

О.І. Бодак<sup>1</sup>, В.А. Ромака<sup>2</sup>, Ю.В. Стадник<sup>1</sup>, М.Г. Шеляпіна<sup>3</sup>,  
Л.П. Ромака<sup>1</sup>, В.Ф. Чекурін<sup>2</sup>, Ю.К. Гореленко<sup>1</sup>

## Роль домішкової зони в провідності твердого розчину $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$ . Донорні домішки

<sup>1</sup>Львівський національний університет імені І. Франка, вул. Кирила і Мефодія, 6, Львів, 79005, Україна, тел. (032)-296-45-03; E-mail: [stadnyk\\_yuriy@franko.lviv.ua](mailto:stadnyk_yuriy@franko.lviv.ua)

<sup>2</sup>Інститут прикладних проблем математики та механіки імені Я. Підстригача НАН України, вул. Наукова, 3-б, Львів, 79053, Україна, тел. (032)-65-19-23; E-mail: [romaka@lviv.net](mailto:romaka@lviv.net)

<sup>3</sup>Інститут фізики імені І.В. Фока Санкт-Петербурзького національного університету, вул. Ульянівська, 1, Петродворець, м. Санкт-Петербург, 198504, Росія; E-mail: [marina@ms4828.spb.edu](mailto:marina@ms4828.spb.edu)

Визначено роль домішкової донорної зони в провідності легованого та компенсованого напівпровідника  $\text{TiCoSb}$ . Здійснено розрахунок електронної структури напівпровідникового твердого розчину  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$ . Запропоновано модель перебудови домішкової зони напівпровідника  $\text{TiCoSb}$  при легуванні донорними домішками. Виявлено перехід провідності від активаційної до металічної при зміні складу твердого розчину  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$ , який ми пов'язуємо з переходом Андерсона.

**Ключові слова:** напівпровідник, домішкова зона, донор, електропровідність, коефіцієнт Зеебека

*Стаття постуила до редакції 14.12.04; прийнята до друку 23.05.05.*

### I. Вступ

В представленій роботі, продовжуючи вивчення впливу домішок на кінетичні характеристики інтерметалічних сполук структурного типу  $\text{MgAgAs}$ , зокрема напівпровідників  $\text{MCoSb}$  ( $\text{M} = \text{Ti}, \text{Zr}, \text{Hf}$ ), зроблено висновок про визначальну роль домішкових зон в провідності вказаних матеріалів. Даний висновок ґрунтується на співставленні власних результатів та численних експериментальних та теоретичних досліджень поведінки питомого електроопору, коефіцієнту Зеебека та магнітної сприйнятливості напівпровідників  $\text{MnNiSn}$ ,  $\text{MCoSb}$  та твердих розчинів на їх основі [1-12].

Вивчення впливу акцепторних домішок різних концентрацій ( $N_A$ ) від  $N_A = 3,5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  до  $N_A = 5,3 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$  на кінетичні явища в  $n\text{-ZrNiSn}$  та розрахунок розподілу електронної густини в  $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSn}$  дозволили нам запропонувати модель перебудови домішкової акцепторної зони при легуванні напівпровідника акцепторними домішками та спостерігати передбачений теоретичними розрахунками перехід провідності метал-діелектрик, який є переходом Андерсона [13,14]. В роботі [15] ми започаткували новий підхід для оцінки

експериментальних результатів стосовно сполук структурного типу  $\text{MgAgAs}$ . Суть нашого підходу полягає в одночасному врахуванні особливостей сильно легованих та компенсованих напівпровідників [16] та локальних розупорядкувань кристалічної структури, особливо у випадках напівпровідникових твердих розчинів [17].

Відомо, що провідність напівпровідників у значній мірі визначається ступінню їх компенсації, яка, в свою чергу, задає положення рівня Фермі ( $E_F$ ). Визначення положення  $E_F$ , а також вміння керувати розташуванням рівня Фермі в напівпровіднику  $\text{TiCoSb}$  є також важливою практичною метою, оскільки дана сполука та твердий розчин на її основі є одними з найбільш досліджуваних та перспективних термоелектричних матеріалів [18].

