

Термоэлектрическая эффективность монокристаллов полупроводникового силицида рутения

© А.Е. Кривошеев[¶], Л.И. Иваненко^{¶¶}, А.Б. Филонов, В.Л. Шапошников,
Г. Бер*, И. Шуманн*, В.Е. Борисенко

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники,
220013 Минск, Белоруссия

* Институт физики твердого тела и материаловедения им. Лейбница,
PF 27.01.16, D-01171, Дрезден, Германия

(Получена 22 марта 2005 г. Принята к печати 8 апреля 2005 г.)

Проведено комплексное экспериментальное и теоретическое исследование термоэлектрической эффективности полупроводникового силицида рутения Ru_2Si_3 . Монокристаллические образцы чистого и легированного марганцем Ru_2Si_3 были получены методом зонной плавки с применением оптического нагрева. Температурные зависимости удельного сопротивления, коэффициента Холла, коэффициента Зеебека и теплопроводности измерены в интервале 100–900 К. Для кристаллов Ru_2Si_3 , легированных марганцем, коэффициент Зеебека является положительным во всем исследованном температурном диапазоне и достигает своего максимального значения 400 мкВ/К приблизительно при 500 К. Значение коэффициента Зеебека для этих кристаллов при комнатной температуре составляет 300 мкВ/К, что в 2 раза превышает величину для нелегированного материала.

Теоретическое исследование транспортных и термоэлектрических свойств включает расчет зонной структуры из первых принципов, оценку эффективных масс носителей заряда, моделирование подвижности электронов и дырок с учетом классических механизмов рассеивания, расчет коэффициента Зеебека и термоэлектрической эффективности ZT . Полученные результаты теоретического моделирования находятся в хорошем качественном и количественном соответствии с экспериментальными данными.

PACS: 72.20.Pa, 71.20.Nr, 72.20.Je

1. Введение

Значительная часть современных исследований в области физики полупроводников направлена на синтез новых материалов на кремнии с целью использования преимуществ традиционной кремниевой технологии. Полупроводниковый силицид рутения Ru_2Si_3 , обладающий возможностью эпитаксиального роста на кремнии, делает перспективы такого использования реальными уже в настоящее время [1]. Благодаря высокой термической стабильности и стойкости к химическим обработкам практическое использование полупроводниковых силицидов лежит в области термоэлектричества. Основные усилия при этом сфокусированы на поиске материалов с высокой термоэлектрической эффективностью $Z = S^2/\rho\kappa$, где S — коэффициент Зеебека (термоэдс), ρ — электрическое сопротивление материала, а κ — его теплопроводность. В то время как безразмерная величина ZT для большинства термоэлектрических материалов, используемых в настоящее время, не превышает единицы [2,3], согласно существующим теоретическим оценкам ZT для силицида рутения может превышать этот предел [4]. Однако экспериментальные попытки получить значение $ZT \geq 1$ на данный момент не принесли желаемого результата [5–8]. Одной из причин может являться недостаточно высокое качество исследуемых образцов. Недавние исследования показывают, что термоэлектрическая эффективность монокристаллов по-

лупроводникового силицида рутения, сформированных методом зонной плавки, выше аналогичной величины поликристаллических образцов и тонких пленок [9,10].

Данная работа является результатом комплексного теоретического и экспериментального исследования термоэлектрических свойств монокристаллов полупроводникового силицида рутения с целью реальной оценки потенциала данного материала для термоэлектричества. Методом линеаризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ) с полным потенциалом проведено моделирование энергетической зонной структуры Ru_2Si_3 , рассчитаны эффективные массы носителей заряда, их подвижность и коэффициент Зеебека. Температурные зависимости подвижности носителей заряда и коэффициента Зеебека измерены экспериментально на монокристаллах и согласованы с расчетными данными.

