

# Термоэлектрическая эффективность в твердых растворах *p*-типа на основе халькогенидов висмута и сурьмы при температурах выше комнатной

© Л.Н. Лукьянова, В.А. Кутасов, П.П. Константинов, В.В. Попов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: lidia.lukyanova@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 15 декабря 2009 г.)

В твердых растворах *p*-типа на основе халькогенидов висмута и сурьмы  $p\text{-(Bi,Sb)}_2(\text{Te,Se})_3$  проведен анализ особенностей изменения термоэлектрической эффективности  $Z$  с учетом данных, полученных при исследовании термоэлектрических и гальваномагнитных свойств. Показано, что в образцах с оптимальными концентрациями носителей заряда для интервала температур 300–370 К увеличение  $Z$  в многокомпонентном составе  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$  ( $x = 1.3, y = 0.06$ ) определяется высокой подвижностью и низкой решеточной теплопроводностью. Рост эффективной массы плотности состояний и увеличение наклонов температурной зависимости подвижности по сравнению с другими составами приводят к увеличению  $Z$  в твердом растворе  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$  при  $x = 1.6$  в интервале температур 370–550 К.

Увеличение термоэлектрической эффективности в исследуемых составах определяется также возрастанием сжатия эллипсоидов постоянной энергии вдоль бинарного и бисекторного направлений и изменением угла  $\theta$  между главными осями эллипсоидов и кристаллографическими осями.

Работа поддержана проектом Российского фонда фундаментальных исследований № 10-08-00695а.

## 1. Введение

Твердые растворы  $p\text{-(Bi,Sb)}_2(\text{Te,Se})_3$  на основе халькогенидов висмута и сурьмы с замещениями атомов в подрешетках Bi и Te являются высокоэффективными термоэлектриками для практического использования в термоэлектрических генераторах при оптимальных составах и концентрациях носителей заряда для температур выше комнатной [1–3].

Рассматриваемые материалы имеют сложную зонную структуру, которая описывается в многодолинной модели энергетического спектра [4]. Изменения параметров эллипсоидов постоянной энергии и рассеяния носителей заряда оказывают влияние на термоэлектрические и гальваномагнитные свойства твердых растворов в зависимости от состава, концентрации носителей и температуры. Поэтому для анализа термоэлектрической эффективности были использованы экспериментальные данные, полученные при исследовании не только термоэлектрических, но и гальваномагнитных свойств твердых растворов  $p\text{-(Bi,Sb)}_2(\text{Te,Se})_3$ .

## 2. Термоэлектрические свойства

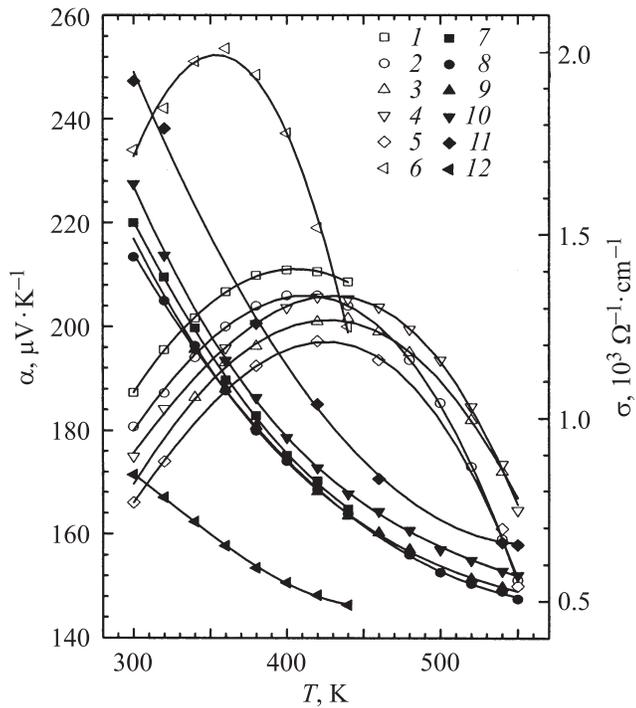
Твердые растворы  $p\text{-(Bi,Sb)}_2(\text{Te,Se})_3$  были получены из компонентов высокой чистоты методом вертикального зонного выравнивания, который является одним из методов направленной кристаллизации. В процессе роста слитков твердых растворов температура на фронте кристаллизации поддерживалась с точностью  $\pm 1^\circ\text{C}$ . Слитки состояли из монокристаллических блоков, вытянутых вдоль оси роста, перпендикулярной оси

третьего порядка ( $C_3$ ). Плоскости спайности (0001) в блоках были параллельны оси роста, которая определяет направление, соответствующее максимальному значению термоэлектрической эффективности. Для получения необходимых концентраций носителей заряда твердые растворы легировали галогенидами металлов и избыточным теллуром по сравнению со стехиометрическим составом.

