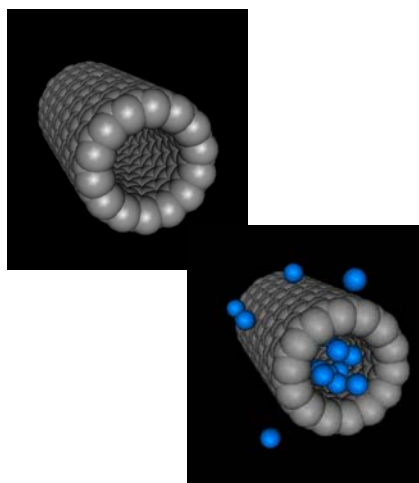


ディビジョン番号	15
ディビジョン名	コロイド・界面化学

大項目	5. 固体表面・界面
中項目	5-1. 表面構造と物性・機能
小項目	5-1-9. ナノ空間での科学

概要（200字以内）

ナノ空間内における分子物性は、固体表面が形成する強調化されたポテンシャル場が支配する。ミクロポアフィリングや毛管凝縮といった分子物理吸着の本質に迫る問題も明らかになりつつある。一方、メソ孔への分子吸着機構に対する研究も進んでおり、これまで用いられてきた解析法の破綻に繋がる新しい結果も報告されている。更に、近年ではナノ空間中における溶液、特にイオン溶液も研究の対象となっている。



現状と最前線

「ナノ空間」という言葉に厳密な定義はないが、概ね細孔径が5 nm以下の固体空間を指す場合が多い。即ち、IUPACで定義しているミクロ孔とメソ孔の一部に対応する。ナノ空間内における分子物性は、固体表面（この場合細孔壁に相当）が形成する強調化されたポテンシャル場が支配する。ミクロポアフィリングや毛管凝縮といった分子物理吸着の本質に迫る問題も少しずつ明らかとなっている。例えば、疎水性表面で囲まれたミクロ孔に対する水分子吸着機構に関する研究は、吸着量測定、精密構造解析、吸着熱測定、及び分子シミュレーションを駆使した統合的な研究が展開され、その過程に水分子クラスターが存在することが明らかになりつつある。活性炭に対する水吸着機構は既存の理論体系では説明がつかなかったが、多角的な研究により新たに解明された事象の1つである。また、メソ孔への分子吸着機構に対する研究も世界的に進んでおり、古くから採用されている解析法の破綻に繋がる新しい結果も多く報告されている。例えば、メソ孔の解析の際に広く用いられているBarrett-Joyner-Halenda (BJH)法による細孔径分布解析は、その大きさを過小評価する傾向にあり、分子シミュレーションや密度汎関数理論による計算値を用いることで正確な値を求めることができる。ただし、理論計算分野の進歩が著しい現在においても全てのサンプルを包括的に解析できる理論はなく、極限られた表面組成を有する試料の場合にのみ用いることができる。我々は急速に発展する理論分野での進捗状況にも注視する必要があり、実験事実との比較・検討、並びに、理論計算より求まった

結果を用いた解析手法の開発も継続する必要がある。

一方、Fox ら¹⁾が唱えるように、ナノサイズの溶液を検証し、それらの秘めた特性を明らかにすることも重要であり、近年ではナノ空間中における溶液、特にイオン溶液に注目が集まっている。例えば、イオン溶液の最小サイズはどの程度か、バルクとは異なる物性或いは組成を有するイオン溶液を作ることとは可能か、などの視点から研究が進みつつある。これら、ナノ制約下におけるイオン溶液を「ナノ溶液」と総称する場合もある。ナノ溶液に関する研究は、電気二重層キャパシターをはじめとする各種電極材料やエネルギー貯蔵材料の開発には不可欠なものであり、そこから得られる知見から材料開発へ繋がる可能性も秘めている。

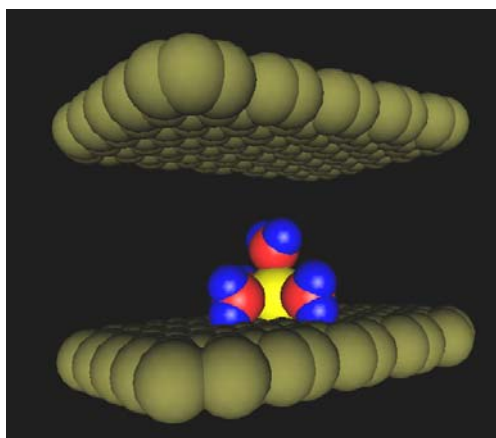


図 「ナノ溶液」のイメージ図

1)B. S. Fox et al., *Chem. Eur. J.*, **8**, 5534 (2002).

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
全ての材料に共通して適用できる高精度メソ孔径分布解析法の確立
ナノ溶液に関する構造・物性解析
- ・ 10年後までに解決・実現が望まれる課題
分子吸着量測定による高精度ミクロ孔径分布解析の確立

キーワード

ミクロ孔、メソ孔、ミクロポアフィリング、毛管凝縮、ナノ溶液

(執筆者：大久保貴広)