2. Эксперимент

Монокристаллические образцы чистого и легированного марганцем полупроводникового силицида рутения были получены методом зонной плавки с применением оптического нагрева [11]. Для изготовления поликристаллических заготовок использовались материалы высокой чистоты: рутений 99.95% (фирма-производитель Heraeus), кремний 99.999% (фирма-производитель Alfa Aesar), марганец 99.99% (фирма-производитель Goodfellow). Концентрация марганца x при изготовлении заготовок $\text{Ru}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Si}_{1.5}$ варьировалась в пределах $0.004 < x < 0.007$. Полученные монокристаллы имели

[¶] E-mail: anton@nano.bsuir.edu.by

^{¶¶} E-mail: ivanenko@nano.bsuir.edu.by

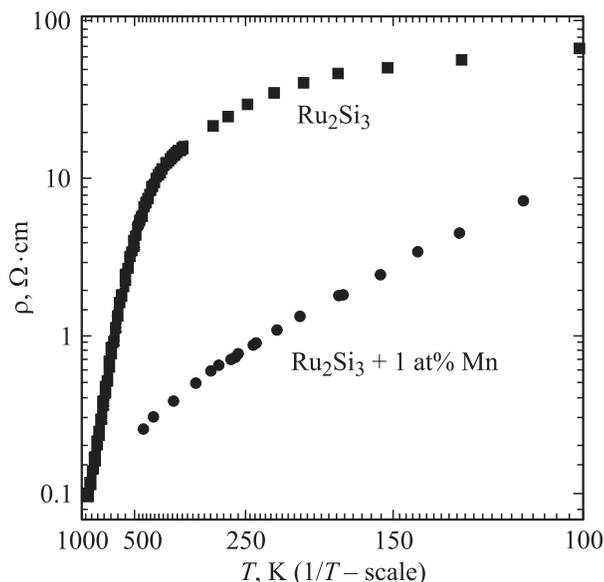


Рис. 1. Температурная зависимость удельного сопротивления чистого и легированного марганцем монокристалла Ru_2Si_3 .

цилиндрическую форму, их длина составила около 40 мм, диаметр 6 мм. Состав, микроструктура и совершенство кристаллов контролировались с помощью рентгеноструктурного анализа, оптической металлографии и рентгеноспектрального микроанализа. Ориентация кристаллов была определена методом обратного рассеяния Лауэ. Из полученных кристаллов были вырезаны образцы размером $16 \times 4 \times 2$ мм для транспортных измерений. Удельное сопротивление образцов измерялось четырехзондовым методом одновременно с измерением коэффициента Зеебека в температурном диапазоне 100–900 К. Концентрация носителей заряда и их подвижность были определены из измерений коэффициента Холла для нескольких дискретных температур между 300 и 585 К в магнитном поле от 0 до 5 Т при токе 1 мА. Теплопроводность измеряли с помощью четырехзондового квазистатического метода с поправкой на радиационный нагрев [10].

Рентгеноструктурный анализ показал, что полученные образцы являются орторомбической фазой полупроводникового силицида рутения Ru_2Si_3 с параметрами решетки $a = 1.1074$ нм, $b = 0.8957$ нм, $c = 0.5533$ нм. Метод Лауэ подтвердил монокристаллическое совершенство образцов и отсутствие кристаллов-близнецов.

По данным температурной зависимости сопротивления, ширина запрещенной зоны Ru_2Si_3 составляет 0.95 эВ, что находится в хорошем соответствии с экспериментальными данными работ [6,12] и качественно совпадает с данными наших теоретических расчетов [9]. Удельное сопротивление нелегированных образцов относительно велико и составляет 22 Ом·см при комнатной температуре. В результате легирования марганцем сопротивление уменьшилось на 1.5 порядка по сравнению с чистым образцом (рис. 1). Экспериментальные

данные, полученные при измерении эффекта Холла, показывают, что в выращенных чистых кристаллах полупроводникового силицида рутения присутствуют носители обоих типов, в то время как легированные образцы имеют p -тип проводимости во всем исследованном диапазоне. Концентрация носителей заряда для нелегированного силицида при комнатной температуре составила около 10^{18} см^{-3} , подвижность носителей заряда — $2\text{--}3 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$. Легирование марганцем ведет к повышению подвижности до $20 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$.

