

Wrocław, 03.06.2024 r.

Autor: mgr Kaja Bilińska

Promotor: dr hab. inż. Maciej J. Winiarski

**“Study of Thermoelectric Properties of Half-Heusler Phases:  
*ab initio* and Machine Learning Analysis”**

## **Abstrakt**

Niniejsza rozprawa doktorska stanowi kontynuację badań prowadzonych w przeszłości nad potencjalnym zastosowaniem związków typu pół-Heusler (hH) jako materiałów termoelektrycznych (TE) [1-3].

Przeprowadzone zostały badania dużej skali z wykorzystaniem Teorii Funkcjonału Gęstości (DFT) dla ponad 150 faz hH z 18 elektronami walencyjnymi; uwzględnione zostały dwie parametryzacje funkcjonału korelacyjno-wymiennego (XC): Perdew-Burke-Ernzerhof (GGA) oraz zmodyfikowany potencjał Becke-Johnson GGA (MBJGGA) [4, 5]. Spośród początkowego zbioru badanych związków hH, ponad 120 układów okazało się mieć charakter półprzewodnikowy, przy czym tylko 34 zostały zakwalifikowane jako nowe oraz termodynamicznie stabilne [6]. Szczegółowa analiza dla tych układów (np. struktury elektronowe) oraz ich właściwości TE (w tym uwzględniająca dwa funkcjonały XC oraz dwa reżimy przewodnictwa) została zrealizowana w niniejszej rozprawie doktorskiej.

Obliczenia *ab initio* zostały uzupełnione metodami Uczenia Maszynowego (ML). Analiza ML oraz predykcje zrealizowane zostały dla sześciu wielkości, w tym przerwy energetycznej [7] oraz wydajności TE (termoelektryczny współczynnik mocy PF dla parametryzacji GGA w reżimie typu *p*) [8]. Trendy chemiczne oraz potencjalne predyktory zostały rozpatrzone i szczegółowo zbadane.

Ogólne wyniki uzyskane w ramach analizy DFT i ML dla rozważanych faz hH wskazują nowych kandydatów na materiały TE, a ponadto umożliwiają wgląd w kluczowe predyktory determinujące korzystne właściwości TE.