

# Роль примесной зоны при переходе диэлектрик–металл при изменении состава сильно легированного и компенсированного полупроводникового твердого раствора $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$ . Донорные примеси

© В.А. Ромака<sup>\*†</sup>, М.Г. Шеляпина<sup>^</sup>, Ю.В. Стаднык<sup>•¶</sup>, D. Fruchart<sup>◇</sup>, Л.П. Ромака<sup>•</sup>, В.Ф. Чекурин<sup>\*</sup>

<sup>\*</sup> Институт прикладных проблем механики и математики им. Я. Пидстрыгача Национальной академии наук Украины, 79053 Львов, Украина

<sup>†</sup> Национальный университет «Львовская политехника», 79013 Львов, Украина

<sup>^</sup> Институт физики им. И.В. Фока Санкт-Петербургского государственного университета, 198504 Санкт-Петербург, Россия

<sup>•</sup> Львовский национальный университет им. И. Франко, 79005 Львов, Украина

<sup>◇</sup> Лаборатория кристаллографии Национального центра научных исследований, BP 166, 38042 Гренобль, Франция

(Получена 23 июня 2005 г. Принята к печати 1 декабря 2005 г.)

Определена роль примесной донорной зоны в проводимости сильно легированного и компенсированного интерметаллического полупроводника  $\text{TiCoSb}$ . Произведен расчет электронной структуры полупроводникового твердого раствора  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$ . Предложена модель перестройки примесной зоны полупроводника  $\text{TiCoSb}$  при легировании донорными примесями. Выявлен переход проводимости от активационной к металлической при изменении состава твердого раствора  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$ , который мы связываем с переходом Андерсона.

PACS: 71.20.Nr, 71.30.+h, 72.20.Pa, 75.20.Ck, 81.05.Hd

## 1. Введение

При изучении влияния примесей на кинетические, магнитные и структурные характеристики интерметаллических соединений структурного типа  $\text{MgAgAs}$ , в частности полупроводников  $\text{MCoNi}(\text{Sn}, \text{Sb})$  ( $\text{M} = \text{Ti}, \text{Zr}, \text{Hf}$ ), мы сделали вывод об определяющей роли примесных состояний в проводимости указанных соединений. Данный вывод сделан из анализа как собственных теоретических и экспериментальных результатов, так и литературных данных по проводимости, коэффициенту Зеебека и магнитной восприимчивости полупроводников  $\text{M}(\text{Co}, \text{Ni})(\text{Sn}, \text{Sb})$  и твердых растворов на их основе, а также в результате исследования структурных особенностей указанных соединений [1–12].

Было изучено влияние акцепторных примесей различных концентраций от  $N_A = 3.5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  до  $N_A = 5.3 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$  на кинетические и магнитные явления в интерметаллических полупроводниках  $n\text{-ZrNiSn}$  и  $n\text{-TiNiSn}$ . Кроме того, был сделан расчет электронной плотности для полупроводниковых твердых растворов  $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSn}$  и  $\text{Ti}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSn}$ . Эти исследования позволили предложить модель перестройки примесной зоны при легировании указанных полупроводников акцепторными примесями и наблюдать предсказанный теоретическими расчетами переход проводимости диэлектрик–металл, который является переходом Андерсона [13,14].

В этой связи важно отметить, что технология получения указанных полупроводниковых материалов во

всех известных нам работах, включая цитируемые, предусматривает сплавление шихты исходных компонентов с последующим неконтролируемым охлаждением расплава. Иными словами, на практике частично реализуется один из путей получения аморфных твердых тел [15]. Последнее наряду с флуктуациями больших концентраций заряженных примесей ( $10^{19} - 10^{21} \text{ см}^{-3}$ ) [16] приводит к наличию в кристаллических соединениях структурного типа  $\text{MgAgAs}$  значительных структурных разупорядочений [17]. Все перечисленное в свою очередь обуславливает появление в запрещенной зоне состояний, связанных с дефектами, а в зоне непрерывных энергий — локализованных состояний, разделенных с непрерывными зонными состояниями порогом подвижности [15]. Такие изменения в энергетическом спектре полупроводника существенным образом влияют на его характеристики. В то же время ни в одной из известных нам работ при анализе экспериментальных результатов, в частности температурных зависимостей проводимости, термоэдс, коэффициента Холла, авторы не обращают внимания на этот, на наш взгляд, принципиальный и определяющий факт. В этой связи в работе [18] изложен подход для оценки экспериментальных результатов исследования интерметаллических полупроводников структурного типа  $\text{MgAgAs}$ . В основе подхода лежит одновременный учет особенностей сильно легированных и компенсированных полупроводников  $\text{MNi}(\text{Sn}, \text{Sb})$  ( $\text{M} = \text{Ti}, \text{Zr}, \text{Hf}$ ) и локальных разупорядочений их кристаллической структуры.

