

<記者用説明文>

バーチャルデザインしたナノサイズの空孔をもつ新しい多孔質炭素材料を開発

日立化成株式会社 イノベーション推進本部

植田 敦子

☎029-864-4106

株式会社日立製作所 研究開発グループ 材料イノベーションセンタ 松本 茂紀

☎029-353-3488

学会発表番号 3Pa021

<研究成果のポイント>

- 新しい省エネ・環境浄化材料として期待される機能性多孔質材料を開発
- 多孔質材料の空孔構造を分子レベルからデザインする計算科学技術を開発

<研究成果の概要>

エネルギー・環境問題の取組みとして、新しい省エネ・環境浄化材料の開発をめざし、仮想数値実験によりメソ孔と呼ばれる2~50ナノメートルの空孔を持つ軽くて熱に強い多孔質炭素材料を開発しました。本研究では、材料の原型となる高分子ゲルの空孔構造を分子レベルから計算科学で予測することで、今までにない新しい材料を短期間で発見しました。計算から構造を制御したゲルを焼成することで、炭素材料としては遮熱性に優れ、活性炭でも難しいウィルスや酵素など有害な有機物を除去できる材料として、様々な応用展開が期待できます。

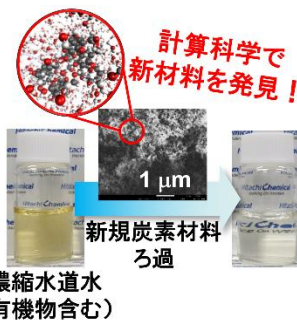


図1 バーチャルデザインした多孔質炭素材料

<研究成果解説文>

シミュレーションにより分子レベルからメソ孔構造をデザインした多孔質炭素材料を開発

Polymer Preprints, Japan 2018, 67

著者名：植田 敦子^{1*}、松本 茂紀^{2**}、乾 祐巳¹、
牧野 竜也¹、小林 譲¹、日高 敬浩¹

著者所属

1. 日立化成
2. 日立製作所

* E-mail: at-ueda@hitachi-chem.co.jp

**E-mail: shigenori.matsumoto.ru@hitachi.com

エネルギー・環境問題の取組みでは、熱マネージメントや汚染物質除去を目的に、スポンジ状の構造をもつ多孔質材料の応用が期待されている。本研究では、新しい省エネ・環境浄化材料として、メソ孔と呼ばれる2~50 nmの空孔を持つ低密度で高耐熱性の多孔質炭素材料を開発した。この材料は、レゾルシノールとホルムアルデヒド、および塩基触媒から作製される有機高分子ゲルを焼成することで得られる。高分子ゲルは、モノマーの重合反応から始まり、ゲル化により1次粒子を形成し、それらの凝集により空孔構造を形成する。空孔構造の変化要因を特定するため、各過程を予測する計算手法を組み合わせたマルチスケールシミュレーションを構築した。これにより、メチレン結合とエーテル結合の形成割合が空孔の大きさに影響することを見出し、水酸化カルシウムまたは水酸化マグネシウムを塩基触媒に用いることで、メソ孔を有する空孔構造が実現することを発見した。こ

の高分子ゲルを乾燥させたのち、焼成して得られる多孔質炭素材料は、構造由来の遮熱性だけでなく、活性炭でも難しいウィルスや酵素など有害な有機物を除去できる吸着性も有しており、様々な応用展開が期待できる。

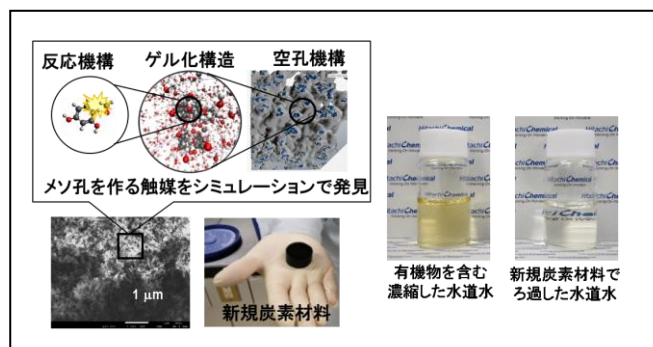


図1 マルチスケールシミュレーションにより見出した塩基触媒により高い吸着性を持つ多孔質炭素材料を開発