

СТРУКТУРНІ, ЕНЕРГЕТИЧНІ, КІНЕТИЧНИХ ТА МАГНІТНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ТЕРМОМЕТРИЧНОГО МАТЕРІАЛУ $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$

Р. В. Крайовський¹, В.В. Ромака², О.В. Бовгира², Ю. М. Довгалюк²

¹Національний університет “Львівська політехніка”

²Львівський національний університет ім. І.Франка

Інтерметалічні напівпровідники $MNiSn$ (M - Ti, Zr, Hf) інтенсивно вивчаються у світових дослідницьких центрах на предмет їх використання у процесі вимірюванні температури. Легування інтерметалічних напівпровідників $MNiSn$ є одним із способів керування їх термометричними характеристиками. У роботі наведені результати особливостей кристалічної, електронної структур та електрофізичних досліджень як нелегованого напівпровідника $n-ZrNiSn$, так сильнолегованого атомами рідкісноземельного металу Ho. Таке легування супроводжується упорядкуванням структури, генерацією дефектів акцепторної природи та деформаціями елементарної комірки: у напрямках Ni–Zr(Ho) та Sn–Zr(Ho) діє деформація стиску, а у напрямі Sn–Ni – розтягу. При певній концентрації Ho ($x = 0,38$), коли закорочення відстаней Zr(Y)-Sn та Ni-Sn стають однаковими, структура типу MgAgAs перестає існувати. Розрахунок розподілу електронної густини та зонного спектру $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$ засвідчив дрейф рівня Фермі від дна зони провідності (в $n-ZrNiSn$) у напрямі валентної зони та її перетин при $x \approx 0.15$ (перехід Андерсона), що підтверджується експериментальними дослідженнями.

З температурних залежностей питомого електроопору, коефіцієнту термо-ЕРС визначені енергетичні характеристики, поведінка яких, у свою чергу, узгоджуються з результатами розрахунків (таблиця): значення енергій активації ε_1^ρ дають енергетичний зазор між рівнями Фермі та протікання, ε_1^α - значення амплітуди модуляції зон неперервних енергій, а значення енергій активації ε_3^ρ та ε_3^α , відповідно, сумірні із ступенем заповненості дрібномасштабної флуктуації та її амплітудою.

Таблиця. Концентраційні та енергетичні характеристики $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$

x	$N_A, \text{см}^{-3}$	$\varepsilon_1^\rho, \text{меВ}$	$\varepsilon_1^\alpha, \text{меВ}$	$\varepsilon_3^\rho, \text{меВ}$	$\varepsilon_3^\alpha, \text{меВ}$
0	-	28.9	44.6	1.6	11.5
0.005	$9.5 \cdot 10^{19}$	99.4	65.4	2.6	4.5
0.01	$1.9 \cdot 10^{20}$	151.4	203.6	6.8	3.1
0.02	$3.8 \cdot 10^{20}$	83.3	152.2	6.7	2.6
0.04	$7.6 \cdot 10^{20}$	18.0	43.5	2.6	1.9
0.06	$1.1 \cdot 10^{21}$	24.6	24.6	1.9	1.4
0.08	$1.5 \cdot 10^{21}$	12.5	7.3	1.2	0.7