
**НАНОМАТЕРИАЛЫ ФУНКЦИОНАЛЬНОГО
И КОНСТРУКЦИОННОГО НАЗНАЧЕНИЯ**

УДК 537.322

**ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА CoSi
И ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ $Co_{1-x}M_xSi$ ($M = Fe, Ni$)**

© 2021 г. А. С. Антонов^{1,*}, А. Ю. Овчинников¹, Д. А. Пшенай-Северин¹,
С. В. Новиков¹, П. П. Константинов¹, А. Т. Бурков¹

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: antonov.arts@gmail.com

Поступила в редакцию 25.11.2020 г.

После доработки 25.11.2020 г.

Принята к публикации 16.12.2020 г.

Исследованы термоэлектрические и гальваномагнитные свойства образцов моносилцида кобальта и его твердых растворов с моносилцидами железа и никеля. Недавние расчеты зонной структуры CoSi, подтвержденные ARPES-измерениями, выявили ряд отличий электронной структуры от двузонной модели, обычно используемой для полуметаллических соединений. Обнаруженные особенности электронного спектра CoSi приводят к необходимости модификации ранее использованных моделей для описания транспортных свойств материала. Получены температурные зависимости кинетических коэффициентов (термоэдс, коэффициента Холла и удельного сопротивления) в диапазоне 100–800 К для CoSi и его твердых растворов с FeSi и NiSi. Проведены *ab initio*-расчеты зонной структуры и кинетических коэффициентов с использованием программного пакета Quantum Espresso. Результаты исследования показали, что основные особенности термоэлектрических и гальваномагнитных свойств CoSi и его твердых растворов с FeSi и NiSi при высоких температурах могут быть качественно описаны с использованием рассчитанной зонной структуры с учетом энергетической зависимости времени релаксации.

DOI: 10.1134/S199272232103002X

ВВЕДЕНИЕ

Начало изучения термоэлектрических и гальваномагнитных свойств моносилцида кобальта (CoSi) и его твердых растворов с FeSi и NiSi было положено в [1, 2]. Интерес к данным материалам связан в первую очередь с высокими для полуметаллов значениями коэффициента термоэдс (–80 мкВ/К), а также высокой механической прочностью и устойчивостью материалов при высоких температурах. Кроме того, эти соединения не содержат дорогих или токсичных компонентов. CoSi имеет кубическую кристаллическую структуру (тип B20). Его пр. гр. $P2_13-T^4$ (№ 198) характеризуется отсутствием центра инверсии. Элементарная ячейка с параметром $a = 4.449 \text{ \AA}$ содержит по четыре атома кремния и кобальта [2, 3].

Концентрация электронов в CoSi может быть изменена путем создания его твердых растворов с NiSi или FeSi. FeSi и CoSi формируют непрерывную серию твердых растворов, а изоструктурные твердые растворы $Co_{1-x}Ni_xSi$ образуются при содержании Ni до 10 ат. %. Концентрация электронов увеличивается при замене

атомов Co атомами Ni и уменьшается при замене атомов Co на Fe [1].

Без знания энергетического спектра электронов в конкретном материале невозможно модифицировать его параметры для повышения термоэлектрической эффективности. В предыдущих исследованиях CoSi [1, 4] для описания его термоэлектрических и гальваномагнитных свойств использовалась двузонная параболическая модель спектра, учитывающая вклады электронов и дырок, а их параметры определялись из экспериментальных данных по температурным и концентрационным зависимостям кинетических коэффициентов. Расчеты зонной структуры CoSi из первых принципов, проведенные в [5, 6], и недавние эксперименты по фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) [7] показали наличие особенностей, не учитываемых в простой модели электронного спектра полуметаллов. Помимо этого, исследование показало, что электронная структура CoSi обладает нетривиальными топологическими свойствами. Описанные особенности требуют пересмотра подходов к описанию термоэлектрических свойств данных материалов.

Свойства сплавов на основе CoSi можно описать, используя модель “жестких зон”. Согласно этой модели твердые растворы $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Si}$ и $\text{Co}_{1-y}\text{Fe}_y\text{Si}$ имеют схожие зонные структуры, а изменение состава отражается только на положении уровня Ферми.

В настоящей работе получены температурные и концентрационные зависимости термоэдс S , удельного сопротивления ρ и коэффициента Холла R . Проведены расчеты зонной структуры моносилцида кобальта из первых принципов с использованием метода функционала электронной плотности. На основе полученных результатов расчета проведен анализ указанных выше зависимостей кинетических коэффициентов.

ТЕХНИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Для исследования были получены образец CoSi и ряд образцов его твердых растворов с замещением кобальта на никель и железо ($\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Si}$, $x \leq 0.1$, и $\text{Co}_{1-y}\text{Fe}_y\text{Si}$, $y \leq 0.3$).

Исследуемые материалы синтезировали методом прямого сплавления в индукционной печи. Образцы для исследований были получены из соединений, синтезированных направленной кристаллизацией по методу Бриджмена. Анализ полученных структур методами порошковой рентгенографии и просвечивающей электронной микроскопии показал, что все образцы являются однофазными соединениями с кубической кристаллической структурой типа B20. Образцы представляют собой поликристаллы с крупными кристаллитами размером не менее нескольких десятков микрометров.

Измерения термоэдс проводили дифференциальным методом с постоянным перепадом температуры (5–15 К), а измерения электропроводности – четырехзондовым методом. Установка, используемая для измерения данных кинетических коэффициентов в исследуемом температурном диапазоне, подробно описана в [8, 9].

Для измерения коэффициента Холла использовали двухчастотный метод измерения совместно с методом автоматической компенсации. В качестве источника компенсирующего напряжения использовали напряжение от умножителя, перемножающего сигналы, пропорциональные току через образец и магнитному полю. Использование этого метода устраняет необходимость в стабилизации тока и магнитного поля в образце, что облегчает автоматизацию процедуры измерения. Максимальная сила тока, протекающего через образец, достигает 1 А, частота – 72 Гц, амплитуда магнитного поля – 0.15 Тл, частота – 50 Гц. Измерения холловского напряжения проводили на разностной частоте 22 Гц. Чувствительность системы составляла 5×10^{-10} В. Одновременно с постоянной Холла измеряли электрическое сопро-

тивление образца. Подробное описание измерительной установки содержится в [10].

ОПИСАНИЕ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ

Ранее в [11, 12] были проведены расчеты кинетических коэффициентов с использованием двух теоретических моделей описания энергетического спектра носителей заряда в материале.

Как было сказано выше, первая модель основывается на простом описании зонной структуры в виде двух зон (электронной и дырочной) с изотропным параболическим законом дисперсии и небольшим энергетическим перекрытием зон. В [1, 4] проводились исследования CoSi и его твердых растворов с использованием данной модели и с учетом рассеяния носителей тока на акустических фононах и точечных дефектах. Помимо целого ряда допущений (независимость от температуры соотношения подвижностей и разности концентраций электронов и дырок; равенство нулю параметра рассеяния r , который связывает длину свободного пробега с энергией ($l \sim E'$); линейная зависимость от температуры величины энергии перекрытия электронной и дырочной зон) в рамках этой модели термоэдс, коэффициент Холла и удельное сопротивление, кроме температуры, определяются еще шестью параметрами, которые от температуры не зависят: эффективные массы (m_{dn}^* , m_{dp}^*), разность концентраций (ΔN) и соотношение подвижностей носителей заряда (b); величина энергетического зазора при нулевой температуре (ΔE_0) и ее температурный коэффициент (β) [4]. В рамках данной модели в [11, 12] проведен анализ экспериментальных зависимостей путем варьирования этих шести параметров, что позволяет на основе температурных зависимостей термоэдс S и коэффициента Холла R провести согласование модели с экспериментальными данными.

Двухзонная модель позволяет качественно описать поведение кинетических коэффициентов с изменением температуры. Однако большое число подгоночных параметров приводит к неоднозначности их определения по экспериментальным температурным зависимостям. Кроме того, простая двухзонная параболическая модель спектра заметно отличается от результатов расчетов в данной работе и в работах [5, 6], а также от результатов ARPES-измерений [7]. Поэтому для анализа транспортных свойств материалов возникает необходимость использования более точного описания спектра с использованием расчетов из первых принципов.