Коэффициент Зеебека для нелегированных образцов является отрицательным при температуре ниже 540 К и меняет свой знак выше этой температуры (рис. 2). Легированные кристаллы показывают положительный коэффициент Зеебека во всем исследованном темпера-

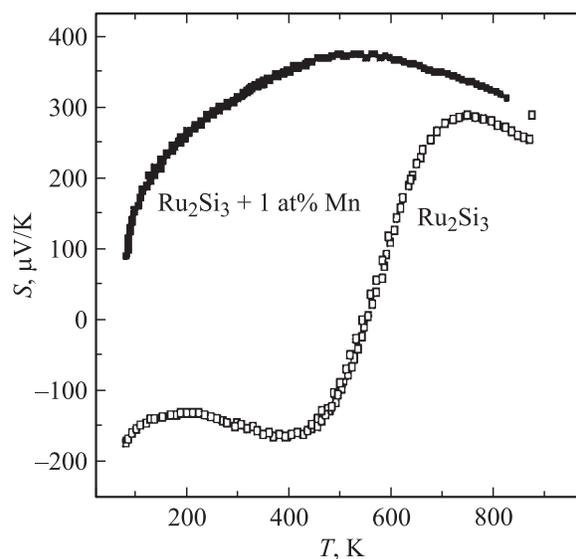


Рис. 2. Температурная зависимость коэффициента Зеебека чистого и легированного марганцем монокристалла Ru_2Si_3 .

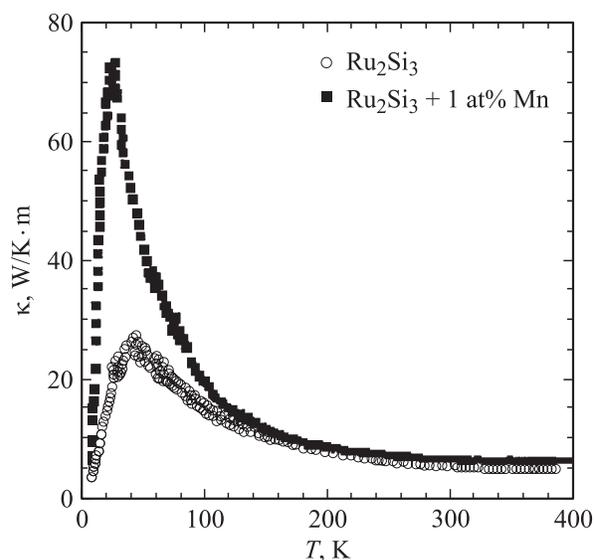


Рис. 3. Температурная зависимость теплопроводности монокристалла Ru_2Si_3 .

турном диапазоне. Это говорит о том, что дырочный тип проводимости является доминирующим.

Максимальное значение коэффициента Зеебека для чистых кристаллов Ru_2Si_3 составляет 300 мкВ/К. Для кристаллов Ru_2Si_3 , легированных марганцем, коэффициент Зеебека достигает максимального значения 400 мкВ/К приблизительно при 500 К.

Температурная зависимость теплопроводности κ для чистых и легированных марганцем кристаллов Ru_2Si_3 показана на рис. 3. В области до 100 К теплопроводность легированного образца значительно больше, чем чистого, и имеет максимум при $T = 50$ К. В температурном интервале от 100 до 400 К ее величина сильно падает, становясь практически независимой от температуры. При комнатной температуре значение κ составляет 5 Вт/К·м как для легированных, так и для чистых образцов, что близко по величине к значению κ для SiGe [2].

3. Моделирование

Силицид рутения Ru_2Si_3 принадлежит к группе соединений переходных металлов состава T_nB_{2n-m} (T = переходной металл, B = Si, Ge, Sn, Ga) [3]. Представители этой группы соединений известны как материалы со структурой Nowotny „chimney-ladder“ или дефектного TiSi_2 . Элементарная ячейка силицида рутения содержит 40 атомов: 16 атомов рутения и 24 атома кремния и подобна учетверенной ячейке TiSi_2 . Параметры решетки, используемые для расчета зонной структуры, указаны выше.

