

カーボンナノチューブ(CNT)とポリアミド(PA)の 複合 RO 膜の分子動力学に関する研究

～本学スパコンを活用した革新的な RO 膜科学への展開～

発表者； 遠藤守信・信州大特別特任教授、荒木拓海・RIST 計算科学技術部、手島正吾・RIST 計算科学技術部長、Rodolfo Cruz-Silva・信州大学特任教授、林卓哉・信州大学教授、

1. 発表のポイント

◇信州大学に地方大学では初めて導入されたスーパーコンピュータシステムを用いて、COI プロジェクトの研究成果を得ることに成功し、米国化学会アプライドマテリアルズインターフェース(電子版)に掲載されました。

◇スーパーコンピュータでは、ポリアミド(PA)にカーボンナノチューブ(CNT)を添加して作成した新規な複合膜を模擬した分子動力学シミュレーションを行い、膜の孔サイズが小さくなり、ナトリウムや塩化物イオンの侵入を妨げるなど、並行して実施している実験と整合する結果が得られました。

◇実験とシミュレーションにより、革新的な逆浸透(RO)膜を創造する新たな試みと評価され、米化学会誌「Applied Materials & Interfaces」への掲載が決まりました(電子版は既公開*).

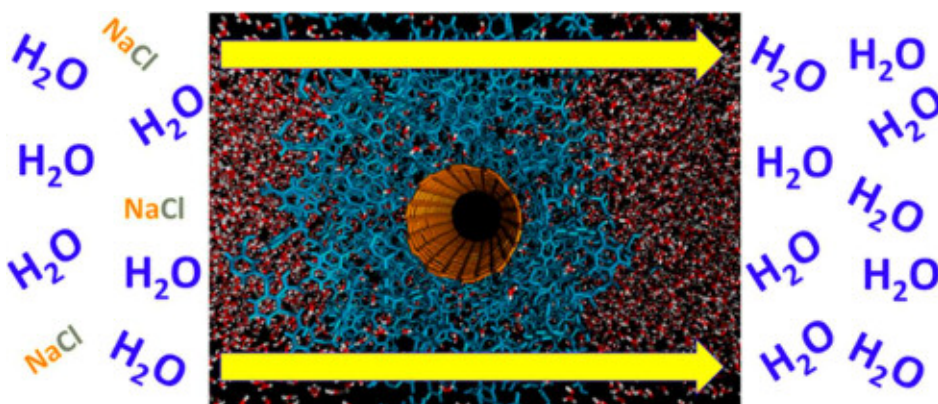


図1 ポリアミドとカーボンナノチューブ複合膜における水分子移動現象の解析

2. 発表の概要

本研究グループが作製したカーボンナノチューブ(CNT)と従来からの水分離膜材料であるポリアミド(PA)を複合化したナノコンポジット分離膜が、既存の膜材料と比較して優れた特性を持つことは当グループによるサイエンスレポート誌の既報論文の通りです。(Inukai, S.; Cruz-Silva, R.; Ortiz-Medina, J.; Morelos-Gomez, A.; Takeuchi, K.; Hayashi, T.; Tanioka, A.; Araki, T.; Tejima, S.; Noguchi, T.; Terrones, M.; Endo, M. High-Performance Multi-Functional Reverse Osmosis Membranes Obtained by Carbon Nanotube- Polyamide Nanocomposite. Sci. Rep. 2015, 5, 10、プレスリリースは9月7日付)。本研究では、このナノコンポジット分離膜が優れた特性を示すメカニズムを、本学が保有するスパコンを用いたコンピューターシミュレーションによって明らかにしました。

モデルとして、単層 CNT の周りに 1,3-diaminobenzene(メタフェニレンジアミン、MPD)と 1,3,5- benzenetricarbonyl trichloride (ベンゼントリカルボニルトリクロリド、TMC)の分子を多数配置し、分子同士の重合過程の分子動力学法によるコンピューターシミュレーションを行ったところ、重合分子が CNT の近傍では CNT に沿って配列する現象が明らかになりました。これは CNT が無い状態での分子の重合では見られない現象でした。(図2)

