

**Karta zgłoszenia tematyki badawczej
w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych
dla kandydatów do Szkoły Doktorskiej
w roku akademickim 2023/2024**

Proponowana tematyka doktoratu
Badania symulacyjne w ramach teorii funkcjonału gęstości właściwości elektrycznych i cieplnych materiałów dla elektroniki
Dyscyplina naukowa (<i>niewłaściwe skreślić</i>)
AUTOMATYKA, ELEKTRONIKA, ELEKTROTECHNIKA i TECHNOLOGIE KOSMICZNE BUDOWNICTWO, GEODEZJA I TRANSPORT INŻYNIERIA MECHANICZNA
Proponowany promotor
prof. dr. hab. Bohdan Andriyevskyy Wydział Elektroniki I Informatyki; Katedra Elektroniki ulica: Śniadeckich 2; budynek A; pokój: 303 e-mail: bohdan.andriyevskyy@tu.koszalin.pl; telefon: 94 34 78 690
Krótki opis tematyki badań ze wskazaniem problematyki naukowej (max. 350 słów)
Proponowany temat badań związany jest z poszukiwaniem efektywnych materiałów półprzewodnikowych na termoelektryczne przetworniki energii słonecznej, w oparciu o efekt Seebecka. Wiadomo, że termoelektryczny współczynnik jakości, $ZT = \alpha^2 \sigma T / \kappa$, jest główną cechą materiału termoelektrycznego (α – współczynnik Seebecka, σ – właściwa przewodność elektryczna, T – temperatura, κ – współczynnik przewodności cieplnej). Celem proponowanych badań jest uzyskanie tych wartości dla materiałów półprzewodnikowych o strukturze krystalicznej argyrodytu, $Cu_7P(S_xSe_{1-x})_6$, $Ag_7P(S_xSe_{1-x})_6$ i podobnych substancji perspektywicznych, poprzez wykonanie badań symulacyjnych w ramach teorii funkcjonału gęstości. Ostatecznie do zastosowań praktycznych zostanie zaproponowana substancja posiadająca optymalne wartości termoelektryczne
Uzasadnienie celowości podjęcia tematyki badawczej (max. 150 słów)
Cel proponowanych badań jest uzasadniony potrzebą pozyskania substancji do termoelektrycznego przetwarzania energii cieplnej
Proponowane tematy prac doktorskich w ramach proponowanej tematyki badań (do 3 tematów)
Badania symulacyjne w ramach teorii funkcjonału gęstości właściwości elektrycznych i termicznych wybranych materiałów półprzewodnikowych

Źródła finansowania tematyki badawczej (tematyka realizowanych obecnie grantów naukowych finansowanych ze źródeł zewnętrznych lub w ramach subwencji)
W ramach dotacji
Potwierdzenie możliwości zapewnienia dostępu do aparatury naukowej oraz oprogramowania niezbędnego do realizacji proponowanej tematyki badawczej (<i>niewłaściwe skreślić</i>)
W PEŁNI / CZĘŚCIOWO / BRAK
W przypadku odpowiedzi CZĘŚCIOWO lub BRAK proszę wskazać rodzaj brakującej aparatury naukowej i/lub oprogramowania oraz źródła finansowania dostępu do nich
-

Wykaz ważniejszych publikacji (maksymalnie 5), związanych z proponowaną tematyką badawczą, publikowanych w czasopiśmie indeksowanym w Web of Science lub Scopus za okres ostatnich 3 lat (z uwzględnieniem współczynnika wpływu czasopisma oraz punktacji MEiN)
<ol style="list-style-type: none"> 1. Electron, phonon and thermoelectric properties of Cu_7PS_6 crystal calculated at DFT level / B. Andriyevsky, I.E. Barchiy, I.P. Studenyak, A.I. Kashuba, M. Piasecki / <i>Scientific Reports</i> 11 (2021) 19065 / 5 Year IF 4.409 / 140 pkt. /DOI: 10.1038/s41598-021-98515-6 2. Growth, crystal structure and theoretical studies of energy and optical properties of $\text{CdTe}_{1-x}\text{Se}_x$ thin films / A. Kashuba, H. Ilchuk, R. Petrus, B. Andriyevskyy, I. Semkiv, E. Zmiiovska / <i>Applied Nanoscience</i>, Springer, (2021) / 5 Year IF 3.362 / 100 pkt. /DOI: 10.1007/s13204-020-01635-0 3. Impact of structure complexity on optoelectronic and non-linear optical properties in quaternary $\text{Ag(Pb)-Ga(In)-Si(Ge)-S(Se)}$ systems / M. Piasecki, G. Myronchuk, O.Y. Khyzhun, A. Fedorchuk, B. Andriyevsky, I. Barchyi, M. Brik / <i>J. Alloys and Compounds</i> 909 (2022) 164636 / 5 Year IF 5.155 / 100 pkt. /DOI: 10.1016/j.jallcom.2022.164636. 4. Highly anisotropic layered crystal $\text{AgBiP}_2\text{Se}_6$: Growth, electronic band-structure and optical properties / V.Vu. Tuan, O.Y. Khyzhun, A.A. Lavrentyev, B.V. Gabrelian, V.I. Sabov, M.Y. Sabov, M.Y. Filep, A.I. Pogodin, I.E. Barchiy, A.O. Fedorchuk, B. Andriyevsky, M. Piasecki / <i>Mater. Chem. Phys.</i> 277 (2022) 125556 / 5 Year IF 3.984 / 100 pkt. /DOI: 10.1016/j.matchemphys.2021.125556 5. Ab initio studies of the gas adsorption on the surface $\text{CdSe}_{1-x}\text{S}_x$ ultra-thin films / A. I Kashuba, I. V. Semkiv, B. Andriyevsky, H. A. Ilchuk, N. Yu. Kashuba / <i>Applied Nanoscience</i> (2023) / 5 Year IF 3.362 / 100 pkt. /DOI: 10.1007/s13204-023-02771-z
Wykaz grantów naukowych finansowanych przez Narodowe Centrum Nauki, Narodowe Centrum Badań i Rozwoju oraz European Research Council, w których promotor brał udział w okresie ostatnich 5 lat
-
Wykaz usług badawczych realizowanych na rzecz przemysłu związanych z proponowaną tematyką badawczą za okres ostatnich 5 lat
-