

УДК 537.32

**Маник О. М.** канд. фіз.-мат. наук,  
**Маник Т. О.** канд. фіз.-мат. наук,  
**Білінський-Слотило В. Р.** канд. фіз.-мат. наук

<sup>1</sup>Інститут термоелектрики НАН і МОН України, вул. Науки, 1,  
Чернівці, 58029, Україна, e-mail: anatysh@gmail.com;

<sup>2</sup>Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича,  
вул. Коцюбинського 2, Чернівці, 58012, Україна  
e-mail: anatysh@gmail.com

## КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА ТА ХІМІЧНИЙ ЗВ'ЯЗОК Cd-Sb-Zn

---

*Розроблено комплексний підхід для розрахунків параметрів електронної будови гібридних орбіталей, що відповідають нееквівалентним міжатомним відстаням у низькосиметричних кристалічних структурах. Проведено розрахунки ефективних зарядів, ефективних радіусів, перерозподілу електронної щільності, енергії дисоціації нееквівалентних гібридних орбіталей (НГО) у кристалічних структурах системи Cd-Sb-Zn. Отримані результати можуть бути використані при розробці технології одержання нових термоелектричних матеріалів на основі потрійних систем антимонідів кадмію та цинку. Бібл. 9, Табл. 2.*

**Ключові слова:** хімічний зв'язок, нееквівалентні гібридні орбіталі, кристалічні структури, діаграми станів поліморфні перетворення, фазові переходи, енергія дисоціації.

### Вступ

Кристалічні структури системи Cd-Sb-Zn є перспективними для використання їх як термоелектричних матеріалів [1]. Однак, для одержання матеріалів із прогнозованими властивостями необхідні дослідження, результати яких дозволять керувати відповідними технологічними режимами. У той же час інформація в цьому напрямку має в основному експериментальний характер [2]. Залежно від режимів термообробки сплави кадмію із сурмою, так само, як і цинку із сурмою, кристалізуються у відповідності зі стабільною або метастабільною діаграмами стану. При вивченні твердофазних перетворень особливий інтерес являють структурні зміни цих сплавів при нагріванні вище критичних й охолодженні до субкристалічних температур.

Діаграма стану системи Cd-Sb-Zn згідно [3] складається із трьох частинних діаграм стабільної рівноваги CdSb-ZnSb-(Cd, Sb, Zn), трьох метастабільної (1): Cd<sub>4</sub>Sb<sub>3</sub>-Zn<sub>4</sub>Sb<sub>3</sub>-(Cd, Sb, Zn) і трьох метастабільної (2): Cd<sub>3</sub>Sb<sub>2</sub>-Zn<sub>3</sub>Sb<sub>2</sub>-(Cd, Sb, Zn). У цій системі можуть бути сформовані різні структурні стани розплавів. Розріз CdSb-ZnSb є квазібінарним.

Результати рентгенографування сплавів трикомпонентної системи Cd-Sb-Zn свідчать, що відбувається утворення неперервного ряду твердих розчинів Sb<sub>2</sub>Zn<sub>3x</sub>Cdb<sub>3(1-x)</sub>, позначених γ-фазою, що утворюється на основі двокомпонентних сполук ζ- Zn<sub>3</sub>Sb<sub>2</sub> і Cd<sub>3</sub>Sb<sub>2</sub>, нестійких при кімнатній температурі.

Діаграма стану системи  $CdSb-ZnSb$ , побудована за кривими нагрівання, являє собою систему неперервного ряду твердих розчинів з мінімум на кривій ліквідусу в області 85 мол. %  $CdSb$ . Також відзначається утворення неперервного ряду твердих розчинів у рівноважних умовах, а в нерівновазі має місце утворення евтектики.

У роботі [4] була побудована стабільна діаграма квазібінарного розрізу  $CdSb-ZnSb$ . Виявлено явище термічної нестійкості структури розплавів, що полягає в можливості кристалізації різних за ступенем стабільності фаз. В окремому випадку швидке охолодження розплавів веде до нерівноважної кристалізації за стабільною діаграмою незалежно від ступеня перегріву. Наявність такої кількості експериментальної інформації дає можливість наблизитися до розв'язку проблеми теоретичного опису процесів плавлення та кристалізації.

