

ЗМІСТ

ВСТУПНЕ СЛОВО БАБАКА В.П., член-кор. НАН України	13
ПЕРЕДМОВА	16
РОЗДІЛ 1	
Матеріали чутливих елементів термоперетворювачів. Стан проблеми та шляхи розвитку з запровадженням фаз пів-Гейслера	21
1.1. Вступні зауваження	21
1.2. Фізичні основи виникнення термоелектрорушійної сили та її використання	22
1.2.1. Історичні аспекти відкриття явища термоелектрики	22
1.2.2. Основні термодинамічні рівняння	23
1.2.3. Фізична природа термоелектрорушійної сили	24
1.2.4. Шляхи оптимізації характеристик термоелектричних матеріалів	26
1.2.5. Принципи термоелектричної термометрії	29
1.3. Фізичні основи електрорезистивної термометрії	32
1.4. Сучасні термоелектричні матеріали	36
1.4.1. Скутерудити	36
1.4.2. Термоелектричні клатрати	37
1.4.3. Термоелектричні матеріали на основі сполук β -Zn ₄ Sb ₃ , Yb ₁₄ MnSb ₁₁ та FeSb ₂	37
1.4.4. Термоелектричні матеріали на основі оксидів металів та халькогенідів	38
1.4.5. Негомогенні наноструктуровані та нанокомпозитні полікристалічні матеріали	38
1.5. Фази пів-Гейслера як перспективні термоелектричні матеріали	39
1.5.1. Кристалічна структура та елементний склад фаз пів-Гейслера	40
1.5.2. Термочутливі матеріали на основі фаз пів-Гейслера M'MSn (де M - d-елемент)	43
1.5.2.1. Термочутливі матеріали на основі фаз пів-Гейслера ZrNiSn, TiNiSn та HfNiSn	43
1.5.3. Термочутливі матеріали на основі твердих розчинів базових сполук M'MSn (M - d-елемент) зі структурою MgAgAs	46
1.5.3.1. Термочутливі матеріали на основі фаз пів-Гейслера M'MSn із заміщенням компонентів у кристалографічній позиції Sn (4b)	47
1.5.3.2. Термочутливі матеріали на основі фаз пів-Гейслера M'MSn із заміщенням компонентів у кристалографічній позиції M (4c)	48
1.5.3.3. Термочутливі матеріали на основі фаз пів-Гейслера M'MSn із заміщенням компонентів у кристалографічній позиції M' (4a)	50
1.5.3.4. Матеріали термоперетворювачів на основі фаз пів-Гейслера (Hf _{1-y} Zr _y) _{1-z} Ti _z NiSn	51
1.5.3.5. Термочутливі матеріали на основі фаз пів-Гейслера M'MSn із багатокомпонентним заміщенням в одній кристалографічній позиції	53
1.5.3.6. Термочутливі матеріали на основі фаз пів-Гейслера M'MSn із багатокомпонентним заміщенням у двох кристалографічних позиціях	54
1.5.3.7. Термочутливі матеріали на основі фаз пів-Гейслера M'MSn із багатокомпонентним заміщенням у трьох кристалографічних позиціях	56
1.5.3.8. Термочутливі матеріали на основі нанокомпозитів та твердих розчинів включення зі структурою MgAgAs	57
1.5.4. Термочутливі матеріали на основі фаз пів-Гейслера M'MSb (M - d-елемент)	57
1.5.4.1. Термочутливі матеріали на основі фаз пів-Гейслера M'CoSb (M' = Ti, Zr, Hf, V, Nb)	58
1.5.4.2. Термочутливі матеріали на основі фаз пів-Гейслера RNiSb (R = Sc, Y, Gd - Lu)	59

1.5.4.3.	Термочутливі матеріали на основі фаз пів-Гейслера $R\text{PdSb}$ ($R = \text{Sc}, \text{Y}, \text{Yb}$) та $R\text{PtSb}$ ($R = \text{Sc}, \text{Y}, \text{Gd}, \text{Dy}, \text{Yb}$)	59
1.5.5.	Термочутливі матеріали на основі твердих розчинів фаз пів-Гейслера $\text{M}'\text{MSb}$ (M' - d -елемент)	60
1.5.5.1.	Термочутливі матеріали на основі фаз пів-Гейслера $\text{M}'\text{MSb}$ із заміщенням компонентів у кристалографічній позиції Sb ($4b$)	61
1.5.5.2.	Термочутливі матеріали на основі фаз пів-Гейслера $\text{M}'\text{MSb}$ із заміщенням компонентів у кристалографічній позиції M ($4c$)	61
1.5.5.3.	Термочутливі матеріали на основі фаз пів-Гейслера $\text{M}'\text{MSb}$ із заміщенням компонентів у кристалографічній позиції M' ($4a$)	62
1.5.5.4.	Термочутливі матеріали на основі фаз пів-Гейслера $\text{M}'\text{MSb}$ із заміщенням компонентів у двох кристалографічних позиціях	63
1.5.5.5.	Термочутливі матеріали на основі фаз пів-Гейслера $\text{M}'\text{MSb}$ із заміщенням компонентів у трьох кристалографічних позиціях	64
