

# 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

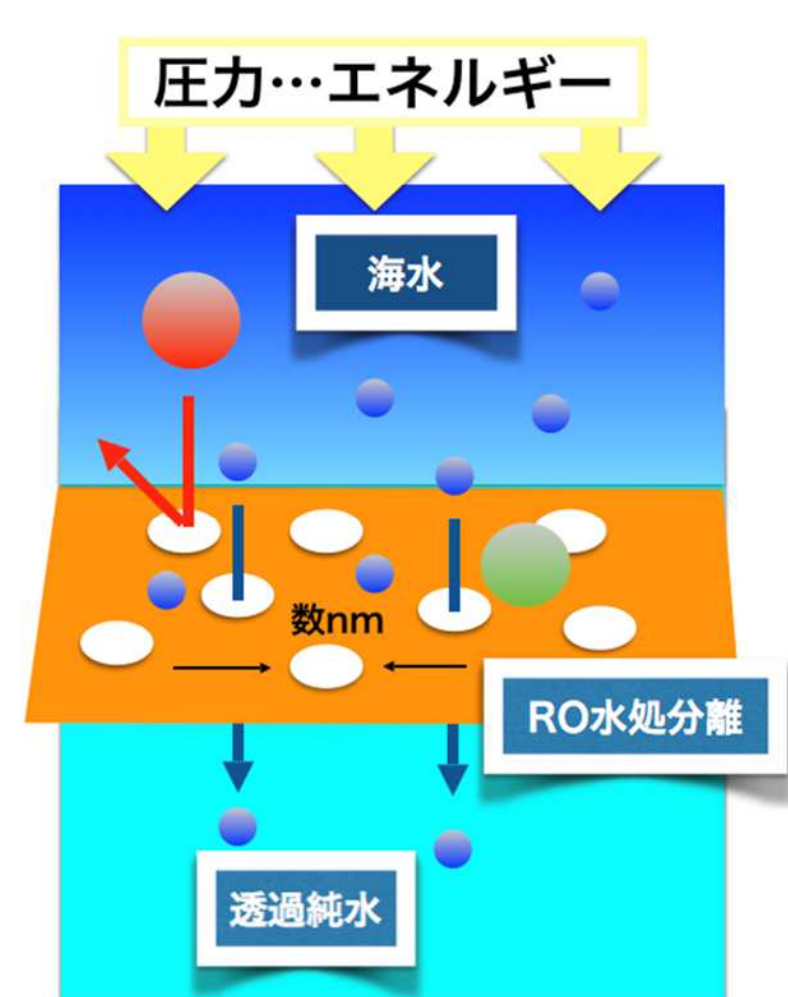
山中綾香<sup>1,2</sup>、手島正吾<sup>1,2</sup>

1 一般財団法人高度情報科学技術研究機構 計算科学技術部

2 信州大学 先鋭材料研究所

- ① 当研究グループでは、分子レベルで水処理膜の性質を理解することを目的に、計算機シミュレーション技法の開発をしています。
- ② 本研究では、分子動力学計算により水分子、膜構造、ファウリング分子の振る舞いを解析することに取り組み、脱塩性、透水性、耐ファウリング性などのメカニズムの解明をします。
- ③ 分子レベルで現象を理解することにより、さらなる機能向上・コスト削減に向けた革新的機能材料設計に貢献します。

## 海水から淡水を作る水処理膜



<水分離膜に求められる機能>

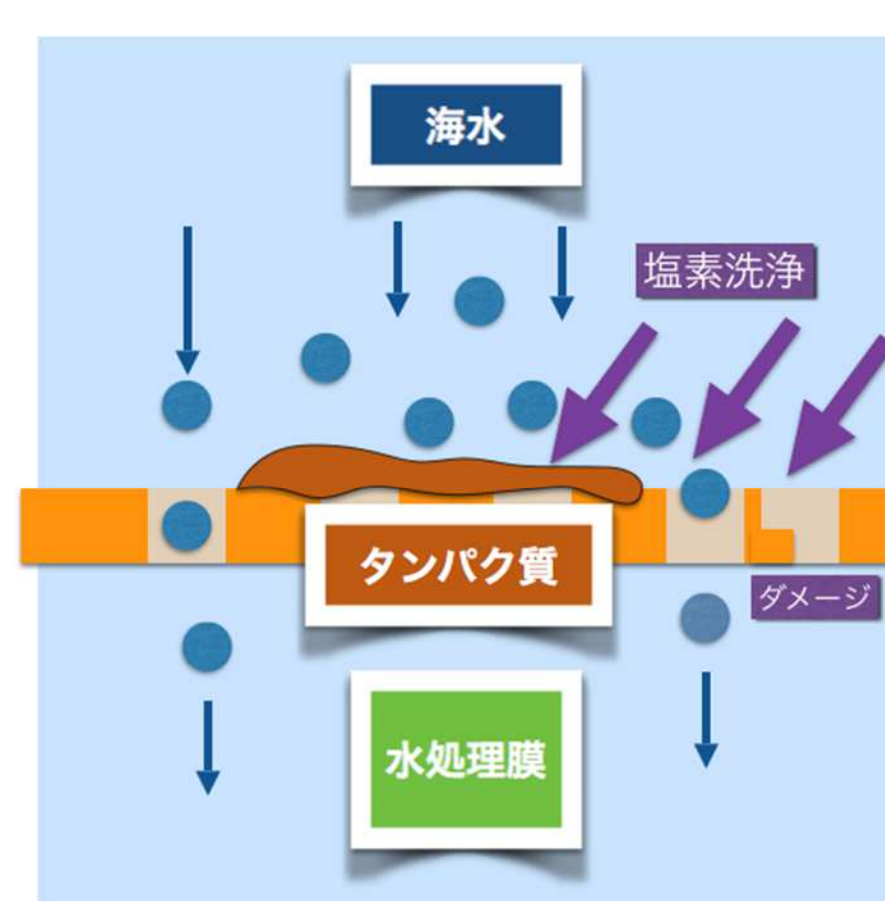
- ★高脱塩性
- ★高透水性
- ★強靱性
- ★耐塩素性
- ★耐ファウリング性

