

ОСОБЛИВОСТІ МОДЕЛЮВАННЯ ХАРАКТЕРИСТИК ТЕРМОМЕТРИЧНОГО МАТЕРІАЛУ $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$

Крайовський В.Я., д-р техн. наук, професор, *Пашкевич В.З.*, канд. техн. наук, доцент,
Горпенюк А.Я., канд. техн. наук, доцент, *Ромака В.А.*, д-р техн. наук, професор,
Національний університет “Львівська політехніка”, Україна,
Стадник Ю.В., канд. хім. наук, пров. наук. співр., *Ромака Л.П.*, канд. хім. наук,
пров. наук. співр., *Горинь А.М.*, канд. хім. наук, ст. наук. співр.,
Львівський національний університет ім. І. Франка, Україна,
Ромака В.В., д-р техн. наук, професор,
Технічний університет м. Дрезден (м. Дрезден, Німеччина)
e-mail: vkrayovskyy@ukr.net

Анотація

Представлено результати моделювання термометричних характеристик напівпровідникового твердого розчину $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$, який є перспективним термометричним матеріалом для виготовлення чутливих елементів термоелектричних та електрорезистивних термоперетворювачів. Моделювання електронної структури $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$ проведено методом Корінги-Кона-Ростокера (KKR) у наближенні когерентного потенціалу та локальної густини і повнопотенціальним методом лінеаризованих плоских хвиль (FLAPW). Моделювання методом KKR проводились з використанням пакету програм AkaiKKR у наближенні локальної густини для обмінно-кореляційного потенціалу з параметризацією Moruzzi, Janak, Williams в напів-релятивістському з врахуванням спин-орбітальної взаємодії. Для проведення розрахунків методом FLAPW використовувалась реалізація методу в пакеті програм Elk.

Для перевірки меж існування термометричного матеріалу $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$ обома методами розраховано зміну значень періоду елементарної комірки $a(x)$ у діапазоні $x=0-1.0$. Показано, що існує узгодження між розрахованою методом FLAPW зміною значень $a(x)$ $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$ та результатами експериментальних досліджень. Отриманий результат свідчить про вищу точність моделювання структурних параметрів $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$ методом FLAPW у порівнянні з методом KKR. Для дослідження можливості отримати термометричний матеріал $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$ та встановлення меж його існування у вигляді неперервного твердого розчину проведено моделювання термодинамічних характеристик у наближенні гармонійних коливань атомів у рамках теорії функціоналу густини DFT для гіпотетичного твердого розчину $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$, $x=0-1.0$. Зміна значень ентальпії змішування ΔH та повної енергії E $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$, $x=0-1.0$ дозволяє стверджувати, що термометричний матеріал існує у вигляді твердого розчину заміщення у діапазоні концентрацій $x=0-0.20$. За більших концентрацій домішкових атомів Zr, $x>0.20$, має місце розшарування (спіноїдальний розпад фази) і термометричний матеріал не існує.

Для розуміння механізмів електропровідності термометричного матеріалу $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$ досліджено способи входження домішкових атомів Zr у матрицю базового напівпровідника $p\text{-LuNiSb}$ та зайняття ними різних кристалографічних позицій, а також наявність у них вакансій. З цією метою проведено моделювання його електронної структури для різних варіантів просторового розташування атомів та наявності вакансій у кристалографічних позиціях. Показано, що найбільш прийнятною результатом експериментальних досліджень є модель електронної структури $p\text{-LuNiSb}$, яка передбачає наявність вакансій у кристалографічних позиціях 4a атомів Lu (~ 0.005) та 4c атомів Ni (~ 0.04). За такої моделі просторового розташування атомів та наявності вакансій у позиціях 4a та 4c сполука LuNiSb є напівпровідником діркового типу провідності, у якого рівень Фермі ε_F розташований біля рівня протікання валентної зони ε_V .

