

世界の豊かな生活環境と
地球規模の持続可能性に貢献する
**アクア・イノベーション
拠点(COI)**

第5回 シンポジウム

～5年間の成果を確認し、研究開発を加速する～

予稿集

Global
Aqua Innovation
Center

2017.11.9(木) 11:00～16:30

ポスターセッション 10:00～15:30
(コアタイム 10:00～11:00／12:00～13:00)

場所 **一橋講堂** (東京都千代田区一ツ橋2-1-2)

主催:アクア・イノベーション拠点(COI)・信州大学
協賛:公益社団法人高分子学会



世界の豊かな生活環境と地球規模の持続可能性に貢献するアクア・イノベーション拠点(COI)

第5回シンポジウム開催趣旨

水は人類にとって最も重要な資源です。近年人口の増加と都市への集中、経済成長、温暖化による気候変動などにより、世界的に水の不足と汚染が大きな問題になっています。2015年に国連で採択された「持続可能な開発目標(SDGs)」でも水に関する開発目標が掲げられています。

信州大学アクア・イノベーション拠点(COI)は、地球上の誰もが十分な水を手に入れられる社会をめざし、革新的な『造水・水循環システム』の構築を実現すべく研究開発を進めてまいりました。プロジェクトは5年目に入り、信州大学のナノカーボン技術や材料技術をもとに、ロバスト(頑強)性を備えた高性能のカーボン膜などを生み出しつつあります。また膜の創製と連携して進めている水科学の研究においても、水分子の透過や脱塩、ファウリング等のシミュレーションにより、そのメカニズムを解明してまいりました。今後革新的な分離膜を生み出すとともに、分離膜のモジュール化と実用化を進めます。さらにこの新しい膜モジュールを使った水処理システムを構築してその優位性を実証し、当拠点の目標である海水淡水化、かん水淡水化をはじめとして、超純水製造、医薬や食品、エネルギーなどの分野での社会実装への道筋をつけてまいります。

東京の会場で初めて実施する今回のシンポジウムでは、水処理関連企業、膜開発・応用関連の企業の方をはじめ、大学・研究機関の研究者や自治体の方々にご参加いただき、膜の研究成果の発表や社会実装に向けたパネル討論を通して、研究開発の方向性を確認し、さらに加速することを目的として開催いたします。忌憚のないご意見をいただき、今後の拠点の研究開発方向を考える上での参考にさせていただきたいと存じます。



アクア・イノベーション拠点
プロジェクトリーダー
株式会社日立製作所

上田 新次郎



アクア・イノベーション拠点
研究リーダー
信州大学特別特任教授

遠藤 守信

シンポジウム開催にあたって

センター・オブ・イノベーション(COI)プログラムは、将来の日本が目指すべき姿を見据えたビジョン主導型の研究開発プロジェクトであり、アクア・イノベーション拠点は「世界の人々がいつでも十分な水を手に入れられる社会」の構築を目指しております。本学は、本拠点の中核機関として、本学の強みであるナノカーボン材料を中心とする材料科学の研究を中心に全学の英知を結集し、参画研究機関や企業とともにオールジャパンの研究体制を組み、革新的な『造水・水循環システム』の創出、社会実装を目指しております。

この度、東京を会場にアクア・イノベーション拠点第5回シンポジウムを開催できることは、産学官連携のイノベーション拠点の形成を目指す本学にとりましても大変有意義なことであり、これを機に企業や大学・研究機関、自治体との連携がさらに広まり、強固になることを期待しております。



国立大学法人信州大学
学長

濱田 州博

プログラム（敬称略）

10:00～11:00	ポスターセッション
11:00～11:10	開会挨拶 上田新次郎(信州大学COIプロジェクトリーダー／株式会社日立製作所) 濱田州博(信州大学学長)
11:10～11:20	来賓ご挨拶 信濃正範(文部科学省大臣官房審議官 科学技術・学術政策局担当) 佐藤順一(COI STREAMビジョン3ビジョナリーリーダー／日本工学会会長)
11:20～15:00	成果報告 11:20～ ● 表面重合を用いた新規ナノ濾過機能有機ナノ薄膜の創成 木村 瞳(信州大学繊維学系教授) 11:40～ ● 無機材料で挑む水をキレイにする化学～社会実装を目指すフラックス育成結晶～ 手嶋勝弥(信州大学工学系教授)

休憩・ポスターセッション(12:00～13:00)