Структурні розупорядкування в сполуках зі структурою типу  $\text{MgAgAs}$  [19] вкупі з розупорядкуваннями, викликаними флуктуаціями значних концентрацій заряджених домішок ( $10^{19} \div 10^{21} \text{ см}^{-3}$ ) [16], зумовлюють появу в забороненій зоні домішкових рівнів а в зоні неперервних енергій – локалізованих станів, розділених краєм рухливості [17]. Останнє суттєво впливає на кінетичні характеристики напівпровідника. Для відокремлення ефектів, пов'язаних саме з домішковою зоною, ми здійснили

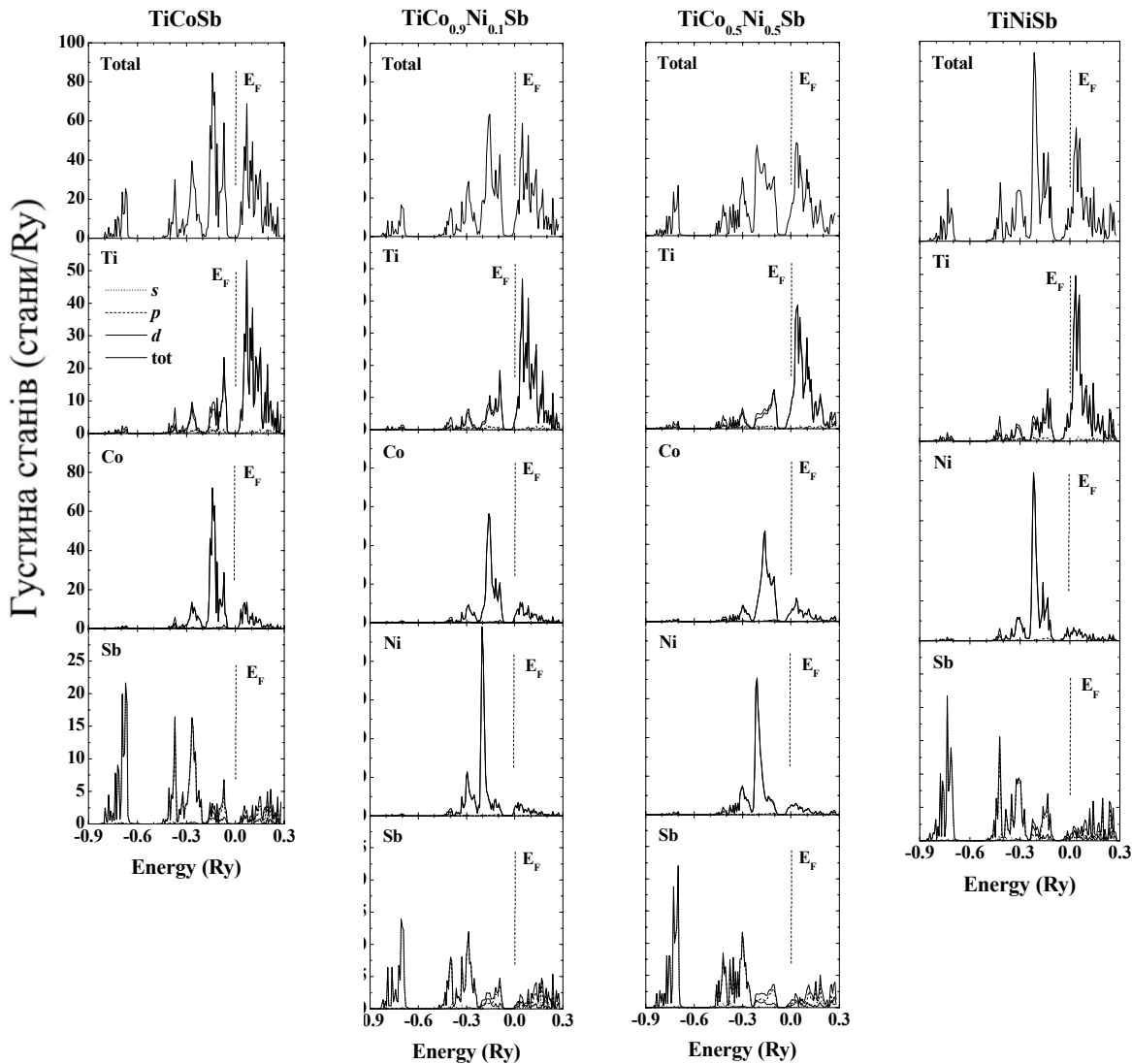


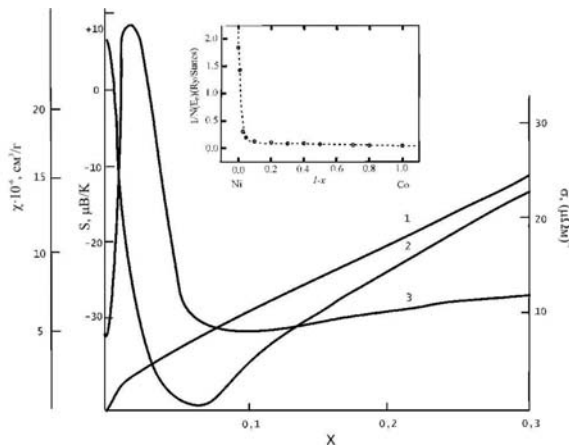
Рис. 1. Розподіл покомпонентної та сумарної густини станів твердого розчину  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$ .

розрахунок електронної структури  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  методом функцій Гріна в наближенні когерентного потенціалу [14].

Запропонована робота є другою в ряді публікацій з даної тематики і присвячена вивченню впливу донорних домішок на кінетичні характеристики напівпровідників зі структурою типу  $\text{MgAgAs}$ . В роботі досліджувалася поведінка електропровідності, коефіцієнту Зеебека та магнітної сприйнятливості сполуки  $\text{TiCoSb}$  при легуванні донорними домішками різних концентрацій шляхом заміни  $\text{Co}$  ( $3d^74s^2$ ) на  $\text{Ni}$  ( $3d^84s^2$ ) та утворення твердого розчину заміщення  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$ . При цьому концентрація донорів ( $N_D$ ) змінювалась від  $N_D = 1,9 