

令和 6 年 6 月 19 日現在

機関番号：32702

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2019～2023

課題番号：19K05198

研究課題名（和文）隙間水が関与した摩擦現象と隙間水の流体現象の研究

研究課題名（英文）Nano-fluidic effect among two solid materials

研究代表者

真庭 豊 (Maniwa, Yutaka)

神奈川大学・付置研究所・客員教授

研究者番号：70173937

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000円

研究成果の概要（和文）：2つの物体の間に間隙を有し、かつ、その間隙に水や空気などの流体が存在しているときの2つの物体間に働く摩擦現象を調べることを目的にした。本研究では、特に隙間に水が存在するときの振る舞いを明らかにすることを目的にした。そのために、まず、単層カーボンナノチューブ（SWCNT）の円筒空洞を流れる水に働く摩擦力の研究を行った。

研究方法としては分子動力学計算を用いた。SWCNTの内部空洞の直径が1nm以下では、水はバルクとは異なる摩擦現象を示した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

通常の物質は、構成する物質結晶間に間隙を有していて、かつそこには水や空気などの吸着層が存在することが多い。これらの間隙物質（水やガス）はそのバルク物性に重大な影響を与えているものと考えられる。このような間隙を有する複合物質のバルク物性を明らかにしようとするもので、広く関心を曳き得る研究であると思われる。

研究成果の概要（英文）：Friction between two solid materials with a nano-scale space were studied by molecular dynamics simulation. Particularly, it was found how water within the nano-space affect the bulk friction between the two materials. In this study, however, water flow within SWCNT was studied to investigate the basic friction phenomena between the SWCNTs and water. it was suggested that water cluster structures, such as hydrogen bond networks, in SWCNT and bulk play an important role on the bulk friction between the two solid materials.

研究分野：物性物理学実験

キーワード：カーボンナノチューブ ナノ流体 ナノ物理学 水 摩擦

1. 研究開始当初の背景

物体間の摩擦は、2物体の間に隙間を有する場合、隙間の幾何学的状態や隙間にある物質（間隙物質。例えば、水、油、気体分子など）やその状態に関わると思われる。ここで2物体間の隙間の大きさがナノメートルサイズになると、隙間物質はバルクにない特異な状態（構造）をとることが考えられ、その摩擦現象に与える影響が興味深い。このような立場からの研究はまだほとんど行われていない。

2. 研究の目的

本研究では、このような研究背景のもとで、水を隙間を含む炭素材料を例として、その摩擦を解明することを主な目的とした。本研究では、特に最初のアプローチとして単層カーボンナノチューブ（SWCNT）の円筒空洞内を流れる水の摩擦現象に注目した。

3. 研究の方法

長さ L 、直径 D の SWCNT の両端に水のリザーバ（タンク）を置いて、SWCNT の両端に圧力 P をかけ、SWCNT を流れる水の体積流量 Q を分子動力学計算（MD）で計算して、 Q が L 、 ΔP および D へどのように依存するかを調べた。また、巨視的な円筒空洞（管）を流れるそれ Q_{H-P} と比較した。巨視的な円筒空洞の場合、流速は、円筒壁に接するところでは壁に対して相対的にゼロになり（滑りなしの条件）、管の中心あたりで最大となる。また Q_{H-P} には Hagen-Poiseuille (ハーゲンポアズイユ) の式が成立することが知られている（図1）； $Q_{H-P} = \Delta P \pi R R^4 / (8 \eta L)$ 。ここで R は、空洞半径であり、SWCNT の場合では $R \sim (1/2)(D - 0.34)$ nm と近似できる。 η は流体の粘性係数である。また、SWCNT への流体の流入部分（SWCNT と水のリザーバ容器の接続部分）の抵抗（流入抵抗）を明らかにするために、SWCNT の代わりに穴の開いたグラフェン3枚を置いた。MD 計算では、SWCNT、グラフェン及び水分子を全て剛体として扱った。SWCNT とグラフェンは空間に固定し、水の分子は SPC/E モデルを用いた。

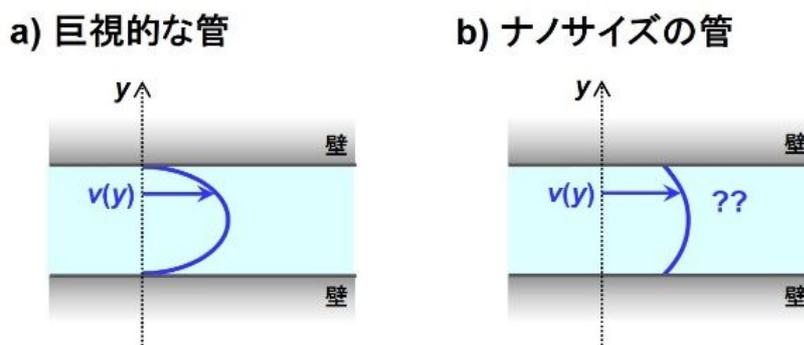


図1. 空洞内を流れる流体の動径方向の速度分布の模式図。a) 巨視的な管において、流体は連続体として振舞い、壁面での流体の速度はゼロである（滑りなしの条件）。b) ナノサイズの管では、壁面との摩擦がない（または非常に小さい）流れの可能性が示唆される。

4. 研究成果

長さ L 依存性： Q_{H-P} は、巨視的な管では、管の長さ L に反比例する。本研究においては、SWCNT ($D < 2.0$ nm) の Q が $L \sim 0.3, 5, 9$ nm の間で一定であることが確認された。また流速分布が、壁の内側で急激に大きくなり、その後、中心付近までほぼ一定になることが分かった。すなわち、巨視的な管とは異なり、SWCNT では滑りなしの条件が成立しないことが確認された。（図2）細

