

В.В. Ромака¹, П. Рогль², Л.П. Ромака³, Ю.В. Стадник³,
Р.О. Корж¹, В.Я. Крайовський¹, Т.М. Ковбасюк¹, Н.В. Цигилик¹

Дослідження напівпровідникового твердого розчину $V_{1-x}Ti_xFeSb$. II. Особливості кристалічної та електронної структур

¹Національний університет "Львівська політехніка", вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна,
e-mail: romakav@lp.edu.ua;

²Інститут фізичної хімії Віденського університету, вул. Верінгерштрассе, 42, Відень, А-1090, Австрія,
e-mail: peter.franz.roggl@univie.ac.at;

³Львівський національний університет ім. І.Франка, вул. Кирила і Мефодія, 6, Львів, 79005, Україна,
e-mail: romakal@franko.lviv.ua;

Досліджено особливості кристалічної та електронної структур напівпровідникового твердого розчину $V_{1-x}Ti_xFeSb$, $x = 0 - 0,20$. Описано механізм генерування у кристалі структурних дефектів акцепторної та донорної природи. Зокрема, встановлена природа донорів у n -VFeSb («апріорне легування») як результат наявності вакансій у позиції атомів Sb (4b). Отриманий результат лежить в основі технології отримання нових термоелектричних матеріалів на основі n -VFeSb з максимальною ефективністю перетворення теплової енергії в електричну.

Ключові слова: напівпровідник, електропровідність, електронна структура.

Стаття постуила до редакції 25.10.2014; прийнята до друку 15.03.2015.

Вступ

Запропонована робота продовжує дослідження напівпровідникового твердого розчину $V_{1-x}Ti_xFeSb$, започатковані в [1], де вивчено особливості електрокінетичних та енергетичних характеристик n -VFeSb, легovanого Ti, і зроблено висновок про наявність у напівпровіднику структурних дефектів різної природи, які визначають його провідність. Саме не передбачуваність параметрів n -VFeSb є стримуючим фактором прогнозування та отримання нових термоелектричних матеріалів з високими значеннями термоелектричної добротності.

Зазначимо, що в інтерметалічних напівпровідниках, зокрема, n -TiNiSn, n -ZrNiSn та n -HfNiSn, які також кристалізуються у структурному типі MgAgAs (пр. гр. $F\bar{4}3m$), було виявлено механізм «апріорного легування донорами», суть якого у генеруванні структурних дефектів донорної природи у результаті часткового зайняття атомами Ni (до 1 %) позиції 4a (позиція атомів Ti, Zr, Hf) При цьому мікросондовий аналіз поверхні зразків, наприклад, у n -HfNiSn, виявив дефіцит атомів Hf на ~ 1 % [2, 3]. Як наслідок, кристалічна структура таких напівпровідників є неупорядкованою, а рівень Фермі ε_F розташовується поблизу зони провідності.

Легування цих напівпровідників акцепторними і/або донорними домішками зазвичай упорядковує структуру: Ni витісняється з позиції 4a і «заліковуються» структурні дефекти донорної природи (зменшення числа донорів). Витіснення невеликих атомів Ni ($r_{Ni} = 0,124$ нм) з позиції 4a, наприклад, Hf ($r_{Hf} = 0,158$ нм), супроводжувалося стрімким збільшенням значень періоду кристалічної ґратки $a(x)$, а мікросондовий аналіз фіксував наближення концентрації Hf на поверхні до еквіатомного складу.

У даній роботі на основі результатів [1], а також структурних досліджень та результатів розрахунку електронної структури n -VFeSb, легovanого Ti, показано механізми *одночасного* генерування у кристалі структурних дефектів акцепторної та донорної природи, концентрація та співвідношення між якими визначають провідність напівпровідника [4].

