

超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト(超超PJ)  
最終成果報告会

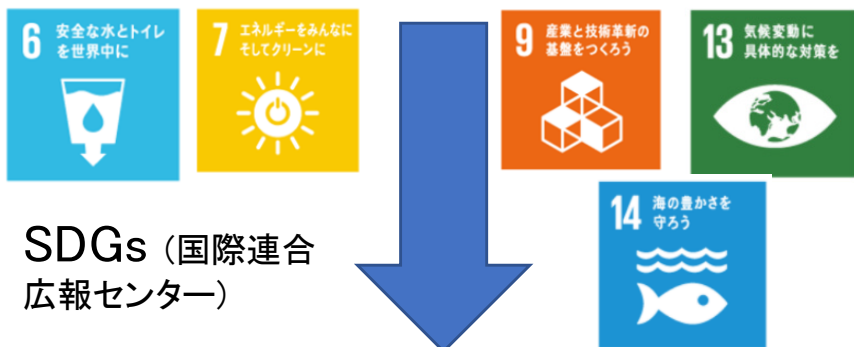
# 「革新分離材料の研究開発」

2022年1月19日(水)

東レ株式会社  
茂本 勇

## 人類共通の課題

地球温暖化や環境汚染、資源・エネルギー・食料・水の供給不足などの克服

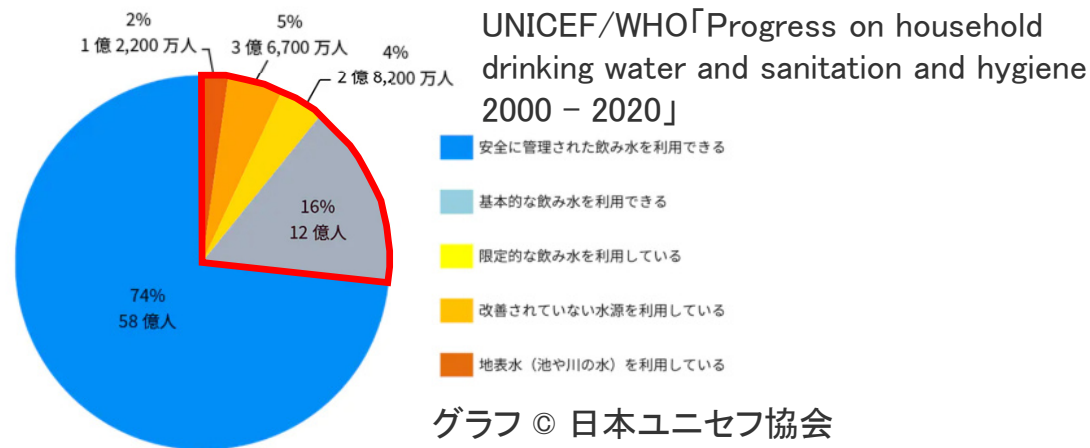


**機能性分離膜**は、飲料水の製造やCO2分離、省エネ化など上記課題へのソリューションとなる技術

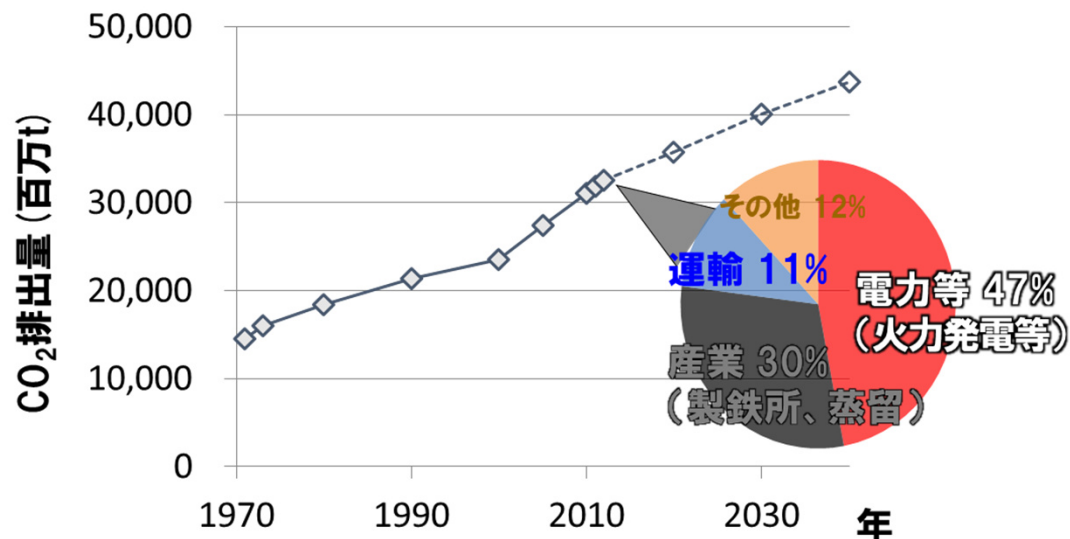
多様な分離対象に対応するため、それに応じた**革新分離材料の開発**が必要

## ■ 世界の人々の飲み水へのアクセス状況

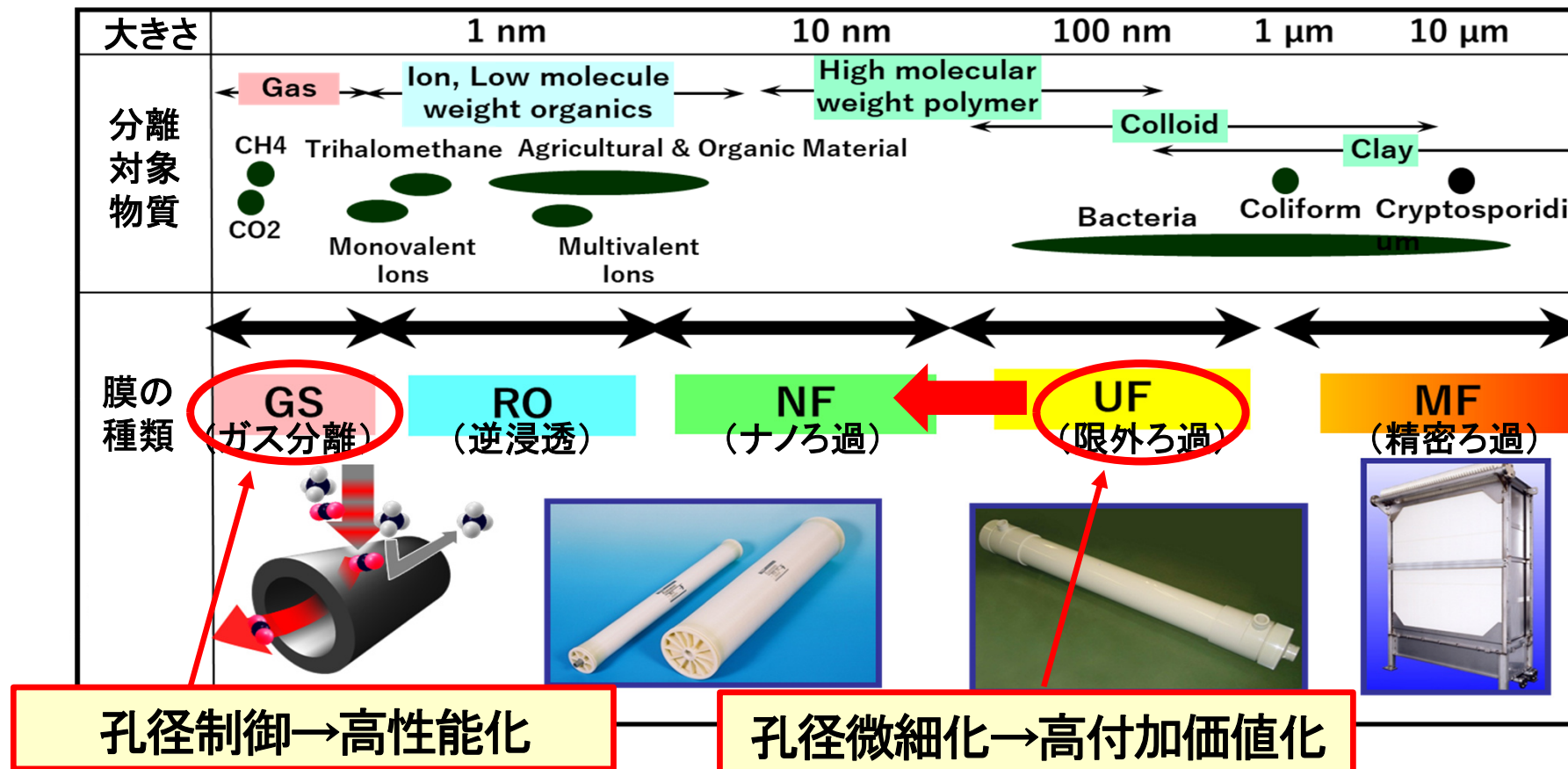
2020年時点、世界では20億人が安全に管理された飲み水を使用できていない



## ■ 世界のCO2排出量の推移 (エネルギー・経済統計要覧 2015)



# テーマの背景(市場面)



機能性分離膜の孔形成を自在に制御できれば

- ① 高付加価値化→高価格市場への進出(例:UF膜の孔微細化)
