

DOI: 10.63527/1607-8829-2025-2-36-48

Горічок І.В.<sup>1</sup> (<https://orcid.org/0000-0001-9748-3288>),  
Галушак М.О.<sup>2</sup> (<https://orcid.org/0009-0000-3693-4903>),  
Кулик О.Г.<sup>1</sup> (<https://orcid.org/0009-0001-2499-6813>)  
Потятинник Т.С.<sup>1</sup> (<https://orcid.org/0009-0004-7067-7639>)

<sup>1</sup>Прикарпатський національний університет  
імені Василя Стефаника, м. Івано-Франківськ, 76018, Україна;  
<sup>2</sup>Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу,  
Івано-Франківськ, 76000, Україна

Автор-кореспондент: Горічок І.В., e-mail: [Ihor.Horichok@pnu.edu.ua](mailto:Ihor.Horichok@pnu.edu.ua)

## Розрахунок рухливості носіїв заряду у РbТе на основі емпіричних термоелектричних параметрів

*У роботі проведено порівняльний аналіз рухливості носіїв заряду у РbТе розрахованої з використанням виразів отриманих на основі моделі Друде-Зомерфельда та моделі невиродженого напівпровідника з параболічними зонами. При цьому рухливості розраховувались як функції експериментально визначених коефіцієнта Зеебека та питомої електропровідності. Результати співставлено з відповідними даними отриманими в наближенні часу релаксації.*

**Ключові слова:** рухливість, коефіцієнт Зеебека, питома електропровідність, ефективна маса.

### Вступ

Рухливість – важливий параметр електронної підсистеми, що використовується для оцінки термоелектричної якості матеріалів [1–3]:

$$B = \left( \frac{k_0}{e_0} \right)^2 e_0 N_{C,V} \frac{u}{k_{lat}} T. \quad (1)$$

Тут  $N_{C,V}$  – густина станів у зоні провідності ( $N_C$ ) чи валентній зоні ( $N_V$ ). Термоелектрична добротність  $ZT$  пов'язана з  $B$  [3]:

$$ZT = \frac{A(\mu)}{B + C(\mu)}, \quad (2)$$

**Цитування:** Горічок І.В., Галушак М.О., Кулик О.Г., Потятинник Т.С. (2025). Розрахунок рухливості носіїв заряду у РbТе на основі емпіричних термоелектричних параметрів. *Термоелектрика*, (2), 36–48. <https://doi.org/10.63527/1607-8829-2025-2-36-48>

де  $A(\mu)$  та  $B(\mu)$  – функції, що залежать лише від хімічного потенціалу і є комбінаціями інтегралів Фермі з різними індексами. А термоелектрична добротність, як відомо, є інтегральною характеристикою матеріалу і дає можливість визначити ефективність перетворення теплової енергії в електричну, зокрема, згідно залежності [4]:

$$Z = \frac{T_h - T_c}{T_h} \frac{\sqrt{ZT+1} - 1}{\sqrt{ZT+1} + T_h/T_c}. \quad (3)$$

Отже, параметр  $B$  відображає комбінацію основних параметрів матеріалу, серед яких і рухливість носіїв заряду. Числове значення даної величини визначатиме фундаментальну можливість придатності матеріалу до практичного застосування в термоелектричних перетворювачах. В той же час, числові значення доданків  $A(\mu)$  та  $B(\mu)$  можуть відносно легко оптимізуватись, наприклад, легуванням, для досягнення максимального значення  $ZT$  при заданому  $B$ .

Основним експериментальним методом вимірювання рухливості носіїв  $u$  є дослідження ефекту Холла. Проте проведення таких досліджень часто є відносно складним завданням, зокрема, у випадку високих температур. Окрема складність також виникає коли концентрації основних і неосновних носіїв є величинами одного порядку, що теж часто має місце при високих температурах. Складність у цьому випадку полягає у розділенні внеску електронної та діркової підсистеми. Тому у роботі [5] було представлено відносно простий спосіб розрахунку  $u$ . Представлений авторами вираз рухливості отримано в наближені моделі вільних електронів Друде-Зомерфельда і передбачає використання для обчислень експериментально вимірянних значень коефіцієнта Зеебека та питомої електропровідності:

$$u_w = \frac{3h^3\sigma}{8\pi e_0 (2m_0 k_0 T)^{3/2}} \left[ \frac{\exp\left(\frac{|S|}{k_0/e_0} - 2\right)}{1 + \exp\left(-5\left(\frac{|S|}{k_0/e_0} - 1\right)\right)} + \frac{\frac{3|S|}{\pi^2 k_0/e_0}}{1 + \exp\left(-5\left(\frac{|S|}{k_0/e_0} - 1\right)\right)} \right]. \quad (4)$$

Тут  $m_0$  – маса вільного електрона. Згідно [5], визначена таким чином рухливість  $u_w$  ( $w$  – weighted) пов’язана з холлівською рухливістю  $u_H$  через ефективну масу густини станів  $m_{d,0}^*$ :

$$u_w = u_H \left( \frac{m_{d,0}^*}{m_0} \right)^{3/2}. \quad (5)$$

Тобто, якщо у (4) замість  $m_0$  відразу підставити  $m_{d,0}^*$ , то отримаємо холлівську рухливість. З іншого боку, якщо є виміряні  $S(T)$ ,  $\sigma(T)$  і холлівська рухливість  $u_H(T)$ , то можна отримати температурну залежність ефективної маси густини станів  $m_{d,0}^*(T)$ , що зокрема, зроблено в роботах [6] та [7].