Проведено моделювання кінетичних характеристик напівпровідникового термометричного матеріалу $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$, зокрема, температурних залежностей питомого електроопору $\rho(T,x)$ та коефіцієнта термо-ерс $\alpha(T,x)$. Встановлено, що за найменшої концентрації домішкових атомів Zr рівень Фермі ε_F $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$ переходить із забороненої зони у зону провідності ε_C . На це вказують від'ємні значення коефіцієнта термо-ерс $\alpha(T,x)$ та металічний тип електропровідності $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$. При цьому відбувається зміна типу основних носіїв струму з дірок на електрони.

Ключові слова

Електропровідність, коефіцієнт термо-ерс, рівень Фермі.

1. Вступ

Цікавість до термометричних матеріалів на основі напівпровідників $p\text{-RNiSb}$ (де R – рідкісноземельні метали підгрупи Ітрію) зумовлена одночасно високими значеннями термо-ерс $\alpha(T)$ та електроопору $\rho(T)$, що робить дані матеріали одними з найбільш перспективних [1]. Дослідження впливу легуючої домішки на зміну кристалічної та електронної структури, розподілу густини електронних станів (DOS), кінетичні, магнітні та енергетичні

характеристики дозволили виявити особливості механізмів електропровідності та виробити шляхи оптимізації параметрів матеріалу для отримання високих значень опору та термо-ерс. Процес оптимізації параметрів термометричних матеріалів шляхом легування базового напівпровідника донорними і/або акцепторними домішками передбачає комп'ютерне моделювання його характеристик. Саме від коректності обраного методу моделювання характеристик матеріалу залежить вибір умов його синтезу, зокрема, концентрації домішкових атомів та температури гомогенізуючого відпалу, що визначає його термометричні характеристики.

Дослідження структурних, кінетичних та магнітних характеристик сполук $RNiSb$ ($R = Gd, Tb, Dy, Yb, Lu$) встановило, що кристалічна структура сполуки $YbNi_{0.9}Sb$ є дефектною, а самі сполуки є напівпровідниками діркового типу провідності [1]. Отже, у кристали існує механізм генерування структурних дефектів акцепторної природи. Однак станом на зараз не існує досконалих моделей кристалічної та електронної структур $RNiSb$, які адекватні реальному стану напівпровідникового матеріалу. Основною причиною такого стану є хибне обрання методів моделювання характеристик, які не у повній мірі враховують усі особливості матеріалу, зокрема, кристалічної структури до розподілу густини електронних станів.

У роботі наведено результати моделювання структурних, термодинамічних, енергетичних та кінетичних характеристик термометричного матеріалу $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$, отриманого легуванням базового напівпровідника $LuNiSb$ атомами Zr шляхом заміщення атомів Lu (4а). Отримані результати дозволять уточнити просторове розташування атомів у вузлах елементарної комірки, а також ідентифікувати механізми електропровідності для визначення умов синтезу термочутливих матеріалів з максимальною ефективністю перетворення теплової енергії в електричну.

2. Недоліки

Дослідження термометричних матеріалів на основі базового напівпровідника $RNiSb$ [1] встановили їхню високу чутливість до режимів термічної обробки (температура та тривалість відпалу).

3. Мета роботи

Встановити механізм формування структурних дефектів у термометричному матеріалі $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$, що дозволить ідентифікувати механізми електропровідності та визначити умови їхнього синтезу.

4. Методики досліджень

Розрахунки електронної структури, розподілу густини електронних станів (density of states – DOS), функції локалізації електрона (ELF), термодинамічних характеристик, а також оптимізація параметрів кристалічної структури термометричного матеріалу $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$ проводились з використанням як методу Корінгі-Кона-Ростокера (Korringa-Kohn-Rostoker, далі KKR) у наближенні когерентного потенціалу (Coherent Potential Approximation – CPA) та локальної густини (Local Density Approximation – LDA), так і повнопотенціального методу лінеаризованих плоских хвиль (Full Potential Linearized Augmented Plane Waves – FLAPW). Моделювання методом KKR проводились з використанням пакетів програм AkaiKKR [2] у наближенні локальної густини для обмінно-кореляційного потенціалу з параметризацією Moruzzi, Janak, Williams [3] (MJW) в напів-релятивістському врахуванні остовного (core) рівня з врахуванням спин-орбітальної взаємодії. Для проведення розрахунків методом FLAPW використовувалась реалізація методу в пакеті програм Elk [4]. Моделювання здійснювалось для k -сітки $10 \times 10 \times 10$ в наближенні як локальної густини (LDA) так і узагальненого градієнта GGA. Зона Бріллюена була розбита на 1000 k -точок, які використовувались як для розрахунків спектральної функції Блоха (зонного енергетичного спектру) так і густини електронних станів. Ширина енергетичного вікна вибиралась так, щоб захопити напів-остовні (semi-core) стани p -елементів. Візуалізація об'ємних даних здійснювалась за допомогою програми VESTA [5]. Топологічний аналіз та інтерпретація DOS та ELF проведено в рамках теорії Бейдера.

