

19a-F11-11

層状カルコゲン化合物 $\text{ACr}(\text{Se}, \text{S})_2$ ($\text{A} = \text{Cu}, \text{Ag}$) 単結晶の熱電特性

Thermoelectric Properties in Single Crystals of Layered Chalcogenides

 $\text{ACr}(\text{Se}, \text{S})_2$ ($\text{A} = \text{Cu}, \text{Ag}$)

東工大応セラ研 ○矢野 力三, 笹川 崇男

MSL- Tokyo Institute of Technology, ○Rikizo Yano, Takao Sasagawa

E-mail: yano.r.ac@m.titech.ac.jp

本研究で着目した層状カルコゲン化合物 ACrX_2 ($\text{A} = \text{Cu}, \text{Ag}$; $\text{X} = \text{S}, \text{Se}$) は、Cr が三角格子を形成し、そのスピンの幾何学的フラストレーションをもつと考えられることから、高い熱起電力が期待される[1]。また、A がイオン伝導性を示すことから、伝導性とフォノン散乱の寄与による高い熱電性能の向上も期待される。

カルコゲン X を S から Se にすることで、比較的高い熱起電力 S を維持しながらも、抵抗率 ρ が数桁オーダーで劇的に改善することを見出し、前回報告した[2]。多原子置換系ではフォノン散乱の増大により、熱伝導率の低下が期待でき、出力因子(Power Factor: $P.F. = S^2/\rho$) が同等でも高い熱電性能をもちうることに着目して、本研究ではカルコゲンサイトを Se と S で固溶させることにより、さらに高い熱電特性をもつ物質の探索を行った。

改良型化学気相輸送法により、大型板状単結晶の育成に成功した。X 線回折パターンが Vegard 則にしたがってピークシフトしていることや、蛍光 X 線分析の結果などから、Se と S の固溶を確認した。得た結晶で評価を行った結果、輸送特性は置換量に対して線型的に変化しておらず、 AgCrSeS では高い熱起電力を保持し続けたが抵抗率は依然として高いままであった(Fig. Top)。一方で、 CuCrSeS では抵抗率は劇的に小さくなったが、熱起電力に劇的な変化は見られなかった(Fig. middle)。そのため、Se,S の固溶系では出力因子の劇的な改善には至らなかった (Fig. bottom)。しかし、この物質は全率固溶することが明らかとなったので、より詳細な組成制御によって熱電特性に改善の余地があることがわかった。また、異方性や周波数依存性についても特徴的な結果が得られた。当日の発表ではそれらの結果を合わせて報告する。

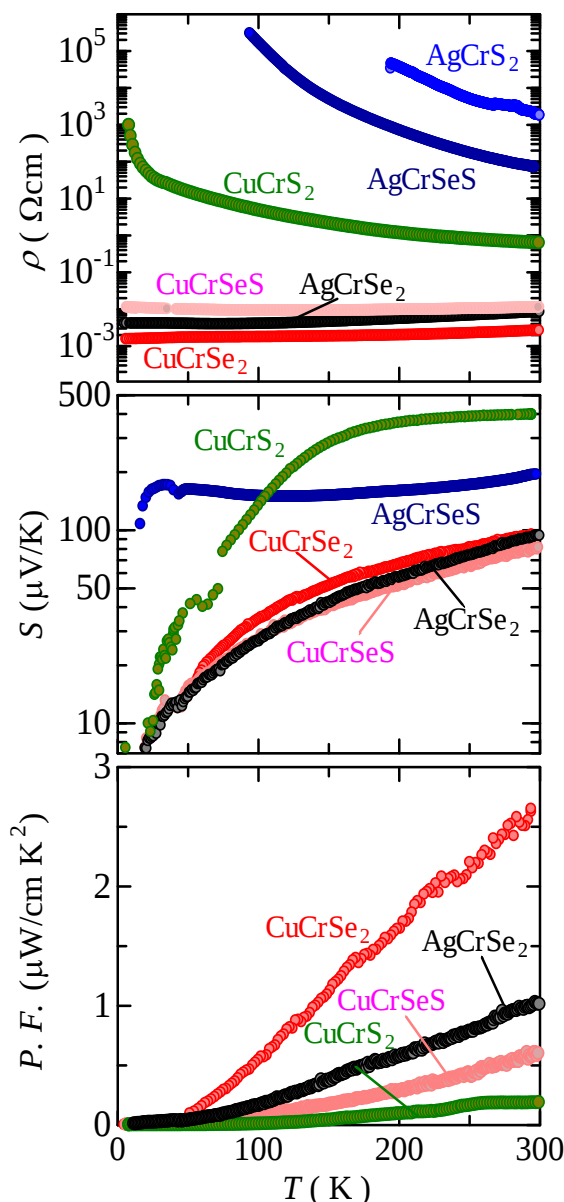


Fig. Temperature dependence of resistivity (top), thermopower (middle), and Power Factor (bottom) in $\text{ACr}(\text{Se}, \text{S})_2$ single crystals.

[1] W. Koshibae and S. Maekawa, Phys. Rev. Lett. **87**, 236603 (2001)

[2] 第 74 回応用物理学会秋季学術講演会, 20a-C13-8 (2013)