

ЗМІСТ	3
ПЕРЕДМОВА	13
РОЗДІЛ 1 Особливості кристалічної структури термоелектричних матеріалів на основі фаз пів-Гейслера	16
1.1. <i>Фази пів-Гейслера як перспективні термоелектричні матеріали</i>	16
1.2. <i>Кристалічна структура та елементний склад фаз пів-Гейслера</i>	17
1.3. <i>Концепція дослідження термоелектричних матеріалів на основі фаз пів-Гейслера</i>	20
1.4. <i>Дослідження кристалохімічної моделі утворення сполук $CT\ MgAgAs$</i>	22
1.5. <i>Дослідження квантової хімічної моделі утворення сполук фаз пів-Гейслера</i>	25
РОЗДІЛ 2 Фізичні основи виникнення термоелектрорушійної сили та особливості механізмів електропровідності термоелектричних матеріалів на основі фаз пів-Гейслера	33
2.1. <i>Історичні аспекти відкриття явища термоелектрики</i>	33
2.2. <i>Основні термодинамічні рівняння</i>	33
2.3. <i>Фізична природа термоелектрорушійної сили</i>	34
2.4. <i>Шляхи оптимізації властивостей термоелектричних матеріалів</i>	36
2.5. <i>Особливості механізмів електропровідності термоелектричних матеріалів на основі легованих та компенсованих напівпровідників</i>	39
2.5.1. Структура одиничних домішкових станів напівпровідників	39
2.5.2. Локалізація електронних станів легованих напівпровідників	40
2.5.3. Перехід Андерсона	40
2.5.4. Механізми електропровідності легованих напівпровідників	41
РОЗДІЛ 3 Термоелектричні матеріали на основі фази пів-Гейслера $TiNiSn$	44
3.1. <i>Зауваження до результатів розділу</i>	44
3.2. <i>Особливості структурних, кінетичних та енергетичних властивостей сполуки $TiNiSn$</i>	45
3.2.1. Дослідження особливостей кристалічної структури та хімічного складу сполуки $TiNiSn$	45
3.2.2. Дослідження електронної структури сполуки $TiNiSn$	52
3.2.3. Дослідження електрофізичних та магнітних властивостей $TiNiSn$	55
3.3. <i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$</i>	57
3.3.1. Дослідження кристалічної структури $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$	57
3.3.2. Дослідження електронної структури $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$	58
3.3.3. Дослідження електрофізичних властивостей $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$	60
3.3.4. Моделювання структурних властивостей термоелектричних матеріалів $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	63
3.4. <i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}Y_xNiSn$</i>	63
3.4.1. Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $Ti_{1-x}Y_xNiSn$	63
3.4.2. Дослідження електронної структури та магнітних властивостей $Ti_{1-x}Y_xNiSn$	65
3.4.3. Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Ti_{1-x}Y_xNiSn$	67
3.5. <i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}Sc_xNiSn$</i>	71
3.5.1. Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $Ti_{1-x}Sc_xNiSn$	71
3.5.2. Дослідження електронної структури $Ti_{1-x}Sc_xNiSn$	72
3.5.3. Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $Ti_{1-x}Sc_xNiSn$	73
3.6. <i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}Al_xNiSn$</i>	76

3.6.1.	Дослідження структурних властивостей $Ti_{1-x}Al_xNiSn$	76
3.6.2.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Ti_{1-x}Al_xNiSn$	79
3.7.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}V_xNiSn$	83
3.7.1.	Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $Ti_{1-x}V_xNiSn$	83
3.7.2.	Дослідження електронної структури $Ti_{1-x}V_xNiSn$	85
3.7.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Ti_{1-x}V_xNiSn$	86
3.7.4.	Коефіцієнт термоелектричної потужності Z^* $Ti_{1-x}V_xNiSn$	88
3.8.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Ti_{1-x}Nb_xNiSn$	88
3.8.1.	Дослідження структурних властивостей $Ti_{1-x}Nb_xNiSn$	89
3.8.2.	Моделювання електронної структури $Ti_{1-x}Nb_xNiSn$	90
3.8.3.	Дослідження електрокінетичних властивостей $Ti_{1-x}Nb_xNiSn$	91
3.8.4.	Дослідження магнітних властивостей $Ti_{1-x}Nb_xNiSn$	93
3.8.5.	Дослідження термоелектричних властивостей $Ti_{1-x}Nb_xNiSn$	93
3.9.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiNi_{1-x}V_xSn$	95
3.9.1.	Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $TiNi_{1-x}V_xSn$	95
3.9.2.	Дослідження електронної структури $TiNi_{1-x}V_xSn$	97
3.9.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $TiNi_{1-x}V_xSn$	98
3.9.4.	Моделювання структурних властивостей термоелектричних матеріалів $TiNi_{1-x}V_xSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	100
3.9.5.	Коефіцієнт термоелектричної потужності Z^* $TiNi_{1-x}V_xSn$	102
3.10.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiNi_{1-x}Co_xSn$	103
3.10.1.	Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $TiNi_{1-x}Co_xSn$	103
3.10.2.	Дослідження електронної структури $TiNi_{1-x}Co_xSn$	105
3.10.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $TiNi_{1-x}Co_xSn$	107
3.10.4.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей $TiNi_{1-x}Co_xSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	110
3.11.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiNi_{1-x}Cu_xSn$	112
3.11.1.	Дослідження структурних властивостей $TiNi_{1-x}Cu_xSn$	112
3.11.2.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $TiNi_{1-x}Cu_xSn$	114
3.12.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiNi_{1-x}Ag_xSn$	117
3.12.1.	Дослідження особливостей кристалічної структури $TiNi_{1-x}Ag_xSn$	117
3.12.2.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $TiNi_{1-x}Ag_xSn$	118
3.13.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiNi_{1-x}Rh_xSn$	121
3.13.1.	Дослідження кристалічної та електронної структур $TiNi_{1-x}Rh_xSn$	122
3.13.2.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $TiNi_{1-x}Rh_xSn$	123
3.14.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $TiNiSn_{1-x}In_x$	128
3.14.1.	Дослідження кристалічної структури $TiNiSn_{1-x}In_x$	128
3.14.2.	Дослідження електронної структури $TiNiSn_{1-x}In_x$	129

3.14.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{In}_x$	130
3.14.4.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{In}_x$ з урахуванням результатів кінетичних та магнітних досліджень	134
3.15.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$	137
3.15.1.	Дослідження кристалічної структури $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$	137
3.15.2.	Дослідження електронної структури $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$	138
3.15.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$	139
3.15.4.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	143
РОЗДІЛ 4	Термоелектричні матеріали на основі фази пів-Гейслера ZrNiSn	145
4.1.	Особливості структурних та енергетичних властивостей сплавів сполуки ZrNiSn	145
4.1.2.	Дослідження особливостей електронної структури ZrNiSn	150
4.1.2.1.	«Априорне легування» ZrNiSn донорами як результат часткового заміщення у позиції 4a атомів Zr на Ni	150
4.1.3.	Дослідження кінетичних та магнітних властивостей ZrNiSn	155
4.1.4.	«Априорне легування» ZrNiSn донорами як результат акумулювання атомів Ni у тетраедричних порожнинах структури	156
4.1.5.	Дослідження структурних, енергетичних, кінетичних та магнітних властивостей твердого розчину $(\text{Zr}_{1-y}\text{Ni}_y)\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}$	158
4.1.5.1.	Особливості мікроструктури та фазового складу $(\text{Zr}_{1-y}\text{Ni}_y)\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}$	159
4.1.5.2.	Дослідження кристалічної структури $(\text{Zr}_{1-y}\text{Ni}_y)\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}$	160
4.1.5.3.	Дослідження електронної структури $(\text{Zr}_{1-y}\text{Ni}_y)\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}$	163
4.1.6.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $\text{ZrNi}_{1+x}\text{Sn}$	166
4.1.7.	Коефіцієнт термоелектричної потужності $\text{ZrNi}_{1+x}\text{Sn}$	169
4.2.	Термоелектричні матеріали, отримані легуванням сполуки ZrNiSn рідкісноземельними та 3d- (V) і 4d-металами (Nb, Mo). Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{Zr}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$	170
4.2.1.	Дослідження структурних властивостей $\text{Zr}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$	170
4.2.2.	Особливості електронної структури $\text{Zr}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$	173
4.2.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{Zr}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$	176
4.2.4.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей термоелектричних матеріалів $\text{Zr}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	180
4.3.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSn}$	186
4.3.1.	Дослідження структурних властивостей $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSn}$	186
4.3.2.	Дослідження електронної структури $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSn}$	188
4.3.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSn}$	189
4.4.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{Zr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{NiSn}$	193
4.4.1.	Дослідження структурних властивостей $\text{Zr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{NiSn}$	194
4.4.2.	Дослідження магнітного стану атомів Ce у $\text{Zr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{NiSn}$	195
4.4.3.	Дослідження електронної структури $\text{Zr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{NiSn}$	195
4.4.4.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{Zr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{NiSn}$	197
4.4.5.	Коефіцієнт термоелектричної потужності $\text{Zr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{NiSn}$	200

