

戦略的創造研究推進事業
－CREST(チーム型研究)－

研究領域「ナノスケール・サーマルマネー
ジメント基盤技術の創出」

研究領域中間評価用資料

研究総括:丸山 茂夫

2022年2月

目 次

1. 研究領域の概要	1
(1) 戦略目標	1
(2) 研究領域	1
(3) 研究総括	1
(4) 採択研究課題	2
2. 研究総括のねらい.....	3
3. 研究課題の選考について.....	4
(1) 選考方針	4
(2) 選考結果	4
4. 領域アドバイザーについて.....	6
5. 研究領域のマネジメントについて.....	8
(1) 会議実施状況	8
(2) 運営事例	9
(3) 研究予算支援	10
6. 研究領域としての戦略目標の達成に向けた状況について.....	11
(1) 研究成果の科学的・技術的な観点からの貢献.....	11
(2) 研究成果の社会的・経済的な観点からの貢献.....	16
7. 総合所見	20
(1) 研究領域のマネジメント.....	20
(2) 研究領域としての戦略目標の達成に向けた状況.....	20
(3) 本研究領域を設定したことの意義と妥当性.....	20
(4) 科学技術イノベーション創出に向けた、今後への期待、展望、課題.....	21
(5) 所感、その他	21

1. 研究領域の概要

(1) 戦略目標

「ナノスケール熱動態の理解と制御技術による革新的材料・デバイス技術の開発」

(2) 研究領域

「ナノスケール・サーマルマネジメント基盤技術の創出」(2017年度発足)

(3) 研究総括

氏名 丸山 茂夫 (東京大学大学院工学系研究科 教授)

*前任者 栗野 祐二 (慶應義塾大学理工学部 教授)～2018年1月

上記詳細は、以下 URL をご参照ください。

JST 公開資料「新規研究領域の事前評価」

<http://www.jst.go.jp/kisoken/evaluation/before/index.html>

平成 29 年度新規研究領域の事前評価

https://www.jst.go.jp/kisoken/evaluation/before/hyouka_h29.pdf

(4) 採択研究課題

採択年度	研究代表者	所属・役職 採択時 ¹	研究課題
2017年度	内田 健一	物質・材料研究機構・ グループリーダー	スピントロニック・サーマルマネージメント
	小原 拓	東北大学・教授	分子界面修飾とナノ熱界面材料による固体接合界面熱抵抗低減
	大宮司 啓文	東京大学・教授	ナノ空間材料に内包された水の吸着・移動の熱制御
	宮崎 康次	九州工業大学・教授	有機-無機ヘテロ界面によるフォノン・電子輸送フィルタリング
	柳 和宏	首都大学東京・教授 (東京都立大学・教授)	フレキシブルマテリアルのナノ界面熱動態の解明と制御
2018年度	高橋 厚史	九州大学・教授	二次元材料とナノ計測の融合による相変化伝熱の革新
	竹内 恒博	豊田工業大学・教授	異常電子熱伝導度と異常格子熱伝導度の制御
	中村 雅一	奈良先端科学技術大学院大学・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
	福島 孝典	東京工業大学・教授	分子ダイナミクスを利用した熱マネジメント
	宮内 雄平	京都大学・准教授 (京都大学・教授)	ナノ物質科学を基盤とするサーモエレクトロニクスの創成
2019年度	Sebastian VOLZ	東京大学・LIMMS Director	Controlling Two-dimensional Surface Phonon Polariton Heat Transfer
	内田 建	東京大学・教授	空間的・時間的に局在化したナノ熱の学理と応用展開
	森川 淳子	東京工業大学・教授	高分子の熱物性マテリアルズインフォマティクス

¹変更/移動のあった場合、下段に括弧つきで記載

2. 研究総括のねらい

本研究領域は、熱に関する様々な課題の解決や熱エネルギー有効利用に向けて、熱の根源的な理解と高度に制御・利用するための基盤技術の創出を目指す。

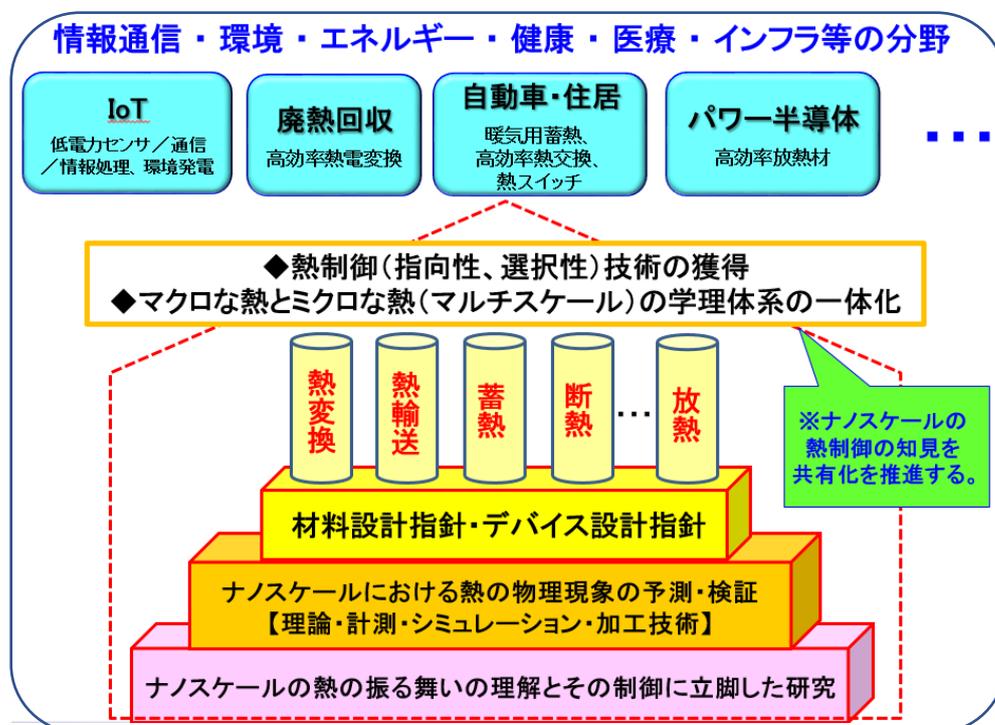
具体的には、3つの大きな方針に基づいて研究を推進する。

1つ目の方針は、ナノスケールの熱の振る舞いを理解し、革新的な熱制御基盤技術の構築に取り組み、高効率な放熱・断熱・蓄熱・変換などを可能とする新材料の創製や、従来の特性や機能を飛躍的に向上させる新たなデバイスの創出を目指す。

2つ目の方針は、上記熱制御基盤技術の創出のために重要な理論、計測、シミュレーション、加工技術などの研究を推進し、ナノスケールにおける熱の物理現象の予測・検証を可能とし、新たな材料設計、デバイス設計の指針に繋がる技術の構築を目指す。

3つ目の方針は、この研究領域はナノスケールの熱の理解を基本として様々な熱の課題を対象とすることから、方針1、2に示すとおり、様々な階層と広範な分野に関わる学問・技術分野の融合を積極的に推進する。

この研究領域は、ナノスケールの熱制御基盤技術の創出により、熱を味方につけ、新たな段階の高効率利用法を生み出すことで、高度情報化社会の実現や環境負荷の少ないエレクトロニクスや交通輸送・住宅など社会インフラの実現、健康医療分野での新産業・新市場創出を実現し新たな段階の高度熱利用社会の実現を目指す。