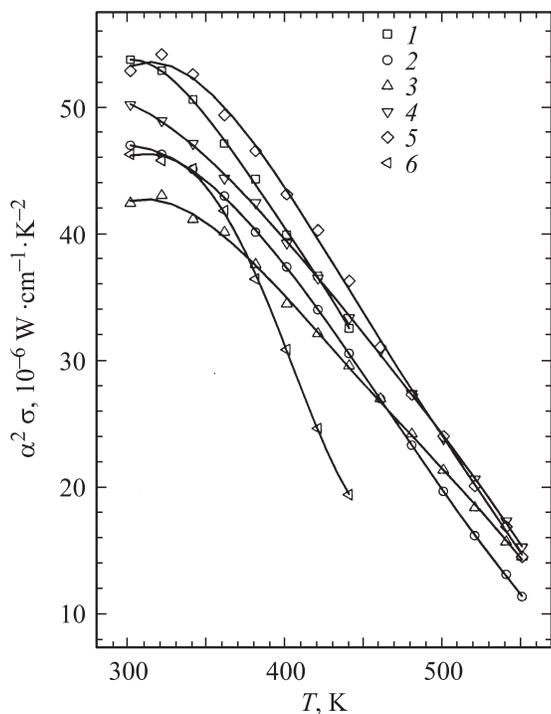
Термоэлектрические свойства были исследованы в составах  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$  ( $x = 1.55$  и  $1.6$ ) и  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$  ( $x = 1.3, 1.6; y = 0.06$ ). Как следует из температурных зависимостей коэффициентов Зеебека (рис. 1, кривые 1–6), угловые коэффициенты  $d \ln \alpha / d \ln T$  уменьшаются в области собственной проводимости и температурные зависимости  $\alpha(T)$  ослабевают с ростом концентрации носителей в твердых растворах одного состава (табл. 1, образцы № 4, 5). Наклоны  $\alpha(T)$  уменьшаются с ростом атомов Sb от  $x = 1.55$

**Таблица 1.** Коэффициент Зеебека и наклоны температурных зависимостей  $d \ln \alpha / d \ln T$  для твердых растворов  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$  и  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$

Номер образца	$x$	$y$	$\alpha, \mu\text{V} \cdot \text{K}^{-1}$ (300 K)	$d \ln \alpha / d \ln T$	$p, 10^{19} \text{cm}^{-3}$
1	1.55		187	0.58	4.7
2	1.6	0.06	181	0.57	4.9
3	1.55		169	0.78	6
4	1.6		175	0.73	5.6
5	1.6		166	0.70	6.3
6	1.3	0.06	234	0.58	1.9



**Рис. 1.** Температурные зависимости коэффициента Зеебека  $\alpha$  (1–6) и электропроводности  $\sigma$  (7–12) в твердых растворах  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$  и  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ . 1, 3, 7, 9 —  $x = 1.55$ ; 2, 8 —  $x = 1.6, y = 0.06$ ; 4, 5, 10, 11 —  $x = 1.6$ ; 6, 12 —  $x = 1.3, y = 0.06$ .



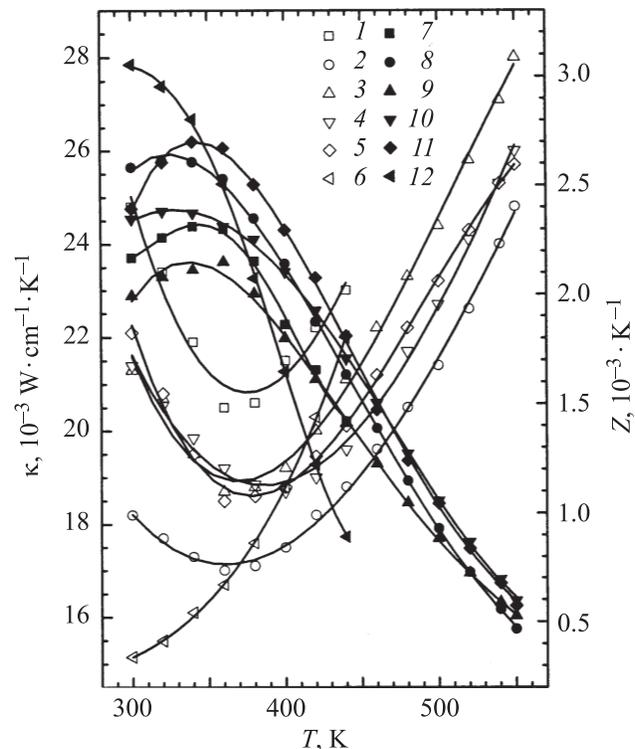
**Рис. 2.** Температурные зависимости параметра мощности  $\alpha^2\sigma$  в твердых растворах  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$  и  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ . 1, 3 —  $x = 1.55$ ; 2 —  $x = 1.6, y = 0.06$ ; 4, 5 —  $x = 1.6$ ; 6 —  $x = 1.3, y = 0.06$ .

