

PACS: 66.35.+a; 74.25.fg

ISSN 1729-4428 (Print)
ISSN 2309-8589 (Online)

Т. Потятинник, О. Матківський, В. Говдяк, І. Горічок

Визначення енергії Фермі електронів у телуриді свинцю на основі вимірювань коефіцієнта Зеебека

Карпатський національний університет імені Василя Стефаника, м. Івано-Франківськ, Україна

Проаналізовано можливості використання моделі домінування одного механізму розсіювання носіїв для розрахунку енергії Фермі μ використовуючи експериментальні значення коефіцієнта Зеебека S_{exp} . Проведено розрахунок питомої електропровідності n -PbTe:I в наближенні часу релаксації з одночасним врахуванням багатьох механізмів розсіювання. Отримані при цьому значення енергії Фермі співставлено з величинами розрахованими як $\mu(S_{\text{exp}})$. Досліджено вплив поправок на блохівський вигляд хвильових функцій та екранування носіями розсіюючих центрів на числові значення рухливостей і визначених в моделі домінування одного механізму розсіювання числових значень енергій Фермі.

Ключові слова: телурид свинцю, термоелектричні властивості, механізми розсіювання, енергія Фермі.

Подано до редакції 24.02.2025; прийнято до друку 10.09.2025.

Вступ

Аналіз електронної підсистеми термоелектричних матеріалів є важливим аспектом дослідження нових та модифікації властивостей відомих напівпровідників [1-3]. Одним з найбільш актуальних питань є визначення домінуючого механізму розсіювання носіїв та розрахунок енергії Фермі μ . Параметр μ надалі може бути використаний для обчислення практично всіх термоелектричних параметрів матеріалу, зокрема, коефіцієнта Зеебека S , концентрація носіїв заряду n , рухливості носіїв u , числа Лоренца L_0 .

Якщо з вимірювань ефекту Холла відома концентрація носіїв n , то μ легко може бути розрахована у випадку параболічної зони напівпровідників з невідродженою статистикою:

$$n = N_C \exp\left(\frac{\mu}{k_0 T}\right). \quad (1)$$

Тут N_C – густина станів. Сама концентрація носіїв n розраховується з експериментально виміряної сталої Холла R_H :

$$n_H = \frac{A}{e_0 R_H}, \quad (2)$$

де A – холл-фактор. Для невідроджених матеріалів з параболічними зонами, зазвичай, холл-фактор близький до одиниці. Але, як відомо, найкращі термоелектричні матеріали переважно характеризуються непараболічними зонами і є слабо вироджені [1-3]. Тоді для коректного розрахунку холл-фактора необхідно враховувати механізми розсіювання носіїв [4]. Це все ускладнює задачу визначення μ . Крім того, сама постановка експерименту з дослідження ефекту Холла при високих T є відносно складною задачею.

З огляду на сказане, в літературі часто використовується інший підхід розрахунку μ . А саме визначення μ з експериментальних значень коефіцієнта Зеебека S [5-7]. Вимірювання S значно простіший експеримент ніж n , особливо при високих T , який, поряд з вимірюванням питомої електропровідності, завжди здійснюється для оцінки термоелектричної добротності. Для параболічної зони і не виродженої статистики S і μ пов'язані простою залежністю:

$$S = -\frac{k_0}{e_0} [r + 2 - \eta], \quad (3)$$

де $\eta = \mu/k_0 T$ – приведена енергія Фермі, r – параметр

розсіювання ($r = 0$ - scattering on the deformation potential of acoustic (DA) and optical (DO) phonons; $r = 1$ - polarization scattering on the optical phonons (PO); $r = 2$ - scattering on ionized defects (ID)) [4].

При відомому значенні r розрахувати μ з S буде і технічно простіше. Крім того за такої схеми не потрібно значення ефективної маси носіїв, як у випадку використання формули (1), яке для багатьох нових термоелектричних матеріалів не відоме з достатньою точністю.

Проблемою залишається визначення параметра r . Для багатьох матеріалів відомі загальні тенденції в реалізації тих чи інших механізмів за різних умов. Зокрема для сполук A^4B^6 зазвичай домінує розсіювання деформаційному потенціалі акустичних фононів (DA). За певних умов суттєвим може виявитись вплив деформаційного потенціалу оптичних фононів (DO) та поляризаційний потенціал оптичних фононів (PO). Зокрема, згідно [8] при $n \geq 10^{19} \text{ см}^{-3}$ за кімнатних температур внески PO, DO, DA є співмірними. А саме такі концентрації характерні для ефективних термоелектричних параметрів.

Врахування кількох механізмів при розрахунку S є відносно складною задачею. Тому зазвичай розрахунок μ проводять в наближенні домінування DA [5-7], а внеском інших механізмів нехтують. В даній роботі ми поставили завдання проаналізувати можливі похибки при оцінці електронної теплопровідності та питомої електропровідності при такому підході. Для цього ми розраховували μ як функцію S_{exp} для випадків домінування кожного з механізмів (DA, DO, PO). А також ми розраховували μ як функцію σ_{exp} для тих же механізмів і спів ставили μ_S і μ_σ . Крім того, було отримано μ підгонкою σ до σ_{exp} при одночасному врахуванні всіх трьох механізмів в наближенні часу релаксації. Отримані таким чином результати співставлень між собою, що дозволило зробити висновки про точність різних підходів до визначення енергії Фермі μ .

