

# 海水淡水化・水処理を省エネルギー化する 高分子膜のモデリング技術

高羽 洋充 先進工学部 環境化学科 教授

キーワード: 膜分離, 分子動力学法, 膜設計, 計算化学, 透過, 選択分離

**概要** 本技術は、独自開発したプログラムによって実施されるモデリング技術を利用することで、省エネルギー化を実現する有望な材料を効率よく見つけることを可能とします。特に、圧力差を駆動力とする逆浸透膜、濃度勾配差を駆動力とする正浸透膜を分子レベルで再現できる技術の開発に成功しました。海水淡水化逆浸透膜の理論的な性能評価や、膜蒸留法における膜材のモデリングなどに応用可能です。

**アピールポイント**

- ◆ 圧力差を駆動力とする膜透過現象を、精度よく分子レベルで再現できる。
- ◆ 逆浸透膜、ナノろ過膜、正浸透膜、気体分離膜、膜蒸留に対応している。
- ◆ 水に関連するプロセスで利用可能なあらゆる高分子膜材料に対応できる。
- ◆ 第三成分の共存、操作条件変更、などの影響を仮想実験できる。

## 独自の膜透過用分子計算プログラム

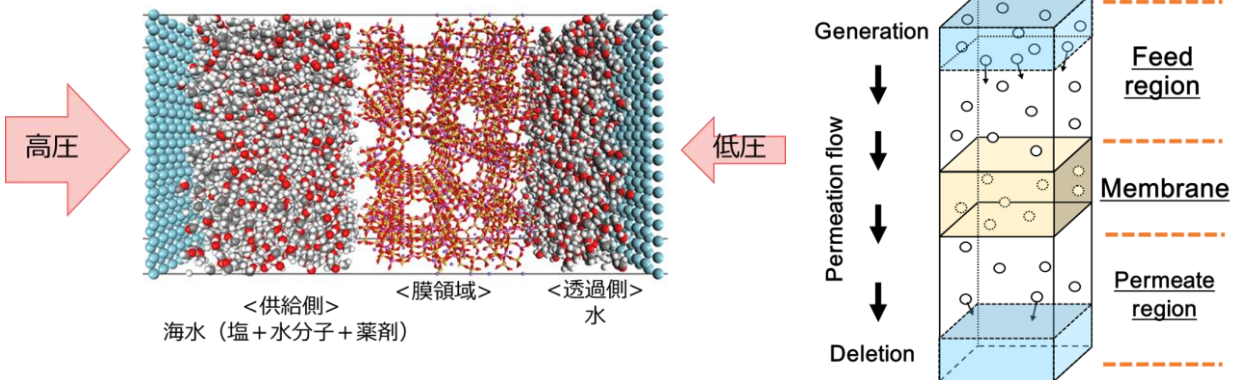
### PermMD:

#### 液相分離系Fluctuating-wall分子動力学法

- ・可動壁で一定の圧力を液相に付加
- ・一定の差圧下での透過現象をシミュレーションできる非平衡分子動力学法。
- ・逆浸透膜、ナノろ過膜、限外濾過膜
- ・逆浸透法、浸透気化法に対応

#### ガス分離系：非平衡分子動力学法

- ・ガス分子を気相に発生と削除を繰り返す
- ・一定の差圧下での透過現象をシミュレーションできる非平衡分子動力学法。
- ・逆浸透膜、ナノろ過膜、限外濾過膜
- ・ガス透過法、蒸気透過法に対応



**利用・用途  
応用分野**

- ◆ 膜構造の最適化、劣化挙動の解明、ファウリング対策、共存種の影響解明、操作条件最適化
- ◆ 企業での高分子膜材料の開発段階での活用(海水淡水化、廃水処理、ガス分離、電池の電解)
- ◆ 化学系企業における分離膜素材の開発段階での活用
- ◆ 処理プロセスに適した分離膜設計指針の明確化

**関連情報**

- 関連論文 = 「水処理用分離膜の開発最前線」、株式会社シーエムシー出版、2020年12月22日  
= 高羽洋充ら、「コンピュータ化学の膜分離への応用」、分離技術学会誌、50(5) (2020)30-36.  
= H. Takaba et al, "Molecular Simulation of Pressure-driven Fluid Flow in Nanoporous Membranes", J. Chem. Phys., 127 (2007) 054073.
- 関連 URL = 研究室の紹介, <http://www.ns.kogakuin.ac.jp/~bt13452/>



