

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 (III) —伝導帯第3バレーと価電子帯の寄与—

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

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/>

室温で弱い n 型の CoSb₃ では、高温になると Hall 係数と Seebeck 係数が正に反転する場合があることが報告されており[1], Wakatsuki ら[2] の無添加 n 型 CoSb₃ でも観測された。本発表では、Wakatsuki ら[2]の n 型 Co_{1-x}Ni_xSb₃ ($x = 0 - 0.05$) の熱電特性に関する 20 - 773 K の実験データを解析し、300 K 以上では伝導帯第3バレーと第3のドナー準位, および価電子帯が重要な役割を演ずることを示す。

バンドモデルとして、 Γ 点における伝導帯 ($c1$), スピン軌道分裂バンド (so) および非放物線の価電子帯 ($v1$) のほか、伝導帯第2および第3バレー ($c2, c3$) と価電子帯第2バレー ($v2$) を仮定した。不純物準位としては、3つのドナー準位 $D1, D2, D3$ と1つの補償アクセプタ準位を考え、 $D1$ 準位は不純物バンド (ib) を形成すると仮定した。伝導帯電子および価電子帯正孔に対する散乱として、イオン化不純物散乱, 音響フォノン散乱, 無極性および極性光学フォノン散乱を考慮して緩和時間を計算し、Hall 係数 R_H , 導電率 σ および Seebeck 係数 S を緩和時間近似[3, 4]により求めた。

Wakatsuki ら[2]の Ni 濃度 $x = 0$ および 0.005 の Co_{1-x}Ni_xSb₃ 試料についての 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、実線および破線は、各バンドの電子および正孔からの寄与で、 ib は $S_{ib}\sigma_{ib}/\sigma$, $c1$ は $S_{c1}\sigma_{c1}/\sigma$ 等

である。300 K 以上では $c3$ バンドの影響が大きいことがわかる。

- [1] T. Caillat, A. Borshchevsky, and J. P. Fleurial, AIP Conf. Proc. **316**, 58 (1994).
- [2] M. Wakatsuki, H. Kitagawa, H. Nagaoka, and Y. Noda, Trans. Mater. Res. Soc. Jpn., **29** (2004) 2841.
- [3] Y. Kajikawa, JAP **115**, 203716 (2014).
- [4] Y. Kajikawa, JAP **117**, 055702 (2015).

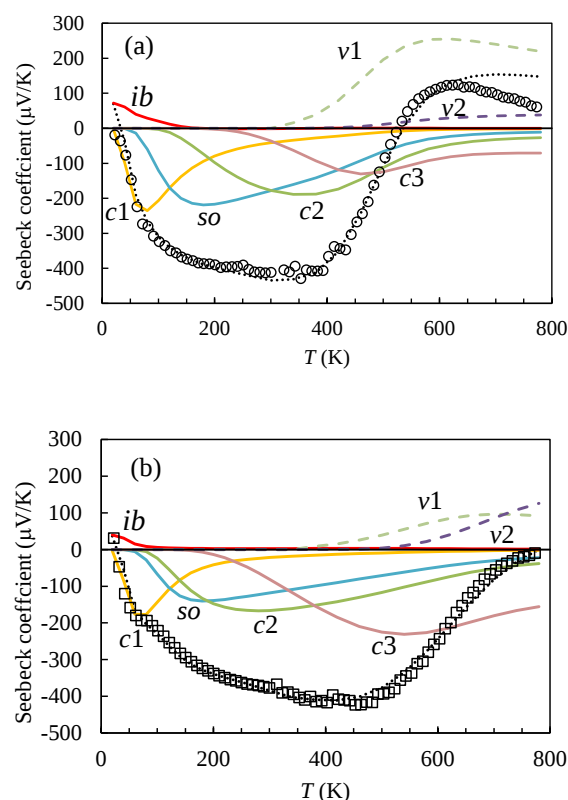


Fig. 1 Comparison between the experimental data [2] and the calculated results of the temperature dependence of Seebeck coefficient for Co_{1-x}Ni_xSb₃ samples with (a) $x = 0$ and (b) $x = 0.005$.