

МЕХАНІЗМИ АКЦЕПТОРНОГО ЛЕГУВАННЯ НАТРІЄМ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНОГО ПЛЮМБУМ ТЕЛУРИДУ PbTe:Na

Н.І. Дикун

*Кафедра фізики і хімії твердого тіла, Прикарпатський національний
університет імені Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57,
Івано-Франківськ, 76025, Україна, E-mail: freik@pi.if.ua*

Покращення термоелектричних параметрів середньотемпературного матеріалу PbTe можливе за рахунок збільшення коефіцієнту термо-ЕРС α , питомої електропровідності σ та зменшення теплопровідності χ . Проте усі ці параметри пов'язані між собою фізичною природою матеріалу: зростання α зумовлює зменшення σ і ріст χ через спад концентрації заряду. Перспективними шляхами вирішення даної проблеми є легування матеріалу, зокрема натрієм. Відомо, що атоми Na проявляють акцепторну дію, проте кристалохімічний механізм цього процесу носить дискусійний характер і до кінця не в'яснений.

У даній роботі розглянуто дві моделі, що пояснюють акцепторну дію натрію. За однією з них, при введенні Na разом із рівним числом атомів халькогену два атоми Натрію створюють повністю насичені зв'язки тільки із одним атомом Телуру за схемою: $2\text{NaTe} = \text{Na}_2\text{Te} + \text{Te}$. Ненасичені зв'язки іншого атома Te і обумовлюють акцепторну дію, створюючи дві дірки у валентній зоні. Кристалохімічна аналогія цього механізму полягає в утворенні негативних двозарядних вакансій у катіонній підгратці. Що стосується розміщення атомів Na , то найбільш імовірно вони займають міжвузлові положення і утворюють із вакансіями Плюмбуму нейтральні комплекси $\left[V_{\text{Pb}}^{2-} (\text{Na}_i^{1+})_2 \right]^{\times}$.

Акцепторну дію натрію у плюмбум телуриді в даній роботі, крім цього, пояснено також утворенням нейтрального комплексу іонізованим Na_i^{1+} із вакансією Плюмбуму при наявності нейтральних вакансій Телуру V_{Te}^{\times} .

Використовуючи запропоновані кристалоквазіхімічні формули для різних механізмів легування кристалів розраховано як концентрацію самих дефектів N_i , так і холлівську концентрацію носіїв струму n_H , а також їх залежності від вмісту легуючої домішки (x) та величини локалізації дірок (μ).

На основі аналізу отриманих даних зроблено висновок, що більш обґрунтованою є модель компенсації з утворенням нейтральної вакансії телуру.

*Робота виконується в межах проекту кафедри фізики і хімії
твердого тіла (державний реєстраційний номер 0107U006768).*