

ЗМІСТ

ПЕРЕДМОВА	13
РОЗДІЛ 1 Особливості кристалічної структури термоелектричних матеріалів на основі фаз пів-Гейслера	15
1.1. Фази пів-Гейслера як перспективні термоелектричні матеріали	15
1.2. Кристалічна структура та елементний склад фаз пів-Гейслера	16
1.3. Концепція дослідження термоелектричних матеріалів на основі фаз пів-Гейслера	19
1.4. Дослідження кристалохімічної моделі утворення сполук СТ MgAgAs	21
1.5. Дослідження квантовохімічної моделі утворення сполук фаз пів-Гейслера	24
РОЗДІЛ 2 Фізичні основи виникнення термоелектрорушійної сили та особливості механізмів електропровідності термоелектричних матеріалів на основі фаз пів-Гейслера	32
2.1. Історичні аспекти відкриття явища термоелектрики	32
2.2. Основні термодинамічні рівняння	32
2.3. Фізична природа термоелектрорушійної сили	33
2.4. Шляхи оптимізації властивостей термоелектричних матеріалів	35
2.5. Особливості механізмів електропровідності термоелектричних матеріалів на основі легованих та компенсованих напівпровідників	38
2.5.1. Структура одиничних домішкових станів напівпровідників	38
2.5.2. Локалізація електронних станів легованих напівпровідників	39
2.5.3. Перехід Андерсона	39
2.5.4. Механізми електропровідності легованих напівпровідників	40
РОЗДІЛ 3 Термоелектричні матеріали на основі фази пів-Гейслера TiNiSn	43
3.1. Зауваження до результатів розділу	43
3.2. Особливості структурних, кінетичних та енергетичних властивостей сполуки TiNiSn	44
3.2.1. Дослідження особливостей кристалічної структури та хімічного складу сполуки TiNiSn	44
3.2.2. Дослідження електронної структури сполуки TiNiSn	51
3.2.3. Дослідження електрофізичних та магнітних властивостей TiNiSn	54
3.3. Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$	56
3.3.1. Дослідження кристалічної структури $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$	56
3.3.2. Дослідження електронної структури $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$	57
3.3.3. Дослідження електрофізичних властивостей $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$	59
3.3.4. Моделювання структурних властивостей термоелектричних матеріалів $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	62
3.4. Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}Y_xNiSn$	62
3.4.1. Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $Ti_{1-x}Y_xNiSn$	62
3.4.2. Дослідження електронної структури та магнітних властивостей $Ti_{1-x}Y_xNiSn$	64
3.4.3. Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Ti_{1-x}Y_xNiSn$	66
3.5. Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}Sc_xNiSn$	70
3.5.1. Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $Ti_{1-x}Sc_xNiSn$	70
3.5.2. Дослідження електронної структури $Ti_{1-x}Sc_xNiSn$	71
3.5.3. Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $Ti_{1-x}Sc_xNiSn$	72
3.6. Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}Al_xNiSn$	75

3.6.1.	<i>Дослідження структурних властивостей $Ti_{1-x}Al_xNiSn$</i>	75
3.6.2.	<i>Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Ti_{1-x}Al_xNiSn$</i>	78
3.7.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}V_xNiSn$	82
3.7.1.	<i>Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $Ti_{1-x}V_xNiSn$</i>	82
3.7.2.	<i>Дослідження електронної структури $Ti_{1-x}V_xNiSn$</i>	84
3.7.3.	<i>Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Ti_{1-x}V_xNiSn$</i>	85
3.7.4.	<i>Коефіцієнт термоелектричної потужності Z^* $Ti_{1-x}V_xNiSn$</i>	87
3.8.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}Nb_xNiSn$	87
3.8.1.	<i>Дослідження структурних властивостей $Ti_{1-x}Nb_xNiSn$</i>	88
3.8.2.	<i>Моделювання електронної структури $Ti_{1-x}Nb_xNiSn$</i>	89
3.8.3.	<i>Дослідження електрокінетичних властивостей $Ti_{1-x}Nb_xNiSn$</i>	90
3.8.4.	<i>Дослідження магнітних властивостей $Ti_{1-x}Nb_xNiSn$</i>	92
3.8.5.	<i>Дослідження термоелектричних властивостей $Ti_{1-x}Nb_xNiSn$</i>	92
3.9.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiNi_{1-x}V_xSn$	94
3.9.1.	<i>Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $TiNi_{1-x}V_xSn$</i>	94