<sup>¶</sup> E-mail: stadnyk\_yuriy@franko.lviv.ua

Известно, что проводимость полупроводников в значительной мере определяется степенью их компенсации, которая в свою очередь задает положение уровня Ферми ( $E_F$ ). Определение положения  $E_F$ , а также умение управлять этим положением в полупроводнике TiCoSb является важной практической задачей, поскольку данный полупроводник только при существующем методе получения обладает относительно высокими значениями проводимости и коэффициента Зеебека, что делает его одним из наиболее исследуемых и перспективных термоэлектрических материалов [19–21].

Данная работа посвящена изучению влияния значительных концентраций донорных примесей на кинетические, магнитные и структурные характеристики интерметаллического полупроводника TiCoSb. Исследовалось поведение электропроводности, коэффициента Зеебека и магнитной восприимчивости TiCoSb, а также пространственное расположение атомов в кристаллической решетке полупроводника при легировании его донорными примесями различных концентраций путем замены Co ( $3d^74s^2$ ) на Ni ( $3d^84s^2$ ) и образования твердого раствора замещения  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$ . При этом концентрация доноров изменялась от  $N_D = 1.9 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  ( $x = 0.01$ ) до  $N_D = 3.8 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$  ( $x = 0.2$ ). Столь большие концентрации донорных примесей в исследуемых полупроводниках позволяют наблюдать особенности их характеристик, в том числе при достаточно высоких температурах [16]. Для отделения эффектов, связанных с примесными состояниями, мы провели расчет электронной структуры  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  методом функций Грина в приближении когерентного потенциала [22] и сопоставили результаты расчетов с экспериментальными данными.

## 2. Методика эксперимента

Образцы твердого раствора  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  получали методом электродуговой плавки исходных компонентов на медном водоохлаждаемом поде в атмосфере очищенного аргона. Сплавы подвергались гомогенизирующему отжигу при 1070 К на протяжении 720 ч в вакуумированных кварцевых ампулах. Рентгеновский фазовый анализ осуществлялся при помощи дифрактометров ДРОН-2.0 ( $\text{FeK}_\alpha$ -излучение) и HZG-4A ( $\text{CuK}_\alpha$ -излучение). Расчет параметров решетки и уточнение кристаллической структуры осуществлялись при помощи комплекса программ CSD [23]. Удельное сопротивление ( $\rho$ ), коэффициент Зеебека ( $S$ ) по отношению к меди и магнитная восприимчивость ( $\chi$ ), определенная по методу Фарадея, были измерены в области температур 80–380 К.

## 3. Расчет электронной структуры $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$

На рис. 1 представлены результаты расчета распределения электронной плотности (DOS) для каждого из компонентов твердого раствора  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  и сум-

марное распределение для различных составов. Видно, что TiCoSb и TiNiSb, находящиеся на противоположных сторонах твердого раствора, являются узкозонными полупроводниками. Данный вывод согласуется как с экспериментальными результатами [10], так и с результатами теоретических расчетов методом псевдопотенциала [5]. Из расчетов следует, что принципиальным отличием между полупроводниками TiCoSb и TiNiSb является расположение в них уровня Ферми  $E_F$ . В TiCoSb  $E_F$  располагается в запрещенной зоне, а в TiNiSb — в зоне проводимости. Соответственно проводимость TiCoSb будет носить активационный характер, а проводимость TiNiSb — металлический.

