

高強度 CNT を用いた耐衝撃緩和メカニズムに関する数値研究

Numerical studies on impact resistance mitigation mechanism using high-strength CNT

手島 正吾

一般財団法人 高度情報科学技術研究機構 計算科学技術部

1. 研究目的

ダイラタント現象は遅いせん断刺激には液体のように容易に変形し、より速いせん断刺激に対してはあたかも固体のような抵抗力を発揮する現象である。一方で、ダイラタント現象自体の物理的発現メカニズムは十分に解明されていないため、ダイラタント現象を発現させるための材料設計指針も確立していない。我々はイオン液体を適切に選びダイラタント現象を制御することで極めて強い耐衝撃 CNT の実現できると考え、実験と分子動力学シミュレーションを融合した研究体制を構築し、ダイラタント現象発現メカニズムの解明に取り組んできた。本年度は、モデル剛体球および溶媒に分散した CNT を対象に、ダイラタント現象を分子シミュレーションで再現しその発現メカニズムを分子レベルで理解することを試みた。

2. 研究成果の内容

【水中高分子】 水中のポリアニオン (PA) とポリカチオン (PC) を対象に、GHz オーダーのせん断速度領域で非平衡分子動力学シミュレーションを実施し、シアニングな振る舞いを経てダイラタント現象が発現することを明らかにした。粘性の変化はせん断によって分子構造に変形が加えられることによって応力が増大することによって説明でき、*J.Phys.Chem.B* 誌に発表した。

【モデル剛体球】 シミュレーションで剪断速度を遅くすると、得られた粘性率の平均値が揺らぎやすく、値の収束には長時間のシミュレーションを必要とすることが計算で分かってきた。水は粘度 $10^{-3} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ の Newton 流体として知られるが、シミュレーションで値を求めると剪断速度が $10^{10}/\text{s}$ では剪断応力のばらつきが $\pm 10^{-4} \text{ Pa}\cdot\text{s}$ 程度で収まるのに対し、剪断速度が $10^3/\text{s}$ では剪断応力のばらつきが $\pm 1000 \text{ Pa}\cdot\text{s}$ と標準偏差が大きく平均値として意味をなさないことが分かった。見積もりによると、実験で観測可能な剪断速度が $10^4/\text{s}$ 以下の領域で、標準偏差を抑えた誤差値の小さい粘度を算出するためには、 10^{12} 以上の粒子数の系を扱う必要があることが分かった。マクロ量で定義されている粘度を粒子シミュレーションから明確に求めるためには、多くの粒子を扱っ

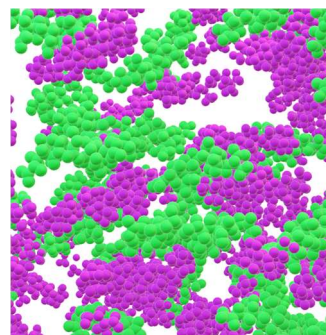


図 1 : せん断下の PA,PC の構造

た大規模計算が必要である。そこで粒子数を抑えてダイラタント現象を起こすシステムを構築した。図 1 に示した系は、同種類の粒子で構成した 15 個の剛体球（正十二面体で表現した計 300 粒子）と 2700 粒子の溶液からなり、比較対象として系全体の粒子数を揃えた 3000 分子からなる溶液の計算を行った。図 2 はペクレ数に対する粘度のプロットである。正十二面体からなる剛体球はペクレ数 46 から衝突を始め、粘度が 2 桁上昇することが分かった。流体粒子中の剛体球を想定した非平衡分子動力学計算によりせん断速度と拡散係数の比からダイラタント現象が起きるせん断速度が予測可能であり、その粘度上昇の起源はサイズの異なる粒子間でおきる分子間衝突であることを明らかにし *Scientific Reports* 誌に発表した。

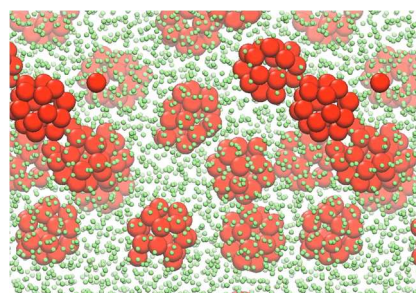


図 2：粒子からなる正十二面体を剛体とし同種粒子中に浸漬した系

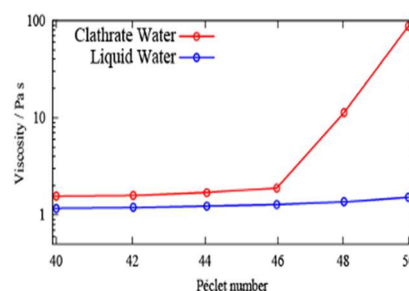


図 3：ペクレ数に対する粘度

【溶媒に分散した CNT】 CNT+溶媒系でのダイラタント現象発現条件の調査を行った。(5,5) CNT 1 nm 分を 1 粒子に、溶媒として水 4 分子を 1 粒子にまとめる粗視化を行い、CNT-溶媒粒子間の相互作用を CNT-CNT 粒子間の相互作用に対して変化させた。CNT-溶媒間相互作用が弱い時には CNT はバンドル化/一部バンドル化し、相互作用が強い時には分散状態になっており、CNT-溶媒間相互作用を変化させることにより CNT の分散度合が異なる系を作り出すことに成功した。この系に対してせん断速度に対する粘度の解析を行った結果、層流に沿って動く CNT によりシアシニング傾向があることがわかった。

