

MoS₂ 含有ナノ濾過膜の有機溶媒性分離特性に関する研究

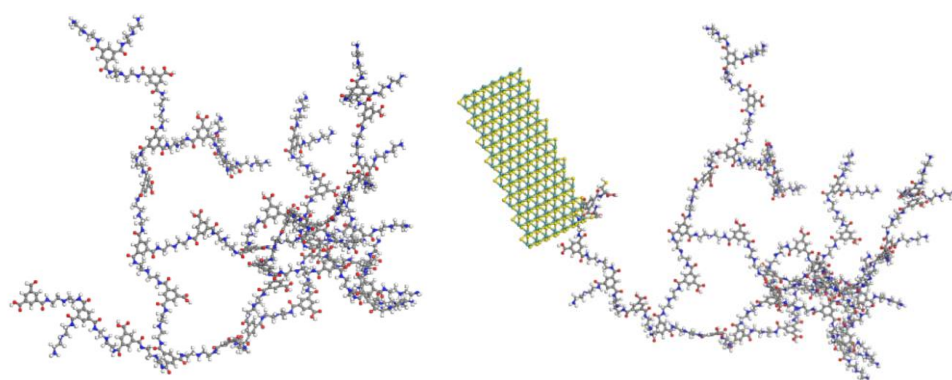
(工学院大先進工¹・工学院大院工²) ○有井 稜¹・樋口 隼人²・宮川 雅也¹・高羽洋充¹

Computational chemistry study on characterization of organic solvent separation using MoS₂ containing nanofiltration membrane(¹*School of Advanced Engineering, Kogakuin University*,
²*Graduate School of Engineering, Kogakuin University*) ○Ryo Arie,¹ Hayato Higuchi,² Masaya Miyagawa,¹ Hiromitsu Takaba¹

The nanofiltration membrane composed of polymer has been used to separate organic solvents, and durability are often spoiled due to swelling. To solve this problem, the inorganic materials are added to the polymer membranes. However, it is difficult to investigate the effect of the additive experimentally, so this research builds a molecular structure of polyamide nanofiltration membrane containing MoS₂ nanosheet. As a result, through the adsorption of methanol simulation using grand canonical Montecarlo simulation of methanol, MoS₂ nanosheet controls the interaction to methanol and influence the amount of adsorption.

Keywords : *Molecular Dynamics; Separation Membrane; Nanosheet; Organic solvent separation*

有機溶媒をナノろ過膜を用いて分離する Organic solvent nanofiltration (OSN) が注目されている。OSN にはポリマー膜が利用されるが、溶媒膨潤による選択性や耐久性の低下が問題となっている。そこで、最近、無機材料などの添加剤をポリマー膜に含有させることで膨潤を封じ込め透過性能を向上させる試みがなされている。¹⁾しかし、ナノろ過膜に含有させた添加剤がどのように分離特性に影響を与えるかについての詳細な考察は実験的に困難である。そこで本研究では、MoS₂ ナノシート含有ポリアミド系ナノろ過膜の分子構造を作成し、分子シミュレーションで MoS₂ ナノシートが吸着・拡散挙動に与える影響について考察した。グランドカノニカルモンテカルロ法と分子動力学法によるメタノールの吸着シミュレーション結果から、MoS₂ ナノシートによってメタノールとの相互作用が弱まり、吸着量に影響を与えることがわかった。



1) S.cao, Environ. Sci Technol. **2022**, 56, 8808.