I. Розрахунок та результати

Розрахунок енергії Фермі на основі експериментальних значень коефіцієнта Зеебека здійснювали підгонкою розрахованого значення S до експериментального S_{exp} , варіюючи μ . При цьому, розрахунок S здійснювали згідно виразу, що враховує можливість виродження носіїв:

$$S = -\frac{k_0}{e_0} \left[\frac{I_{r+1,2}^1(\eta, \beta)}{I_{r+1,2}^0(\eta, \beta)} - \eta \right]. \quad (4)$$

Тут $I_{n,k}^m(\eta, \beta)$ інтеграл Фермі:

$$I_{n,k}^m(\eta, \beta) = \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) \frac{x^m (x + \beta x^2)^n dx}{(1 + 2\beta x)^k}, \quad (5)$$

де $x = \frac{E}{k_0 T}$ - приведена енергія, $\eta = \frac{\mu}{k_0 T}$ - приведена енергія Фермі, $\beta = \frac{k_0 T}{E_g}$ - показник непараболічності, $f_0 = \frac{1}{1 + e^{x - \eta}}$ - функція Фермі.

Отримані описаним способом значення μ_S використали для розрахунку питомої електропровідності:

$$\sigma = u n e, \quad (6)$$

де u - рухливість носіїв.

Концентрація носіїв визначалась як:

$$n = \frac{(2m_{d,0} k T)^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2 \hbar^3} I_{3/2,0}^0(\eta, \beta), \quad (7)$$

де $m_{d,0}$ - ефективна маса густини станів на дні зони, а рухливість [4]:

$$u = e \frac{\tau_0(T)}{m_{n,0}} \cdot \frac{I_{r+1,2}^0(\eta, \beta)}{I_{3/2,0}^0(\eta, \beta)}. \quad (8)$$

Тут $m_{n,0}$ - ефективна маса на дні зони, τ_0 - час релаксації носіїв. У випадку розсіювання на деформаційному потенціалі акустичних фононів:

$$\tau_{0r}(T) = \frac{2\pi \hbar^4 \rho v_0^2}{(2m_{n,0} k_0 T)^{\frac{3}{2}} E_1^2} \quad (9)$$

де $\rho = 8,24 \text{ г/см}^3$ [8], $E_1 = 15 \text{ eV}$ [8], $v_0 = 1,92 \text{ км/с}$ [9], $r = 0$.

При розсіюванні на деформаційному потенціалі оптичних фононів (для $k_0 T \gg \hbar \omega_0$):

$$\tau_{0r}(T) = \frac{2}{\pi} \left(\frac{\hbar \omega_0}{E_0} \right)^2 \frac{\hbar^2 a^2 \rho}{(2m_{n,0} k_0 T)^{\frac{3}{2}}}, \quad (10)$$

де $\hbar \omega_0 = k \theta$ ($\theta = 157,8 \text{ К}$ [10, 11]), $a = 6,461 \text{ А}$ [8], $E_0 = 26 \text{ eV}$ [8], $r = 0$.

При розсіюванні на поляризаційному потенціалі оптичних фононів (для $k_0 T > \hbar \omega_0$):

$$\tau_{0r}(T) = \frac{\hbar^2}{e^2 \sqrt{2m_n k_0 T} \left(\frac{1}{\chi_\infty} - \frac{1}{\chi_0} \right)}, \quad (11)$$

де $\chi_\infty = 32,6$ [8]; $\chi_0 = 400$ [8]; $r = 1$.

При розрахунку для всіх механізмів розсіювання враховувались (у двозонному наближенні) поправки на блохівський вигляд хвильових функцій, а для полярних оптичних фононів - додаткова поправка на екранування розсіюючих центрів вільними носіями заряду.

Згідно [4], ця поправки для акустичних фононів визначається як:

$$F_{ak}(k) = 1 - \frac{10}{3} L + \left[\frac{191}{60} + \frac{11}{60} \left(\frac{v_L}{v_T} \right)^2 \right] L^2, \quad (12)$$

де v_L та v_T - поздовжня та поперечна компонента швидкості звуку. При розсіюванні на деформаційному потенціалі оптичних фононів [4]:

$$F_{KP} = 1 - \frac{8}{3} L + \frac{13}{6} L^2 \quad (13)$$

А при розсіюванні на поляризаційному потенціалі оптичних фононів [4]:

$$F'_{PO} = 1 - \frac{2}{\xi} \ln(1 + \xi) + \frac{1}{1 + \xi} - \frac{1}{2} (4L - L^2) B + L^2 C \quad (14)$$

$\xi = (2kr_0)^2$, де k – хвильове число, r_0 – радіус екранування.

У наведених формулах:

$$L = \frac{E}{E_g + 2E}, \quad B = 1 - \frac{4}{\xi} - \frac{2}{\xi(1+\xi)} + \frac{6}{\xi^2} \ln(1+\xi), \quad C = 1 - \frac{3}{\xi} + \frac{9}{\xi^2} + \frac{3}{\xi^2(1+\xi)} - \frac{12}{\xi^3} \ln(1+\xi)$$

Радіус екранування при розрахунку ξ визначався як [4]

$$r_0^2 = \frac{\chi_0 k_0 T}{6\pi e_0^2 n} \cdot \frac{I_{3/2,0}^0(\eta, \beta)}{I_{1/2,-1}^0(\eta, \beta)}, \quad \text{а} \quad \text{хвильове число}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m_{n,0}}{\hbar^2} \bar{E} \left(1 + \frac{E}{E_g}\right)}. \quad \text{Значення енергії, що входить у}$$

даний вираз, визначали шляхом усереднення, згідно [4]: $\bar{E} = \frac{1}{n} \int_0^\infty E \cdot g(E) \cdot f_0(E, \mu) dE$, а

$$n = \int_0^\infty g(E) \cdot f_0(E, \mu) dE. \quad \text{Густина станів [4]:}$$

$$g(E) = \frac{(2m_{d,0})^{\frac{3}{2}}}{2\pi^2 \hbar^3} E^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{E}{E_g}\right)^{\frac{1}{2}} \left(1 + \frac{2E}{E_g}\right).$$

Врахування поправки здійснювалось діленням відповідних величин τ_0 на поправку.

