

様 式 C-7-1

平成26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

研究活動スタート支援

4. 研究期間

平成25年度～平成26年度

5. 課題番号

2

5

8

8

8

0

1

6

6. 研究課題名

フラーレン類縁体の特異的熱電効果に関する計算化学的考察

7. 研究代表者

研究者番号	研究代表者名	所属部局名	職名
70713634	コジマ ヒロタカ 小島 広孝	物質創成科学研究科	特任助教

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

近年精力的に行われている熱電変換材料研究において、実用化を指向した材料開発を行うことが早急に求められる。これまでに行われた物質探索から見出された特異的な熱電特性を示すフラーレンについて、計算化学的手法を用いた原因解明と次世代材料設計へのフィードバックが本研究の主目的である。

平成26年度は、前年度に実験で得られたゼーベック効果の温度依存性から、構造的な変化が期待されたため、SPring-8でのGIXD測定を行ったが、当該する温度領域において明確な構造変化は観測できなかった。

そこで前年度に導入したGPGPU搭載Linuxマシンを用いて分子動力学計算パッケージGromacsによる計算を行い、分子シミュレーションによって分子運動の温度変化を考察した。結晶構造を基に作成した単結晶構造と、分子をランダムに包含した微結晶構造をそれぞれモデリングし、双方の挙動を比較した。得られた安定化構造に対して密度、定圧比熱、運動エネルギー、回転運動の自己相関関数などの物性値を概算した。各種解析により、微結晶構造では多くの空隙が生じていることがわかったが、より高密度の単結晶構造において回転運動の自己相関関数の素早い減衰が観測された。減衰の時定数をフィッティングにより求めたところ、微結晶構造では結晶ドメイン間に起因すると予測される大きな時定数が確認できた。これは空隙に対して分子が頻繁に重心移動していることを示しており、分子同士の衝突によって回転運動が散乱していることが示唆された。さらにグリーン・久保公式を基にした熱伝導率の算出を試み、結晶構造と熱伝導率との関連性を示す傾向が散見された。これにより、当初期待されたフラーレンの回転運動だけでなく、並進運動が熱物性に寄与している可能性が示された。

10. キーワード

(1) 分子動力学

(2) フラレーン

(3) ゼーベック効果

(4) 熱電変換

(5) 廃熱利用

(6) 再生可能エネルギー

(7)

(8)

11. 現在までの達成度

(区分)

(理由)

26年度が最終年度であるため、記入しない。

12. 今後の研究の推進方策

(今後の推進方策)

26年度が最終年度であるため、記入しない。

13.研究発表(平成26年度の研究成果)

〔雑誌論文〕 計(2)件 うち査読付論文 計(1)件

著 者 名		論 文 標 題			
小島広孝, 阿部竜, 藤原史弥, 伊藤光洋, 橋爪拓也, 松原亮介, 中村雅一		分子動力学法による熱電変換材料の熱物性評価			
雑 誌 名		査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁
信学技報		無	114	2 0 1 4	51-56
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)					
なし					

著 者 名		論 文 標 題			
M. Ito, N. Okamoto, R. Abe, H. Kojima, R. Matsubara, I. Yamashita, M. Nakamura		Enhancement of Thermoelectric Properties of Carbon Nanotube Composites by Inserting Biomolecules at Nanotube Junctions			
雑 誌 名		査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁
Appl. Phys. Express		有	7	2 0 1 4	65102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子)					
10.7567/APEX.7.065102					

〔学会発表〕 計(9)件 うち招待講演 計(0)件

発 表 者 名		発 表 標 題			
小島広孝, 阿部竜, 藤原史弥, 伊藤光洋, 橋爪拓也, 松原亮介, 中村雅一		巨大ゼーベック係数を示すフラーレンの回転運動と熱物性との相関性			
学 会 等 名		発表年月日	発 表 場 所		
第62回応用物理学会春季学術講演会		2015年03月11日～2015年03月14日	東海大学湘南キャンパス (神奈川県平塚市)		

