

ナノスケール・サーマルマネジメント基盤技術の創出  
2017年度採択研究代表者

2019年度 実績報告書
-----------------

大宮司 啓文

東京大学大学院工学系研究科  
教授

ナノ空間材料に内包された水の吸着・移動の熱制御

## § 1. 研究成果の概要

本研究では、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標とする。この目標を達成するために、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、ナノスケールで現象を理解することに取り組む。この研究成果は革新的な吸湿材の創製に繋がる。また、複合材料の合成、水分移動機構の提案、デバイスの開発を行い、ナノスケールからマクロスケールまでシームレスに物質輸送、熱輸送現象を捉えるマルチフィジックスの学理を構築することに取り組む。この研究成果は新規調湿デバイスの開発に繋がる。研究項目は以下の4項目にまとめられる。

1. ナノ空間材料の合成、機能化技術の開発
2. 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の開発
3. ナノ空間材料に内包された物質の吸着・移動現象の解析技術の開発
4. 複合材料の合成、水分移動機構の提案、デバイス応用

本年度は、昨年度に引き続き、ナノ空間材料の合成、ガス吸着の実験計測、理論解析について研究を行った。**1**については、材料の特徴を把握するための様々な計測系に適した材料を合成した。例えば、珪素系多孔質材料について、メソポーラスシリカのエイジングプロセスにおける細孔構造の時間変化を分析した。(S. Hiraide, M. Yamada, S. Kataoka, Y. Inagi, A. Endo, “Time evolution of the framework structure of SBA-15 during the aging process,” *Colloids Surf. A* 583, 123807, 2020) **2**については、高温水蒸気吸着測定装置、吸着量・吸着熱同時計測装置、吸着量・赤外分光同時計測装置などの計測機器の開発を進め、取得データの評価を行った。**3**については、ソフトウェアの開発を進めた。**4**については、複合材料の合成を念頭に、シリンダー状の細孔をもつ珪素系多孔質材料について、細孔径のみならず細孔長さが吸着・脱着速度に与える影響を評価した。(J. Hwang, K. Yanagita, K. Sakamoto, W.-L. Hsu, S. Kataoka, A. Endo and H. Daiguji, “Water filling and emptying kinetics in two-dimensional hexagonal mesoporous silica of same pore diameter but different pore lengths,” *Langmuir* 35, 10762-10771, 2019)

これまでの研究から、ナノポーラス金属錯体、特に柔軟な構造をもつナノポーラス金属錯体を吸湿材として応用することがエネルギーの観点から有効であることを見出した。すなわち、水蒸気が吸着する際に放出する吸着熱を材料の膨潤に利用し、一方、材料が収縮する際に放出する熱を水蒸気の脱着に利用することにより、水蒸気の吸着・脱着に必要な外部との熱の授受を低減することができると考えた。今後の新規調湿デバイスの開発においては、柔軟な構造をもつナノポーラス金属錯体を中心に検討する予定である。また、このことに関連して、ゲスト溶媒分子により柔軟な構造をもつナノポーラス金属錯体の構造を変化させ、化学反応を切り替える、動的トポケミカル反応という概念を提唱した。(S. Kusaka, A. Kiyose, H. Sato, Y. Hijikata, A. Hori, Y. Ma, R. Matsuda, “Dynamic topochemical reaction tuned by guest molecules in the nanospace of a metal-organic framework,” *J. Am. Chem. Soc.*, 141, 15742-15746, 2019)

## § 2. 研究実施体制

### (1) 大宮司グループ

- ① 研究代表者: 大宮司 啓文 (東京大学大学院工学系研究科教授)
- ② 研究項目
  1. 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の開発  
水吸着・移動評価、熱輸送の分光計測
  2. ナノ空間材料に内包された物質の吸着・移動現象の解析技術の開発  
分子シミュレーションソフト、マルチスケールシミュレーションソフトの開発
  3. 複合材料の合成、水分移動機構の提案、デバイス応用  
水分移動機構の提案、デバイス応用

### (2) 遠藤グループ

- ① 主たる共同研究者: 遠藤 明 (産業技術総合研究所化学プロセス研究部門副研究部門長)
- ② 研究項目
  1. ナノ空間材料の合成、機能化技術の開発  
珪素系ナノ空間材料
  2. 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の開発  
珪素系ナノ空間材料
  3. 複合材料の合成、水分移動機構の提案、デバイス応用  
水分移動機構の提案、デバイス応用、複合材料の合成

### (3) 千足グループ

- ① 主たる共同研究者: 千足 昇平 (東京大学大学院工学系研究科准教授)
- ② 研究項目
  1. ナノ空間材料の合成、機能化技術の開発  
炭素系ナノ空間材料
  2. 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の開発  
炭素系ナノ空間材料、熱輸送の分光計測

### (4) 松田グループ

- ① 主たる共同研究者: 松田 亮太郎 (名古屋大学大学院工学研究科教授)
- ② 研究項目
  1. ナノ空間材料の合成、機能化技術の開発  
ナノポーラス金属錯体
  2. 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の開発  
ナノポーラス金属錯体