THERMOELECTRIC PROPERTIES OF OXIDES AND OTHER NOVEL COMPOUNDS

DIVYA PRAKASH DUBEY

DEPARTMENT OF PHYSICS

INDIAN INSTITUTE OF TECHNOLOGY DELHI

JUNE 2024

THERMOELECTRIC PROPERTIES OF OXIDES AND OTHER NOVEL COMPOUNDS

by

DIVYA PRAKASH DUBEY

Department of Physics

Submitted

in the fulfilment of the requirement of the degree of the Doctor of Philosophy

to the

INDIAN INSTITUTE OF TECHNOLOGY DELHI

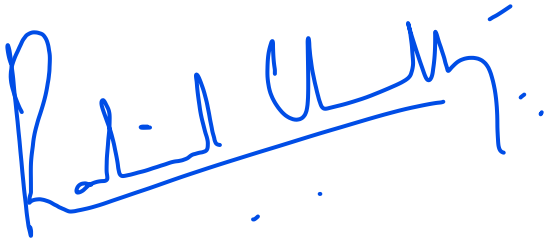
JUNE 2024

Dedicated to my Mother

CERTIFICATE

This is to certify that the thesis entitled **"Thermoelectric properties of oxides and other novel compounds"**, which is being submitted by **Mr. Divya Prakash Dubey** to the **Indian Institute of Technology Delhi**, New Delhi, India, for the award of the degree of **Doctor of Philosophy** in Physics, is a record of bonafide research work carried out by him. He has worked under my supervision and guidance and has fulfilled the requirements for the submission of this thesis, which, in my opinion, has reached the requisite standard.

The results contained in this thesis have not been submitted, in part or full, to any other University or Institute for the award of any degree/diploma.



Prof. Ratnamala Chatterjee

Professor

Department of Physics

Indian Institute of Technology Delhi

New Delhi-110016

India

ACKNOWLEDGMENTS

I would like to take this opportunity to express my sincere gratitude and appreciation to all those who have supported me throughout my academic journey. The period of PhD rather my life at IIT Delhi was indeed awesome, and the credit goes to people around me. It would be really tough to express my feeling towards them through a few words.

First and foremost, I want to express my heartfelt gratitude to my Ph.D. supervisor Prof. Ratnamala Chatterjee for his unwavering support, guidance, and encouragement throughout my research. Ma'am provided me ample time to learn and understood my thesis problem thoroughly. Along with this, her persistent care and efforts toward the research work, motivational talks and innovative ideas, helped me lot in completing the research work in time and in a very satisfying and productive manner. Most importantly, her valuable inputs, insightful discussions, and constructive feedback have been instrumental in shaping me and my research work. I am grateful for the opportunity to work under her supervision, which has been a great learning experience for me. I pray and hope that this mentorship will be continued further in research as well as in my carrier will continue further in my whole life. Along with the research part, as a person, ma'am has also motivated and supported me for my personal aspect to look into life in a different manner with a correct work-life balance especially during my tough time.

I am thankful to other Faculty members from IIT Delhi, especially my SRC committee members, Prof. Sujeet Chaudhary, Prof. Neeraj Khare and Prof. Samaresh Das, for their periodic feedback, encouragement, insightful comments, and fruitful discussions during various progress meetings. I am also very thankful to Prof. Pankaj Srivastava sir for their help and support during my research tenure. I also wish to show my heartiest gratitude to Prof. Rie. Y. Umetsu, Institute of Material Research, Tohoku University (IMR), Sendai, Japan for her continuous support for the experimental and discussion part for my research. With her collaboration, I got opportunity to work at IMR as short-term visiting researcher multiple time as through GIMRT-project. I would also like to thank Prof. Saroj Prasad Dash, Chalmers University of Technology, Gothenborg, Sweden for fruitful research discussion and providing exposure for high class clean room facility at Chalmers regarding 2D-Quantum electronic measurements.

