

## بررسی ویژگی ترموالکتریک مکسین کاربید تیتانیم

علی حسین محمد ظاهری\*<sup>۱</sup> و هادی محمد ظاهری<sup>۲</sup>

۱- گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه پیام نور

۲- گروه کامپیوتر، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه آزاد اسلامی اراک، اراک، ایران

### چکیده

رو به اتمام بودن انرژی‌های تجدیدناپذیر برای نسل‌های آینده و نیز افزایش روزافزون دمای کره‌ی زمین محققین را وادار به بررسی جایگزین این انرژی‌ها نموده است. از طرفی ائتلاف انرژی بسیار زیاد در دستگاهها و ماشینهای مورد استفاده امروزی دانشمندان را به سوی برگرداندن این انرژی‌ها در زمره انرژی‌های مفید سوق داد. نتیجه‌ی تحقیقات نشان می‌دهد مواد ترموالکتریک که نوعی میدلهای انرژی حالت جامد همراه با ترکیبی از خواص حرارتی الکتریکی و نیم‌رسانایی هستند که منجر به تبدیل انرژی حرارتی ائتلافی به الکتریسیته میگردند، طبق تعاریف میتوانند جایگزین مناسبی باشند. مواد دو بعدی به دلیل ویژگیهای منحصر به فرد از قبیل سطح ویژه بسیار بالا مورد توجه بسیاری از پژوهشگران قرار گرفته است. دسته‌ای از مواد دو بعدی که از سال ۲۰۱۱ کشف و مورد توجه قرار گرفته‌اند مکسین‌ها هستند. مکسینها طیف جدیدی از مواد هستند که با استفاده از فازهای ماکس به دست می‌آیند. این مواد معمول دارای یک عنصر فلزی از فلزات عناصر واسطه، عموماً تیتانیم و یا کروم، به همراه کربن و یا نیتروژن و یک گروه عاملی همانند فلوئور، اکسیژن و یا هیدروکسیدی هستند. بر اساس نظریه آلتنکیچ کیفیت مواد ترموالکتریک با ضرایب سبیک و رسانش گرمایی تعیین می‌شود. در این کار از نظریه ترابرد نیمه کلاسیکی بولتزمن در قالب بسته نرم افزاری "بولتز ترپ" برای محاسبه ضرایب ترابرد استفاده شده است. این نظریه در موارد بسیاری دارای جوابهایی است که با نتایج تجربی توافق بسیار خوبی دارد. جهت بررسی خواص ساختاری کاربید تیتانیم و نیز استفاده در فایل‌های ورودی کد بولتز ترپ از بسته نرم افزاری "کوانتوم اسپرسو" استفاده شده است.

**کلید واژه‌ها:** " بسته نرم افزاری کوانتوم اسپرسو"، " بسته نرم افزاری بولتز ترپ"، " مکسین‌ها"، " مواد دو بعدی"، " مکس فازها".

ایمیل نویسنده مسئول: [ahmzaheri@pnu.ac.ir](mailto:ahmzaheri@pnu.ac.ir)

در واقع این امکان وجود دارد که انرژی الکتریکی به صورت مستقیم و بدون نیاز به پیچیدگی‌های موجود در سیستم‌های سراماساز، برای خنک کاری به کار گرفته شود. ترموکوپل، تجهیزاتی است که به کمک آن می‌توان ولتاژ الکتریکی را به اختلاف دما تبدیل کرد. این فرآیند که عکس آن هم امکان پذیر است، اثر ترموالکتریک نامیده می‌شود. تعاریف پایه و اصلی مواد ترموالکتریک در سه دهه از سال ۱۸۲۱ تا سال ۱۸۵۱ به صورت ماکروسکوپی مطرح شد. پس از آن مفاهیم میکروسکوپی و ترکیبات آن تا امروزه در حال بررسی و مطالعه محققین هستند [۲-۳]. در سال‌های اخیر کارهای جدیدی بر روی اثرات ترموالکتریک هم در حوزه نظری و هم تجربی به دلیل اهمیت موضوع انجام شده است [۲-۸].