4.5.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Nd_xNiSn$</i>	201
4.5.1.	Особливості кристалічної структури $Zr_{1-x}Nd_xNiSn$	201
4.5.2.	Дослідження електронної структури $Zr_{1-x}Nd_xNiSn$	202
4.6.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Dy_xNiSn$</i>	204
4.6.1.	Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}Dy_xNiSn$	204
4.6.2.	Дослідження електронної структури $Zr_{1-x}Dy_xNiSn$	206
4.6.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $Zr_{1-x}Dy_xNiSn$	207
4.7.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$</i>	212
4.7.1.	Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$	212
4.7.2.	Дослідження електронної структури $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$	214
4.7.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$	215
4.7.4.	Дослідження магнітних властивостей $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$	218
4.8.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Er_xNiSn$</i>	219
4.8.1.	Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}Er_xNiSn$	219
4.8.2.	Дослідження електронної структури $Zr_{1-x}Er_xNiSn$	221
4.8.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Zr_{1-x}Er_xNiSn$	223
4.8.4.	Дослідження магнітних властивостей $Zr_{1-x}Er_xNiSn$	226
4.9.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$</i>	227
4.9.1.	Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$	227
4.9.2.	Моделювання електронної структури $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$	229
4.9.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$	231
4.9.4.	Дослідження магнітних властивостей $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$	234
4.10.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Lu_xNiSn$</i>	236
4.10.1.	Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}Lu_xNiSn$	236
4.10.2.	Моделювання енергетичних властивостей $Zr_{1-x}Lu_xNiSn$	237
4.10.3.	Дослідження магнітних властивостей $Zr_{1-x}Lu_xNiSn$	238
4.11.	<i>Критерій розчинності атомів рідкісноземельних металів у кристалічній структурі пів-Гейслерової фази $ZrNiSn$</i>	239
4.12.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Al_xNiSn$</i>	241
4.12.1.	Дослідження структурних властивостей $Zr_{1-x}Al_xNiSn$	242
4.12.2.	Моделювання електронної структури $Zr_{1-x}Al_xNiSn$	244
4.12.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $Zr_{1-x}Al_xNiSn$	245
4.13.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}V_xNiSn$</i>	250
4.13.1.	Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}V_xNiSn$	250
4.13.2.	Моделювання електронної структури $Zr_{1-x}V_xNiSn$	251
4.13.3.	Дослідження кінетичних та енергетичних властивостей $Zr_{1-x}V_xNiSn$	253
4.13.4.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей термоелектричних матеріалів $Zr_{1-x}V_xNiSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	256
4.14.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$</i>	259

4.14.1.	Дослідження кристалічної структури $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$	259
4.14.2.	Моделювання енергетичних властивостей $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$	261
4.14.3.	Дослідження електрокінетичних властивостей $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$	263
4.14.4.	Дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$	265
4.15.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Zr_{1-x}Mo_xNiSn$	265
4.15.1.	Моделювання енергетичних властивостей $Zr_{1-x}Mo_xNiSn$	265
4.15.2.	Дослідження електрокінетичних та магнітних властивостей $Zr_{1-x}Mo_xNiSn$	266
4.16.	Термоелектричні матеріали, отримані легуванням пів-Гейслерової фази $ZrNiSn$ 3d- та 4d-металами M шляхом заміщення атомів Ni: M = V, Cr, Mn, Fe, Co, Cu, Rh	267
4.16.1.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}V_xSn$	268
4.16.1.1.	Дослідження кристалічної та електронної структур $ZrNi_{1-x}V_xSn$	268
4.16.1.2.	Дослідження кінетичних та енергетичних властивостей $ZrNi_{1-x}V_xSn$	271
4.16.2.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}Cr_xSn$	275
4.16.2.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNi_{1-x}Cr_xSn$	275
4.16.2.2.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Cr_xSn$	275
4.16.2.3.	Дослідження електрокінетичних властивостей $ZrNi_{1-x}Cr_xSn$	276
4.16.3.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$	277
4.16.3.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$	277
4.14.3.2.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$	278
4.16.3.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$	279
4.16.3.4.	Дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$	283
4.16.4.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$	284
4.16.4.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$	284
4.16.4.2.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$ для упорядкованого варіанта структури	285
4.16.4.3.	Дослідження кінетичних та енергетичних властивостей $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$	286
4.16.4.4.	Дослідження магнітних властивостей $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$	289
4.14.4.5.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$ для різних варіантів входження атомів Fe до структури сполуки $ZrNiSn$	290
4.16.5.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}Co_xSn$	292
4.16.5.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNi_{1-x}Co_xSn$	292
4.16.5.2.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Co_xSn$	293
4.16.5.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $ZrNi_{1-x}Co_xSn$	293
4.16.6.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}Cu_xSn$	300
4.16.6.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNi_{1-x}Cu_xSn$	300
4.16.6.2.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Cu_xSn$	301
4.16.6.3.	Дослідження кінетичних властивостей $ZrNi_{1-x}Cu_xSn$	302
4.16.7.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNi_{1-x}Rh_xSn$	304
4.16.7.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNi_{1-x}Rh_xSn$	306
4.16.7.2.	Моделювання електронної структури $ZrNi_{1-x}Rh_xSn$	306
4.16.7.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $ZrNi_{1-x}Rh_xSn$	307
4.16.7.4.	Дослідження термодинамічних властивостей $ZrNi_{1-x}Rh_xSn$	312

4.16.7.5.	Моделювання енергетичних властивостей $ZrNi_{1-x}Rh_xSn$ з урахуванням результатів термодинамічних розрахунків	313
4.17.	<i>Термоелектричні матеріали, отримані легуванням пів-Гейслерової фази $ZrNiSn$ р-металами шляхом заміщення атомів Sn: $M = Ga, In, Sb$ та Bi</i>	318
4.17.1.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNiSn_{1-x}Ga_x$</i>	318
4.17.1.1.	Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $ZrNiSn_{1-x}Ga_x$	319
4.17.1.2.	Моделювання електронної структури $ZrNiSn_{1-x}Ga_x$	321
4.17.1.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $ZrNiSn_{1-x}Ga_x$	323
4.17.1.4.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей $ZrNiSn_{1-x}Ga_x$ з урахуванням результатів кінетичних та магнітних досліджень	329
4.17.2.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNiSn_{1-x}In_x$</i>	332
4.17.2.1.	Дослідження кристалічної структури $ZrNiSn_{1-x}In_x$	332
4.17.2.2.	Моделювання енергетичних та термодинамічних властивостей $ZrNiSn_{1-x}In_x$	333
4.17.2.3.	Дослідження кінетичних та енергетичних властивостей $ZrNiSn_{1-x}In_x$	334
4.17.2.4.	Дослідження магнітних властивостей $ZrNiSn_{1-x}In_x$	338
4.17.2.5.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей $ZrNiSn_{1-x}In_x$ з урахуванням результатів кінетичних та магнітних досліджень	339
4.17.2.6.	Визначення енергетичних параметрів повністю компенсованого напівпровідника на прикладі твердого розчину $ZrNiSn_{1-x}In_x$	340
4.17.3.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNiSn_{1-x}Sb_x$</i>	342
4.17.3.1.	Дослідження структурних властивостей $ZrNiSn_{1-x}Sb_x$	342
4.17.3.2.	Моделювання електронної структури, кінетичних та термодинамічних властивостей $ZrNiSn_{1-x}Sb_x$	343
4.17.3.3.	Дослідження кінетичних та енергетичних властивостей $ZrNiSn_{1-x}Sb_x$	344
4.17.3.4.	Дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності $ZrNiSn_{1-x}Sb_x$	346
4.17.4.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $ZrNiSn_{1-x}Bi_x$</i>	346
4.17.4.1.	Дослідження структурних властивостей $ZrNiSn_{1-x}Bi_x$	346
4.17.4.2.	Моделювання електронної структури $ZrNiSn_{1-x}Bi_x$	348
4.17.4.3.	Дослідження кінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $ZrNiSn_{1-x}Bi_x$	349
4.17.4.4.	Дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності $ZrNiSn_{1-x}Bi_x$	352
РОЗДІЛ 5	<i>Термоелектричні матеріали на основі фази пів-Гейслера $HfNiSn$</i>	353
5.1.	Загальні зауваження	353
5.2.	Дослідження хімічного складу та особливостей кристалічної і електронної структур сполуки $HfNiSn$	354
5.2.1.	Рентгеноспектральний та рентгеноструктурний аналіз сплавів	354
5.2.2.	Дослідження електронної структури n - $HfNiSn$	358
5.2.3.	Дослідження електрофізичних та магнітних властивостей n - $HfNiSn$	360
5.3.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Hf_{1-x}Lu_xNiSn$</i>	363
5.3.1.	Особливості кристалічної структури $Hf_{1-x}Lu_xNiSn$	363
5.3.2.	Дослідження електронної структури та магнітних властивостей $Hf_{1-x}Lu_xNiSn$	365
5.3.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Hf_{1-x}Lu_xNiSn$	368
5.3.4.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей $Hf_{1-x}Lu_xNiSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	372