Моделирование электронных свойств Ru_2Si_3 проводилось в рамках функционала локальной плотности с помощью первопринципного самосогласованного метода линейаризованных присоединенных плоских волн с полным потенциалом. Метод реализован в виде пакета программ WIEN97 [13]. Обменно-корреляционные эффекты учитывались в рамках приближения локальной плотности с потенциалом, предложенным в [14]. Процедуру согласования в настоящей работе осуществляли с использованием 20 k -точек, равномерно распределенных в неприводимой части орторомбической зоны Бриллюэна. Радиус маффин-тин сфер для атомов рутения и кремния R_{MT} выбирался равным 2.2 а.е.; параметр, контролирующий сходимость $R_{\text{MT}}K_{\text{max}}$, был равен 8 (K_{max}^2 — граничное условие отбора плоских волн); разложение волновых функций по гармоникам решетки для парциальных волн, используемых внутри атомных сфер, проводили до $l = 10$. Дальнейшее увеличение числа

Компоненты тензора эффективных масс носителей заряда вдоль основных кристаллографических осей

	m_a ($\Gamma-X$)	m_b ($\Gamma-Y$)	m_c ($\Gamma-Z$)
Электроны	2.72	2.95	0.66
Дырки	0.43	0.15	0.47

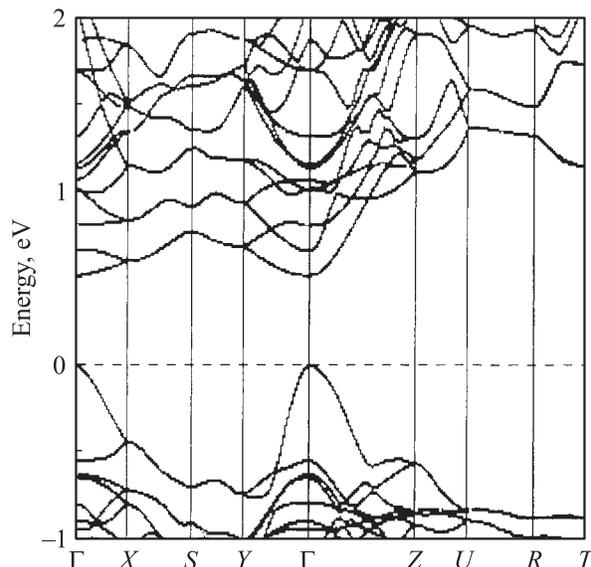


Рис. 4. Зонная структура полупроводникового силицида рутения Ru_2Si_3 .

точек и прочих параметров не приводит к существенным изменениям в собственных значениях. При расчете зонной структуры использовалось 30 k -точек вдоль каждого из направлений высокой симметрии. Самосогласование проводили до тех пор, пока разность полной энергии системы для двух последовательных итераций была более 0.0001 Ридберг/атом.

На рис. 4 представлены фрагменты зонной структуры вдоль направлений высокой симметрии орторомбической зоны Бриллюэна. Нуль на шкале энергий „привязан“ к потолку валентной зоны. Силицид рутения обладает прямым переходом в точке Γ с энергией 0.52 эВ. Эта величина хорошо коррелирует с результатами других теоретических расчетов [15,16]. В то же время она несколько меньше значений, полученных экспериментально [17,18], поскольку, как хорошо известно, методы функционала электронной плотности обычно занижают значения энергетических зазоров из-за влияния так называемых корреляционных эффектов.

Для изучения транспортных свойств в работе проведена оценка эффективных масс носителей заряда. Тензоры эффективных масс для электронов и дырок рассчитаны в центре зоны Бриллюэна в минимуме зоны проводимости и максимуме валентной зоны соответственно. Компоненты тензора эффективных масс дырок и электронов представлены в таблице. В скобках указаны направления, вдоль которых вычислялись эффективные массы. Все значения даны в единицах массы свободного электрона.

Из полученных данных можно сделать вывод о том, что эффективные массы дырок и электронов для силицида рутения значительно различаются между собой. Это связано с различной дисперсией зон, которая возникает вследствие большого вклада p -орбиталей атомов кремния в орбитальный состав в экстремумах зон. Также можно наблюдать сильную анизотропию эффективных

масс как электронов, так и дырок вдоль основных кристаллографических осей.