3. 研究課題の選考について

(1) 選考方針

高度情報化社会の実現に向けた技術革新が進む中、微細化された高密度メモリや高速情報処理・通信用、パワーエレクトロニクス用電子デバイスや、それらを用いた機器・システムで高性能化の障壁として発熱問題が顕在化し、その解決のために高度な熱制御技術の構築が期待される。また、工場、自動車、住宅等において、未利用のまま排出されている熱エネルギーが大量に存在しており、こうした熱エネルギーの有効活用が省エネルギー社会の実現には不可欠と考えられる。

本研究領域では、このような社会への貢献を将来に見据え、熱を高効率に輸送、変換、または高度に利用するための熱制御基盤技術の構築に取り組む。このことを実現するには、従来になかった新しい概念、発想に基づいた熱制御技術の創出が求められる。例えば半導体内の電子状態は、ナノ加工技術や原子層制御のヘテロ接合結晶成長技術に基づく「バンドエンジニアリング」によって精緻に制御され、その結果、多くの革新的電子デバイス・光デバイスを生み、エレクトロニクスの一大分野としての成功に貢献してきた。これを熱に適用すれば、半導体中では今まで人類が積極的には利用してこなかった結晶の格子振動、いわゆるフォノンを我々の手で設計・制御する「フォノンエンジニアリング」を行うことになる。現在はまだ萌芽的段階にあるこうした新しい原理や物質、デバイス等のポテンシャルを最大限に引き出し、もしくは高度化することが必要となる。

「放熱」「熱輸送」「熱発生」「断熱」「蓄熱」「熱変換」「輻射」等の熱制御技術において、現在取り組まれている最先端の研究に新たな着想や視点を加えて新たな熱制御技術を創出しようとする、斬新かつ挑戦的な提案を募集した。また、従来からの熱輸送制御・熱利用技術に関する研究についても、ナノスケール(ミクロスケール)の熱の振る舞いの理解とその制御に立脚したものであれば対象とした。すなわち、いずれの場合においても、提案技術の独創性・優位性がどこにあるかを明確に示すこと、また熱制御技術としての具体的に期待できる応用展開を採択の条件とした。

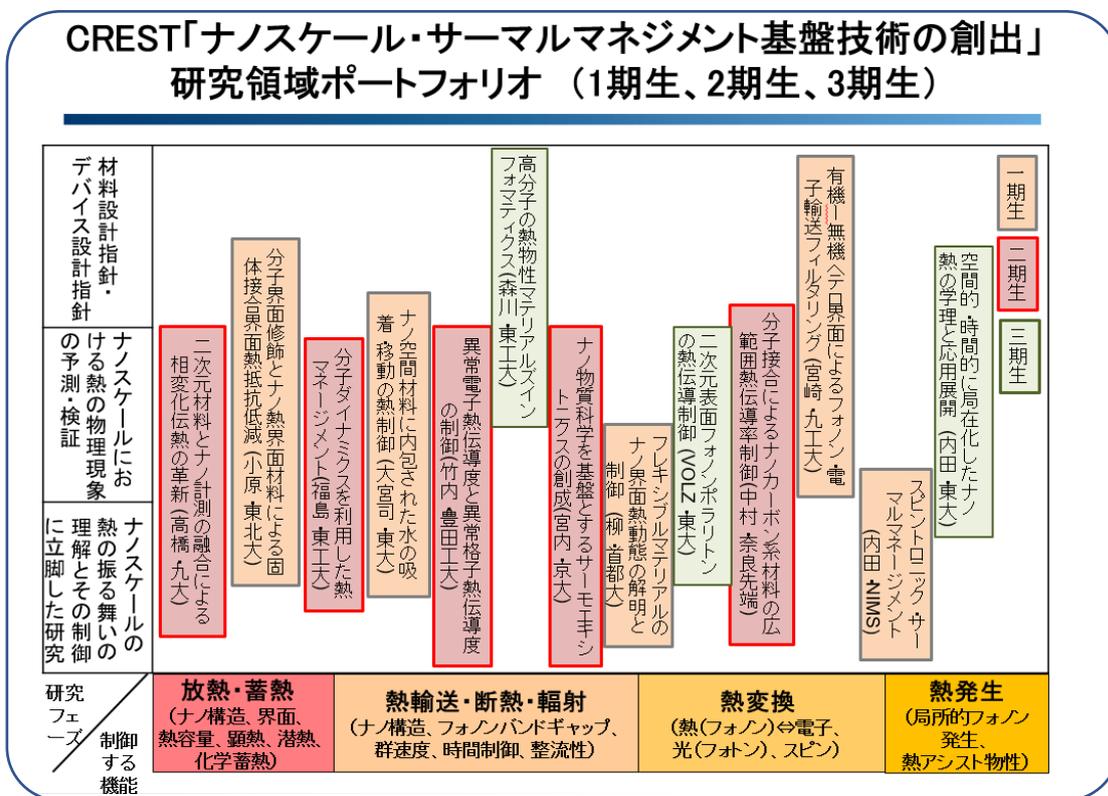
また、原理実証にとどまらず、その実用化に向けた検討を常に行い、その道筋を付けることが求められる。特に、計測技術や材料設計の指針・理論(計算科学を含む)、デバイスシミュレーション技術など、早期実用化が見込まれる分野では企業連携が推奨された。

(2) 選考結果

2017年度採択課題は、固体接合界面熱抵抗の低減による効率的な放熱、ナノ空間材料に内包された水の吸着・移動に伴う熱輸送、フレキシブルマテリアルのナノ界面や有機材料と無機材料の界面における熱制御と熱変換、スピントロニクスに基づく熱エネルギー変換原理の解明とその応用と、熱制御に関わる研究課題を幅広くカバーし、革新的な基盤技術の創出に向けての研究成果が期待される。

2018 年度採択課題は、異常電子熱伝導度と異常格子熱伝導度の精密解析や巨視的分子ダイナミクスと熱輸送の相関に関する学理に基づく革新材料・熱制御デバイスへの展開、ナノカーボン複合材料と分子接合部のナノスケール熱輸送に着目した広範な熱伝導率の制御、新たに観測されたカーボンナノチューブからの熱励起子現象を応用した熱や広帯域光から特定波長光への効率的変換、二次元材料の原子オーダーの平坦性と構造自由度を相変化伝熱に活用した放熱性能の向上と、ナノスケールの根源的な熱の理解から高度な熱制御・利用につながる革新的な研究成果が期待される。

2019 年度採択課題は、界面に局在するフォノンと電磁波の連成波である表面フォノンポラリトンにより、固体中を伝搬するフォノンの熱伝導では実現できない革新的熱伝導技術の創製を目指すもの、ナノ材料中の電流によって発生するジュール熱を時間的・空間的に局在化させた「ナノ熱」を制御可能とする電荷キャリアとフォノンの輸送に関する学理と技術の構築を目指すもの、計測・合成・量子化学計算・デバイス開発から創出される新規熱物性データと、機械学習・計算科学に基づくマテリアルズインフォマティクスを融合することによる高分子熱伝導の学理と実用的なデータベースの構築を目指すものとなっており、ナノスケールの根源的な熱の理解から広範な熱制御・利用につながる革新的な研究成果が期待される。



