

В.А. Ромака^{1,2}, Ю.В. Стадник³, Д. Фрушарт⁴, Я. Тобола⁵

Особливості зонної структури та механізмів електропровідності напівпровідникового твердого розчину $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$

¹Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я. Підстригача НАН України,
вул. Наукова, 3-б, 79060, Львів, Україна;

²Національний університет "Львівська політехніка", вул. Кн. Романа, 1, 79005, Львів, Україна,
E-mail: vrotaaka@polynet.lviv.ua;

³Львівський національний університет ім. І.Франка, вул. Кирила і Мефодія, 6, 79005, Львів, Україна;

⁴Лабораторія кристалографії Національного центру наукових досліджень, BP 166, 38042 Гренобль, Франція;

⁵Науково-технологічний університет Гірничо-металургійної академії, 30-059 Краків, Польща.

Розраховано зонну структуру, розподіл електронної густини (DOS) та досліджено температурні і концентраційні залежності питомого електроопору, коефіцієнту термо-ЕРС та магнітної сприйнятливості напівпровідникового твердого розчину $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$ в температурному інтервалі $80 \div 380$ К. Експериментально виявлено передбачений розрахунками перехід провідності діелектрик-метал (перехід Андерсона).

Ключові слова: напівпровідник, донорна домішка, рівень Фермі, електропровідність.

Стаття постуила до редакції 29.10.2006; прийнята до друку 15.12.2007.

Вступ

Розрахунок електронних структур та експериментальні дослідження структурних, кінетичних, термоелектричних, магнітних та резонансних характеристик інтерметалічних напівпровідників зі структурою типу MgAgAs при легуванні їх значними концентраціями акцепторних і/або донорних домішок ($N_A, N_D \sim 10^{19} \div 10^{21} \text{ см}^{-3}$) дозволили вперше визначити механізми електропровідності для даного класу напівпровідників в широкому концентраційному та температурному інтервалах, встановити роль домішкових зон в провідності згаданих напівпровідників, запропонувати моделі перебудови домішкових зон та сформулювати умови досягнення максимальних значень коефіцієнту термоелектричної потужності Z^* ($Z^* = \alpha^2 \cdot \sigma$, де α – коефіцієнт термо-ЕРС, σ – питома електропровідність) [1-7].

Останній результат є надзвичайно актуальним і з практичної точки зору, оскільки інтерметалічні напівпровідники зі структурою типу MgAgAs є одними з найбільш перспективних на предмет їх використання в якості робочих елементів термоелектричних генераторів струму [8]. В даному контексті запропоновані дослідження виглядають логічними та актуальними особливо з огляду на можливе практичне використання отриманих результатів.

Зробимо зауваження, на яке будемо посилатися при обговоренні результатів експерименту. Технологія отримання інтерметалічних напівпровідників в переважній більшості відомих нам робіт полягає у сплавленні шихти вихідних компонентів з наступним неконтрольованим охолодженням розплаву. При цьому, частково реалізується один з шляхів отримання неупорядкованих (аморфних) твердих тіл [9], що призводить до структурних розупорядкувань, локальним деформаціям і, як наслідок, викликає модуляцію зон неперервних енергій. З іншого боку, в сильно легуваному напівпровіднику енергетична схема через флуктуації значних концентрацій заряджених домішок має схожий вигляд [10].

В запропонованій роботі досліджувався вплив значних концентрацій донорних домішок на зміну електронної структури, поведінку питомого опору (ρ), коефіцієнту термо-ЕРС, магнітної сприйнятливості (χ) та просторове розташування атомів в елементарній комірці інтерметалічного напівпровідника $p\text{-TiCoSb}$ при його легуванні шляхом заміщення атомів Co на Cu . При цьому концентрація донорних домішок змінювалася від $N_D = 1,9 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ ($x = 0,001$) до $N_D = 7,6 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$ ($x = 0,4$).