Теоретичні міркування що, використовують класичні підходи при аналізі розплавленого стану речовин [5] ґрунтуються на відповідності обраної інтерпретаційної моделі до результатів конкретних експериментальних досліджень. Утруднення, що виникають при такому трактуванні експериментального матеріалу, призвели до необхідності розробки мікроскопічної теорії, що поєднує класичні схеми застосування різних методів до вирішення проблем матеріалознавства з позицій хімічного зв'язку [6].

За допомогою цих підходів у роботі [7] були проведені розрахунки коефіцієнтів пружності нееквівалентних хімічних зв'язків у кристалах твердих розчинів  $CdSb-ZnSb$ . Дана робота є продовженням початих в [7] досліджень природи хімічного зв'язку в кристалічних структурах системи  $Cd-Sb-Zn$ . Необхідність виконання такої роботи викликана тим, що низка питань, які стосуються технології одержання високоякісних матеріалів системи  $Cd-Sb-Zn$ , залишаються відкритими й мають суперечливий характер; термодинамічні константи майже не досліджені. У зв'язку із цим особливо актуальним стає проведення досліджень, що дають можливість кількісно описати взаємозалежність макроскопічних властивостей досліджуваних матеріалів з їхніми мікроскопічними параметрами з позицій хімічного зв'язку. З врахуванням наведених вище міркувань у даній роботі було поставлено завдання: узагальнити методи розрахунків, наведені в [8] на випадок кристалічних структур систем  $Cd-Sb-Zn$  і на основі квантовохімічного підходу провести розрахунки ефективних зарядів, ефективних радіусів, перерозподілу електронної щільності, енергії дисоціації нееквівалентних гібридних орбіталей (НГО), що відповідають нееквівалентним міжатомним відстаням у кристалічних структурах системи  $Cd-Sb-Zn$ ; провести співставлення отриманих результатів з наявними в літературі даними й дати рекомендації по розробці технологічних підходів одержання високоякісних термоелектричних матеріалів на основі кристалічних структур системи  $Cd-Sb-Zn$ .

### Квантовохімічні розрахунки параметрів НГО системи $Cd-Sb-Zn$

У роботі [8] аналіз емпіричної інформації про властивості елементів та електронну будову утворених ними сполук проводився з позицій іонних радіусів  $R_u$ . Найбільш прості співвідношення були отримані шляхом постулювання лінійної залежності числа електронів  $n$  у зовнішній оболонці атома від логарифма його фермієвського радіуса. Взаємозв'язок тангенса кута нахилу прямолінійних залежностей  $\text{tg}\alpha = \Delta \log R_u / \Delta n$  та електронегативностей дозволив записати співвідношення, яке дає добре узгодження комплексу дослідних даних у вигляді:

$$\log R_{uA}^x = \log R_{uA}^0 - x \text{tg}\alpha \quad (1)$$

де  $R_{uA}^0$  – радіус атома в незбудженому стані, а  $x$  – валентність.

Оскільки рівняння (1) описує зміни  $R_{iA}$  атомів  $A$  і  $B$  при зміні числа електронів на орбіталях кожного з них, то необхідно проаналізувати залежність міжатомних відстаней  $d_i$  від ефективних зарядів:  $d_i = f(z_{ef})$ . Виявилось що в будь-якій точці цієї залежності, крім  $d_i = d_{min}$  щільність заряду на границі іонів різна. Утворення зв'язку ( $A-B$ ) з  $d_i < d_{min}$  супроводжується перерозподілом заряду на інші напрямки міжатомної взаємодії, тобто зв'язок стає донорним. При цьому зменшення заряду ( $+\Delta q$ ) або його локалізації ( $-\Delta q$ ) на даному напрямку зв'язку однаково змінює значення заряду, яке має дана пара при  $d_i = d_{min}$ .