1.5.6.	Особливості фазового складу фаз пів-Гейслера	65
1.5.6.1.	Діаграми стану потрійних систем $\text{M}'\text{-M-Sn}$	65
1.5.6.2.	Діаграми стану потрійних систем $\text{M}'\text{-M-Sb}$	67
1.5.7.	Електронна структура фаз пів-Гейслера	68
1.6.	Прикінцеві зауваження	70
РОЗДІЛ 2	Методи досліджень	72
2.1.	Виготовлення та термічне оброблення сплавів термочутливих матеріалів	72
2.2.	Рентгенівські фазовий та структурний аналізи термочутливих матеріалів	72
2.3.	Кристалохімічний аналіз термочутливих матеріалів	73
2.4.	Мікроструктурний та рентгеноспектральний аналіз сплавів	74
2.5.	Дослідження електрокінетичних та магнітних характеристик	74
2.6.	Диференціальна скануюча калориметрія, термогравіметрія та вимірювання теплопровідності термочутливих матеріалів	75
2.7.	Методи моделювання електронної структури	75
2.7.1.	Особливості методів розрахунку енергетичних характеристик термочутливих матеріалів	76
РОЗДІЛ 3	Елементи сучасної теорії легованих та компенсованих напівпровідників	83
3.1.	Структура одиничних домішкових станів	83
3.2.	Локалізація електронних станів	84
3.2.1.	Перехід Мотта	85
3.2.2.	Перехід Андерсона	87
3.3.	Структура домішкових зон легованих напівпровідників	89
3.3.1.	Слаболеговані напівпровідники	89
3.3.1.1.	Домішкова зона у випадку малого ступеня компенсації	89
3.3.1.2.	Домішкова зона у випадку високого ступеня компенсації	91
3.4.	Електропровідність напівпровідників. Стрибкова провідність	93
3.5.	Сильнолеговані напівпровідники	97
3.5.1.	Стани електронів у сильнолегованих напівпровідниках. Лінійне екранування	97
3.6.	Сильнолеговані та сильнокомпенсовані напівпровідники	99
3.7.	Повністю компенсований напівпровідник	101
РОЗДІЛ 4	Встановлення фізико-хімічних особливостей будови термочутливих матеріалів на основі фаз пів-Гейслера	104
4.1.	Вступні зауваження	104
4.2.	Дослідження кристалохімічної моделі утворення сполук CT MgAgAs	105
4.3.	Дослідження квантовохімічної моделі утворення фаз пів-Гейслера	108

РОЗДІЛ 5	Термочутливі матеріали на основі фази пів-Гейслера TiNiSn	116
5.1.	<i>Зуваження до результатів розділу</i>	116
5.2.	Особливості структурних, кінетичних та енергетичних характеристик сполуки TiNiSn	117
5.2.1.	Дослідження особливостей кристалічної структури та хімічного складу сполуки TiNiSn	117
5.2.2.	Дослідження електронної структури сполуки TiNiSn	124
5.2.3.	Дослідження електрофізичних та магнітних властивостей TiNiSn	127
5.3.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$	130
5.3.1.	Дослідження кристалічної структури $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$	130
5.3.2.	Дослідження електронної структури $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$	131
5.3.3.	Дослідження електрофізичних властивостей $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$	132
5.3.4.	Моделювання структурних характеристик термочутливих матеріалів $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	136
5.4.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}Y_xNiSn$	136
5.4.1.	Дослідження структурних та термодинамічних характеристик $Ti_{1-x}Y_xNiSn$	136
5.4.2.	Дослідження електронної структури та магнітних характеристик $Ti_{1-x}Y_xNiSn$	138
5.4.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних характеристик $Ti_{1-x}Y_xNiSn$	140
5.5.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}Sc_xNiSn$	143
5.5.1.	Дослідження структурних та термодинамічних характеристик $Ti_{1-x}Sc_xNiSn$	143
5.5.2.	Дослідження електронної структури $Ti_{1-x}Sc_xNiSn$	145
5.5.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних характеристик $Ti_{1-x}Sc_xNiSn$	146
5.6.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}V_xNiSn$	149
5.6.1.	Дослідження структурних та термодинамічних характеристик $Ti_{1-x}V_xNiSn$	149
5.6.2.	Дослідження електронної структури $Ti_{1-x}V_xNiSn$	151