У [6] досліджено термоелектричні властивості SnS легovanого натрієм та селеном. На основі проведених вимірювань коефіцієнта Зеебека та питомої електропровідності авторами проведено розрахунок рухливості  $u_w$ . Додатково проведено вимірювання холлівської рухливості, що дозволило визначити температурну залежність ефективної маси густини станів, використовуючи вираз (5). Отримана залежність характеризувалась немонотонною поведінкою, з максимумом в околі 750 К. Авторами зроблено припущення, що саме за цієї температури взаємне розташування трьох валентних підзон є найближчим і це є причиною росту ефективної маси густини станів. Використовуючи отримані значення ефективної маси, авторами розраховано термоелектричну якість матеріалу, через яку в свою чергу, визначили термоелектричну добротність  $ZT$ . Результати такого розрахунку добре узгоджуються з результатами розрахунку  $ZT$  на основі вимірювань  $S$ ,  $\sigma$ ,  $k$ .

У роботі [7] також використано розрахунок рухливості  $u_w$  і його співставлення з холлівською для оцінки зміни ефективних мас густини станів зі збільшенням кількості введеної домішки.

Таким чином, даний підхід може бути корисним не лише для розрахунку рухливостей і подальшої оцінки термоелектричної якості матеріалів, але й для визначення ефективної маси густини станів, якщо такий параметр невідомий. Втім варто мати на увазі наближеність моделі в рамках якої отримано вираз (4). Модель Друде-Зомерфельда свого часу виявилась дуже продуктивною для пояснення властивостей металів. Вироджені надпровідники часто демонструють властивості подібні до металів. Наприклад, температурна залежність питомої електропровідності  $\sigma$  спадає з ростом температури, як і у металах. Також у випадку сильного виродження вирази для кінетичних параметрів можуть не залежати явно від механізму розсіювання [8]. Відповідні рівняння, як і рівняння (4), не міститимуть параметра  $r$ , який характеризує конкретний механізм розсіювання ( $r = 0$  при розсіюванні на деформаційному потенціалі акустичних (DA) та оптичних фононів (DO),  $r = 1$  при розсіюванні на поляризаційному потенціалі оптичних фононів (PO),  $r = 2$  при розсіюванні на іонізованій домішці (ID))[8].

Проте, відомо, що хороші термоелектричні матеріали є слабо виродженими напівпровідниками. Тому модель справедлива для сильного виродження може призводити до похибки при оцінці  $u$ . В даній роботі ми провели порівняння рухливостей отриманих за формулою (4) та при послідовному розрахунку в наближенні часу релаксації. Також проаналізували можливість використання іншого виразу для рухливості  $u$  як функції  $\sigma$  та  $S$ , отриманого для невироджених напівпровідників з параболічними зонами. Результати порівняно з експериментальними даними. Модельні розрахунки проведено для легovanого йодом телуриду свинцю PbTe:І оскільки при легуванні І не утворює локалізованих енергетичних рівнів, які можуть спричиняти додаткові механізми розсіювання при певних значеннях енергії Фермі. Також ми використали експериментальні залежності  $S(T)$ ,  $\sigma(T)$  з роботи [9], у якій для отримання дослідних зразків використовували метод гарячого пресування, що також виключає участь границь зерен у процесах розсіювання. Крім того, для PbTe є достатньо інформації

про ефективні маси [9], що, в загальному, робить даний матеріал гарним модельним об'єктом.

### Методика розрахунків та результати

Методика розрахунку  $u$  в наближенні часу релаксації представлена, зокрема, в роботах [3, 8, 10]. Рухливість у даних роботах визначають як:

$$u = e \frac{\tau_0(T)}{m_{n,0}} \cdot \frac{I_{r+1,2}^0(\eta, \beta)}{I_{3/2,0}^0(\eta, \beta)}. \quad (6)$$

Тут  $m_{n,0}$  – ефективна маса на дні зони,  $\tau_0$  – час релаксації носіїв,  $I_{n,k}^m(\eta, \beta)$  – інтеграл Фермі. Згідно [8]:

$$I_{n,k}^m(\eta, \beta) = \int_0^\infty \left( -\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) \frac{x^m (x + \beta x^2)^n dx}{(1 + 2\beta x)^k}. \quad (7)$$

Тут  $x = E/k_0T$  – приведена енергія,  $\eta = \mu/k_0T$  – приведена енергія Фермі,  $\beta = k_0T/E_g$  – показник непараболічності,  $f_0 = 1/(1 + e^{x-\eta})$  – функція Фермі. Енергія Фермі визначалась підгонкою розрахованих значень  $\sigma(T)$  до експериментальних шляхом варіювання  $\mu$ .

Питому електропровідність визначали згідно залежності

$$\sigma = une_0, \quad (8)$$

в якій концентрація носіїв  $n$  визначалась як:

$$n = \frac{(2m_{d,0}^*kT)^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2\hbar^3} I_{3/2,0}^0(\eta, \beta), \quad (9)$$

Час релаксації носіїв, у випадку розсіювання на деформаційному потенціалі акустичних фононів:

$$\tau_{0r}(T) = \frac{2\pi\hbar^4\rho v_0^2}{(2m_{n,0}k_0T)^{\frac{3}{2}} E_1^2}, \quad (10)$$

де  $\rho = 8.24$  г/см<sup>3</sup> [10],  $E_1 = 15$  еВ [10],  $v_0 = 1.92$  км/с [11]).

