p型 CoSb₃の輸送および熱電特性に関する実験データの解析の見直し

Revised analysis of experimental data on transport and thermoelectric properties of p-type CoSb₃

島根大 総合理工 ○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/

CoSb₃ は重要な熱電半導体であるにもかかわらず,バンドギャップエネルギーや有効質量などの重要な物性パラメーターの値についてコンセンサスが得られていない。本発表では,Caillatら[1]のp型CoSb₃に関する実験データの解析を見直し,実験データを統一的に説明できるバンドモデル及び物性パラメーターを提示する。

Γ点に頂上および谷をもつ価電子帯 ν1 と伝 導帯 c1 に加え、 Γ 点以外に頂上および谷をもつ 価電子帯 v2 と伝導帯 c2 を考え, v1 バンドに は、 $\hbar^2 k^2/(2m_{v1}) = E(1+E/A_{v1})$ という非放物 線的な分散関係を仮定した。v1 バンドに対す る c1 および c2 バンドのバンドギャップの温度 依存性としては、Varshini タイプの $E_{\sigma1,2}(T)$ = $E_{g1,2}(0) + S_{V1,2}k_BT^2/(0.61\theta_D + T)$ を仮定し た(ただし、 θ_D は Debye 温度)[2]。c1 および c2 バンドの電子に対する散乱機構としては, 音響フォノン散乱のみを考えたのに対し、v1 バンドの正孔に対しては、これに加え、イオン 化不純物散乱,無極性および極性光学フォノン 散乱を考える一方、v2 バンドはほとんど伝導 に寄与せず, 電荷中性条件のみを通して影響す るとして、緩和時間近似で導電率、Hall 係数お よび Seebeck 係数を計算した[3]。

Caillat ら[1]の種々の正孔濃度の p 型 $CoSb_3$ 試料についての Hall 係数および Seebeck 係数の温度依存性の実験データと計算結果を比較して図 1(a)および(b)に示す。計算に用いたパラメ

ーターの値は、 $m_{v1}=0.016~m_0$ 、 $A_{v1}=25~{\rm meV}$ 、 $m_{v2}=5.0~m_0$ 、 $m_{c1}=7.0~m_0$ 、 $E_{g1}(0)=0.32\sim0.37~{\rm eV}$ 、 $S_{V1}=1.5$ 、 $m_{c2}=14.0~m_0$ 、 $E_{g2}(0)=E_{g1}(0)+0.5~{\rm eV}$ 、 $S_{V2}=7.5~{\rm ol}$ はか、音響フォノン変形ポテンシャル E_{ac} として、v1、c1、c2 の各バンドに対し、 $1.8\sim2.15{\rm eV}$ 、 $1.5{\rm eV}$ 、 $1.3{\rm eV}$ および v1 バンドに対する無極性光学フォノン変形ポテンシャル $E_{npo}=2~E_{ac}$ である。

- [1] T. Caillat et al., JAP 80, 4442 (1996).
- [2] M. Beaudoin et al., APL 70, 3540 (1997).
- [3] W. Zawadzki, Adv. Phys. 23, 435 (1974).

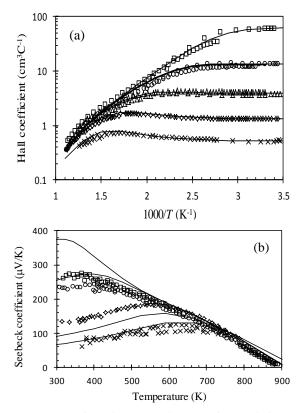


Fig. 1 Comparison between the experimental data [1] and the calculated results for p-type CoSb₃. (a) Temperature dependence of Hall coefficient. (b) Temperature dependence of Seebeck coefficient.