- ② 高性能化→新規市場の創出(例:CO<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub>分離膜)

が可能に

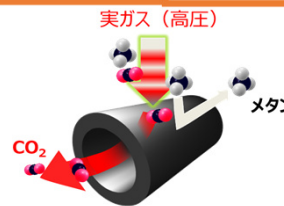
## 開発ターゲット

## 分離対象



溶液(水処理膜)

## 機能性分離膜



ガス(炭素膜)

## 製造技術

NIPS

NIPS(非溶媒  
誘起相分離法)

焼成

## 要求特性

孔径分布

膜耐久性

物質  
選択性

## 課題

①相分離  
挙動

②高分子  
の粘弾性

③ファウリング

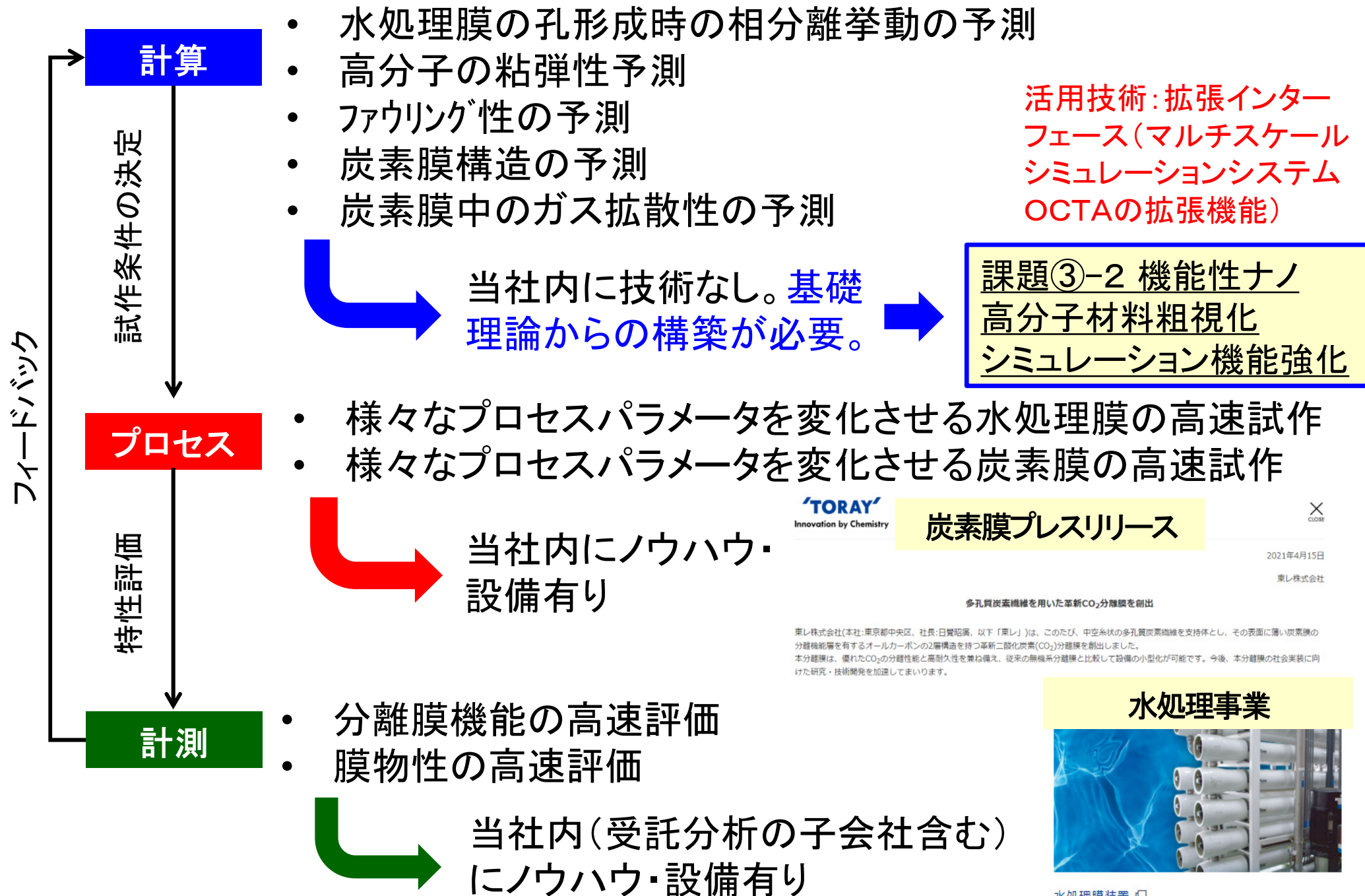
④炭素膜  
構造

⑤ガス  
拡散性

## 研究体制

青柳総括研究主幹(①), 岡崎教授(①, ③, ④, ⑤), 金子特任研究員(①, ③), 嶺澤特任研究員(④, ⑤), 増淵教授(②), 川勝教授(①), 本田博士(①), 吉元, 北畑(①, ②, ③, ④, ⑤)

# 当社の技術開発体制と超超PJでの取組みの関係



# テーマの目標

当社に不足しているシミュレーション技術を超超PJで構築し、新規分離膜開発を加速させる。具体的な課題は以下の5点:

- ① 水処理膜の孔形成時の相分離挙動の予測
- ② 高分子の粘弾性予測
- ③ ファウリング性の予測
- ④ 炭素膜構造の予測
- ⑤ 炭素膜中のガス拡散性の予測