با توجه به محدودیت منابع انرژی تجدید ناپذیر، و با توجه به سازگاری انرژی الکتریکی با محیط زیست و اینکه یکی از روش‌های تولید انرژی برق استفاده از مواد ترموالکتریک است. این مواد مورد توجه جدی دانشمندان قرار گرفتند. پژوهش‌ها نشان می‌دهد مواد ترموالکتریک که نوعی مبدل‌های انرژی حالت جامد همراه با ترکیبی از ویژگی حرارتی الکتریکی و نیم‌رسانایی هستند و منجر به تبدیل انرژی حرارتی اتلافی به الکتریسیته می‌گردند، طبق تعاریف می‌توانند جایگزین مناسبی باشند. مشکلی که محققین با آن مواجه هستند بازدهی کم این نوع تبدیل است ولی تجدید پذیری بودن آن کامل مورد توجه قرار گرفته است. از طرف دیگر کاربردهای بسیار زیادی از جمله ذخیره انرژی، بازیافت حرارتی ماشین‌های گرمایی، به خصوص در کاربرد حمل و نقل، تبدیل حرارت اتلافی در صنعت و کوره‌های حرارتی و تبدیل حرارت بدن انسان به انرژی در دستگاه‌های قابل حمل و نقل است. علاوه بر این از این اثر می‌توان در اندازه‌گیری دما یا تغییر دمای اجسام و همچنین، در خنک کننده‌ها استفاده [۹]. افزون بر معیار بازده بالا برای مواد ترموالکتریک، سازگاری با محیط زیست که نشانه آن بدون سرب ماده‌ی مورد نظر است از اهمیت بالایی برخوردار است. بررسی و مقایسه مناسب بودن مواد مورد استفاده در ساخت سیستم‌های ترموالکتریک توسط کمیته بدون بعد ضریب شایستگی مشخص می‌شود که به ضرایب سبیک، رسانندگی الکتریکی و حرارتی وابسته است [۱۰]. ضریب سبیک و رسانندگی الکتریکی بالا و

## ۱- مقدمه

تاریخ مطالعه ویژگی‌های ترموالکتریک مواد نیمه رسانا به سال‌های ۱۸۲۳-۱۸۲۱ برمی‌گردد که توسط سبیک انجام شده است [۱]. در سال ۱۸۲۲ میلادی، «توماس سبیک (Seebeck)»، فیزیکدان آلمانی، متوجه شد اختلاف دما در دو نقطه اتصال مدار که از دو فلز متفاوت تشکیل شده باشد، قادر است عقربه قطب‌نما را منحرف کند. در واقع اختلاف دما، باعث ایجاد پتانسیلی الکتریکی شده بود که می‌توانست در یک مدار بسته، جریان الکتریکی ایجاد کند. این پدیده، امروزه به عنوان اثر سبیک شناخته می‌شود. ولتاژی که بدین طریق القا می‌شود، با اختلاف دما بین دو سر مدار (محل اتصال دو فلز به یکدیگر) متناسب است. این رابطه به شکل زیر نشان داده می‌شود.

$$v = s(T_h - T_c) \quad (1)$$

این ضریب تناسب (s) به ضریب سبیک معروف است.

در سال ۱۸۳۴، پلنیر (Peltier)، مداری را آزمایش کرد که در آن، دو انتهای دو فلز متفاوت به یکدیگر متصل شده بودند. پلنیر متوجه شد اگر جریان الکتریکی در این مدار برقرار شود، در محل اتصال دو فلز، گرما یا سرما ایجاد خواهد شد. این پدیده، به عنوان اثر پلنیر معروف است. گرمای جذب یا آزاد شده در نقاط اتصال، با جریان الکتریکی گذرنده از مدار، متناسب است. ثابت تناسب در رابطه زیر ( $\Pi$ ) ضریب پلنیر نامیده می‌شود.

$$Q = \Pi \times I \quad (2)$$

در واقع زمانی که هر طرف ماده ترموالکتریک، دمای مختلفی داشته باشد، یک ولتاژ ایجاد می‌شود و بر عکس زمانی که ولتاژی بر روی آن ماده اعمال شود، اختلاف دما ایجاد می‌شود. در ابعاد اتمی، اختلاف دمای اعمال شده سبب می‌شود تا حامل‌های بار در ماده از قسمت گرم ماده به قسمت سرد آن حرکت کنند.

بیست سال بعد، تامسون، که امروزه با نام لرد کلونین شناخته می‌شود، نشان داد که می‌توان ضرایب سبیک و پلنیر را با کمک علم ترمودینامیک به هم ارتباط داد. در واقع ضریب پلنیر برابر با حاصل ضرب دمای مطلق در ضریب سبیک است. به این موضوع اثر تامسون گفته می‌شود.