13:00～	● ナノカーボンRO膜の新しい展開 遠藤守信(信州大学COI研究リーダー／信州大学特別特任教授) ・ 新規開発RO膜のマルチスケールシミュレーション Rodolfo Cluz Silva(信州大学カーボン科学研究所特任教授) ・ 大面積化可能なグラフェン脱塩膜 Aaron Morelos Gomez(信州大学COI研究員)
14:00～	● シミュレーションによる、分子レベルでの水分離膜メカニズムの把握とコンピュータ創膜への展開 手島正吾(高度情報科学技術研究機構計算科学技術部長)
14:20～	● 先端計測と分子モデリングによる水科学の基礎研究 前田瑞夫(理化学研究所前田バイオ工学研究室主任研究員)
14:40～	● 人と水大循環の相互作用 高橋桂子(COI-S研究リーダー／海洋研究開発機構地球情報基盤センター長)

休憩(15:00～15:10)

15:10～16:25	社会実装に向けたパネル討論 モデレータ：上田新次郎(信州大学COIプロジェクトリーダー／株式会社日立製作所) パネリスト：長岡 裕(東京都市大学教授) 山田博之(東レ株式会社地球環境研究所) 大西真人(株式会社日立製作所産業・水業務統括本部) 加来啓憲(栗田工業株式会社開発本部) 田中厚志(信州大学工学系教授／信州大学COI研究推進機構)
-------------	---

16:25～16:30	閉会挨拶 遠藤守信(信州大学COI研究リーダー／信州大学特別特任教授)
-------------	---

司会進行：佐藤明生(信州大学学長補佐／工学系教授)

表面重合を用いた 新規ナノ濾過機能有機ナノ薄膜 の創成



COIサブ研究リーダー
信州大学
繊維学系教授

木村 瞳

革新的水処理膜を得るために、膜の選択性と水透過性の向上が必須となる。これらを達成するには、膜素材のナノ構造を制御しなければならない。さらに、高信頼性を得るためにには均一かつ欠陥のない製膜手法との組み合わせが必要となる。そこで、有機化合物の表面化学気相重合法によるポリマーフィルム形成手法“パリレンコーティングプロセス”に着目した。低分子有機化合物を昇華・熱分解・表面重合することによって、製膜したい基材表面にナノスケールの厚みで高分子フィルムを室温で形成できる。基材表面に凸凹があっても欠陥なく表面に有機フィルムを形成できる非常に信

頼性の高いプロセスであり、このプロセスによる物質分離機能膜創成に関し研究開発を進めた。原料分子に極性基を導入しパリレン膜を形成させたところ、高バリア性を示すパリレン膜に水透過性を付与することに成功した。さらに、架橋構造導入による機械的強度向上とナノ孔数増加によって水透過量の大幅な改善が得られた。色素の選択透過性などからパリレン膜には2nm程度のナノ孔を持ち、分子の大きさによるナノ濾過機能を持つことを明らかとした。発表では有機ナノ薄膜の応用展開についても述べる。

無機材料で挑む 水をキレイにする化学 ～社会実装を目指すフラックス育成結晶～



COIサブ研究リーダー
信州大学
工学系教授

手嶋 勝弥

本研究では、無機結晶材料を活用して『水をキレイにする化学』に挑んでいる。具体的には、無機結晶のナノ空間(結晶構造)や立体形状をデザインし、水に溶解するさまざまなイオンを吸着する超機能性結晶のフラックス創成に取り組んでいる。フラックス法は、液相から単結晶を育成するプロセスの一種であり、高品質な単結晶を単純なプロセスで育成できることを特長とする。このプロセスでは、結晶組成、形状やサイズはもとより、晶相や晶癖なども制御できるため、材料自体の性能を最大限に引き出すことができる。浄水デバイス応用では、重金属イオンなどを選択的・高効率に除去できる結晶材料を開発し、社会実装を目指している。



信州大学工学部物質化学科棟2F居室に設置済(使用中)