З врахуванням зазначених вище зауважень залежність (1) набуває вигляду системи рівнянь:

$$\log R_{UA}^{ZA} = \log R_{UA}^0 - (Z_{minA} + \frac{\Delta q}{2}) \operatorname{tg} \alpha_A \quad (2)$$

$$\log R_{UA}^{ZA} = \log R_{UA}^0 - (Z_{minA} + \frac{\Delta q}{2}) \operatorname{tg} \alpha_B \quad (3)$$

$$d_i = R_{UA}^{ZA} + R_{UB}^{ZB} \quad (4)$$

Функція  $d_i = f(z_{ef})$  розрахована у рамках кристалохімічного підходу за рівних валентностей ( $X_A = -X_B$ ) коректна з квантовомеханічної точки зору лише за  $d_i = d_{min}$ , але цього досить, щоб системи (2) – (4) розв'язувалася за відомого  $d_i$ .

Тому для розв'язання задачі необхідно було мати параметри ґратки, нееквівалентні міжатомні відстані як у підґратці  $CdSb$  так і в підґратці  $ZnSb$ . У такий спосіб ми маємо 5 НГО в підґратці  $CdSb$ ; 5НГО в підґратці  $ZnSb$  і одну НГО, коли в підґратці  $CdSb$  атом  $Cd$  буде заміщуватися атомом  $Zn$  і навпаки – зв'язок  $Cd-Zn$ . Чисельні значення цих міжатомних відстаней були отримані нами шляхом розв'язку оберненої задачі: за відомими експериментальними даними [9] щодо концентраційних залежностей періодів ґраток та щільностей  $CdSb-ZnSb$  було проведено розрахунки параметрів кристалічних структур  $Cd_xZn_{1-x}Sb$  різного складу ( $0 \leq x \leq 1$ ) з інтервалом  $\Delta x = 0.1$ ; було знайдені параметри ґратки та міжатомні відстані в наближенні закону Вегарда за методикою, розробленою в [6]. Результати розрахунків міжатомних відстаней у підґратках  $CdSb$  і  $ZnSb$  наведено в табл 1.

Таблиця 1

Концентраційні залежності міжатомних відстаней  $d_i$  у кристалічних структурах  $Zn_xCd_{1-x}Sb$

% Zn	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
$d_1(Cd-Sb)$ Å	2.80	2.784	2.768	2.752	2.736	2.72	2.704	2.688	2.672	2.656	-
$d_2(Cd-Sb)$ Å	2.81	2.794	2.778	2.762	2.746	2.73	2.714	2.698	2.682	2.666	-
$d_3(Cd-Sb)$ Å	2.91	2.895	2.88	2.865	2.85	2.835	2.82	2.805	2.79	2.771	-
$CdSb$ $d_4(Sb-Sb)$ Å	2.81	2.809	2.808	2.807	2.806	2.805	2.804	2.803	2.802	2.801	-
$Cd-Sb$ $d_5(Cd-Cd)$ Å	2.99	2.973	2.956	2.939	2.922	2.905	2.888	2.871	2.854	2.837	-

Продовження таблиці 1

$d_6(\text{Zn-Sb})$ Å	-	2.789	2.773	2.757	2.741	2.725	2.709	2.693	2.677	2661.	2.645
$d_7(\text{Zn-Sb})$ Å	-	2.793	2.777	2.76	2.744	2.727	2.71	2.694	2.677	2.66	2.64
$d_8(\text{Zn-Sb})$ Å	-	2.895	2.88	2.865	2.85	2.835	2.82	2.805	2.79	2.775	2.76
$ZnSb$ $d_9(\text{Sb-Sb})$ Å	-	2.809	2.808	2.807	2.806	2.805	2.804	2.803	2.802	2.801	2.80
$ZnSb$ $d_{10}(\text{Zn-Zn})$	-	2.973	2.956	2.939	2.922	2.905	2.888	2.871	2.854	2.837	2.82
$d_{11}(\text{Cd-Zn})$	2.99	2.973	2.956	2.939	2.922	2.905	2.888	2.871	2.854	2.837	2.82