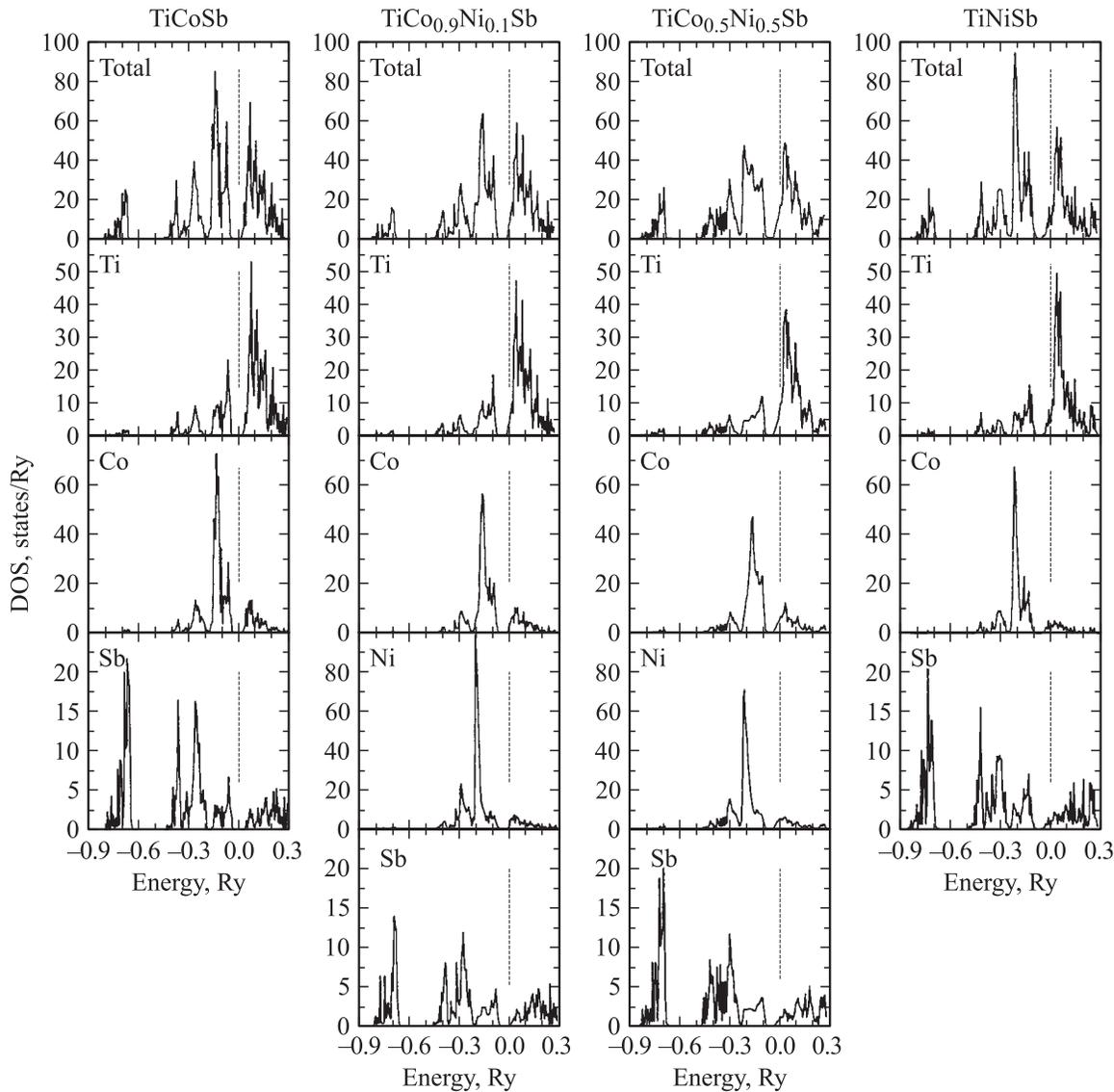
Из рис. 1 также следует, что электронная плотность выше уровня Ферми определяется главным образом  $d$ -состояниями Ti, в то же время валентная зона определяется  $d$ -состояниями Co или Ni, которые перекрываются с  $d$ -состояниями Ti и  $p$ -состояниями Sb. Уже при  $x = 0.1$  уровень Ферми попадает в зону проводимости. Увеличение  $x$  приводит к дрейфу  $E_F$  внутри зоны проводимости. Наблюдается уменьшение интенсивности пиков в валентной зоне при  $-0.14$  и  $-0.06 \text{ Ry}$  (для случая TiCoSb), которые соответственно принадлежат  $d$ -состояниям Co и Ni. При этом новый пик  $-0.22 \text{ Ry}$  ниже  $E_F$ , связанный с увеличением  $d$ -состояний Ni, является более рельефным и доминирует для  $x = 0.9$ . Проводимость  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  будет носить металлический характер. Таким образом, замена Co на Ni в полупроводниковом твердом растворе  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  приводит к реализации перехода проводимости от активационной к металлической.