I acknowledge the Department of Physics, IIT Delhi for giving me the opportunity to be a part of it. Also, I would like to acknowledge the Ministry of Education, Government of India for providing me the fellowship. I am also thankful to IIT Delhi for the covering the expenses incurred in attending various Conferences. The experimental facilities provided by the Nanoscale Research Facility (NRF) and Central Research Facility (CRF), IIT Delhi are also highly acknowledged.

I would like to express my sincere gratitude to Dr. Kaushik Chakrabarti, who has provided invaluable technical support and guidance for electric, magnetic and thermal transport measurements for PPMS-Sonipat system throughout my research work. His expertise and unconditional assistance have been crucial in completing my experiments successfully.

I would like to present my special thanks to my seniors, Dr. Divyanshu Bhatnagar, Dr. Sandeep Yadav, Dr. Vishal Bharadwaj and Dr. Gyaneshwar Sharma for their exceptional support during my research. My initial learning of every experimental tool was through them only. Their valuable comments, suggestions, knowledge sharing, and support have enhanced my knowledge up to the adequate mark. I have learned a lot from their expertise and experience, and I am grateful for their support and friendship. I am also grateful to Dr. Dinesh Dixit, who helped to understand and execute my measurements at the PPMS-Sonipat system.

I am also very grateful to my lab mates: Balwant Singh Chahan, Dr. Mithun Majee, Dr. Devendra Kumar Pandey, Dr. Anupam Bhattacharya, Vikas Chahar, Pankaj Sharma, Dr. Priyanka Sharma, Rinku, Durgesh Ojha, Shiwangi Srivastava, Hitesh Gulati, Vikas Malik, Shubham, Dr. Parul Jain for providing me a wonderful atmosphere to pursue my research work and all those scientific discussions that have enhanced my knowledge a lot.

I would also like to thank to Prabuddha Kant Mishra (Chemistry Department-IIT Delhi), Anish Bhargav (NPL-Delhi) for their collaborative support regarding single crystal growth and various experimental characterizations during my research.

To my friends Puneet Sharma, Dr. Nanhe Kumar Gupta, Dr. Monu Nath Baitha, Mohan, Dr. Lalit Pandey, Dr. Akash Singh, Dr. Nancy Verma, Gaurav and others. I sincerely thank you all for always being there for me, providing the emotional support, and cheering me on. Your encouragement and motivation have helped me to overcome many challenges, and I am grateful for your unwavering support.

I would like to extend my gratitude to my classmates from both my M.Sc. and M.Tech. programs. Our shared experiences and collaborative efforts have helped me grow both professionally and personally. I am grateful for the friendships I have made during this time.

This acknowledgment would be incomplete without expressing my sincere feelings towards my family members; my father Shri Santosh Dubey, my mother Smt. Savitree Devi, my sisters (Mrs. Preeti, Mrs. Nutan) and brother (Brahma Prakash and Surya Prakash). I would also like to thank my in-laws Mr. Dinesh Mourya and Mrs. Soniya Mourya and other family members Vivek, Tarun, Harsh and Deepshikha. I shall remain grateful forever for their unconditional love, support, and encouragement throughout my life. Their sacrifices and dedication have been instrumental in shaping my values and beliefs, and I am grateful for their multifaceted steady support.

I want to thank my wife Khayati Mourya, who have been my constant source of inspiration and motivation. Her love, support, and encouragement have helped me to overcome many challenges, and I am grateful for her unwavering support.

In conclusion, I am indebted to all those who have contributed to my academic and personal growth, and I shall be forever grateful for their support, encouragement, and friendship.

