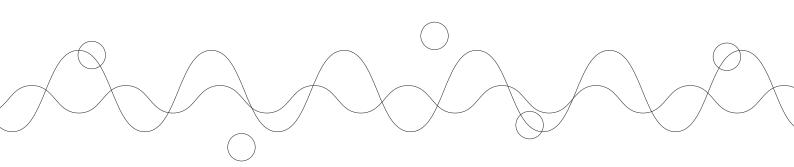
科学技術未来戦略ワークショップ 革新的熱技術に関するワークショップ報告書

平成 25 年 6 月 29 日(土) 開催



エグゼクティブサマリー

現在のエネルギー技術体系は、燃料や素材が安く安定に入手できることを前提としたものである。しかしながら、2000 年代半ば以降の途上国の著しい経済発展による資源価格高騰、東日本大震災による福島第一原発事故、シェールガス革命等、エネルギーを取り巻く状況は大きく変わりつつあり、現在の技術体系も転換期を迎えている。当然のことながら、熱技術にも大きな革新が求められている。熱は、ほぼ全てのエネルギープロセスにおいて生じ、エネルギーの最終形態であるとともに、暖房・給湯、ならびに製造・加工プロセス等においては直接の需要として膨大な量が消費されている。すなわち、熱利用技術を高度化することは、エネルギー環境問題の解決はもちろんのこと、人類の全ての活動を向上させるための基盤であると言える。

このような現状を背景に、独立行政法人科学技術振興機構(JST)研究開発戦略センター(CRDS)環境・エネルギーユニットでは、熱利用に関する研究開発の推進のあるべき姿について検討を行なっている。2013年6月29日には検討の一環として「革新的熱技術に関するワークショップ」を開催した。本書は同ワークショップに関する記録である。本ワークショップは、(1)熱利用技術とその研究の現状の課題、(2)重要性、新規性、進歩性に富む革新的なシーズ研究テーマ、(3)異分野からの人材の参画の方法等、について議論することを目的として開催された。科学的な先進性や独創性だけでなく、エネルギー供給解決や経済成長への貢献などを含めて、広い観点から議論を行った。

議論の結果、以下の共通認識を得た。

材料研究による革新

熱利用技術を高度化するとは、あらゆる熱媒体やエネルギーキャリアの輸送、分離、蓄エネルギー、変換といった素過程を革新するということである。そのためには、従来の物性を凌駕する、あるいは新たな機能を発現する新たな熱機能材料の開発が重要となる。当然のことながら、これらの新規材料には高い安定性、安全性、環境性が求められるため、これらのトレードオフを解決するための研究が不可欠である。また、固体に限らず液体研究も今後重要になると考えられる。

設計科学研究の重要性

熱エネルギーを扱う技術には膨大な量的貢献が求められることから、たとえ研究成果が わずかな改善につながるものであっても、その重要性は大きい。従って、数値目標を明確 に定めた上で、それを実現するための手法やツールを革新する構成的な設計科学研究も極 めて重要である。

製造プロセスの革新

上記の新規材料を安定に大量生産する製造プロセス技術も併せて 高度化する必要がある。例えば、混練、凝集、分散、塗布、濃縮、乾燥、焼結、圧縮、反応といった低コスト量産プロセスは、熱輸送現象を伴う場合がほとんどであるが、従来は経験とノウハウに依存していた面が強い。新規な高機能材料を大量かつ安価に製造するためには、今後は科学的なアプローチを導入してその熱的製造プロセスをブレークスルーさせる必要がある。

目 次

エグゼクティブサマリー

1. ワークショップ開催趣旨	• 1
1-1. 背景	• 1
1-2. 目的	. 1
1-3. 概要	
1-4. 趣旨説明	
2. 話題提供	. 3
2-1. フォノニクスによる熱伝導制御と熱電変換応用	
野村政宏(東京大学)	. 3
2-2. 電極製造プロセスにおける熱流動現象とその高度化技術	
井上元(京都大学)	. 8
2-3. イオン液体内部における物質・エネルギー移動	
- 未利用エネルギーの有効利用を目指す光波長変換研究に関連して	
······村上陽一(東京工業大学) ····	• 13
2-4. ナノ・マイクロ熱物性センシングとサーマルデザインプラットフォーム	
田口良広(慶應義塾大学)	• 19
2-5. 世界のトピックス 大宮司啓文 (東京大学)	· 25
3. コメンテータからのコメント	
4. まとめ	. 32
5. 付 録	
付録 1. 開催概要・プログラム	. 33
付録 2. 参加者名簿	. 34

1. ワークショップ開催趣旨

1-1. 背景

JST 研究開発戦略センター (CRDS) では、5 つの技術専門ユニットが科学技術分野の現状を広く俯瞰するとともに、それに基づいて今後国として推進すべき研究開発領域や課題、あるいはその推進方策等について検討を行っている。検討結果は提言として関連府省などへ発信され、JST 基礎研究事業における研究開発領域の設定や、政府の各種施策の策定などに活用されている。

技術専門ユニットの1つである環境・エネルギーユニットでは、これまでエネルギー 分野を中心とした研究開発の俯瞰を実施してきた。俯瞰の過程で同定された複数の重要課題については個別の深堀検討を行っており、昨年来注目してきた研究領域の1つとして「革 新的熱技術」がある。

熱は全てのエネルギー利用の最終形態であるとともに、暖房・給湯、ならびに製造・加工プロセス等においては直接の需要として膨大な量が消費されている。すなわち、熱媒体やエネルギーキャリアの輸送や変換過程における熱利用技術を高度化することは、エネルギー環境問題の解決はもちろんのこと、人類の全ての活動の向上のための基盤であると言える。

1-2. 目的

本ワークショップでは、熱に関わる革新的技術の基礎研究戦略の提言に向けて、広い領域において現れる熱の輸送・変換現象の研究課題の抽出と整理を行うことを目的とする。応用物理、化学、材料、機械等の広い分野から専門家を招いて講演頂き、現在の課題を広く俯瞰するとともに、分野横断の討議を通じて、真に社会に貢献するための学術研究戦略について議論する。

1-3. 概要

【日時】

平成 25 年 6 月 29 日 (土) 13:00 ~ 17:00

【場所】

JST 東京本部別館 2 階会議室A-2

【主催】

JST 研究開発戦略センター 環境・エネルギーユニット

【プログラム基本構成】

- (1) 熱技術の幅広い分野の専門家による最新の研究動向について話題提供いただく。
- (2) 専門家からの話題提供を受けて、4名のコメンテータの先生方よりコメントをいただき、真に社会に貢献するための学術研究戦略について議論する。

1-4. 趣旨

JSTの重要なミッションの一つは、基礎研究に集中投資することで、その分野の研究を加速し、成果を実用化して世の中のベネフィットにつなげるというものである。研究の科学的な成果としてインパクトファクターの高い雑誌への投稿論文が増えることも重要であるが、本ワークショップでは、むしろ成果をどうやって社会につなげていくか、あるいは社会の期待という観点から基礎研究として相応しいテーマを推進すべきか、という観点をより重視する。すなわち、現象解明や分析的な研究に止まらず、設計的な研究も含めて議論を行う。具体的には、熱利用技術とその研究の現状の課題を明らかにした上で、重要性、新規性、進歩性に富む革新的なシーズ研究テーマを抽出するとともに、複合的なテーマに対して異分野からの人材の参画の方法等について理解を深め、共通認識を得る。

2. 話題提供

2-1. フォノニクスによる熱伝導制御と熱電変換応用

野村 政宏(東京大学生産技術研究所 准教授)

シリコンに微細加工を施すことでナノ構造中の熱伝導率を制御し、マイクロエレクトロニクスと高い整合性を持つシリコンを熱電変換材料に昇華させることを目指して研究を行っている。熱電変換材料の性能向上のためのアプローチをいくつか紹介し、その一つである、周期的な人工ナノ構造(フォノニック結晶ナノ構造)を用いた手法について説明する。また、現在進めている熱伝導率制御のための構造作製と実験結果を紹介する。

格子系は光子系とは異なり、支配方程式が複雑であり、フォノンをフォトンのように固体中での伝搬制御を行うことは難しい。さらに、フォノンの周波数は何桁にも渡っているため、バンドエンジニアリングによる統一的な制御は困難である。格子系におけるバンドエンジニアリングは、結晶成長技術による数原子層レベルでの周期構造を用いるものと、電子線描画装置を用いた設計自由度の高い周期構造作製による手法で行うことができるが、後者は技術的に 100 nm 程度の空間分解能での作製となる。フォトンに対しては十分ではあるが、本研究で制御対象となるフォノンの「波長」は数ナノメートル程度であるため、可能な限り微細な構造を作製する必要がある。