フラックス育成した結晶(挿入図)を搭載した浄水器用カートリッジ

ナノカーボンRO膜の新しい展開 ～ナノカーボンを用いたロバスト水処理膜～



COI拠点
研究リーダー
信州大学特別特任教授
遠藤 守信

1970年代当初以降、ポリアミドを始めとする高分子フィルムは海水淡水化用逆浸透(RO)膜等として水処理分野で大きな貢献を果たしてきた。水の世紀と称される21世紀、水処理膜に今、様々なイノベーションが要請され、水処理膜から造水システムまで広く挑戦的研究が展開されている。信州大学COI拠点では、近い将来において世界規模で水情勢が一層切迫すると危惧される事態に対応するため、海水淡化や随伴水処理などで貢献できる高性能なロバスト水処理膜の開拓を進めている。1970年代初め、それまで主流だった天然纖維や合成纖維に加えて全く異なる軽量・高強度のカーボンファイバーが開発され、宇宙航空分野でイノベーションが創出された。同様の発想で信州大学の炭素研究のポテンシャルをベースに、当COI拠点では新たにカーボンを多用した新規な膜開発によって造水膜分野での世界貢献を目指している。その際、用いるのが先進のナノカーボン(Nano Carbons, NCs)である。このNCsは、ナノメータサイズで炭素の構造を制御することによって革新的機能を発現する炭素体の総称であり、本学で提唱された概念である。代表的物質にフラーん、カーボンナノチューブ、グラフェン、また構造制御したダイヤモンド様炭素等がある。これらを新たな造水用膜に応用して将来的に要請される膜イノベーションを実現しようとするものである。具体的に対象としている膜は、①多層カーボンナノチューブ(CNT)とポリアミドの複合化薄膜によるRO膜の構成、②構造制御したダイヤモンド様炭素(Diamond-like carbon, DLC)薄膜を用いるRO/NF(Nano Filtration)膜、③酸化グラフェン・グラフェン(GO/G)複合によるNF膜等である(図1)。ここでは①を中心に膜生成と機能について報告する。

ポリアミド(PA)の界面重合の際にカーボンナノチューブを添加して、CNT/PA複合薄膜活性層をポリスルファン多孔性基材上に連続的に形成することができる。その際、CNTの周辺に高度に配向したPA分子層が形成される(図2)。膜機能発現のために、CNT含有量が最適化されている。脱塩率、透水性、耐塩素性において特色ある複合逆浸透膜が生成される(表1、図3)。特にロバスト性においては有機、無機耐ファウリング性に優れた特徴を有したRO膜が形成できる(図4)^(1,2,3)。この優れた機能はCNT/PA複合膜において興味深い電荷移動が発生したためであることが分子動力学をベースにしたシミュレーションで明らかにされた。

References

- High-performance multi-functional reverse osmosis membranes obtained by carbon nanotube/polyamide nanocomposite: SCIENTIFIC REPORTS,5,2015
- Molecular Dynamics Study of Carbon Nanotubes/Polyamide Reverse Osmosis Membranes: Polymerization, Structure, and Hydration, ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES,7(44):24566-24575 2015.
- Antiorganic Fouling and Low-Protein Adhesion on Reverse-Osmosis Membranes Made of Carbon Nanotubes and Polyamide Nanocomposite. ACS Appl. Mater. Interfaces. 2017 Sep 20;9(37):32192-32201.



図1 ナノカーボンを用いて様々な方法で膜イノベーションにチャレンジしている。Phase I,II での取り組み



図2 CNT/PA 複合RO膜の構造モデル

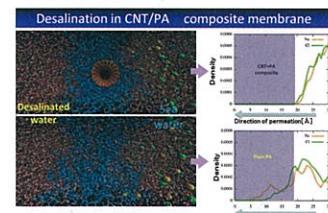


図3 CNT/PA 複合RO膜におけるNaCl 透過機構のモデル(PA膜との比較)

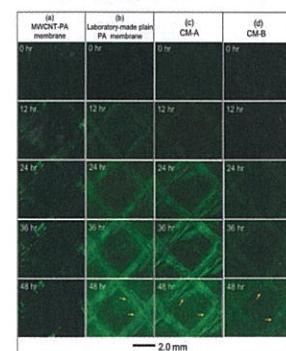


図4 各種RO膜表面への有機ファウラント沈積挙動の比較

CNT/PA 複合膜の特色			
項目	市販RO膜 (芳香族ポリアミド膜)	開発品 (MW-CNT-PA膜)	
塚の阻止率	● 高い	△ 市販品とほぼ同等～若干劣る	
透通水量	○ 多い	● 非常に多い	
耐残留塩素	✗ 弱い	○ 非常に強い	
ファウリング特性 (耐汚染)	✗ 弱い	○ 強い	