3.9.2.	<i>Дослідження електронної структури $TiNi_{1-x}V_xSn$</i>	96
3.9.3.	<i>Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $TiNi_{1-x}V_xSn$</i>	97
3.9.4.	<i>Моделювання структурних властивостей термоелектричних матеріалів $TiNi_{1-x}V_xSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень</i>	99
3.9.5.	<i>Коефіцієнт термоелектричної потужності Z^* $TiNi_{1-x}V_xSn$</i>	101
3.10.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiNi_{1-x}Co_xSn$	102
3.10.1.	<i>Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $TiNi_{1-x}Co_xSn$</i>	102
3.10.2.	<i>Дослідження електронної структури $TiNi_{1-x}Co_xSn$</i>	104
3.10.3.	<i>Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $TiNi_{1-x}Co_xSn$</i>	106
3.10.4.	<i>Моделювання структурних та енергетичних властивостей $TiNi_{1-x}Co_xSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень</i>	109
3.11.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiNi_{1-x}Cu_xSn$	111
3.11.1.	<i>Дослідження структурних властивостей $TiNi_{1-x}Cu_xSn$</i>	111
3.11.2.	<i>Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $TiNi_{1-x}Cu_xSn$</i>	113
3.12.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiNi_{1-x}Ag_xSn$	116
3.12.1.	<i>Дослідження особливостей кристалічної структури $TiNi_{1-x}Ag_xSn$</i>	116
3.12.2.	<i>Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $TiNi_{1-x}Ag_xSn$</i>	117
3.13.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiNi_{1-x}Rh_xSn$	120
3.13.1.	<i>Дослідження кристалічної та електронної структур $TiNi_{1-x}Rh_xSn$</i>	121
3.13.2.	<i>Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $TiNi_{1-x}Rh_xSn$</i>	122
3.14.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiNiSn_{1-x}In_x$	127
3.14.1.	<i>Дослідження кристалічної структури $TiNiSn_{1-x}In_x$</i>	127
3.14.2.	<i>Дослідження електронної структури $TiNiSn_{1-x}In_x$</i>	128
3.14.3.	<i>Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $TiNiSn_{1-x}In_x$</i>	129
3.14.4.	<i>Моделювання структурних та енергетичних властивостей $TiNiSn_{1-x}In_x$ з урахуванням результатів кінетичних та магнітних досліджень</i>	133

3.15.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$	136
3.15.1.	Дослідження кристалічної структури $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$	136
3.15.2.	Дослідження електронної структури $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$	137
3.15.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$	138
3.15.4.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	142
РОЗДІЛ 4	Термоелектричні матеріали на основі фази пів-Гейслера ZrNiSn	144
4.1.	Особливості структурних та енергетичних властивостей сплавів сполуки ZrNiSn	144
4.1.2.	Дослідження особливостей електронної структури ZrNiSn	149
4.1.2.1.	«Апріорне легування» ZrNiSn донорами як результат часткового заміщення у позиції 4a атомів Zr на Ni	149
4.1.3.	Дослідження кінетичних та магнітних властивостей ZrNiSn	154
4.1.4.	«Апріорне легування» ZrNiSn донорами як результат акумулювання атомів Ni у тетраедричних порожнинах структури	155
4.1.5.	Дослідження структурних, енергетичних, кінетичних та магнітних властивостей твердого розчину $(\text{Zr}_{1-y}\text{Ni}_y)\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}$	157
4.1.5.1.	Особливості мікроструктури та фазового складу $(\text{Zr}_{1-y}\text{Ni}_y)\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}$	158
4.1.5.2.	Дослідження кристалічної структури $(\text{Zr}_{1-y}\text{Ni}_y)\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}$	159
4.1.5.3.	Дослідження електронної структури $(\text{Zr}_{1-y}\text{Ni}_y)\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}$	162
4.1.6.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $\text{ZrNi}_{1+x}\text{Sn}$	165
4.1.7.	Коефіцієнт термоелектричної потужності $\text{ZrNi}_{1+x}\text{Sn}$	168
4.2.	Термоелектричні матеріали, отримані легуванням сполуки ZrNiSn рідкісноземельними та 3d- (V) і 4d-металами (Nb, Mo). Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{Zr}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$	169