У таблиці прийнято наступні позначення:  $\varphi_i$  позначає  $i$  – орбіталь з відповідною їй міжатомною відстанню  $d_i$ ;  $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$  – орбіталі зв'язків Cd-Sb з міжатомними відстанями  $d_1, d_2, d_3$ ;  $\varphi_4$  – Sb-Sb з міжатомною відстанню  $d_4$ ;  $\varphi_5$  відповідає зв'язку Cd – Cd з міжатомною відстанню  $d_5$ . Далі йдуть зв'язки  $\varphi_6, \varphi_7, \varphi_8$  – (Zn-Sb) з міжатомними відстанями  $d_6, d_7, d_8$ ;  $\varphi_9$  відповідає зв'язку (Sb-Sb), але вже у підгратці ZnSb і  $\varphi_{10}$  – (Zn-Zn) з відстанню  $d_{10}$ .

Наведені також міжатомні відстані для зв'язків (Cd-Zn) позначені відповідно  $\varphi_{11}$  – (Cd-Zn) і  $d_{11}$ .

Для знаходження ефективних зарядів, перерозподілу електронної щільності система рівнянь (2) – (4) записувалася для кожної  $i$ -тої орбіталі, а потім шляхом розв'язання оберненої задачі за відомими міжатомними відстанями  $d_i (1 \leq x \leq 11)$  знаходились  $R_{iCd}, R_{iZn}, R_{iSb}$ . Необхідні для проведення розрахунків значення  $R_{Cd}^0, R_{Zn}^0, R_{Sb}^0$  й  $\text{tg}\alpha_{Cd}, \text{tg}\alpha_{Zn}, \text{tg}\alpha_{Sb}$  були знайдені за методикою [8].

У результаті проведених розрахунків були отримані числові значення:

$$\begin{aligned} R_{UCd}^0 &= 1.51 \text{Å}; R_{UZn}^0 = 1.37 \text{Å}; R_{USb}^0 = 1.45 \text{Å}; \\ \text{tg}\alpha_{Cd} &= 0.097; \text{tg}\alpha_{Zn} = 0.135; \text{tg}\alpha_{Sb} = 0.074. \end{aligned} \quad (5)$$

Далі в даній роботі, у результаті врахування квантовомеханічної інтерпретації емпіричного матеріалу шляхом поєднання принципів теоретичного та експериментального підходів була отримана залежність енергії зв'язку НГО від міжатомних відстаней, ефективних радіусів і електронних конфігурацій атомів у кристалах CdSb-ZnSb у вигляді:

$$D_{A-B}^{(j)} = \frac{c_1(R_{UA}^0 + R_{UB}^0)}{(\text{tg}\alpha_A + \text{tg}\alpha_B)} \cdot \left( \frac{c_2 d_j}{d_j^2 - R_{UA} - R_{UB}} - \frac{1}{d_j} \right), \quad (6)$$

де  $R_{UA}^0$  й  $\text{tg}\alpha_{A(B)}$  – коефіцієнти рівнянь (2) – (4) для атомів  $A$  і  $B$ ,  $R_{UA}$  і  $R_{UB}$  – ефективні радіуси їх іонів у зв'язку ( $A-B$ ) довжиною  $d_j (1 \leq j \leq 11)$ ;  $C_1$  і  $C_2$  – постійні:  $C_1$  – коефіцієнт, що відображає взаємозв'язок розмірних і енергетичних характеристик міжатомної взаємодії, таких як потенціали іонізації, ефекти екранування, електронегативність із ефективними радіусами й міжатомними відстанями. У випадку використання несистемних одиниць, коли відстань вимірюється в ангстремах  $C_1$  – має розмірність в електрон-вольтах.  $C_2$  – коефіцієнт, що залежить від типу кристалічної структури, хімічному зв'язку. З урахуванням вимог теорії подібності коефіцієнт  $C_2$  вибирається безрозмірним.