5. Моделювання структурних характеристик термометричного матеріалу $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$

Для перевірки меж існування термометричного матеріалу $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$ розраховано зміну значень періоду елементарної комірки $a(x)$ з використанням пакетів програм AkaiKKR [3] та Elk [4] (рис. 1). Результати розрахунку зміни значень $a(x)$ $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$ обома методами показують зменшення значень періоду комірки, що є цілком логічним, адже атомний радіус Zr ($a_{Zr}=0.160$ нм) є меншим за такий у Lu ($a_{Lu}=0.173$ нм).

З рис. 1 також видно, що значення періоду елементарної комірки a сполуки $LuNiSb$, отримані моделювання з використанням методу AkaiKKR [2] є меншими за такі, отримані за використання методу в пакеті програм Elk [4]. У той же час результат моделювання для гіпотетичної сполуки $ZrNiSb$ (інша сторона твердого розчину $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$ за $x=1$) показало протилежний результат: значення періоду a сполуки $ZrNiSb$, отримані методом AkaiKKR [2], є більшими за такі, отримані методом Elk [4] (рис. 1). Можемо констатувати, що хід залежностей $a(x)$ $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$, отриманих різними методами моделювання, відбувається за різними законами. У даному випадку різними є кути нахилу залежностей $a(x)$ $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$. Виявилось, що кут нахилу зміни значень періоду комірки $a(x)$ $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$, отриманий з експериментальних досліджень, повністю збігається з таким при моделюванні методом Elk [4]. Отриманий результат свідчить про вищу точність моделювання структурних параметрів $Lu_{1-x}Zr_xNiSb$, зокрема, періоду комірки $a(x)$ методом FLAPW у порівнянні з методом KKR.

Утворення напівпровідникового термометричного матеріалу $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$ шляхом заміщення у позиції $4a$ атомів Lu на Zr супроводжується змінами як в кристалічній структурі, так і електронній. Адже уведення у структуру сполуки LuNiSb атомів Zr ($4d^25s^2$) шляхом заміщення у позиції $4a$ атомів Lu ($5d^16s^2$) повинно генерувати структурні дефекти донорної природи, оскільки атом Zr містить більше число d -електронів, ніж атом Lu. В експерименті це повинно призвести до зміни типу основних носіїв електричного струму з діркового на електронний.

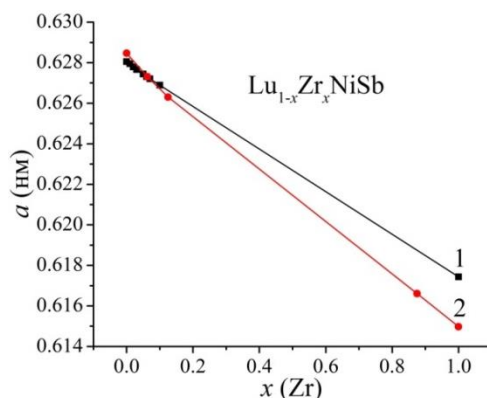


Рис. 1. Розрахована методами AkaiKKR (1) та Elk (2) зміна значень періоду елементарної комірки $a(x)$ термометричного матеріалу $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$

6. Моделювання термодинамічних характеристик $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$