Расчет энергетического спектра носителей заряда в CoSi был проведен с помощью программного пакета Quantum Espresso [13]. Расчет проводили в рамках теории функционала электронной

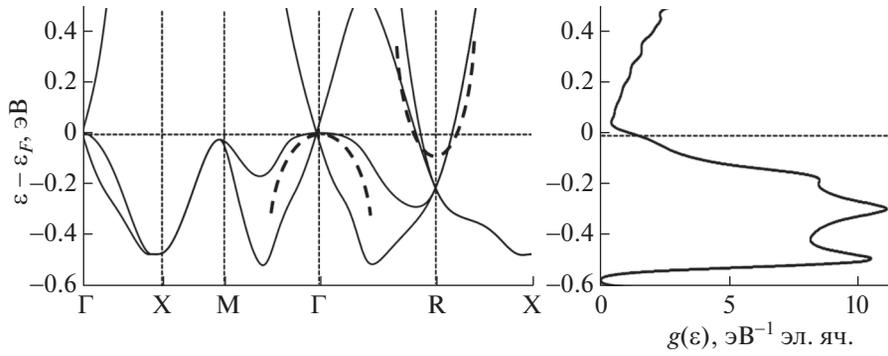


Рис. 1. Фрагмент рассчитанной электронной зонной структуры и плотности состояний (DOS) в CoSi вблизи уровня Ферми.

плотности (density functional theory – DFT) с использованием базиса плоских волн и псевдопотенциалов. При проведении расчета для функционала электронной плотности использовали градиентное приближение без учета спин-орбитального взаимодействия при равновесных параметрах решетки ($a = 4.4348 \text{ \AA}$, $x_{\text{Co}} = 0.144$, $x_{\text{Si}} = 0.843$). Размер базиса плоских волн определялся граничной энергией 120Ry. Для интегрирования по зоне Бриллюэна использовали сетку Монхорста–Пака $6 \times 6 \times 6$ с гауссовым сглаживанием с параметром сглаживания 0.026 эВ. Рассчитанный электронный спектр и плотность состояний находятся в хорошем согласии с полученными и опубликованными ранее [5, 6] результатами расчетов. На рис. 1 представлено сравнение рассчитанной зонной структуры (сплошные линии) с простой полуметаллической моделью в виде двух параболических перекрывающихся зон (пунктирные линии). Кроме того, на рис. 1 представлен результат расчета плотности состояний из первых принципов. По рис. 1 видно, что рассчитанная электронная структура является более сложной. Отличительной чертой данного спектра является наличие точек пересечения зон вблизи уровня Ферми. Кроме того, вблизи этих точек пересечения спектр является практически линейным. Упомянутые особенности спектра оказывают влияние на транспортные свойства материала, которое необходимо учитывать.

Вычисление кинетических коэффициентов проводили с использованием достаточно плотной сетки в зоне Бриллюэна ($64 \times 64 \times 64$), полученной с использованием ванье-интерполяции зонной структуры [14]. Изменение состава в данной модели учитывали в виде сдвига химического потенциала μ в приближении “жестких зон”. Для расчета кинетических коэффициентов термоэдс S и электропроводности σ была разработана программа на основе следующих выражений [15]:

$$[\sigma]_{ij}(\mu, T) = e^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \left(\frac{-df_0(\epsilon, \mu, T)}{d\epsilon} \right) \Xi_{i,j}(\epsilon), \quad (1)$$

$$[\sigma S]_{ij}(\mu, T) = \frac{e}{T} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \left(\frac{-df_0(\epsilon, \mu, T)}{d\epsilon} \right) (\epsilon - \mu) \Xi_{i,j}(\epsilon), \quad (2)$$

где $f_0(\epsilon, \mu, T)$ – функция распределения Ферми, $\Xi_{ij}(\epsilon)$ – тензор транспортной функции распределения:

$$\Xi_{ij}(\epsilon) = \frac{1}{V} \Xi_{n,k} v_i(n, k) v_j(n, k) \tau(n, k) \delta(\epsilon - \epsilon_{n,k}). \quad (3)$$

Выражения для расчета коэффициента Холла в кубическом кристалле могут быть получены из общих формул [16]. Для вывода следующих соотношений использовали приближение времени релаксации, зависящего от энергии:

$$R = \frac{\sigma_{123}}{\sigma_{11}^2}, \quad (4)$$

где

$$\sigma_{123} = \frac{-e^3}{c} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{-\partial f_0(\epsilon, \mu, T)}{\partial \epsilon} \right) \Xi_R(\epsilon) d\epsilon, \quad (5)$$

а входящая в него функция распределения

$$\Xi_R(\epsilon) = \frac{2}{V} \sum_{n,k} (v_2^2(n, k) m_{11}^{-1}(n, k) - v_1(n, k) v_2(n, k) m_{12}^{-1}(n, k)) \tau^2(\epsilon) \delta(\epsilon - \epsilon_{n,k}), \quad (6)$$

где $m_{ij}^{-1}(n, k) = \hbar^{-2} \partial^2 \epsilon_{n,k} / \partial k_i \partial k_j$ – компоненты тензора обратных эффективных масс.

