جامعة الإمارات العربية المتحدة
United Arab Emirates University

UAEU

تتشرف كلية الدراسات العليا و كلية علوم بدعوتكم لحضور

مناقشة أطروحة الدكتوراه

العنوان

دراسة المبادئ الأولى لمواد حصاد الطاقة من أجل بيئة خضراء

للطالبة

مهرين جاويد

المشرف

د. معمر بنكرودة

قسم الفيزياء

كلية العلوم

المكان والزمان

صباحا 10:30

الخميس، 2 نوفمبر 2023

غرفة F3, 223 مبنى

الملخص

يتيح البحث المتطور للمواد اكتشاف مواد جديدة لجمع الطاقة. في هذا المشروع تتم دراسة الخصائص الهيكلية والإلكترونية والمغناطيسية والديناميكية الحرارية والحرارية والبصرية لمواد حصاد الطاقة المختلفة. الهدف الرئيسي من هذا العمل هو في المقام الأول دراسة مركبات نصف هيوسلر ذات الكفاءة الحرارية الكهربائية والبيروفسكايت النشطة ضوئيًا. تم دراسة المخططات المتنوعة للمركبات المبتكرة مع إدخال العيوب. تقدم المركبات المعدلة تركيبيًا والتي تم تصميمها عن طريق إدخال عيوب بلورية من حيث المنشطات البديلة أو الخلالية، اتجاهًا جديدًا لخصائص المواد. لإنجاز المهمة، تم استخدام الحزم باستخدام هندسة العيوب والإجهاد، تستكشف هذه .(VASP وWein2K) الحسابية القائمة على نظرية الكثافة الوظيفية الدراسة الخصائص الكهروضوئية والكهروضوئية. هدفنا هو تصميم ودراسة نصف هيوسلر والبيروفسكايت حسابيًا للتطبيقات الكهروحرارية والطاقة الشمسية وإنتاج الطاقة الخضراء. تتوافق عمليات المحاكاة الحسابية، إلى جانب النتائج التي تم الحصول عليها، مع الدراسات السابقة لإعطاء فهم أفضل للبيروفسكايت ونصف الهيسولرز.

كلمات البحث الرئيسية: نظرية الكثافة الوظيفية، نصف الهوسلر، البيروفسكايت، الخلايا الشمسية، الدوبانت