до 1.6 для образцов с близкими концентрациями носителей (табл. 1, образцы № 3, 5). Замещения атомов  $\text{Te} \rightarrow \text{Se}$  при  $y = 0.06$  в твердом растворе при  $x = 1.6$  приводит к уменьшению наклонов  $d \ln \alpha / d \ln T$  (табл. 1, образцы № 2, 6). Наклоны температурных зависимостей электропроводности  $d \ln \sigma / d \ln T$  отражают изменения подвижности с температурой  $\mu_0(T)$  и будут рассмотрены в следующем разделе, где обсуждаются температурные зависимости подвижности носителей заряда.

На рис. 2 приведены температурные зависимости параметра мощности  $\alpha^2\sigma$ . Высокое значение  $\alpha^2\sigma$  в образце с наиболее высокой концентрацией носителей заряда при  $x = 1.6$  (рис. 2, кривая 5) объясняется началом влияния собственной проводимости при более высоких температурах, что связано с увеличением ширины запрещенной зоны  $E_g$  в твердом растворе при увеличении количества замещенных атомов в подрешетке висмута.

Кроме того, изменение параметра мощности, которое зависит от состава, концентрации носителей и температуры, определяется также изменениями параметров поверхности постоянной энергии в валентной зоне твердого раствора [5–7].

На рис. 3 приведены температурные зависимости теплопроводности  $\kappa$  (кривые 1–6). Теплопроводность значительно уменьшается при температурах ниже 400 К в твердых растворах с замещениями атомов в обеих подрешетках теллурида висмута. Такое уменьше-



**Рис. 3.** Температурные зависимости теплопроводности  $\kappa$  (1–6) и термоэлектрической эффективности  $Z$  (7–12) в твердых растворах  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$  и  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ . Обозначение кривых то же, что на рис. 1.

**Таблица 2.** Параметр вырождения  $\beta_d$ , компоненты тензора эффективных масс, угол  $\theta$  и критерий качества минимизации варьируемых параметров  $\chi^2$  в твердых растворах  $\text{Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$  и  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$  при 300 К

Номер образца	$x$	$y$	$\beta_d$	$m_3$	$m_1$	$m_2$	$\theta, ^\circ$	$\chi^2, 10^{-4}$
1	1.55		0.63	0.24	0.05	0.17	33	1.6
2	1.5	0.06	0.39	0.22	0.07	0.17	29	1.55
3*	1.5		0.24	0.28	0.06	0.11	41	0.26
5	1.6		0.62	0.22	0.03	0.05	39	1.23
6	1.3	0.06	0.52	0.24	0.02	0.06	42	1.02

Примечание. Номера образцов в табл. 2 совпадают с номерами в табл. 1, кроме образца № 3\*. На образце № 3\* термоэлектрические свойства не исследовались.

ние  $\chi$  наблюдается вследствие дополнительных искажений кристаллической решетки по сравнению с твердым раствором с замещениями атомов только в подрешетке  $\text{Bi}$  (рис. 3, кривые 2, 6). Теплопроводность также уменьшается при увеличении концентрации атомов  $\text{Sb}$  в твердом растворе (рис. 3, кривые 3–5).

С повышением температуры теплопроводность возрастает из-за влияния собственной проводимости. Более резкое повышение теплопроводности в составе при  $x = 1.3$ ,  $y = 0.06$  в образце с низкой концентрацией носителей (табл. 2, образец № 6; рис. 3, кривая 6) связано с наступлением собственной проводимости при меньших температурах, чем в образцах с более высокими концентрациями носителей заряда.

Как видно из рис. 3, рост термоэлектрической эффективности  $Z$  в температурном интервале 300–370 К связан с низкой теплопроводностью в составе с замещениями атомов в обеих подрешетках  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$   $x = 1.3$  и  $y = 0.06$  (кривые 6, 12) при оптимальных концентрациях носителей. В интервале 370–550 К увеличение  $Z$  в твердом растворе с замещениями атомов висмута сурьмой при  $x = 1.6$  (рис. 3, кривая 11) определяется высоким параметром мощности  $\alpha^2\sigma$  (рис. 2, кривая 5) в образце с оптимальной концентрацией носителей для этого температурного интервала.