Методики розрахунку електронної структури $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$ в рамках самоузгодженого методу Корінгі-Кона-Ростокера в наближенні когерентного

потенціалу (KKR-CPA-LDA), отримання зразків, їх структурні дослідження, вимірювання питомого електроопору, коефіцієнту термо-ЕРС по відношенню до міді, магнітної сприйнятливості (метод Фарадея) в області температур 80 ÷ 380 К наведені в [1].

I. Розрахунок електронної структури

На рис. 1 приведені результати розрахунку електронної густини (DOS) для кожного компоненту

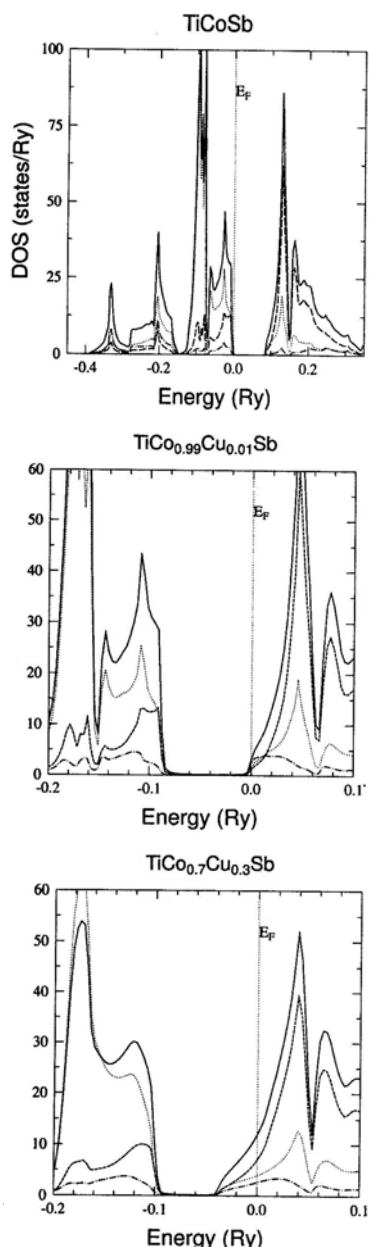


Рис. 1. Розподіл електронної густини (DOS) в $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$. Сумарний DOS – суцільна лінія, вклади атомів Ti, Co та Sb – пунктир, крапки та шрих-пунктир, відповідно.

та сумарний розподіл DOS для різних значень x твердого розчину $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$. З розрахунків слідує, що не леговані зразки TiCoSb є напівпровідниками, в

яких енергетична щілина (E_g) між зоною провідності та валентною зоною утворюється в результаті сильної гібридизації d -станів перехідних елементів (Ti та Co): електронна густина зони провідності визначається головним чином d -станами Ti, в той час як валентна зона – d -станами Co, які перекриваються з d -станами Ti та p -станами Sb.

Як слідує з аналізу дисперсійних залежностей $E(k)$ (рис. 2), в інтерметалічному напівпровіднику