上図に示すように、3年間の採択により熱制御の幅広い分野において、先進的な研究を推進する研究課題を採択することができた。

4. 領域アドバイザーについて

以下のような方針に沿って、領域アドバイザーを依頼した。

①新旧の熱科学研究者

⇒新世代の熱研究者

⇒従来熱研究の大家で、コミュニティの信頼が高い研究者

②理論・計測・解析・シミュレーション・データベース科学

⇒産学ともに必要としている理論、計測において、産学双方の有識者を配置する

③新たな学理の創出

⇒フォノンと他の量子物性とのインタラクションといった新たな物性物理の研究者

④モノの具現化

⇒材料開発の具現化ができる化学工学関連の研究者(特に企業研究者)

⇒デバイス・システム化にたけたセンサ、MEMS、回路の研究者(産学ともに必要)

領域アドバイザー名 (専門分野)	着任時の所属 ¹	役職	任期
小原 春彦 (熱電変換、超伝導)	産業技術総合研究所	研究戦略部長	2017年4月 ～2024年3月
喜々津 哲 (半導体プロセス)	(株)東芝	研究主幹	2017年4月 ～2024年3月
徐 一斌 (情報科学、熱電材料)	物質・材料研究機構	データプラットフォーム長	2017年4月 ～2024年3月
常行 真司 (計算物質科学)	東京大学	教授	2017年4月 ～2024年3月
鶴田 隆治 (熱工学、エネルギー学)	九州工業大学	理事・副学長	2017年4月 ～2023年3月
花村 克悟 (熱工学、近接場光学)	東京工業大学	教授	2017年4月 ～2024年3月
平山 祥郎 (スピントロニクス)	東北大学	教授 (総長特命教授・センター長)	2017年4月 ～2024年3月
藤田 博之 (MEMS、センサ)	東京都市大学	教授	2017年4月 ～2024年3月
森 孝雄 (熱電材料)	物質・材料研究機構	主任研究者 (グループリーダー)	2017年4月 ～2024年3月
山内 崇史 (熱マネジメント)	(株)豊田中央研究所	主任研究員 (Leading Researcher)	2017年4月 ～2024年3月

山根 常幸 (材料物性、熱計測)	(株)東レリサーチセンター	理事・部長	2017年4月 ～2024年3月
領域運営アドバイザー 馬場 寿夫 (材料物性)	科学技術振興機構	フェロー	2017年4月 ～2024年3月

¹変更/移動のあった場合、下段に括弧つき記載

5. 研究領域のマネジメントについて

(1) 会議実施状況

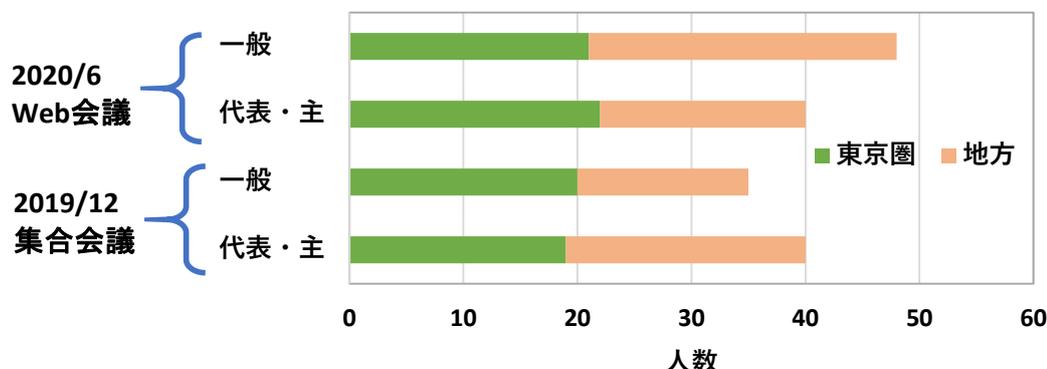
研究領域全体会議および研究チーム別の個別面談により、各研究チームの進捗状況を把握し、今後の進め方を領域アドバイザーも交えて議論している。研究領域主催の主要な会議の開催実績は以下の通りである。

年度	会議名	日時	場所	参加
2017	キックオフ会議	11/20 14:00～18:20	別館 1 階ホール	61 名
	1 期サイトビジット	12/12, 14、1/15, 23, 26	代表所属機関	—
2018	CREST/ さきがけ合同領域会議	6/21 13:00～18:20	別館 2 階会議室 A-1、A-2	83 名
	キックオフ会議	11/9 11:00～18:20	別館 1 階ホール	64 名
	1, 2 期サイトビジット	10/15, 25、11/11、12/6, 7, 13, 25、2/5	代表所属機関	—
2019	CREST/ さきがけ合同領域会議	5/16 13:00～18:25 5/17 9:30～18:30 5/18 9:30～17:10	多摩永山情報教育センター	109 名
	キックオフ会議	11/22 13:00～18:15	AP 市ヶ谷 8 階	92 名
	3 期サイトビジット	10/4, 18	代表所属機関	—
	1, 2 期個別面談	12/17, 20, 23, 26 各 2h	別館会議室	—
2020	Web 領域会議	6/12 10:00～15:30 6/13 10:00～14:30	Zoom ウェビナー	131 名
	1 期課題中間評価会	10/16 10:00～15:40	Zoom 会議	—
	2, 3 期個別面談	1/25, 26, 29 各 2h	Zoom 会議	—
2021	Web 領域会議	6/14 10:00～16:00 6/15 10:00～15:00	Zoom ウェビナー	169 名
	2 期課題中間評価会	11/8 10:00～15:40	Zoom 会議	—

2020 年度以降はコロナ禍により、対面での会議開催が難しくなり、すべて Zoom による Web 会議に移行している。Web 会議では研究者間の個別交流を促進するのが難しくなる反面、首都圏での開催では出張参加が難しい地方在住研究者が参加しやすくなるメリットもある。

下図は、領域参加研究者母数がほぼ同じ時期に、東京で集合開催した会議と、Web 開催

した会議の東京圏とその他地域の所属研究者の参加割合を示した図である。研究代表者や主たる共同研究者はあまり変わらないが、一般の参加研究者は地方からの参加が大幅に増加していることがわかる。



(2) 運営事例

1期小原チームにおいては、研究領域内のハブとなるような界面熱特性の数値計算法と実験計測法を研究課題とすることから、研究開始当初は8グループで構成し、委託研究費も重点配分を行った。しかし、2年次が経過した時点で、手がける研究内容が発散する傾向となったため、指導により熱界面材料(TIM)開発関係の2グループの活動を中止して、6グループに再編した。

1期柳チームにおいては、カーボンナノチューブ(CNT)等のフレキシブルマテリアルの熱起電力特性の向上成果が出始め、ナノ界面の熱動態の測定が進展したのに合わせて、4年次から2期宮内チームの参加グループでもある山本グループを新たに加えて、理論解析の強化を図っている。

ネットワークづくりとしては、研究領域内の研究者間やさきがけ「熱制御」研究領域の研究者との連携を支援するとともに、海外研究者との連携強化を推進している。

複数チームで研究しているナノワイヤーの熱伝導率、熱拡散率測定特性の評価について、2期中村チームが中心となって、1期小原チーム、1期宮崎チーム、2期高橋チームの4チーム間で、ラウンドロビンテストを実施して、それぞれの評価法の特徴や差異を明らかにすることで、評価法の信頼性向上を図っている。