5.4.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Hf_{1-x}Y_xNiSn$</i>	374
5.4.1.	Особливості кристалічної структури $Hf_{1-x}Y_xNiSn$	374
5.4.2.	Дослідження електронної структури та магнітних властивостей $Hf_{1-x}Y_xNiSn$	375
5.4.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Hf_{1-x}Y_xNiSn$	377
5.5.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Hf_{1-x}Tm_xNiSn$</i>	380
5.5.1.	Особливості кристалічної структури $Hf_{1-x}Tm_xNiSn$	380
5.5.2.	Дослідження електронної структури $Hf_{1-x}Tm_xNiSn$	382
5.5.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Hf_{1-x}Tm_xNiSn$	384
5.5.4.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей $Hf_{1-x}Tm_xNiSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	388
5.6.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Hf_{1-x}Er_xNiSn$</i>	390
5.6.1.	Дослідження кристалічної структури $Hf_{1-x}Er_xNiSn$	391
5.6.2.	Дослідження електронної структури $Hf_{1-x}Er_xNiSn$	392
5.6.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Hf_{1-x}Er_xNiSn$	393
5.6.4.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей $Hf_{1-x}Er_xNiSn$ з урахуванням результатів кінетичних досліджень	396
5.7.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Hf_{1-x}Nb_xNiSn$</i>	397
5.7.1.	Дослідження структурних властивостей $Hf_{1-x}Nb_xNiSn$	398
5.7.2.	Моделювання електронної структури $Hf_{1-x}Nb_xNiSn$	400
5.7.3.	Дослідження електрокінетичних та магнітних властивостей $Hf_{1-x}Nb_xNiSn$	401
5.8.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $HfNi_{1-x}Ru_xSn$</i>	404
5.8.1.	Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $HfNi_{1-x}Ru_xSn$	404
5.8.2.	Дослідження електронної структури $HfNi_{1-x}Ru_xSn$	405
5.8.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $HfNi_{1-x}Ru_xSn$	406
5.8.4.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей $HfNi_{1-x}Ru_xSn$ з урахуванням результатів експериментальних досліджень	409
5.9.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $HfNi_{1-x}Rh_xSn$</i>	411
5.9.1.	Дослідження кристалічної структури $HfNi_{1-x}Rh_xSn$	411
5.9.2.	Моделювання енергетичних та термодинамічних властивостей $HfNi_{1-x}Rh_xSn$	412
5.9.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $HfNi_{1-x}Rh_xSn$	415
5.9.4.	Моделювання структурних та енергетичних властивостей $HfNi_{1-x}Rh_xSn$ з урахуванням результатів експериментальних досліджень	418
5.10.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $HfNi_{1-x}Co_xSn$</i>	419
5.10.1.	Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $HfNi_{1-x}Co_xSn$	419
5.10.2.	Дослідження електронної структури та магнітних властивостей $HfNi_{1-x}Co_xSn$	421
5.10.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $HfNi_{1-x}Co_xSn$	422
5.10.3.1.	Дослідження зразків $HfNi_{1-x}Co_xSn$ серії № 1	422
5.10.3.2.	Дослідження зразків $HfNi_{1-x}Co_xSn$ серії № 2	424

5.11.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{HfNi}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sn}$</i>	428
5.11.1.	Дослідження структурних властивостей $\text{HfNi}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sn}$	429
5.11.2.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{HfNi}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sn}$	429
5.12.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{HfNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$</i>	432
5.12.1.	Дослідження структурних властивостей $\text{HfNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$	432
5.12.2.	Дослідження електронної структури і магнітних властивостей $\text{HfNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$	434
5.12.3.	Дослідження електрокінетичних і енергетичних властивостей $\text{HfNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$	436
5.12.4.	Дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності $\text{HfNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$	438
РОЗДІЛ 6	<i>Термоелектричні матеріали на основі фаз пів-Гейслера TiCoSb, VFeSb, ZrCoSb та RNiSb ($\text{R} = \text{Gd}, \text{Tm}, \text{Dy}, \text{Er}, \text{Lu}$)</i>	440
6.1.	<i>Термоелектричні матеріали на основі сполуки TiCoSb</i>	440
6.1.1.	Дослідження особливостей кристалічної структури та хімічного складу сплавів сполуки TiCoSb	440
6.1.1.1.	Дослідження особливостей електронної структури TiCoSb	442
6.1.1.2.	Дослідження кінетичних та магнітних властивостей TiCoSb	444
6.1.2.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{CoSb}$</i>	447
6.1.2.1.	Дослідження структурних властивостей $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{CoSb}$	447
6.1.2.2.	Моделювання електронної структури $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{CoSb}$	450
6.1.2.3.	Дослідження кінетичних та енергетичних властивостей $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{CoSb}$	453
6.1.3.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{Ti}_{1-x}\text{Mo}_x\text{CoSb}$</i>	457
6.1.3.1.	Особливості кристалічної структури $\text{Ti}_{1-x}\text{Mo}_x\text{CoSb}$	457
6.1.3.2.	Моделювання електронної структури $\text{Ti}_{1-x}\text{Mo}_x\text{CoSb}$	459
6.1.3.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $\text{Ti}_{1-x}\text{Mo}_x\text{CoSb}$	460
6.1.4.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{Ti}_{1-x}\text{Sc}_x\text{CoSb}$</i>	465
6.1.4.1.	Дослідження кристалічної структури $\text{Ti}_{1-x}\text{Sc}_x\text{CoSb}$	465
6.1.4.2.	Моделювання електронної структури $\text{Ti}_{1-x}\text{Sc}_x\text{CoSb}$	468
6.1.4.3.	Дослідження магнітної сприйнятливості $\text{Ti}_{1-x}\text{Sc}_x\text{CoSb}$	470
6.1.4.4.	Дослідження кінетичних та енергетичних властивостей $\text{Ti}_{1-x}\text{Sc}_x\text{CoSb}$	470
6.1.4.5.	Особливості електронної та кристалічної структур сполуки TiCoSb	475
6.1.5.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Sb}$</i>	477
6.1.5.1.	Дослідження структурних властивостей $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Sb}$	478
6.1.5.2.	Моделювання електронної структури $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Sb}$	479
6.1.5.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Sb}$	481
6.1.6.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{TiCo}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$</i>	485
6.1.6.1.	Дослідження структурних властивостей $\text{TiCo}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$	485
6.1.6.2.	Моделювання електронної структури $\text{TiCo}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$	487
6.1.6.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{TiCo}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$	488
6.1.7.	<i>Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$</i>	492
6.1.7.1.	Дослідження кристалічної структури $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$	492
6.1.7.2.	Моделювання електронної структури $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$	494