Divya Prakash Dubey

(2017PHZ8612)

ABSTRACT

The exponentially increasing requirement and usage of energy in our daily life has given rise to a big push to the research in the area of 'renewable energy'. Among various existing solutions for renewable energy like solar, geo-thermal, wind, ocean etc., use of thermoelectric materials takes the centre-stage. Thermoelectric materials work on the principle of interconversion of heat energy (e.g., industrial waste heat) to electrical energy and thus are seen as efficient source of energy without any adverse effect on climate and human environment. In this field intensive research is ongoing in search of novel materials with large energy conversion efficiency and the ability to replace the existing sources of energy like fossil fuel or coal. The conversion efficiency of the thermoelectric material is decided by a dimensionless parameter called "Figure of Merit" i.e., $ZT = S^2\sigma T/\kappa$; where, S, σ and κ are Seebeck coefficient, electrical conductivity and thermal conductivity respectively. In order to replace the existing energy solutions, the required ZT values are ~4-5; however, till now the maximum ZT observed is ~ 2.5 to 2.8 for SnSe based compositions. The main impediment in improving the thermoelectric efficiency is the interdependence of the parameters defining the ZT. To have good thermoelectric efficiency, a high value of Seebeck coefficient and electrical conductivity along with a low thermal conductivity is required.

Hence, in this thesis, we have focused our work on the study of oxides and chalcogenides-based compositions for enhancing the thermoelectric efficiency near room temperature. For this, initially we present the results of a comprehensive investigation of electric and thermal transport properties of polycrystalline $La_{0.95}Sr_{0.05}CoO_3$. We first investigate the lattice modulation effect via heavy element doping within the system. For this a comprehensive investigation of electric and thermal transport properties of polycrystalline Bi substituted $La_{0.95-x}Bi_xSr_{0.05}CoO_3$ for (LBSCO-0, 1 & 2) performed. The electrical resistivity reflects the semiconducting nature with n-type to p-type transition ~ *52K* for LBSCO-1 and LBSCO-2 samples. In the low temperature region, the dominant transport mechanism is found to be variable range hopping (VRH), with hopping range decreasing with increasing temperature from *95* to *20 Å*. The substitution of higher atomic weight element Bi at La site drastically affects overall thermal conductivity by reducing the lattice contribution (~ *0.12W/m-K* at *50K*) and also enhancing the Seebeck coefficient ($S \sim 354\ \mu V/K$). The increase in the resistivity and Seebeck coefficient for the Bi-substituted system is related to the decrease in the available

charge carrier concentration (~ 5.12×10^{20} cm^{-3}). The overall variation in the Seebeck coefficient depicts a complex nature with a large decreasing trend below *50K* followed by an in-depth analysis of the Debye temperature (~ *470K*) and *e-ph* coupling. These findings suggest the Bi-substituted LBSCO system have phonon mediated charge transport via phonon drag effect below *50K*. Notably, we found a large increment in *ZT* ~ *0.17* at RT for LBSCO-2 composition that is 1-order larger than pristine undoped LBSCO-0 and even higher than the other existing cobaltite's-based thermoelectric choice.

In the second part, we analysed the effect on magnetic ion substitution on the thermoelectric properties. For this, a detailed investigations on electrical, magnetic, and thermal transport properties of a series of polycrystalline samples of Cr-substituted $La_{0.65}Bi_{0.20}Sr_{0.15}CoO_3$ (x = 0, 0.10, 0.15, 0.20 and 0.25) have been performed in the view of thermoelectric applications. The optimized composition of $x = 0.25$ has been arrived at by studying the temperature and field dependent properties of samples; where both Co and Cr have mixed valency, that give rise to interesting magnetic ordering, effective at low temperatures. A p-type nature for all compositions observed from Seebeck and Hall coefficient measurements. An in-depth analysis of electrical and thermal transport provides well understanding for the various conduction mechanisms (i.e., small polaron hopping, variable range hopping and phonon drag) involved at different temperature regimes. The Seebeck coefficient increases with Cr-substitution (S_{max}~ 660 μV/K for Cr-25 at 115K) while electrical conductivity decreases. This decrease in electrical conductivity is due to decrease in the mobility and charge carrier concentration (~$1.27 \times 10^{21} cm^{-3}$ for Cr-25). The value of thermal conductivity is found to be strongly supressed (6-fold) in Cr-doped compositions ~0.46 W/m-K for Cr-25. Another important feature is the field dependent Seebeck, electrical and thermal conductivity measurements which show the negative magnetoresistance of the Cr-25 and helps to improve the electrical conductivity and hence thermoelectric efficiency at low temperatures. The field induced increment in thermoelectric efficiency i.e ΔZT ~500% observed for 9Tesla at 50K. This provides an effective scheme for magnetically tuned thermoelectricity at low temperatures.

