

Rezumat pentru raport anual Program Nucleu (maxim 2 pagini format A4, Times New Roman 12, la un rand)

Titlu Faza: Noi compusi Heusler. Studiul proprietatilor magnetice si termoelectrice in raport cu structura electronica specifica

Obiective: Prezenta faza a proiectului presupune caracterizarea structurii electronice si a proprietatilor de transport, in noul compus cuaternar Heusler  $\text{CoFeZrSi}$ , prin modelare teoretica folosind Teoria Functionalei de Densitate (Density Functional Theory –DFT) pentru posibile aplicatii spintronice si termoelectrice.

Rezultate estimate initial: Dispozitivele electronice avand compusi Heusler cuaternari  $\text{XX}'\text{YZ}$ , cu o distributie ordonata a atomilor, in general au o disipare a puterii mai mica comparativ cu cele avand in componenta materiale pseudo-ternare tipice  $\text{X}_2\text{Y}_{1-x}\text{Y}'_x\text{Z}$ . Acest fenomen se datoreaza faptului ca o distributie aleatoare a atomilor, implica o imprastiere aditionala a electronilor si conduce la o crestere a rezistivitatii totale. Structura compusilor cuaternari  $\text{XX}'\text{YZ}$  cu stoichiometrie 1:1:1:1, deriva dintr-una din cele doua structuri Heusler tipice, avand unul din prototipurile  $\text{LiMgPdSn}$  sau  $\text{LiMgPdSb}$ , cu diferite ocupari ale pozitiilor atomice din cadrul retelei, descrisa de intrepatrunderea a doua subretele cubice si anume: Tipul I – $\text{Si}(4a)\text{Fe}(4c)\text{Zr}(4b)\text{Co}(4d)$ , Tipul II-  $\text{Si}(4a)\text{Zr}(4c)\text{Fe}(4b)\text{Co}(4d)$  sau Tipul III- $\text{Fe}(4a)\text{Si}(4c)\text{Zr}(4b)\text{Co}(4d)$ .

Raportat recent in literatura ca un potential material feromagnetic moale,  $\text{CoFeZrSi}$  a motivat prezentul studiu. Astfel, pe baza Teoria Functionalei de Densitate, au fost investigate teoretic “ab initio” proprietatile magnetice de semi-metal si de transport, asociate deformatiilor structurii cristaline tipice.

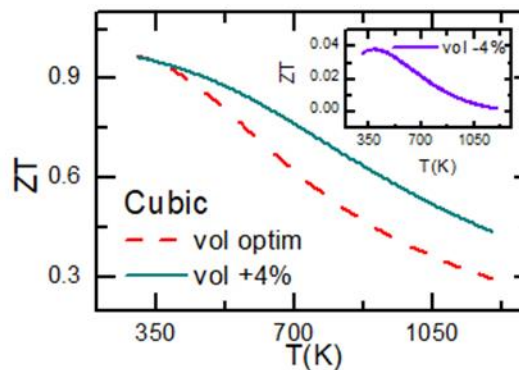
Rezultate obtinute (scurta descriere a celor mai importante rezultate, cu 1-2 imagini/grafice de impact care sustin rezultatele):

Materialele nano-structurate, compuse din straturi magnetice subtiri cu proprietati semi-metalice (half-metallic properties) crescute pe straturi tampon sau cu proprietati antiferomagnetice au atras in ultimii ani un interes stiintific semnificativ. Cu toate acestea, rezultatele raportate si disponibile in literatura releva faptul ca distorsiunile sau dezorganizarea in retea cristalina in cazul filmelor subtiri constituie unul dintre cele mai mari impedimente in producerea materialelor termoelectrice multitrat. In acest context, au fost studiate deformatiile in urma carora celula unitate trece din structura cubica, fie in cea tetragonala (prin modificarea raportului  $c/a$  cu -4% respectiv 2% precum si cresterea/descrerea volumului (+ 4% / - 4%) sau in cea triclinica (pentru care in plus de modificarile utilizate in studiul structurii tetragonale, a fost micorat si unghiul  $\gamma$  cu un grad).

Structurile de benzi electronice obtinute pentru structurile descrise mai sus au constituit punctul de plecare pentru analiza proprietatilor de transport (coeficientii Seebeck si conductibilitatea

electrica in functie de timpul de relaxare) folosind codul BoltzTraP [4] implementat pe baza ecuatiilor semi-clasice, de transport ale lui Boltzmann.

Eficienta unui material termoelectric poate fi evaluata prin parametrul termoelectric de calitate adimensional  $ZT = S^2\sigma T/\kappa_{te}$  unde  $S$ ,  $\sigma$ ,  $T$  si  $\kappa_{te}$  sunt coeficientul Seebeck, conductibilitatea electrica, temperatura absoluta si respectiv conductibilitatea termica electronica. Asa cum se poate observa din Figura 1 eficienta materialului studiat este ridicata la 350K. In plus, cu cat structura devine din ce in ce mai relaxata, fara insa sa isi modifice structura cristalina favorabila energetic (cubica), eficienta termoelectrica a materialului caracterizata de constanta adimensionala  $ZT$  se imbunatateste.



Figură 1 Eficienta materialului CoFeZrSi studiat in functie de temperatura pentru structura optima energetic si cubica a carui volum creste cu +4%.

#### Bibliografie:

- [1] T.Kanbe, A.Hashimoto, and T.Fukushima, US Patents US20110235479 A1(2011), US8270286 B2(2012), US20130194901 (2013).
- [2] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka si J. Luitz (2009) Wien2k An Augmented PlaneWave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, WIEN2k code, ISBN 3-9501031-1-2 .
- [3] A. Birsan J. Alloys Compd 710 (2017) 339
- [4] G.K.H. Madsen D.J.Singh,BoltzTraP. (2006) Computer Physics Communications, 175 (1), pp. 67-71.

Concluzii si perspective: S-a demonstrat ca aliajul CoFeZrSi prezinta un parametru termoelectric de calitate adimensional  $ZT$  semnificativ de mare in cazul cristalizarii in structura cubica si tetragonala, inasa daca unghiul  $\gamma$  descreste cu un grad si structura cristalina devenind triclinica, compusul isi pierde din proprietatile termoelectrice.

Rezultatele teoretice obtinute pe parcursul ultimelor luni privind compusul CoFeZrSi au fost trimise spre diseminare la o revista stiintifica indexata Thomson Reuters Scientific Database (ISI). si se afla in stadiul de revizie.

Continuarea proiectului presupune analiza detaliata a proprietatilor termoelectrice in functie de temperatura pe cele doua canale (de spin up si spin down), mai concret a coeficientului Seebeck, a conductibilitatii /rezistivitatii electrice si a conductibilitatii termice electronice pentru deformari tetragonale si triclinice ale celulei elementare primitive ale compusului CoFeZrSi, ce poate fi considerat un potential candidat pentru aplicatii termoelectrice imediate, ca material component in substraturi ale heterostructurilor epitaxiale