

様 式 C - 7 - 1

平成 27 年度科学研究費助成事業（科学研究費補助金）実績報告書（研究実績報告書）

1. 機関番号

1	4	6	0	3
---	---	---	---	---

 2. 研究機関名 奈良先端科学技術大学院大学
3. 研究種目名 新学術領域研究（研究領域提案型） 4. 研究期間 平成 27 年度～平成 28 年度
5. 課題番号

1	5	H	0	1	0	0	0
---	---	---	---	---	---	---	---
6. 研究課題名 非平衡状態下での分子振動と 電子輸送との結合による巨大ゼーベック効果の理解と制御
7. 研究代表者

研究者番号	研究代表者名	所属部局名	職名
8 0 3 3 2 5 6 8	ナカムラ マサカズ 中村 雅一	物質創成科学研究科	教授

8. 研究分担者

研究者番号	研究分担者名	所属研究機関名・部局名	職名

9. 研究実績の概要

代表者は、高純度有機低分子材料において従来理論の予測上限値より100倍程度大きいゼーベック係数が現れることを見出した。この巨大ゼーベック効果には熱による分子振動が関与しており、キャリア流と非平衡状態下で分子振動が運ぶ熱流との間に、電子系特有のカップリングが起こることが原因であると推測されている。そこで、軌道形状などを系統的に変化させた様々な有機材料について熱電物性および熱物性の精密計測を行い、分子の構造と巨大ゼーベック効果との間の関係性を明らかにするとともに、分子動力学計算と物性理論をリンクさせることによって、現象の理解を進めることを目的とし、研究を進めてきた。

H27年度は、共役系の概形（特に縦横比）や側鎖の有無が異なる様々な分子について、熱電特性および構造の温度依存性を調べ、ほとんどの共役低分子固体において出現温度こそ異なるものの巨大なゼーベック係数が出現すること、ならびに、キャリア輸送方向の隣接 骨格間距離および温度の組み合わせに最適値があるらしいことを見出した。さらに、ポーロン伝導の特徴を十分に取り入れてキャリア輸送を解析することで、従来理論を超える巨大ゼーベック係数が物性論的に説明し得ることを見出した。

10. キーワード

- | | | | |
|------------|------------|---------------|----------|
| (1) 熱電変換 | (2) 低分子集合体 | (3) 巨大ゼーベック効果 | (4) 電子輸送 |
| (5) 震電相互作用 | (6) | (7) | (8) |

11. 現在までの進捗状況

(区分)(2) おおむね順調に進展している。

(理由)

実験・理論両面において、巨大ゼーベック効果のメカニズム理解に着実に近づいている。

12. 今後の研究の推進方策

(今後の推進方策)

昨年度、一部の材料において確認されたゼーベック係数の隣接 骨格間距離および温度依存性をより明確にするために、様々な 共役低分子固体の結晶構造 / 格子定数の温度依存性を温度可変二次元微小角入射X線回折法によって調べる。それと、ゼーベック係数の温度依存性から、ゼーベック係数と最も良い相関を示す構造パラメータを抽出し、さらに温度もパラメータとしてゼーベック係数の二次元マッピングを行う。

物性論的に巨大なゼーベック係数とその温度依存性を正しく説明するためには、材料に依存する複数の物性パラメータとその温度依存性が必要である。そのうちの一部は実験的に求めることが可能であることから、物性パラメータの温度依存性も取り入れた理論計算を試み、巨大ゼーベック効果に特有の大きな温度依存性を説明することを試みる。また、一部の物性パラメータは実験的に求めることが困難であることから、A03班杉本氏の協力を得て実験で用いた様々な分子における結晶状態での電子輸送パラメータを電子およびフォノンバンドの計算によって求める。さらに、分子固体に特徴的なキャリア輸送に伴う大きな再配向エネルギーも量子化学計算によって求め、材料ごとにゼーベック係数が異なることの定量的理解につなげる。

13. 研究発表(平成27年度の研究成果)

(雑誌論文) 計(2)件/うち査読付論文 計(1)件/うち国際共著論文 計(0)件/うちオープンアクセス 計(0)件

著者名		論文標題				
H. Kojima, R. Abe, M. Ito, Y. Tomatsu, F. Fujiwara, R. Matsubara, N. Yoshimoto, M. Nakamura		Giant Seebeck effect in pure fullerene thin films				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
Appl. Phys. Express	有	8	2015	121301	-	
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)						
10.7567/APEX.8.121301						
オープンアクセス						
オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難						

著者名		論文標題				
中村雅一, 伊藤光洋, 阿部 竜, 小島広孝		フレキシブル環境発電デバイスを目指した有機系熱電材料の探索				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
エネルギーデバイス	無	2	2015	70 78	-	
掲載論文のDOI(デジタルオブジェクト識別子)						
なし						
オープンアクセス						
オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難						