При моделировании подвижности с целью учета вкладов различных механизмов рассеяния мы воспользовались формулой Мэтьюссена (Mathiessen), которая в общем случае может быть выражена как $\mu^{-1} = \sum_i \mu_i^{-1}$, и в нашем случае имеет вид

$$\mu^{-1} = \mu_{AC}^{-1} + \mu_{NPO}^{-1} + \mu_{PO}^{-1} + \mu_{IM}^{-1}, \quad (1)$$

где μ_{AC} , μ_{NPO} , μ_{PO} , μ_{IM} — подвижность при рассеянии на акустических фоновых, полярных и неполярных оптических фоновых и заряженной примеси соответственно.

В случае невырожденного полупроводника и параболических зон для каждого отдельного механизма имеют [19]

$$\mu_i = \frac{4e}{3m^*(kT)^{5/2}\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} E^{3/2} \tau_i \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) dE, \quad (2)$$

где m^* — эффективная масса носителей заряда, e — заряд электрона, T — абсолютная температура, k — постоянная Больцмана и τ_i — время релаксации i -го механизма. Детальное описание используемых механизмов рассеяния и, в частности, точные формулы для времени релаксации каждого из рассмотренных механизмов приведены в [9].

Необходимо отметить, что для легированного марганцем силицида рутения в рассмотрение был включен дополнительный механизм рассеяния на нейтральной примеси, которая, как было показано в [9], играет существенную роль в этом случае. При этом время релаксации определяется следующим выражением [20]:

$$\tau_0 = e^2 m^{*2} (20\epsilon_0 h^2 N_0)^{-1}, \quad (3)$$

где N_0 — концентрация нейтральной примеси (параметр модели в нашем случае), а ϵ_0 — диэлектрическая постоянная.

В расчетах подвижности носителей заряда мы использовали следующие параметры модели:

— высокую концентрацию ионизированных примесных центров N_i (до 10^{20} см^{-3}), так как концентрация точечных дефектов в таких кристаллах сравнительно высока [11];

— для силицида рутения, легированного марганцем, концентрацию нейтральных примесных центров (N_0) принимали равной 10^{19} см^{-3} , что также подтверждено экспериментально и объясняется избыточной концентрацией Mn [9].

Результаты моделирования подвижности дырок в сравнении с экспериментальными данными представлены на рис. 5. Необходимо отметить, что в связи со значительно большей усредненной эффективной массой электроны оказывают существенное влияние на подвижность в температурном диапазоне ниже 300 К. Таким образом, нам

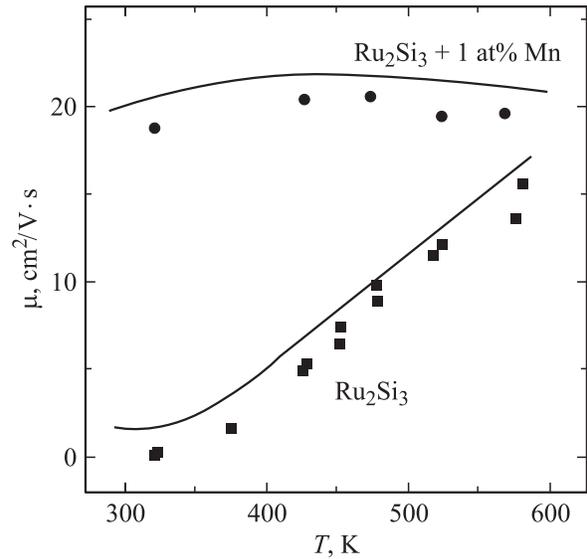


Рис. 5. Экспериментальная (темные точки) и теоретическая (сплошные линии) температурная зависимость подвижности дырок в Ru_2Si_3 .

качественно удалось воспроизвести основные особенности эксперимента как для чистого, так и легированного марганцем силицида рутения.

