京都工芸繊維大学 KYOTO INSTITUTE OF TECHNOLOGY　慶應義塾大学 Keio University

令和 8 年 11 月 4 日
国立大学法人 京都工芸繊維大学
慶應義塾大学

カーボンナノチューブ内の液体が示す特異な熱の伝わり方を解明
–ナノチューブの太さによって変わる熱伝導率と液体構造・壁面摩擦の関係–

1．発表者：

久本 健太（京都工芸繊維大学 大学院工芸科学研究科 博士前期課程 機械物理学専攻）（研究当時）
小林 祐生（京都工芸繊維大学 機械工学系 助教）
池田 高浩（京都工芸繊維大学 未来デザイン・工学機構 特任助手）
山本 詠士（慶應義塾大学 理工学部 准教授）
山川 勝史（京都工芸繊維大学 機械工学系 教授）

2．発表のポイント：

◆カーボンナノチューブ内の液体アルゴンで、熱伝導率（熱の伝わりやすさ）が管の長さとともに増す条件と、その増加が抑えられる条件をシミュレーションで明らかにしました。

◆原子が一列状や一層の筒状に並ぶ細い管では、調べた範囲で熱伝導率の増加が続く一方、複数の列や層が共存する太い管では、その増加が大きく抑制されました。また、太い管では、原子の集団運動の特徴が変化し、壁との摩擦も大きくなることがわかりました。

◆本成果は、ナノスケールの流路内の熱の流れを見積もるための基礎となります。将来、流路の寸法や壁面の性質を考慮した熱設計に役立つことが期待されます。

3．発表概要：

京都工芸繊維大学の久本健太 博士前期課程学生（大学院工芸科学研究科機械物理学専攻）、機械工学系 小林祐生 助教、山川勝史 教授、未来デザイン・工学機構 池田高浩 特任助手、慶應義塾大学の理工学部 山本詠士 准教授らの研究グループは、カーボンナノチューブ（注 1）の内部に閉じ込められた液体アルゴンについて、管の太さによって熱の伝わり方が大きく異なることを、分子動力学シミュレーション（注 2）により明らかにしました。具体的には、細い管では管が長くなるほど熱伝導率（注 3）が増加する一方、太い管ではその増加が大きく抑えられることを確認しました。さらに、これらの熱の伝わり方の違いと原子の並び方や壁との摩擦との関係を示しました。

熱伝導率は通常、試料の長さによらない物質固有の値として扱われます。しかし、原子や分子の動きが一方向に制限されるような極めて細い管の中では、管が長くなるほど熱伝導率が増す場合があります。この増加が続く条件や抑えられる条件、また液体の構造や壁との摩擦がどう関わるのかは、十分に明らかに

なっていませんでした。

本研究では、管の太さによって内部のアルゴン原子の並び方が変化することに着目しました。アルゴン原子が一列または一層の筒状に並ぶ細い管では、調べた範囲で管が長くなるほど熱伝導率が増加しました。一方、アルゴン原子が複数の列や層を形成する太い管では、この増加が大きく抑えられました。さらに、こうした違いには、原子の集団運動（注４）や管の壁面との摩擦（注５）が関係していることを示しました。

これらの結果は、ナノスケールの流路における熱輸送現象の理解を深め、熱伝導率を正確に予測・評価するための新たな知見となることが期待されます。本研究成果は、2026 年 11 月 4 日付で英国王立化学会の学術誌『*Nanoscale*』にオンライン掲載されます。

４．発表内容：

研究の背景

熱伝導率は、物質の熱の伝わりやすさを表す量です。通常、同じ物質で温度や密度などの条件が同じであれば、試料を長くしても熱伝導率そのものは変わらないと考えます。この考え方は、試料の寸法や温度差から熱の流れを見積もる際の前提の一つです。

