

REZUMATUL RAPORTULUI ȘTIINȚIFIC AL PROIECTULUI INSTITUȚIONAL

15.817.02.29F

Raport științific 80 p., figuri 37, tabele 2, bibliografie 79.

În cadrul proiectului instituțional 15.817.02.29F „*Fenomene fononice și termoelectronice în materiale nanostructurate*” au fost cercetate teoretic proprietățile fononice și termoconductibile ale diferitor nanostructuri: grafenul laminat, nanofirele segmentate Si/Ge, nanotuburile Si/SiO₂ și grafenul bistrat „*twisted*”. Au fost de asemenea studiate proprietățile termoelectrice ale nanofirelor segmentate Si/Ge și efectuat studiul teoretico-experimental complex al proprietăților structurale, electrofizice, termoconductibile și de chemosorbție în peliculele nanocristaline din sistemul ZnO-In₂O₃-SnO₂ (ZITO), obținute prin metoda spray-pirolizei. Am arătat, că în nanostructurile cercetate rolul dimensiunii cristalitelor, frontierele de separare dintre ele și sarcina adsorbatului pe aceste frontiere, care influențează domeniul sarcinii spațiale din apropierea suprafeței, devin determinante pentru transportul electronilor și fononilor.

Cercetările teoretice a fononilor și a conductibilității termice în grafenul laminat, nanofirele segmentate Si/Ge, nanotuburile Si/SiO₂ și în grafenul bistrat „*twisted*” au fost efectuate în cadrul modelelor dinamice ale oscilațiilor rețelei cristaline (modelul „*face-centered cubic cell*” și modelul Born-von Karman), dezvoltate în proiect, și a formalismului ecuației cinetice Boltzmann în aproximația perioadei de relaxare. Am stabilit, că:

- factorul principal, care determină conductibilitatea termică a grafenului laminat, este dimensiunea nanocristalelor: majorarea dimensiunilor lor duce la creșterea esențială a conductibilității termice (de 5 - 10 ori) la temperatura camerei. Acest efect se explică prin diminuarea împrăștierii fononilor pe nanocristalite odată cu majorarea parcursului liber al fononilor.
- în nanofirele segmentate Si/Ge are loc suprimarea puternică a transportului de căldură din cauza captării modelelor fononice în segmentele nanofirului. În rezultatul acestui efect conductibilitatea termică de rețea se micșorează de 2 – 3 ori comparativ cu firul omogen din siliciu ori germaniu, iar factorul termoelectirc de calitate ZT crește de 2 – 8 ori în dependență de temperatură și concentrația purtătorilor de sarcină.
- vitezele de grup ale fononilor în nanotuburile Si/SiO₂ sunt mai mici decât în nanofirele omogene din siliciu datorită „*confinement*”-ului mai puternic al fononilor în aceste structuri, cât și datorită influenței materialului SiO₂ cu viteză a sunetului mai joasă.
- un nou tip de fononi hibridi dependenți de rotația dintre straturi apare în grafenul bistrat „*twisted*” din cauza reducerii dimensiunilor zonei Brillouin și modificării interacțiunii dintre straturi.

Pentru măsurarea parametrilor structurali ai peliculelor ZITO, a conductibilității electrice și a tensiunii electromotoare termice am utilizat următoarele metode: XRD (X-ray diffraction), EDAX (energy dispersive analysis), XPS (X-ray photoelectron spectroscopy); măsurările conductibilității termice au fost efectuate prin metodele "Laser Flash" și TDTR (time domain thermorefectivity).

Analiza structurală a peliculelor ZITO a arătat, că:

- în sistemul ZITO la variația compoziției Zn și Sn (până la 50 – 60 at.%), iar în sistemul ZIO a compoziției Zn (până la 100 at.%), domină cristalitele cu rețeaua cristalină In_2O_3 de tipul bixbiit (grupa spațială 206); la doparea cu Ga acest diapazon este marginit de limita solubilității (10 at.%).
- peliculele depuse sunt nanocristaline, având dimensiunea cristalitelor de 15 – 30 nm în dependență de temperatura pirolizei și temperatura sintezei; creșterea compoziției după Zn, Sn și Ga duce la micșorarea dimensiunii cristalitelor; în peliculele ZITO și ZIO în afara soluției solide se observă cristalite ale altor faze de oxid, spre exemplu ZnO cu diferite singonii cristaline, $\text{In}_2\text{O}_3(\text{ZnO})_3$, ș.a.

Măsurările factorului de putere (FP) prin intermediul măsurării conductibilității electrice și a tensiunii electromotoare termice în cazul peliculelor ITO (10 at.%Sn) și ZITO (25 at.%Zn) ($\text{FP} = 1,5 \text{ mW}/(\text{m}\cdot\text{K}^2)$ și $\text{FP} = 2,3 \text{ mW}/(\text{m}\cdot\text{K}^2)$, corespunzător), dopate cu Ga (5 – 8 at.%), au arătat o creștere a FP comparativ cu peliculele fără adaos de Ga. Ce-a mai mare majorare o demonstrează peliculele ZITO:Ga (de peste 3 ori). Măsurările conductibilității termice transversale prin metoda „Laser Flash” și TDTR pentru peliculele ITO (5 at.% Sn) cu valoare maximală a factorului de putere au furnizat valoarea conductibilității termice κ în diapazonul 0.9 – 1.5 W/(m·K) la temperatura camerei. Aceste valori au permis de a estima valoarea factorului termoelectric de calitate ZT la temperatura de lucru $T_{\text{oper}} = 450^\circ\text{C}$ ca fiind egală cu 1.5.

Un rezultat important al cercetărilor este și crearea modelului cantitativ consecvent al chemosorbiției oxigenului, coadsorbiției apei și influenței acestor procese asupra conductibilității electrice a oxidului semiconductor la temperatura de lucru a convertorului. Acest lucru a permis de a confirma teoretic efectul de filtrare a electronilor în oxidul semiconductor degenerat și a explica valorile înalte ale factorului de putere. Rezultatele științifice, obținute în cadrul proiectului, vor fi utilizate la actualizarea cursurilor de studii, ținute de colaboratorii proiectului la Facultatea de Fizică și Inginerie a Universității de Stat din Moldova.

Pe baza rezultatelor obținute au fost publicate **130 lucrări științifice**, dintre care **2** monografii, **15** capitole în monografiile internaționale, **44** articole științifice în revistele internaționale (RI) cu factor de impact (FI) (**15** articole în revistele internaționale cu **FI > 3**, **18** articole în revistele internaționale cu **FI între 1.0 și 2.9** și **11** articole în revistele internaționale cu **FI < 1.0**); au fost susținute **3** teze de doctor în științe fizice și **1** teză de doctor habilitat în științe fizice.