Поскольку для полупроводникового силицида рутения в широком температурном диапазоне необходимо учитывать присутствие обоих типов носителей заряда, формула для коэффициента Зеебека в нашем случае имеет вид [21]

$$S(T) = \frac{k}{\sigma} \left\{ n \cdot \mu_n \left[A + \ln \frac{2(2\pi m_n^* kT)^{3/2}}{h^3 n} \right] - p \cdot \mu_p \left[A + \ln \frac{2(2\pi m_p^* kT)^{3/2}}{h^3 p} \right] \right\}, \quad (4)$$

где k — постоянная Больцмана, σ — удельная электропроводность, n , p , $\mu_{n,p}$, $m_{n,p}^*$ — концентрации электронов и дырок, их подвижности и эффективные массы соответственно, h — постоянная Планка.

Значение постоянной A зависит от механизма рассеяния и в общем случае может быть выражено формулой [21]

$$A = \left[\frac{r+3}{r+1} \times \frac{F_{r+2}(\xi^*)}{F_r(\xi^*)} - \frac{(r+2)^2}{(r+1)^2} \times \frac{F_{r+1}^2(\xi^*)}{F_r^2(\xi^*)} \right], \quad (5)$$

где $F_r(\frac{\xi}{kT})$, $F_{r+1}(\frac{\xi}{kT})$ и т.д. обозначают интегралы Ферми. При этом

$$F_r(\xi^*) = \int_0^{\infty} \frac{x^r dx}{e^{x-\xi^*} + 1}, \quad (6)$$

где $x = E/kT$ и $\xi^* = \xi/kT$ — приведенная энергия электрона и химический потенциал соответственно.

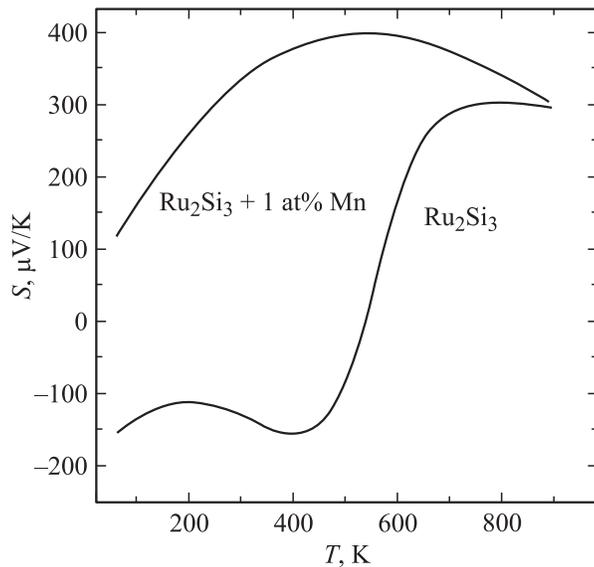


Рис. 6. Результаты моделирования температурной зависимости коэффициента Зеебека чистого и легированного марганцем Ru_2Si_3 .

Удельная электропроводность определяется как электронами, так и дырками и может быть записана в виде $\sigma = (\sigma_n + \sigma_p) \times (An + Bp)$, где An и Bp — весовые коэффициенты для электронной и дырочной составляющих электропроводности соответственно. В наиболее общем случае, учитывающем все виды рассеяния, кроме рассеяния на колебаниях постоянной частоты, для σ_n (σ_p) можно записать следующую формулу [21]:

$$\sigma_n(\sigma_p) = \frac{16 \cdot \pi \cdot e^2 \cdot m^* (kT)^{r+1}}{3 \cdot \hbar^3} l_0(T) (r+1) F_r(\xi^*), \quad (7)$$

где $l_0(T)$ — длина свободного пробега носителей с энергией E .

Расчитанные зависимости коэффициента Зеебека (рис. 6) для легированного и нелегированного силицида рутения воспроизводят экспериментальные данные (рис. 2) не только качественно, но и количественно (погрешность не превышает 2%), что подтверждает высокую точность созданной нами модели подвижности и правильность выбранного подхода для моделирования термоэлектрических свойств полупроводникового силицида рутения.