I. Методики дослідження

Досліджувалася кристалічна структура та розподіл густини електронних станів (DOS) твердого розчину $V_{1-x}Ti_xFeSb$, $x = 0 - 0,20$. Зразки синтезовано у лабораторії Інституту фізичної хімії Віденського

університету. Гомогенізуючий відпал зразків проводився в евакуйованих кварцових ампулах при температурі 870 К на протязі 720 год. Методом рентгеноструктурного аналізу з використанням програми Fullprof [5] отримані значення періодів кристалічної ґратки. Для розрахунків структурних характеристик використано масиви даних, отримані методом порошку (дифрактометр Guinier-Huberimageplatesystem, $\text{CuK}\alpha_1$ -випромінювання). Хімічний та фазовий склад зразків контролювалися за допомогою скануючого електронного мікроскопа (SEM, ZeissSupra 55VP) та мікронзондового аналізатора (EPMA, energy-dispersiveX-rayanalyzer). Розрахунки електронної структури поведилися методом KKR у наближенні когерентного потенціалу (CPA) і локальної густини (LDA) [6] з використанням значення постійної ґратки на k -сітці розміром $10 \times 10 \times 10$ та тип параметризації обмінно-кореляційного потенціалу Moruzzi-Janak-Williams [7]. Ширина енергетичного вікна, що охоплюється контуром, становить 16 еВ. Число значень енергії для розрахунку DOS становило 1000. Точність розрахунку положення рівня Фермі ± 8 меВ.

II. Дослідження кристалічної структури $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$

На першому етапі досліджувалася серія з п'яти зразків сполуки VFeSb. Рентгенівські фазовий та структурний аналізи не виявили слідів інших фаз, окрім основної. У той же час мікронзондовий аналіз поверхні зразків виявив дефіцит атомів Sb на $\sim 1\%$. Подібний результат отримано у [8]. Дефіцит Sb можна пояснити наявністю структурних дефектів у вигляді вакансій у позиції $4b$ атомів Sb, а формула сполуки трансформується у VFeSb_{1-z} , де z – концентрація вакансій у позиції $4b$. Уточнення кристалічної структури VFeSb методом порошку з одночасним уточненням ізотропних параметрів атомного заміщення та зайнятості кристалографічних позицій у силу малості концентрації структурних дефектів не дозволило ідентифікувати вакансії. Так, значення коефіцієнта невідповідності моделі структури та масиву брегівських відбить знаходилися у межах похибки як для варіанту моделі з 100% зайняття атомами своїх позицій, так і для варіанту існування $\sim 1\%$ вакансій атомів Sb.

Враховуючи, що усі досліджені раніше інтерметалічні напівпровідники містили структурні дефекти донорної і/або акцепторної природи [3], то припущення про наявність у VFeSb дефектів донорної природи у вигляді вакансій у позиції $4b$ є доволі природним. Оскільки атоми Sb формують валентну зону напівпровідника, то зменшення їх числа та поява вакансій у позиції $4b$ еквівалентне генеруванню донорів («апріорне легування»).

Виходячи з упорядкованої моделі структури VFeSb, в якій атоми займають позиції у відповідності до структурного типу MgAgAs і ступінь зайнятості становить 100%, було розраховано значення періоду

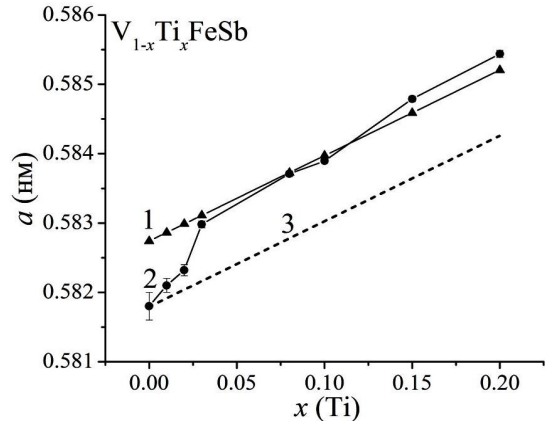


Рис. 1. Зміна значень періоду кристалічної ґратки $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$: 1 – розраховані значення; 2 – експериментальні результати; 3 – гіпотетичні.

кристалічної ґратки (рис. 1). Виявилось, що значення періоду, отримані з експерименту, є меншими від прогнозованих розрахунками: $a_{\text{екс.}} = 0,5818$ нм і $a_{\text{роз.}} = 0,5827$ нм. Виникає запитання, що є причина такої різниці? Якщо пригадати, що мікронзондовий аналіз виявив дефіцит Sb на $\sim 1\%$ [8], а також припущення, що це може бути проявом вакансій у кристалографічній позиції $4b$ атомів Sb, то різниця у значеннях періоду ґратки VFeSb може слугувати вагомим аргументом у підтвердження такого припущення.