رسانندگی حرارتی پایین نشان دهنده مناسب بودن مواد به منظور استفاده در مصارف ترموالکتریک است. ولی مشکل این است که رسانندگی الکتریکی، رسانندگی گرمایی نسبت مستقیم دارند یعنی با افزایش رسانندگی الکتریکی، رسانندگی گرمایی نیز افزایش مییابد، برای غلبه بر این مشکل، با توجه به تحقیقات انجام شده پیشنهادهای مختلفی از جمله استفاده از نانو ساختارها، بکارگیری نانو نوارها و افزودن ناخالصی ارائه شده است [۱۰]. جهت بررسی مواد ترموالکتریک آلتکیرچ معیاری را به روش تئوری ارائه کرد که بر مبنای آن شایستگی مواد ترموالکتریک با ضرایب سیبک و رسانش گرمایی مورد بررسی قرار میگیرد. ترموالکتریک با ضرایب سیبک و رسانش گرمایی مورد بررسی قرار میگیرد. ویژگی انتقال بولتزمن مواد را از خصوصیات مانند ساختار باند ماده می توان مورد مطالعه قرار داد و بسته نرم افزاری که می تواند این کار را انجام دهد "بولتز ترپ" است. در واقع این بسته نرم افزاری بر پایه نظریه ترابرد نیمه کلاسیکی بولتزمن استوار است. همانطور که در بالا گفته شد مقاومت الکتریکی پایین یا به عبارتی رسانایی الکتریکی بالا که گرمای ژول را کم می کند یکی از عوامل تعیین کننده کیفیت مواد ترمو الکتریک است. به طور کلی ضریب شایستگی که با  $Z$  (یکای عکس دما دارد) نشان داده می شود بیانگر راندمان ترکیبات ترموالکتریک است که با آیوفه به صورت معادله زیر نشان داده شده است.

$$Z = \frac{\sigma S^2}{\lambda} \quad (3)$$

کمیات  $S$ ،  $\sigma$  و  $\lambda$  به ترتیب نشان دهنده ضریب سیبک، رسانندگی الکتریکی و رسانندگی گرمایی هستند. رسانندگی گرمایی الکترونها و رسانندگی گرمایی فونونی ناشی از ارتعاشات شبکه هستند [۱۱]. حاصل ضرب کمیت های ضریب سیبک و رسانندگی الکتریکی کمیتی به نام ضریب توان با تعریف  $PF = \sigma S^2$  را به وجود می آورند.

با توجه به آنکه  $Z$  با دما تغییر میکند می توان ضریب شایستگی را با کمیت بدون بعد  $ZT$  که با رابطه زیر تعریف می گردد نشان داد.

$$ZT = \frac{\sigma S^2}{\lambda} T \quad (4)$$

در رابطه بالا  $T$  دمای میانگین  $T_c$  و  $T_h$  (دماهای ناحیه گرم و سرد)، است. بدیهی است جهت داشتن

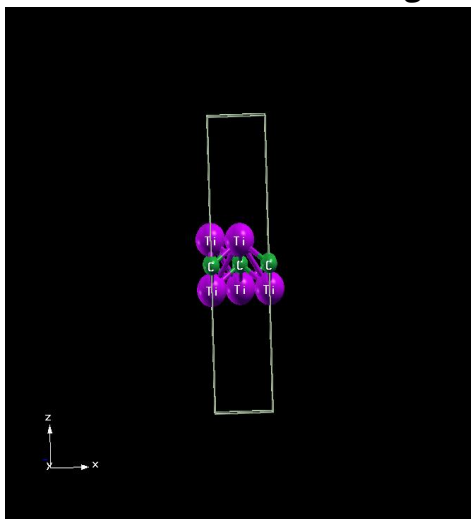
ضریب شایستگی بالا نیازمند داشتن ضریب توان بالا هستیم. موادی که دارای ضریب شایستگی یک و بالا تر از یک هستند برای کاربردهای ترمو الکتریک بسیار مناسب هستند. بدیهی است که هر چه مقدار ضریب عامل توان بالاتر و رسانندگی گرمایی پایین تر باشد، بهره وری ترموالکتریکی بهتر خواهد بود. در دهه اخیر تحقیقات گسترده ای در بهبود بهره وری مواد ترموالکتریکی انجام شده است [۱۲]. پژوهش بر مواد جدید هنوز یک مسیر مهم برای به دست آوردن مواد ترموالکتریکی با کارایی بالا است. بدیهی است یافتن مواد جدید با ویژگی های گفته شده در بالا رمز موفقیت این مولدها می باشد. به همین منظور در این کار ویژگی الکترونی و ترموالکتریک مواد نانو ساختارهای مواد دو بعدی تحت عنوان مکسین با استفاده از نظریه تابعی چگالی همراه با معادله تراپردی نیمه کلاسیکی بولتزمن، مورد مطالعه قرار گرفته است. ویژگی الکترونی و ترموالکتریکی توسط ساختار اتمی اعضا بلورهای دو-بعدی، مشخص می شود. پس، مواد دو بعدی به دلیل ویژگی های منحصر به فرد فیزیکی و شیمیایی در دهه گذشته توجه محققان در شاخه های مختلف علمی را به خود معطوف کرده- اند [۱۳]. جدیدترین عضو این خانواده مواد دو بعدی، مکسینها هستند که اولین بار در سال ۲۰۱۱ توسط پروفیسور یوری گوگوتسی و همکاران وی از دانشگاه درکسل کشف شدند [۱۴-۱۷]. مکسینها از سنتز مواد انبوهه به نام مکس فازها با فرمول شیمیایی  $M_{n+1}AX_n$  به دست می آیند که  $M$  جزو عناصر واسطه،  $A$  به از عناصر گروه 13 و 14 و  $X$  نیز کربن و نیتروژن است. همچنین،  $n$  اعداد ۱ الی ۳ را به خود میگیرد. با توجه به آنکه پیوند فلزی بین  $M$  و  $A$  ضعیفتر از پیوند بین  $M$  و  $X$  است، میتوان لایه  $A$  را با استفاده از مواد اسیدی حذف کرد که منجر به تولید مکسین با فرمول شیمیایی  $M_{n+1}X_n$

