

УДК 539.2:621.315.548.0:612.029.62
PACS NUMBER (s): 78.55.HX, 78.40.NA, 71.35.CC.

ISSN 1729-4428

Д.М. Фреїк¹, Ц.А. Криськов², І.В. Горічок¹, Т.С. Люба¹, Л.В. Туровська¹,
О.С. Криницький¹, О.М. Матківський¹, І.П. Яремій¹, В.І. Маковишин¹

Термоелектричні властивості і дефектна підсистема твердих розчинів PbTe-Vi₂Te₃

¹ Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76025, Україна, e-mail: fcss@pu.if.ua

² Кам'янець-Подільський державний університет, вул. І.Огієнка, 61, Кам'янець-Подільський, 32300, Україна, e-mail: fizkaf@ua.fm

Представлено результати дослідження структурних і термоелектричних властивостей твердих розчинів PbTe-Vi₂Te₃ в діапазоні 0-5 мол.% Vi₂Te₃. Встановлені немонотонні залежності сталої ґратки та питомої електропровідності матеріалів при збільшенні вмісту Vi₂Te₃. Здійснено кристалохімічний аналіз дефектної підсистеми та визначено найбільш ймовірні механізми їх утворення.

Ключові слова: п्लомбум телурид, тверді розчини, термоелектричні властивості, точкові дефекти.

Стаття постуила до редакції 23.02.2013; прийнята до друку 15.06.2013.

Вступ

Плюмбум телурид – перспективний напівпровідниковий матеріал для пристроїв термоелектричного перетворення енергії, що функціонують у середній області температур (500–850) К. Легування вісмутом дозволяє значно покращити термоелектричні характеристики матеріалу [1-2]. Зокрема, заміщуючи йони п्लомбуму, бісмут, який у валентній оболонці має на один електрон більше у порівнянні з атомом матриці, віддає його у зону провідності, що зумовлює ріст концентрації вільних носіїв n та питомої електропровідності σ . Менш дослідженими є тверді розчини PbTe-Vi₂Te₃, хоча термоелектричні властивості таких систем можуть бути значно кращими, зокрема, за рахунок значного зменшення теплопровідності розчинів внаслідок ефективного розсіювання фононів на точкових дефектах кристалічної ґратки.

Тверді розчини PbTe-Vi₂Te₃ мають кубічну структуру типу NaCl. Визначення області їх існування зі сторони сполуки PbTe було здійснено у [3-5] методами рентгенографії та металографії. Зокрема, проведені у [3] структурні дослідження матеріалів показали, що тверді розчини PbTe-Vi₂Te₃ є однофазними до концентрації 3 моль% Vi₂Te₃. Згідно ж даних [3-5] – межа твердого розчину знаходиться поблизу 5 моль% Vi₂Te₃.

Достовірні дані щодо механізму входження бісмуту в кристалічну ґратку відсутні. Тому

завданням даної роботи є дослідження структурних і термоелектричних властивостей твердих розчинів PbTe-Vi₂Te₃ та встановлення кристалохімічних механізмів їх утворення.

I. Методика експерименту

Синтез твердих розчинів проводили методом сплавлення у кварцових ампулах вакуумованих до тиску $2 \cdot 10^{-4}$ Па. У якості вихідних компонентів використовували очищені Pb, Te та Vi. Отримані злитки подрібнювали у агатовій ступці та виділивши фракції розміру (0,05 - 0,5) мм, пресували під тиском 0,5 ГПа. Отримані циліндричної форми зразки з $d = 5$ мм та $l \approx 8$ мм піддавали відпалу на повітрі при температурі $T = 230$ °С на протязі 5 год.

Фазовий склад отриманого матеріалу (подрібненого і спресованого) визначали методами рентгенографії на установці ДРОН-3 за методом порошків у геометрії Бреґґа-Брентано в діапазоні кутів сканування $20^\circ \leq 2\theta \leq 110^\circ$. Обробка результатів рентгено-фазового аналізу проводилася із використанням повнопрофільного методу Рітвелда із застосуванням програмного пакету FulProf.