6.1.7.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$	496
6.1.7.4.	Дослідження коефіцієнта термоелектричної потужності $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$	500
6.1.8.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$	501
6.1.8.1.	Особливості структурних властивостей $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$	501
6.1.8.2.	Моделювання електронної структури $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$	504
6.1.8.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$	505
6.2.	Дослідження структурних, термодинамічних, електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей фази пів-Гейслера VFeSb	508
6.2.1.	Особливості структурних та енергетичних властивостей VFeSb	508
6.2.1.1.	Дослідження особливостей структури, магнітних властивостей сполуки VFeSb та фазових рівноваг у системі V-Fe-Sb	508
6.2.1.2.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей сполуки VFeSb	510
6.2.1.3.	Уточнення моделі кристалічної структури VFeSb	511
6.2.2.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$	512
6.2.2.1.	Особливості структурних властивостей $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$	512
6.2.2.2.	Моделювання електронної структури $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$	514
6.2.2.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$	516
6.2.2.4.	Моделювання кристалічної та електронної структур $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$ з урахуванням результатів електрокінетичних досліджень	519
6.2.2.5.	Коефіцієнт термоелектричної потужності $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$	521
6.2.3.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{VFe}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$	522
6.2.3.1.	Особливості структурних властивостей $\text{VFe}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$	522
6.2.3.2.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{VFe}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$	523
6.2.3.3.	Моделювання кристалічної та електронної структур $\text{VFe}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$ з урахуванням результатів електрокінетичних досліджень	526
6.2.3.4.	Коефіцієнт термоелектричної потужності $\text{VFe}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$	527
6.2.4.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{V}_{1-x}\text{Sc}_x\text{FeSb}$	528
6.2.4.1.	Дослідження структурних властивостей $\text{V}_{1-x}\text{Sc}_x\text{FeSb}$	529
6.2.4.2.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{V}_{1-x}\text{Sc}_x\text{FeSb}$	529
6.2.4.3.	Коефіцієнт термоелектричної потужності $\text{V}_{1-x}\text{Sc}_x\text{FeSb}$	532
6.2.5.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{VFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$	532
6.2.5.1.	Структурні дослідження твердого розчину $\text{VFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$	532
6.2.5.2.	Дослідження електрокінетичних властивостей $\text{VFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$	534
6.2.5.3.	Моделювання електронної структури $\text{VFe}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$	534
6.2.6.	Термоелектричні матеріали на основі фази пів-Гейслера VFeSb за участі Mn, Cr, Co, Ni, Ta, Bi, Sn	538
6.3.	Термоелектричні матеріали на основі фази пів-Гейслера ZrCoSb	539
6.3.1.	Дослідження особливостей структури сполуки ZrCoSb та фазових рівноваг у системі Zr-Co-Sb	539
6.3.2.	Моделювання енергетичних властивостей $\text{Zr}_{1+x}\text{Co}_{1-x}\text{Sb}$	540
6.3.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $\text{Zr}_{1+x}\text{Co}_{1-x}\text{Sb}$	541

6.3.4.	Моделювання кристалічної та електронної структур $Zr_{1-x}Co_1-xSb$ з урахуванням результатів електрокінетичних досліджень	542
6.4.	Термоелектричні матеріали на основі фаз напів-Гейслера $RNiSb$ ($R = Gd, Dy, Er, Tm, Lu$)	545
6.4.1.	Структурні дослідження сполук $RNiSb$	545
6.4.2.	Дослідження електронної структури сполук $RNiSb$	546
6.4.3.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей сполук $RNiSb$ ($R = Gd, Dy, Lu$)	547
6.4.4.	Уточнення моделей кристалічної та електронної структур сполук $RNiSb$ на прикладі $LuNiSb$	550
6.4.5.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Er_{1-x}Zr_xNiSb$	552
6.4.5.1.	Структурні дослідження $Er_{1-x}Zr_xNiSb$	552
6.4.5.2.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $Er_{1-x}Zr_xNiSb$	553
6.4.6.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Er_{1-x}Sc_xNiSb$	557
6.4.6.1.	Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $Er_{1-x}Sc_xNiSb$	557
6.4.6.2.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Er_{1-x}Sc_xNiSb$	560
6.4.6.3.	Оптимізація кристалічної та електронної структур $Er_{1-x}Sc_xNiSb$	563
6.4.7.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Tm_{1-x}V_xNiSb$	565
6.4.7.1.	Дослідження термодинамічних та структурних властивостей $Tm_{1-x}V_xNiSb$	566
6.4.7.2.	Моделювання електронної структури $Tm_{1-x}V_xNiSb$ для упорядкованого варіанту кристалічної структури	568
6.4.7.3.	Моделювання електронної структури $Tm_{1-x}V_xNiSb$ для неупорядкованого варіанту кристалічної структури	570
6.4.7.4.	Дослідження електрокінетичних та енергетичних властивостей $Tm_{1-x}V_xNiSb$	571
6.4.8.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Lu_{1-x}Sc_xNiSb$	577
6.4.8.1.	Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $Lu_{1-x}Sc_xNiSb$	577
6.4.8.2.	Моделювання електронної структури $Lu_{1-x}Sc_xNiSb$	578
6.4.8.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $Lu_{1-x}Sc_xNiSb$	581
6.4.9.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$	585
6.4.9.1.	Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$	586
6.4.9.2.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$	589
6.4.9.3.	Повторне уточнення кристалічної та електронної структур сполуки $LuNiSb$	593
6.4.9.4.	Моделювання електрокінетичних властивостей $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$	595
6.4.10.	Термоелектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $Lu_{1-x}V_xNiSb$	598
6.4.10.1.	Дослідження структурних та термодинамічних властивостей $Lu_{1-x}V_xNiSb$	600
6.4.10.2.	Моделювання електронної структури $Lu_{1-x}V_xNiSb$	603
6.4.10.3.	Моделювання електрокінетичних властивостей $Lu_{1-x}V_xNiSb$	605
6.4.10.4.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $Lu_{1-x}V_xNiSb$	608
	ПЕРЕЛІК ЛІТЕРАТУРНИХ ПОСИЛАНЬ	613
	ПРАКТИЧНИЙ ДОРОБОК	624

CONTENT	3
PREFACE	13
CHAPTER 1 Features of the crystal structure of thermoelectric materials based on half-Heusler phases	16
1.1. <i>Half-Heusler phases as promising thermoelectric materials</i>	16
1.2. <i>Crystal structure and elemental composition of half-Heusler phases</i>	17
1.3. <i>Concept of research into thermoelectric materials based on half-Heusler phases</i>	20
1.4. <i>Study of the crystal chemical model of the formation of ST MgAgAs compounds</i>	22
1.5. <i>Investigation of the quantum chemical model of the formation of compounds of half-Heusler phases</i>	25
CHAPTER 2 Physical foundations of the emergence of thermoelectromotive force and features of the mechanisms of electrical conductivity of thermoelectric materials based on half-Heusler phases	33
2.1. <i>Historical aspects of the discovery of the phenomenon of thermoelectricity</i>	33
2.2. <i>Basic thermodynamic equations</i>	33
2.3. <i>The physical nature of the thermoelectromotive force</i>	34
2.4. <i>Ways to optimize the properties of thermoelectric materials</i>	36
2.5. <i>Features of the mechanisms of electrical conductivity of thermoelectric materials based on doped and compensated semiconductors</i>	39
2.5.1. Structure of single impurity states of semiconductors	39
2.5.2. Localization of electronic states of doped semiconductors	40
2.5.3. Anderson's transition	40
2.5.4. Mechanisms of electrical conductivity of doped semiconductors	41
CHAPTER 3 Thermoelectric materials based on the half-Heusler phase TiNiSn	44
3.1. <i>Notes on the results of the section</i>	44
3.2. <i>Features of the structural, kinetic and energetic properties of the TiNiSn compound</i>	45
3.2.1. Study of the features of the crystal structure and chemical composition of the TiNiSn compound	45
3.2.2. Study of the electronic structure of the TiNiSn compound	52
3.2.3. Research on the electrophysical and magnetic properties of TiNiSn	55
3.3. <i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$</i>	57
3.3.1. Study of the crystal structure of $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$	57
3.3.2. Study of the electronic structure of $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$	58
3.3.3. Study of the electrophysical properties of $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$	60
3.3.4. Modeling of structural properties of thermoelectric materials $Ti_{1-x}Dy_xNiSn$ taking into account the results of kinetic studies	63
3.4. <i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $Ti_{1-x}Y_xNiSn$</i>	63
3.4.1. Investigation of structural and thermodynamic properties of $Ti_{1-x}Y_xNiSn$	63
3.4.2. Study of the electronic structure and magnetic properties of $Ti_{1-x}Y_xNiSn$	65
3.4.3. Investigation of electrokinetic and energetic properties of $Ti_{1-x}Y_xNiSn$	67
3.5. <i>Thermoelectric materials based on semiconductor solid solution $Ti_{1-x}Sc_xNiSn$</i>	71
3.5.1. Investigation of structural and thermodynamic properties of $Ti_{1-x}Sc_xNiSn$	71
3.5.2. Study of the electronic structure of $Ti_{1-x}Sc_xNiSn$	72

