

Термоэлектрические характеристики сильно легированного теллурида свинца *p*-типа при разной глубине зоны тяжелых дырок

© А.В. Дмитриев

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова (физический факультет),
119991 Москва, Россия

E-mail: dmitriev@mig.phys.msu.su

(Поступила в Редакцию 25 июля 2018 г.

В окончательной редакции 11 октября 2018 г.

Принята к публикации 15 октября 2018 г.)

Рассчитан полный комплект термоэлектрических величин сильно легированного *p*-PbTe в диапазоне температур 300–1200 К при концентрации акцепторов $N_a = 1 \cdot 10^{19} - 4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и глубине зоны тяжелых дырок от 0.36 до 0.7 эВ. Величина термоэлектрической эффективности Z оказалась весьма чувствительна к уровню легирования, увеличиваясь в 1.5 раза при возрастании концентрации примеси с $1 \cdot 10^{19}$ до $5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, причем наибольшее значение Z отвечает $N_a = (1-2) \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$. Изменение глубины зоны тяжелых дырок приводит к заметному смещению положения максимума Z по оси температуры без существенного изменения величины Z в максимуме. Температура, отвечающая максимуму Z , близко коррелирует с той, при которой вершина зоны легких дырок пересекает уровень Ферми. Максимальная найденная величина ZT равняется 1.64. При глубине зоны тяжелых дырок 0.5 эВ наши расчеты хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

DOI: 10.21883/FTR.2019.04.47436.8963

1. Введение

Зонная структура теллурида свинца устроена довольно сложно [1]. Его электронный энергетический спектр в окрестности уровня Ферми состоит из электронных минимумов в L -точках зоны Бриллюэна, максимумов с легкими дырками в тех же точках и максимумов зоны тяжелых дырок, располагающихся в Σ -точках зоны Бриллюэна. При тех довольно высоких температурах 700–800 К, при которых работают основанные на PbTe термоэлектрические устройства, в электронном транспорте участвуют все три группы носителей заряда. К тому же ширина запрещенной зоны в L -точке в этом материале быстро увеличивается с температурой, так что при определенной ее величине прямозонный полупроводник превращается в материал с непрямой щелью (рис. 1). Эти обстоятельства сильно затрудняют анализ термоэлектрических свойств этого важного материала и их качественное понимание [3–10].

Так, несколькими экспериментальными группами было не так давно обнаружено значительное увеличение термоэлектрической эффективности ZT у сильно легированных образцов теллурида свинца *p*-типа с $N_a \approx 10^{20} \text{ см}^{-3}$ с обычного значения около 0.7 до величины 1.2 [9–11]. Этот рост был воспроизведен теоретически в работах [12–14], где было показано, что максимум термоэлектрической эффективности при $N_a = 1 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ соответствует той температуре, при которой совпадают по энергии вершины легкой и тяжелой дырочных зон, причем уровень Ферми тоже находится недалеко от них. Данный результат находится в согласии с предположениями, ранее выдвинутыми в

работе [15], о важной роли, которую играет высокая плотность дырочных состояний в увеличении термоэлектрической эффективности PbTe.

В работах [12–14] осталось, однако, не выясненным, с каким именно фактором в таком тройном совпадении энергий связан максимум ZT . Важно ли для него совпадение вершин обеих дырочных зон или главным является пересечение какой-то одной из них с уровнем Ферми, или, наконец, для максимума действительно необходимо равенство всех трех энергий? А может быть, обнаруженное соответствие максимума ZT температуре,

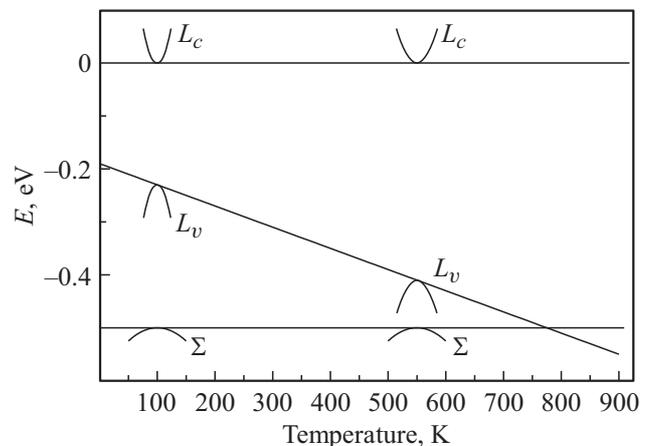


Рис. 1. Качественная диаграмма электронного спектра PbTe [2]. L_c — минимумы зоны проводимости в L -точках зоны Бриллюэна, L_v — максимумы валентной зоны в тех же точках, Σ — максимумы зоны тяжелых дырок в Σ -точках зоны Бриллюэна.

при которой сравниваются характерные энергии, вообще представляет собой простую случайность?

Хорошо известна формула Мотта [16] для коэффициента Зеебека:

$$S = \frac{\pi^2 T}{3e} \left. \frac{\partial \ln \sigma}{\partial E} \right|_{E=E_F} = \frac{\pi^2 T}{3e} \left. \frac{\partial \ln(v^2 g \tau)}{\partial E} \right|_{E=E_F}, \quad (1)$$

в которой E и v — энергия и скорость носителей заряда, τ — время релаксации, g — плотность состояний. Она показывает, что S в самом деле возрастает при приближении энергии Ферми к краю зоны, где плотность состояний быстро изменяется. Однако использование этой формулы в данном случае осложняется тем, что она получена для сильно вырожденных носителей, находящихся в пределах одной зоны, а в РbТе при 700–800 К ни то ни другое не имеет места.

Ясно, с другой стороны, что на поставленный выше вопрос затруднительно ответить, если рассматривать только один образец, характеристики которого неизменны. В то же время анализ термоэлектрических характеристик теллурида свинца мог бы оказаться более удобным и продуктивным, если бы относящиеся к этому веществу результаты удалось включить в более широкую картину и посмотреть на них с более общей точки зрения. Такой цели могла бы послужить, например, вариация подходящих параметров материала, влияющих на его электронные характеристики, и наблюдение возникающих при этом изменений.

Электронные свойства полупроводника зависят в первую очередь от его зонной структуры. В материале p -типа, который мы сейчас рассматриваем, важнее всего характеристики валентной зоны. Подходящим параметром в ней может служить глубина Σ -зоны тяжелых дырок. Другой естественный параметр — концентрация акцепторной примеси, определяющая концентрацию дырок. В данной статье мы воспользуемся обоими.