発 表 者 名	発 表 標 題	
阿部竜, 藤原史弥, 高橋功太郎, 小島広孝, 松原亮介, 葛原大軌, 山田容子, 山本達也, 葉師寺秀典, 池田征明, 中村雅一	温度変調に伴うキャリア伝導機構変化を利用した新奇有機熱電材料の探索(III):巨大ゼーベック効果の特異性と普遍性	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
第62回応用物理学会春季学術講演会	2015年03月11日～2015年03月14日	東海大学湘南キャンパス (神奈川県平塚市)

発 表 者 名	発 表 標 題	
藤原史弥, 阿部竜, 伊藤光洋, 橋爪拓也, 小島広孝, 松原亮介, 中村雅一	巨大ゼーベック効果を発現する有機低分子熱電材料の探索:ヘリンボーン型パッキング構造を持つペンタセンの熱電効果	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
応用物理学会関西支部平成26年度第3回講演会	2015年02月27日	奈良先端科学技術大学院大学 (奈良県生駒市)

発 表 者 名	発 表 標 題	
小島広孝, 阿部竜, 藤原史弥, 伊藤光洋, 橋爪拓也, 松原亮介, 中村雅一	分子動力学計算による熱電変換材料の熱物性評価	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
第8回分子科学討論会	2014年09月21日～2014年09月24日	広島大学東広島キャンパス (広島県東広島市)

発 表 者 名	発 表 標 題	
阿部 竜, 伊藤光洋, 高橋功太郎, 小島広孝, 松原亮介, 葛原大軌, 山田容子, 中村雅一	温度変調に伴うキャリア伝導機構変化を利用した新奇有機熱電材料の探索(II):巨大ゼーベック効果は定常現象か?	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
第75回応用物理学会秋季学術講演会	2014年09月17日～2014年09月20日	北海道大学札幌キャンパス (北海道札幌市)

発 表 者 名	発 表 標 題	
H. Kojima, R. Abe, F. Fujiwara, M. Ito, T. Hashizume, T. Oguri, M. Kikuchi, T. Watanabe, T. Koganezawa, R. Matsubara, N. Yoshimoto, M. Nakamura	Irregular Thermoelectric Behavior of C60 and Computational Elucidation of Its Origin	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
2014 MRS Fall Meeting	2014年11月29日～2014年12月04日	Boston (USA)

発 表 者 名	発 表 標 題	
R. Abe, M. Ito, K. Takahashi, H. Kojima, R. Matsubara, D. Kuzuhara, H. Yamada, T. Yamamoto, H. Yakushiji, M. Ikeda, M. Nakamura	Novel Organic Thermoelectric Materials Utilizing Temperature-Induced Alternation of Structure and Carrier Transport	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
2014 MRS Fall Meeting	2014年11月29日～2014年12月04日	Boston (USA)

発 表 者 名	発 表 標 題	
R. Abe, K. Takahashi, M. Ito, H. Kojima, D. Kuzuhara, H. Yamada, R. Matsubara, and M. Nakamura	Experimental Evidences of Giant Seebeck Coefficients over 0.1 V/K in Organic Semiconductors	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
KJF International Conference on Organic Materials for Electronics and Photonics (KJF-ICOMEF) 2014	2014年09月21日～2014年09月24日	つくば国際会議場 (茨城県つくば市)

発 表 者 名	発 表 標 題	
R. Abe, M. Ito, K. Takahashi, H. Kojima, R. Matsubara, D. Kuzuhara, H. Yamada, M. Nakamura	Novel Design of Organic Thermoelectric Materials Utilizing Controlled Structural Transition: Benzoporphyrin Derivatives	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
The 8th International Symposium on Organic Molecular Electronics (ISOME 2014)	2014年05月15日～2014年05月16日	東京農工大学小金井キャンパス (東京都小金井市)

〔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.備考

--