Величину коефіцієнта Зеебека S і питому електропровідність σ визначали за стандартною методикою, детально описаною у роботі [6]. Зразок розміщували між двома мідними стержнями поміщеними у піч, яка його нагріває до заданої

температури. Градієнт температури на зразку ($\approx 10^\circ\text{C}$) створювався додатковою пічкою на одному з мідних стержнів. Вимірювання температури проводили двома хромель-алюмелевими термопарами, поміщеними в отвори у зразку. Електропровідність визначали вимірюючи спад напруги на зразку, генеровану джерелом постійної напруги. При цьому, одна з віток кожної термопари використовувалась як струмовід.

II. Результати експериментальних досліджень

Результати проведених рентгенографічних досліджень синтезованих матеріалів представлені на рис. 1 та рис. 2. Фазовий склад за вибраних технологічних умов синтезу відповідає стандартним характеристикам структури для плюмбум телуриду (рис. 1). Як і для інших досліджуваних нами матеріалів на основі PbTe [7], синтезованих за аналогічною методикою, на дифрактограмах спостерігається відносно підсилення одних та послаблення інших інтенсивностей рефлексів у порівнянні з теоретичною дифрактограмою PbTe, що зумовлено орієнтаційним характером кристалізації розплаву [7].

Визначена залежність сталої ґратки твердого розчину PbTe-Bi₂Te₃ від вмісту Bi₂Te₃ характеризується немонотонною залежністю з мінімумом в околі 2 мол.% (рис. 2).

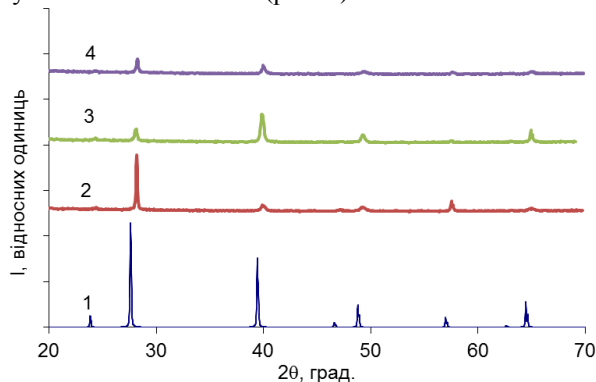


Рис. 1. Порівняльні дифрактограми синтезованих злитків твердих розчинів (2 – PbTe, 3 – PbTe-1 мол.% Bi₂Te₃, 4 – PbTe-5 мол.% Bi₂Te₃) із паспортними даними (1).

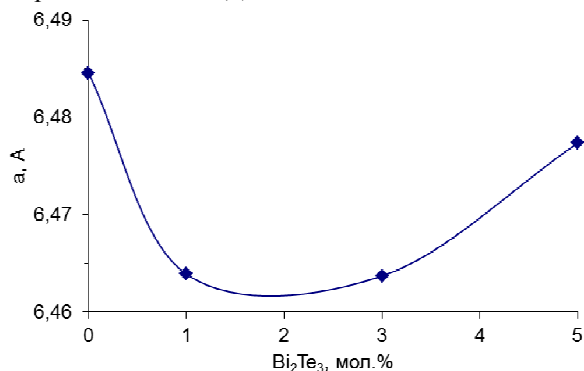


Рис. 2. Залежність сталої ґратки твердих розчинів PbTe-Bi₂Te₃ від вмісту Bi₂Te₃.

Результати вимірювання питомої електропровідності та коефіцієнту Зеебека представлено на рис. 3. Для чистого PbTe у досліджуваному діапазоні температур питома електропровідність слабо збільшується з ростом T і становить ≈ 200 (Ом·см)⁻¹, а коефіцієнт Зеебека монотонно змінюється від 150 мкВ/К при 100 °C до 300 мкВ/К при 250 °C.

