

平成21年5月7日現在

研究種目： 基盤研究(C)
 研究期間： 2006～2008
 課題番号： 18560188
 研究課題名（和文） ナノ熱流体システムの構築を志向した液膜及び固液界面における熱・物質移動の基礎研究
 研究課題名（英文） Study of heat and mass transfer in liquid films and at solid-liquid interfaces oriented toward nanoscale thermofluid systems
 研究代表者
 小原 拓 (OHARA TAKU)
 東北大学・流体科学研究所・教授
 研究者番号： 40211833

研究成果の概要：

固体のナノ構造（チャンネルや修飾表面等）に流体を満たしたものや、生体細胞のように膜で包まれた構造体等、ナノスケールの熱流体を用いてバルク流体にはない特性をもたせた系（ナノ熱流体システム）により熱・運動量・物質の新たな輸送機能を作り出そうとの全体構想の下、基礎研究としてナノ熱流体システムの鍵となる固液界面や液膜・流動性分子膜における熱・物質移動の特性を解析し、その分子スケールメカニズムを明らかにした。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006年度	1,500,000	0	1,500,000
2007年度	1,000,000	300,000	1,300,000
2008年度	1,000,000	300,000	1,300,000
年度			
年度			
総計	3,500,000	600,000	4,100,000

研究分野： 工学

科研費の分科・細目： 機械工学・熱工学

キーワード： ナノ流体、固液界面、液膜、分子膜、分子動力学、熱・運動量輸送、界面抵抗

1. 研究開始当初の背景

ナノファブリケーションの発達によりナノスケール構造が液体のフルイディクス素子に利用されようとしていることや、生体模倣膜など特殊な液体膜の構造に対する理解が進んだことにより、ナノ熱流体システムの応用展開が現実的になろうとしている。ナノスケールの構造をもつ流体は、高速拡散現象（熱伝導や物質拡散が高速になる）、低次元化（流動性や輸送特性が特定に次元に限定され、非バルク特性が発現する）、高非平衡、界面力の卓越などの特徴を示すが、そこで系

全体の熱流体现象を支配する膜・界面の輸送特性については、マクロなデータ収集が始まったばかりで、その分子スケールメカニズムはほとんど明らかになっていなかった。一方、固体材料分野では、薄膜やナノワイヤー、超格子などナノスケール構造で発現する特異な熱輸送特性が注目され、盛んな研究が行われている。この状況を踏まえて、熱流体工学をこの分野で展開することは極めて重要であり、その成果はナノ熱流体システムの熱エネルギー輸送特性や物質輸送特性を自在に「設計」するための基礎データとして貴重なものとなる。

2. 研究の目的

リソグラフィーなどファブリケーション技術を用いて製作した固体のナノ構造（チャネル、平板間の隙間など）に流体を静止状態あるいは流動状態で満たしたものや、例えば生体細胞のように膜で包まれて構造を保つものなど、ナノ構造を利用した熱流体システムを用いて熱・運動量・物質の新たな輸送機能を作り出し、革新的な熱流体デバイス（機械）を創成しようとの全体構想の下、基礎研究としてナノ熱流体システムの鍵となる界面・膜の熱・物質移動を解析する。いずれも異種の分子が接する場所で、それぞれのナノスケール構造が示す特性が異なることにより発現する分子レベルの現象と捉えると、メカニズムの解析には分子動力学シミュレーションが強力な道具となる。液体中におけるエネルギーの伝搬現象を分子スケールで解析するために有効な方法として本報告者が提案している「分子間エネルギー・運動量伝搬」の概念を適用し、マクロ～マイクロスケールの熱流体現象やその解析手法の延長では理解できないナノスケール熱流体現象を明らかにして、熱工学の基礎に新たな知見を加えることを目的とする。

3. 研究の方法

研究対象としては、まず、MEMSと液体の組み合わせであるマイクロフルイディクス
の延長として最初に応用が始まるであろう、
固体材料によるナノ構造に液体を満たした
ナノ熱流体システムを想定し、そこで決定的
に重要な液膜内と固液界面の解析を行った。
次に、両親媒性分子（脂質等）の二重膜など、
流動性のある（液体の性質をもつ）分子膜が
示す熱・物質輸送特性の解析に研究を進めた。
これらの構造及び輸送現象の特徴を捉えた
分子動力学計算系を構築し、大規模な分子動
力学シミュレーションを行って分子の位置・
速度に関するデータを得る。これを処理
することにより、系に発生しているマクロな
熱流束・運動量流束や温度分布・速度分布を
算出して、熱伝導率などマクロな輸送特性
（輸送物性値）を得る。さらに、本報告者が
確立した分子間エネルギー伝搬の解析法を
適用して、その熱流束・運動量流束を構成す
る分子間のエネルギー伝搬・運動量伝搬を調
べ、どのような分子間にどのような運動自由
度による伝搬が生じているかを明らかにす
る。