表1 CNT/PA 複合RO膜機能の特色

New developments in RO membrane multiscale simulation

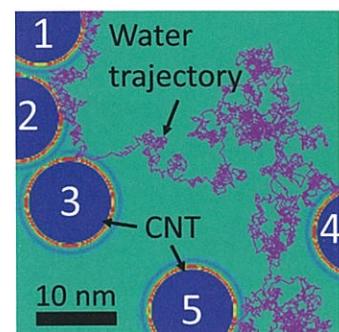
新規開発RO膜のマルチスケールシミュレーション



信州大学
カーボン科学研究所
特任教授

**Rodolfo
Cruz Silva**

In this work, we have implemented an approach using the large set of data generated from atomistic molecular dynamics to calculate the diffusion of water molecules across a polyamide/carbon nanotube composite reverse osmosis membrane. Our approach is based on a Montecarlo method that considers the free energy of the membrane measured at different positions from the surface of the carbon nanotube, as well as a quasi-random variation of the water free energy within a velocity distribution calculated from the molecular dynamics simulations. This approach enables the simulation of 200 nm thick membranes by using two-dimensional cells that simulate the permeation of water through the nanocomposite membrane. The reduction in computation time enable the calculation of a wide range of compositions and different patterns of free energy on the membrane. In this talk, we will explain the implementation and more relevant results.



Simulation of water permeation trajectory across a nanocomposite membrane.

Scalable graphene-based membranes for desalination

大面積化可能なグラフェン脱塩膜



信州大学
COI研究員

**Aaron
Morelos
Gomez**

A successful advancement of graphene oxide membranes for desalination and dye filtration has been made. The membrane is made by spray-coating a mixture of graphene oxide, few-layered graphene and surfactant on a porous polysulfone support with a polymer adhesive. The membrane could withstand high water flow and desalination measurements showed salt rejection up to 90% for NaCl and 96% for dyes, with a water permeation of 20 L/(m².h). The introduction of few-layered graphene enhanced its resistance against chlorine, which is highly used in water treatment industries for cleaning.

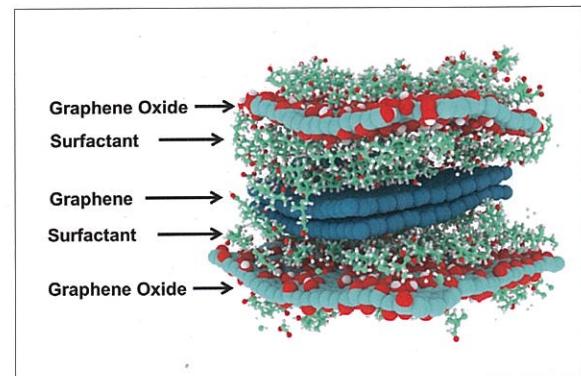


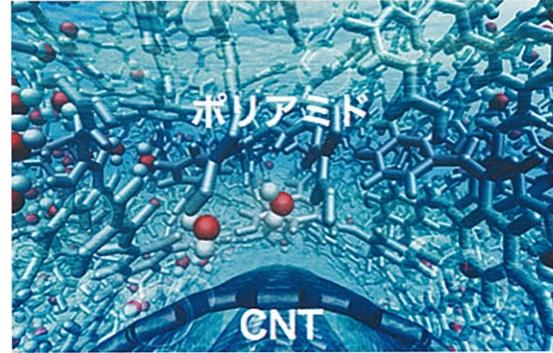
Figure 1. Representation of the active membrane.
A hybrid interlayer structure of graphene oxide,
graphene and surfactant is made.

シミュレーションによる、 分子レベルでの 水分離膜メカニズムの把握と コンピュータ創膜への展開



高度情報科学
技術研究機構
計算科学技術部長
信州大学特任教授
手島 正吾

本プロジェクトで開発したナノカーボン複合膜の水処理について、ナノスケールの粒子系の視点から膜分子・不純物分子・水分子等に分解し、それら数万分子の間に働く相互作用を計算し、分子の振る舞いを追跡することにより、水分離膜の透水性、脱塩性、汚染物の膜への影響、及びメカニズムなどを調べています。このような分子動力学シミュレーション手法は、スーパーコンピューターの能力向上と、物理モデルの高精度化により、信頼性の高いツールとなり、その結果は実験家がもつモノの振る舞いの感覚と非常に一致するまでになってきました。コンピュータ上で膜材料のドープ元素比率や元素置換したコンピュータ創膜にも取り組んでいます。



