

## 1次元ピーナッツ型フラーレンポリマーの熱電係数計算

### Calculated thermoelectric properties of one-dimensional peanut-shaped fullerene polymers

野田祐輔<sup>1</sup>、Keivan Esfarjani<sup>2</sup>、大野かおる<sup>1</sup>

Yusuke Noda<sup>1</sup>, Keivan Esfarjani<sup>2</sup> and Kaoru Ohno<sup>1</sup>

<sup>1</sup>横浜国立大学大学院工学府物理情報工学専攻、<sup>2</sup>Rutgers 大学機械宇宙工学専攻

<sup>1</sup>Dept. of Physics, Yokohama National Univ., Yokohama, Kanagawa 240-8501

<sup>2</sup>Dept. of Mechanical and Aerospace Engineering, Rutgers Univ.,  
Piscataway, New Jersey 08854, USA

今現在では、Se や Te などレアメタルを含む良質な熱電材料が多く知られているが、それに代わる新規の熱電材料の開発が必要とされている。私達は炭素のように低コスト・軽量な元素を用いることで、熱電代替材料の可能性を探ることが重要であると考えている。これまでの実験研究により、擬1次元かつ凹凸形状を持つピーナッツ型フラーレンポリマー (PSFP) は、朝永-Luttinger 液体状態に基づく1次元金属的な電気伝導性を示すことが知られている[1]。私達はこれまで第一原理計算を用いた1次元PSFPの電子状態計算を行ってきたが、本研究ではより簡単なtight-binding法[2]を用いて、1次元PSFPの熱電係数(コンダクタンス  $G$ 、Seebeck 係数  $S$ 、熱コンダクタンス  $K$ 、性能指数  $ZT=GS^2T/K$ )への電子的寄与の計算を行う。用いる計算手法は、非平衡Green関数法[3]とLandauer-Buttiker公式[4]である。各物性値を、Fermiエネルギー $\mu$ と温度 $T$ の関数として評価した。本研究ではまだフォノンの寄与は含めていないので、さらにダイナミクス計算に発展させる必要がある。計算結果の詳細は、ポスター発表にて紹介する。

[1] J. Onoe, T. Ito, H. Shima, H. Yoshioka, and S. Kimura, *Euro. Phys. Lett.* **98**, 27001 (2012).

[2] S. Okada and S. Saito, *J. Phys. Soc. Jpn.* **64**, 2100 (1995).

[3] Y. Meir and N. S. Wingreen, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2512 (1992).

[4] M. Buttiker, *Phys. Rev. Lett.* **57**, 1761 (1986).