Расчет плотности состояний на уровне Ферми  $N(E_F)$  свидетельствует (рис. 2, вставка), что для малых значений  $x$  (меньших концентраций донорных примесей) плотность состояний на уровне Ферми определяется  $d$ -электронами Ti с существенным вкладом  $d$ -состояний Co. С увеличением  $x$  определяющим становится вклад  $d$ -электронов Ni.

## 4. Экспериментальные исследования $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$

Рентгеновский фазовый анализ подтвердил, что все исследуемые образцы неограниченного твердого раствора  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  являются однофазными и кристаллизуются в структурном типе MgAgAs (пространственная группа  $F\bar{4}3m$ ). Уточнение кристаллической структуры для фаз составов  $\text{TiCo}_{0.99}\text{Ni}_{0.01}\text{Sb}$  и  $\text{TiCo}_{0.95}\text{Ni}_{0.05}\text{Sb}$  показало, что распределение атомов в образцах соответствует структурному типу MgAgAs, в котором позиции 4 ( $a$ )  $0\ 0\ 0$  статистически заняты атомами Ni и Co [10].

Зависимости  $\ln \rho(1/T)$  для  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  при  $x \leq 0.01$  являются типичными для полупроводников (рис. 3). При значениях  $x > 0.01$  активационные участки исчезают и зависимости принимают металлический характер. На зависимости  $\ln \rho(1/T)$  для образца TiCoSb (кривая 1)

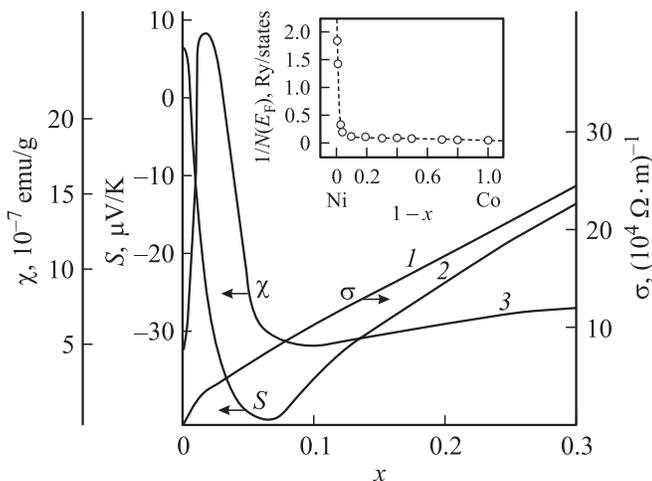


**Рис. 1.** Распределение плотности состояний для каждого из компонентов и суммарное распределение для твердого раствора  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$ . Вертикальными пунктирными прямыми обозначено положение уровня Ферми  $E_F$ .

