

Struktura elektronowa a efektywność zjawisk konwersji energii w złożonych strukturach krystalicznych

prof. dr hab. inż. Janusz Tobała

KFMS WFiIS AGH

Od XIX wieku wiadomo, że materiały krystaliczne o specyficznych właściwościach fizyko-chemicznych potrafią przekształcać różne formy energii, z wykorzystaniem np. zjawiska termoelektrycznego, magnetokalorycznego czy też procesów elektrochemicznych. Niemniej stosunkowo niedawno - dzięki intensywnym badaniom teoretycznym - udało się skorelować skuteczność tych efektów z cechami struktury elektronowej, manifestującymi się obserwowanymi zachowaniami transportowymi, a nawet elektrochemicznymi. Podjęte próby poprawy wydajności procesów konwersji energii, wymagały zastosowania kwantowego opisu mechanizmów transportu elektronów połączone z zaawansowanymi obliczeniami struktury elektronowej. W referacie przedstawione zostaną przykładowe wyniki badań teoretyczno-eksperymentalnych w materiałach termoelektrycznych z uwzględnieniem realnych cech kryształów, w których zidentyfikowano unikalne cechy struktury elektronowej (np. konwergencja czy współliniowość pasm, silnie nieparaboliczne relacje dyspersji, wpływ oddziaływań relatywistycznych na anizotropię mas efektywnych), jako bezpośrednio odpowiedzialne za wzrost konwersji termoelektrycznej. Ponadto zaprezentowane zostaną ostatnie wyniki badań wpływu cech struktury elektronowej na charakter krzywych rozładowania w układach baterii Li-/Na-jonowych.