.

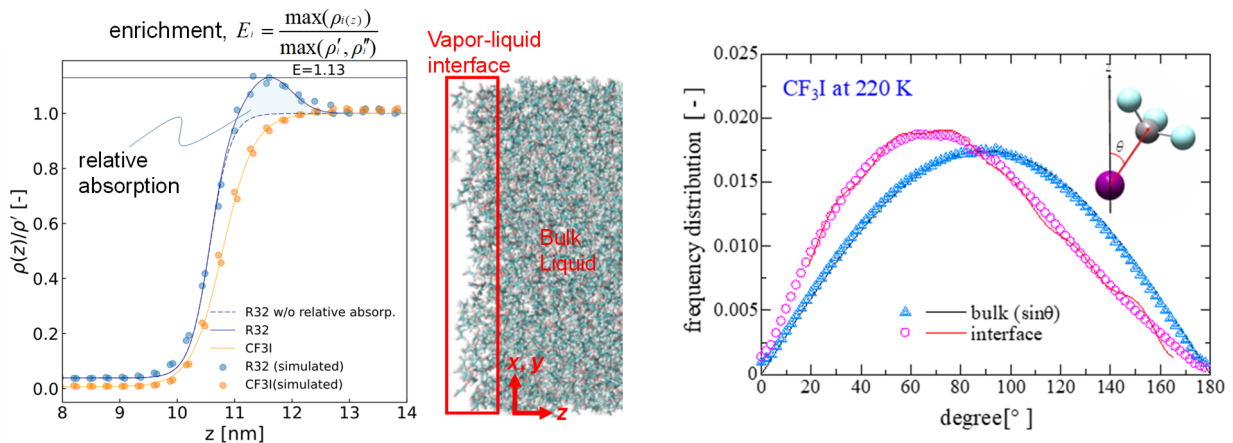


図 2 R32/CF₃I の局所成分密度分布 (左) および界面とバルク液中の CF₃I 分子配向 (右)

水・蒸気の物性と発電プラントの水質設計・異常診断

The Properties of Water and Steam, Water Quality Design and Abnormal Diagnosis of Power Plants

石原 伸夫^{*1}, 濱口 涼吉^{*2}

Ishihara, N.^{*1}, Hamaguchi, R.^{*2}

*1 三菱重工業株式会社 原子力セグメント プラント設計部 (652-8585 兵庫県神戸市兵庫区和田崎町 1-1-1)

*2 三菱重工業株式会社 総合研究所 化学研究部 化学第三研究室 (676-868 兵庫県高砂市荒井町新浜 2-1-1)

Email : nobuo.ishihara.2x@nu.mhi.com (ryokichi.hamaguchi.57@mhi.com)

要旨 :

加圧水型軽水炉 (PWR) などの原子力発電プラント, 火力プラントの水・蒸気系統では, 配管・機器の全面腐食・流れ加速型腐食 (FAC) を最小化するため, アルカリ側の pH 管理を行っている. pH 管理については, 環境規制・配慮, ランニングコスト, アルカリ側に弱い材料などもあるため, pH は上げれば良いのではなく, プラント全体としてバランスをとる必要がある. さらに, プラントの系統は複雑な気液分配で構成された上に, 様々な温度の配管・機器があり, 系統上の 1 点で評価するのではなく, プラント全体としてみる必要がある.

このような設計最適化は複雑であるため, PWR プラントでは水・蒸気での解離・分配の平衡データを組み入れた, 系統全体の化学種濃度分布, 高温 pH 分布を計算する設計ツールが作成されている [1][2][3]. このようなツール作成には, 一般的にプログラミング言語と GUI ツールを用いているものと思われるが, 当社の場合は, Microsoft Excel の自作外部関数を用いて実現した. これにより, ツールの開発期間の短縮, プログラム以外でも容易な機能拡張, さらに, 想定外の解析時でも作業時間全体の短縮が実現できている. 基本的には, マクロ (計算時にプログラムを実行) は使用しておらず, Microsoft Excel のソルバー機能を用いて, 逆問題を解く方式で計算を行っている. 具体的には, pH 制御条件を入力して, それを実現できる薬品の注入量を逆問題として解くことで, プラントの設計を行う. 同様の方法で, 予期しない化学反応が起きた際でも, 通常時の薬液注入量と系統の成分濃度 (測定値) を入力とし, 化学反応の場所と速度を逆問題として解くことで, 異常診断を行うことができる.

キーワード : 溶液化学, 原子力, 発電プラント, 化学平衡, pH

参考文献

- [1] EPRI, ML18233A520, “NRC / SGMP Steam Generator Task Force Meeting”, 2018.
- [2] Olga Also Ramos et. al. . ” Outcomes and Analyses of the Secondary Circuit Water Chemistry Strategy for the French PWR Fleet”, NPC 2014 SAPPORO, Proc., Sapporo, Japan, 2014.,
- [3] Marie-Hélène Clinard et. al., “PWR Secondary Water Conditioning Modelling: FRASEC”, NPC 2018, 21st International Conference on Water Chemistry in Nuclear Reactor Systems, Proc., San Francisco, USA, 2018

わが国の水・蒸気性質研究 90 年の歩み

Historical review on water and steam properties research over 90 years in Japan

渡部 康一*¹

Watanabe, K.*¹

*¹ 慶應義塾大学理工学部 名誉教授

Email : watanabe.thermo@gmail.com

要旨 :

熱エネルギー変換システムに用いられる数多くの作動流体の中で、水が最も重要な役割を演じていることは論を俟たない。蒸気機関から蒸気タービンへの展開、技術開発の推進・高性能化の過程で、国際商取引の基礎となるシステムの性能・経済性評価の基盤を担う水・水蒸気の主要な熱物性値に関する国際標準の作成を目的とする国際学術組織の誕生からほぼ 1 世紀になる。1929 年にロンドンで開催された第 1 回国際蒸気表会議 (1st International Steam Table Conference) 以降、当該分野の基礎研究の成果は技術開発の分野に大きな進展と恩恵をもたらしてきた。いわゆる軽水のみならず、重水、重要な各種の水溶液系、海水、地熱水なども対象とした物理化学分野も含む当該分野の基礎研究の成果は、各種の発電・エネルギー変換システムの高性能化に役立つ国際的なガイドライン作成などの面でも重要な役割を演じている。

本講演では、現在の国際水・蒸気性質協会(International Association for the Properties of Water and Steam, 略称 IAPWS)の誕生に至る経緯と、これまでの約 90 年間に亘るわが国の当該分野における基礎研究の進展を国際協力活動面での実績を中心に展望する。欧米先進工業国を中核とする国際協力の開始から約 10 年弱の遅れがあり、第二次世界大戦の大きな影響を乗り越え、学界、電力・産業界の支援も受けつつ多大な努力を継続された先達たちの足跡はあまり詳細には伝えられていないように思われる。このような背景もあり、この分野の国際協力活動の恒久化を象徴する IAPWS の誕生(1971 年)の頃までのわが国の国際活動の実績などを紹介しておきたい。

キーワード : 熱工学, 熱力学, 熱物性値, 蒸気表, 国際水・蒸気性質協会 (IAPWS)

日本の産業戦略はカーボンニュートラルから GX へ

Japan's industrial strategy moves from carbon neutral to GX

大場 紀章^{*1}

Oba, N.^{*1}

^{*1} ポスト石油戦略研究所 (101-0054 東京都千代田区神田錦町 1-5-5OZIO 大手町 1302 号)

Email : oba@postoil.jp

要旨 :

日本の多くの人々 (特に技術者に多い) は, 日本がカーボンニュートラルに取り組まなければならないのは, COP21 のパリ協定に基づいて 2020 年に菅首相 (当時) が 2050 年までのカーボンニュートラルを宣言したからだと思込んでいるが, それは必ずしも正しくない. パリ協定には所謂「2 度目標」はあるが, 「1.5 度目標」については「抑える努力を追求する」と言及があるのみで, まして「2050 年カーボンニュートラル」に関する言及はない. そもそもパリ協定で各国に求められているのは目標の策定義務であって, 京都議定書のような罰則規定のある目標遵守義務はない. そして, 菅首相の宣言よりも前に大手企業や経済団体, 電力会社が自発的にカーボンニュートラル宣言を行っている事実がある.

これが意味することは, カーボンニュートラルとは, 政府が設定した目標を達成することが目的ではなく, 産業界がグローバル市場で競争するためにこそ求められているということである. その意味において, カーボンニュートラルとはその本質からして電力政策ではなく産業政策である. この違いの認識は重大である.