しかし、原子や分子の動きが主に一方向に限られるほど細い空間では、流路の長さとともに熱伝導率が増す場合があります。本研究グループはこれまでに、ナノチューブ内で水分子が一列に並ぶ条件で、この現象を示してきました [1]。また、短い鎖状分子を含む水溶液のシミュレーションでも、計算領域を細長くすると同様の現象が現れることを報告しています [2]。

また、ナノメートルほどの狭い空間に閉じ込められた液体では、空間のサイズ・形状や壁との相互作用によって、原子の並び方や動きが変わります。原子が連動して音波のように動く集団運動は、壁との摩擦にも影響を受けます [3]。しかし、どのような原子の並び方で熱伝導率の増加が続き、どのような場合に抑えられるのかは、十分に分かっていませんでした。壁との摩擦がこの違いにどう関わるかについても、明確ではありませんでした。

研究内容

本研究グループは、カーボンナノチューブ内の液体アルゴンを対象に、管の半径と長さを変えた分子動力学シミュレーションを行いました。管の両端に温度差を与え、内部の熱の流れと温度分布から熱伝導率を求めています（図 1A）。

その結果、原子が一列に並ぶ細い管では、調べた最長の 300 nm まで熱伝導率の増加が続きました。一層の筒状に並ぶ状態でも、増加の程度は小さくなるものの、調べた範囲で増加が継続しています。一方、太い管で複数の列や層が共存すると増加が弱まり、多層構造では長い管でほぼ一定になりました（図 1B）。これにより、増加が続く原子配列と、増加が抑えられる原子配列を明らかにしています。

この違いを理解するため、液体内部の密度の変動から、原子が連動して動く「集団運動」に着目しました。また、液体が内壁に及ぼす力の変動から、壁との摩擦を評価したところ、熱伝導率の増加が続く細い管では摩擦が小さく、増加が抑えられる太い管では摩擦が大きいことが分かりました。さらに、増加が弱まる条件では、音波のように伝わる集団運動の特徴も変化していることが確認されました。こうした解析

を通じて、管を長くしたときに熱伝導率の増加が続くか抑えられるかという違いと、原子の並び方、集団運動、壁との摩擦との対応関係を明らかにしました。

今後の展開

今後は、より長いカーボンナノチューブでの計算に加え、液体の種類や壁面材料、温度を変えた検証を進めます。管の長さとともに熱伝導率の増加が続く条件と、その増加が抑えられる条件への理解を深めます。さらに、ナノ流路の寸法や壁面の性質が熱輸送に与える影響を予測し、将来的には、ナノスケールのデバイスにおける熱輸送の評価や熱設計に役立てることを目指します。