В рассматриваемой модели для учета времени релаксации были использованы два приближения: приближение постоянного времени релаксации (constant relaxation time approximation – CRTA) и приближение времени релаксации, зависящего от энергии: $\tau^{-1}(\epsilon) \sim (T/T_0 + w)g(\epsilon)$, призванное учесть основные черты рассеяния электронов на фононах и точечных дефектах. В данном выражении постоянная w определяет относительную интенсивность рассеяния на де-

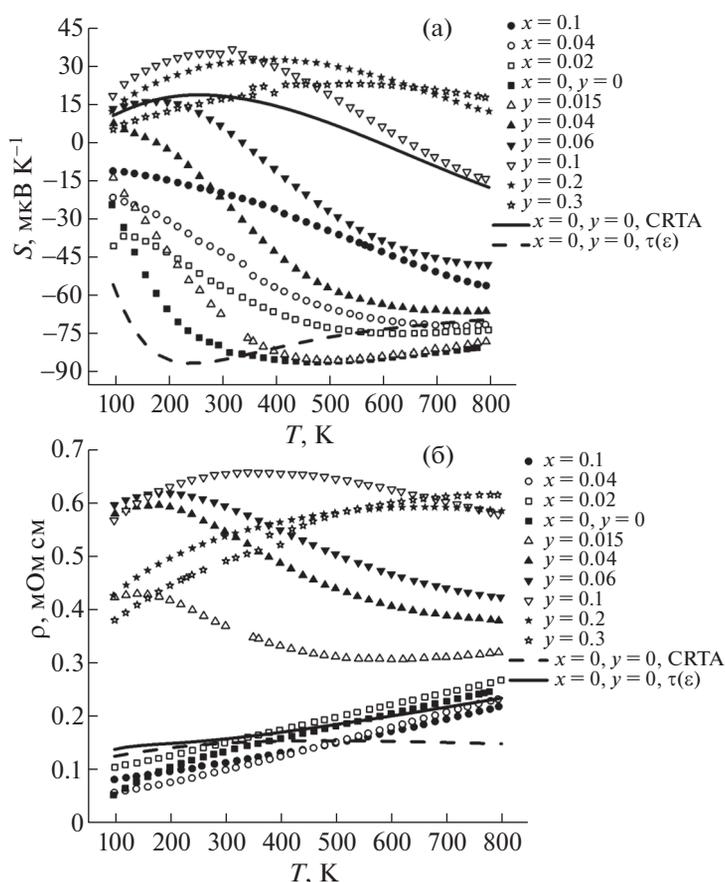


Рис. 2. Температурные зависимости термоэдс S (а) и удельного сопротивления ρ (б) для $\text{Co}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Si}$ и $\text{Co}_{1-y}\text{Fe}_y\text{Si}$ и сравнение теоретических и экспериментальных зависимостей для CoSi .

фектах, а $g(\epsilon)$ — плотность состояний. При этом расчет с использованием зависимости $\tau(\epsilon)$ потребовал разработки собственной программы для расчета кинетических коэффициентов. В обоих вариантах приближения времени релаксации расчеты термоэдс и коэффициента Холла не содержат подгоночных параметров. В приближении CRTA при вычислении электропроводности возникает один подгоночный параметр — абсолютная величина электропроводности при заданной температуре. Во втором варианте при вычислении проводимости возникают два подгоночных параметра: абсолютное значение электропроводности и относительная интенсивность рассеяния на дефектах.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В ходе работы измерены температурные зависимости термоэдс S , коэффициента Холла R и удельного сопротивления ρ в диапазоне 100–800 К. Зависимости $S(T)$ и $\rho(T)$ для CoSi и твердых растворов с замещением Co на Fe или Ni представлены на рис. 2а и 2б соответственно. За-

висимость $R(T)$ для образцов с добавлением Ni представлена на рис. 3а, а для твердых растворов с содержанием Fe — на рис. 3б.

В рамках простой классической теории описания металлических соединений ожидается, что исследуемые кинетические коэффициенты должны возрастать почти линейно с ростом температуры. Температурные зависимости термоэдс для всех соединений, а также зависимости удельного сопротивления для твердых растворов с FeSi являются нелинейными и сложными для анализа.