При розсіюванні на деформаційному потенціалі оптичних фононів (для  $k_0T \gg \hbar\omega_0$ ):

$$\tau_{0r}(T) = \frac{2}{\pi} \left( \frac{\hbar\omega_0}{E_0} \right)^2 \frac{\hbar^2 a^2 \rho}{(2m_{n,0}k_0T)^{\frac{3}{2}}}, \quad (11)$$

де  $\hbar\omega_0 = k\theta$  ( $\theta = 157.8$  К [3]),  $a = 6.461$  А [10],  $E_0 = 26$  еВ [10].

При розсіюванні на поляризаційному потенціалі оптичних фононів (для  $k_0T \gg \hbar\omega_0$ ):

$$\tau_{0r}(T) = \frac{\hbar^2}{e^2 \sqrt{2m_n k_0 T} \left( \frac{1}{\chi_\infty} - \frac{1}{\chi_0} \right)}, \quad (12)$$

де  $\chi_\infty = 32.6$  [10];  $\chi_0 = 400$  [10].

При розрахунку враховувались поправки на блохівський вигляд хвильових функцій та екранування. Згідно [8], ця поправка для акустичних фононів визначається як:

$$F_{ak}(k) = 1 - \frac{10}{3}L + \left[ \frac{191}{60} + \frac{11}{60} \left( \frac{v_L}{v_T} \right)^2 \right] L^2, \quad (13)$$

де  $v_L$  та  $v_T$  – поздовжня та поперечна компонента швидкості звуку. При розсіюванні на деформаційному потенціалі оптичних фононів [8]:

$$F_{KP} = 1 - \frac{8}{3}L + \frac{13}{6}L^2. \quad (14)$$

При розсіюванні на поляризаційному потенціалі оптичних фононів [8]:

$$F'_{PO} = 1 - \frac{2}{\xi} \ln(1 + \xi) + \frac{1}{1 + \xi} - \frac{1}{2}(4L - L^2)B + L^2C, \quad (15)$$

$\xi = (2kr_0)^2$ , де  $k$  – хвильове число,  $r_0$  – радіус екранування.

У наведених формулах:  $L = \frac{E}{E_g + 2E}$ ,  $B = 1 - \frac{4}{\xi} - \frac{2}{\xi(1 + \xi)} + \frac{6}{\xi^2} \ln(1 + \xi)$ ,

$C = 1 - \frac{3}{\xi} + \frac{9}{\xi^2} + \frac{3}{\xi^2(1 + \xi)} - \frac{12}{\xi^3} \ln(1 + \xi)$ . Радіус екранування при розрахунку  $\xi$  визначався

як [8]  $r_0^2 = \frac{\chi_0 k_0 T}{6\pi e^2 n} \cdot \frac{I_{3/2,0}^0(\eta, \beta)}{I_{1/2,-1}^0(\eta, \beta)}$ . Хвильове число  $k = \sqrt{\frac{2m_{n,0}}{\hbar^2} \bar{E} \left( 1 + \frac{\bar{E}}{E_g} \right)}$ , де

$\bar{E} = \frac{1}{n} \int_0^\infty E \cdot g(E) \cdot f_0(E, \mu) dE$ , а  $n = \int_0^\infty g(E) \cdot f_0(E, \mu) dE$ . Густина станів

$g(E) = \frac{(2m_{d,0})^{3/2}}{2\pi^2 \hbar^3} E^{1/2} \left( 1 + \frac{E}{E_g} \right)^{1/2} \left( 1 + \frac{2E}{E_g} \right)$ . Врахування поправки здійснювалось діленням

відповідних величин  $\tau_0$  на поправку.

На рис. 1 показано розраховані таким способом рухливості в залежності від концентрації носіїв для бездомішкового РbТе при 300 К та співставлено з

експериментальними даними [10]. Видно, що, по перше, модель добре описує експеримент в області концентрацій  $\geq 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , а, по друге, рухливість в цій області приблизно в однаковій мірі визначається DA, DO та PO.

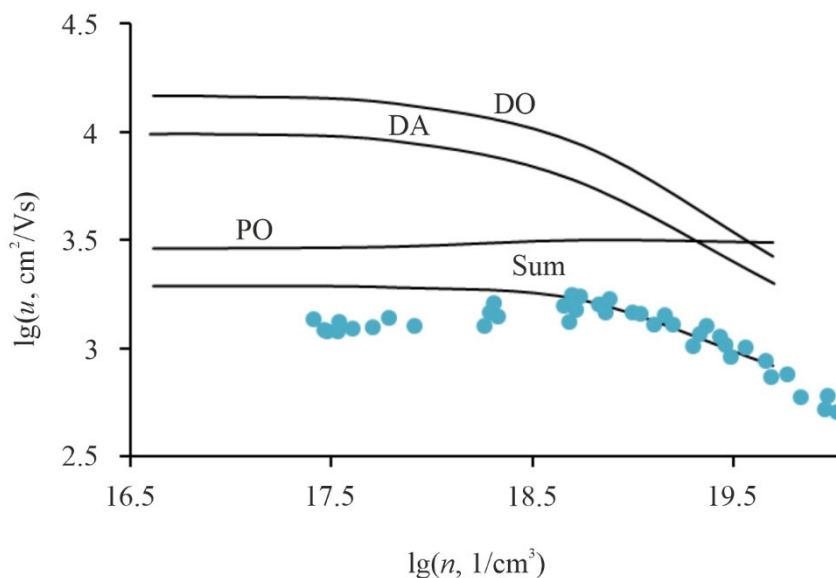


Рис. 1. Залежність рухливості електронів у PbTe від їх концентрації при 300 К.  
Sum – рухливість отримана з врахуванням трьох механізмів розсіювання (DA+DO+PO);  
DA – парціальний внесок зумовлений розсіюванням на деформаційному потенціалі акустичних фононів; DO – парціальний внесок зумовлений розсіюванням на деформаційному потенціалі оптичних фононів; PO – парціальний внесок зумовлений розсіюванням на поляризаційному потенціалі оптичних фононів. Точки – експериментальні дані [10].

