



تحرك پذیری و ویژگی های ترموالکتریکی دیامان های نیمه هادی

سمیه احمدی سلطانسرای

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه بین المللی امام خمینی (ره)، قزوین

پست الکترونیکی: s.ahmadi@sci.ikiu.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۰/۶/۱۲؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۰/۹/۱۲)

چکیده

در این مقاله تحرك پذیری و خواص ترموالکتریکی دیامان های (C_2X ($X=H$ و F و Cl) با استفاده از نظریه تابعی چگالی و بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو و بولتزراپ مطالعه می شود. در تمامی ساختارهای (C_2X ($X=H$ و F و Cl) تحرك پذیری حفره ها کوچک تر از تحرك پذیری الکترون ها است. این امر ناشی از شکل ساختار نواری هر ساختار است. برای ساختارهای C_2H ، C_2F و C_2Cl با آرایش نوع p بیشینه ضریب سیبک به ترتیب برابر است با $2733 \mu V/K$ ، 2811 و 2201 و برای آرایش نوع n بیشینه ضریب سیبک مواد فوق به ترتیب $2767 \mu V/K$ ، 2696 و 2269 است. در تمامی ساختارها پارامترهای ترموالکتریکی از جمله رسانندگی الکتریکی، رسانندگی گرمایی الکتریکی و ضریب توان در مقادیر مثبت پتانسیل شیمیایی بیشینه هستند. در نتیجه این مواد با آرایش نوع n می توانند مواد ترموالکتریکی مناسب تری باشند. همچنین هر سه ساختار در بازه دمایی $200-500$ کلوین بیشینه ضریب توان را دارند.

واژه های کلیدی: تحرك پذیری، ترموالکتریک، رسانندگی الکتریکی، رسانندگی گرمایی، ضریب سیبک، نظریه تابعی چگالی

۱. مقدمه

گرافن نیم رسانایی با گاف انرژی صفر است، اما ساختارهایی همچون دی سلفید مولیبدن گاف انرژی محدودی دارند که این ویژگی باعث می شود این مواد نامزد خوبی برای طراحی و ساخت ادوات نانو الکترونیکی باشند.

با توجه به ویژگی های منحصر به فرد گرافن، تلاش های زیادی برای طراحی و سنتز ساختارهای دو بعدی بر پایه کربن که گاف نواری محدود دارند صورت گرفته است. از جمله این مواد می توان به ترکیبات کربن-بورون-نیتروژن همچون

پس از کشف و سنتز گرافن [۱]، مطالعه خواص فیزیکی مواد دوبعدی مورد توجه محققین بسیاری قرار گرفت. مطالعه و بررسی خواص ساختارهای دوبعدی همچون فسفرین، دی سولفید مولیبدن و دی سولفید تنگستن از جمله مواد دوبعدی هستند که پس از گرافن بیشترین توجه را به خود جلب کرده اند [۲-۴]. خواص الکترونیکی، مکانیکی و اپتیکی این ساختارها به طور گسترده ای بررسی شده است. از سوی دیگر،

همچنین پارامترهای ترموالکتریکی نشان می‌دهد که آرایش نوع n این مواد دوبعدی از نظر کاربردهای ترموالکتریکی مناسب‌تر است. این مطالعه دید کلی در مورد خواص ترموالکتریکی دیامان‌های دو بعدی را ارائه می‌دهد.

۲. روش و مدل محاسباتی

تمام محاسبات با استفاده از نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته شبیه سازی کوانتوم اسپرسو^۱ انجام شده است [۱۷]. تقریب گرادیان تعمیم یافته در پتانسیل تبادل همبستگی پر دو-بورک-انزروف^۲ [۱۸] با انرژی قطع Ry ۶۰ اعمال شده است. برای بهینه سازی هندسه ساختار و استخراج ساختار باند نواری، گسسته سازی منطقه اول بریلوئن با $10 \times 10 \times 10$ نقطه شبکه وارون K به روش مونخارست [۱۹] در کلیه ساختارها اعمال شده است. آستانه همگرایی Ry 10^{-10} و $Ry / \text{\AA}$ 10^{-4} به ترتیب برای انرژی و نیروی بین اتمی به کار برده می‌شود. برای جلوگیری از برهم کنش بین لایه‌ها خلأ 20 آنگستروم در راستای محور z در نظر گرفته شده است. ارزیابی خصوصیات ترموالکتریکی ساختارها با استفاده از بسته بولتزراپ^۳ تحت چارچوب نظریه تراپردی بولتزمن^۴ با تقریب زمان واهلش ثابت، انجام می‌شود [۲۰]. به منظور دستیابی به دقت لازم، منطقه اول مترکم با $65 \times 65 \times 1$ نقطه شبکه وارون در نظر گرفته می‌شود. کد بولتزراپ با استفاده از یک درون‌یابی فوریه ساختار باند برای محاسبه ضرایب ترابری نیمه کلاسیک مانند σ رسانندگی الکتریکی، S ضریب سبیک و k_e رسانندگی گرمایی الکترون به صورت زیر استفاده می‌کند [۲۰]:

$$\sigma_{xy}(T, \mu) = \frac{1}{V} \int \bar{\sigma}_{xy}(\epsilon) \left[-\frac{\partial f_0(T, \epsilon, \mu)}{\partial \epsilon} \right] d\epsilon, \quad (1)$$

$$S_{xy}(T, \mu) = \frac{1}{eTV \sigma_{xy}(T, \mu)} \int \bar{\sigma}_{xy}(\epsilon) (\epsilon - \mu) \left[-\frac{\partial f_0(T, \epsilon, \mu)}{\partial \epsilon} \right] d\epsilon, \quad (2)$$

BC_3N ، BC_3 ، BC_6N و... اشاره کرد [۵-۷]. همچنین مطالعات نظری بسیاری برای مطالعه خواص فیزیکی این ساختارهای جدید انجام گرفته است. دسته دیگری از مواد کربنی دارای گاف محدود با تبدیل گرافن دولایه به تک لایه الماس که دیامان نامیده می‌شوند، پیشنهاد شدند [۸]. به منظور دستیابی به نانو ورقه‌های دیامان پایدار، باید سطوح بیرونی نانو ذرات گرافنی اصلی توسط گروه‌های فلورین، هیدروژن و یا هیدروکسیل احاطه شوند [۹]. باخارف و همکارانش، اخیراً به طور تجربی موفق به تبدیل گرافن دو لایه با چیدمان AB به الماس تک لایه فلورین شده (یعنی C_2F)، شده‌اند [۱۰]. همچنین کین و همکارانش، دیامان فلورین شده و دیامان هیدروژنه شده را سنتز و خواص آنها را مطالعه کرده‌اند [۱۱]. همچنین مطالعات نظری بسیاری روی این دسته از مواد انجام گرفته است [۹ و ۱۲].

در سال‌های اخیر تلاش‌های بسیاری برای یافتن جایگزینی مناسب به جای سوخت‌های فسیلی انجام شده است. بنابراین با توجه به بحران گرم شدن زمین، جستجو و یافتن انرژی‌های پاک و دوستدار محیط زیست ضروری شده است. از این رو، استفاده از خاصیت ترموالکتریکی مواد به منظور تبدیل مستقیم گرما به الکتریسیته و بالعکس، مورد توجه بسیاری قرار گرفته است. یکی از کاربردهای پیشرفته مواد ترموالکتریک تأمین انرژی مورد نیاز فضاپیماها توسط سازمان فضایی ناسا است [۱۳]. بیسموت تلورید (Bi_2Te_3) و آلیاژهای آن، از جمله مواد ترموالکتریکی توده‌ای هستند که کاربرد زیادی در تبرید ترموالکتریکی دارند [۱۴]. بازده و کارایی مواد ترموالکتریک وابسته به ضریب سبیک، رسانندگی الکتریکی و رسانندگی گرمایی الکتریکی و فونونی است. کارایی ترموالکتریکی در مواد دوبعدی به علت پراکندگی فونونی در مرزها و اثر محدودیت کوانتومی افزایش می‌یابد [۱۵ و ۱۶].

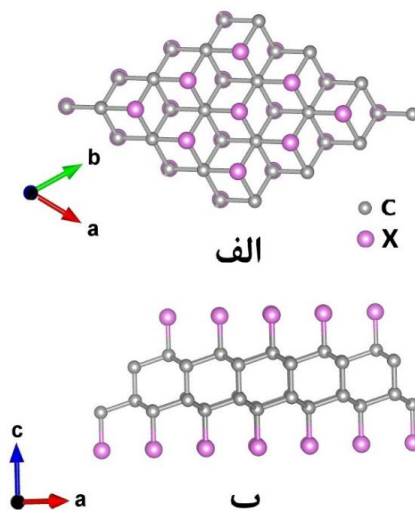
در این مقاله برای نخستین بار تحرک پذیری حامل و خواص ترموالکتریکی دیامان‌هایی همچون C_2H ، C_2F ، C_2Cl مطالعه می‌شود. محاسبات نشان می‌دهد که در این ساختارها الکترون‌ها تحرک پذیری بیشتری نسبت به حفره‌ها دارند.