本プロジェクトで開発した多層カーボンナノチューブ(CNT)とポリアミドとかなるナノカーボン水分離複合膜。CNTの周辺に形成された固有のポリアミドのナノ構造が、水路を築き、膜としての高い透水性と脱塩性を達成した。

先端計測と分子モデリングによる 水科学の基礎研究



サテライトリーダー
理化学研究所
前田バイオ工学研究室
主任研究員
信州大学工学系教授
前田 瑞夫

理化学研究所(理研)は、日本で唯一の自然科学の総合研究所として、物理学、工学、化学、計算科学、生物学、医科学などに及ぶ広い分野で研究を進めている。本アクリア・イノベーション拠点には理研から前田バイオ工学研究室と杉田理論分子科学研究室が参画し、次世代の水浄化膜開発のために水に関する基礎研究を行っている。理研は、細胞膜などのやわらかい物質(ソフトマテリアル)の構造と物性を原子・分子レベルで研究してきた実績があり、それを基礎に計算シミュレーションと分光計測を連携させて、高分子材料でつくられた水透過膜と水との相互作用を原子レベルで明ら

かにし、その結果をもとに高性能膜の設計指針を提案しようとしている。今回、水分離膜(逆浸透膜)の基本構造であるポリアミドと水分子の相互作用を計算科学から予測し、これが赤外分光法による実測値とよく一致することを明らかにした。また水分離膜の防汚性を評価する手法も独自に開発している。信州大学と理研の協定に基づく連携研究室が信州大学国際科学イノベーションセンター(AICS)内に設置され、私はクロスマボイント制度により信州大学大学院教授に就任した。COIが標榜するアンダーワンルーフのコンセプトのもと、緊密な連携研究を進めているところである。

COI-S

「水」大循環をベースとした持続的な
「水・人間環境」構築拠点
人と水大循環の相互作用



COI-S研究リーダー
海洋研究開発機構
地球情報基盤センター長

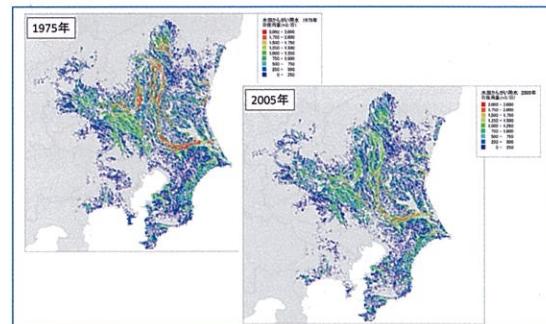
高橋 桂子

本プロジェクトで開発した大気・海洋・陸域・地下水系を統合した3次元「水」大循環モデルは、地球上の水全体の循環を表現しシミュレーションが実施できます。非常に高解像度で高速なシミュレーションが可能ですので、自然の水循環系へ影響を与える可能性がある人の活動を、シミュレーションに組み込むことが可能になりました。つまり、人と自然の水循環が相互に影響を与えあうありさまをシミュレーションによって再現したり、予測したりすることが可能となったのです。このようなことができる水大循環モデルは世界初の開発成果です。

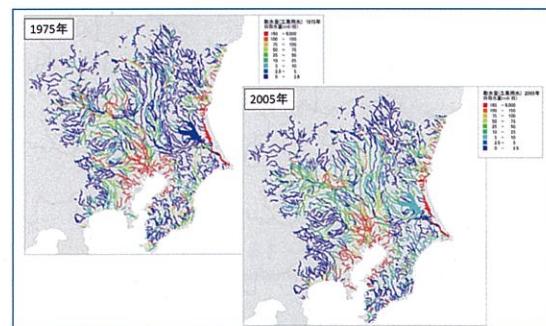
この3次元「水」大循環モデルを使用して、将来、地球温暖化が進んだ時に、地上の雨の降り方が変化した際の水循環のようすを予測し、その予測結果をもとに気候変化に頑健な水環境をどのように構築すればよいか、その設計が可能になります。人の活動によって水環境が影響されるようすを再現することによって、将来人がどのような行動指針に基づいて水環境を保持すればよいかについての指針を与えることが可能になります。