5.6.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних характеристик $Ti_{1-x}V_xNiSn$	152
5.6.4.	Коефіцієнт термоелектричної потужності $Z^* Ti_{1-x}V_xNiSn$	154
5.7.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiNi_{1-x}V_xSn$	155
5.7.1.	Дослідження структурних та термодинамічних характеристик $TiNi_{1-x}V_xSn$	155
5.7.2.	Дослідження електронної структури $TiNi_{1-x}V_xSn$	157
5.7.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних характеристик $TiNi_{1-x}V_xSn$	158
5.7.4.	Моделювання структурних характеристик термочутливих матеріалів $TiNi_{1-x}V_xSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	161
5.7.5.	Коефіцієнт термоелектричної потужності $Z^* TiNi_{1-x}V_xSn$	163
5.8.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiNi_{1-x}Co_xSn$	163
5.8.1.	Дослідження структурних та термодинамічних характеристик $TiNi_{1-x}Co_xSn$	164
5.8.2.	Дослідження електронної структури $TiNi_{1-x}Co_xSn$	165
5.8.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних характеристик $TiNi_{1-x}Co_xSn$	167
5.8.4.	Моделювання структурних та енергетичних характеристик $TiNi_{1-x}Co_xSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	170
5.9.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiNi_{1-x}Cu_xSn$	172
5.9.1.	Дослідження структурних характеристик $TiNi_{1-x}Cu_xSn$	173
5.9.2.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних характеристик $TiNi_{1-x}Cu_xSn$	175

5.10.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiNi_{1-x}Rh_xSn$</i>	178
5.10.1.	Дослідження кристалічної та електронної структур $TiNi_{1-x}Rh_xSn$	178
5.10.2.	Дослідження кінетичних та енергетичних характеристик $TiNi_{1-x}Rh_xSn$	179
5.11.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiNiSn_{1-x}In_x$</i>	184
5.11.1.	Дослідження кристалічної структури $TiNiSn_{1-x}In_x$	184
5.11.2.	Дослідження електронної структури $TiNiSn_{1-x}In_x$	186
5.11.3.	Дослідження кінетичних та енергетичних характеристик $TiNiSn_{1-x}In_x$	187
5.11.4.	Моделювання структурних та енергетичних характеристик $TiNiSn_{1-x}In_x$ з урахуванням результатів кінетичних та магнітних досліджень	191
5.12.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiNiSn_{1-x}Ga_x$</i>	193
5.12.1.	Дослідження кристалічної структури $TiNiSn_{1-x}Ga_x$	193
5.12.2.	Дослідження електронної структури $TiNiSn_{1-x}Ga_x$	194
5.12.3.	Дослідження кінетичних та енергетичних характеристик $TiNiSn_{1-x}Ga_x$	196
5.12.4.	Моделювання структурних та енергетичних характеристик $TiNiSn_{1-x}Ga_x$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	200
РОЗДІЛ 6	<i>Термочутливі матеріали на основі фази пів-Гейслера $ZrNiSn$</i>	202
6.1.	<i>Особливості структурних та енергетичних характеристик сплавів сполуки $ZrNiSn$</i>	202
6.1.2.	Дослідження особливостей електронної структури $ZrNiSn$	207
6.1.2.1.	«Апріорне легування» $ZrNiSn$ донорами як результат часткового заміщення у позиції $4a$ атомів Zr на Ni	207
6.1.3.	Дослідження кінетичних та магнітних характеристик $ZrNiSn$	212
6.1.4.	«Апріорне легування» $ZrNiSn$ донорами як результат акумулювання атомів Ni у тетраедричних порожнинах структури	213
6.1.5.	Дослідження структурних, енергетичних, кінетичних та магнітних характеристик твердого розчину $(Zr_{1-y}Ni_y)Ni_{1+x}Sn$	215
6.1.5.1.	Особливості мікроструктури та фазового складу $(Zr_{1-y}Ni_y)Ni_{1+x}Sn$	216
6.1.5.2.	Дослідження кристалічної структури $(Zr_{1-y}Ni_y)Ni_{1+x}Sn$	217
6.1.5.3.	Дослідження електронної структури $(Zr_{1-y}Ni_y)Ni_{1+x}Sn$	220
6.1.6.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних характеристик $ZrNi_{1+x}Sn$	223
6.1.7.	Коефіцієнт термоелектричної потужності $ZrNi_{1+x}Sn$	226
