The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

| | |
|---|---|
| Title | 平衡状態と定常流れにおけるカーボンナノチューブ内の水の挙動の分子動力学解析 |
| Author(s) | 花﨑, 逸雄 |
| Citation | 大阪大学, 2006, 博士論文 |
| Version Type | |
| URL | https://hdl.handle.net/11094/46811 |
| rights | |
| Note | 著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、<a href="https://www.library.osaka-u.ac.jp/thesis/#closed">大阪大学の博士論文について</a>をご参照ください。 |

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

氏　　名　花崎逸雄（はなさきいつお）

博士の専攻分野の名称　博　士（工　学）

学位記番号　第　20301　号

学位授与年月日　平成18年3月24日

学位授与の要件　学位規則第4条第1項該当

工学研究科知能・機能創成工学専攻

学位論文名　**平衡状態と定常流れにおけるカーボンナノチューブ内の水の挙動の分子動力学解析**

論文審査委員　（主査）
教　授　中谷　彰宏

（副査）
教　授　黄地　尚義　　教　授　稲葉　武彦　　教　授　南埜　宜俊
助教授　芝原　正彦　　教　授　浅田　稔　　教　授　石黒　浩
教　授　安田　秀幸

## 論文内容の要旨

本論文は、カーボンナノチューブ（CNT）との相互作用によって生み出される流体の挙動を工学的に利用するための基礎的な知見を得ることを目的として、分子動力学法を用いておこなった理論計算的研究の成果をまとめたものであり、以下の6章から成る。

第1章では、CNTと流体との相互作用に関する研究の重要性と、平衡状態および流動状態におけるCNT内の流体の挙動の理論・実験的研究両方の状勢についてまとめ、本研究の背景と目的について述べた。

第2章では、分子動力学法における既存の流れ駆動手法の特長と限界について述べ、それを克服するために開発した新たな手法である流動ピストンモデルとアイスピストンモデルの原理とアルゴリズムの詳細および実装の手順を示し、これらが高密度の多原子分子の流体力学的流れを上流からの圧力により効率的に駆動できることを明らかにした。

第3章では、本論文で対象とする（6, 6）（直径0.81 nm）から（20, 20）（直径2.71 nm）までのCNT内の水の基本構造と特性を評価するために実施した平衡状態における微視的構造と水素結合ダイナミクスの解析について述べた。CNT内の直径に応じて、バルク状態と異なり水分子が一列の分子鎖や円筒、二重円筒構造などを形成し、CNT内の最も外側の水分子層の水素結合寿命は内側の分子層よりも短く、層間水素結合はそれを構成するそれぞれの層単独での水素結合より寿命が短いことを明らかにした。さらに、バルク状態の水に比べて、CNT内の水分子間の水素結合は崩壊しやすいが、拡散しにくいためそれらの水分子は互いの近傍に長時間とどまり、水素結合を再構成しやすいことを明らかにした。

第4章では、CNT内の定常流れにおける水の構造について解析し、第3章で述べた平衡状態での解析結果との違いについて論じた。流れがあってもCNT内の水分子の集団的構造は不変であり、さらにその構造が有するロバスト性も損なわれず、ここで取り扱った細いCNT内の流れはPoiseuille flowよりPlug flowに近いものであることを明らかにした。

第5章では、CNT接合系を先細分子ノズルとしてとらえるという独自の着想に基づき、その内部の水の定常流れの特性について解析した結果について考察した。上流に対する下流のCNTの断面積の比が小さくなるほど上流に対す

る下流の流速の比（加速率）が増大し、入口流速が大きいほど加速率が大きくなる傾向があること、接合部分での壁面への衝突により流速が熱速度に変換され温度が局所的に著しく上昇することを明らかにした。

第６章では、得られた結果を総括した。

## 論文審査の結果の要旨

近年、カーボンナノチューブ（CNT）に流体を流し流量センサや分離膜として利用する実験的研究成果が報告されるなど、CNT 内の流体の挙動の理解は重要性を増している。本論文は、CNT をナノ流体学（Nanofluidics）の観点から応用するための知見を得ることを目的として、分子動力学法を用い、CNT 内の水の平衡状態の微視的構造と水素結合ダイナミクス、そして定常流の構造と秩序、さらにそのロバスト性などを理論解析した研究の成果をまとめたものである。得られた成果を要約すると以下の通りである。

(1) 分子動力学法の枠組における既存の流れ駆動手法の限界を克服する新たな手法である流動ピストンモデルとアイスピストンモデルを開発し、これらが高密度の多原子分子の流体力学的流れを上流からの圧力により効率的に駆動できることを明らかにしている。

(2) CNT 内の水の平衡状態における微視的構造と水素結合ダイナミクスについて解析し、CNT 内で水分子が形成する一列の分子鎖や円筒、二重円筒構造において、CNT 内の水素結合はバルクよりも崩壊しやすいが、バルクより拡散しにくいためそれらの水分子は互いの近傍に長時間とどまり、水素結合を再構成しやすいことを明らかにし、CNT をナノリアクターとして利用できる可能性について述べている。

(3) CNT 内の水の定常流れの構造を解析し、その平衡状態との違いについて検討している。その中で、流れがあっても CNT 内の水分子の集団的構造は不変であり、さらにその構造のロバスト性も損なわれず、全体として細い CNT 内の流れはポワズイユ流よりもプラグ流に近いものであることを示し、CNT をマイクロ総合分析システム（$\mu$-TAS）などへ応用する際の有用性について述べている。

(4) CNT 接合系を先細分子ノズルとしてとらえるという独自の着眼点から、その内部の水の定常流れの特性について解析し、下流に対する上流の CNT の断面積の比が大きくなるほど、ノズル部の入口と出口の流速の比で定義される加速率が増大し、入口流速が大きいほど加速率が大きくなる傾向があることを示している。また、接合部分での壁面への衝突により流速が熱速度に変換され温度が局所的に著しく上昇することを明らかにしている。

以上のように、本論文は分子動力学法を用いた理論解析により、物理学や化学などの分野を横断しながら CNT を工学的に応用するための知見を示しており、機械工学、材料科学、生産科学の融合領域におけるナノテクノロジー分野に貢献するところは大きい。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。