Для аналізу використано дані $S(T)$ та $\sigma(T)$ для легovanого йодом телуриду свинцю PbTe:I як одного з кращих термоелектричних матеріалів. Домішка І не створює локалізованих енергетичних рівнів і є одним з найефективніших донорів у PbTe. Для даного матеріалу в літературі представлено достатньо багато експериментальних даних, що робить його гарним

модельним об'єктом. Ми використали дані $S(T)$, $\sigma(T)$ з роботи [12].

На рис. 1 представлено результати розрахунку енергії Фермі та інших термоелектричних параметрів в наближенні домінування розсіювання на деформаційному потенціалі акустичних фононів. На рис.1.а показано температурна залежність енергії Фермі μ_S отриманої з експериментальної залежності $S(T)$ (точки на рис.1, в) з використанням формули 4. Використовуючи отримане таким чином μ_S проведено розрахунок питомої електропровідності за формулою (6) (рис. 1, г). Бачимо, що різниця між розрахованим $\sigma(T)$ та експериментальними значеннями становить $\approx 1000 \text{ (Ом}\cdot\text{см)}^{-1}$ і практично стала в усьому температурному інтервалі. При 550 К відносна похибка становитиме $\approx 50\%$, а при 300 К – $\approx 20\%$.

Якщо рівень Фермі визначити не з $S_{exp}(T)$, а з $\sigma_{exp}(T)$, то отримані значення μ_σ суттєво відрізнятимуться від μ_S (рис. 1, а). Процедура реалізовувалась шляхом підгонки розрахованої за формулою (6) провідності до експериментальних

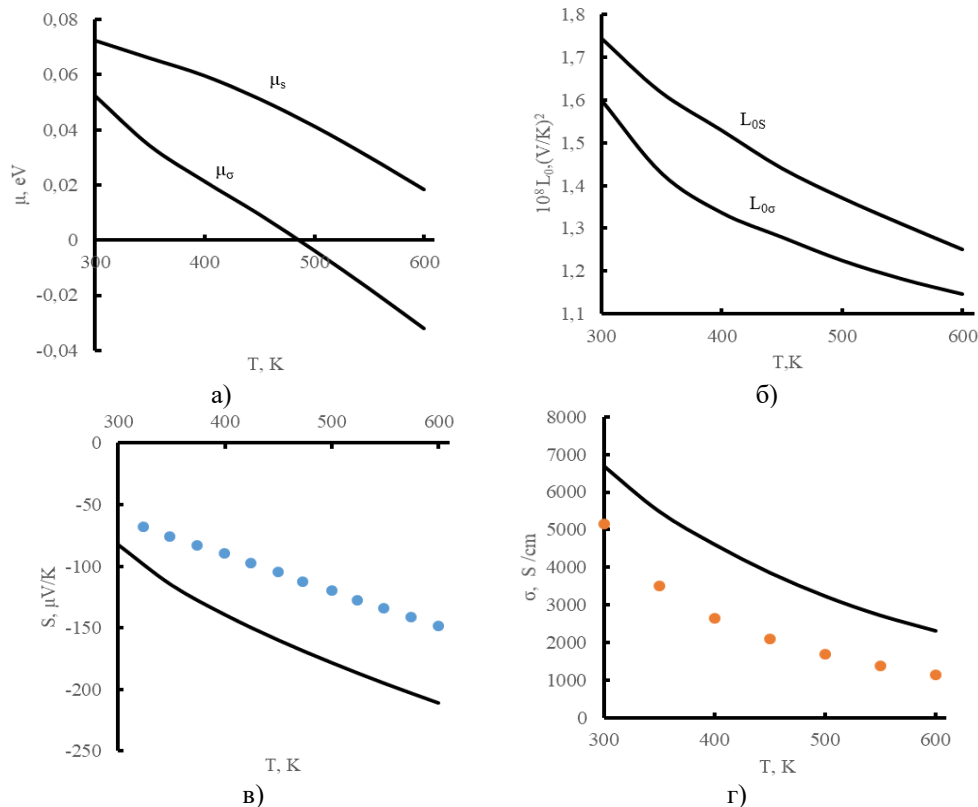


Рис.1. а) – температурні залежності енергії Фермі електронів отримані з використанням припущення про домінування ДА (μ_S розраховані з експериментальної залежності $S(T)$, та μ_σ розраховані з експериментальної залежності $\sigma(T)$); б) – розраховані значення сталої Лоренца для двох значень енергії Фермі представлені на рисунку а; в) експериментальна залежність $S(T)$ (точки) та розрахована з використанням значень μ_σ ; г) – експериментальна залежність $\sigma(T)$ (точки) та розрахована з використанням значень μ_S . Експериментальні дані – [11].

