

УДК 537.311.322

Кристалічна, електронна структури та електротранспортні властивості твердого розчину $ZrNiSn_{1-x}Bi_x$

Ромака В. В.¹, к.х.н., ст.викл. каф. ІМПФ

Стадник Ю. В.², к.х.н., пров.н.с.

Ромака Л. П.², к.х.н., пров.н.с.

Горинь А. М.², к.х.н., н.с.

¹ Національний університет «Львівська політехніка»

(вул. С. Бандери, 12, м. Львів, 79013, Україна)

² Львівський національний університет ім. Івана Франка

(вул. Кирила і Мефодія, 6, м. Львів, 79005, Україна)

Напівпровідникові сполуки зі структурою типу $MgAgAs$ (також відомі як напівгейслерові фази), зокрема, $MNiSn$ ($M = Ti, Zr, Hf$), належать до об'єктів, що інтенсивно досліджуються як перспективні матеріали для прямого перетворення теплової енергії в електричну. Одним із шляхів покращення термоелектричних характеристик матеріалу є легування. Заміщення Sn на Sb вже показало значне підвищення фактора термоелектричної потужності. Оскільки Bi належить до тієї самої групи що і Sb, передбачалося схоже чи навіть більше зростання. Для перевірки цього припущення сплави загальної формули $ZrNiSn_{1-x}Bi_x$ у концентраційному інтервалі $x = 0 - 0.1$ були синтезовані та відпалені за температури 1070 K протягом одного місяця. Одержані зразки були перевірені методами скануючої електронної спектроскопії і рентгенофазового аналізу та виявились чистими до складу $x = 0.08$. Зі зростанням вмісту Bi параметри елементарної комірки нелінійно зростають. Розрахунки зонної структури методом Корінгі-Кона-Ростокера в наближеннях когерентного потенціалу та локальної густини показали, що легування ZrNiSn атомами Bi зсуває рівень Фермі в глибину зони провідності. Концентраційна залежність густини електронних станів на рівні Фермі повторює характер залежності періодів елементарної – характерні максимуми та мінімуми при однакових значеннях x . Заміщення Sn на Bi не змінює електронний тип провідності, а значення коефіцієнта Зеєбека у всьому концентраційному інтервалі залишається приблизно однаковим. Мінімальні кількості Bi значно зменшують питомий електроопір зразків. Така поведінка коефіцієнта Зеєбека та питомого електроопору показала значне зростання фактора термоелектричної потужності у порівнянні з вихідною сполукою ZrNiSn та навіть більші значення, ніж у випадку легування атомами Sb.