


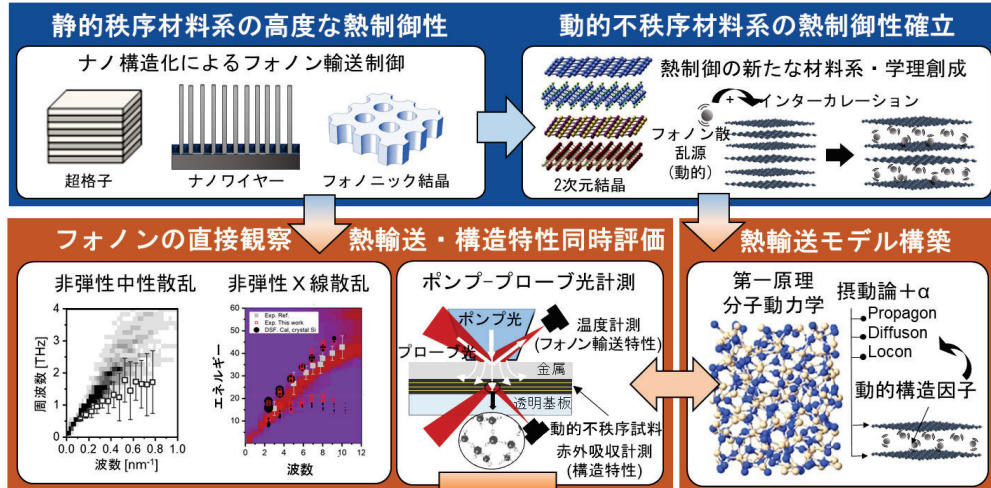
質量輸送も含めた超不秩序固体系のメタフォニクス

| | | |
|--|--------|--|
|  | 研究代表者 | 東京大学・大学院工学系研究科（工学部）・教授 塩見 淳一郎（しおみ じゅんいちろう） 研究者番号:40451786 |
| | 研究課題情報 | 課題番号：22H04950 研究期間：2022年度～2026年度 キーワード：動的な不秩序構造、フォノン輸送、質量輸送、ナノ構造、メタフォニクス |

なぜこの研究を行おうと思ったのか（研究の背景・目的）

●研究の全体像

近年のフォノン輸送の科学の進展は目覚しく、結晶材料においてはナノ構造化による熱伝導の制御性が格段に向上している。さらなる技術の革新に向けては、不秩序な構造から成る系へ材料探索空間を広げる必要があり、その究極を突き詰めるべく、静的および動的な不秩序ナノ構造を創製することで熱伝導の制御性の大幅な拡大を狙う。静的な系として、非晶質材料から成る超格子、ナノワイヤー、フォニック結晶を作製する。一方、動的な系としては、超イオン伝導体のように構成元素の一部が動き回る「超不秩序材料」を創製する。例えば、2次元層状材料へのイオンや水の部分的な導入を通じて、質量輸送とフォノン輸送が共存して相互作用する材料を実現する。それらに対して非弾性散乱実験によってフォノンの状態および緩和を直接計測するとともに、フォノン輸送と動的構造を同時に計測できる新手法を開発してその相関を評価する。さらに、これらを解析することで超不秩序系の熱輸送の新しい学理（メタフォニクス）を構築する。最終的には、熱伝導率を究極的に小さくする固体材料を開発し、光センサーや分子センサーの感度向上や省エネに繋げる。



学術創成：動的な不秩序系による材料・物性空間の拡張 ⇒ 熱輸送の新学理創成
学術展開：熱マネジメント（光センサー、分子センサー、熱遮蔽膜など）に応用

図1 研究全体のイメージ図

●研究の背景と目的 非金属の固体（半導体や絶縁体）の熱伝導は固体を構成する格子（配列した原子）の振動を量子化した「フォノン」によって運ばれる。近年、固体の熱伝導率をフォノン描像より理解し、ナノ構造により制御する「フォノンエンジニアリング」が急速に発展してきた。これによって、ダイヤモンドより高い熱伝導率や、均一非晶質材料よりも小さい熱伝導率を有する結晶材料が見いだされ、熱伝導率はもはや素材が決まる物性ではなく、ナノ構造を工夫することで広域に制御が可能な物性として、放熱、断熱、

