

様式 F-7-2

科学研究費助成事業（学術研究助成基金助成金）実績報告書（研究実績報告書）

所属研究機関名称		奈良先端科学技術大学院大学	機関番号	14603
研究代表者	部局	物質創成科学研究科		
	職	助教		
	氏名	小島 広孝		

1. 研究種目名 若手研究(B) 2. 課題番号 15K21163

3. 研究課題名 巨大ゼーベック効果を示す熱電変換材料の分子形状に着目した計算化学的考察

4. 補助事業期間 平成27年度～平成29年度

5. 研究実績の概要

本研究では、近年急速に注目されている有機熱電変換材料に関して、以前より報告している巨大なゼーベック係数の発現機構の解明を指向した計算化学的研究を実施し、実験的研究から得た結果との突き合わせを行った。実験的研究では、分子形状の異なる種々の分子についてゼーベック測定を行い、平板状のベンゾポルフィリンや、ペンタセンでは10～100 mV/K前後の巨大ゼーベック係数が観測された。一方、基板に対して平行配向が優勢を示すペリレンビスイミド類縁体では平凡な値に留まった。そこで、基板処理により分子配向を垂直配向に制御したところ、同温度域での巨大ゼーベック係数は消失し、その発現温度が高温側にシフトする様子が見られた。また、湾曲した共役系をもつ球状分子のフラレンと、その部分構造を有するスマネンに関してゼーベック測定を行ったところ、いずれも10～100 mV/K前後の巨大ゼーベック係数が観測された。分子動力学シミュレーションを用いて両者の格子熱伝導率を算出したところ、いずれも導電方向に比較的低い熱伝導率が得られた。球状のフラレンでは、固体中で並進および回転運動しており、熱の散逸により低熱伝導率となったと考えられる。スマネンは、結晶構造において大きな異方性を示し、通常は高熱伝導となる分子スタック方向にむしろ熱伝導率が低下した。これにより熱流のホッピング速度が電荷のホッピング速度のオーダーと概ね一致し、時間的・空間的な熱流と電流とのカップリングにより、巨大ゼーベック効果が誘起されている可能性が示唆された。また、荷電時には分子内部の構造が変化し、共役系にも比較的大きな変調を与える可能性がDFT計算を用いて行った振電結合の解析によって示唆されている。これらの状況証拠を複合的に鑑み、温度差によって電気的性質が変化し、これが構造変調にも波及することで、複雑な物理現象が発現していると予測した。

6. キーワード

ゼーベック効果 熱電変換 廃熱利用 再生可能エネルギー 分子動力学計算 格子熱伝導率

7. 研究発表

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

1. 著者名 H. Kojima, M. Nakagawa, R. Abe, F. Fujiwara, Y. Yakiyama, H. Sakurai, M. Nakamura	4. 巻 47
2. 論文標題 Thermoelectric and Thermal Transport Properties in Sumanene Crystals	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Chemistry Letters	6. 最初と最後の頁 524-527
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1246/cl.171210	査読の有無 有
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	国際共著 -

2 版

1. 著者名 H. Kojima, R. Abe, F. Fujiwara, M. Nakagawa, K. Takahashi, D. Kuzuhara, H. Yamada, Y. Yakiyama, H. Sakurai, T. Yamamoto, H. Yakushiji, M. Ikeda, M. Nakamura	4. 巻 2
2. 論文標題 Universality of Giant Seebeck Effect in Organic Small Molecules	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Materials Chemistry Frontiers	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/C7QM00596B	査読の有無 有
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	国際共著 -

〔学会発表〕 計7件 (うち招待講演 3件 / うち国際学会 3件)

1. 発表者名 H. Kojima, R. Abe, T. Takeuchi, S. Inoue, S. Izawa, M. Kikuchi, M. Hiramoto, Y. Yakiyama, H. Sakurai, M. Nakamura
2. 発表標題 Recent Progress on Understanding the Origin of Giant Seebeck Effect in Organic Small Molecules
3. 学会等名 International Conference on Organic and Hybrid Thermoelectrics (ICOT2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 H. Kojima, R. Abe, M. Nakagawa, T. Takeuchi, M. Ito, K. Takahashi, T. Yamamoto, H. Yakushiji, M. Ikeda, M. Kikuchi, D. Kuzuhara, H. Yamada, N. Yoshimoto, M. Nakamura
2. 発表標題 Giant Seebeck Effect in Organic Semiconductors: A DFT Study of the Vibronic Coupling
3. 学会等名 International Union of Materials Research Societies-The 15th International Conference on Advanced Materials (IUMRS-ICAM) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 H. Kojima, R. Abe, and M. Nakamura
2. 発表標題 Specific thermoelectric effect in organic materials and the computational elucidation
3. 学会等名 International Symposium for Advanced Materials Research (ISAMR) 2017 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 小島広孝, 阿部竜, 井上智史, 中村雅一
2. 発表標題 特異な熱電現象の解明を指向した分子動力学計算による熱物性の評価
3. 学会等名 第31回分子シミュレーション討論会
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 小島広孝
2. 発表標題 熱を電気に変換する有機半導体材料とその特異な性質
3. 学会等名 第3回SPERC研究交流発表会(招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 小島広孝, 阿部竜, 中村雅一
2. 発表標題 有機材料における特異な熱電現象と計算化学的解析
3. 学会等名 第66回高分子討論会(招待講演)
4. 発表年 2017年

1. 発表者名 小島広孝
2. 発表標題 特異な熱電現象の解明を指向した電子と格子の化学計算
3. 学会等名 奈良先端科学技術大学院大学異文化融合ワークショップ「電子格子相互作用：基礎物理からデバイス応用まで」
4. 発表年 2017年

2 版

〔図書〕 計1件

1. 著者名 中村雅一（監修）、戸嶋直樹、石田敬雄、小島広孝、真庭豊、河合壯、宮崎康次、末森浩司、小矢野幹夫、伊藤光洋、関本祐紀ほか	4. 発行年 2017年
2. 出版社 シーエムシー出版	5. 総ページ数 254
3. 書名 フレキシブル熱電変換材料の開発と応用	

8. 研究成果による産業財産権の出願・取得状況

計0件（うち出願0件 / うち取得0件）

9. 科研費を使用して開催した国際研究集会

計0件

10. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

-

11. 備考

-