

π共役曲面をもつジベンゾクリセンにおける巨大ゼーベック効果

Giant Seebeck Effect in Dibenzochrysene with a Curved π -Conjugation

奈良先端大¹, 神奈川大², 富山高専³ ○川内 暁貴¹, 小嶋 晃平¹, 阿部 竜¹,

小島 広孝¹, 辨天 宏明¹, 辻 勇人², 大井 綾子³, 山岸 正和³, 中村 雅一¹.

NAIST¹, Kanagawa University², National Institute of Technology, Toyama College³

○Toshiki Kawauchi¹, Kohei Kojima, Ryo Abe¹, Hirotaka Kojima¹, Hiroaki Bente¹,

Hayato Tsuji², Ayako Oi³, Masakazu Yamagishi³, Masakazu Nakamura¹.

E-mail: kawauchi.toshiki.kq3@ms.naist.jp

フラーレンやヘリセン等の曲面 π 共役分子は、平面 π 共役分子には無い外部刺激応答性などの特異な機能を示す可能性があり、近年精力的に研究されている。熱的刺激に対しても構造が動的に変化しやすいと期待されることから、特異な熱電特性を示す可能性を秘めている。これまでの当研究室の研究から、 π 共役曲面をもつフラーレン C₆₀ やスマネンの薄膜試料においても、従来理論では説明のできない、100 mV/K を超える非常に大きなゼーベック係数を発現することが確認されている[1,2]。ゼーベック係数は熱電素子における発電効率に直結するため、我々はこの特異な現象についての研究を続けている。

本研究では、近年基礎研究および応用研究が進められている曲面 π 共役分子の一つとして、ジベンゾクリセン(DBC)に着目した(Fig. 1)。DBC はベンゼン環 6 個が縮環した骨格をもつ多環芳香族炭化水素であり、結晶中でねじれた構造をとることが確認されている[3]。本研究では、DBC およびその誘導体であるジメチルジベンゾクリセン(Me₂-DBC)について、構造欠陥や薄膜の分子配向の乱れなどの外的要因を排除した単結晶での熱電特性を測定した。

本研究で測定した DBC と Me₂-DBC の単結晶試料におけるゼーベック係数の温度依存性を Fig. 2 に示す。DBC は 350 K から 390 K の温度範囲で、絶対値 10 mV/K 以上の大きな負のゼーベック係数を示した。Me₂-DBC についても同様の巨大なゼーベック係数が確認できたが、DBC と比べると発現温度がわずかに高温側にシフトしていた。また、両者のゼーベック係数の最大値を比較すると、DBC の方がより高い値を示した。両者の結晶構造(Fig. 1)は基本的によく似ているが、置換基の立体反発などにより分子間距離がわずかに異なる。このため、温度に対する構造変化の様子も異なると予想され、熱電特性との相関も疑われる。その他の測定結果の詳細については当日報告する。

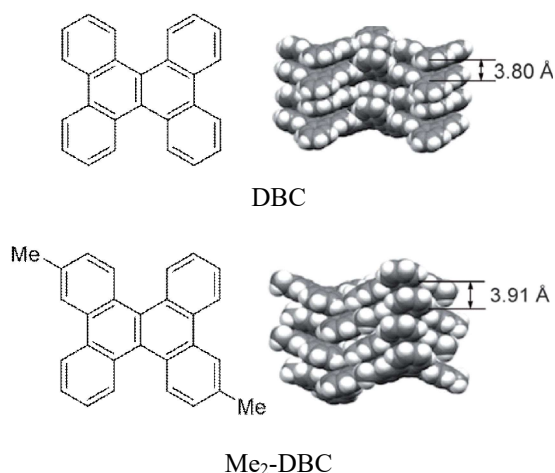


Fig. 1 Molecular structure and the crystal packing of DBC and Me₂-DBC [3].

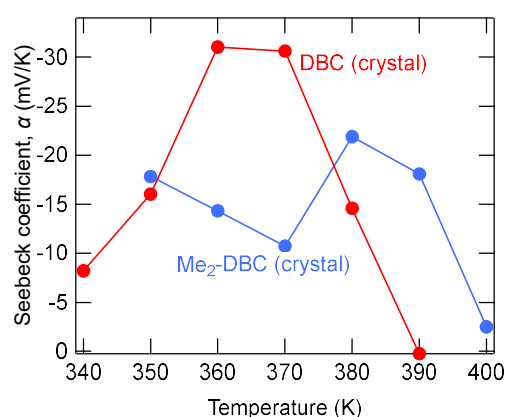


Fig. 2 Seebeck coefficient at each temperature for DBC and Me₂-DBC.

- [1] H. Kojima *et al.*, *Appl. Phys. Express*, **2015**, 8, 121301.
 [2] H. Kojima *et al.*, *Mater. Chem. Front.*, **2018**, 2, 1276.
 [3] Y. Ueda *et al.*, *Chem. Asian J.*, **2014**, 9, 1623.