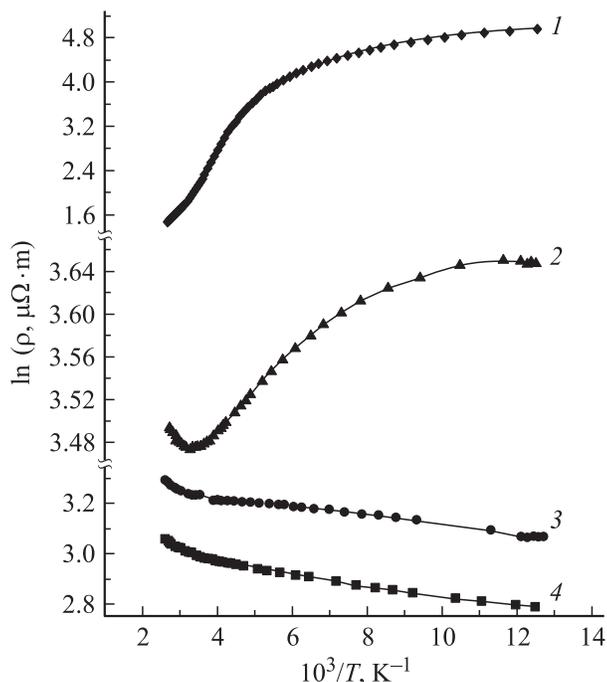
можно выделить высоко- и низкотемпературный активационные участки, которые мы связываем соответственно с активацией электронов с уровня Ферми, расположенного в кулоновской щели примесной зоны, в нелокализованные состояния зоны проводимости (энергия  $\varepsilon_1$ ) и  $\varepsilon_2$  — энергия активации на порог подвижности  $E_C$  зоны проводимости. Расчеты показывают, что для  $\text{TiCoSb}$  ( $x = 0$ )  $\varepsilon_1 \approx 176$  мэВ, а  $\varepsilon_2 \approx 9$  мэВ. При этом коэффициент Зеебека  $S$  с температурой изменяется квазилинейно (рис. 4, кривая 1). Такое несвойственное для классических полупроводников поведение зависимости  $S(T)$ , как считают авторы [24], обусловлено значительными концентрациями примесей ( $\sim 10^{20} \text{ см}^{-3}$ ). Оно экспериментально наблюдалось в сильно легированных акцепторными примесями и компенсированных полупроводниках  $\text{ZrNiSn}$  [17,18,25,26]. Для образца с  $x = 0$  при  $T < 100$  К

величина  $S$  имеет положительный знак (рис. 2, 4). При более высоких температурах и для всех остальных образцов коэффициент Зеебека имеет отрицательный знак. Смена знака  $S$  с положительного на отрицательный свидетельствует, что исследуемый образец  $\text{TiCoSb}$  имеет неконтролируемые акцепторные примеси.

Легирование полупроводника донорными примесями с  $N_D = 1.9 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  ( $x = 0.01$ ) обуславливает процесс перестройки примесной зоны в результате изменения как степени компенсации и положения уровня Ферми, так и размеров этой зоны и ее расположения по отношению к вершинам зон непрерывных энергий, а также изменяет механизмы проводимости полупроводника. При полной компенсации полупроводника уровень  $E_F$  должен находиться на дне примесной зоны, а при перекомпенсации (увеличении  $x$ ) будет дрейфовать по



**Рис. 2.** Зависимости проводимости  $\sigma$  (1), коэффициента Зеебека  $S$  (2), магнитной восприимчивости  $\chi$  (3) и расчетной плотности состояний на уровне Ферми (вставка) от состава твердого раствора  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  при 80 К.

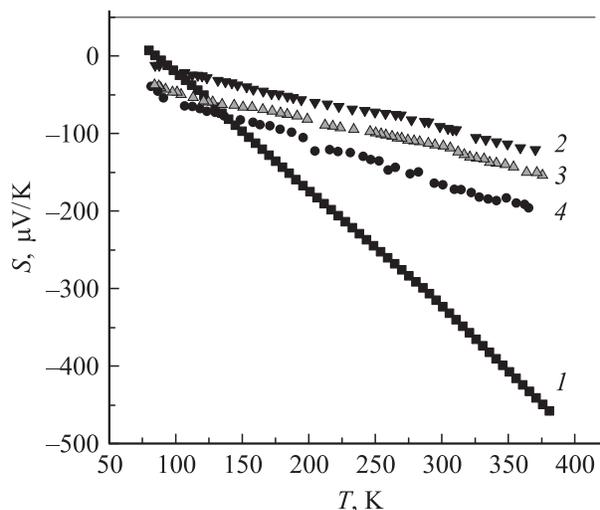


**Рис. 3.** Температурные зависимости удельного сопротивления  $\rho$  для твердого раствора  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  для различных значений  $x$ : 1 — 0, 2 — 0.01, 3 — 0.03, 4 — 0.05.