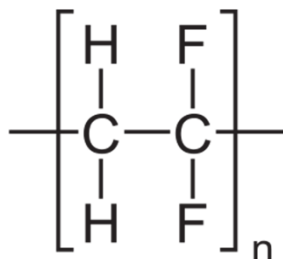
## 目標

上記5点の課題解決に資するシミュレーション技術を確立し、革新分離材料の開発を加速する。

## モデル材料

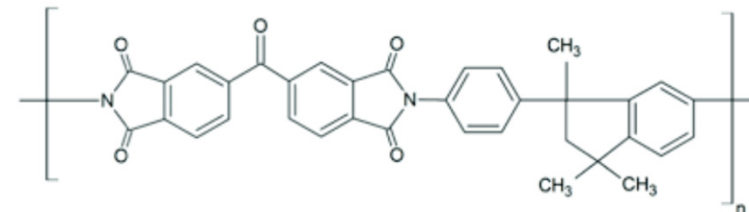
水処理膜:

PolyVinylidene Fluoride  
(PVDF)



ガス分離炭素膜(前駆体):

Matrimid®

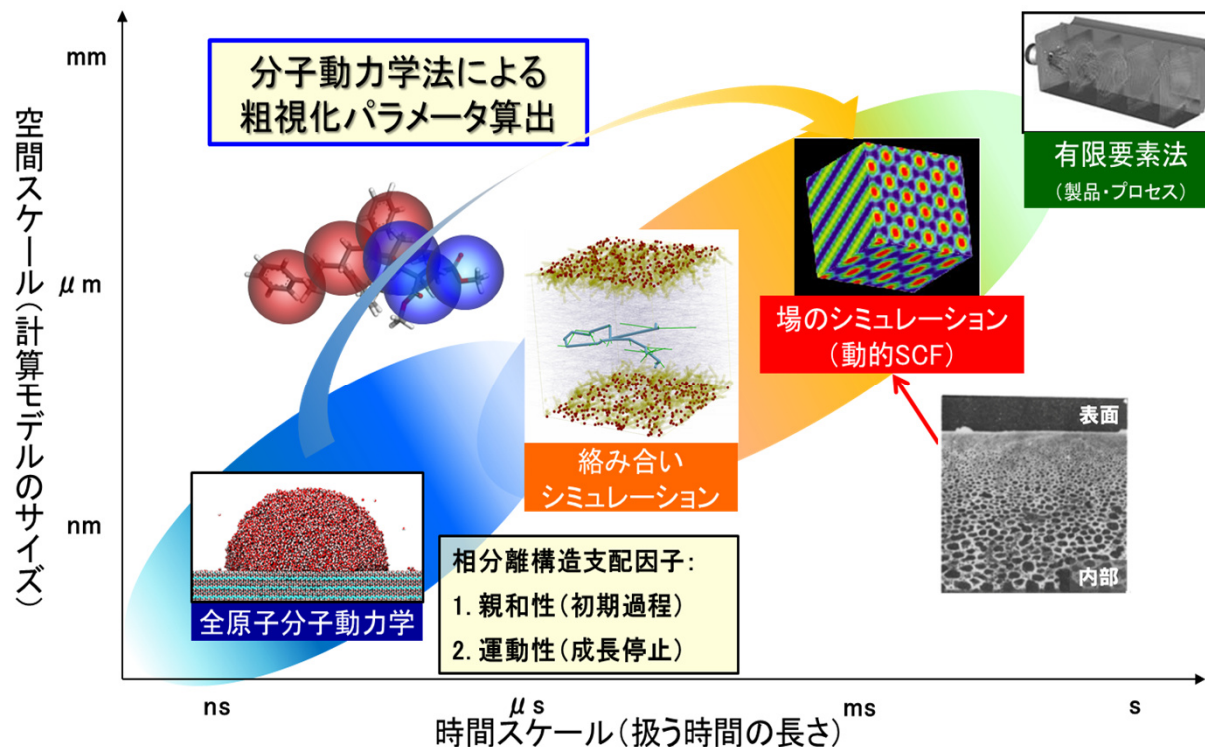




# 超超PJにおける開発の方向性

- ①水処理膜の孔形成時の相分離挙動の予測
- ②高分子の粘弾性予測
- マルチスケールシミュレーション技術の構築
  
- ③ファウリング性の予測
- ④炭素膜構造の予測
- ⑤炭素膜中のガス拡散性の予測
- 分子シミュレーション技術の構築

これらのシミュレーション技術を  
を組合せ設計期間短縮



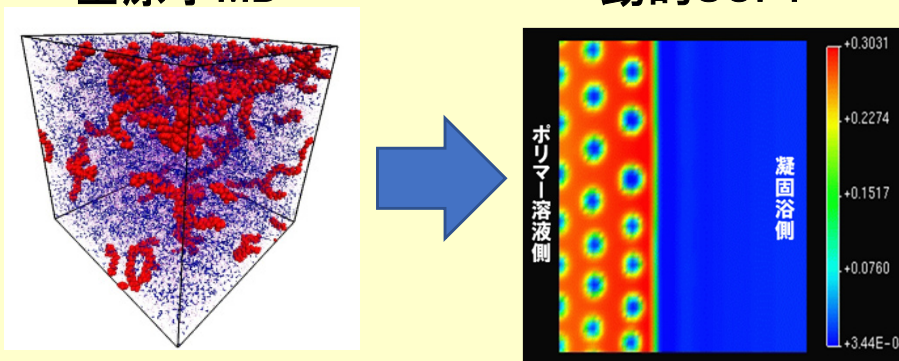
# 超超PJにおける開発の取り組み

## 計算

## 課題③-2 機能性ナノ高分子材料粗視化シミュレーション機能強化

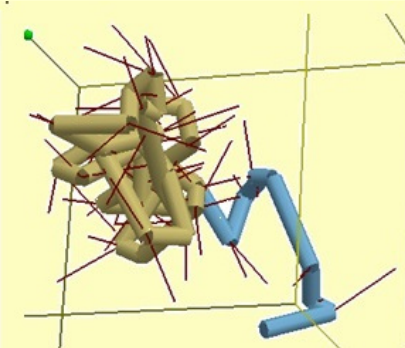
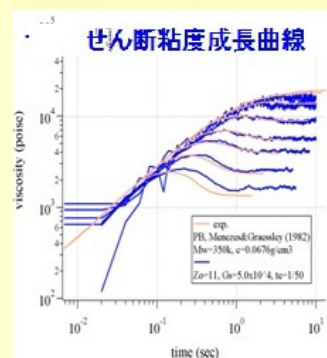
### ①相分離挙動

NIPS孔形成シミュレーション(東大・東北大・  
全原子MD 動的SCFT 日本ゼオン)



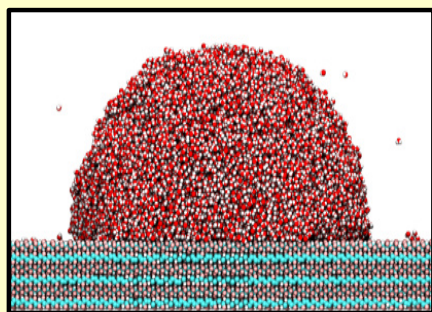
### ②高分子粘弾性

高速分子レオロジーシミュレーション(名大)