Виходячи з того, що не існує сполуки ZrNiSb зі структурою MgAgAs, а значить і неперервного твердого розчину (100 % заміщення у структурі сполук атомів Lu на Zr і навпаки), важливо встановити межі можливого існування термометричного матеріалу $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$, отриманого шляхом заміщення у кристалографічній позиції $4a$ атомів Lu на Zr. Для дослідження можливості отримати термометричний матеріал $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$ та встановити межі його існування проведено моделювання термодинамічних характеристик у наближенні гармонійних коливань атомів у рамках теорії функціоналу густини DFT для гіпотетичного твердого розчину $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$, $x=0-1.0$. Зміна значень ентальпії змішування ΔH (рис. 2а) та повної енергії ΔE (рис. 2б) $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$, $x=0-1.0$, дозволяє стверджувати, що термометричний матеріал існує у вигляді твердого розчину заміщення у діапазоні концентрацій $x=0-0.20$. На цій концентраційній ділянці значення ентальпії змішування $\Delta H(x)$ та повної енергії $\Delta E(x)$ зростають, вказуючи на енергетичну доцільність заміщення атомів Lu на Zr. Однак за більших концентрацій домішкових атомів Zr, $x>0.20$, залежності $\Delta H(x)$ та $\Delta E(x)$ спадають, що свідчить про енергетичну невідповідність утворення твердого розчину заміщення. Відбувається розшарування (спіноїдальний розпад фази) і термометричний матеріал не існує.

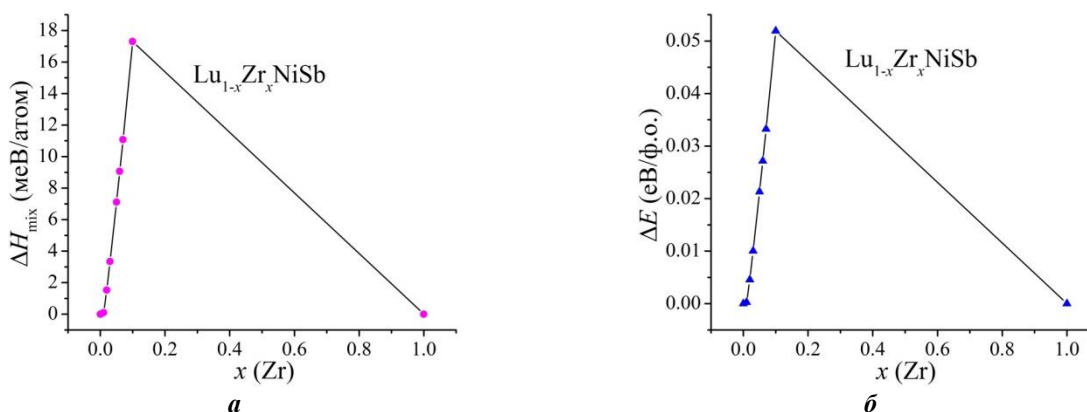


Рис. 2. Розрахунок методом Elk зміни значень ентальпії змішування ΔH (а) та повної енергії ΔE (б) термометричного матеріалу $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$

Отже, результати моделювання ентальпії змішування ΔH та повної енергії ΔE $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$ дозволяють стверджувати, що не існує необмеженої розчинності атомів Zr у структурі базового напівпровідника LuNiSb, а концентрація домішкових атомів Zr, $x \approx 0.2$, є межею існування твердого розчину заміщення, коли атоми Zr займають кристалографічну позицію $4a$. За більших концентрацій атомів Zr, $x > 0.20$, має місце розшарування (спіноїдальний розпад фази).

7. Моделювання енергетичних характеристик LuNiSb

Першим і найголовнішим кроком при моделюванні електронної структури напівпровідникового термометричного матеріалу $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$, зокрема поведінки рівня Фермі ε_F , ширини забороненої зони ε_g необхідно зрозуміти особливості просторового розташування та електронної структури базового напівпровідника $p\text{-LuNiSb}$. Саме ці особливості визначають спосіб входження домішкових атомів у матрицю напівпровідника, що визначає формування структурних дефектів різної природи та появу у забороненій зоні відповідних енергетичних рівнів.