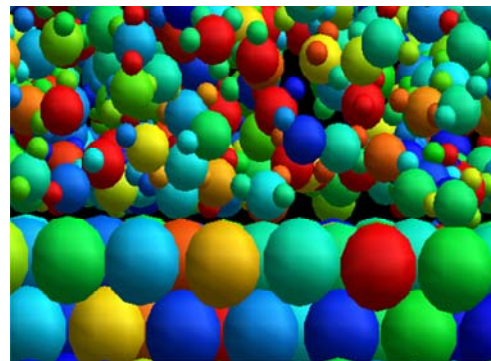
これらの界面あるいは膜における熱・物質輸送について、その特性を支配する要因（分子間相互作用のパラメータ、固体分子の配列や格子定数、固体壁の表面状態、膜分子の配

列や運動など）を明らかにして、その要因を制御・選択することによる輸送特性のコントロールや、これらを統合してナノ熱流体システムの熱エネルギー輸送特性や物質輸送特性を自在に「設計」することを可能にする理論的基盤を構築した。

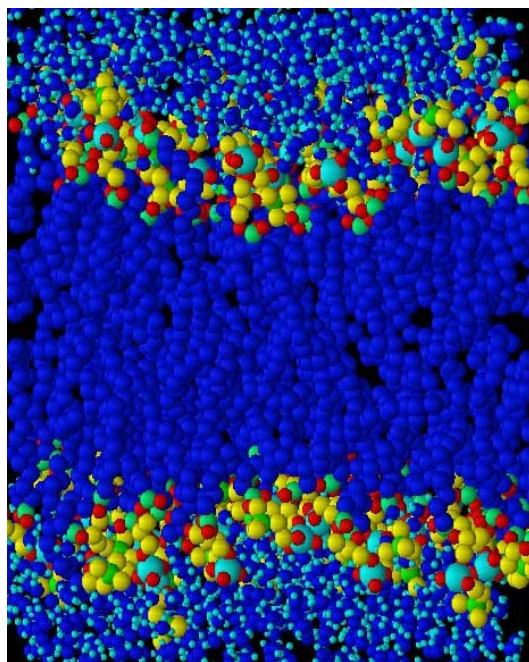
4. 研究成果

固体壁面に接する液体膜について分子動力学計算系を構築し、液膜内及び固液界面を輸送される熱エネルギーについて、分子間エネルギー伝搬の概念を用いて、その特性を解析し、分子間相互作用のパラメータ、固体分子の配列（結晶面）、固体壁の表面状態（原子レベルの凹凸や配列の乱れ）など支配因子の影響を明らかにした。固体壁には典型的な金属の結晶構造をもつ白金（面心立方格子）を想定し、液体については、まず球形で電荷をもたない分子による液体（単純液体）を想定して液体一般において発現する基礎的・普遍的な現象を解析し、次に、電荷（分極）の影響が強くまた回転運動の自由度をもち、実用上も重要性の高い水について解析を行った。さらに、分子の配向や分子内運動自由度（分子の変形）の影響が顕著な長鎖状高分子の代表としてアルカンを選択し、解析を行った。これらの解析の結果、固液界面では界面垂直方向の運動自由度による熱エネルギーの伝搬が卓越し、この結果、他の自由度による熱エネルギーが界面近傍で滞留することにより、熱エネルギーが運動自由度間で均等に分配されるとのエネルギー等分配則が破綻していることを見出した。また、この傾向が固体壁表面の分子スケール構造（結晶面）により変化していることを示した。さらに、固液界面における運動量の伝搬と熱エネルギーの伝搬を、同じメカニズムで描像することに成功した。

液体水の場合は、白金の表面原子の直上に水分子が配位する傾向にあるため、固体



白金－液体水界面



水中の脂質二重膜

壁表面の結晶構造が水分子の運動に与える影響は小さくなる。また、バルクの液体水において熱伝導流束の70%程度が分子の回転運動で伝搬されているのと対照的に、液体水-白金固体壁界面の熱流束は、ほぼ100%が併進運動によるものであり、このことが水-白金界面が示す大きな熱抵抗の原因となっている。

これと関連して、固体表面近傍の液体領域における物質輸送特性について解析を開始し、界面近傍で界面垂直方向の物質輸送が著しく減退するなど、特異な現象を観測した。

細胞膜を模倣した水中の脂質(DPPC)二重膜について計算系を構築し、その物質・熱輸送特性を解析する分子動力学シミュレーションを実施した。水-リン脂質-リン脂質-水の系における総括的熱伝導率や、それぞれの界面が示す熱抵抗を計測した結果、脂質二重膜内ではバルクとは異なる顕著な不均質構造が発現する結果、熱伝導率が膜垂直方向と平行方向では著しく異なり、垂直方向が5倍程度大きな値を示すことがわかった。

最終年度には、これらの解析を総合して、界面輸送現象を支配する分子間相互作用の寄与やこれに及ぼす界面構造の影響を明らかにして、本研究を終了した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 5 件)

