

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

2020年度
年次報告書

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

本年度は、昨年度に引き続き、1. ナノ空間材料の合成、2. ガス吸着の実験計測、3. ガス吸着の理論解析、4. 応用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、炭素系多孔質材料について、単層 CNT への水吸着現象において単層 CNT からの蛍光発光 (PL) スペクトルの温度依存性を広域の温度範囲で詳細に分析した。温度変化により水分子吸着層が単層 CNT に対し歪みを与えること、さらに水分子吸着層自体もその分子構造が連続的に変化することを明らかにした。

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。例えば、テラヘルツ領域の超低波数領域のラマンスペクトルと吸着量の同時計測を可能にした。これによって、ローカルな分子振動、回転運動、格子振動等と吸着との相関を明らかにすることが可能となった。実際に 2 価の銅イオンとテレフタル酸誘導体からなる JAST 型 MOF について、ラマン・吸着同時得計測を実施したところ、吸着量変化に伴って MOF 結晶のリブレーションモードの変化が観測され、吸着の拡散速度がバルクの結晶構造変化ではなく、配位子と骨格の運動によって大きく影響を受けることを明らかにした。

3については、シミュレーションによりナノ空間材料内部の水の構造的・動的・熱力学的特性を解析する手法を開発した。例えば、MOF 内部に吸着する水のテラヘルツ領域の運動特性を予測した。

4については、本研究で開発した材料を調湿技術に応用することを目標に、様々な調湿技術を検討した。例えば、除湿システムにおける各種パラメータ(材料特性、機械要素の寸法、運転条件など)が「エネルギー効率」と「性能」に及ぼす影響を明らかにし、機械学習により運転条件を最適化する研究を行った。

§ 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

(5) 平出グループ

① 主たる共同研究者: 平出 翔太郎 (京都大学工学研究科、助教)

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
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・移動現象の解析技術の開発
分子シミュレーションソフトの開発

【代表的な原著論文情報】

- 1) Yuta Saito, Yuichiro Tanaka, Genta Yamaguchi, Takashi Kato, Satoru Konabe, Shohei Chiashi, Yoshikazu Homma, “Temperature dependence of photoluminescence spectra from a suspended single-walled carbon nanotube with water adsorption layer,” *Journal of Applied Physics* 129, 014301, 2021.
- 2) Y. Feng, H. Li, B. Hou, H. Kataura, T. Inoue, S. Chiashi, R. Xiang, S. Maruyama, “Zeolite-supported synthesis, solution dispersion, and optical characterizations of single-walled carbon nanotubes wrapped by boron nitride nanotubes,” *J. Appl. Phys.*, 129, 015101, 2021.
- 3) H. Arai, T. Inoue, R. Xiang, S. Maruyama, S. Chiashi, “Non-Catalytic Heteroepitaxial Growth of Aligned, Large-Sized Hexagonal Boron Nitride Single-Crystals on Graphite,” *Nanoscale*, 12, 10399–10406, 2020.
- 4) M. Fujimura, S. Kusaka, A. Masuda, A. Hori, Y. Hijikata, J. Pirillo, Y. Ma, R. Matsuda, “Trapping and Releasing of Oxygen in Liquid by Metal-organic Framework with Light and Heat,” *Small*, 17, 2004351, 2021
- 5) Shubo Fei, Wei-Lun Hsu, Jean-Jacques Delaunay and Hirofumi Daiguji, “Molecular dynamics study of water confined in MIL-101 metal-organic frameworks,” *Journal of Chemical Physics* 154, 144503, 2021.
- 6) Lili Yu, Jubair Ahmed Shamim, Wei-Lun Hsu and Hirofumi Daiguji, “Optimization of parameters for air dehumidification systems including multilayer fixed-bed binder-free desiccant dehumidifier,” *International Journal of Heat and Mass Transfer* 172, 121102, 2021.