Изменение глубины Σ -зоны возможно не только как метод теоретического исследования электронных свойств, но и в реальности. Величина энергетических зазоров в электронном спектре полупроводника восприимчива по отношению ко многим методам воздействия, в числе которых, например, гидростатическое давление и деформация, сплавление с другим подходящим веществом и сильное легирование — через так называемое „химическое давление“. Разумеется, при этом могут в той или иной степени меняться и другие параметры спектра, но мы здесь ограничимся рассмотрением только изменения глубины Σ -зоны.

Разумеется, положение края Σ -зоны, вообще говоря, зависит от температуры. Однако расчеты показывают, что эта зависимость относительно слабая [17], и в настоящей работе мы ей пренебрегаем и считаем, что $E_{g\Sigma} = \text{const}$. Мы считаем также, что температурная зависимость прямой щели в L -точках остается линейной во всем рассматриваемом температурном диапазоне (рис. 1).

С точки зрения практических термоэлектрических приложений, как мы увидим далее, изменение глубины зоны тяжелых дырок позволяет смещать положение максимума термоэлектрической эффективности по оси температуры почти без изменения максимальной величины этой эффективности. Это дает удобную возможность перемещать максимум эффективности термоэлектрического устройства в желательную область рабочей температуры.

В данной работе мы исследуем термоэлектрические характеристики РbТе в области температур от 300 до 1200 К, т.е. практически до температуры его плавления. В таком широком температурном интервале использование комбинации ZT в качестве меры термоэлектрической эффективности не вполне удобно, поскольку она подчеркивает область высоких температур. Величина Z лучше позволяет сравнивать термоэлектрические эффективности, относящиеся к сильно различающимся температурам, и поэтому именно она представлена на наших графиках. Для удобства она умножена на 1000, так что получающаяся величина аналогична ZT при $T = 1000$ К. Напомним, что именно сама величина

$$Z = \frac{\sigma S^2}{\kappa} \quad (2)$$

является мерой термоэлектрической эффективности материала [18]. В этой формуле σ — электрическая проводимость, S — коэффициент Зеебека, а κ — полная теплопроводность полупроводника.

Для удобства читателя мы, однако, приводим также и оценки характерных значений величины ZT .

2. Модель и метод расчета

Наша модель и метод вычислений подробно описаны в работах [19,20].

В модели учитывается электронный перенос по всем трем зонам, показанным на рис. 1, которые содержат три группы носителей заряда: электроны и легкие и тяжелые дырки. Поскольку РbТе — кубический кристалл и проводимость его изотропна, в модели закон дисперсии во всех зонах считается изотропным. Принята во внимание сильная непараболичность законов дисперсии электронов и легких дырок, которые описываются моделью Лэкса (все относящиеся к ней величины представлены, например, в работе [21]). Учтено рассеяние электронов и дырок на DA- и PO-фононах и заряженных примесях. Считается, что компенсация отсутствует.

В модель входят многочисленные материальные параметры, описывающие характеристики как зонной структуры, так и процессов рассеяния электронов и дырок. Мы используем ту их совокупность, которая была найдена в работах [12–14]. В них они были определены из весьма полного набора экспериментальных данных, полученных на сильно легированных образцах p -РbТе с концентрацией акцепторов на уровне 10^{20} см^{-3} [11].

Вычисления были проведены численно.

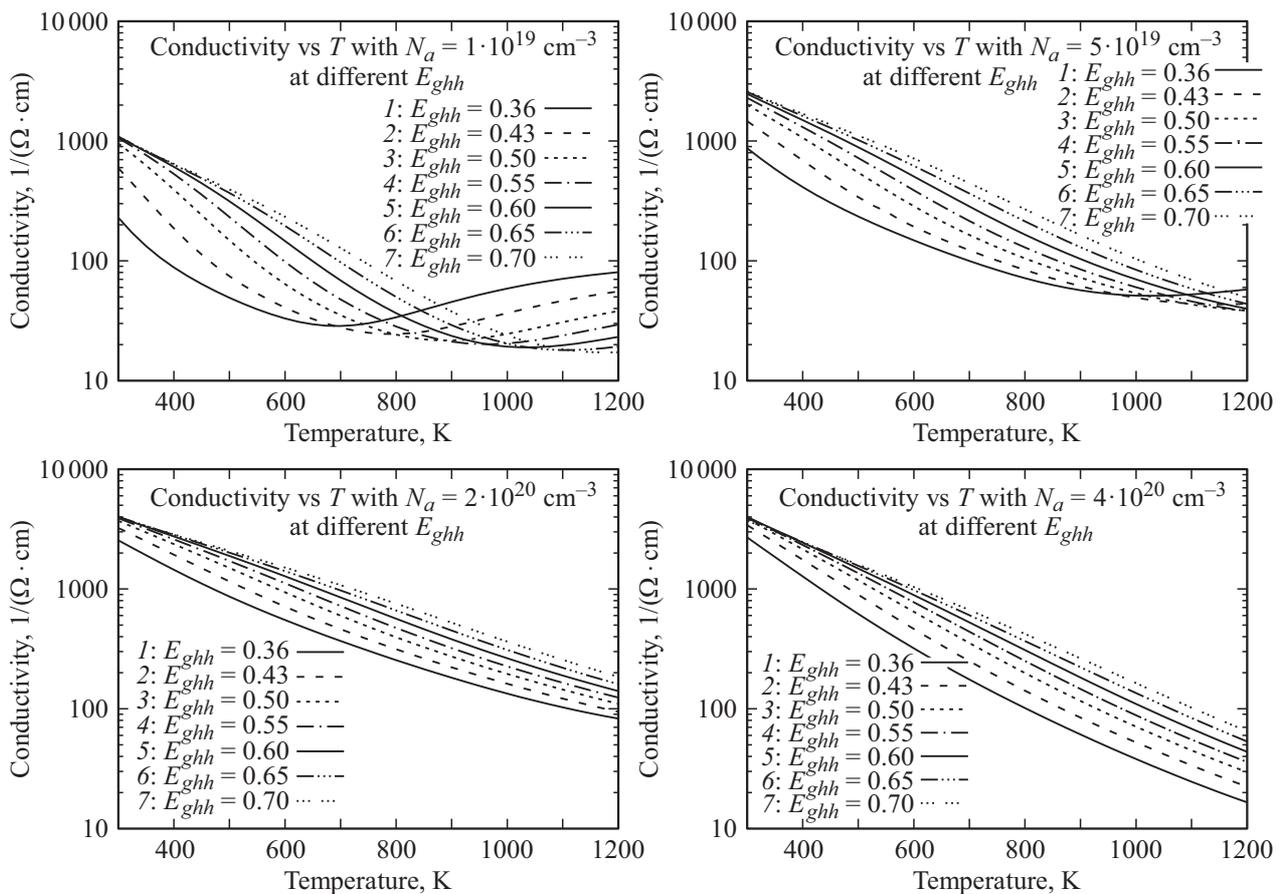


Рис. 2. Проводимость при уровнях легирования $1 \cdot 10^{19}$ – $4 \cdot 10^{20}$ см^{-3} и при различных значениях $E_{g\Sigma}$.