З іншого боку, припущення щодо наявності у структурі VFeSb вакансій у позиції $4b$, що еквівалентне генеруванню донорів виглядає логічним, оскільки узгоджується з результатами кінетичних досліджень VFeSb [1], які вказували на існування у напівпровіднику донорів невідомого походження. Так, від'ємні значення коефіцієнта термо-ерс VFeSb та наявність стрибкового механізму переносу заряду по утвореній дефектами домішкової донорній зоні є вагомим аргументом щодо припущення про наявності вакансій у позиції атомів Sb ($4b$).

На наступному етапі структурних досліджень вивчалися зразки твердого розчину $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$, $x \leq 0,20$, які за результатами рентгеноструктурного аналізу також не містили слідів інших фаз, а уточнення їх кристалічної структури методом порошку також не дозволило однозначно ідентифікувати особливості просторового розташування атомів (вакансій).

Враховуючи, що атомний радіус Ti ($r_{\text{Ti}} = 0,146$ нм) є більшим від такого для V ($r_{\text{V}} = 0,135$ нм), то логічним є збільшення значень періоду кристалічної ґратки $a(x)$ $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$ при збільшенні вмісту Ti (рис. 1, крива 2). Привертаємо увагу до характеру зміни значень $a(x)$, зокрема, на ділянці $0 \leq x \leq 0,03$. Якщо у VFeSb існують вакансії у позиції $4b$ атомів Sb і їх число при легуванні залишалося би незмінним, то зміну значень $a(x)$ описала би гіпотетична залежність (рис. 1, крива 3), яка проходить через точку $a_{\text{експ.}}$ паралельно, але

нижче розрахованої. Однак на ділянці концентрацій $0 \leq x \leq 0,03$ амплітуда зміни значень періоду кристалічної ґратки є значно більшою, ніж дають розрахунки (більшим є кут нахилу залежності $a(x)$). Така «прискорена» зміна значень періоду $a(x)$ $V_{1-x}Ti_xFeSb$ на ділянці вказує на наявність у кристалі не ідентифікованих досі структурних дефектів.

Оскільки атомний радіус Ti переважає такі у V та Fe ($r_{Fe} = 0,127$ нм) і є меншим від атомного радіусу Sb ($r_{Sb} = 0,159$ нм), то стрімке збільшення значень $a(x)$ $V_{1-x}Ti_xFeSb$ логічно пов'язати саме зі змінами у підґратці найбільшого атому Sb . Враховуючи, що залежність $a(x)$ при $x \geq 0,03$ практично виходить на розраховану траєкторію $a(x)$ у випадку заміщення лише атомів V на Ti , логічно припустити, що на ділянці $0 \leq x \leq 0,03$ одночасно відбувається щонайменше два процеси: заміщення V на Ti , що генерує у кристалі $V_{1-x}Ti_xFeSb$ структурні дефекти акцепторної природи та поступове зайняття атомами Sb вакансій у власній позиції ($4b$), що зменшує число структурних дефектів донорної природи («заліковування дефектів»). У такому разі формула сполуки набуває вигляду $V_{1-x}Ti_xFeSb_{1-z}$, де z – концентрація вакансій у позиції $4b$. Тобто, за такого механізму у кристалі відбувалося би *прискорене* збільшення ступеню компенсації з подальшою перекомпенсацією при $x \approx 0,01 - 0,02$, оскільки у напівпровіднику електронного типу провідності n - $VFeSb$ *прискорено* зменшувалася би концентрація донорів як за рахунок генерування акцепторів при уведенні домішки Ti , так і за рахунок зменшення числа донорів при зайнятті атомами Sb вакансій у позиції $4b$.

Однак результати кінетичних досліджень $V_{1-x}Ti_xFeSb$ [1] засвідчили, що зміна типу провідності напівпровідника (перекомпенсація) має місце при більших концентраціях акцепторів, що відповідає складу $x \approx 0,03$. Іншими словами, у кристалі $V_{1-x}Ti_xFeSb$ поряд з механізмом генерування акцепторів та зменшення числа донорів через «заліковування» структурних дефектів донорної природи існує ще один невідомий механізм генерування донорів, який «тормозить» перекомпенсацію напівпровідника.

