$Co_{1-x}Ni_xSb_3$ 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（IV）―多重バンドのネルンスト係数の表式と $Co_{1-x}Ni_xSb_3$ への応用―

An expression of the Nernst coefficient for a multi-band system and its application to $Co_{1-x}Ni_xSb_3$

○梶川 靖友（島根大 総合理工）

○Y. Kajikawa (Shimane Univ.)

E-mail: kajikawa@riko.shimane-u.ac.jp

n 型 $Co_{1-x}Ni_xSb_3$ では，Γ 点の第 1 伝導帯（*c*1）とスピン軌道分裂バンド（*so*）および Σ 点の伝導帯第 2 バレー（*c*2）に加え，不純物帯(*ib*)が低温での導電率およびゼーベック係数で重要な役割を演ずることを以前示した[1]。一方，n 型 $Co_{0.999}Ni_{0.001}Sb_3$ 試料について，低温でのホール効果およびゼーベック効果測定に加え，ネルンスト効果の測定結果が最近報告された[2]。そこで，今回は，多重バンドでのネルンスト係数の表式を導き，これを n 型 $Co_{0.999}Ni_{0.001}Sb_3$ 試料のネルンスト係数の解析に用いた。

２バンドモデルでのネルンスト係数の表式[3]の自然な拡張として，多重バンドでのネルンスト係数は次のように書ける。

$$Q=\sum_x\left(Q_x^{(1)}+Q_x^{(2)}\right)=\sum_x\frac{\sigma_x}{\sigma}\left[Q_x+\left(S_x-S\right)R_{Hx}\sigma_x\right]$$

ここで，σ_x，R_{Hx}，S_x，および Q_x は，それぞれ x バンドにおける導電率，ホール係数，ゼーベック係数，およびネルンスト係数で，σおよび S は，それぞれ合計の導電率およびゼーベック係数である。この表式からわかるように，Q_x は x バンド内の本来的なネルンスト係数の項 $Q_x^{(1)}$ と x バンド以外のゼーベック係数の合計に比例する項 $Q_x^{(2)}$ とからなる。

本研究では，緩和時間近似[3]により，σ_x，R_{Hx}，S_x，および Q_x（$x = c1$，so，$c2$）を計算するとともに，σ_{ib}，R_{Hib}，S_{ib}，および Q_{ib} については，ホッピング伝導における経験式を用いて Sun ら[2]のσ，R_H，S，および Q の温度依存性の測定結果へのフィッティングを行った。

Sun ら[2]の $Co_{0.999}Ni_{0.001}Sb_3$ 試料についてのネルンスト係数の実験データに対し，計算結果を点線で比較して図 1 に示す。また，各バンドの $Q_x^{(1)}$ および $Q_x^{(2)}$ の計算結果を破線および実線でそれぞれ示す。40K 付近のピークは $Q_{c1}^{(2)}$ によるものであり，80K 付近の肩は $Q_{so}^{(2)}$ によるものであるのに対し，本来的なネルンスト係数の項は $Q_{c1}^{(1)}$ でさえ小さいことがわかる。

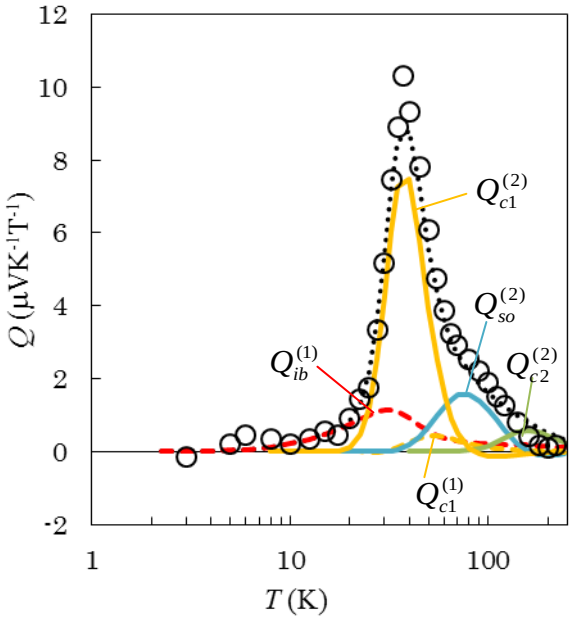

Fig. 1 Comparison of the calculated results with the experimental data [2] of the Nernst coefficient $Q(T)$ for the $Co_{0.999}Ni_{0.001}Sb_3$ sample.

[1]Y. Kajikawa, J. Alloys Compd. **664**, 338 (2016).
[2]P. Sun *et al.*, Nature Commun. **6**, 7475 (2015).
[3]B. M. Askerov, *Electron Transport Phenomena in Semiconductors* (World Scientific, 1994).

© 2016年 応用物理学会