

熱輸送のスペクトル学的理解と機能的制御  
2019 年度採択研究者

2021 年度 年次報告書
------------------

岡田 健司

大阪府立大学 大学院工学研究科  
准教授

結晶性ナノ多孔質材料を用いた熱輸送の理解と能動的制御

## § 1. 研究成果の概要

本研究では、結晶性かつ多孔性の金属有機構造体(MOF)を新規熱輸送物質として用いることで「分子・ナノレベルでの熱挙動の理解」並びに、自在な熱輸送を目指して研究を行っています。MOF のマイクロ細孔は断熱的な役割を果たし、結晶性の骨格が熱輸送のパスとなると考えられます。また、マイクロ細孔は分子配向の鋳型として利用できます。そのため、骨格構造やマイクロ細孔内への導入物質など分子スケールの構造設計を基盤とした自在な熱輸送が期待できます。2019、2020年度は1次元方向に連なったマイクロ細孔を有するMOFの配向自立膜を合成し、細孔方向に約1.46倍高い面内熱拡散率(細孔の垂直方向と比較して)を示すこと、また結晶連続性と熱拡散率異方性の関係を調査した結果、MOFの熱輸送特性には分子/格子スケールのMOFの骨格/格子構造だけでなく結晶連続性(つまり $\mu\text{m}$ スケールの結晶間隙やボイドなど)も影響することが明らかになりました。本年度は、高い分子吸着特性を示すMOFや格子構造の異方性の大きいMOFなどを対象に結晶構造と熱輸送特性の関係を調査することを試みました。これまでとは異なる計4種類のMOF(すべて1次元細孔を有する)に対しても同様に配向自立膜の合成および面内方向に対する熱拡散率異方性を調査した結果、これら4種類のMOFについても同様に1次元細孔と平行方向に高い熱拡散率を示すことを明らかにしました。また、細孔断面積と熱拡散率異方性を調査した結果、細孔断面積の増大に伴い熱拡散率異方性が向上する傾向を確認しました。この研究過程でFT-IR装置でMOF配向自立膜の配向性評価や薄膜内の分子の配向を観察できるIR Crystallography法を報告しました。本年度は2022年度の研究目的である高分子導入MOFの熱輸送特性の調査に向けて、高分子導入MOFの合成方法の探索も行いました。MOF細孔に高分子を導入するアプローチとMOF細孔内で高分子を合成するアプローチを検討した結果、本研究においては後者が最適であることがわかった。次年度はこの手法を用いて高分子導入MOF配向自立膜の合成および熱伝導率の調査を行う予定である。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) “Oriented growth of semiconducting TCNQ@Cu<sub>3</sub>(BTC)<sub>2</sub> MOF on Cu(OH)<sub>2</sub>: crystallographic orientation and pattern formation toward semiconducting thin-film devices”, *Journal of Materials Chemistry A*, vol. 9, No. 35, pp. 19613–19618, 2021
- 2) “Infrared crystallography for framework and linker orientation in metal-organic framework films”, *Chemical Science*, vol. 12, No. 27, pp. 9298–9308, 2021