

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

福島 孝典

東京工業大学 科学技術創成研究院
教授

分子ダイナミクスを利用した熱マネジメント

§ 1. 研究成果の概要

有機系物質に特徴的な因子と熱輸送の相関を理解する取り組みとして、 π 電子系分子によく見られる π スタックに関して詳細に検討した結果、電荷や励起子の場合と対照的に、この構造形態は熱輸送にはあまり寄与しないことを明らかにした。分子間相互作用の一つであるハロゲン接触について調べるため、ハロゲン種を変えても同形構造をとるトリプチセン誘導体を設計し、それらの単結晶試料を用いてハロゲン-ハロゲン接触方向の熱伝導度を評価した結果、原子質量や分子間相互作用よりも、接触するハロゲンの同種性が熱輸送に寄与することが示唆された。光照射と熱により単結晶状態を保ったまま重合と解重合を示す系は、分子間力で集合した状態と、分子が共有結合で連結された状態の熱輸送の直接比較を可能にする。過去に一例だけ報告されている系に着目し、結合形成前後の熱伝導性を評価したところ、予想に反して、反応前後で明確な差は見られず、これは高い熱伝導性には共有結合の有無以外の因子があることが強く示唆された。分子ダイナミクスを示す系としてテトラシアノキノジメタン塩の単結晶の熱物性を評価したところ、対カチオンの質量やダイナミクスが熱伝導度を低減させ、熱電性能指数にも影響を及ぼすことを見いだした。

前年度に続く三脚型トリプチセンを足場として様々な官能基を高密度集積させた SAM と水との界面熱抵抗の検討では、親水性の官能基は界面熱抵抗を減少させる一方、SAM を構成する分子自体の熱抵抗も界面熱抵抗に寄与することが示唆された。また、走査型熱顕微鏡を用いた有機 SAM の熱計測に初めて成功した。特に従来法とは異なる非接触モードの検討から、輻射により非破壊的かつ高分解能な表面構造イメージングが可能になることを示した。理論では、単分子接合デバイスを対象に熱整流作用の検討や分子ローター集積体の回転緩和と熱伝導の相関に関する計算シミュレーションを進めている。

§ 2. 研究実施体制

(1) 福島グループ

- ① 研究代表者: 福島 孝典(東京工業大学 科学技術創成研究院 教授)
- ② 研究項目
 - ・精緻な高密度自己組織化単分子膜を形成する理想的な三脚型チオール分子の開発
 - ・熱マネージメント有機材料の開発と熱物性測定

(2) 西野グループ

- ① 研究代表者: 西野 智昭(東京工業大学 理学院 准教授)
- ② 研究項目
 - ・機械的外力による単分子の熱起電力制御
 - ・走査型サーマル顕微鏡を用いた自己組織化単分子膜の微小スケール熱計測の検討

(3) 中村グループ

- ① 研究代表者: 中村 恒夫(産業技術総合研究所 機能材料コンピューショナルデザイン研究センター 研究チーム長)
- ② 研究項目
 - ・フォノン散乱による散逸効果を組み込んだ量子非平衡熱伝導シミュレータの開発
 - ・分子-分子接合系の熱伝導予測と熱デバイス機能提案、分子ダイナミクス熱伝導への影響の解明

(4) 芥川グループ

- ① 研究代表者: 芥川 智行(東北大学 多元物質科学研究所 教授)
- ② 研究項目
 - ・有機単結晶を用いた熱伝導度測定システムの構築
 - ・逐次相転移とダイナミクスが関連した有機-無機ハイブリッド材料の熱伝導性解明

(5) 宍戸グループ

- ① 研究代表者: 宍戸 厚(東京工業大学 科学技術創成研究院 教授)
- ② 研究項目
 - ・熱マネージメントを指向した ZnO ナノロッド液晶高分子フィルムの作製
 - ・高分子フィルムのダイナミクス解析

【代表的な原著論文情報】

- 1) S. Fujii, Y. Shoji, T. Fukushima, T. Nishino, “Visualization of Thermal Transport Properties of Self-Assembled Monolayers on Au(111) by Contact and Non-Contact Scanning Thermal Microscopy”, *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 18777-18783.
- 2) N. Hoshino, T. Akutagawa, “Thermal Conductivities and Figures of Merit of TCNQ-Based Thermoelectric Materials Consisting of Cations Exhibiting Order-Disorder Transitions”, *Crystal Growth & Design*, doi.org/10.1021/acs.cgd.2c00161.
- 3) K. Ogata, K. Matsumoto, Y. Kobayashi, S. Kubo, A. Shishido, “Unidirectional Alignment of Surface-Grafted ZnO Nanorods in Micrometer-Thick Cells Using Low-Molecular-Weight Liquid Crystals”, *Molecules* **2022**, *27*, 689.