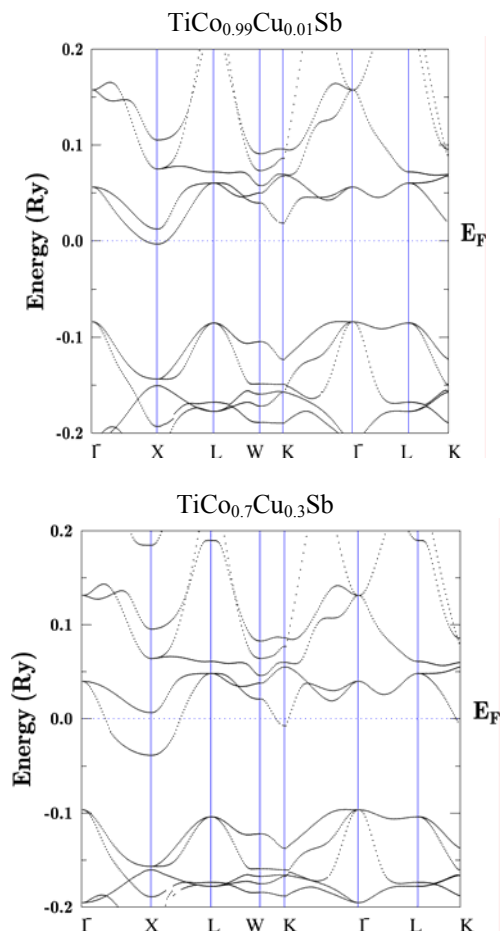


Рис. 2. Зонна структура та положення рівня Фермі в $\text{TiCo}_{0.99}\text{Cu}_{0.01}\text{Sb}$ та $\text{TiCo}_{0.7}\text{Cu}_{0.3}\text{Sb}$.

TiCoSb енергетична щілина з'являється між точками Γ та X зони Бріллюена. Величина енергетичної щілини $E_g \approx 1$ eV. Рівень Фермі (E_F) в напівпровіднику TiCoSb розташовується в забороненій зоні поблизу стелі валентної зони. Отриманий результат для TiCoSb співпадає з раніше отриманими за допомогою методів псевдопотенціалу та CPA-LDA [5].

Легування інтерметалічного напівпровідника TiCoSb донорними домішками Cu призводить до дрейфу E_F в напрямку зони провідності (рис. 1,2). Розрахунки показують, що вже при $x \approx 0,01$ рівень Фермі розташовується на краю рухливості зони провідності. Подальше збільшення концентрації донорних домішок супроводжується входженням E_F в зону провідності та дрейфом в зоні неперервних енергій. Для концентрацій донорних домішок, що відповідають складу $\text{TiCo}_{0.7}\text{Cu}_{0.3}\text{Sb}$, рівень Фермі

розташовується глибоко в зоні провідності (рис. 1, 2). Розрахунок положення E_F та розподілу електронної густини при умові повної заміни в сполуці TiCoSb атомів Co на Cu (гіпотетична сполука TiCuSb) призводить до зникнення забороненої зони в результаті перекриття зони провідності та валентної зони – утворення металу з властивим йому розташуванням рівня Фермі.

Як слідує з рис. 3, вклад різних компонентів напівпровідникового твердого розчину заміщення $TiCo_{1-x}Cu_xSb$ у сумарну величину електронної густини на рівні Фермі ($n(E_F)$) є різним. Введення в

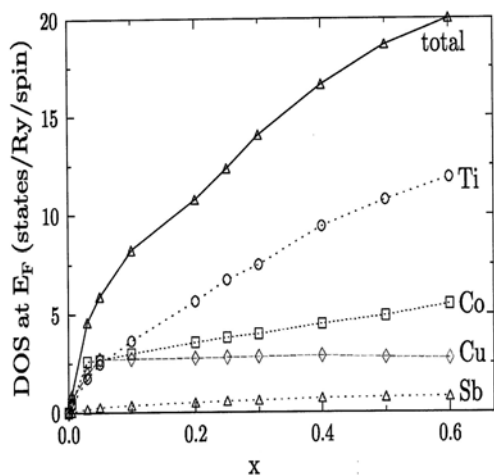


Рис. 3. Вклад різних компонентів напівпровідникового твердого розчину $TiCo_{1-x}Cu_xSb$ у сумарну величину електронної густини на рівні Фермі.

напівпровідник TiCoSb вже незначних концентраціях домішок Cu призводить до різкого збільшення $n(E_F)$ головним чином через вклад d -станів Cu. При збільшенні концентрації домішок Cu, що відповідають складам $TiCo_{1-x}Cu_xSb$, $x > 0,1$, вклад d -станів атомів Ti та Co в $n(E_F)$ збільшується, в той же час як вклад d -станів атомів Cu практично не змінюється.

Розрахунки показують, що найбільша зміна густини станів на рівні Фермі при легуванні інтерметалічного напівпровідника TiCoSb домішками Cu має місце при концентраціях домішок, що відповідають складам $TiCo_{1-x}Cu_xSb$, $x < 0,1$, що узгоджується з результатами, представленими на рис. 3.