さきがけ「熱制御」研究領域研究者との連携では、2期福島チームからの有機材料の提供や、3期森川チームでの材料特性評価などが行われている。

また、研究総括が編集代表者となり、当領域の研究者が多数参加(内田健一、大宮司、山本、菊川、小原、宮内、山口、宮崎、竹内、福島、森川、八木、他)して、「マイクロ・ナノ熱工学の進展」をまとめて書籍として発行した。

http://www.nts-book.co.jp/item/detail/summary/nano/20210401_46.html

(3) 研究予算支援

海外研究者との連携促進のための海外交流については、総括裁量経費も活用して支援を進めており、例えば 2019 年度は国際強化支援策での 3 件の派遣・招聘支援に加え、期中に総括裁量経費で 4 件の派遣・招聘の支援を行っている。

また、国際会議やワークショップの開催についても積極的に支援している。近年は、コロナ禍で対面での会議開催が難しいが、Web 会議に切り替えるなどして、連携が途切れないようにしている。

実施年度	会議名	形態	参加国
2017- 2022	Workshop on Thermal and Charge Transport across Flexible Nano-interface(TCTFN)	ワークショップ	シンガポール、中国、米国、欧州
2018- 2022	フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム	シンポジウム	欧州、米国
2019	トポロジカル物質とスピントロニクス研究分野の融合研究に向けた国際 WS	ワークショップ	米国プリンストン大
2020	伝熱マテリアルズ・インフォマティクスに関する日米合同ワークショップ	ワークショップ	米国 NSF

予算については、総括裁量経費を用いて複数年にわたる増額希望を受け付けることで、継続した研究者雇用やシステム運用などによる研究拡充を可能としている。3 期内田チームを代表として 1 期内田チーム、1 期宮崎チーム、3 期 VOLZ チーム合同でのフォノン物性の計算環境とデータベース構築に関しての 4 年間の予算増額などを実施している。

6. 研究領域としての戦略目標の達成に向けた状況について

本研究領域は、熱に関する様々な課題の解決や熱エネルギー有効利用に向けて、熱の根源的な理解と高度に制御・利用するための基盤技術の創出を目指したものであり、研究成果は、科学的・技術的な観点からの貢献が主となり、社会的・経済的な観点からの貢献はこれらの基盤技術の元に将来的に可能となると考える。ただし、科学的・技術的な観点からの貢献であっても将来の社会的・経済的な貢献を見据えたものである。以下、科学的・技術的な観点と社会的・経済的な観点とに分けて議論する。

(1) 研究成果の科学的・技術的な観点からの貢献

ナノスケールの材料や界面現象が関わる熱移動現象はさまざまな分野で現れるとともに、一般に、熱輸送は、様々なメカニズムの熱輸送が重畳することに本質的な難しさがある。マクロな伝熱工学では、伝熱形態を熱伝導、対流伝熱、熱放射の3形態に分類し、経験的にいずれかが支配的と考えて解析を行うが、ナノスケールの材料や界面の場合には、支配因子のバランスが変わるとともに、弾道的なフォノン輸送、フォノンの量子化、相界面現象、近接場効果によるふく射、電子のトンネリング、スピン流など、マクロスケールでは無視できた現象も顕れてくる。ナノスケールの熱の振る舞いの理解、熱制御基盤技術構築に向けて、ナノスケール熱制御の体系化と学理の構築から開始している。

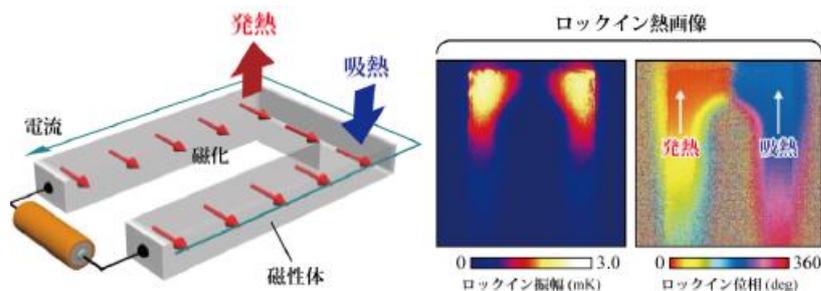
具体的には、「放熱」「熱輸送」「熱発生」「断熱」「蓄熱」「熱変換」「輻射」等の熱制御技術において、現在取り組まれている最先端の研究に新たな着想や視点を加えて新たな熱制御技術の創成を目指しており、それぞれの最先端の研究分野を主戦場として熱制御技術の展開するフェーズから熱制御技術を中心と最先端研究分野を横断したナノスケール熱制御の体系化へと進んでいる。これまでに、①バルク固体や固体表面の物理、②有機材料や高分子材料の熱輸送、③低次元材料や低次元材料を複合した材料、④相変化やふく射熱輸送制御、⑤フレキシブル熱電変換材料を中心としたデバイス展開研究において、世界的にインパクトのある研究成果を得ている。本研究領域全体でのこれまでの国際的ジャーナル論文は521編であり、熱工学や熱科学分野の国際論文の特性を考慮すると極めてインパクトの大きな数字である。内容的にも、科学技術全般へのインパクトの大きなNature、Science、Nature Materialsなどの雑誌論文、広い科学領域での読者層を有するNature Communications、Science Advancesなどの論文誌、物理分野での代表となるPhys. Rev. Lett.をはじめとするPhysical Reviewシリーズ、化学分野での代表となる、J. Am. Chem. Soc.、ACS Nano、Nano Lett.、J. Phys. Chem.、デバイス分野での代表となる、Appl. Phys. Lett.、伝熱分野でのフラグシップであるInt. J. Heat Mass Transferなどの多数の論文を含み、広い科学技術分野への貢献を果たしている。当然ながら、1000件を超える国内外学会の口頭発表などもこれらの雑誌論文を補完するものとなっている。

以下、①バルク固体や固体表面の物理、②有機材料や高分子材料の熱輸送、③低次元材料や低次元材料を複合した材料、④相変化やふく射熱輸送制御についての成果を概観する。

①バルク固体や固体表面の物理

バルク固体や固体表面における熱輸送現象の解明に向けて、内田健一チームのスピン트로ニック熱輸送、竹内恒博チームの電子熱伝導と格子熱伝導、VOLZ チームの表面フォノンポラリトンを中心に熱移動の基礎物理の探求を進めてきており、以下の優れた成果をあげている。

内田健一チームは、すでにスピントロニクス分野の世界をリードするチームであり、磁性材料やスピントロニクス素子が有する制御性・対称性・整流作用を利用した熱エネルギー制御原理とその応用に向けた基盤技術の構築が進んでいる。異方性ペルチェ効果、異常エッチングスハウゼン効果などスピンを用いなければ実現できない熱制御について、新しいコンセプトを実証しており、極めて高い基礎研究成果を上げている。例えば、内田健一チームが世界初の観測に成功した異方性磁気ペルチェ効果(磁化と電流の相対角に依存して磁性材料のペルチェ係数が変化する現象)に関しては、論文が *Nature* 誌に掲載され、大きな注目を集めた。[chida, S. Daimon, R. Iguchi, and E. Saitoh, “Observation of anisotropic magneto-Peltier effect in nickel”, *Nature*, Vol. 558, No. 7708, pp. 95–99, 2018]