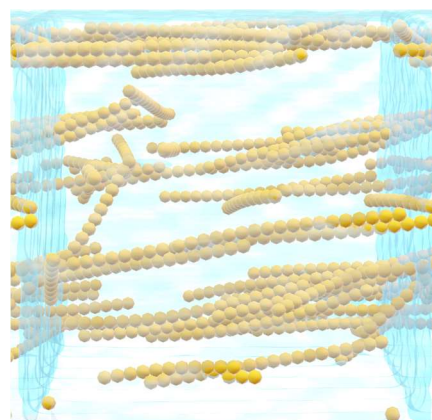


図 4：層流に沿って状態の CNT

3. 学際共同利用が果たした役割と意義

実験と同等のせん断速度を実現するために必要な計算系の見積もりには系の大規模化と計算の高速化が必須であり、学際共同利用によって初めて実施できる内容である。

4. 今後の展望

剛体球だけでなく剛体棒・剛体板などの形状が粘性の変化に与える影響はわかっていない。今後はカーボンナノチューブ、グラフェン、フラーレン等の炭素材料に展開する。

5. 成果発表

(1) 学術論文

- ① Patrick A. Bonnaud, Hiroshi Ushiyama, Syogo Tejima, and Jun-Ichi Fujita
Neat and Aqueous Polyelectrolytes under a Steady-Shear Flow
J. Phys. Chem. B, 125, 6930 (2021)
- ② Ryota Jono, Syogo Tejima, and Jun-ichi Fujita
Microstructure of the Fluid Particles around the Rigid Body at the Shear-thickening State toward Understanding of the Fluid Mechanics
Scientific Reports, 11, 24204 (2021)

(2) 学会発表

- ① (口頭発表)赤田圭史, 大久保 総一郎, 徳田 一弥, 山口 浩司, 小野木 伯薫, 山田 達矢, 牛山 浩, 手島 正吾, 藤田 淳一
せん断応力印加に伴うシリカコロイド溶液の構造変化
レオロジー学会年会 2021 年 5 月 13, 14 日 オンライン
- ② (口頭発表)赤田 圭史,大久保 総一郎, 徳田 一弥, 山口 浩司, 小野木 伯薫, 山田 達矢, 城野 亮太, 牛山 浩, 手島 正吾, 藤田 淳一
時間分解小角 X 線散乱による非ニュートン流体の構造解析
レオロジー討論会 2021 年 10 月 21 日~22 日 オンライン
- ③ (口頭発表)Patrick A. Bonnaud, Hiroshi Ushiyama, Syogo Tejima, and Jun-Ichi Fujita
Molecular Simulations of Neat and Aqueous Polyelectrolytes Having Low Molecular Weights
ICFD2021, 2021 年 10 月 27 日~29 日東北大学
- ④ (口頭発表)Patrick A. Bonnaud, Hiroshi Ushiyama, Syogo Tejima, and Jun-Ichi Fujita
Dilatant Properties of Low Molecular-Weight Polyelectrolytes
日本コンピュータ化学会 2021 年秋季年会 in つくば, 2021 年 11 月 2, 3 日
筑波大学 (オンライン開催)
- ⑤ (口頭発表)山田 達矢, 手島正吾, 藤田 淳一
イオン液体のシェアニングと流動活性化エネルギーの関係
日本コンピュータ化学会 2021 年秋季年会 in つくば, 2021 年 11 月 2, 3 日
筑波大学 (オンライン開催)
- ⑥ (口頭発表)山田 達矢, 手島, 正吾, 藤田 淳一
Eyring モデルを用いたイオン液体のシェアニングの解明
第 35 回 分子シミュレーション討論会 2021 年 11 月 29 日~12 月 1 日
岡山大学

- ⑦ (ポスター発表)Keishi Akada, Soichiro Okubo, Kazuya Tokuda, Koji Yamaguchi, Takamasa Onoki, Tatsuya Yamada, Ryota Jono, Hiroshi Ushiyama, Syogo Tejima, Jun-ichi Fujita
 Structural Change of Colloidal Silica Solution Under Shear Stress
 MRS fall meeting 2021 年 12 月 6 日～8 日 Boston (オンライン)

(3) その他

無し

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
Cygnus	○	16000	0
Oakforest-PACS			
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			