



## بررسی ابتدا به ساکن خواص الکترونی و ترموالکتریکی تک لایه جدید $B_2CO$

مجتبی اشهدی و داود واحدی فخرآباد<sup>۲</sup>

۱. گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان

۲. گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه نیشابور، نیشابور

پست الکترونیکی: mo\_ashhadi@phys.usb.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۰/۲/۱۳؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۰/۴/۲۴)

### چکیده

در این مقاله، خواص ترموالکتریکی تک لایه جدید دو بعدی  $B_2CO$  با استفاده از محاسبات اصول اولیه به دست آمده است. ساختار نواری و چگالی حالت‌های الکترونی بر پایه نظریه تابعی چگالی با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم-اسپرسو (QE)، مورد مطالعه قرار گرفته است. خواص ترموالکتریکی با استفاده از معادله تراپردی نیمه کلاسیکی بولتزمن در تقریب زمان واهلش و در بسته محاسباتی BoltzTraP محاسبه شدند. این خواص تراپردی الکترونی شامل ضرایب رسانش الکترونی ( $\sigma$ )، رسانندگی گرمایی ( $\kappa_e$ )، ضریب سیبک (S) و کمیت بدون بعد ضریب ارزشی ZT هستند که برای طراحی ادوات ترموالکتریکی مناسب هستند. بر اساس نتایج ما، تک لایه دو بعدی  $B_2CO$  نشان دهنده یک نیم‌رسانا با گاف نواری غیر مستقیم و با مقدار  $1.68$  الکترون ولت است. نتایج محاسبات عددی خواص تراپردی تقریباً همسانگرد برای تک لایه دو بعدی  $B_2CO$  را نشان می‌دهند. به ویژه، مطالعه ترموالکتریک تک لایه دو بعدی  $B_2CO$  عملکرد خوب ترموالکتریکی با ضریب ارزشی بالا را نمایش می‌دهد، به طوری که نانوساختار  $B_2CO$  یک نیم‌رسانای نوع n است و مقدار ضریب سیبک و ضریب ارزشی در دمای اتاق به ترتیب،  $2595 \mu V/K$  و  $1$  به دست آمدند.

واژه‌های کلیدی: نظریه تابعی چگالی، معادله تراپردی بولتزمن، تک لایه  $B_2CO$ ، ضریب سیبک، ضریب ارزشی

### ۱. مقدمه

خواهد بود. تاکنون تعداد زیادی از مواد دو بعدی با خواص فیزیکی متفاوتی پیشنهاد شده‌اند که شامل شش ضلعی بورن-نیتريد (h-BN) [۸]، پنج ضلعی گرافین [۹]، استانین [۱۰]، سیلیسن [۱۱] هستند. ماهیت الکترونیکی یک ماده دو بعدی ممکن است از فاز عایق تا فلز تغییر کند به طوری که یک ماده دو بعدی می‌تواند عایق، نیم‌رسانا، فلز، نیم فلز، یا خاصیت ابررسانایی را از خود نشان دهد. در میان همه مواد دو بعدی،

تحقیقات انجام گرفته روی گرافین، ویژگی‌های جالب توجه و کاربردهای متنوع آن را آشکار ساخته است [۱-۳] که این امر انگیزه‌ای قوی جهت پژوهش روی سایر مواد تک لایه دو بعدی را در دهه اخیر فراهم کرده است [۴-۷]. از آنجایی که کاربردهای گرافین به گاف نواری صفر آن محدود می‌شود لذا یافتن مواد دو بعدی جایگزین از اهمیت ویژه‌ای برخوردار

هر چه مقدار ضریب عامل توان ( $PF=S^2\sigma$ ) بالاتر و رسانندگی گرمایی ( $\kappa_e+\kappa_i$ ) پایین تر باشد، بهره‌وری ترموالکتریکی بهتر خواهد بود. در دهه اخیر تحقیقات گسترده‌ای در بهبود بهره‌وری مواد ترموالکتریکی انجام شده است [۱۵]. تحقیق روی مواد جدید هنوز یک مسیر مهم برای به دست آوردن مواد ترموالکتریکی با کارایی بالا است.

در این مقاله، به منظور جستجوی مواد ترموالکتریک با کارایی بالا، با استفاده از نظریه تابعی چگالی همراه با معادله ترابردی نیمه کلاسیکی بولتزمن، خواص الکترونی و ترموالکتریکی نانوساختار تک لایه  $B_2CO$  را بررسی می‌کنیم. نتایج نشان می‌دهند که خواص ترمو الکتریک این نانوساختار، ضریب سیبک بزرگ، ضریب عامل توان بالا و رسانندگی گرمایی پایین دارد. نکته مهم این است که، می‌توان ضریب سیبک، ضریب ارزشی و ضریب عامل توان را با توجه به نوع حامل‌های  $n$  و  $p$ ، تا حد زیادی افزایش داد.

