بررسی ویژگی ترموالکتریک مکسین کاربید تیتانیم

علی حسین محمد ظاهری*[۱و] و هادی محمد ظاهری[۲]

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 انرژی ها نموده است. از طرفی اتلاف 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 مبدلهای انرژی حالت جامد همراه با ترکیبی از خواص حرارتی الکتریکی و نیم‌رسانایی هستند که منجر به تبدیل انرژی حرارتی اتلافی 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. دسته ای 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 معموال دارای یک عنصر فلزی از فلزات عناصر واسطه، عموما تیتانیم و یا کروم، به همراه کربن و یا نیتروژن و یک گروه عاملی همانند فلوئور، اکسیژن و یا هیدروکسیدی هستند. بر اساس نظریه آلتنکیرچ کیفیت مواد ترموالکتریک با ضرایب سیبک 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 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

تاریخ دریافت:۱۴۰۲/۰۳/۱۹ تاریخ بازنگری: ۱۴۰۲/۰۴/۱۷ تاریخ پذیرش:۱۴۰۲/۰۵/۰۲

۱-مقدمه

تاریخ مطالعه ویژگي هاي ترموالکتريك مواد نیمه رسانا به سال هاي1823-1821 برمی‌گردد که توسط سیبك انجام شده است [۱].در سال ۱۸۲۲ میلادی، «توماس سیبک(Seebeck)، فیزیک‌دان آلمانی، متوجه شد اختلاف دما در دو نقطه اتصالِ مداری 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 سیبک 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.

$$v = s(T_h - Tc) \qquad (1)$$

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

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

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

در واقع زماني كه هر طرف مادۀ ترموالکتريك، دماي مختلفي داشته باشد، يك ولتاژ ايجاد ميشود و بر عكس زماني كه ولتاژي بر روي آن ماده اعمال شود، اختلاف دما ايجاد ميشود. در ابعاد اتمي، اختلاف دماي اعمال شده سبب ميشود تا حاملهاي بار در ماده از قسمت گرم ماده به قسمت سرد آن حركت كنند.

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

در واقع این امکان وجود دارد که انرژی الکتریکی به صورت مستقیم و بدون نیاز به پیچیدگی‌های موجود در سیستم‌های سرماساز، برای خنک کاری به کار گرفته شود. ترموکوپل، تجهیزی است که به کمک آن می‌توان ولتاژالکتریکی 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 سال‌هاي اخير كارهاي جديدي بر روي اثرات ترموالکتريك هم در حوزه نظري و هم تجربي به دليل اهميت موضوع انجام شده است[۲-۸].

با توجه به محدودیت منابع انرژي تجدید ناپذیر، و با توجه به سازگاری انرژی الکتریکی با محیط زیست و اینکه یکی از روشهاي توليد انرژي برق استفاده از مواد ترموالکتريك است. این مواد مورد توجه جدی دانشمندان قرار گرفتند. پژوهش‌ها نشان می دهد 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 بازدهي كم اين نوع تبديل است ولی تجدید پذ یر بودن آن کامل مورد توجه قرار گرفته است. از طرف دیگرکاربردهای بسیار زیادی از جمله ذخیرۀ انرژي، بازيافت حرارتي ماشينهاي گرمايي، به خصوص در كاربرد حمل و نقل، تبديل حرارت اتلافي در صنعت و كوره‌هاي حرارتي و تبديل حرارت بدن انسان به انرژي در دستگاههاي قابل حمل و نقل است. علاوه بر این از این اثر میتوان در اندازه‌گيري دما يا تغيير دماي اجسام و همچنين، در خنك كننده‌ها استفاده [۹]. افزون بر معیار بازده بالا برای مواد ترموالکتریک، سازگاری با محیط زیست که نشانه آن بدون سرب ماده‌ی مورد نظر است از اهميت بالايي برخوردار است. بررسی و مقایسه مناسب بودن مواد مورد استفاده در ساخت سیستمهای ترموالکتریک توسط کمیت بدون بعد ضريب شايستگي مشخص مي‌شود كه به ضرايب سيبك، رسانندگي الكتريكي و حرارتي وابسته است [۱۰]. ضريب سيبك و رسانندگي الكتريكي بالا و

