

ベンゾチオフェン骨格を鍵とする有機熱電材料の創出

代表研究者 角屋 智史
兵庫県立大学 物質理学研究科 助教

研究要旨

近年、有機材料の熱電変換性能について急速に研究が進んでいる。これまでに申請者は、高伝導性と比較的高い熱起電力を併せ持つ分子性導体の開発に成功している。有機エレクトロニクスに由来するベンゾチオフェンという分子骨格を用いたことがブレイクスルーとなった。これにより、これまで注目されてこなかった「分子性導体の熱電性能」という概念が生まれた。本研究では、ベンゾチオフェン系電子ドナーを合成し、それらを用いた新規分子性導体の開発を行った。特に分子内のカルコゲン元素が熱電性能にあたる効果を検証した。研究手法としては、ベンゾチエノベンゾチオフェン (BTBT) 系電子ドナーを合成し、これを用いて電解結晶法でラジカルカチオン塩の作製を試みた。得られた結晶は構造解析、輸送特性を評価した。特筆すべき結果として、BTBT のイオウをセレンに置換したベンゾセレンベンゾセレンフェン (BSBS) を用いて、 $(BSBS)_2AsF_6$, $(BSBS)_2SbF_6$ を開発できた。これらの単結晶構造解析に成功し、伝導度 ($\sigma_{rt} > 600$ S/cm)、熱起電力 ($S_{rt} = 17\mu V/K$) を評価した。エネルギーバンド計算の結果、これらの錯体は一次元電子構造をもつことが示唆された。一次元バンドを仮定し、熱起電力から分子間トランスファー積分を算出した。300 meV 以上の大きな値を実験的に確認できた。この結果を分子軌道計算の値と照合し、考察を行った。