значень варіюванням μ . При подальшому використанні μ_σ для розрахунку $S(T)$ бачимо, що відмінність від експериментальних значень становить $\approx 30\%$. Також використовуючи μ_S і μ_σ проведено розрахунок L_0 (рис. 1, б). На відміну від σ і S тут відмінності виявились дещо меншими. У всьому інтервалі температур вони не перевищували 10% . Отримані результати дають можливість оцінити можливі похибки при використанні такого підходу.

При використанні моделі домінування DO і PO розбіжності між μ_S і μ_σ стають ще більшими (рис. 2, 3). Відповідно для розрахованих і експериментальних залежностей $S(T)$ та $\sigma(T)$ відмінності теж більш суттєві. Отже DA дійсно можна вважати для даного матеріалу визначальним. Але, оскільки при «перехресному» перерахунку $S(T)$ та $\sigma(T)$ результати не збігаються, то вочевидь внесок інших механізмів є досить суттєвим.

Для оцінки того, наскільки може змінитися результат розрахунку енергії Фермі при врахуванні одночасно DA, DO, PO проведено розрахунок $\sigma(T)$. При цьому, варіюючи μ , домагалися якнайкращого узгодження розрахованої залежності $\sigma(T)$ з експериментальною. При цьому рухливість, що входить у (6), розраховувалась використовуючи правило Матіссена:

$$\frac{1}{u} = \frac{1}{u_{DA}} + \frac{1}{u_{DO}} + \frac{1}{u_{PO}} \quad (15)$$

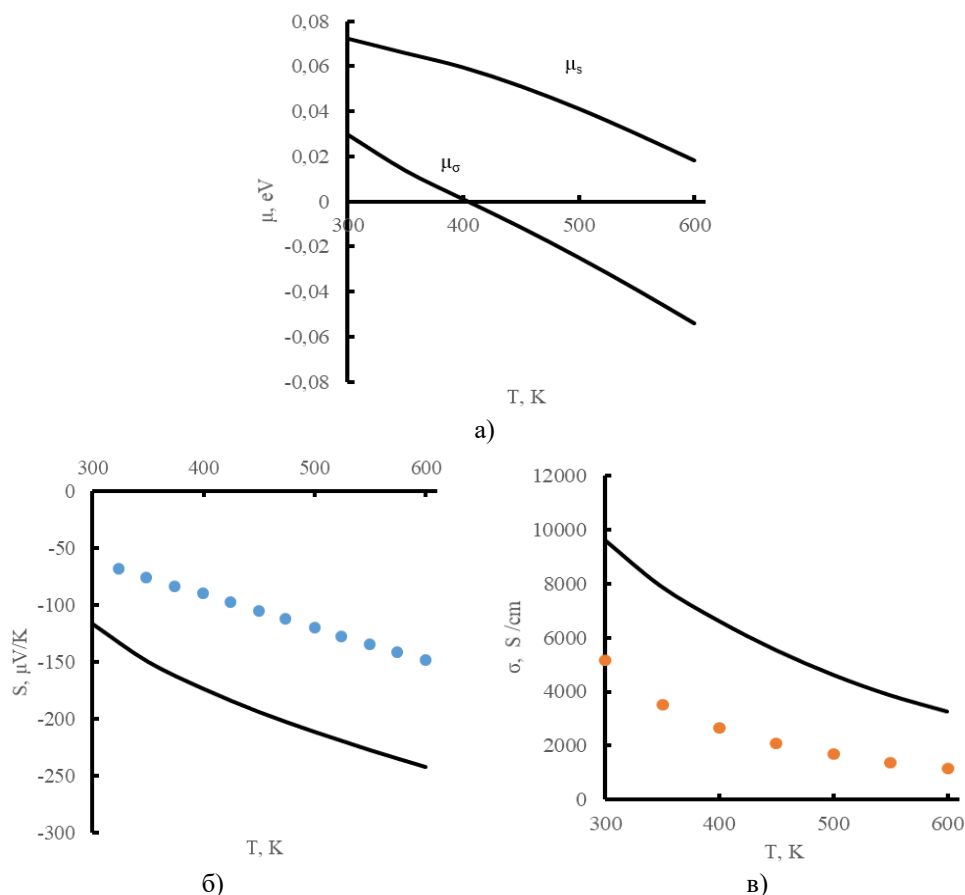


Рис.2. а) – температурні залежності енергії Фермі електронів отримані з використанням припущення про домінування DO (μ_S розраховані з експериментальної залежності $S(T)$, та μ_σ розраховані з експериментальної залежності $\sigma(T)$); б) – експериментальна залежність $S(T)$ (точки) та розрахована з використанням значень μ_σ ; в) – експериментальна залежність $\sigma(T)$ (точки) та розрахована з використанням значень μ_S . Експериментальні дані – [11].

На рис. 4. представлено результати розрахунку рухливості $u(n)$ для бездомішкового PbTe і співставлення його результатів з експериментальними даними роботи [8]. Бачимо, що в області $n \geq 10^{19} \text{ см}^{-3}$ наші розраховані значення u дуже добре узгоджуються з експериментальними.