На рис. 2 представлено розрахунок температурних залежностей рухливостей для легованого йодом телуриду свинцю PbTe:I в наближенні часу релаксації та використовуючи експериментальні залежності  $S(T)$  та  $\sigma(T)$  і вираз (4). Розрахунок проведено для ефективної маси  $m_{d,0}^* = 0.142 \cdot (T / 120)^{0.4} \cdot m_0$ , яка є відома для PbTe [12], а також використовуючи визначену в роботі [9]  $m_{d,0}^* = 0.25 \cdot (T / 300)^{0.5} \cdot m_0$ .

Бачимо, що при використанні методу часу релаксації, в околі кімнатних температур розраховані та експериментальні значення дуже добре корелюють між собою, а при вищих температурах – кореляція погіршується. Формула ж (4) добре працює лише в області високих  $T$ , тоді як в області  $T_{кім}$  розрахована рухливість та експериментальні значення відрізняються втричі.

Зважаючи на наближеність формули (4) отриманий результат є відносно задовільним, особливо якщо прийняти до уваги, що єдиним параметром, необхідним для розрахунку є ефективна маса густини станів  $m_{d,0}^*$ . У випадку ж часу релаксації потрібна значно більша кількість параметрів, зокрема, константи взаємодії електронів з фононами, визначення яких є складним завданням.

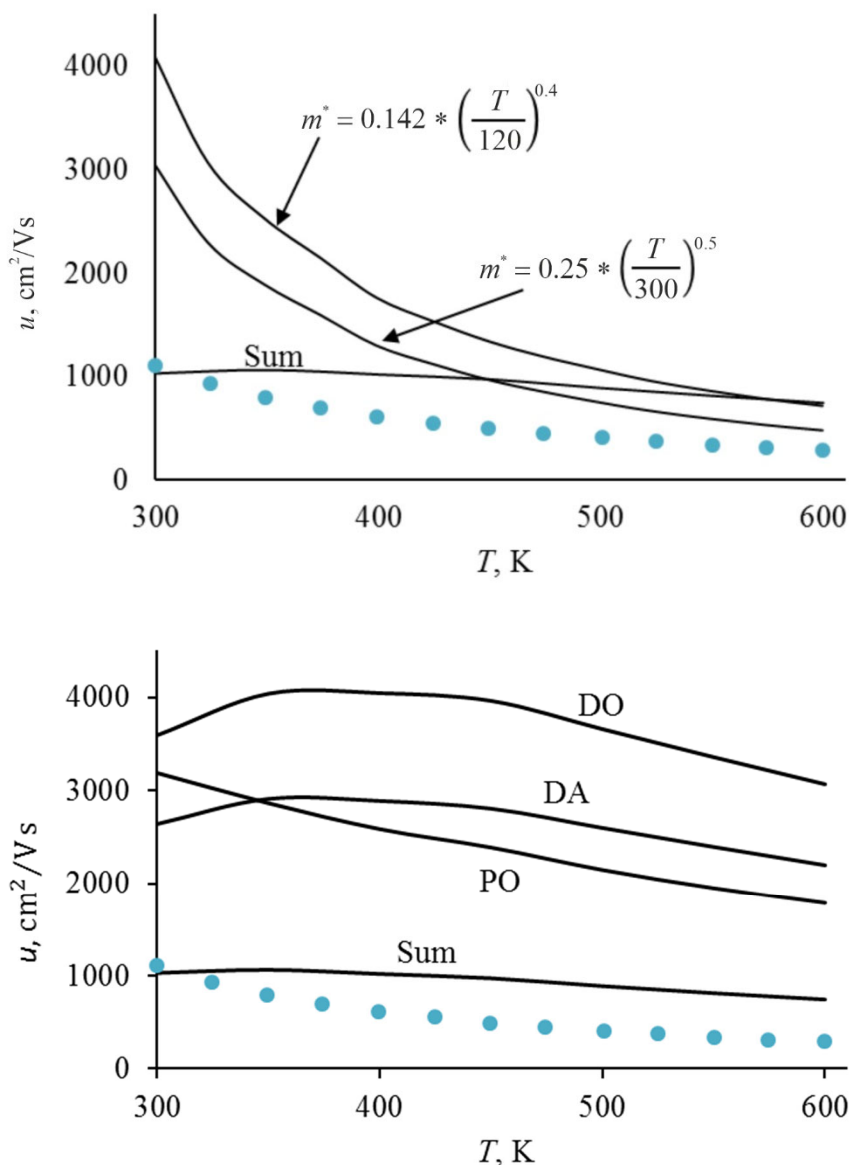


Рис. 2. а – залежність рухливості електронів у РbТе:І від температури отримана в наближенні часу релаксації (Sum) з врахуванням трьох механізмів розсіювання (DA+DO+PO), та за формулою (4) при двох різних значеннях ефективної маси густини станів; б – парціальні внески кожного з механізмів розсіювання отримані при розрахунку рухливості у РbТе:І в наближенні часу релаксації (позначення механізмів – аналогічно до рис. 1). Експериментальні дані – [9]

Для встановлення причин спостережуваних розбіжностей, зокрема внаслідок впливу власних носіїв  $n_i$  на результат розрахунку  $u_w(T)$ , ми розрахували їх концентрації в РbТе та повну концентрацію  $n$  для досліджуваного матеріалу РbТе:І. Енергія Фермі  $\mu$  та концентрація  $n$  були отримані при розрахунку  $u$  в наближенні часу релаксації. Важливо зазначити, що розраховане при 300 К значення  $n$  становить  $3.1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ , що дуже добре узгоджується з експериментальним  $2.9 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$  [9].