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  ( $x = 0,01$ ) до  $N_D = 3,8 \cdot 10^{21} \text{ см}^{-3}$  ( $x = 0,2$ ). Методики отримання зразків, їх обробки та ідентифікації за допомогою рентгенівського фазового аналізу, а також вимірювання питомого електроопору ( $\rho$ ), коефіцієнту Зеебека ( $S$ ) (відносно міді) та магнітної сприйнятливості ( $\chi$ ) (метод Фарадея) в температурному інтервалі  $80 \div 380 \text{ K}$  представлені в [10].

## II. Розрахунок електронної структури твердого розчину $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$

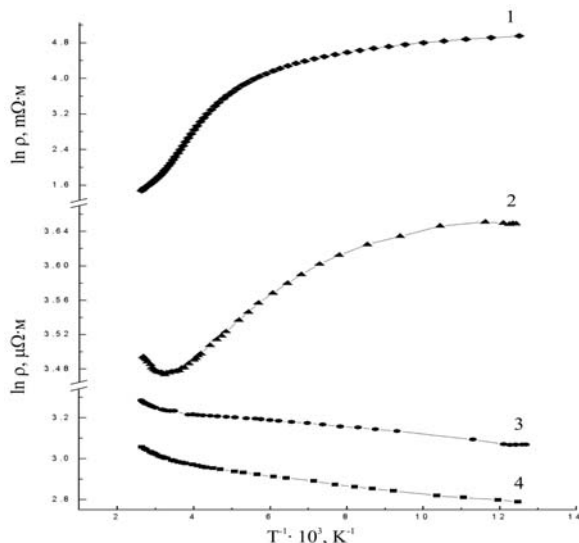
На рис.1 показано результати розрахунку розподілу електронної густини для кожного з компонентів твердого розчину  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  та сумарний розподіл для різних значень  $x$ . Можна бачити, що сполуки  $\text{TiCoSb}$  та  $\text{TiNiSb}$ , які знаходяться на краях твердого розчину, є вузькозонними напівпровідниками. Даний висновок узгоджується як з експериментальними даними [14] так і з результатами теоретичних розрахунків методом псевдопотенціалу [5]. Відмінність полягає в тому, що в  $\text{TiCoSb}$  рівень Фермі знаходиться в забороненій зоні, а в  $\text{TiNiSb}$  – в зоні провідності. Відповідно, провідність  $\text{TiCoSb}$  має активаційний характер і в значній мірі буде визначається співвідношенням концентрацій донорних та акцепторних домішок, а провідність  $\text{TiNiSb}$  – металічний характер і визначається електронами