(学会発表) 計(20)件/うち招待講演 計(9)件/うち国際学会 計(6)件

発表者名		発表標題		
中村雅一		IoT 時代を支える環境発電技術としての有機熱電変換素子:材料・素子構造に対する要求と研究の現状		
学会等名	発表年月日	発表場所		
近畿化学協会 エレクトロニクス部会 平成27年度第1回研究会(招待講演)	2015年05月19日	大阪科学技術センター(大阪市)		

発表者名	発表標題	
中村雅一、阿部 竜、小島広孝	共役系分子性固体における巨大ゼーベック効果の普遍性と特異性	
学会等名	発表年月日	発表場所
「造形科学」第2回公開シンポジウム	2015年06月08日 ~ 2015年06月09日	大阪市中央公会堂(大阪市)

発表者名	発表標題	
R. Abe, K. Takahashi, M. Ito, F. Fujiwara, H. Kojima, R. Matsubara, D. Kuzuhara, H. Yamada, T. Yamamoto, H. Yakushiji, M. Ikeda, and M. Nakamura	Irregularly large Seebeck coefficients and their temperature dependence observed in pure organic semiconducting materials"	
学会等名	発表年月日	発表場所
Eighth International Conference on Molecular Electronics and Bioelectronics (M&BE8)(国際学会)	2015年06月22日 ~ 2015年06月24日	タワーホール船堀(東京)

発表者名	発表標題	
H. Kojima, R. Abe, F. Fujiwara, K. Takahashi, M. Ito, R. Matsubara, D. Kuzuhara, H. Yamada, T. Yamamoto, H. Yakushiji, M. Ikeda, and M. Nakamura	Universality of Giant Seebeck effect in organic semiconductors	
学会等名	発表年月日	発表場所
34th Annual International Conference on Thermoelectrics (ITC2015)(国際学会)	2015年06月28日 ~ 2015年07月02日	Dresden (Germany)

発表者名	発表標題	
中村雅一	エネルギーハーベスティングのための有機系熱電材料の探索:電荷および熱輸送の新たな制御法を探して	
学会等名	発表年月日	発表場所
M&BE新分野開拓研究会2015(招待講演)	2015年09月04日	早稲田大学(東京)

発表者名	発表標題	
藤原史弥, 阿部 竜, 伊藤光洋, 高橋功太郎, 葛原大軌, 山田容子, 小栗 貴文, 菊池 護, 吉本 則之, 渡辺 剛, 小金澤 智之, 小島 広孝, 中村 雅一	巨大ゼーベック効果を発現する有機低分子材料の探索: 分子配向の効果	
学会等名	発表年月日	発表場所
第76回応用物理学会秋季学術講演会	2015年09月13日 ~ 2015年09月16日	名古屋国際会議場(名古屋市)

発表者名	発表標題	
中村雅一, 伊藤光洋, 阿部 竜, 小島広孝, 山下一郎, 山田容子, 池田征明	分子の機能を活かした「やわらかい」熱電材料の探索	
学会等名	発表年月日	発表場所
第76回応用物理学会秋季学術講演会(招待講演)	2015年09月13日 ~ 2015年09月16日	名古屋国際会議場(名古屋市)

発表者名	発表標題	
阿部 竜, 藤原史弥, 伊藤光洋, 小島広孝, 高橋功太郎, 葛原大軌, 山田容子, 山本達也, 薬師寺秀典, 池田征明, 小栗貴文, 菊池護, 渡辺剛, 小金澤智之, 吉本則之, 中村雅一	温度変調に伴うキャリア伝導機構化を利用した新奇有熱電材料の探索(): GIXDによる結晶構造の解析	
学会等名	発表年月日	発表場所
第76回応用物理学会秋季学術講演会	2015年09月13日 ~ 2015年09月16日	名古屋国際会議場(名古屋市)

発表者名	発表標題	
中村雅一, 伊藤光洋, 阿部 竜, 小島広孝, 山下一郎	フレキシブル熱電変換デバイスのための有機系熱電材料探索と材料設計指針	
学会等名	発表年月日	発表場所
第64回高分子討論会(招待講演)	2015年09月15日 ~ 2015年09月17日	東北大学(仙台市)

発表者名	発表標題	
M. Nakamura	Giant Seebeck Effect in Organic Semiconductor Thin Films: Another Role of Gap States?	
学会等名	発表年月日	発表場所
Pre-ESPML symposium in honor of Professor Ueno (招待講演) (国際学会)	2015年10月13日	University of Arizona (USA)

発表者名	発表標題	
中川真理雄, 藤原史弥, 阿部 竜, 小島広孝, 高橋功太郎, 葛原大軌, 小栗貴文, 菊池 護, 渡辺 剛, 小金澤智之, 山田容子, 吉本則之, 中村雅一	有機平板状低分子化合物における巨大ゼーベック効果	
学会等名	発表年月日	発表場所
第12回薄膜材料デバイス研究会	2015年10月30日 ~ 2015年10月31日	龍谷大学響都ホール(京都市)