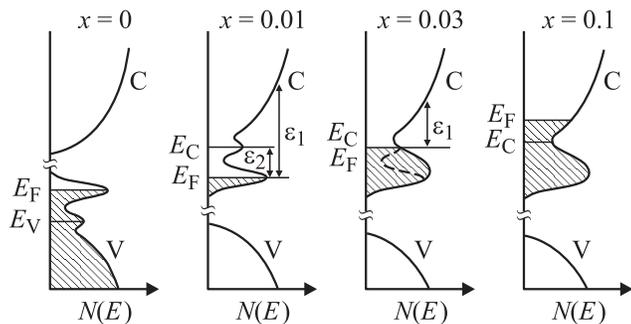
примесной зоне в направлении зоны проводимости [16]. Уменьшение энергии активации проводимости  $\varepsilon_2$  с 9 мэВ ( $x = 0$ ) до 3.5 мэВ ( $x = 0.01$ ) указывает на увеличение радиусов локализации электронов и изменение положения  $E_F$  по отношению к порогу подвижности зоны проводимости  $E_C$  из-за изменения степени компенсации полупроводника. Как следует из рис. 2, на этом же концентрационном участке ( $x = 0-0.05$ ) наблюдается

увеличение  $\chi = f(x)$  ( $\chi \propto N(E_F)/E_F$  для парамагнетика Паули) и возрастание по абсолютной величине значений  $S(x)$  ( $S \propto k_B T/E_F$ ). Поскольку исследованные образцы являются парамагнетиками Паули, наблюдаемая синхронность в поведении  $|S|(x)$  и  $\chi(x)$  в концентрационном интервале  $N_D = (1.9-9.5) \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  ( $x = 0.01-0.05$ ) свидетельствует об уменьшении плотности состояний на уровне Ферми, что связано поначалу с изменением степени компенсации полупроводника с последующей перекомпенсацией и переходом от  $p$ - к  $n$ -типу проводимости. Последнее приводит к дрейфу уровня  $E_F$  от дна примесной зоны в сторону зоны проводимости (случай сильной компенсации полупроводника  $n$ -типа) вплоть до дна зоны (случай слабой компенсации) при увеличении концентрации донорной примеси [16]. Можно предположить, что в этой области концентраций кулоновская щель исчезает из-за заполнения всех состояний примесной зоны. В результате примесная зона перекрывается с порогом подвижности, а уровень  $E_F$  фиксируется на пороге подвижности зоны проводимости, т.е. на минимуме плотности состояний. Отметим, что мы не наблюдали осцилляций плотности состояний при прохождении уровня Ферми через примесную зону в  $\text{TiCoSb}$ , как это имело место при легировании интерметаллических полупроводников  $\text{ZrNiSn}$  и  $\text{TiNiSn}$  акцепторными примесями [13,14,18,25]. Объяснений этого различия у нас пока нет.

Из рис. 3 следует, что для образца с  $x = 0.01$  при  $T \gtrsim 270$  К вклад зонных носителей становится все более существенным и при  $T \gtrsim 300$  К наблюдается металлизация проводимости, а рост  $\rho(T)$  обусловлен зонными механизмами рассеяния. Иными словами, уже при  $x = 0.01$  и определенных значениях температур появляется достаточное количество свободных электронов с высокой подвижностью, которые существенно влияют на проводимость полупроводника. Проводимость



**Рис. 4.** Температурные зависимости коэффициента Зеебека  $S$  для твердого раствора  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  при различных значениях  $x$ : 1 — 0, 2 — 0.01, 3 — 0.03, 4 — 0.05.



**Рис. 5.** Модель перестройки примесной зоны интерметаллического полупроводника  $n\text{-TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  при легировании донорной примесью Ni различной концентрации.

полупроводника в этом концентрационном интервале увеличивается на 3 порядка. При  $N_D > 9.5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  ( $x > 0.06$ ) наблюдаемый рост зависимостей  $\chi(x)$  и  $\sigma(x)$ , а также одновременное уменьшение по абсолютной величине коэффициента Зеебека при изменении состава полупроводникового твердого раствора  $n\text{-TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  связаны с появлением и увеличением концентрации свободных электронов и ростом плотности состояний на уровне Ферми в зоне проводимости (выше  $E_C$ ). Это согласуется и с результатами расчетов электронной структуры. Проводимость интерметаллического полупроводника  $n\text{-TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  носит металлический характер.