そうした事情を反映してか, 我が国の気候変動関連の政策は, 次第にカーボンニュートラルという呼称から産業全体の転換を意味する GX (グリーントランスフォーメーション) と呼ばれるようになり, 現在では「GX 推進戦略」としてまとめられている. その中身は原子力政策からカーボンプライシングと幅広く, 個別の政策には議論の余地があるが, 問題の認識を捉え直すという意味で本講演のタイトルは「カーボンニュートラルから GX へ」としたい. こうした事情は日本だけではなく, 世界中で共通している.

従って, 電力はただ再生可能エネルギーを増やせばよいというわけではなく, 当然のことながら, これからも安価で安定したものでなければならない. その為には供給力・調整力・慣性力に優れた回転発動機である火力・原子力の存在, そしてそれを支える高温水・蒸気を扱う技術がより一層重要となる. しかし, 我が国の電力政策は原発事故後の混乱から未だ抜けきっておらず, そうした電力が今後どのような扱いとなるのか, 未だ不透明な部分が多く, ロードマップが描けないでいる.

キーワード : カーボンニュートラル, GX, 環境科学

経済的脱炭素社会を実現する革新的レトロテクノロジーの蓄熱発電

Electric Thermal Energy Storage, which can realize economic de-carbonized society

岡崎 徹

Okazaki, T.

エネルギー総合工学研究所 プロジェクト試験研究部 (105-0003 東京都港区西新橋 1-14-2)

Email : t-okazaki@iae.or.jp

要旨 :

電力・産業の脱炭素化と電力自由化という二つの大きな変化が起きている。これらを踏まえ経済性を最優先して考えると、蓄熱発電がレトロで革新的な技術として注目されつつある。蓄熱発電の構成は単純な3つのプロセスより成り立つ。電力を熱に変換し、蓄熱し、必要時に発電する。発電時には主には蒸気タービンを用いるが、他に先進的技術も提案されている。ただ蒸気タービンを使う限り、この3つのプロセスは全て成熟技術で成立する。表1は世界の蓄熱発電開発計画である。2016年にはドイツ・シーメンス社の一社しか開発を公表しておらず、まだ歴史は浅い。

表1 世界の蓄熱発電開発計画 (赤字は電力会社)

	研究段階	パイロット	技術的に完成
発電専用	MALTA/Duke Energy Energy-Dome(LAES) 中部電力/東芝 三菱重工 (愛知製鋼)	Siemens-Gamesa Seas-nve HighView/Enlisa(チリ)(LAES) HighView/住友重機 EPRI/Southern Co. Brenmiller/NYPA	硝酸塩2タンク RWE (以下原子力の蓄熱部として) MOLTEX, TerraPower, Seaborg, 富士電
電熱併給		1414degrees Azelio EnergyNest/Siemens-Energy Eco-Tech-Ceram SaltX/Vattenfall TEXEL	STORASOL(蓄熱部)
未接触	247Solar, aalborgCSP, ABENGOA, AES Andes, Airthium, Almina, Antora, Bornholms, Brayton, Build to zero, CCT, Cheesecake, CHESTER, CsolPower, E2S, Ecogen, Ecovat, Element16, Electrified Thermal, ENEL, ESPL, Graphite, Hyme, KELVIN, KYOTO, LEAG, Lumenion/Vattenfall, MAN/ABB, Magaldi, MGA, Pintail, Quantum Graphite, Rondo, Seaborg, Seramic, SOLID, Stiesdal, Stolect, Storworks, Terrafore, Westinghouse		

従来は、火力発電を利用できた。しかし、脱炭素社会では火力発電は使えない。脱炭素電源は再生可能エネルギー(以下、再エネ)か、原子力しか無い。前者は需要に合わせた運転ができず、後者は経済性の観点から一定運転が望ましい。需要の方を発電側に合わせるのも、広域・大規模となるとセキュリティの課題もあり、望ましくない。

この需要と供給のアンバランスを解消するためには、蓄エネルギー設備が必要である。代表的な蓄エネルギーとしては揚水発電があるが、既に適地は少なく、増設は難しい。そのため蓄電池の開発が鋭意行われてきた。しかし蓄電池は数時間の貯蔵時間しかないものが多く、中・長期間のエネルギー貯蔵に別の技術が必要である。

蓄熱発電の経済性を説明するため、太陽電池の電力を夜間に利用するという簡単な計算で蓄電池との比較を行った。この夜間電力のコストは、次の式で計算される。

$$\text{夜間電力コスト} = \text{充電コスト} / \text{効率} + \text{設備コスト} / \text{寿命}$$

蓄電池は 6 万円/kWh、3 千回寿命とし、蓄熱発電は 2 千円/kWh、寿命は 1 万回とした。充電コストは変数なので、これを横軸にグラフ化した。縦軸が夜間電力コストとなる。明らか、蓄電池は初期コストが高いためゼロ円の充電コストでも 25 円以上負担しないと経済的に成り立たない。蓄熱発電は効率が悪いものの、設備コストが安く寿命が長いため、充電電力費が安ければ蓄電池より経済性に勝る。将来、蓄電池は現状の 1/2 コストになると見積もられているが、それでも 7 円/kWh 以下の電力コストであれば、蓄熱発電の方が有利である。再エネ発電コストはこれ程度に低下しつつあるので、蓄熱発電の方が経済性に優れることとなる。蓄熱発電で熱利用も併用すれば、相当に蓄熱発電の方が経済性に優れる。ただし、蒸気タービンを採用するタイプの蓄熱発電は数十 MW 規模でないと経済的に成立が難しく、小規模では蓄電池の方がすぐれており、棲み分けとなる。

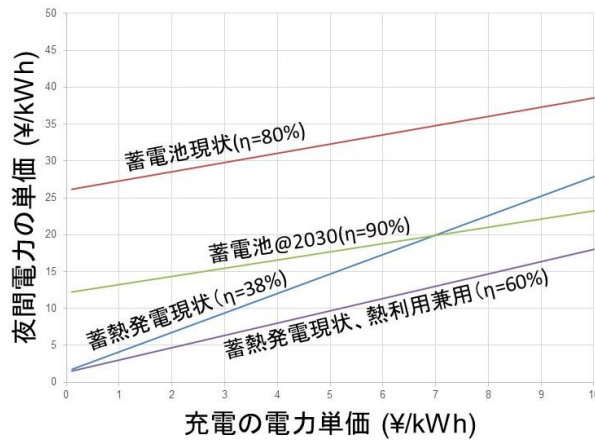


図1 PVによる夜間電力コスト

キーワード：蓄熱発電，熱工学，熱力学，汽力発電，熱交換

参考文献

[1] 岡崎徹、他「蓄熱発電所と風力熱発電」電気学会論文誌 B, Vol,138 No.4 pp.303-308 (2018)
 [2] Toru Okazaki, Electric thermal energy storage and advantage of rotating heater having synchronous inertia, Renewable Energy, <https://doi.org/10.1016/j.renene.2019.11.051>

相転移に伴う臨界ゆらぎに着目して

水の比熱を解釈する新たな枠組み構築の試み

An attempt to construct a new framework for interpreting the specific heat of water

by focusing on critical fluctuations associated with phase transitions

梶原 行夫*1

Kajihara, Y.*1

*1 広島大学 先進理工系科学研究科 (739-8521 東広島市鏡山 1-7-1)

Email : kajihara@hiroshima-u.ac.jp

要旨 :

常温常圧付近の液体の水は、他の液体とは異なる異常な熱力学特性を示すことが古くから知られている。この熱力学異常を包括的に解釈する仮説として、過冷却域に液体-液体相転移 (LLT) の存在を仮定する LLT シナリオ [1,2] が有力視されている。実は液体の水には二つの相 (構造) が存在し、過冷却域で一次相転移の LLT を起こす。常温常圧付近はこの LLT の超臨界領域に位置し、LLT 臨界ゆらぎの影響を受けて熱力学特性が異常な振る舞いを示す、と言うものである。このシナリオに関しては、特に近年有力な実験証拠が報告されており、妥当性はかなり確かなものとなってきている。