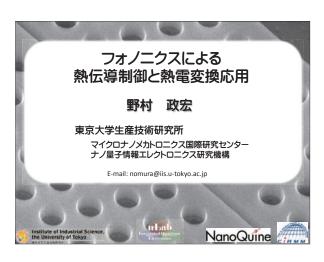
熱電変換材料が克服すべき課題はいくつかあるが、変換効率の向上と、長期的には高環境負荷材料からの脱却ということがあげられる。我々は、この2点を同時に満たすよう、材料にシリコンを選択して、バルクでは低い変換能をナノ加工によって向上させることを目的とした研究を進めている。ナノをキーワードに90年代後半から様々な取り組みが行われてきたが、大半が表面散乱や粒界散乱の増大によるものであり、我々は、それらとは一線を画す2012年にMITから報告されたような、コーレントなフォノン輸送制御に基づく熱伝導制御のアプローチを採っている。特に、トップダウン的な手法によるフォノニック結晶ナノ構造を用いた熱伝導制御を行っている。

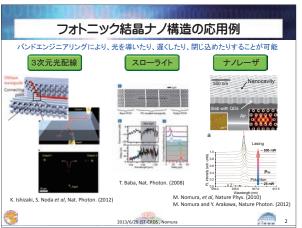
シリコンフォノニック結晶ナノ構造の導入によって熱伝導率を低減できるかどうかについては自明ではなく、理論的な考察が必要である。MIT の Chen グループや、東大の塩見グループで行われているのと同様に、まずは、バルクのシリコンにおける平均自由行程スペクトルと累積熱伝導率に関する情報を計算によって得ると、100 nm から数十 um 程度の平均自由行程を持つフォノンが主に熱伝導に寄与していることがわかる。したがって、周期 100 nm 程度のフォノニック結晶ナノ構造は、室温において、シリコン中でのコヒーレントな熱伝導制御の可能性があることを示唆している。ただし、これはバルクに対する計算であるので、ナノ構造化したときの影響を含んでおらず、あくまでも不可能でないことを示す以上のものではないため、実験的に示すことが重要である。

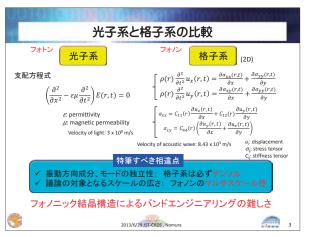
シリコンフォノニック結晶ナノ構造による熱伝導制御の可能性を検証すべく、SOIウェハを電子線描画装置やドライエッチング装置を用いて加工し、フィッシュボーン型のエアブリッジ・フォノニック結晶ナノ構造を作製した。16枚目のスライドに示すように、中央にアルミパッドを蒸着したアイランドを用意し、それがフォノニック結晶を介して周囲とつながるエアブリッジ構造になっている。アルミパッドを光パルスで瞬間加熱し、アル

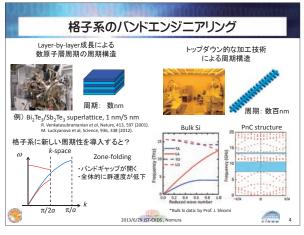
ミの反射率をモニターすることで、フォノニック結晶部分を通した熱散逸の情報を得ることができる。ナノ構造化における熱伝導率の低減は明確に観測されている。これは、表面散乱の増大とフォノニック結晶によるコヒーレントな効果によるものと思われるが、後者の影響を抽出する実験を進めている段階である。

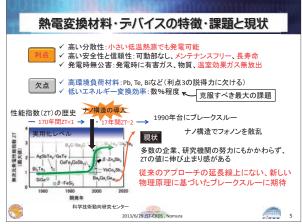
今回、ナノ構造を用いた熱電変換デバイスへの展望も合わせて述べたが、課題となるのは、バルク性能、システムとしての多技術との整合性、社会導入を促す経済性や利便性の確保である。エネルギーリサイクリングという観点も重要であるが、我々が重視するのは、エネルギーハーベスターとしての「0を1にする」使い方である。将来、パワーマネジメント、低消費電力回路技術、無線通信技術と連携することで、エネルギー自立型センサーノードによるワイヤレスネットワーク形成を一つの出口として考えている。



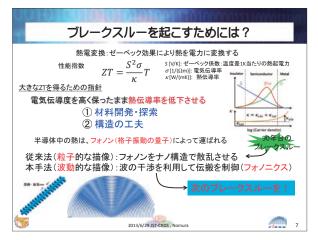


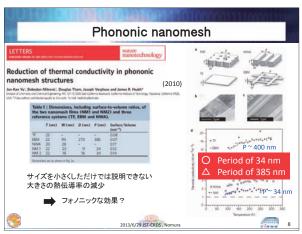


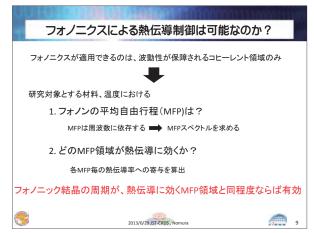


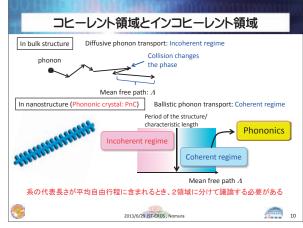


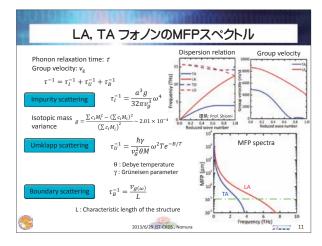


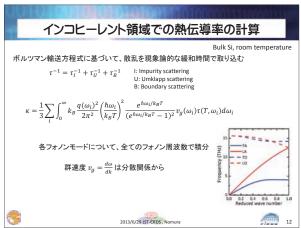


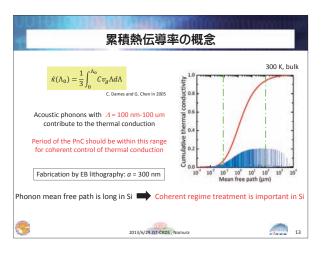


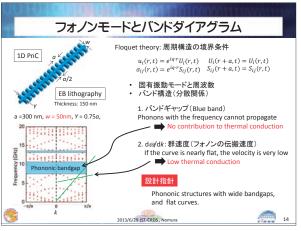


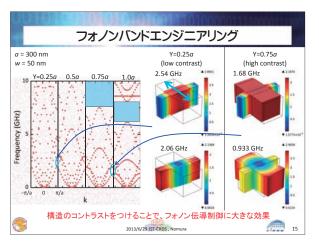


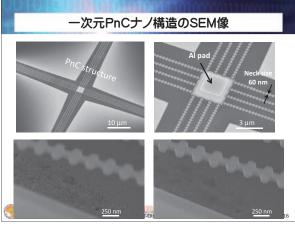


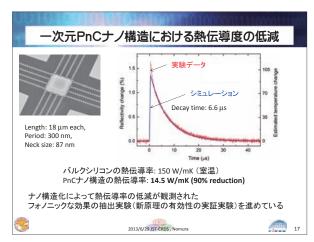














2-2. 電極製造プロセスにおける熱流動現象とその高度化技術

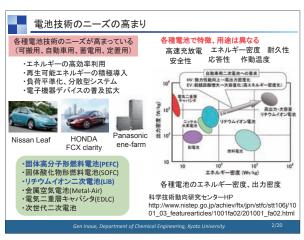
井上 元(京都大学 大学院工学研究科 化学工学専攻 助教)