۱. Quantum Espresso

۲. Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)

۳. Boltztrap

۴. Boltzmann Transport Theory



شکل ۱. (الف) طرحواره‌ای از ساختارهای C_2X ($X=Cl, F, H$) در نگاه از بالا، (ب) نمایش ساختارهای ذکر شده در قسمت (الف) وقتی به طور افقی نگریسته شود.

راستای مسیره‌های پرتقارن در اولین منطقه بریلوئن در شکل ۲ نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می‌شود هر سه ماده نیمه‌رسانا هستند و ساختار باند مستقیم در نقطه Γ دارند. مقدار گاف نواری با استفاده از محاسبات PBE به ترتیب $1/30$ ، $3/98$ و $3/08$ الکترون ولت برای C_2H ، C_2Cl و C_2F محاسبه شده است. در محاسبات HSE06 مقدار گاف نواری $2/51$ ، $5/71$ و $3/84$ الکترون ولت به ترتیب برای C_2H ، C_2Cl و C_2F به دست آمده است. از آنجا که محاسبات در کد محاسباتی بولتزتراپ برمبنای زمان واهلش ثابت است و با توجه به این که در مواد مختلف زمان واهلش می‌تواند مقادیر متفاوتی داشته باشد، عملاً مقایسه مواد مختلف بدون محاسبه زمان واهلش دقیق و جامع نخواهد بود. در اینجا زمان واهلش را با استفاده از تقریب تابع پتانسیل تغییر شکل محاسبه می‌کنیم [۲۱]. بر این اساس تحرك پذیری حامل توسط رابطه زیر به دست می‌آید [۲۲]:

$$\mu_{\alpha}^{2D} = \frac{e\hbar^3 C_{\alpha}^{2D}}{K_B T (m_{\alpha}^* x \text{ or } y)^{3/2} (m_{\alpha}^* y \text{ or } x)^{1/2} E_I^{2D}}, \quad (5)$$

که \hbar ، e و $m_x^*(y)$ به ترتیب نشان دهنده بارالکترون، ثابت پلانک کاهش یافته و جرم مؤثر در راستای x و y هستند. α شاخص نشان دهنده الکترون یا حفره است. در

$$k_{xy}(T, \mu) = \frac{1}{e^2 TV} \int \bar{\sigma}_{xy}(\varepsilon) (\varepsilon - \mu)^2 \times \left[-\frac{\partial f_0(T, \varepsilon, \mu)}{\partial \varepsilon} \right] d\varepsilon, \quad (3)$$

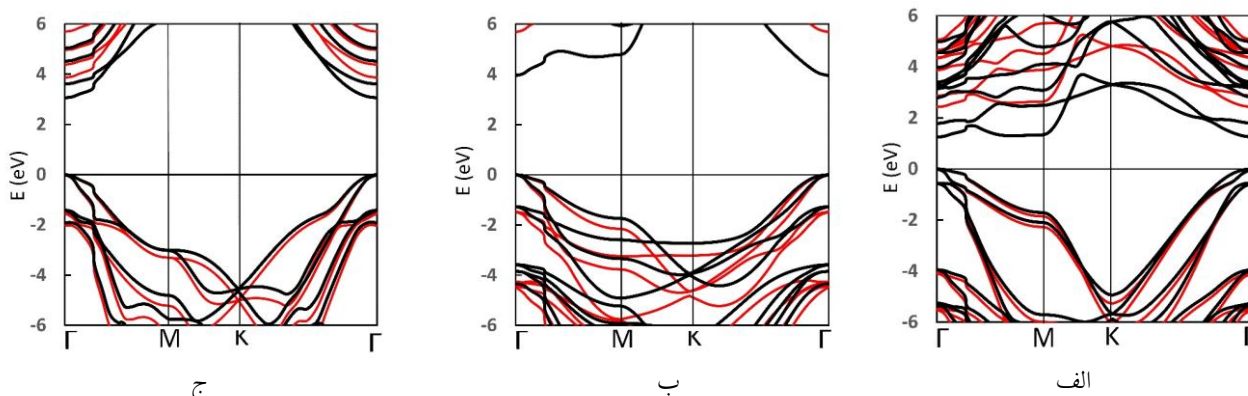
$$\sigma_{xy}(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{i, k} \bar{\sigma}_{xy}(i, k) \frac{\delta(\varepsilon - \varepsilon_{i, k})}{\delta \varepsilon}, \quad (4)$$

که در اینجا V ، f_0 ، μ ، ε و T به ترتیب حجم سلول واحد، تابع توزیع فرمی-دیراک، پتانسیل شیمیایی، بار الکترون، دما و تعداد نقاط شبکه وارون (k) هستند. همچنین، $\bar{\sigma}_{xy}(i, k) = e^2 \tau_{i, k} v_x(i, k) v_y(i, k)$ وابسته به انرژی را نشان می‌دهد. $\tau_{i, k}$ و $\varepsilon_{i, k}$ و $v(i, k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{i, k}}{\partial k}$ به ترتیب زمان واهلش، ساختار باند و سرعت گروه را نشان می‌دهند. همچنین، اندیس i نشان دهنده شاخص باند (ظرفیت یا رسانش) است.

