計算化学の応用展開

高羽洋充^{1)*}・鈴木 愛²⁾・坪井秀行¹⁾・畠山 望¹⁾・
遠藤 明¹⁾・久保百司¹⁾・宮本 明^{2, 1)}

1) 東北大学 大学院工学研究科 〒980-8579 宮城県仙台市荒巻字青葉6-6-11-1302

2) 東北大学 未来科学技術共同研究センター 〒980-8579 宮城県仙台市荒巻字青葉6-6-11-1302

Novel Modeling Methodology for Membranes Study

Hiromitsu Takaba^{1)*}, Ai Suzuki²⁾, Hideyuki Tsuboi¹⁾, Nozomu Hatakeyama¹⁾,
Akira Endou¹⁾, Momoji Kubo¹⁾, and Akira Miyamoto^{2, 1)}

School of Engineering / NICHE, Tohoku University
6-6-11-1302 Aoba, Aramaki, Aoba-ku, Sendai 980-8579, Japan

Computational chemistry technique has been applied to the study of functional materials including membrane separation medium for the past a decade. These studies have provided important findings regarding to separation mechanism as well as the detail structure of membranes from the microscopic point of view. We have recently proposed “combinatorial computational chemistry”, “multiscale computational chemistry” and “multi-physics computational chemistry” as new concepts for useful tool to develop novel functional materials. Combinatorial computational chemistry is a methodology for theoretical material screening to seek optimal membrane for particular separation system. Multiscale computational chemistry and multi-physics computational chemistry are concept combining different theoretical methods that are validated only for individual time or size scales, which is useful for seamless understanding of interested phenomena from micro-scale to macro-scale. In this paper, some theoretical studies based on this new concept are presented. The applications to membrane characterization of dialysis membranes, theoretical screening methodology for porous membranes for specific gas purification, degradation mechanism of polymer electrolyte membranes in fuel cell, and modeling of fouling in water purification system are discussed.

Key words : molecular dynamics / separation mechanism / accelerated quantum chemistry molecular dynamics / zeolite membranes

1. はじめに

計算化学は分子材料設計、物性予測、構造解析など化学プロセスの研究において多様な応用展開が期待されている。著者らは既成の計算化学の概念をよ

り材料開発の実際に即したものに展開するため、「コンビナトリアル計算化学」、「マルチフィジックス計算化学」、「マルチスケール計算化学」などの計算化学に基づく新しい材料設計の概念を提唱している¹⁾。「コンビナトリアル計算化学」とは、材料特性を計算化学を利用して高速にスクリーニングすることで、材料開発の高効率化に結び付けようという試みであり、「マルチフィジックス計算化学」と「マルチスケール計算化学」では、分子論や機械工学など複数の物理モデルとスケールの異なるモデルを活用し、実

* Corresponding author

Tel : 022-795-7236

Fax : 022-795-7235

E-mail : takaba@aki.che.tohoku.ac.jp

Fig. 1 Schematic figure of porous structure model. Zeolite-like structure is simplified into basic unit of pore structure. Structure factors are also shown.

験データに基づく現象論も組み入れることで、より実践的な計算化学応用の体系化を目指したものである。

膜工学の分野においても、このような新しい計算化学の発展を背景に、タンパクなどの巨大分子の精密ダイナミクス解析、膜材の高速スクリーニング、膜モジュールの最適設計、ファウリング機構解析、プロトン伝導機構など、従来では経験的要素が多かった現象を数値シミュレーションで理論的に解析していくことが可能となっており、計算化学を利用した新しい膜工学が実現されつつある。特に膜の透過メカニズムについては、ゼオライト膜やシリカ膜を中心に、分子動力学法をはじめとした計算化学手法がこれまで適用され成果を挙げている。(これらについては参考文献2)～5)を参照いただきたい。) 本稿では、著者らの膜工学における計算化学の取り組みについて、いくつかのトピックスを紹介する。

2. 最適膜の理論スクリーニング⁶⁾

実験データの無い分離系に対して、最適な膜を計算化学を利用して理論的に選定することができれば、開発試験の労力を大幅に減らせることが期待できる。本章では、多孔質の無機膜を想定したCO₂分離膜を例に、コンビナトリアル計算化学を利用した膜構造スクリーニングについて述べる。

CO₂ (3.3 Å) と N₂ (3.64 Å) では分子径に大きな差はないが、わずかな大きさの違いと極性の違いにより分離が可能である。特に、ゼオライト膜は剛直な細孔構造をもつので、精密な細孔径制御ができれば高い透過性と分離係数が期待できると考えられる。既報のゼオライト膜では、DDRタイプのゼオライト膜の分離係数が21 (301 K)⁷⁾ (ちなみに我々の非平衡分子動力学法シミュレーションによる完全結晶DDR膜での検討では323 Kで32という値が得られている。)⁸⁾、またK-Y型ゼオライト膜で分離係数20.3、

Fig. 2 Comparison of CO₂ adsorption selectivity in CO₂/N₂ mixture for various porous membranes obtained from GCMC with that predicted by PLS model.