Как видно из рис. 2, коэффициент Зеебека может принимать как положительные, так и отрицательные значения. Температура, при которой происходит смена знака, зависит от плотности носителей заряда, механизмов рассеяния и доминирующего типа подвижности.

Опираясь на экспериментальные данные и результаты теоретического моделирования, можно рассчитать термоэлектрическую эффективность чистого и легированного марганцем силицида рутения. Для этого воспользуемся критерием ZT :

$$ZT = S^2 T / \rho \kappa. \quad (8)$$

Максимальные значения ZT для кристаллов нелегированного и легированного марганцем силицида рутения составляют 0.2 ($T = 800$ К) и 0.3 ($T = 500$ К) соответственно. Таким образом, легированные кристаллы силицида рутения показывают более высокое значение ZT по сравнению с нелегированными образцами во всем исследованном температурном диапазоне.

4. Заключение

Методом зонной плавки выращены монокристаллические образцы нелегированного и легированного марганцем силицида рутения. Температурные зависимости удельного сопротивления, теплопроводности и коэффициента Зеебека исследованы в широком температурном диапазоне. Установлено, что удельное сопротивление нелегированных образцов относительно велико и составляет $22 \text{ Ом} \cdot \text{см}$ при комнатной температуре, легирование марганцем приводит к уменьшению сопротивления на 1.5 порядка. Максимальное значение коэффициента Зеебека для чистых кристаллов Ru_2Si_3 составляет 300 мкВ/К . Для кристаллов Ru_2Si_3 , легированных марганцем, коэффициент Зеебека достигает максимального значения 400 мкВ/К приблизительно при 500 К. Легированные кристаллы показывают положительный коэффициент Зеебека во всем исследованном температурном диапазоне. При комнатной температуре и выше значение теплопроводности практически не зависит от температуры и составляет $5 \text{ Вт/К} \cdot \text{м}$ как для легированных, так и для нелегированных образцов.

Максимальные значения ZT для кристаллов нелегированного и легированного марганцем силицида рутения составляют 0.2 ($T = 800$ К) и 0.3 ($T = 500$ К) соответственно. Легированные кристаллы силицида рутения показывают более высокое значение ZT по сравнению с чистыми образцами во всем температурном диапазоне, что представляет значительный интерес для дальнейшего изучения данного материала с целью повышения его термоэлектрической эффективности.

В результате теоретического исследования транспортных и термоэлектрических свойств полупроводникового силицида рутения разработана модель расчета коэффициента Зеебека и термоэлектрической эффективности ZT , обладающая высокой точностью в широком диапазоне температур. Полученные результаты находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными.

Авторы выражают благодарность Э. Аружанову за плодотворное обсуждение экспериментальных результатов и Д. Сутелю за помощь в подготовке монокристаллических образцов.

Список литературы

- [1] S.P. Murarka. In: *Microelectronic Materials and Processes*, ed. by R.A. Levy (Kluwer Academic, Dordrecht, 1989) p. 9.
- [2] G.S. Nolas, J. Sharp, H.J. Goldsmid. *Thermoelectrics* (Springer, Berlin, 2002) v. 45, p. 78.