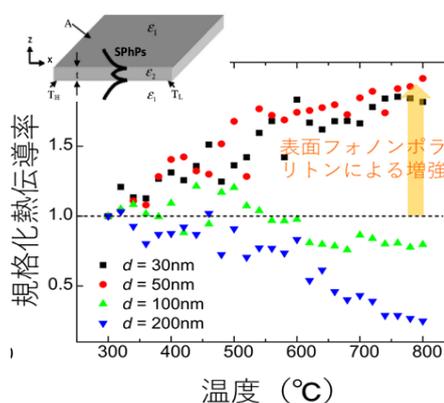


また、異常エッチングスハウゼン効果に着目した“アクティブな熱制御”を目指して、円偏光照射により電流に伴って生じる熱流を自在に制御することに成功している[J. Wang, Y. K. Takahashi, and K. Uchida, “Magneto-optical painting of heat current”, *Nature Communications*, Vol. 11, No. 2, pp. 1-7, 2020]。これらの磁性材料やスピントロニクス素子に特有の熱電効果(磁気熱電効果)及び熱流とスピン流の変換現象(熱スピン効果)に関する系統的な研究に加えて、新原理・新機構の導入によりスピントロニクス現象として、ゼーベック効果を駆動力とした新機構の“横型”熱電変換の提案と実証[W. Zhou, K. Yamamoto, A. Miura, R. Iguchi, Y. Miura, K. Uchida*, and Y. Sakuraba*, “Seebeck-driven transverse thermoelectric generation”, *Nature Materials*, Vol. 20, No. 4, pp. 463-467, 2021]や磁気トムソン効果の世界初の直接観測[K. Uchida*, M. Murata, A. Miura, and R. Iguchi, “Observation of the magneto-Thomson effect”, *Physical Review Letters*, Vol. 125, No. 10, p. 106601, 2020]、磁性多層膜における巨大磁気熱抵抗効果の観測[H. Nakayama*, B. Xu, S. Iwamoto, K. Yamamoto, R. Iguchi, A. Miura, T. Hirai, Y. Miura, Y. Sakuraba, J. Shiomi*, and K. Uchida*, “Above-room-temperature giant thermal conductivity switching in spintronic multilayers”, *Applied Physics Letters*, Vol. 118, No. 4, p. 042409,

2021]などの成果がある。

竹内チームは、異常電子熱伝導度と異常格子熱伝導度の制御の研究で、「非調和振動で特徴づけられる材料の格子熱伝導予測方法の確立」など基礎物理としての優れた成果をあげ論文発表をするとともに、これらを基盤として、「熱利用素子(熱ダイオード、熱流スイッチ、熱電材料)の高性能化」、「2次元材料の熱電性能の評価と高性能」などの実用に近い材料開発領域での注目される実験成果を論文にしている。具体的には、貴金属カルコゲナイドなどの材料群を用いて熱物性を精密測定すると共に、高性能熱利用素子の開発研究を行い、バイアス電圧の印加により 1000%以上の熱流変化を示すスイッチング素子、磁場により熱伝導度が約 50%減少する材料、370~410 K の範囲において巨大な無次元性能指数($ZT = 20$)を示す熱電材料の開発に成功している[Mixed-phase effect of a high Seebeck coefficient and low electrical resistivity in Ag_2S ”, G. Kim, D. Byeon, S. Singh, K. Hirata, S. Choi, M. Matsunami, T. Takeuchi. *Journal of Physics D: Applied Physics* **54** (11), 115503]。さらに、表面状態に特異なフェルミ面を有するトポロジカル物質において、熱電物性の解析が十分に可能である $0.2\sim 1.0\text{cm}^2$ の大きさの高品質なトポロジカル絶縁体単結晶薄膜を気相輸送成長法およびテープ剥離法を適用することで作製し、2次元物質の中では最大の熱電変換パワー因子の可能性を示している。また、人工ニューラルネットワークに基づく原子間ポテンシャルを活用した分子動力学法や第一原理計算による熱伝導率や熱電性能評価・設計技術も進展している。

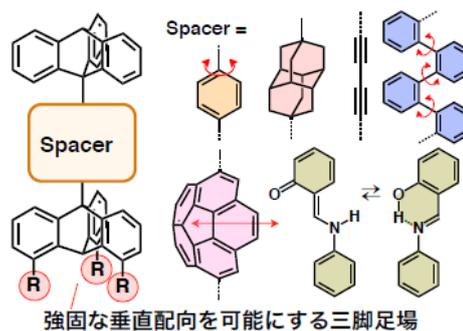
VOLZ チームは、二次元表面フォノンポラリトンの熱伝導制御の研究を展開しており、表面に局在するフォノンと電磁波の連成波である表面フォノンポラリトンの理論的な解析と同時に独創的なマイクロ・ナノ構造を用いた実験による実証をしており、表面フォノンポラリトンによる薄膜材料の熱伝導の増強の可能性があることから、様々なメディアで取り上げられている [Y. Wu et al., Enhanced thermal conduction by surface phonon-polaritons, *Sci. Adv.* **6**, 40 (2020)]。



②有機材料や高分子材料の熱輸送

上述のように、バルク固体や固体表面における熱輸送現象はフォノンエンジニアリングの研究の進展とともに大きく進展してきたが、有機材料や高分子材料の熱輸送についての学理は未開拓であった。本領域では、福島孝典チームの分子ダイナミクスと森川チームの高分子の熱伝導の研究で、分子系における熱移動の現象解明から始めて体系化と学理構築を目指してきており、それぞれ研究成果をあげている。

福島チームの分子ダイナミクスを利用した熱マネジメントにおいては、トリプチセンを足場とした高配向アルキル鎖薄膜の熱伝導度の評価、圧力による単分子接合の熱電特性の制御、 π -スタックの熱輸送への寄与が小さいことと電気と熱の流れやすい方向が垂直であることの確認、回転運動を示す π -スタック系における熱輸送特性測定、量子熱伝導シミュレータの開発など独自の合成技術を駆使するとともに、研究領域内の他チームとも有機的な連携を行って確実に研究を進捗させている。これまで誰も手を付けていなかった、分子の特異な構造と熱伝導の関係の検討は極めて独創的である。また、S_{Th}M(Scanning Thermal Microscopy)による自己組織化単分子膜(SAM)熱伝導性イメージングや、メカニズムが不明な点はあるがS_{Tr}M(Scanning Thermal Radiation Microscopy)による新規イメージング法の提案なども計画以上に進捗している。独自の有機化学合成技術を駆使して、他のグループがまねのできない研究成果を出している。具体的には、鎖アルキル鎖が高密度かつ垂直配向した有機ナノ薄膜の熱伝導度計測[“Thermal transport properties of an oriented thin film of a paraffinic tripodal triptycene”, T. Imaizumi, R. Takehara, Y. Yamashita, T. Yagi, F. Ishiwari, Y. Shoji, X. Wang, Y. Murakami, T. Nishino, T. Fukushima, *Jpn. J. Appl. Phys.* 2021, 60, 038002]や、走査型サーマル顕微鏡(S_{Th}M)を用いたナノスケール熱輸送特性の新しいイメージング技術[“Visualization of Thermal Transport Properties of Self-Assembled Monolayers on Au(111) by Contact and Non-Contact Scanning Thermal Microscopy”, S. Fujii, Y. Shoji, T. Fukushima, T. Nishino, *J. Am. Chem. Soc.* 2021, 143, 18777]などの論文が注目される。