3.5.3.	Investigation of electrokinetic, energetic and magnetic properties of $Ti_{1-x}Sc_xNiSn$	73
3.6.	<i>Thermoelectric materials based on semiconducting solid solution $Ti_{1-x}Al_xNiSn$</i>	76
3.6.1.	Study of the structural properties of $Ti_{1-x}Al_xNiSn$	76
3.6.2.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $Ti_{1-x}Al_xNiSn$	79
3.7.	<i>Thermoelectric materials based on semiconducting solid solution $Ti_{1-x}V_xNiSn$</i>	83
3.7.1.	Study of structural and thermodynamic properties of $Ti_{1-x}V_xNiSn$	83
3.7.2.	Study of the electronic structure of $Ti_{1-x}V_xNiSn$	85
3.7.3.	Research on electrokinetic and energetic properties of $Ti_{1-x}V_xNiSn$	86
3.7.4.	Thermoelectric power coefficient Z^* $Ti_{1-x}V_xNiSn$	88
3.8.	<i>Thermoelectric materials based on semiconducting solid solution $Ti_{1-x}Nb_xNiSn$</i>	88
3.8.1.	Study of structural properties of $Ti_{1-x}Nb_xNiSn$	89
3.8.2.	Modeling the electronic structure of $Ti_{1-x}Nb_xNiSn$	90
3.8.3.	Investigation of the electrokinetic properties of $Ti_{1-x}Nb_xNiSn$	91
3.8.4.	Research on the magnetic properties of $Ti_{1-x}Nb_xNiSn$	93
3.8.5.	Study of thermoelectric properties of $Ti_{1-x}Nb_xNiSn$	93
3.9.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconducting solid solution $TiNi_{1-x}V_xSn$</i>	95
3.9.1.	Study of structural and thermodynamic properties of $TiNi_{1-x}V_xSn$	95
3.9.2.	Study of the electronic structure of $TiNi_{1-x}V_xSn$	97
3.9.3.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $TiNi_{1-x}V_xSn$	98
3.9.4.	Modeling of structural properties of thermoelectric materials $TiNi_{1-x}V_xSn$ taking into account the results of kinetic studies	100
3.9.5.	Thermoelectric power coefficient Z^* $TiNi_{1-x}V_xSn$	102
3.10.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconducting solid solution $TiNi_{1-x}Co_xSn$</i>	103
3.10.1.	Study of structural and thermodynamic properties of $TiNi_{1-x}Co_xSn$	103
3.10.2.	Study of the electronic structure of $TiNi_{1-x}Co_xSn$	105
3.10.3.	Research on electrokinetic and energetic properties of $TiNi_{1-x}Co_xSn$	107
3.10.4.	Modeling of structural and energetic properties of $TiNi_{1-x}Co_xSn$ taking into account the results of kinetic studies	110
3.11.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconducting solid solution $TiNi_{1-x}Cu_xSn$</i>	112
3.11.1.	Study of the structural properties of $TiNi_{1-x}Cu_xSn$	112
3.11.2.	Investigation of electrokinetic, energetic and magnetic properties of $TiNi_{1-x}Cu_xSn$	114
3.12.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconducting solid solution $TiNi_{1-x}Ag_xSn$</i>	117
3.12.1.	Study of the features of the crystal structure of $TiNi_{1-x}Ag_xSn$	117
3.12.2.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $TiNi_{1-x}Ag_xSn$	118
3.13.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconducting solid solution $TiNi_{1-x}Rh_xSn$</i>	121
3.13.1.	Study of the crystal and electronic structures of $TiNi_{1-x}Rh_xSn$	122
3.13.2.	Research on electrokinetic and energetic properties of $TiNi_{1-x}Rh_xSn$	123
3.14.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $TiNiSn_{1-x}In_x$</i>	128
3.14.1.	Study of the crystal structure of $TiNiSn_{1-x}In_x$	128

3.14.2.	Study of the electronic structure of $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{In}_x$	129
3.14.3.	Research on the electrokinetic and energetic properties of $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{In}_x$	130
3.14.4.	Modeling of structural and energetic properties of $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{In}_x$ taking into account the results of kinetic and magnetic studies	134
3.15.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconducting solid solution $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$</i>	137
3.15.1.	Study of the crystal structure of $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$	137
3.15.2.	Study of the electronic structure of $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$	138
3.15.3.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$	139
3.15.4.	Modeling of structural and energetic properties of $\text{TiNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$ taking into account the results of kinetic studies	143
CHAPTER 4	<i>Thermoelectric materials based on the half-Heusler phase ZrNiSn</i>	145
4.1.	Features of structural and energy properties of ZrNiSn alloy compounds	145
4.1.2.	Study of the features of the electronic structure of ZrNiSn	150
4.1.2.1.	"A priori doping" of ZrNiSn with donors as a result of partial substitution of Zr atoms by Ni in position 4a	150
4.1.3.	Investigation of kinetic and magnetic properties of ZrNiSn	155
4.1.4.	"A priori doping" of ZrNiSn by donors as a result of the accumulation of Ni atoms in the tetrahedral voids of the structure	156
4.1.5.	Investigation of structural, energetic, kinetic and magnetic properties of the solid solution $(\text{Zr}_{1-y}\text{Ni}_y)\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}$	158
4.1.5.1.	Features of the microstructure and phase composition of $(\text{Zr}_{1-y}\text{Ni}_y)\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}$	159
4.1.5.2.	Study of the crystal structure of $(\text{Zr}_{1-y}\text{Ni}_y)\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}$	160
4.1.5.3.	Study of the electronic structure of $(\text{Zr}_{1-y}\text{Ni}_y)\text{Ni}_{1+x}\text{Sn}$	163
4.1.6.	Research on electrokinetic, energetic and magnetic properties of $\text{ZrNi}_{1+x}\text{Sn}$	166
4.1.7.	Thermoelectric power coefficient $\text{ZrNi}_{1+x}\text{Sn}$	169
4.2.	<i>Thermoelectric materials obtained by doping the ZrNiSn compound with rare earth and 3d-(V) and 4d-metals (Nb, Mo). Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $\text{Zr}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$</i>	170
4.2.1.	Study of structural properties of $\text{Zr}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$	170
4.2.2.	Features of the electronic structure of $\text{Zr}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$	173
4.2.3.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $\text{Zr}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$	176
4.2.4.	Modeling of structural and energy properties of thermoelectric materials $\text{Zr}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$ taking into account the results of kinetic studies	180
4.3.	Термoeлектричні матеріали на основі напівпровідникового твердого розчину $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSn}$	186
4.3.1.	Дослідження структурних властивостей $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSn}$	186
4.3.2.	Дослідження електронної структури $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSn}$	188
4.3.3.	Дослідження електрокінетичних, енергетичних та магнітних властивостей $\text{Zr}_{1-x}\text{Sc}_x\text{NiSn}$	189
4.4.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $\text{Zr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{NiSn}$</i>	193
4.4.1.	Study of structural properties of $\text{Zr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{NiSn}$	194
4.4.2.	Investigation of the magnetic state of Ce atoms in $\text{Zr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{NiSn}$	195
4.4.3.	Study of the electronic structure of $\text{Zr}_{1-x}\text{Ce}_x\text{NiSn}$	195

