擬一次元有機伝導体 $(TTT)_2I_{3+\delta}$ ($\delta < 0.1$) の熱電性能指数の試料依存性

Sample Dependence of Thermoelectric Figure of Merit of Quasi-One-Dimensional Organic Conductor $(TTT)_2I_{3+\delta}$ ($\delta < 0.1$)

○ 吉野 治一[1]、長谷川 祥史[1]、黒田 菜月[1]、田中 里佳[2]、小嵜 正敏[1]([1]. 阪市大理、[2]. 阪市大工)

○**Harukazu Yoshino[1], Akifumi Hasegawa[1], Natsuki Kuroda[1], Rika Tanaka[2], Masatoshi Kozaki[1]**

(1.Grad. School of Sci., Osaka City Univ., 2.Grad. School of Eng., Osaka City Univ.)

E-mail: yoshino@sci.osaka-cu.ac.jp

【序】$(TTT)_2I_{3+\delta}$ ($\delta < 0.1$, 以下 TTT–I_3) は，Casian ら [1,2] によって無次元熱電性能指数 ZT が 2 を超えることが理論的に予測されている擬一次元有機伝導体である．一次元方向の電気伝導度 σ が室温で約 1000 S cm^{-1} と非常に高い一方で，熱電能も約 50 μV K^{-1} と比較的高い値を保っている．また，約 50 K で金属から半導体に電子状態が変化する．伝導バンドを形成する TTT(=tetrathiatetracene) 分子とヨウ素原子の比は約 2:3 だが，若干の不定比性がある．これによって，TTT バンドのフィリングや電荷キャリアの散乱時間が変化し，電気伝導度や状態変化の温度に試料依存性が生じる．本講演では液相から成長させた単結晶の ZT の試料依存性について報告する．

【結果】図 (a)–(c) に 3 個の試料 (#1602, #1701, #1704) の電気抵抗率 $\rho = 1/\sigma$，熱電能 S，熱伝導度 κ の温度依存性を示す．室温以下の ρ の温度依存性は，金属的もしくはわずかに半導体的だが，いずれの試料とも 40–50 K 以下で急激に上昇した．S は試料依存性が大きく，符号まで変化することが初めてわかった．300 K で +50 から −95 μV K^{-1} の間で変化した．これらの変化は，TTT–I_3 が室温においても単純な金属ではなく，フェルミエネルギー近傍に小さいギャップのある半導体であると仮定すると説明することができる．一方，κ の試料依存性は小さく，ρ の絶対値も考慮すると，格子系の寄与が支配的であると考えられる．室温付近の増大は熱輻射の影響によるものだと考えている．

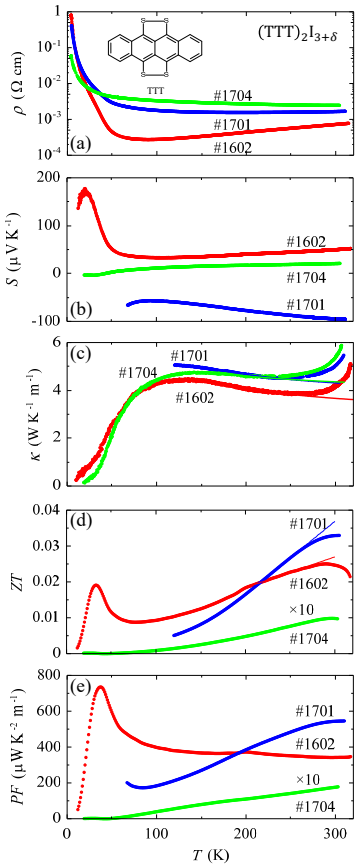

図 $(TTT)_2I_{3+\delta}$(試料 #1602，#1701，#1704) の (a) 電気抵抗率，(b) 熱電能，(c) 熱伝導度，(d) 無次元熱電性能指数，(e) 出力因子の温度依存性．

図 (d)，(e) に，測定結果から計算した ZT と出力因子 PF を示す．最高の ZT は#1701 の 0.033 (300 K) であった．一方，PF の最高は#1602 の 730 μW K^{-2} m^{-1} (54 K) であった．これは分子性導体として非常に大きい値である．#1701 の結果はいずれの輸送係数とも，気相で成長させた結晶についての Huewe ら [3] の報告とほぼ一致する．一方，他の 2 つの試料については，室温で S の符号や絶対値が大きく異なるという，過去に報告のない挙動が観測された．講演では ZT が理論予測より大幅に低い原因や，大きい試料依存性の起源などについて議論する．

[1] A. Casian and I. Sanduleac, J. Electron Mater. **43**, 3740 (2014).

[2] I. Sanduleac *et al.*, J. Nanoelectron. Optoelectron. **9**, 247 (2014).

[3] F. Huewe *et al.*, Adv. Mater. 1605682 (2017).

© 2018年 応用物理学会