رسانندگي حرارتي پايين نشان دهنده مناسب بودن مواد به منظور استفاده در مصارف ترموالكتريك است. ولی مشکل این است که رسانندگي الكتريكي، رسانندگي گرمايي نسبت مستقيم دارند يعنی با افزايش رسانندگي الكتريكي، رسانندگي گرمايي نيز افزايش مييابد، براي غلبه بر اين مشكل، با توجه به تحقيقات انجام شده پيشنهادهای مختلفي از جمله استفاده از نانو ساختارها، بكار گيری نانو نوارها و افزودن ناخالصي ارائه شده است[۱۰].جهت بررسی مواد ترموالكتريک آلتنكيرچ معياری را به روش تئوری ارائه كرد كه بر مبنای آن شايستگی مواد ترموالكتريک با ضرايب سيبک و رسانش گرمايی مورد بررسی قرار ميگيرد. ترموالكتريک با ضرايب سيبک و رسانش گرمايی مورد بررسی قرار ميگيرد. ويژگی انتقال بولتزمن مواد را از خصوصياتی مانند ساختار باند ماده می‌توان مورد مطالعه قرار داد و بسته نرم افزاری كه می‌تواند اين كار را انجام دهد "بولتز ترپ" است. در واقع اين بسته نرم افزاری بر پايه نظريه ترابرد نيمه‌كلاسيكی بولتزمن استوار است. همانطور كه در بالا گفته شد مقاومت الكتريكی پايين يا به عبارتی رسانايی الكتريكی بالا كه گرمای ژول را كم می‌كند يكی از عوامل تعيين كننده كيفيت مواد ترمو الكتريک است. به طور كلی ضريب شايستگی كه با Z (يكای عكس دما دارد) نشان داده می‌شود بيانگر راندمان تركيبات ترموالكتريک است كه با آيوفه به صورت معادله زير نشان داده شده است.

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

كميات S، σ و λ به ترتيب نشان دهنده ضريب سيبک، رسانندگی الكتريكی و رسانندگی گرمايی هستند. رسانندگی گرمايی الكترونها و رسانندگی گرمايی فونونی ناشی از ارتعاشات شبكه هستند[۱۱].حاصل ضرب كميتهای ضريب سيبک و رسانندگی الكتريكی كميتی به نام ضريب توان با تعريف $PF = \sigma S^2$ را به وجود می آورند.

با توجه به آنكه Z با دما تغيير ميكند می‌توان ضريب شايستگی را با كميت بدون بعد ZT كه با رابطه زير تعريف می‌گردد نشان داد.

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

در رابطه بالا T دمای ميانگين T_c و T_h (دماهای ناحيه گرم و سرد)، است. بديهی است جهت داشتن ضريب شايستگی بالا نيازمند داشتن ضريب توان بالا هستيم. موادی كه دارای ضريب شايستگی يک و بالا تر از يک هستند برای كاربردهای ترمو الكتريک بسيار مناسب هستند. بديهی است كه هر چه مقدار ضريب عامل توان بالاتر و رسانندگی گرمايی پايين‌تر باشد، بهره وري ترموالكتريكی بهتر خواهد بود. در دهه اخير تحقيقات گستردهاي در بهبود بهره وري مواد ترموالكتريكی انجام شده است [۱۲]. پژوهش بر مواد جديد هنوز يک مسير مهم براي به دست آوردن مواد ترموالكتريكی با كارايی بالا است. بديهی است يافتن مواد جديد با ويژگی های گفته شده در بالا رمز موفقيت اين مولدها می باشد. به همين منظور در اين كار ويژگی الكترونی و ترموالكتريک مواد نانوساختارهاي مواد دو بعدی تحت عنوان مكسين با استفاده از نظريهٔ تابعی چگالی همراه با معادلهٔ ترابردي نيمه كلاسيكی بولتزمن، مورد مطالعه قرار گرفته است. ويژگی الكترونی و ترموالكتريكی توسط ساختار اتمی اعضاي بلورهاي دو-بعدي، مشخص می‌شود. پس، مواد دو بعدي به دليل ويژگيهاي منحصر به‌فرد فيزيكی و شيميايی در دههٔ گذشته توجه محققان در شاخه های مختلف علمی را به خود معطوف كرده-اند[۱۳].جديدترين عضو اين خانوادهٔ مواد دو بعدي، مكسينها هستند كه اولين بار در سال ۲۰۱۱ توسط پروفسور يوری گوگوتسی و همكاران وی از دانشگاه دركسل كشف شدند[۱۴-۱۷]. مكسينها از سنتز مواد انبوهه به نام مكس فازها با فرمول شيميايی $M_{n+1}AX_n$ به‌دست می‌آيند كه Mجزو عناصر واسطه، Aبه از عناصرگروه 13و ۱۴، و Xنيز كربن و نيتروژن است. همچنين، n اعداد ۱ الی ۳ را به خود ميگيرد. با توجه به آنكه پيوند فلزي بين Mو Aضعيفتر از پيوند بين Mو Xاست، ميتوان لايهٔ Aرا با استفاده از مواد اسيدی حذف كرد كه منجر به‌توليد مكسين با فرمول شيميايی $M_{n+1}X_n$ می‌شود[۱۸-۲۱].مكسينها كاربردهاي زيادي در حوزه‌هاي مختلف از جمله ذخيرة سازی انرژي، الكترونيكی، اپتيكی، مكانيكی، مغناطيسی، ترموالكتريک، فوتوكاتاليست براي تصفيهٔ آب، اپتوالكتريک، و پيزوالكتريک دارند[۲۲-۲۴].در اين مطالعه، ساختار الكترونی و ويژگی ترموالكتريک تک لايه‌هاي Ti_2Cدر چارچوب نظريهٔ تابعی چگالی بررسی شده است. سپس، با

