

G119 温度応答性クロマトグラフによる分離特性シミュレーション

(鹿大工) ○ (学) 中野 麻利・(正) 水田 敬*

1. 緒言

近年、高速液体クロマトグラフィーの充填剤に、温度変化や電氣的刺激、pH 変化などの環境変化に応じて自身の機能を変化させるような刺激応答性高分子を化学結合した、刺激応答性クロマトグラフィーの研究が注目されている。中でも、温度応答性高分子として知られているポリ-N-イソプロピルアクリルアミド (PNIPAAm) を用いた研究¹⁾は盛んに行われている。温度応答性クロマトグラフィーは、水系単一移動相を用いて温度変化のみで分離を制御できることから、分析標物の生活活性を損なうことなく分離を達成することができる。また、移動相に有機溶媒を使用しないため、環境に優しい分離システムである。

しかし、温度応答性高分子の素材についての研究やクロマトグラフィーに適用した結果についての報告例はあるものの、プロセスの最適設計という観点からの報告例はない。そこで我々は、シミュレーションを用いた温度応答性クロマトグラフィーの最適設計手法の確立を目的として研究を行っている。

前報においては、複雑な流れ場に対して適用性が高い²⁾³⁾と言われる格子ボルツマン法(LBM)と反応をカップリングしたソルバーの開発を行った。⁴⁾その結果、均相反応場において、種々の反応系に対し開発したソルバーを適用したところ、いずれの系に対しても妥当な結果が得られた。

そこで本研究においては、流れのある場に対して、本手法を適用し、吸・脱着速度定数の違いによって分離にどのような違いがあらわれるか検証を行った。

2. シミュレーション方法

シミュレーションモデルとしては、前報⁴⁾と同様である。計算領域としては、横101、縦11グリッドとし、長手方向を基準長さとして、流路中央に無次元高さ0.01、長さ0.6の棒状充填物を配置した。左右の境界は非周期境界条件とし、それぞれ一定の圧力勾配をもって流入(左側境界)および流出(右側境界)とした。分離対象成分としては、BおよびCの二成分系とし、BのC法がC比べて吸着材に対する親和性が高いという場合を想定した。吸・脱着過程を式(1)および(2)で示す。式中の σ は吸着サイトを示している。なお、温度変化に伴う親和性の変化を想定し、ここでは、吸・脱着速度定数がことなる2つの場合について分離特性の変化をしらべた。吸・脱着速度定数をTable 1に示す。ここでは、Cの吸・脱着速度定数はCase 1, 2で同じ値とし、Bについては、吸・脱着速度とも、Case 2がCase 1の10倍となる様に設定した。計算方法としては、

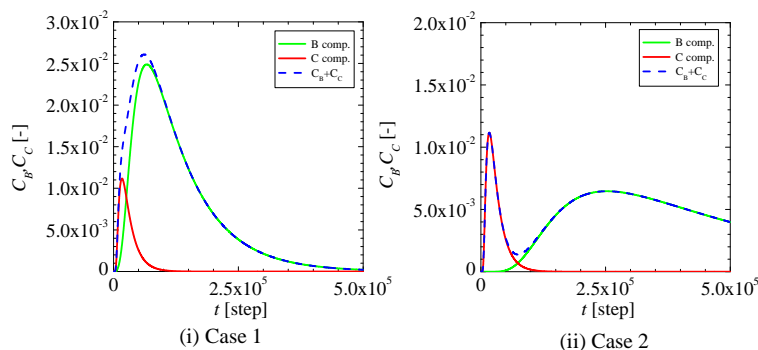


Fig. 1 濃度の経時変化

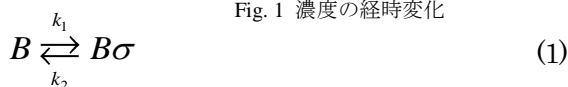


Table 1 吸・脱着速度定数について

Case	k_1	k_2	k_3	k_4
1	1.0×10^{-2}	1.0×10^{-4}	1.0×10^{-3}	1.0×10^{-2}
2	1.0×10^{-1}	1.0×10^{-3}	1.0×10^{-3}	1.0×10^{-2}

まず流れ場の計算のみを行い、速度分布が十分発達し定常に達した後、B, C成分の計算を開始した。なお、B, Cの初期濃度はそれぞれ1.0, 0.1とし、入口から10グリッド目の部分を含めて、流路を横断する方向に3グリッド分の幅を持たせた部分に配置した。

3. 結果と考察

計算結果をFig. 1に示す。図中の緑色および赤色の実線はそれぞれ成分BおよびCに関する出口濃度の経時変化を示し、全濃度を青色の点線で示す。この図より、Case 1においては、2成分の分離が悪く、全濃度分布の経時変化においては、1つのピークしか確認されないのに対し、Case 2では、B成分の吸着性がCase 1に比べて増加した結果、B成分の流出がC成分に比べて遅れたことにより、両者の分離性が向上し、全濃度の経時変化においても2つのピークが確認されることがわかった。なお、Case 1, 2の分離係数は、それぞれ約3.9と15.0であり、定性的に妥当な結果が得られた。今後は、分離途中における温度変化による吸・脱着速度変化がどのような影響を与えるかについて検討する。

参考文献

- 1) H. Kanazawa, K. Yamamoto, Y. Matsushima, N. Takai A. kikuchi, Y. Sakurai, T. Okano, *Anal. Chem.*, **68**, 100-105 (1996)
- 2) 稲室隆二著: 物性研究者のための計算手法入門(2001)
- 3) T. Inamura, M. Yoshino, H. Inoue, R. Mizuno, F. Ogino, *J. Comput. Phys.* **179**, 201-215 (2002)
- 4) 中野 麻利, 水田 敬, 化学工学会第41回秋季大会講演要旨集, C313 (2009)

*E-mail: kmizuta@cen.kagoshima-u.ac.jp
Tel/ Fax: 099-285-3061