### 3. Эффективная масса и подвижность

Зависимости усредненной эффективной массы плотности состояний  $m/m_0$ , подвижности носителей заряда с учетом вырождения  $\mu_0$  и решеточной теплопроводности  $\kappa_L$  от состава, температуры и концентрации носителей заряда были использованы для анализа изменений термоэлектрической эффективности  $Z$  в твердых растворах в различных интервалах температур. Величины  $m/m_0$ ,  $\mu_0$  и  $\kappa_L$  были рассчитаны для параболической модели энергетического спектра с изотропным механизмом рассеяния. В расчетах  $m/m_0$ ,  $\mu_0$  и  $\kappa_L$  был использован эффективный параметр рассеяния ( $r_{\text{eff}}$ ). Параметр  $r_{\text{eff}}$

был рассчитан из экспериментальных величин, полученных при исследовании температурных зависимостей термоэдс и параметра вырождения  $\beta_d$ , определенного по результатам исследований гальваномангнитных эффектов, обработанных в многодолинной модели энергетического спектра [5,6].

Параметр  $\beta_d$  для изотропного механизма рассеяния носителей заряда в соответствии с [5] имеет вид

$$\beta_d(r, \eta) = \frac{(2r + 3/2)^2 F_{2r+1/2}^2(\eta)}{(r + 3/2)(3r + 3/2) F_{r+1/2}(\eta) F_{3r+1/2}(\eta)}, \quad (1)$$

где  $F_s(\eta)$  — интегралы Ферми

$$F_s(\eta) = \int_0^\infty \frac{x^s}{e^{x-\eta} + 1} dx, \quad (2)$$

$\eta$  — приведенный уровень Ферми.

Выражение для коэффициента Зеебека  $\alpha$  через интегралы Ферми представляется в виде

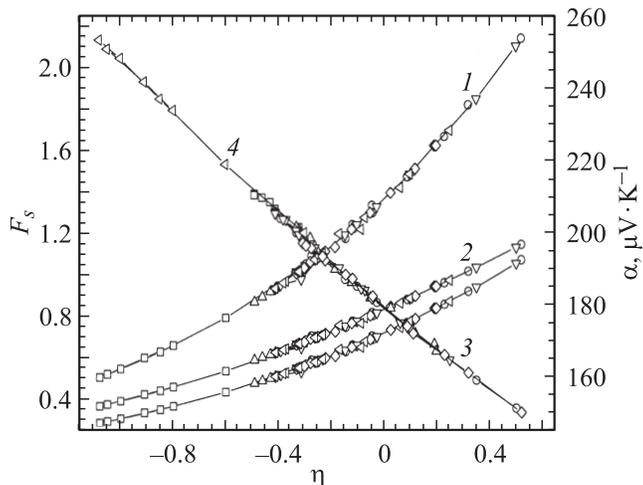
$$\alpha = \frac{k}{e} \left[ \frac{(r + 5/2) F_{r+3/2}(\eta)}{(r + 3/2) F_{r+1/2}(\eta)} - \eta \right]. \quad (3)$$

Величины  $r_{\text{eff}}$  были рассчитаны из решения методом минимизации целевой функции ( $\chi$ ) [5] системы уравнений для параметра  $\beta_d$  (1) и коэффициента Зеебека  $\alpha$  (3) относительно ( $r, \eta$ ). Для образцов твердых растворов из табл. 1 значения  $r_{\text{eff}}$  составляли  $-(0.78-0.79)$  при значениях  $\chi^2 \approx 10^{-4}$ , что указывает на высокую точность определения варьируемых параметров ( $r, \eta$ ).

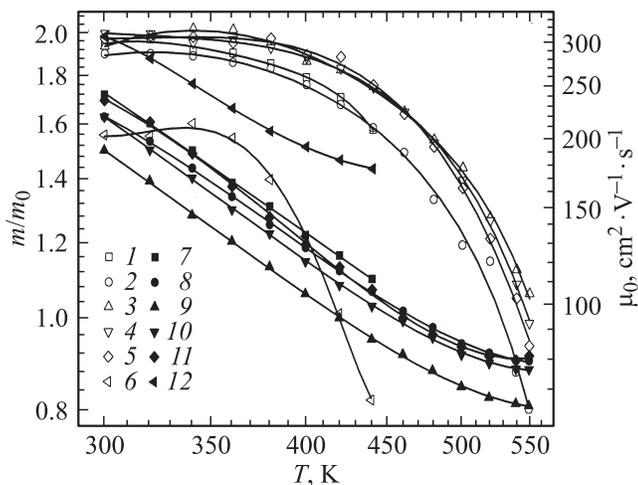
Исследования твердых растворов  $p\text{-(Bi,Sb)}_2(\text{Te,Se})_3$  с низкими концентрациями носителей заряда, ранее проведенные нами, показали, что величина  $r_{\text{eff}}$  уменьшается по модулю по сравнению со значением параметра рассеяния  $r = -0.5$ , характерного для акустического механизма рассеяния носителей заряда, и достигает значений  $-(0.37-0.45)$  в низкотемпературной области, что объясняется заметным вкладом примесного рассеяния.