<市場競争に勝ち抜くための機能>

- ★低コスト
- ★長耐久性

信州大学の最先端カーボン技術で強靱な水処理膜開発へ！

## 従来型PA膜、スパーサーの課題はファウラント



<ファウラントとは>

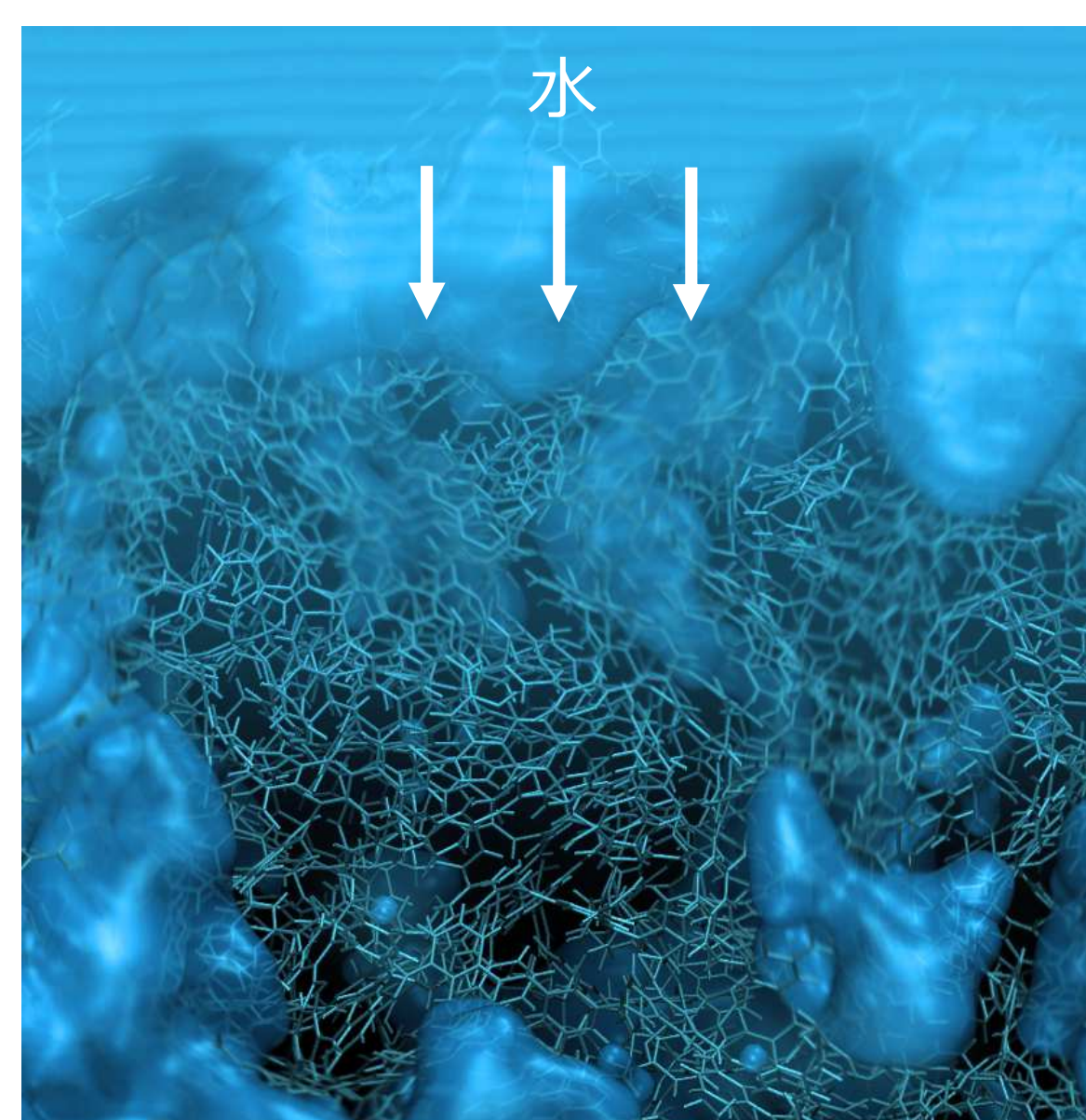
膜の表面に付着し水処理機能を低下させる物質

<ファウラントを防ぐ方法>

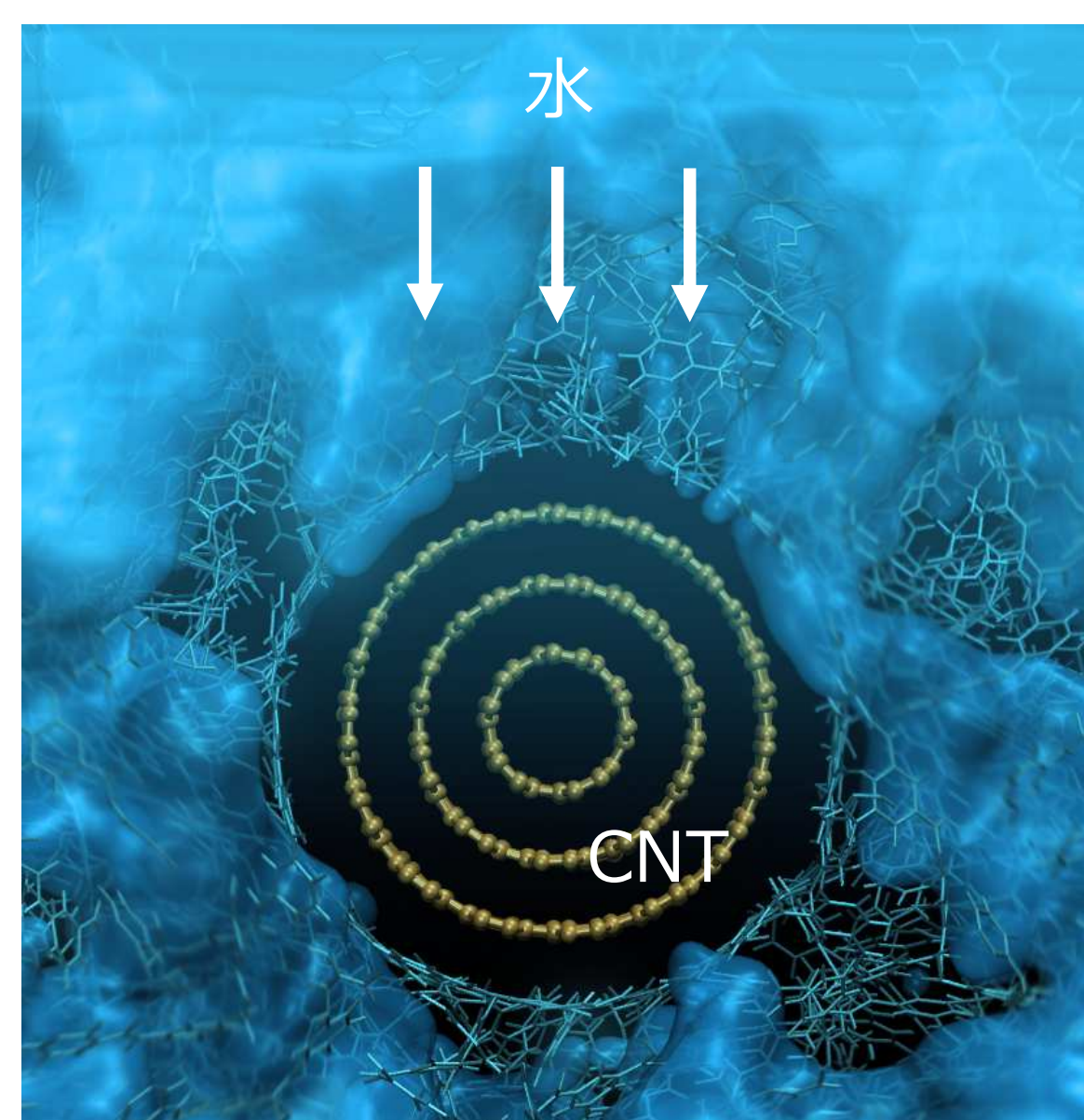
従来法：塩素洗浄 → 傷める

信州大学で開発した革新的な膜とスパーサー：  
CNT/PA膜、ポリプロピレン(PP)/CNT [CNF]複合スパーサー  
ファウラントを付着し難い構造・機能が発現