З аналізу результатів, представлених на рис. 1 – 3, для випадку експериментальних досліджень зразків TiCoSb можна прогнозувати, що оскільки E_F в TiCoSb розташовується поблизу валентної зони, то ми маємо справу з аналогом напівпровідника діркового типу провідності, в якого рівень Фермі фіксується кулонівською щільною домішковою акцепторної зони. В такому випадку, при дослідженні коефіцієнту термо-ЕРС повинна реалізуватися ситуація, при якій $\alpha > 0$.

Далі, оскільки рівень Фермі в $TiCo_{1-x}Cu_xSb$, $x < 0,01$, розташовується поза зонами неперервних енергій, електропровідність напівпровідника при

низьких температурах може носити активаційний характер – стрибковий механізм електропровідності по домішковій зоні (до металізації провідності в домішковій зоні [9]) та активація носіїв струму в зоні неперервних енергій та на край рухливості зони провідності. При $x \geq 0,01$, коли E_F фіксується краєм рухливості зони провідності чи входить в зону неперервних енергій, дрейфуючи в ній, провідність $TiCo_{1-x}Cu_xSb$ буде визначатися вільними електронами в досліджуваному температурному інтервалі.

Таким чином, легування інтерметалічного напівпровідника TiCoSb домішками Cu призведе до зміни механізмів провідності – від активаційного до металічного (реалізація переходу Андерсона [10]), що зумовлюється перебудовою енергетичного спектру напівпровідника та дрейфом рівня Фермі від вершини зони провідності через заборонену зону з наступним входженням в зону та дрейфом по зоні провідності.

II. Результати експерименту та їх обговорення

Рентгенівські фазовий та структурний аналізи досліджуваних зразків підтвердили, що всі зразки $TiCo_{1-x}Cu_xSb$ є однофазними, а розподіл атомів в них відповідає структурному типу MgAgAs (просторова група $F\bar{4}3m$): 4Co в 4(a) 0 0 0 (Co +Cu); 4Sb в 4(c) $\frac{1}{4} \frac{1}{4} \frac{1}{4}$; 4 Ti в 4(d) $\frac{3}{4} \frac{3}{4} \frac{3}{4}$.

Температурна залежність питомого електроопору не легованого зразка p -TiCoSb (рис. 4) носить

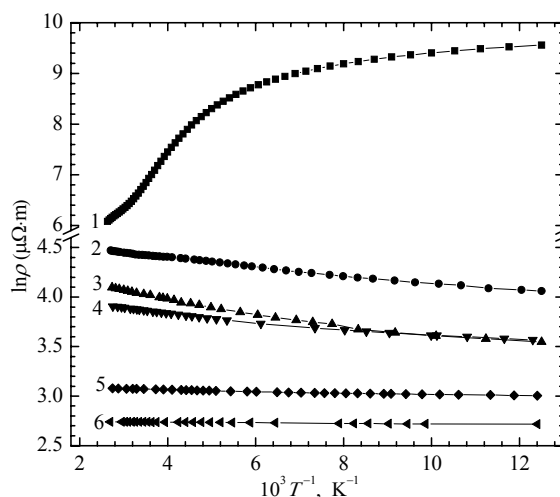


Рис. 4. Температурні залежності питомого електроопору (ρ) $TiCo_{1-x}Cu_xSb$ для різних концентрацій домішок, що відповідають складам x : 1- 0; 2 - 0,001; 3 – 0,005; 4 – 0,02; 5 – 0,3; 6 – 0,4.

активаційний характер. На залежності $\ln \rho(1/T)$ мають місце кілька активаційних ділянок, які для випадку слабо легованих напівпровідників, в яких відсутні модуляції зон неперервних енергій, можна пов'язати з активацією електронів з E_F в

нелокалізовані стани зони провідності (високі температури), активацією електронів з E_F на край рухливості зони провідності (проміжні температури) та стрибковою провідністю (область низьких температур).