3. Результаты расчетов

На рис. 2 представлена проводимость материала как функция температуры. В целом температурная зависимость проводимости имеет по большей части металлический характер, что естественно при высоком уровне легирования. Только при наименьшей исследованной плотности примесей $1 \cdot 10^{19}$ см^{-3} и при самых высоких температурах $T > 700$ К прослеживается полупроводниковый участок роста $\sigma(T)$, обусловленный рождением собственных электронов с большой подвижностью в *L*-точках. Их появление отчетливо заметно также на соответствующем графике коэффициента Зеебека, который в этой области меняет знак (рис. 3).

Проводимость, разумеется, возрастает при увеличении концентрации примесей, но не так быстро, как последняя, потому что вместе с числом примесных центров увеличивается не только концентрация дырок, но и темп примесного рассеяния, а это ведет к уменьшению подвижности. Видно также, что если при фиксированной концентрации примесей зона тяжелых дырок перемещается ниже по энергии, то проводимость становится больше из-за перехода дырок из тяжелой зоны в легкую.

Коэффициент Зеебека при изменении температуры проходит через максимум (рис. 3). Его величина в

максимуме, как обычно, падает при увеличении концентрации носителей заряда. Расположение максимума на оси температуры сильно зависит от глубины Σ -зоны: чем глубже она располагается, тем выше температура, отвечающая максимуму. При сравнительно низком уровне легирования $1 \cdot 10^{19}$ см^{-3} величина S в максимуме несколько уменьшается при заглоблении Σ -зоны, а при концентрации примесей $> 5 \cdot 10^{19}$ см^{-3} она, наоборот, увеличивается.

Температурная зависимость полной теплопроводности показана на рис. 4. Отчетливо виден ее рост при понижении температуры, повторяющий поведение проводимости. При повышении температуры теплопроводность выходит на примерно постоянный уровень 1–1.5 Вт/мК, который практически не зависит ни от концентрации примеси, ни от глубины зоны тяжелых дырок. Величина полной теплопроводности в этой области определяется в основном теплопроводностью решетки и электронными межзонными вкладами. Чем глубже располагается тяжелая зона, тем при более высокой температуре происходит выход теплопроводности на эту „полку“.

Теплопроводность в PbTe с его тремя разрешенными зонами: зоной проводимости (*e*), зоной легких дырок (*lh*) и зоной тяжелых дырок (*hh*) — включает многочисленные слагаемые. В их число входят теплопровод-

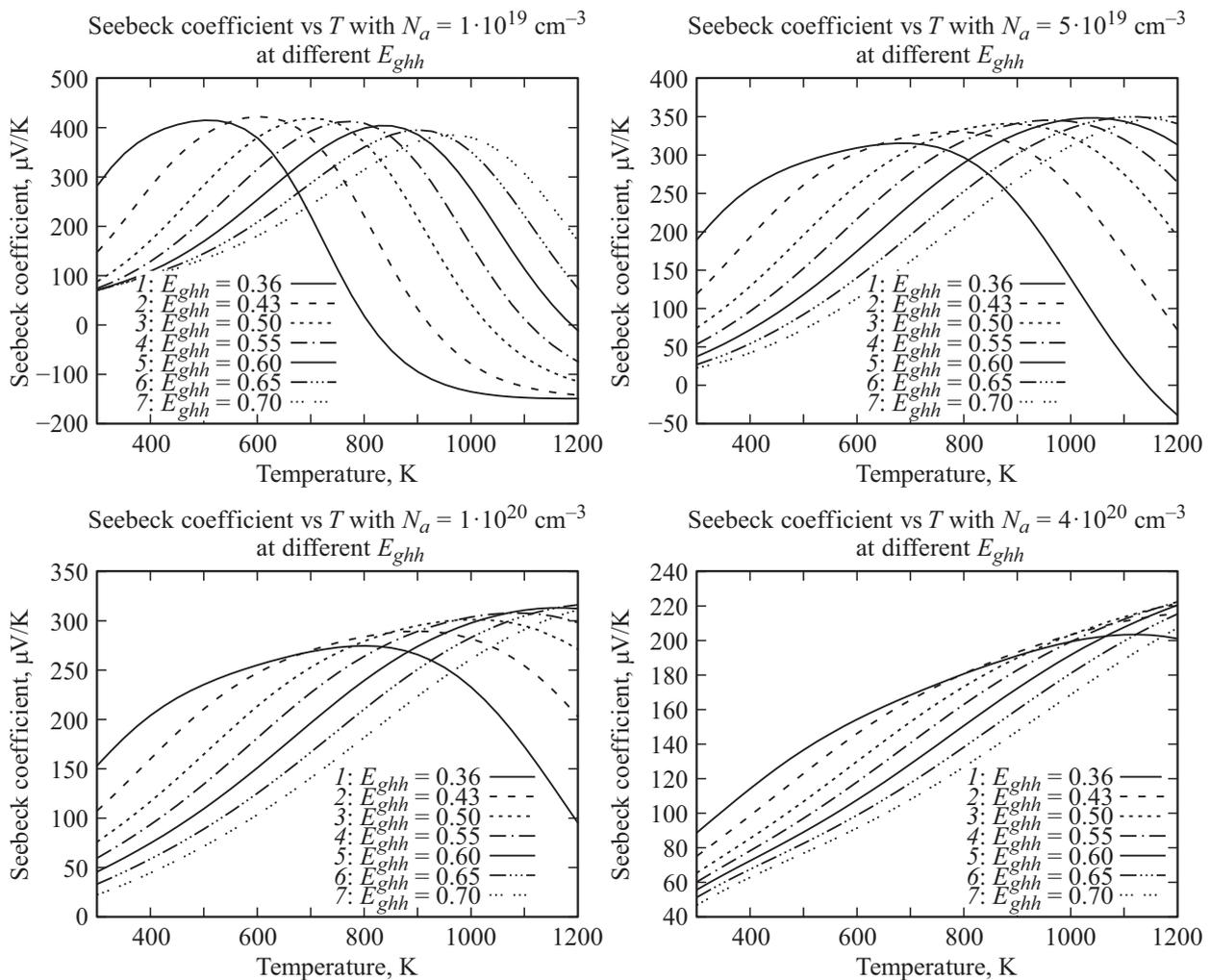


Рис. 3. Коэффициент Зеебека при уровнях легирования $1 \cdot 10^{19} - 4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и при различных значениях E_{ghh} .