In the third part, we report a detailed investigations of sample dimensionality and correlated electrical and thermal transport behaviour in the view of thermoelectric applications. For this we compared the bulk, thin film and nano ribbon of $La_{0.75}Bi_{0.20}Sr_{0.05}CoO_3$ composition that have been synthesized using solid state reaction, PLD and electrospinning technique

respectively. Reducing the dimension helps to minimize the scattering processes that affects both the electrical and thermal conductivity. We observed increase in Seebeck coefficient by going from bulk to thin film and then nano ribbons, however, the thermal conductivity gets suppressed significantly. Both these effects help to improve the thermoelectric efficiency of the system. However, with decreasing lattice dimension, the electrical resistivity gets increased from bulk to thin film to nano ribbons by several orders. The overall *ZT* value is observed to be maximum for thin film i.e., ~0.24, which is highest among the existing bulk/ thin-film literatures of cobaltite system. This study gives a detailed information of various transport mechanism and scattering process activated in different dimensional and temperature regimes of complex oxide system.

The last part of this thesis is focused to investigate the charge density wave property of a chalcogenide system using thermoelectric characterizations. For this, we investigate the CDW characteristics of a highly pure single crystal of Ta_2NiSe_7 through electrical and thermal transport measurements. In addition to the observed $2k_F$ anomaly at ~78.5K, we identify an additional feature at around 146K, associated with $4k_F$ CDW modulations within the system. The distinct spiro-step-like feature observed at low temperatures is discussed in terms of phase-slip and quantized conductivity phenomena. We analyse the pinning-depinning behavior of CDW transport through I-V characteristics for both applied DC and AC + DC electric fields. We propose a revised two-band model for this system, introducing the concept of p to n-type carrier inversion for T< 50K. Our examination of Seebeck, thermal conductivity, and specific heat data supports the coexistence of both types of CDW modulations. Furthermore, theoretical calculations using GGA+U validate the presence of both $2k_F$ and $4k_F$ CDW modulations and emphasize the role of the electron pocket at the Fermi surface in the formation of CDW in this system.

Thus, this study provides a comprehensive analysis of thermoelectric properties of oxide i.e., $La_{0.95}Sr_{0.05}CoO_3$ and a novel compound i.e., Ta_2NiSe_7 along with their correlated electrical and thermal transport behaviour. The focused exploration of these systems underscores the significance findings in the context of potential applications for thermoelectric energy generators.

सारांश

हमारे दैनिक जीवन में ऊर्जा की तेजी से बढ़ती आवश्यकताओं एवं उनके अनुप्रयोग ने 'नवीकरणीय ऊर्जा' के क्षेत्र में अनुसंधान को एक विस्तृत प्रसार प्रदान किया है। सौर, भू-तापीय, पवन, महासागर आदि जैसे नवीकरणीय ऊर्जा के विभिन्न मौजूदा समाधानों में, तापविद्युतीय पदार्थों का उपयोग नवीकरणीय ऊर्जा से सम्बद्ध अनुसन्धान के केंद्र-स्थान पर है। तापविद्युतीय पदार्थ उष्मीय ऊर्जा (उदाहरण के लिए, औद्योगिक अपशिष्ट ताप) को विद्युतीय ऊर्जा में परिवर्तित करने के सिद्धांत पर काम करती हैं और इस प्रकार उन्हें जलवायु और मानव पर्यावरण पर किसी भी प्रतिकूल प्रभाव के बिना ऊर्जा के कुशल स्रोत के रूप में देखा जाता है। इस क्षेत्र में बड़ी ऊर्जा रूपांतरण दक्षता और जीवाश्म ईंधन या कोयले जैसे ऊर्जा के मौजूदा स्रोतों को प्रतिस्थापित करने की क्षमता वाली नवीन पदार्थों की खोज के सन्दर्भ में गहन अनुसंधान जारी है। तापविद्युतीय पदार्थों की रूपांतरण दक्षता "फिगर ऑफ मेरिट" ZT नामक एक आयामहीन घटक द्वारा तय की जाती है, अर्थात, $ZT=(S^2\sigma T)/\kappa$; जहां, S, σ और κ क्रमशः सीबेक गुणांक, विद्युत चालकता और तापीय चालकता हैं। मौजूदा ऊर्जा समाधानों को बदलने के लिए, आवश्यक ZT मान ~4-5 हैं; हालाँकि, अब तक देखा गया अधिकतम ZT, SnSe आधारित संयोजनों के लिए ~ 2.5 से 2.8 है। तापविद्युतीय दक्षता में सुधार में मुख्य बाधा ZT को परिभाषित करने वाले मापदंडों की अन्योन्याश्रयता है। एक बेहतर तापविद्युतीय दक्षता के लिए, कम तापीय चालकता के साथ सीबेक गुणांक और विद्युत चालकता के उच्च मूल्य की आवश्यकता होती है।

