

W dzisiejszych czasach ludzie borykają się z problemem malejącej ilości paliw kopalnych, przy jednoczesnym wzroście zapotrzebowania na energię elektryczną. Warto zaznaczyć, że dwie trzecie energii wytwarzanej z paliw kopalnych jest dostarczane do środowiska jako ciepło odpadowe. Odzyskanie nawet niewielkiej ilości utraconego ciepła pozwoliłoby na znaczne oszczędności w wykorzystaniu paliw kopalnych i zmniejszenie emisji dwutlenku węgla do atmosfery. Właściwe wykorzystanie zjawiska termoelektrycznego, które polega na konwersji energii cieplnej w elektryczną, może być jednym z wielu sposobów rozwiązania tego problemu. Efekt termoelektryczny może być również stosowany w urządzeniach chłodzących Peltiera, które nie zawierają szkodliwych dla środowiska cieczy i gazów. Przewagę urządzeń termoelektrycznych nad klasycznymi rozwiązaniami zapewnia brak ruchomych części, dzięki czemu są ciche, wytrzymałe i niezawodne. Ostatnie postępy w dziedzinie rozwoju materiałów i narzędzi obliczeniowych pokazują, że urządzenia termoelektryczne mogą konkurować z tradycyjnymi technologiami chłodniczymi i wytwarzania energii.

Materiały termoelektryczne mogą pracować w różnych zakresach temperatur zależnie od ich zastosowania. W przypadku niskich i średnich temperatur zwykle stosuje się chalcogenki (S, Se, Te) i antymonki. Siarka jest jednym z najtańszych materiałów, dzięki czemu może być dobrym kandydatem na składnik materiałów termoelektrycznych. Ponadto siarka jest jednym z produktów ubocznych wydobywania ropy naftowej. Z tego względu produkcja siarki znacznie przewyższa jej konsumpcję. Wiele firm gromadzi siarkę na składach, stwarzając ogromne zagrożenie dla środowiska. W związku z tym niezbędne jest wykorzystanie siarki poprzez wytwarzanie cennych produktów, takich jak np. materiały termoelektryczne.

Niniejszy projekt poświęcony jest badaniu zjawiska termoelektrycznego a jego głównym celem jest znalezienie odpowiedniego półprzewodnika magnetycznego, który składa się między innymi z siarki. Przydatność materiału do zastosowań na elementy termoelektryczne opisuje współczynnik efektywności, zdefiniowany jako $ZT = \sigma S^2 / \kappa$, gdzie σ oznacza przewodność elektryczną, S – współczynnik Seebecka, T – temperaturę oraz κ – przewodność termalną. Wytworzenie materiałów o wysokim współczynniku ZT jest dużym wyzwaniem, ponieważ wartości σ , S i κ są determinowane przez te same zjawiska fizyczne. Dlatego zrozumienie zjawisk fizycznych odpowiedzialnych za transport elektronów i fononów w materiałach objętościowych jest bardzo ważne dla opracowania nowych strategii poprawy termoelektrycznego współczynnika efektywności ZT . Jedną z możliwości zwiększenia tego współczynnika jest poprawa właściwości elektrycznych materiału.

W projekcie zostaną przestudiowane dwa naturalne półprzewodniki magnetyczne: CuCr_2S_4 i CuFeS_2 . Spinel CuCr_2S_4 jest interesujący ze względu na odkryte niedawno właściwości magnetyczne – czysty materiał ma naturę metaliczną, natomiast nawet niewielki dodatek antymonu zmienia jego charakter na półprzewodnikowy, co znacząco polepsza jego właściwości termoelektryczne. Natomiast drugi zaproponowany materiał, chalkopiryt CuFeS_2 , wykazuje interesującą zależność współczynnika Seebecka od temperatury – w niskich temperaturach pojawia się pik, a następnie, w zakresie temperatur powyżej piku, współczynnik ten pozostaje bez zmian. Co więcej, opisana zależność została odwzorowana w obliczeniach w skali atomowej z wykorzystaniem metod obliczeniowych typu *ab initio*, jednak uzyskane wartości różnią się od eksperymentalnych.

Głównym celem projektu jest przeanalizowanie za pomocą obliczeniowych metod *ab initio* właściwości termoelektrycznych faz para-, ferro- i antyferromagnetycznych wspomnianych półprzewodników magnetycznych: CuCr_2S_4 i CuFeS_2 oraz znalezienie domieszek typu p i n (odpowiednio antymonu, oraz domieszek z grupy fluorowców), które znacząco poprawiłyby właściwości termoelektryczne proponowanych materiałów. Pierwsze badania zostaną przeprowadzone z wykorzystaniem obliczeń *ab initio*, a następnie, najbardziej obiecujące materiały domieszkowane zostaną zweryfikowane eksperymentalnie. Na podstawie wyników uzyskanych w projekcie możliwe będzie również przeanalizowanie korelacji między właściwościami termoelektrycznymi a magnetyzmem.

Technologicznym wyzwaniem jest wytworzenie materiałów o dużej wydajności termoelektrycznej. Natomiast problemem naukowym projektu jest zrozumienie i rozwinięcie zdolności do przewidywania i optymalizacji właściwości termoelektrycznych. Wyniki tego projektu mogą być niezwykle pomocne w identyfikacji technologicznie istotnych strategii poprawy wydajności materiałów termoelektrycznych opartych na półprzewodnikach magnetycznych.