

Анотація

Наведено результати досліджень нового класу термоелектричних матеріалів з високою ефективністю перетворення теплової енергії в електричну, отриманих легуванням напівпровідникових фаз пів-Гейслера TiNiSn, ZrNiSn, HfNiSn, TiCoSb, VFeSb, ZrCoSb та RNiSb (R – рідкісноземельний метал) акцепторними і/або донорними домішками, що дозволяє керувати положенням рівня Фермі, змінюючи значення електроопору, коефіцієнтів термо-ерс та теплопровідності. Дослідження структурних, термодинамічних, електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей термоелектричних матеріалів дозволило встановити особливості трансформацій їхніх кристалічної та електронної структур, механізмів електропровідності. Сформульовано та запроваджено фізичні принципи оптимізації властивостей фаз пів-Гейслера для отримання максимальних значень термоелектричної добротності. Зокрема, розроблено алгоритм керування властивостями термоелектричних матеріалів шляхом їхнього моделювання методами KKR (пакет AkaiKKR для потенціалу MJW) та FLAPW у межах теорії функціонала густини DFT (пакет Vienna Ab initio Simulation Package VASP v. 5.4.4) та циклічного корегуванням початкових умов розрахунків з параметрами експериментальних вимірювань. Для наукових працівників, аспірантів та студентів спеціальностей метрологія та інформаційно-вимірювальна техніка, матеріалознавство, мікро- та наносистемна техніка, прикладна фізика та наноматеріали.

Ключові слова: напівпровідник, рівень Фермі, термоелектрорушійна сила, електричний опір, коефіцієнт термо-ерс, електрони, вакансія, кінетичні властивості, термодинамічні властивості, кристалічна структура, електронна структура, теплопровідність.

Annotation

The results of research on a new class of thermoelectric materials with high efficiency of converting thermal energy into electrical energy, obtained by doping semi-Heusler semiconductor phases TiNiSn, ZrNiSn, HfNiSn, TiCoSb, VFeSb, ZrCoSb and RNiSb (R is a rare earth metal) with acceptor and/or donor impurities are presented, which allows controlling the position of the Fermi level, changing the values of electrical resistance, thermopower coefficients and thermal conductivity. The study of structural, thermodynamic, electrokinetic, energy and magnetic properties of thermoelectric materials made it possible to establish the features of transformations of their crystal and electronic structures, mechanisms of electrical conductivity. Physical principles for optimizing the properties of semi-Heusler phases to obtain maximum values of thermoelectric figure of merit are formulated and implemented. In particular, an algorithm for controlling the properties of thermoelectric materials has been developed by modeling them using the KKR methods (AkaiKKR package for the MJW potential) and FLAPW within the framework of the density functional theory DFT (Vienna Ab initio Simulation Package VASP v. 5.4.4) and cyclic correction of the initial conditions of calculations with the parameters of experimental measurements. For researchers, postgraduates and students of the specialties of metrology and information and measurement technology, materials science, micro- and nanosystem technology, applied physics and nanomaterials.

Keywords: semiconductor, Fermi level, thermoelectromotive force, electrical resistance, thermoEMF coefficient, electrons, vacancy, kinetic properties, thermodynamic properties, crystal structure, electronic structure, thermal conductivity.