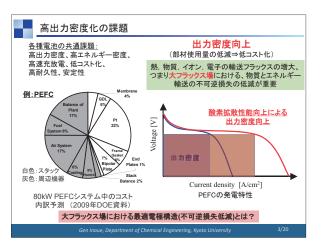
エネルギーの高効率利用や負荷平準化、分散型システムや電子機器デバイスの普及拡大、将来のエネルギー問題の解決策としてのエネルギー貯蔵技術のニーズの高まりなどを背景として、各種電池技術の需要が高まっている。そしてそれに伴ってより一層の高出力化、低コスト化、高耐久化が求められている。電池にはリチウムイオン電池等の二次電池、電気二重層現象を利用したキャパシタ、化学エネルギーを電気エネルギーに直接変換する燃料電池等があるが、これらの多くが多孔質電極を有している。反応点となる電極触媒や活物質、カーボンブラック等の導電性材料、イオン輸送経路となる電解液や固体電解質などで構成され、その数 nm ~数 μ m の複雑な構造の中を、反応種、電子、イオンが移動し、すなわち多相多成分の反応輸送現象が内部で生じている。これら各種電池および電気化学システムの高出力密度化、低コスト化、長寿命化を図るためには、電極触媒表面に反応種を如何に円滑に、迅速に、広範囲に供給するかが重要であり、そしてそれを考慮した電極構造の設計および製造が課題である。

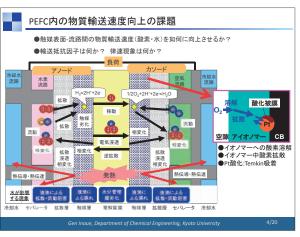
電極成形プロセスにおいて熱利用技術は極めて重要である。一般に湿式法で電極スラリーを塗布乾燥させて電極層を形成するが、液調製や乾燥条件次第で偏析や割れ(クラック)が発生する。また一般に多部材の積層構造である電池の部材間界面構造制御、空隙制御のために加熱圧縮が施され、固体酸化物型燃料電池では焼結操作が導電経路の形成のために必要とされる。さらに担体や導電剤の結晶化度向上や黒鉛化度向上のために前処理加熱も行われる。これらの操作が構造形成や電池性能に強く影響する。その中でも乾燥プロセスにおいては、乾燥理論に基づいた条件設計や、複合方式による品質管理が行われている。しかしながら現状は成形時の品質管理が主であり、電池の実使用環境下におけるイオン輸送や電気化学反応の速度論(特に高出力密度、大フラックス場)に基づいた構造設計は行われていない。膨大な成形条件や材料の組み合わせに対して網羅的に経験的に最適条件を探索しているのが現状である。また近年、乾燥操作による電極材料の偏析や不均一分散による伝導度や放電容量の低下が報告されているが、その詳細なメカニズムの解明までには至っていない。

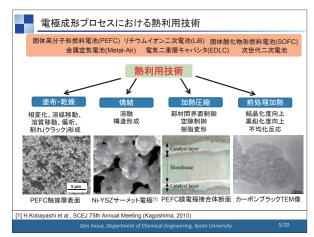
以上の背景より、私は電極作製プロセスの高度化のアプローチとして、X線CTや集束イオンビームSEM (FIB-SEM)等の技術を用いた「内部現象・構造測定技術」、複雑構造内の反応場解析や凝集構造を考慮した電子伝導解析などの「内部現象解析技術」、出力特性や過電圧分離評価などの「電池性能・評価技術」、電極、担体などの「新規材料開発」、塗布乾燥操作の新手法や偏析現象の数値解析などの「構造作製技術」の高度化と連携を図っている。今後、種々の電池の性能向上や低コスト化のために、成形プロセス・構造・電池性能を個別な研究開発対象とせず、三位一体として全体を俯瞰して、その因果関係や影響度を評価する取組が必要であると考える。その中で乾燥や焼成など、熱が関わる現象は極めて重要であり、その詳細なメカニズムの解明が求められている。また実作動環境の最適構造を、理論的に裏付けされたプロセスで作製し、本分野における我が国の産業競争力強化に繋がると考える。

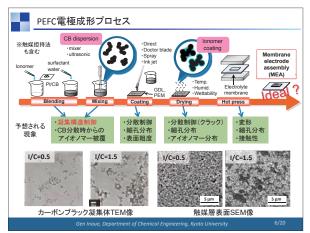


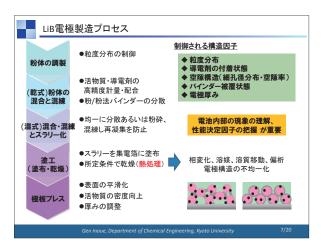


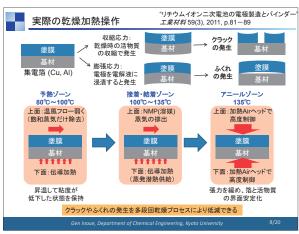


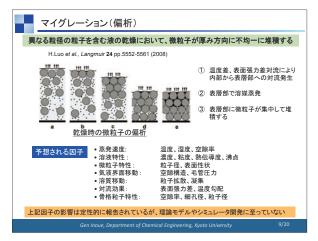


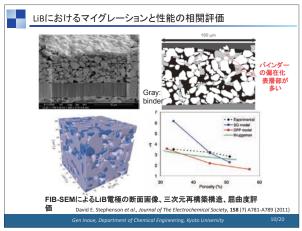


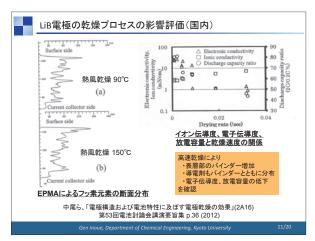


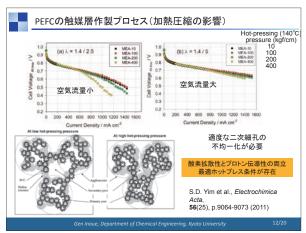


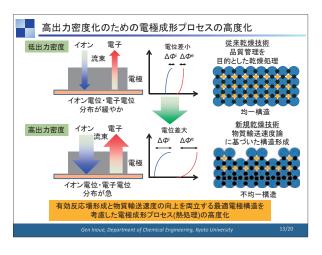


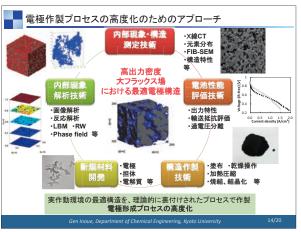


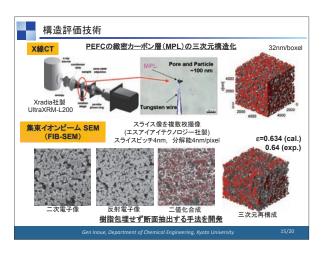


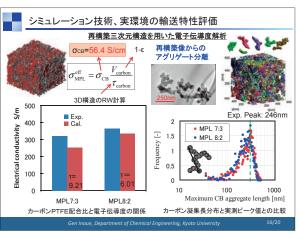


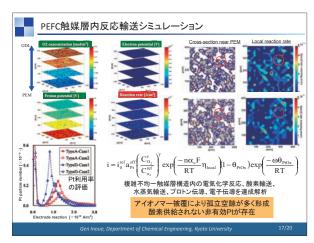


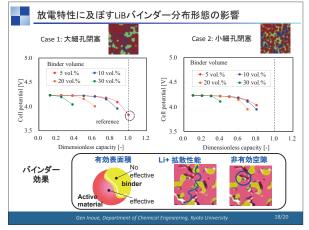


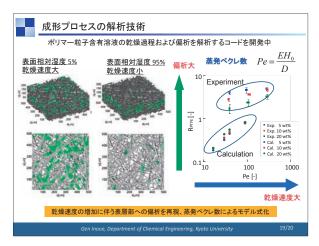


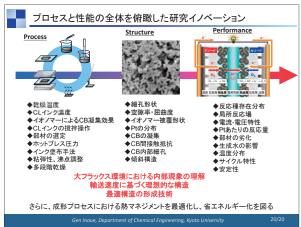












2-3. イオン液体内部における物質・エネルギー移動 - 未利用エネルギーの有効利用を目指す光波長変換研究に関連して

村上 陽一(東京工業大学 グローバルエッジ研究院 テニュアトラック助教)