Результати розрахунків енергії зв'язків окремих НГО для сполуки  $Cd_{0.5}Zn_{0.5}Sb$  наведені в табл. 2. При цьому значення коефіцієнта  $C_1$  і  $C_2$  в першому наближенні вибирались рівними одиниці.

Таблиця 2

*Ефективні заряди, ефективні радіуси й енергії дисоціації НГО в кристалічних структурах  $Cd_{0.5}Zn_{0.5}Sb$*

$\varphi_j$	$\varphi_1 (Cd-Sb)$	$\varphi_2 (Cd-Sb)$	$\varphi_3 (Cd-Sb)$	$Cd_{sb}$ $\varphi_4 (Cd-Cd)$	$Cd_{sb}$ $\varphi_5 (Cd-Cd)$	$\varphi_6 (Zn-Sb)$	$\varphi_7 (Zn-Sb)$	$\varphi_8 (Zn-Sb)$	$Zn_{sb}$ $\varphi_9 (Cd-Sb)$	$Zn_{sb}$ $\varphi_{10} (Cd-Sb)$	$\varphi_{10} (Cd-Zn)$
$d_j (\text{Å})$	2.72	2.73	2.835	2.805	2.905	2.725	2.727	2.835	2.805	2.905	2.905
$R_U^{Cd} (\text{Å})$	1.127	1.13	1.17	-	1.4525	-	-	-	-	-	1.515
$R_U^{Zn} (\text{Å})$	-	-	-	-	-	1.015	1.012	1.05	-	1.4525	1.39
$R_U^{Sb} (\text{Å})$	1.593	1.6	1.665	1.4025	-	1.71	1.715	1.785	1.4025	-	-
$\Delta q_j \%$	8	8	3.2	18.5	3	3.2	2	2	3.3	18.8	4.7
$D_j (eV)$	2.04	2.031	1.953	2.328	1.768	1.51	1.506	1.447	2.329	1.165	1.421

У табл. 2 також наведені значення ефективних радіусів  $R_{UCd}$ ,  $R_{UZn}$ ,  $R_{USb}$ , перерозподілу електронних щільностей  $\Delta q_i$  ( $1 \leq i \leq 11$ ) і міжатомних відстаней для яких розраховувалися значення  $D_i$ .

### Обговорення результатів

Аналіз отриманих результатів показав, що наведені в роботі залежності можна використовувати не тільки для розрахунків енергії зв'язків окремих НГО в кристалах  $Zn_xCd_{1-x}Sb$ , але й для розробки технологічних режимів одержання нових матеріалів із прогнозованим набором фізико-хімічних властивостей. Отримані в роботі результати узгоджуються з наведеними в роботах [2], [3] результатами досліджень діаграм стану стабільної й метастабільної рівноваги, уточнюють можливості фазових переходів і поліморфних перетворень при формуванні фізико-хімічних властивостей у нових синтезованих матеріалах залежно від атомних розмірів вихідних компонентів та їх фізико-хімічних параметрів.

Отримані в роботі результати також узгоджуються з результатами досліджень термічного перегрупування атомів у розплавах [4]. У зв'язку з цим особливого інтересу набуває інформація про механізм переходів від одних кластерних мікрогруп атомів до інших при формуванні структури розплавів здатних кристалізуватися за стабільним або метастабільним режимами. Результати наведені в даній роботі дозволяють установити способи зміни й з'ясувати потенційні можливості структурного стану розплавів системи  $Cd-Sb-Zn$ .

### Висновки

1. Розроблено методика застосування НГО для розрахунків міжатомної взаємодії в кристалічних структурах системи  $Cd-Sb-Zn$ .

2. Розроблено методику й проведено розрахунки перерозподілу зарядів на НГО, що характеризують утворення донорного або акцепторного зв'язку.
3. Проведено розрахунки ефективних радіусів, міжатомних відстаней і енергії дисоціації в кристалах  $Cd_{0.5}Zn_{0.5}Sb$ .
4. Отримані в роботі результати узгоджуються з результатами розрахунків параметрів хімічного зв'язку методами мікроскопічної теорії, результатами досліджень термічного перегрупування атомів у розплавах і можуть бути використані у процесі розробки технологічних режимів синтезу нових матеріалів на основі  $Zn_xCd_{1-x}Sb$ .

