カーボンナノチューブ/かご状タンパク質ナノ複合材料の熱電特性： フレキシブル熱電材料のための新たな材料設計指針

Thermoelectric Property of Carbon Nanotube / Cage-Shaped Protein Nanocomposites: A Novel Design Method for Flexible Thermoelectric Materials

奈良先端大物質創成 [○]伊藤 光洋, 戸松 康行, 松原 亮介, 岡本 尚文, 山下 一郎, 中村 雅一

NAIST, [○]M. Ito, Y. Tomatsu, R. Matsubara, N. Okamoto, I. Yamashita, M. Namamura

E-mail: i-mitsuhiro@ms.naist.jp

私たちの身の回りの排熱を効果的に回収するためには、大面積・低コスト・フレキシブルな熱電変換素子の開発が望まれている。しかしながら、いまだにそれを実現するに適した熱電材料は見いだされていない。一般に、熱電変換材料の能力は無次元性能指数 $ZT = \alpha^2 \sigma T / \kappa$ (α , σ , κ , T は、それぞれ、ゼーベック係数、導電率、熱伝導率、絶対温度) で評価される。数ある材料候補の中で、カーボンナノチューブ (CNT) 複合材料は、柔軟性を保ちつつ高い機械的強度と導電率が得られるという利点を有している [1]。しかし、CNT そのものの熱伝導率が極めて高いことから、そのままでは熱電材料として最適とは言いがたい。

そこで我々は、熱電材料設計における新たなアプローチの一つとして、複合材料内で CNT 間を接続する単「複合分子」接合を最適化することにより、高い導電率を保ちつつ、ゼーベック係数の増強と熱伝導率の低減を両立させることを目指している。今回、そのコンセプトを実証するためのモデル分子として、無機物を内包したかご状タンパク質を用いた。使用するタンパク質は DNA 操作により CNT に選択的に吸着するよう設計されており [2]、CNT を橋渡しして単分子接合を作ることが期待される。さらに内包するコア粒子の組成を変化させることで接合部の電子状態を接合構造とは独立に制御することができる。図 1 および 2 は、本研究のコンセプトを示す概念図である。図 2 に示されるように、ナノ複合材料の接合部でフォノン伝達が阻害されることにより、熱伝導率が低下するだけでなく、熱流によって接合部に急峻な温度差が生じる。すると、接合の前後でフェルミディラック分布が大きく非対称になり、ナノ粒子の電子準位を介したキャリアの拡散に不均衡が生じ、高温部から低温部への正味キャリア流が生じる。

今回、コア粒子の材料を変化させてナノ複合材料の導電率とゼーベック係数を評価した。その結果、CNT のみでは p 型のゼーベック効果を示すところ、ナノ複合材料において p 型半導体的なナノ粒子をコアとして使用するとゼーベック係数が 2 倍程度まで増強され、n 型半導体的なナノ粒子では減少した。また、前者では導電率も増加した。これらの結果は、体積比率的にはごくわずかな単「複合分子」接合部におけるナノ粒子の電子状態を変化させることで、CNT 複合材料の熱電性能を大きく向上させることができることを示している。従って、このようなアプローチは、フレキシブル熱電変換素子のための材料設計法として有望であると考えられる。

[1] 末森浩司ら、第 59 回応用物理学関係連合講演会 (東京) 16p-E7-6.

[2] M. Kobayashi et al, Chem. Commun., 2011, 47.

図 1 無機粒子を内包したかご状タンパク質とそれを CNT に付加した様子

図 2 単分子接合におけるゼーベック効果