

## 【基盤研究(S)】

### 大区分D



## 研究課題名 革新的負熱膨張材料を用いた熱膨張制御

東京工業大学・科学技術創成研究院・教授

あずま まさき  
東 正樹

研究課題番号：19H05625 研究者番号：40273510

キーワード：負熱膨張、相転移、局所構造解析、複合材料、トポロジー最適化

### 【研究の背景・目的】

原子振動の増大に起因する熱膨張は、固体、液体、気体の別を問わない物質共通の性質であるが、構造材料に対して、1. 位置決めはずれ、2. 熱応力による変形・破壊・形状精度の劣化・剥離、という深刻な問題を起こす。例えば純鉄の線熱膨張係数は $\alpha = 11.6 \times 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$ であるから、10cmの鉄の棒は、 $1^{\circ}\text{C}$ の昇温で $1.16\mu\text{m}$ 膨張する。この値は最近のLSIのゲート幅である10nmの100倍以上である。このため、半導体製造や光通信などの精密な位置決めが必要とされる場面では、熱膨張抑制のための高度空調に膨大なエネルギーが浪費されている。また、金属、セラミックス、樹脂などの熱膨張係数の違いは、異種接合界面の剥離や断線といった深刻な障害につながる。この問題は、パワー半導体や3次元集積回路素子といった先端電子デバイスや、熱電変換、燃料電池といったエネルギー・環境技術において、喫緊の課題と認識されており、技術革新には熱膨張制御が不可欠である。東、竹中は、樹脂に添加することで熱膨張係数を任意の値に制御できると期待される、新世代の負熱膨張材料を開発してきた。産業化を目指して更なる新材料を開発すると共に、巨大負熱膨張材料を用いた熱膨張制御技術を確認するのが、本研究の目的である。

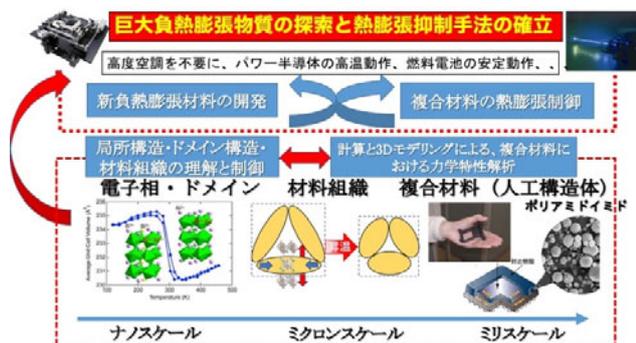


図1 研究の概念

### 【研究の方法】

ナノスケールの局所構造、ミクロンスケールのドメイン構造や材料組織、3Dプリンティングで造形したミリスケールの人工構造体の構造・力学特性を、先進的量子ビームを用いた構造解析と、弾性力学理論にもとづく数値計算で明らかにする。さらに、第一原理計算を駆使して、負熱膨張の起源となる相転移力学を、解明する。これらの結果を材料設計へとフィードバックすることで、効率的な材料開発を行う。また、こう

して開発した負膨張材料を、3Dプリンティングを用い、数値計算で最適化した濃度・配置で樹脂中に分散させることで、強い力学特性を持つゼロ熱膨張コンポジット（複合材料）を実現する。

### 【期待される成果と意義】

第一に、負熱膨張特性を左右する相転移挙動の理解が進み、効率的な材料探索手法を確立出来ると期待される。これにより、 $300^{\circ}\text{C}$ の温度範囲に渡り $-100 \times 10^{-6}/^{\circ}\text{C}$ の負熱膨張が続き、かつ現実的な価格で供給可能な負熱膨張材料を実現する。また、正の熱膨張を持つ構造材料と負熱膨張材料を、任意の比で混合した複合材料の熱膨張率を予測する手法を構築する。さらには、3Dプリンティングで負熱膨張材料の配置を最適化することで、高い機械的強度と任意の熱膨張率を持つ構造材料を実現する。

これらにより、負熱膨張材料とその使用法の学理を構築すると共に、社会的要請の大きい熱膨張問題を解決し、精密加工やエネルギー・環境技術の更なる発展に貢献する。

### 【当該研究課題と関連の深い論文・著書】

- H. Yamamoto, T. Imai, Y. Sakai, and M. Azuma, “Colossal Negative Thermal Expansion in Electron-Doped  $\text{PbVO}_3$  Perovskites”, *Angev. Chem. Int. Ed.*, **57**, 8170 (2018).
- K. Takenaka, Y. Okamoto, T. Shinoda, N. Katayama, and Y. Sakai, “Colossal negative thermal expansion in reduced layered ruthenate”, *Nature Commun.*, **8**, 14102/1–7 (2017).
- M. Azuma, W-T Chen, H. Seki, M. Czapsli, S. Olga, K. Oka, M. Mizumaki, T. Watanuki, N. Ishimatsu, N. Kawamura, S. Ishiwata, M. G. Tucker, Y. Shimakawa, and J. P. Attfield, “Colossal negative thermal expansion in  $\text{BiNiO}_3$  induced by intermetallic charge transfer”, *Nature Commun.*, **2**, 347/1–5 (2011).

### 【研究期間と研究経費】

令和元年度—令和5年度  
155,000千円

### 【ホームページ等】

<http://www.msl.titech.ac.jp/~azumalab/>