

## Výpočty termoelektrických vlastností z elektronových struktur aneb hledání pudinku ve špagetách.

Karel Knížek, Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i., Cukrovarnická 10, Praha 6, [knizek@fzu.cz](mailto:knizek@fzu.cz)

Jiří Hejtmánek, Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i., Cukrovarnická 10, Praha 6, [hejtman@fzu.cz](mailto:hejtman@fzu.cz)

Termoelektrickým jevem rozumíme schopnost daného materiálu generovat elektrického napětí za přítomnosti teplotního gradientu, a tím zajišťovat přeměnu tepelné energie na energii elektrickou. Pro určení účinnosti přeměny energie se používá bezrozměrná materiálová veličina  $ZT = T(S^2 \cdot \sigma) / (\lambda_L + \lambda_e)$ , kde  $S$  je termoelektrická síla (Seebeckův koeficient),  $\sigma$  je elektrická vodivost,  $\lambda$  je mřížová ( $\lambda_L$ ) a elektronová ( $\lambda_e$ ) tepelná vodivost, a  $T$  je absolutní teplota. Pro zvýšení parametru  $ZT$  je nutné, aby termoelektrický materiál měl tyto vlastnosti:

- (1) **nízkou tepelnou vodivost**  $\lambda$ , která je nezbytná pro vytvoření velkého teplotního gradientu v materiálu,
- (2) **vysokou elektrickou vodivost**  $\sigma$ , která je potřebná pro snížení vnitřního odporu materiálu, a
- (3) **velkou termoelektrickou sílu**  $S$ , která je potřeba k získání vysokého napětí.

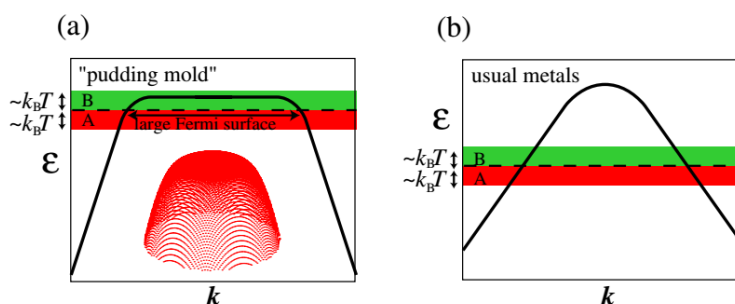
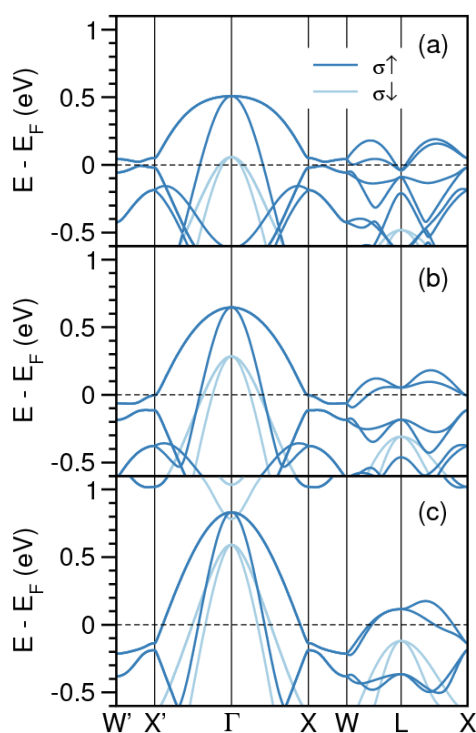
V této práci se zaměříme na predikci termoelektrických vlastností pomocí výpočtů elektronových struktur. Programem [Wien2k](#), založeném na teorii DFT (Density Functional Theory), se nejprve provedou výpočty pásových struktur (slangově nazývaných *špagety*). Z tvaru těchto pásů v okolí Fermiho meze se pak pomocí programu [BoltzTraP](#), vycházejícím z Boltzmannovy transportní rovnice, určí elektronová část transportních vlastností  $S$ ,  $\sigma$  a  $\lambda_e$ , tzn. vyjma  $\lambda_L$ . Můžeme takto spočítat elektronovou část parametru  $ZT_e = T(S^2 \cdot \sigma) / \lambda_e$  a díky tomu odhadnout, které materiály by mohly být efektivní pro termoelektrickou konverzi. Z hlediska elektronové struktury je pro velký Seebeckův koeficient potřeba velká hustota stavů na Fermiho mezi, a zároveň pro velkou elektrickou vodivost je potřeba velká derivace závislosti energie v  $k$ -prostoru. Obě podmínky jsou nejlépe splněny pro speciální tvar pásu, tzv. pudding-mold (forma na *pudink*). Cílem práce je pomocí výpočtů programy Wien2k a BoltzTraP na vybraných systémech najít materiály s tímto tvarem pásu blízko Fermiho meze a příp. dopováním elektronů nebo děr dosáhnout posunu Fermiho meze na tento pás. Z hlediska pásové struktury to tedy znamená hledání *pudinku ve špagetách*.

Další informace lze nalézt na WWW stránkách našeho oddělení:

[Laboratoř termoelektrických materiálů](#)

[Laboratoř strukturních a elektronových vlastností](#)

[Energy conversion by thermoelectric effect](#)



↑ Příklady tvaru pásu „pudding mold“ pro optimální termoelektrické vlastnosti a pro typický kov.

← Příklad výpočtu pásové struktury pro sérii  $\text{CuCr}_2\text{X}_4$  a)  $\text{X}=\text{S}$ , b)  $\text{X}=\text{Se}$ , c)  $\text{X}=\text{Te}$ . Tvaru „pudding mold“ nejlépe odpovídá tvar pásu pro a)  $\text{X}=\text{S}$ . Pro optimalizaci termoelektrických vlastností je ještě potřeba posunout Fermiho mez  $E_F$  do vyšších energií, tzn. doplnit elektrony. Toho se dá dosáhnout další substitucí, např.  $\text{CuCr}_2\text{S}_{4-x}\text{Cl}_x$ .