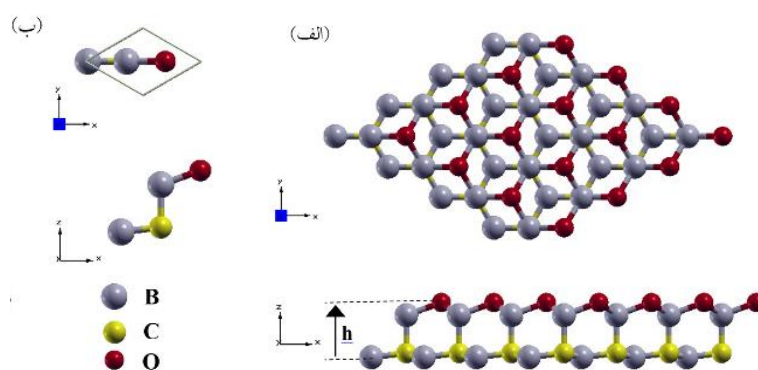
## ۲. روش محاسبات

در این مقاله، ابتدا محاسبات اصول اولیه بر اساس نظریه تابعی چگالی، با استفاده از بسته نرم‌افزاری کوانتوم-اسپرسو [۱۶] انجام شد و برای تعیین پتانسیل همبستگی-تبادلی از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) که توسط پردیو و بورک و انزروف [۱۷] ارائه شده، استفاده شده است. از آنجا که محاسبات به روش خود سازگار و برای مجموعه معینی از نقاط درون منطقه اول بریلوئن انجام می‌شود، لذا دقت و سرعت محاسبات بستگی شدیدی به انتخاب صحیح پارامترهایی نظیر تعداد نقاط  $k$  و انرژی قطع دارد. برای دستیابی به دقت مناسب در محاسبات از روش مونخورست-پک و انرژی قطع  $700\text{ eV}$  و تحت نمونه برداری از منطقه اول بریلوئن  $16 \times 16 \times 16$ ، استفاده کرده‌ایم. ثابت شبکه و مکان‌های اتمی را به طور کامل واهلش کرده تا همگرایی انرژی حدود  $10^{-6}\text{ eV}$  و نیروی وارد بر هر اتم کمتر از  $0.02\text{ eV/\AA}$  شود و برای کمینه کردن انرژی نسبت به موقعیت اتم‌ها، قضیه هلمن-فاینمن را به کار برده‌ایم. همچنین برای بهینه‌سازی حجم،  $15\text{ \AA}$  خلأ، برای جلوگیری از اندرکنش بین

نیم‌رساناهای دو بعدی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار هستند. برای یافتن یک ماده تک لایه دو بعدی جدید، می‌توان به طور مستقیم با یک روش تجربی آن را سنتز کرد. با این وجود، بهتر است قبل از سنتز آزمایشگاهی یک ماده دو بعدی احتمالی، با استفاده از محاسبات اصول اولیه بر پایه نظریه تابعی چگالی (DFT)، امکان وجود، پایداری و خصوصیات فیزیکی-شیمیایی آن را ارزیابی کرد. به این ترتیب، از دیدگاه نظری می‌توان به نگرشی عمیق برای نتیجه آزمایشگاهی دست یافت و یک ماده دو بعدی مؤثر را جهت استخراج معرفی کرد. لازم به ذکر است جهت سنتز ماده دو بعدی در محیط آزمایشگاهی، ابتدا لازم است پایداری انرژی آن از دیدگاه نظری مورد تأیید قرار گیرد. بنابراین، پیشنهاد یک نیم‌رسانای تک لایه دو بعدی با ویژگی‌های الکتریکی جدید نه تنها یک مسئله علم مواد است بلکه از نظر فنی نیز حائز اهمیت است.

در مطالعه اخیر که بر پایه محاسبات اصول اولیه انجام شده است، یک گروه تحقیقاتی اثبات کردند که نانوساختار تک لایه  $B_2CO$  می‌تواند وجود داشته باشد [۱۲]. پایداری ترمودینامیکی این ماده دو بعدی پیشنهادی با محاسبه انرژی همبستگی و پایداری دینامیکی آن با محاسبه پراکندگی فونون بررسی شده است. خواص مناسب این نانوساختار، موجب شده که در زمینه‌های متعددی در صنعت کاربرد داشته باشد [۱۲]. همچنین در مطالعه‌ای دیگر، خواص الکترونی و اپتیکی تک لایه  $B_2CO$  مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج این بررسی پایداری ساختاری و خواص برجسته الکترونی و فوتوکاتالیستی را نشان می‌دهد [۱۳].

مواد ترموالکتریک دسته‌ای از مواد با پتانسیل بالا هستند که ما را قادر می‌سازند تا به طور مستقیم گرما را به الکتریسیته و یا بالعکس، از طریق ضریب سیبک و یا اثر پلنتیه، تبدیل کنیم. بهره‌وری مواد ترموالکتریک توسط کمیت بدون بعد ضریب ارزشی  $ZT=S^2\sigma T/(\kappa_e+\kappa_i)$  نشان داده می‌شود که در آن  $S$  ضریب سیبک،  $\sigma$  رسانندگی الکتریکی،  $T$  دمای مطلق،  $\kappa_e$  و  $\kappa_i$  به ترتیب، رسانندگی گرمایی الکترون‌ها و رسانندگی گرمایی فونونی ناشی از ارتعاشات شبکه هستند [۱۴]. بدیهی است که



شکل ۱. (الف) نمای بالا و جانبی تک لایه  $B_2CO$  و (ب) سلول واحد تک لایه  $B_2CO$  از نمای بالا و جانبی.