Якщо прийняти за основу упорядковану модель кристалічної структури сполуки LuNiSb , в якій усі кристалографічні позиції зайняті атомами у відповідності до структурного типу MgAgAs , то моделювання електронної структури LuNiSb показує, що сполука є напівпровідником електронного типу провідності (рис. 3). Відповідно, рівень Фермі ε_F (пунктирна лінія) розташований біля зони провідності ε_C , що в експерименті дасть від'ємні значення коефіцієнта термо-ерс $\alpha(T)$ за всіх температур. Однак цей результат моделювання електронної структури базового напівпровідника $p\text{-LuNiSb}$ не узгоджується з результатами експериментальних досліджень [1], де отримано додатні значення коефіцієнта термо-ерс $\alpha(T)$.

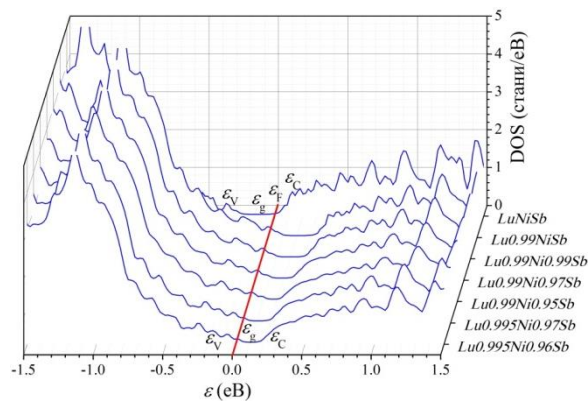


Рис. 3. Розрахунок розподілу густини електронних станів DOS для різних варіантів зайнятості кристалографічних позицій сполуки LuNiSb

Неузгодженість результатів експериментальних досліджень базового напівпровідника $p\text{-LuNiSb}$ та моделювання електронної структури для упорядкованої моделі його кристалічної структури вказує на її невпорядкованість. Отже, у кристалічній структурі сполуки LuNiSb має місце часткове зайняття атомами чужих позицій, а також можливими є наявність вакансій у різних кристалографічних позиціях. А вже у разі легування базового напівпровідника домішковими атомами саме наявність вакансій та зайнятість кристалографічних позицій визначатимуть способи формування структурних дефектів та енергетичних рівнів у забороненій зоні ε_g .

Саме тому важливо встановити особливості його кристалічної структури базового напівпровідника $p\text{-LuNiSb}$. Для встановлення кристалічної структури сполуки LuNiSb , максимально наближеної до її реальної стану, що відображається в узгодженості з результатами експериментальних вимірювань [1], проведено моделювання електронної структури LuNiSb для різних варіантів просторового розташування атомів та наявності вакансій у різних кристалографічних позиціях. На рис. 3. показано фрагмент результатів моделювання розподілу густини електронних станів для упорядкованої моделі кристалічної структури (всі атоми займають власні позиції) сполуки LuNiSb , однак кристалографічні позиції $4a$ атомів Lu та $4c$ атомів Ni містять певне число вакансій (атоми відсутні).

Так, у гіпотетичній сполуці $\text{Lu}_{0.99}\text{NiSb}$ ($y=0.01$) рівень Фермі ε_F змінить своє положення і розташовується на краю валентної зони ε_V : відбудеться перехід провідності діелектрик-метал (рис. 3), а основними носіями струму стають вільні дірки. Розташування рівня Фермі ε_F біля краю валентної зони або у самій зоні є зрозумілим, адже відсутність у кристалографічній позиції $4a$ атома Lu породжує структурний дефект акцепторної природи, що породжує у забороненій зоні акцепторний рівень (зону). При цьому експерименті матимемо додатні значення коефіцієнта термо-ерс $\alpha(T)$ $\text{Lu}_{0.99}\text{NiSb}$, а перетин рівня Фермі ε_F та валентної зони ε_V змінить провідність з активційної на металічну: значення питомого опору ρ зростатимуть з температурою. Такі результати моделювання стосовно типу основних носіїв електричного струму відповідають результатам експерименту [1]. Однак експериментальні дослідження [1] встановили, що на температурних залежностях питомого електроопору $\rho(T)$ LuNiSb присутні високо- та низькотемпературні активаційні ділянки, вказуючи на активацію дірок з рівня Фермі ε_F на край валентної зони ε_V . А отже рівень Фермі ε_F у реальному кристалі розташований у забороненій зоні напівпровідника, а не краю валентної зони ε_V , як показують результати моделювання для випадку $\text{Lu}_{0.99}\text{NiSb}$.

