

Title	熱スイッチ機能を有する熱輸送材料の設計と熱交換メカニズムの分子論的理解
Sub Title	Design for materials with thermo-switching function based on molecular-level understanding of thermal conduction
Author	荒井, 規允(Arai, Noriyoshi)
Publisher	慶應義塾大学
Publication year	2020
Jtitle	学事振興資金研究成果実績報告書 (2019.)
JaLC DOI	
Abstract	<p>本研究では分子の自己集合を利用した熱スイッチ機能を持つ熱輸送材料の設計を行うことを目的とした研究で、2年計画の1年目である。スイッチ機能には材料の自己集合を利用する予定であり、1年目の成果として、まずは自己集合材料の様々なモルフォロジーを明らかにした。近年合成が可能となった異方性ナノ粒子の中でも、両親媒性テトラポッド型ナノ粒子に着目した。この粒子は結合サイトを有しているため、従来の球形のナノ粒子に比べ、ネットワーク状につながることでできたり、複雑な結晶構造を形成することができるなど、これまでにない特徴をもった新規材料の開発が期待される。分子シミュレーションによって、ナノ粒子の疎水表面積が自己集合構造を制御する鍵であることを特定した。疎水表面積が粒子間の結合パターンに直接影響し、ナノ粒子の立体構造の秩序性を変化させることを明らかにした。</p> <p>また、従来の球形ナノ粒子の自己集合と熱伝導率の変化についても調べた。過去の実験では、熱伝導率は添加剤の粒径や粒子種等に大きく依存し、あるナノ粒子について熱伝導率が高くなるという報告もあるが、逆に分低くなるという報告もあり、鍵となるパラメータは不明であった。そこで分子シミュレーションを用い、親水性・疎水性、両方を持つ粒子を水中に分散させ、熱伝導率を解析した。その結果、熱伝導率は水溶液中の平均クラスターサイズと強く関連があることを明らかにした。</p> <p>以上の成果を踏まえ、次年度以降は異方性ナノ粒子が複雑な自己集合構造を形成したときの熱伝導率の測定、および相変化条件を特定し、スイッチ機能を持った材料設計に取り組みたい。</p> <p>This is the first year of the two-year plan, which aims at designing a heat transport material with a switch function of thermal conductivity using molecular self-assembly. We first clarified various morphologies of self-assembled materials. Among the anisotropic nanoparticles that can be synthesized in recent years, we focused on amphiphilic tetrapod-type nanoparticles because these nanoparticles have binding sites. Materials with unprecedented functionality are expected due to networks or complex crystal structures.</p> <p>We have identified by molecular simulation that the hydrophobic surface area of nanoparticles is the key to control the self-assembly structure.</p> <p>We also examined the self-assembly of conventional spherical nanoparticles and the change in thermal conductivity. In previous experiments, it was reported that the thermal conductivity greatly depends on the particle size and particle type as additives. However, its key parameter was unknown. Therefore, we analyzed the thermal conductivity by dispersing nanoparticles with hydrophilic surface, hydrophobic surface, and Janus surface in water using molecular simulation. The results showed that the thermal conductivity was strongly related to the mean cluster size in aqueous solution.</p> <p>Based on the above results, we will work on the measurement of thermal conductivity when anisotropic nanoparticles form a complex self-assembled structure.</p>
Notes	
Genre	Research Paper
URL	https://koara.lib.keio.ac.jp/xoonips/modules/xoonips/detail.php?koara_id=2019000008-20190359

慶應義塾大学学術情報リポジトリ(KOARA)に掲載されているコンテンツの著作権は、それぞれの著作者、学会または出版社/発行者に帰属し、その権利は著作権法によって保護されています。引用にあたっては、著作権法を遵守してご利用ください。

The copyrights of content available on the Keio Associated Repository of Academic resources (KOARA) belong to the respective authors, academic societies, or publishers/issuers, and these rights are protected by the Japanese Copyright Act. When quoting the content, please follow the Japanese copyright act.