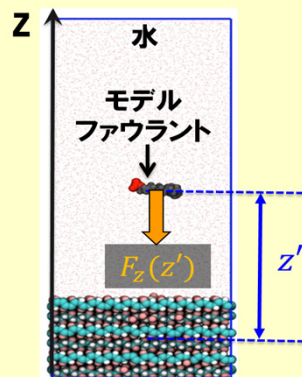


### ③ファウリング性

膜の濡れ性予測  
(東大)

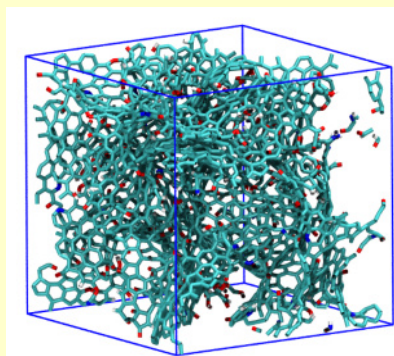


吸着自由エネルギー  
評価(東大)



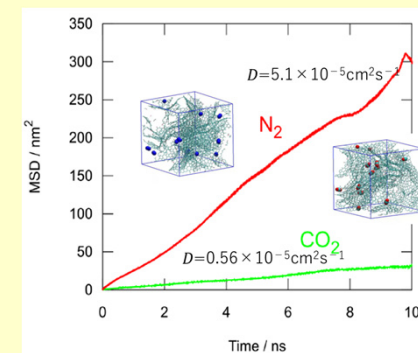
### ④炭素膜構造

炭素膜モデリング  
技術(東大)



### ⑤ガス拡散性

拡散係数予測  
(東大)





# 開発成果の概要

## 目標の達成状況

- ①相分離挙動の予測, ②高分子の粘弾性予測, ③ファウリング性の予測,
  - ④炭素膜構造の予測, ⑤炭素膜中のガス拡散性の予測
- 設計期間短縮に資するシミュレーション技術構築に成功
- 日本化学会第26回技術進歩賞受賞(2020年度)



設計期間短縮(目標値: 1/20) → 目標達成見込み

## 他企業とのPJ内連携

日本ゼオン(株)本田隆博士: 拡張OCTAに当社が必要とする機能を新たに実装いただいた

## プレスリリース

2件

### 2020年度日本化学会 第26回技術進歩賞受賞

先端素材高速開発技術研究組合(ADMAT)の研究員であった東レ株式会社/北畑雅弘氏は、「分子シミュレーションを用いたフッ素ポリマーの界面自由エネルギー予測技術の開発」により、公益社団法人日本化学会より「第26回(2020年度)技術進歩賞」を受賞しました。

この成果は、NEDOプロジェクト(超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト)によるものです。

詳しくは、次のニュースリリースをご覧ください。

東レ株式会社URL:

[https://cs2.toray.co.jp/news/toray/newsrrs01.nsf/0/2D6DF045566376F1492586A0002165F8?](https://cs2.toray.co.jp/news/toray/newsrrs01.nsf/0/2D6DF045566376F1492586A0002165F8?open)

open

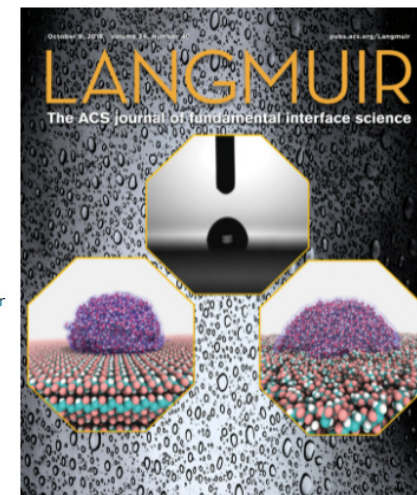
2018.11.14

アメリカ化学会『LANGMUIR』の表紙を飾りました。

当組合の北畑雅弘と名古屋大学の岡崎進教授、Tseden Taddese研究員がアメリカ化学会(American Chemical Society, 略称ACS)の学術誌『LANGMUIR』に発表した論文“Molecular Dynamics Study on Wettability of Poly(vinylidene fluoride) Crystalline and Amorphous Surfaces”が学術誌のCover Artの一つに選ばれました。

この論文で、高分子分離膜等に用いられるポリフッ化ビニリデン(PVDF)表面における微視構造が、濡れ性に与える影響を分子シミュレーションにより解明しました。本論文の技術による、高分子膜表面の濡れ性制御技術の開発への貢献が期待されます。

Langmuir, 2018, 34 (40), pp 12214–12223



ACS Publications

www.acs.org

## 論文・総説 9件

- [1] M. Kitabata, T. Taddese, S. Okazaki, *Langmuir*, **34**, 12214–12223 (2018).
- [2] T. Taddese, M. Kitabata, S. Okazaki, *J. Chem. Phys.*, **150**, 184505 (2019).
- [3] M. Kitabata, T. Taddese, S. Okazaki, *Langmuir*, **36**, 3633–3644 (2020).
- [4] 北畑雅弘, 山本海, 企業における分子シミュレーション活用事例, 徳満勝久監修 ポリマーアロイ・ポリマーブレンドー設計技術と実用化事例一, シーエムシー出版 (2020).
- [5] Y. Masubuchi, D. Vlassopoulos, G. Ianniruberto, G. Marrucci, *Journal of Rheology*, **65**, 213 (2020).
- [6] 茂本勇, 高分子材料シミュレーションとインフォマティクスとの連携, 高分子 (2020).
- [7] 北畑雅弘, 両親媒性分子会合体/溶液および固体高分子/溶液間に働く界面張力の分子論的研究, アンサンブル (2021).
- [8] Y. Masubuchi, G. Ianniruberto, G. Marrucci, *Nihon Reoroji Gakkaishi*, **49**, 171-178 (2021).
- [9] L. Yang, T. Uneyama, Y. Masubuchi, Y. Doi, *Nihon Reoroji Gakkaishi*, **49**, 267-274 (2021).

## 学会発表 16件(内招待講演4件)

- [1] 北畑雅弘、Tseden Taddese、岡崎進、第11回分子科学討論会(2017)
- [2] T. Taddese, 北畑雅弘, 岡崎進, 第66回高分子討論会(2017)
- [3] 北畑雅弘、Tseden Taddese、岡崎進、第31回分子シミュレーション討論会(2017)
- [4] 北畑雅弘、Tseden Taddese、岡崎進、第67回高分子討論会(2018)
- [5] T. Taddese, 北畑雅弘, 岡崎進, 第67回高分子討論会(2018)
- [6] 北畑雅弘、Tseden Taddese、岡崎進 第32回分子シミュレーション討論会(2018)
- [7] 北畑雅弘、Tseden Taddese、岡崎進、第68回高分子討論会(2019)
- [8] 北畑雅弘、Tseden Taddese、岡崎進、第33回分子シミュレーション討論会(2019)
- [9] T. Taddese, M. Kitabata, S. Okazaki, The 5th International Conference on Molecular Simulation(2019)
- [10] 茂本勇、ポリマー材料フォーラム (2019)
- [11] M. Kitabata, T. Taddese, S. Okazaki, ACS Spring 2020 National Meeting & Exposition(2020)
- [12] 北畑雅弘、2021年度産総研産協対話交流会講習会「富岳時代のHPC」(2021)
- [13] 北畑雅弘、コンピュータによる材料開発・物質設計を考える会(CAMMフォーラム)(2021)
- [14] 金子敏宏、北畑雅弘、岡崎進、第35回分子シミュレーション討論会(2021)
- [15] 嶺澤範行、北畑雅弘、岡崎進、第35回分子シミュレーション討論会(2021)
- [16] 北畑雅弘、日本学術会議 第11回計算力学シンポジウム(2021)