می شود [۱۸-۲۱]. مکسینها کاربردهای زیادی در حوزه های مختلف از جمله ذخیره سازی انرژی، الکترونیکی، اپتیکی، مکانیکی، مغناطیسی، ترموالکتریک، فوتوکاتالیست برای تصفیه آب، اپتوالکتریک، و پیزوالکتریک دارند [۲۲-۲۴]. در این مطالعه، ساختار الکترونی و ویژگی ترموالکتریک تک لایه های  $Ti_2C$  در چارچوب نظریه تابعی چگالی بررسی شده است. سپس، با

ضرایب ترموالکتریک هستند. در این راستا تاثیر برهمکنش متقابل بس ذره‌ها نقش ویژه‌ای برویژگی الکترونی و نیز ضرایب ترموالکتریکی نانو ساختارها دارند.

در این راستا، ساختار نواری الکترونی و طیف چگالی حالتها، به عنوان عوامل اصلی در تعیین ویژگی الکترونی و ترموالکتریکی، مورد توجه زیادی قرار گرفته است. بر این اساس در این بخش، نتایج مربوط به ویژگی ساختاری و الکترونی نانو ساختار  $Ti_2C$  برای به دست آوردن ضرایب مربوط به ویژگی ترموالکتریکی، را مورد بحث قرار می‌دهیم.

پس از حذف اتمهای الومینیم به روش نرم افزاری سلول اولیه نانوساختار مورد بررسی در این کار به صورت یاخته اولیه با سه اتم و به شکل هگزگونال حادث شد. در واقع لایه‌های بالا و پایین در امتداد محور Z از یک لایه را حذف می‌کنیم تا یک سطح دوبعدی منطبق بر صفحهی X-Y حادث شود. طرحواره‌ای از اینچنین نانوساختاری در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱: طرح‌واره مکسین  $Ti_2C$

نمودار نواری رسم نمودار مختلف ترازهای انرژی الکترون به عنوان تابعی از ابعاد مکانی است. از ساختار نواری میتوان اطلاعاتی درمورد ماهیت بلور از لحاظ رسانا یا نارسانا بودن، اندازه گاف انرژی در صورت وجود و نوع آن را به دست آورد. گاف نواری یکی از سودمندترین جنبه‌های ساختار نواری است و میزان آن بیانگر ویژگیهای نوری و الکتتریکی است.

استفاده از انرژی الکترونی محاسبه شده، ضرایب ترابردی ترموالکتریکی با حل معادله نیمه کلاسیکی بولتزمن در تقریب زمان واهلش، با بسته BoltzTraP به دست می‌آوریم.

