

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 (II) —スピン軌道分裂バンドと光学フォノン散乱の影響—

Refined analysis of experimental data on transport and thermoelectric properties of Co_{1-x}Ni_xSb₃ (II)

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/>

前報[1]では, Dyck ら[2]の Co_{1-x}Ni_xSb₃ ($x = 0.001 - 0.01$) の熱電特性に関する 2 - 300 K の実験データを解析し, 不純物帯 (*ib*)や Γ 点の伝導帯下端 (*c1*) のほか, 伝導帯の第 2 バレー (*c2*) が 300 K 以下でも重要な役割を演ずることを示した。一方, バンド計算によると, Γ 点に伝導帯下端より 23-25meV だけ上方にスピン軌道分裂 (*so*) バンドがあり[3, 4], この影響も無視できないと思われる。そこで, 今回は, *so* バンドも入れたモデルで Hall 係数 R_H , 導電率 σ および Seebeck 係数 S を計算し, Dyck ら[2]の実験データとのフィッティングを行った。

また, 前報[1]では, Dyck ら[2]に従い, 各伝導帯の Seebeck 係数を $S_{ci} = -(k_B/e)\ln(N_{ci}/n_{ci})$ (n_{ci} は *ci* バンドの電子濃度, N_{ci} は *ci* バンドの多重度も含めた有効状態密度) として計算したが, 今回は, 通常の緩和時間近似の公式に従って計算した。さらに, 緩和時間の計算においては, 前報でも考慮したイオン化不純物散乱と音響フォノン散乱に加え, 今回は無極性および極性光学フォノン散乱も取り入れた。

Dyck ら[2]の Ni 濃度 $x = 0.001$ の Co_{1-x}Ni_xSb₃ 試料についての導電率および 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)および(b)に示す。また, 実線は, 各バンドの寄与で, (b)においては *ib* は $S_{ib}\sigma_{ib}/\sigma$, *c1* は $S_{c1}\sigma_{c1}/\sigma$ 等である。100 K 付近

では導電率, Seebeck 係数とも *so* バンドの寄与が他のバンドと同程度になることがわかる。

- [1] Y. Kajikawa, J. Alloys Compd. **621**, 170 (2015).
- [2] J. S. Dyck *et al.*, PRB **65**, 115204 (2002).
- [3] K. Koga *et al.*, PRB **71**, 155119 (2005).
- [4] S. Sharma and S. K. Pandey, Comp. Mater. Sci. **85**, 340 (2014).

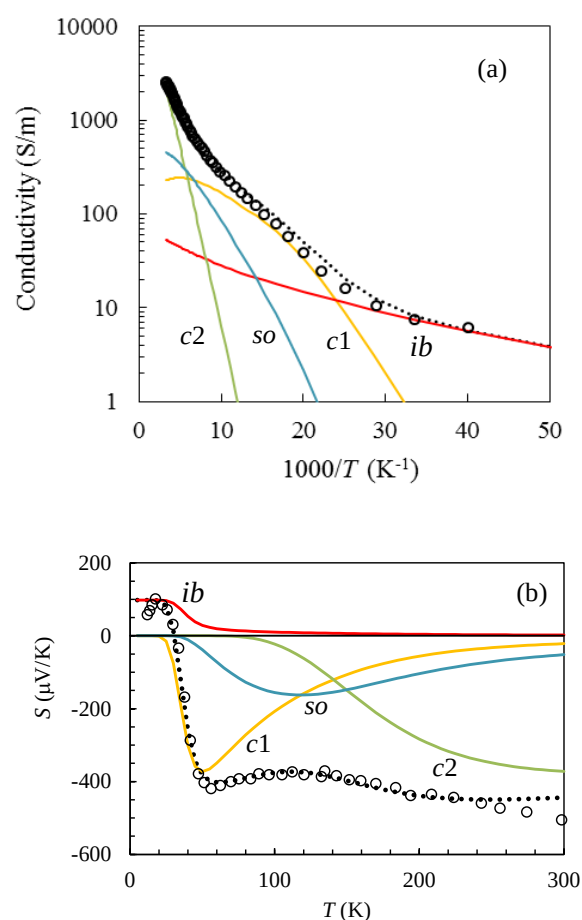


Fig. 1 Comparison between the experimental data [2] and the calculated results of the temperature dependence of (a) conductivity and (b) Seebeck coefficient for the sample of Co_{0.999}Ni_{0.001}Sb₃.