

Autor rozprawy: mgr inż. Piotr Zwoleński

Promotor: prof. dr hab. inż. Janusz Tobała

## **Teoretyczne badania wpływu domieszkowania na strukturę elektronową i własności transportowe stopów krzemku magnezu wykazujących silny efekt Seebecka**

### Streszczenie:

Tematem rozprawy doktorskiej są badania teoretyczne wybranych układów termoelektrycznych w oparciu o obliczenia struktury elektronowej, w celu poprawy elektronowych własności transportowych (np. termosily). Rozprawa dotyczy związków  $Mg_2X$  ( $X = Si, Ge, Sn$ ) wykazujących silny efekt Seebecka. W pracy omówione zostały podstawowe zjawiska fizyczne zachodzące w materiałach termoelektrycznych oraz przedstawiona została prosta metoda obliczania współczynnika Seebecka (termosily) na podstawie funkcji gęstości stanów elektronowych. Zaprezentowano metodę KKR-CPA (*Korringa-Kohn-Rostoker method with the coherent potential approximation*) służącą do obliczeń struktury elektronowej układów nieuporządkowanych. Zastosowanie przybliżenia koherentnego potencjału (CPA) pozwoliło na przywrócenie symetrii translacyjnej w badanych układach zawierających nieporządek chemiczny w postaci różnych defektów punktowych (podstawienia, domieszki, wakancje). W szczególności przeanalizowano wpływ tego typu defektów na pojawianie się elektronowego (lub dziurowego) przewodnictwa elektrycznego w układach  $Mg_2X$ . Defekty modyfikowały zarówno kształt elektronowych gęstości stanów DOS, jak też miały wpływ na położenie poziomu Fermiego za skali energii. Zbadano także strukturę elektronową stopów  $Mg_2(Si-Ge)$  i  $Mg_2(Si-Sn)$ . Pokazano, że  $Mg_2Si_{1-x}Sn_x$  wykazuje konwergencję (degenerację) dwóch pasm przewodnictwa w pobliżu punktu X w strefie Brillouina dla krytycznego stężenia  $x \sim 0.7$ . Ta cecha struktury elektronowej jest jedną z przyczyn poprawy własności termoelektrycznych stopu w stosunku do analogicznych własności obserwowanych w związkach  $Mg_2Si$  i  $Mg_2Sn$ . Warto zauważyć, że struktura elektronowa stopu  $Mg_2Si_{1-x}Ge_x$  nie wykazuje podobnych zachowań. Przeanalizowano też strukturę elektronową kilkudziesięciu domieszek rozcieńczonych na różnych pozycjach w  $Mg_2Si$ , uzyskując informacje o charakterze przewodnictwa, tendencji w zachowaniach termosily, jak też o stanie magnetycznym domieszek. W ostatniej części pracy przedstawiono wyniki obliczeń energii tworzenia wybranych domieszek w  $Mg_2Si$ . Energię tworzenia rozpatrywano w dwóch przypadkach granicznych, określonych przez więzy nałożone na potencjały chemiczne atomów magnezu i krzemu. Pozwoliło to na zbadanie preferencji podsięci przy podstawianiu, jak też analizę stabilności tych domieszek. Dodatkowo przeanalizowano energię tworzenia stopów  $Mg_2(Si-Ge)$  i  $Mg_2(Si-Sn)$  względem związków bazowych  $Mg_2X$  ( $X = Si, Ge, Sn$ ), która wskazała na termodynamiczne warunki sprzyjające powstaniu odrębnych faz w  $Mg_2(Si-Sn)$ . Dyskutowano też wpływ defektów punktowych, takich jak wakancje czy położenie atomów w pozycjach międzywęzłowych, na własności elektronowe tych związków.