6.2.	<i>Термочутливі матеріали, отримані легуванням сполуки $ZrNiSn$ радієснозмельченими та $3d$- (V) і $4d$-металами (Nb, Mo). Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Y_xNiSn$</i>	227
6.2.1.	Дослідження структурних характеристик $Zr_{1-x}Y_xNiSn$	227
6.2.2.	Особливості електронної структури $Zr_{1-x}Y_xNiSn$	230
6.2.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних характеристик $Zr_{1-x}Y_xNiSn$	233
6.2.4.	Моделювання структурних та енергетичних характеристик термочутливих матеріалів $Zr_{1-x}Y_xNiSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	237
6.3.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Sc_xNiSn$</i>	243
6.3.1.	Дослідження структурних характеристик $Zr_{1-x}Sc_xNiSn$	243
6.3.2.	Дослідження електронної структури $Zr_{1-x}Sc_xNiSn$	245
6.3.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних характеристик $Zr_{1-x}Sc_xNiSn$	246
6.4.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Ce_xNiSn$</i>	250
6.4.1.	Дослідження структурних характеристик $Zr_{1-x}Ce_xNiSn$	251
6.4.2.	Дослідження магнітного стану атомів Ce у $Zr_{1-x}Ce_xNiSn$	252
6.4.3.	Дослідження електронної структури $Zr_{1-x}Ce_xNiSn$	252

6.4.4.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних характеристик $Zr_{1-x}Ce_xNiSn$	254
6.4.5.	Коефіцієнт термоелектричної потужності $Zr_{1-x}Ce_xNiSn$	257
6.5.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Nd_xNiSn$</i>	258
6.5.1.	Особливості кристалічної структури $Zr_{1-x}Nd_xNiSn$	258
6.5.2.	Дослідження електронної структури $Zr_{1-x}Nd_xNiSn$	259
6.6.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Dy_xNiSn$</i>	261
6.6.1.	Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}Dy_xNiSn$	261
6.6.2.	Дослідження електронної структури $Zr_{1-x}Dy_xNiSn$	263
6.6.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних характеристик $Zr_{1-x}Dy_xNiSn$	264
6.7.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$</i>	269
6.7.1.	Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$	269
6.7.2.	Дослідження електронної структури $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$	271
6.7.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних характеристик $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$	272
6.7.4.	Дослідження магнітних характеристик $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$	275
6.8.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Er_xNiSn$</i>	276
6.8.1.	Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}Er_xNiSn$	276
6.8.2.	Дослідження електронної структури $Zr_{1-x}Er_xNiSn$	278
6.8.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних характеристик $Zr_{1-x}Er_xNiSn$	280
6.8.4.	Дослідження магнітних характеристик $Zr_{1-x}Er_xNiSn$	283
6.9.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$</i>	284
6.9.1.	Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$	284
6.9.2.	Моделювання електронної структури $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$	286
6.9.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних характеристик $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$	288
6.9.4.	Дослідження магнітних характеристик $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$	291
6.10.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Lu_xNiSn$</i>	293
6.10.1.	Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}Lu_xNiSn$	293
6.10.2.	Моделювання енергетичних характеристик $Zr_{1-x}Lu_xNiSn$	294
6.10.3.	Дослідження магнітних характеристик $Zr_{1-x}Lu_xNiSn$	295
6.11.	<i>Критерій розчинності атомів рідкісноземельних металів у кристалічній структурі пів-Гейслерової фази $ZrNiSn$</i>	296
6.12.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}V_xNiSn$</i>	298
6.12.1.	Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}V_xNiSn$	299
6.12.2.	Моделювання електронної структури $Zr_{1-x}V_xNiSn$	300
