

## 1. 利用の概略

### 1) 利用目的・内容

本研究は、文部省 COI ストリームのアクア・イノベーション信州大学拠点の水処理膜研究の一環として実施された。弊財団は、信州大学が開発したロバストカーボン水処理膜（逆浸透膜）に対し原子構造モデルを構築し、計算機シミュレーションにより、透水性、脱塩性、ファウリング、耐塩素性などの水処理メカニズムを解明することを目的とした。また、可視化や関連したナノカーボンの基礎研究も加えて実施した。

### 2) 利用意義（産業利用の観点から）

現在、世界各国の水不足のために、生命の危機、食料不足、環境汚染等が問題となっている。アクア・イノベーション信州大学拠点では、最終的な高度な造水・水循環システムの社会実装を実現し、豊富で新鮮な水を地球上の場所にかかわらず供給することを目指す。そのためのキーテクノロジーとなるロバストカーボン水処理膜の研究・開発のシミュレーションは重要である。

### 3) スーパーコンピューターを利用する必要性

水処理膜に海水が侵入し純水だけが膜を透過する現象を評価するため、分子動力学シミュレーションでは、膜分子・原子からなる数万原子の系を数 100 万回以上のタイムステップで（数ナノ秒）の計算が必要であり、水圧、原子構造を変えた多くのケースで計算が必要となる。また、膜を構成する原子の電荷は、数百～数千原子からなる第一原理計算によって決める。これ他の計算ではスーパーコンピューターの利用は必須である。

## 2. 成果の概要

### 1) 本利用で得られた成果（成果が得られなかった場合はその理由）

※ 内容を以下のうちから選択の上、計算機利用の観点から得られた知見を中心に記載してください。

（ 〇1. 計算科学、 2. コンピュータ・サイエンス、 3. プログラムチューニング、 4. その他 ）

信州大学では、従来のポリアミド膜にカーボンナノチューブ（CNT）を分散させ、海水を淡水に変える革新的ロバスト水処理膜の合成に成功した。この水処理膜の原子構造モデルを構築し、膜に海水中の汚染物（ファウラント）がつかない耐ファウリング性のメカニズムの解明に、計算機シミュレーションを利用した。

ファウラントとして天然有機物アルギン酸とフミン酸を膜に吸着させ、後に膜に沿って水流を起こし、膜表面とファウラントの分子相互作用の MD 計算からファウラントを洗い落とせるかを調べた。フミン酸は膜表面の粗さによって生じる空洞のスペースが、単一ポリアミド膜よりこの CNT/ポリアミド膜の方が浅くなり、ファウラントを起こさない事が示された。さらに、アルギン酸分子は  $Ca^{2+}$  を通して膜と架橋するが、この CNT/ポリアミド膜表面が正の電荷を帯びるためにこの架橋を壊し、ファウラントを起こさない事が示された。計算コードは LAMMPS を用いて、ポテンシャル場として FeaxFF を使った。この研究により、ポリアミド膜に CNT が分散された炭素複合ポリアミド膜が耐ファウラント性を示すメカニズムが理論的に明らかにされた。

### 2) 社会・経済への波及効果の見通し

本シミュレーション研究は実験家との連携で実施され、シミュレーションの結果は、実験にフィードバックされ、透水性、脱塩性に加え、幾つかのファウラントに対する耐性などの評価と現象のメカニズムの解明により、水処理膜の機能向上へとつながっている。さらに、本プロジェクトは産官学連携により膜開発、モジュール化、水処理プラント施設のロードマップが示されており、ビジネスへの展開を進め、水処理プラントが必要となる世界各国の地域で、水に含まれる塩分量の情報を分析し、適した水処理プロセスの設計に着手している。開発されたロバストカーボン水処理複合膜の製品化は順調に進み、世界各国の水処理市場の分析も進み、社会・経済への普及固めは着実に進行している。

### 3) その他の成果

UV2000 システムを利用した。AVS ソフトによる可視化を進めている。ネットワークを通しての利用にも関わらず、VNC により高速に端末で操作が可能のため、幾つかのコンテンツを作成することが出来た。