発表者名	発表標題	
中村雅一	エネルギーハーベスティングのための有機系フレキシブル熱電変換材料/デバイス	
学会等名	発表年月日	発表場所
NEDIA 第2回 電子デバイスフォーラム京都(招待講演)	2015年11月13日	京都リサーチパーク(京都市)

発表者名	発表標題	
中村雅一	フレキシブル熱電変換素子のための有機系材料による熱およびキャリア輸送制御	
学会等名	発表年月日	発表場所
応用電子物性分科会研究例会「フォノンエンジニアリングの現状と展望」(招待講演)	2015年11月25日	金沢工業大学大学院虎ノ門キャンパス(東京)

発表者名	発表標題	
M. Nakagawa, R. Abe, F. Fujiwara, H. Kojima, K. Takahashi, D. Kuzuhara, T. Oguri, M. Kikuchi, T. Watanabe, T. Koganezawa, H. Yamada, N. Yoshimoto, and M. Nakamura	2D-GIXD Analysis of Small Organic Materials Exhibiting the Giant Seebeck Effect	
学会等名	発表年月日	発表場所
International Conference on Organic and Hybrid Thermoelectrics (ICOT2016) (国際学会)	2016年01月18日 ~ 2016年01月20日	Kyoto-TERRSA Conference Center (Kyoto)

発表者名	発表標題	
H Kojima, R. Abe, F. Fujiwara, M. Nakagawa, M. Ito, K. Takahashi, T. Yamamoto, H. Yakushiji, M. Ikeda, D. Kuzuhara, H. Yamada, and M. Nakamura	Universality of Giant Seebeck Effect in Organic Semiconductors: Impact of the Activation Energy of Electrical Conductivity	
学会等名	発表年月日	発表場所
International Conference on Organic and Hybrid Thermoelectrics (ICOT2016) (国際学会)	2016年01月18日 ~ 2016年01月20日	Kyoto-TERRSA Conference Center (Kyoto)

発表者名	発表標題	
M. Nakamura, M. Ito, R. Abe, H. Kojima, T. J. Inagaki, H. Yamada, and I. Yamashita	A Broad Survey of Organic-Based Thermoelectric Materials: Discussion on the Materials Strategy for Flexible Thermoelectrics	
学会等名	発表年月日	発表場所
International Conference on Organic and Hybrid Thermoelectrics (ICOT2016) (国際学会)	2016年01月18日 ~ 2016年01月20日	Kyoto-TERRSA Conference Center (Kyoto)

発表者名	発表標題	
中村雅一	分子の機能を活かした「やわらかい」熱電材料の探索	
学会等名	発表年月日	発表場所
近畿化学協会機能性色素・エレクトロニクス部会合同公開講演会(招待講演)	2016年03月07日	千里ライフサイエンスセンター(吹田市)

発表者名	発表標題	
阿部竜, 藤原史弥, 中川真理雄, 小島広孝, 中村雅一	有機低分子熱電材料における巨大なゼーベック効果と諸物性値の温度依存性	
学会等名	発表年月日	発表場所
日本熱電学会計算&データ研究会	2016年03月11日	東京大学本郷キャンパス(東京)

発表者名	発表標題	
中村雅一	有機分子の機能を利用した新奇フレキシブル熱電材料の探索	
学会等名	発表年月日	発表場所
SPring-8 次世代先端デバイス研究会(第3回)(招待講演)	2016年03月18日 ~ 2016年03月18日	日本化学会化学会館(東京)

発表者名	発表標題	
小島広孝, 阿部竜, 藤原史弥, 中川真理雄, 中村雅一	巨大ゼーベック係数を示す有機低分子における振電相互作用の評価	
学会等名	発表年月日	発表場所
第63回応用物理学会春季学術講演会	2016年03月19日 ~ 2016年03月22日	東工大大岡山キャンパス(東京)

(図書) 計(0)件

著者名	出版社		
書名	発行年	総ページ数	

14. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

(出願) 計(0)件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	出願年月日	国内・外国の別

(取得) 計(0)件

産業財産権の名称	発明者	権利者	産業財産権の種類、番号	取得年月日	国内・外国の別
				出願年月日	

15. 科研費を使用して開催した国際研究集会

(国際研究集会) 計(0)件

国際研究集会名	開催年月日	開催場所

16. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

(1) 国際共同研究: -

17. 備考

<p>有機固体素子科学研究室 研究の具体例 http://mswebs.naist.jp/LABs/greendevic/research/example.html ドキ ワク先端科学 ~ 読売新聞寄稿連載「ドキ ワク先端科学」から ~ http://www.naist.jp/activity/c01_14_34_j.html</p>
--