研究代表者	所属	理工学部	職名	准教授	補助額	1,600 千円
	氏名	荒井 規允	氏名（英語）	Noriyoshi Arai		
研究課題（日本語）						
熱スイッチ機能を有する熱輸送材料の設計と熱交換メカニズムの分子論的理解						
研究課題（英訳）						
Design for materials with thermo-switching function based on molecular-level understanding of thermal conduction						
研究組織						
氏名 Name		所属・学科・職名 Affiliation, department, and position				
荒井規允（Noriyoshi Arai）		理工学部・機械工学科・准教授				
大村亮（Ryo Ohmura）		理工学部・機械工学科・教授				
1. 研究成果実績の概要						
<p>本研究では分子の自己集合を利用した熱スイッチ機能を持つ熱輸送材料の設計を行うことを目的とした研究で、2年計画の1年目である。スイッチ機能には材料の自己集合を利用する予定であり、1年目の成果として、まずは自己集合材料の様々なモルフォロジーを明らかにした。近年合成が可能となった異方性ナノ粒子の中でも、両親媒性テトラポッド型ナノ粒子に着目した。この粒子は結合サイトを有しているため、従来の球形のナノ粒子に比べ、ネットワーク状につながることができたり、複雑な結晶構造を形成することができるなど、これまでにない特徴をもった新規材料の開発が期待される。分子シミュレーションによって、ナノ粒子の疎水表面積が自己集合構造を制御する鍵であることを特定した。疎水表面積が粒子間の結合パターンに直接影響し、ナノ粒子の立体構造の秩序性を変化させることを明らかにした。</p> <p>また、従来の球形ナノ粒子の自己集合と熱伝導率の変化についても調べた。過去の実験では、熱伝導率は添加剤の粒径や粒子種等に大きく依存し、あるナノ粒子について熱伝導率が高くなるという報告もあるが、逆に分低くなるという報告もあり、鍵となるパラメータは不明であった。そこで分子シミュレーションを用い、親水性・疎水性、両方を持つ粒子を水中に分散させ、熱伝導率を解析した。その結果、熱伝導率は水溶液中の平均クラスターサイズと強く関連があることを明らかにした。</p> <p>以上の成果を踏まえ、次年度以降は異方性ナノ粒子が複雑な自己集合構造を形成したときの熱伝導率の測定、および相変化条件を特定し、スイッチ機能を持った材料設計に取り組みたい。</p>						
2. 研究成果実績の概要（英訳）						
<p>This is the first year of the two-year plan, which aims at designing a heat transport material with a switch function of thermal conductivity using molecular self-assembly. We first clarified various morphologies of self-assembled materials. Among the anisotropic nanoparticles that can be synthesized in recent years, we focused on amphiphilic tetrapod-type nanoparticles because these nanoparticles have binding sites. Materials with unprecedented functionality are expected due to networks or complex crystal structures.</p> <p>We have identified by molecular simulation that the hydrophobic surface area of nanoparticles is the key to control the self-assembly structure.</p> <p>We also examined the self-assembly of conventional spherical nanoparticles and the change in thermal conductivity. In previous experiments, it was reported that the thermal conductivity greatly depends on the particle size and particle type as additives. However, its key parameter was unknown. Therefore, we analyzed the thermal conductivity by dispersing nanoparticles with hydrophilic surface, hydrophobic surface, and Janus surface in water using molecular simulation. The results showed that the thermal conductivity was strongly related to the mean cluster size in aqueous solution.</p> <p>Based on the above results, we will work on the measurement of thermal conductivity when anisotropic nanoparticles form a complex self-assembled structure.</p>						
3. 本研究課題に関する発表						
発表者氏名 （著者・講演者）	発表課題名 （著書名・演題）	発表学術誌名 （著書発行所・講演学会）	学術誌発行年月 （著書発行年月・講演年月）			
Y. Kobayashi and N. Arai	Predominant Factor Determining Thermal Conductivity Behavior of Nanofluid : Effect of Cluster Structures with Various	J. Electrochem. Soc.	2019/05			
Y. Araki, Y. Kobayashi, and N. Arai	Programmed self-assembly of tetrapod nanoparticles with an amphiphilic surface pattern: the effect of arm length and hydrophobic ratio	Mol. Sys. Des. Eng.	2019/12			