Зазначимо, що мікросондовий аналіз зразків $V_{1-x}Ti_xFeSb$, $x \geq 0,03$, не виявив дефіциту Sb , що підтверджує припущення стосовно «заліковування» с дефектів донорної природи. Натомість дослідження виявили дефіцит Fe , концентрація якого наростала. Міркуючи за схемою, описаною вище, можна припустити, що у кристалі $V_{1-x}Ti_xFeSb$ також діє механізм генерування структурних дефектів донорної природи у вигляді вакансій у позиції $4c$ атомів Fe , однак швидкість генерування донорів значно поступається швидкості генерування акцепторів при зайнятті атомами Ti позиції $4a$ атомів V . Така умова ґрунтується на тому, що при концентрації $x \geq 0,03$ основними носіями струму напівпровідника є дірки, а утворені донори лише зменшують швидкість зміни ступеню компенсації. Дане твердження повністю узгоджується з результатами [1]. У такому разі формула сполуки набуває вигляду $V_{1-x}Ti_xFe_{1-y}Sb_{1-z}$, де

y – концентрація вакансій у позиції $4c$.

Таким чином, структурні дослідження сполуки $VFeSb$ та твердого розчину $V_{1-x}Ti_xFeSb$ не дозволили *однозначно* ідентифікувати особливості просторового розташування атомів у реальних кристалах, оскільки точність методу рентгеноструктурного аналізу лежить за межами концентрацій дефектів, генерованих у кристалі. Однак їх результати дали підстави для висунення обґрунтованих припущень щодо моделей формування структурних дефектів як у сполуці, так і твердому розчині. Зокрема, з досліджень випливає, що у структурі $VFeSb$ мають місце вакансії у позиції $4b$ атомів Sb , що еквівалентно генеруванню дефектів донорної природи. Окрім того, уведення у $VFeSb$ Ti шляхом заміщення V супроводжується:

- генеруванням структурних дефектів акцепторної природи при зайнятті атомами Ti позиції $4a$ атомів V ;

- зменшенням та зникненням на ділянці концентрацій $V_{1-x}Ti_xFeSb$, $0 \leq x \leq 0,03$, дефектів донорної природи при зайнятті Sb вакансій у позиції $4b$ («заліковування» дефектів);

- генерування у кристалі структурних дефектів донорної природи як результат появи та наростання числа вакансій у позиції $4c$ атомів Fe .

III. Дослідження електронної структури $V_{1-x}Ti_xFeSb$

Оскільки дослідження структури $V_{1-x}Ti_xFeSb$ не дозволили ідентифікувати наявність структурних дефектів, які визначають розподіл густини електронних станів DOS та механізми провідності, застосуємо для вирішення проблеми методу, запропоновану у [3]. Її суть полягає у пошуку такого просторового розташування атомів у вузлах елементарної комірки (або вакансій), при якому результати розрахунку DOS узгоджуються з результатами експериментальних досліджень кристалічної структури та електрофізичних властивостей. Іншими словами, результати розрахунку DOS у співставленні з фізичними властивостями дають можливість отримати інформацію про структуру кристалу, яка недоступна при використанні рентгенівських методів дослідження.

Спочатку проаналізуємо результати розрахунку DOS для моделі кристалічної структури $V_{1-x}Ti_xFeSb$, в якій усі атоми займають позиції у відповідності до структурного типу $MgAgAs$ і ступінь зайнятості позицій становить 100 % (рис. 2). Зосередимо увагу на положенні рівня Фермі ϵ_F . Для $VFeSb$ рівень Фермі ϵ_F розташовується поблизу зони провідності, що вказує на електронний тип провідності напівпровідника. Подібний висновок було отримано в [1] з результатів кінетичних досліджень, де знак коефіцієнта термо-ерс α залишався від'ємним у діапазоні температур 4,2 - 380 К ($\alpha_{T=300K} = -207,25$ мкВ/К).