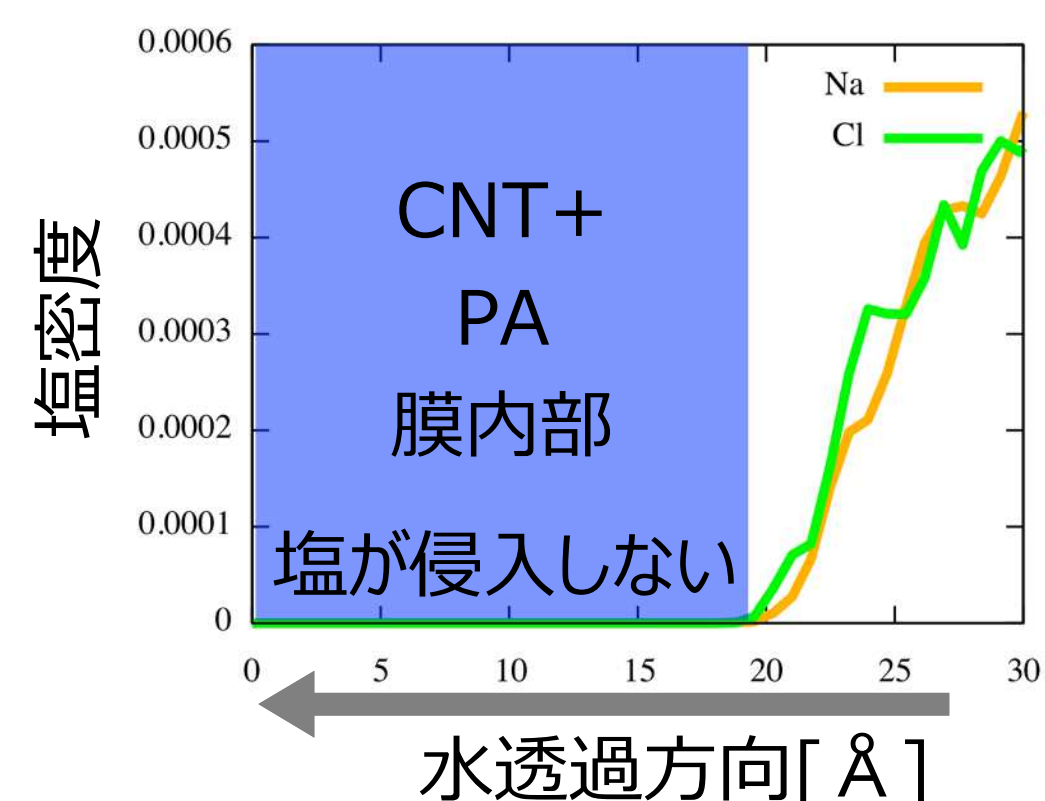
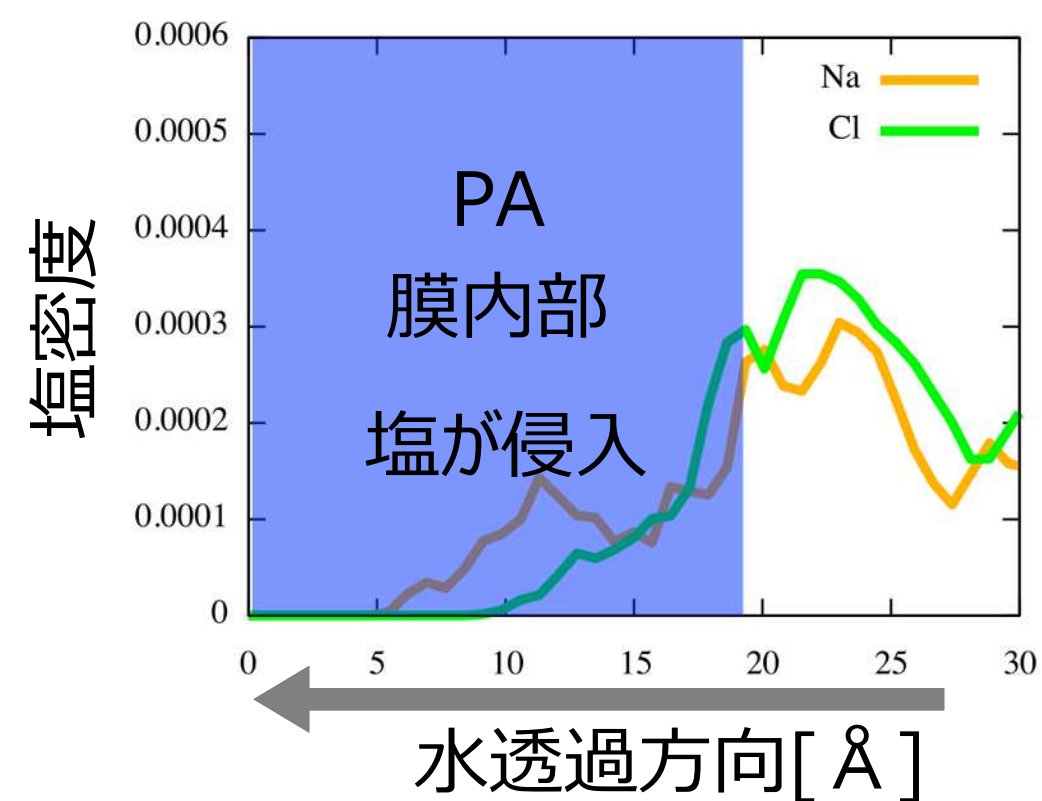
