

Proprietățile termoelectrice și optice ale materialelor nanostructurate și dispozitivelor cu puncte cuantice

15.817.02.22F

Director de proiect Prof. Univ. Dr. Hab. A. Casian

A fost elaborat un model fizic nou, mai adecvat pentru descrierea proceselor de transport în cristale organice nanostructurate cu proprietăți termoelectrice mai performante. În direcția firelor conductive a fost aplicată reprezentarea de bandă pe baza funcțiilor de undă delocalizate de tip Bloch. Iar în direcția transversală a fost aplicată reprezentarea de noduri pe baza funcțiilor de undă localizate. Au fost calculate elementele matriciale de interacțiune a electronilor de conducție cu vibrațiile rețelei cristaline determinate de variațiile energiei de transfer și de variațiile energiei de polarizare a moleculelor, în cristale organice nanostructurate în reprezentarea mixtă. Modelarea fizică a fost aplicată pe cristale de TTT_2I_3 de tip p și $\text{TTT}(\text{TCNQ})_2$ de tip n . A fost calculată funcția Green a deplasărilor rețelei cristaline retardată, dependentă de temperatură. În aproximația fazelor aleatorii a fost dedus operatorul de polarizare pentru diferite valori ale parametrilor cristalului. A fost determinat spectrul renormat al fononilor acustici $\Omega(\mathbf{q})$ din ecuația de dispersie și a fost calculată temperatura de tranziție Peierls: 54 K în cristale de TTF-TCNQ și pentru TTT_2I_3 s-a demonstrat că tranziția începe la 35 K în lanțurile moleculare de TTT. Însă tranziția se realizează la temperatura de 19 K, când ar trebui să apară o nouă superstructură cristalină și deasupra nivelului Fermi ar trebui să se deschidă o bandă interzisă largă. Prin compararea cu rezultatele raportate experimental, au fost stabiliți un set de parametri ai cristalului. Au fost deduse expresiile analitice parametrilor de transport și termoelectrice. S-a obținut, că coeficientul termoelectric atinge o valoare maximă pentru anumite valori ale energiei Fermi. Au fost calculate dependențele conductivității termice electronice și a factorului termoelectric de calitate ZT în funcție de concentrația purtătorilor de sarcină (goluri) pentru diferite valori ale parametrilor cristalelor. Pentru TTT_2I_3 s-a obținut, că în cristalele stoichiometrice $ZT < 0.02$ și nu depinde de puritatea cristalelor. Însă ZT va crește până la 1.0 în cristalele existente, sintetizate din fază gazoasă, dacă concentrația golurilor este micșorată de 1.5 ori. În cristale mai perfecte, $ZT \sim 2.2$ și chiar 4.5, în comparație cu $ZT \sim 1$ în cristalele comerciale de Bi_2Te_3 .

A fost propus un model fizic care descrie feedback-ul optic ce provine de la o cavitate dublă. S-a arătat că lungimea rezonatorului influențează drastic comportamentul laserului. Au

fost pregătite ecuațiile ce descriu dinamica laserului sub influența feedback-ului. Ulterior au fost obținute analitic ecuațiile transcendente pentru stările staționare așa numite moduri ale cavității exterioare. S-a studiat stabilitatea acestor stări. Au fost determinate condițiile optime pentru generarea haosului optic și de sincronizare a două lasere identice cu feedback optic cuplate unidirecțional. Pentru intensități mici ale feedback-ului optic s-a obținut domeniul, în care este prezent doar un singur mod. S-a arătat că modurile cavității exterioare suplimentare apar în perechi atunci când se traversează curba de bifurcație nod-șă. S-a demonstrat prezența diferitor regimuri în evoluția puterii emergente precum unde continue, oscilații periodice, dublare de perioadă și în final – haos. Rezultatele obținute au fost implementate în cadrul proiectului STCU-5993 din cadrul Departamentului Fizică.

A fost propus un nou dispozitiv laser. Schema dispozitivului cercetat constă dintr-un laser cu mediu activ puncte cuantice ce funcționează sub influența unui feedback optic multiplu provenit de la cavități exterioare. Dinamica laserelor este descrisă de sistemul de ecuații complexe Bloch. S-a demonstrat că datorită influenței unui feedback optic extern de la mai multe cavități, în condiții adecvate, sistemul manifestă un comportament haotic complex. S-au obținut condițiile de realizare a comportamentului haotic și de sincronizare a două astfel de lasere. S-a demonstrat influența parametrilor relevanți ai dispozitivului asupra proprietăților de sincronizare. S-a examinat criptarea și decriptarea unui mesaj digital cu ajutorul tehnicii de modulare haotică. S-a demonstrat că prezența mai multor cavități exterioare are ca rezultat apariția unor oscilații mai complexe ale sistemului. Pe de altă parte dispozitivul a devenit mai compact decât cele raportate anterior și poate fi aplicat în comunicarea optică bazată pe haos.

Împreună cu partenerii din Germania s-a propus un nou dispozitiv laser cu mediu activ gropi cuantice și cu secțiune reflector de tip Bragg. Schema dispozitivului cercetat permite controlul deplin al semnalului emergent. S-au obținut valorile parametrilor pentru regiunile unde semnalul emergent reprezintă unde continue în timp. Aceste regiuni coincid cu cele obținute experimental de colegii din Berlin.

În final menționăm că în cadrul proiectului doi doctoranzi, Sanduleac Ionel și Andronic Silvia, au susținut în termen tezele de doctor în științe fizice, iar doctoranda Oloinic Tatiana finalizează teza de doctor. În 2015 un masterand a susținut teza.