۳. نتایج و بحث

ساختارهای شش گوشه بهینه شده تک لایه‌های C_2F ، C_2Cl و C_2H در شکل ۱ نشان داده شده‌اند. ثوابت شبکه بهینه شده برای C_2H و C_2F ، C_2Cl به ترتیب $2/761$ ، $2/562$ و $2/530$ است. نتایج فوق با نتایج کارهای انجام شده قبلی در توافق است [۱۲].

خواص الکتریکی و ساختار باند ساختارهای ذکر شده در



شکل ۲. نمودار ساختار باندها برای (الف) C_2Cl ، (ب) C_2F ، (ج) C_2H . خطوط مشکی مربوط به محاسبات بر پایه PBE و خطوط قرمز نشان دهنده محاسبات بر پایه HSE06 است.

جدول ۱. اطلاعات کلی خواص الکترون و حفره برای هر ساختار شامل جرم مؤثر حامل m_i^* (تقسیم بر جرم سکون الکترون)، تحرک پذیری حامل (m^2/Vs) ، μ_i ، زمان واهلش τ_i ، و ثابت الاستیکی دو بعدی در امتداد x و y در دمای اتاق. در اینجا منظور از x راستای آرمچیر و y راستای زیگزاگ هر ساختار است.

		m_i^{*x}/m_0	m_i^{*y}/m_0	μ_i^x ($\frac{m^2}{Vs}$)	μ_i^y ($\frac{m^2}{Vs}$)	τ_i^x ($\times 10^{-14}S$)	τ_i^y ($\times 10^{-14}S$)	$C_{\gamma Dx}$ ($\frac{J}{m^2}$)	$C_{\gamma Dy}$ ($\frac{J}{m^2}$)	E_{Lx} (eV)	E_{Ly} (eV)
C_2Cl	e	۰/۶۰۸	۰/۶۲۶	۰/۷۲۷	۰/۷۰۶	۲۵۱/۱	۲۵۱/۲	۳۹۵/۳۰۶	۳۹۵/۴۶۵	۱/۷۶۴	۱/۷۵۰
	h	۰/۷۵۸	۰/۵۷۶	۰/۰۰۰۶	۰/۰۰۰۸	۲/۵۰۳	۲/۵۰۴	۳۹۵/۳۰۶	۳۹۵/۴۶۵	۱۷/۰۱۶	۱۷/۰۳۲
C_2F	e	۰/۲۵۱	۰/۲۶۱	۳/۷۴۴	۳/۵۷۳	۵۳۴/۳	۵۳۰/۷	۴۷۵/۲۸۱	۴۷۲/۰۶۳	۲/۰۸۰	۲/۰۰۲
	h	۰/۴۸۷	۰/۴۳۶	۰/۰۰۰۰۰۲	۰/۰۰۰۰۰۲	۰/۴۲۷	۰/۴۲۴	۴۷۵/۲۸۱	۴۷۲/۰۶۳	۵/۴۴۸	۵/۳۴۴
C_2H	e	۰/۴۳۶	۰/۴۳۵	۳/۴۱۵	۳/۴۲۱	۸۴۶	۸۴۶	۴۸۲/۰۲۷	۴۸۲/۱۱۴	۱/۲۵۲	۱/۲۷۰
	h	۰/۳۲۱	۰/۲۸۷	۰/۱۶۵	۰/۱۹۰	۳۱/۰۶	۳۱/۰۶	۴۸۲/۰۲۷	۴۸۲/۱۱۴	۷/۹۹۸	۷/۴۹۸

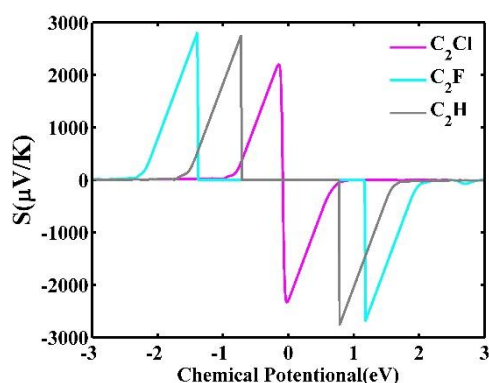
الاستیکی محدوده کشش اعمال شده بین ۱٪ تا ۱٪- فرض شده است.