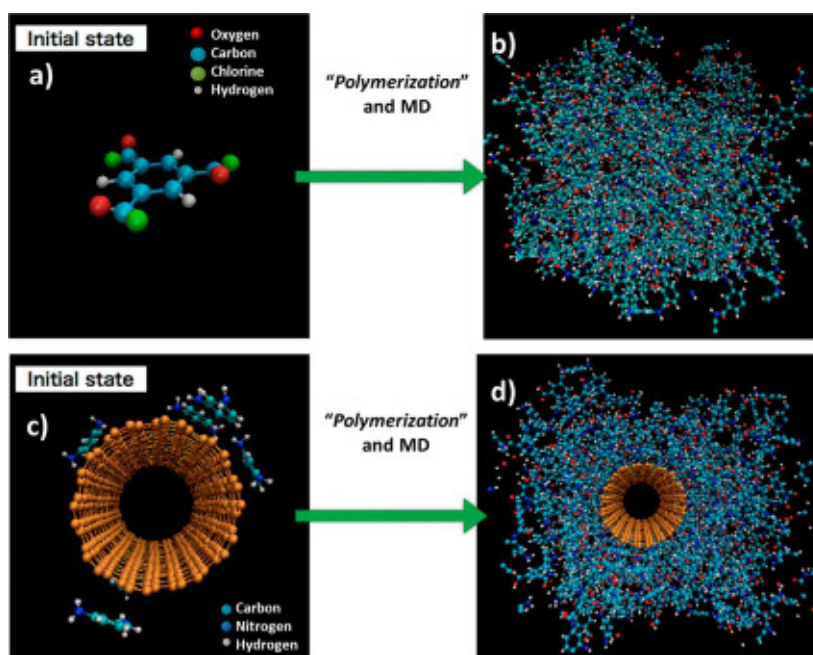


図2 ナノチューブが存在しない場合(上)と存在する場合(下)での重合現象の違い

得られたモデルに対して、3%の塩水を模して水分子と NaCl 分子を膜モデルの一方に配置して高圧をかけた状態で、水分子やイオンの膜への侵入深さを計測しました。その結果、ナノチューブが存在することで膜内に水分子が侵入しにくくなり、ナトリウムイオン(Na⁺)、塩化物イオン(Cl⁻)も同様に膜への侵入が阻止されていることが分かりました。対照的に、CNT 無しの膜モデルでは膜内にまでイオンが侵入することが分かりました。これは CNT が存在することで膜材料に存在する

微小な孔の平均径が小さくなり、分子やイオンが膜に侵入し難くなったためであると推測されました。(図 3) 一方、この複合膜に圧力を印可すると水分子が移動できることも分子レベルで可視化して解析できました(図 1)。

これらの知見により実験的に得られた CNT と PA のナノコンポジット分離膜の水分離膜としての機能発現の機構が明らかとなり、さらなる高性能分離膜開発への理論的な足掛かりを得ることができました。

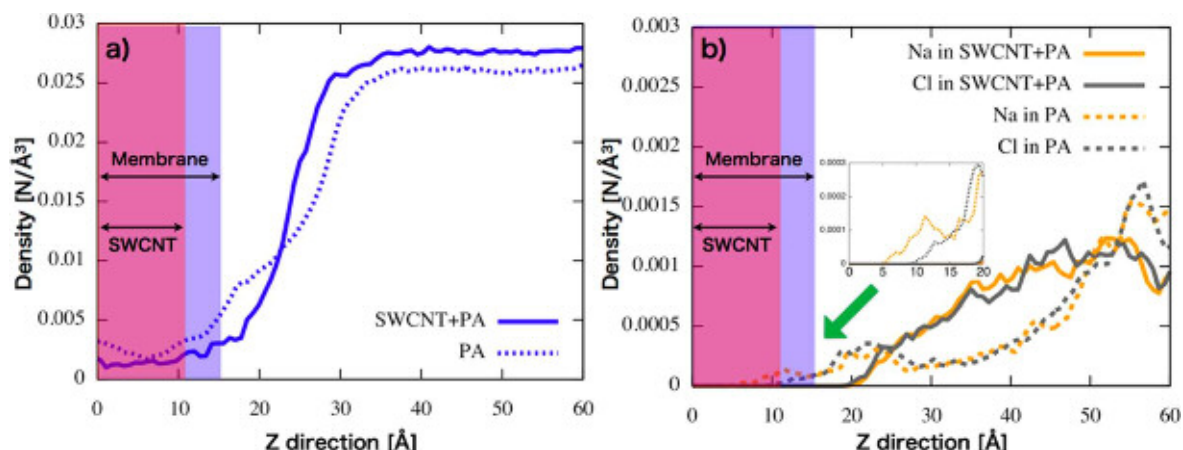


図 3 ナノチューブが存在しない場合とする場合の膜への水分子の侵入度合い(左)とナトリウム、塩化物両イオン(Na⁺,Cl⁻)の膜への侵入度合い(右)

3. 発表の背景

この研究成果は、科学技術振興機構 (JST) が推進するセンター・オブ・イノベーション (COI) プログラムの「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」**の中核拠点として、「活気ある持続可能な社会を構築する」という将来ビジョンに向け、信州大学などが取り組む革新的な造水・水循環システムの構築を目指す研究の一環で得られた成果です。

プロジェクトチームが、世界的な水不足を解消するために注目したのが、海水、随伴水、かん水¹という 3 つの水源地で、これらはすべて塩分を含んでいます。そこで、脱塩のためにキーテクノロジーとして取り組んでいるのが、従来のポリアミドに替わるナノカーボンを使った逆浸透 (RO) 膜の研究開発です。

