

様式 C-7-1

平成28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

代表者らが高純度有機低分子材料において見出した巨大ゼーベック効果について、特にキャリア流と分子振動が運ぶ熱流との間の相互作用に着目し、その発現メカニズムを理解することを目的として研究を行った。

H28年度は、巨大ゼーベック効果が発見された分子であるC60フラレンの部分構造と考えられるスマネンについて熱電特性を評価し、分子の対称性とそれに伴う伝導の対称性の巨大ゼーベック効果への影響を調べた。その結果、電気伝導が極めて一次元的であるスマネンにおいても、最大30 mV/Kの巨大なゼーベック係数が観測された。H27年度の研究において、電気伝導が二次元的な分子についても巨大ゼーベック効果が見られることが確認されていることから、巨大ゼーベック効果は電気伝導の次元性とは無関係であることがほぼ確実となった。

また、両者の格子熱伝導率を分子動力学計算によって計算したところ、フラレンでは結晶構造/アモルファス構造ともに比較的小さな熱伝導率を示すのに対して、スマネンでは結晶構造とアモルファス構造の熱伝導率差が大きく、特に結晶構造では電気伝導が起りやすい分子スタック方向において熱伝導率が小さいことが判明した。巨大ゼーベック効果は結晶性の高い薄膜の分子スタック方向への電気伝導において現れており、格子熱伝導率が小さいことが巨大ゼーベック効果発現に有利に働く可能性を示唆していると考えられる。

平行して、より多くの材料を迅速に評価するための粉末試料用熱電特性評価装置の開発を行った。その結果、粉末を加熱圧縮してペレット化し、その状態のままゼーベック係数・電気伝導率・熱伝導率を同一試料・同一方向で測定することが可能となった。今後、合成化学者との共同研究をより増やして分子構造と巨大ゼーベック効果との相関をさらに解明してゆく。

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)
(理由) 28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) 28年度が最終年度であるため、記入しない。

13. 研究発表 (平成 28 年度の研究成果)

〔雑誌論文〕 計(1)件/うち査読付論文 計(0)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				
中村雅一, 小島広孝		"やわらかい" 熱電材料を追い求めて 有機材料が熱電変換にブレークスルーをもたらす!?				
雑誌名	査読の有無	巻	発行年	最初と最後の頁	国際共著	
化学	無	8	2016	31-35	-	
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(17)件/うち招待講演 計(5)件/うち国際学会 計(7)件

発表者名		発表標題	
M. Nakamura		Organic-based thermoelectric devices and materials for energy harvesting	
学会等名	発表年月日	発表場所	
2016 International Conference on Solid State Devices and Materials (招待講演) (国際学会)	2016年09月26日 ~ 2016年09月29日	Tsukuba International Congress Center (茨城県つくば市)	

発表者名		発表標題	
M. Nakamura, H. Kojima, T.J. Inagaki		Giant Seebeck Effect in Organic Semiconductors - Toward Revolutionary Simple Thermoelectric Generators -	
学会等名	発表年月日	発表場所	
"12th International Conference on Nano-Molecular Electronics (ICNME2016)" (招待講演) (国際学会)	2016年12月14日 ~ 2016年12月16日	Kobe International Conference Center (兵庫県神戸市)	

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, M. Kikuchi, D. Kuzuhara, H. Yamada, N. Yoshimoto, M. Nakamura	Giant Seebeck effect in organic semiconductors	
学 会 等 名	発表年月日	発表場 所
European Advanced Materials Congress 2016 (国際学会)	2016年08月23日 ~ 2016年08月25日	Stockholm, Sweden

発表者名	発表標 題	
H. Kojima, R. Abe, F. Fujiwara, K. Takahashi, M. Nakagawa, D. Kuzuhara, H. Yamada, M. Nakamura	Impact of Intra-Molecular Vibrations on the Giant Seebeck Effect in Organic Semiconductors: DFT Study of Vibronic Coupling	
学 会 等 名	発表年月日	発表場 所
KJF International Conference on Organic Materials for Electronics and Photonics 2016 (国際学会)	2016年09月04日 ~ 2016年09月07日	ACROS Fukuoka (福岡県福岡市)

発表者名	発表標 題	
M. Nakamura, R. Abe, F. Fujiwara, M. Nakagawa, H. Kojima, T.J. Inagaki	Giant Seebeck Effect in Pure Organic Semiconductors - A Singular Phenomenon in Charge Transport by Small Polarons -	
学 会 等 名	発表年月日	発表場 所
12th Japan-China Joint Symposium on Conduction and Photoconduction in Organic Solids and Related Phenomena (国際学会)	2016年10月17日 ~ 2016年10月20日	早稲田大学西早稲田キャンパス (東京都新宿区)