بر خلاف C_2F ، برای تک لایه C_2H ، لبه‌های نوارهای ظرفیت نسبتاً صاف و لبه‌های نوارهای رسانایی بسیار شیب دار هستند. بنابراین، در مقایسه با حفره‌ها، جرم‌های مؤثر الکترون‌های تک لایه C_2H نسبتاً کوچک است. برای تک لایه C_2Cl جرم مؤثر الکترون در راستای x کوچک‌تر از جرم مؤثر حفره در این راستا است. این ناهمسانگردی در پتانسیل تغییر شکل سبب می‌شود که تحرک پذیری و زمان واهلش ساختارهای C_2X ($X=H, Cl, F$) آلییده نوع n بزرگ‌تر از نوع p باشد. همچنین مشاهده می‌شود که تحرک پذیری الکترونی

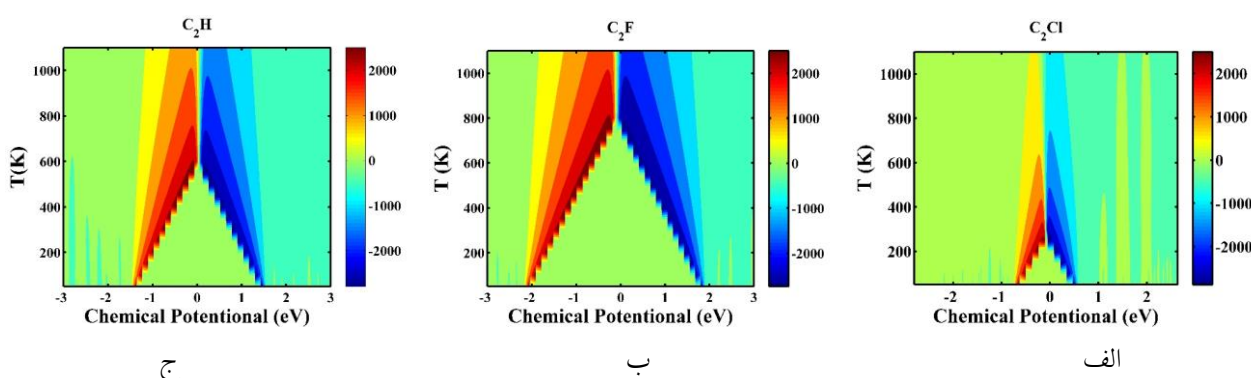
اینجا $C_{x\ ory}^{\gamma D}$ به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\frac{E - E_0}{S_0} = \frac{1}{\gamma} C_{x\ ory}^{\gamma D} \Delta l^{\gamma}, \quad (6)$$

که E و E_0 ، به ترتیب انرژی کل و انرژی در حالت تعادلی برای هر ساختار است. S_0 مساحت در صفحه x - y و Δl میزان تغییر ثابت شبکه l_0 هستند. $E_I = \frac{\Delta E_I}{\Delta l / l_0}$ ثابت پتانسیل تغییر شکل برای باندهای رسانش و ظرفیت است. در پایان زمان واهلش توسط رابطه $\tau = \mu^{\gamma D} m^* / e$ برای هر راستا محاسبه می‌شود. در اینجا از علامت $\mu^{\gamma D}$ برای تحرک پذیری استفاده شده است تا در ادامه با پتانسیل شیمیایی تمایز داشته باشد. نتایج محاسبات در دمای اتاق در جدول ۱ ارائه شده است. برای محاسبه ثابت



شکل ۳. ضریب سبیک برحسب پتانسیل شیمیایی در دمای اتاق، انرژی صفر نشان دهنده پتانسیل شیمیایی در انرژی فرمی صفر است.



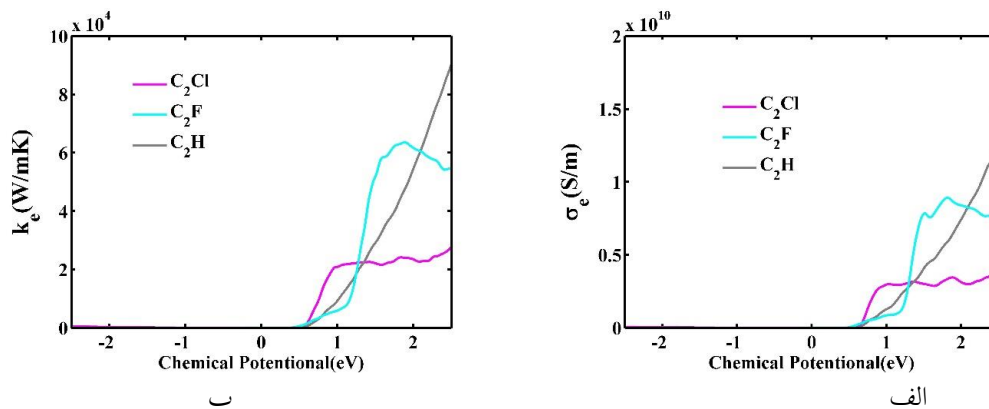
شکل ۴. منحنی مقیاس رنگ ضریب سبیک برحسب پتانسیل شیمیایی و دما برای (الف)، C_2Cl ، (ب) C_2F و (ج) C_2H .