В однозонной модели спектра знак термоэдс совпадает со знаком заряда носителей тока, и ее абсолютное значение увеличивается с ростом температуры. В CoSi термоэдс отрицательна. Это свидетельствует о преобладании вклада электронов в проводимость. Температурные зависимости термоэдс в рассматриваемых материалах немонотонны, что вызвано вкладом в перенос носителей другого знака (дырок). В чистом CoSi этот вклад становится заметным при температуре выше комнатной. С ростом температуры вклад дырок возрастает, вследствие чего происходит замедление роста термоэдс по абсолютной величине, а затем

и ее снижение. При замещении Co на Ni происходит увеличение разности концентраций электронов и дырок. Также возрастает степень вырождения электронов, и, как следствие, абсолютная величина термоэдс уменьшается, а влияние дырочного вклада оказывается менее значительным и проявляется при более высоких температурах. Замещение Co на Fe, наоборот, приводит к возрастанию вклада дырочной составляющей. С ростом содержания Fe кривые температурных зависимостей термоэдс смещаются в область положительных значений, а при достижении содержания Fe 4 ат. % в исследуемом температурном диапазоне возникает точка перемены знака термоэдс.

Удельное сопротивление CoSi и его твердых растворов с NiSi увеличивается с ростом температуры. Это связано с уменьшением подвижности носителей тока из-за увеличения интенсивности акустического рассеяния. В то же время сопротивление твердых растворов с FeSi имеет необычную зависимость от температуры, т.е. уменьшается с ростом температуры даже при малой концентрации Fe. Это вызвано двумя факторами. Одним из них является усиление влияния рассеяния на точечных дефектах замещения (сплавное рассеяние). Этот эффект проявляется сильнее при добавлении Fe, чем при добавлении Ni. Рассеяние на точечных дефектах в отличие от рассеяния на фонах не имеет явной зависимости от температуры. Это приводит к ослаблению температурной зависимости сопротивления по сравнению с чистым CoSi. Кроме того, при добавлении Fe происходит рост относительного вклада дырок, обладающих меньшей подвижностью в сравнении с электронами, в перенос заряда. Поэтому при повышении температуры возникает отклонение температурной зависимости сопротивления от классической картины, что связано с перераспределением вкладов электронов и дырок в процессы переноса, а именно с увеличением температуры увеличивается вклад электронов с более высокой подвижностью, что приводит к росту проводимости.

Как видно из графика на рис. 3а, с ростом концентрации атомов Ni коэффициент Холла уменьшается по абсолютному значению, что говорит о росте концентрации носителей. Так как во всем представленном интервале температур коэффициент Холла отрицателен, можно сделать вывод о том, что основными носителями заряда в данных образцах являются электроны. С ростом температуры коэффициент Холла убывает, что говорит о металлической природе $Co_{1-x}Ni_xSi$.

Обсудим коэффициент Холла твердых растворов $Co_{1-x}Fe_xSi$. Коэффициент Холла, как и в случае с замещением атомов Co атомами Ni, уменьшается по абсолютному значению с ростом концентрации примеси. Все кривые, кроме коэффициента Холла образца с содержанием 1 ат. %, имеют ми-

