

## 【基盤研究(S)】

理工系 (工学)



### 研究課題名 超臨界フルイディックセラミクスによるサーマルマネージメント材料創製

東北大学・原子分子材料科学高等研究機構・教授

あじり ただふみ  
阿 尻 雅文

研究課題番号：16H06367 研究者番号：60182995

研究分野：工学

キーワード：超臨界流体、ナノ粒子、ナノ流体、分散、凝集構造、粘性

#### 【研究の背景・目的】

様々なナノ粒子が開発されているにもかかわらず、その応用展開が必ずしも十分すすんでいないその一因は、ナノ粒子と溶媒や高分子間との親和性制御が容易でないことにある。それに対し、申請者らが開発した超臨界水熱合成法によれば、高密度に有機修飾したナノ粒子を合成でき、それにより表面性状は有機分子となるから、高分子との親和性を高く設定できる。さらには、粒径分布を制御することで、80vol%もの超高濃度でさえ流動性を示す、“フルイディックセラミクス”ともいえる新素材を創製できた。これにより、様々なハイブリッド材料やナノインクの開発が展開される端緒ができた。しかしながら、そのナノ材料・部材の物性を設計する科学がなく、そのため合理的材料設計基盤ができていない。

本研究では、この新素材の①生成原理の解明、設計法の確立を図り、それに基づき、②高性能「熱制御」材料創製をめざす。

#### 【研究の方法】

超臨界水中での有機修飾機構の解明を行ない、任意の種類、修飾密度でナノ粒子を有機修飾するためのナノ素材設計手法を確立する。

ナノ粒子の分散・凝集現象を“相挙動”と捉える。化工熱力学を導入し、粒子間、粒子・溶媒間相互作用を評価し、それに基づき分散凝集（相平衡）推算法（設計）を確立する。PVT評価等の熱力学物性評価法をナノ粒子系に適用し、状態方程式と比較することで、ナノ粒子間相互作用すなわちポテンシャルを評価する。これを計算科学に用いることで、ナノ粒子系の構造と物性を評価する。

新たな数学（パーシステント・トポロジー）を導入し、このナノ粒子系の無秩序な凝集（相分離）構造を評価し、無秩序構造に潜む規則構造を抽出する。これにより、構造・物性相関を構築する。まず、凝集（相分離）状態での（静的）構造と粘性の関係を評価する。次に、外場（せん断、温度等）エネルギーが付与された流動状態での（動的）凝集構造を評価し、同様に動的構造・粘性相関を得る。これらと上記相挙動との関係も明らかにする。以上により、フルイディックセラミクスの流動原理を解明する。

それらに基づき、流動性（動的構造発現）と熱伝導/光伝達特性（静的構造発現）とを同時達成し、革新的「熱制御」材料を創製する。

#### 【期待される成果と意義】

- 1) 高い流動性と無秩序構造との相関に基づく、レオロジーへの新科学の提供。
- 2) 流動性を発現する有機修飾ナノ粒子の設計法の確立
- 3) パーシステント・トポロジーの導入によるナノ粒子分散系の無秩序構造の記述法の確立
- 4) 熱制御材料の創製 a) 流動性と熱伝導性をともに発現するフルイディックセラミクス、b) 温度によって熱線を遮蔽、透過を制御するナノ粒子を透明分散させたフレキシブルフィルム

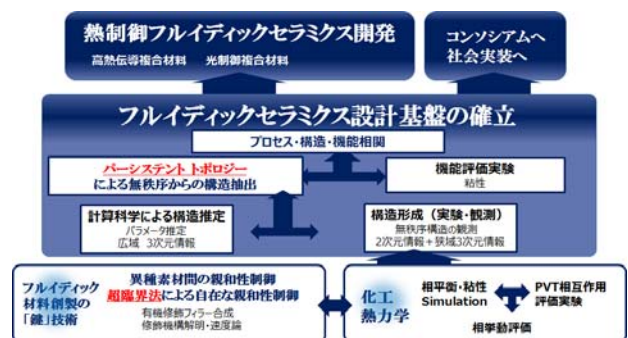


図1 研究構想

#### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- ・ Byrappa K, T.Adshiri, "Hydrothermal technology for nanotechnology", Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials, 53 117-166 (2007)
- ・ J.Zhang, S.Ohara, M.Umetzu, T.Naka, Y. Hatakeyama, T.Adshiri, "Colloidal ceria nanocrystals tailor-made crystal morphology in supercritical water", Adv. Mater., 19, 203-206(2007)

#### 【研究期間と研究経費】

平成 28 年度－32 年度 140,700 千円

#### 【ホームページ等】

[http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/ajiri\\_lab/eng/lish/index.html](http://www.wpi-aimr.tohoku.ac.jp/ajiri_lab/eng/lish/index.html)  
ajiri@tagen.tohoku.ac.jp