دارد. در دمای اتاق برای دست یافتن به بیشینه ضریب سبیک برای دو ساختار C_2H و C_2F ، نیازمند آرایش هستیم و عملاً در حوالی انرژی فرمی ضریب سبیک قابل توجهی نداریم. این امر ناشی از تفاوت در ساختارهای باند نواری است. مقدار ضریب سبیک بیشینه برای آرایش نوع P برای ساختارهای C_2H ، C_2F و C_2Cl به ترتیب برابر است با $2733 \mu V/K$ ، 2811 و 2201 . مقادیر بیشینه سبیک برای مواد فوق با آرایش نوع n به ترتیب برابر با $2767 \mu V/K$ ، 2696 و 2269 است. در واقع ضریب سبیک به ساختار نواری هر ماده وابسته است. توصیف کامل این وابستگی و ارتباط ضریب سبیک مواد دو بعدی و سایر مواد با ساختار نواری به تفصیل توسط احمدی و همکاران ارائه شده است [۲۵].

شکل ۴ منحنی مقیاس رنگ تغییرات ضریب سبیک با دما و پتانسیل شیمیایی را برای ساختارهای مختلف نشان می‌دهد. همان طور که مشاهده می‌شود با افزایش دما ضریب سبیک

این ساختارها به مراتب بزرگ‌تر از تحرك پذیری حامل در $WS_{\uparrow} (\sim 0.18 mV^{-1}S^{-1})$ و $[23] WS_{\uparrow} (\sim 0.28 mV^{-1}S^{-1})$ است، که این امر برای عملکرد ترموالکتریک بالاتر مفید است. همچنین C_2F در مقایسه با دو ساختار دیگر تحرك پذیری الکترونی بالاتری دارد.

در شکل ۳ تغییرات ضریب سبیک برحسب پتانسیل شیمیایی در دمای اتاق نشان داده شده است. پتانسیل شیمیایی منفی به معنی انتقال تراز فرمی به سمت نوار ظرفیت بوده و نشان دهنده آرایش نوع P است. در این شرایط ضریب سبیک مثبت به دست می‌آید. به همین ترتیب پتانسیل شیمیایی مثبت نتیجه انتقال تراز فرمی به سمت نوار هدایت است و نشان دهنده آرایش نوع n بوده و در نتیجه منجر به ضریب سبیک منفی می‌شود. برای تک لایه C_2Cl در حوالی انرژی فرمی، ضریب سبیک دو قله مشخص برای انواع آرایش نوع P و n



ب

الف

شکل ۵. (الف) رسانندگی الکتریکی بر حسب تغییرات پتانسیل شیمیایی و (ب) رسانندگی گرمایی الکتریکی بر حسب تغییرات پتانسیل شیمیایی.

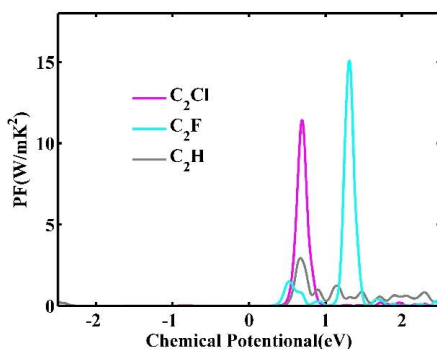
می‌شود. رسانندگی گرمایی فونونی (شبکه) معیاری از توانایی انتقال گرما توسط فونون‌ها است. در واقع مجموع رسانندگی گرمایی الکتریکی و فونونی میزان رسانندگی ماده را مشخص می‌سازد. هر اندازه رسانندگی گرمایی ماده‌ای کوچک‌تر باشد آن ماده کارایی ترموالکتریکی بیشتری را نشان می‌دهد. در انرژی فرمی رسانندگی گرمایی الکترون $1/56 \times 10^{-6} W/mK$ ، $1/13 \times 10^{-12} W/mK$ و $7/28 \times 10^{-8} W/mK$ به ترتیب برای C_2H ، C_2F و C_2Cl محاسبه شده است. ریسی و همکارانش رسانندگی گرمایی فونونی را برای هر سه ساختار محاسبه کرده‌اند [۱۲]. بر اساس نتایج به دست آمده توسط آنها، در دمای اتاق رسانندگی گرمایی فونونی W/mK ۱۱۴۵، ۳۷۷ و ۱۴۶ به ترتیب برای C_2H ، C_2F و C_2Cl محاسبه شده است [۱۲]. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت در این مواد فونون‌ها سهم بیشتری در انتقال گرما نسبت به الکترون‌ها دارند.