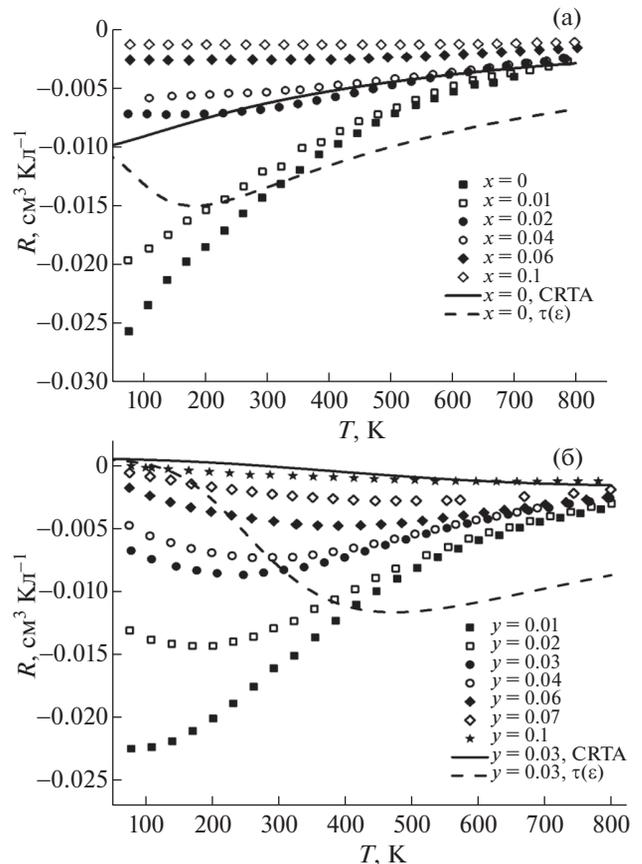


Рис. 3. Температурные зависимости коэффициента Холла $Co_{1-x}Ni_xSi$ (а) и $Co_{1-y}Fe_ySi$ (б) и сравнение теоретических и экспериментальных зависимостей для $Co_{0.97}Fe_{0.03}Si$.

нимум, причем температура, при которой он наблюдается, увеличивается с ростом концентрации Fe. Экспериментальная зависимость для образца $Co_{0.99}Fe_{0.01}Si$ также повторяет форму всех остальных кривых, но ярко выраженного минимума на ней не наблюдается.

В работе проанализирована возможность интерпретации полученных температурных и концентрационных зависимостей с использованием электронного спектра, рассчитанного из первых принципов. На рис. 2 приведены температурные зависимости термоэдс и удельного сопротивления для чистого CoSi, полученные путем теоретического расчета с использованием расчетного спектра, в сравнении с экспериментальными данными, а на рис. 3а – рассчитанные температурные зависимости коэффициента Холла. На рис. 3б показаны теоретические зависимости $R(T)$ для образца с содержанием 3 ат. % Fe. На кривой, построенной в приближении времени релаксации, зависящего от энергии, отражены характерные особенности, описанные выше, которые невозможно получить в рамках других моделей.

