

キャリア散乱過程の温度依存性を考慮した単結晶 Bi ワイヤの輸送係数

Transport coefficient considering temperature dependence of scattering process for single crystal bismuth wire

埼玉大院¹, 山下 大輔¹, 長谷川 靖洋¹

Saitama Univ.¹, Daisuke Yamashita¹, Yasuhiro Hasegawa¹

E-mail: yamashita@env.saitama-u.ac.jp

【背景】

ビスマス(Bi)はキャリア有効質量が自由電子の 10^2 倍程度と小さく、キャリア平均自由行程が 4.2 K で 100 μm 程度と大きいので、数百 nm ~ 数 μm 直径の単結晶 Bi ワイヤにおいても単結晶バルク Bi 材料とは異なる特性を持つ。過去に報告された単結晶 Bi ワイヤの抵抗率 ρ 及び温度係数 dp/dT の測定結果を Fig.1(a)に示した。¹ 温度係数 dp/dT は 50 K 以下で極大値を持っているが、この原因を説明するために不純物の混入や移動度の増大などを考慮したモデル計算が試みられている。一方でキャリア散乱過程の変化は考えられておらず、直前に提案された単結晶 Bi ワイヤの理論モデルにおいても全温度領域で音響フォノン散乱が仮定されてきた。² しかし近年、多結晶バルク Bi 材料において、結晶粒径よりもキャリア平均自由行程が大きくなる 50 K 付近から低温側では、キャリア散乱過程がイオン化不純物散乱を示すことが報告されている。³ また、室温かつ真性条件を仮定した場合に音響フォノン散乱が優位になるバルク Bi 材料とは異なり、キャリア平均自由行程がワイヤ直径方向に制限される単結晶 Bi ワイヤについてもキャリア散乱過程の変化を導入したモデルが必要であることを示唆している。そこで本研究ではキャリア散乱過程の温度依存性を仮定した単結晶 Bi ワイヤの輸送係数モデル計算を行った。

【モデルの概要と抵抗率の計算結果例】

半古典的なモデルで現象を説明するため、3 次元状態密度と緩和時間近似を用いたボルツマン方程式から輸送係数を算出した。ここでキャリア平均自由行程 λ とワイヤ直径 d の大きさによって、 $\lambda \ll d$ では音響フォノン散乱、 $\lambda \gg d$ ではイオン化不純物散乱となるキャリア散乱過程の温度依存性を仮定した。Fig.1(b)には(a)と同じ条件で計算を行った抵抗率 ρ と温度係数 dp/dT の温度依存性を全温度領域で音響フォノン散乱とイオン化不純物散乱を仮定した場合の計算結果と共に示した。キャリア散乱過程の温度依存性を仮定した抵抗率 ρ は 300 K 付近で音響フォノン散乱に近い値を取っているが、ワイヤ径が小さい場合には境界散乱が優位になりイオン化不純物散乱へと遷移していくため、抵抗率 ρ は増大する。また、全温度領域で音響フォノン散乱を仮定した場合、温度係数 dp/dT が 50 K 以下の低温側で上昇しているが、極大値は存在しない。一方でキャリア散乱過程の温度依存性を導入した場合、50 K 以下でイオン化不純物散乱に遷移するため、温度係数 dp/dT は極大値を持つ。したがって、キャリア散乱過程の温度依存性を仮定することで、温度係数 dp/dT が 50 K 以下で極大値を持つことを定性的に説明できる。

【参考文献】

- [1] M. Otsuka, R. Homma, Y. Hasegawa, J. of Electric Materials, Vol.46, No.5, 2976, (2017).
- [2] M. Murata A. Yamamoto, Y. Hasegawa, T. Komine, A. Endo, J. Appl. Phys. 121, 014303 (2017)
- [3] T. Arisaka, M. Otsuka, M. Tokitani, Y. Hasegawa, J. Appl. Phys. 126, 085101 (2019)

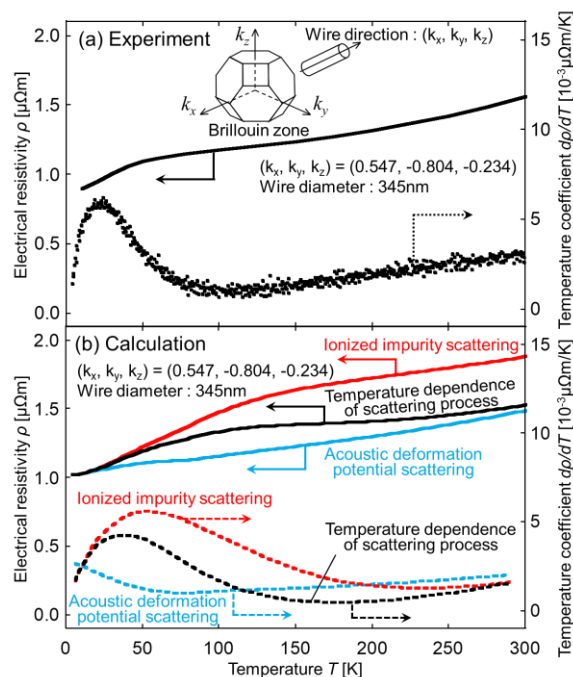


Fig.1 Temperature dependence of resistivity and temperature coefficient for Bi wire (a) from previous report and (b) by calculation. An inset of Fig.1(a) shows a schematic diagram of Brillouin zone and wire longitudinal direction of Bi wire.