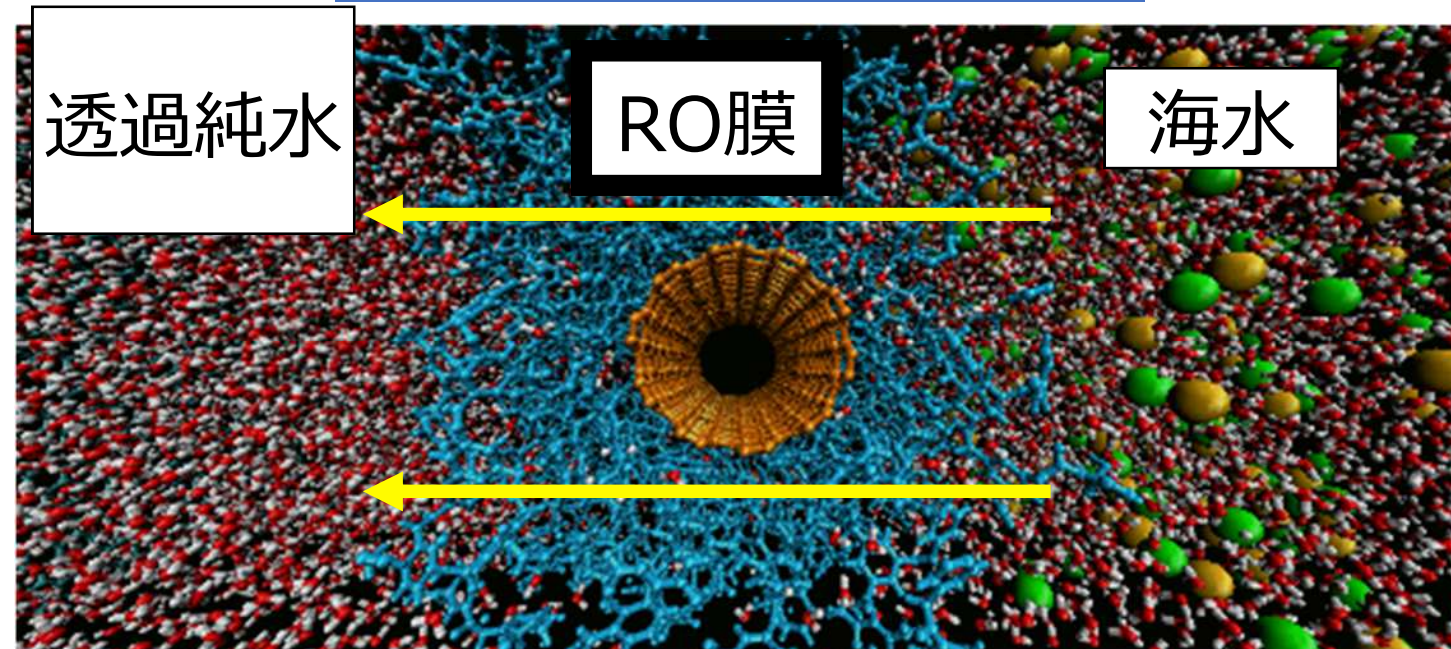
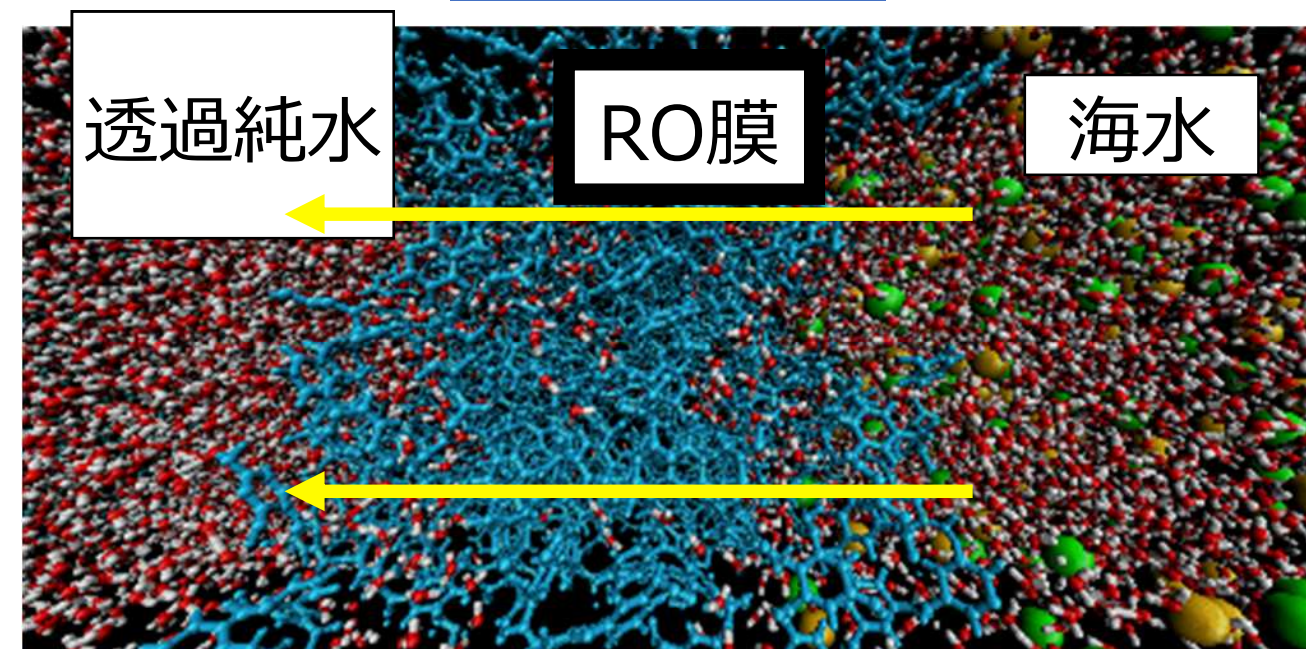
## CNT/PA複合膜の水処理シミュレーション