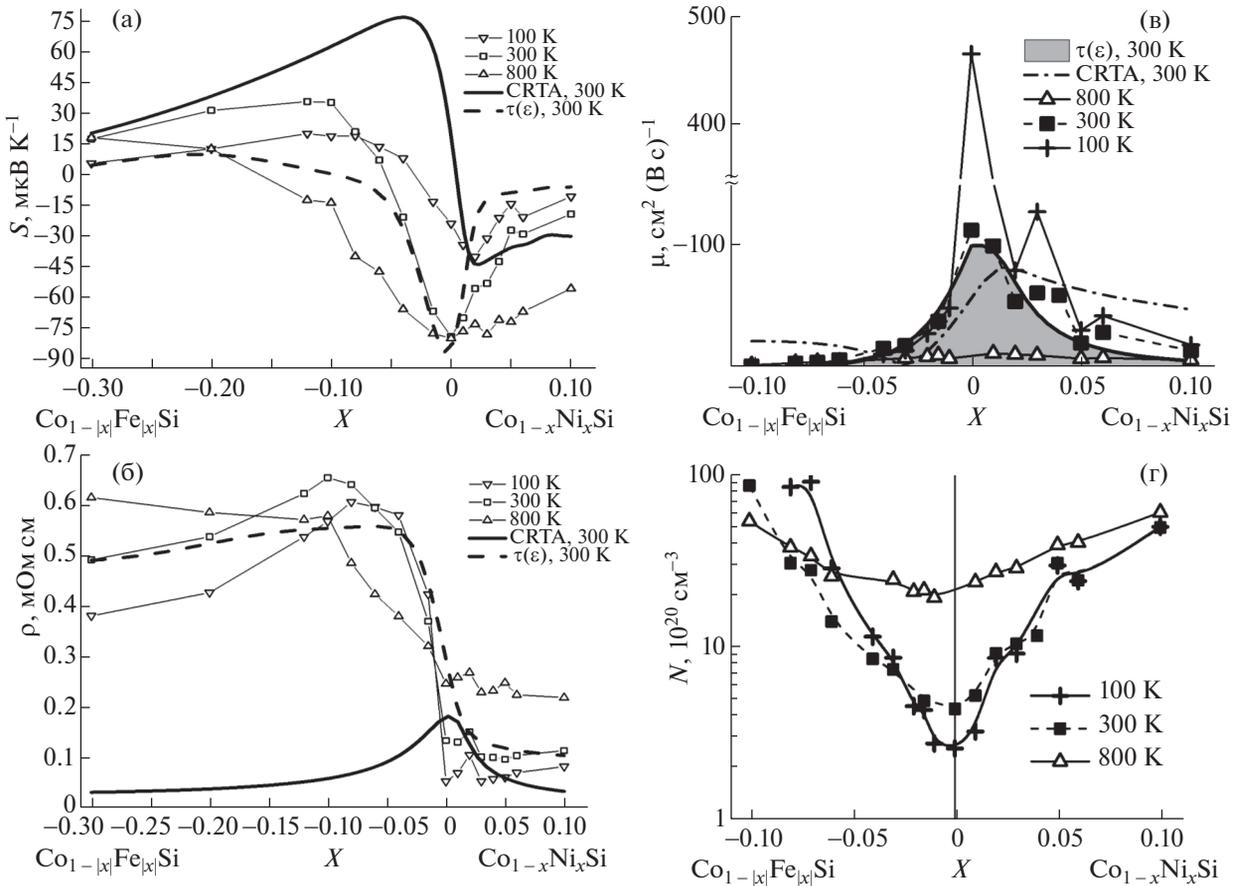


Рис. 4. Концентрационные зависимости термоэдс S (а), удельного сопротивления ρ (б), холловской подвижности μ (в) и эффективной концентрации N (г) при $T = 100, 300$ и 800 К и сравнение теоретических и экспериментальных зависимостей при $T = 300$ К.

На рис. 4а и 4б приведены зависимости термоэдс и удельного сопротивления от состава при температурах 100, 300 и 800 К, а также сравнение теоретических и экспериментальных данных при комнатной температуре. Из рисунков видно, что результаты расчетов, полученные с использованием приближения постоянного времени релаксации, не позволяют описать экспериментальные температурные и концентрационные зависимости: в этом приближении не удается получить не только корректные значения и характер зависимости, но и верный знак коэффициента термоэдс. Расчеты с использованием приближения CRTA прогнозируют монотонное снижение удельного сопротивления при добавлении Ni и Fe, однако при добавлении Fe сопротивление, напротив, увеличивается. Рассчитанные значения коэффициента Холла твердых растворов $\text{Co}_{1-x}\text{Fe}_x\text{Si}$ ниже (по абсолютному значению), чем экспериментальные. В то же время учет энергетической зависимости времени релаксации $\tau(\epsilon)$ позволяет получить качественное согласование теоретических и экспериментальных зависимостей.

Полученное согласие с экспериментом при использовании для расчета времени релаксации, обратно пропорционального полной плотности состояний, говорит о том, что в данных материалах заметный вклад в рассеяние вносят межзонные переходы. Плотность состояний сильно возрастает при уменьшении энергии в области $\epsilon < \epsilon_F$, а ее рост при $\epsilon > \epsilon_F$ оказывается более слабым (рис. 1). Это приводит к тому, что по сравнению с приближением CRTA вклад в термоэдс электронов вблизи R точки зоны Бриллюэна возрастает, а вклад дырок вблизи точек Γ и M снижается. В результате термоэдс оказывается отрицательной в согласии с экспериментом (рис. 4а). На рис. 4в приведены концентрационные зависимости холловской подвижности. Видно, что при использовании зависимости $\tau(\epsilon)$ расчетные кривые лучше согласуются с экспериментальными, чем полученные в приближении постоянного времени релаксации. Эффективная концентрация носителей заряда, рассчитанная с использованием коэффициента Холла, показана на рис. 4г.

Использование данного приближения времени релаксации позволяет объяснить и асимметрию зависимости удельного сопротивления от состава (рис. 4б). В твердых растворах CoSi с Fe сопротивление оказывается выше, чем при добавлении Ni, и увеличивается с ростом содержания Fe. При использовании постоянного времени релаксации (рис. 4б, сплошная кривая) сопротивление уменьшается как при добавлении Fe, так и при добавлении Ni, что связано с увеличением концентрации дырок и электронов соответственно. На рис. 4в приведены концентрационные зависимости холловской подвижности. Видно, что при использовании $\tau(\epsilon)$ расчетные кривые лучше согласуются с экспериментальными, чем полученные в приближении постоянного времени релаксации. Эффективная концентрация носителей заряда, рассчитанная с использованием коэффициента Холла, показана на рис. 4г. С учетом энергетической зависимости времени релаксации оказывается, что в твердых растворах CoSi с Fe химический потенциал смещается в область более низких энергий и более высокой плотности состояний, в которой вероятность рассеяния носителей возрастает, а подвижность снижается.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Существенное отличие простой двузонной модели электронного спектра от *ab initio*-расчетов и данных ARPES-измерений, а также неоднозначность определения ее параметров при описании экспериментальных данных по кинетическим коэффициентам приводят к необходимости использования рассчитанного электронного спектра и его особенностей для описания транспортных свойств материала.

