

受入大学名	工学院大学		
Host University	Kogakuin University		
外国人研究者	モハメド イスマエル モハメド ヨセフ		
Foreign Researcher	Mohamed Ismael Mohamed Yossef		
受入研究者	高羽 洋充	職名	教授
Research Advisor	Hiromitsu Takaba	Position	Professor
受入学部/研究科	先進工学部 環境化学科		
Faculty/Department	Department of Environmental Chemistry and Chemical Engineering, School of Advanced Engineering		

<外国人研究者プロフィール/Profile>

国籍	エジプト・アラブ共和国
Nationality	Egypt
所属機関	ソハーク大学
Affiliation	Sohag University
現在の職名	准教授
Position	Associate Professor
研究期間	2021年1月1日～2021年3月31日(90日間)
Period of Stay	90days ( January 1, 2021 - March 31, 2021)
専攻分野	化学、計算化学
Major Field	Chemistry, Computational Chemistry



研究中のモハメド博士/Dr.Mohamed in the lab.

<外国人研究者からの報告/Foreign Researcher Report>

①研究課題 / Theme of Research
Applying quantum mechanics (QM) for investigation the degradation on water treatment membrane with the design of new materials
②研究概要 / Outline of Research
Water treatment using membranes is challenging topic. The development of membrane materials that suppress fouling has become a vital issue. To find out the influence of intermediate water between protein and polymer membrane extensive research is required. MD simulations were done for two polymer membranes, namely, poly 2-methoxyethyl acrylate (PMA) and poly vinylidene difluoride (PVDF). More specifically the mechanism of water action as anti-fouling on the membrane surface was investigated.
③研究成果 / Results of Research
Adsorption of water molecules may influence the protein adsorption into the membrane surface. This is a favorable process where water acts as anti-fouling agent and hence extend the life time of the membrane. More specific, water molecules showed special characteristics as intermediate water rather than free water. Forming a protective layers on the surface of the polymer membrane. These finding supported the future industry of polymeric membrane usage in pollutants removal from aqueous solutions.
④今後の計画 / Further Research Plan
Development of new membrane polymers that exhibit anti-fouling characters. Improve the molecular dynamics parameters to enhance the potential of the calculations. Construct parallel research unit to disseminate the computational technology in the local research community.

## < 受入研究者からの報告/Research Advisor Report >

①研究課題 / Theme of Research
新膜材料の設計を目的とした水処理膜の劣化に関する計算化学の応用研究
②研究指導概要 / Outline of Research
膜を使用した水処理は挑戦的なトピックであり、ファウリングを抑制する膜材料の開発は重要な問題になっている。タンパク質と高分子膜の間の中間水の影響を見つけるには、広範な研究が必要で、その一つの試みとして我々は計算化学を活用した研究を推進してきた。本人には、この研究の開始時にすでに協力をしてもらっており、今回はその経験があって、スムーズに来日後の研究を進めることができた。具体的には、2つの高分子膜、つまりポリ2-メトキシエチルアクリレート (PMA) とポリビニリデンジフルオライド (PVDF) に関して、分子動力学法を用いて中間水の影響を分子レベルで検討し、膜表面でのフラウティング防止としての水の作用のメカニズムの解明を行った。ある程度の成果が出たので、論文の執筆を併せて進めるよう指導した。
③研究指導成果 / Results of Research
水分子の吸着は、膜表面へのタンパク質の吸着に影響を与えることがシミュレーション結果より示唆された。これは、水がフラウティング防止剤として機能し、膜の寿命を延ばす好ましいプロセスを実現していることを意味している。より具体的には、水分子は、自由水ではなく中間水として振る舞い、高分子膜の表面に保護層を形成する特性を示すことを分子レベルで明らかとした。これらの発見は、水溶液からの汚染物質除去における高分子膜の工業的な利用に将来的に寄与するものである。
④留学生交流事業の活動状況 / Activities of International Student Exchange Program
平日は毎日、研究室に来て研究を行っていた。コロナ禍ということもあり、講演会などの交流行事は実施できず、学生との交流も制限されていたのは、国際交流という観点からは残念だったが、研究については支障なく精力的に取り組んでいた。共同研究を進め、まだ完成していないが論文執筆も行うことができたことは、90日という短い滞在期間、また最初の2週間はコロナ感染予防のための隔離期間として大学に入構できなかったことを考えると、十分な研究成果を挙げたといえる。
⑤今後の計画 / Further Research Plan
フラウティング防止特性を示す新しい膜ポリマーの開発に取り組む意欲をみせているので国際的な共同研究に発展させたい。日本での研究活動を広げることも目的として、計算技術を広めるための共同研究ユニットを並行的に構築する意欲を持っているので実現に協力したい。コロナ禍ということもあり、しばらくは直接的な交流は難しいが、共同論文の執筆などで、今回の成果をまとめさらに発展させていく予定である。



同研究室の宮川先生と/with Dr.Miyagawa