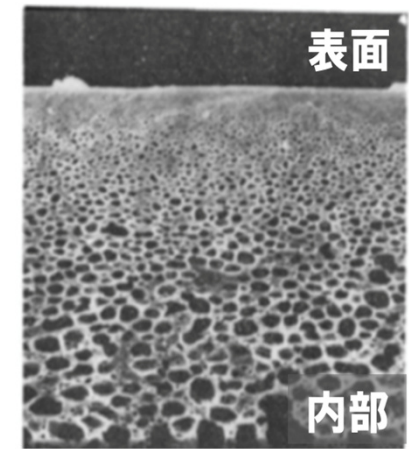
## 非溶媒誘起相分離 (NIPS)

Non-solvent Induced Phase Separation

微多孔膜の代表的な製造プロセス

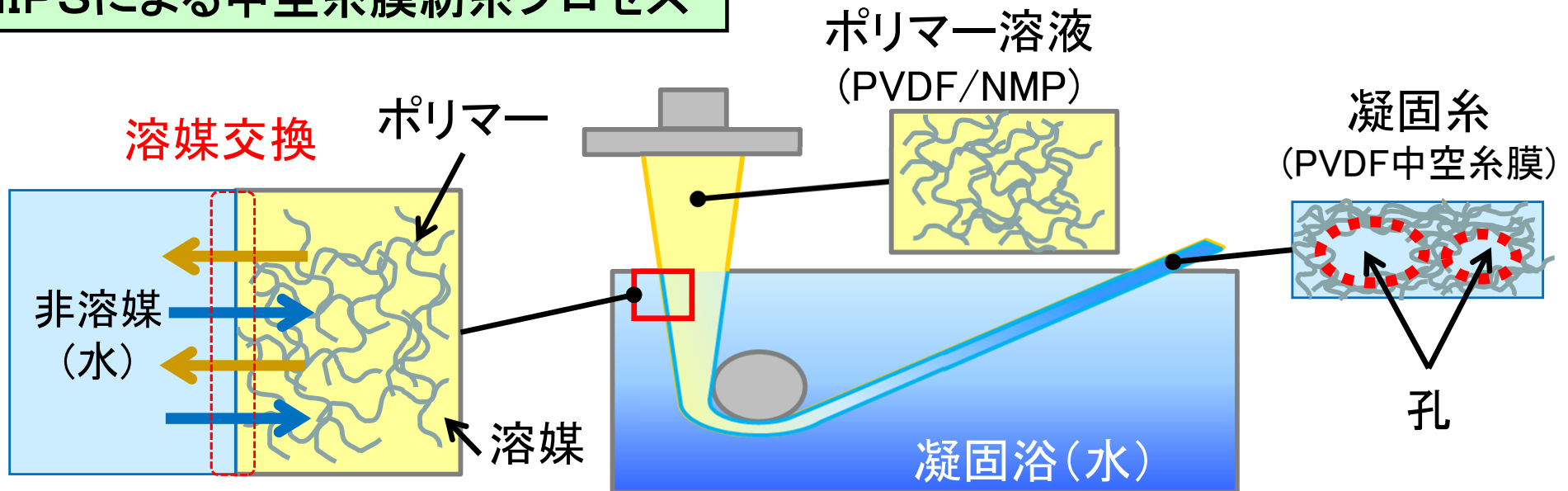


水処理用  
中空糸UF膜



*Desalination, 16, 179 (1975).*

## NIPSによる中空糸膜紡糸プロセス



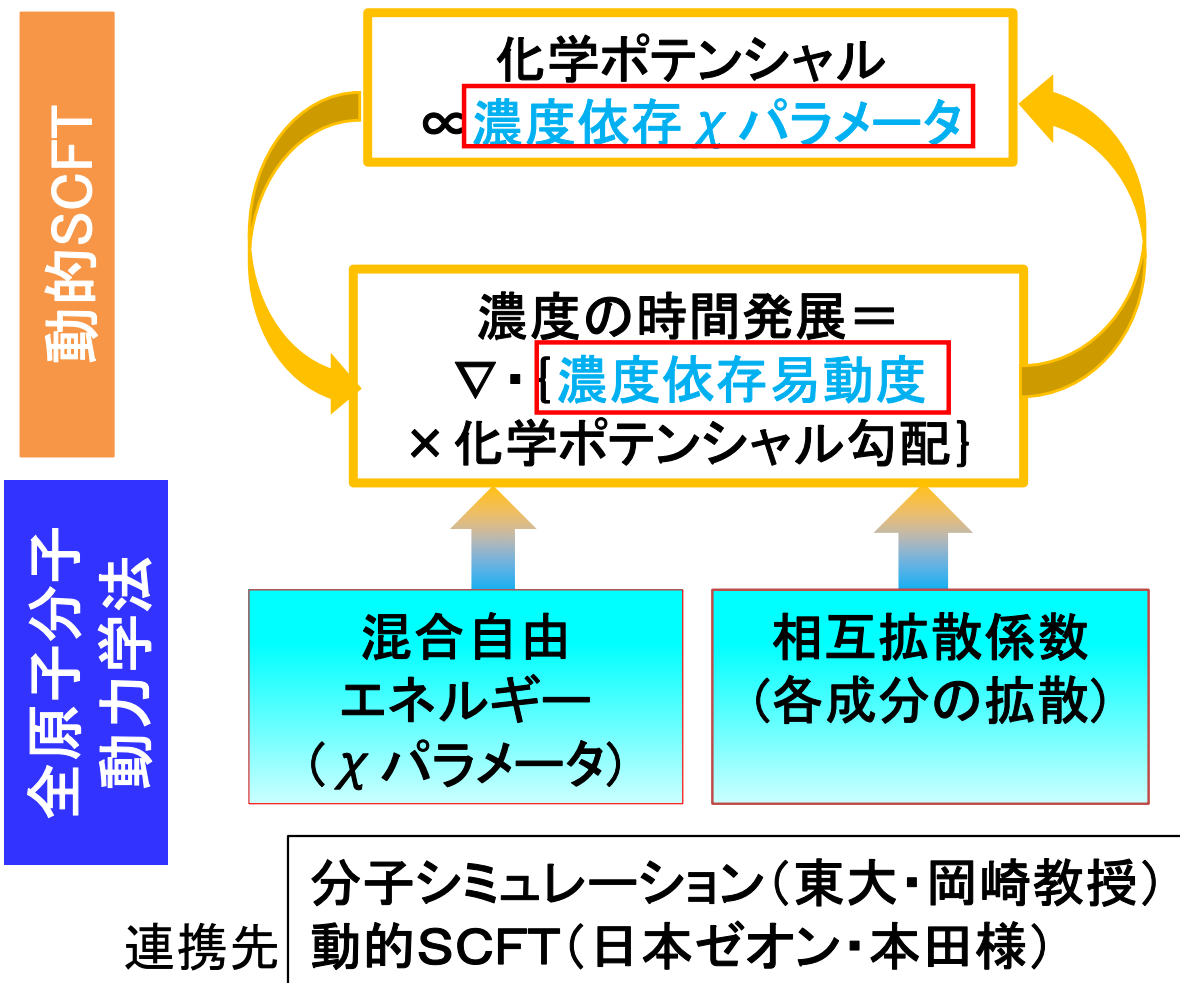
# 開発項目トピックス 水処理膜の孔形成時の相分離挙動の予測

## 目的

分子スケールとメソスケールを繋ぎ合わせるマルチスケールシミュレーションにより、分子レベルの構造の寄与がNIPS孔形成に及ぼす影響を解明する。

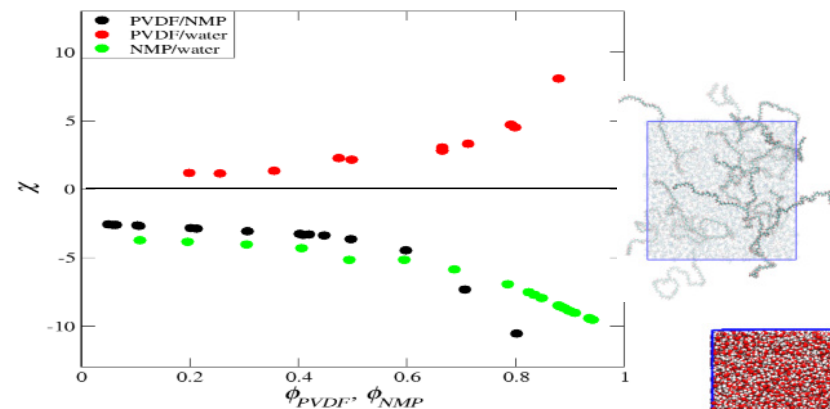