4.2.1.	Дослідження структурних властивостей $\text{Zr}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$	169
4.2.2.	Особливості електронної структури $\text{Zr}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$	172
4.2.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{Zr}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$	175
4.2.4.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей термоелектричних матеріалів $\text{Zr}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	179
4.3.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSn}$	185
4.3.1.	Дослідження структурних властивостей $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSn}$	185
4.3.2.	Дослідження електронної структури $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSn}$	187
4.3.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSn}$	188
4.4.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{Zr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{NiSn}$	192
4.4.1.	Дослідження структурних властивостей $\text{Zr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{NiSn}$	193
4.4.2.	Дослідження магнітного стану атомів Ce у $\text{Zr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{NiSn}$	194
4.4.3.	Дослідження електронної структури $\text{Zr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{NiSn}$	194
4.4.4.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{Zr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{NiSn}$	196
4.4.5.	Коефіцієнт термоелектричної потужності $\text{Zr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{NiSn}$	199
4.5.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{Zr}_{1-x}\text{Nd}_x\text{NiSn}$	200
4.5.1.	Особливості кристалічної структури $\text{Zr}_{1-x}\text{Nd}_x\text{NiSn}$	200
4.5.2.	Дослідження електронної структури $\text{Zr}_{1-x}\text{Nd}_x\text{NiSn}$	201

4.6.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Dy_xNiSn$	203
4.6.1.	<i>Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}Dy_xNiSn$</i>	203
4.6.2.	<i>Дослідження електронної структури $Zr_{1-x}Dy_xNiSn$</i>	205
4.6.3.	<i>Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $Zr_{1-x}Dy_xNiSn$</i>	206
4.7.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$	211
4.7.1.	<i>Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$</i>	211
4.7.2.	<i>Дослідження електронної структури $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$</i>	213
4.7.3.	<i>Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$</i>	214
4.7.4.	<i>Дослідження магнітних властивостей $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$</i>	217
4.8.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Er_xNiSn$	218
4.8.1.	<i>Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}Er_xNiSn$</i>	218
4.8.2.	<i>Дослідження електронної структури $Zr_{1-x}Er_xNiSn$</i>	220
4.8.3.	<i>Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Zr_{1-x}Er_xNiSn$</i>	222
4.8.4.	<i>Дослідження магнітних властивостей $Zr_{1-x}Er_xNiSn$</i>	225
4.9.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$	226
4.9.1.	<i>Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$</i>	226
4.9.2.	<i>Моделювання електронної структури $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$</i>	228
4.9.3.	<i>Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$</i>	230
4.9.4.	<i>Дослідження магнітних властивостей $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$</i>	233
4.10.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Lu_xNiSn$	235
4.10.1.	<i>Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}Lu_xNiSn$</i>	235
4.10.2.	<i>Моделювання енергетичних властивостей $Zr_{1-x}Lu_xNiSn$</i>	236
4.10.3.	<i>Дослідження магнітних властивостей $Zr_{1-x}Lu_xNiSn$</i>	237
4.11.	Критерій розчинності атомів рідкісноземельних металів у кристалічній структурі пів-Гейслерової фази $ZrNiSn$	238
4.12.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Al_xNiSn$	240
4.12.1.	<i>Дослідження структурних властивостей $Zr_{1-x}Al_xNiSn$</i>	241
4.12.2.	<i>Моделювання електронної структури $Zr_{1-x}Al_xNiSn$</i>	243