جدول ۱. ثابت‌های شبکه بهینه‌سازی شده، طول خمیدگی،  $h$ ، و طول‌های پیوند تک لایه  $B_2CO$ .

ساختر	$a(\text{\AA})$	$d_{B-C}(\text{\AA})$	$d_{B-O}(\text{\AA})$	$\Delta_{B-C}(\text{\AA})$	$h(\text{\AA})$
$B_2CO$	۲,۵۸	۱,۵۰	۱,۵۹	۱,۶۰	۲,۳۱

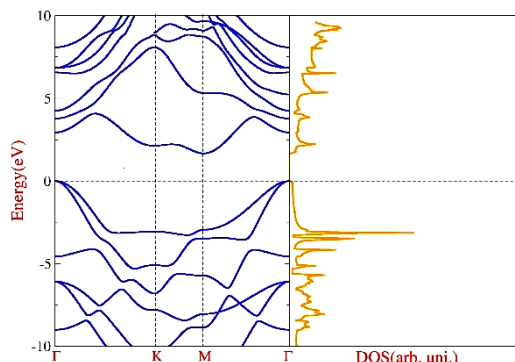
آینده نانو الکترونیک باشند. به ویژه، ساختار نواری الکترونی و طیف چگالی حالت‌ها، به عنوان یک عامل اصلی در تعیین خواص الکترونی و ترموالکتریکی، مورد توجه زیادی قرار گرفته است. بر این اساس در این بخش، نتایج مربوط به خواص ساختاری و الکترونی نانو ساختار تک لایه  $B_2CO$  جهت به دست آوردن ضرایب مربوط به خواص ترموالکتریکی، را مورد بحث قرار می‌دهیم. یاخته اولیه این نانوساختار مورد بررسی در این پژوهش، به صورت یاخته اولیه با چهار اتم (یک اتم اکسیژن، یک اتم کربن و دو اتم بورن) در نظر گرفته شده است. با توجه به فرایند بهینه‌سازی، تک لایه  $B_2CO$  در یک شبکه شش ضلعی خمیده با ثابت شبکه  $a=2.58\text{\AA}$  و بیشینه فاصله خمیدگی  $h=2.31\text{\AA}$  به پایداری می‌رسد. طرحواره‌ای از اینچنین نانوساختار در شکل ۱ نشان داده شده است.

با نگاهی دقیق به شبکه بلوری تک لایه  $B_2CO$ ، مشاهده می‌شود که تک لایه از دو صفحه شش ضلعی بورن-کربن (شامل شش ضلعی‌های B-C با طول پیوند  $d_{B-C}=1.50\text{\AA}$ ) و بورن-اکسیژن (شامل شش ضلعی‌های B-O با طول پیوند  $d_{B-O}=1.59\text{\AA}$ ) که توسط پیوندهای B-C با طول پیوند  $\Delta_{B-C}=1.60\text{\AA}$  متصل هستند، تشکیل شده است. نتایج در جدول ۱ ارائه شده است.

لایه‌ها در یاخته‌های مجاور استفاده شده است. سپس، با استفاده از انرژی الکترونی محاسبه شده، ضرایب تراپردی ترموالکتریکی توسط حل معادله نیمه کلاسیکی بولتزمن در تقریب زمان واهلش، توسط بسته محاسباتی BoltzTraP را به دست می‌آوریم [۱۸]. محاسبات تراپردی بولتزمن برای نیم‌رساناهای حجمی به طور گسترده مورد استفاده قرار گرفته است به طوری که نتایج حاصل رضایت بخش است [۲۰ و ۱۹]. مواد با ابعاد کم نسبت به مواد حجمی، به واسطه پراکندگی‌های گوناگون توسط فونون‌ها، خواص ترموالکتریکی بهتری را از خود نشان می‌دهند [۲۱ و ۲۲].

### ۳. بحث و نتیجه‌گیری

ساختار الکترونی و پاسخ ترموالکتریکی نانوساختارها، دو خاصیت فیزیکی مهم هستند که بایستی مورد بررسی قرار گیرند. اثرات برهم‌کنشی بس-ذره‌ای نقش مهمی در مطالعه خواص الکترونی و ترموالکتریکی سامانه‌های ابعاد کم، ناشی از کاهش اثرات استتار و افزایش همبستگی الکترون-الکترون، بازی می‌کند. انتظار می‌رود که نانوساختار تک لایه  $B_2CO$ ، دارای خواص مختلف قابل توجهی و نیز پتانسیل بالقوه‌ای برای



شکل ۲. ساختار نواری (سمت چپ) و چگالی حالت‌های الکترونی (سمت راست) تک لایه  $B_2CO$ . با گاف نواری غیرمستقیم  $1.68 \text{ eV}$ ، در طول راستاهای تقارنی،  $\Gamma(0, 0, 0)$ ،  $K(0.6, 0.3, 0)$ ،  $M(0.5, 0.5, 0)$  و  $\Gamma(0, 0, 0)$  رسم شده است. مقیاس انرژی بر حسب  $\text{eV}$  و مبدأ انرژی به طور دلخواه به عنوان بیشینه نوار ظرفیت انتخاب شده است.

