

DOKTORAND: Lars Musland
GRAD: Philosophiae doctor
FAKULTET: Det matematisk-naturvitenskapelige fakultet
INSTITUTT: Fysisk institutt
FAGOMRÅDE: Faste stoffers fysikk
VEILEDERE: Espen Flage-Larse, Joakim Bergli, Øystein Prytz
DISPUTASDATO: 27/9/2019

AVHANDLINGENS TITTEL: *Theory and calculations of thermoelectric transport in heterostructures*

Avhandlingen omhandler transport av elektrisk ladning og varme i materialer. Dette studeres ved numeriske simulasjoner av elektroners bevegelse gjennom materialene. Arbeidet er motivert av studiet av den termoelektriske effekt, og av ønsket om å modellere denne effekten i kompliserte materialer kalt heterostrukturer.

Arbeidet for denne avhandlingen er motivert av et ønske om å modellere termoelektrisk effekt i heterostrukturer. Heterostrukturer er materialer hvor den kjemiske sammensetningen varierer fra sted til sted, på en svært liten skala. Den termoelektriske effekt vil kort fortalt si at elektrisk strøm i et materiale vil kunne dytte med seg en varmestrøm, og omvendt, at en varmestrøm vil kunne dytte med seg en elektrisk strøm. Dersom en kan finne materialer hvor disse effektene er sterke nok, har den termoelektriske effekt potensielt mange interessante bruksområder, slik som for eksempel varmepumper og elektriske generatorer uten bevegelige deler. Å kunne modellere effekten er derfor ønskelig, siden man da vil kunne forutsi hvor sterk effekten er i forskjellige materialer.

Denne avhandlingen dokumenterer de innledende fasene i dette modelleringsarbeidet, hvor forskjellige teorier og metoder for beregning av transport av varme og ladning sammenliknes på et teoretisk og numerisk plan. Avhandlingen åpner med en diskusjon og sammelikning av forskjellige teorier for elektrontransport i materialer. Deretter presenteres en serie numeriske eksperimenter. Formålet med disse numeriske testene er å studere hva som kan gjøres med de forskjellige metodene, samt å sammenlikne resultatene som produseres, og hvor mye beregningsressurser som kreves. Noe arbeid er også lagt ned i å finne nye metoder, i håp om at disse krever mindre resurser. Blant annet har vi utviklet en montecarlo metode som til en viss grad virker lovende, og kanskje kan være nyttig i studiet av visse regimer av heterostrukturertransport.