

Streszczenie popularnonaukowe

Tytuł projektu: Półprzewodniki diamentopodobne jako tanie materiały termoelektryczne do bezpośredniej konwersji ciepła odpadowego w energię elektryczną

Motywacja

Rosnące koszty energii, wyczerpujące się zasoby naturalne, zanieczyszczenie środowiska i globalne zmiany klimatu to pilne kwestie, przed którymi stoi dzisiejsze społeczeństwo. Konwersja energii termoelektrycznej (TE) może skutecznie przyczynić się do zrównoważonego zaopatrzenia w energię, podczas gdy odzyskiwanie ciepła odpadowego przez generatory TE (TEG) jest dobrym sposobem na zmniejszenie zużycia paliw kopalnych i emisji CO₂. Jednak wysoki koszt, średnia wydajność i toksyczność najlepszych materiałów TE ograniczają możliwość masowej produkcji konwerterów TE. Dlatego poszukiwanie tanich i przyjaznych dla środowiska materiałów o wysokiej wydajności konwersji energii jest jednym z głównych zadań inżynierii materiałowej TE i rozwoju energii TE. Półprzewodniki diamentopodobne (DLS) są obiecującą rodziną materiałów TE, które mogą skutecznie odpowiedzieć na wyżej wymienione wyzwania.

Cel projektu

Projekt ma na celu opracowanie nowych tanich, przyjaznych dla środowiska i wysoce wydajnych materiałów termoelektrycznych z rodziny półprzewodników diamentopodobnych poprzez jednoczesną inżynierię transportu elektronowego i fononowego. Aby osiągnąć cele projektu, proponujemy następujące koncepcje:

- 1) Inżynieria stanów defektowych (DS). DS zostanie wprowadzony do przerwy wzbronionej materiałów półprzewodnikowych w celu ustanowienia źródła nośników ładunku dla wzmocnienia transportu elektronicznego. Takie podejście wyeliminuje negatywny wpływ nieoptymalizowanej przerwy wzbronionej i dynamicznie zwiększy koncentrację nośników wraz ze wzrostem temperatury.
- 2) Podejście niejednorodności wiązań (BI). Obecność niejednorodności wiązań zostanie wykorzystana do zakłócenia transportu fononów i znacznego zmniejszenia przewodności cieplnej sieci.

Opis badań

W ramach projektu zbadamy strukturę krystaliczną, właściwości mikrostrukturalne, stabilność termiczną oraz właściwości transportu elektronicznego i cieplnego lekkich materiałów DLS. Połączymy informacje o strukturze krystalicznej, energiach tworzenia defektów, energiach aktywacji przewodnictwa elektrycznego i obliczeniach transportu Boltzmanna, aby zweryfikować zdolność DS do wytwarzania nośników aktywowanych termicznie do transportu elektronicznego. Z kolei zdolność do silnego zakłócania transportu fononowego poprzez podejście niejednorodności wiązania zostanie zbadana poprzez analizę wyników obliczeń funkcji lokalizacji elektronów, pomiarów ultradźwiękowych i obliczeń Debye'a-Callawaya. Główne aspekty badań można wymienić w następujący sposób: i) ustanowienie skalowalnych i powtarzalnych metod syntezy; ii) oszacowanie optymalnych warunków dla inżynierii DS i BI przy użyciu obliczeń energii tworzenia defektów i analizy wiązań; iii) opracowanie procedury spiekania dla powtarzalnych i odtwarzalnych właściwości termoelektrycznych; iv) optymalizacja właściwości transportu elektronicznego i cieplnego w kierunku wysokiej wydajności TE przy użyciu koncepcji DS i BI.

Oczekiwane wyniki

Celem tego 3-letniego projektu jest opracowanie nowych lekkich materiałów DLS typu *n* i *p* o wysokiej wydajności termoelektrycznej, zapewniających drogę do dojrzałych i zrównoważonych konwerterów TE. Główny cel projektu zostanie zrealizowany poprzez synergiczne zastosowanie koncepcji DS i BI zaproponowanych w projekcie.