6.12.3.	Дослідження кінетичних та енергетичних характеристик $Zr_{1-x}V_xNiSn$	301
6.12.4.	Моделювання структурних та енергетичних характеристик термочутливих матеріалів $Zr_{1-x}V_xNiSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	305
6.13.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$</i>	308
6.13.1.	Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$	308
6.13.2.	Моделювання енергетичних характеристик $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$	310
6.13.3.	Дослідження електрокінетичних характеристик $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$	312
6.13.4.	Дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$	313

6.14.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Mo_xNiSn$</i>	314
6.14.1.	Моделювання енергетичних характеристик $Zr_{1-x}Mo_xNiSn$	314
6.14.2.	Дослідження електрокінетичних та магнітних характеристик $Zr_{1-x}Mo_xNiSn$	315
6.15.	<i>Термочутливі матеріали, отримані легуванням пів-Гейслерової фази $ZrNiSn$ 3d- та 4d-металами M шляхом заміщення атомів Ni: $M = V, Cr, Mn, Fe, Co, Cu, Rh$</i>	316
6.16.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}V_xSn$</i>	317
6.16.1.	Дослідження кристалічної та електронної структур $ZrNi_{1-x}V_xSn$	317
6.16.2.	Дослідження кінетичних та енергетичних характеристик $ZrNi_{1-x}V_xSn$	320
6.17.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}Cr_xSn$</i>	324
6.17.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNi_{1-x}Cr_xSn$	324
6.17.2.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Cr_xSn$	324
6.17.3.	Дослідження електрокінетичних характеристик $ZrNi_{1-x}Cr_xSn$	325
6.18.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$</i>	326
6.18.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$	326
6.18.2.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$	327
6.18.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних характеристик $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$	328
6.18.4.	Дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$	332
6.19.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$</i>	333
6.19.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$	333
6.19.2.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$ для упорядкованого варіанта структури	334
6.19.3.	Дослідження кінетичних та енергетичних характеристик $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$	335
6.19.4.	Дослідження магнітних характеристик $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$	338
6.19.5.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$ для різних варіантів входження атомів Fe до структури сполуки $ZrNiSn$	339
6.20.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}Co_xSn$</i>	341
6.20.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNi_{1-x}Co_xSn$	341
6.20.2.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Co_xSn$	342
6.20.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних характеристик $ZrNi_{1-x}Co_xSn$	343
6.21.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}Cu_xSn$</i>	350
6.21.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNi_{1-x}Cu_xSn$	350
6.21.2.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Cu_xSn$	350
6.21.3.	Дослідження кінетичних характеристик $ZrNi_{1-x}Cu_xSn$	351
6.22.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}Rh_xSn$</i>	353
6.22.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNi_{1-x}Rh_xSn$	355
6.22.2.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Rh_xSn$	356
6.22.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних характеристик $ZrNi_{1-x}Rh_xSn$	357
6.22.4.	Дослідження термодинамічних характеристик $ZrNi_{1-x}Rh_xSn$	362
6.22.5.	Моделювання енергетичних характеристик термочутливих матеріалів $ZrNi_{1-x}Rh_xSn$ з урахуванням результатів термодинамічних розрахунків	363