ность решетки, вклады трех групп подвижных носителей заряда и члены, обусловленные межзонными переходами носителей заряда между содержащими их тремя зонами ($lh-e$, $hh-e$ и $lh-hh$) (см., например, работы [19,20] и ссылки в них). Эти компоненты представлены на рис. 5 как функции температуры.

При относительно низких температурах основной вклад дает теплопроводность решетки и подвижных дырок в двух зонах. При низких уровнях легирования заметны также переходы между этими зонами. При высоких температурах роль теплопроводности по разрешенным зонам становится мала, и основными слагаемыми в теплопроводности делаются решеточный член и вклады переходов между двумя дырочными зонами и зоной проводимости ($lh-e$ и $hh-e$). Последние проявляются, в частности, в высокотемпературных осцилляциях на кривых теплопроводности, (см. рис. 4) при $N_a = 1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$. При температурах 700–900 К электронные вклады малы по сравнению с теплопроводностью решетки.

Такая структура теплопроводности в p -PbTe ясно показывает, что закон Видемана–Франца не может со-

блюдаться в этом материале. Именно благодаря тому, что он нарушается, термоэлектрическая эффективность в этом полупроводнике может увеличиваться с ростом концентрации дырок. Если бы этот закон соблюдался, уменьшение коэффициента Зеебека при росте их концентрации приводило бы к уменьшению Z в соответствии с формулой (2).

Расчетные температурные зависимости термоэлектрической эффективности показаны на рис. 6 и 7. Их вид меняется под действием обоих наших параметров, $E_{g\Sigma}$ и N_a . При изменении глубины Σ -зоны максимум Z сдвигается по оси температуры в широких пределах без существенного изменения величины Z в максимуме (рис. 6)

Напротив, как видно из рис. 7, изменение уровня легирования существенно влияет на максимальное значение термоэлектрической эффективности. Температура максимума изменяется тоже, но не так сильно, как при изменении Σ -щели.

Сопоставление кривых $Z(T)$ при наименьшем уровне легирования $N_a = 1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ с другими кривыми на

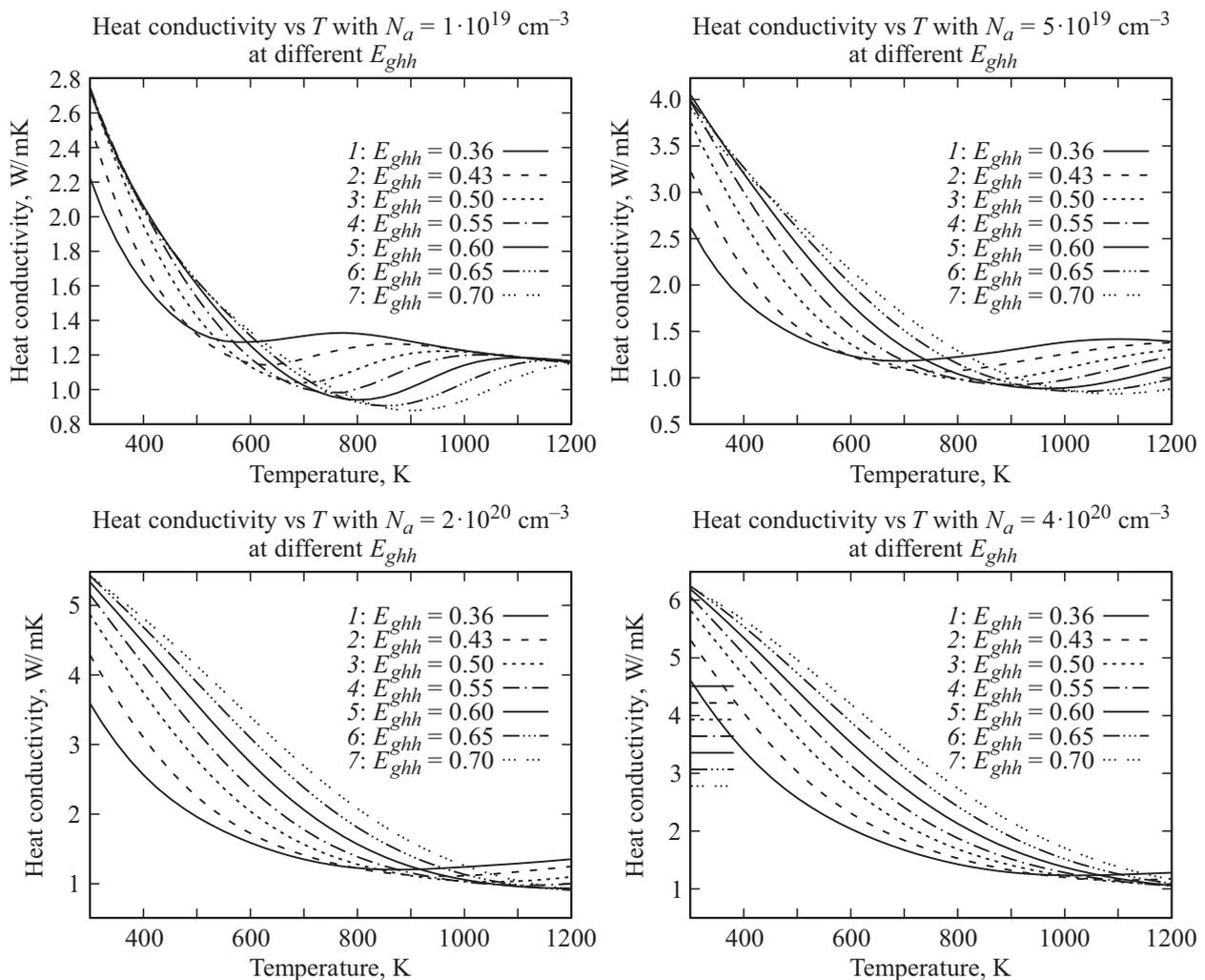


Рис. 4. Полная теплопроводность при уровнях легирования $1 \cdot 10^{19}$ – $4 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ и при различных значениях E_{ghh} .

