

ナノ流体現象の機構解明とその応用

: カーボンナノチューブによる水輸送

客野 遥* 松田 和之** 小倉 宏斗*** 宮田 耕充**** 真庭 豊****

Study on the Mechanism and Application of Nanoscale Fluid Flows

: Water Transport through Carbon Nanotubes

Haruka KYAKUNO* Kazuyuki MATSUDA** Hiroto OGURA*** Yasumitsu MIYATA**** Yutaka MANIWA****

1. 緒言

ナノ空洞内の物質は、バルク状態の性質からは予測できない新規な振舞いを示す[1-3]。例えば単層カーボンナノチューブ (SWCNT) 内部での流体輸送において、マクロな流体力学のいわゆる「滑りなしの条件」が破綻することが示唆されている。これは摩擦なしの流れの実現可能性として注目されているが、その輸送メカニズムはまだじゅうぶんに明らかにされていない。

本プロジェクト研究は、ナノ空洞における流体のバルクとは異なる流動性の起源を明らかにすること、およびそれを応用したナノ材料の新規物性制御・新規機能開発を行うことを目的とする。2022年度は、古典分子動力学 (MD) 計算を用いて、SWCNT 空洞内を流れる水の体積流量のチューブ長さ依存性を明らかにした。概要を以下に報告する。

2. 方法と結果

本研究で用いた計算モデルを図 1 に示す。周期境界条件を適用し、SWCNT の両端にグラフェンからなる壁を設置することで、SWCNT 空洞へ水を供給するための“水溜め”をつくった。SWCNT とグラフェンはともに空間に固定した。ピストンに SWCNT のチューブ軸方向 (図 1 の z 方向) の外力 F_z を加えることによって、水の流れを生じさせた。ここで、ピストンは炭素原子から成る剛体である。ピストンの断面積 S から、図中右の水溜めにかかる圧力は $P_z = F_z/S$ となる。本研究で用いた SWCNT の一覧を表 1 に示す。それぞれのモデルにおいて、 P_z が 100MPa から 1500MPa の範囲で計算を行った。シミュレーション温度は 300K である。なお本稿では紙面の都合に

より、代表的な計算結果について述べる。

MD 計算結果から、まずピストンの移動の速さ v_z を求めた。図 1 に示したように、ピストンとグラフェン壁との間の距離を d とすると、距離 d の時間変化から v_z が求まる。この速さ v_z を、上流側の水溜めで水が流れる平均の速さとみなし、SWCNT の空洞内を流れる水の体積流量を $Q_{\text{CNT}} = v_z S$ とした。一例として、 $D = 1.145\text{nm}$ での解析結果を図 2 に示す。図より、本研究の圧力範囲において、体積流量 Q_{CNT} は圧力 P_z にほぼ比例し、かつ SWCNT のチューブ長さ L にほとんど依存しないことが分かる。

このようにして求めた Q_{CNT} を、マクロ流体力学において知られている Hagen-Poiseuille (H-P) 式から見積もられる体積流量 $Q_{\text{H-P}}$ と比較した。 $Q_{\text{H-P}}$ は次式で表される。

$$Q_{\text{H-P}} = \frac{\pi \Delta P}{8\eta L} R^4 \quad (1)$$

ここで ΔP は管の両端の圧力差、 R は管の半径、 L は管の長さ、 η は流体の粘性係数である。本研究において、SWCNT の空洞半径 R (nm) は次式のように定義した。

$$R = \frac{1}{2}(D - 0.34) \quad (\text{nm}) \quad (2)$$

式中の 0.34nm は、SWCNT を構成する炭素原子の大きさである。また、 η は 300 K でのバルク水の値である $0.8 \text{ mPa} \cdot \text{s}$ とした。

図 3 に、3 種類の直径の SWCNT について、 $P_z = 486\text{MPa}$ における体積流量のチューブ長さ依存性を示す。マクロ流体力学の H-P 式では、体積流量はチューブの長さ L に反比例する。一方、本研究の MD 計算では、いずれの直径の SWCNT においても、体積流量 Q_{CNT} はチューブ長さによらずほぼ一定となった。これは SWCNT の空洞内壁と水分子との間に摩擦がほとんど存在しないことを示唆している。

3. まとめと今後の展望

本研究では、3 種類の直径 ($D = 0.7145\text{nm}$, 1.145nm , 1.925nm) の SWCNT について、その空洞内を流れる水の体積流量のチューブ長さ依存性を調べた。その結果、いずれの直径の SWCNT において

*准教授 応用物理学科

Associate Professor, Department of Applied Physics

**教授 応用物理学科

Professor, Department of Applied Physics

***特別研究員 工学研究所

Researcher, Research Institute for Engineering

****客員教授 工学研究所

Guest Professor, Research Institute for Engineering

も、体積流量はチューブ長さによらずほぼ一定であることが分かった。これは SWCNT の空洞内壁と水分子との間に摩擦がないことを示唆する結果である。ただし、現実系の SWCNT は熱振動をしており、それは SWCNT 空洞壁と水との間の摩擦に無視できない影響を与える可能性がある。今後、計算モデルの妥当性についてもじゅうぶんな検証を行いながら、引き続き SWCNT におけるマクロ流体力学の破綻の原因を検討したい。