**Рис. 2.** Залежності провідності  $\sigma$  (1), коефіцієнту Зеебека  $S$  (2), магнітної сприйнятливості  $\chi$  (3) та розрахункової густини станів на рівні Фермі (4) від складу  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  при 80 К.

зони провідності.

Як видно з рис. 1, електронна густина вище рівня Фермі визначається головним чином d-станами Ті, в той час валентна зона визначається d-станами Со чи Ні, які перекриваються з d-станами Ті та р-станами Sb. Вже при  $x = 0,1$  рівень Фермі потрапляє в зону провідності. Зростання величини  $x$  призводить до дрейфу рівня Фермі в глибину зони провідності, при цьому спостерігається зменшення інтенсивності піків у валентній зоні при  $-0,14$  та  $-0,06$  Ry (для випадку  $\text{TiCoSb}$ ), які, відповідно, належать d-станам Со та Ні. При цьому новий пік  $-0,22$  Ry нижче рівня Фермі, що пов'язаний зі збільшенням d-станів Ні, є більш виразний і домінує для  $x = 0,9$ . При цьому провідність  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  буде носити металічний характер. Таким чином, заміна Со на Ні в напівпровідниковому твердому розчині  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  призводить до переходу провідності від активаційної до металічної.



**Рис. 3.** Температурні залежності питомого електроопору  $\rho$  твердого розчину  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  для різних значень  $x$ : 1 – 0; 2 – 0,01; 3 – 0,03; 4 – 0,05.

Розрахунок густини станів на рівні Фермі  $N(E_F)$  засвідчує (рис. 2, залежність 4), що для малих значень  $x$  (менших концентрацій донорних домішок) густина станів на рівні Фермі визначається d-електронами Ті з суттєвим вкладом d-станів Со. З ростом  $x$  визначальним стає вклад d-електронів Ні.

### III. Експериментальні дослідження $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$

Рентгенівський фазовий аналіз підтвердив, що всі досліджувані зразки твердого розчину  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  з  $x = 0 \div 0,2$  є однофазними і кристалізуються в структурному типі  $\text{MgAgAs}$  (просторова група  $F\bar{4}3m$ , № 216). Уточнення кристалічної структури для фаз складу  $\text{TiCo}_{0,99}\text{Ni}_{0,01}\text{Sb}$  та  $\text{TiCo}_{0,95}\text{Ni}_{0,05}\text{Sb}$  показали, що розподіл атомів в зразках відповідає структурному типу  $\text{MgAgAs}$ , в якому позиції 4(a)  $0\ 0\ 0$  є статистично зайняті атомами Ні та Со.

Залежності  $\ln \rho(1/T)$  для  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$   $x \leq 0,01$  є типовими для напівпровідників (рис. 3). При значеннях  $x > 0,01$  активаційні ділянки зникають і ці залежності набувають металічного характеру. З графіку  $\ln \rho(1/T)$  для зразка  $\text{TiCoSb}$  можна виділити високу та низькотемпературний активаційні ділянки, які ми пов'язуємо, відповідно, з міжзонною активацією електронів в зону провідності та з активацією з рівня Фермі, розташованого в кулонівській щільній домішкової зони, в зону провідності ( $\epsilon_1$ ). Розрахунки показують, що для  $\text{TiCoSb}$  ( $x = 0$ ) термічна ширина забороненої зони  $E_g \approx 176$  меВ, а  $\epsilon_1 \approx 9$  меВ. Коефіцієнт Зеебека змінюється з температурою квазілінійно [10].

