19a-F11-1

## 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 CoSb<sub>3</sub>

## 島根大 総合理工 <sup>0</sup>梶川 靖友

Shimane Univ. <sup>°</sup>Y. Kajikawa

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

CoSb<sub>3</sub> 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 CoSb<sub>3</sub> 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 v1 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、 $\hbar^2 k^2 / (2m_{\nu 1}) = E(1 + E / A_{\nu 1})$ 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 cl 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 $E_{s12}(T) =$  $E_{g12}(0) + S_{V12}k_{B}T^{2}/(0.61\theta_{D} + T)$ を仮定し た(ただし,  $\theta_D$ 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<sub>3</sub> 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、 $m_{v1} = 0.016 m_0$ ,  $A_{v1} = 25$  meV,  $m_{v2} = 5.0 m_0$ ,  $m_{c1} = 7.0 m_0$ ,  $E_{g1}(0) = 0.32 \sim 0.37$  eV,  $S_{v1} = 1.5$ ,  $m_{c2} = 14.0 m_0$ ,  $E_{g2}(0) = E_{g1}(0) + 0.5$  eV,  $S_{v2} = 7.5 \text{ O(B}$ か、音響フォノン変形ポテンシャ  $\mathcal{V} E_{ac}$ として、v1、c1、c2 の各バンドに対し、  $1.8 \sim 2.15$  eV、1.5 eV、1.3 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 $\mathcal{V}$  $E_{npo} = 2 E_{ac}$ 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 CoSb<sub>3</sub>. (a) Temperature dependence of Hall coefficient. (b) Temperature dependence of Seebeck coefficient.