「イオン液体」と呼ばれる新しいグループの液体が、従来液体にはない数多くの特長と広範にわたる応用可能性から近年注目を集めている。イオン液体という物質自体は古くから(しかし殆ど注目される事なく)存在していたが、初めて大気中で安定なものが合成されたのは1992年と比較的最近であり、本格的な研究開発が立ち上がったのは21世紀に入ってからである。その意味でイオン液体は21世紀の液体である。特長としては、極小の蒸気圧(事実上の不揮発性)、熱分解開始温度が300~500℃程度と熱安定性が高く、一般に炎を近づけても着火しない性質(不燃性)、高いイオン伝導性と広い電気化学窓を有する点(二次電池などの幅広い応用可能性)、紫外から近赤外にわたる広い波長範囲で無色透明な点(光学応用の可能性)、などが挙げられる。なお、イオン液体は様々な「別名」を有しており、不揮発であることにより人体・環境負荷が小さく比較的リサイクルし易いという側面からは「グリーン・ソルベント」、炭化水素骨格を基本とするため極めて柔軟で高い物性設計の自由度を有するという側面からは「デザイナーズ・ソルベント」、従来の代表的液体である水および有機溶媒とは本質的に異なるという側面からは「第三の液体」などと呼ばれている。

これまでイオン液体に関して数多くの応用が提案されており、例えば、二次電池、燃料電池、有機太陽電池、キャパシタ、 CO_2 選択吸着媒体、セルロース溶解抽出媒体、化学反応媒体、化学反応触媒、などが挙げられる。伝熱工学の視点からは、広い温度域(種類に依るが $300\sim550~\mathrm{K}$ 程度の温度幅)で液体状態を保つ性質と事実上の不揮発性(=蒸気圧が無視でき不燃であると同時に、沸騰も凝固もしない)という特長から、熱輸送媒体としての利用が提案されている。また、イオン液体の比熱は熱輸送媒体として使用し得る程十分高いものであるとの指摘もなされている。このような多彩な応用可能性を将来実現させるためには、イオン液体内部における物質・エネルギー移動に対する理解が必須である。

他方、イオン液体は、内部に分子スケールの微細構造を有するというユニークな特徴を持つ。これに起因して、物質拡散に関し、従来液体ではいわゆる Debye の式によって(その比較的多い近似にも関わらず)比較的良い定量的予測が得られるが、イオン液体では内部における微視的構造に起因し、例えば小分子の場合には、(バルク粘度のみに依拠する) Debye 式による予測からしばしば一桁程度逸脱することが、これまでの報告されている。また、イオン液体中での物質拡散は、イオン液体を構成する陽イオン・陰イオンの分子構造や、それらの配座異性体の多さ(構成分子のエントロピー)などを考慮して議論する必要があることが、筆者らによる結果を含む様々な報告によってこれまで強く示唆されている。イオン液体中における物質・エネルギー移動の研究はこれまで主に化学者(物理化学者)によって先導されてきたが、このような問題が伴う学際性を考えれば、今後より広い学問領域における研究者の参入と貢献が望まれる。

このようなイオン液体の工学的特長に着目し、筆者は、従来有機溶媒が使用されていた有機分子間のスピンエネルギー移動に基づく光アップコンバージョン(UC)において、イオン液体をエネルギー運搬分子の運動媒体に用いることを着想した。UCとは、人類がこれまで太陽電池・光触媒・光合成において捨ててきた閾値エネルギー E_g 以下の光子、すなわち未利用の光エネルギーを利用可能にする技術である。このような不可逆的な無駄は、系の E_g を減ずる事(=系の閾値波長 λ_g を長波長化する事)によりある程度までは改善可能だが、それに付随して励起電子の自由エネルギー低下(出力電圧の低下や化学反応性のアレニウス的低下)を伴うために、このようなアプローチは一般に根本的な解決とはならない。一方、UCは「変換系に λ_g の長波長化(= E_g の低下)を求めることなく」未利用の太陽光エネルギー部分を利用可能にする技術であるため、根本的解決策となり得る。

このような UC 技術において、(従来の溶媒和の常識によれば非常に困難との予想に反して)実はイオン液体が使用可能なことを見出し、世界で初めて不揮発・不燃・長期安定な光アップコンバーターを創出した。成果詳細は既報 (*Chem. Phys. Lett.*, vol. 56, pp. 516, 2011; *Thermal Sci. Eng.*, vol. 20, pp. 15 2012; ケミカルエンジニヤリング, vol. 57, pp. 1, 2012) に示されているが、UC というエネルギー有効利用技術において、イオン液体の使用は、不揮発性と不燃性の付与のみならず、ターボ分子ポンプによる試料の直接脱気による簡便かつ徹底した脱酸素の実現や、(蒸気圧が極小で基本的にプラスチック類を侵食しないという点を利用した) 試料封止性・デバイス製作性の向上を始めとする、UC 技術の実用化に向けて望まれる工学的長所を付与したものとなった。

以上要約すると、イオン液体は人類が最近、水・有機溶媒に次いで手にした第三の流体であり、その多くのユニークな特長と事実上無限種類可能な設計自由度の高さから、将来において人類の様々な問題に応え得るだけの可能性を秘めた新しい流体である。実際、上の例のように、筆者は光アップコンバージョンという事例において、他流体では決して得られないであろう利点を複数手にすることができている。その初期(2000~)において、物質輸送現象を含む様々な基礎研究は主に化学者(物理化学者)の手によって先導されてきたが、近年の応用提案の広がりとそのマルチスケール性を見るにつけ、(最近海外において徐々にそうなってきているように)我が国においても機械系や化学工学系も含めた学際的取り組みがなされてゆくことが期待される。

まとめ

2013/06/29 JST Thermal Workshop

イオン液体内部における物質・エネルギー移動

― 未利用エネルギーの有効利用を目指す光波長変換研究に関連して

東京工業大学 グローバルエッジ研究院

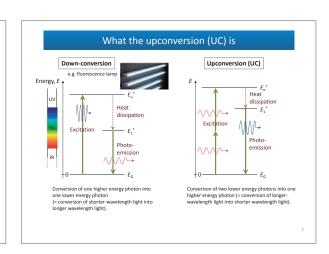
murakami.y.af@m.titech.ac.jp

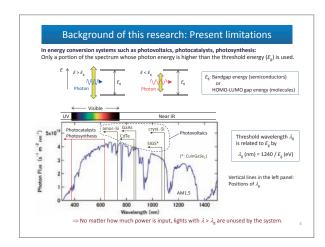
謝辞: これまで貴重な示唆と助言を頂いた佐藤敷・石谷治・河合明雄・彌田智一東京工業大学教授 および産学連携共同研究パートナーの日本化薬株式会社に心より謝意を表す.

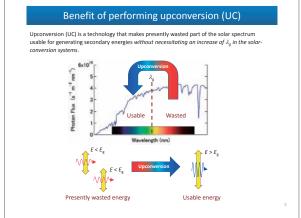
本発表の内容

- 1. 光アップコンバージョンおよび研究目的の概要
- 2. イオン液体について
- 3. イオン液体内部における物質移動
- 4. 研究成果の概略紹介
- 5. まとめ

1. 光アップコンバージョンおよび 研究目的の概要









2. イオン液体について

What the "ionic liquids" is

tonic liquids:

Novel fluid composed sorely of ions, having negligible vapor pressures and non-flammability

(-10⁻³⁰ - 10⁻⁸ Pal)⁻¹¹

2.890 papers

Burner flame

Surner flame

Fluid with "onic liquid" (in title)

98 papers

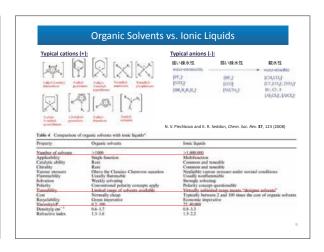
— often called "the 3rd fluid," in addition to water and organic solvents

— called "green-solvent" (-2.3) due to its negligibly-small vapor pressures and recyclability

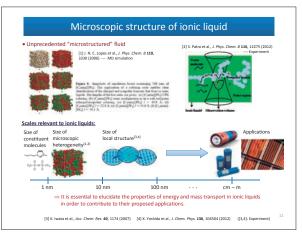
[1] D. H. Zaitsau et al., J. Phys. Chem. A, 110, 7303 (2006)

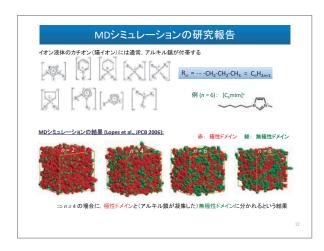
[2] N. V. Piechkova and K. R. Seddon, Chem. Soc. Rev. 37, 123 (2008)

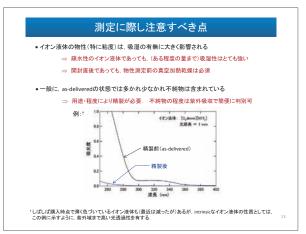
[3] M. J. Earle and K. R. Seddon, Pure Appl. Chem. 72, 1391 (2000)











3. イオン液体内部における物質移動

Diffusion-controlled rate constant by Debye equation

Suppose molecule species α and β are colliding with each other in a fluid.

