

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

2022年度
年次報告書

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

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)

宍戸 厚 (東京工業大学 科学技術創成研究院 教授)

中村 恒夫 (産業技術総合研究所 機能材料コンピューテーショナルデザイン研究センター 研究チーム長)

西野 智昭 (東京工業大学 理学院 准教授)

研究成果の概要

有機物質の熱伝導には、特定の分子間相互作用が支配的な因子になることをこれまでに見いだしている。本年度は、分子間相互作用と熱輸送特性の相関を包括的かつ定量的に理解するための取り組みを中心に研究を展開した。 π -スタックにより分子が積層すると音響フォノンが形成され、このフォノンは分子内振動として蓄積された熱エネルギーのキャリアにもなるという描像を初めて明らかにした。結晶中でカルコゲン-窒素間相互作用のネットワークが形成されている物質は、一般的な有機物質よりも数倍高い熱拡散率を示し、さらに強力な水素結合のネットワークを有する系では、桁違いの熱拡散率が観測された。一方、ほぼ同一の化学組成と構造を有しながらも、構成分子が弱い分子間力のみで集合している状態と、それらが化学結合で連結された状態を示す物質系の熱輸送特性の検討では、予想に反して両者にほとんど差は見られず、共有結合で構成分子を連結するだけでは熱伝導が向上しないことを示した。これらの結果は高熱伝導有機材料の設計に明確な指針を与える。また相転移と熱輸送の相関については、スピncrossオーバー錯体の中心金属のspin状態と熱伝導性の相関を見いだしている¹⁾。継続課題であるSAM/水界面の系に関する検討では、計算シミュレーションの結果も踏まえ、親水性官能基の形状、および基板とSAM分子の結合の大きさが、界面熱抵抗に関与する定量的な結果を得た。SThMによるSAMの熱計測によっても、熱伝導が分子/金属界面の結合様式に依存することが示されている。バルク物質開発では、異方的熱輸送が期待される液晶高分子修飾 ZnO ナノロッド単独での一軸配向フィルムを自立膜として作製することに成功した。理論面では、単分子接合デバイスを対象に非線形熱伝導や熱整流作用の検討、また分子ローター集積体における双極子の回転運動と熱伝導の相関に関する計算を進めた。

【代表的な原著論文情報】

1) N. Hoshino, A. Hayashi, T. Akutagawa, “The strong correlations between thermal conductivities and electronic spin states in crystals of Fe(III) spin crossover complexes”, Dalton Transactions **2022**, 51, 12698-12703.