По аналогии с теорией легирования интерметаллических полупроводников  $\text{MNiSn}$  (M — металл) акцепторными примесями [25] предлагаем модель перестройки примесной зоны  $\text{TiCoSb}$  при легировании донорными примесями различных концентраций (рис. 5).

Известно, что, когда состав твердых растворов рассматриваемого типа изменяется таким образом, что  $E_C - E_F$  изменяет знак, имеет место переход Андерсона [15]. Из приведенного следует:

а)  $p\text{-TiCoSb}$  является компенсированным полупроводником, уровень Ферми фиксируется акцепторной зоной, проводимость носит активационный характер и  $E_C - E_F > 0$ ;

б) проводимость  $n\text{-TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  при  $x > 0.06$  носит металлический характер и определяется свободными электронами, уровень Ферми находится в зоне проводимости и  $E_C - E_F < 0$ .

## 5. Заключение

Представленные результаты свидетельствуют о том, что наблюдаемый переход проводимости диэлектрик-металл в интерметаллическом полупроводниковом твердом растворе  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  является переходом Андерсона и связан с перестройкой примесной зоны легированного и компенсированного полупроводника. Совпадение выводов теоретических расчетов с экспериментальными результатами о наличии перехода проводимости диэлектрик-металл при легировании  $\text{TiCoSb}$  донорными

примесями свидетельствует о корректности предложенной модели перестройки примесной зоны интерметаллических полупроводников при легировании донорными примесями.

Работа выполнена в рамках грантов Национальной академии наук Украины (№ 0102U000454) и Министерства образования и науки Украины (№ 0106U001299).

## Список литературы

- [1] K.H.J. Buschow, D.B. Mooij, T.T.M. Palstra, G.J. Nieuwenhuys, J.A. Mydosh. *Phil. J. Res.*, **40**, 313 (1985).
- [2] M. Terada, K. Endo, Y. Fujita, R. Kimura. *J. Phys. Soc. Japan*, **32**(1), 91 (1972).
- [3] J. Pierre, R.V. Skolozdra, J. Tobola, S. Kaprzuk, C. Hordequum, M.A. Kouacou, I. Karla, R. Currat, E. Lelievre-Berna. *J. Alloys Comp.*, **262–263**, 101 (1997).
- [4] K. Kaczmarzka, J. Pierre, J. Beille, J. Tobola, R.V. Skolozdra, G.A. Melnik. *J. Magn. Magn. Mater.*, **187**, 210 (1998).
- [5] J. Tobola, J. Pierre, S. Kaprzuk, R.V. Skolozdra, M.A. Kouacou. *J. Phys. B: Condens. Matter.*, **10**, 1013 (1998).
- [6] H. Kleinke. *Z. Anorg. Allgm. Chem.*, **624**, 1272 (1998).
- [7] J. Tobola, J. Pierre. *J. Alloys Comp.*, **296**, 243 (2000).
- [8] D. Jung, H.-J. Koo, M.-H. Whangbo. *J. Molecul. Struct.*, **527**, 113 (2000).
- [9] Y. Xia, V. Ponnambalam, A.L. Pope, S.J. Poon, T.M. Tritt. *J. Appl. Phys.*, **88**(4), 1952 (2000).
- [10] Yu. Stadnyk, Yu. Gorelenko, A. Tkachuk, A. Goryn, V. Davydov, O. Bodak. *J. Alloys Comp.*, **329**, 37 (2001).
- [11] Y. Xia, V. Ponnambalam, A.L. Pope, S.J. Poon, T.M. Tritt. *J. Phys. B: Condens. Matter.*, **13**, 77 (2001).
- [12] A.N. Caruso, C.N. Borca, D. Ristoiu, J.P. Nozieres, P.A. Dowben. *Surf. Sci. Lett.*, **525**, L109 (2003).
- [13] О.И. Бодак, В.А. Ромака, Ю.В. Стаднык, М.Г. Шеляпина, Д. Фрушарт, Л.П. Ромака, В.Ф. Чекурин, Ю.К. Гореленко. *Укр. физ. журн.* (2005) в печати.
- [14] L. Romaka, Yu. Stadnyk, M.G. Shelyapina, V.S. Kasperovich, D. Fruchart, A. Horyn. *J. Alloys Comp.*, **396**, 64 (2005).
- [15] Н. Мотт, Э. Дэвис. *Электронные процессы в некристаллических веществах* (М., Мир, 1982) [Пер. с англ.: N.F. Mott, E.A. Davis. *Electron processes in non-crystalline materials* (Oxford, Clarendon Press, 1979)].
- [16] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. *Электронные свойства легированных полупроводников* (М., Наука, 1979).
- [17] Ф.Г. Алиев, Н.Б. Брандт, В.В. Козырьков, В.В. Мошалков, Р.В. Сколоздра, Ю.В. Стаднык. *Письма ЖЭТФ*, **45**, 535 (1987).
- [18] Yu.V. Stadnyk, V.A. Romaka, Yu.K. Gorelenko, L.P. Romaka, D. Fruchart, V.F. Chekurin. *J. Alloys Comp.*, (2005) to be published.
- [19] R.V. Skolozdra, Yu.V. Stadnyk, L.P. Romaka, F.G. Aliev. *J. Thermoelectricity*, **3**, 29 (1994).
- [20] R.V. Skolozdra. *J. Thermoelectricity*, **2**, 55 (1997).
- [21] Ю.В. Стаднык, А.М. Горынь, Л.П. Ромака, Ю.К. Гореленко, Р.В. Сколоздра. *Патент Украины*, № 25472 А (1998).
- [22] M. Schroter, P.H. Ebert, H. Akai, P. Entel, E. Hoffmann, G.G. Reddy. *Phys. Rev. B*, **52**, 188 (1995).
- [23] L.G. Akselrud, Yu.N. Grin, P.Yu. Zavali, V.K. Pecharsky, V.S. Fundamenskii. *Proc. 12<sup>th</sup> Eur. Crystallographic Meeting* (М., Наука, 1989) p. 155.

