

ナノスケール・サーマルマネジメント基盤技術の創出
2017年度採択研究代表者

2019年度
実績報告書

柳 和宏

首都大学東京理学研究科物理学専攻
教授

フレキシブルマテリアルのナノ界面熱動態の解明と制御

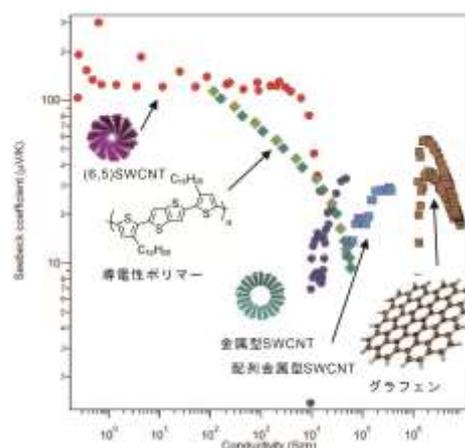
§ 1. 研究成果の概要

近年、折り曲げ可能なディスプレイ・スマートフォンなど、柔軟(フレキシブル)性を有するデバイスが社会に普及しつつある中、そのデバイス性能を最適化する為には、フレキシブル材料の熱および電荷の流れの理解は必要不可欠である。また、様々なものがインターネットに繋がったIoT社会の実現には、無数のセンサーを駆動する電源確保が必要不可欠であり、様々な形状の素材における温度差から発電可能なフレキシブル性を有する熱電変換素子は有力な電源の一つである。このようなフレキシブル性を有する物質系における、熱、電荷の流れ、および熱起電力発生との相関と機構を理解し、制御する方法を確立することが、社会的に重要な課題としてとられ、我々は本プロジェクトを進めている。特に、フレキシブル性の起源であるファンデルワールス接合界面における熱・電荷輸送を正確に理解する為、単層ナノチューブ(SWCNT)・原子層物質・有機導電性ポリマーの3つの材料に焦点を絞り、物質の電子構造、フェルミレベル、そして接合界面の構造を制御した形で、熱・電荷の輸送を理解し制御する研究をチームとして進めている。

2019年度は、単層カーボンナノチューブや導電性ポリマー、グラフェンのゼーベック係数(S)および電気伝導率(σ)の相関について、解き明かし、その背景をチームとして理解すること進めた。図に、本チームで各学術誌に報告したデータをまとめる。ここでは、(6,5)半導体型SWCNT、金属型SWCNT、グラフェン、導電性ポリマーの薄膜系における S と σ の関係を示す。これら薄膜系は、単体・界面・グレインバウンダリが薄膜内部にある材料系で、どの物質系も電荷の流れにおいてホッピング界面が存在する系である。しかしながら、 S と σ の関係は、物質に依存して極めて多様な振る舞いを示しており、その振る舞いを支配する物理が物質毎に異なることが分かってきた。SWCNTやグラフェン系においては、単体の電子構造から理論的に導き出される S とコンダクタンスの相関で、薄膜系の S と σ の相関の振る舞いを説明可能であることが分かった。一方、金属型SWCNTにおける S と σ の同時増大(トレードオフの破れ)は、一次元電子構造から理解できる現象である。一方、導電性ポリマー系においては、伝導機構がバリアブルレンジホッピング、弱局在、金属伝導への転移が、 S と σ の相関の振る舞いを説明できること分かった。個々に理解している物理を、階層性と不均一性が存在する系の熱電物理として統一的に理解することが今後の課題である。

【代表的な原著論文】

- (1) H. Tanaka, et al., "Thermoelectric properties of a semicrystalline polymer doped beyond the insulator-to-metal transition by electrolyte gating", *Sci. Adv.*, Vol. 6, No. eaay8065, pp.1-8, 2020.
- (2) Y. Ichinose, et al., "Solving the Thermoelectric Trade-Off Problem with Metallic Carbon Nanotubes", *Nano Lett.* 19, 7370-7376 (2019)



§ 2. 研究実施体制

(1) 柳グループ

① 研究代表者: 柳和宏 (首都大学東京理学研究科物理学専攻 教授)

② 研究項目

『研究課題1: フレキシブルナノ界面の熱起電力・電気伝導の制御と学理構築』

・ナノチューブ系の熱起電力・電気伝導の制御と物理的機構の解明

研究項目1-1-1: 試料作製技術の改善

研究項目1-1-2: 熱起電力(S)・電気伝導(σ)のキャリア注入依存性および温度依存性

研究項目1-1-3: 高純度単一カイラリティ SWCNT および alloy 化した SWCNT の熱動態の研究

『課題2: キャリア量を制御したフレキシブルナノ界面の熱伝導率の測定技術開発と理解の深耕』

・フェルミレベルを制御した薄膜系の熱伝導評価測定技術の開発

研究項目2-1-1: キャリア量を制御された薄膜熱伝導評価に向けた実験系の構築

研究項目2-1-2: 薄膜熱伝導率評価

(2) 竹延グループ

① 主たる共同研究者: 竹延大志 (名古屋大学大学院工学研究科 教授)

② 研究項目

『課題1: フレキシブルナノ界面の熱起電力・電気伝導の制御と学理構築』

・有機導電性高分子・原子層系の熱起電力・電気伝導率の制御と物理的機構の解明

研究項目1-2-1: 試料作成技術の改善

研究項目1-2-2: 熱起電力(S)・電気伝導(σ)のキャリア注入依存性および温度依存性

(3) 岡田グループ

① 主たる共同研究者: 岡田晋 (筑波大学数理物理系 教授)

② 研究項目

『課題1: フレキシブルナノ界面の熱起電力・電気伝導の制御と学理構築』

・計算科学によるフレキシブルナノ界面の熱起電力・電気伝導の物理的機構の解明

研究項目1-3-1: 計算科学によるナノ界面におけるキャリア蓄積現象・電気伝導・熱起電力の
相関の解析

『課題2: キャリア量を制御したフレキシブルナノ界面の熱伝導率の測定技術開発と理解の深耕』

・計算科学によるフレキシブルナノ界面の熱伝導率の理解の深耕

研究項目2-2-1: ナノ界面におけるマルチスケール熱伝導特性シミュレーション

(4) 平原グループ

① 主たる共同研究者: 平原佳織 (大阪大学大学院工学研究科 准教授)

② 研究項目

『課題1: フレキシブルナノ界面の熱起電力・電気伝導の制御と学理構築』

研究項目1-4-1: 単一ナノ界面における熱起電力・電気伝導測定の実験

(5) 河野グループ

① 主たる共同研究者: 河野淳一郎 (Rice University, Dept. of Electrical & Computer Engineering 教授)

② 研究項目

『課題1: フレキシブルナノ界面の熱起電力・電気伝導の制御と学理構築』

研究項目1-5-1: 配向制御ナノチューブ薄膜の作製技術の進化と基礎物性研究