4.4.4.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $Zr_{1-x}Ce_xNiSn$	197
4.4.5.	Thermoelectric power coefficient $Zr_{1-x}Ce_xNiSn$	200
4.5.	<i>Thermoelectric materials based on semiconductor solid solution $Zr_{1-x}Nd_xNiSn$</i>	201
4.5.1.	Features of the crystal structure of $Zr_{1-x}Nd_xNiSn$	201
4.5.2.	Study of the electronic structure of $Zr_{1-x}Nd_xNiSn$	202
4.6.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $Zr_{1-x}Dy_xNiSn$</i>	204
4.6.1.	Study of the crystal structure of $Zr_{1-x}Dy_xNiSn$	204
4.6.2.	Study of the electronic structure of $Zr_{1-x}Dy_xNiSn$	206
4.6.3.	Research on electrokinetic, energetic and magnetic properties of $Zr_{1-x}Dy_xNiSn$	207
4.7.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$</i>	212
4.7.1.	Study of the crystal structure of $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$	212
4.7.2.	Study of the electronic structure of $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$	214
4.7.3.	Research on electrokinetic and energetic properties of $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$	215
4.7.4.	Study of magnetic properties of $Zr_{1-x}Ho_xNiSn$	218
4.8.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $Zr_{1-x}Er_xNiSn$</i>	219
4.8.1.	Study of the crystal structure of $Zr_{1-x}Er_xNiSn$	219
4.8.2.	Study of the electronic structure of $Zr_{1-x}Er_xNiSn$	221
4.8.3.	Research on electrokinetic and energetic properties of $Zr_{1-x}Er_xNiSn$	223
4.8.4.	Study of magnetic properties of $Zr_{1-x}Er_xNiSn$	226
4.9.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$</i>	227
4.9.1.	Study of the crystal structure of $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$	227
4.9.2.	Modeling the electronic structure of $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$	229
4.9.3.	Research on electrokinetic and energetic properties of $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$	231
4.9.4.	Research on the magnetic properties of $Zr_{1-x}Tm_xNiSn$	234
4.10.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $Zr_{1-x}Lu_xNiSn$</i>	236
4.10.1.	Study of the crystal structure of $Zr_{1-x}Lu_xNiSn$	236
4.10.2.	Modeling the energetic properties of $Zr_{1-x}Lu_xNiSn$	237
4.10.3.	Research on the magnetic properties of $Zr_{1-x}Lu_xNiSn$	238
4.11.	<i>Criterion for the solubility of rare earth metal atoms in the crystal structure of the half-Heusler phase $ZrNiSn$</i>	239
4.12.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $Zr_{1-x}Al_xNiSn$</i>	241
4.12.1.	Study of structural properties of $Zr_{1-x}Al_xNiSn$	242
4.12.2.	Modeling the electronic structure of $Zr_{1-x}Al_xNiSn$	244
4.12.3.	Research on electrokinetic, energetic and magnetic properties of $Zr_{1-x}Al_xNiSn$	245
4.13.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $Zr_{1-x}V_xNiSn$</i>	250
4.13.1.	Study of the crystal structure of $Zr_{1-x}V_xNiSn$	250
4.13.2.	Modeling the electronic structure of $Zr_{1-x}V_xNiSn$	251
4.13.3.	Research on kinetic and energetic properties of $Zr_{1-x}V_xNiSn$	253

4.13.4.	Modeling of structural and energy properties of thermoelectric materials $Zr_{1-x}V_xNiSn$ taking into account the results of kinetic studies	256
4.14.	<i>Thermoelectric materials based on semiconductor solid solution $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$</i>	259
4.14.1.	Study of the crystal structure of $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$	259
4.14.2.	Modeling of energy properties of $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$	261
4.14.3.	Research on the electrokinetic properties of $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$	263
4.14.4.	Study of the thermoelectric power coefficient of $Zr_{1-x}Nb_xNiSn$	265
4.15.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $Zr_{1-x}Mo_xNiSn$</i>	265
4.15.1.	Modeling of the energetic properties of $Zr_{1-x}Mo_xNiSn$	265
4.15.2.	Research on the electrokinetic and magnetic properties of $Zr_{1-x}Mo_xNiSn$	266
4.16.	<i>Thermoelectric materials obtained by doping the half-Heusler phase $ZrNiSn$ with 3d- and 4d-metals M by replacing Ni atoms: $M = V, Cr, Mn, Fe, Co, Cu, Rh$</i>	267
4.16.1.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $ZrNi_{1-x}V_xSn$</i>	268
4.16.1.1.	Study of the crystal and electronic structures of $ZrNi_{1-x}V_xSn$	268
4.16.1.2.	Investigation of kinetic and energetic properties of $ZrNi_{1-x}V_xSn$	271
4.16.2.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $ZrNi_{1-x}Cr_xSn$</i>	275
4.16.2.1.	Study of the crystal structure of $ZrNi_{1-x}Cr_xSn$	275
4.16.2.2.	Modeling the electronic structure of $ZrNi_{1-x}Cr_xSn$	275
4.16.2.3.	Investigation of the electrokinetic properties of $ZrNi_{1-x}Cr_xSn$	276
4.16.3.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$</i>	277
4.16.3.1.	Study of the crystal structure of $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$	277
4.14.3.2.	Modeling the electronic structure of $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$	278
4.16.3.3.	Investigation of electrokinetic, energetic and magnetic properties of $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$	279
4.16.3.4.	Study of the thermoelectric power coefficient of $ZrNi_{1-x}Mn_xSn$	283
4.16.4.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$</i>	284
4.16.4.1.	Study of the crystal structure of $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$	284
4.16.4.2.	Modeling the electronic structure of $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$ for the ordered structure variant	285
4.16.4.3.	Investigation of kinetic and energetic properties of $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$	286
4.16.4.4.	Research on the magnetic properties of $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$	289
4.14.4.5.	Modeling the electronic structure of $ZrNi_{1-x}Fe_xSn$ for different variants of the inclusion of Fe atoms in the structure of the $ZrNiSn$ compound	290
4.16.5.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $ZrNi_{1-x}Co_xSn$</i>	292
4.16.5.1.	Study of the crystal structure of $ZrNi_{1-x}Co_xSn$	292
4.16.5.2.	Modeling the electronic structure of $ZrNi_{1-x}Co_xSn$	293
4.16.5.3.	Research on electrokinetic, energetic and magnetic properties of $ZrNi_{1-x}Co_xSn$	293

4.16.6.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $\text{ZrNi}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sn}$</i>	300
4.16.6.1.	Study of the crystal structure of $\text{ZrNi}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sn}$	300
4.16.6.2.	Modeling the electronic structure of $\text{ZrNi}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sn}$	301
4.16.6.3.	Study of kinetic properties of $\text{ZrNi}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sn}$	302
4.16.7.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $\text{ZrNi}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Sn}$</i>	304
4.16.7.1.	Study of the crystal structure of $\text{ZrNi}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Sn}$	306
4.16.7.2.	Modeling the electronic structure of $\text{ZrNi}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Sn}$	306
4.16.7.3.	Investigation of electrokinetic, energetic and magnetic properties of $\text{ZrNi}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Sn}$	307
4.16.7.4.	Study of thermodynamic properties of $\text{ZrNi}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Sn}$	312
4.16.7.5.	Modeling of the energetic properties of $\text{ZrNi}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Sn}$ taking into account the results of thermodynamic calculations	313
4.17.	<i>Thermoelectric materials obtained by doping the half-Heusler phase ZrNiSn with p-metals by replacing Sn atoms: $M = \text{Ga}, \text{In}, \text{Sb}$ and Bi</i>	318
4.17.1.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$</i>	318
4.17.1.1.	Investigation of structural and thermodynamic properties of $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$	319
4.17.1.2.	Modeling the electronic structure of $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$	321
4.17.1.3.	Investigation of electrokinetic, energetic and magnetic properties of $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$	323
4.17.1.4.	Modeling of structural and energetic properties of $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Ga}_x$ taking into account the results of kinetic and magnetic studies	329
4.17.2.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{In}_x$</i>	332
4.17.2.1.	Study of the crystal structure of $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{In}_x$	332
4.17.2.2.	Modeling of energetic and thermodynamic properties of $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{In}_x$	333
4.17.2.3.	Investigation of kinetic and energetic properties of $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{In}_x$	334
4.17.2.4.	Research on the magnetic properties of $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{In}_x$	338
4.17.2.5.	Modeling of structural and energetic properties of $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{In}_x$ taking into account the results of kinetic and magnetic studie	339
4.17.2.6.	Determination of energy parameters of a fully compensated semiconductor using the example of a $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{In}_x$ solid solution	340
4.17.3.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$</i>	342
4.17.3.1.	Study of structural properties of $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$	342
4.17.3.2.	Modeling the electronic structure, kinetic and thermodynamic properties of $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$	343
4.17.3.3.	Investigation of kinetic and energetic properties of $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$	344
4.17.3.4.	Study of the thermoelectric power coefficient of $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$	346
4.17.4.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Bi}_x$</i>	346
4.17.4.1.	Study of structural properties of $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Bi}_x$	346
4.17.4.2.	Modeling the electronic structure of $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Bi}_x$	348