研究領域内の他チームとも有機的な連携を行って確実に研究を進捗させている。これまで誰も手を付けていなかった、分子の特異な構造と熱伝導の関係の検討は極めて独創的である。また、S_{Th}M(Scanning Thermal Microscopy)による自己組織化単分子膜(SAM)熱伝導性イメージングや、メカニズムが不明な点はあるがS_{Tr}M(Scanning Thermal Radiation Microscopy)による新規イメージング法の提案なども計画以上に進捗している。独自の有機化学合成技術を駆使して、他のグループがまねのできない研究成果を出している。具体的には、鎖アルキル鎖が高密度かつ垂直配向した有機ナノ薄膜の熱伝導度計測[“Thermal transport properties of an oriented thin film of a paraffinic tripodal triptycene”, T. Imaizumi, R. Takehara, Y. Yamashita, T. Yagi, F. Ishiwari, Y. Shoji, X. Wang, Y. Murakami, T. Nishino, T. Fukushima, *Jpn. J. Appl. Phys.* 2021, 60, 038002]や、走査型サーマル顕微鏡(S_{Th}M)を用いたナノスケール熱輸送特性の新しいイメージング技術[“Visualization of Thermal Transport Properties of Self-Assembled Monolayers on Au(111) by Contact and Non-Contact Scanning Thermal Microscopy”, S. Fujii, Y. Shoji, T. Fukushima, T. Nishino, *J. Am. Chem. Soc.* 2021, 143, 18777]などの論文が注目される。

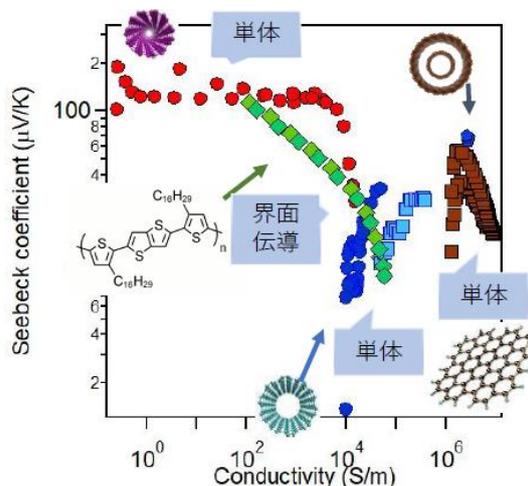
一方、森川チームは、別の観点から高分子の熱物性マテリアルズインフォマティクスの研究を進めており、データ駆動型高分子熱物性研究(高分子熱物性インフォマティクス)の学術基盤の整備を目指している。「データを分析する技術(機械学習)」においては、データ駆動型研究に資する世界最大の高分子材料のデータベース構築に向けて、分子動力学(MD)シミュレーションによる高分子物性自動計算システム RadonPy(LAMMPS による高分子物性計算の自動化を支援する Python ライブラリ)を開発し、プログラムを完成させ、データ生産を始動した。マテリアルズインフォマティクスのオープンソースソフトウェア XenonPy に実装された機械学習を用いた分子生成の技術を適用し、ポリイミドの仮想ライブラリを作製している。将来的には、ナノスケールにおける熱の物理現象の予測・検証を可能とし、新たな材料設計、デバイス設計の指針に繋がるデータベース技術として領域内外への公開をめざす。

③低次元材料や低次元材料を複合した材料

バルク固体材料、高分子材料に加えて、フレキシブルデバイスなどでの応用が期待される

カーボンナノチューブ(CNT)などの低次元材料や低次元材料を複合した材料などの熱輸送については、柳チームと中村チームが検討している。

柳チームは、フレキシブルマテリアルのナノ界面熱動態の解明と制御のテーマで、フレキシブルマテリアルとしての、単層カーボンナノチューブ(SWCNT)や有機導電性ポリマーの材料特性評価に関して、研究成果をあげている。フレキシブルマテリアルの電気伝導 σ および熱起電力 S の関係の系統的な解明や次元性の違いがもたらすトレードオフの破れの提案、電子顕微鏡内での熱輸送の可視化など、興味深い成果が得られている。国際的な一流紙への発表も数多くあり、発表論文の質と量は高い水準にある。



今後、薄膜熱伝導や界面熱抵抗の測定技術を発展させ、電界でキャリアを誘起した状態での熱伝導率の測定法の吟味、CNT 集合体の面内・外方向熱伝達特性の評価など、研究題目に掲げている「界面熱動態」を正面から取り扱う研究の進展が期待される。代表的には、1次元半導体型材料における熱電物性の次元性の発現の解明[“One-Dimensionality of the Thermoelectric Properties of Semiconducting Nanomaterials”, *Physical Review Materials*, 5, 025404 (2021)]、単層カーボンナノチューブ薄膜の熱伝導率のキャリア注入依存性の解明と ZT 値の評価[“In situ time-domain thermo-reflectance measurements using Au as the transducer during electrolyte gating”, *Appl. Phys. Lett.* 117 133104 (2020)]がある。特に後者は、小原チームと連携して、金電極をトランスデューサとして用いた時間領域サーモリフレクタンス法を開発することにより、電界効果によるキャリア注入量と熱伝導率の相関を解き明かす実験手法を確立した顕著な研究成果である。

中村チームは、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を目指した研究を進めており、CNT などのナノカーボン系に有機あるいはハイブリッド分子による接合を形成し、接合部におけるナノスケール熱輸送を理解し、高い電気伝導性を保ちつつ熱伝導率を 5 桁にわたって制御することを目指す課題である。ワイヤ状試料の精密熱伝導率測定技術の確立を目指した、領域内ラウンドロビンテストは、中村雅一チームが主導して、小原チーム、宮崎チーム、高橋チームの 4 チーム間でおこない、それぞれの評価法の特徴や差異を明らかにすることで、評価法の信頼性向上を図っている。この成果は領域外にも論文として公表している。

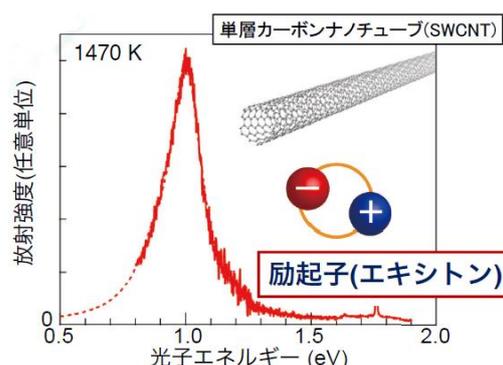
④相変化やふく射熱輸送制御

これまで、様々な材料の熱伝導について議論してきたが、熱発生、相変化を伴う熱輸送、ふく射による熱輸送についても重要な熱制御の切り札となる。相変化を伴う熱輸送につい

ては、高橋チームの独創的な実験と理論、ナノ材料のふく射については、宮内チームの研究が研究成果をあげている。

高橋チームは、二次元材料とナノ計測の融合による相変化伝熱の革新の研究を進めており、2次元材料層内のウォーターポケットのTEM観察、液中AFM観察などのユニークな測定法を開発し独自の成果を出している。グラフェンとhBNのウォーターポケットを比較したナノ液滴の移動、ナノスケールでのピンギング観察、凝縮水の移動測定などの学術的に有用な成果が得られている。中国清華大と共同してのラマンを用いた熱物性計測技術の開発も進めている。さらに、分子動力学法を中心とした理論的研究も、固体面上での水のすべりの理論の構築により、新たな学術的展開が期待できる。また、これらの成果の発表論文は、質・量ともに高い水準にある。今後は、さらに独創的なTEM観察やAFM観察と分子動力学法シミュレーションなどの結果を連携させて、ナノバブルのサイエンスとしての確立を目指すことが期待される。一方、2次元材料を用いた相変化伝熱の革新的なデバイスとの開発が期待できる。