इसलिए, इस शोध ग्रन्थ में हमने वातावरणीय तापमान के निकट तापविद्युतीय दक्षता को बढ़ाने के लिए ऑक्साइड और चॉल्कोजेनाइड आधारित संयोजनों के अध्ययन पर अपना शोध केंद्रित किया है। इसके लिए, शुरुआत में हम बहु माणभीय $La_{0.95}Sr_{0.05}CoO_3$ के विद्युतीय और तापीय परिवहनीय गुणों की व्यापक अनुसंधान के परिणाम प्रस्तुत करते हैं। हम पहले इस संयोजन के भीतर भारी तत्वों (Bi) के प्रतिस्थापन के माध्यम से जालकों के प्रादुर्भावित प्रभाव की विवेचना करते हैं। इसके लिए बहु माणभीय $La_{0.95-x}Bi_xSr_{0.05}CoO_3$ संयोजनों के विद्युतीय और तापीय परिवहनीय गुणों का तापविद्युतीय दक्षता के प्रभाव की जांच की गई। विद्युत प्रतिरोधकता इस संयोजन के नमूनों के लिए एन-प्रकार से पी-प्रकार विद्युतीय संक्रमण (~ 52K) के साथ अर्धचालक

प्रकृति को दर्शाती है। कम तापमान वाले क्षेत्र में, प्रमुख परिवहन वैरिएबल रेंज हॉपिंग (VRH) द्वारा प्रेरित होता है , जिसमें तापमान बढ़ने के साथ हॉपिंग रेंज 95 से 20 Å तक कम हो जाती है। La के स्थान पर पर उच्च परमाणु भार तत्व Bi का प्रतिस्थापन जलकीय तापीय चालकता (50K पर $\sim 0.12 W/m-K$) को कम करके और सीबेक गुणांक ($S \sim 354\ \mu V/K$) को बढ़ाकर समग्र तापीय चालकता को काफी प्रभावित करता है। द्वि-प्रतिस्थापित प्रणाली के लिए प्रतिरोधकता और सीबेक गुणांक में वृद्धि उपलब्ध आवेश वाहक एकाग्रता ($\sim 5.12 \times 10^{20}\ cm^{-3}$) में कमी से संबंधित है। सीबेक गुणांक में समग्र भिन्नता एक जटिल प्रकृति को दर्शाती है जिसमें 50K से नीचे एक बड़ी घटती प्रवृत्ति के साथ डीबाई तापमान ($\sim 470K$) और इलेक्ट्रॉन फ़ोनन युग्मन का गहन विश्लेषण किया गया है। इन निष्कर्षों से पता चलता है कि द्वि-प्रतिस्थापित $La_{0.95-x}Bi_xSr_{0.05}CoO_3$ प्रणाली में 50K से नीचे फोनन ड्रैग प्रभाव के माध्यम से फोनन मध्यस्थ आवेश परिवहन होता है। विशेष रूप से, हमने 20% Bi संयोजनों के लिए वातावरणीय तापमान पर $ZT \sim 0.17$ में एक बड़ी वृद्धि पाई है जो कि प्राचीन अघोषित संयोजनों से १० गुना बड़ा है और अन्य मौजूदा कोबाल्टाइट-आधारित तापविद्युतीय विकल्प से भी अधिक है।