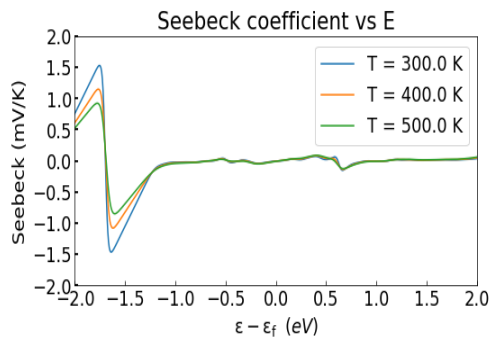
## ۲ - جزئیات محاسبات

برای بررسی ویژگی ساختاری و الکترونی از محاسبات اصول اولیه، بر اساس نظریه تابعی چگالی و با استفاده از بسته نرم افزاری کوانتوم اسپرسواستفاده شده است. پتانسیل همبستگی-تبادلی با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) مورد محاسبه قرار گرفت. با استفاده از روشهای شبه پتانسیل و موج تخت انرژی کل و سایر کمیت‌های مربوط به آن محاسبه شده است. با توجه به اینکه بسته نرم افزاری کوانتوم اسپرسو بر پایه روش خودسازگار کار می‌کند و از آنجا که محاسبات برای تعداد معینی از نقاط درون منطقه اول بریلون انجام می‌شود انتخاب تعداد نقاط (K) و نیز انرژی قطع تاثیر زیادی بر اپتیمم بودن محاسبات دارد. برای این منظور در این کار با در نظر گرفتن نظریه هلمن-فاینمن و بر اساس روش مونخورست-پیک نقاط را  $16 \times 16 \times 1$  انتخاب کردیم. مقدار انرژی الکترونی از خروجی‌های محاسبات بالا خواهد بود. بنابراین، با استفاده از انرژی الکترونی محاسبه شده و نیز حل معادله نیمه کلاسیکی بولتزمن که با بسته نرم افزاری بولتزترپ انجام می‌شود ضرایب ترابردی ترموالکتریکی را به دست آوردیم. به عبارت دیگر جهت بررسی ضرایب ترمودینامیکی از کد بولتزترپ بهره برده-ایم [۲۷-۲۵]. کد بولتزترپ بر اساس عکس (وارونگی) فوریه نوارهای انرژی محاسبات را انجام می‌دهد و ضرایب انتقال را به روش نیمه کلاسیکی محاسبه می‌کند. به تازگی، محاسبات ترابردی بولتزمن برای نیمه رساناهای حجمی به طور گسترده مورد استفاده قرار گرفته است به طوری که نتایج حاصل رضایت بخش است و مواد با ابعاد کم نسبت به مواد حجمی، به واسطه پراکندگی‌های گوناگون با فونونها، ویژگی ترموالکتریکی بهتری را از خود نشان می‌دهند [۲۸-۳۱].

## ۳ - نتیجه‌گیری و بحث

دو خاصیت فیزیکی مهم نانوساختارها که در این کار مورد بحث قرار گرفته‌اند ساختار الکترونی و

دمایی دارد برای به دست آوردن بیشترین آن و کاربردی کردن کار، این کمیت در دماهای مختلف مورد بحث قرار گرفت که نتایج در شکل (۳) آمده- اند.

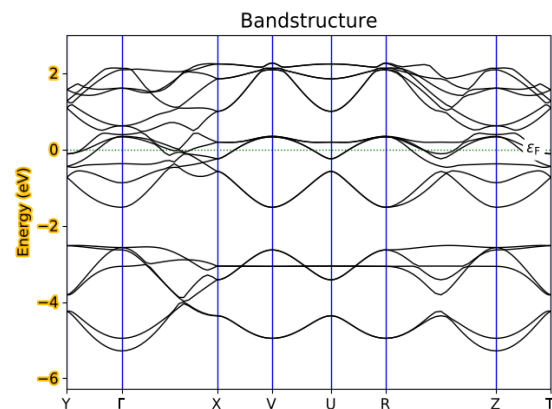


شکل ۳: نمودار ضریب سبیک بر حسب انرژی

همانطور که در نمودار مشخص است، ضریب سبیک در دمای اتاق (۳۰۰ درجه کلون) بیشترین مقدار را دارد و در پانصد درجه کلون کمترین مقدار را دارد. این نتیجه کاملاً با ویژگی فیزیکی این ساختار در تطابق است زیرا هر چقدر دما بالا تر می‌رود جنبش حامل‌های بار بیشتر و در نتیجه غلظت حامل‌های بار در اطراف سطح فرمی کمتر و به طبع ضریب سبیک نیز کمتر خواهد شد. از طرفی تغییرات این کمیت دارای یک پیک مثبت و یک پیک منفی در نزدیکی منفی ۱/۷۵ الکترون ولت است و در بقیه مقادیر انرژی تغییراتی ندارد و مقدار آن خیلی کم است. این تقارن در دو پیک با خاصیت ساختار تطابق کامل دارد زیرا هیچگونه تزییق حامل بار (حفره یا الکترون) صورت نگرفته پس، میانگین غلظت حاملها در اطراف سطح فرمی برابر هستند.