発表者名	発表標 題	
R. Abe, F. Fujiwara, M. Nakagawa, M. Ito, H. Kojima, M. Kikuchi, T. Watanabe, T. Koganezawa, N. Yoshimoto, and M. Nakamura	Giant Seebeck Effect Over 0.1 V/K in Organic Molecular Solids: Correlation between Seebeck Coefficient and Intermolecular Distance	
学 会 等 名	発表年月日	発表場 所
35th International Conference on Thermoelectrics (国際学会)	2016年05月29日 ~ 2016年06月02日	Wanda Reign Hotel, Wuhan, China

発表者名	発表標 題	
R. Abe, M. Nakagawa, M. Ito, H. Kojima, and M. Nakamura	Development of Easy Thermoelectric Measurement System for Pelletized Organic Materials	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
The 3rd International Symposium on -System Figuration (国際学会)	2017年01月27日 ~ 2017年01月28日	名古屋大学東山キャンパス (愛知県名古屋市)

発表者名	発表標 題	
中村雅一	熱電材料設計の基礎とフレキシブル熱電変換素子	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
第63回CVD研究会「第27回夏季セミナー」(招待講演)	2016年08月18日 ~ 2016年08月19日	ひょうご共済会館 (兵庫県神戸市)

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	「やわらかい」熱電材料 - 有機分子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
第53回熱測定ワークショップ「ナノ粒子、ナノ構造体の熱測定」(招待講演)	2016年11月29日	大阪大学豊中キャンパス (大阪府豊中市)

発表者名	発表標 題	
中村 雅一, 小島 広孝, 稲垣 剛, 杉本 学	高純度 共役分子性固体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
日本物理学会第72回年次大会 (招待講演)	2017年03月17日 ~ 2017年03月20日	大阪大学豊中キャンパス (大阪府豊中市)

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	DFT計算を用いた有機熱電変換材料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10回分子科学討論会	2016年09月13日 ~ 2016年09月15日	神戸ファッションマート (兵庫県神戸市)

発表者名	発表標 題	
阿部 竜, 中川真理雄, 伊藤光洋, 小島広孝, 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変化を利用した新奇有機熱電材料の探索 () : 分子間距離の影響	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
第77回応用物理学会秋季学術講演会	2016年09月13日 ~ 2016年09月16日	朱鷺メッセ (新潟県新潟市)

発表者名	発表標 題	
中村雅一, 小島広孝	電子系で観測される巨大ゼーベック効果と振電相互作用	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
「造形科学」第3回公開シンポジウム	2016年10月20日 ~ 2016年10月21日	東北大学さくらホール (宮城県仙台市)

発表者名	発表標 題	
中村雅一, 小島広孝, 稲垣剛, 杉本学	高純度有機半導体における巨大ゼーベック効果 - 分子性固体に見られる特異的だが一般的な現象 -	
学 会 等 名	発表年月日	発 表 場 所
第10回物性科学領域横断研究会「凝縮系科学の最前線」	2016年12月10日	神戸大学百年記念会館 (兵庫県神戸市)

発表者名	発表標題	
竹内高伸, 中川真理雄, 藤原史弥, 阿部竜, 高橋功太郎, 山田容子, 葛原大軌, 渡辺剛, 小金澤智之, 小島広孝, 中村雅一	分子配向の影響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13回薄膜材料デバイス研究会	2016年10月21日 ~ 2016年10月22日	龍谷大学響都ホール校友会館 (京都府京都市)

発表者名	発表標題	
中川真理雄, 阿部 竜, 竹内高伸, 高橋功太郎, 山田容子, 葛原大軌, 渡辺 剛, 小金澤智之, 小島広孝, 中村雅一	スマネン薄膜における熱電特性と構造評価	
学会等名	発表年月日	発表場所
第3回 造形科学若手研究会	2016年11月11日 ~ 2016年11月12日	ゆのくに天祥 (石川県加賀市)

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	有機熱電変換材料に関する計算化学的考察	
学会等名	発表年月日	発表場所
有機固体若手の会冬の学校2017	2017年03月09日	ホテルあかね (神奈川県足柄下郡湯河原町)

〔図書〕 計(1)件

著者名	出版社		
中村雅一	シーエムシー出版		
書名	発行年	総ページ数	
IoTを指向するバイオセンシング・デバイス技術	2016	193 (154-163)	

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

有機固体素子科学研究室 研究紹介 http://mswebs.naist.jp/LABS/greendevic/research/example.html