従来型RO膜



信州大学の高性能RO膜



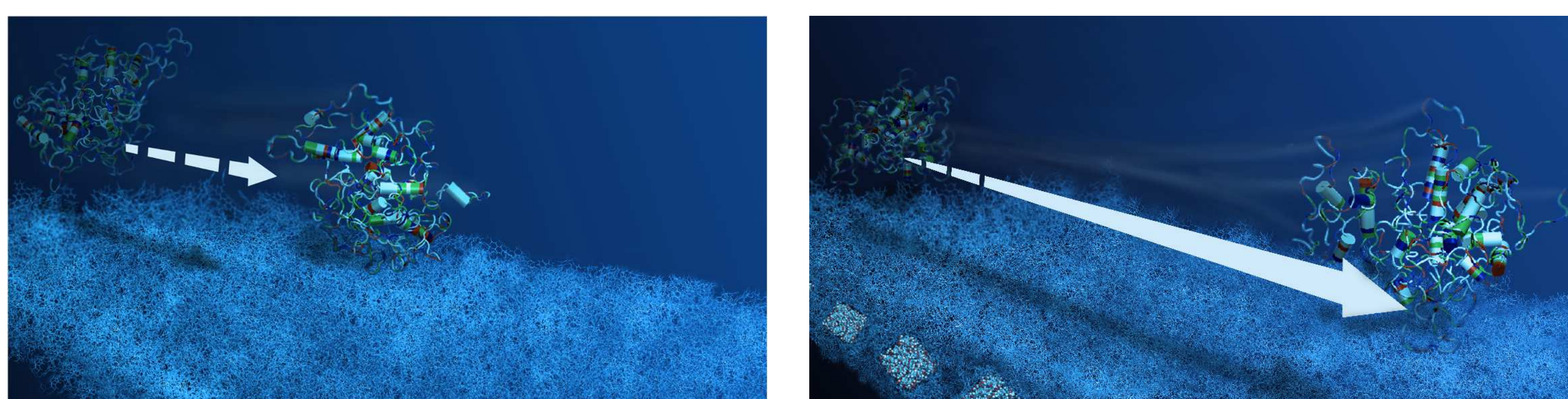
CNTによってポリアミド部分が僅かに固くなることで塩の侵入を防ぐ

→ **優れた脱塩性**

PAがCNTの周りに配向し、新たなPAナノ構造配列が発現

→ **優れた透水性**

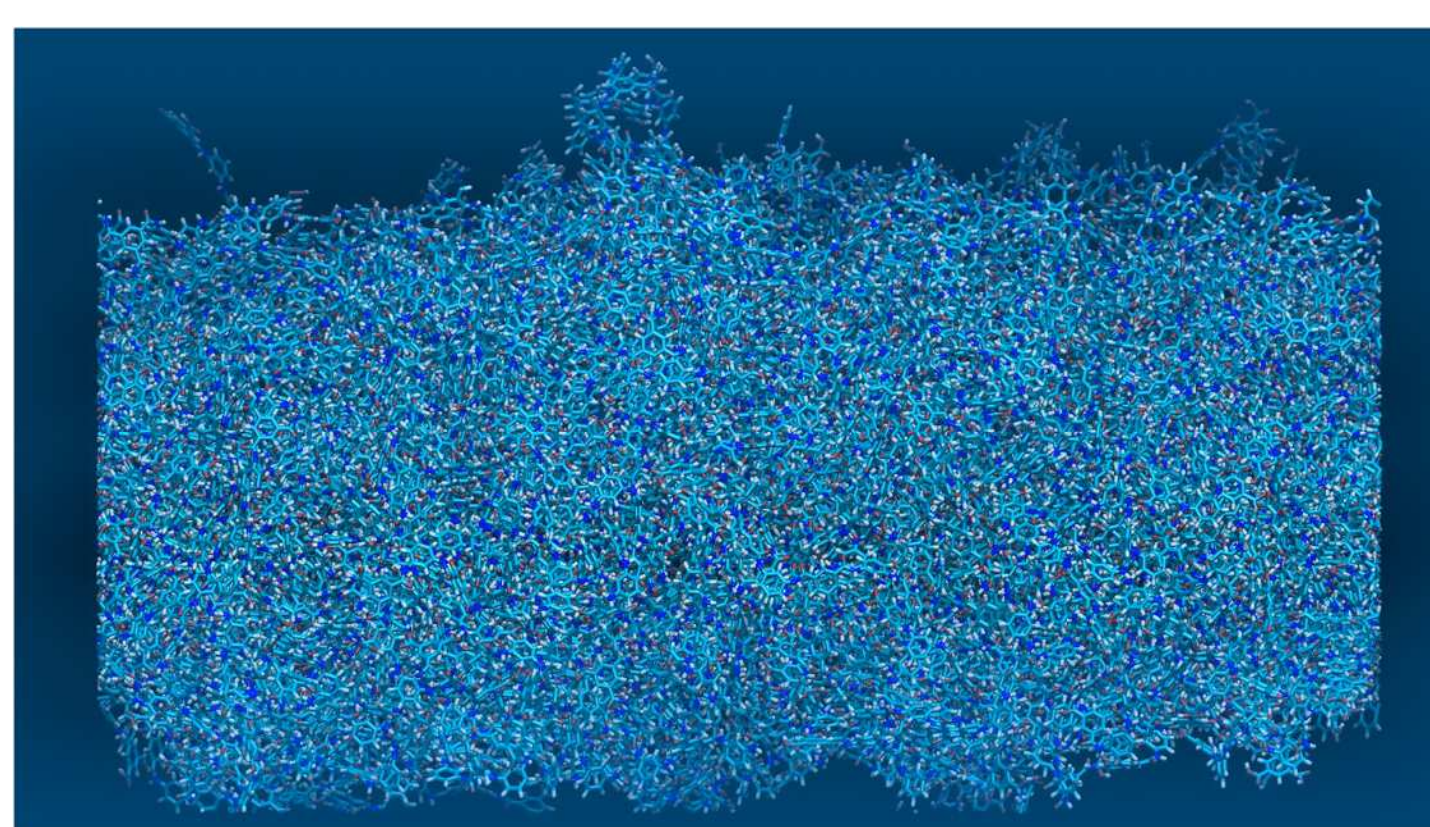
## CNF/PA複合膜のBSAファウリングシミュレーション



PAからCNFへの電荷移動により膜表面に界面水が発生し、ファウラント付着低減