Для зразка з  $x = 0$  при  $T < 100$  К величина  $S$  має позитивні значення (рис. 2), при вищих температурах, як і для всіх інших зразків в дослідженому інтервалі температур – від'ємні. Зміна знаку коефіцієнту Зеебека з додатного на від'ємний свідчить, що досліджуваний зразок  $\text{TiCoSb}$  містить неконтрольовані домішки і має дірковий тип провідності. Слід зауважити, що згідно результатів рентгенівського аналізу всі досліджувані зразки є однофазними [10], тобто цей метод аналізу не дозволяє нам в повній мірі контролювати вміст домішок, які в свою чергу мають значний вплив на властивості напівпровідника.

Легування напівпровідника донорними домішками з  $N_D = 1,9 \cdot 10^{20} \text{ cm}^{-3}$  ( $x = 0,01$ ) зумовлює процес перебудови домішкової зони в результаті зміни як ступеня компенсації і положення рівня Фермі, так і розмірів зони та її розташування по відношенню до вершин зон неперервних енергій, а також змінює механізми провідності напівпровідника. При повній компенсації напівпровідника рівень Фермі повинен знаходитись на дні домішкової зони а з перекомпенсацією (ростом  $x$ ) буде зміщатися по домішковій зоні в напрямку зони провідності. Зменшення енергії активації  $\epsilon_1$  з 9 меВ ( $x = 0$ ) до 3,5 меВ ( $x = 0,01$ ) свідчить про зміну положення рівня Фермі по відношенню до краю

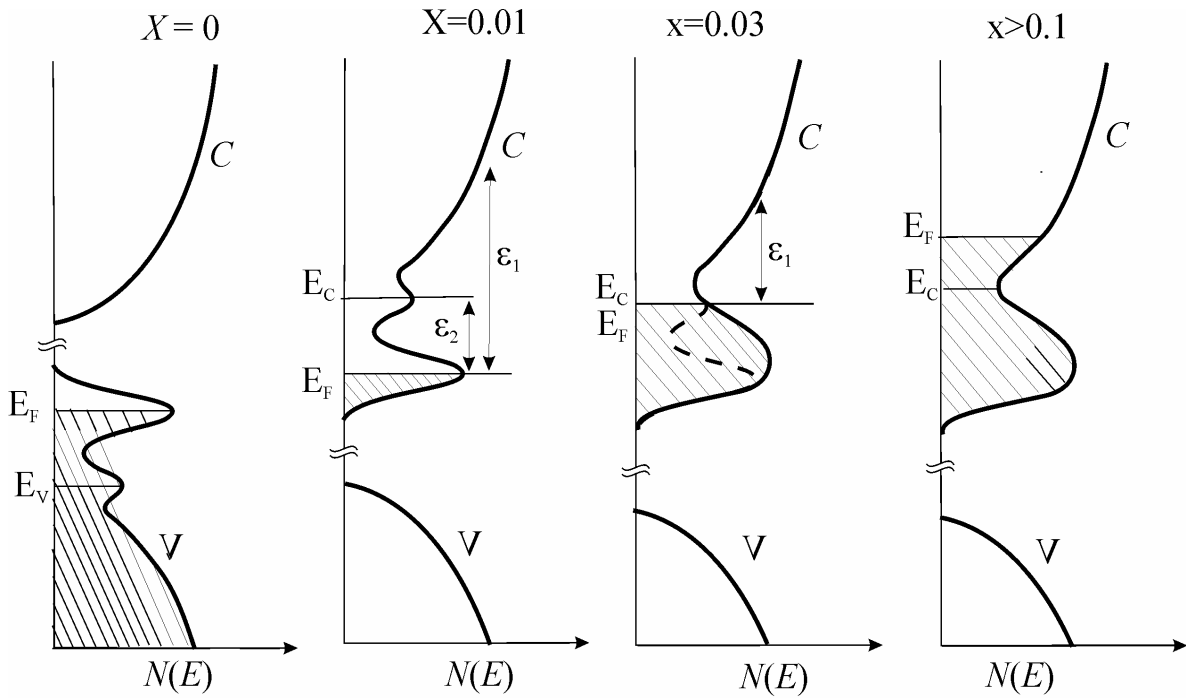


Рис. 4. Модель перебудови домішкової зони  $\text{TiCoSb}$  при легуванні донорними домішками.