Висновок про напівпровідниковий характер провідності p -TiCoSb підтверджується також температурною залежністю коефіцієнту термо-ЕРС

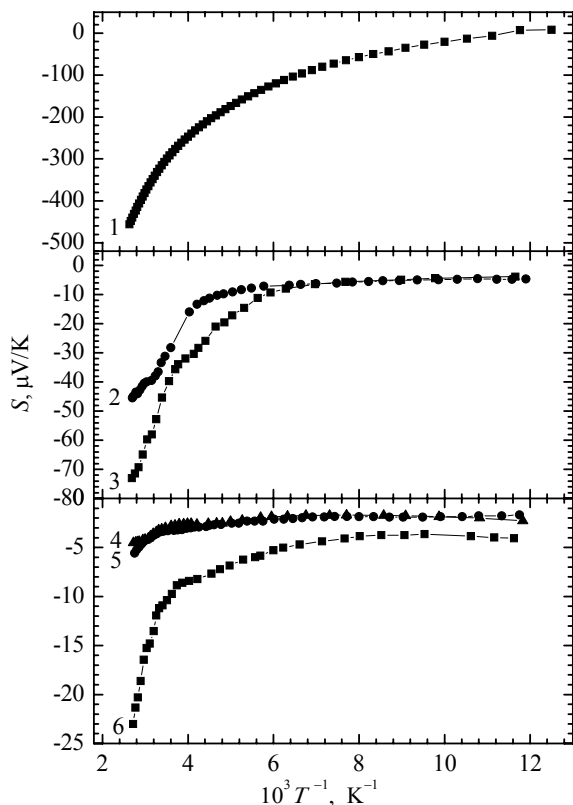


Рис. 5. Температурні залежності коефіцієнту термо-ЕРС (α) $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$ для різних концентрацій донорних домішок, що відповідають складам x : 1 – 0; 2 – 0,001; 3 – 0,005; 4 – 0,02; 5 – 0,3; 6 – 0,4.

(рис. 5). Додатний знак коефіцієнту термо-ЕРС при $T \leq 85 \text{ K}$ і від’ємний при $T > 85 \text{ K}$ свідчить, що досліджуваний зразок є сильно компенсованим і містить значні концентрації неконтрольованих донорних та акцепторних домішок. Зауважимо, що рентгенівські фазовий та структурний аналізи не виявили у зразку іншої фази окрім TiCoSb.

З високотемпературних ділянок залежностей $\ln \rho(1/T)$ та $\alpha(1/T)$ для p -TiCoSb визначені величини енергій активації ε_i^p та ε_i^α , відповідно, які в слабо легованих напівпровідниках дають величину енергетичного бар’єру між дном зони провідності та положенням рівня Фермі, який зафіксований кулонівською щільною домішкової зони. Для p -TiCoSb розрахунки дають: $\varepsilon_i^p \approx 106 \text{ meV}$ та $\varepsilon_i^\alpha \approx 196 \text{ meV}$. З точки зору фізики слабо легованих напівпровідників отриманий результат є протиріччивим та незрозумілим.

Легування p -TiCoSb донорними домішками, що відповідають складам $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$ ($x \geq 0,001$), призводить до ліквідації активаційних ділянок на

залежностях $\ln \rho(1/T)$ і можемо припустити, що провідність напівпровідника набуває типово металічного характеру вже при найменш досяжних в експерименті концентраціях донорних домішок Cu.

З іншого боку, як слідує з рис. 5, для досліджуваних зразків $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$ $0 \leq x \leq 0,02$ на залежностях $\alpha(1/T)$ мають місце ярко виражені активаційні ділянки. Крім того, легування напівпровідника p -TiCoSb донорними домішками призводить до зміни типу провідності з діркового на електронний при $T \leq 85 \text{ K}$. Це означає, що відбулася перекомпенсація напівпровідника і, як показує розрахунок електронної структури $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$, має місце дрейф рівня Фермі в напрямку зони провідності з наступним входженням в зону провідності.

Таким чином, отримуємо наступний протиріччивий та незрозумілий результат: залежності $\ln \rho(1/T)$ вказують на металічний механізм провідності сильно легованого напівпровідника $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$, а $\alpha(1/T)$ – напівпровідниковий.