313 K, CO₂透過係数 1.8×10^{-6} mol/m² sec Pa という報告がある⁹⁾。このように、CO₂分離性はゼオライトの種類、つまり細孔径や細孔ネットワークにより変わるが、100種類以上ある全てのゼオライトを製膜できているわけではなく、CO₂に対してさらに高いパフォーマンスをもつゼオライト膜が存在する可能性がある。

膜性能への細孔径などの構造因子が与える影響を検討するために、Fig. 1に示すような細孔単位が3次元周期的に繋がっている膜を想定した。この細孔の吸着サイト径や細孔径、Si/Al比、さらには、細孔のつながり方を、構造因子パラメータとして定義し、それらのCO₂/N₂透過性をシミュレーションで評価してやることで、高いCO₂分離性能を示す膜を理論スクリーニングした。マイクロポラス膜では、拡散性と吸着性によって透過係数が求まる。そこで、拡散に関してはダイナミック・モンテカルロ (DMC) 法で拡散選択性と透過係数を求め、モンテカルロ法で吸着選択性・吸着量の予測モデルを作成して、この二つを合わせることで膜性能を推算した。

DMC法は分子の移動を吸着サイト間のホッピングと仮定し、拡散性をランダムウォークの考えに基づいて確率的に求めるシミュレーション方法である。任意の細孔構造での移動確率には構造因子の違いが反映されている。また吸着性については、既存のゼオライト約30種類についてCO₂とN₂の吸着量を、グランドカノニカル・モンテカルロ法 (GCMC) で解析し、多変量解析の一つであるPartial Least Squares (PLS) 法で吸着予測モデルを作成した。

純シリカのゼオライトの吸着量について、GCMC計算値とPLSモデルによる予測値を比較したものをFig. 2に示す。CO₂吸着量とCO₂/N₂吸着選択性につ

Fig. 3 Plot of calculated membranes performance for 1600 type of virtual porous membranes.

Fig. 4 Schematic figure of the porous structure of membrane that showed the best performance for CO₂ separation.

いていずれも $Q2 \approx 0.4$ という結果を得た。なお、 $Q2$ (予測的説明分散) はモデルの予測性を示しており、1に近いほどモデルの予測性は高い。一方、Al含有ゼオライトについては、 $Q2 \approx 0.6\sim 0.9$ の値を得ることができた。

拡散性に関しては、細孔径 $3.4\sim 7.4$ Å, 吸着サイト径 $7\sim 13$ Å, Si/Al比 = $(\infty, 19, 6, 3)$, 細孔のつながり方 = (7種類), と構造変数を変えた組み合わせ全1600通りについてDMC計算を行った。DMC計算から求めた拡散係数と吸着量予測モデル式を使って、透過係数と分離係数を算出した結果をFig. 3に示す。この図で示されるように、既報のゼオライト膜よりもさらに優れた性能の膜が存在していることがわかる。最も良い性能を示す構造の細孔単位をFig. 4に示した。この構造は3次元に繋がった細孔をもっており、Si/Al比が99, Y型ゼオライトに近い構造を持っているが, super cageを結ぶ細孔径が3.4 ÅとY型ゼオライトよりも細い。このような構造をもつ膜を作成することができれば、高い性能を示すCO₂分離膜になると考えられる。

Fig. 5 Proposed unzipping degradation reactions

Fig. 6 Result of the UA-QCMD for Nafion® membrane with H₂O and OH radicals ($\lambda = 3$). (upper) Trajectories of H₂O and OH radical molecules. (bottom) Trajectories of OH radicals. Trajectories were taken from the results of during 50 ps ~ 300 ps.