宮内チームは、ナノ物質科学を基盤とするサーモエキシトニクス創成という独創的な研究課題で多くの基礎的研究成果を得ている。カーボンナノチューブ(CNT)熱励起子の太陽熱発電応用に向けて研究が進捗しており、当初の予想を超えた成果も得られている。具体的には、低温領域で非平衡放射による発光強度の減少が起こらない状況を初観測し、有効温度~1400 Kの放射強度を実温度 1000 Kのエミッタで実現できることを示している。構造分離ナノチューブを用いた構造と蛍光量子収率の測定、CNT複素屈折率の実験式の導出、CNT励起子の熱放射の理論など課題の目標に向けて重要でしかもインパクトのある成果が得られている。



(2)研究成果の社会的・経済的な観点からの貢献

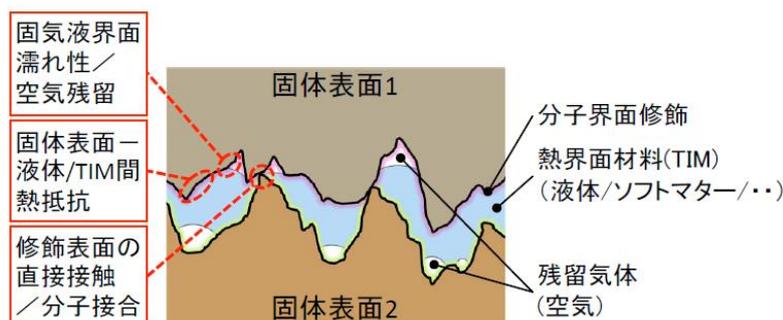
本研究領域は、ナノスケールの熱制御基盤技術の創出により、熱を味方につけ、新たな段階の高効率利用法を生み出すことで、高度情報化社会の実現や環境負荷の少ないエレクトロニクスや交通輸送・住宅など社会インフラの実現、健康医療分野での新産業・新市場創成を実現し新たな段階の高度熱利用社会の実現を目指したものである。

これまで、学術的な研究成果に基づき、①熱界面材料、②フレキシブル熱電変換デバイス、③ナノスケール熱制御に基づくセンサ、④新規調湿デバイスなどの可能性が見えてきている。特に、熱界面材料と熱電変換デバイスは、行動情報化社会や環境負荷の小さいエレクトロニクスの実現に向けて成果の実用化が急がれるとともに、ナノスケールの熱制御が極めて有効な応用になる。以下、それぞれのデバイスについて概要を述べる。

①熱界面材料

パワー半導体など高密度発熱体からの大量の熱を効率的に輸送するため、微細な積層構造で熱の流れを阻害する界面熱抵抗を低減することが求められている。一般に熱界面材料(TIM)と呼ばれるデバイス要素は、ナノスケール熱制御の総合的な適用が求められるものである。

小原チームでは、分子界面修飾とナノ熱界面材料による固体接合界面熱抵抗低減の研究課題で、固体層表面を特殊な分子で修飾し、固体表面間を分子で接合し、固体表面間にナノ物質層を介在密着させる技術により、固体層間に強力な熱的接続を形成するための技術開発を進めている。すでに、固液界面の熱輸送や、分子修飾界面の熱抵抗、凹凸面での濡れ性などに関する分子動力学法シミュレーションによって、界面熱抵抗の物理モデルを構築しつつある。特に、固体表面の分子修飾が固液界面熱抵抗に与える影響について、親水性SAM(自己組織化単分子層)で修飾した固体表面試料を作成し、水との間の固液界面熱抵抗をTDTR(時間領域サーモフレクタンス)法で計測して、分子動力学法シミュレーションとの整合性を確認している。福島チームとの連携でこれまでにない画期的な配列高分子修飾による熱界面材料の性能の非連続的な向上の可能性もある。



②フレキシブル熱電変換材料

高度情報化社会の実現に向けた技術革新が進む中、無数のセンサの為の電源確保のために、あらゆる物の温度差から発電可能なフレキシブルな熱電変換素子は有力な候補になる。さらに、カーボンニュートラルの実現に向けて、低温熱源からの発電による熱エネルギーの有効活用の観点でも、熱電変換材料の開発と評価は喫緊の課題である。また、熱電素子の熱伝導率を下げれば性能指数が増大することから、ナノスケール熱制御の大きなターゲットとなる。本領域内では、内田健一チームの磁性材料やスピントロニクス素子に特有の熱電効果、竹内チームの異常電子熱伝導度と異常格子熱伝導度の制御および2次元材料の熱電性能の評価、柳チームの単層CNTや有機導電性ポリマーの熱電特性評価、中村チームの分子接合によるCNT集合体の熱伝導率の低減、宮崎康次チームの有機-無機ヘテロ界面制御と社会実装可能なフレキシブルデバイスなど、基礎物理から実装までのデバイス開発を進めている。

柳チームは、フレキシブルマテリアルのナノ界面熱動態の解明と制御のテーマで、フレキ

シブルマテリアルとしての、単層カーボンナノチューブ(SWCNT)や有機導電性ポリマーの材料特性評価に関して、一般化した理解を進めている。フレキシブルマテリアルの電気伝導および熱起電力の関係の系統的な解明や次元性の違いがもたらすトレードオフの破れの提案、記録的な熱電パワーファクターの実現などの成果が得られている。

宮崎チームは、有機-無機ヘテロ界面によるフォノン・電子輸送フィルタリングのテーマで、熱電デバイスの実用化に向けた成果を得ている。性質が大きく異なる有機材料と無機材料の接触面を用いて、熱と電子の輸送をふるいにかける熱制御基盤技術を構築し、応用として熱から直接発電する熱電変換技術の低コスト化と高効率化が進んでいる。材料開発と塗布型モジュールを統合し、実用的なフレキシブルデバイスが実現しており、熱エネルギーの有効利用への貢献が期待できる。

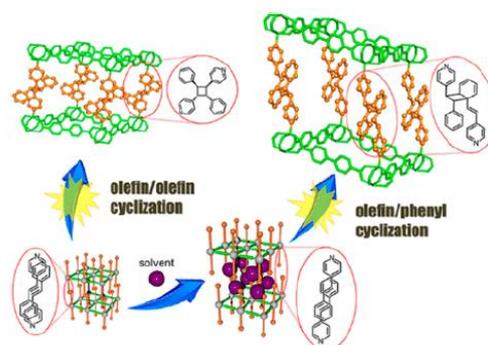
③ ナノスケール熱制御に基づくセンサ

バルク固体や固体表面における熱輸送に加えて熱発生(ジュール熱)の制御を組み合わせ、電荷キャリアとフォノンの輸送に関する学理を構築することで、具体的なナノ熱センサ開発に展開する試みが内田建チームで進んでいる。センサデバイス開発まで進む段階で、固体間の熱移動・熱抵抗の制御が大きくクローズアップされてくる。