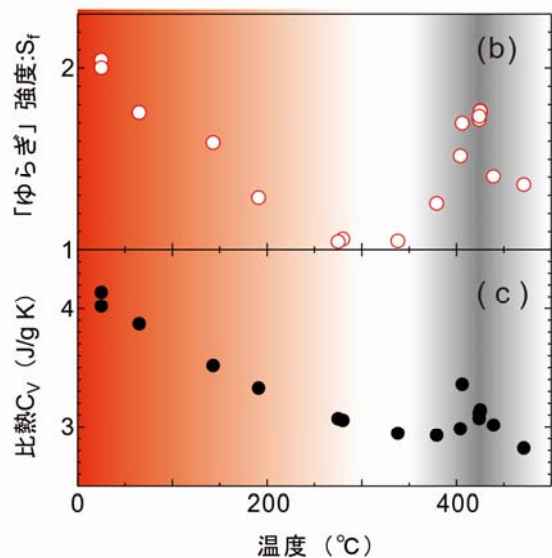
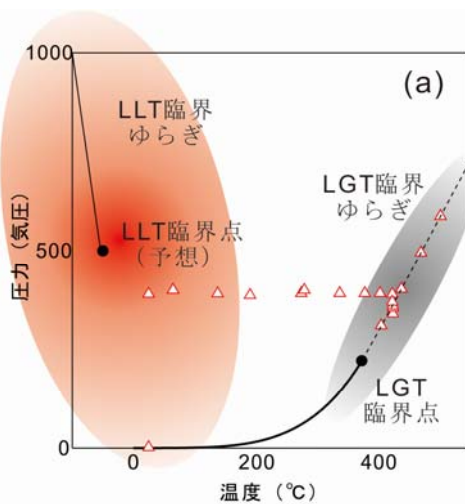


図1 (a)動的ゆらぎ測定 of 温度圧力点、(b)動的ゆらぎ強度の測定結果、IAPWS-95による(c)定積比熱

我々はこの LLT シナリオの更なる検証に向けて、「動的なゆらぎ」を測定する新たな実験手法を考案した。この手法では、音波の緩和現象（音速の周波数依存性）を利用して、液体中に存在するゆらぎ＝不均質性の強度を抽出する。実際に広範囲の温度圧力領域の液体の水に適用したところ、動的ゆらぎ強度に2つの顕著な増大を観測することができた（図1）[3]。これらは相図の位置関係からそれぞれ、高温域のものは液体-気体相転移（LGT）臨界ゆらぎ、低温域のものは LLT 臨界ゆらぎによるものと結論づけられ、LLT シナリオを強く支持する新たな結果となった。LLT 臨界ゆらぎの影響は、過冷却域や常温常圧付近に限定されていると認識されてきたが、実ははるかに高温域まで広がっていた。また動的ゆらぎ強度の変化が、定積比熱 C_v の変化[4]と広範囲の温度圧力領域で連動していることが初めて明らかとなった。これはつまり水の比熱の起源がこのような動的ゆらぎであることを示している。

これらの結果を踏まえ我々は、LLT、LGT 二つの相転移に伴う臨界ゆらぎに着目して、液体（流体）の全温度圧力領域の比熱を解釈するという新たな枠組みの着想に至った。従来の液体の比熱の議論では、複雑な相互作用や様々な「コンフィギュレーション」に焦点が当てられていたが、これとは大きく異なる野心的な試みである。この枠組みでは、液体の比熱は表1に示した①-⑤の5つの起源から成る。気体などで知られている①粒子の内部構造の自由度に加え、③-④の臨界ゆらぎの効果が定積比熱 C_v に寄与する。また定圧比熱 C_p ではこれらに加え「体積効果」が寄与するが、これはやはり LGT 臨界ゆらぎに支配されている。②粒子間の相互作用に起因する効果は、実は過去液体金属で知られているように、物質によらず温度と密度でスケールされる。その他詳細については当日発表する。

部位		粒子内	粒子間			
比熱の起源		① 粒子構造の自由度	② 粒子間相互作用 (ポテンシャルエネルギー)	臨界ゆらぎ		
				③ 液体-気体相転移	④ 液体-液体相転移	⑤ 「体積効果」
特定方法		計算、分光測定	(密度・温度でスケール)	動的ゆらぎ測定/密度ゆらぎ測定		状態図
気体		←→				
固体		←→	←→			
液体	定積比熱	←→	←→	←→		
	定圧比熱	←→	←→	←→	←→	

表1 固体・気体・液体の定積比熱の起源（要素）とその特定方法

キーワード：熱力学性質，物理化学一般，統計力学，高圧力の科学と技術

参考文献

[1] 三島修、「液-液臨界点による「水の不思議」の解釈」、高圧力の科学と技術、2007, 17, 352
 [2] 梶原行夫、「ゆらぎ」に着目した液体-液体相転移臨界点仮説の検証」、高圧力の科学と技術、2017, 26, 288
 [3] Y. Kajihira et al., “Experimental observation of mesoscopic fluctuations to identify origin of thermodynamic anomalies of ambient liquid water”, Phys. Rev. Research 2023, 5, 013120
 [4] W. Wagner and A. Pruss, “The IAPWS Formulation 1995 for the Thermodynamic Properties of Ordinary Water Substance for General and Scientific Use”, J. Phys. Chem. Ref. Data, 2002, 31, 387

表層型メタンハイドレートに関する研究開発

および機能活用技術開発

R&D for shallow-type methane hydrate and gas hydrate-based applications

室町 実大^{*1}, 鈴木 清史¹, 天満 則夫¹

Muromachi, S.^{*1}, Suzuki, K.¹ and Tenma, N.¹

^{*1} 産業技術総合研究所 エネルギープロセス研究部門 (305-8569 茨城県つくば市小野川 16-1)

Email : s-muromachi@aist.go.jp

要旨 :

産業技術総合研究所エネルギープロセス研究部門では、表層型メタンハイドレート (MH) の資源開発とガスハイドレートの機能活用技術開発を行っている。表層型 MH の研究開発については、海洋エネルギー・鉱物資源開発計画に基づく経済産業省からの委託事業として回収・生産技術や環境影響評価を実施している。その研究開発テーマの一つに流動障害対策技術の研究開発がある。海底 MH からのメタンガス生産においては、MH がシステム内にて再生成し配管の閉塞や機器の破損などの流動障害を引き起こすリスクがある。当部門では、多連式ロッキングセル装置を用いて、MH を流動化させ閉塞を解消する流動剤の研究開発を行っている。また、CO₂ハイドレートを用いた CCS についても同プロジェクト内で研究を進めている。

一方で、メタンハイドレートを含む広義のガスハイドレートは、ガスの分離・貯蔵媒体や蓄熱媒体として利用することができる。ガスハイドレートは水を利用した作りやすく壊しやすい弱い材料であり、カーボンニュートラルの観点からも持続可能な機能材料として期待される。当部門では、こうしたガスハイドレート機能活用技術についても、蓄熱、ガス分離・貯蔵を中心に研究開発を行っている。ガスハイドレートの中でも温和な温度圧力条件で使用できるセミクラスレートハイドレートは、様々なイオン性物質を用いることができるという点が特徴である。

本ポスター発表において、当部門で取り組んでいる表層型メタンハイドレートの流動障害対策技術の開発および蓄熱、ガス分離・貯蔵技術の機能活用技術開発について紹介する。

キーワード：熱工学, 高圧力の科学と技術, 海洋科学, メタンハイドレート, 蓄熱, ガス分離・貯蔵

謝辞：流動障害対策技術およびハイドレート CCS に関する研究は、経済産業省のメタンハイドレート研究開発事業の一部として実施した。

参考文献

[1] 経産省：海洋エネルギー・鉱物資源開発計画 <https://www.meti.go.jp/press/2018/02/20190215004/20190215004-2.pdf>

モンテカルロシミュレーションを用いたクラスレートハイドレートの相図と充填率解析

Analysis of Clathrate Hydrate Phase Diagrams and Occupancy Rates through Monte Carlo Simulations

岸本 寛隆^{*1}, Paul E. Brumby^{*1}, 泰岡 顕治^{*1}

Kishimoto, H.^{*1}, Brumby, P. E.^{*1}, and Yasuoka, K.^{*1}

^{*1} 慶應義塾大学 理工学部機械工学科 (223-8522 神奈川県横浜市港北区日吉 3-14-1)

Email : h.kishimoto@keio.jp

要旨 :

クラスレートハイドレート (以下ハイドレート) は, 水分子間の水素結合によってかご状構造を形成することでゲスト選択性を有する分子結晶である. ハイドレートは一般的にゲスト分子が存在することで安定な結晶構造を保つことが可能であり, ゲスト分子の種類に応じて熱力学的性質や結晶構造は異なる. したがって, ゲスト分子の充填率やその充填率が相図に与える影響について, 分子スケールから考察することは, ハイドレートの理解の深化において重要となる. 特に Gibbs Ensemble Monte Carlo (GEMC) 法は粒子の確率的移動を行うことで, 充填率の正確な計算が可能である. Brumby らはハイドレートの充填率計算における GEMC 法の有効性を示した[1]. また, Yuhara らは分子動力学 (MD) 法を用いたメタンハイドレートの相図予測を行い, 系のサイズが相図に与える影響を報告した[2].