Однако с повышением концентрации носителей заряда происходит заполнение дополнительной зоны как в валентной зоне, так и в зоне проводимости твердых растворов  $p\text{-(Bi,Sb)}_2(\text{Te,Se})_3$ , в результате чего простая параболическая модель энергетического спектра становится недостаточной для описания концентрационных зависимостей подвижности носителей заряда и теплопроводности кристаллической решетки [6]. Зависимости функций  $F_s$  (2) и коэффициента Зеебека  $\alpha$  от приведенного уровня Ферми  $\eta$ , необходимые для расчетов эффективной массы  $m/m_0$ , подвижности  $\mu_0$  и решеточной теплопроводности  $\kappa_L$ , были рассчитаны для эффективного параметра рассеяния  $r_{\text{eff}}$  (рис. 4).

Эффективная масса  $m/m_0$  возрастает с ростом концентрации носителей и содержания  $\text{Sb}$  в твердом растворе (рис. 5, кривые 1–6). Уменьшение  $m/m_0$  при повышении температуры ( $T > 400$  К) определяется влиянием собственной проводимости. Влияние собственной



**Рис. 4.** Зависимости функций  $F_s$  (1–3) и коэффициента Зеебека  $\alpha$  (4) от приведенного уровня Ферми  $\eta$  для твердых растворов  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$  и  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ .  $F_s$ :  $s = r_{\text{eff}} + 2.5$  (1),  $r_{\text{off}} + 0.5$  (2),  $r_{\text{eff}} + 1.5$  (3).



**Рис. 5.** Температурные зависимости эффективной массы плотности состояний  $m/m_0$  (1–6) и подвижности носителей заряда  $\mu_0$  (7–12) в твердых растворах  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$  и  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ . Обозначение кривых то же, что на рис. 1.

проводимости, которое проявляется при более высоких температурах в образцах с высокими концентрациями носителей заряда, приводит к ослаблению температурной зависимости эффективной массы в области высоких температур для образцов № 3–5 по сравнению с № 1, 2 и 6 из табл. 1 и на рис. 5 (кривые 3–5 и 1, 2, 6).

Подвижность  $\mu_0$  уменьшается в твердых растворах с ростом концентрации носителей (рис. 5, кривые 7–12). С увеличением содержания атомов Sb от  $x = 1.55$  до 1.6 наклоны зависимостей  $d \ln \mu_0 / d \ln T$  возрастают от  $-1.75$  до  $-1.9$  для образцов с близкими концентрациями носителей (рис. 5, кривые 9, 11). В составах с замещениями атомов Bi  $\rightarrow$  Sb и Te  $\rightarrow$  Se при  $x = 1.3$ ,  $y = 0.06$  наклоны температурных зависимо-

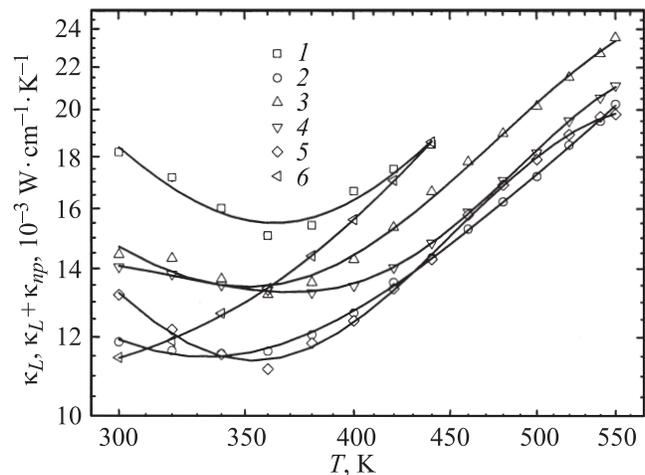
стей  $\mu_0(T)$  уменьшаются до  $-1.6$ , однако в составе с большим содержанием Sb ( $x = 1.6$ ,  $y = 0.06$ ) уменьшение наклонов зависимостей  $\mu_0(T)$  слабое и величины  $d \ln \mu_0 / d \ln T = -1.8$  (рис. 5, кривые 8, 12).