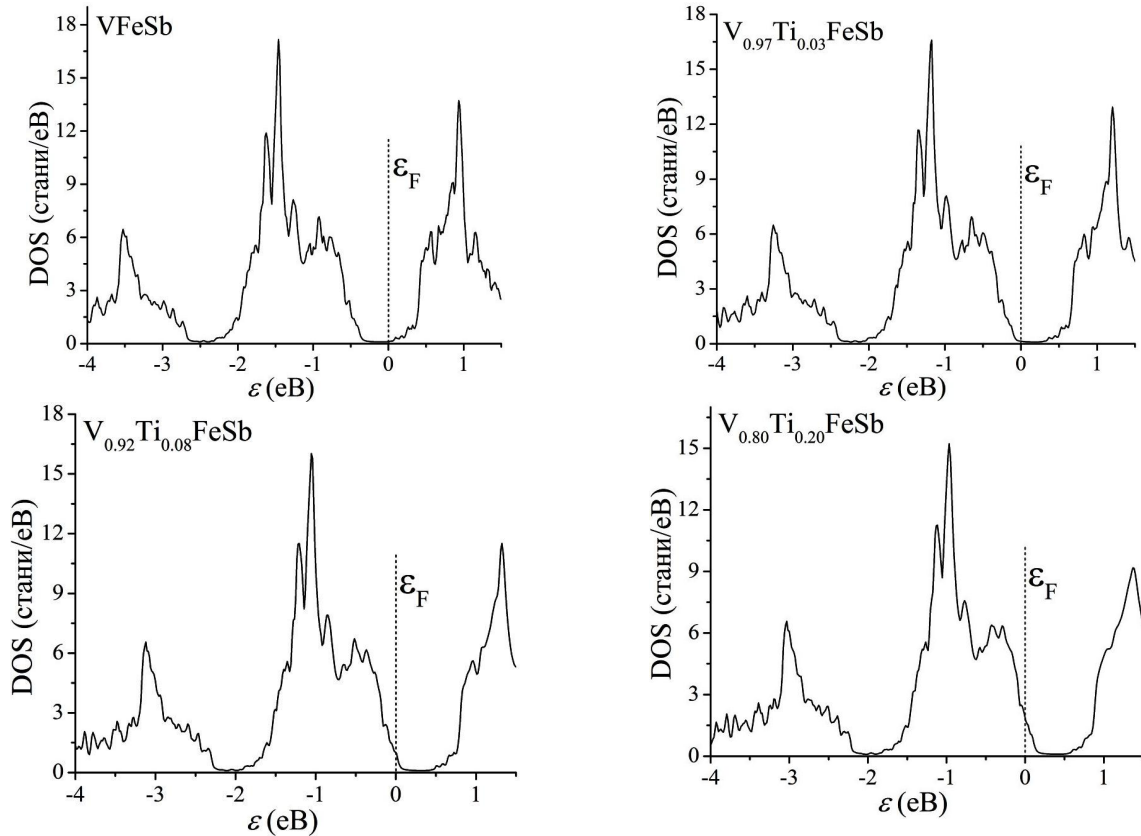


Рис. 2. Розрахунок густини електронних станів DOS для варіанту упорядкованої структури $V_{1-x}Ti_xFeSb$ та 100 % зайняття атомами належних їм кристалографічних позицій.

Розрахунки показують, що легування n -VFeSb акцепторною домішкою Ti вже при концентрації $x = 0,03$ змінює тип провідності і дірки стають основними носіями струму, на що вказує розташування рівня Фермі ϵ_F біля валентної зони. Цей результат узгоджується з експериментальними даними щодо зміни типу провідності, які вказали на розташування рівня Фермі на відстані $\sim 33,1$ меВ від краю валентної зони. Однак, при концентрації акцепторів, що відповідає складу $V_{1-x}Ti_xFeSb$, $x = 0,08$, розрахунки розташовують рівень Фермі ϵ_F глибоко у валентній зоні – відбувся перехід провідності діелектрик-метал, однак експериментальні результати показують, що рівень Фермі лише наблизився до валентної зони на відстань $\sim 16,7$ меВ. Таким чином, результати розрахунку електронної структури для випадку моделі упорядкованої кристалічної структури $V_{1-x}Ti_xFeSb$ зі 100 % зайняття атомами належних їм позицій не узгоджуються з даними експерименту. Даний висновок переключається з таким, зробленим із структурних досліджень напівпровідника.

Перейдемо до викладу результатів розрахунку DOS для моделі кристалічної структури $V_{1-x}Ti_xFeSb$, яка максимально наближена до реального стану. Розрахунки DOS проведені для різних варіантів як розташування атомів у вузлах елементарної комірки, так і ступеню зайнятості кристалографічних позицій власними або чужими атомами, а також за умови існування вакансій. Реперними точками були результати кінетичних досліджень [1], зокрема,

динаміка зміни ступеню компенсації напівпровідника (амплітуди великомасштабної флуктуації $e_1^a(x)$), енергії активації $e_1^r(x)$ з рівня Фермі на рівень протікання валентної зони, а також обмеження та припущення, які впливають зі структурних досліджень $V_{1-x}Ti_xFeSb$. На рис. 3 представлені результати таких розрахунків.