• Smoluchowski's theory

 $k_{diff} = 4000\pi N \rho_{\alpha\beta} D \qquad [\text{M}^{\text{-}1}\,\text{s}^{\text{-}1}]$ where N: Avogadro number, $\rho_{\alpha\beta}$: reaction radius between α and β , and D: relative diffusion constant between α and β .

 \bullet Stokes relation of friction coefficient for the species α

 $\varsigma_{\alpha} = 6\pi \eta r_{\alpha}$

where r_a is the radius of the molecule α . In this, a stick (non-slippage) condition is assumed.

 \bullet Einstein relation of diffusion constant for the species α

 $D_{\alpha} = \frac{k_B T}{\varsigma_{\alpha}}$

where ζ_{α} is the coefficient of friction between the molecule α and the solvent.

Assuming $\rho_{\alpha \beta}=2$ $r_{\alpha}=2$ r_{β} , and hence $D=2D_{\alpha}=2D_{\beta}$ in the above equations, together with $R=k_BN$, the so-called Debye equation is obtained as below:

 $k_{
m diff} = rac{8RT}{3000\eta} ~ [{
m M}^{-1}~{
m S}^{-1}]$

R: Gas constant (= 8.31 × 10⁷ erg mol⁻¹)
T: Temperature (= 300 K)

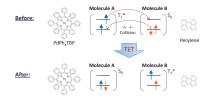
r: Rulk viscosity of solvent (P)

Triplet energy transfer

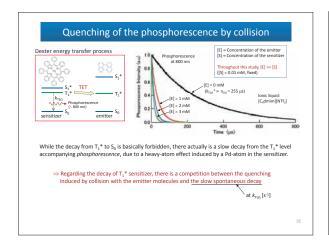
| Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet energy transfer | Triplet ene

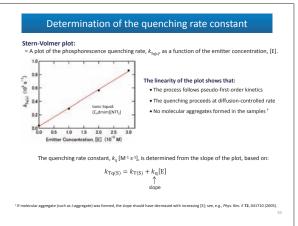
Intermolecular energy transfer by Dexter mechanism

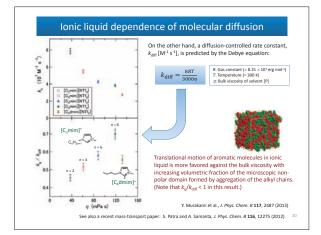
Triplet energy transfer (TET): Inter-molecular energy transfer fulfilled with an electronic-spin exchange

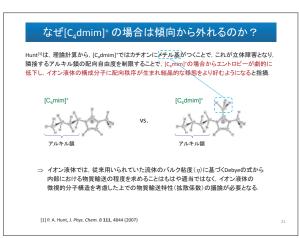


This spin-exchanging inter-molecular energy transfer process is called the "Dexter mechanism". This energy transfer necessitates intermolecular collision (coming close to the distance of \leq 1 nm).









5. まとめ

まとめ イオン液体は: • 数多くの工学的長所を併せ持つ、今世紀に入り研究が本格化した新しい流体(第三の流体) 内部に微細構造 (microheterogeneity)をもつ点で従来の流体と異なる(≈ ポリマー的要素を持つ) 内部における物質拡散の特性は、Debyeの式による予測から大きく異なる場合があり、 イオン液体の具体的な分子構造、場合によってはエントロピー、等の影響を強く受ける これまでの本研究から: 無極性(弱極性)の多環芳香族分子類を疎水性イオン液体中に溶解させる手法を開発、 溶解安定性を発見し、その安定溶媒和メカニズムを提案 → イオン液体用途の拡大 極性ミスマッチの問題から不適と思われたイオン液体をUCIC使用する事に成功。先行研究の可燃性・揮発性・封止の困難さ等の応用に向けた問題を解決 → プロトタイプデバイス作製 分子間の三重項エネルギー移動効率(Φ_{ττι})が、イオン液体の種類に非依存であることを発見 • TTA分岐比 ϕ_S とイオン液体粘度 η との間に明確な相関(正の相関)を発見 研究開始当初「欠点」だと思っていたイオン液体の高粘度が、実は「利点」だったことが判明 【関連参考文献】 村上, Thermal. Sci. Eng. 20, 15 (2012) Y. Murakami, *Chem. Phys. Lett.* **56**, 516 (2011) 村上. ケミカルエンジニヤリング **57**, 1 (2012) Y. Murakami et al., *J. Phys. Chem. B* **117**, 5180 (2013) Y. Murakami et al., J. Phys. Ch ご清職ありがとうございました.

2-4. ナノ・マイクロ熱物性センシングとサーマルデザインプラットフォーム

田口 良広(慶應義塾大学 理工学部 システムデザイン工学科 准教授)

革新的熱技術に資する新しいナノデバイスの開発には、新奇ナノ材料探索やデバイスデザインのための【シミュレーション技術】、ナノ構造の構築やデバイス作製を実現する【ナノ構造合成・構築技術】、そして合成・構築したナノデバイスの評価やシミュレーションの妥当性検証のための【センシング技術】が三位一体となったサーマルデザインプラットフォームの構築が必要不可欠である。これら3つの分野が各々独立に研究・開発をすれば良いのではなく、相補的かつ緊密な連携が極めて重要であるが、現状では必ずしも効果的なプラットフォームが組まれているわけではなく、大きな枠組み作りが喫緊の課題であると言える。今回、様々なナノ・マイクロスケール熱物性センシング技術を紹介し、サーマルデザインプラットフォームの構築に向けた取り組みのヒントを模索する。

ナノ・マイクロ熱物性センシングでは測定対象をエネルギー輸送特性、運動量輸送性質、ナノ物質輸送性質の3つに大別し、従来の測定技術では高精度にセンシングできなかった系に適用している。いずれのセンシング技術も測定対象のデバイスやナノ構造の系を乱さない in situ 計測への適用が可能であり、超高時空間分解能を有する革新的センシング技術により、ナノ構造に起因した熱物性変化が解明されつつある。

例えば高温超伝導薄膜線材は送電ケーブルや超伝導コイルなどエネルギー・環境分野の次世代技術として注目されており、実用環境下(すなわち低温・強磁場環境下)での熱物性値が求められている。レーザー周期加熱による熱物性センシング手法は、周期的に変調された加熱光に対する試料表面の温度応答の位相差を検出することで、高温超電導薄膜の熱伝導率をセンシングする手法であり、本方法は実用環境下への適用が可能である。実際に、MgO 基板にエピタキシャル成長させた種々の膜厚の YBCO 超伝導薄膜の熱伝導率を測定したところ、フォノン散乱に起因した熱伝導率の低下が見られた。得られた熱物性データはシミュレーションやデバイス設計に用いられ、高温超伝導のメカニズム解明や材料探索の足掛かりになると期待される。

電子デバイス分野においても革新的熱技術によるブレークスルーが期待されている。高密度実装デバイスにおいて微細化に伴う消費電力と発熱量の増大が熱制御問題を引き起こし、クロックスピードの高速化やデバイスの高機能化のボトルネックになっている。特に、3次元実装された電子デバイスの接合部における界面熱抵抗の増大と効果的な排熱手段の欠如が大きな障壁となっている。また、経時劣化による界面熱抵抗の増大も熱制御を困難にしていると言える。一方、ナノデバイスにおける局所温度分布やナノスケールでの熱輸送現象の観察は、フォノン輸送解析や新奇材料創製の観点からも非常に重要であるが、空間分解能と不確かさの観点からセンシングは極めて難しい。近年では近接場光を用いたナノスケール温度計測技術の開発が進んでおり、新たなセンシング手法として期待される。

TBABセミクラスレートハイドレートは生成条件が常温付近であり、蓄熱媒体として非常に優れている。しかし、結晶構造の歪みが熱伝導率を低下させ、ゲスト分子のラットリングにより熱伝導率の温度依存性が特異的な振る舞いをする。幅広い温度範囲での高精度な熱物性センシング技術は、セミクラスレートハイドレートの水分子格子とゲスト分子のナノ構造に依存したフォノン輸送性質の解明や生成過程の理解と蓄熱材としての実用化