6.23.	<i>Термочутливі матеріали, отримані легуванням пів-Гейслерової фази ZrNiSn р-металами шляхом заміщення атомів Sn: M = Ga, In, Sb та Ві Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину ZrNiSn_{1-x}Ga_x</i>	367
6.23.1.	Дослідження структурних та термодинамічних характеристик ZrNiSn _{1-x} Ga _x	369
6.23.2.	Моделювання електронної структури ZrNiSn _{1-x} Ga _x	370
6.23.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних характеристик ZrNiSn _{1-x} Ga _x	372
6.23.4.	Моделювання структурних та енергетичних характеристик термочутливих матеріалів ZrNiSn _{1-x} Ga _x з урахуванням результатів кінетичних та магнітних досліджень	379
6.24.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину ZrNiSn_{1-x}In_x</i>	381
6.24.1.	Дослідження кристалічної структури ZrNiSn _{1-x} In _x	381
6.24.2.	Моделювання енергетичних та термодинамічних характеристик ZrNiSn _{1-x} In _x	383
6.24.3.	Дослідження кінетичних та енергетичних характеристик ZrNiSn _{1-x} In _x	384
6.24.4.	Дослідження магнітних характеристик ZrNiSn _{1-x} In _x	388
6.24.5.	Моделювання структурних та енергетичних характеристик термочутливих матеріалів ZrNiSn _{1-x} In _x з урахуванням результатів кінетичних та магнітних досліджень	389
6.24.6.	Визначення енергетичних параметрів повністю компенсованого напівпровідника на прикладі твердого розчину ZrNiSn _{1-x} In _x	390
6.25.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину ZrNiSn_{1-x}Sb_x</i>	392
6.25.1.	Дослідження структурних характеристик ZrNiSn _{1-x} Sb _x	392
6.25.2.	Моделювання електронної структури, кінетичних та термодинамічних характеристик ZrNiSn _{1-x} Sb _x	393
6.25.3.	Дослідження кінетичних та енергетичних характеристик ZrNiSn _{1-x} Sb _x	394
6.25.4.	Дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності ZrNiSn _{1-x} Sb _x	396
6.26.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину ZrNiSn_{1-x}Bi_x</i>	396
6.26.1.	Дослідження структурних характеристик ZrNiSn _{1-x} Bi _x	396
6.26.2.	Моделювання електронної структури ZrNiSn _{1-x} Bi _x	398
6.26.3.	Дослідження кінетичних, енергетичних та магнітних характеристик ZrNiSn _{1-x} Bi _x	399
6.26.4.	Дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності ZrNiSn _{1-x} Bi _x	402
РОЗДІЛ 7	<i>Термочутливі матеріали на основі фази пів-Гейслера HfNiSn</i>	403
7.1.	<i>Загальні зауваження</i>	403
7.2.	<i>Дослідження хімічного складу та особливостей кристалічної і електронної структур сполуки HfNiSn</i>	404
7.2.1.	Рентгеноспектральний та рентгеноструктурний аналіз сплавів	404
7.2.2.	Дослідження електронної структури n-HfNiSn	408
7.2.3.	Дослідження електрофізичних та магнітних властивостей n-HfNiSn	410
7.3.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину Hf_{1-x}Lu_xNiSn</i>	413
7.3.1.	Особливості кристалічної структури Hf _{1-x} Lu _x NiSn	413
7.3.2.	Дослідження електронної структури та магнітних характеристик Hf _{1-x} Lu _x NiSn	415
7.3.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних характеристик Hf _{1-x} Lu _x NiSn	418
7.3.4.	Моделювання структурних та енергетичних характеристик термочутливих матеріалів Hf _{1-x} Lu _x NiSn з урахуванням результатів кінетичних досліджень	422
7.4.	<i>Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину Hf_{1-x}Y_xNiSn</i>	424

7.4.1.	Особливості кристалічної структури $Hf_{1-x}Y_xNiSn$	424
7.4.2.	Дослідження електронної структури та магнітних характеристик $Hf_{1-x}Y_xNiSn$	425
7.4.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних характеристик $Hf_{1-x}Y_xNiSn$	427
7.5.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Hf_{1-x}Tm_xNiSn$	430
7.5.1.	Особливості кристалічної структури $Hf_{1-x}Tm_xNiSn$	430
7.5.2.	Дослідження електронної структури $Hf_{1-x}Tm_xNiSn$	432
