

ナノスケール・サーマルマネジメント基盤技術の創出
2017年度採択研究代表者

2021年度 年次報告書

大宮司 啓文

東京大学 大学院工学系研究科
教授

ナノ空間材料に内包された水の吸着・移動の熱制御

§ 1. 研究成果の概要

本年度の研究は以下の4項目にまとめられる。1) ナノ空間材料の合成、機能化技術の開発、2) ナノ空間材料に内包された物質の吸着・移動現象の計測技術の開発、3) ナノ空間材料に内包された物質の吸着・移動現象の解析技術の開発、4) 複合材料の合成、水分移動機構の提案、デバイス応用。1については、材料の特徴を把握するための様々な計測系に適した材料を合成した。例えば、炭素系多孔質材料について、単層 CNT の内部への水内包現象について、室温付近で観測された固液相転移の解析を進め、同時に実験と同一温度・圧力条件での分子動力学計算を行った。分子動力学計算において、水分子間の水素結合の数が相転移時に大きく変化することが明らかになり、実験結果と良い一致を示した。2については、高温水蒸気吸着測定装置、吸着量・吸着熱同時計測装置、吸着量・赤外分光同時計測装置などの計測機器の開発を進め、取得データの評価を行った。例えば、同一組成で同一の結晶構造を有するが、構造の動的特性が異なる Rigid MIL-53 (Al) と Flexible MIL-53 (Al) を合成し、それぞれの水吸着と熱量変化の同時計測を行った。その結果、柔軟な Flexible MIL-53 (Al) は構造変化に応答して大きな吸着熱が観測されるのに対し、Rigid MIL-53 (Al) では構造変化による吸着熱がないため、吸着熱が大幅に抑制されることを明らかにした。3については、シミュレーションによりナノ空間材料内部の水の構造的・動的・熱力学的特性を解析する手法を開発した。例えば、MOF 内部への水の吸着過程を明らかにした。4については、本研究で開発した材料を調湿技術に応用することを目標に、様々な調湿技術を検討した。例えば、除湿システムと換気装置を組み合わせた新型コロナウイルス対策機器を提案した。

§ 2. 研究実施体制

(1) 大宮司グループ

① 研究代表者:大宮司 啓文 (東京大学 大学院工学系研究科 教授)

② 研究項目

1. ナノ空間材料に内包された物質の吸着・移動現象の計測技術の開発
水吸着・移動評価、熱輸送の分光計測
2. ナノ空間材料に内包された物質の吸着・移動現象の解析技術の開発
分子シミュレーションソフト、マルチスケールシミュレーションソフトの開発
3. 複合材料の合成、水分移動機構の提案、デバイス応用
水分移動機構の提案、デバイス応用

(2) 遠藤グループ

① 主たる共同研究者:遠藤 明 (産業技術総合研究所 研究戦略企画部 次長・PM/化学プロセス研究部門付 副研究部門長)

② 研究項目

1. ナノ空間材料の合成、機能化技術の開発
珪素系ナノ空間材料
2. ナノ空間材料に内包された物質の吸着・移動現象の計測技術の開発
珪素系ナノ空間材料
3. 複合材料の合成、水分移動機構の提案、デバイス応用
水分移動機構の提案、デバイス応用、複合材料の合成

(3) 千足グループ

① 主たる共同研究者:千足 昇平 (東京大学 大学院工学系研究科 准教授)

② 研究項目

1. ナノ空間材料の合成、機能化技術の開発
炭素系ナノ空間材料
2. ナノ空間材料に内包された物質の吸着・移動現象の計測技術の開発
炭素系ナノ空間材料、熱輸送の分光計測

(4) 松田グループ

① 主たる共同研究者:松田 亮太郎 (名古屋大学 大学院工学研究科 教授)

② 研究項目

1. ナノ空間材料の合成、機能化技術の開発
ナノポーラス金属錯体
2. ナノ空間材料に内包された物質の吸着・移動現象の計測技術の開発
ナノポーラス金属錯体

(5) 平出グループ

① 主たる共同研究者: 平出 翔太郎 (京都大学 大学院工学研究科 助教)

② 研究項目

1. ナノ空間材料に内包された物質の吸着・移動現象の計測技術の開発
珪素系ナノ空間材料
2. ナノ空間材料に内包された物質の吸着・移動現象の解析技術の開発
分子シミュレーションソフトの開発

【代表的な原著論文情報】

- 1) M. Liu, K. Hisama, Y. Zheng, M. Maruyama, S. Seo, A. Anisimov, T. Inoue, E. I. Kauppinen, S. Okada, S. Chiashi, R. Xiang, S. Maruyama, “Photoluminescence from Single-Walled MoS₂ Nanotubes Coaxially Grown on Boron Nitride Nanotubes,” ACS Nano, 15, 8418, 2021.
- 2) Jiao Gao, Shubo Fei, Ya-Lun Ho, Ryotaro Matsuda, Hirofumi Daiguji and Jean-Jacques Delaunay, “Water confined in MIL-101(Cr): unique sorption-desorption behaviors revealed by diffused reflectance infrared spectroscopy and molecular dynamics simulation,” Journal of Physical Chemistry C 125, 17786-17795, 2021.
- 3) Lili Yu, Wei-Lun Hsu, Jubair Ahmed Shamim and Hirofumi Daiguji, “Pore network modeling of a solid desiccant for dehumidification application,” International Journal of Heat and Mass Transfer 186, 122456, 2022.
- 4) Jubair Ahmed Shamim, Wei-Lun Hsu and Hirofumi Daiguji, “Review of component designs for post-COVID-19 HVAC systems: Possibilities and challenges,” Heliyon 8, e09001, 2022.