

Domieszki rezonansowe w materiałach termoelektrycznych – struktura elektronowa i własności transportowe.

Bartłomiej Wiendlocha

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej, Akademia Górniczo-Hutnicza im. St. Staszica w Krakowie

W referacie przedstawię wybrane wyniki z serii 12 prac, stanowiących podstawę toczącego się obecnie postępowania habilitacyjnego. Przedmiotem moich badań było formowanie się i wpływ stanów rezonansowych na własności elektronowe, transportowe i termoelektryczne materiałów zawierających tzw. domieszki rezonansowe. Badanymi materiałami były, w głównej mierze, domieszkowane półprzewodniki, mające zastosowanie w modułach termoelektrycznych. Obliczenia teoretyczne *ab initio* wykonywane były w oparciu o teorię funkcjonału gęstości (DFT – *density functional theory*) i przy wykorzystaniu dwóch komplementarnych metod, tj. KKR-CPA (Korringi-Kohna-Rostokera z przybliżeniem potencjału koherentnego) oraz LAPW (zlinearyzowanych dołączonych fal płaskich). Badania teoretyczne w znacznej części prowadzone były we współpracy z grupami doświadczalnymi, zatem zaprezentowane zostaną również najciekawsze wyniki eksperymentalne.

Stany rezonansowe charakteryzują się powstawaniem wąskiego maksimum w parcjalnej gęstości stanów elektronowych na atomach domieszki. Jeśli koncentracja domieszek zostanie zwiększona, może nastąpić hybrydyzacja stanów domieszki ze stanami elektronowymi macierzystego materiału, prowadząc do silnej zmiany struktury elektronowej materiału wyjściowego, poza ramy modelu „sztywnego pasma”. Dodatkowo, stany rezonansowe powodują silne rozpraszanie nośników ładunku, znacznie wpływając na własności transportowe materiału, mogąc też modyfikować jego termosilę. Omówienie tematu zacznę od kanonicznego przykładu materiału ze stanami rezonansowymi, tzn. stopu Cu:Ni (konstantan), gdzie poziom rezonansowy powstaje na atomach Ni. Obecność rezonansu prowadzi do bardzo dobrych własności termoelektrycznych stopu Cu-Ni, wykorzystywanego do budowania termopar. Następnie, aby wykazać, że stan rezonansowy może podnosić termosilę w półprzewodnikach, omówię własności półprzewodnika PbTe domieszkowanego talem (Tl). Jako kontrprzykład materiału z domieszką nierezonansową, posłuży PbTe domieszkowany sodem (Na). Zaprezentowane zostaną wyniki obliczeń Blochowskich funkcji spektralnych, resztkowego przewodnictwa elektronowego, elektronowych czasów życia, masy efektywnej oraz termosily. Poza dostarczeniem informacji na temat podstawowych własności elektronowych w/w materiałów, obliczenia potwierdzają i wyjaśniają doświadczalnie obserwowany wzrost termosily w PbTe:Tl w porównaniu z PbTe:Na. W dalszej części przedstawię wyniki teoretyczne i doświadczalne badań nad bizmutem domieszkowanym indem, galem i cyną. Badania te pokazują inny aspekt formowania stanu rezonansowego, który może być interpretowany jako nowy mechanizm domieszkowania materiałów, pozwalający w ogólności uniknąć rozpraszania na zjonizowanych atomach domieszek. W końcowej części zaprezentuję wyniki poszukiwań nowych domieszek rezonansowych, prowadzonych dla materiałów z rodziny Mg_2X , Bi-Sb i tetradymitów (Bi_2Te_3 , Bi_2Se_3 , Bi_2Te_2Se , As_2Te_3).

1. CM. Jaworski, B. Wiendlocha, V. Jovovic and J.P. Heremans, *Energy & Environmental Science* **4**, 4155 (2011)
2. C.M. Orovets, A.M. Chamoire, H. Jin, B. Wiendlocha and J.P. Heremans, *J. Electron. Mater.* **41**, 1648 (2012).
3. J.P. Heremans, B. Wiendlocha and A.M. Chamoire, *Energy & Environmental Science* **5**, 5510 (2012)
4. B. Wiendlocha, *Physical Review B* **88** 205205 (2013)
5. B. Wiendlocha, *Applied Physics Letters* **105** (2014) 133901
6. S. Kim, B. Wiendlocha, H. Jin, J. Tobola, J.P. Heremans, *J. Appl. Phys.* **116**, 153706 (2014).
7. H. Jin, B. Wiendlocha and J.P. Heremans, *Energy & Environmental Science* **8**, 2027 (2015).
8. B. Wiendlocha, K. Kutorasinski, S. Kaprzyk, J. Tobola, *Scripta Materialia* **111**, 33 (2016).
9. B. Wiendlocha, *Journal of Electronic Materials* **45**, 3515 (2016).
10. J.P. Heremans, B. Wiendlocha, H. Jin, in *Advanced Thermoelectrics: Materials, Contacts, Devices, and Systems*, ed. Z. Ren, Y. Lan, Qi. Zhang, CRC Press, Taylor & Francis Group, Boca Raton, FL (USA), 2018.
11. B. Wiendlocha, J.B. Vaney, C. Candolfi, A. Dauscher, B. Lenoir, and J. Tobola, *Phys Chem Chem Phys* (2018).
12. B. Wiendlocha, *Physical Review B* **97**, 205203 (2018).