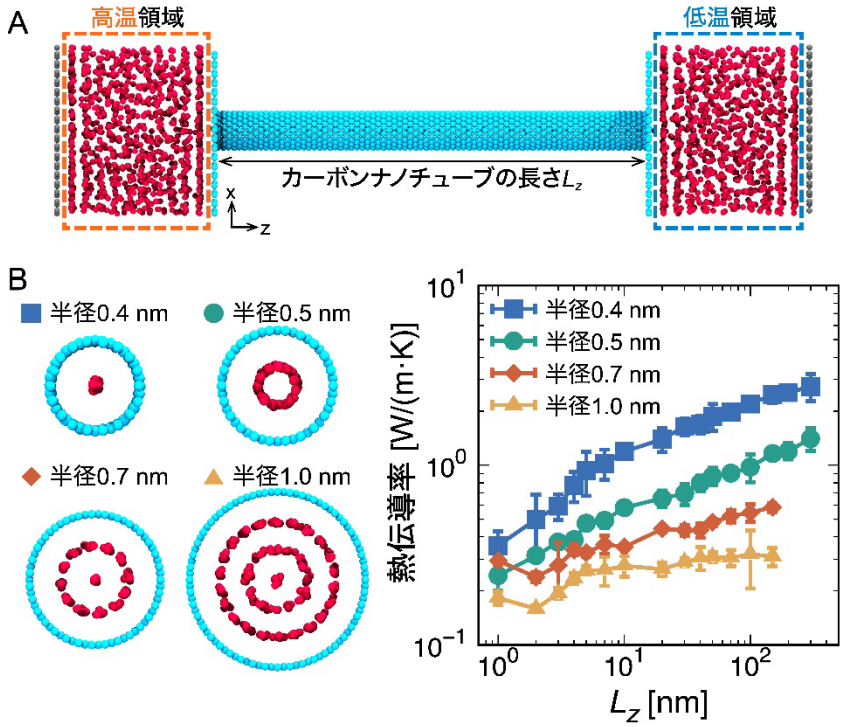


図 1. 計算モデルと、管内の原子の並び方・熱伝導率の変化。(A) 計算モデル。赤色はアルゴン原子、水色は炭素原子を示します。両端の液体領域に温度差を与え、管内の液体が長さ方向に熱を伝える様子を調べました。(B) 原子の並び方の断面表示（左）と、管の長さに対する熱伝導率の変化（右）。一列状・一層の筒状配列では増加が続き、複数の列や層が共存する構造では増加が弱まります。

＜参考文献＞

[1] S. Imamura, Y. Kobayashi, and E. Yamamoto, “Thermal transport of confined water molecules in quasi-one-dimensional nanotubes”, *J. Chem. Phys.* 160, 184503 (2024). DOI: 10.1063/5.0197041

[2] K. Hisamoto, Y. Kobayashi, T. Ikeda, and M. Yamakawa, “Dimensional crossover of thermal transport in oligomer aqueous solutions: From three-dimensional to quasi-one-dimensional behavior”, *Phys. Rev. E* 112, 055414 (2025). DOI: 10.1103/489m-39x3

[3] H. Holey, P. Gumbsch, and L. Pastewka, “Sound waves, diffusive transport, and wall slip in nanoconfined compressible fluids”, *Phys. Rev. Fluids* 9, 014203 (2024). DOI: 10.1103/PhysRevFluids.9.014203

＜研究費＞
本研究は、日本学術振興会（JSPS）科学研究費助成事業（JP24K17216、JP25K23425）および京都工芸繊維大学令和 5 年度法人戦略枠に基づく若手研究者支援制度の支援を受けて実施されました。

５．発表雑誌：

雑誌名：Nanoscale（英国王立化学会）
論文タイトル：Dimensional Crossover of Thermal Transport in Nanoconfined Liquids Driven by the Interplay of Quasi-One-Dimensional Structure and Wall Dissipation
著者：Kenta Hisamoto，Yusei Kobayashi，Takahiro Ikeda，Eiji Yamamoto，Masashi Yamakawa
DOI 番号：10.1039/d6nr02737g
アブストラクト URL：https://doi.org/10.1039/D6NR02737G

６．用語解説：

注 1）カーボンナノチューブ
炭素原子が網目状につながった、ナノメートルの太さを持つ管状の物質です。

注 2）分子動力学シミュレーション
原子や分子の運動をコンピュータ上で模擬する手法です。粒子間の相互作用をモデル化し、古典力学におけるニュートンの運動方程式を数値的に解くことで、各粒子の位置と速度の時間変化を計算します。

注 3）熱伝導率
物質の熱の伝わりやすさを表す量です。通常は、同じ物質で温度や密度などの条件が同じであれば、試料の長さによらない値として扱われます。実際に流れる熱の量は、熱伝導率に加え、試料の長さや断面積、温度差にも依存します。

注 4）集団運動
多数の原子や分子が連動して動くことです。液体の密度の変化が音波のように周囲へ伝わっていく運動も、その一つです。

注 5）壁面摩擦
液体が壁面に沿って相対的に動くときに生じる抵抗です。その程度を表す量が壁面摩擦係数で、値が大きいほど、液体と壁との相対運動に対する抵抗が大きいことを意味します。