熱電変換などの性能の向上に寄与するパラメータとなっている。

このように、ナノ構造を含む結晶系におけるフォノンエンジニアリングは徐々に成熟してきた。さて、固体の熱伝導の学理に関する次の展開は何であろうか？ 私たちは、それが「不秩序系のフォノンエンジニアリング」であると考えている。フォノンによる熱輸送は、結晶のような周期系では明確に定義された固有モード（振動する際の変形の形状）の伝搬として記述できるが、原子が不規則に配列している非晶質の場合は、そのようには行かない。それを表現する理論がこれまで提唱されているが、私たちの最近の研究で、非晶質材料をナノ構造化すると、その理論限界よりも小さな熱伝導率が得られることを明らかにしており、不秩序系によって熱伝導率を従来の理解を超えて制御できる可能性を示している。

本研究では、そのような静的な不秩序ナノ構造に加えて、「動的な不秩序系」を考える。これは、固体を構成する一部の元素群が動的に動くことができる系である。グラファイトなどの層状材料の内部にイオンや水などを導入し、フォノンの輸送と質量の輸送が共存し強く相互作用する材料を創製して、熱輸送の新たな制御性を見出す。さらに、フォノン輸送と動的構造を同時に計測できる新手法を開発してその相関を評価し、分子シミュレーションも用いてそれらを解析し、熱輸送の新しい理論モデルおよび学理を構築することを目指す。

この研究によって何をどこまで明らかにしようとしているのか

●研究の進め方 本研究では、①静的な系として非晶質材料から成る超格子、ナノワイヤー、フォニック結晶を作製してナノ構造による熱輸送の制御性を示し、②動的な系として2次元層状材料の内部で構成元素の一部が動き回る「超不秩序固体系」を創製して熱輸送の新たな制御性を見出す。さらに、③非弾性散乱実験によってフォノンの状態および緩和を直接計測するとともに、フォノン輸送と動的構造を同時に計測できる新手法を開発してその相関を評価し、④それらを解析して熱輸送の様式を明らかにして、超不秩序固体系の熱輸送の新しい理論モデルおよび学理（メタフォニクス）を構築する。

●不秩序固体の熱輸送の新しい理論を確立し、制御性を創出 非晶質固体のような静的な不秩序構造の熱輸送については、結晶の場合の伝播するフォノンと、不秩序性を反映してランダムな方向に拡散的に輸送されるフォノンに切り分けて理解する理論が存在するが、非晶質ナノ構造の熱伝導を再現しないため、ナノ構造やその界面の影響を表現する理論モデルを仕上げる。さらに、上記の超不秩序固体系については、現時点では基盤となる理論が全くない。それに対して、本研究では、最先端の計測や分子動力学シミュレーションでその特徴を捉えた上で、固体側、流体側、その界面と相互作用に切り分けて考え、全体の不秩序性の中の短距離の秩序性を見出しながら、理論モデルを構築する。さらに、このようにして得た理論をもとに、熱伝導率を究極的に低減する最適化された不秩序ナノ構造を設計して実証する。

●ナノスケール熱工学と流体工学の融合分野の創成 固体の熱科学では、結晶から非晶質へ、さらには、固体内部のイオンが拡散するイオン伝導体まで、複雑な構造を持つ材料の理解と制御に発展してきた。一方、流体工学では、流路の微小化が進み、最近では2次元ヘテロ構造を構成部材としたオンストローム流路が実現され、微小空間に液体が閉じ込められることにより特異な流動特性が生じること分かってきている。オンストローム流路内の流動はフォノンと同等のスケールであるため、流路を固体内に設けることで相乗効果が得られると考えている。このように、本研究では結晶系から不秩序系に発展する固体の熱科学と、流路の微小化や閉じ込め効果により変調する液体の流体工学が出会う「新しい融合領域」を創成する。

●応用への展開 機械的に強い緻密な材料の究極的な低熱伝導化を実現し、光センサーや分子センサーの断熱を通じた感度向上や燃焼や熱分解炉の表面の遮熱性向上などに応用する。

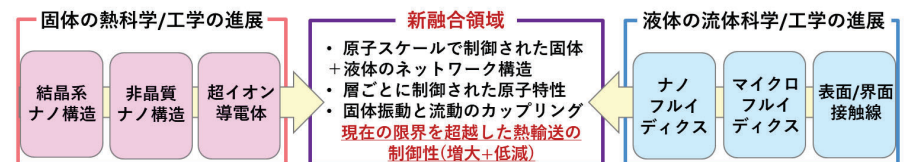


図2 新しい融合領域の創成