

# **I. Summary for public relations work**

## **1. Zusammenfassung für die Öffentlichkeitsarbeit**

Etwa 70% der gesamten, weltweit erzeugten Energie geht als Abwärme verloren. Thermoelektrika sind spezielle Materialien, mit welchen ein Teil dieser Abwärme in nutzbare Energie umgewandelt werden kann. Jedoch ist der Wirkungsgrad dieser Methode zur Energieerzeugung für eine großflächige, kommerzielle Anwendung noch zu gering, sodass ihre Anwendung derzeit auf Nischenbereiche beschränkt bleibt. Um den Wirkungsgrad zu steigern, konzentriert sich die aktuelle Forschung auf die Erzeugung künstlicher Materialien mittels Nano-Strukturierung. Dies ist jedoch ein teurer Prozess, und Art und Größe der Nanostrukturen, die einen hohen thermoelektrischen Wirkungsgrad erreichen, sind kaum untersucht. Grundsätzlich wird ein hoher Wirkungsgrad dann erreicht, wenn die thermische Leitfähigkeit des Materials gering und die elektrische Leitfähigkeit gleichzeitig hoch ist. Dieses Projekt verfolgt zwei Ziele: i) das Potential von Silizium für thermoelektrische Anwendungen zu untersuchen, da dieses das meist verwendete Material in der Halbleiterindustrie ist und daher ausgereifte Prozesstechnologien existieren; und ii) Entwurfsstrategien für Nanostrukturen zu identifizieren, welche zu einer deutlichen Steigerung des thermoelektrischen Wirkungsgrades führen. Zuerst wurde untersucht, wie effektiv sich die Wärmeleitfähigkeit von Silizium durch den Einschluss von nano-skaligen Poren reduziert lässt. Monte-Carlo-Simulationen haben gezeigt, dass diese Methode besonders dann effektiv ist, wenn die Poren eine bestimmte Größe besitzen und ihre Oberfläche sehr rau ist. Weiters wurde die Möglichkeit der Wirkungsgradsteigerung durch Modulations-Dotierung und elektrostatische Dotierung von Nanodrähten aufgezeigt. Durch diese Methoden ist eine Erhöhung des sogenannten thermoelektrischen Leistungsfaktors um das Fünffache theoretisch möglich. Schließlich wurden Mehrschichtsysteme untersucht, wobei dünne Schichten mit sehr hoher Elektronenkonzentration mit Schichten, die als Energiebarriere wirken, abwechseln. Durch die beim Stromtransport entstehende Energie-Filterung kann bei optimaler Wahl der Schichtdicken der Leistungsfaktor um etwa 30% gesteigert werden. Allerdings hat die Untersuchung auch gezeigt, dass dieser Zugewinn durch herstellungsbedingte statistische Schwankungen der Schichtdicken teilweise oder ganz verloren gehen kann. Maßnahmen, die den Einfluss dieser Schwankungen reduzieren, wurden vorgeschlagen.

## **2. Summary for public relations work**

An estimated 70% of all power generated in the world is lost as waste heat. Thermoelectrics are a special class of materials that have the capability to harvest usable renewable energy from this heat. However, the efficiency of this power generation has remained stubbornly low for decades, which has relegated the technology to only niche applications. To enhance the power harvesting efficiency of these materials, there has been ongoing research into the potential of nano-technology and material design. However, for most materials, such nano-structuring is expensive and the best ways of structuring, to obtain maximal increases in efficiency, are not fully understood. In general, a high thermoelectric efficiency requires a material with low thermal conductivity and simultaneously a high electrical conductivity. The goals of this project were two-fold: i) to explore the potential of silicon for thermoelectric application. Silicon is the most widely used material in semiconductor industry, and nano-structuring approaches are already well developed and cheap; and ii) to develop material design strategies to maximize thermoelectric performance. During the project a number of specific nano-structuring strategies were explored and their potential for enhancing thermoelectric energy harvesting efficiency assessed. First, the effect of the insertion of tiny, regular arrays of pores intended to hamper heat flow has been explored by means of Monte Carlo calculations. It was found that this approach is quite effective provided the pores were large and their surfaces rough. Second, the effect of electrostatic doping and modulation doping of silicon nano-wires on the thermoelectric efficiency was investigated. It was shown that these methods can theoretically increase the so-called thermoelectric power factor five times. Another set of studies explored the potential for efficiency enhancement of inserting thin alternating layers of a different material into a system. It was found, for optimal structures, that moderate enhancement is possible, but that for rough and imprecise structures that this enhancement is destroyed completely. Further exploration revealed that this degradation from non-ideal structures could be mitigated to some extent by choosing insertion materials with low thermal conductivity.