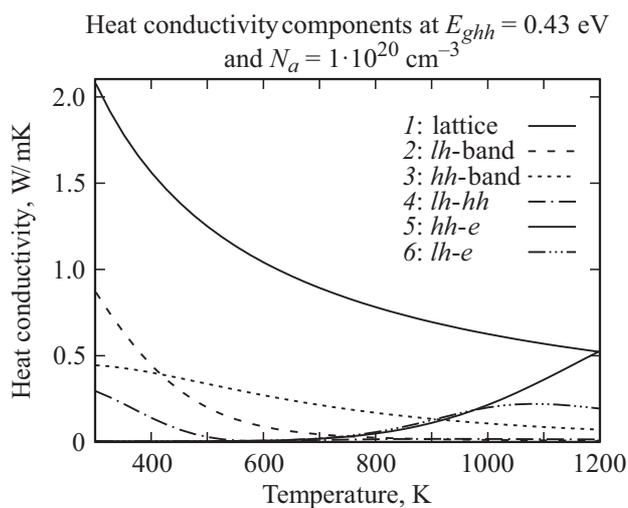


Рис. 5. Составляющие полной теплопроводности при уровне легирования $N_a = 1 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ и ширине Σ -щели $E_{g\Sigma} = 0.43 \text{ eV}$. Вклад зонных электронов в теплопроводность пренебрежимо мал.

рис. 7 отчетливо показывает то значительное влияние, которое сильное легирование на уровне 10^{20} cm^{-3} оказывает на термоэлектрическую эффективность теллурида свинца *p*-типа. Из графиков следует, что в большинстве случаев наибольшая эффективность получается при $N_a = 1 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$, и только при наибольших заглуплениях тяжелой дырочной зоны может стать более выгодной вдвое большая концентрация акцепторов.

Увеличение концентрации примесей с $1 \cdot 10^{19}$ до $5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ уже приводит к 50% возрастанию Z . При этом теплопроводность увеличивается на 25–30%, коэффициент Зеебека падает на $\sim 15\%$, и рост Z происходит за счет очень существенного 4-кратного возрастания проводимости. При этих еще не слишком высоких концентрациях примесей рассеяние дырок происходит в основном на фонах, поэтому уменьшение подвижности при легировании невелико и проводимость увеличивается почти пропорционально росту концентрации носителей заряда. При дальнейшем росте легирования увеличение концентрации частично компенсируется па-

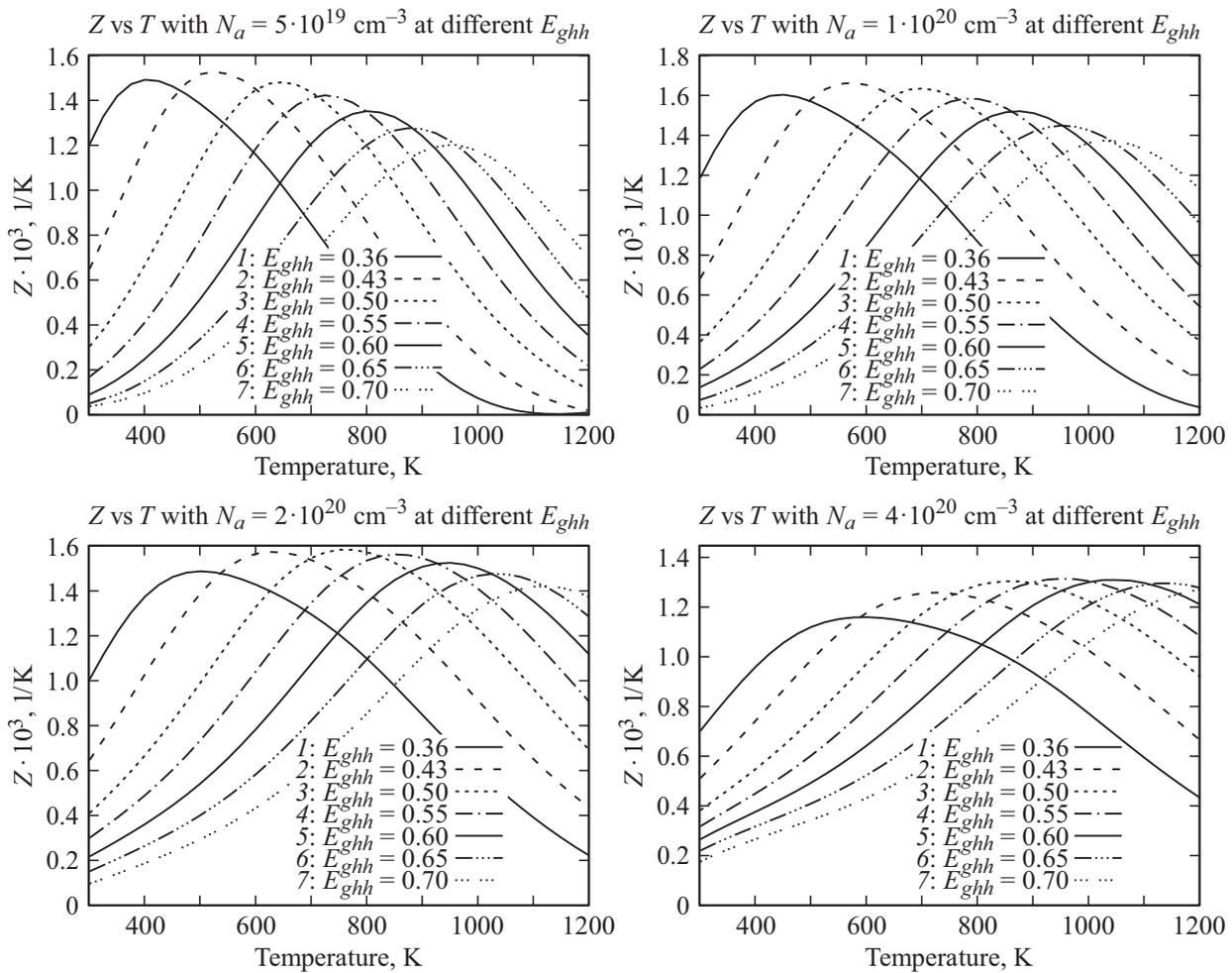


Рис. 6. Термоэлектрическая эффективность при уровне легирования $5 \cdot 10^{19} - 4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и разных значениях $E_{g\Sigma}$.

дением подвижности из-за усиливающегося примесного рассеяния и поэтому влияние легирования на проводимость и термоэлектрическую эффективность ослабевает.

Самое большое значение Z во всех наших расчетах получалось при уровне легирования $N_a = 1 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и ширине щели в Σ -точке $E_{g\Sigma} = 0.43 \text{ эВ}$. В этих условиях величина Z достигает 0.00166 К^{-1} при температуре $T = 575 \text{ К}$, чему соответствует $ZT = 0.955$.