4.12.3.	<i>Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $Zr_{1-x}Al_xNiSn$</i>	244
4.13.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}V_xNiSn$	249
4.13.1.	<i>Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}V_xNiSn$</i>	249
4.13.2.	<i>Моделювання електронної структури $Zr_{1-x}V_xNiSn$</i>	250
4.13.3.	<i>Дослідження кінетичних та енергетичних властивостей $Zr_{1-x}V_xNiSn$</i>	252
4.13.4.	<i>Моделювання структурних та енергетичних властивостей термоелектричних матеріалів $Zr_{1-x}V_xNiSn$ з урахуванням результатів електрокінетичних досліджень</i>	255
4.14.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$	258
4.14.1.	<i>Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$</i>	258
4.14.2.	<i>Моделювання енергетичних властивостей $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$</i>	260
4.14.3.	<i>Дослідження електрокінетичних властивостей $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$</i>	262
4.14.4.	<i>Дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$</i>	264

4.15.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Mo_xNiSn$	264
4.15.1.	Моделювання енергетичних властивостей $Zr_{1-x}Mo_xNiSn$	264
4.15.2.	Дослідження електрокінетичних та магнітних властивостей $Zr_{1-x}Mo_xNiSn$	265
4.16.	Термоелектричні матеріали, отримані легуванням пів-Гейслерової фази $ZrNiSn$ 3d- та 4d-металами М шляхом заміщення атомів Ni: $M = V, Cr, Mn, Fe, Co, Cu, Rh$	266
4.16.1.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}V_xSn$	267
4.16.1.1.	Дослідження кристалічної та електронної структур $ZrNi_{1-x}V_xSn$	267
4.16.1.2.	Дослідження кінетичних та енергетичних властивостей $ZrNi_{1-x}V_xSn$	270
4.16.2.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}Cr_xSn$	274
4.16.2.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNi_{1-x}Cr_xSn$	274
4.16.2.2.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Cr_xSn$	274
4.16.2.3.	Дослідження електрокінетичних властивостей $ZrNi_{1-x}Cr_xSn$	275
4.16.3.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$	276
4.16.3.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$	276
4.16.3.2.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$	277
4.16.3.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$	278
4.16.3.4.	Дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$	282
4.16.4.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$	283
4.16.4.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$	283
4.16.4.2.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$ для упорядкованого варіанта структури	284
4.16.4.3.	Дослідження кінетичних та енергетичних властивостей $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$	285
4.16.4.4.	Дослідження магнітних властивостей $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$	288
4.16.4.5.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$ для різних варіантів входження атомів Fe до структури сполуки $ZrNiSn$	289
4.16.5.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}Co_xSn$	291
4.16.5.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNi_{1-x}Co_xSn$	291
4.16.5.2.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Co_xSn$	292
4.16.5.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $ZrNi_{1-x}Co_xSn$	292
4.16.6.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}Cu_xSn$	299
4.16.6.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNi_{1-x}Cu_xSn$	299
4.16.6.2.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Cu_xSn$	300
4.16.6.3.	Дослідження кінетичних властивостей $ZrNi_{1-x}Cu_xSn$	301
4.16.7.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}Rh_xSn$	303
4.16.7.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNi_{1-x}Rh_xSn$	305
4.16.7.2.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Rh_xSn$	305
4.16.7.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $ZrNi_{1-x}Rh_xSn$	306
4.16.7.4.	Дослідження термодинамічних властивостей $ZrNi_{1-x}Rh_xSn$	311
4.16.7.5.	Моделювання енергетичних властивостей $ZrNi_{1-x}Rh_xSn$ з урахуванням результатів термодинамічних розрахунків	313