Найбільш прийнятною результатом експериментальних досліджень є модель електронної структури сполуки LuNiSb , яка передбачає наявність вакансій у кристалографічних позиціях $4a$ атомів Lu (~ 0.005) та $4c$ атомів Ni (~ 0.04) (рис. 3). За такої моделі просторового розташування атомів та наявності вакансій у позиціях $4a$ та $4c$ сполука LuNiSb є напівпровідником діркового типу провідності, у якого рівень Фермі ε_F розташований біля у

забороненій зоні біля краю валентної зони ε_V . За такої моделі електронної структури p -LuNiSb на температурних залежностях питомого електроопору $\rho(T)$ LuNiSb будуть присутні високо- та низькотемпературні активаційні ділянки, а значення коефіцієнта термо-ерс $\alpha(T)$, що відповідає результатам [1].

8. Моделювання кінетичних характеристик $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$

Моделювання поведінки питомого електроопору $\rho(x, T)$ та коефіцієнта термо-ерс $\alpha(T)$ $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$ проведено у температурному діапазоні $T=4.2\text{--}450$ К. На рис. 4 показані результати моделювання за температур $T=4.2\text{--}70$ К, а на рис. 5 – за температур $T=80\text{--}450$ К. Можемо бачити, що у LuNiSb значення питомого електроопору $\rho(x, T)$ у температурному діапазоні $T=4.2\text{--}70$ К стрімко зменшуються з ростом температури (рис. 4), що є характерним для напівпровідників, коли має місце збільшення числа вільних носіїв струму за рахунок їхньої активації з рівня Фермі ε_F . Такими носіями є вільні дірки, на що вказують додатні значення коефіцієнта термо-ерс $\alpha(T)$.