Можемо бачити, що для випадку VFeSb рівень Фермі розташовується у «хвості» зони провідності, породженим структурними дефектами донорної природи як результат вакансій у позиції $4b$ атомів Sb. Таке розташування ϵ_F забезпечує, з одного боку, стрибковий механізм переносу заряду e_3^r по станах з енергіями, близькими до рівня Фермі ϵ_F , а з іншого – забезпечує при $T \geq 80$ К перехід електронів у зону неперервних енергій практично без енергетичного стрибка, що ми спостерігали в експерименті [1].

При концентрації акцепторів, що відповідає складу $V_{1-x}Ti_xFeSb$, $x = 0,02$, рівень Фермі все ще знаходиться у домішкській донорній зоні, тоді як розрахунок DOS для випадку упорядкованої структури напівпровідника та 100 % зайняття атомами належних їм позицій розташовував рівень Фермі по середині забороненої зони. Саме завдяки показаному на рисунку співвідношенню концентрацій вакансій у позиціях $4b$ та $4c$ атомів Sb та Fe, відповідно, отримано результат, який також співпадає з результатами експерименту [1].

Результати розрахунку DOS для випадку

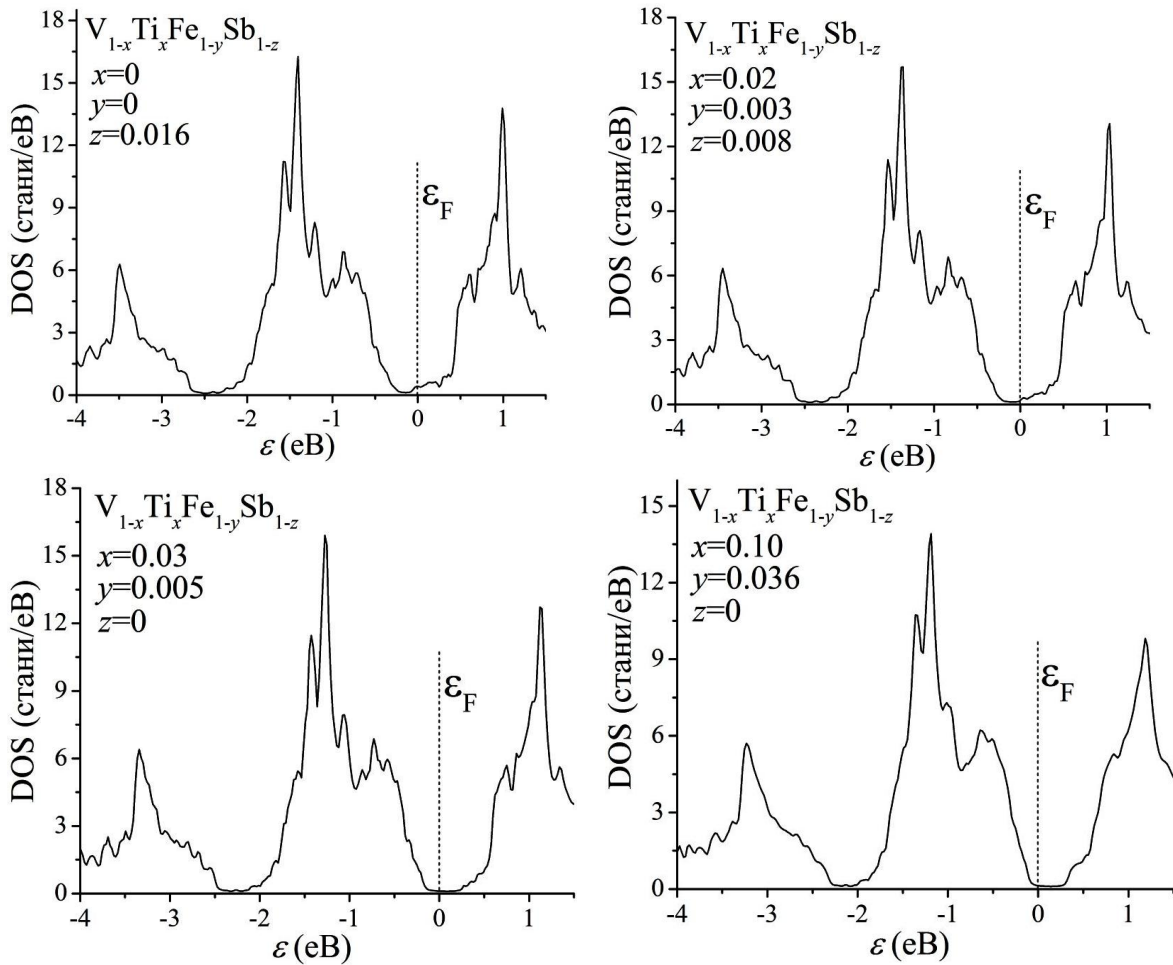


Рис. 3. Розрахунок густини електронних станів DOS напівпровідника n -VFeSb, легованого Ti, з урахуванням структурних дефектів, де x – концентрація домішки Ti у позиції $4a$ атомів V; y – концентрація вакансій у позиції $4c$ атомів Fe; z – концентрація вакансій у позиції $4b$ атомів Sb.