- [24] K. Durcewski, M. Ausloos. *J. Magn. Magn. Mater.*, **51** (1–3), 230 (1985).
- [25] В.А. Ромака, Ю.В. Стадник, М.Г. Шеляпина, Д. Фрушарт, В.Ф. Чекурин, Л.П. Ромака, Ю.К. Гореленко. *ФТП*, **40** (6), 665 (2005).
- [26] F.G. Aliev, V.V. Kozyrkov, V.V. Moshchalkov, R.V. Skolozdra, K. Durczewski. *J. Phys. B: Condens. Matter*, **80**, 353 (1990).

*Редактор Т.А. Полянская*

**The role of the impurity band  
in insulator–metal transition due  
to composition change in highly doped  
and compensated semiconducting  
TiCo<sub>1-x</sub>Ni<sub>x</sub>Sb solid solution. Donor  
impurities**

*V.A. Romaka\*<sup>†</sup>, M.G. Shelyapina<sup>^</sup>, Yu.V. Stadnyk<sup>•</sup>,  
D. Fruchart<sup>◇</sup>, L.P. Romaka<sup>•</sup>, V.F. Chekurin\**

\* Ya. Pidstryhach Institute for Applied Problems  
of Mechanics and Mathematics,  
National Academy of Sciences of Ukraine,  
79053 Lviv, Ukraine

<sup>†</sup> National University „Lvivska Politehnika“,  
79013 Lviv, Ukraine

<sup>^</sup> I.V. Fock Institute of Physics  
St. Petersburg State University,  
198504 St. Petersburg, Russia

<sup>•</sup> Ivan Franko Lviv National University,  
79005 Lviv, Ukraine

<sup>◇</sup> Laboratoire de Cristallographie, CNRS, BP 166,  
38042 Grenoble Cedex 9, France

**Abstract** The role of the impurity donor band in the conductivity of doped and compensated intermetallic semiconductors TiCoSb was investigated. A simulation of the electronic structure for TiCo<sub>1-x</sub>Ni<sub>x</sub>Sb semiconducting solid solution was carried out. A scheme of the impurity band transformation in TiCoSb semiconductor due to donor impurities doping was advanced. A transition of conductivity from activated to metallic type while TiCo<sub>1-x</sub>Ni<sub>x</sub>Sb solid solution composition changes was observed. We relate this transition with Anderson-type transition.