## 成果

全原子シミュレーションで得られた濃度依存パラメータを動的SCFTに適用することで、NIPSによる多孔構造形成を再現可能になった。



濃度依存  $\chi$  パラメータ

$$\chi(\phi_1) = \frac{V_{\text{ref}} \Delta H_m}{kT V_m \phi_1 (1 - \phi_1)}$$



濃度依存易動度

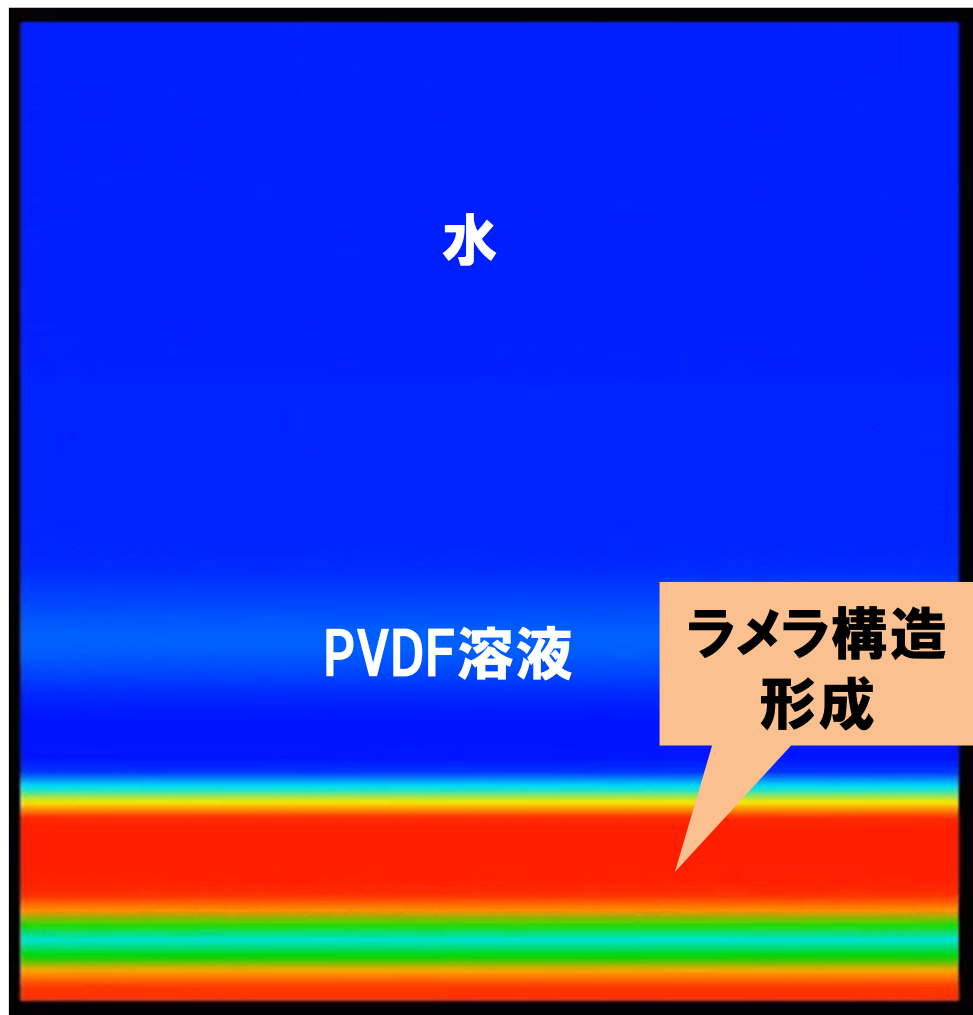
$$L = L_0 \exp(-\alpha c^{\nu})$$



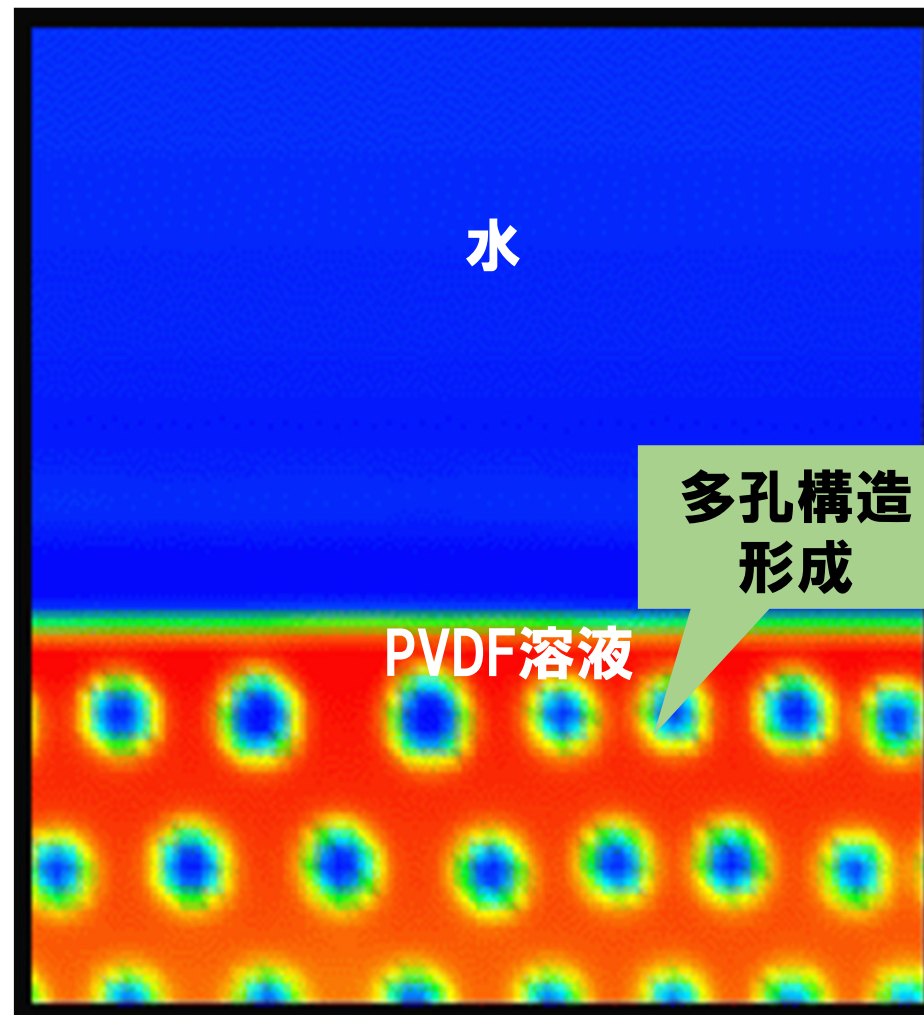
# 開発項目トピックス 水処理膜の孔形成時の相分離挙動の予測

活用技術: 拡張インターフェース(マルチスケールシミュレーションシステムOCTAの拡張機能)