Додавання 1 мол.% Bi₂Te₃ зумовлює значне підвищення питомої електропровідності і деяке зменшення коефіцієнта Зеебека. Причому, на відміну від чистого PbTe, температурні залежності S(T) та $\sigma(T)$ не можуть бути апроксимовані лінійними залежностями. Так, до температури T $\approx 150^\circ\text{C}$ дані термоелектричні параметри слабо змінюються зі зміною температури; при вищих T – значення питомої електропровідності різко зменшуються (рис.3, а), а коефіцієнт Зеебека збільшується (рис.3, б).

При збільшенні вмісту Bi₂Te₃ до 5 мол.% і коефіцієнт Зеебека, і питома електропровідність для фіксованих значень температур вимірювання зменшуються. Температурна залежність $\sigma(T)$ є спадною і при T > 100°C її чисельне значення є меншим за аналогічну величину для чистого плюмбум телуриду.

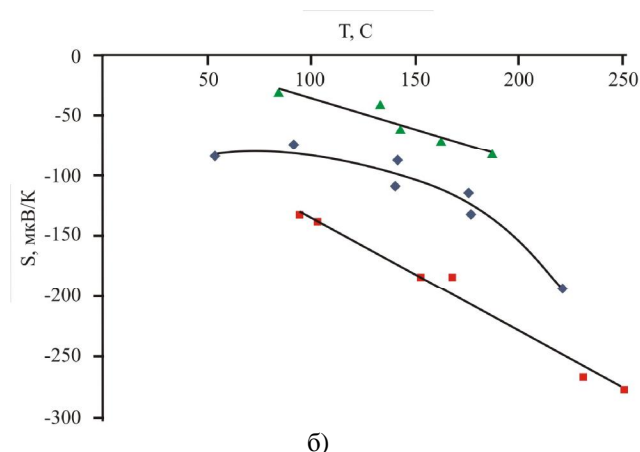
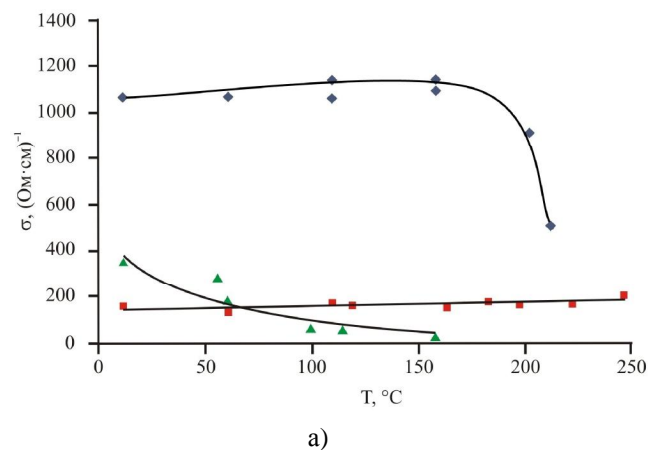


Рис. 3. Залежність питомої електропровідності σ (а) та коефіцієнта Зеебека S (б) від температури T зразків твердих розчинів з різним вмістом Bi₂Te₃, мол.% : ■ – 0, ♦ – 1, ▲ – 5.

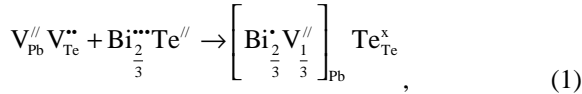
III. Кристалоквазіхімічне моделювання

Деякі з відзначених особливостей поведінки термоелектричних параметрів можна пояснити специфікою формування дефектної підсистеми твердого розчину при його утворенні. Для цього зручно використати кристалоквазіхімічний підхід, в основі якого лежить поняття антиструктури [11], яка для п्लомбум телуриду має вигляд $V_{Pb}'' V_{Te}^{**}$, де V_{Pb}'' і V_{Te}^{**} – двозарядні вакансії п्लомбуму і телуру відповідно; „'” і „•” – негативний і позитивний заряди відповідно. Кристалоквазіхімічна формула твердого розчину записується як суперпозиція легуючого кластера, утвореного на основі антиструктури основної матриці, і формули базової сполуки.