Розрахунок  $n_i$  проводили згідно залежності  $n_i = \sqrt{N_C N_V} \exp(-E_g/2k_0T)$ . При цьому, окремо розраховувалась концентрація для  $E_g = E_C - E_{V,i}$  та для  $E_g = E_C - E_{V,h}$ .

А  $n_i$  визначалась як сума концентрацій отриманих при цих двох розрахунках. Непараболічність зон (залежність  $m^*(\mu)$ ) при цьому не враховувалась, оскільки  $\mu$  для власного напівпровідника мав би знаходитися близько середини забороненої зони. Результати такого розрахунку повністю узгоджуються з даними [13]. Ширина забороненої зони між зоною провідності та валентною зоною легких дірок приймалася рівною  $E_C - E_{V,l} = 0.19 - 4 \cdot 10^{-4}T$ , еВ, а між зоною провідності та валентною зоною важких дірок  $E_C - E_{V,h} = 0.38$  еВ [3].

Як видно з рисунку (3)  $n$ , щонайменше, на порядок перевищує концентрацію власних носіїв  $n_i$ . А при кімнатній  $T$  ця відмінність становить близько трьох порядків. Отже власні носії не є причиною розбіжності  $u_w$  та  $u_{exp}$ , особливо при  $T_{кім}$ . Проте, можна припустити, що їх врахування ( $n_i$ ) могло б покращити кореляцію з експериментальними даними для методу часу релаксації при високих  $T$ .

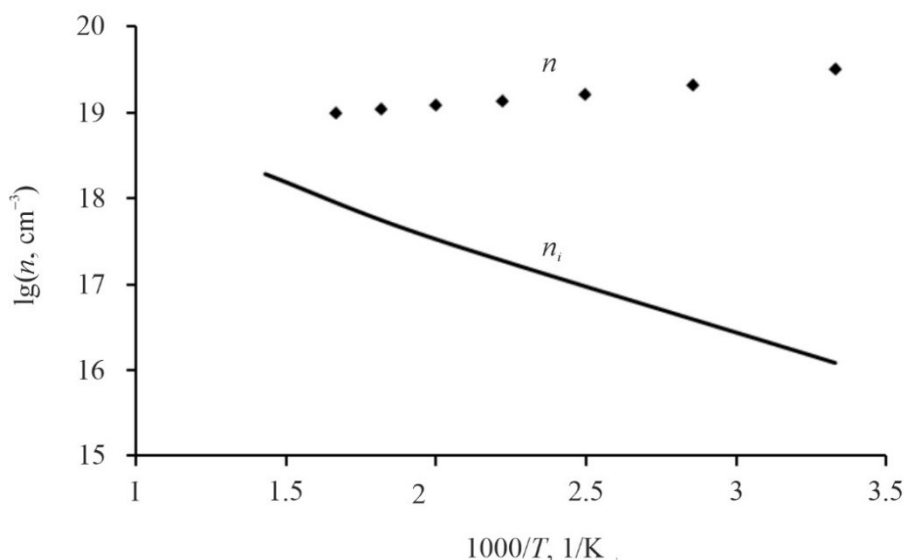


Рис. 3. Розраховані температурна залежність концентрації носіїв у PbTe:I ( $n$ ), та власна концентрація носіїв у PbTe ( $n_i$ )

На рис. 4 наведено залежність хімічного потенціалу від температури отриманого при розрахунку питомої електропровідності та рухливості в наближенні часу релаксації. Як бачимо при 300 К  $\mu$  знаходиться глибоко в зоні провідності: глибше  $5 kT$ . При 600 К – близько  $2 kT$ . Тобто при 300 К матеріал ближчим є до сильного виродження ( $10 kT$ ) аніж при 600 К. Можна було б припустити, що при сильнішому виродженні модель Друде-Зомерфельда, а отже і формула (4), мали б давати значення ближчі до експериментальних. Проте ситуація протилежна.