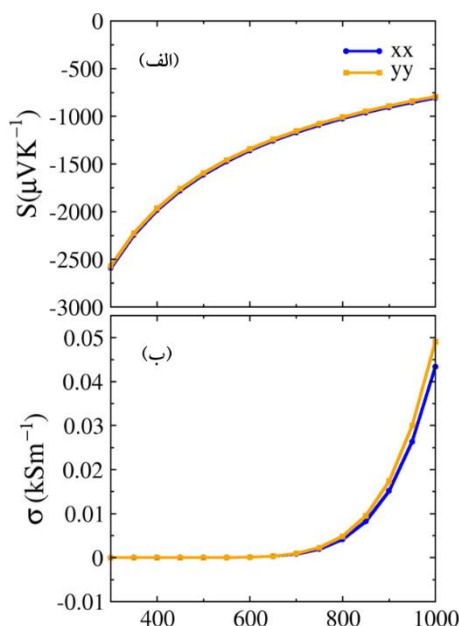
تابع توزیع فرمی دیراک است [۲۱]. در ادامه، خواص ترموالکتریکی نانوساختار مورد بررسی را از جمله ضرایب ترموالکتریک مانند ضریب سیبک، رسانندگی الکتریکی، رسانندگی گرمایی الکترونی، ضریب عامل توان و کمیت بدون بعد ضریب ارزشی  $ZT$  را مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

شکل ۳. الف و ب به ترتیب، ضریب سیبک ( $S$ ) و رسانندگی الکتریکی ( $\sigma$ ) در طول راستاهای  $x$  و  $y$  را برحسب تابعی از دما و در پتانسیل شیمیایی صفر،  $\mu = 0$ ، برای نانو ساختار  $B_2CO$  نشان می‌دهد. مکان پتانسیل شیمیایی ( $\mu$ ) نقش مهمی در خواص تراپردی بازی می‌کند. مکان  $\mu$  در ساختار نواری تعیین کننده مشارکت الکترون‌های نوار ظرفیت و یا رسانش در تراپرد الکترونی است و بنابراین ضریب سیبک و رسانندگی الکتریکی را تحت تأثیر قرار می‌دهد. می‌توان با تغییر دادن تعداد الکترون‌های نوار ظرفیت، پتانسیل شیمیایی را دست‌کاری کرد. همان طور که از شکل ۳ مشخص است، خواص تراپردی تقریباً همسانگرد برای این نانوساختار، در محدوده دمایی نشان داده شده را نمایش می‌دهد. همچنین، مقدار ضریب سیبک  $B_2CO$  در همه محدوده دمایی قابل توجه است. به طور مشخص، در شکل ۳ الف، مقدار ضریب سیبک در دمای  $300$  کلوین و در پتانسیل شیمیایی صفر،  $-2595 \mu\text{V/K}$  است. بنابراین، با توجه به این که ضریب سیبک منفی است، نانوساختار  $B_2CO$  نیم‌رسانای نوع  $n$  است و

در شکل ۲ ساختار نواری الکترونی و طیف چگالی حالت‌ها در طول راستاهای تقارنی  $\Gamma$ - $K$ - $M$ - $\Gamma$  برای نانوساختار تک لایه  $B_2CO$  نشان داده شده است. همان‌طور که از شکل ۲ مشاهده می‌شود، نانوساختار تک لایه  $B_2CO$  رفتار نیم‌رسانا از خود نشان می‌دهد، به طوری که ساختار تک لایه  $B_2CO$  با گاف نواری غیرمستقیم (بیشینه نوار ظرفیت (VBM) در نقطه  $\Gamma$  و کمینه نوار رسانش (CBM) در مسیر  $M$ - $\Gamma$ ، در حوالی نقطه  $M$ ) به میزان  $1.68 \text{ eV}$  را از خود نشان می‌دهد. این گاف نواری از گاف‌های نواری مواد ترموالکتریک مرسوم ( $1 \text{ eV}$ ) برای  $Sb_2Te_3$  و  $Bi_2Te_3$  ( $1.4 \text{ eV}$  برای  $Sb_2Te_3$ ) بزرگ‌تر است [۲۱]، که منجر به ایجاد اختلاف زیادی در خواص ترموالکتریکی می‌شود. از آنجایی که ضرایب تراپردی عمدتاً وابسته به خواص الکترونی هستند، گاف نواری بزرگ ممکن است باعث کاهش غلظت حامل‌های بار در اطراف انرژی فرمی شود. این امر می‌تواند منجر به ضرایب سیبک بزرگ شود و همچنین می‌توان با آرایش مناسب حامل‌های بار، ضریب عامل توان و ضریب ارزشی بزرگی را به دست آورد. لازم به ذکر است در یک نیم‌رسانا، غلظت حامل‌ها برای یک دما ( $T$ ) و پتانسیل شیمیایی ( $\mu$ ) مفروض با استفاده از تقریب باند سخت (RBA) توسط رابطه:

$$N = \int_{-\infty}^{VBM} dE n(E) [f(\mu, T) - 1] + \int_{CBM}^{\infty} dE n(E) f(\mu, T), \quad (1)$$

محاسبه می‌شود که در آن  $n(E)$  چگالی حالت‌های انرژی و  $f$



شکل ۳. (الف) و (ب) به ترتیب، نمودار تغییرات ضریب سبیک و رسانندگی الکتریکی در طول راستاهای x و y برحسب تابعی از دما برای نانوساختار B<sub>2</sub>CO.

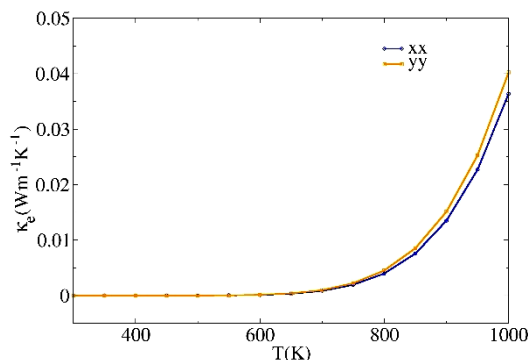
دهنده پایداری حرارتی بسیار خوب B<sub>2</sub>CO است [۲۵]. از شکل ۴ به راحتی ملاحظه می‌شود که به ازای دمای بیشتر از ۶۵۰ کلوین، رسانندگی گرمایی الکترونی افزایش سریع پیدا می‌کند. این رفتار با افزایش رسانندگی الکتریکی نشان داده شده در شکل ۳. ب به دلیل رابطه متناسب بین رسانندگی الکتریکی و رسانندگی گرمایی الکترونی مطابقت دارد. اگر رابطه ضریب ارزشی ZT را به صورت زیر بنویسیم:

$$ZT = \frac{S^2 \sigma T}{\kappa_e} \frac{\kappa_e}{\kappa_e + \kappa_l}, \quad (2)$$

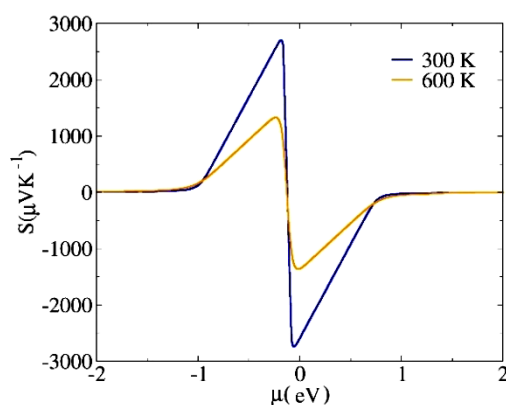
رابطه،  $ZT_e = S^2 \sigma T / \kappa_e$ ، مستقل از زمان واهلش  $\tau$ ، و حد بالایی از ضریب ارزشی ترموالکتریک است که مشارکت رسانندگی گرمایی فونونی ناشی از ارتعاشات شبکه را در نظر نمی‌گیرد. اگر سهم شبکه در رسانندگی گرمایی ( $\kappa_l$ ) در مقایسه با جمله الکترونی ( $\kappa_e$ ) ناچیز باشد،  $ZT_e$  به ZT نزدیک می‌شود. در دماهای بسیار پایین، تعداد کمی از الکترون‌ها برانگیخته می‌شوند که منجر به رسانندگی گرمایی الکترونی کم می‌شود. بنابراین، ممکن است که رسانندگی گرمایی توسط سهم شبکه بیان شود به این معنی که جمله مربوط به رسانندگی گرمایی

الکترون‌ها حامل‌های اصلی بار در رسانش هستند [۲۳]. شکل ۳. ب رسانندگی الکتریکی B<sub>2</sub>CO را نشان می‌دهد به طوری که با افزایش دما مقدار آن از صفر تا حدود ۰٫۰۵ kS/m متغیر است. همچنین، در محدوده دمایی صفر تا ۶۵۰ کلوین، این کمیت تقریباً ثابت است؛ اما هنگامی که حامل‌های بار بیشتری در اثر افزایش دما برانگیخته می‌شوند، افزایش سریعی در رسانندگی الکتریکی مشاهده می‌شود.

