

Rosnące na świecie zapotrzebowanie na energię i wyczerpywanie się zasobów naturalnych stanowią silną motywację do lepszego wykorzystania dostępnych zasobów energii i rozwoju nowych źródeł energii. Materiały i urządzenia termoelektryczne są związane z ekologicznymi źródłami energii ze względu na możliwość konwersji ciepła odpadowego na energię elektryczną lub odwrotnie. Jedynym niezależnym parametrem, który silnie wpływa na właściwości termoelektryczne materiałów, jest ich sieciowe przewodnictwo cieplne. Znalezienie sposobu na powiązanie transportu ciepła z aspektami struktury krystalicznej ma kluczowe znaczenie dla projektowania nowych materiałów o ultraniskim sieciowym przewodnictwie cieplnym do termoelektrycznej konwersji energii.

Badania struktury krystalicznej i właściwości transportu ciepła w materiałach o sieci gęsto upakowanych tetraedrów (TCP, z ang. *tetrahedrally close-packed*) (związki typu β -Mn i argyrodytu) pokazują, że prawdopodobnie występują interakcje par elektronów niewiążących, niejednorodność wiązań chemicznych i nieuporządkowanie strukturalne jako główne powody ich ultraniskiego sieciowego przewodnictwa cieplnego. Jednak ewidentny związek między tymi zjawiskami a transportem ciepła w strukturach TCP nadal nie został ustalony.

W tym projekcie chcemy znaleźć związek między właściwościami strukturalnymi a transportem ciepła obiecujących materiałów termoelektrycznych opartych na $\text{Cu}_6\text{Te}_3\text{S}$ i $\text{Cu}_{9.1}\text{TeSb}_3$ o sieci gęsto upakowanych tetraedrów. Szczególna uwaga zostanie poświęcona wpływowi struktury krystalicznej i wiązań chemicznych na właściwości transportu ciepła tych obiecujących materiałów termoelektrycznych. Co więcej, takie odkrycie powinno sugerować więcej przyczyn chemicznych przewidywania niskiego przewodnictwa cieplnego w krystalicznych ciałach stałych.

Aby rozwiązać te problemy, zostaną zrealizowane następujące cele:

- Systematyczne badanie struktury krystalicznej materiałów na bazie $\text{Cu}_6\text{Te}_3\text{S}$ i $\text{Cu}_{9.1}\text{TeSb}_3$ oraz analiza wiązań chemicznych pomiędzy atomami.

- Badanie właściwości transportu elektrycznego i cieplnego w materiałach na bazie $\text{Cu}_6\text{Te}_3\text{S}$ i $\text{Cu}_{9.1}\text{TeSb}_3$.

- Poszukiwanie nowych przyczyn strukturalnych, które są głównie odpowiedzialne za transport cieplny we wszystkich badanych związkach o sieci gęsto upakowanych tetraedrów w celu przewidywania materiałów o niskim sieciowym przewodnictwie cieplnym.

Przypuszczamy, że niejednorodność wiązań chemicznych w materiałach na bazie $\text{Cu}_6\text{Te}_3\text{S}$ i $\text{Cu}_{9.1}\text{TeSb}_3$ może być głównie odpowiedzialna za niskie sieciowe przewodnictwo cieplne. Efektywna inżynieria wiązań chemicznych pomoże obniżyć transport ciepła i dostroić właściwości elektronowe w kierunku wysokiej wydajności termoelektrycznej badanych materiałów. Zastosowanie zaawansowanych technik eksperymentalnych i teoretycznych pozwoli odkryć pochodzenie ultraniskiego sieciowego przewodnictwa cieplnego w związkach o sieci gęsto upakowanych tetraedrów, w tym materiałów na bazie $\text{Cu}_6\text{Te}_3\text{S}$ i $\text{Cu}_{9.1}\text{TeSb}_3$, a także związków z typem struktury β -Mn i argyrodytu.

Ze względu na złożoność struktury krystalicznej związków TCP, rozwiązanie struktury krystalicznej pozwoli nam znaleźć możliwe sposoby jej modyfikacji w celu kontrolowania właściwości fizycznych. Co więcej, dokładnie określona struktura krystaliczna pozwoliłaby nam zrozumieć pochodzenie właściwości transportu cieplnego badanych związków i przeprowadzić optymalizację składu chemicznego w celu poprawy ich wydajności termoelektrycznej.

Wierzimy, że w trakcie realizacji projektu odkryjemy nowe deskryptory chemiczne materiałów o ultraniskim sieciowym przewodnictwie cieplnym. Co więcej, końcowe wnioski z projektu pomogą nam zrobić krok dalej w chemicznym zrozumieniu transportu elektronowego i cieplnego w materiałach funkcyjnych.