В області слабого виродження напівпровідника ( $-4 \cdot kT \leq \mu \leq 10 \cdot kT$ ) простих аналітичних виразів, на зразок (4), для кінетичних параметрів отримати складно. Але цікаво було б оцінити відмінності між результатами використання формули (4), справедливої для випадку виродження носіїв, та формули, що отримана в наближенні невиродженого напівпровідника. Її можна отримати, використовуючи відому для цього випадку залежність для коефіцієнта Зеебека:

$$S = \frac{k_0}{e_0} \left( r + 2 - \ln \left( \frac{n}{N_C} \right) \right), \quad (16)$$

де  $N_C = 2 \left( \frac{2\pi m_{d,0}^* k_0 T}{h^2} \right)^{3/2}$  – густина станів у зоні провідності. Звідки отримаємо:

$$n = N_C \cdot \exp \left( r + 2 - \frac{S}{k_0/e_0} \right). \quad (17)$$

Оскільки  $u = \sigma / n e_0$ , то

$$u = \frac{\sigma}{N_C e_0} \cdot \exp \left( \frac{S}{k_0/e_0} - (r + 2) \right). \quad (18)$$

Отже у цьому випадку, на відміну від виразу (4), крім  $m_{d,0}^*$  необхідно знати параметр розсіювання  $r$ . При відомій залежності  $\sigma_{\text{exp}}(T)$  його можна визначити за нахилом залежності  $\ln(\sigma) - \ln(T)$  (рис. 5). Сам параметр  $r$ , як зазначалось вище, може набувати трьох значень (0, 1, 2). Цим трьом значенням  $r$  відповідають три різні значення тангенса кута нахилу залежності  $\sigma(T)$  в логарифмічних координатах [8]. У випадку n-PbTe додатково необхідно врахувати залежність ефективної маси від температури  $m^* = f(T)$ . Тоді, при розсіюванні електронів на деформаційному потенціалі акустичних та оптичних фононів тангенс кута становитиме  $-2.5$ , а при розсіюванні на поляризаційному потенціалі оптичних фононів  $-1.1$ . Для більшості сполук  $A^4B^6$  вважають що розсіювання на деформаційному потенціалі акустичних фононів (DA) практично завжди переважає над іншими механізмами. Проте, як видно з рис. 5 нахил експериментальної залежності становить  $-2.1$ . На основі цього можна припустити що DA буде не єдиним визначальним механізмом розсіювання, як це і отримано в наближенні часу релаксації (рис. 2, б).

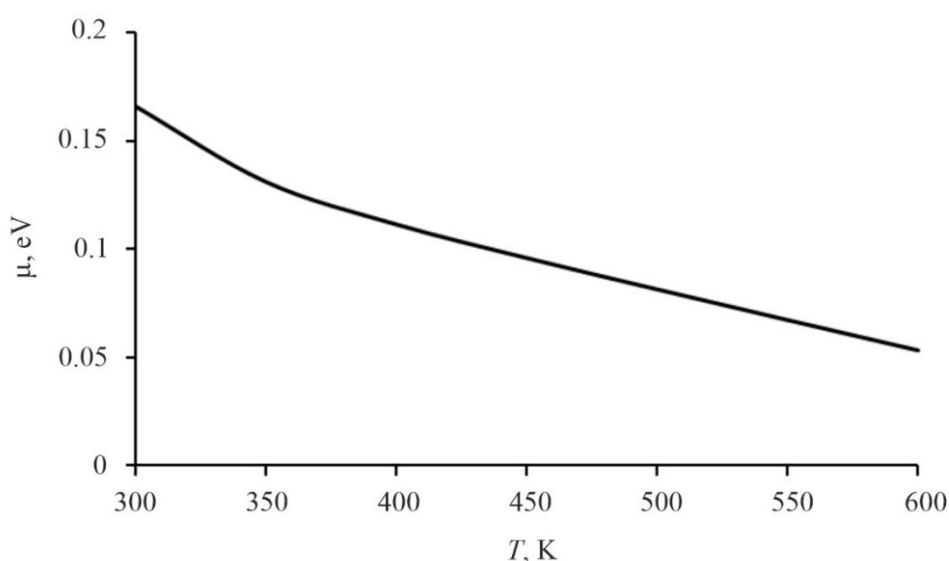


Рис. 4. Температурна залежність енергії Фермі електронів  $\mu$  розрахована в наближенні часу релаксації з одночасним врахуванням трьох механізмів розсіювання носіїв (DA+DO+PO)

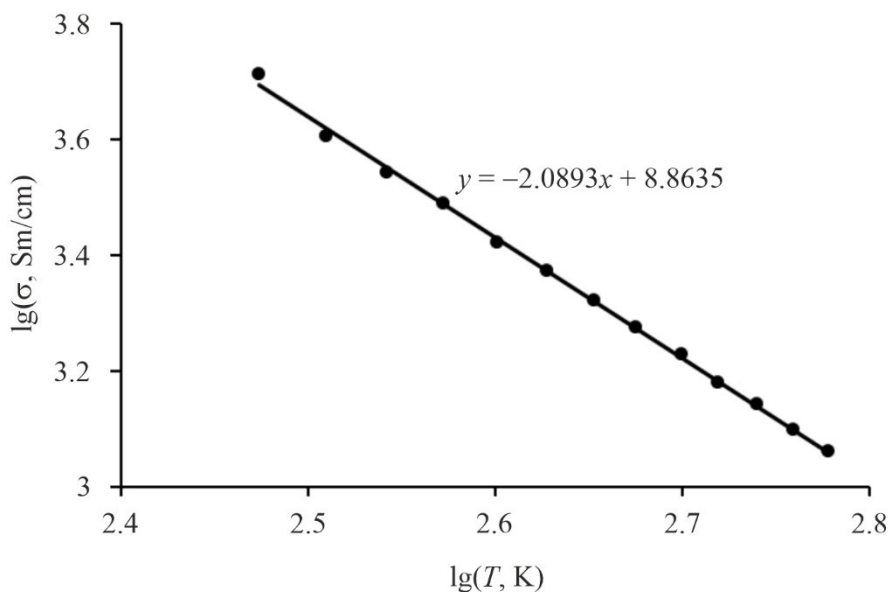


Рис. 5. Лінійна апроксимація залежності питомої електропровідності від температури в логарифмічних координатах для кристалів РbТе:І. Точки – експериментальні дані [9], пряма – апроксимаційна залежність