- [3] L. Ivanenko, H. Lange, A. Heinrich. *Semiconducting silicides*, ed. by V.E. Borisenko (Springer, Berlin, 2000) v. 39, p. 243.
- [4] C.B. Vining. *Proc. Symp. on Space Nuclear Power Systems* [AJP Conf. Proc., **246**, 338 (1992)].
- [5] Y. Arita, S. Mitsuda, Y. Nishi, T. Matsui, T. Nagasaki. *J. Nucl. Mater.*, **294**, 202 (2001).
- [6] T. Ohta, C.B. Vining, C.E. Allevato. *Proc. 26th Intersociety Energy Conversion Engineering Conf.* (American Nuclear Society, La Grande Park, IL, 1991) v. 3, p. 196.
- [7] T. Ohta, A. Yamamoto, T. Tanaka, Y. Sawade, K. Kamisako, T. Horigome. *Proc. 12th Int. Conf. on Thermoelectrics* (Yokohama, 1993) p. 393.
- [8] A. Yamamoto, T. Ohta, Y. Sawade, T. Tanaka, K. Kamisako. *Proc. 14th Int. Conf. on Thermoelectrics* (Ioffe Institute, St. Petersburg, 1995) p. 264.
- [9] L. Ivanenko, A. Filonov, V. Shaposhnikov, G. Behr, D. Souptel, J. Schumann, H. Vinzelberg, A. Plotnikov, V. Borisenko. *Microelectron. Engin.*, **70** (2–4), 209 (2003).
- [10] L. Ivanenko, A. Filonov, V. Shaposhnikov, A. Krivosheev, G. Behr, D. Souptel, J. Schumann, H. Vinzelberg, S. Paschen, A. Bentien, V. Borisenko. *22nd Int. Conf. on Thermoelectrics* [IEEE, p. 157 (2003)].
- [11] D. Souptel, G. Behr, L. Ivanenko, H. Vinzelberg, J. Schumann. *J. Cryst. Growth*, **244**, 296 (2002).
- [12] C.B. Vining, C.E. Allevato. *Proc. 10th Int. Conf. on Thermoelectrics* (Cardiff, 1991) p. 167.
- [13] P. Blaha, K. Schwarz, J. Luitz. *WIEN97, Improved and updated Unix version of the original copyrighted WIEN-code* (Vien, Vienna University of Technology, 1997) [P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin, S.B. Trickey. *Comput. Phys. Com.*, **59**, 399 (1990)].
- [14] D.M. Ceperly, B.J. Alder. *Phys. Rev. Lett.*, **45**, 566 (1980).
- [15] W. Henrion, M. Rebien, A.G. Birdwell, V.N. Antonov, O. Jepsen. *Thin Sol. Films*, **364**, 171 (2000).
- [16] W. Wolf, G. Bihlmayer, S. Blügel. *Phys. Rev. B*, **55**, 6918 (1997).
- [17] C.P. Susz, J. Muller, K. Yvon, E. Parthe. *J. Less-Common Metals*, **71** (1), (1980).
- [18] T. Ohta, C.B. Vining, C.E. Allevato. *Proc. 26th Intersociety Energy Conversion Engineering Conf.* (1991) v. 3, p. 196.
- [19] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников* (М., Наука, 1990) с. 389.
- [20] B.K. Ridley. *Quantum Processes in Semiconductors* (Oxford, Clarendon Press, 1982) p. 143.
- [21] А.Ф. Иоффе. *Физика полупроводников* (М.; Л., АН СССР, 1957) с. 36.

Редактор Л.В. Беляков

Thermoelectric efficiency of single crystal semiconducting ruthenium silicide

A.E. Krivosheev, L.I. Ivanenko, A.B. Filonov, V.L. Shaposhnikov, G. Behr*, J. Schumann*, V.E. Borisenko

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics,
220013 Minsk, Belarus
* Leibniz-Institute of Solid State and Materials Research Dresden, PF 27 01 16,
D-01171 Dresden, Germany

Abstract Thermoelectric efficiency of semiconducting ruthenium silicide Ru_2Si_3 was systematically studied both experimentally and theoretically. Pure and Mn-doped single crystals of Ru_2Si_3 have been grown by the floating zone technique with radiation heating. Electrical resistivity, Hall effect, Seebeck coefficient and thermal conductivity of the crystals were measured from 100 to 900 K. The Seebeck coefficient S for $\text{Ru}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Si}_{1.5}$ is positive in the whole temperature range analyzed and reaches its maximum value of $400 \mu\text{V}/\text{K}$ at about 500 K. The room temperature value of S for the crystals is $300 \mu\text{V}/\text{K}$ which is twice higher than that one for the undoped Ru_2Si_3 .

The theoretical study of the transport and thermoelectric properties includes the following: the *ab initio* electronic band structure calculation and the effective mass tensor evaluation; the simulation of the charge carrier mobility for electrons and holes taking into account classical scattering mechanisms; the Seebeck coefficient and figure of merit ZT calculation. The results of the theoretical simulation are in good agreement with the experimental data not only qualitatively but quantitatively as well.