Необходимо оговориться, что речь здесь идет именно о значении ZT , соответствующем максимальной величине Z , а не о максимальном значении самого произведения ZT . Между этими величинами большая разница: максимальная величина ZT в наших вычислениях была равна 1.64 и получалась при $T = 1200 \text{ К}$, $N_a = 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и $E_{g\Sigma} = 0.7 \text{ эВ}$, однако ей отвечает только $Z = 0.00137 \text{ К}^{-1}$ (см. рис. 6, $N_a = 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$).

Как следует из недавних вычислений [15,17], в теллуриде свинца $E_{g\Sigma} = 0.5 \text{ эВ}$. Эта же величина получилась и из выполненного в работах [12–14] сравнения расчетных термоэлектрических характеристик РbТе с данными детальных их измерений в статье [11]. Наибольшая величина термоэлектрической эффективности

при данной глубине Σ -зоны в наших расчетах оказалась равной 0.00158 К^{-1} при $T = 750 \text{ К}$ и $N_a = 2 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, что дает $ZT = 1.185$. Эта величина хорошо согласуется с экспериментальными данными, полученными в работах [9–11].

Температура, при которой возникает максимум Z , не совпадает с той, при которой располагается максимум коэффициента Зеебека, а всегда меньше ее (ср. рис. 3 и 6). Так получается, потому что проводимость убывает с ростом температуры быстрее, чем теплопроводность, так что отношение σ/κ в формуле (2) максимально при низких температурах, и это смещает максимум Z влево от максимума S .

Положение максимума Z на оси температуры с хорошей точностью соответствует той температуре, при которой вершина зоны легких дырок в ее температурном движении (рис. 1) пересекает уровень Ферми (рис. 6–8). Эта корреляция имеет место при любых степенях легирования и глубинах Σ -зоны и вряд ли может быть случайной.

Такое соответствие не удивительно. Когда зона легких дырок в ее температурном смещении пересекает уро-

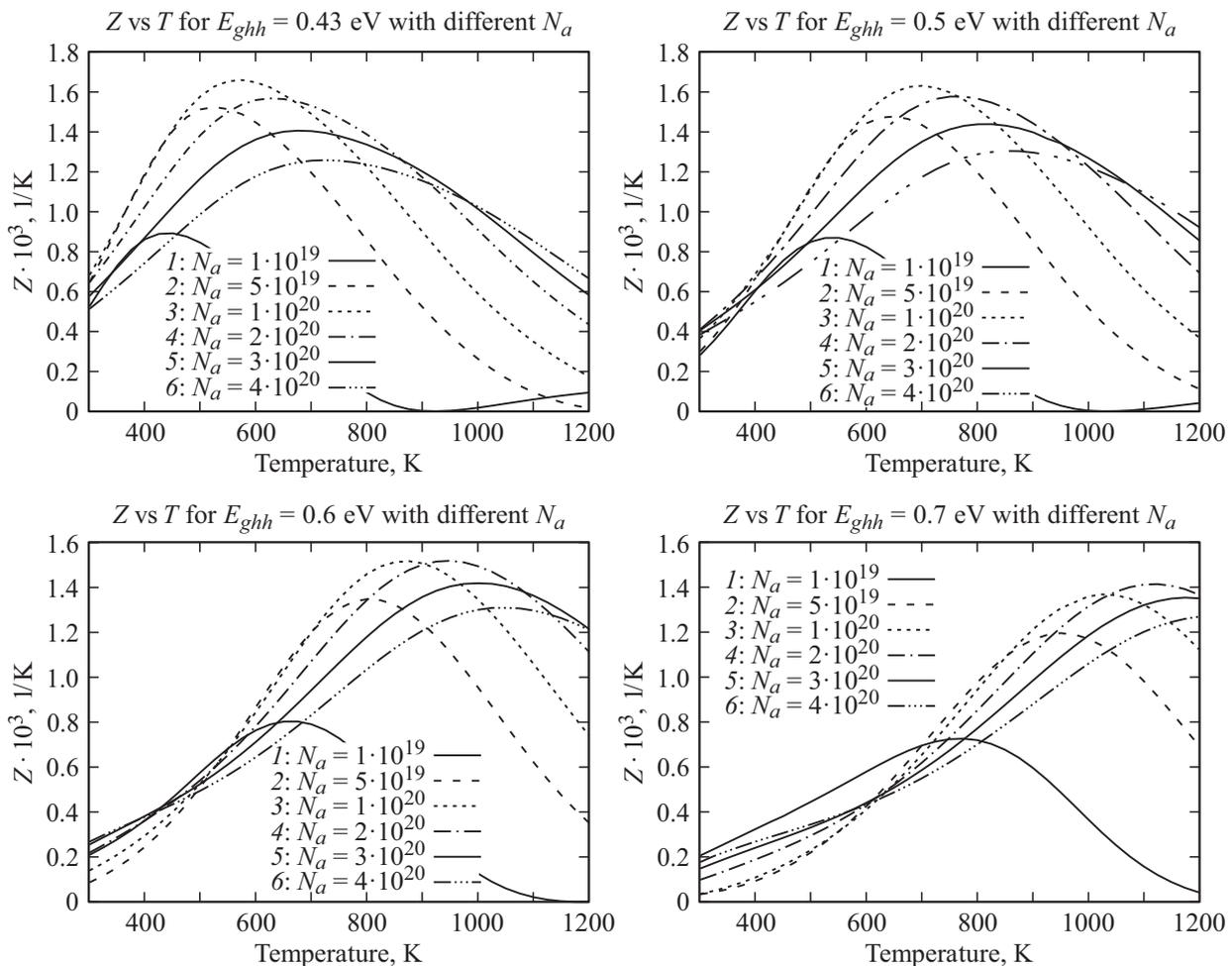


Рис. 7. Термоэлектрическая эффективность при $E_{g\Sigma}$ от 0.43 до 0.7 эВ и уровне легирования $1 \cdot 10^{19} - 4 \cdot 10^{20}$ см $^{-3}$.

вень Ферми, заселенность этой зоны быстро меняется, как это отчетливо видно по ее проводимости (рис. 9). На полной проводимости эти изменения, разумеется, тоже отражаются, но на наших рисунках это не так заметно. Зато хорошо видно возникающее при температуре такого пересечения „плечо“ на кривой коэффициента Зеебека (рис. 3, графики с $E_{g\Sigma} = 0.36, 0.43$ эВ и др.). В этом „плече“ производная dS/dT уменьшается, вызывая замедление зависимости $Z(T)$ и способствуя формированию ее максимума.