本研究では, ハイドレートのバルク系とプロパン・二酸化炭素の混相系に焦点を当て, ゲスト分子の充填率計算を行った. 興味深いことに, 二酸化炭素はハイドレートが安定となる高压低温下で充填率が向上していたが, 一方でプロパンは低压高温下で充填率が向上していることがわかった.

また, 充填率がハイドレートの相図に与える影響を明らかにするため, MD 法と GEMC 法をカップリングし, メタンハイドレートの結晶成長および相図の予測を行った. 本手法は, GEMC 法の組み込みによって, 温度圧力条件に応じた正確なハイドレートの充填状態を実現しながら, 結晶成長または分解を観察することが可能であるため, 相図予測に適していることが明らかとなった.

キーワード : 分子シミュレーション-計算科学, 統計力学, 結晶成長, クラスレートハイドレート

参考文献

[1] Brumby, P. E., et al., Fluid Phase Equilib., 2016, 413.

[2] Yuhara, D., et al., J. Chem. Phys., 2018, 148(14).

アルキルアミンの水熱反応：皮膜形成アミン適用のための

生成物と経路の NMR 解析

Hydrothermal Reaction of Alkyl Amines: NMR Analysis of Products and Pathways for Application of Film Forming Amines

土井 彪斗^{*1}, 吉田 健^{*1}, 吉岡 春香^{*1,2}, 平野 朋広^{*1}, 中原 勝^{*3}

Doi, A.^{*1}, Yoshida, K.^{*1}, Yoshioka, H.^{*1,2}, Hirano, T.^{*1}, and Nakahara, M.^{*3}

*1 徳島大学 大学院社会産業理工学研究部 (770-8506 徳島県徳島市南常三島町 2-1)

*2 栗田工業株式会社 (196-0002 東京都昭島市拝島町 3993-15)

*3 京都大学 化学研究所 (611-0011 京都府宇治市五ヶ庄)

Email : yoshida.ken@tokushima-u.ac.jp

要旨：

水-蒸気サイクルで用いられる金属配管の腐食防止剤として皮膜形成アミン(FFA)が近年注目を集めている。FFA の研究においては、水-蒸気サイクルの実機やモデル機への適用試験といった産業用の応用研究が欧米を中心に先行する一方で、適用のために必要となる FFA の水熱反応の知見は少なく、特に反応経路や反応式に言及したものはほとんどない。FFA を正しく効果的に適用する目的で、高温高圧の水・蒸気中において FFA がどの程度まで安定に存在し、また反応する場合はどのような物質が生成されるのか、といった情報が必要とされている。本研究グループでは、エチルアミン(EtA)とオクチルアミン(OctA)の水熱反応を FFA 反応のモデルとして NMR により解析した[1, 2]。EtA の反応解析には、¹³C-¹⁵N にラベルされた同位体試薬を用いたことにより、高分解能の NMR スペクトルとカップリング情報を得ることができ、生成物の同定・定量に成功した[2]。さらに、反応生成物の濃度の経時変化の詳細な解析から、EtA から初期生成物のエタノールを経由してエテンが生成すると分かった。OctA の水熱反応では、オクテンとオクタノールが生成物であると分かった。オクチルアンモニウム(OctAH⁺)を出発物質とした反応では、オクテンとオクタノールの全ての異性体が生成した。観測されたオクテンの異性体の生成量は、反応温度が 400 °C のときでは、10 min 以内に平衡量に達していることも分かった。反応物が中性分子とアンモニウムカチオンの場合の比較から、アミノ基のプロトン化が反応速度に顕著な影響をもつことが見出された。

キーワード：溶液化学、NMR 分光法、皮膜形成アミン、水熱反応、超臨界水

参考文献

[1] Yoshida, K., et al., Chem. Lett. 2021, 50, 316.

[2] Yoshida, K., et al., J. Chem. Phys. Chem. A 2023, 127, 3848.

分子動力学シミュレーションによるアルコール水溶液表面における 分子構造の解明

Molecular dynamics study on the surface structure of alcohol-water mixture

廣瀬 真由*¹, 石山 達也*¹

Hirose, M.*¹, Ishiyama, T.*¹

*¹ 富山大学大学院 理工学研究科 (390-8555 富山県富山市五福 3190)

Email : m22c1233@ems.u-toyama.ac.jp

要旨 :

アルコール水溶液は、アルコール分子の両親媒性により、水溶液表面で特異的な性質を示す。水溶液表面の分子構造の詳細についてこれまで多くの議論がなされ、この界面構造を実験的に検出する手法として和周波発生 (SFG) 分光法が用いられてきた。2021 年、Kirschner らは SFG 分光法と光電子分光法を組み合わせることによりエタノール水溶液表面構造に関する以下の結論を得た。SFG 測定から密度 ρ と分子配向 $\langle \cos \theta \rangle$ の積に相当する情報が得られ (θ は表面垂直方向に対するメチル配向角)、光電子分光法から表面数密度 ρ の情報が得られるため、これらから表面の分子配向 $\langle \cos \theta \rangle$ の情報が得られることになる。彼らは、これらの実験手法を用いてエタノールのモル分率が 0.2 以下の低濃度領域で、エタノール水溶液界面におけるエタノール分子の配向性が低下すると主張した [1]。

本研究では、MD 計算を用いて、低濃度領域における配向性の低下を再現されることを確認し、さらに、その分子論的メカニズムについて議論する。

Figure 1 に横軸をエタノールモル分率、縦軸を表面のエタノール分子配向 $\langle \cos \theta \rangle^s$ とした結果を示す。この結果から、MD 計算の結果は実験結果 (挿入図) を再現することがわかる。この詳細な分子構造については当日議論する。

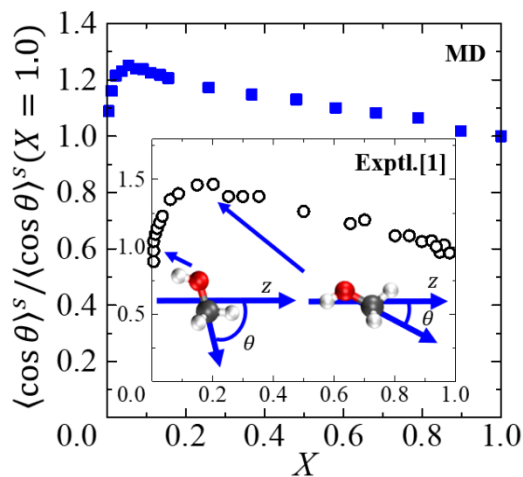


Figure 1 The distribution of surface orientation $\langle \cos \theta \rangle^s$ as a function of the concentration of ethanol.

キーワード : 分子シミュレーション-計算科学, 分子動力学シミュレーション, アルコール, 表面

参考文献

[1]Kirschner, J., et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2021**, *23*, 11568.