همانطور که در بالا گفته شد، ضریب سبیک وابستگی شدیدی به غلظت حامل‌های بار دارد، پس، تغییرات ضریب سبیک بر حسب غلظت حامل‌های بار را در سه دمای مختلف مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج حاصله در نمودار شکل ۴ آمده است. ملاحظه می‌گردد وابستگی S به N تغییر قابل ملاحظه‌ای با دما ندارد ولی تغییر ضریب سبیک نسبت به حامل‌های بار با مرجعیت سطح فرمی دارای یک پیک مثبت و یک پیک منفی است که همانطور که در بالا گفته شد بیانگر تساوی غلظت حامل‌های بار است.

برای بررسی ویژگی الکترونی این نانو ساختار، ساختار نواری در نقاط پرتقارن با مرجعیت سطح فرمی ترسیم شده است. نتایج در شکل ۲ آمده است. در واقع در شکل ۲ ساختار نواری الکترونی در طول راستاهای تقارنی  $\Gamma-X-V-R-T-\Gamma$  که نقاط پرتقارن محسوب می‌شوند برای این نانوساختار نشان داده شده است.



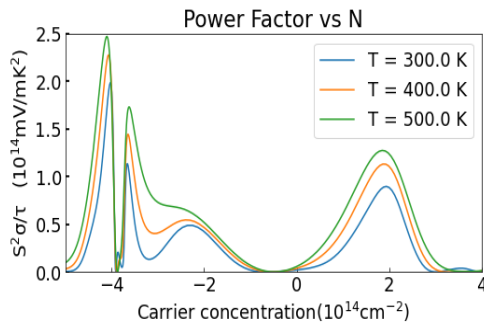
شکل ۲: ساختار نواری  $Ti_2C$

همانطور که در شکل مشاهده می‌شود، این نانوساختار رفتار رسانا از خود نشان می‌دهد، به طوری که این ساختار با گاف نواری غیرمستقیم بیشینه نوار ظرفیت در مسیر  $\Gamma-X$  در حوالی نقطه  $\Gamma$  و کمینه نوار رسانش در نقطه را از خود نشان می‌دهد.

ضرایب ترموالکتریک وابستگی شدیدی به ویژگی الکترونی دارند از جمله گاف نواری با عکس غلظت حامل‌های بار متناسب است به این معنا که گاف نواری بزرگ ممکن است باعث کاهش غلظت حامل‌های بار در اطراف سطح فرمی شود ولی نسبت مستقیم با ضرایب سبیک دارد. پس، با توجه به اهمیت ویژگی ترموالکتریکی نانوساختارها در شناخت هرچه بیشتر این مواد ضرایب ترموالکتریک مانند ضریب سبیک، رسانندگی الکتریکی، رسانندگی گرمایی الکترونی، ضریب عامل توان و کمیت بدون بعد ضریب ارزشی، ZT را مورد مطالعه قرار می‌دهیم.

با توجه به آنکه داشتن ضریب سبیک بالا یکی از ویژگی‌های خوب مواد ترموالکتریک محسوب می‌شود. در این کار این کمیت نیز مطالعه شده است. همچنین، از آنجا که این ضریب وابستگی

دمای مختلف مورد مطالعه قرار گرفت که نتایج آن در شکل (۶) نشان داده شده است.



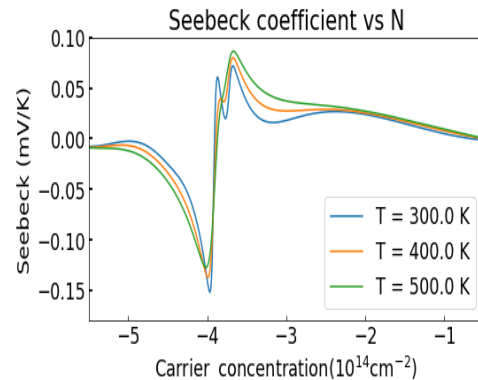
شکل ۶: نمودار ضرایب توان بر حسب غلظت حاملها

همانطور که در نمودارها مشخص است، ضرایب توان نسبت به غلظت حاملها به طور غیر خطی بستگی دارند و با توجه به آنکه مواد مورد مطالعه، ترکیب دو عنصر هستند پس هر دو حفره ها و الکترونها در ضرایب سیبک و توان نقش آفرینی می کنند که در نمودارهای شکل (۶) کاملاً پیداست و مطابقت کامل با تئوری این بحث دارد. همچنین، نتایج حاصل از این کار با کاری که توسط Subrahmanyam Bandaru و همکارانش انجام شده است [۳۲]، مورد قیاس قرار گرفت که دارای تطابق خوبی هستند.