7.5.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних характеристик $Hf_{1-x}Tm_xNiSn$	434
7.5.4.	Моделювання структурних та енергетичних характеристик термочутливих матеріалів $Hf_{1-x}Tm_xNiSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	438
7.6.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Hf_{1-x}Er_xNiSn$	440
7.6.1.	Дослідження кристалічної структури $Hf_{1-x}Er_xNiSn$	441
7.6.2.	Дослідження електронної структури $Hf_{1-x}Er_xNiSn$	442
7.6.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних характеристик $Hf_{1-x}Er_xNiSn$	443
7.6.4.	Моделювання структурних та енергетичних характеристик термочутливих матеріалів $Hf_{1-x}Er_xNiSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	446
7.7.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $HfNi_{1-x}Ru_xSn$	447
7.7.1.	Дослідження структурних та термодинамічних характеристик $HfNi_{1-x}Ru_xSn$	448
7.7.2.	Дослідження електронної структури $HfNi_{1-x}Ru_xSn$	449
7.7.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних характеристик $HfNi_{1-x}Ru_xSn$	449
7.7.4.	Моделювання структурних та енергетичних характеристик $HfNi_{1-x}Ru_xSn$ з урахуванням результатів експериментальних досліджень	453
7.8.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $HfNi_{1-x}Rh_xSn$	455
7.8.1.	Дослідження кристалічної структури $HfNi_{1-x}Rh_xSn$	455
7.8.2.	Моделювання енергетичних та термодинамічних характеристик $HfNi_{1-x}Rh_xSn$	456
7.8.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних характеристик $HfNi_{1-x}Rh_xSn$	458
7.8.4.	Моделювання структурних та енергетичних характеристик $HfNi_{1-x}Rh_xSn$ з урахуванням результатів експериментальних досліджень	461
7.9.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $HfNi_{1-x}Co_xSn$	462
7.9.1.	Дослідження структурних та термодинамічних характеристик $HfNi_{1-x}Co_xSn$	463
7.9.2.	Дослідження електронної структури та магнітних характеристик $HfNi_{1-x}Co_xSn$	465
7.9.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних характеристик $HfNi_{1-x}Co_xSn$	466
7.9.3.1.	Дослідження зразків $HfNi_{1-x}Co_xSn$ серії № 1	466
7.9.3.2.	Дослідження зразків $HfNi_{1-x}Co_xSn$ серії № 2	468
7.10.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $HfNiSn_{1-x}Sb_x$	472
7.10.1.	Дослідження структурних характеристик $HfNiSn_{1-x}Sb_x$	472
7.10.2.	Дослідження електронної структури і магнітних характеристик $HfNiSn_{1-x}Sb_x$	474
7.10.3.	Дослідження електрокінетичних і енергетичних характеристик $HfNiSn_{1-x}Sb_x$	477
7.10.4.	Дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності $HfNiSn_{1-x}Sb_x$	479
РОЗДІЛ 8	Термочутливі матеріали на основі фаз пів-Гейслера $TiCoSb$, $VFeSb$, $ZrCoSb$ та $RNiSb$ ($R=Gd, Dy, Er, Lu$)	480
8.1.	Термочутливі матеріали на основі сполуки $TiCoSb$	480
8.1.1.	Дослідження особливостей кристалічної структури та хімічного складу сплавів сполуки $TiCoSb$	480

8.1.1.1.	Дослідження особливостей електронної структури TiCoSb	482
8.1.1.2.	Дослідження кінетичних та магнітних характеристик TiCoSb	484
8.1.2.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}V_xCoSb$	487
8.1.2.1.	Дослідження структурних характеристик $Ti_{1-x}V_xCoSb$	487
8.1.2.2.	Моделювання електронної структури $Ti_{1-x}V_xCoSb$	490
8.1.2.3.	Дослідження кінетичних та енергетичних характеристик $Ti_{1-x}V_xCoSb$	493
8.1.3.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}Mo_xCoSb$	497
8.1.3.1.	Особливості кристалічної структури $Ti_{1-x}Mo_xCoSb$	497
8.1.3.2.	Моделювання електронної структури $Ti_{1-x}Mo_xCoSb$	499
8.1.3.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних характеристик $Ti_{1-x}Mo_xCoSb$	500
8.1.4.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}Sc_xCoSb$	505
8.1.4.1.	Дослідження кристалічної структури $Ti_{1-x}Sc_xCoSb$	505