На рис. 5,а наведено отримана при підгонці до $\sigma_{exp}(T)$ температурна залежність рухливості електронів з парціальними внесками кожного з механізмів. А на рис. 5,б – результати аналогічного розрахунку, але без врахування поправок на непараболічність (в розрахунку інтегралу Фермі), а також без поправок на блохівський вигляд хвильових функцій та екранування (при розрахунку часу релаксації). Бачимо, що враховуючи всі механізми одночасно, внесок DA і PO виявляється приблизно співмірний для обох варіантів розрахунку. Проте, у випадку врахування всіх поправок числові значення u значно краще узгоджуються з експериментальними, тоді як без їх врахування відмінність є досить суттєвою.

Якщо проаналізувати експериментальну залежність $\sigma(T)$ в логарифмічних координатах то нахил отриманої прямої становить -2.1 . Згідно [4], для електронів при розсіюванні на деформаційному

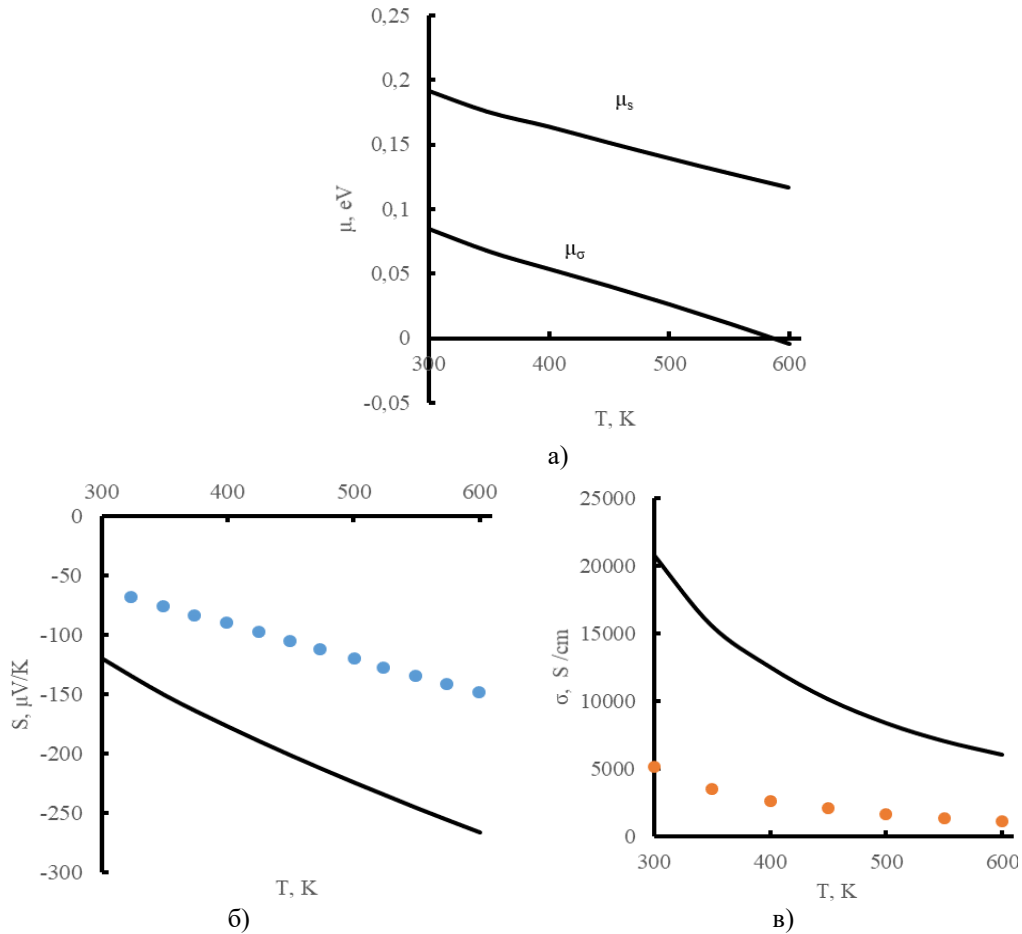


Рис.3. а) – температурні залежності енергії Фермі електронів отримані з використанням припущення про домінування РО (μ_s розраховані з експериментальної залежності $S(T)$), та μ_σ розраховані з експериментальної залежності $\sigma(T)$); б) – експериментальна залежність $S(T)$ (точки) та розрахована з використанням значень μ_σ ; в) – експериментальна залежність $\sigma(T)$ (точки) та розрахована з використанням значень μ_s .

Експериментальні дані – [11].

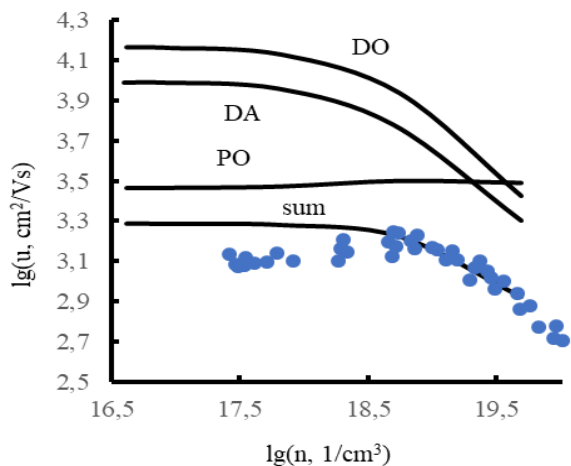


Рис. 4. Залежність рухливості електронів у PbTe від їх концентрації при 300 K. Sum – рухливість отримана з врахуванням трьох механізмів розсіювання (DA+DO+PO); DA – парціальний внесок зумовлений розсіюванням на деформаційному потенціалі акустичних фононів; DO – парціальний внесок зумовлений розсіюванням на деформаційному потенціалі оптичних фононів; PO – парціальний внесок зумовлений розсіюванням на поляризаційному потенціалі оптичних фононів. Точки – експериментальні дані [8].