दूसरे भाग में, हमने तापविद्युतीय गुणों पर चुंबकीय आयन प्रतिस्थापन के प्रभाव का विश्लेषण किया। इसके लिए, Cr-प्रतिस्थापित $La_{0.65}Bi_{0.20}Sr_{0.15}CoO_3$ ("x = 0,0.10,0.15,0.20 और 0.25") के बहु माणभीय नमूनों की एक श्रृंखला के विद्युत, चुंबकीय और तापीय परिवहन गुणों पर विस्तृत जांच की गई है। तापविद्युतीय अनुप्रयोगों की दृष्टि से नमूनों के तापमान और चुंबकीयक्षेत्र पर निर्भर गुणों का अध्ययन करके "x = 0.25" की अनुकूलित संरचना प्राप्त की गई है; जहां Co और Cr दोनों में मिश्रित संयोजकताएं होती हैं, जो रोचक चुंबकीय क्रम को जन्म देती हैं, जो कम तापमान पर प्रभावी होती हैं। सीबेक और हॉल गुणांक माप से सभी संयोजनों के लिए पी-प्रकार की विद्युतीय प्रकृति देखी गई। विद्युत और तापीय परिवहन का गहन विश्लेषण विभिन्न तापमान प्रवस्थाओ में शामिल विभिन्न चालन तंत्रों (यानी, छोटे पोलरॉन हॉपिंग, वैरिएबल रेंज हॉपिंग और फोनन ड्रैग) के लिए अच्छी समझ प्रदान करता है। सीबेक गुणांक Cr-प्रतिस्थापन (115K पर Cr-25 के लिए $S\_max \sim 660\ \mu V/K$) के साथ बढ़ता है जबकि विद्युत चालकता कम हो जाती है। विद्युत चालकता में यह कमी गतिशीलता और आवेश वाहक एकाग्रता में कमी (Cr-25 के लिए $\sim 1.27 \times 10^{21}\ cm^{-3}$) के कारण है। Cr- प्रतिस्थापित संयोजनों में तापीय चालकता का मान अत्यधिक न्यून (6-गुना कम) पाया गया है जो की Cr-

25 के लिए ~0.46 W/m-K है। एक अन्य महत्वपूर्ण विशेषता चुंबकीयक्षेत्र पर निर्भर सीबेक, विद्युत और तापीय चालकता माप है जो Cr-25 के नकारात्मक चुंबकत्व और विद्युत चालकता को दर्शाता है और इसलिए कम तापमान पर तापविद्युतीय दक्षता में सुधार करने में मदद करता है। तापविद्युतीय दक्षता में क्षेत्र प्रेरित वृद्धि यानी Δ ZT ~500%, 50K पर 9T के लिए देखी गई। यह कम तापमान पर चुंबकीय रूप से प्रवर्धित तापविद्युतकीय के लिए एक प्रभावी योजनाविधि प्रदान करता है।