Разумеется, есть еще и вторая, тяжелая дырочная Σ -зона, и уровень Ферми при определенной температуре переходит и через ее край тоже. Температуры такого перехода отмечены кружками на кривых на рис. 8. Однако, как видно из рис. 6 и 7, при этих температурах никаких особенностей на графиках $Z(T)$ не возникает. И действительно, температурное движение уровня Ферми относительно зоны тяжелых дырок вызывается условием неизменности концентрации дырок, поэтому при входе его в Σ -зону или выходе его из нее быстрых изменений концентрации тяжелых дырок не наблюдается. В результате все кривые на рис. 6 выглядят

одинаково, и по их виду нельзя сказать, какая из них соответствует данному пересечению.

Если более внимательно посмотреть на рис. 6 и 8 при $N_a = 1 \cdot 10^{20}$ см $^{-3}$, то видно, что, с одной стороны, абсолютный максимум Z , отвечающий $E_{g\Sigma} = 0.43$ эВ, расположен при температуре $T = 575$ К, тогда как пересечение уровня Ферми с краем тяжелой дырочной зоны происходит при 513 К. С другой стороны, при $E_{g\Sigma} = 0.395$ эВ положение максимума Z в точности совпадает с температурой тройного пересечения обеих дырочных зон и уровня Ферми. Тем не менее величина Z в соответствующем максимуме оказывается меньше, чем при $E_{g\Sigma} = 0.43$ эВ, который соответствует пересечению одной легкой дырочной зоны с уровнем Ферми. Таким образом, существенного влияния пересечения уровня Ферми с краем зоны тяжелых дырок на формирование максимума Z не заметно.

Тем не менее сама величина Z в максимуме оказывается больше, если уровень Ферми располагается на фоне тяжелой зоны, чем если он находится выше нее. Действительно, как видно из рис. 6, при уровне легирования $1 \cdot 10^{19}$ см $^{-3}$ наибольшая величина Z близ-

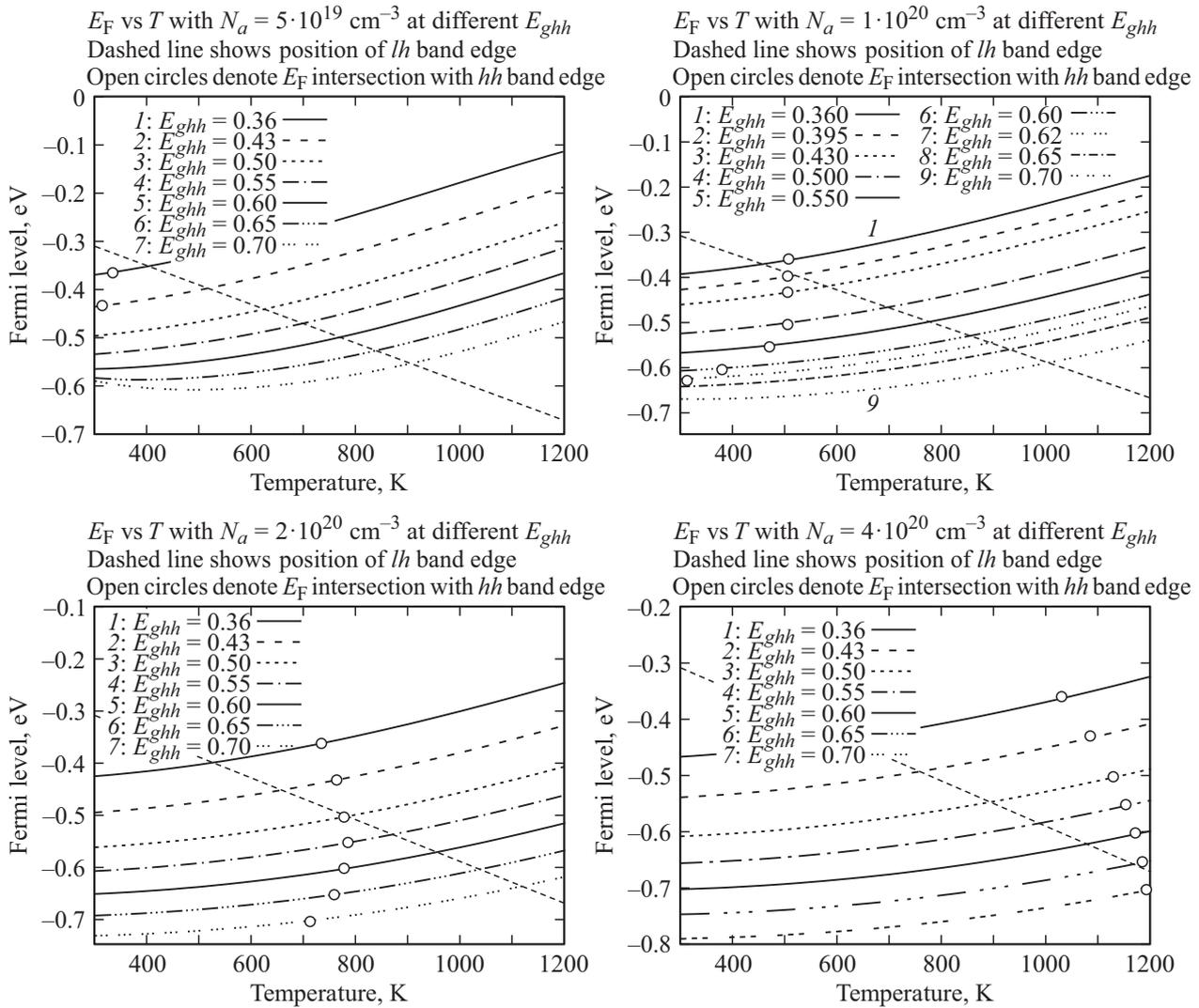


Рис. 8. Расположение уровня Ферми и краев валентных зон при $N_a = 5 \cdot 10^{19} - 4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и различных $E_{g\Sigma}$. Кругами обозначены пересечения уровня Ферми с краем Σ -зоны.