З залежностей $\alpha(1/T)$ нами визначені величини енергій активації для різних концентрацій донорних домішок, що відповідають складам твердого розчину $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$: для $x = 0$ $\varepsilon_i^\alpha \approx 196 \text{ meV}$, $x = 0,001$ $\varepsilon_i^\alpha \approx 40 \text{ meV}$, $x = 0,005$ $\varepsilon_i^\alpha \approx 26 \text{ meV}$, $x = 0,02$ $\varepsilon_i^\alpha \approx 25 \text{ meV}$. Монотонне зменшення величини енергії активації з ростом концентрації донорних домішок для слабо легованих напівпровідників вказувало б на дрейф положення рівня Фермі в напрямку зони провідності, що повністю співпадає з результатами розрахунків.

Якісне обговорення отриманих експериментальних результатів, яке знімить протиріччя почнемо з того, що в силу зробленого вище зауваження щодо особливостей отримання інтерметалічних напівпровідників та значних концентрацій легуючих домішок, введених в напівпровідник, в досліджуваних зразках одночасно мають місце часткові розупорядкування [9] та флуктуації заряджених домішок [10], які викликають модуляцію зон неперервних енергій. Саме це, на нашу думку, є головною причиною спостережуваних відмінностей як між характером залежностей $\ln \rho(1/T)$ та $\alpha(1/T)$, а також значної різниці між ε_i^p та ε_i^α для не легованого напівпровідника.

Приймаючи підходи авторів [10,11] для опису сильно легованих та сильно компенсованих напівпровідників, для початку визначимо принципову відмінність між електрокінетичним явищем провідності та термоелектричним – коефіцієнтом термо-ЕРС для випадку сильно легованого напівпровідника, в якого має місце модуляція зон неперервних енергій. Якщо в слабо легованому напівпровіднику на носії струму діє лише одна зовнішня сила – градієнт температури ∇T , то в напрямку $-\nabla T$ виникає потік зарядів, який в силу стаціонарності системи, компенсується іншим потоком, який виникає в кристалі під впливом створеного в кристалі поля E , а створена електрорушійна сила є коефіцієнт термо-ЕРС.

У випадку сильного легування напівпровідника крупномасштабні флуктуації концентрації домішки створюють потенціал, що набагато перевищує різницю потенціалів між двома точками в напівпровіднику при умові, що між ними підтримується градієнт температури. Таким чином, вимірювана величина ε_1^α в сильно легovanому та компенсованому напівпровіднику співмірна усередненій амплітуді модуляції зон неперервних енергій.

Електропровідність напівпровідника в основному визначається концентрацією носіїв та їх рухливістю та існує лише при наявності зовнішнього електричного поля. Таким чином, вимірювана величина ε_1^ρ в сильно легovanому та компенсованому напівпровіднику співмірна з енергетичною щільною між рівнем Фермі та рівнем протікання.

Як висновок, в сильно легovanому та компенсованому напівпровіднику величина ε_1^α змінюється на величину зміни амплітуди модуляції, а величина ε_1^ρ - на величину зміни взаємного розташування між рівнем Фермі та рівнем протікання.

