

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

2018 年度 実績報告書

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

高規則的かつ高密度に金属基板表面を分子で化学修飾するための、理想的な三脚型チオール分子の開発に成功した。この分子三脚は、トリプチセンを基盤骨格とし、固体表面上で二次元入れ子状集合構造を形成することで、高い規則性と密度をもって、基板表面にほぼ完全に垂直配向して吸着する。この吸着挙動は、走査型トンネル顕微鏡 (STM)、X線光電子分光 (XPS)、X線吸収端微細構造分光 (NEXAFS) などにより明らかにした。このトリプチセン分子三脚を足場として用いることで、様々な機能団を表面に対する距離や角度を完全に制御しつつ、高密度で固定化できる。表面修飾した固体や薄膜の熱物性を含む様々な物性の制御や、目的に合わせた表面の機能化が可能になると期待される(代表的な原著論文1)。

分子ダイナミクスを示す系として、非平面型の分子構造を有するアルキルアミド置換ヘリセン誘導体を設計した。この分子は、分子間水素結合により二次元的に自己集合化し、液晶性を示すことを見いだした。液晶状態において外部電場を印加すると、分子間アミド水素結合の反転が生じ、双極子反転による強誘電体電場一分極ヒステリシスが生じる。熱分析では、ラセミヘリセン誘導体は330から420 Kの温度域で液晶性を示すが、キラル誘導体は液晶性を示さなかった。ラセミ誘導体の結晶構造解析では、二次元的な水素結合ネットワークの形成が確認され、従来までの一次元カラム型の強誘電体とは異なる分子集合構造の形成が示された。二次元構造を反映して、高い水素結合密度と優れたドメイン配向が実現し、結果として、強誘電体パラメータである残留分極値が、一次元系と比較して飛躍的に増加した。二次元強誘電体の開発は、優れた強誘電体パラメータの実現に有利であり、実用化材料としても高い潜在能力を秘めている。(代表的な原著論文2)

分子配向の新しい技術として、異方性を有するモノマー分子を光重合により高分子化しながら一段階で配向させる手法を開発した。様々な形状に設計した光を動かすことにより、大面積一軸配向、放射状配向、螺旋状配向など多彩な分子配向パターンニングができることを示した。さらに、これらの配向パターンを有するフィルムが、光回折機能や偏光変換機能を発現することを明らかにした。特に、ハニカム形状の光照射により内部に放射状の分子配向を誘起したフィルムでは、ガウシアン状の入射レーザー光をドーナツ状に変換できることを見いだした(代表的な原著論文3)。

【代表的な原著論文】

1. Fumitaka Ishiwari, Giulia Nascimbeni, Eric Sauter, Hiromu Tago, Yoshiaki Shoji, Shintaro Fujii, Manabu Kiguchi, Tomofumi Tada, Michael Zharnikov, Egbert Zojer and Takanori Fukushima, "Triptycene Tripods for the Formation of Highly Uniform and Densely Packed Self-Assembled Monolayers with Controlled Molecular Orientation", *Journal of the American Chemical Society*, vol. 141, No. 14, pp. 5995–6005, 2019.
2. Hayato Anetai, Takashi Takeda, Norihisa Hoshino, Higashi Kobayashi, Nozomi Saito, Masanori Shigeno, Masahiko Yamaguchi and Tomoyuki Akutagawa, "Ferroelectric

Alkylamide Substituted Helicene Derivative with 2D Hydrogen-Bonding Lamellar Phase”, *Journal of the American Chemical Society*, vol. 141, No. 6, pp. 2391–2397, 2019.

3. Miho Aizawa, Megumi Ota, Kyohei Hisano, Norihisa Akamatsu, Takeo Sasaki, Christopher Barrett and Atsushi Shishido, “Direct fabrication of a q-plate array by scanning wave photopolymerization”, *Journal of the Optical Society of America B*, vol. 36, No. 5, pp. D47–D51, 2019.

§ 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
 - ・様々な熱マネージメント有機材料の熱拡散率測定

(2) 木口グループ

- ① 主たる共同研究者: 木口 学 (東京工業大学理学院 教授)
- ② 研究項目
 - ・機械的応力による単分子の熱起電力制御の検討
 - ・ラマン分光と電気計測を組み合わせた電流加熱による分子の吸着構造の変化の検討

(3) 中村グループ

- ① 主たる共同研究者: 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
 - ・量子非平衡伝導理論に基づくフォノン熱伝導シミュレータの開発
 - ・非調和効果、大振幅運動による散逸のモデル化と量子伝導理論への組み込み手法の構築

(4) 芥川グループ

- ① 主たる共同研究者: 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率測定システムの構築
 - ・二次元ダイナミクスを有する有機強誘電体の開発

(5) 宍戸グループ

- ① 主たる共同研究者: 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
 - ・熱マネージメント物質の精密配向制御法の開発
 - ・分子配向した巨視的高分子フィルム創製の創製