3. イオン交換膜の劣化機構のシミュレーション

近年、固体高分子形燃料電池 (PEFC) は高効率な次世代エネルギー変換技術として期待されている。しかし、その実用化のためには、PEFCの電解質膜の劣化特性の解明が必須課題である。PEFCの電解質膜として最も一般的に用いられるNafion®の化学的劣化要因の一つとして、酸素の反応から生成されるOHラジカルの影響があげられている。OHラジカルはFig. 5に示されるように、Nafion®の側鎖末端官能基であるスルホン酸基の水素を攻撃して、連鎖的に側鎖を分解している可能性がある (これをUnzipping劣化機構とよぶ)^{10, 11)}。またこの反応は、電解質膜内の加湿状態にも影響を受け、低加湿条件下では電解質膜の劣化が加速されることが知られている。これまで、実験による電解質膜内でのOHラジカルの拡散及び反応メカニズムの検討は困難であったため、OHラジカルによる劣化過程に関する分子スケールでの理解は不充分であった。そこで量子分子動力学法を用いて、低加湿条件下における電解質膜内でのOHラジカルの動的特性を計算し、OHラジカルによる電解質膜劣化機構について検討した。

反応ダイナミクスの計算はTight-binding量子分子動力学手法に基づく超高速化量子分子動力学計算手

Fig. 7 Snap shots of the reaction dynamics result. Part of sulfonic acid of Nafion[®] membrane and reacting OH radical molecule are shown.

Table 1 Bond population of the O-H bond in OH radical molecule and the bond between O atom in radical molecule and H atom in sulfuric acid of Nafion[®] membrane.

	initial	final
OH radical	0.742	0.686
O - H		
O - H'	0.000	0.801
O - H''	0.000	0.802
O' - H'	0.541	0.000
O'' - H''	0.561	0.000

法 (UA-QCMD) を用いて行った^{12, 13)}. この UA-QCMD は, 量子論により求めた結合エネルギーなどの電子状態を, 古典分子動力学手法計算に逐次反映させることで, 量子ダイナミクスの高速計算を可能にした方法である. まず, Nafion[®] ポリマーに含水率 (λ) が 3, 5, 8, 10 になるように H₂O 分子を, さらに O₂, H₂, 及び OH ラジカル分子を含むモデルを作成しシミュレーションを行った. 計算条件は温度 353 K, 圧力 1 atm である.

Fig. 6 にシミュレーションの計算結果を示す. この図から, 低加湿条件下 ($\lambda = 3$) では断片的な水クラスターが形成されていることが確認できる. さらに, 経時変化による OH ラジカルの軌跡から, OH ラジカルは高分子主鎖からなる疎水性領域に捕捉される傾向があることがわかる. これらの OH ラジカルが膜の劣化に影響を与えられられる. 次に, H₂O 分子及び OH ラジカルの活発な拡散が見られた部位に注目し, その反応メカニズムを探った. Fig. 7 に計算モデルの初期構造と最終構造の一部をスナップショットで, OH ラジカルの軌跡とともに示した. この軌跡から, OH ラジカルが Nafion[®] 末端スルホン酸基の水素に接近している様子がわかる. さらに, Table 1 に示した結合次数から, OH ラジカルの O 原子とスル

Fig. 8 Calculated bond energies for bonds in side chain of Nafion[®] membrane. The bond energies before/after reacting OH radical molecule are compared.

ホン酸基の H 原子が結合を形成していることが確認できる. これは, 低加湿条件下で, Nafion[®] 膜の OH ラジカルによる劣化反応の進行可能性を示唆している.

次に, Fig. 5 の劣化機構 ii) の可能性を調べるため, スルホン酸基が OH ラジカルとの反応によってラジカル化した Nafion[®] と, ラジカル化していないものについて, 分子鎖内部の個々の結合エネルギーを算出した (Fig. 8). この図より, Nafion[®] がラジカル化すると, 鎖中の結合エネルギーは減少し, 特に側鎖 -OCF₂CF(CF₃)OCF₂CF₂SO₃H 中の C-S 結合①での減少が最も大きいことが明らかとなった. このように弱くなった結合は切断されやすいと考えられ, ii) の反応は起こりやすいと考えられる. これらの結果から, Fig. 5 で想定された Unzipping 劣化機構が理論的に起こりうることを示された. 量子分子動力学法は化学反応を評価することができるため, 膜の劣化や合成過程などへの応用が今後期待される.

