

ウルマナイト NiSbS の電子物性と 3d 遷移金属置換効果 II

Effect of 3d transition metal substitution and electronic properties

in ullmannite NiSbS II

北陸先端大¹, 東大物性研², ○宮田 全展¹, 尾崎 泰助^{1, 2}, 小矢野 幹夫¹JAIST¹, ISSP², ○Masanobu Miyata¹, Taisuke Ozaki^{1, 2}, and Mikio Koyano¹

E-mail: s1330067@jaist.ac.jp

我々は新しい硫化物熱電材料の探索を目的として、ウルマナイト NiSbS とその置換系の物性を実験と理論の両面から研究している.[1] 今回は Ni サイトを Co で置換した $\text{Ni}_{1-x}\text{Co}_x\text{SbS}$ の物性と電子状態について報告する.

測定に用いた $\text{Ni}_{1-x}\text{Co}_x\text{SbS}$ ($0 \leq x \leq 0.5$) 多結晶は熔融法で作製し, 5–340 K の温度領域で電気抵抗率 ρ , 熱電能 S , 熱伝導率 κ , およびホール係数 R_H の温度依存性を測定した.

Figure 1 に $x = 0, 0.1$ の S の温度依存性を示す. 母体の $x = 0$ では温度の上昇に伴い, S の符号は正から負に反転する. Co 置換系では $|S|$ は減少し, 符号反転する温度が高温側にずれる.

Figure 2 に R_H の温度依存性を示す. いずれの試料でも $R_H < 0$ で電子伝導を示唆している. 低温側で R_H と S の符号は異なっている. R_H は温度変化があまり小さくなく, 縮退電子系であることがわかる. $|R_H|$ は Co 置換により減少している.

Figure 3 に 第一原理計算より得た, $T = 0$ K における $\text{Ni}_{1-x}\text{Co}_x\text{SbS}$ ($x = 0, 0.25$) の電子状態密度を示す. $x = 0$ ではフェルミレベル E_F が状態密度の立ち上がりに位置しているのに対して, $x = 0.25$ では状態密度がより大きい位置にシフトしている. $|S|$ の減少はこのことに起因していると考えられる. Co 置換により, E_F は約 100 meV 減少しており, Fig. 2 の $|R_H|$ の減少を説明することは一電子モデルでは難しい.

これは, NiSbS の電子系はマルチキャリア系として取り扱う必要があることを示している.

[1] 宮田, 尾崎, 小矢野, 第 61 回応用物理学会春季学術講演会 (19a-F11-12).

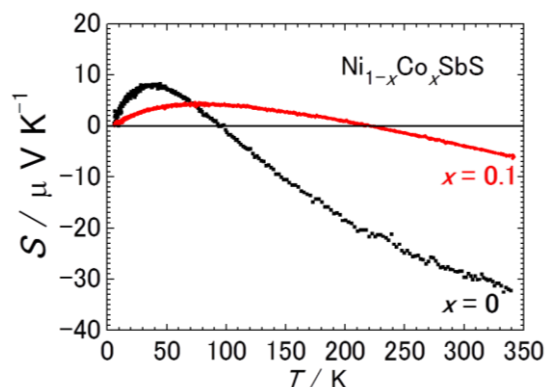


Fig. 1 Temperature dependence of Seebeck coefficient S of $\text{Ni}_{1-x}\text{Co}_x\text{SbS}$

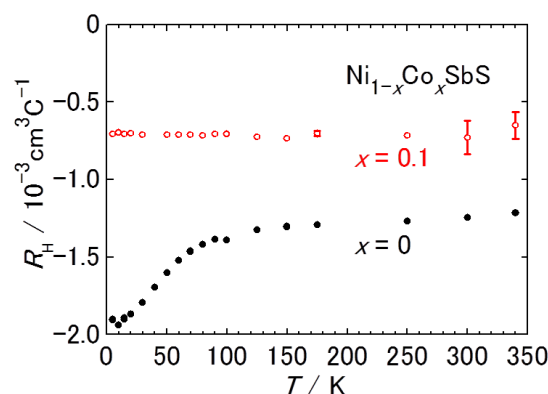


Fig. 2 Temperature dependence of Hall coefficient R_H of $\text{Ni}_{1-x}\text{Co}_x\text{SbS}$

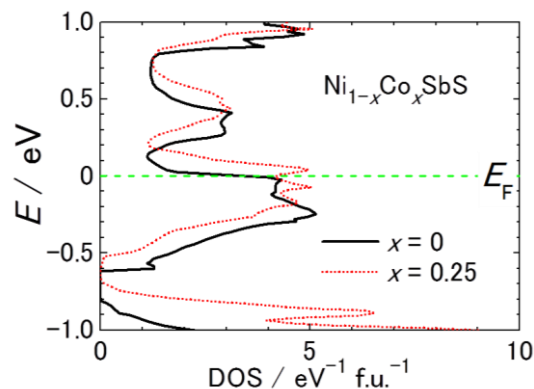


Fig. 3 Density of states of $\text{Ni}_{1-x}\text{Co}_x\text{SbS}$