流動するアイスラリー中の氷粒子径の変化

Variation of ice particle size in ice slurry flowing in circular pipe

浦城 仁^{*1}, 原崎 太希^{*1}, 浅岡 龍徳^{*2}

Uraki, J.^{*1}, Harazaki, T.^{*1} and Asaoka, T.^{*2}

*1 信州大学大学院 総合理工学研究科工学専攻 (380-8553 長野県長野市若里 4-17-1)

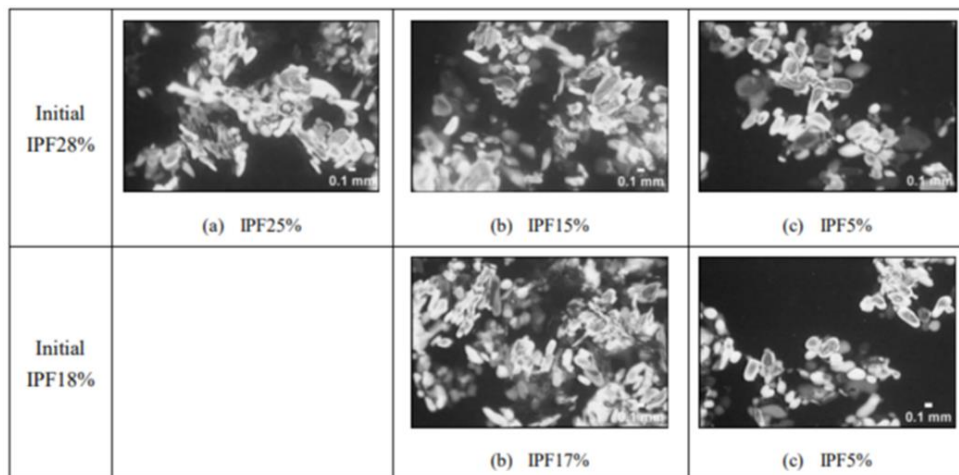
*2 信州大学 学術研究院工学系 (380-8553 長野県長野市若里 4-17-1)

Email : asaoka@shinshu-u.ac.jp

要旨 :

アイスラリーとは、水または水溶液と微細な氷粒子が混在した固液二相流体であり、冷熱輸送媒体として使用される。アイスラリーを利用した熱輸送システムの実用化には、より効率的かつ安全に輸送するための流動特性の把握が必要不可欠である。アイスラリーに関しては、これまで多くの研究がされてきており、アイスラリーの流動特性、熱伝達特性、流動様相などに氷粒子径が及ぼす影響は大きいとされている。流動中の氷粒子径の変化および粒子径変化が流れに与える影響について検討した。

氷粒子径の変化について、初期 IPF に関係なく、流動初期は不規則な形の比較的大きな氷粒子が凝集しあった状態であり、融解が進むにつれて（下図の IPF が減少するにつれて）径の小さな氷粒子の割合が高くなり、楕円形の氷が分散した状態となっていく。また、0.1mm 以下の氷粒子は極端に少なく、細かい氷は優先的に融解して消滅していくことがわかった。下図のように初期 IPF が異なる実験結果を比較すると、同程度の IPF となったとき初期 IPF の高いほうが小さい粒子が多い結果となった。また、初期 IPF が高いほど流動初期の氷粒子径が若干大きくなる。これは、IPF を高めるには長い生成時間が必要であり、その間に貯氷タンク内で粒子径が成長したためと考えられる。



キーワード：熱工学，混相流，アイスラリー，蓄熱，凝集，IPF

加水分解酵素の機能制御に向けた共溶媒添加効果の全原子 MD 解析

All-atom molecular dynamics analysis of the effect of co-solvent addition for functional control of hydrolytic enzymes

大坂 龍司^{*1}, 石田 豊和^{*2}, 笠原 健人^{*1}, 松林 伸幸^{*1}Osaka, R.^{*1}, Ishida, T.^{*2}, Kasahara, K.^{*1}, Matubayasi, N.^{*1}^{*1} 大阪大学大学院 基礎工学研究科 (560-8531 大阪府豊中市待兼山町 1-3)^{*2} 産業技術総合研究所 材料・化学領域 (305-8568 茨城県つくば市梅園 1-1-1 つくば中央第 2 事業所)

Email : r.osaka@cheng.es.osaka-u.ac.jp

要旨 :

生体触媒はその選択性や環境負荷の面から工業的利用価値が高い。キシラナーゼは生体触媒の一種で、細胞壁に多く含まれるキシランを分解する加水分解酵素として様々なアプローチによる研究成果が報告されている。その中でも量子力学/分子力学 (QM/MM) 法を用いてキシラナーゼの遷移状態の構造を特定した先行研究[1]によって、計算化学を用いた活性化エネルギーの評価が可能になった。

そこでタンパク質の活性化障壁を小さくするためには変異タンパク質が用いられることがあるが、この方法は有限種類のアミノ酸の置換を用いるために、活性の制御は離散的なものとなる。一方溶媒環境の変調を利用すると、共溶媒濃度という連続変数に依拠することで微細制御の可能性が拓かれ、操作も比較的安価である。

そこで本研究ではキシラナーゼの酵素活性に対する共溶媒添加効果を分子動力学シミュレーションとエネルギー表示法を用いて計算した。またタンパク質に対するリガンドとしては糖鎖である β -1,4 キシランを用い、グリコシド結合の加水分解過程における遷移状態へ移行する際の活性化自由エネルギー変化を計算した。純水中と混合溶媒中のそれを比較することで系の安定性を定量的に議論し、共溶媒添加による酵素活性の改善を目指す。

Fig.1 に R と TS における混合溶媒系の溶媒和自由エネルギー (SFE) を示す。点線は純水系における値であり、これとの差をとることで算出した $\delta\Delta G_{act}$ を Table.1 に示す。標準誤差の値を考慮すると、DMSO が反応を促進、尿素、エチレングリコール、1,6-ヘキサジオールは反応を阻害することがわかった。

キーワード : 熱力学, 統計力学, 分子シミュレーション-計算化学, 溶液化学, 生体関連化学

参考文献 :

[1]T. Ishida, et al., J. Am. Chem. Soc., 2020, 142, 17966–17980.

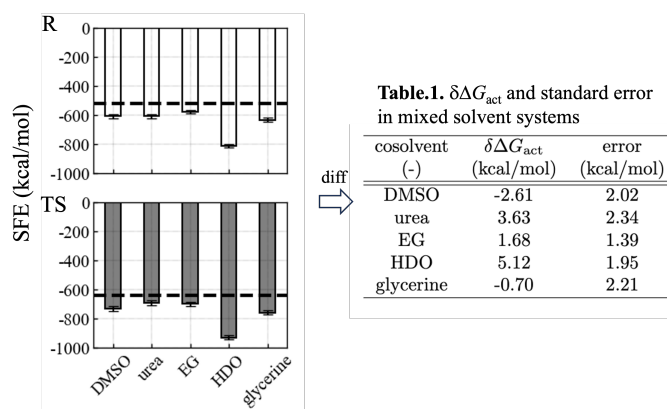


Fig. 1. SFE for pure water (dotted line) and mixed solvent systems in Reactant and Transition State

ポリマーに対する水の溶解性の MD 解析

Molecular dynamics simulation of water dissolved in polymer

向江謙心^{*1}, 小嶋秀和^{*1}, 矢ヶ崎琢磨^{*1}, 松林伸幸^{*1}

Mukae, K.^{*1}, Kojima, H.^{*1}, Yagasaki, T.^{*1} and Matubayasi, N.^{*1}

1 大阪大学大学院 基礎工学研究科 物質創生専攻 (560-0831 大阪府豊中市待兼山 1-3)

Email : k.mukae@cheng.es.osaka-u.ac.jp

要旨 :

工業的に用いられているポリマー分離膜の透過性能は、ポリマーと透過物質の化学種のみならず、非晶 (amorphous) や結晶 (crystal) といった膜中のポリマーの集合様態に依存に依存する。ポリマー分離膜の透過性能は、溶解・拡散機構によってモデル化される [1]。実験的に、溶解性と拡散性のそれぞれの寄与を測定することは可能であるが、各寄与に対する分子論的な理由づけを行うことは困難である。本研究では、polyethylene (PE) の非晶構造と結晶構造に対する水の溶解性の差異について分子論的に理解することを目的とする。水の真空中からポリマー中への移行に伴う自由エネルギー変化である $\Delta\mu$ を全原子分子動力学計算と Bennett's Acceptance Ratio 法 [2] を用いて計算する。PE の重合度は 30, 分子数は 60 である。

Fig. 1 に非晶構造と結晶構造の $\Delta\mu$ の値を示す。結晶に対する $\Delta\mu$ は非晶より大きく、水は結晶中に非常に溶解しにくいことがわかる。非晶を基準とした集合様態による $\Delta\mu$ の差を、Lennard-Jones (LJ) の寄与 (LJ), 静電相互作用の寄与 (elec), 排除体積効果の寄与 (exc), ポリマーの再配向の寄与 (reo) に近似的に分割した結果を Fig. 2 に示す。 $\Delta\mu$ の差に対して、静電相互作用及びポリマーの再配向の寄与が小さいのは、PE が疎水的な分子であるからである。結晶構造は原子が規則性を持って隙間なく充填されている。そのため、自由体積が小さく、非晶構造に比べて溶質が入り込みにくいいため、排除体積効果により大きく不安定化すると考えられる。また、LJ 相互作用の不安定化は、隙間がない結晶構造に小分子が置かれた時のエネルギー的不安定性を示している。

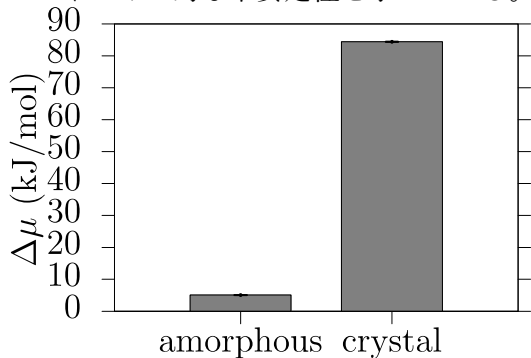


Fig. 1 $\Delta\mu$ of water in amorphous and crystalline PE.