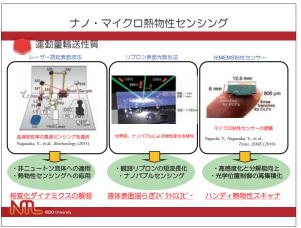
のためのデータを提供するとともに、分子シミュレーションを用いた新しいゲスト分子の 探索やナノ構造デザインを通した熱伝導制御へと繋がる。

以上示してきたように、センシング技術、シミュレーション技術、ナノ構造合成・構築 技術の一貫したサーマルデザインプラットフォームの構築は、我が国に革新的熱技術をも たらすと確信する。





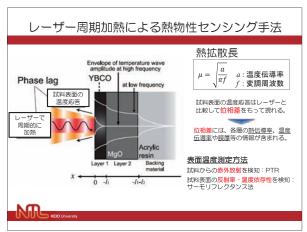


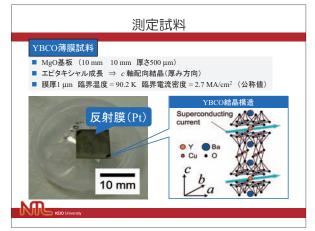


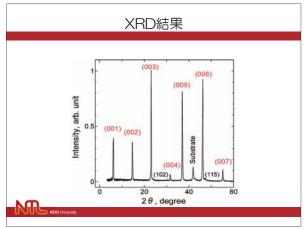


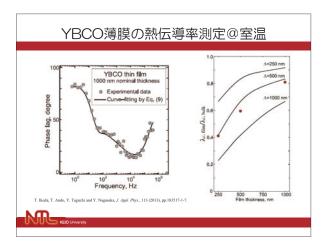




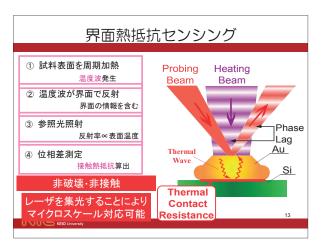


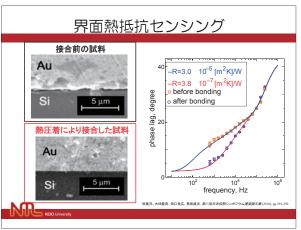




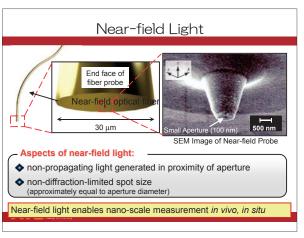


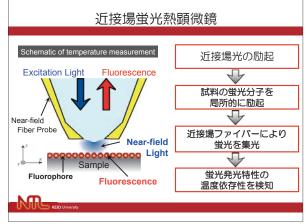


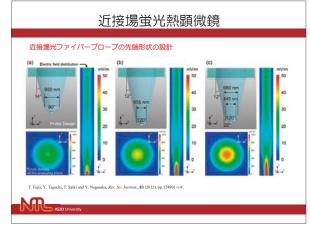


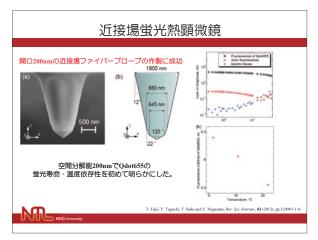




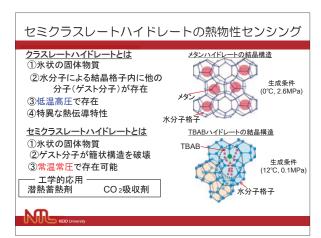


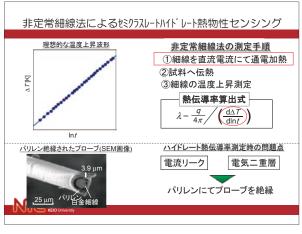


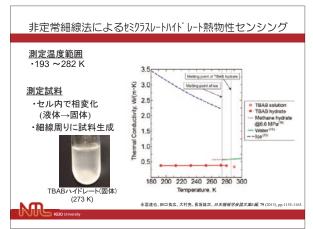


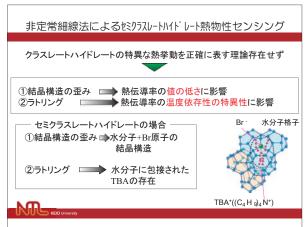












2-5. 世界のトピックス

大宮司 啓文(東京大学 大学院新領域創成科学研究科 環境学専攻 准教授)

これまでのエネルギー利用は、その大部分が、化石燃料(化学エネルギー)を燃やすことで、高温高圧のガス(熱エネルギー)をつくり、熱機関を動かすことで動力(機械エネルギー)を取り出すというものであった。動力は機械エネルギーとしてそのまま利用されたり、あるいは発電機を使って電気エネルギーに変換の後、利用されたりする。一方、最近は、化学エネルギーを直接に電気エネルギーに変換する電池技術、あるいは光エネルギーを利用する技術などがある程度の規模で実現されてきている。このような背景から、熱エネルギーへの注目度は相対的に低くなっているかもしれない。しかしながら、熱エネルギーを直接に電気エネルギーに変換する熱電変換、あるいは、様々な温熱環境をつくりだすヒートポンプなどは今後、ますます注目されるようになると思われる。

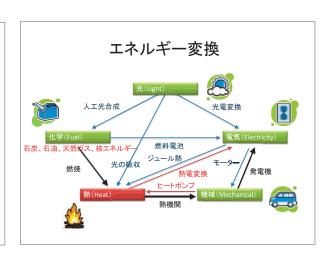
近年注目されているエネルギー技術は、物質、材料の性質を上手に利用することが特徴の一つである。ヒートポンプ技術に関しては、デシカント材(乾燥材)を利用して、温度と(絶対)湿度を独立に制御するデシカント空調システムが注目されているが、少ないエネルギーで水分を分離することができる材料、および手法の開発がその本質である。しかし、エネルギーシステム全体の効率を考える場合には、例えば、システムを導入する環境に合わせて、機械装置の寸法、運転条件などを最適化すること、デシカント材が機能すること(潜熱を分離して処理すること)に伴い、機械要素の設計を変更することなどが必要になる。システムのレベル、機械要素のレベル、材料のレベルなど、様々なレベルに技術的課題があるが、革新的熱技術は最も基本的なレベルにあると思われる。

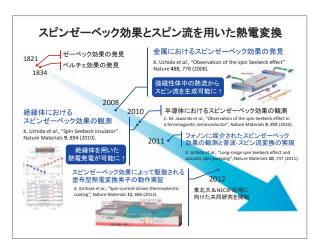
デシカント材による水分分離は、デシカント材による水の吸着・脱着と説明されるが、吸着材表面における水の1分子単位の吸着・脱着というよりはむしろ、ナノスケールの細孔内部における水の毛管凝縮・毛管蒸発という描像に近い。理想的な吸着面に対して、最初に来た水分子が、どの吸着サイトにどのように配向して吸着したかという初期吸着の問題を解明することももちろん重要ではあるが、デシカント材を考える際には、ナノ細孔表面で水の凝縮が進み、ナノ細孔内部を凝縮水が移動し、蒸発、あるいは液体のまま外に取り出すプロセス全体を理解することが重要である。そのような意味で、ナノスケールの流体工学(ナノフルイディクス)は重要な研究課題である。デシカント材の他にも、フィルター、触媒など多孔質材料を用いる様々なエネルギー関連技術においても、また、バイオセンサー、ケミカルセンサーなど分析化学の分野においても注目されている研究課題である。

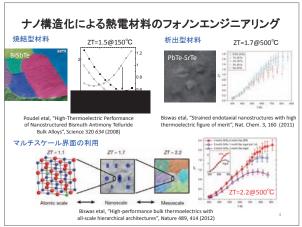
ナノスケールの空間内部の物質移動を正しく評価し、設計手法を確立するためには、材料合成、実験計測、理論解析など、それぞれの開発を進め、相互に評価することが必要になるであろう。また、デシカント空調システムの目標である「少ないエネルギーで水分を分離することができる材料、および手法の開発」については、応用を意識した試行錯誤的な研究も必要であろう。現在、CREST(研究領域「エネルギー高効率利用のための相界面科学」)で、このような研究課題に取り組んでいる。

革新的熱技術に関するワークショップ 「世界のトピックス(仮)」

東京大学工学部機械工学科 大学院新領域創成科学研究科 大宮司 啓文



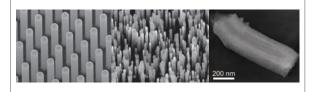


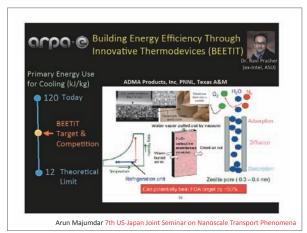


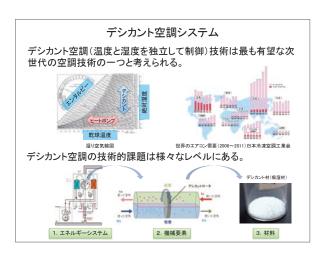
先端的な材料が含まれるエネルギーシステム

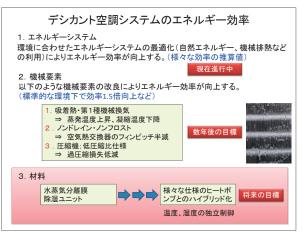
"... We need researchers to develop the technologies that would reduce cost, and that needs system-level thinking: it's not just materials. Materials in the context of systems is really what the issue is."

