

研究課題別事後評価結果

1. 研究課題名： 分子ダイナミクスを利用した熱マネージメント

2. 研究代表者名及び主たる共同研究者名

研究代表者

福島 孝典（東京工業大学科学技術創成研究院 教授）

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）

穴戸 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タ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）

3. 事後評価結果

○評点：

A+ 非常に優れている

○総合評価コメント：

これまで系統的な熱伝導特性の評価がなされていなかった様々な有機分子に関して、マイクロからマクロスケールの熱伝導特性の評価方法の開発、有機膜・バルクの熱伝導特性の系統的な評価、有機分子の量子熱輸送の第一原理計算シミュレータの開発、水素結合を持つ有機分子による高熱伝導特性の実現などの成果をあげた。有機物内の熱伝導メカニズムおよび分子ダイナミクスの影響は、これまでにシステムティックな知見がなかったが、本研究は、高度な材料合成と熱測定技術の融合により、 π スタック系や共有結合、水素結合など代表的な材料に対して熱伝導の測定と解析を行い、分子内熱輸送の原理および分子設計の指針に顕著な成果が得られた。

有機熱デバイスには至らなかったが、有機の特徴を活かした熱物性、熱輸送特性の学理構築に向けて大きな進展があった。具体的には、同一組成、構造で共有結合/非共有結合（分子間力による結合）が実現できる BIT-Hep2 を用いて、共有結合の熱伝導に与える効果を調べ、室温では差がないが、フォノンの散乱が抑制される低温では共有結合があることにより顕著に熱伝導が増大することを見出した。また、有機材料に一般的に見られる π スタック構造において、並行と垂直方向で熱輸送の様相が異なることを明らかにし、 π スタック方向には音響フォノンが熱伝導を担うことを示した。さらに、水素結合ネットワークにより 1 桁以上熱伝導度が高くなることを示し、分子間相互作用の中でも水素結合が顕著に熱伝導に寄与することを実証した。理論的な基礎研究として、分子構造と熱輸送の相関の議論に寄与する第一原理フォノン熱輸送シミュレータの開発・実装を行ったことも評価できる。分子ローターを有する有機材料を実現したことも面白い。分子の回転の熱伝導への貢献はまだはっきりしないが研究のスタート点に立った意義は大きい。業績論文が 160 件以上あり、論文発表などは非常に高いレベルで行われた。

CREST 内の各チームとの連携を上手く推進し、有機材料の信頼性のある熱物性計測を実現したこと、グループの持つ合成技術を活かして、他のグループへの有機材料供給を積極的に行なったこと、高効率な光熱変換挙動を示す分子性マンガングラスタを発見したことも高い評価に値する。走査型サーマル顕微鏡 (SThM) において、温度や輻射特性の分布を非接触で可視化できること、さらには接触条件よりも高解像度のイメージングが可能になることを見出したことも、非接触で非破壊なナノ熱計測に繋がる有望な技術として特筆に値する。