4.17.	Термоелектричні матеріали, отримані легуванням пів-Гейслерової фази ZrNiSn р-металами шляхом заміщення атомів Sn: M = Ga, In, Sb та Bi	317
4.17.1.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNiSn_{1-x}Ga_x$</i>	317
4.17.1.1.	Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $ZrNiSn_{1-x}Ga_x$	318
4.17.1.2.	Моделювання електронної структури $ZrNiSn_{1-x}Ga_x$	320
4.17.1.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $ZrNiSn_{1-x}Ga_x$	322
4.17.1.4.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей $ZrNiSn_{1-x}Ga_x$ з урахуванням результатів кінетичних та магнітних досліджень	328
4.17.2.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNiSn_{1-x}In_x$</i>	331
4.17.2.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNiSn_{1-x}In_x$	331
4.17.2.2.	Моделювання енергетичних та термодинамічних властивостей $ZrNiSn_{1-x}In_x$	332
4.17.2.3.	Дослідження кінетичних та енергетичних властивостей $ZrNiSn_{1-x}In_x$	333
4.17.2.4.	Дослідження магнітних властивостей $ZrNiSn_{1-x}In_x$	337
4.17.2.5.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей $ZrNiSn_{1-x}In_x$ з урахуванням результатів кінетичних та магнітних досліджень	338
4.17.2.6.	Визначення енергетичних параметрів повністю компенсованого напівпровідника на прикладі твердого розчину $ZrNiSn_{1-x}In_x$	339
4.17.3.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNiSn_{1-x}Sb_x$</i>	341
4.17.3.1.	Дослідження структурних властивостей $ZrNiSn_{1-x}Sb_x$	341
4.17.3.2.	Моделювання електронної структури, кінетичних та термодинамічних властивостей $ZrNiSn_{1-x}Sb_x$	342
4.17.3.3.	Дослідження кінетичних та енергетичних властивостей $ZrNiSn_{1-x}Sb_x$	343
4.17.3.4.	Дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності $ZrNiSn_{1-x}Sb_x$	345
4.17.4.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNiSn_{1-x}Bi_x$</i>	345
4.17.4.1.	Дослідження структурних властивостей $ZrNiSn_{1-x}Bi_x$	345
4.17.4.2.	Моделювання електронної структури $ZrNiSn_{1-x}Bi_x$	347
4.17.4.3.	Дослідження кінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $ZrNiSn_{1-x}Bi_x$	348
4.17.4.4.	Дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності $ZrNiSn_{1-x}Bi_x$	351
РОЗДІЛ 5	Термоелектричні матеріали на основі фази пів-Гейслера HfNiSn	352
5.1.	Загальні зауваження	352
5.2.	Дослідження хімічного складу та особливостей кристалічної і електронної структур сполуки HfNiSn	353
5.2.1.	<i>Рентгеноспектральний та рентгеноструктурний аналіз сплавів</i>	353
5.2.2.	<i>Дослідження електронної структури n-HfNiSn</i>	357
5.2.3.	<i>Дослідження електрофізичних та магнітних властивостей n-HfNiSn</i>	359
5.3.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Hf_{1-x}Lu_xNiSn$	362
5.3.1.	<i>Особливості кристалічної структури $Hf_{1-x}Lu_xNiSn$</i>	362
5.3.2.	<i>Дослідження електронної структури та магнітних властивостей $Hf_{1-x}Lu_xNiSn$</i>	364
5.3.3.	<i>Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Hf_{1-x}Lu_xNiSn$</i>	367
5.3.4.	<i>Моделювання структурних та енергетичних властивостей $Hf_{1-x}Lu_xNiSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень</i>	371
5.4.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Hf_{1-x}Y_xNiSn$	373

5.4.1.	Особливості кристалічної структури $Hf_{1-x}Y_xNiSn$	373
5.4.2.	Дослідження електронної структури та магнітних властивостей $Hf_{1-x}Y_xNiSn$	374
5.4.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Hf_{1-x}Y_xNiSn$	376
5.5.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Hf_{1-x}Tm_xNiSn$	379
5.5.1.	Особливості кристалічної структури $Hf_{1-x}Tm_xNiSn$	379
5.5.2.	Дослідження електронної структури $Hf_{1-x}Tm_xNiSn$	381
5.5.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Hf_{1-x}Tm_xNiSn$	383
5.5.4.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей $Hf_{1-x}Tm_xNiSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	387
5.6.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Hf_{1-x}Er_xNiSn$	389
5.6.1.	Дослідження кристалічної структури $Hf_{1-x}Er_xNiSn$	390
5.6.2.	Дослідження електронної структури $Hf_{1-x}Er_xNiSn$	391