→ **優れた耐ファウリング性**

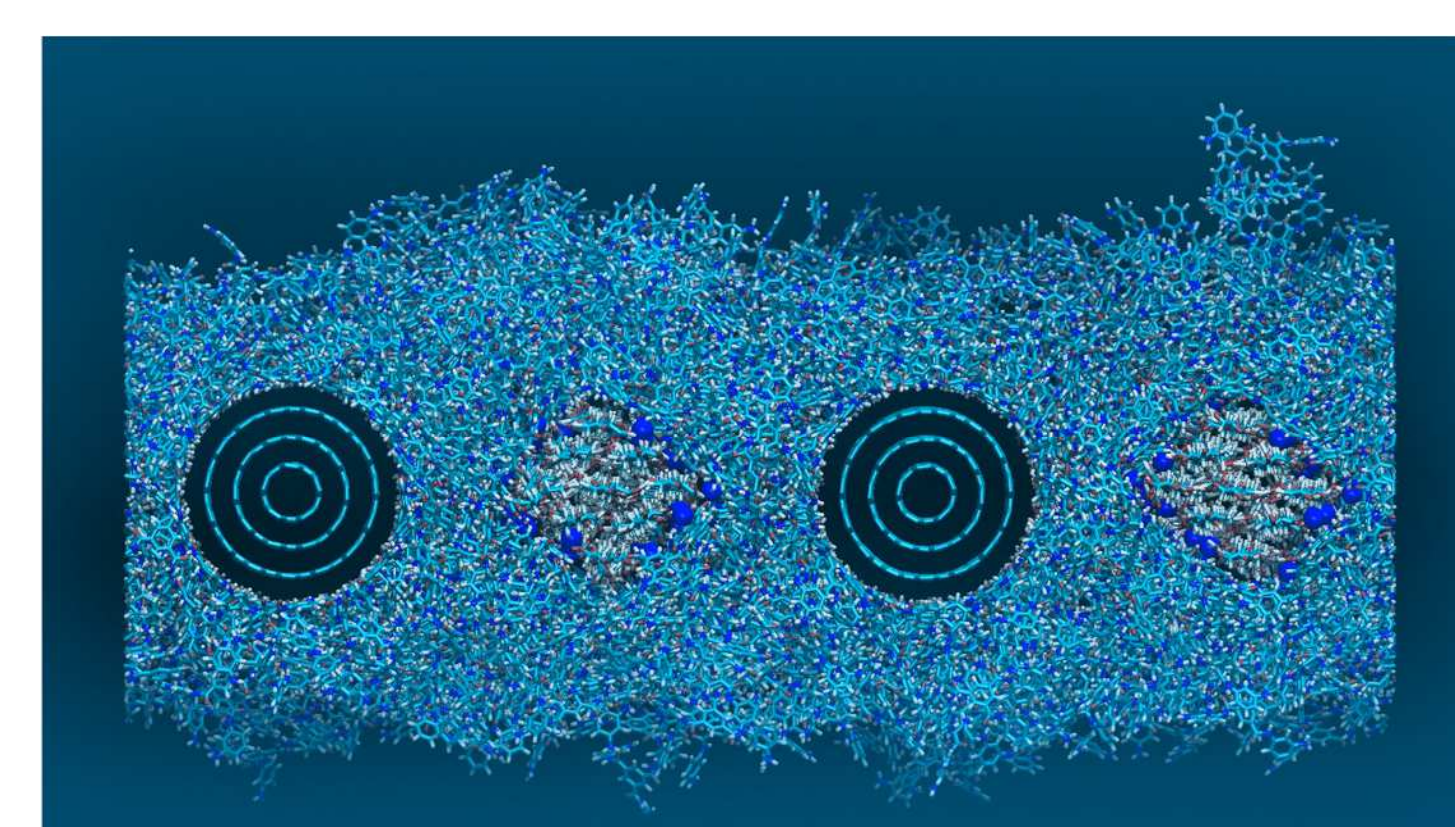
## CNT+CNF/PA複合膜のBSAファウリングシミュレーション



従来型RO膜



初期状態 MD後  
BSAは膜に付着

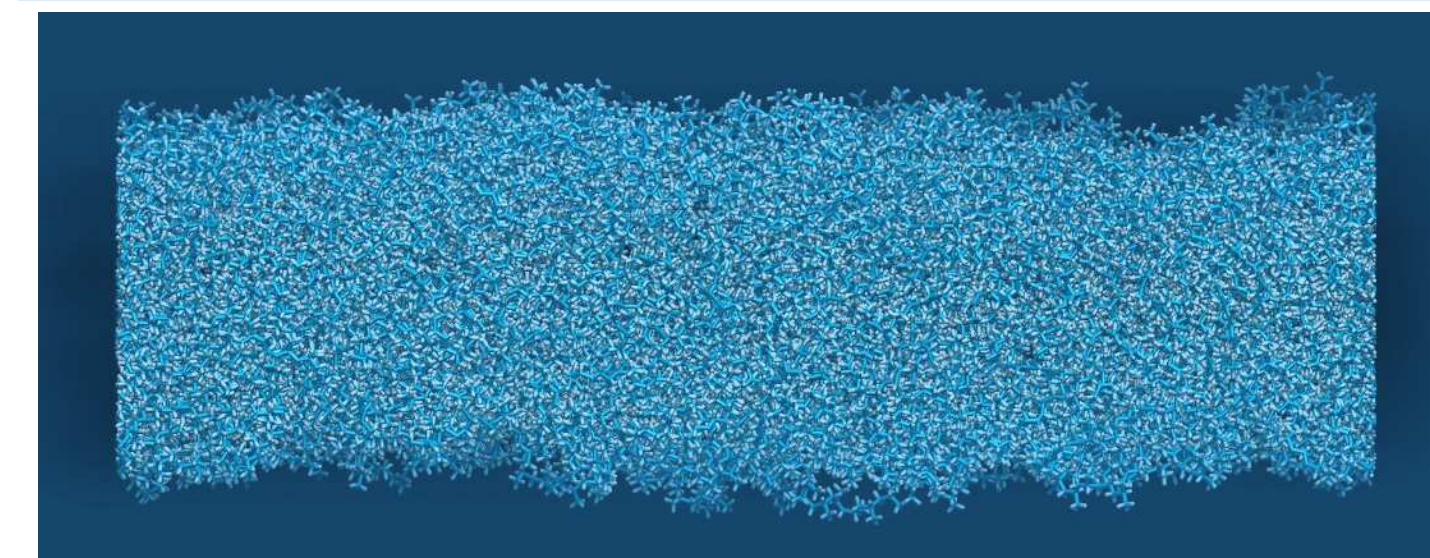


CNT+CNF/PA複合膜



初期状態 MD後  
BSAが膜から離れる

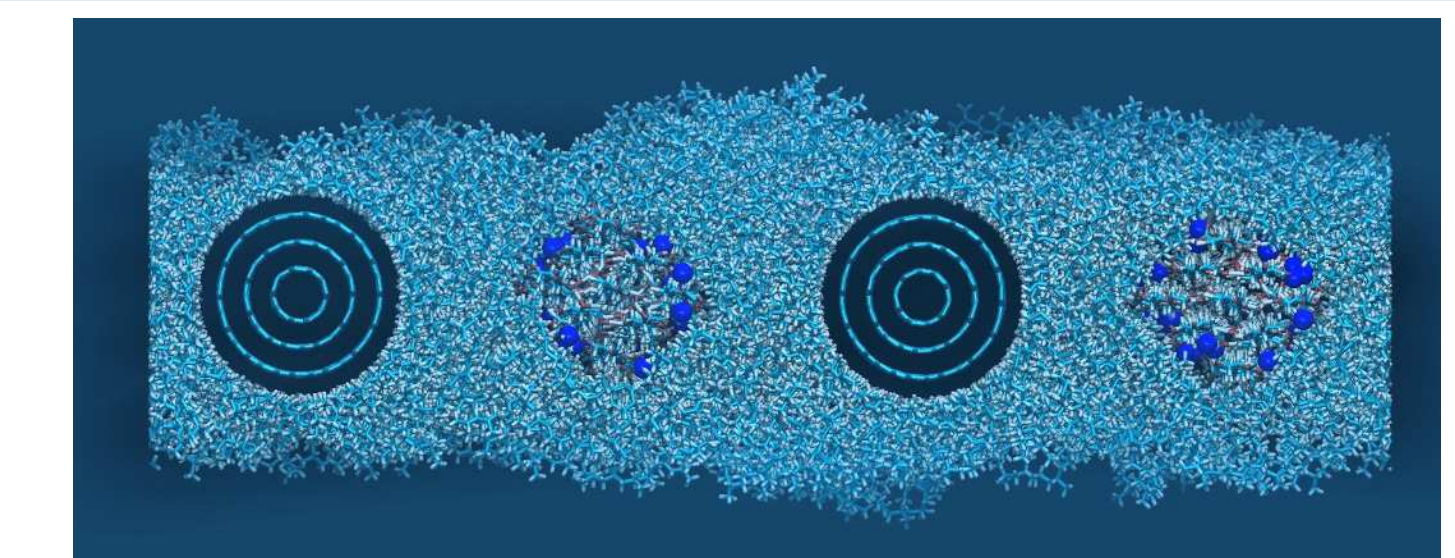