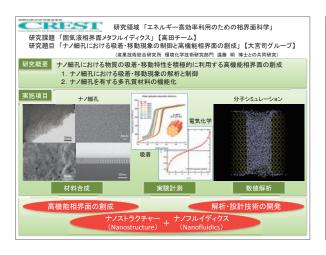
Dr. Arun Majumdar, MRS Bulletin vol. 38, 448 (2013)

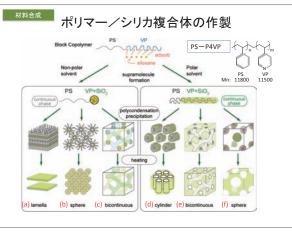


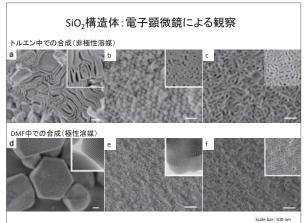


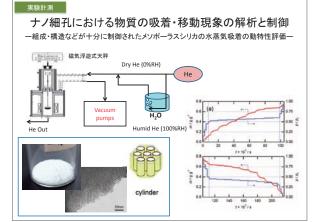


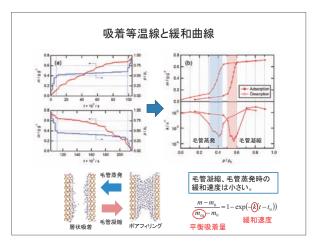


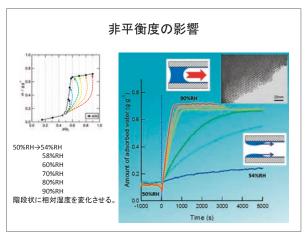


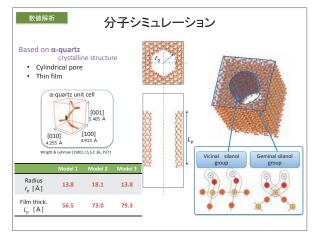


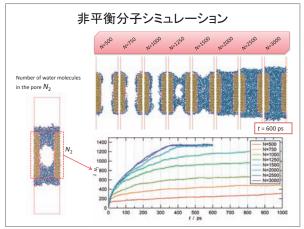


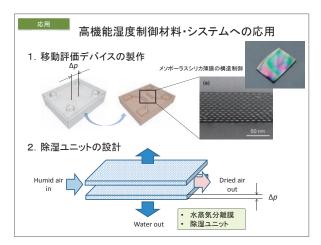


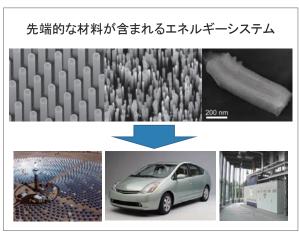












3. コメンテータからのコメント

有識者からの話題提供を受けて、4名のコメンテータの先生方よりコメントをいただいた。

コメンテータ(五十音順)

小原 拓(東北大学 流体科学研究所 ナノ流動研究部門 教授)

加藤 之貴(東京工業大学 原子炉工学研究所 エネルギー工学部門 准教授)

長坂 雄次(慶應義塾大学 理工学部 システムデザイン工学科 教授)

花村 克悟(東京工業大学 大学院理工学研究科 機械制御システム専攻 教授)

■ コメント1 (小原 拓)

材料設計という言葉自体は10年ぐらいずっとありますが、少なくともつい最近までは、それは単なる構造の設計だったと思います。これからはそこで起きている熱現象を設計するというように、明らかに「現象の設計」へと進んでいくであろう。特に、固体の場合は明らかに物理的なバックグラウンドが確立していて、例えばMITの例でも物理と工学がすごく緊密に連携しているからこそ非常に進んだのだと思います。日本では、理論と応用の連携が残念ながらまだなかなかそこまでできていない。

材料と言うと、そのとき我々の頭の中は、それこそ固体の中をフォノンが飛び回っているイメージで一杯になっているわけです。しかし個人的には、流体、特に液体の重要性をやはり強調しておきたい気がします。気体は気体分子運動論が確立しているから、予想もできないような、それほど珍しいことはもう起こらないですけれども、液体をどう設計していくか、あるいは液体のナノスケールでの現象をどう設計していくかということが、今後、間違いなく重要になると思います。むしろ、日本として重要にしなければいけないと思っています。

また、対外的なアピールに関してですが、個人個人が非常に良いテーマを抱えて各人の立場でそれがどう役に立つかといったことを説明することは重要なことだと思いますが、全体として俯瞰できるマップがきちんとあって、その中の自分の位置をきちんと確認できて、かつ外に対してもきちんと見えるような形にできることが、グループを組むことの一つの重要性だと思います。

■ コメント2(加藤 之貴)

米国 DOE のプロジェクト審査を行った際に感じたことですが、「こういうすごい材料 かあるから、こういうすごいことができる」という提案がほとんどで、実現性が希薄な提 案もありますが、中には常識に囚われない斬新な提案もあります。日本にも十分な自力が あるので、革新的な材料研究を日本でも是非推奨するべきだと思います。

また、言葉の使い方ですが、「低品位」な熱と言うと「低エクセルギー」と見えてしまい温度が常温付近に限られますので、「未利用」等の方が言葉としてより的確ではないかと思います。エネルギーの質ではなく、使いやすさで使い分けて、「使いにくいエネルギー」

をいかに使うかに焦点を絞ったら良いのではないでしょうか。

熱エネルギーに関わる新材料開発についてはエネルギー貯蔵、そして変換が重要になりますが、現象はナノスケールで起きているため、実用においては、いかにそれを集約して大容量で効率的に実現するかが大事だと思います。目的とする機能の指標を貯蔵、変換、大容量、輸送などに分けた方が良いのではないかと思います。

材料は気固反応になり、どうしても性能に表面積で効いてきます。例えば、燃料電池で大電力を発生させようとすると大面積でなければなりませんから、スケールアップの正の効果が出しにくい。従って、面積を増やさずに大フラックス化を目指す研究、面積を省く研究が必要だと思います。出力密度を上げると、熱も同時に大量に発生しますから、この熱を高効率に除くまたは輸送するか、その辺を意識した材料設計が良い研究テーマになると思います。

■ コメント3 (長坂 雄次)

材料は重要であるがそれだけではないというのが、熱技術に関する課題だと認識しています。いわゆるバイオ分野での現象解明とか、新しい物質を見つけるとかいうサイエンスの観点からすると、熱技術に関して言えば、例えばだれも考えたことがないサイクルとか新しい変換技術といった完全に新しいものは、原理的には無いと思います。スピンゼーベックなどは新しいと言えば新しいですが、熱やエネルギーといった量的に大きいものを考える限り、やはりサイエンスで言っているような意味での革新性は無いと言えます。