## Література

1. Анатычук Л.И. Термоэлементы и термоэлектрические устройства. – К.: Наукова думка, 1979. – 786 с.
2. Лазарев В.Б., Шевченко В.Я., Гринберг Я.Х., Соболев В.В. Полупроводниковые соединения группы  $A^{II}B^V$ . – М.: Наукова, 1978. – 252 с.
3. Дремлюженко С.Г. Системы на основе  $CdSb$ : диаграммы состояния, получение и свойства сплавов. Справочник. – Черновцы: Рута, 2002. – 127 с.
4. Псарев В.И., Кирий В.Г., Викторов В.В. Особенности кристаллизации твердых растворов квазибинарного разреза  $ZnSb-CdSb$  // Изв. АН СССР неорганические материалы. – 1979. – 15, №3. – С. 395-399.
5. Уббеллоде А.Р. Расплавленное состояние вещества. – М.: Металлургия, 1982. – 376 с.
6. Маник О.М. Багатофакторний підхід в теоретичному матеріалознавстві. – Чернівці: Прут, 1999. – 432 с.
7. Ерёменко А.И., Лотоцкий В.Б., Маник О.Н., Раранский Н.Д., Исследование особенностей химической связи в кристаллах твердых растворов  $CdSb-ZnSb$  // Термоэлектричество. – 2007, №1. – С. 53-65.
8. Manik O.N., Manik T.O., Bilinsky-Slotylo V.R. Peculiarities of electronic structure of hybrid orbitals and interatomic interaction in cadmium antimonite crystals. // Journal of Thermoelectricity/ – 2016. – №5 – P. 57-64.
9. Балазюк В.М., Грицюк Б.М., Драпак Л.С., Лотоцький В.Б., Новіков С.М. Раренко А.І. Анізотропія пружності і мікротвердості монокристалів твердих розчинів системи  $CdSb-ZnSb$ . // Науковий вісник Чернівецького університету. – 2001, випуск 112. Фізика. Електроніка. – С. 71-74.

Надійшла до редакції 10.10.2017

**Маник О. Н.** канд. физ.-мат. наук,<sup>1,2</sup>

**Маник Т. О.** канд. физ.-мат. наук,<sup>1,2</sup>

**Билинский-Слотыло В. Р.** канд. физ.-мат. наук<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Институт термоэлектричества НАН и МОН Украины, ул. Науки, 1,  
Черновцы, 58029, Украина, e-mail: anatyach@gmail.com;

<sup>2</sup>Черновицкий национальный университет имени Юрия Федьковича,  
ул. Коцюбинского 2, Черновцы, 58012, Украина

*e-mail: anatykh@gmail.com*

## КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И ХИМИЧЕСКАЯ СВЯЗЬ Cd-Sb-Zn

*Разработан комплексный подход для расчетов параметров электронного строения гибридных орбиталей, соответствующих неэквивалентным межатомным расстояниям в низкосимметричных кристаллических структурах. Проведены расчеты эффективных зарядов, эффективных радиусов, перераспределения электронной плотности, энергии диссоциации неэквивалентных гибридных орбиталей (НГО) в кристаллических структурах системы Cd-Sb-Zn. Полученные результаты могут быть использованы при разработке технологии получения новых термоэлектрических материалов на основе тройных систем антимонидов кадмия и цинка. Библиография, 9, Таблица 2.*

**Ключевые слова:** химическая связь, неэквивалентные гибридные орбитали, кристаллические структуры, диаграммы состояний, полиморфные превращения, фазовые переходы, энергия диссоциации.