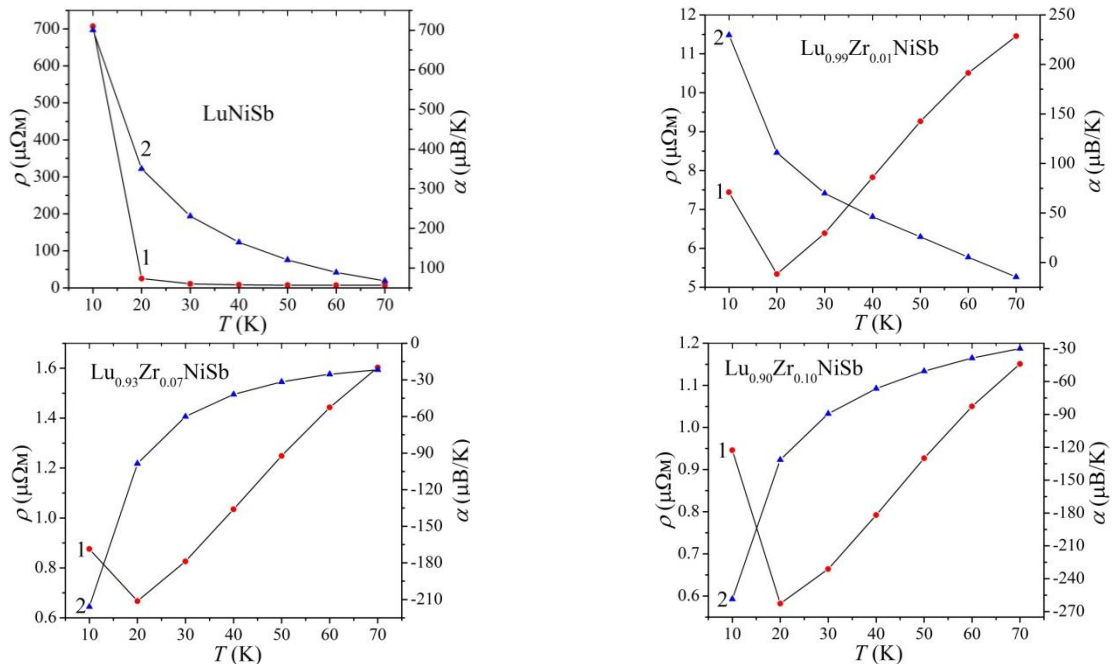


Рис. 4. Моделювання зміни значень питомого електроопору $\rho(T, x)$ (1) та коефіцієнта термо-ерс $\alpha(T, x)$ (2) $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$ за температур $T=4.2\text{--}70$ К

Уведення у структуру сполуки LuNiSb домішкових атомів Zr шляхом заміщення у позиції 4a атомів Lu генерує у напівпровіднику $\text{Lu}_{1-x}\text{Zr}_x\text{NiSb}$ структурні дефекти донорної природи. Моделювання зміни значень питомого електроопору $\rho(x, T)$ за найменшої концентрації атомів Zr ($x=0.01$) показує дві принципово різні ділянки: на ділянці температур $T=4.2\text{--}20$ К значення $\rho(T)$ зменшуються, що характерно для напівпровідників, а з ростом температури – зростають, вказуючи на металічний тип провідності. При цьому значення коефіцієнта термо-ерс $\alpha(T)$ стрімко зменшуються від значень $\alpha_{4.2\text{ К}}=225$ $\mu\text{В/К}$ до $\alpha_{70\text{ К}}=-20$ $\mu\text{В/К}$. Зміна знаку коефіцієнта термо-ерс $\alpha(T)$ засвідчує зміну типу електропровідності, коли основними носіями струму є вільні електрони. При цьому рівень Фермі ε_F розташується у зоні провідності ε_C напівпровідника $\text{Lu}_{0.99}\text{Zr}_{0.01}\text{NiSb}$.

За ще більшої концентрації атомів Zr ($x=0.07$ та $x=0.10$) у діапазоні температур $T=4.2\text{--}70$ К знак коефіцієнта термо-ерс $\alpha(T)$ залишається від'ємним, а характер зміни значень питомого електроопору $\rho(T)$ подібний, як і для випадку, коли концентрація атомів Zr становила $x=0.01$.

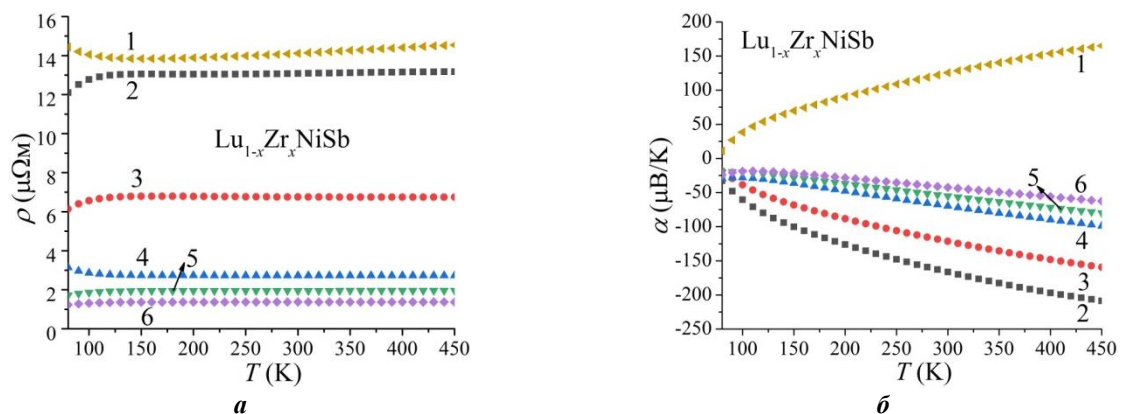


Рис. 5. Розрахунок зміни значень питомого електроопору $\rho(T, x)$ (а) та коефіцієнта термо-ерс $\alpha(T, x)$ (б)