рухливості зони провідності  $E_C$  через зміну ступеня компенсації напівпровідника. Як видно з рис. 2, на цій ж концентраційній ділянці ( $x = 0 \div 0,05$ ) спостерігається зменшення залежності  $\chi(x)$  ( $\chi \sim N(E_F)$  для парамагнетика Паулі) та збільшення  $S(x)$  ( $S \sim k_B T/E_F$ ). Оскільки досліджувані зразки є слабкими парамагнетиками, то спостережувана синхронність в поведінці  $S(x)$  та  $\chi(x)$  в концентраційному інтервалі  $N_D = (1,9 \div 9,5) \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  ( $x = 0,01 \div 0,05$ ) свідчить про зменшення густини станів на рівні Фермі, що викликає спочатку зміною ступеня компенсації напівпровідника з наступною його перекомпенсацією з р- на n-тип провідності. Останнє призводить до руху рівня Фермі з дна домішкової зони в бік зони провідності (випадок сильної компенсації напівпровідника n-типу) аж до її вершини (випадок слабкої компенсації) при збільшенні концентрації донорної домішки [16]. Можемо припустити, що в цій області концентрацій кулонівська щілина зникає через заповнення всіх станів домішкової зони, домішкова зона перекривається з краєм рухливості зони провідності а рівень Фермі фіксується  $E_C$  на мінімумі густини станів. Крім того, з рис. 3 виступає, що для зразка з  $x = 0,01$  при  $T \geq 270 \text{ K}$  вклад зонних носіїв стає дедалі суттєвішим і при  $T \geq 300 \text{ K}$  спостерігається металізація провідності, а збільшення  $\rho(T)$  зумовлене зонними механізмами розсіяння. Тобто, вже для  $x = 0,01$  при певних значеннях температур з'являється достатня кількість вільних електронів з досить високою рухливістю, які суттєво впливають на провідність напівпровідника. Тому провідність в цьому інтервалі концентрацій зростає на три порядки.

Наостанок, при  $N_D > 9,5 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$  ( $x > 0,06$ )

спостерігається ріст залежностей  $\chi(x)$  та  $\sigma(x)$  і водночас зменшення коефіцієнту Зеебека зі зміною складу напівпровідникового твердого розчину  $n\text{-TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  пов'язаний з появою та збільшенням концентрації вільних електронів і ростом густини станів на рівні Фермі в зоні провідності (вище  $E_C$ ). Провідність напівпровідника  $n\text{-TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  має металічний характер.

По аналогії з випадком легування напівпровідників акцепторними домішками [13-15], ми пропонуємо модель перебудови домішкової зони  $\text{TiCoSb}$  при легуванні донорними домішками різних концентрацій (рис. 4).

Відомо, що коли склад твердого розчину змінюється таким чином, що  $E_C - E_F = \Delta E$  змінює знак, то має місце перехід Андерсона [17]. З наведеного вище випливає:

а)  $p\text{-TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  при  $x = 0$  є компенсованим напівпровідником, рівень Фермі  $E_F$  фіксується акцепторною зоною та  $E_C - E_F > 0$ ;

б) провідність  $n\text{-TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  при  $x > 0,06$  носить металічний характер і визначається вільними електронами, рівень Фермі знаходиться в зоні провідності а  $E_C - E_F < 0$ .

#### IV. Заключні зауваження

Таким чином, представлені результати свідчать, що спостережуваний перехід провідності метал-діелектрик в напівпровідниковому твердому розчині  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  є переходом Андерсона і пов'язаний з перебудовою домішкової зони легованого та компенсованого напівпровідника при проходженні рівня Фермі через домішкову зону в результаті зміни

концентрації домішок та ступеня компенсації при зміні складу твердого розчину. Співпадіння теоретичних розрахунків та результатів експерименту, що показують перехід провідності від активаційної до металічної, свідчить про правильність запропонованої нами моделі перебудови домішкової зони при легуванні напівпровідника донорними домішками.