ضریب توان ($PF = S^2 \sigma$) کارایی یک ماده ترموالکتریک را نشان می‌دهد. بنابراین هرچه ضریب سیبک و رسانندگی الکتریکی ماده‌ای بالاتر باشند آن ماده کارایی بیشتری نشان خواهد داد. شکل ۶ ضریب توان بر حسب تغییرات پتانسیل شیمیایی در دمای اتاق را نشان می‌دهد. همان طور که مشاهده می‌شود، ضریب توان برای هر سه ماده با آرایش نوع n به مراتب بزرگ‌تر از آرایش نوع p است. بیشترین مقدار ضریب

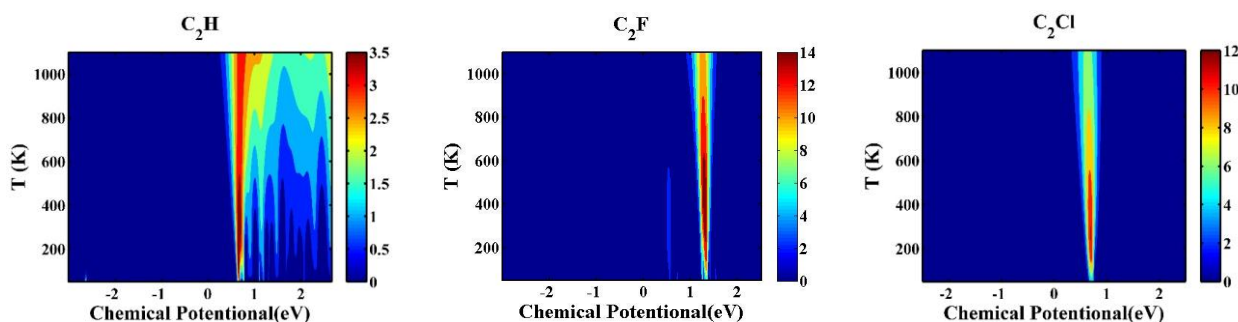
کاهش می‌یابد. در بازه پتانسیل شیمیایی $-1 < \mu < 1 eV$ ، C_2Cl در محدوده دمایی ۳۰۰-۵۰۰ کلون، C_2F در محدوده دمایی ۶۰۰-۹۰۰ کلون و C_2H در محدوده دمایی ۴۰۰-۷۰۰ کلون بیشینه سیبک را دارند. عموماً این بازه پتانسیل شیمیایی با اعمال ولتاژ گیت الکتریکی یا آلیش ماده برای مواد دوبعدی قابل حصول است.

رسانندگی الکتریکی بر حسب پتانسیل شیمیایی در دمای اتاق در شکل ۵، الف نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می‌شود رسانندگی الکتریکی برای آلیش نوع n هر سه ساختار در مقایسه با آلیش نوع p بیشتر است. همچنین مشاهده می‌شود برای دستیابی به رسانندگی الکتریکی قابل ملاحظه در هر سه ساختار، نیازمند آلیش ساختارها هستیم. C_2H آلییده شده از نوع n در مقایسه با دو ساختار دیگر رسانندگی الکتریکی بزرگ‌تری را نشان می‌دهد. رسانندگی گرمایی الکتریکی بر حسب تغییرات پتانسیل شیمیایی در شکل ۴، ب نشان داده شده است. رسانندگی گرمایی الکتریکی معیاری از توانایی انتقال گرما توسط الکترون‌ها است. همان طور که مشاهده می‌شود رفتار نمودار رسانندگی گرمایی مشابه رسانندگی الکتریکی است که تأییدی بر قانون ویدمان-فرانتس^۱ است. بر اساس این قانون، رسانندگی گرمایی الکتریکی بر مبنای رابطه $L = \frac{K_e}{\sigma_e T}$ (که در آن ثابت تناسب L عدد لورنز نامیده می‌شود) به رسانندگی الکتریکی وابسته

۱. Wiedemann-Franz Law



شکل ۶. ضریب توان (PF) برحسب پتانسیل شیمیایی در دمای اتاق برای سه ساختار دیامان.



