

## 1. 利用の概略

### 1) 利用目的・内容

本研究は、文科省 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、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、世界各国では水不足のために、生命の危険、食糧不足、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、最終的に高度な造水・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に供給可能となることを目指す。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

水処理膜に海水が浸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、膜原子・水分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（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。これら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 ）

これまでに、アクアイノベーション拠点信州大学では、従来の水処理であるポリアミド膜に CNT を分散させ、革新的ロバストカーボン水処理複合膜の合成に成功した。そして、作成した膜の透水性についてシミュレーションを実施し、ポリアミド膜よりも優れていることを示した。さらに牛血清アルブミン（BSA）を用いた実験により、この CNT ポリアミド複合水処理膜のたんぱく質に対する耐ファウリング性が発見された。

本研究では、この耐ファウリング性の起源について MD シミュレーションを用いて解析を行った。膜の表面はグラフェンポリアミド（GPA）膜がポリアミド（PA）膜よりも滑らかであった。GPA 膜上では PA 部の剛性と界面水の効果により BSA は膜への付着がほとんどないのに比べ、PA 膜上では BSA は膜に付着してしまっている。水流を加えると、GPA 膜上の BSA は水に流されて移動したが、PA 膜上ではほとんど動かなかった。PA 膜上の BSA は GPA 膜上に比べてエネルギー的に安定であり、これは BSA が膜と水素結合を組み、その相互作用により安定化しているためである。GPA 膜上では界面水の効果により、耐ファウリング性発現した。これが CNT ポリアミド複合水処理膜の耐ファウリング性の起源となることが明らかになった。

### 2) 社会・経済への波及効果の見通し

水処理膜シミュレーションの結果を実験にフィードバックして、透水性・脱塩性に加え、耐ファウリング性・耐塩素などの評価、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。本研究は産学官連携により、ロバストカーボン水処理膜の作成に続き、モジュール化、最終的に水処理プラント施設がロードマップに示されている。さらに、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・油分量の情報を分析し、適した水処理プラント施設のビジネス展開も同時に着手している。開発されたロバストカーボン水処理複合膜の作成は順調に進み、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かかわらず、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。