Вычисление термоэдс, электросопротивления и коэффициента Холла с использованием электронного спектра, рассчитанного из первых принципов в приближении постоянного времени релаксации, не позволяет описать характер зависимости кинетических коэффициентов от температуры и состава. В то же время учет энергетической зависимости времени релаксации позволяет описать основные особенности кинетических коэффициентов. Отметим, что в расчете электропроводности с использованием реального энергетического спектра возникают только два подгоночных параметра — абсолютная величина электропроводности при комнатной температуре и относительная доля примесного рассеяния. В свою очередь расчеты термоэдс и коэффициента Холла подгоночных параметров не содержат. Кроме того, учет зависимости $\tau(\epsilon)$ позволяет объяснить асимметрию зависимости удельного сопротивления от состава твердых растворов.

В дальнейшем планируется более точно учесть особенности энергетической зависимости време-

ни релаксации и провести модификацию электронного спектра в твердых растворах, чтобы улучшить согласование расчетных зависимостей кинетических коэффициентов с экспериментальными.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Asanabe S., Shinoda D., Sasaki Y.* // Phys. Rev. A. 1964. V. 134. № 3. P. 774. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.134.A774>
2. *Fedorov M.I., Zaitsev V.K.* // CRC Handbook of Thermoelectrics / Ed. Rowe D.M. CRC Press, 1995. P. 321.
3. *Гельд П.В., Сидоренко Ф.А.* // Силициды переходных металлов четвертого периода. М.: Металлургия, 1971. 582 с.
4. *Zaitsev V.K., Stilbans L.S., Tarasov V.I. et al.* // Proc. of the II Int. Conf. on Thermoelectrical Energy Conversion. USA. Arlington. 1978. P. 23.
5. *Sakai A., Ishii F., Onose Y.* // J. Phys. Soc. Jpn. 2007. V. 76. № 9. P. 093601. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.76.093601>
6. *Pshenay-Severin D.A., Ivanov Yu.V., Burkov A.A., Burkov A.T.* // J. Phys.: Condens. Matter. 2018. V. 30. № 135501. P. 12. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aab0ba>
7. *Takane D., Wang Z., Souma S. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 122. P. 076402. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.076402>
8. *Бурков А.Т., Федотов А.И., Касьянов А.А. и др.* Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2015. Т. 15. № 2. С. 173. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2015-15-2-173-195>
9. *Burkov A.T., Heinrich A., Konstantinov P.P. et al.* // Meas. Sci. Technol. 2001. V. 12. P. 264. <https://doi.org/10.1088/0957-0233/12/3/304>
10. *Vedernikov M., Konstantinov P., Burkov A.* Proceedings of the Eighth International Conference on Thermoelectric Energy Conversion, Nancy, France. 1989. P. 45.
11. *Антонов А.С., Новиков С.В., Пшенай-Северин Д.А., Бурков А.Т.* // Физика и техника полупроводников. 2019. Т. 53. № 5. С. 674. <https://doi.org/10.21883/FTP.2019.05.47561.19>
12. *Овчинников А.Ю., Константинов П.П., Пшенай-Северин Д.А., Бурков А.Т.* // Физика и техника полупроводников. 2019. Т. 53. № 6. С. 746. <https://doi.org/10.21883/FTP.2019.06.47720.29>
13. *Giannozzi P., Andreussi O., Brumme T. et al.* // J. Phys.: Condens. Matter. 2017. V. 29. № 465901. P. 67. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa8f79>
14. *Mostofi A.A., Yates J.R., Pizzi G. et al.* // Comput. Phys. Commun. 2014. V. 185. № 8. P. 2309. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2014.05.003>
15. *Pizzi G., Volja D., Kozinsky B. et al.* // Comput. Phys. Commun. 2014. V. 185. P. 422. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2013.09.015>
16. *Аскеров Б.М.* Электронные явления переноса в полупроводниках. М.: Наука, 1985. 320 с.