پس، با توجه به بحث های بالا این ماده ی دو بعدی جهت استفاده ی مصارف ترموالکتریک از جمله در باتری ها، ابررساناها، الکتروکاتالیست، حسگرهای زیستی، سنسورهای گازی، روان کننده ها و همچنین، اینترفیس ها توصیه می شود.

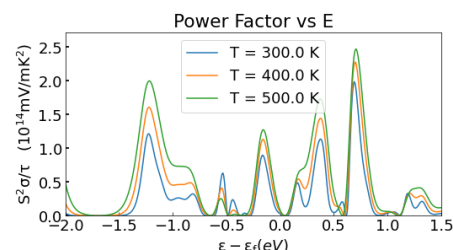
#### ۴. منابع

- [1] Treatise A, Semiconductors and Semimetals, Recent Trends in thermoelectric materials Research, (Academic Press, 2001).
- [2] Rowe: DM. Thermoelectrics handbook: macro to nano: ( CRC press; 2009)
- [3] Nolas G.S., Sharp J., Goldsmid J., Thermoelectrics: basic principles and new materials developments, vol. 45: (Springer Science & Business Media; 2013).



شکل ۴: نمودار تغییرات ضریب سیبک بر حسب غلظت حاملهای بار

کمیت دیگری که بیانگر کیفیت مواد ترموالکتریک است ضریب توان است که با رابطه  $PF = \sigma S^2$  تعریف می شود. به منظور دستیابی به کارایی ترموالکتریک بالا یا ضریب شایستگی بالا، بایستی توان ترمو الکتریک بالا داشته باشیم. پس، در این کار این کمیت نیز به صورت تابعی از انرژی و غلظت حاملها مورد مطالعه قرار گرفت که نتیجه آن به ترتیب در شکل های (۴) و (۵) آمده اند.



شکل ۵: نمودارهای ضریب توان بر حسب انرژی

بر اساس نظر آلتنکیرچ که در بخش مقدمه آورده شده است در حالت کلی اگر یک ماده دارای ضریب سیبک مثبت باشد بدین معنی است که جزئی مواد p-type است و اکثریت حامل های بار آن توسط حفره ها انجام می پذیرد. و در صورت منفی بودن ضریب سیبک میتوان گفت که اکثر حامل های بار ماده الکترونها هستند و به صورت سمبلیک n-type است. و از آنجا که ضریب سیبک نسبت مستقیم با ضریب توان دارد بررسی تغییرات ضریب توان نسبت به غلظت حاملها می تواند شاخص خوبی برای شناخت ویژگی ترموالکتریک مواد باشد. پس، در این کار این تغییرات در سه



- [15] Anasori B., and Gogotsi Y., Introduction to 2D transition metal carbides and nitrides (MXenes), in 2D Metal carbides and nitrides (MXenes). 2019, Springer. p. 3-12.
- [16] Oyama S.T., et al., Preparation and characterization of early transition metal carbides and nitrides. Industrial & engineering chemistry research, 1988. 27 (9): p. 1639-1648.
- [17] Levy R. and Boudart M., Platinum-like behavior of tungsten carbide in surface catalysis. science, 1973. 181 (4099): p. 547-549.
- [18] Halim J., Synthesis and Transport Properties of 2D Transition Metal Carbides, Linköping University Electronic Press, 2018, 1953.
- [19] Persson I., Surface Characterization of 2D Transition Metal Carbides (MXenes), 2019, 1986.
- [20] Naguib M., Mochalin V.N., Barsoum M.W., Gogotsi Y., 25th Anniversary Article: MXenes: A New Family of Two-Dimensional Materials, Advanced Materials; 2014, 26 992-1005.
- [21] Venkateshalu S., Grace A.N., MXenes—A New Class of 2D Layered Materials: Synthesis, Properties, Applications as Supercapacitor Electrode and Beyond, Applied Materials Today; 2020, 18, 100509.
- [22] Lei J.C., Zhang X., Zhou Z., Recent Advances in MXene: Preparation, Properties, and Applications, Frontiers in Physics; 2015, 10, 276-286.
- [23] Khazaei M., Mishra A., Venkataramanan N.S., Singh A.K., Yunoki S., Recent Advances in MXenes: From Fundamentals to Applications, Current Opinion in Solid State & Materials Science; 2019, 23, 164-178.
- [24] Ronchi R.M., Arantes J.T., Santos S.F., Synthesis, Structure, Properties and Applications of MXenes: Current Status and Perspectives, Ceramics International; 2019, 45, 18167.
- [25] Perdew J.P., Burke, Ernzerhof, K., M. [4] Carotenuto G. et al. Synthesis and thermoelectric characterisation of bismuth nanoparticles, J. Nanopart Res, 2009 ;11, 1729-1738.
- [5] Heremans J. and C. M. Thrush, Thermoelectric power of bismuth nanowires, Phys. Rev B, 1999; 59, 12579.
- [6] Glatz A. and Beloborodov, I. S. Thermoelectric performance of granular semiconductors, Phys. Rev B, 2009; 80, 245440.
- [7] Cheng Zheng Jin, Recent advances on thermoelectric materials, Front. Phys. China, 2008; 3, 269–279.
- [8] Ioffe A. F, Semiconductor Thermoelements and Thermoelectric Cooling Infosearch (Ltd., 1965).
- [9] Markovic D.S., Zivkovic D., Cvetkovic D., Popovic R., Impact of nanotechnology advances in ICT on sustainability and energy efficiency, Renewable and Sustainable Energy Reviews; 2012. 16 , 2966-2972.
- [10] Santos R., Yamini S.A., Dou S.X., Recent progress in magnesium-based thermoelectric materials. Journal of Materials Chemistry A; 2018, 6 , 3328-3341.
- [11] Levi B.G., Simple compound manifests record-high thermoelectric performance, Physics Today; 2014, 67, 14–16.
- [12] He J., Kanatzidis M. G., Dravid V.P., High performance bulk thermoelectrics via a panoscopic approach, Materials Today; 2013, 16, 166–176.
- [13] Fiori G., Francesco B., Iannaccone G., Palacios T., Neumaier D., Seabaugh A., Banerjee, Colombo S.K., L., Electronics based on twodimensional materials, Nature nanotechnology; 2014, 9.
- [14] Naguib M., Kurtoglu M., Presser V., Lu J., Niu J., Heon M., Hultman L., Gogotsi Y., Barsoum M.W., Two-dimensional nanocrystals produced by exfoliation of  $Ti_3AlC_2$ , Advanced materials; 2011, 23, 4248-4253.