信大 COI の研究チームは 9 月 7 日、CNT と PA のナノ複合膜による高性能、高機能な RO 膜の開発に成功したことをプレスリリースしていますが、今回の研究成果は、実験で得られた知見を、本学のスーパーコンピュータシステムを使った分子動力的解析により分析して理論的に証明し、革新的な RO 膜の創出に結び付くさまざまな仮説が導き出されました。

スーパーコンピュータシステムは、富士通製の「PRIMERGY RX200 S8」による PC クラスタと「PRIMEHPC FX10」のシステム構成で、文部科学省の「地域資源等を活用した産学連携による国際科学イノベーション拠点整備事業」(2014 年度)の一環として約 2 億 100 万円かけて整備され、2014 年 8 月から信州大学長野(工学)キャンパスで稼働を開始しました。今年 5 月には、国際科学イノベーションセンターの 4 階に移設されています。²

¹ 湖沼や地下にある塩分を含んだ水のこと。

² 2014 年 2 月のプレスリリースです。 <http://www.shinshu-u.ac.jp/coi/news/2014/02/post.php>

アクア・イノベーション拠点のプロジェクトの中では、ナノカーボンを使った革新的な RO 膜の開発に向け、ナノカーボン膜の複雑な解析やシミュレーションに使われています。「PRIMEHPC FX10」で利用するアプリケーションは、スーパーコンピュータ「京」³との互換性があるため、将来、シミュレーション規模が拡大した際には、スーパーコンピュータ「京」を利用したシミュレーションも進めて行く予定です。

また、本学スパコン運用の実績も重ねてきており、これらの実績をベースにスパコンを用いた諸計算について地域の企業等との連携・協力体制の整備も考えている所です。

* ACS Publications / Applied Materials & Interfaces (コピー配布)

Takumi Araki, Rodolfo Cruz-Silva, Syogo Tejima, Kenji Takeuchi, Takuya Hayashi, Shigeki Inukai, Toru Noguchi, Akihiko Tanioka, Takeyuki Kawaguchi, Mauricio Terrones, and Morinobu Endo, Molecular Dynamics Study of Carbon Nanotubes/Polyamide Reverse Osmosis Membranes: Polymerization, Structure, and Hydration, ACS Appl. Mater. Interfaces, 2015, 7 (44), pp 24566–24575, DOI: 10.1021/acsami.5b06248

<http://pubs.acs.org/doi/full/10.1021/acsami.5b06248>

** センター・オブ・イノベーション (COI) プログラム

科学技術振興機構 (JST) による公募型研究開発プログラム。現在潜在している将来社会のニーズから導き出されるあるべき社会の姿、暮らしの在り方を見据えたビジョンに基づき、企業だけでは実現できない革新的なイノベーションを創出するため、産学連携による研究開発に取り組んでいます。

信州大学は、ビジョン3・活気あふれる持続可能な社会の構築(ビジョナリーリーダー、住川雅晴・日立製作所顧問)の中の「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」の中核機関。

・プロジェクトリーダー(PL) 上田新次郎(日立製作所インフラシステム社・技術最高顧問)

・研究リーダー(RL) 遠藤守信(信州大学特別特任教授)

《中核機関》信州大学、物質・材料研究機構(NIMS)、長野県

《中心企業》日立製作所インフラシステム社、東レ、昭和電工

《参画機関》理化学研究所、高度情報科学技術研究機構、北川工業、トクラス

《COI-S サテライト》海洋研究開発機構、ソニーコンピュータサイエンス研究所、東京大学、中央大学、宇宙航空研究開発機構

・研究開発期間 平成 25 年度～平成 33 年度(予定)

³ 「京」： 文部科学省が推進する「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ (HPCI) の構築」プログラムの中核システムとして、独立行政法人理化学研究所と当社が共同で開発を行い、2012 年 9 月に共用を開始した計算速度 10 ペタフロップス級のスーパーコンピュータ。

3. お問い合わせ先

〈研究に関すること〉

林 卓哉 信州大学学術研究院(工学系) 教授

TEL 026-269-5763, FAX 026-269-5710

E-mail hayashi@endomoribu.shinshu-u.ac.jp

荒木拓海 高度情報科学技術研究機構 計算科学技術部

TEL 03-6433-0670, FAX 03-6433-0673

E-mail araki@rist.or.jp

〈プロジェクトに関すること〉

中村牧生 信州大学アクア・イノベーション拠点・広報コーディネーター

TEL 026-269-5761, MOBILE 090-1420-8141, FAX 026-269-5710

E-mail m3nakamura@shinshu-u.ac.jp

URL <http://www.shinshu-u.ac.jp/coi/>

田中厚志 信州大学環境・エネルギー材料研究所教授

アクア・イノベーション拠点研究推進機構・副機構長(戦略支援統括)

TEL 026-269-5766 or 5747, FAX 026-269-5710

E-mail attanaka@shinshu-u.ac.jp