در محاسبات تراپردی بولتزمن در تقریب زمان واهلش، ضریب سبیک، مستقل از زمان واهلش  $\tau$  است، در صورتی که رسانندگی الکتریکی به طور خطی وابسته به  $\tau$  است. به علاوه، رسانندگی گرمایی الکترونی ( $\kappa_e$ ) توسط معادله ویدمان-فرانز ( $\kappa_e = L\sigma T$ ) که L ثابت لورنتز است) بیان می‌شود، بنابراین،  $\kappa_e$  نیز به  $\tau$  وابسته است. در این مقاله، زمان واهلش ثابت  $1 \times 10^{-14}$  s در نظر گرفته می‌شود [۲۴ و ۲۵]. در شکل ۴ نمودار تغییرات رسانندگی گرمایی الکترونی، در طول راستاهای x و y برحسب دما برای نانوساختار B<sub>2</sub>CO رسم شده است. همان طور که مشاهده می‌شود، رسانندگی گرمایی الکترونی B<sub>2</sub>CO تقریباً تا دمای ۶۵۰ کلوین مقدار صفر را نتیجه می‌دهد. این نتیجه نشان



شکل ۴. نمودار تغییرات رسانندگی گرمایی در طول راستاهای x و y بر حسب تابعی از دما برای نانوساختار B<sub>2</sub>CO.



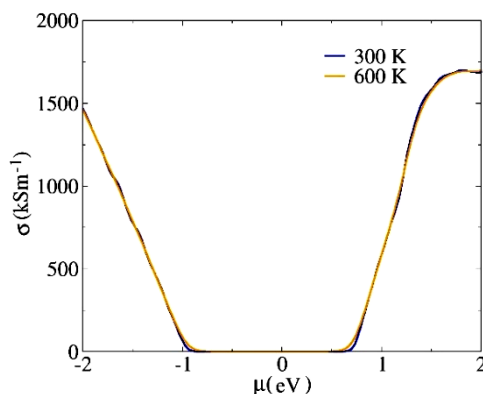
شکل ۵. نمودار تغییرات ضریب سبیک بر حسب تابعی از پتانسیل شیمیایی برای نانوساختار B<sub>2</sub>CO، در دماهای ۳۰۰ و ۶۰۰ کلوین.

است. جالب توجه این است که S در محدوده کوچکی در اطراف  $\mu=0$  بسیار افزایش می‌یابد که نشان دهنده این است که می‌توان مقدار قابل توجهی از S را از طریق آرایش کم‌حامل-های نوع n یا p به دست آورد. همچنین، بیشینه مقدار |S| برای این نانوساختار با افزایش دما کاهش پیدا می‌کند، به طوری که مقدار آن از  $-2740 \mu\text{V}/\text{K}$  در دمای ۳۰۰ کلوین به مقدار  $-1330 \mu\text{V}/\text{K}$  در دمای ۶۰۰ کلوین می‌رسد [۳۰ و ۳۱].

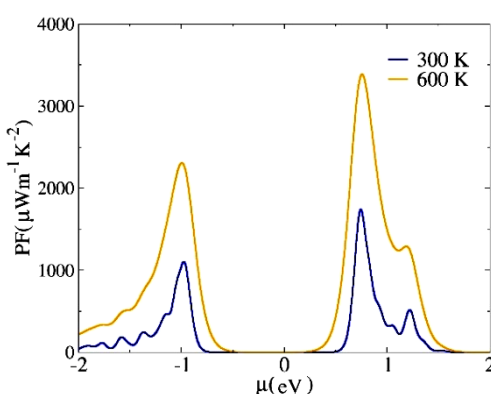
نمودار تغییرات رسانندگی الکتریکی نانوساختار تک لایه B<sub>2</sub>CO در شکل ۶ در دماهای مختلف ۳۰۰ و ۶۰۰ کلوین رسم شده است. همان طور که مشاهده می‌شود، نمودار تقریباً مقدار مستقل از دما را نشان می‌دهد و همچنین با افزایش نوع آرایش (n یا p) رسانندگی الکتریکی افزایش می‌یابد. بیشینه مقدار رسانندگی الکتریکی در دمای ۳۰۰ کلوین، در آرایش نوع n حامل‌ها به میزان  $1754 \text{ kS}/\text{m}$  اتفاق می‌افتد که در آن S واحد زیمنس است. در شکل ۶ بدیهی است که مقدار رسانندگی

فونونی ناشی از ارتعاشات شبکه نقش عمده را در ZT بازی می‌کند. هنگامی که دما افزایش پیدا می‌کند، به ویژه برای دماهای بالاتر از دمای اتاق، الکترون‌های بیشتری برانگیخته می‌شوند که منجر به افزایش رسانندگی الکترونی می‌شود، در حالی که سهم شبکه به دلیل افزایش پراکندگی‌های فونونی ناشی از ارتعاشات شبکه، کاهش می‌یابد. بنابراین، همان طور که دما به مقادیر بالاتر افزایش می‌یابد، نسبت  $ZT_e$  تخمین خوبی از ZT است [۲۵-۲۹].