Така логіка приводить до того, що величина ε_1^α повинна бути більшою за ε_1^ρ , що ми і спостерігаємо в експерименті ($\varepsilon_1^\rho \approx 106$ меВ та $\varepsilon_1^\alpha \approx 196$ меВ). Далі, при введенні в напівпровідник незначних концентрацій донорних домішок, концентрація яких не призводить до перекомпенсації напівпровідника з *p*- на *n*-тип провідності, збільшується ступінь компенсації напівпровідника і рівень Фермі змінюється, як $n^{2/3}$, а потенціальний рельєф зростає, оскільки електронне екранування послаблюється [10]. При повній компенсації напівпровідника ($N_A \approx N_D$) амплітуда модуляції зон неперервних енергій є максимальною і рівна половині ширини забороненої зони напівпровідника, рівень Фермі розміщується посередині забороненої зони [11]. В такій ситуації величина енергії активації ε_1^ρ з рівня Фермі на рівень протікання є максимальною і дорівнює тій же половині ширини забороненої зони. Той факт, що не легований напівпровідник *p*-TiCoSb змінює знак коефіцієнта термо-ЕРС з додатнього на від'ємний в досліджуваному інтервалі температур свідчить про близькість концентрацій акцепторів та донорів в напівпровіднику, а значить ступінь компенсації такого не легovanого напівпровідника є максимально високим. В свою чергу амплітуда модуляції зон неперервних енергій є для вимірюваних зразків найбільшою саме для не легovanого зразка (~ 196 меВ). Наявність ективіаційної ділянки на залежності $\ln \rho(1/T)$ в не легovanому *p*-TiCoSb вказує, що рівень протікання розташовується вище рівня Фермі на величину ~

106 меВ.

При перекомпенсації напівпровідника, подальше збільшення концентрації донорних домішок тепер вже в напівпровіднику електронного типу провідності, призведе до зменшення ступеню компенсації, збільшення енергії Фермі, як $n^{2/3}$, а потенціальний рельєф зменшиться через зменшення радіусу електронного екранування r_0 . Саме таку динаміку зміни амплітуди модуляції зон неперервних енергій ми спостерігаємо в експерименті ($x = 0,001$ $\varepsilon_1^\alpha \approx 40$ меВ, $x = 0,005$ $\varepsilon_1^\alpha \approx 26$ меВ, $x = 0,02$ $\varepsilon_1^\alpha \approx 25$ меВ). Відсутність активаційних ділянок на залежностях $\ln \rho(1/T)$ для всіх легovanних напівпровідників свідчить, що рівень Фермі та рівень протікання помінялися місцями – реалізувався перехід провідності діелектрик-металл (перехід Андерсона). Такий перехід, зокрема, був передбачений розрахунками.

З наведеного слідує, що не існує протиріч як в поведінці залежностей $\ln \rho(1/T)$ та $\alpha(1/T)$, так і величин енергій активації, отриманих з цих залежностей, оскільки у випадку сильно легovanних та компенсованих напівпровідників вони описують різні фізичні процеси.

Таким чином, представлені результати свідчать, що спостережуваний перехід провідності діелектрик-метал в інтерметалічних напівпровідниках *p*-TiCoSb при легуванні донорними домішками Cu є переходом Андерсона і відбувається при набагато менших концентраціях донорних домішок в порівнянні з раніше дослідженими випадками [4]. Співпадіння результатів теоретичних розрахунків та основних результатів експерименту свідчить про адекватність запропонованої моделі зонної структури інтерметалічного напівпровідника TiCo_{1-x}Cu_xSb. У випадках, де такого співпадіння не спостерігається, повинні бути внесені корективи в модель, зокрема врахування модуляції зон неперервних енергій, що є предметом наступних досліджень.

Робота виконана в рамках грантів Національної академії наук України (№ 0106U000594) та Міністерства освіти і науки України (№ 0106U001299, № 0106U005428).

Ромака В.А. – к. фіз.-мат. н., доцент, ст.н.с.;
Стадник Ю.В. – к. х. н., пров. н. с.;
Фрушарт Д. – доктор фізики, професор;
Тобола Я. – доктор фізики, професор.

- [1] В.А. Ромака, Ю.В. Стадник, М.Г. Шелепина, Д. Фрушарт, Л.П. Ромака, Ю.К. Гореленко. Особенности перехода проводимости металл-диэлектрик в узкощелевых полупроводниках структурного типа MgAgAs // *ФТП*, **40**(2), сс. 136-141 (2006).
- [2] Yu.V. Stadnyk, V.A. Romaka, Yu.K. Gorelenko, L.P. Romaka, D. Fruchart, V.F. Chekurin. Metal-insulator transition induced by changes in composition in Zr_{1-x}Sc_xNiSn solid solution range // *Journal of Alloys and Compounds*, **400**, pp. 29-32 (2005).