4. 膜ファウリングのシミュレーション

逆浸透膜を用いた排水処理においては, 溶存不純物によって膜が汚染され透水性能の低下が問題となるため, 低汚染膜の開発が重要な課題となっている. しかしながら, 低汚染膜の開発に必要な, 膜面の特性和汚染物質の分子レベルでの相互作用については理解されていない部分も多く, そのため透水実験を行わないで汚染性を予測することは難しい. そこで本研究では, 逆浸透膜汚染機構をシミュレーションできる新規な分子動力学 (MD) 法を開発し, 汚染物質と膜との相互作用を計算することで, 膜汚染機構の分子レベルでの解明を試みた. 具体的には, 芳香族系ポリアミド (PA) 系低圧逆浸透膜の非イオン性界面活性剤および高級アルコールによる膜汚染系について検討を行った.

逆浸透膜法の MD 計算においては, 膨大な水分子

Fig. 9 Calculated adhesion structure of nonion surfactants on PA model membrane. (a) side view of unit cell at initial step. (b) the snapshot after 1 ps of PMF-MD run. (c) The surface view after 1 ps.

を扱う必要があり、現在の計算機能力での直接計算は困難である。そこで本研究では、水中での膜と汚染物質および汚染物質同士に働く相互作用を、平均場ポテンシャル (PMF) として取り扱える PMF-MD プログラムを開発した。このプログラムでは、水中における膜と溶質の全構成原子を高速に計算できる点に特徴がある。PMF の計算は、まず PA 膜分子と非イオン性界面活性剤分子を適当な原子団に分割し、それらの原子団のうち 2 つを溶媒セル (水分子 510 ~ 515 個を含む) に挿入して、体積、温度一定の MD 計算を行うことで求めた。また、PA 膜モデルについては、PA モノマーを組み合わせ構造最適化計算を行うことで、直径約 7 Å の空隙をもつ網目状の膜モデルを作成した。ここでは、透水実験から PA 膜には水和イオン (約 7 Å) と同程度の細孔があると考えられることを考慮した¹⁴⁾。

非イオン性界面活性剤 ($\text{CH}_3-(\text{CH}_2)_6-(\text{OCH}_2\text{CH}_2)_2-\text{OH}$) の PA 膜への付着現象をシミュレートした結果を Fig. 9 に示す。水分子はあらわに計算に含まれていないが、水中では非イオン性界面活性剤の親水基が膜に付着している様子がわかる。また、非イオン界面活性剤分子同士が膜面で凝集することによって細孔が塞がることが示された。一方、同じ初期濃度の高級アルコールについて計算を行ったところ、分子同士は凝集せず PA 膜のポリマー鎖に沿う形で付着し、細孔が顕著に閉塞する様子は観察されなかった (Fig. 10)。以上より、凝集して付着する傾向のある非イオン性界面活性剤は、高級アルコールと比べて膜の孔を塞ぎやすく、そのため透過流束の低下幅が大きいと推測される。この傾向は、実際の透

Fig. 10 Calculated adhesion structure of alcohol molecules on PA model membrane. (a) side view of unit cell at initial step. (b) the snapshot after 1 ps of PMF-MD run. (c) The surface view after 1 ps.

水実験結果¹⁵⁾とも一致している。以上より、溶存不純物の親水基部と膜との相互作用、また、分子同士の凝集力が、PA 膜汚染における重要な因子であり、それらを計算で評価することで膜汚染性の予測が可能だと考えられる。本手法を用いることで、様々な溶存物質の膜汚染状態をシミュレーションすることが可能である。今後、膜の汚染性の理論的予測方法としての活用が期待される。

5. 透析膜の生体適合性シミュレーション

近年のコンピュータ速度の高速化によって、タンパク質のような生体分子のシミュレーションが可能になりつつある。膜分野において人工膜表面でのタンパク質などの挙動を知ることは大変重要である。ここでは、著者らの最近の研究例として、透析膜のシミュレーションについて述べる。

人工透析療法においては、透析膜との接触に伴い血中の補体 C3b タンパク質が過剰に活性化し、その結果、合併症などにつながるものが問題となる。そのため、より補体活性化への影響の少ない、生体適合性に優れた透析膜開発が進められているが、その補体活性化反応の詳細には不明な点が多い。そこで計算化学手法により、生体適合性に優れた透析膜開発のための指針を得ることを目的として透析膜とタンパク質の相互作用を評価した。

計算には、タンパク質表面の親疎水性の評価により相互作用領域を決定し、膜とタンパク質の接触時の構造を予測するために、“MIAX”プログラムによるソフトドッキング手法を用いた。また、透析膜と、

Fig. 11 Result of soft docking simulation. (a) prediction of C3b protein region reacting with the hydrophilic membrane. (b) Predicted conformation of C3b protein on cellulose acetate membrane.