потенціалі акустичних фононів (DA) дана величина мала б бути -2,5, а при розсіюванні на поляризаційному потенціалі оптичних фононів (PO) – -1.1. Таким чином у досліджуваному матеріалі дійсно варто очікувати одночасної дії кількох механізмів розсіювання.

Важливо, що окрім доброго узгодження розрахованої залежності $u(T)$ з експериментальною, лише для моделі, що враховує три механізми розсіювання одночасно вдається отримати розраховану концентрацію носіїв $n = 3,1 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, що відповідає експериментальному значенню при 300 K $n_{\text{exp}} = 2,9 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$. Якщо, наприклад, розглядали модель домінування DA, то розрахована за μ_s і μ_σ значеннями концентрація носіїв становить $n_\sigma = 0,5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, $n_s = 0,8 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, що в рази менше за експериментальне значення.

Варто звернути увагу на вплив вище описаних поправок на числові значення енергії Фермі та інших параметрів матеріалу, що розраховуються на його основі. Нагадаємо, що всі вищенаведені результати, окрім рис. 5.б, отримані з їх врахуванням. При врахуванні лише деяких з них також можна отримувати результати які добре узгоджуються з експериментальними. Наприклад, якщо не враховувати непараболічність зони провідності PbTe,

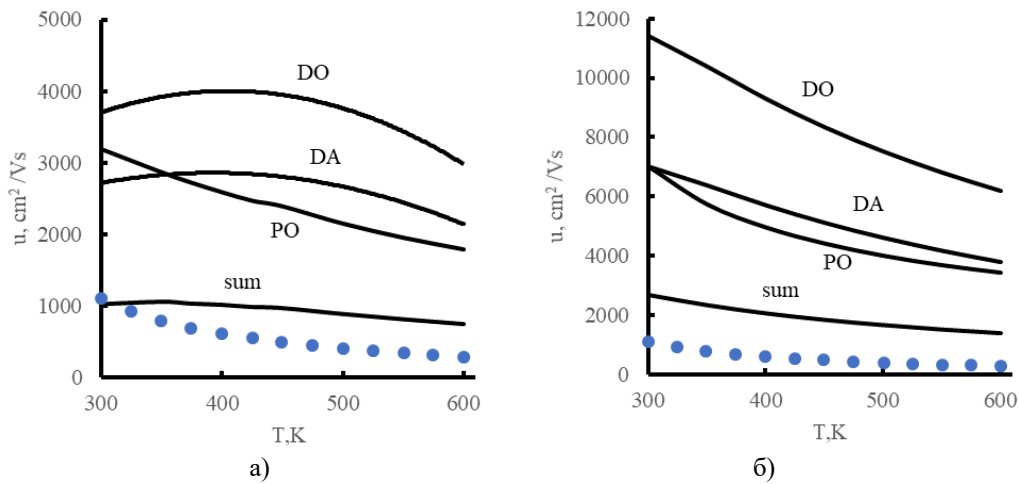


Рис. 5. Залежність рухливості електронів у PbTe:I від температури. *Sum* – рухливість отримана з врахуванням трьох механізмів розсіювання (DA+DO+PO); DA – парціальний внесок зумовлений розсіюванням на деформаційному потенціалі акустичних фононів; DO – парціальний внесок зумовлений розсіюванням на деформаційному потенціалі ліптичних фононів; PO – парціальний внесок зумовлений розсіюванням на поляризаційному потенціалі оптичних фононів. Точки – експериментальні дані [11].

то для моделі домінування DA отримані значення $\mu_S(T)$ практично співпадають з результатами розрахунку при врахуванні всіх трьох механізмів одночасно (рис. 7). Згідно з таким результатом, можна було б сказати, що DA дійсно єдиний домінуючий механізм розсіювання. Проте, якщо на основі таких значень $\mu_S(T)$ розрахувати питому електропровідність, то отримані значення будуть ще більше відрізнятися від експериментальних ніж на рис. 1.г.

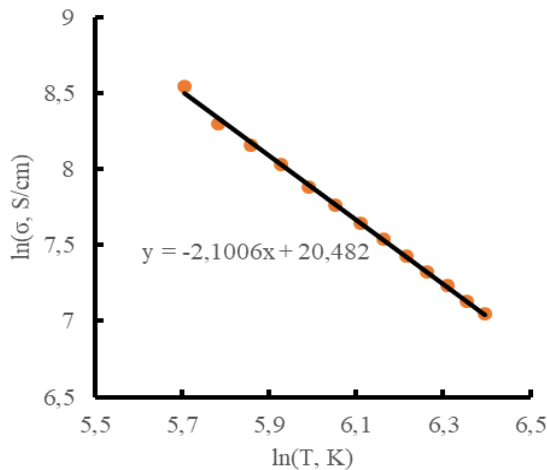


Рис. 6. Лінійна апроксимація залежності питомої електропровідності від температури в логарифмічних координатах для кристалів PbTe:I. Точки – експериментальні дані [12], пряма – апроксимаційна залежність.