5.6.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Hf_{1-x}Er_xNiSn$	392
5.6.4.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей $Hf_{1-x}Er_xNiSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	395
5.7.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Hf_{1-x}Nb_xNiSn$	396
5.7.1.	Дослідження структурних властивостей $Hf_{1-x}Nb_xNiSn$	397
5.7.2.	Моделювання електронної структури $Hf_{1-x}Nb_xNiSn$	399
5.7.3.	Дослідження електрокінетичних та магнітних властивостей $Hf_{1-x}Nb_xNiSn$	400
5.8.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $HfNi_{1-x}Ru_xSn$	403
5.8.1.	Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $HfNi_{1-x}Ru_xSn$	403
5.8.2.	Дослідження електронної структури $HfNi_{1-x}Ru_xSn$	404
5.8.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $HfNi_{1-x}Ru_xSn$	405
5.8.4.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей $HfNi_{1-x}Ru_xSn$ з урахуванням результатів експериментальних досліджень	408
5.9.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $HfNi_{1-x}Rh_xSn$	410
5.9.1.	Дослідження кристалічної структури $HfNi_{1-x}Rh_xSn$	410
5.9.2.	Моделювання енергетичних та термодинамічних властивостей $HfNi_{1-x}Rh_xSn$	411
5.9.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $HfNi_{1-x}Rh_xSn$	414
5.9.4.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей $HfNi_{1-x}Rh_xSn$ з урахуванням результатів експериментальних досліджень	417
5.10.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $HfNi_{1-x}Co_xSn$	418
5.10.1.	Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $HfNi_{1-x}Co_xSn$	418
5.10.2.	Дослідження електронної структури та магнітних властивостей $HfNi_{1-x}Co_xSn$	420
5.10.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $HfNi_{1-x}Co_xSn$	421
5.10.3.1.	Дослідження зразків $HfNi_{1-x}Co_xSn$ серії № 1	421
5.10.3.2.	Дослідження зразків $HfNi_{1-x}Co_xSn$ серії № 2	423
5.11.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $HfNi_{1-x}Cu_xSn$	427
5.11.1.	Дослідження структурних властивостей $HfNi_{1-x}Cu_xSn$	428
5.11.2.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $HfNi_{1-x}Cu_xSn$	428
5.12.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $HfNiSn_{1-x}Sb_x$	431

5.12.1.	Дослідження структурних властивостей $\text{HfNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$	431
5.12.2.	Дослідження електронної структури і магнітних властивостей $\text{HfNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$	433
5.12.3.	Дослідження електрокінетичних і енергетичних властивостей $\text{HfNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$	435
5.12.4.	Дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності $\text{HfNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$	437
РОЗДІЛ 6	Термоелектричні матеріали на основі фаз пів-Гейслера TiCoSb, VFeSb, ZrCoSb та RNiSb ($\text{R} = \text{Gd}, \text{Tm}, \text{Dy}, \text{Er}, \text{Lu}$)	439
6.1.	Термоелектричні матеріали на основі сполуки TiCoSb	439
6.1.1.	Дослідження особливостей кристалічної структури та хімічного складу сплавів сполуки TiCoSb	439
6.1.1.1.	Дослідження особливостей електронної структури TiCoSb	441
6.1.1.2.	Дослідження кінетичних та магнітних властивостей TiCoSb	443
6.1.2.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{CoSb}$	446
6.1.2.1.	Дослідження структурних властивостей $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{CoSb}$	446
6.1.2.2.	Моделювання електронної структури $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{CoSb}$	449
6.1.2.3.	Дослідження кінетичних та енергетичних властивостей $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{CoSb}$	452
6.1.3.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{Ti}_{1-x}\text{Mo}_x\text{CoSb}$	456
6.1.3.1.	Особливості кристалічної структури $\text{Ti}_{1-x}\text{Mo}_x\text{CoSb}$	456
6.1.3.2.	Моделювання електронної структури $\text{Ti}_{1-x}\text{Mo}_x\text{CoSb}$	458
6.1.3.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $\text{Ti}_{1-x}\text{Mo}_x\text{CoSb}$	459
6.1.4.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{Ti}_{1-x}\text{Sc}_x\text{CoSb}$	464