1975年～2005年の約30年間における首都流域圏（東京湾を囲む流域）の土地利用、人工排熱、水利用の変化についてのデータベースを構築しました。右図の農業用水使用量や工業用水使用量の変化は、人の活動の変化に対応しています。30年間の人の水の使い方の変化は、地下水の流動を変え、渴水や地盤沈下などの影響を与えるまでになったことはよく知られています。現在の水循環のようすが将来にはどのように変化していくのかをシミュレーションによって明らかにし、自然の水循環を最大限に活かしながら環境をよくしていく指針を、本プロジェクトで提示したいと考えています。

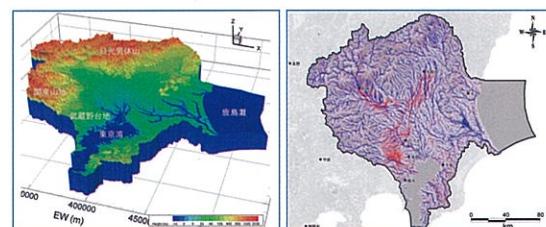
かつては清らかな水が湧いていた場所が、東京都内にもたくさんありました。しかしながら、今では水が枯れてしまったところは少なくありません。水が枯れてしまった理由については、よくわからないことが多い、都市化もその理由の一つに挙げられています。しかし、地表面や地下の水の流動の様子がわかれれば、湧水を呼び戻すことができる可能性を検討することができます。この検討に、本プロジェクトで開発した水大循環モデルを活用することを考えています。東京都内の「湧水ポテンシャル」を見出し、自然の潜在能力を引き出して、水辺を活かした素晴らしい都市環境をコストをかけずに実現するための指針を見出したいと考えています。



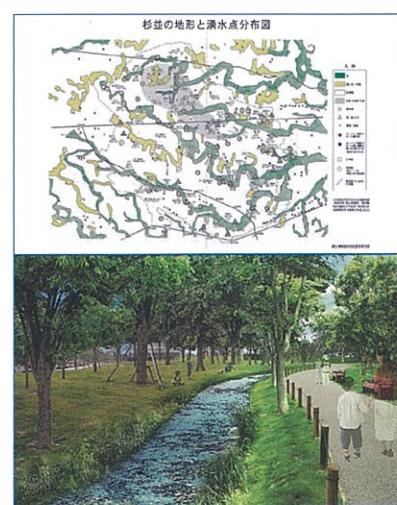
農業用水使用量の分布状況(水田)



工業用水取水量の分布状況



シミュレーション・
解析対象領域
水大循環モデルによる
シミュレーション結果



都市計画と湧水の変化

社会実装に向けて

本COIプロジェクトは5年目に入り、信州大学のナノカーボン技術や材料技術をもとに、ロバスト(頑強)性を備えた高性能のカーボン膜などを生み出しつつあります。また膜の創製と連携して進めている水科学の研究においても、水分子の透過や脱塩、ファウリング等の分析やシミュレーションにより、そのメカニズムを解明してまいりました。これらの研究成果を実用化に繋げるべく、分離膜のモジュール化も進めています。そこでこのパネル討論では、これら新しい膜を活用して水処理システムや分離システムにイノベーションを起こす可能性について討論をしたいと思います。分野としては海水淡水化やかん水淡水化、Oil&Gas分野での随伴水処理、超純水製造など産業分野、医薬や食品分野、さらに上下水分野での展開も考えられます。このパネル討論を通じて本COIプロジェクトの研究開発の方向性を確認すると共に、社会実装へ繋げる道筋をつけてまいりたいと思います。

モデレータ

上田 新次郎

COI拠点
プロジェクトリーダー
株式会社日立製作所



パネリスト

長岡 裕

東京都市大学
工学部都市工学科
教授



パネリスト

山田 博之

東レ株式会社
地球環境研究所
主任研究員



パネリスト

大西 真人

株式会社日立製作所
産業・水業務統括本部
技術開発本部 松戸開発センタ
水環境システム部長



パネリスト

加来 啓憲

栗田工業株式会社
開発本部技術開発部門
R&D統括部戦略企画課
課長



パネリスト

田中 厚志

COI研究推進機構
副機構長
信州大学工学系教授



ポスターセッション
(コアタイム 10:00~11:00／12:00~13:00)

アクア・イノベーション拠点(COI)

