

**Karta zgłoszenia tematyki badawczej  
w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych  
dla kandydatów do Szkoły Doktorskiej  
w roku akademickim 2022/2023**

Proponowana tematyka doktoratu
<b>Badania symulacyjne w ramach teorii funkcjonału gęstości właściwości termoelektrycznych materiałów półprzewodnikowych</b>
Dyscyplina naukowa ( <i>niewłaściwe skreślić</i> )
AUTOMATYKA, ELEKTRONIKA I ELEKTROTECHNIKA INŻYNIERIA LĄDOWA I TRANSPORT INŻYNIERIA MECHANICZNA
Proponowany promotor
Prof. dr hab. inż. Bohdan Andriyevskyy Wydział Elektroniki i Informatyki; Katedra Elektroniki ul. Śniadeckich 2; budynek A; pokój 303 e-mail: bohdan.andriyevskyy@tu.koszalin.pl ; tel. : 94 34 78 690

Krótki opis tematyki badawczej ze wskazaniem problematyki naukowej (max. 350 słów)
Proponowana tematyka badań jest związana z poszukiwaniem efektywnych materiałów półprzewodnikowych dla przetworników termoelektrycznych energii słonecznej, bazujących na zjawisku Seebeck'a. Wiadomo, że termoelektryczny współczynnik jakości, $ZT = \alpha^2 \sigma T / \kappa$ , jest główną charakterystyką materiału termoelektrycznego ( $\alpha$ – współczynnik Seebecka'a, $\sigma$ - właściwa przewodność elektryczna, $T$ – temperatura, $\kappa$ - współczynnik przewodności cieplnej). Celem proponowanych badań jest uzyskanie tych wielkości dla materiałów półprzewodnikowych ze strukturą krystaliczną argyrodytu, $Cu_7P(S_xSe_{1-x})_6$ i $Ag_7P(S_xSe_{1-x})_6$ , poprzez wykonanie badań symulacyjnych w ramach kwantowej teorii funkcjonału gęstości.
Uzasadnienie celowości podjęcia tematyki badawczej (max. 150 słów)
Celowość podjęcia proponowanego badania jest uzasadniona potrzebą poszukiwań optymalnych materiałów dla przetworników termoelektrycznych energii słonecznej.
Proponowane tematy prac doktorskich w ramach zgłaszanej tematyki badawczej (do 3 tematów)
Badania symulacyjne w ramach teorii funkcjonału gęstości właściwości termoelektrycznych półprzewodników $Cu_7P(S_xSe_{1-x})_6$ i $Ag_7P(S_xSe_{1-x})_6$
Źródła finansowania tematyki badawczej (tematyka realizowanych obecnie grantów naukowych finansowanych ze źródeł zewnętrznych lub w ramach subwencji)
Finansowanie ze źródeł wewnętrznych

Potwierdzenie możliwości zapewnienia dostępu do aparatury naukowej oraz oprogramowania niezbędnego do realizacji proponowanej tematyki badawczej (*niewłaściwe skreślić*)

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 czasopismach indeksowanych w Web of Science lub Scopus za okres ostatnich 3 lat (z uwzględnieniem współczynnika wpływu czasopisma oraz punktacji MEiN)

B. Andriyevsky, I.E. Barchiy, I.P. Studenyak, A.I. Kashuba, M. Piasecki. Electron, phonon and thermoelectric properties of  $\text{Cu}_7\text{PS}_6$  crystal calculated at DFT level. *Scientific Reports* 11 (2021) 19065 (<https://doi.org/10.1038/s41598-021-98515-6>) (140 punktów)

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

Brak

Wykaz usług badawczych realizowanych na rzecz przemysłu związanych z proponowaną tematyką badawczą za okres ostatnich 5 lat

Brak