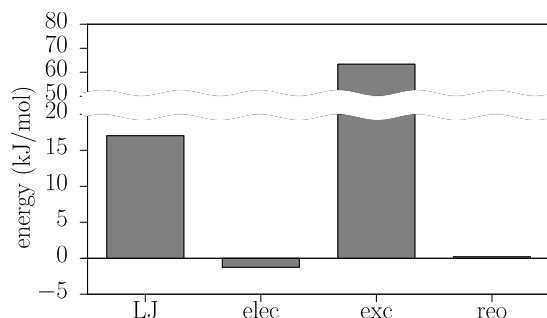


Fig. 2 Differences in contributions between amorphous and crystalline PE.

キーワード：熱力学, 統計力学, 分子シミュレーション-計算科学, 高分子化学

参考文献：[1] C. H. Bennet, *J. Comp. Phys.*, **22** 245-268 (1976). [2] Rong Xu, *et al.*, *Scientific reports*, **12** 1 (2022).

ペプチド結合主鎖二面角変化の自由エネルギー曲面を特徴付ける

反応座標の深層学習による探索

Deep learning search for reaction coordinates characterizing the free energy surface of peptide bond backbone dihedral angle

岡田 一志^{*1}, 菊辻 卓真^{*1}, 岡崎 圭一^{*2}, 森 俊文^{*3}, 金 鋼^{*1}, 松林伸幸^{*1}

Okada, K.^{*1}, Kikutsuji, T.^{*1}, Okazaki, K.^{*2}, Mori, T.^{*3}, Kim, K.^{*1} and Matubayasi, N.^{*1}

^{*1} 大阪大学大学院 基礎工学研究科物質創成専攻 (560-8531 大阪府豊中市待兼山町 1-3)

^{*2} 分子科学研究所 (444-8585 愛知県岡崎市明大寺町字西郷中 38 番地)

^{*3} 九州大学 先導物質化学研究所 (819-8580 福岡県春日市春日公園 6 丁目 1)

Email : k.okada@cheng.es.osaka-u.ac.jp

【序】

タンパク質の構造変化や溶媒和などの複雑分子系において、多くの自由度から少数の変数を選び出し、安定状態をつなぐ遷移経路を特徴付けることは重要課題である。そのため平均力ポテンシャル(PMF)が計算され、そこで原子位置に関する高次元の配置座標から決まる変数 Q に関する確率分布関数 $P(Q)$ をサンプリングし、その対数 $F = -k_B T \ln P(Q)$ を獲得する。この PMF は自由エネルギー曲面ともみなすことができ、もし安定状態が鞍点により区別され、さらに実際の遷移経路が鞍点を通過するとき、変数 Q は構造変化を特徴付ける適切な反応座標といえる。

本研究では、アラニンジペプチド(Fig. 1)の立体配座が変化する異性化過程に着目する。真空中ではエネルギー的に安定な 2 状態である β -シート構造(状態 A)と左巻き α -ヘリックス構造(状態 B)が存在することが知られ、遷移状態(TS)を特徴付ける候補変数として二面角(ϕ, ψ)が重要視されてきた(Fig. 2) [1]。ここで二面角は物理的直観により反応座標として機能するものと選択されてきたが、それが適切かどうかは自明ではないことに注意が必要である。先行研究では分子動力学(MD)計算と機械学習を用いた二面角の系統だった探索方法が提案されている [2,3]。さらに二面角だけでなく原子間距離も候補となりえることを考慮すれば、異性化過程のより精緻な記述が期待できる。そこで原子間距離を候補変数として

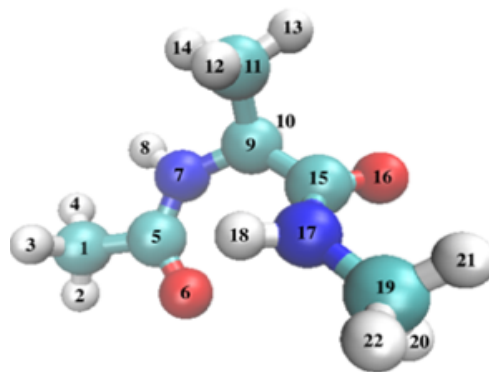


Fig. 1. Alanine dipeptide molecule and number

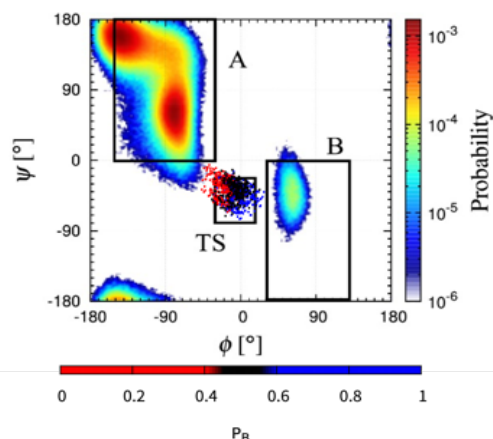


Fig. 2. 2D PMF using dihedral angles (ϕ, ψ). Points with committor $p_B \sim 0.5$ are widely distributed and the separatrix line is not clear.

深層学習を行うことで、どの原子間距離が適切な反応座標となりえるのかを明らかにすることを目的とした。

【計算方法】

真空中のアラニンジペプチドの異性化過程について MD 計算を行い、TS 近傍の分子構造 2000 点をサンプリングした。それぞれを初期状態とし 1 ps の MD 計算を 100 回実施し、状態 A に辿り着く前に状態 B に遷移する確率をコミッター p_B として定量化した。入力変数として初期状態の化学結合を除いた原子間距離を用い、コミッター p_B を出力変数として、シグモイド関数 $p_B(q) = [1 + \tanh(q)]/2$ に回帰することで適切な反応座標 q の学習を行った。なお用いたニューラルネットワークは 5 つの隠れ層から構成され、奇数層、偶数層それぞれが 400 ノード、200 ノードを持っている。

【結果・考察】

深層学習による p_B のシグモイド関数への回帰結果を Fig. 3(a) に示す。ただし複数回の非線形結合が行われているので入力変数の q への寄与を直接的に求めることは困難である。そこで深層学習に対して解釈性を与えることのできる「説明可能な AI」(XAI) の一手法である LIME を適用した。その結果、最も寄与の大きい入力変数として原子 6-10 間の距離 r_{6-10} 、二番目に寄与の大きい入力変数として r_{6-11} が得られた。 (r_{6-10}, r_{6-11}) を変数とした二次元 PMF を Fig. 4 に示す。このことより、 (r_{6-10}, r_{6-11}) を反応座標とみなすと 2 つの安定状態とその間の TS が確認でき、 $p_B \sim 0.5$ の構造が二状態間の分割線をなしており障壁交差を近似的に記述していることがわかった。最も寄与の大きい原子間距離 r_{6-10} は、異性化に伴う二面角変化の活性化過程を決める主要な役割を果たしていることを示唆する。

キーワード：統計力学、分子シミュレーション-計算科学、生体関連科学、機械学習、XAI

【参考文献】

- [1] P. G. Bolhuis, *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **97**, 5877 (2000).
- [2] Y. Mori, *et al.*, *J. Chem. Phys.* **153**, 054115 (2020).
- [3] T. Kikutsuji, *et al.*, *J. Chem. Phys.* **156**, 154108 (2022).