## CNT+CNF/PPスパーサーのBSAファウリングシミュレーション



PPスパーサー



初期状態 MD後  
BSAはスパーサーに付着

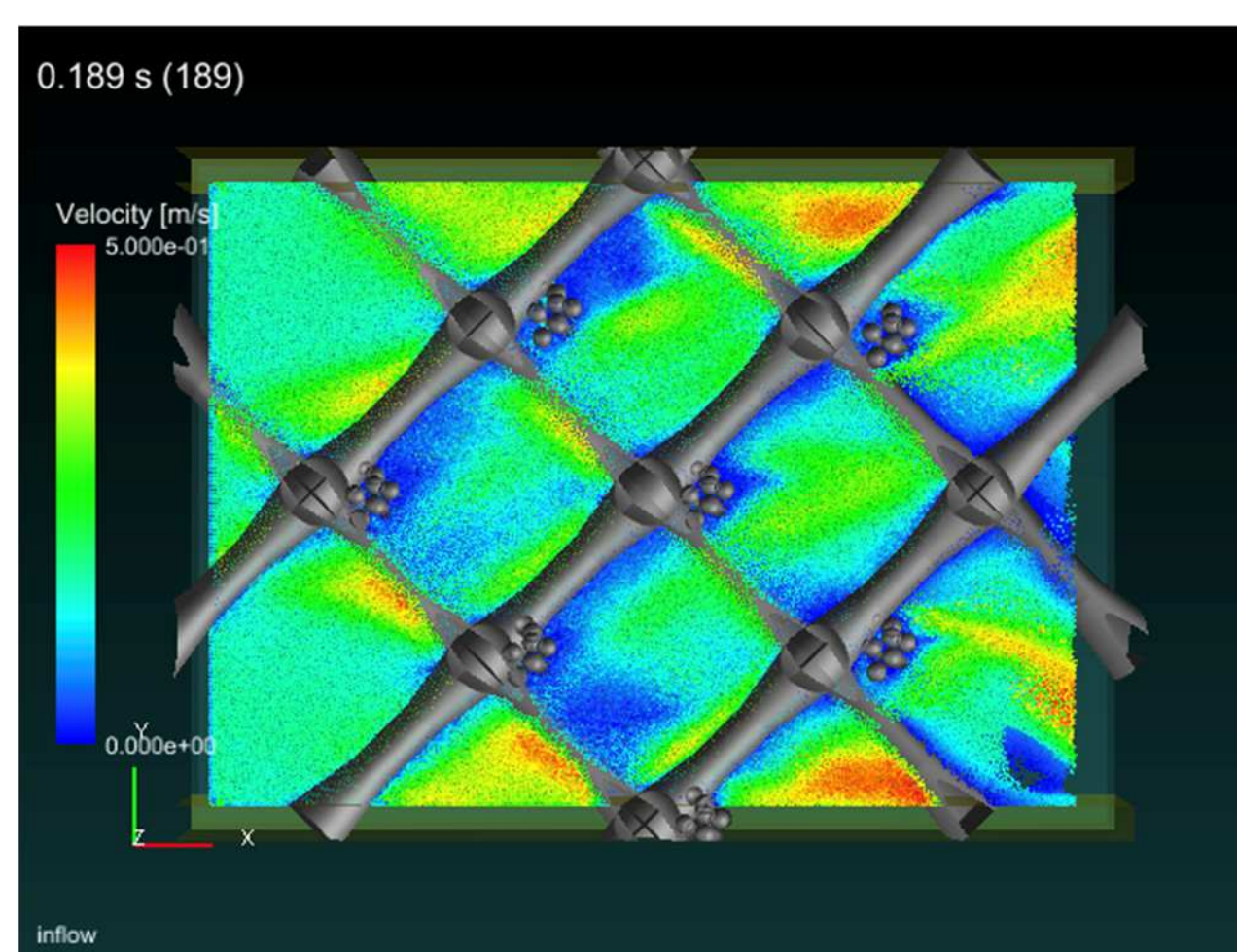


CNT+CNF/PP複合スパーサー

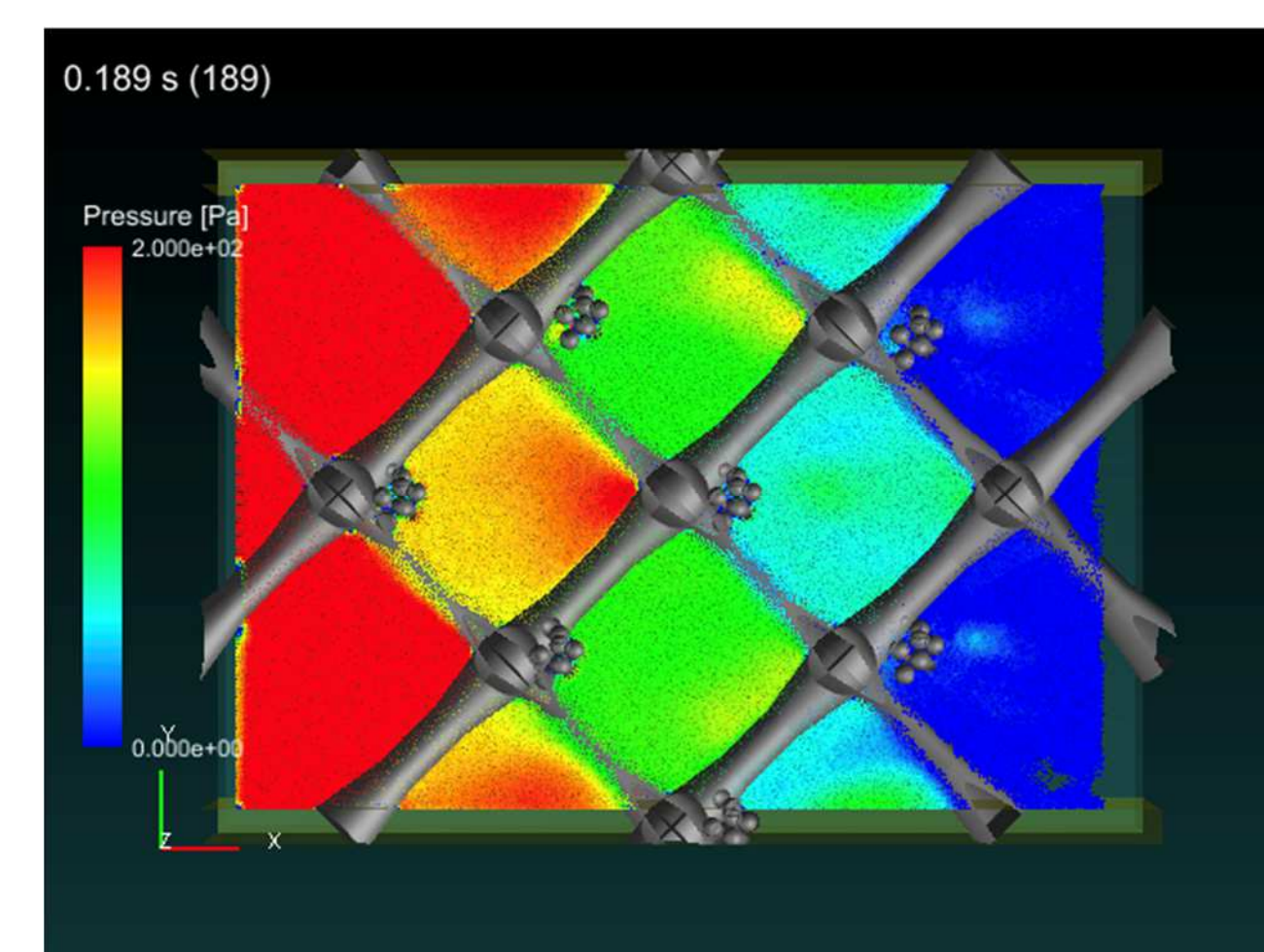


初期状態 MD後  
BSAがスパーサーから離れる

## スパーサーの流体シミュレーション



速度分布



圧力分布

### 【今後の展開】

今後、膜のモジュール化によりスケールはナノからマクロへ推移するため、マルチスケールで水処理膜の特性・メカニズムを明らかにする

利用ソフトウェア：lammps

計算機：信州大学スパコン、九州大学スパコン ITO

問合せ先

一般財団法人高度情報科学技術研究機構  
計算科学技術部 手島正吾 山中綾香

Tel: 03-6433-0670

E-mail: yamanaka@rist.or.jp

©2021 Global Aqua Innovation Center, Shinshu University