Розглянемо два можливих механізми утворення твердого розчину $PbTe-Bi_2Te_3$: заміщення йонами бісмуту позицій п्लомбуму з утворенням катіонних вакансій (механізм I) та заміщення Bi позицій Pb з утворенням міжвузлового телуру (механізм II).

Механізм I. З розрахунку на 1 атом телуру та з урахуванням зарядового стану йонів формула для легуючого компонента прийме вигляд: $Bi_{\frac{2}{3}}^{3+} Te_{\frac{1}{3}}^{2-}$.

Легуючий кластер в такому випадку запишеться як:



де „x” – нейтральний заряд.

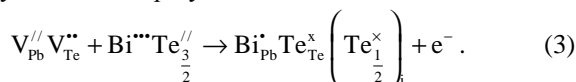
Тоді кристалоквазіхімічна формула $n-PbTe-Bi_2Te_3$ як суперпозиція легуючого кластера (1) з кристалоквазіхімічною формулою $n-PbTe$ [12]:

$$(1-x) \left\{ \left[Pb_{1-\alpha\sigma}^x V_{\alpha\sigma(1-\delta)}'' V_{\alpha\sigma\delta}' \right]_{Pb} \left[Te_{1-\alpha}^x V_{\alpha}^{**} \right]_{Te} (Pb_{\alpha\sigma}^{**})_i + (2\alpha + \alpha\sigma\delta)e^- \right. \\ \left. + x \left\{ \left[Bi_{\frac{2}{3}} V_{\frac{1}{3}} \right]_{Pb} Te_{Te}^x \right\} \right\} \rightarrow \\ \rightarrow \left[Pb_{(1-x)(1-\alpha\sigma)}^x Bi_{\frac{2}{3}x} V_{\alpha\sigma(1-\delta)(1-x)+\frac{1}{3}x}'' V_{\alpha\sigma\delta(1-x)}' \right]_{Pb} \times \\ \times \left[Te_{(1-\alpha)(1-x)+x}^x V_{\alpha(1-x)}^{**} \right]_{Te} (Pb_{\alpha\sigma(1-x)}^{**})_i + (2\alpha + \alpha\sigma\delta)(1-x)e^- \quad (2)$$

Тут x – мольна частка Bi_2Te_3 , α – величина початкового відхилення від стехіометрії на боці Pb , δ – коефіцієнт диспропорціонування зарядового стану вакансій п्लомбуму, σ – частка міжвузлового п्लомбуму Pb , e^- – електрон.

Механізм II. З розрахунку на 1 атом бісмуту та з урахуванням зарядового стану йонів формула для легуючого компонента прийме вигляд: $Bi^{3+} Te_{\frac{3}{2}}^{2-}$.

Легуючий кластер буде:



Тоді кристалоквазіхімічна формула $n-PbTe-Bi_2Te_3$:

$$(1-x) \left\{ \left[Pb_{1-\alpha\sigma}^x V_{\alpha\sigma(1-\delta)}'' V_{\alpha\sigma\delta}' \right]_{Pb} \left[Te_{1-\alpha}^x V_{\alpha}^{**} \right]_{Te} (Pb_{\alpha\sigma}^{**})_i + (2\alpha + \alpha\sigma\delta)e^- \right. \\ \left. + x \left\{ Bi_{Pb}^{\bullet} Te_{Te}^x \left(Te_{\frac{1}{2}}^x \right)_i + e^- \right\} \right\} \rightarrow \\ \rightarrow \left[Pb_{(1-x)(1-\alpha\sigma)}^x Bi_{\frac{2}{3}x} V_{\alpha\sigma(1-\delta)(1-x)}'' V_{\alpha\sigma\delta(1-x)}' \right]_{Pb} \times \\ \times \left[Te_{(1-\alpha)(1-x)+x}^x V_{\alpha(1-x)}^{**} \right]_{Te} \times \\ \times (Pb_{\alpha\sigma(1-x)}^{**})_i \left(Te_{\frac{1}{2}x}^x \right)_i + \{ (2\alpha + \alpha\sigma\delta)(1-x) + x \} e^- \quad (4)$$