Ще один цікавий результат отримується для моделі домінування DA, якщо врахувати непараболічність зони провідності, але не враховувати поправки на блохівський вид хвильових функцій. Якщо для такої моделі отримати $\mu_S(T)$ з залежності $S(T)$ а потім використати її для розрахунку $S(T)$ то для температур вище 350 К ми отримаємо практично ідеальне узгодження з експериментом.

Аналогічний результат можна отримати якщо вираховувати $\mu_\sigma(T)$ з експериментальної залежності $\sigma_{exp}(T)$ та розрахувати на її основі $S(T)$. Такий результат також можна прийняти як підтвердження домінування одного механізму DA (рис. 8). Проте, концентрація носіїв при цьому за $T = 300$ К становить $0.8 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, що більш ніж втричі відрізняється від експериментального значення.

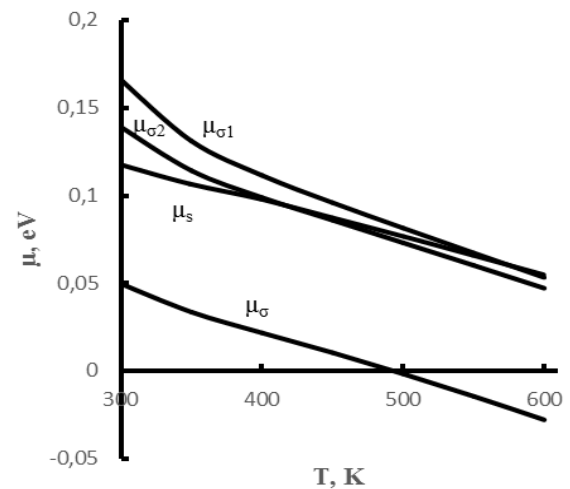


Рис. 7. Температурні залежності енергії Фермі електронів μ розраховані з експериментальної залежності $S(T)$ та $\sigma(T)$, використовуючи різні наближення: μ_S – розраховані з експериментальної залежності $S(T)$, а μ_σ – з експериментальної залежності $\sigma(T)$, з використанням припущення про домінування DA; $\mu_{\sigma 1}$ – розрахунок в наближенні часу релаксації з одночасним врахуванням трьох механізмів розсіювання носіїв (DA+DO+PO); $\mu_{\sigma 2}$ – аналогічно до $\mu_{\sigma 1}$, але не враховано непараболічність зон, поправки на екранування для PO, та блохівський вилад хвильових функцій.

Такі результати, скоріш за все, можна аргументувати в кожному конкретному випадку. Проте, в загальному випадку такі спрощені схеми не

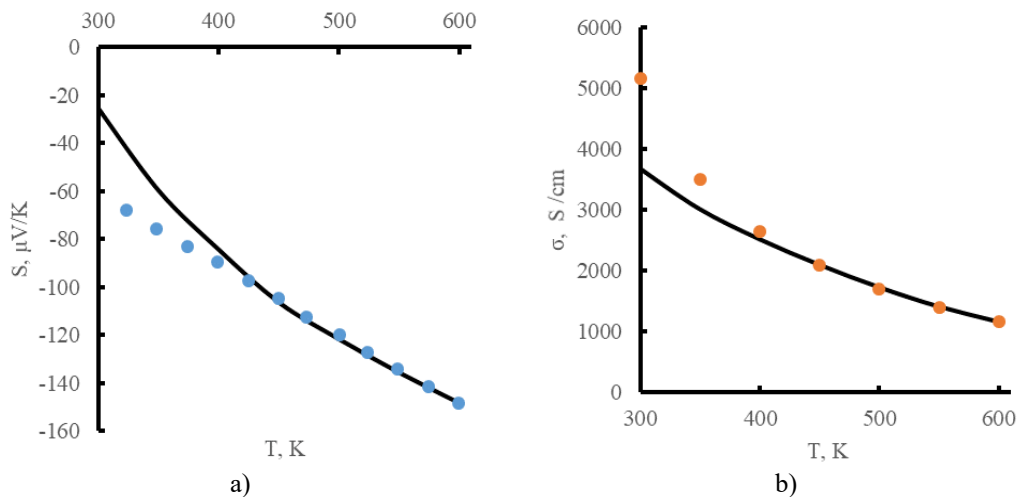


Рис. 8. а) експериментальна залежність $S(T)$ (точки [11]) та розрахована з використанням значень μ_{σ} ; в) експериментальна залежність $\sigma(T)$ (точки [11]) та розрахована з використанням значень μ_S . Розрахунки проведено в наближенні домінування ДА з врахуванням непараболічності зон але без врахування поправки на блохівський вигляд хвильової функції.

виглядають обґрунтованими. А кількісно результати розрахунку найкраще узгоджуються з експериментальними для моделі, що враховує кілька механізмів розсіювання та всі вище описані поправки.

II. Висновки

Вибір моделі домінуючого механізму розсіювання суттєво впливає на розраховані значення енергії Фермі μ_S виходячи з експериментальних значень $S(T)$. Отримані числові значення для моделі домінування одного механізму розсіювання змінюються від $\approx E_C + 0,025$ eV для DO до $\approx E_C + 0,2$ для РО при 300 K.

Згідно з результатами проведених розрахунків, отримані в рамках моделі домінування розсіювання на деформаційному потенціалі акустичних фонових числові значення μ при подальшому використанні для обчислення основних термоелектричних параметрів (коефіцієнта Зеебека, питомої електропровідності та числа Лоренца) призводять до результатів, що відрізняються від експериментальних на 10-50 %.