На рис. 6 наведено розрахунок  $u(T)$  з використанням отриманого виразу (18) для двох значень  $r$ : 0 та 1. Також використано  $m_{d,0}^* = 0.142 \cdot (T/120)^{0.4} \cdot m_0$  з [12] та  $m_{d,0}^* = 0.25 \cdot (T/300)^{0.5} \cdot m_0$  з роботи [9]. Бачимо, що у випадку  $r = 1$  та ефективної маси з роботи [12] при температурах до 450 К розрахована рухливість добре описує експериментальні дані. А от при вищих температурах, більш коректним є модель домінування розсіювання на оптичних фонах, для якого  $r = 1$ . Таким чином, для кількісно правильної інтерпретації експериментальних даних необхідно враховувати два механізми розсіювання одночасно.

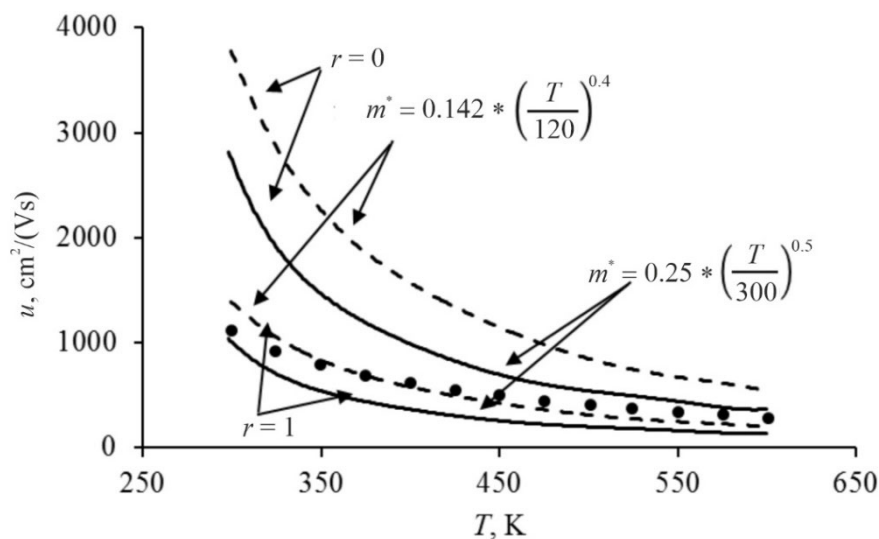


Рис. 6. Температурні залежності рухливості отримані з використанням виразу (18) та експериментальні значення з [9]

У роботі [9] авторами розрахована ефективна маса електронів провідності шляхом підгонки розрахункової кривої  $u(T)$  до експериментальної  $u_H(T)$ . При цьому авторами використано модель домінування розсіювання на деформаційному потенціалі акустичних фононів. На рис. 7. наведена отримана у [9] залежність у порівнянні з відомою для телуриду свинцю  $m_{d,0}^* = 0.142 \cdot (T/120)^{0.4} \cdot m_0$ . Також на рисунку точками представлено ефективну масу розраховану нами за описаною в огляді методикою. Тобто, спочатку було розраховано  $u_w$  за (4), а тоді  $m_{d,0}^*$ , згідно (5). Бачимо, що відмінність від інших двох залежностей є суттєвою.

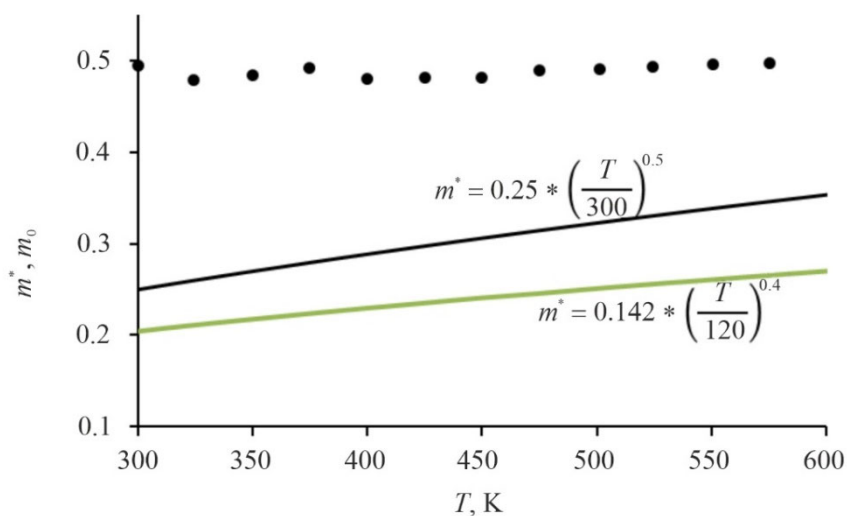


Рис. 7. Залежність ефективної маси густини станів від температури за даними [12]

$$(m_{d,0}^* = 0.142 \cdot (T/120)^{0.4} \cdot m_0), [9] (m_{d,0}^* = 0.25 \cdot (T/300)^{0.5} \cdot m_0)$$

та отримана на основі розрахунку за формулами (4) і (5) (точки)

## Висновки

Розрахунок рухливості носіїв заряду  $u$  як функції коефіцієнта Зеебека  $S$  та питомої електропровідності  $\sigma$  в наближенні Друде-Зомерфельда дає можливість отримувати задовільні числові значення в області температур  $T > 450$  К. Проте, при кімнатних температурах відмінність між розрахованими таким способом значення  $u$  та експериментальними становить  $\approx 300$  %. Використання для розрахунку  $u$  виразу отриманого в наближенні невиродженого напівпровідника забезпечує можливість отримувати числові значення, що, при коректному виборі параметра розсіювання  $r$ , значно краще узгоджуються з експериментом.