環境計算化学工学研究室

# 海水淡水化・水処理を省エネルギー化する 高分子膜のモデリング技術

高羽 洋充 先進工学部 環境化学科 教授

キーワード: 膜分離, 分子動力学法, 膜設計, 計算化学, 透過, 選択分離

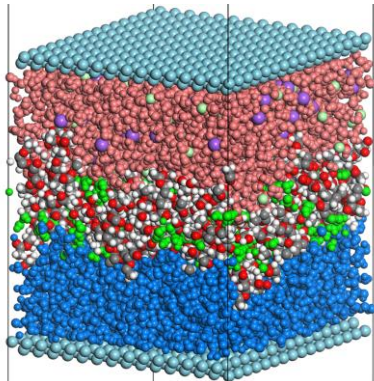
## 独自開発プログラムの特徴

- ◆ 全原子計算(元素種、分子種に制限なし)
- ◆ 任意の差圧・温度を設定可能
- ◆ 並列化計算で数十万原子まで対応
- ◆ 豊富な適用例・計算ノウハウ

## モデリングから得られる情報

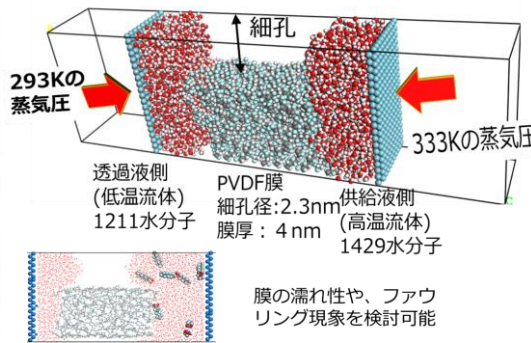
- ◆ 透過流束、分離係数
- ◆ 透過分子のダイナミクス、透過経路解析
- ◆ ファウリング過程のダイナミクス
- ◆ 分離膜の安定分子構造

## 酢酸セルロース膜による海水淡水化

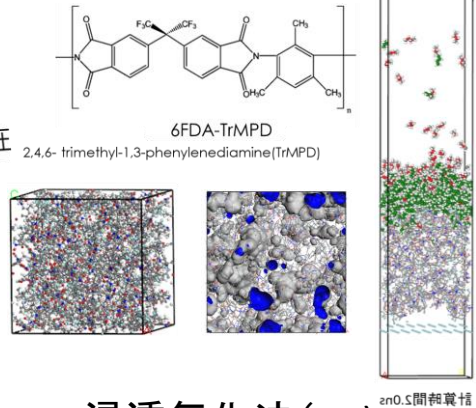


有機溶媒分離

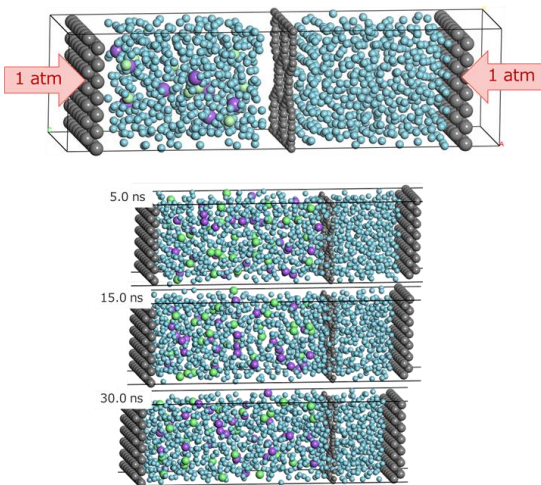
## 膜蒸留のモデリング技術



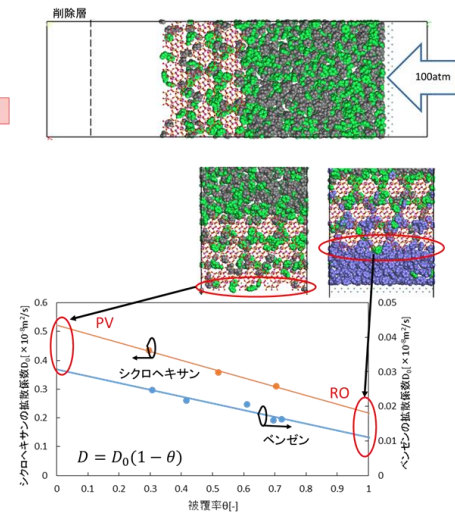
## ポリイミド膜ガス分離



## 正浸透膜法 (FO)



## 浸透気化法 (PV)



## 個別の応用について

- ◆ 様々な高分子膜構造・膜分離プロセスをシミュレーションできるPermMDを提供できます。
- ◆ シミュレーションのノウハウに基づく、モデリング技術を提供できます。

工学院大学 産学連携室

〒163-8677 東京都新宿区西新宿一丁目24番2号 〒192-0015 東京都八王子市中野町2665-1

TEL:03-3340-3440 FAX:03-3342-5304

TEL:042-628-4940 FAX:042-626-6726

E-Mail: sangaku@sc.kogakuin.ac.jp URL: https://www.kogakuin.ac.jp