#### 4. Решеточная теплопроводность и термоэлектрическая эффективность

При расчетах решеточной теплопроводности в области примесной проводимости обычно используется выражение для полной теплопроводности  $\kappa$  в виде:  $\kappa_L + \kappa_{el}$ , где  $\kappa_{el}$  — электронная составляющая теплопроводности. Однако следует учитывать, что с ростом температуры увеличивается вклад собственной проводимости в теплопроводность. Поэтому при повышении температуры возникает необходимость рассматривать сумму  $\kappa_L + \kappa_{np}$  вместо  $\kappa_L$ , где  $\kappa_{np}$  — теплопроводность, связанная с собственной проводимостью (рис. 6).

Увеличение содержания замещенных атомов в подрешетке висмута и замещения атомов в обеих подрешетках теллурида висмута приводит к снижению решеточной теплопроводности  $\kappa_L$  (рис. 6), поскольку возрастает рассеяние фононов в результате искажений кристаллической решетки.

Из температурных зависимостей величин  $m/m_0$ ,  $\mu_0$  и  $\kappa_L$  следует, что термоэлектрическая эффективность  $Z$  возрастает при оптимальных соотношениях между этими величинами. В интервале температур 370–550 К в составе при  $x = 1.6$  значения  $Z$  возрастают в связи с увеличением эффективной массы, увеличением наклонов температурных зависимостей подвижности  $\mu_0$  и уменьшением решеточной теплопроводности  $\kappa_L$  (рис. 3, 5, кривые 5, 11). Высокая подвижность  $\mu_0$  и низкая решеточная теплопроводность  $\kappa_L$  в составе твердого раствора при



**Рис. 6.** Температурные зависимости решеточной теплопроводности  $\kappa_L$  и суммы  $\kappa_L + \kappa_{np}$  в твердых растворах  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$  и  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ . Обозначение кривых то же, что на рис. 2.

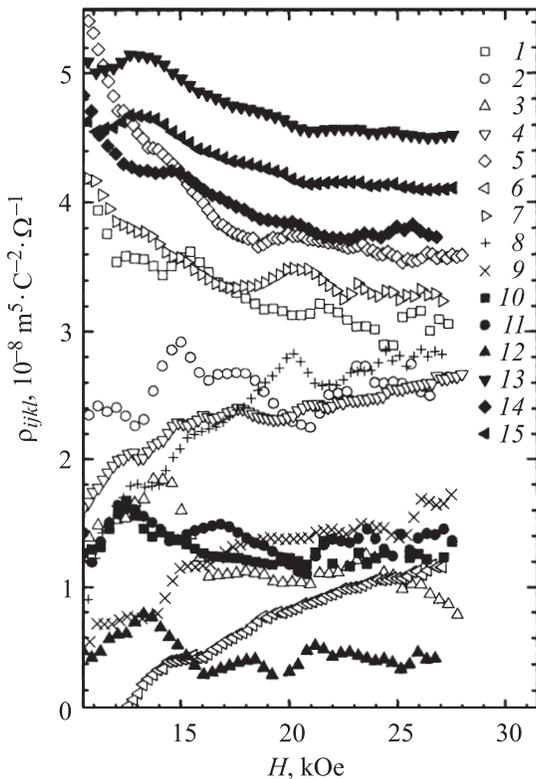
$x = 1.3$  и  $y = 0.06$  обеспечивают рост величины  $Z$  в интервале 300–370 К (рис. 3, 5, кривые 6, 12).

## 5. Гальваномагнитные свойства

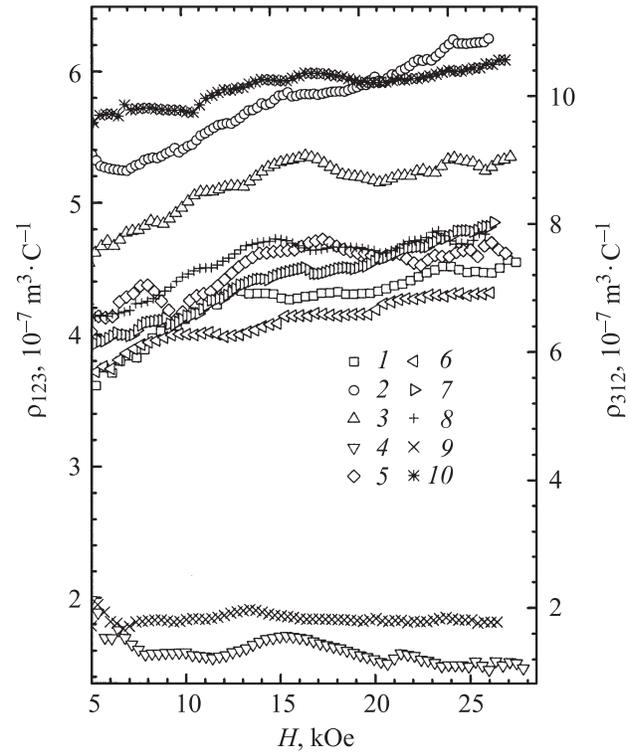
Гальваномагнитные свойства (компоненты тензора магнетосопротивления  $\rho_{ijkl}$  и эффекта Холла  $\rho_{ijk}$ ) были измерены в слабых и промежуточных магнитных полях в твердых растворах  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$  и  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$  для образцов с близкими термоэлектрическими свойствами к образцам № 1, 2, 5 и 6 из табл. 1.