Робота виконана в рамках грантів Міністерства освіти і науки України (№ 0103U001887) та Національної академії наук України (№ 0102U000454).

**Бодак О.І.** – доктор хімічних наук, професор, завідувач кафедри неорганічної хімії;

**Ромака В.А.** – кандидат фізико-математичних

наук, старший науковий співробітник відділу математичних проблем механіки неоднорідних тіл;

**Стадник Ю.В.** – кандидат хімічних наук, старший науковий співробітник кафедри неорганічної хімії;

**Шаляпіна М.Г.** – кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник Інституту фізики;

**Ромака Л.П.** – кандидат хімічних наук, старший науковий співробітник кафедри неорганічної хімії;

**Гореленко Ю.К.** – старший науковий співробітник кафедри неорганічної хімії;

**Чекурін В.Ф.** – доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач відділу математичних проблем механіки неоднорідних тіл.

- [1] Ф.Г. Алиев, Н.Б. Брандт, В.В. Козырьков, В.В. Мощалков, Р.В. Сколоздра, Ю.В. Стадник. Диэлектризация вакансионных интерметаллических систем  $RNiSn$  ( $R = Zr, Hf, Ti$ ) // *Письма в ЖЭТФ*, **45**, сс. 535-537 (1987).
- [2] F.G. Aliev, V.V. Kozyrkov, V.V. Moshchalkov, R.V. Skolozdra, K. Durczewski. Narrow band in the intermetallic compounds  $MNiSn$  ( $M = Ti, Zr, Hf$ ) // *J. Phys. B – Condensed Matter.*, **80**, 353 (1990).
- [3] S.J. Poon. Electronic Properties of Quasicrystals: An Experimental Review // *Adv. Phys.*, **41**, pp. 303-347 (1992).
- [4] M.A. Kouacou, J. Pierre, R.V. Skolozdra. Semiconductor-metal transition and the onset of itinerant ferromagnetism in the Heusler phases  $TiCoSn-TiCoSb$  // *J. Phys. B – Condensed Matter*, **7**, pp. 7373-7385 (1995).
- [5] S. Ogut, K.M. Rabe. Band gap and stability in the ternary intermetallic compounds  $NiSnM$  ( $M = Ti, Zr, Hf$ ): A first-principles study // *Physical Review B*, **51**(16), pp. 10443-10453 (1995).
- [6] J. Pierre, R.V. Skolozdra, J. Tobola, S. Kaprzyk, C. Hordequin, M.A. Kouacou, I. Karla, R. Gurrat, E. Lelievre-Berna. Properties on request in semi-Heusler phases // *J. Alloys and Compounds*, **262-263**, pp. 101-107 (1997).
- [7] Yu. Stadnyk, L.P. Romaka, A.Goryn, Yu. Gorelenko, J. Pierre, R.V. Skolozdra. Solid solutions  $ZrNi_{1-x}M_xSn$  ( $M = Cr, Mn, Cu$ ) and their electrical and magnetic properties // *J. Alloys and Compounds*, **262-263**, pp. 476-480 (1997).
- [8] J. Tobola, J. Pierre, S. Kaprzyk, R.V. Skolozdra, M.A. Kouacou. Crossover from semiconductor to magnetic metal in semi-Heusler phases as a function of valence electron concentration // *J. Phys. B – Condensed Matter*, **10**, pp. 1013-1032 (1998).
- [9] H. Hohl, A. P. Ramirez, C. Goldmann, G. Ernst, B. Wolfing, E. Buchert. Efficient dopants for  $ZrNiSn$ -based thermoelectric materials // *J. Phys. B – Condensed Matter*, **11**, pp. 1697-1709 (1999).
- [10] Yu. Stadnyk, Yu. Gorelenko, A. Tkachuk, A.Goryn, V. Davydov, O. Bodak. Electric transport and magnetic properties of  $TiCo_{1-x}Ni_xSb$  solid solution // *J. Alloys and Compounds*, **329**, pp. 37-41 (2001).
- [11] Y. Kawaharada, K. Kurosaki, H. Muta, M. Uno, S. Yamanaka. High Temperature thermoelectric properties of  $CoNb_{1-x}M_xSn$  half-Heusler compounds // *J. Alloys and Compounds*, **384**, pp. 303-307 (2004).
- [12] S. Katsuyama, H. Matsushima, M. Ito. Effect of substitution for Ni by Co and/or Cu thermoelectric properties of half-Heusler  $ZrNiSn$  // *J. Alloys and Compounds*, **385**, pp. 232-237 (2004).
- [13] О.І. Бодак, В.А. Ромака, Ю.В. Стадник, Л.П. Ромака, Ю.К. Гореленко, В.Ф. Чекурін. Перехід провідності метал-діелектрик, викликаний зміною складу твердого розчину  $Zr_{1-x}Sc_xNiSn$  // *Фізика і хімія твердого тіла*, 2005 (в друці).
- [14] L. Romaka, Yu. Stadnyk, M.G. Shelyapina, V.S. Kasperovich, D. Fruchart, A. Horyn. Electronic structure of the  $Ti_{1-x}Sc_xNiSn$  and  $Zr_{1-x}Sc_xNiSn$  solid solutions // *J. Alloys and Compounds*. (2004) (в друці).
- [15] Yu.V. Stadnyk, V.A. Romaka, Yu.K. Gorelenko, L.P. Romaka, D. Fruchart, V.F. Chekurin. Conductivity transition of metal-insulator induced by change in  $Zr_{1-x}Sc_xNiSn$  solid solution composition // *J. Alloys and Compounds*. (2005) (в друці).
- [16] Б.И. Шкловский, А.Л. Эфрос. *Электронные свойства легированных полупроводников*. Москва. Наука 416 с. (1979)
- [17] Н. Мотт, Э. Дэвис. *Электронные процессы в некристаллических веществах*. Мир. М., 368 с. (1982) (переклад з англійської: N.F. Mott, E.A. Davis. *Electron processes in non-crystalline materials* (Oxford, Clarendon Press, 1979).
- [18] R.V. Skolozdra. New intermetallic compounds perspective in thermoelectricity // *J. Thermoelectricity*, **2**, pp. 55-77 (1997).
- [19] Р.В. Сколоздра. *Станіди перехідних і рідкісноземельних елементів*. Світ. Львів (1993).