**О.М. Manik**, *Candidate Phys.-math. Sciences*<sup>1,2</sup>

**Т.О. Manik**, *Candidate Phys.-math. Sciences*<sup>1,2</sup>

**V.R. Bilinsky-Slotylo**, *Candidate Phys.-math. Sciences*<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Institute of Thermoelectricity of the NAS and MES of Ukraine,  
1, Nauky str, Chernivtsi, 58029, Ukraine; *e-mail: anatykh@gmail.com*  
<sup>2</sup>Yurii Fedkovych Chernivtsi National University, 2, Kotsiubynskyi str.,  
Chernivtsi, 58012, Ukraine; *e-mail: anatykh@gmail.com*

## CRYSTALLINE STRUCTURE AND CHEMICAL BOND OF Cd-Sb-Zn

*A complex approach was developed for calculating the electronic structure of hybrid orbitals corresponding to nonequivalent interatomic distances in low-symmetry crystalline structures. Calculations of effective charges, effective radii, redistribution of the electron density, dissociation energy of nonequivalent hybrid orbitals (NHO) in Cd-Sb-Zn crystalline structures were carried out. The results can be used in the development of technology for obtaining new thermoelectric materials based on ternary systems of cadmium and zinc antimonides. Bibliography, 9, Table 2.*

**Key words:** chemical bond, nonequivalent hybrid orbitals, crystalline structures, state diagrams, polymorphous transformations, phase transitions, dissociation energy.

### References

1. Anatykhuk L.I. (1979). *Termoelementy i termoelektricheskiye ustroystva [Thermoelements and thermoelectric devices]*. Kyiv: Naukova dumka [in Russian].
2. Lazarev V.B., Shevchenko V.Ya., Grinberg Ya.Kh., Sobolev V.V. (1978). *Poluprovodnikovyye soedineniia grupy A<sup>II</sup>B<sup>V</sup> [Semiconductor compounds of A<sup>II</sup>B<sup>V</sup> group]*. Moscow: Nauka [in Russian].

3. Dremluzhenko S.G. (2002). *Sistemy na osnove CdSb: diagramma sostoianii, poluchenie i svoistva splavov. Spravochnik [Systems on the basis of CdSb: state diagram, manufacture and properties of alloys. Handbook]*. Chernivtsi: Ruta [in Russian].
4. Psarev V.I., Kirii V.G., Viktorov V.V. (1979). Osobennosti kristallizatsii tverdykh rastvorov kvazibinarnogo razreza ZnSb-CdSb [Crystallization features of solid solutions of ZnSb-CdSb quazi-binary section]. *Izvestiia Akademii Nauk SSSR. Neorganicheskie materialy – Bulletin of the USSR Academy of Sciences. Inorganic Materials*, 15 (3), 395 – 399 [in Russian].
5. Ubbelohde A.R. (1982). *Raspavlennoe sostoianie veshchestva [The molten state of matter]*. Moscow: Metallurgiya [Russian transl].
6. Manik O.M. (1999). *Bahatofaktornyi pidhid v teoretychnomu materialoznavstvi [Multi-factor approach in theoretical materials research]*. Chernivtsi: Prut [in Ukrainian].
7. Yeremenko A.I., Lototskii V.B., Manik O.N., Raranskii N.D. (2007). Peculiarities of chemical bond in crystals of CdSb-ZnSb solid solutions. *J. Thermoelectricity*, 1, 53 – 65.
8. Manik O.N., Manik T.O., Bilinsky-Slotylo V.R. (2016). Peculiarities of electronic structure of hybrid orbitals and interatomic interaction in cadmium antimonide crystals. *J. Thermoelectricity*, 5, 57 – 64.
9. Balaziuk V.N., Hrytsiuk B.M., Drapak L.S., Lototskyi V.B., Novikov S.M., Rarenko A.I. (2001). Anizotropiia pruzhnosti i mikrotverdosti monokrystaliv tverdykh rozchyniv systemy CdSb-ZnSb [Elasticity and microhardness anisotropy of single crystals of solid solutions of CdSb-ZnSb system]. *Naukovyi visnyk Chernivetskoho Universytetu. Fizyka. Elektronika – Scientific Bulletin of Chernivtsi University. Physics. Electronics*, 112, 71 – 74 [in Ukrainian].

Submitted 10.10.2017