На рис. 7, 8 приведены зависимости компонентов тензора магнетосопротивления ( $\rho_{1133}$ ,  $\rho_{1122}$ ,  $\rho_{1111}$ ) и эффекта Холла ( $\rho_{123}$ ,  $\rho_{312}$ ) от величины магнитного поля для твердых растворов.

Отношения, составленные из гальваномагнитных коэффициентов (ГМК), приведенных на рис. 7, 8 в области магнитных полей  $H = 25\text{--}28$  кОе, при которых изменения ГМК от  $H$  ослабевают, были использованы для расчета параметров эллипсоидов постоянной энергии для валентной зоны твердых растворов. В многодлинной модели энергетического спектра с изотропным рассеянием носителей заряда были рассчитаны отношения компонентов ( $m_i/m_j$ ), главные компоненты тензора



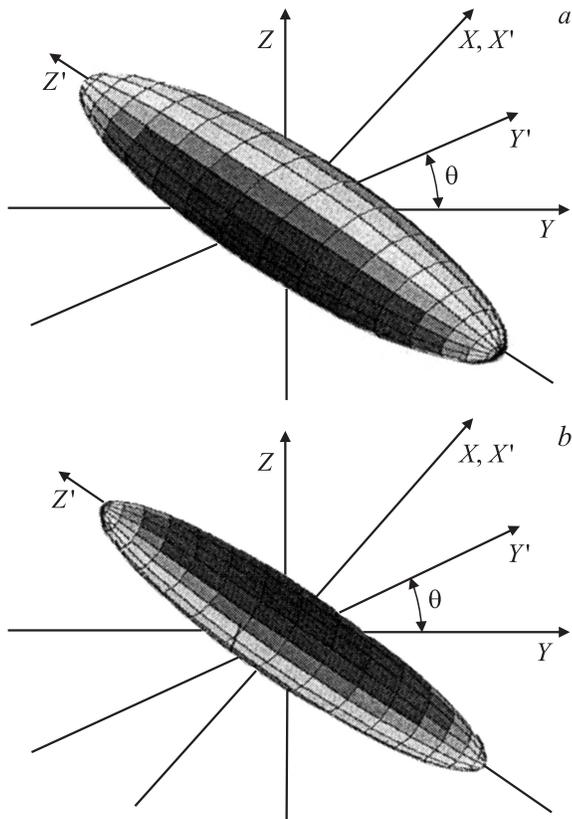
**Рис. 7.** Зависимости компонентов тензора магнетосопротивления  $\rho_{1133}$  (1, 4, 7, 10, 13),  $\rho_{1122}$  (2, 5, 8, 11, 14),  $\rho_{1111}$  (3, 6, 9, 12, 15) от величины магнитного поля  $H$  для твердых растворов  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$  и  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ . 1–3 —  $x = 1.55$ , 4–6 —  $x = 1.5$ ,  $y = 0.06$ , 7–9 —  $x = 1.6$ , 10–12 —  $x = 1.5$ , 13–15 —  $x = 1.3$ ,  $y = 0.06$ .



**Рис. 8.** Зависимости компонентов тензора Холла  $\rho_{123}$  (1–5) и  $\rho_{312}$  (6–10) от величины магнитного поля  $H$  для твердых растворов  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$  и  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ . 1, 6 —  $x = 1.55$ , 2, 7 —  $x = 1.5$ ,  $y = 0.06$ , 3, 8 —  $x = 1.6$ , 4, 9 —  $x = 1.5$ , 5, 10 —  $x = 1.3$ ,  $y = 0.06$ .