O.I. Bodak<sup>1</sup>, V.A. Romaka<sup>2</sup>, Yu.V. Stadnyk<sup>1</sup>, M.G. Shelyapina<sup>3</sup>,  
L.P. Romaka<sup>1</sup>, V.F. Chekurin<sup>2</sup>, Yu.K. Gorelenko<sup>1</sup>

## **Impurity band effect on $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$ conductivity. Donor impurities**

<sup>1</sup>*Ivan Franko Lviv National University, 6, Kyryl & Mephodiy Str., Lviv, 79005,  
ph. (032)-296-45-03; E-mail: [stadnyk\\_yuriy@franko.lviv.ua](mailto:stadnyk_yuriy@franko.lviv.ua)*

<sup>2</sup>*Ya. Pidstryhach Institute for Applied Problems of Mechanics and Mathematics  
Academi of Sciences of Ukraine, 3-b, Naukova Str., Lviv, 79053, Ukraine,  
ph. (0322)-63-71-11; E-mail: [romaka@lviv.net](mailto:romaka@lviv.net).*

<sup>3</sup>*L.V. Fock Institute of Physics, St. Petersburg State University, 1, Ulyanovskaya Str.,  
Petrodvorets, St.-Petersburg, 198504, Russia; E-mail: [marina@ms4828.spb.edu](mailto:marina@ms4828.spb.edu).*

The role of the impurity donor band in the conductivity of doped and compensated semiconductors with MgAgAs structure type was investigated. A simulation of the electronic structure for  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  semiconducting solid solution was carried out. A scheme of the impurity band transformation in  $\text{TiCoSb}$  semiconductor due to donor impurities doping was advanced. A transition of conductivity from activated to metallic type while  $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$  solid solution composition changes was observed. We relate this transition with Anderson-type transition.