Запропоновані механізми легування, а також кристалоквазіхімічні формули (1)-(4) дають можливість знайти аналітичні залежності як концентрації окремих точкових дефектів, так і носіїв струму від величини відхилення від стехіометричного складу у базовій сполуці (α) і складу твердого розчину (x). Так, зокрема, для механізму I, згідно з кристалоквазіхімічною формулою (2), повне рівняння електронейтральності запишеться наступним чином:

$$n + |q_{V_{Pb}''}| [V_{Pb}''] + |q_{V_{Pb}'}| [V_{Pb}'] = \\ = |q_{V_{Te}^{**}}| [V_{Te}^{**}] + |q_{Pb_i^{**}}| [Pb_i^{**}] + |q_{Bi_{Pb}^{\bullet}}| [Bi_{Pb}^{\bullet}], \quad (5)$$

де

$$n = A(2\alpha + \alpha\sigma\delta)(1-x),$$

$$[V_{Pb}'] = A \left(\alpha\sigma(1-\delta)(1-x) + \frac{1}{3}x \right), \quad [V_{Pb}'] = A\alpha\sigma\delta(1-x),$$

$$[Bi_{Pb}^{\bullet}] = \frac{2}{3}Ax, \quad [V_{Te}^{**}] = A\alpha(1-x), \quad [Pb_i^{**}] = A\alpha\sigma(1-x),$$

$|q_{V_{Pb}'}| = |q_{Bi_{Pb}^{\bullet}}| = 1$, $|q_{V_{Pb}''}| = |q_{V_{Te}^{**}}| = |q_{Pb_i^{**}}| = 2$, $A = \frac{2Z}{a^3}$, Z – число структурних одиниць в елементарній комірці, a – параметр ґратки.

Холлівська концентрація носіїв струму n_H в цьому випадку буде визначатися як:

$$n_H = A(2\alpha + \alpha\gamma\delta)(1-x). \quad (6)$$

Для механізму II, згідно (4):

$$n + |q_{V_{Pb}''}| [V_{Pb}''] + |q_{V_{Pb}'}| [V_{Pb}'] = \\ = p + |q_{V_{Te}^{**}}| [V_{Te}^{**}] + |q_{Pb_i^{**}}| [Pb_i^{**}] + |q_{Bi_{Pb}^{\bullet}}| [Bi_{Pb}^{\bullet}], \quad (7)$$

де

$$n = A((2\alpha + \alpha\sigma\delta)(1-x) + x),$$

$$[V_{Pb}'] = A \left(\alpha\sigma(1-\delta)(1-x) + \frac{1}{3}x \right), \quad [V_{Pb}'] = A\alpha\sigma\delta(1-x),$$

$$[Bi_{Pb}^{\bullet}] = Ax, \quad [V_{Te}^{**}] = A\alpha(1-x), \quad [Pb_i^{**}] = A\alpha\sigma(1-x),$$

$$|q_{V_{Pb}'}| = |q_{Bi_{Pb}^{\bullet}}| = 1, \quad |q_{V_{Pb}''}| = |q_{V_{Te}^{**}}| = |q_{Pb_i^{**}}| = 2.$$

Холлівська концентрація носіїв струму n_H в цьому випадку матиме вигляд:

$$n_H = A((2\alpha + \alpha\sigma\delta)(1-x) + x). \quad (8)$$

Деякі результати проведених розрахунків холлівської концентрації носіїв струму і концентрації

домінуючих точкових дефектів, згідно формул (5)-(8), представлено на рис. 4.