эффективных масс ( $m_1, m_2, m_3$ ) и угол ( $\theta$ ) между главными осями эллипсоидов постоянной энергии и кристаллографическими осями (табл. 2). На рис. 9 показаны эллипсоиды постоянной энергии для валентной зоны твердых растворов  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$  ( $x = 1.6$ ) (рис. 9, а) и  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$  ( $x = 1.3$ ,  $y = 0.06$ ) (рис. 9, б) для образцов № 5 и 6, (табл. 1), которым соответствуют высокие значения термоэлектрической эффективности  $Z$  (рис. 3, кривые 11, 12).

В составах при  $x = 1.6$  с высокой термоэлектрической эффективностью при оптимальных концентрациях носителей для температур выше комнатной (рис. 3, кривая 11) эллипсоиды сильнее сжаты вдоль бинарных ( $m_1, X'$ ) и биссекторных осей ( $m_2, Y'$ ) по сравнению с образцом при  $x = 1.5$  с близкой концентрацией носителей заряда (рис. 9, а, табл. 2, образцы № 3\*, 5). Сжатие эллипсоидов вдоль этих осей также возрастает в составах с замещениями атомов  $\text{Bi} \rightarrow \text{Sb}$  и  $\text{Te} \rightarrow \text{Se}$  при  $x = 1.3$ ,  $y = 0.06$  в твердых растворах с высокой термоэлектрической эффективностью вблизи комнатной температуры по сравнению с составом при  $x = 1.5$ ,  $y = 0.06$  (табл. 2, образцы № 2, 6). Сжатие эллипсоидов постоянной энергии сопровождается поворотом осей эллипсоидов на угол  $\theta$  по отношению к кристаллографическим осям.



**Рис. 9.** Эллипсоиды постоянной энергии для валентной зоны твердых растворов  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$  ( $x = 1.6$ ) (a) и  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$  ( $x = 1.3, y = 0.06$ ) (b) для образцов № 5 и 6 соответственно.

## 6. Заключение

Исследования твердых растворов  $p\text{-(Bi,Sb)}_2(\text{Te,Se})_3$  показали, что увеличение термоэлектрической эффективности  $Z$  наблюдается в составах  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_3$  ( $x = 1.6$ ) и  $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$  ( $x = 1.3, y = 0.06$ ) с оптимальными соотношениями между тремя параметрами: усредненной эффективной массой плотности состояний ( $m/m_0$ ), подвижностью ( $\mu_0$ ) и решеточной теплопроводностью ( $\kappa_L$ ) в образцах с оптимальными концентрациями носителей заряда для рассматриваемых интервалов температур.

Увеличение термоэлектрической эффективности  $Z$  в составе при  $x = 1.3, y = 0.06$  в интервале температур 300–370 К определяется высокой подвижностью  $\mu_0$  и низкой решеточной теплопроводностью  $\kappa_L$ . В составе при 1.6 рост эффективной массы и увеличение наклонов температурной зависимости подвижности приводят к росту  $Z$  в интервале температур 370–550 К.

Соотношения между величинами  $Z$  и анизотропией поверхности постоянной энергии для валентной зоны твердых растворов определяются изменением ориентации главных осей эллипсоидов постоянной энергии ( $m_1, m_2, m_3$ ). Оси эллипсоидов повернуты на угол  $\theta$

по отношению к кристаллографическим осям. Показано, что сжатие эллипсоидов возрастает вдоль бинарных и бисекторных направлений в составах с оптимально высокими значениями термоэлектрической эффективности  $Z$ .

## Список литературы

- [1] M.H. Ettenberg, W.A. Jesser, F.D. Rosi. Proc. of the XV Int. Conf. on thermoelectrics. Pasadena, CA, USA (1996). P. 52.
- [2] Т.Е. Свечникова, Л.Е. Шелимова, П.П. Константинов, М.А. Кретьова, Е.С. Авилов, В.С. Земсков, Х. Штыве, А. Жубер, Е. Мюллер. Неорган. материалы **41**, 10, 1186 (2005).
- [3] H. Böttner, D.G. Ebling, A. Jacquot, U. Kühn, J. Schmidt. Proc. of the 5th Eur. Conf. on thermoelectrics. Odessa, Ukraine (2007). P. 104.
- [4] L.P. Caywood, G.R. Miller. Phys. Rev. B **2**, 8, 3210 (1970).
- [5] Л.Н. Лукьянова, В.А. Кутасов, В.В. Попов, П.П. Константинов. ФТТ **46**, 8, 1366 (2004).
- [6] Л.Н. Лукьянова, В.А. Кутасов, П.П. Константинов. ФТТ **47**, 2, 224 (2005).
- [7] L.N. Lukyanova, V.A. Kutasov, V.V. Popov, P.P. Konstantinov, M.I. Fedorov. Proc. of the XXV Int. Conf. of thermoelectrics. IEEE, Vienna, Austria (2006). P. 496.