タンパク質の吸着エネルギー、溶媒の影響について解析するために前述のPMF-MD法を用いた。

高分子膜（酢酸セルロース、ポリスルホン、ポリメチルアクリレート）と補体C3bタンパク質について、接触時の構造をシミュレーションした。ソフトドッキング手法により、補体C3bタンパク質の表面における、高分子膜との相互作用領域を予測した結果をFig. 11に示す。Fig. 11 (a) で色の濃い部分が予測された相互作用領域である。領域はチオエステル基が属するドメインに多く分布していた。この結果から、Fig. 11 (b) のようにC3bタンパク質は膜とチオエステル基を接触させた構造で吸着すると予測した。また、このチオエステル基が高分子膜表面とエステル交換により結合を生じ、C3bタンパク質が吸着することで補体活性化が進行すると考えられる。したがって、C3bタンパク質の吸着、活性化を抑制するためには、このチオエステル基を含むドメインの膜への接近を防ぐ必要があるといえる。

Fig. 12には、MIAXによって求められた各種透析膜（酢酸セルロース、ポリスルホン、ポリメチルアクリレート）と補体タンパク質C3bとの相互作用形態に対して、PMF-MDシミュレーションを用いて付着力を求めた結果を示した。ポリスルホン膜においては、タンパク質が表面に接近するにつれて複数のエネルギー障壁が存在することが示された。これは、タンパク質が膜へ接近したときのエネルギー変化には、タンパク質-膜間の相互作用だけでなく、水分子からの影響が大きいことを意味する。またこの図から、補体タンパク質C3bはセルロース膜と最も強く相互作用することがわかる。つまり、生体適合性の観点からはセルロース膜は最も劣り、ポリスルホン膜が最も優れているといえる。このように、タンパク質のような巨大分子と膜との相互作用を、計算化学シミュレーションで定量的に評価できるようになってきた。

Fig. 12 Calculated result of interaction (PMF-potential) between C3b protein and various kinds of polymer membranes.

6. まとめ

膜技術は、分離プロセスのみならず燃料電池など先端分野での重要な要素技術である。そのような応用分野において、理論的に膜性能を評価し設計できる計算化学の利用は、見通しのよい開発を実現する上で不可欠である。分子動力学法は動的挙動を調べるのに有効であり、量子化学は反応性を調べるのに有効である。これらミクロな手法に加えて、メソスケール、流体力学のようなマクロスケールのような複数の計算科学手法をつなげていくマルチスケール計算化学を利用することが有効で、そのために多様な物理モデルに基づくシミュレーション手法の利用方法の体系化を進めていくことが重要だと考えられる。膜を利用した革新的材料開発に計算化学がどのように貢献していくか楽しみである。

