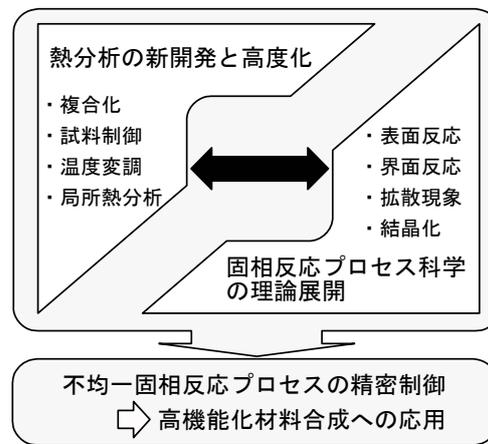


ディビジョン番号	1
ディビジョン名	物理化学

大項目	3. 凝縮系の物性と機能
中項目	3-3. 熱物性
小項目	3-3-9. 不均一反応論と熱分析

概要（200字以内）

固体の関与する化学反応は、種々の材料合成プロセスにおいて材料の高度機能化のためのキープロセスである。一方、熱分析は、固相反応プロセスのシミュレーションや反応条件の最適化の検討において極めて重要な役割を担っている。最先端分析技法を複合化した新たな熱分析法の開発と固相反応プロセス理論の構築を相補的に推進することにより、反応プロセス科学を基礎とした機能材料合成の発展に大きく貢献することが期待される。



現状と最前線

セラミックスをはじめとした種々の先端工業材料においては、材料物質の粒子径、形態、表面構造、組織などの精密な制御が要求され、これを実現することにより物理的および化学的機能の高度化や付加的機能の発現などの材料の高度機能化が追究されている。これらの先端工業材料は、工業製品の素材としてまた多様な工業プロセスの反応補助物質として健康や環境に配慮した工業プロセスや工業製品の実現に大きな役割を担う。固体の熱分解反応、固体間反応、固相-液相反応、固相-気相反応などの固体の関与する化学反応や非晶質の結晶化、固体の構造相転移などの固体内反応は、これらの先端工業材料の合成プロセスにおけるキープロセスとして位置づけられる。一方、種々の制御された温度変化のもとで試料の物性変化を追跡する熱分析の手法は、熱力学と動力学を基盤として固体の関与する化学反応プロセスを科学的に探究する有効な方法として、固体の関与する不均一反応プロセス科学の理論構築のための基礎的情報を提供するとともに、合成反応プロセスのシミュレーション、反応条件の最適化、材料物質の熱物性および寿命評価などの先端工業材料の反応プロセス設計と評価において極めて重要な役割を担っている。熱分析においては、最先端分析技法との複合化や新たな測定原理の導入などが図られ、固体の関与する不均一反応プロセス科学の理論的発展とこれを基礎とした高度機能材料合成の新展開に寄与している。

(1) 熱分析の複合化：熱重量測定，示差熱分析，示差走査熱量測定などの従来の熱分析法は，質量分析，粉末X線回折測定，フーリエ変換赤外分光などの測定技法との複合化により，固体の熱的挙動を多角的に捕捉する方法へと発展した。これらの複合熱分析の手法は，固相反応による発生気体の定量やその時間変化をもとにした反応機構の詳細や多形現象の解明に有効に利用されている。

(2) 試料制御熱分析：加熱による試料の物性変化速度を参照しながら加熱条件を随時変化させる試料制御熱分析の手法が実用化されている。この手法によると，反応中の自生反応条件を制御することが可能であり，固相反応の精密な速度論的解析を可能とするとともに，固体生成物の形態制御における自生反応条件の影響を定量的に解析するうえで有効である。

(3) 温度変調熱分析：熱分析における加熱条件に一定周波数の変調を加えた温度変調熱分析は，熱重量測定や示差走査熱量測定に応用されている。これまでの熱分析法では明らかにされなかった非晶質のガラス転移における可逆過程と非可逆過程の分離や平衡状態における固相反応挙動の解析に有効な方法として期待され，高分子材料の開発や二酸化炭素吸収分離材の開発に応用されている。

(4) 局所熱分析：微小領域や微小試料の熱分析を目的として，走査型プローブ顕微鏡の原理を応用した熱走査型熱顕微鏡が開発され，マイクロメートルおよびナノグラムの微小領域および微小試料の示差熱分析，熱機械分析，発生気体分析などが可能になった。この手法は，微小材料の熱物性評価における実用的側面のほかに，固相反応における表面反応や反応界面などの局所における反応挙動を解析する手法としても期待される。

#### [参考文献]

- ・ 日本熱測定学会 編，「熱量測定・熱分析ハンドブック」，丸善，1998.
- ・ 八田一郎 監修，「最新熱測定 ー基礎から応用までー」，アグネ技術センター，2003.
- ・ 小澤丈夫・吉田博久 編，「最新 熱分析」，講談社サイエンティフィック，2005.

#### 将来予測と方向性

- ・ 5年後までに解決・実現が望まれる課題

最新の熱分析の手法を駆使した固相反応の熱力学的および動力学的解析をもとにした，固相反応プロセス科学の理論展開と材料合成プロセスへの応用

- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題

固相反応プロセス科学を基盤とした，高度な固相反応プロセス制御を可能とした熱分析法の開発と新規反応場としての高度機能材料合成プロセスへの応用

#### キーワード

熱分析、固相反応、反応機構、プロセス制御、形態制御

(執筆者： 古賀 信吉 )