カーボン膜基盤分科会

- ① カーボンナノチューブ・ポリアミドのナノ複合膜による高性能、多機能性逆浸透(RO)膜の開発(信州大学)
- ② Spray coated graphene oxide membranes for desalination and dye removal.(信州大学)
- ③ Nanocarbon based high performance membranes for water purification from physical methods.(信州大学)
- ④ シミュレーションを用いたナノカーボン複合膜の水処理メカニズムの解明(高度情報科学技術研究機構)
- ⑤ 周辺技術)CNT複合材料による高機能シール・軽量高強度樹脂開発(信州大学)
- ⑥ バイオと化学を融合した新技術による石油系オイル汚染水の浄化(信州大学)

新材料・新プロセス分科会

- ⑦ 表面重合法を用いたナノ薄膜形成と選択透過性の発現(信州大学)
- ⑧ 無機材料で挑む水をキレイにする化学 ~社会実装を目指すフラックス育成結晶~(信州大学)

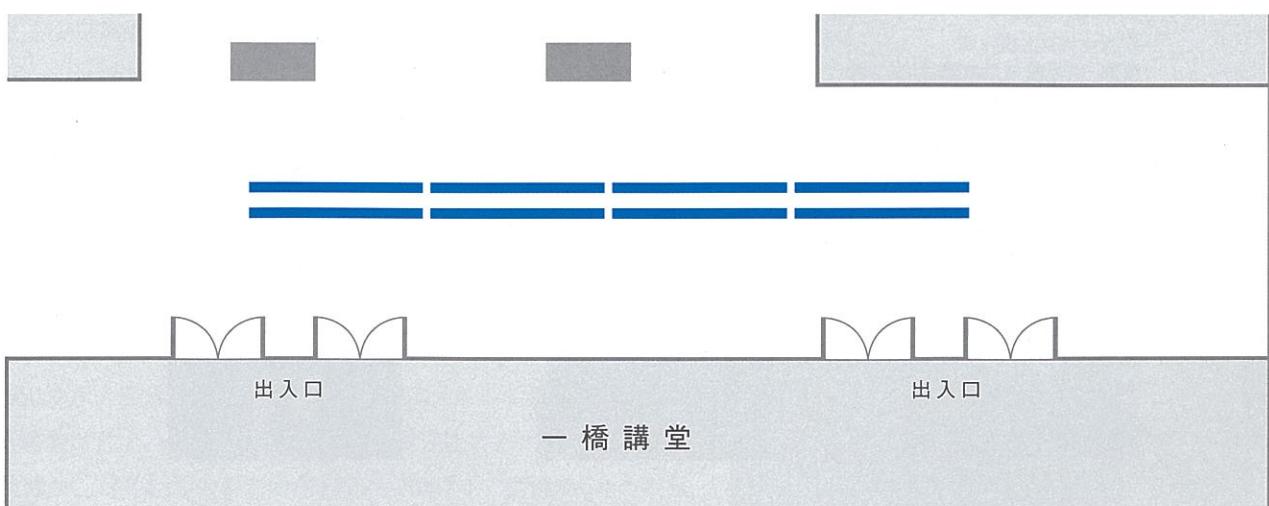
水科学・表面分科会

- ⑨ カーボンナノ細孔固有の同種イオン濃縮機能(信州大学)
- ⑩ 水やその他の物質と膜との相互作用を原子レベルで探る(理化学研究所)

COI-S

- ⑪ ⑫ 「水」大循環モデルをベースとした持続的な「水・人間環境」構築(海洋研究開発機構)
- ⑬ ⑭ 神田川流域における緑地計画の歴史的評価に関する研究
～急速な都市化が起こった神田川上流域を対象として～(中央大学)

■パネルレイアウト



MEMO



発行元

信州大学アクリア・イノベーション拠点
〒380-8553 長野県長野市若里4-17-1
TEL.026-269-5771 E-mail:coi_info@shinshu-u.ac.jp
HP:<http://www.shinshu-u.ac.jp/coi/>

世界の豊かな生活環境と地球規模の持続可能性に貢献するアクリア・イノベーション拠点(COI)

【中核機関】	国立大学法人信州大学
【中心企業】	株式会社日立製作所、東レ株式会社
【サテライト・連携機関】	国立研究開発法人物質・材料研究機構
【サテライト機関】	国立研究開発法人理化学研究所
【共同実施機関】	一般財団法人高度情報科学技術研究機構、昭和電工株式会社、北川工業株式会社、トクラス株式会社、栗田工業株式会社
【参画機関】	長野県
【COI-S機関】	国立研究開発法人海洋研究開発機構
【COI-S共同実施機関】	株式会社ソニーコンピュータサイエンス研究所、学校法人中央大学