8.1.4.2.	Моделювання електронної структури $Ti_{1-x}Sc_xCoSb$	508
8.1.4.3.	Дослідження магнітної сприйнятливості $Ti_{1-x}Sc_xCoSb$	510
8.1.4.4.	Дослідження кінетичних та енергетичних характеристик $Ti_{1-x}Sc_xCoSb$	510
8.1.4.5.	Особливості електронної та кристалічної структур TiCoSb	515
8.1.5.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiCo_{1-x}Ni_xSb$	517
8.1.5.1.	Дослідження кристалічної структури $TiCo_{1-x}Ni_xSb$	518
8.1.5.2.	Моделювання електронної структури $TiCo_{1-x}Ni_xSb$	520
8.1.5.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних характеристик $TiCo_{1-x}Ni_xSb$	522
8.1.5.4.	Дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності $TiCo_{1-x}Ni_xSb$	525
8.1.6.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiCo_{1-x}Cu_xSb$	526
8.1.6.1.	Особливості структурних характеристик $TiCo_{1-x}Cu_xSb$	526
8.1.6.2.	Моделювання електронної структури $TiCo_{1-x}Cu_xSb$	529
8.1.6.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних характеристик $TiCo_{1-x}Cu_xSb$	530
8.2.	<i>Дослідження структурних, термодинамічних, електрокінетичних, енергетичних та магнітних характеристик фази пів-Гейслера VFeSb</i>	533
8.2.1.	Особливості структурних та енергетичних характеристик сполуки VFeSb	533
8.2.1.1.	Дослідження особливостей структури, магнітних властивостей сполуки VFeSb та фазових рівноваг у системі V-Fe-Sb	534
8.2.1.2.	Дослідження кінетичних та енергетичних характеристик сполуки VFeSb	536
8.2.1.3.	Уточнення моделі кристалічної структури VFeSb	537
8.2.2.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $V_{1-x}Ti_xFeSb$	538
8.2.2.1.	Особливості структурних характеристик $V_{1-x}Ti_xFeSb$	538
8.2.2.2.	Моделювання електронної структури $V_{1-x}Ti_xFeSb$	540
8.2.2.3.	Дослідження кінетичних та енергетичних характеристик $V_{1-x}Ti_xFeSb$	542
8.2.2.4.	Моделювання кристалічної та електронної структур $V_{1-x}Ti_xFeSb$ з урахуванням результатів електрокінетичних досліджень	545
8.2.2.5.	Коефіцієнт термоелектричної потужності $V_{1-x}Ti_xFeSb$	547
8.2.3.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $VFe_{1-x}Ti_xSb$	548
8.2.3.1.	Особливості структурних характеристик $VFe_{1-x}Ti_xSb$	548
8.2.3.2.	Дослідження кінетичних та енергетичних характеристик $V_{1-x}Ti_xFeSb$	549
8.2.3.3.	Моделювання кристалічної та електронної структур $V_{1-x}Ti_xFeSb$ з урахуванням результатів електрокінетичних досліджень	552

8.2.3.4.	Коефіцієнт термоелектричної потужності $V_{1-x}Ti_xFeSb$	554
8.3.	<i>Термочутливі матеріали на основі фази пів-Гейслера $ZrCoSb$</i>	554
8.3.1.	Дослідження особливостей структури сполуки $ZrCoSb$ та фазових рівноваг у системі $Zr-Co-Sb$	555
8.3.2.	Моделювання енергетичних характеристик $Zr_{1+x}Co_{1-x}Sb$	555
8.3.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних характеристик $Zr_{1+x}Co_{1-x}Sb$	556
8.3.4.	Моделювання кристалічної та електронної структур $Zr_{1+x}Co_{1-x}Sb$ з урахуванням результатів електрокінетичних досліджень	558
8.4.	<i>Термочутливі матеріали на основі фаз напів-Гейслера $RNiSb$ ($R = Gd, Dy, Er, Lu$)</i>	560
8.4.1.	Структурні дослідження сполук $RNiSb$	561
8.4.2.	Дослідження електронної структури сполук $RNiSb$	562
8.4.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних характеристик сполук $RNiSb$ ($R = Gd, Dy, Lu$)	563
8.4.4.	Уточнення моделей кристалічної та електронної структур сполук $RNiSb$ на прикладі $LuNiSb$	565
8.4.5.	Термочутливі матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Er_{1-x}Zr_xNiSb$	567
8.4.5.1.	Структурні дослідження $Er_{1-x}Zr_xNiSb$	568
8.4.5.2.	Дослідження кінетичних, енергетичних та магнітних характеристик матеріалу $Er_{1-x}Zr_xNiSb$	569
РОЗДІЛ 9	Термоперетворювачі на основі досліджених термочутливих матеріалів	573
ПЕРЕЛІК ЛІТЕРАТУРНИХ ПОСИЛАНЬ		582
ПРАКТИЧНИЙ ДОРОБОК		608