4.17.4.3.	Investigation of kinetic, energetic and magnetic properties $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Bi}_x$	349
4.17.4.4.	Study of the thermoelectric power coefficient of $\text{ZrNiSn}_{1-x}\text{Bi}_x$	352
CHAPTER 5	Thermoelectric materials based on the half-Heusler phase HfNiSn	353
5.1.	General remarks	353
5.2.	Study of the chemical composition and features of the crystal and electronic structures of the compound HfNiSn	354
5.2.1.	X-ray spectral and X-ray structural analysis of alloys	354
5.2.2.	Study of the electronic structure of $n\text{-HfNiSn}$	358
5.2.3.	Study of the electrophysical and magnetic properties of $n\text{-HfNiSn}$	360
5.3.	<i>Thermoelectric materials based on semiconductor solid solution $\text{Hf}_{1-x}\text{Lu}_x\text{NiSn}$</i>	363
5.3.1.	Features of the crystal structure of $\text{Hf}_{1-x}\text{Lu}_x\text{NiSn}$	363
5.3.2.	Study of the electronic structure and magnetic properties of $\text{Hf}_{1-x}\text{Lu}_x\text{NiSn}$	365
5.3.3.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $\text{Hf}_{1-x}\text{Lu}_x\text{NiSn}$	368
5.3.4.	Modeling of structural and energetic properties of $\text{Hf}_{1-x}\text{Lu}_x\text{NiSn}$ taking into account the results of kinetic studies	372
5.4.	<i>Thermoelectric materials based on semiconductor solid solution $\text{Hf}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$</i>	374
5.4.1.	Features of the crystal structure of $\text{Hf}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$	374
5.4.2.	Study of the electronic structure and magnetic properties of $\text{Hf}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$	375
5.4.3.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $\text{Hf}_{1-x}\text{Y}_x\text{NiSn}$	377
5.5.	<i>Thermoelectric materials based on semiconductor solid solution $\text{Hf}_{1-x}\text{Tm}_x\text{NiSn}$</i>	380
5.5.1.	Features of the crystal structure of $\text{Hf}_{1-x}\text{Tm}_x\text{NiSn}$	380
5.5.2.	Study of the electronic structure of $\text{Hf}_{1-x}\text{Tm}_x\text{NiSn}$	382
5.5.3.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $\text{Hf}_{1-x}\text{Tm}_x\text{NiSn}$	384
5.5.4.	Modeling of structural and energetic properties of $\text{Hf}_{1-x}\text{Tm}_x\text{NiSn}$ taking into account the results of kinetic studies	388
5.6.	<i>Thermoelectric materials based on semiconductor solid solution $\text{Hf}_{1-x}\text{Er}_x\text{NiSn}$</i>	390
5.6.1.	Study of the crystal structure of $\text{Hf}_{1-x}\text{Er}_x\text{NiSn}$	391
5.6.2.	Study of the electronic structure of $\text{Hf}_{1-x}\text{Er}_x\text{NiSn}$	392
5.6.3.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $\text{Hf}_{1-x}\text{Er}_x\text{NiSn}$	393
5.6.4.	Modeling of structural and energetic properties of $\text{Hf}_{1-x}\text{Er}_x\text{NiSn}$ taking into account the results of kinetic studies	396
5.7.	<i>Thermoelectric materials based on semiconductor solid solution $\text{Hf}_{1-x}\text{Nb}_x\text{NiSn}$</i>	397
5.7.1.	Study of structural properties of $\text{Hf}_{1-x}\text{Nb}_x\text{NiSn}$	398
5.7.2.	Modeling the electronic structure of $\text{Hf}_{1-x}\text{Nb}_x\text{NiSn}$	400
5.7.3.	Investigation of the electrokinetic and magnetic properties of $\text{Hf}_{1-x}\text{Nb}_x\text{NiSn}$	401
5.8.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $\text{HfNi}_{1-x}\text{Ru}_x\text{Sn}$</i>	404
5.8.1.	Study of structural and thermodynamic properties of $\text{HfNi}_{1-x}\text{Ru}_x\text{Sn}$	404
5.8.2.	Study of the electronic structure of $\text{HfNi}_{1-x}\text{Ru}_x\text{Sn}$	405
5.8.3.	Investigation of electrokinetic, energetic and magnetic properties of $\text{HfNi}_{1-x}\text{Ru}_x\text{Sn}$	406
5.8.4.	Modeling of structural and energetic properties of $\text{HfNi}_{1-x}\text{Ru}_x\text{Sn}$ taking into account the results of experimental studies	409

5.9.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $\text{HfNi}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Sn}$</i>	411
5.9.1.	Study of the crystal structure of $\text{HfNi}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Sn}$	411
5.9.2.	Modeling of energetic and thermodynamic properties of $\text{HfNi}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Sn}$	412
5.9.3.	Investigation of electrokinetic, energetic and magnetic properties of $\text{HfNi}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Sn}$	415
5.9.4.	Modeling of structural and energetic properties of $\text{HfNi}_{1-x}\text{Rh}_x\text{Sn}$ taking into account the results of experimental studies	418
5.10.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $\text{HfNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{Sn}$</i>	419
5.10.1.	Study of structural and thermodynamic properties of $\text{HfNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{Sn}$	419
5.10.2.	Study of the electronic structure and magnetic properties of $\text{HfNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{Sn}$	421
5.10.3.	Investigation of electrokinetic, energetic and magnetic properties of $\text{HfNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{Sn}$	422
5.10.3.1.	Study of $\text{HfNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{Sn}$ samples of series № 1	422
5.10.3.2.	Study of $\text{HfNi}_{1-x}\text{Co}_x\text{Sn}$ samples of series № 2	424
5.11.	<i>Thermoelectric materials based on semiconductor solid solution $\text{HfNi}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sn}$</i>	428
5.11.1.	Study of structural properties of $\text{HfNi}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sn}$	429
5.11.2.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $\text{HfNi}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sn}$	429
5.12.	<i>Thermoelectric materials based on semiconductor solid solution $\text{HfNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$</i>	432
5.12.1.	Study of structural properties of $\text{HfNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$	432
5.12.2.	Study of the electronic structure and magnetic properties of $\text{HfNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$	434
5.12.3.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $\text{HfNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$	436
5.12.4.	Study of the thermoelectric power coefficient of $\text{HfNiSn}_{1-x}\text{Sb}_x$	438
CHAPTER 6	<i>Thermoelectric materials based on the half-Heusler phases TiCoSb, VFeSb, ZrCoSb and RNiSb ($\text{R} = \text{Gd}, \text{Tm}, \text{Dy}, \text{Er}, \text{Lu}$)</i>	440
6.1.	<i>Thermoelectric materials based on the compound TiCoSb</i>	440
6.1.1.	Study of the features of the crystal structure and chemical composition of TiCoSb alloys	440
6.1.1.1.	Study of the electronic structure features of TiCoSb	442
6.1.1.2.	Investigation of kinetic and magnetic properties of TiCoSb	444
6.1.2.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconducting solid solution $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{CoSb}$</i>	447
6.1.2.1.	Study of structural properties of $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{CoSb}$	447
6.1.2.2.	Modeling the electronic structure of $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{CoSb}$	450
6.1.2.3.	Investigation of kinetic and energetic properties of $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x\text{CoSb}$	453
6.1.3.	<i>Thermoelectric materials based on semiconducting solid solution $\text{Ti}_{1-x}\text{Mo}_x\text{CoSb}$</i>	457
6.1.3.1.	Features of the crystal structure of $\text{Ti}_{1-x}\text{Mo}_x\text{CoSb}$	457
6.1.3.2.	Modeling the electronic structure of $\text{Ti}_{1-x}\text{Mo}_x\text{CoSb}$	459
6.1.3.3.	Research on electrokinetic, energetic and magnetic properties of $\text{Ti}_{1-x}\text{Mo}_x\text{CoSb}$	460
6.1.4.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconducting solid solution $\text{Ti}_{1-x}\text{Sc}_x\text{CoSb}$</i>	465
6.1.4.1.	Study of the crystal structure of $\text{Ti}_{1-x}\text{Sc}_x\text{CoSb}$	465
6.1.4.2.	Modeling the electronic structure of $\text{Ti}_{1-x}\text{Sc}_x\text{CoSb}$	468