濃度依存パラメータなし



濃度依存パラメータあり



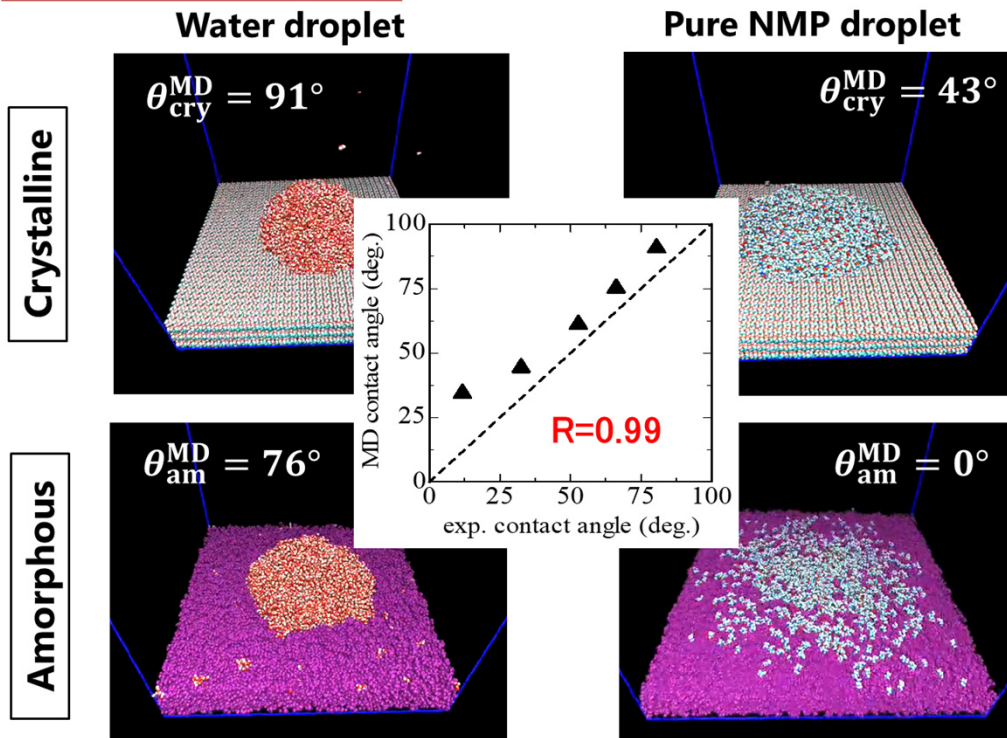
分子描像を考慮したNIPS孔構造の予測が可能に



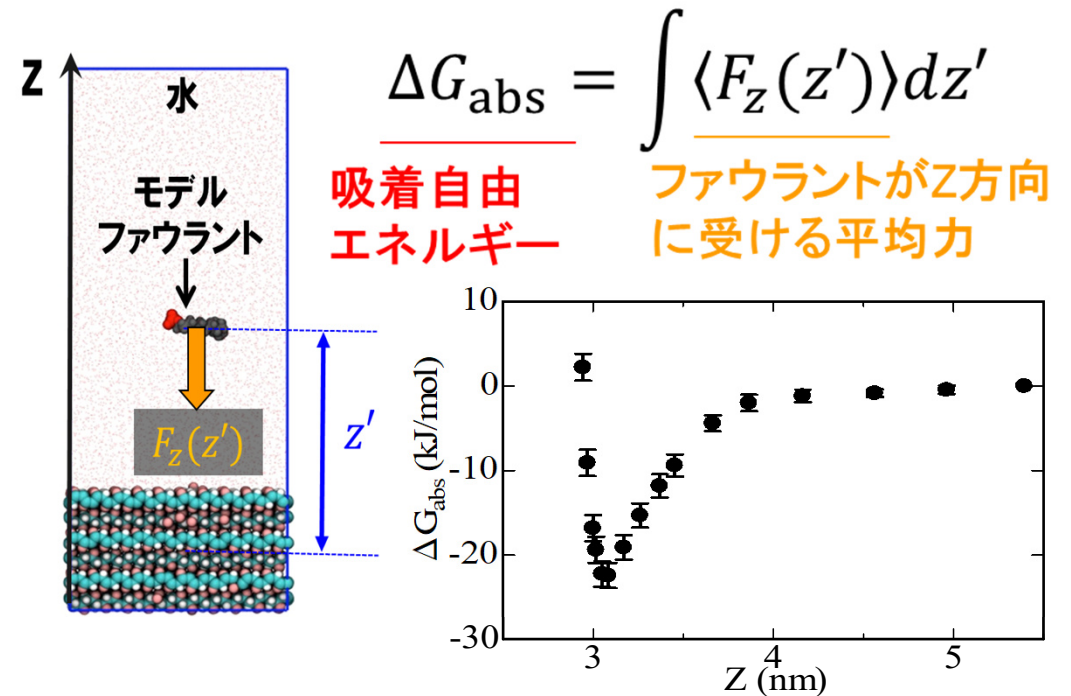
**目的** 分離膜の水処理利用としての重要な課題であるファウリング機構の理解と高耐ファウリング性をもつ分離膜の表面設計技術を構築