しかし、それでは熱技術は学問として意味がないかというと、そうではなく、工学あるいはエンジニアリングとして考えたときには、やはりやるべきことはたくさんあると思います。それをどうやって外に見えるような形で提示するかが課題だと思います。例えば、これはノーベル賞を狙うのではなく改良するための研究ですというと、インパクトが小さく感じられてしまいますが、むしろその重要性を訴えるべきだと思います。その意味で、数値目標を掲げることは極めて重要で、例えば熱電変換でも目標のZT値とか、想定したアプリケーションで使う場合のエネルギー消費削減量などの目標設定が必要だと思います。また、手法や方法論についても、プロセス改善でどういうものを作ればどれだけの効果が出るのかを明確にすることが重要です。例えば、熱機関ではカルノー効率という理論限界がありますが、電極やイオン液体等の場合でも「これ以上は行かない」という極限の目標を定めて、そこへ段階的にアプローチすることが必要ですし、計測も何でも測ればいいというものではなく、やはり欲しいものに対してどこまで、どの精度で測れるかを的確に言う必要があると思います。

熱分野の研究での鍵だと思うのは、設計のための方法論もきちんと含めて提示するということだと思います。例えば、「設計因子をしらみ潰しに検討するための計測技術や解析技術があれば最高の電極が開発できます」というように、方法論も含めて工学らしいエンジニアリングサイエンスという側面を強調すべきだと思います。これは科研費研究では難しいことなので、JSTの研究では泥臭くてもそういう視点を強調しても良いのではないかと思いました。

■ コメント4 (花村 克悟)

例えば溶けるとは思えなかったものが溶けたりするなど、今までの常識を疑ったり、教科書に載っていないことに挑戦するといったことがまだこの分野にも残っていると思います。確かに、第二法則を破るということはあり得ないし、カルノー効率よりも上がるものはないですが、それとは別に材料の限界というのもあって、物性を固定してしまうとそれ以上の特徴は出てこないわけです。しかし、物質の構造を工夫するなど何かを付加することで特徴や違いを出せると思います。何とキャッチコピーをつけたら良いのかわかりませんが、指向性を強めるというか、今までの熱という乱雑なものを一つの方向性に揃えるような、いわゆるエントロピーを下げるような話がこれからの熱研究の取り組むべき方向ではないかと思います。その例がアップコンバージョンであり、熱伝導の制御であると思います。

そのときに、今まで知られていなかった、教科書では触れられていない、あるいは非常にぼやかした書き方をしているところが逆に明確になる場合も出てくると思います。そういう事例を探しつつ、一方でJSTの場合は数値目標が必要だということであれば、現在の立ち位置とその限界を示しつつ、そこにアイデアを付与することでどこまで達するのかを明らかにする必要があると思います。

良い言葉が思い浮かびませんが、学術的には熱の指向性というか、乱雑さを抑えるような何か、そういうことがこれからの一つの視点ではないかと思います。材料をよく見極めて、分子レベルからマクロなエネルギーシステムまでを繋げていくというような話になるかと思います。エネルギーというのは、量的に稼がなければならないので、波長範囲でいえば、ある幅をもったバンド(領域)が必要です。すなわち、ある程度大きな量として取り出したり輸送するには、今まで(波長範囲でいえば)ブロードな波長範囲だったものを、ある程度のバンドにそのエネルギーを閉じ込める、あるいは揃えるぐらいにすることが大事だと思います。レーザーのように完全に揃える必要はありません。熱の範疇は超えないでそのような潮流を表現するキャッチコピーが何かあれば良いと思います。

4. まとめ

以上のような事例紹介と討論を通じて、革新的熱技術に関わる活発な意見交換がなされ、以下の共通認識を得た。

材料研究による革新

熱利用技術を高度化するとは、あらゆる熱媒体やエネルギーキャリアの輸送、分離、蓄エネルギー、変換といった素過程を革新するということである。そのためには、従来の物性を凌駕する、あるいは新たな機能を発現する新たな熱機能材料の開発が重要となる。当然のことながら、これらの新規材料には高い安定性、安全性、環境性が求められるため、これらのトレードオフを解決するための研究が不可欠である。また、固体に限らず液体研究も今後重要になると考えられる。

設計科学研究の重要性

熱エネルギーを扱う技術には膨大な量的貢献が求められることから、たとえ研究成果が わずかな改善につながるものであっても、その重要性は大きい。従って、数値目標を明確 に定めた上で、それを実現するための手法やツールを革新する構成的な設計科学研究も極 めて重要である。

製造プロセスの革新

上記の新規材料を安定に大量生産する製造プロセス技術も併せて高度化する必要がある。例えば、混練、凝集、分散、塗布、濃縮、乾燥、焼結、圧縮、反応といった低コスト量産プロセスは、熱輸送現象を伴う場合がほとんどであるが、従来は経験とノウハウに依存していた面が強い。新規な高機能材料を大量かつ安価に製造するためには、今後は科学的なアプローチを導入してその熱的製造プロセスをブレークスルーさせる必要がある。

5. 付録

付録 1 開催概要・プログラム

■ 日時: 平成 25 年 6 月 29 日 (土) 13:00 ~ 17:00

■ 場所: JST 東京本部別館(K's 五番町) 2階会議室A-②

■ 主催: JST 研究開発戦略センター 環境・エネルギーユニット

■ プログラム(敬称略):

◆総合司会◆ 鹿園 直毅 (東京大学生産技術研究所エネルギー工学連携研究センター 教授、 CRDS 特任フェロー)

13:00 ~ 13:10 開会挨拶

笠木伸英 (CRDS 上席フェロー/東京大学名誉教授)

開催趣旨説明 (イントロダクション)

鹿園直毅(東京大学生産技術研究所 エネルギー工学連携研究センター 教授

/ CRDS 特任フェロー)

*講演各30分、質疑応答各10分

- 13:10 ~ 13:50 1. フォノニクスによる熱伝導制御と熱電変換応用 野村政宏(東京大学生産技術研究所 准教授)
- 13:50 ~ 14:30 2. 電極製造プロセスにおける熱流動現象とその高度化技術 井上元(京都大学 大学院工学研究科 化学工学専攻 助教)
- 14:30 ~ 15:10 3. イオン液体内部における物質・エネルギー移動 - 未利用エネルギーの有効利用を目指す光波長変換研究に関連して 村上陽一(東京工業大学 グローバルエッジ研究院

テニュアトラック助教)

15:10~15:20 休憩(10分)

15:20 ~ 16:00 4. ナノ・マイクロ熱物性センシングとサーマルデザインプラットフォーム 田口良広 (慶應義塾大学 理工学部 システムデザイン工学科 准教授)

16:00 ~ 16:40 5. 世界のトピックス 大宮司 啓文 (東京大学 大学院新領域創成科学研究科 環境学専攻 准教授)

16:40 ~ 17:00 コメンテータからのコメント

コメンテータ (五十音順):

小原 拓 (東北大学 流体科学研究所 ミクロ熱流動研究部門 教授)

加藤之貴(東京工業大学 原子炉工学研究所 エネルギー工学部門 准教授)

長坂雄次(慶應義塾大学 理工学部 システムデザイン工学科 教授)

花村克悟(東京工業大学 大学院理工学研究科 機械制御システム専攻 教授)

17:00 閉会挨拶

笠木伸英 (CRDS 上席フェロー/東京大学名誉教授)

付録 2 参加者名簿

(敬称略)

ラック助教
ラック助教
エロー
壬フェロー
_
_
_
生
ド・ 汝調査員
カター
开究監
光員
니닷

■ワークショップ企画・報告書編纂メンバー■

笠木 伸英 (環境・エネルギーユニット) 上席フェロー (環境・エネルギーユニット) 鹿園 直毅 特任フェロー (環境・エネルギーユニット) 給木 至 フェロー 福田 哲也 フェロー (環境・エネルギーユニット) (環境・エネルギーユニット) 渡辺 美代子 フェロー

※お問い合せ等は下記ユニットまでお願いします。

CRDS-FY2013-WR-04

科学技術未来戦略ワークショップ

革新的熱技術に関するワークショップ報告書

平成 25 年 6 月 29 日 (土) 開催

平成 25 年 10 月 October 2013

独立行政法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター 環境・エネルギーユニット Environment and Energy Unit, Center for Research and Development Strategy, Japan Science and Technology Agency

〒102-0076 東京都千代田区五番町7 K's 五番町

電 話 03-5214-7481 (代表)

ファックス 03-5214-7385

http://www.jst.go.jp/crds/ ©2013 JST/CRDS

許可無く複写/複製することを禁じます。

引用を行う際は、必ず出典を記述願います。

No part of this publication may be reproduced, copied, transmitted or translated without written permission. Application should be sent to crds@jst.go.jp. Any quotations must be appropriately acknowledged.