Lu_{1-x}Zr_xNiSb за температур $T=70-450$ К: 1 – $x=0$, 2 – $x=0.01$, 3 – $x=0.02$, 4 – $x=0.05$, 5 – $x=0.07$, 6 – $x=0.10$

Те, що за усіх концентрацій атомів Zr у температурному діапазоні $T=4.2-20$ К значення питомого електроопору $\rho(T,x)$ *Lu_{1-x}Zr_xNiSb* спадають вказує на глибину залягання утвореної донорної зони. За низьких температур ($T < 20$ К) теплової енергії недостатньо, щоб відбулася активація електронів у зону провідності ε_C *Lu_{1-x}Zr_xNiSb*. Однак, за температур $T > 20$ К концентрація вільних електронів стає значною і рівень Фермі ε_F заходить у зону провідності ε_C напівпровідника, засвідчуючи перехід провідності діелектрик метал, що є переходом Мотта [1]. Температурні залежності питомого електроопору $\rho(x,T)$ та коефіцієнта термо-ерс $\alpha(T)$ *Lu_{1-x}Zr_xNiSb*, $x > 0$, у температурному діапазоні $T=80-450$ К не містять особливих точок, оскільки рівень Фермі ε_F розташований глибоко у зоні провідності. Про це свідчить металічний (не активаційний) характер зміни значень опору. Відповідно, знак коефіцієнта термо-ерс $\alpha(T,x)$ також прогнозовано є від'ємним, оскільки електрони є основними носіями електричного струму. У випадку *LuNiSb* значення питомого електроопору $\rho(T)$ та коефіцієнта термо-ерс $\alpha(T)$, як і в діапазоні концентрацій $T=4.2-70$ К, продовжують відповідно спадати, та збільшуватися. При цьому дірки залишаються основними носіями струму.

9. Висновки

Моделювання структурних, термодинамічних, енергетичних та кінетичних характеристик термочутливого матеріалу *Lu_{1-x}Zr_xNiSb* для випадку упорядкованої кристалічної структури показало, що у напівпровіднику генеруються як структурні дефекти донорної природи, концентрація яких росте при збільшенні вмісту атомів Zr. Досліджений твердий розчин *Lu_{1-x}Zr_xNiSb* є перспективним термометричним матеріалом, однак вимагає детальних експериментальних досліджень, чому буде присвячена наша наступна робота.

10. Подяка

Автори висловлюють вдячність членам наукового семінару кафедри інформаційно-вимірювальних технологій НУ «Львівська політехніка» за цікаву та змістовну дискусію за результатами даних досліджень.

11. Конфлікт інтересів

Автори заявляють про відсутність будь-якого фінансового або іншого можливого конфлікту, який стосується цієї роботи.

Список Літератури

- [1] L. Romaka, Yu. Stadnyk, V.A. Romaka, P. Klyzub, V. Krayovskyy, V. Pashkevych, A. Horyn, P. Garanuk. *Phys. Chem. Sol. St.*, Vol. 22(1), P. 146–152, 2021. (DOI: 10.15330/pcss.22.1.146-152).
- [2] M. Schrueter, H. Ebert, H. Akai, P. Entel, E. Hoffmann, G.G. Reddy. First-principles investigations of atomic disorder effects on magnetic and structural instabilities in transition-metal alloys, *Phys. Rev. B*, Vol. 52, P. 188–209, 1995.
- [3] V. Moruzzi, J. Janak, A. Williams. *Calculated Electronic Properties of Metals*. NY, Pergamon Press, 1978.
- [4] All-electron full-potential linearised augmented-plane wave (FP-LAPW) code – <http://elk.sourceforge.net>.
- [5] Momma K., Izumi F. VESTA. *J. Appl. Crystallogr.* Vol. 41, P. 653–658, 2008.