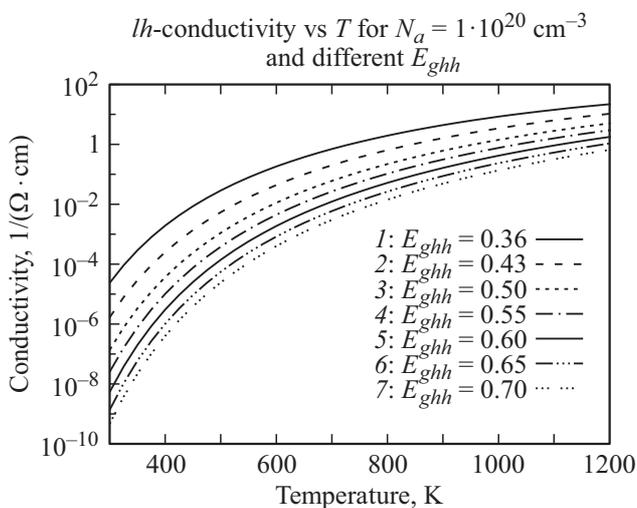


Рис. 9. Проводимость по зоне легких дырок при $N_a = 1 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и различных $E_{g\Sigma}$.

как к 0.0009 K^{-1} , тогда как при концентрации акцепторов $N_a = 5 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ и выше она возрастает до $0.0014 - 0.0016 \text{ K}^{-1}$. В первом случае уровень Ферми остается всегда выше зоны тяжелых дырок, тогда как во втором он при низких температурах заходит в Σ -зону. Данное обстоятельство согласуется со сделанным выше общим заключением об увеличении термоэлектрической эффективности при росте уровня легирования.

4. Заключение

В статье рассчитан полный набор термоэлектрических величин сильно легированного p -PbTe при температуре 300–1200 К, концентрации акцепторов $1 \cdot 10^{19} - 4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и при различных положениях тяжелой дырочной зоны: $E_{g\Sigma} = 0.36 - 0.7 \text{ эВ}$. Наибольшее расчетное значение термоэлектрической эффективности $ZT = 1.64$.

Глубина зоны тяжелых дырок не влияет существенно на максимальную величину Z , но сильно сказывается на отвечающей этому максимуму температуре. Положение максимума Z на температурной оси с хорошей точностью соответствует той температуре, при которой край зоны легких дырок пересекается с уровнем Ферми.

При глубине зоны тяжелых дырок 0.5 эВ наши расчеты хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Самое же большое значение Z во всех наших расчетах получилось при уровне легирования $N_a = 1 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ и $E_{g\Sigma} = 0.43 \text{ эВ}$.

Список литературы

- [1] H. Preier. Appl. Phys., **20**, 189 (1989).
- [2] A.V. Dmitriev. J. Appl. Phys., **123**, 165707 (2018).
- [3] T.M. Tritt, M.A. Subramanian. MRS Bull., **31**, 188 (2006).
- [4] H. Ohita. Materials Today, **10**, 44 (2007).
- [5] A.B. Дмитриев, И.П. Звягин. УФН, **180**, 208 (2010).
- [6] G. Komisarchik, D. Fuks, Yaniv Gelbstein. J. Appl. Phys., **120**, 055104 (2016).
- [7] Manju Bala, Anuradha Bhogra, Saif A. Khan, Tripurari S. Tripathi, Surya K. Tripathi, Devesh K. Avasthi, Kandasami Asokan. J. Appl. Phys., **121**, 215301 (2017).
- [8] Zong-Yue Li, Jing-Feng Li, Wen-Yang Zhao, Qing Tan, Tian-Ran Wei, Chao-Feng Wu, Zhi-Bo Xing. Appl. Phys. Lett., **104**, 113905 (2014).
- [9] A. Ishida, T. Yamada, D. Cao, Y. Inoue, M. Veis, T. Kita. J. Appl. Phys., **106**, 023718 (2009).
- [10] Y. Pei, A. LaLonde, S. Iwanaga, G.J. Snyder. Energy & Environmental Sci., **4**, 2085 (2011).
- [11] J. Andrulakis, I. Todorov, D.-Y. Chung, S. Ballikaya, G. Wang, C. Uher, M. Kanatzidis. Phys. Rev. B, **82**, 115209 (2010).
- [12] N.I. Babenko, A.V. Dmitriev. J. Appl. Phys., **121**, 025704 (2017).
- [13] Н.И. Бабенко, А.В. Дмитриев. Вестн. Моск. ун-та. Физика, астрономия, **3**, 80 (2014).
- [14] Н.И. Бабенко, А.В. Дмитриев. Вестн. Моск. ун-та. Физика, астрономия, **3**, 85 (2014).
- [15] A. Svane, N.E. Christensen, M. Cardona, A.N. Chantis, M. van Schilfhaarde, T. Kotani. Phys. Rev. B, **81**, 245120 (2010).
- [16] N.F. Mott, H. Jones. *The Theory of the Properties of Metals and Alloys* (Clarendon, Oxford, 1936).
- [17] Z. Gibbs, H. Kim, H. Wang, R.L. White, F. Drymiotis, M. Kaviani, G.J. Snyder. Appl. Phys. Lett., **103**, 262109 (2013).
- [18] А.Ф. Иоффе. *Полупроводниковые термоэлементы* (М., Изд-во АН СССР, 1956).
- [19] A.V. Dmitriev, E.S. Tkacheva. J. Electron. Mater., **43**, 1280 (2014).
- [20] А.В. Дмитриев, Е.С. Ткачева. Вестн. Моск. ун-та. Физика, астрономия, **3**, 38 (2014).
- [21] S.D. Beneslavskii, A.V. Dmitriev. Sol. St. Commun., **32**, 1175 (1979).

Редактор Г.А. Огансян

Thermoelectric characteristics of highly doped *p*-type lead telluride at variable heavy hole band depth

A.V. Dmitriev

Lomonosov Moscow State University
(Department of Low Temperature Physics,
the Faculty of Physics),
119991 Moscow, Russia

Abstract The full set of thermoelectric characteristics of highly doped *p*-PbTe was calculated in the temperature interval from 300 to 1200 K at the acceptor doping levels from $N_a = 1 \cdot 10^{19}$ to $4 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ and at the heavy hole band depth from 0.36 to 0.7 eV. The figure-of-merit value appears to be very sensitive to the doping and increases by a factor of 1.5 when the doping level raises from $1 \cdot 10^{19}$ to $5 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ the maximum Z value corresponds to $N_a = (1 \text{ to } 2) \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$. The heavy hole band depth variation shifts in wide limits the position of $Z(T)$ maximum on the temperature axis whereas Z value in the maximum remains almost unaltered. The temperature corresponding to Z maximum correlates with the one at which the light hole band maximum crosses the Fermi level. The maximum calculated ZT value equals 1.64. At the heavy hole band depth of 0.5 eV the results of our calculations are in close agreement with available experimental data.