6.1.4.3.	Magnetic susceptibility study of $\text{Ti}_{1-x}\text{Sc}_x\text{CoSb}$	470
6.1.4.4.	Investigation of kinetic and energetic properties of $\text{Ti}_{1-x}\text{Sc}_x\text{CoSb}$	470
6.1.4.5.	Features of the electronic and crystal structures of the compound TiCoSb	475
6.1.5.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconducting solid solution $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Sb}$</i>	477
6.1.5.1.	Study of structural properties of $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Sb}$	478
6.1.5.2.	Modeling the electronic structure of $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Sb}$	479
6.1.5.3.	Research on electrokinetic and energetic properties of $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Sb}$	481
6.1.6.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconducting solid solution $\text{TiCo}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$</i>	485
6.1.6.1.	Study of structural properties of $\text{TiCo}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$	485
6.1.6.2.	Modeling the electronic structure of $\text{TiCo}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$	487
6.1.6.3.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $\text{TiCo}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Sb}$	488
6.1.7.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconducting solid solution $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$</i>	492
6.1.7.1.	Study of the crystal structure of $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$	492
6.1.7.2.	Modeling the electronic structure of $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$	494
6.1.7.3.	Investigation of electrokinetic, energetic and magnetic properties of $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$	496
6.1.7.4.	Study of the thermoelectric power coefficient of $\text{TiCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{Sb}$	500
6.1.8.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconducting solid solution $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$</i>	501
6.1.8.1.	Features of the structural properties of $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$	501
6.1.8.2.	Modeling the electronic structure of $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$	504
6.1.8.3.	Investigation of electrokinetic, energetic and magnetic properties of $\text{TiCo}_{1-x}\text{Cu}_x\text{Sb}$	505
6.2.	<i>Investigation of structural, thermodynamic, electrokinetic, energetic and magnetic properties of the half-Heusler phase VFeSb</i>	508
6.2.1.	Features of the structural and energetic properties of VFeSb	508
6.2.1.1.	Study of the structural features, magnetic properties of the VFeSb compound and phase equilibria in the V-Fe-Sb system	508
6.2.1.2.	Investigation of the electrokinetic and energetic properties of the VFeSb compound	510
6.2.1.3.	Refinement of the VFeSb crystal structure model	511
6.2.2.	<i>Thermoelectric materials based on semiconductor solid solution $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$</i>	512
6.2.2.1.	Features of the structural properties of $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$	512
6.2.2.2.	Modeling the electronic structure of $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$	514
6.2.2.3.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$	516
6.2.2.4.	Modeling the crystal and electronic structures of $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$ taking into account the results of electrokinetic studies	519
6.2.2.5.	Thermoelectric power coefficient $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{FeSb}$	521
6.2.3.	<i>Thermoelectric materials based on semiconductor solid solution $\text{VFe}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$</i>	522
6.2.3.1.	Features of the structural properties of $\text{VFe}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$	522
6.2.3.2.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $\text{VFe}_{1-x}\text{Ti}_x\text{Sb}$	523

6.2.3.3.	Modeling the crystal and electronic structures of $VFe_{1-x}Ti_xSb$ taking into account the results of electrokinetic studies	526
6.2.3.4.	Thermoelectric power coefficient $VFe_{1-x}Ti_xSb$	527
6.2.4.	<i>Thermoelectric materials based on semiconductor solid solution $V_{1-x}Sc_xFeSb$</i>	528
6.2.4.1.	Study of structural properties of $V_{1-x}Sc_xFeSb$	529
6.2.4.2.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $V_{1-x}Sc_xFeSb$	529
6.2.4.3.	Thermoelectric power coefficient $V_{1-x}Sc_xFeSb$	532
6.2.5.	<i>Thermoelectric materials based on semiconductor solid solution $VFe_{1-x}Cu_xSb$</i>	532
6.2.5.1.	Structural studies of the solid solution $VFe_{1-x}Cu_xSb$	532
6.2.5.2.	Investigation of the electrokinetic properties of $VFe_{1-x}Cu_xSb$	534
6.2.5.3.	Modeling the electronic structure of $VFe_{1-x}Cu_xSb$	534
6.2.6.	<i>Thermoelectric materials based on the half-Heusler phase $VFeSb$ with the participation of Mn, Cr, Co, Ni, Ta, Bi, Sn</i>	538
6.3.	<i>Thermoelectric materials based on the half-Heusler phase $ZrCoSb$</i>	539
6.3.1.	Study of the structural features of the $ZrCoSb$ compound and phase equilibria in the Zr-Co-Sb system	539
6.3.2.	Modeling the energetic properties of $Zr_{1+x}Co_{1-x}Sb$	540
6.3.3.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $Zr_{1+x}Co_{1-x}Sb$	541
6.3.4.	Modeling the crystal and electronic structures of $Zr_{1+x}Co_{1-x}Sb$ taking into account the results of electrokinetic studies	542
6.4.	<i>Thermoelectric materials based on RNiSb half-Heusler phases ($R = Gd, Dy, Er, Tm, Lu$)</i>	545
6.4.1.	Structural studies of RNiSb compounds	545
6.4.2.	Study of the electronic structure of RNiSb compounds	546
6.4.3.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of RNiSb compounds ($R = Gd, Dy, Lu$)	547
6.4.4.	Refinement of crystal and electronic structure models of RNiSb compounds using the example of LuNiSb	550
6.4.5.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconducting solid solution $Er_{1-x}Zr_xNiSb$</i>	552
6.4.5.1.	Structural studies of $Er_{1-x}Zr_xNiSb$	552
6.4.5.2.	Investigation of electrokinetic, energetic and magnetic properties of $Er_{1-x}Zr_xNiSb$	553
6.4.6.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $Er_{1-x}Sc_xNiSb$</i>	557
6.4.6.1.	Study of structural and thermodynamic properties of $Er_{1-x}Sc_xNiSb$	557
6.4.6.2.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $Er_{1-x}Sc_xNiSb$	560
6.4.6.3.	Optimization of the crystal and electronic structures of $Er_{1-x}Sc_xNiSb$	563
6.4.7.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $Tm_{1-x}V_xNiSb$</i>	565
6.4.7.1.	Study of thermodynamic and structural properties of $Tm_{1-x}V_xNiSb$	566
6.4.7.2.	Modeling the electronic structure of $Tm_{1-x}V_xNiSb$ for an ordered variant of the crystal structure	568
6.4.7.3.	Modeling the electronic structure of $Tm_{1-x}V_xNiSb$ for a disordered variant of the crystal structure	570

6.4.7.4.	Investigation of electrokinetic and energetic properties of $Tm_{1-x}V_xNiSb$	571
6.4.8.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $Lu_{1-x}Sc_xNiSb$</i>	577
6.4.8.1.	Study of structural and thermodynamic properties of $Lu_{1-x}Sc_xNiSb$	577
6.4.8.2.	Modeling the electronic structure of $Lu_{1-x}Sc_xNiSb$	578
6.4.8.3.	Investigation of electrokinetic, energetic and magnetic properties of $Lu_{1-x}Sc_xNiSb$	581
6.4.9.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$</i>	585
6.4.9.1.	Study of structural and thermodynamic properties of $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$	586
6.4.9.2.	Study of structural and thermodynamic properties of $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$	589
6.4.9.3.	Re-refining the crystal and electronic structures of the compound $LuNiSb$	593
6.4.9.4.	Modeling the electrokinetic properties of $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$	595
6.4.10.	<i>Thermoelectric materials based on the semiconductor solid solution $Lu_{1-x}V_xNiSb$</i>	598
6.4.10.1.	Study of structural and thermodynamic properties of $Lu_{1-x}V_xNiSb$	600
6.4.10.2.	Modeling the electronic structure of $Lu_{1-x}V_xNiSb$	603
6.4.10.3.	Modeling the electrokinetic properties of $Lu_{1-x}V_xNiSb$	605
6.4.10.4.	Investigation of electrokinetic, energetic and magnetic properties of $Lu_{1-x}V_xNiSb$	608
	LIST OF REFERENCES	613
	PRACTICAL WORK	624