شکل ۷. منحنی مقیاس رنگ ضریب توان برحسب پتانسیل شیمیایی و دما برای (الف) C_2Cl ، (ب) C_2F و (ج) C_2H .

لایه‌های C_2X ($X=H, Cl, F$) مطالعه شده است. تمامی محاسبات بر مبنای نظریه تابعی چگالی صورت گرفته است. نتایج نشان می‌دهد که در هر سه ساختار الکترون‌ها تحرک پذیری بیشتری نسبت به حفره‌ها دارند. این امر ناشی از تفاوت نوارهای رسانش و ظرفیت در این مواد است. ضریب سیبک برای هر سه ماده بزرگ و قابل توجه است. همچنین نتایج نشان می‌دهد که در انرژی فرمی، رسانندگی گرمایی الکتریکی بسیار ناچیز است و این امر می‌تواند عدد شایستگی $(ZT = \frac{PF}{k_e + k_L} T)$ ماده ترموالکتریک را بهبود بخشد. ضریب توان در هر سه ماده با آرایش n در مقایسه با آرایش نوع p بسیار بزرگ‌تر است. همچنین هر سه ماده در بازه دمایی ۲۰۰ تا ۵۰۰ کلوین، بیشترین مقدار ضریب توان را دارند.

توان برای C_2Cl و C_2H به ترتیب برابر با $11/46 \text{ W/mK}^2$ و $2/91 \text{ W/mK}^2$ در پتانسیل شیمیایی $0/69 \text{ eV}$ و $0/68 \text{ eV}$ است. برای C_2F بیشینه مقدار ضریب توان $15/1 \text{ W/mK}^2$ در پتانسیل شیمیایی $2/74 \text{ eV}$ خواهد بود.

به منظور بررسی دقیق‌تر اثر دما و پتانسیل شیمیایی، منحنی مقیاس رنگ PF برحسب پتانسیل شیمیایی و دما برای هر سه ماده در شکل ۷ رسم شده است. همان طور که مشاهده می‌شود C_2Cl در دمای $150-550$ کلوین، C_2F در بازه دمایی $100-800$ کلوین و C_2H در بازه دمایی $50-550$ کلوین بیشترین مقدار ضریب توان را دارند.

۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله تحرک پذیری حامل و خواص ترموالکتریکی تک

مراجع

1. K Novoselov, et al., *Science* **306** (2004) 666.
2. L Li, et al., *Nature Nanotechnology* **9** (2014) 372.

3. W B. Xu, *et al.*, *Nanoscale Research Letters* **9** (2014) 554.
4. Q Luan, *et al.*, *Chinese Journal of Physics* **55** (2017) 1930.
5. L B. Shi, *et al.*, *J. Mater. Chem. C* **8** (2020) 5882.
6. J Song, *et al.*, *Phys.Chem.Chem.Phys.* **21** (2019) 12977.
7. J Mahmood, *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **113** (2016) 7414.
8. A G Kvashnin, *et al.*, *Nano Lett.* **14** (2014) 676.
9. D Odkhuu, *et al.*, *Sci. Rep.* **3** (2013) 3276.
10. P V Bakharev, *et al.*, *Nat. Nanotechnol.* **15** (2020) 59.
11. G Qin, L Wu and H Gou, *Functional Diamond* **1** (2021) 83.
12. M Raeisi, *et al.*, *Carbon* **167** (2020) 51.
13. D M. Rowe, “*CRC Handbook of Thermoelectrics*”; CRC Press, Boca Raton Fl 1995.
14. I Chowdhury, *et al.*, *Nat. Nanotechnol.* **4** (2009) 235.
15. L D. Hicks and M S Dresselhaus, *Phys. Rev. B* **47** (1993) 12727.
16. J He, M G Kanatzidis, and V P Dravid, *Materialstoday* **16** (2013) 166.
17. P Giannozzi, *et al.*, *Journal of Physics: Condensed Matter* **21** (2009) 395502.
18. J P Perdew, K Burke, and M Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 3865.
19. H J Monkhorst, and J D Pack, *Phys. Rev. B* **13** (1976) 5188.
20. G K H Madsen and D L Singh, *Comp. Phys. Comm.* **175** (2006) 67.
21. J Bardekn and V Shockley, *Phys. Rev.* **85** (1950) 72.
22. H Lang, S Zhang, and Z Liu, *Phys. Rev. B* **94** (2016) 235306.
23. F Reale, *et al.*, *Sci Rep.* **7** (2017) 14911.
24. A Allain and A Kis, *ACS NANO* **8** (2014) 7180.
25. S Ahmadi, *et al.*, *Journal of Physical Chemistry C*, **125** (2021) 14525.