

No. 154

*** 研究テーマ**

効率的熱電変換を目指した有機伝導体の開発

*** 研究目的**

エネルギー問題は近い将来、我々が直面する世界規模の課題の一つであり、代替エネルギーへの転換は急務である。熱電変換は日常的に排出される「熱」を「電気」エネルギーとして回収利用できるため、身近な発電源として期待されている。

そのなかで近年、特徴的なフレキシブル性を活かした有機材料の熱電変換性能について注目が高まっている。しかし、新規熱電材料開発を主眼とした研究は少なく、どのような分子系を用いれば優れた熱電材料を実現できるのかは明らかではない。これまでに申請者は、ベンゾチオフェン系分子、特にベンゾチエノベンゾチオフェン (BTBT) 骨格を構成要素とする有機伝導体群が優れた熱電特性を示すことを見出している (T. Kadoya* et al., Phys. Chem. Chem. Phys., 15, 17818-17822 (2013). J. Am. Chem. Soc., 138, 3920-3925 (2016). J. Phys. Chem. C, 123, 5216-5222 (2019). 他)。有機伝導体とは、有機半導体に化学ドーピングを施し、電子ドナー分子とアクセプター分子の2種類の分子から構成される伝導性有機化合物である。化学ドーピングの効果で、有機結晶のなかで分子は開殻電子構造をもち、その価数と分子のかたちと配列により固体の物性が支配されるのが特徴である。

本研究ではベンゾチオフェン、その類縁体であるインドール系半導体分子を用いた新規有機伝導体の開発と熱電特性を中心として電荷輸送特性の評価を行う。特に、熱・電気輸送特性に大きな影響を与えるフォノン（格子振動）の効果を考察し、分子がもつ「硫黄（カルコゲン）原子または窒素原子の数と分子内の配置」に着目したフォノンの化学的制御を通して優れた有機熱電結晶の創出を目的とする。

*** 研究チームメンバーと研究課題・分担課題**

角屋智史（研究幹事） 理工学部 機能分子化学科・助教

・研究課題：効率的熱電変換を目指した有機伝導体の開発

池田 茂 理工学部 機能分子化学科 教授

・分担課題：本研究の要である化学ドーピングに関しての助言等を賜る。また有機半導体のエネルギーレベルの評価は、化学ドーピングによる有機伝導体作製において重要な指標となる。これに関して、イオン化エネルギー測定装置を用いての有機半導体粉末のHOMOエネルギーの評価を担当して頂く