6.1.4.1.	Дослідження кристалічної структури $\text{Ti}_{1-x}\text{Sc}_x\text{CoSb}$	464
6.1.4.2.	Моделювання електронної структури $\text{Ti}_{1-x}\text{Sc}_x\text{CoSb}$	467
6.1.4.3.	Дослідження магнітної сприйнятливості $\text{Ti}_{1-x}\text{Sc}_x\text{CoSb}$	469
6.1.4.4.	Дослідження кінетичних та енергетичних властивостей $\text{Ti}_{1-x}\text{Sc}_x\text{CoSb}$	469
6.1.4.5.	Особливості електронної та кристалічної структур TiCoSb	474
6.1.5.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Sb}$	476
6.1.5.1.	Дослідження структурних властивостей $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Sb}$	477
6.1.5.2.	Моделювання електронної структури $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Sb}$	478
6.1.5.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Sb}$	480
6.1.6.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{TiCo}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$	484
6.1.6.1.	Дослідження структурних властивостей $\text{TiCo}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$	484
6.1.6.2.	Моделювання електронної структури $\text{TiCo}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$	486
6.1.6.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{TiCo}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$	487
6.1.7.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$	491
6.1.7.1.	Дослідження кристалічної структури $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$	491
6.1.7.2.	Моделювання електронної структури $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$	493
6.1.7.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$	495
6.1.7.4.	Дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$	499
6.1.8.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$	500
6.1.8.1.	Особливості структурних властивостей $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$	500
6.1.8.2.	Моделювання електронної структури $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$	503

6.1.8.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$	504
6.2.	Дослідження структурних, термодинамічних, електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей фази пів-Гейслера VFeSb	507
6.2.1.	<i>Особливості структурних та енергетичних властивостей VFeSb</i>	507
6.2.1.1.	Дослідження особливостей структури, магнітних властивостей сполуки VFeSb та фазових рівноваг у системі V-Fe-Sb	507
6.2.1.2.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей сполуки VFeSb	509
6.2.1.3.	Уточнення моделі кристалічної структури VFeSb	510
6.2.2.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$</i>	511
6.2.2.1.	Особливості структурних властивостей $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$	511
6.2.2.2.	Моделювання електронної структури $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$	513
6.2.2.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$	515
6.2.2.4.	Моделювання кристалічної та електронної структур $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$ з урахуванням результатів електрокінетичних досліджень	518
6.2.2.5.	Коефіцієнт термоелектричної потужності $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$	520
6.2.3.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{VFe}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$</i>	521
6.2.3.1.	Особливості структурних властивостей $\text{VFe}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$	521
6.2.3.2.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{VFe}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$	522
6.2.3.3.	Моделювання кристалічної та електронної структур $\text{VFe}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$ з урахуванням результатів електрокінетичних досліджень	525
6.2.3.4.	Коефіцієнт термоелектричної потужності $\text{VFe}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$	526
6.2.4.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{V}_{1-x}\text{Sc}_x\text{FeSb}$</i>	527
6.2.4.1.	Дослідження структурних властивостей $\text{V}_{1-x}\text{Sc}_x\text{FeSb}$	528