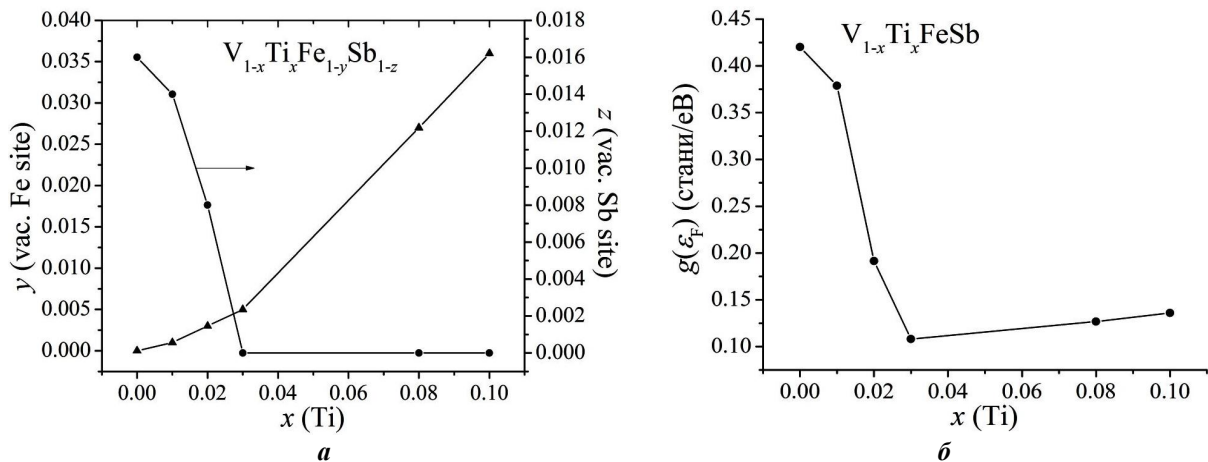


Рис. 4. Зміна значень концентрації структурних дефектів (а) та густини станів на рівні Фермі $g(\epsilon_F)$ з урахуванням структурних дефектів (б) n -VFeSb, легованого Ti.

$V_{1-x}Ti_xFeSb$, $x = 0,03$, та концентрації вакансій у позиції $4c$ атомів Fe ($y = 0,005$) та їх відсутності у позиції $4b$ ($z = 0$) розташовують рівень Фермі у забороненій зоні поблизу валентної зони. Таке розташування рівня Фермі повністю узгоджується з експериментальними дослідженнями, оскільки тепер основними носіями струму є дірки і має місце

активація дірок з рівня Фермі на рівень протікання валентної зони. І на завершення, для випадку $V_{1-x}Ti_xFeSb$, $x = 0,10$, та концентрації вакансій у позиції $4c$ атомів Fe, $y = 0,036$ та їх відсутності у позиції $4b$ рівень Фермі все ще знаходиться у забороненій зоні поблизу валентної зони, що узгоджується з результатами [1].

На рис. 4,а узагальнено результати зміни значень концентрації структурних дефектів у напівпровіднику n -VFeSb, легovanого Ti, на основі яких здійснено розрахунок густини електронних станів DOS (рис. 3), що узгоджуються з результатами експериментальних досліджень структури та кінетичних властивостей напівпровідника.