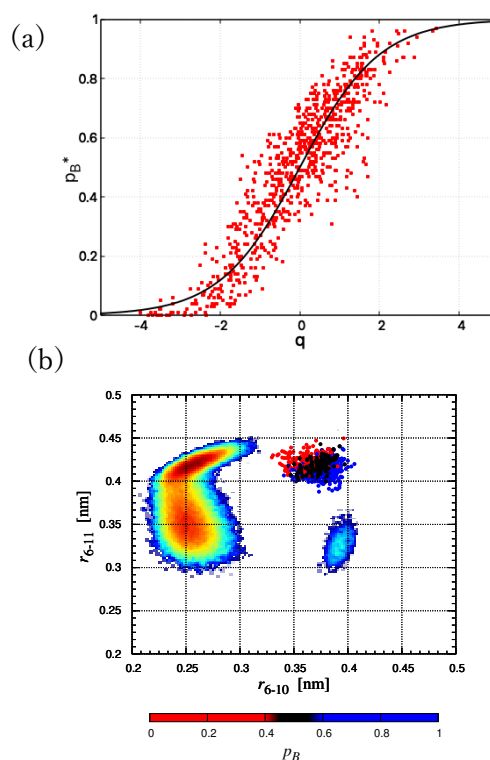


Fig3. (a) Regression results of deep learning (b) 2D PMF using interatomic distances (r_{6-10}, r_{6-11}) . We can distinguish between states A and B and see that the saddle point is bounded by a structure in the transition state $p_B \sim 0.5$.

高分子に閉じ込められた水の水素結合状態と動的性質に対する 分子動力学解析

Revealing the hidden dynamics of confined water in acrylate polymers:
Insights from hydrogen-bond lifetime analysis

四方 志*¹, 菊辻 卓真*¹, 八十島 亘宏*¹, 金 鋼*¹, 松林伸幸*¹

Shikata, K.*¹, Kikutsuji, T.*¹, Yasoshima, N.*¹, Kim, K.*¹, Matubayasi, N.*¹

*1 大阪大学大学院 基礎工学研究科物質創成専攻 (560-8531 大阪府豊中市待兼山町 1-3 基礎工学部棟)

Email : k.shikata@cheng.es.osaka-u.ac.jp

要旨 :

【緒言】

poly(2-methoxyethyl acrylate) (PMEA) は血液適合性材料であり、人工血管等に用いられている。PMEA 表面と緩く相互作用した水分子の存在が血液との接触時にタンパク質の吸着と変性を抑制し、非血栓性において重要な役割を果たすとされる。示差走査熱量計(DSC) を用いた実験では、PMEA に含まれる水から 0 °C で凍結する水、-40 °C で凍結する水、-110 °C 以下でも凍結しない水の 3 種類の水が確認され、バルク中とは異なる性質を持つことが明らかにされている。それぞれ自由水、中間水、不凍水と定義され、特に中間水は PMEA で特異に観測された。したがって、PMEA 近傍の水分子の動態は血液適合性にとって重要であり、特定の水分子の特性を解明する研究が注目されている [1]。本研究では、高分子に含まれる水分子の詳細な動きを理解してその動的性質を説明するために分子動力学 (MD) 計算を行った。アクセプター酸素に着目した水素結合状態の解析と整理を行った [2]。

【結果と考察】

高分子には PMEA の他に類似構造を持つ poly-(2-hydroxyethyl methacrylate) (PHEMA), poly(1-methoxy methyl acrylate) (PMC1A) を用いて比較を行った。高分子の力場には OPLS-AA, 水分子は

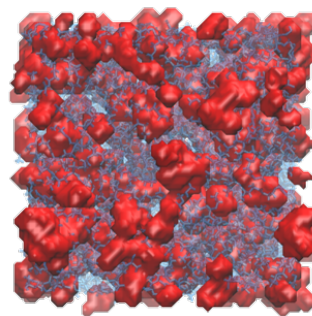


図 1. 含水率 9wt%系のシミュレーションでのスナップショット。青色が PMEA、赤色が水分子を示す。

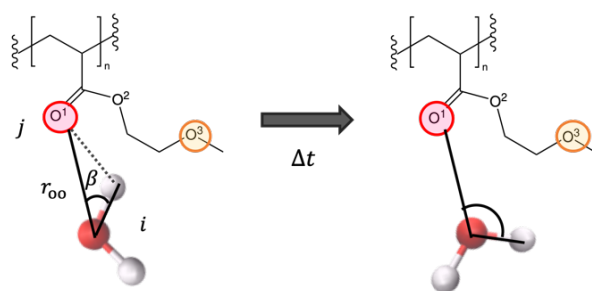


図 2 : PMEA での水素結合状態変化の一例 (左) $t = 0$ における水素結合状態 (右) $t = t$ で β の増大により破断した状態

TIP4P2005 モデルを利用した。重合度 50 の高分子 20 本に対して含水率が 3 ~ 90 wt%となる系を作成し、300K、NVT条件での MD 計算を行った。水の酸素原子とアクセプターとなる酸素原子(水および高分子の官能基)間の距離 r_{oo} と OH - O 角 β を用いて水素結合を ($r_{oo} < 0.35 \text{ nm}, \beta < 30^\circ$) によって幾何学的に定義した(図 2)。

高分子に含まれる水は含水率の低下により運動性が大きく低下し、水素結合寿命時間の結果からは水素結合相手によって変化することが明らかになった。図 1 に示したように水は高分子によって閉じ込められた状態で存在しており、含水率の差によってその割合は変化する。存在様態の違い

と水素結合状態に水の運動性は強く支配されると考えられる。水素結合の定義を用いて各種の水素結合の破断から拡散に至るまでのダイナミクスを解析した(図 3)。メトキシ酸素 O^3 では水素結合の破断が起きやすく $\sim 10 \text{ ps}$ 程度の時間では拡散せず、水分子はアクセプター近傍に存在していることが判明した。これは類似構造を持つ他種高分子にはみられない傾向であった。これは他のアクセプター酸素との水素結合では見られなかった。水分子の並進運動に強い制限がされているが、回転の束縛する相互作用が弱くなっていると考えられる。PMEA に特異に観測された水素結合の性質は、実験から描像されていた緩い相互作用が働いていることを示唆するものである。

本手法は水と水素結合アクセプターを持つ材料が存在する系で普遍的に利用可能である。多様な材料近傍における水素結合状態の解明が期待できる。

キーワード：分子シミュレーションー計算科学, 高分子化学, 水素結合, 血液適合性, 分子動力学計算

参考文献

- [1] M. Tanaka, *et al.*, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* 92, 2043 (2019).
 [2] K. Shikata, *et al.*, *J. Chem. Phys.* 158, 174901 (2023).

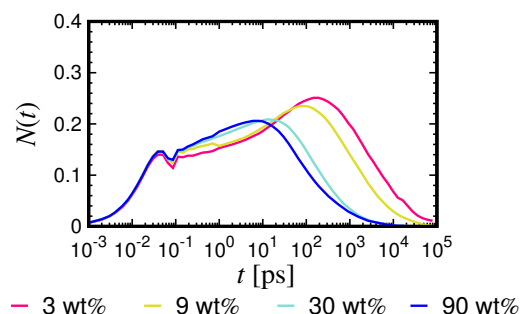


図 3. $t = 0$ で存在した水と PMEA の O^3 との間での水素結合が t 秒後に破断と拡散の中間状態にいる割合を評価する時間相関関数 $N(t)$ 。

メタステーブル領域における熱力学諸性質の精密測定

Precise Measurement of Thermodynamics Properties in the Metastable Region

久津見 朋也^{*1}, 粥川 洋平^{*2}, 宮本 泰行^{*1}, 赤坂 亮^{*3}

Kutsumi, T.^{*1}, Kayukawa, Y.^{*2}, Miyamoto, H.^{*1} and Akasaka, R.^{*3}

*1 富山県立大学 工学部機械システム工学科 (939-0398 富山県射水市黒河 5180)

*2 産業技術総合研究所 工学計測標準研究部門 (305-8563 茨城県つくば市梅園 1-1-1 中央事業所)

*3 九州産業大学 理工学部機械工学科 (813-8503 福岡市東区松香台 2-3-1)

Email : u013018@st.pu-toyama.ac.jp

要旨 :

減速材に重水を用いる重水炉として, Candu 炉 (カナダ) [1]や新型転換炉ふげん (日本) [2]などが挙げられる. 近い将来の高度な改良や制御の精密化などに備えるため, 作動流体の高精度な熱物性値の整備が不可欠である. Herrig ら [3]によって発表された状態方程式には, 実測値の不足により一部の領域における信頼性に課題があることが指摘されている. 具体的には, 飽和性質およびメタステーブル領域において改善の余地がある. 混合系の熱力学モデルは成分物質の式から構成されているが, アンモニア水溶液を例にとると, 温度 400 K において水のメタステーブル領域における算出値 (図中緑線) が水溶液の状態量 (同黒線) の算出に使われている状況が確認できる (図 1). すなわち, 成分物質の式のメタステーブル領域における信頼性が, 混合物モデルの精度に直結する. こうした課題を解決するために, 今日では様々な作動流体の状態方程式のリニューアルが実施されており, 重水についても, 2018 年以降新たな実測値情報が報告され, 熱力学状態方程式の改良が国際水・蒸気性質協会 (IAPWS) における重要な検討課題のひとつとなっている.