管で大きな Q を報告している先行研究の結果とも一致する (A. Noy, et al., NanoToday 2(6), 22-29 (2007), J. A. Thomas, A. J. H. McGaughey, Nano Lett. 8(9), 2788-2793 (2008))。この点については、本研究では SWCNT を剛体として扱った、という理由も考えられるので、SWCNT の振動を考慮した、より詳細な研究が必要である。

また、SWCNT ($D < 2\text{nm}$) において、 Q は $Q_{\text{H-P}}$ から増大されていたが、この増大因子はチューブ直径 D (したがって R) が小さくなる程おおきくなることが確認された。なお Q のこの変化はアイスナノチューブというチューブ状の氷が観測される、細い SWCNT でより顕著であることが示唆された。

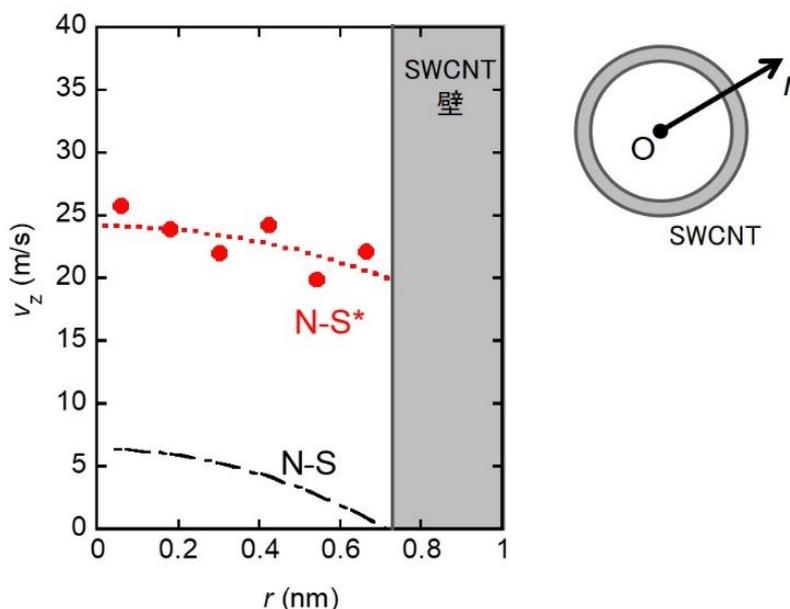


図 2。SWCNT 内の水の流速分布 ($D=1.93\text{ nm}$, $\Delta P = 100\text{ MPa}$)。赤丸印が MD 計算の解析から得られた流速。図中の一点鎖線 (N-S) は、H-P から予測される流速分布である。SWCNT 内の水の流速分布が滑りなしの条件を満たしていないことが分かる。このとき η は 300 K でのバルク水の値である $0.854\text{ mPa}\cdot\text{s}$ とした。破線 (N-S*) では、SWCNT の壁面での流速が有限値になるように流速の式を修正し、かつ $\eta = 1.3\text{ mPa}\cdot\text{s}$ とした。右図は SWCNT 円筒断面模式図。

流入抵抗：SWCNT を流れる流量 Q は SWCNT の長さに依存しない。また有限の値を示した。この事は水がリザーバから SWCNT の空洞内に流入する際には抵抗をうけていることを意味している。すなわち SWCNT 両端の圧力差は、SWCNT 内部での圧力降下と流入(流出)口での圧力降下の和で近似されるが、今の場合前者がほぼ無視できる (ゼロ) であることが分かった。

この事を詳細に調べるために、SWCNT の代わりに穴を開けた 3 枚のグラフェンシートを重ねておき、そこを流れる水の体積流量の圧力差依存性を穴の大きさに対してどのように変化するかを調べた。圧力差依存性は穴の直径が $D \sim 1.0\text{nm}$ 近傍で穴の大きさに対して顕著であることが示唆された。

以上を総合して、SWCNT の細管を流れる水について、以下の描像が示唆される。細管が細くなると、巨視的な管で期待される滑りなしの条件が破綻する。水と SWCNT では $D \sim 1.0\text{nm}$ 以下で顕著である。リザーバ内の水のネットワーク構造と細管中のネットワーク構造が異なるために、流入(出)口でこのネットワークの構造変換を伴い、有限の抵抗が発生する、これらの効果は細管が細くなるほど顕著であり、H-P からのずれが大きくなる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 H. Kyakuno, K. Matsuda, K. Ishizeki, T. Yamamoto, Y. Maniwa	4. 巻 Accepted
2. 論文標題 Proton transport through ice nanoribbons	5. 発行年 2024年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計5件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 客野遥, 小倉宏斗, 松田和之, 真庭豊
2. 発表標題 つぶれたカーボンナノチューブに内包された水の構造とダイナミクスIV
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小倉宏斗, 客野遥, 松田和之, 真庭豊
2. 発表標題 形状を変化させたカーボンナノチューブ内の水II
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 客野遥, 小倉宏斗, 松田和之, 真庭豊
2. 発表標題 一次元リボン状氷のプロトン輸送
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小倉宏斗, 客野遥, 松田和之, 真庭豊
2. 発表標題 カーボンナノチューブの内部空洞における水輸送
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 H. Kyakuno, H. Ogura, K. Matsuda, Y.Maniwa
2. 発表標題 Proton transport through ice nanoribbons
3. 学会等名 11th Liquid Matter Conference
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	客野 遥 (Kyakuno Haruka) (10746788)	神奈川大学・工学部・准教授 (32702)	
研究分担者	松田 和之 (Matsuda Kazuyuki) (60347268)	神奈川大学・工学部・教授 (32702)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------