У випадку реалізації механізму I (заміщення позицій п्लомбуму і утворення катіонних вакансій) має місце незначне зменшення концентрації основних носіїв з ростом частки Bi₂Te₃ (рис. 4, а – крива 1). При реалізації механізму II (заміщення позицій п्लомбуму і утворення міжвузлового телуру) у n-PbTe-Bi₂Te₃ холлівська концентрація носіїв струму помітно зростає зі збільшенням вмісту домішки (рис. 4, б – крива 1).

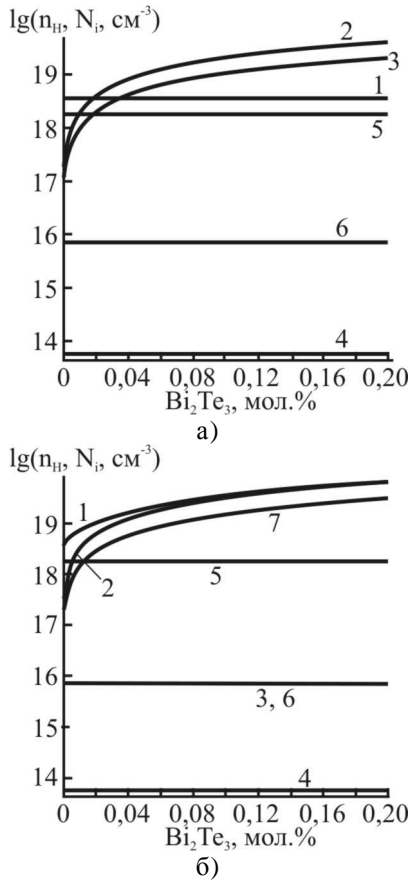


Рис. 4. Залежність холлівської концентрації носіїв струму (1 – n_H) та концентрації домінуючих точкових дефектів (2-7 – N_i) кристалів n-PbTe-Bi₂Te₃ від вмісту Bi₂Te₃ згідно механізму I (а) та механізму II (б). 2 – $[Bi_{Pb}^+]$; 3 – $[V_{Pb}^{2-}]$; 4 – $[V_{Pb}^-]$; 5 – $[V_{Te}^{2+}]$; 6 – $[Pb_i^{2+}]$; 7 – $[Te_i^0]$.

Особливості, що спостерігаються у зміні концентрації носіїв заряду, пов'язані з характерними співвідношеннями між окремими точковими дефектами. Так, для механізму I у кристалах n-PbTe-Bi₂Te₃ (рис. 4, а) найбільший внесок у провідність дають йонізовані атоми бісмуту на місці п्लомбуму Bi_{Pb}^+ (рис. 4, а – крива 2), двозарядні катіонні вакансії V_{Pb}^{2-} (рис. 4, а – крива 3), концентрація яких помітно зростає зі збільшенням вмісту домішки та двозарядні аніонні вакансії V_{Te}^{2+} (рис. 4, а – крива 5), концентрація яких зі зміною складу твердого розчину змінюється незначно. Концентрації ж однозарядних

катіонних вакансій V_{Pb}^- та міжвузлового п्लомбуму Pb_i^{2+} значно менші (рис. 4, а – криві 4, 6).

З рис. 4, б видно, що для механізму II у кристалах n-PbTe-Bi₂Te₃ найбільший внесок у провідність дають домішкові дефекти Bi_{Pb}^+ (рис. 4, б – крива 2), а також аніонні вакансії V_{Te}^{2+} (рис. 4, б – крива 5). При цьому якщо концентрація перших різко зростає, то других - змінюється незначно зі збільшенням вмісту Bi₂Te₃ у твердому розчині. Концентрація інших дефектів V_{Pb}^{2-} , V_{Pb}^- , Pb_i^{2+} є значно меншою (рис. 4, б – криві 3, 4, 6). Міжвузловий телур Te_i^0 має високу концентрацію, яка зростає з ростом вмісту Bi₂Te₃ (рис. 4, б – крива 7).