**成果** 分子レベルの膜表面構造からマクロな濡れ性を予測する技術およびモデルファウラントの吸着性を評価する技術を確立

## 濡れ性予測



## 吸着自由エネルギー評価



分子レベルの膜表面構造とファウリング性の関係を予測可能に

# 開発項目トピックス 炭素膜構造の予測とその内部でのガス拡散性

**目的** 炭素膜の構造とガス拡散性との関係を分子レベルで明らかにする

**成果** 反応力場を用いた高分子前駆体の熱分解により炭素膜をモデリングし、その内部のガス分子拡散性を評価する技術を確立

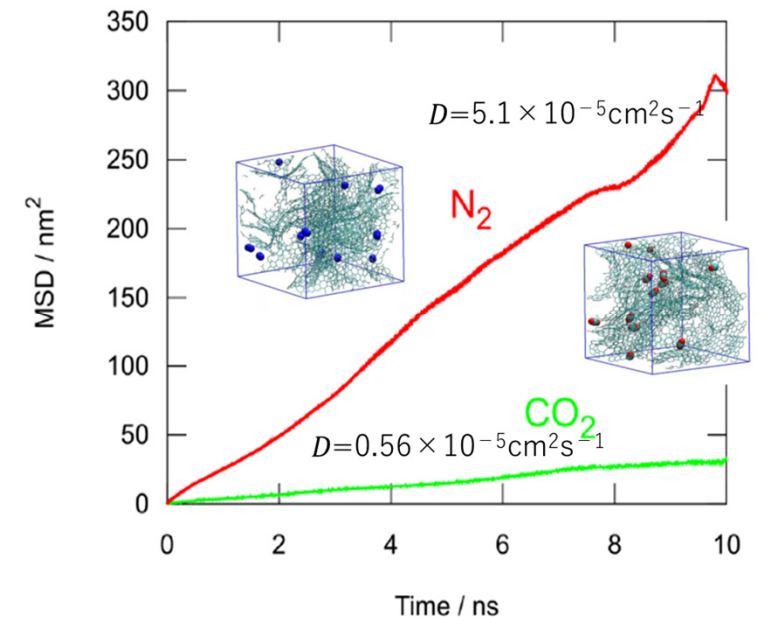
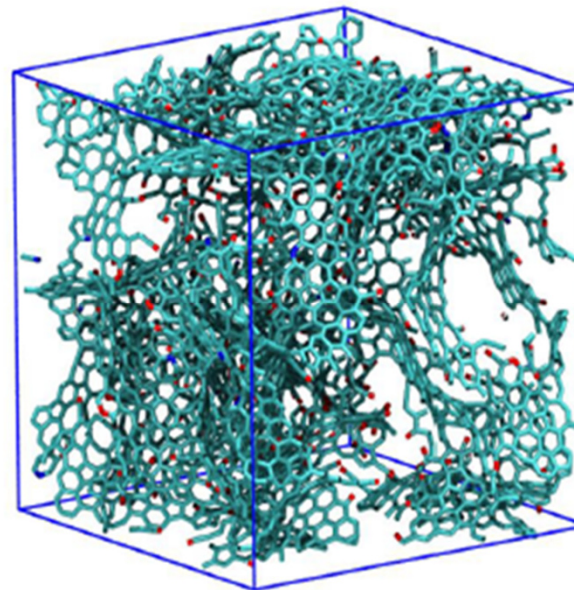
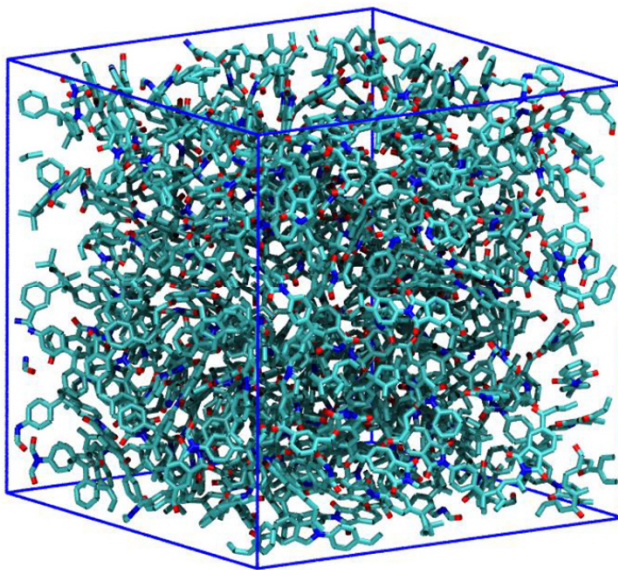
高分子前駆体

反応力場  
熱分解

炭素膜

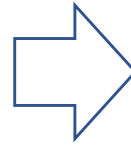
古典力場  
ガス拡散

ガス拡散性評価

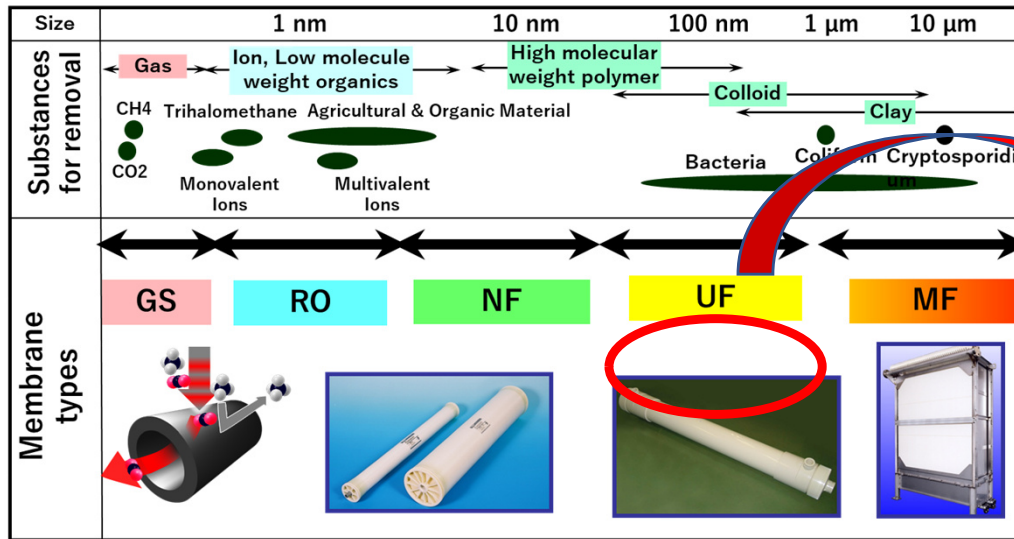


実験では解析困難な分子レベルの細孔とガス拡散性の関係を解明可能に

本PJで開発した  
革新分離材料の計算技術

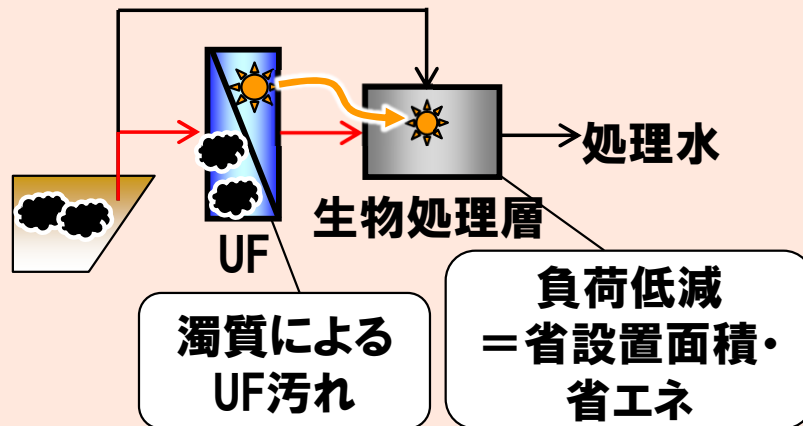


水処理分野、環境分野、  
医療等

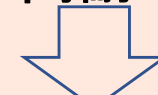


限外濾過膜 (UF膜) の用途拡大  
→ 下廃水処理用途UF膜の開発

## 新規下廃水処理 下廃水の一部をUF膜処理するハイブリッドプロセス



要求特性:  
高濾過流速、高耐ファウリング性



本PJ開発の計算技術を活用し、  
新規UF膜の高速開発



## 〈産総研〉

青柳 岳司

## 〈東京大学〉

岡崎 進、金子 敏宏、嶺澤 範行

## 〈名古屋大学〉

増渕 雄一

## 〈東北大学〉

川勝 年洋

## 〈ADMAT研究員〉

本田 隆 （日本ゼオン株式会社）

吉元 健治、北畑 雅弘 （東レ株式会社）

以上