الخصائص الكهروحرارية لثلاثي أنتيمونيد الكوبالت

هلا مرعي رشاد ابوشحاده

المستخلص

الازدياد السريع في استهلاك البشر للطاقة على مستوى العالم والاعتماد على الوقود الحفري كمصدر أساسي للطاقة في حين أن مصادر الطاقة الحفرية تؤول للاضمحلال وضارة للبيئة؛ أدى إلى الحاجة للبحث عن مصادر بديلة للطاقة بحيث تكون متجددة وصديقة للبيئة. يعتبر توليد الطاقة الكهروحرارية (تحويل الطاقة الحرارية لطاقة كهربية) أحد الحلول الممكنة لأزمة الطاقة العالمية. عُرضت خلال هذه الدراسة نتائج حسابات نظرية لمعاملات النقل الكهروحرارية لثلاثي أنتيمونيد الكوبالت ($CoSb_3$)، وهو أحد المواد الواعدة لإنتاج الطاقة الكهروحرارية. عُرِضت نتائج حسابات التوصيل الحراري للفونونات (الشبيكة البلورية) نظريًا لأربع عينات تم تحضيرها عن طريق فرق بحثية مختلفة تحت ظروف تحضير مختلفة أيضًا في خطوات منظمة ودقيقة. بدايةً تم تطبيق نموذج كالاوي (Callaway's model) لحساب التوصيل الحراري للشبيكة، والذي يتطلب حساب معدل استرخاء الفونونات بعد عمليات التشتت المختلفة التي تمر بها مع الأخذ بالاعتبار تأثير التصادمات العادية (N-processes) بين الفونونات على مدى واسع من درجات الحرارة. في خلال هذه الحسابات، تم اتباع مخطط سريفاستافا (Srivastava's scheme) لحساب معدل استرخاء الفونون عند تصادمه مع فونون آخر. تم التوصل لتطابق جيد جدًا بين النتائج النظرية والقراءات المعملية للعينات الأربع. كذلك تم حساب وتحليل مساهمات عمليات التشتت المختلفة في المقاومية الحرارية للشبيكة. إضافة إلى ذلك، عُرِضت نتائج حساب تأثير الحد الناتج عن التصادمات العادية (N-drift term) وكذلك متوسط المسار الحر للفونونات للعينات الأربعة على طول المدى المستخدم لدرجات الحرارة. أخيرًا حُسِب تغير مستوى طاقة فيرمي مع درجات الحرارة لعينة واحدة نظريًا، وتم استخدام نتيجة هذا الحساب لحساب تغير معامل سيبك مع درجات الحرارة لنفس العينة. بدايةً، حُسِبت الخصائص الكهربية باعتبار قيمة ثابتة لمعامل تشتت الإلكترونات، ثم أُعيد اجراء الحسابات باعتبار معامل تشتت الإلكترونات قيمة قابلة للتعديل؛ مما أدى لوصول لتطابق أفضل مع القراءات المعملية.

Thermoelectric Properties of Cobalt Triantimonide

Hala Marrei Aboushehada

Abstract

The rapid increase in the global energy consumption and our dependence on the depleting and environmentally hazardous fossil fuel raise the need to find green and sustainable energy resources. Thermoelectric power generation is one of the possible solutions for the global energy problem. In this work, a theoretical study of thermoelectric transport coefficients of a promising thermoelectric material, cobalt triantimonide, has been presented. Lattice thermal conductivity of $CoSb_3$ was theoretically calculated for four samples, which were experimentally prepared and studied by different research groups under different conditions, using a systematic and rigorous approach. Calculations were carried out over a wide temperature range by applying Callaway's model, which involves calculating the relaxation time of phonons due to different scattering processes while taking into consideration the role of N-processes. In addition, Srivastava's rigorous scheme was utilised to calculate the relaxation time of phonons due to three-phonon scattering. A very good agreement between the theoretically obtained results and the experimentally reported data is shown. Moreover, the contributions of each scattering process towards lattice thermal resistivity have been quantitatively analysed and presented. Furthermore, both the contribution of the N-drift term in Callaway's model towards thermal conductivity and the mode-average phonon mean-free path have been calculated over the entire temperature range. Finally, the temperature variation of the Fermi energy for a sample has been theoretically calculated and used to calculate the temperature variation of the Seebeck coefficient for the same sample. Electronic properties have been evaluated considering the scattering parameter to be constant, then re-evaluated considering the scattering parameter to be adjustable. The later calculations showed better agreement with experimental results.