18p-A7-1

Co_{1-x}Ni_xSb₃の輸送および熱電特性に関する実験データの解析の精密化

Refined analysis of experimental data on transport and thermoelectric properties of Co1-xNixSb3

島根大 総合理工 ⁰梶川 靖友

Shimane Univ. [°]Y. Kajikawa

E-mail: kajikawa@riko.shimane-u.ac.jp, URL: http://www.ecs.shimane-u.ac.jp/~kajikawa/

前回, p型 CoSb₃について,600K 以上では 第 2 の伝導帯が熱電特性に大きな影響を及ぼ すことを示した[1]。今回は,Dyck ら[2]の Co_{1-x}Ni_xSb₃に関する実験データを解析し,n型 CoSb₃での第2の伝導帯の影響を調べた。

解析において、第1の伝導帯 c1 とイオン化 エネルギー E_{SD} の浅いドナー準位が作る不純物 バンドに加え、H 点に谷をもつ第2の伝導帯 c2 とイオン化エネルギー E_{DD} の深いドナー準 位を考えた。c2 バンドの電子に対する散乱と しては、音響フォノン(ac)散乱のみを考えたの に対し、c1 バンドの電子に対しては、イオン 化不純物(ii)散乱をも考慮した。不純物バンド 内での導電率については Efros-Shklovskii 型ホ ッピング伝導[3]の $\sigma_{ib} = \sigma_{ib0} \exp[-(T_0/T)^{1/2}]$ を用 い、 $T_0 = E_{SD} / k_B$ と仮定した。

Dyck ら[2]の Ni 濃度 x = 0.003 の Co_{1-x}Ni_xSb₃ 試料についての導電率,移動度および Seebeck 係数の温度依存性の実験データに対し,計算結 果を点線で比較して図 1(a),(b)および(c)に示 す。計算に用いたパラメーターの値は, $m_{c1} =$ 2.2 $m_0, m_{c2} = 5.5 m_0, E_{SD} = 22$ meV, $E_{DD} = 38$ meV および, c1 バンドと c2 バンドのエネルギー差 $\Delta E = 50$ meV 等である。300 K 以下においても c2 バンドの影響が大きいことがわかる。

- [1] Y. Kajikawa, JAP **115**, 203716 (2014).
- [2] J. S. Dyck et al., PRB 65, 115204 (2002).
- [3] A. L. Efros and B. I. Shklovskii, J. Phys. C 8 (1975) 49.



Fig. 1 Comparison between the experimental data [2] and the calculated results for $Co_{0.997}Ni_{0.003}Sb_3$. Temperature dependences of (a) conductivity, (b) mobility, and (c) Seebeck coefficient.