तीसरे भाग में, हम तापविद्युतकीय अनुप्रयोगों के मद्देनजर आयाम और सहसंबद्ध विद्युत और तापीय परिवहन व्यवहार की विस्तृत जांच की रिपोर्ट करते हैं। इसके लिए हमने $La_{0.75}Bi_{0.20}Sr_{0.05}CoO_3$ संरचना के ठोस, पतली फिल्म और नैनो रिबन की तुलना की, जिन्हें क्रमशः ठोस अवस्था प्रतिक्रिया, PLD और इलेक्ट्रोस्पिनिंग तकनीक का उपयोग करके संश्लेषित किया गया है। आयाम को कम करने से विक्षेपण वाली प्रक्रियाओं को कम करने में मदद मिलती है जो विद्युत और तापीय चालकता दोनों को प्रभावित करती है। हमने ठोस से पतली फिल्म और फिर नैनो रिबन तक जाकर सीबेक गुणांक में वृद्धि देखी, हालांकि, तापीय चालकता काफी कम हो जाती है। ये दोनों प्रभाव संयोजन की तापविद्युतकीय दक्षता को बेहतर बनाने में मदद करते हैं। हालाँकि, आयाम में कमी के साथ, विद्युत प्रतिरोधकता ठोस से पतली फिल्म से लेकर नैनो रिबन तक कई क्रमों तक बढ़ जाती है। समग्र ZT मान पतली फिल्म के लिए अधिकतम यानी ~0.24 देखा गया है, जो कोबाल्टाइट प्रणाली के मौजूदा ठोस /पतली-फिल्म साहित्य में सबसे अधिक है। यह अध्ययन जटिल ऑक्साइड प्रणाली के विभिन्न आयामी और तापमान क्षेत्र में सक्रिय विभिन्न परिवहन तंत्र और बिखरने की प्रक्रिया की विस्तृत जानकारी देता है।

इस शोध ग्रन्थ का अंतिम भाग तापविद्युतीय लक्षण के वर्णन का उपयोग करके चॉल्कोजेनाइड संयोजनों की आवेश घनत्व तरंग (CDW) प्रकृति की विवेचना पर केंद्रित है। इसके लिए, हम Ta_2NiSe_7 के अत्यधिक शुद्ध एकल क्रिस्टल की CDW विशेषताओं की जांच विद्युत और तापीय परिवहन माप के माध्यम से करते हैं। लगभग 78.5K पर देखी गई $2k_F$ विसंगति के अलावा, हम लगभग 146K पर एक अतिरिक्त विसंगति की पहचान करते हैं, जो इस संयोजन के भीतर $4k_F$ CDW विक्षोभ से जुड़ी है। कम तापमान पर देखी गई विशिष्ट सीढ़ीनुमा विद्युत चालकता की चर्चा चरणवत प्रतिस्थापित और परिमाणित चालकता के संदर्भ में की जाती है। हम दिष्ट धारा और प्रत्यावर्ती धारा एवं दिष्ट धारा दोनों के लिए विद्युत क्षेत्रों में I-V विशेषताओं के

माध्यम से CDW परिवहन के सम्बद्ध-विमुक्त व्यवहार का विश्लेषण करते हैं। हम इस प्रणाली के लिए एक संशोधित द्विक्षेत्र मॉडल का प्रस्ताव करते हैं, जिसमें $T<50K$ के लिए पी से एन-प्रकार के विद्युतीय वाहक व्युत्क्रम की अवधारणा को प्रस्तुत किया गया है। सीबेक, तापीय चालकता और विशिष्ट ऊष्मा की हमारी जांच दोनों प्रकार के CDW विक्षोभ के सह-अस्तित्व का समर्थन करती है। इसके अलावा, GGA+U का उपयोग करते हुए सैद्धांतिक संगणकीय गणना $2k_F$ और $4k_F$ CDW विक्षोभ दोनों की उपस्थिति को मान्य करती है और इस प्रणाली में CDW के निर्माण में फर्मी सतह पर इलेक्ट्रॉन पॉकेट की भूमिका पर जोर देती है।

इस प्रकार, यह अध्ययन ऑक्साइड यानी $La_{0.95}Sr_{0.05}CoO_3$ और एक नए यौगिक यानी Ta_2NiSe_7 के तापविद्युतीय गुणों के साथ-साथ उनके सहसंबद्ध विद्युतीय और तापीय परिवहन के व्यवहार का व्यापक विश्लेषण प्रदान करता है। इन प्रणालियों पर केंद्रित अन्वेषण तापविद्युतीय ऊर्जा जनित्र के लिए संभावित अनुप्रयोगों के संदर्भ में महत्वपूर्ण निष्कर्षों को रेखांकित करता है।

CONTENT

LIST OF FIGURES

LIST OF TABLES