

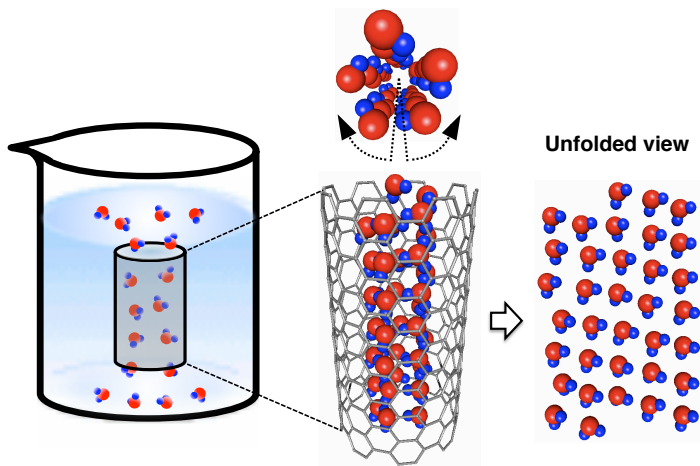
オープンセミナーのお知らせ

『常温常圧ナノチューブ内の液体分子の異常な振舞い』

中村 美道（物質・材料研究機構 先端的共通技術部門 理論計算科学ユニット）

2011年12月1日（木）16:10-17:40
東京理科大学 九段校舎 KS201 教室

水に代表されるような水素結合性分子がカーボンナノチューブ(CNT)内に入り込むと、どのように振る舞うか?素朴で興味深いこの分野の研究は“アイスナノチューブ”の発見でよく知られる[1]。無限長（又は閉口端）CNTに水分子を完全に閉じ込めた分子動力学計算で低温/高圧を課すと、バルクとは異なる氷の相が得られる。一方、我々は、開放端CNTを常温常圧の液体水に浸し、CNT内外へ水分子の移動が可能な状況を想定したシミュレーションを行った（下図）。意外なことに、水分子のダイポールの向きが一方向に全て揃う高度な規則相が自然に現れた。室温の熱揺らぎの中で安定に振る舞いつつ、集団的に拡散することが分かった。固相/液相の枠を越えた新たな相の発見と言える。



開放端 CNT に入り込んだ水分子は CNT 直径が小さくなるにつれ、バルク→レイヤー→ワイヤー的な構造へ変化する。ワイヤー的な構造へ移る手前の直径領域（1.1-1.2 nm）で、ほぼ1原子層の水チューブが得られた（図の中央）。構造を“水分子シート”に展開すると、全ての分子のダイポールモーメントが揃っていることが分かった[2]。この強誘電的な秩序配列を保ちつつ、分子全体が CNT 軸方向へ長距離拡散する様子を動画で示す予定である。

長時間シミュレーションにより、流動/非流動の明確な時間変化の様子が確認された。流動性の“ON/OFF”現象は、ナノゲート機能引き出しの観点で興味深い。“ON”が安定で、“OFF”が準安定である。細孔内の水分子同士の静電エネルギーの得が、状態の安定に大きく寄与する。アルコールについても系統調査を行い、特異な振舞いが見られる“臨界直径”を見出した。混合液の計算も行っている。ナノゲート・ナノフィルターとしてのCNTのポテンシャル機能が示唆され、興味深い。ナノ細孔濾過膜開発のような薄膜応用分野からの関心も期待される。

[1] e.g., Koga, Gao, Tanaka, Zeng, Nature 412 (2001) p.802.

[2] Nakamura, Ohno, Phys.Chem.Chem.Phys.13 (2011) p.1064.