内田建チームは、空間的・時間的に局在化したナノ熱の学理と応用展開の研究課題を進めている。ナノ材料中の電流によって発生するジュール熱を時間的・空間的に局在化させた「ナノ熱」を創出し、ナノ熱を所望の場所に所望の時間だけ生成する技術により、温度上昇に必要なエネルギーを極限まで抑制する。具体的には、身の回りに漂うガス分子を認識する機能を、環境負荷の少ない小型・低エネルギーで実現することが期待される。具体的には、硫化水素センサとして、金ナノシートをセンサ受容部とすることで、低濃度の硫化水素を高速に検出可能であることが示されている。また、ナノ熱センサとして期待される酸化タングステンナノワイヤを低電圧で駆動可能とする技術の開発にも成功している。

④ 新規調湿デバイス

大宮司チームは、ナノ空間材料に内包された水の吸着・移動の熱制御の研究課題で、ナノ空間材料に内包された水がバルクとは異なる相、運動特性を示すことを利用し、空気中の湿分制御を高効率に行う技術の確立を目指している。珪素系多孔質材料、炭素系多孔質材料、ナノポーラス金属錯体の3種類のナノ空間材料を対象とし、ナノ空間材料の合成、機能化、および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、解析技術の開発を行い、ナノ空間材料に内包された水の吸着・移動の熱制御、および水の吸着・移動に伴うナノ空間材料の熱輸送に



ついて、ナノスケール現象の解明が進んでいる。ナノポーラス金属錯体(MOF)を用いた革新的な吸湿材の創製が期待される。民間企業との連携も想定して、産業への貢献が期待される。この研究成果は新規調湿デバイスの開発に繋がる。カーボンニュートラルへの貢献を考えるとヒートポンプや調湿デバイスの重要性は極めて高い。

7. 総合所見

(1) 研究領域のマネジメント

本研究領域では、熱に関する様々な課題の解決や熱エネルギー有効利用に向けて、各チームが活動するため、おもに工学を中心とした伝熱の研究者と、物理・応用物理、有機化学の分野での基礎物理およびナノ材料合成を中心とした研究者を繋げることで、固体、ポリマー、界面を含む材料の基礎的な熱伝導物性、スピン由来の熱輸送や表面フォノンポラリトンなどの輸送現象の解明、これらの材料や基礎物理を利用したデバイスの開発が可能となる。また、熱輸送の精緻な計測は電気系の計測と比べて格段に難しい。計測技術の展開には様々な伝熱形態に対する従来の経験に加えて新たなナノスケール技術も必要となる。ましてや、デバイスとしての応用を考えると工学的な要素と基礎学術的な要素の連携が必須となる。多くのチームと研究者が異なる分野の学会を中心として活動している状態から、まさにネットワーク型研究所として連携を図ることを大きなマネジメントの軸としてきた。キックオフ会議、領域会議やサイトビジットなどでの積極的な議論に加えて、材料、計測技術、シミュレーション技術、熱電デバイスなどの共有、ラウンドロビントによるチーム間の実質的な連携研究を進めてきた。さらに、研究領域を主体とする国際会議、国際ワークショップをエンカレッジすることで、研究領域内外の研究者を巻き込んだ、分野融合的な研究を促進することに腐心してきている。

また、海外との共同研究や発信などの国際展開についても研究領域として促進してきた。外国人が研究代表者のチームもあり、国際展開は自然に進んでいる。コロナ下でも本研究領域が主催したハイブリッドの国際ワークショップなどは、研究領域内外の活発な議論につながっている。

(2) 研究領域としての戦略目標の達成に向けた状況

戦略目標「ナノスケール熱動態の理解と制御技術による革新的材料・デバイス技術の開発」を各チームが分担しかつ連携して達成することが期待される。ナノスケール熱動態の理解については、固体材料、低次元材料、高分子材料の熱伝導や電子伝導の体系化とともに、内田健一チームのスピン트로ニック熱輸送、VOLZ チームの表面フォノンポラリトンなどの新規物理現象の解明が進み、有機材料や高分子材料の熱輸送についても体系化と学理構築が見えてきている。さらに、制御技術についても、低次元材料の活用、配列分子やたんぱく質を用いた界面制御などの見通しが立ちつつある。さらに、革新的材料・デバイスについても、CNTや2次元材料の開発とともに、熱界面材料、熱電変換デバイス、ナノ熱センサなどの見通しが立ってきている。

(3) 本研究領域を設定したことの意義と妥当性

これまで、ナノスケール熱動態という研究領域がフォーカスされることはあまりなかつ

たために、熱移動や相変化の研究はそれぞれの分野でバラバラに進められてきた。工学と理学分野との連携が格段に進み、熱移動の体系化と学理の構築が進んでいることは極めて意義深い。例えば、工学の小原チームのSAM膜に代わって有機化学の福島チームの配列分子材料が同じ実験系で時間領域サーモリフレクタンス計測によって比較されることや、第一原理計算による熱輸送と古典分子動力学法シミュレーションとの比較が実デバイスレベルで可能となっている。また、柳チームが小原チームの八木らの開発してきた時間領域サーモリフレクタンス計測を活用して共同研究を進めるだけでなく、柳チームが独自の時間領域サーモリフレクタンス計測装置を開発するなど、質の高い共同研究に発展している。材料の合成・評価・デバイス検証・実用デバイス設計というサイクルがナノスケール熱動態として進んだことの意義は大きい。フレキシブル熱電デバイスなどの実用化に近いものとともに、まったく新しいスピントロニック熱デバイス、熱流制御材料、調湿装置などの提案の可能性も見えてきている。

(4) 科学技術イノベーション創出に向けた、今後への期待、展望、課題

これまで、フォーカスされることの少なかったナノスケール熱動態という体系的な学理が有効となる科学技術イノベーションの範囲は極めて広い。本領域も「高度情報化社会の実現や環境負荷の少ないエレクトロニクスや交通輸送・住宅など社会インフラの実現、健康医療分野での新産業・新市場創成を実現し新たな段階の高度熱利用社会の実現を目指す。」としており、いずれの分野においても、熱動態のナノスケール制御が主役あるいは名脇役となって大きなイノベーションにつながることを期待できる。一方、フレキシブル熱電デバイス、熱流制御材料、調湿装置などの熱動態のナノスケール制御が主役となる分野もあるが、それ以上に、学理構築によって広範囲のイノベーションの名脇役としても重要と考える。学理構築と他分野の研究者がツールとして利用できる形までの一般化が今後の課題になると考える。

(5) 所感、その他

分野融合や境界領域の研究を促進することは、想像以上に難しいところがある。分野ごとの慣習の差異や、分野ごとに研究の評価基準も微妙に異なることを考慮する必要がある。この意味では、本研究領域は、これまでにない挑戦的な戦略目標であると考ええる。また、「ナノスケール熱動態の理解と制御技術による革新的材料・デバイス技術の開発」との戦略目標はすこし漠然としているかもしれない。領域全体としての一体感のある研究というよりは、いくつかのサブトピックに対する複数チームの連携というスタイルでの共同研究が進んでいる。ナノスケール熱動態をすこしシャープな材料系や物理に絞り込んだ戦略目標、例えば、「1次元・2次元材料の熱動態の解明とデバイス応用」、「低次元ヘテロ材料界面における熱動態の制御とデバイス開発」、くらいまで絞り込んだ戦略目標があっても良いか考える。後者は、低次元ファンデルワールスヘテロ構造といった新たな材料・デバイス系として期待

される材料系であり、ある程度一体感のある研究領域が形成されると期待される。

以上