در شکل‌های ۵، ۶، ۷ و ۸ ضریب سبیک، رسانندگی الکتریکی، ضریب عامل توان و ضریب ارزشی در دماهای مختلف (۳۰۰ و ۶۰۰ کلوین) بر حسب تابعی از پتانسیل شیمیایی به منظور بهینه‌سازی عملکرد حرارتی این نانوساختار، رسم شده‌اند. از آنجایی که پتانسیل شیمیایی  $\mu=0$  در پایین‌ترین نوار رسانش این نانوساختار انتخاب شده است، پتانسیل شیمیایی مثبت (منفی) متناظر با آرایش نوع n (p) حامل‌های بار



شکل ۶. نمودار تغییرات رسانندگی الکتریکی برحسب تابعی از پتانسیل شیمیایی برای نانوساختار B<sub>2</sub>CO، در دماهای ۳۰۰ و ۶۰۰ کلوین.



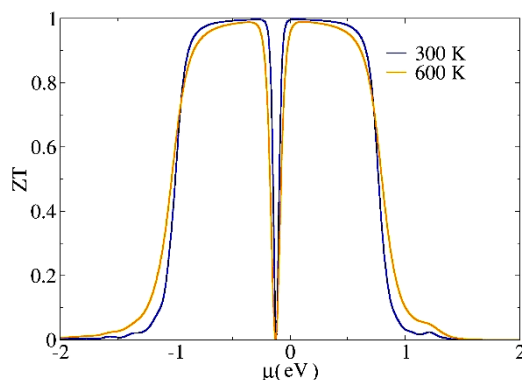
شکل ۷. الف) و ب) نمودار تغییرات ضریب عامل توان برحسب تابعی از پتانسیل شیمیایی برای نانوساختار B<sub>2</sub>CO، در دماهای ۳۰۰ و ۶۰۰ کلوین.

که نشان دهنده ضریب عامل توان بزرگتر در دمای ۶۰۰ کلوین برای محدوده پتانسیل شیمیایی بیان شده خواهد بود. بدیهی است که  $|S|$  بزرگ، منجر به ضریب عامل توان بزرگ برای هر دو نوع آرایش n و p برای این نانوساختار می‌شود و همچنین آرایش نوع n نتایج بهتری نسبت به آرایش نوع p را نمایش می‌دهد. در مقابل، قله‌های ضریب عامل توان در ۶۰۰ کلوین بالاتر از ۳۰۰ کلوین هستند که این امر به واسطه  $|S|$  بزرگتر در مقادیر بزرگ  $|\mu|$  است. در جدول ۲ قله‌های ضریب عامل توان و غلظت حامل‌های بار مربوطه برای هر دو نوع آرایش n و p در دماهای ۳۰۰ و ۶۰۰ کلوین از این نانوساختار نشان داده شده است.

همان طور که از شکل ۸ مشاهده می‌شود، مقدار  $ZT_e$  این ترکیب در مقایسه با نمودار ضریب عامل توان، تقریباً در محدوده کوچکی از  $|\mu|$  به بیشینه مقدار خود می‌رسد. در شکل

الکتریکی با تغییر دما از ۳۰۰ به ۶۰۰ کلوین تغییر نکند، این وضعیت در شکل ۳. ب هم دیده می‌شود که مقدار رسانندگی الکتریکی برای دمای زیر ۶۵۰ کلوین تقریباً صفر است. دلیل آن پهنای زیاد گاف نواری ساختار است که باعث می‌شود در محدوده زیادی از انرژی هیچ حالت مجازی برای حامل‌ها در سیستم وجود نداشته باشد. کم کم با افزایش دما، مشتق فرمی (که نقش کلیدی در فرمول رسانندگی الکتریکی دارد) پهن می‌شود و حالت‌های مجاز نوار ظرفیت و رسانش وارد محدوده غیر صفر آن می‌شود و انتگرال رسانندگی غیر صفر می‌شود.

در شکل ۷ نمودار تغییرات ضریب عامل توان بر حسب تابعی از پتانسیل شیمیایی برای نانوساختار B<sub>2</sub>CO در دماهای ۳۰۰ و ۶۰۰ کلوین، رسم شده است. همان طور که در شکل ۵ ملاحظه می‌شود، برای مقادیر بزرگ  $|\mu|$ ،  $|S|$  در دمای ۳۰۰ کلوین نسبت به دمای ۶۰۰ کلوین سریع‌تر به صفر میل می‌کند



شکل ۸. نمودار تغییرات ضریب ارزشی بر حسب تابعی از پتانسیل شیمیایی برای نانوساختار  $B_2CO$  در دماهای ۳۰۰ و ۶۰۰ کلوین.

جدول ۲. قله‌های ضریب عامل توان،  $PF(\mu W / m K^2)$ ، و غلظت‌های حامل‌های بار،  $N(1/cm^2)$ ، برای آلایش نوع n و p تک لایه  $B_2CO$  در دماهای ۳۰۰ و ۶۰۰ کلوین.