Врахування трьох механізмів розсіювання одночасно дозволяє досягати значно кращого узгодження розрахованих та експериментальних параметрів матеріалів. При чому, згідно отриманих результатів, для досліджуваного матеріалу PbTe:І парціальні внески механізмів ДА та РО в діапазоні температур 300-600 K є практично однаковими.

При розрахунку кінетичних властивостей PbTe важливим є врахування виродження носіїв, непараболічності зони та поправок на екранування і блохівський вигляд хвильових функцій. В іншому випадку, числові значення розрахованих та експериментальних параметрів можуть відрізнятися вдвічі.

Потятинник Т. студентка;

Матківський О. – кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник;

Говдяк В. – аспірант;

Горічок І. – доктор фізико-математичних наук, професор.

- [1] Z.M. Gibbs, F. Ricci, G. Li, H. Zhu, K. Persson, G. Ceder, G. Hautier, A. Jain, G. J. Snyder, *Effective Mass and Fermi Surface Complexity Factor from Ab Initio Band Structure Calculations*. Comput. Mater, 3 (1), 1 (2017); <https://doi.org/10.1038/s41524-017-0013-3>.
- [2] Y. Pei, X. Shi, A. LaLonde, H. Wang, L. Chen, G. J. Snyder, *Convergence of Electronic Bands for High Performance Bulk Thermoelectrics*. Nature, 473 (7345), 66 (2011); <https://doi.org/10.1038/nature09996>.
- [3] O.M. Matkivskiy, V.R. Balan, M.O. Halushchak, I.B. Dadiak, G.D. Mateik, I.V. Horichok, *Thermal conductivity of GeBiTe solid solutions*. Physics And Chemistry Of Solid State, 25 (1), 189 (2024); <https://doi.org/10.15330/pcss.25.1.185-190>.
- [4] B.M. Askerov, *Electron Transport Phenomena in Semiconductors*. 1994. <https://doi.org/10.1142/1926>.
- [5] Y. Xiao, W. Li, C. Chang, Y. Chen, L. Huang, J. He, L.-D. Zhao, *Synergistically optimizing thermoelectric transport properties of n-type PbTe via Se and Sn co-alloying*. Journal of Alloys and Compounds. (2017); <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2017.06.296>.
- [6] T. Parashchuk, Z. Dashevsky, K. Wojciechowski, *Feasibility of a High Stable PbTe:In Semiconductor for Thermoelectric Energy Applications*. J. Appl. Phys., 125 (24), 245103 (2019); <https://doi.org/10.1063/1.5106422>.
- [7] Z. Dashevsky, I. Horichok, M. Maksymuk, A.R. Muchtar, B. Srinivasan, T. Mori, *Feasibility of high performance in p-type $Ge_{1-x}Bi_xTe$ materials for thermoelectric modules*. J Am Ceram Soc., 1 (2022); <https://doi.org/10.1111/jace.18371>.

- [8] D.M. Zayachuk, *The Dominant Mechanisms of Charge-Carrier Scattering in Lead Telluride*. Semiconductors, 31 (2), 173 (1997); <https://doi.org/10.1134/1.1187322>.
- [9] R. Knura, T. Parashchuk, A. Yoshiasa, K.T. Wojciechowski, *Origins of Low Lattice Thermal Conductivity of $Pb_{1-x}Sn_xTe$ Alloys for Thermoelectric Applications*. Dalt. Trans., 50 (12), 4323 (2021); <https://doi.org/10.1039/d0dt04206d>.
- [10] O. Khshanovska, T. Parashchuk, I. Horichok, *Estimating the upper limit of the thermoelectric figure of merit in n - and p -type $PbTe$* . Materials Science in Semiconductor Processing, 160, 107428 (2023); <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2023.107428>.
- [11] D. M.Freik, S. I.Mudryi, I. V.Gorichok, R. O.Dzumedzey, O. S.Krynytskyi, & T. S. Lyuba, (2014). Charge carrier scattering mechanisms in thermoelectric $PbTe$: Sb. *Ukrainian journal of physics*, 59(7), 706-711; <https://doi.org/10.15407/ujpe59.07.0706>.
- [12] P. Yanzhong, A.D. LaLonde, H. Wang, and G.J. Snyder, *Low effective mass leading to high thermoelectric performance*. Energy Environ. Sci., 5, 7963 (2012); <https://doi.org/10.1039/c2ee21536e>.

T. Potiatynnyk, O. Matkivskyi, V. Hovdiak, I. Horichok

Determination of the Fermi energy of electrons in lead telluride based on measurements of the Seebeck coefficient

Vasyl Stefanyk Carpathian National University, Ivano-Frankivsk, Ukraine, tetiana.potiatynnyk.22@pnu.edu.ua

The possibilities of using the model of dominance of one scattering mechanism of carriers for calculating the Fermi energy μ using experimental values of the Seebeck coefficient S_{exp} were analyzed. The specific electrical conductivity of n - $PbTe$:I was calculated in the relaxation time approximation with simultaneous consideration of many scattering mechanisms. The obtained Fermi energy values were compared with the values calculated as $\mu(S_{exp})$. The influence of corrections to the Bloch form of wave functions and screening of scattering centers by carriers on the numerical values of mobilities and numerical values of Fermi energies determined in the model of dominance of one scattering mechanism was investigated.

Keywords: lead telluride, thermoelectric properties, scattering mechanism, Fermi energy.