IV. Обговорення результатів

Отримані експериментальні залежності питомої електропровідності та коефіцієнта Зеебека свідчать про значний донорний ефект при утворенні твердих розчинів PbTe-Bi₂Te₃. Співставляючи ці дані з результатами кристалоквазіхімічного моделювання, можна зробити висновок, що ріст питомої електропровідності матеріалу при додаванні 1 мол.% Bi₂Te₃ найімовірніше зумовлений ростом концентрації вільних електронів, утворених внаслідок заміщення атомів п्लомбуму атомами бісмуту з утворенням нейтрального міжвузлового атома телуру. Тобто утворення твердих розчинів відбувається згідно механізму II. Проте, такий результат не узгоджується з даними щодо параметра ґратки. Адже у випадку росту концентрації міжвузлових атомів телуру варто було б очікувати збільшення величини σ , що має місце лише для концентрацій Bi₂Te₃ більше 2 мол.% (рис. 2). Нижче цієї концентрації домінуючий механізм дефектоутворення, ймовірно, є іншим. Зазначимо, що до 2 мол.% наші результати вимірювання сталої ґратки якісно узгоджуються з даними [3].

Та, незважаючи на механізм донорної дії, саме ріст концентрації вільних носіїв виглядає найбільш ймовірним поясненням росту величини σ при додаванні 1 мол.% Bi₂Te₃. Підтвердженням цього, зокрема, може бути експериментально спостережуване зменшення коефіцієнта Зеебека у всьому досліджуваному діапазоні концентрацій Bi₂Te₃, що закономірно пояснити ростом концентрації вільних носіїв.

Зменшення електропровідності при вмісті 5 мол.% Bi₂Te₃, ймовірно, зумовлене зменшенням рухливості носіїв. Так при не дуже високих значеннях n , згідно [8], переважаючими механізмами розсіювання є розсіювання на акустичних та оптичних поляризаційних фононах. Ріст концентрації носіїв зумовлює їх додаткове розсіювання на оптичних деформаційних фононах [8] та електрон-електронне розсіювання [9], що значно зменшує рухливість носіїв, а тому й електропровідність матеріалу. Можна припустити, що за таких концентрацій домішки може проявлятися й

розсіювання на йонізованих дефектах, проте, згідно [10], домінування такого механізму повинне призводити до росту коефіцієнта Зеебека, чого не спостерігається експериментально. Але варто зазначити, що такий ріст однозначно спостерігається б у випадку параболічної зони [10], а оскільки непараболічність PbTe є суттєвою, то ріст величини S при розсіюванні на йонізованій домішці може й не спостерігатися.

Висновки

1. Проведено синтез і досліджено фазовий склад, структуру і термоелектричні властивості твердих розчинів PbTe-Bi₂Te₃.

2. Немонотонні зміни питомої електропровідності з максимумом при 1 мол.% Bi₂Te₃ та монотонне зменшення коефіцієнта Зеебека при збільшенні вмісту Bi₂Te₃ можуть бути пояснені ростом концентрації вільних електронів при збільшенні вмісту Bi₂Te₃ та одночасним зменшенням їх рухливості.

3. Запропоновано кристалохімічні механізми утворення твердих розчинів PbTe-Bi₂Te₃ та їх кристалоквазіхімічні формули. Встановлено, що при вмісті Bi₂Te₃ ≥ 2 мол.% найбільш ймовірним механізмом утворення твердого розчину PbTe-Bi₂Te₃

є заміщення бісмутом позицій плюмбуму Bi_{Pb}⁺ з утворенням міжвузлового телуру Te_i⁰.

Робота виконана згідно комплексного наукового проекту МОН України (державний реєстраційний номер 0113U000185).