- [1] T. Nakano, T. Ohara and G. Kikugawa, Study on molecular thermal energy transfer in a lipid bilayer, Journal of Thermal Science and Technology, Vol. 3 (2008), pp. 421-429. 査読有.
- [2] T. Ohara, Molecular-scale heat transfer in liquids and at liquid-solid interfaces: Toward the quality evaluation of heat flux, Journal of Theoretical and Computational Nanosciences, Vol. 5 (2008), pp. 175-186. 査読有.
- [3] D. Torii, T. Nakano and T. Ohara, Contribution of inter- and intramolecular energy transfer to heat conduction in liquids, Journal of Chemical Physics, Vol. 127 (2008), 044504 (8 pages). 査読有.
- [4] D. Torii and T. Ohara, Molecular dynamics study on ultra-thin liquid water film sheared between solid walls: Liquid structure and energy and momentum transfer, Journal of Chemical Physics, Vol. 126 (2007), 154706 (10 pages). 査読有.
- [5] 鳥居大地, 中野雄大, 小原拓, 多体ポテンシャルによる液体中の熱伝導 (分子内及び分子間エネルギー伝搬の寄与), 日本機械学会論文集B編, 第 73 巻 (2007), 2122-2129 頁. 査読有.

[学会発表] (計 14 件)

- [1] T. Nakano, G. Kikugawa and T. Ohara, A molecular dynamics study on heat transfer characteristics in lipid membranes, Eighth International Symposium on Advanced Fluid Information and Transdisciplinary Fluid Integration, Sendai, Dec. 20th, 2008.
- [2] 小原拓, 膜・界面の分子熱流動, 第 22 回流体工学シンポジウム, 東京, 2008.12.6.
- [3] 小原拓, 熱工学におけるナノ, 日本機械学会熱工学部門 活性化のためのワークショップ, 逗子, 2008.10.31.
- [4] T. Nakano, G. Kikugawa and T. Ohara, Molecular dynamics study on lipid-bilayer membranes in shear flow, Seventh JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, Sapporo, Oct. 13th, 2008.

- [5] T. Nakano, G. Kikugawa and T. Ohara, A molecular dynamics study on heat conduction characteristics in lipid bilayer, Second International Forum on Heat Transfer, Tokyo, Sep. 19th, 2008
- [6] タンチアユアン, 鳥居大地, 菊川豪太, 小原拓, アルカン液体の固液界面におけるエネルギー・運動量伝搬特性, 日本機械学会 2008 年度年次大会, 横浜, 2008.8.4.
- [7] T. Ohara, Thermal energy transfer in membranes and at liquid-solid interfaces, US-Japan Seminar on Nanoscale Transport Phenomena, Boston, July 14th, 2008
- [8] 中野雄大, 菊川豪太, 小原拓, 脂質二重膜界面における熱輸送特性, 第 45 回日本伝熱シンポジウム, つくば, 2008.5.22.
- [9] T. Nakano, T. Ohara and G. Kikugawa, Study on molecular thermal energy transfer in a lipid bilayer, ASME-JSME Thermal Engineering and Summer Heat Transfer Conference, Vancouver, July 9th, 2007.
- [10] D. Torii and T. Ohara, Molecular scale mechanism of thermal resistance at solid-liquid interfaces (Influence of interaction parameters between solid and liquid molecules), ASME- JSME Thermal Engineering and Summer Heat Transfer Conference, Vancouver, July 9th, 2007.
- [11] D. Torii, T. Ohara and T. Matsuzaka, Molecular heat conduction in liquid alkane: Contribution of inter- and intra- molecular energy transfer, 5th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics, Sun City, July 2nd, 2007.
- [12] 鳥居大地, 小原拓, 松坂岳廣, アルカン液体中における熱エネルギー伝搬特性, 第 44 回日本伝熱シンポジウム, 長崎, 2007.5.25.
- [13] 中野雄大, 小原拓, 菊川豪太, 脂質二重膜の熱エネルギー伝搬特性, 第 44 回日本伝熱シンポジウム, 長崎, 2007.5.25.
- [14] D. Torii, T. Ohara and K. Ishida, Solid-liquid boundary resistance: A molecular dynamics study on intermolecular energy transfer at solid-liquid interfaces, 13th International Heat Transfer Conference, Sydney, Aug. 18th, 2006.

[図書] (計 1 件)

- [1] T. Ohara and D. Torii, Transport phenomena in nanoscale solid-liquid structures in Nano-mega scale flow dynamics in highly coupled systems, Tohoku University Press, pp. 101-154, 2008.

6. 研究組織

(1) 研究代表者

小原 拓 (OHARA TAKU)
東北大学・流体科学研究所・教授
研究者番号：40211833

(2) 研究分担者

菊川 豪太 (KIKUGAWA GOTTA)
東北大学・流体科学研究所・助教
研究者番号：90435644

(3) 連携研究者

なし