そこで本研究では, 上記の問題を解決し, 重水の式の改良に貢献するため, メタステーブル領域における新たな密度 ($P\rho T$ 性質) および音速に関する実測値情報の提供を目的とした. 一例として, メタステーブル領域の測定に用いた金属ベローズ変容法 [4] についての測定方法を以下に説明する. 図 2 にベローズ変容法の装置図と測定可能範囲 ($P\rho$ 線図) を示す. 試料容器の内容積は可変であり, 高精度な内容積検定式を作成することで, 一つのサンプルについて, 測定可能な全温度・圧力範囲における測定を一度に実施することが可能である. さらに, 図 2 右図の等温線の屈折点が蒸発現象を示すことから, 飽和蒸気圧力値および飽和液体密度値に加えて, メタステーブル領域についても, 高精度な実測値が取得出来る.

現在までに得られた $P\rho T$ 性質実測値の $P\rho$ 線図上における分布状況を図 3 に示す. 本実測値は●および○で示し, Herrig の式から REFPROP ver10 [5] を用いて計算した飽和液密度線も併せてプロットした. 本実測値は, Herrig の式と, 比較的一致した挙動を示していることが見て取れる. さらに広い温度・圧力範囲における実測値情報および考察結果についても, 併せて報告する予定である.

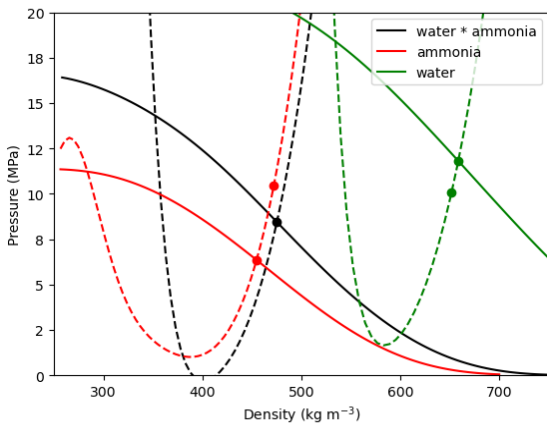


図 1 400 K におけるアンモニア水溶液のメタステーブル領域の挙動

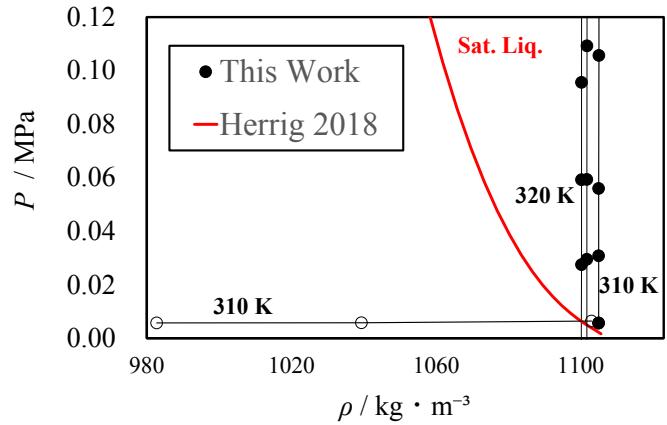


図 3 本研究における重水の $P\rho T$ 性質実測値および Herrig らの式[3]からの計算値の分布

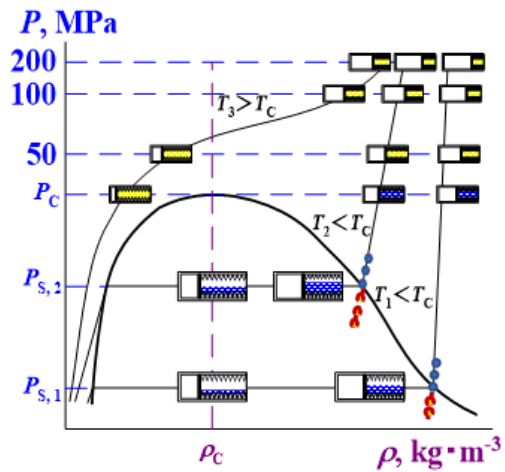
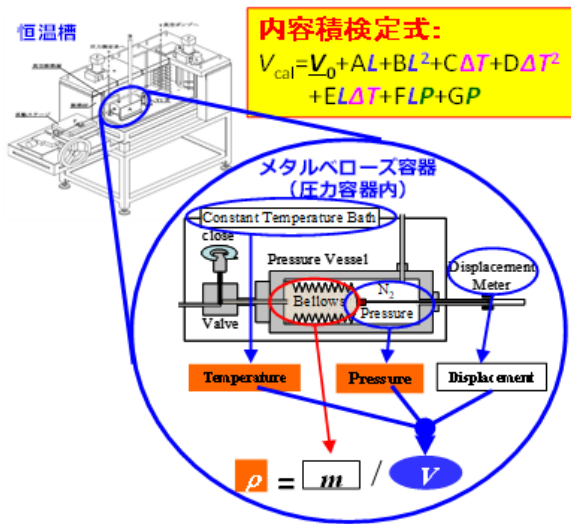


図 2 本研究で用いた測定装置(左図)と測定可能範囲(右図)

キーワード：重水，精密測定，飽和性質，メタステーブル領域， $P\rho T$ 性質

参考文献

[1] Chaplin, R., Genealogy of CANDU Reactors, The Essential CANDU, A Textbook on the CANDU Nuclear Power Plant Technology, Garland, W. J., UNENE, Canada, 2016.
 [2] Iguchi, Y., et al. Preparatory Activities for Reducing Exposure Dosage during Fugen Decommissioning Project, Hokenbutsuri., 2003,38(2),116~127.
 [3] Herrig, S., et al., J. Phys. Chem. Ref. Data, 2018, 47(4), 043102.
 [4] Miyamoto, H., et al. "Measurement and modeling of thermodynamic properties for various hydrogen carriers", 21st Symp. Thermophys. Prop., Boulder, CO, USA, 2021.
 [5] Lemmon, E. W., Bell, I. H., Huber, M. L., McLinden, M. O., Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties (REFPROP), NIST Standard Reference Database 23, Version 10.0 (U.S. Secretary of Commerce, 2018).

開催概要

主催

日本水・蒸気性質協会 (JPAPWS)

協賛

株式会社IHI／アクアス株式会社／オルガノ株式会社
一般社団法人 火力原子力発電技術協会／栗田工業株式会社
一般財団法人 電力中央研究所／東芝エネルギーシステムズ株式会社
内外化学製品株式会社／株式会社日立製作所／富士電機株式会社
三菱重工業株式会社 (五十音順)

IHI

AQUAS アクアス株式会社



一般社団法人
火力原子力発電技術協会

KURITA

TOSHIBA
東芝エネルギーシステムズ株式会社



内外化学製品株式会社
NAIGAI CHEMICAL PRODUCTS CO.,LTD

HITACHI
Inspire the Next



富士電機



三菱重工

後援

慶應義塾大学グローバルリサーチインスティテュート(KGRI)2040独立自尊プロジェクト
一般社団法人 全国エネルギー管理士連盟
一般社団法人 日本エネルギー学会／日本海洋学会
一般社団法人 日本機械学会／一般社団法人 日本原子力学会 水化学部
日本高圧力学会／日本熱物性学会／一般社団法人 日本ボイラ協会
公益社団法人 日本冷凍空調学会／公益社団法人 腐食防食学会
分子シミュレーション学会／溶液化学研究会 (五十音順)

オーガナイザー

粥川洋平(産業技術総合研究所)／吉田健(徳島大学)
泰岡顕治(慶応義塾大学)／沖田信雄(東芝エネルギーシステムズ)
寺田慎一(東芝エネルギーシステムズ)／椿崎仙市(火力原子力発電技術協会)
石原伸夫(三菱重工)／市原太郎(三菱重工パワーインダストリー)
赤坂亮(九州産業大学)／宮本泰行(富山県立大学)