نوع p		نوع n		دما
N	PF	N	PF	
$26/85 \times 10^{+12}$	۱۱۰۳	$17/42 \times 10^{+12}$	۱۷۴۱	۳۰۰
$36/43 \times 10^{+12}$	۲۳۰۷	$20/50 \times 10^{+12}$	۳۳۸۶	۶۰۰

نظریه نیمه کلاسیکی تراپردی بولتزمن، مورد مطالعه قرار گرفتند. نتایج، خواص ترموالکتریک برجسته‌ای برای این نانوساختار را نشان می‌دهد؛ به طوری که می‌توان ضرایب سیبک بزرگ، رسانندگی‌های گرمایی پایین، ضرایب عامل توان بالا را در این نانوساختار به دست آورد. بنابراین، انتظار می‌رود که در آینده، نانوساختار تک لایه  $B_2CO$  نامزد بسیار خوبی برای مواد ترموالکتریک با کارایی بالا باشد. علاوه بر این، تک لایه  $B_2CO$ ، ویژگی‌های نسبی برجسته ترموالکتریکی را از خود نمایش می‌دهد، به طوری که این نانوساختار یک نیم‌رسانای نوع n است و مقدار ضریب سیبک و ضریب ارزشی در دمای اتاق به ترتیب،  $2595 V/K\mu$  و ۱ به دست آمدند.

۸ نمودار تغییرات ضریب ارزشی بر حسب تابعی از پتانسیل شیمیایی برای نانوساختار  $B_2CO$  در دماهای ۳۰۰ و ۶۰۰ کلوین، رسم شده است. مقدار ضریب ارزشی بزرگ‌تری در دمای ۳۰۰ کلوین مشاهده می‌شود، به طوری که برای آلایش نوع n و p حامل‌ها، مقدار ۱ را نشان می‌دهد، که نشان دهنده عملکرد خوب  $B_2CO$  در دمای اتاق است.

#### ۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله، خاصیت‌های الکترونی و ترموالکتریکی نانوساختار تک لایه  $B_2CO$  با استفاده از محاسبات اصول اولیه همراه با

#### مراجع

1. K S Novoselov, *et al.*, *Science* **306** (2004) 666.
2. H Sahin and S Ciraci, *Phys. Rev. B* **84** (2011) 035452.
3. R H Baughman, *et al.*, *Phys.* **87** (1987) 6687.
4. S Zhang, *et al.*, *Nano Lett.* **17** (2017) 3434.
5. S Zhang, *et al.*, *Chem. Soc. Rev.* **47** (2018) 982.
6. J Ji, *et al.*, *Nat. Commun.* **7** (2016) 13352.
7. Q Tang, Z Zhou, and Z Chen, *Wiley Interdiscip. Rev. Comput. Mol. Sci.* **5**, **5** (2015) 360.
8. C Zhi, *et al.*, *Adv. Mater.* **21** (2009) 2889.



9. S Zhang, *et al.*, *Proc. Natl. Acad. Sci.* **112**, **8** (2015) 2372.
10. S Saxena, R P Chaudhary, and S Shukla, *Sci. Rep.* **6** (2016) 31073.
11. S Huang, W Kang, and L Yang, *Appl. Phys. Lett.* **102** (2013) 133106.
12. M Naseria and D M Hoatb, *Comput. Mater. Sci.* **186** (2021) 109975.
13. M M Abutalib, *Superlattices Microstruct* **149** (2021) 106759.
14. B G Levi, *Phys. Today* **67** (2014) 14.
15. J He, M G Kanatzidis, and V P Dravid, *Mater. Today* **16** (2013)166.
16. P Giannozzi, *et al.*, *J. Phys. Condens. Matter* **21** (2009) 395502.
17. J P Perdew, K Burke, and M Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 3865.
18. G K H Madsen and D J Singh, *Comput. Phys. Commun.* **175** (2006) 67.
19. G Ding, G Y Gao, and K L Yao, *J. Phys. D Appl. Phys.* **47** (2014) 385305.
20. Y Saeed, N Singh, and U Schwingenschlogl, *Sci. Rep.* **4** (2014) 4390.
21. N F Hinsche, *et al.*, *Phys. Rev. B* **86** (2012) 085323.
22. G Shi and E Kioupakis, *J. Appl. Phys.* **117** (2015) 065103.
23. Ö C Yelgel, C Yelgel, and J Magnes, *Alloys* **7** (2019) 514.
24. S Yabuuchi, *et al.*, *Sci. Rep.* **5** (2015) 9567.
25. G Ding, G Gao, and K Yao, *Sci. Rep.* **5** (2015) 9567.
26. L D Zhao *et al.*, *Nature* **508** (2014) 373.
27. N Gaonkar and R G Vaidya, *Phys. Lett. A* **384** (2020) 126912.
28. D L Nika, *et al.*, *Phys. Rev. B* **79** (2009) 155413.
29. B Peng, *et al.*, *Sci. Rep.* **6** (2016) 20225.
30. Z Gao and J S Wang, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12** (2020) 14298.
31. S Tab, *et al.*, *Appl. Phys. A* **126** (2020) 544.