Використання методу розрахунку ефективної маси густини станів через розрахунок рухливості  $u_w$  для РbТе:І приводить до значень, що суттєво відрізняються від відомих літературних даних.

## Інформація про авторів

Горічок І.В. – Професор кафедри фізики та хімії твердого тіла.

Галушак М.О. – Професор кафедри фізико-математичних наук.

Кулик О.Г. – Спеціаліст 1 категорії кафедри аспірантури та докторантури.

Потятинник Т.С. – Студент.

## Література

1. Joffe A.F., Stil'bans L.S. (1959) Physical problems of thermoelectricity. *Reports Prog. Phys.* 22 (1), 167–203. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/22/1/306>.
2. Gelbstein Y., Davidow J. (2014). Highly efficient functional  $\text{Ge}_x\text{Pb}_{1-x}\text{Te}$  based thermoelectric alloys. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 16, 20120-20126. DOI: 10.1039/C4CP02399D.
3. Khshanovska O., Parashchuk T., Horichok I. (2023). Estimating the upper limit of the thermoelectric figure of merit in *n*- and *p*-type PbTe. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 160, 107428 (13p). <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2023.107428>.
4. Ni J.E. (2012). Powder processing and mechanical properties of  $\text{Ag}_{0.86}\text{Pb}_{19}\text{SbTe}_{20}$  (LAST) and  $\text{Pb}_{0.95}\text{Sn}_{0.05}\text{Te}$  - PbS 8% (PbTe-PbS) thermoelectric materials. *A dissertation doctorate of philosophy Materials Science Engineering*. Michigan State University. P.300.
5. Snyder G.J., Snyder A.H., Wood M., Gurunathan R., Snyder B.H., Niu Ch. (2020). Weighted mobility. *Adv. Mater.*, 32, 2001537. DOI: 10.1002/adma.202001537.
6. He W., Qin B., Zhao L.-D. (2020). Predicting the potential performance in *p*-type SnS crystals via utilizing the weighted mobility and quality factor. *Chin. Phys. Lett.*, 37(8), 087104. DOI: 10.1088/0256-307X/37/8/087104.
7. Qin B., He W., Zhao L.-D. (2020). Estimation of the potential performance in *p*-type SnSe crystals through evaluating weighted mobility and effective mass. *Journal of Materiomics*, 6, 671e676. <https://doi.org/10.1016/j.jmat.2020.06.003>
8. Askerov B.M. (1994). *Electron transport phenomena in semiconductors*. <https://doi.org/10.1142/1926>.
9. Pei Y., LaLonde A. D., Wang, H. and Snyder G.J. (2012). Low effective mass leading to high thermoelectric performance. *Energy Environ. Sci.*, 5, 7963. DOI: 10.1039/c2ee21536e.
10. Zayachuk D.M. (1997). The dominant mechanisms of charge-carrier scattering in lead telluride. *Semiconductors*, 31(2), 173 – 176. <https://doi.org/10.1134/1.1187322> .
11. Knura R., Parashchuk T., Yoshiasa A., Wojciechowski K.T. (2021). Origins of low lattice thermal conductivity of  $\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$  alloys for thermoelectric applications. *Dalt. Trans.*, 50 (12), 4323–4334. <https://doi.org/10.1039/d0dt04206d>.
12. Chesnokova D.B., Kamchatka M.I. (2001). Modeling of defect formation in lead chalcogenides and their properties. *Inorg. Mater.* 37(2), 111–118. <https://doi.org/10.1023/A:1004189006526>.
13. Sealy B.J., Crocker A.J. (1973). The P-T-x phase diagram of PbTe and PbSe. *Journal of Materials Science*, 8, 1737–1743.

Submitted: 07.05.2025

**I.V. Horichok**<sup>1</sup> (<https://orcid.org/0000-0001-9748-3288>),  
**M.O Halushchak**<sup>2</sup> (<https://orcid.org/0009-0000-3693-4903>),  
**O.H. Kulyk**<sup>1</sup> (<https://orcid.org/0009-0001-2499-6813>)  
**T.S. Potiatynnyk**<sup>1</sup> (<https://orcid.org/0009-0004-7067-7639>)

<sup>1</sup>Vasyl Stefanyk Precarpathian National University,  
Ivano-Frankivsk, 76018, Ukraine;

<sup>2</sup>Ivano-Frankivsk National Technical University  
of Oil and Gas, Ivano-Frankivsk, 76000, Ukraine

## **Calculation of Charge Carrier Mobility in PbTe Based on Empirical Thermoelectric Parameters**

*The paper presents a comparative analysis of the charge carrier mobility in PbTe calculated using expressions derived from the Drude-Sommerfeld model and the model of a nondegenerate semiconductor with parabolic zones. The mobilities were calculated as functions of the experimentally determined Seebeck coefficient and specific electrical conductivity. The results are compared with the corresponding data obtained in the relaxation time approximation.*

**Key words:** mobility, Seebeck coefficient, specific electrical conductivity, effective mass.

Submitted: 07.05.2025