6.2.4.2.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{V}_{1-x}\text{Sc}_x\text{FeSb}$	528
6.2.4.3.	Коефіцієнт термоелектричної потужності $\text{V}_{1-x}\text{Sc}_x\text{FeSb}$	531
6.2.5.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{VFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$</i>	531
6.2.5.1.	Структурні дослідження твердого розчину $\text{VFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$	531
6.2.5.2.	Дослідження електрокінетичних властивостей $\text{VFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$	533
6.2.5.3.	Моделювання електронної структури $\text{VFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$	533
6.2.6.	<i>Термоелектричні матеріали на основі фази пів-Гейслера VFeSb за участі $\text{Mn, Cr, Co, Ni, Ta, Bi, Sn}$</i>	537
6.3.	Термоелектричні матеріали на основі фази пів-Гейслера ZrCoSb	538
6.3.1.	Дослідження особливостей структури сполуки ZrCoSb та фазових рівноваг у системі Zr-Co-Sb	538
6.3.2.	Моделювання енергетичних властивостей $\text{Zr}_{1+x}\text{Co}_{1-x}\text{Sb}$	539
6.3.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{Zr}_{1+x}\text{Co}_{1-x}\text{Sb}$	540
6.3.4.	Моделювання кристалічної та електронної структур $\text{Zr}_{1+x}\text{Co}_{1-x}\text{Sb}$ з урахуванням результатів електрокінетичних досліджень	541
6.4.	Термоелектричні матеріали на основі фаз напів-Гейслера RNiSb ($\text{R} = \text{Gd, Dy, Er, Tm, Lu}$)	544
6.4.1.	Структурні дослідження сполук RNiSb	544
6.4.2.	Дослідження електронної структури сполук RNiSb	545
6.4.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей сполук RNiSb ($\text{R} = \text{Gd, Dy, Lu}$)	546

6.4.4.	<i>Уточнення моделей кристалічної та електронної структур сполук RNiSb на прикладі LuNiSb</i>	549
6.4.5.	<i>Термoeлектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Er_{1-x}Zr_xNiSb$</i>	551
6.4.5.1.	Структурні дослідження $Er_{1-x}Zr_xNiSb$	551
6.4.5.2.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $Er_{1-x}Zr_xNiSb$	552
6.4.6.	<i>Термoeлектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Er_{1-x}Sc_xNiSb$</i>	555
6.4.6.1.	Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $Er_{1-x}Sc_xNiSb$	556
6.4.6.2.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Er_{1-x}Sc_xNiSb$	559
6.4.6.3.	Оптимізація кристалічної та електронної структур $-Er_{1-x}Sc_xNiSb$	562
6.4.7.	<i>Термoeлектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Tm_{1-x}V_xNiSb$</i>	564
6.4.7.1.	Дослідження термодинамічних та структурних властивостей твердого розчину $Tm_{1-x}V_xNiSb$	564
6.4.7.2.	Моделювання електронної структури $Tm_{1-x}V_xNiSb$ для упорядкованого варіанту кристалічної структури	567
6.4.7.3.	Моделювання електронної структури $Tm_{1-x}V_xNiSb$ для неупорядкованого варіанту кристалічної структури	569
6.4.7.4.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Tm_{1-x}V_xNiSb$	570
6.4.8.	<i>Термoeлектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Lu_{1-x}Sc_xNiSb$</i>	576
6.4.8.1.	Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $Lu_{1-x}Sc_xNiSb$	576
6.4.8.2.	Моделювання електронної структури $Lu_{1-x}Sc_xNiSb$	577
6.4.8.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $Lu_{1-x}Sc_xNiSb$	580
6.4.9.	<i>Термoeлектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$</i>	584
6.4.9.1.	Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$	585
6.4.9.2.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$	588
6.4.9.3.	Повторне уточнення кристалічної та електронної структур сполуки LuNiSb	592
6.4.9.4.	Моделювання електрокінетичних властивостей $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$	594
6.4.10.	<i>Термoeлектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Lu_{1-x}V_xNiSb$</i>	597
6.4.10.1.	Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $Lu_{1-x}V_xNiSb$	599
6.4.10.2.	Моделювання електронної структури $Lu_{1-x}V_xNiSb$	602
6.4.10.3.	Моделювання електрокінетичних властивостей $Lu_{1-x}V_xNiSb$	604
6.4.10.4.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $Lu_{1-x}V_xNiSb$	607
	ПЕРЕЛІК ЛІТЕРАТУРНИХ ПОСИЛАНЬ	612
	ПРАКТИЧНИЙ ДОРОБОК	623