Висновки

Таким чином, комплексне дослідження n -VFeSb, легovanого Ti, дозволило встановити взаємопов'язаний механізм генерування у кристалі структурних дефектів акцепторної та донорної природи, відношення яких визначає провідність напівпровідника. Встановлена природа донорів у n -VFeSb («априорне легування») як результат наявності вакансій у позиції атомів Sb (4b). Уведення у VFeSb домішки Ti шляхом заміщення V одночасно приводить до: а) генерування дефектів акцепторної природи у позиції 4,а; б) зменшення та ліквідації дефектів донорної природи на ділянці концентрацій $0 \leq x \leq 0.03$ при зайнятті Sb вакансій у позиції 4b; в) генерування дефектів донорної природи при появі та збільшенні числа вакансій у позиції 4с. Отриманий результат дозволяє прогнозувати поведінку кінетичних параметрів $V_{1-x}Ti_xFeSb$, які забезпечать

максимальну ефективність перетворення теплової енергії в електричну, а також отримати термоелектричний матеріал на основі n -VFeSb шляхом оптимального його легування, що однак буде результатом окремого дослідження.

Робота виконана у рамках гранту МОН України, № 0112U001279.

Ромака В.В. - к.х.н., докторант кафедри прикладного матеріалознавства та обробки матеріалів;

Рогль Петер (RoglPeter) - доктор фізики, професор, директор Інституту фізичної хімії Віденського університету (Відень, Австрія);

Стадник Ю.В. - к.х.н., провідний науковий співробітник кафедри неорганічної хімії;

Ромака Л.П. - к.х.н., провідний науковий співробітник кафедри неорганічної хімії;

Корж Р.О. - к.т.н., доцент, керуючий справами Національного університету "Львівська політехніка";

Крайовський В.Я. - к.т.н., проректор;

Цигилик Н.В. - к.х.н., асистент кафедри прикладного матеріалознавства та обробки матеріалів;

Ковбасюк Т.М. – аспірант.

- [1] В.А. Ромака, П. Рогль, Ю.В. Стадник, Д. Качаровський, Л.П. Ромака, Р.О. Корж, В.Я. Крайовський, А.М. Горинь, Фіз. хім. тв. тіла, (направлена до друку 04.2014 р.).
- [2] V.V. Romaka, P. Rogl, L. Romaka, Yu. Stadnyk, A. Grytsiv, O. Lakh, V. Krayovsky, Intermetallics 35, 45 (2013).
- [3] В.А. Ромака, В.В. Ромака, Ю.В. Стадник, Інтерметалічні напівпровідники; властивості та застосування (Львівська політехніка, Львів, 2011).
- [4] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос, Электронные свойства легированных полупроводников (Наука, Москва, 1979).
- [5] T. Roisnel, J. Rodriguez-Carvajal, Mater. Sci. Forum, Proc. EPDIC7 378-381, 118 (2001).
- [6] M. Schroter, H. Ebert, H. Akai, P. Entel, E. Hoffmann, G.G. Reddy, Phys. Rev. B 52, 188 (1995).
- [7] V.L. Moruzzi, J.F. Janak, A.R. Williams, Calculated electronic properties of metals (Pergamon Press, NY, 1978).
- [8] Chenguang Fu, Hanhui Xie, Yintu Liu, T.J. Zhu, Jian Xie, X.B. Zhao, Intermetallics 32, 39 (2013).

V.V. Romaka¹, P. Rogl², L.P. Romaka³, Yu.V. Stadnyk³,
R.O. Korzh¹, V.Ya. Krayovsky¹, T.M. Kovbasuk¹, H.V. Tsygylyk¹

Investigation of $V_{1-x}Ti_xFeSb$ Semiconductor Solid Solution. II. Peculiarities of Crystal and Electronic Structure

¹National University "Lvivska Politechnika", Bandera str., 12, Lviv, 79013, Ukraine;

²Institut für Physikalische Chemie, Universität Wien, Währingerstrasse, 42, Wien, A-1090, Austria;

³Ivan Franko National University of Lviv, Kyryla and Mefodiya Str., 6, Lviv, 79005, Ukraine;

The peculiarities of the crystal and electronic structure of $V_{1-x}Ti_xFeSb$, $x = 0 - 0.20$, semiconductor solid solution were investigated. The mechanism of generation of structural defects of acceptor and donor nature is described. In particular the nature of donors in n -VFeSb was established ("a priori doping") as a result of presence of vacancies in Sb atomic site (4b). The obtained result lays in the basis of the technology for obtaining thermoelectric materials based on n -VFeSb with maximal efficiency of thermal to electrical energy conversion.

Keywords: semiconductor, electrical conduction, electronic structure.