Фреїк Д.М. – заслужений діяч науки і техніки України, академік АНВШ України, доктор хімічних наук, професор, директор Фізико-хімічного інституту, завідувач кафедри фізики і хімії твердого тіла;

Криськов Ц.А. – кандидат фізико-математичних наук, завідувач кафедри фізики Кам'янець-Подільського державного університету;

Горічок І.В. – кандидат хімічних наук, старший науковий співробітник Фізико-хімічного інституту;

Люба Т.С. – аспірант кафедри фізики і хімії твердого тіла;

Туровська Л.В. – кандидат хімічних наук, науковий співробітник Фізико-хімічного інституту;

Криницький О.С. – аспірант кафедри фізики і хімії твердого тіла;

Матківський О.М. – аспірант кафедри фізики і хімії твердого тіла;

Яремій І.П. – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри матеріалознавства і новітніх технологій;

Маковишин В.І. – студент.

[1] L.D. Borisova, Phys. stat. sol. (a) 53, K19 (1979).

[2] Ju.V. Lisjuk, Sensor Electronics and Microsystem Technologies 3(1), 82 (2012).

[3] T.A. Christakudi, P.T. Cholakov, G.Ch. Christakudis, Godishnik na Sofijskija Universitet «Kl.Ohridski», Fizicheski fakul'tet 86(39), 13 (1994).

[4] B.A. Efimova, G.F. Zaharjugina, L.A. Kolomoec, Izv. AN SSSR, Neorg. Materialy 4(1), 32 (1968).

[5] E.I. Elagina, N.H. Abrikosov, Zhurnal neorg. Himii 4(7), 1642 (1970).

[6] D.M. Freik, I.V. Gorichok, R.O. Dzumedzej, Ju.V. Lisjuk, V.P. Koznjuk, A.P. Koznjuk, Fizika i himija tverdogo tila 13(1), 220 (2012).

[7] D.M. Freik, I.V. Gorichok, N.I. Dykun, Yu.V. Lysyuk, Journal of Thermoelectricity 2, 42 (2011).

[8] D.M. Zajachuk, FTP 31(2), 217 (1997).

[9] B.Ja. Mojzhes, Ju.I. Ravich, FTP 1(2), 188 (1967).

[10] L.I. Anaticuk, Termojelementy i termojelektricheskie ustrojstva (Naukova dumka, Kiev, 1979).

[11] S.S. Lisnjak, Neorganicheskie materialy 32(2), 1913 (1992).

[12] V.M. Bojchuk, O.V. Tkachik, L.V. Turovs'ka, N.I. Dikun, Fizika i himija tverdogo tila 8(2), 366 (2007).

D.M. Freik¹, Ts.A. Krisko², I.V. Gorichok¹, T.S. Lyba¹, L.V. Turavska,
O.S. Krunutsky¹, O.M. Matkivsky¹, I.P. Jaremij¹, V.I. Makovushun¹

Thermoelectric Properties and Defects Subsystems of Solid Solutions PbTe-Bi₂Te₃

¹Vasyl Stefanyk Prekarpathian University, Shevchenko Str., 57, Ivano-Frankivsk, 76025, Ukraine, e-mail: fcss@pu.if.ua

²Kamyanets-Podilsky State University, Ogienko Str. 61, Kamyanets-Podilsk, 32300, Ukraine, e-mail: fizkaf@ua.fm

Studied the phase composition, structure and thermoelectric properties of solid solutions PbTe-Bi₂Te₃. Found that the increase of Bi₂Te₃ in solid solution leads to non-monotonic change of the lattice constant in a neighborhood with a minimum of 2 mol. % and conductivity with a maximum at 1 mol. % Bi₂Te₃. Zeebek coefficient ratio decreases with increasing content of Bi₂Te₃ throughout the studied concentration range. When the content of Bi₂Te₃ ≥ 2 mol. % Of the most probable mechanism for the formation of a solid solution PbTe-Bi₂Te₃ is equivalent position

of lead bismuth to form interstitial tellurium.