柔軟性有機単結晶における巨大ゼーベック効果

Giant Seebeck Effect in Flexible Organic Single Crystals

奈良先端大¹, 高知工科大² ○^(M1)服部修也¹, 趙ヨンユン¹,^(P)阿部竜¹, ^(M2)杉山拓弥¹, 林正太郎², 辨天宏明¹, Manish Pandey¹, 中村雅一¹NAIST¹, Kochi University of Technology.², °S. Hattori¹, Y. Cho¹, R. Abe¹, T. Sugiyama¹,S. Hayashi², H. Benten¹, M. Pandey¹, M. Nakamura¹

E-mail: hattori.shuya.hn6@ms.naist.jp

[緒言] IoT 機器の普及に伴い、それらを動作させるための孤立電源の必要性が高まっている。身の周りの未利用エネルギーを回収するエナジーハーベスティング技術の中でも、熱を電気に変換する熱電変換素子は、人体や電子機器から排出される低エネルギー密度の熱を利用できることから注目されている。我々の過去の研究によって、有機低分子半導体の薄膜や単結晶において 10mV/K を超える巨大なゼーベック係数が見いだされた[1][2]。この現象の発現機構を探求することは、熱電素子構造の単純化や高性能な有機熱電材料の創造の足掛かりになると考えられる。これまでに巨大ゼーベック効果を発現することが確認されている材料は一般的に脆いが、フレキシブル性を有する材料で巨大ゼーベック効果が発現すればフレキシブル素子への応用が容易になる。

そこで本研究では、TBT-Se: 4,7-Bis(2-thienyl)-2,1,3-benzoselenadiazole, TBT-S: 4,7-Bis(2-thienyl)-2,1,3-benzothiadiazole(Fig.1)の2種類の柔軟性有機単結晶について、熱電特性を比較し、フレキシブルな有機材料における巨大ゼーベック効果について考察した。

[結果] TBT-Se と TBT-S の有機単結晶における 330K での導電率とゼーベック係数の測定結果を Fig.2 に示す。まず、双方の物質において n 型の巨大なゼーベック係数が確認された。分子の左右にあるチオフェニル基は他の有機半導体においては p 型を示す場合が多いが、中央に位置するベンゾジアゾール構造が n 型を示すことから、この部分が分子間のキャリア輸送を担っていると推測できる。

二つの分子は類似構造を持つにもかかわらず、その値には差異が見られた。ここにそれぞれ含まれる硫黄とセレンを比較すると、最外殻電子数は同じであるが原子半径が異なる。この違いが結晶内で分子間距離にも現れ、導電率にも同様に影響を与えたと考えられる。一方、巨大ゼーベック効果におけるゼーベック係数の大小が何によって決まるかは明らかになっていないが、導電率が大きい TBT-S のほうがゼーベック係数の絶対値も大きいことから、キャリア密度による差ではなく、分子間相互作用の大小によりゼーベック係数が変化している可能性がある。ゼーベック係数、導電率、導電率活性化エネルギーなどの温度依存性について測定した結果を交え、より詳細な議論を当日報告する。

[謝辞] 本研究は、JSPS 科研費(JP21H02013) の支援を受けたものです。

[参考文献]

[1] H. Kojima et al., *Appl. Phys. Express* **8**, 121301 (2015).

[2] H. Kojima et al., *Mater. Chem. Front.* **2**, 1276 (2018).

Fig.1 Molecular structure of (a)TBT-Se &(b)TBT-S

Fig.2 Electrical conductivity and Seebeck coefficient in TBT-Se and TBT-S at 330K