

## REZUMATUL RAPORTULUI

Proiectul 19.80012.02.01F „Investigarea proprietăților termoelectrice și optice ale materialelor nanostructurate și sistemelor moleculare”, Director proiect: Dr. Sanduleac Ionel

Scopul proiectului a fost realizarea unor cercetări mai ample asupra proprietăților termoelectrice ale cristalelor organice nanostructurate de tip p și de tip n în scopul identificării parametrilor optimi detaliați ai proprietăților termoelectrice. Aceasta permite evaluarea mai corectă a posibilităților de implementare a materialelor date în cadrul dispozitivelor de conversie directă a energiei termice în energie electrică și dispozitivelor de refrigerare. S-a propus studiul detaliat al tranziției structurale metal-dielectric de tip Peierls în cristale organice nanostructurate de TTT2I3. Anterior, a fost utilizat un model fizic mai simplificat, elaborat pentru temperatura camerei, pentru descrierea proprietăților termoelectrice. În cadrul proiectului dat, a fost dezvoltat modelul fizic existent, prin includerea dependențelor de temperatură a parametrilor cristalului și a proceselor de împrăștiere a purtătorilor de sarcină pe impuritățile activate termic. A fost analizată tranziția metal-dielectric de tip Peierls, cu determinarea spectrului renormat al fononilor și a temperaturii de tranziție Peierls, ținând cont de efectele temperaturii. Astfel, s-au obținut rezultate importante, care descriu comportamentul coeficienților termoelectrice pentru diferite regimuri de temperatură, ceea ce este foarte important pentru aprecierea aplicabilității materialelor date în condiții reale de lucru a convertoarelor termoelectrice. Au fost elaborate recomandări și sugestii pentru sinteza cristalelor optimizate și, ulterior, proiectarea de dispozitive ieftine cu eficiență termoelectrică ridicată. În particular, convertoarele termoelectrice pot fi implementate în: recuperarea energiei termice disipată de instalațiile industriale și automobile (o problemă ecologică stringentă), mini-generatoare termoelectrice pentru uz personal, alimentarea cu energie a diferitor sensori medicali (utilizând căldura corpului uman), dispozitive infraroșu și termometre fără contact, ca substrat pentru celulele fotovoltaice pentru ridicarea randamentului, răcire locală și refrigerare fără elemente mobile.

De asemenea, s-a propus dezvoltarea tehnologiei de comunicare optică prin utilizarea laserelor cu puncte cuantice ca element principal. Printre obiectivele principale a fost obținerea feedback-ului optic provenit de la mai multe cavități exterioare, analiza numerică a comportamentului haotic al laserului cu puncte cuantice aplicat în comunicarea optică bazată pe haos și descrierea comportamentului dinamic al laserului cu puncte cuantice în funcție de diferite valori a intensității feedback-ului. În rezultatul activității a fost înaintată o structură nouă a modelului teoretic al laserului cu puncte cuantice și caracteristici noi care vor optimiza funcționarea acestuia. Pe baza modelărilor numerice s-au obținut condițiile adecvate pentru comportamentul de rezonanță coerentă pentru un astfel de laser și au fost determinate proprietățile optice. Aceste rezultate se aplică direct în dezvoltarea tehnologiei de comunicare optică în bază de haos.

În cadrul proiectului a fost dezvoltată tematica de cercetare ce ține de investigarea sistemelor moleculare ce posedă dipol permanent la interacțiunea cu radiația laser. S-a propus deducerea ecuației Master pentru un sistem cuantic de tip moleculă cu dipol permanent. Una dintre aplicațiile sistemelor cu dipol permanent sau schemelor optoelectronice este generarea undelor electromagnetice în domeniul terahertz. Importanța undelor terahertz contribuie la perfecționarea tehnicilor de imagistică hipersensibilă, spectroscopie, telecomunicații de înaltă rezoluție. În cadrul cercetărilor, a fost descrisă influența efectelor de interferență asupra undelor electromagnetice emise de moleculele cu dipol permanent, pompate cu radiație laser. Au fost realizate calcule pentru caracterizarea oscilatorului cuantic cuplat cu un sistem cu dipol permanent și a fost descrisă interacțiunea dintre procesele multifotonice asistate de interferență cuantică. În baza rezultatelor obținute a fost analizată influența dintre oscilatorii dinamici cuantici cu mai multe nivele și emitorul cuantic respectiv, a fost demonstrată posibilitatea generării fotonilor terahertz.