謝 辞

本研究の一部は東京大学（現工学院大学）中尾真一教授のご指導の成果である。また、一部は財団法人

人地球環境産業技術研究機構 (RITE) の余語克則博士、栗田工業株式会社の川勝孝博博士との共同研究である。

文 献

- 1) 高羽洋充, 古山通久, 坪井秀行, 畠山 望, 遠藤 明, 久保百司, Carlos A. Del Carpio, 宮本 明: 「シミュレーションによる材料設計技術」, 化学工学, 71, 504-508 (2007)
- 2) 高羽洋充, 坪井秀行, 古山通久, 畠山 望, 遠藤 明, 久保百司, Carlos Del Carpio, 宮本 明: 「液相系膜分離における計算化学の応用展開」, *Membrane*, 32 (2), 80-88 (2007)
- 3) 吉岡朋久: 「分子シミュレーションによる微細孔無機膜における気体透過・分離機構の解明」, *Membrane*, 32 (2), 71-79 (2007)
- 4) 高羽洋充ら: 「最先端の機能膜技術—未来の膜技術を展望する—」, 第9章「新しい膜性能推算法 (分子シミュレーション)」, シーエムシー出版, 127-146 (2005)
- 5) 高羽洋充ら: 「化学工学における分子シミュレーションの活用—基礎と応用—」, 第4章「膜分離への応用」, 分離技術シリーズ8, 分離技術会 (2006)
- 6) Ohta Y, Takaba H, Nakao S: *Microporous and Mesoporous Materials*, 101, 319-323 (2007)
- 7) Tomita T, Nakayama K, Sakai H: *Microporous and Mesoporous Materials*, 68, 71-75 (2004)
- 8) unpublished data.
- 9) Kusakabe K, Kuroda T, Morooka S: *J. Membr. Sci.*, 148, 13-23 (1998)
- 10) Xie T, Hayden CA: *Polymer*, 48, 5497-5506 (2007)
- 11) Mittal VO, Kunz HR, Fenton JM: *J. Electrochem. Soc.*, 154, B652-B656 (2007)
- 12) Takaba H, Endou A, Yamada A, Kubo M, Teraishi K, Nakamura KG, Ishioka K, Kitajima M, Miyamoto A: *Jpn. J. Appl. Phys.*, 39, 2744-2747 (2000)
- 13) Alam Md K, Ahmed AF, Nakamura K, Suzuki A, Sahnoun R, Tsuboi H, Koyama M, Hatakeyama N, Endou A, Takaba H, Del Carpio CA, Kubo M, Miyamoto A: *J. Phy. Chem. C*, 113, 7723-7727 (2009)
- 14) Hirose M, Minamizaki Y, Kamiyama Y: *J. Membr. Sci.*, 123, 151-156 (1997)
- 15) 川勝孝博, 高羽洋充, 宮本 明: 分離技術会, S7-P13 (2008)

(Received 7 May 2009 ;

Accepted 20 May 2009)

著者略歴

高羽 洋充 (たかば ひろみつ)

1998年 3月 東北大学大学院工学研究科材料化学専攻博士課程修了 博士 (工学)

同 年 4月 東京大学大学院工学系研究科化学システム工学専

攻 助手

2001年～2002年 米国コロラド鉱山大学石油化学科博士研究員

2006年 4月 東北大学大学院工学研究科応用化学専攻助教

2008年 4月 東北大学大学院工学研究科化学工学専攻准教授

鈴木 愛 (すずき あい)

2002年 3月 東北大学大学院工学研究科材料化学専攻博士前期課程修了

2002年 4月 日産自動車株式会社入社

2005年 9月 東北大学大学院工学研究科材料化学専攻博士後期課程修了 博士 (工学)

2007年 7月 東北大学未来科学技術共同研究センター助教

坪井 秀行 (つばい ひでゆき)

1990年 3月 佐賀大学大学院理工学研究科修士課程修了

同 年 4月 (財) 電子機械検査検定協会 入社

1992年 8月 三井造船 (株) 入社, 2002年主任研究員

2004年 3月 東北大学未来科学技術共同研究センター助手

2006年 3月 東北大学大学院工学研究科博士課程修了 博士 (工学)

2007年 4月 東北大学大学院工学研究科応用化学専攻准教授

畠山 望 (はたけやま のぞむ)

1999年 3月 東京大学大学院理学系研究科博士課程修了 博士 (理学)

同 年 4月 東北大学流体科学研究所 助手

2006年 10月 東北大学大学院工学研究科応用化学専攻助教

2007年 4月 同准教授

遠藤 明 (えんどう あきら)

2000年 3月 東北大学大学院工学
研究科材料化学専攻
博士課程修了 博士
(工学)
同 年 4月 日本PMC(株)入社
2002年 7月 東北大学大学院工学
研究科材料化学専攻
助手
2003年 10月 東北大学流体科学研
究所 講師
2005年 10月 東北大学大学院工学
研究科応用化学専攻
助教授
2007年 4月 同准教授

久保 百司 (くぼ ももじ)

1992年 3月 京都大学大学院工学
研究科修士課程石油
化学専攻 修了
同 年 7月 東北大学工学部分子
化学工学科 助手
1999年 3月 東北大学大学院工学
研究科博士課程材料
化学専攻博士(工
学)
2001年 4月 東北大学大学院工学
研究科 助教授
2008年 1月 東北大学大学院工学
研究科附属エネルギー
安全科学国際研究
センター 教授

宮本 明 (みやもと あきら)

1975年 3月 東北大学大学院工学
研究科化学工学専攻
博士課程修了 工学
博士
同 年 4月 名古屋大学工学部合
成化学科 助手
1985年 5月 京都大学工学部石油
化学科 助教授
1992年 4月 東北大学工学部分子
化学工学科 教授
2002年 4月 東北大学未来科学技
術共同研究センター
教授