Generalized Gradient Approximation Made Simple, Physical review letters; 1996 **77**, 3865.

[26] Giannozzi P., et al., A modular and open-source software project for quantum simulations of materials, Journal of Physics: Condensed Matter; 2009, **21**, 395502-395521.

[27] Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M., Generalized Gradient Approximation Made Simple, Physical Review Letters; 1996, **77** (18), 3865-3868.

[28] Ding G., Gao G.Y., Yao K.L., Thermoelectric performance of half-Heusler compounds  $MYSb$  ( $M = Ni, Pd, Pt$ ), Journal of Physics D: Applied Physics; 2014, **47**, 385305(5).

[29] Saeed Y., Singh N., Schwingenschlogl U., Superior thermoelectric response in the 3R phases of hydrated  $NaxRhO_2$ , Scientific Reports; 2014, **4** 4390(5).

[30] Hinsche N.F., et al., Thermoelectric transport in  $Bi_2Te_3/Sb_2Te_3$  superlattices, Physical Review B; 2012, **86** 085323(13).

[31] Shi G., Kioupakis E., Quasiparticle band structures and thermoelectric transport properties of p-type SnSe, Journal of Applied Physics; 2015, **117** 065103(10).

[32] Bandaru S, Agnieszka M., Jastrzębska, and Birowska M., Recent progress in thermoelectric MXene-based structures versus other 2D materials. Condensed Matter > Materials Science, 2023.







## Investigating the thermoelectric properties of mxene titanium carbide

A.H. Mohammadzaheri<sup>1\*</sup> and H. Mohammadzaheri<sup>2</sup>

1. Department of Physics - Faculty of science - Payame Noor university
2. Department of computer, Faculty of technical and engineering , Islamic Azad University.

### Abstract:

The depletion of non-renewable energies for the future generations and the increasing temperature of the earth have forced researchers to investigate the alternatives of these energies. A lot of energy wastage in the devices used today led scientists to turn these energies into useful energies. The results of the research show that thermoelectric materials, which are a type of solid state energy converters with a combination of thermal electrical and semiconducting properties that lead to the conversion of waste thermal energy into electricity, can be a suitable alternative according to the definitions. Two-dimensional materials have attracted the attention of many researchers due to their unique features such as a very high specific surface. A group of two-dimensional materials that have been discovered are mxenes. Mxenes are a new range of materials obtained by using Max phases. These materials usually have a metal element from intermediate metals, generally titanium or chromium, along with carbon or nitrogen and a functional group such as fluorine, oxygen or hydroxide. According to Altenkirch's theory, the quality of thermoelectric materials is determined by coefficients of Seebeck and thermal conductivity. In this work, Boltzmann's semi-classical transport theory has been used in the form of "Boltztrap" software package to calculate transport