- [3] В.А. Ромака, М.Г. Шеляпина, Ю.К. Гореленко, Д. Фрушарт, Ю.В. Стадник, Л.П. Ромака, В.Ф. Чекурин. Особенности механизмов проводимости сильно легированных интерметаллических полупроводников n -ZrNiSn // *ФТП*, **40**(6), сс. 676-682 (2006).
- [4] В.А. Ромака, М.Г. Шеляпина, Ю.В. Стадник, Д. Фрушарт, Л.П. Ромака, В.Ф. Чекурин. Роль примесной зоны при переходе проводимости диэлектрик-металл при изменении состава сильно легированного и компенсированного полупроводникового твердого раствора $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$. Донорные примеси // *ФТП*, **40**(7), сс. 796-801 (2006).
- [5] L.P. Romaka, M.G. Shelyapina, Yu.V. Stadnyk, D. Fruchart, V.A. Romaka. Pecularity in metal-insulator transition due to composition change in semiconducting $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$ solid solution. I. Electronic structure calculations // *Journal of Alloys and Compounds*, **416**, pp. 46-50 (2006).
- [6] Yu.V. Stadnyk, V.A. Romaka, M.G. Shelyapina, D. Fruchart, Yu.K. Gorelenko, L.P. Romaka, A.V. Tkachuk, V.F. Chekurin. Impurity band effect on $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$ conduction. Donor impurities // *Journal of Alloys and Compounds*, **421**, pp. 19-23 (2006).
- [7] В.А. Ромака, Д. Фрушарт, М.Г. Шеляпина, Ю.В. Стадник, В.Ф. Чекурин, Л.П. Ромака, Ю.К. Гореленко. Условия достижения максимальных значений коэффициента термоэлектрической мощности в интерметаллических полупроводниках структурного типа MgAgAs // *ФТП*, **40**(11), сс. 1309-1315 (2006).
- [8] G.S. Nolas, J. Poon, M. Kanatzidis. Recent Developments in Bulk Thermoelectric Materials // *MRS Bulletin*, **8**(3), pp. 199-205 (2006).
- [9] Н. Мотт, Э. Дэвис. *Электронные процессы в некристаллических веществах*. Мир, М. 368 с. (1982).
- [10] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. *Электронные свойства легированных полупроводников*. Наука, М. 416 с. (1979).
- [11] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. Полностью компенсированный кристаллический полупроводник как модель аморфного полупроводника // *ЖЭТФ*, **62**, с. 1156-1168 (1972).

V.A. Romaka^{1,2}, Yu.V. Stadnyk³, D. Fruchart⁴, J. Tobola⁵

Pecularity in Band Structure and Conductivity Mechanisms in Heavily-Doped $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$ Solid Solution

¹*Ya. Pidstryhach Institute of Applied Problems of Mechanics and Mathematics*

National Academy of Sciences of Ukraine, 79060 Lviv, Ukraine;

²*National University "Lvivska Politechnika", 79013 Lviv, Ukraine;*

³*Ivan Franko Lviv National University, 79005 Lviv, Ukraine;*

⁴*Laboratoire de Cristallographie, CNRS, 38042 Grenoble, France;*

⁵*AGH University of Science and Technology, 30-059 Krakow, Poland;*

Calculation of the band structure and distribution of electronic density (DOS) of the TiCoSb intermetallic semiconductor were performed at it doping with donor impurities by way of substituting Co atoms by Cu ones. Temperature and concentration dependences of electro-conductivity, thermopower of p - TiCoSb semiconductor were investigated at various concentrations of donor impurities in the 80 - 380 K temperature range. An insulator-metal transition of the conduction forecasted by the model calculation in the $\text{ZrNi}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sn}$ solid solution alloys (Anderson transition) is caused by the displacement of the Fermi level from the impurity donor band to the conduction band as the donor impurity concentration increases.

Key words: semiconductor, donor impurity, Fermi level, electrical conduction.