

ナノスケール・サーマルマネジメント基盤技術の創出
2018年度採択研究代表者

2021年度 年次報告書

中村 雅一

奈良先端科学技術大学院大学 先端科学技術研究科
教授

分子接合によるナノカーボン系材料の広範囲熱伝導率制御

§ 1. 研究成果の概要

カーボンナノチューブ(CNT)などのナノカーボン複合材料では、ナノカーボンユニット間の接合界面が熱輸送を律速する。本研究では、そこに有機あるいはハイブリッド分子による接合を形成し、分子接合部のナノスケール熱輸送を理解し制御することによって、フレキシブルなナノカーボン複合材料の熱伝導率を広範囲にわたって選択可能とすることを目指している。

以下に 2021 年度の主要な成果を列挙する。

・CNT 系断熱性熱電接合

前年度までに技術確立したワイヤ状試料の高精度熱伝導率測定法を活用し、CNT 紡績糸の様々な作製条件や有機ハライド化合物によるドーピングなどについて、 ZT や熱伝導率を主たる評価指標とする最適化を行った。

より高性能なアプタマー候補については、Dps の C 末端と N 末端にそれを付与したものでナノカーボン材料への吸着動態を調査中であるが、場合によって Dps の凝集傾向が見られることが判明した。

・高熱伝導性接合

直描法による CNT リボンについても、高精度熱伝導率測定法を用いて作製条件の最適化を進め、金属の中で上位に相当する熱伝導率は再現性良く得られるようになった。また、CNT の配向メカニズムについて理論的考察を進め、半定量的ではあるが実験結果がニードル中でのせん断応力の影響によって説明できることを示した。

・分子接合部熱輸送機構の理解と制御

上記 2 項目の研究の過程で、CNT の配向度を変化させたときに、熱伝導率と導電率の間に普遍的かつ線形ではない関係式が成り立つことを見いだした。

分子スケール温度分布計測を目的とした原子間力顕微鏡ポテンショメトリの開発については、コロナ過で遅れていた装置の改良を進め基本性能がある程度使えるレベルに達したことを確認した。また、測定試料として、基板上の電極間を電氣的に接続する CNT 網目ネットワークが再現性よく作製できるようになった。

分子動力学シミュレーションにより、CNT/Dps/CNT 接合部の温度分布についてのファーストデータを得た。

§ 2. 研究実施体制

(1) 中村グループ

- ① 研究代表者: 中村 雅一 (奈良先端科学技術大学院大学 先端科学技術研究科 教授)
- ② 研究項目
 1. CNT 系断熱性熱電接合の高性能化
 - 1.1) CNT/C-Dps 凝集体／紡績糸の作製と熱電／熱輸送特性評価
 - 1.5) ナノカーボン/ハイブリッドペロブスカイト凝集体／紡績糸の作製と熱電／熱輸送特性評価
 2. 断熱性熱電接合の各種ナノカーボンへの水平展開
 - 2.1) 各種ナノカーボン凝集体の作製と熱輸送特性評価
 3. 断熱性熱電接合の応用開拓
 - 3.1) 低熱伝導率と熱電性能を両立させた高断熱性熱電素子の開発
 4. 高熱伝導性接合の高性能化
 - 4.1) 熱輸送増強ポリマーの探索と作製法最適化による高熱伝導率化
 - 4.2) 接合部の構造解析とCNT フォノンへの影響評価
 5. 高熱伝導性接合の応用開拓
 - 5.1) 究極の高熱伝導率を有する導熱・導電材料の応用開拓
 6. 分子接合部熱輸送機構の理解と制御
 - 6.0) ワイヤ状試料の精密熱伝導率測定技術の確立
 - 6.1) 熱輸送現象の分子スケール計測
 - 6.2) 接合部の熱輸送シミュレーション

(2) 山下グループ

- ① 主たる共同研究者: 山下 一郎 (大阪大学 大学院医学系研究科 特任研究員)
- ② 研究項目
 1. CNT 系断熱性熱電接合の高性能化
 - 1.2) C-Dps 用アプタマーの高性能化と吸着メカニズム解明
 - 1.3) アプタマー提示球殻状タンパク質の CNT 吸着メカニズム解明
 2. 断熱性熱電接合の各種ナノカーボンへの水平展開
 - 2.2) 各種ナノカーボン材料用アプタマーの新規創製

【代表的な原著論文情報】

- 1) “Gas phase doping of pre-fabricated CNT yarns for enhanced thermoelectric properties”, Synthetic Metals vol. 280, article number 116874 (2021).
- 2) “Anomalous enhancement of electrochemical charge transfer by a Ru complex ion intercalator”, Anal. Chem., Vol. 94, No. 2, 571-576 (2021).
- 3) “Carbon nanotube/biomolecule composite yarn for wearable thermoelectric application”, ACS Appl. Energy Mater. Vol. 5, No. 3, pp. 3698-3705 (2022).
- 4) “Round robin study on the thermal conductivity/diffusivity of a gold wire with a diameter of 30 μ m tested via five measurement methods”, J. Therm. Sci. (in press).
- 5) “The role of structural order in the mechanism of charge transport across tunnel junctions with various iron-storing proteins”, (査読中).