図 1. SWCNT による水輸送の MD 計算モデル。SWCNT のチューブ軸方向を z 軸とした。水分子には SPC/E モデル[4]を用いた。

表 1. 本研究で用いた SWCNT の一覧表。ここで、カイラル指数 (n, m) は SWCNT の構造を指定する整数組である。SWCNT の直径と長さは、炭素原子を質点とみなしたときの値を示した。

カイラル指数	直径 D (nm)	長さ L (nm)
(9, 0)	0.7145	0.2880
		4.608
		9.360
(12, 4)	1.145	0.4793
		4.670
		9.350
(14, 14)	1.925	0.3741
		4.864
		9.852

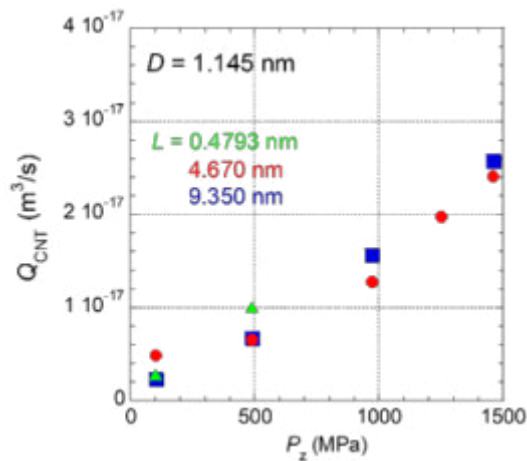


図 2. 体積流量 Q_{CNT} の圧力 P_z 依存性 ($D = 1.145$ nm の場合)。 $L = 0.4793$ nm については、 $P_z > 500$ MPa での計算を現在進めている。

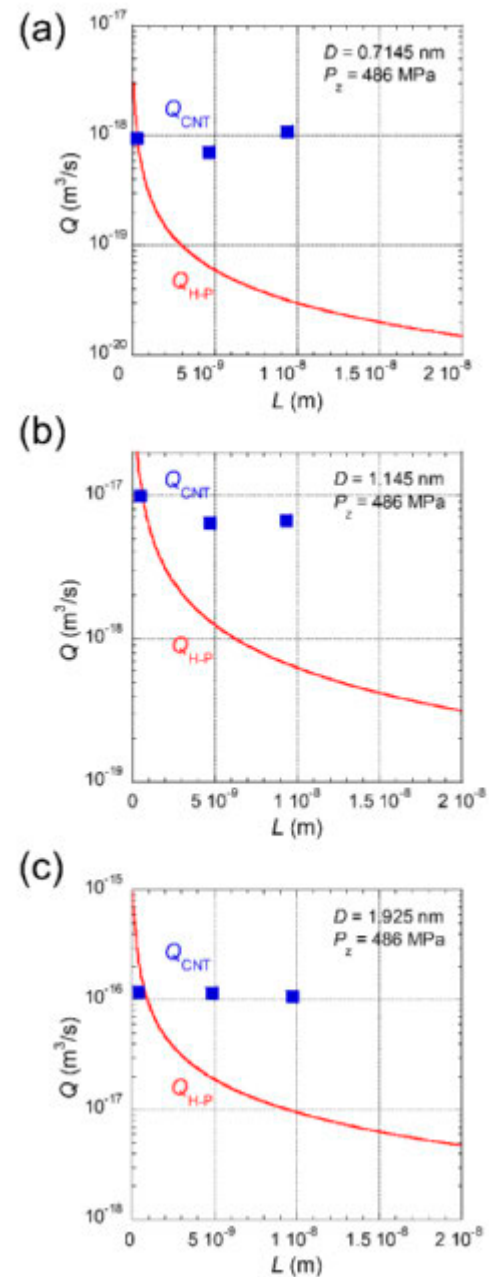


図 3. 体積流量の SWCNT チューブ長さ依存性 ($P_z = 486$ MPa)。 (a) $D = 0.7145$ nm, (b) $D = 1.145$ nm, (c) $D = 1.925$ nm での結果。 Q_{CNT} が本研究の MD 計算から求めた体積流量であり、 Q_{H-P} はマクロ流体力学の H-P 式から予測される値である。

参考文献

- [1] A. Noy, et al., NanoToday 2(6), 22-29 (2007).
- [2] J. C. Rasaiah, et al., Annu. Rev. Phys. Chem. 59, 713-740 (2008)
- [3] H.G. Park, et al., Chem. Soc. Rev. 43, 565-576 (2014).
- [4] H. J. C. Berendsen, et al., J. Phys. Chem. 91(24), 6269-6271 (1987).