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

۲ ـ جزئیات محاسبات

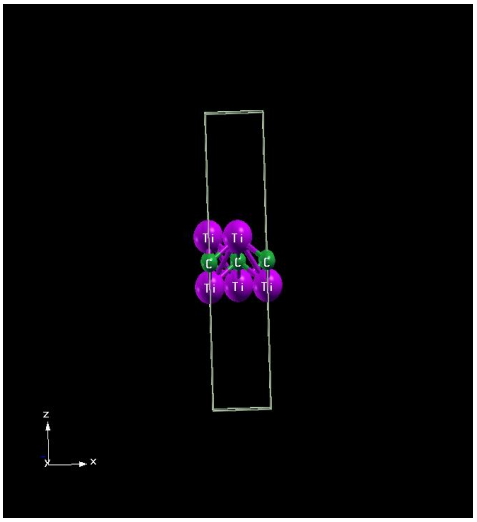
برای بررسی ویژگی ساختاری و الکترونی از محاسبات اصول اولیه ، بر اساس نظریهٔ تابعی چگالی و با استفاده از بسته نرم افزاري کوانتوم اسپرسواستفاده شده است. پتانسیل همبستگی-تبادلی با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) مورد محاسبه قرار گرفت. با استفاده از روشهای شبه پتانسیل و موج تخت انرژي کل و سایر کمیت‌هاي 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 بریلوئن 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-پک نقاط را ۱*۱۶*۱۶ انتخاب کردیم. مقدار انرژی الکترونی از خروجی‌های محاسبات بالا خاهد بود. بنابراین، با استفاده از انرژي الکترونی محاسبه شده و نیز حل معادله نیمه کلاسیکی بولتزمن که با بسته نرم افزاری بولتزترپ انجام می‌شود ضرایب ترابردي ترموالکتریکی را به‌دست آوردیم. به عبارت دیگر جهت بررسی ضرایب ترمودینامیکی از کد بولتزترپ بهره برده‌ایم [۲۵-۲۷].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 ترابردي بولتزمن براي نیمه رساناهاي حجمی به طور گسترده مورد استفاده قرار گرفته است به طوریکه نتایج حاصل رضایت بخش است و مواد با ابعاد کم نسبت به مواد حجمی، به واسطهٔ پراکند گی‌هاي گوناگون با فونونها، ویژگی ترموالکتریکی بهتري را از خود نشان می‌دهند [۲۸-۳۱].

۳ ـ نتیجه‌گیری و بحث

دو خاصیت فیزیکی مهم نانوساختارها که در این کارمورد بحث قرارگرفته‌اند ساختار الکترونی و 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 نواري الکترونی و طیف چگالی حالتها، به عنوان عوامل اصلی در تعیین ویژگی الکترونی و ترموالکتریکی، مورد توجه زیادي قرار گرفته است. بر این اساس در این بخش، نتایج مربوط به ویژگی ساختاري و الکترونی نانو ساختار Ti_2C برای به دست آوردن ضرایب مربوط به ویژگی ترموالکتریکی، را مورد بحث قرار می‌دهیم.

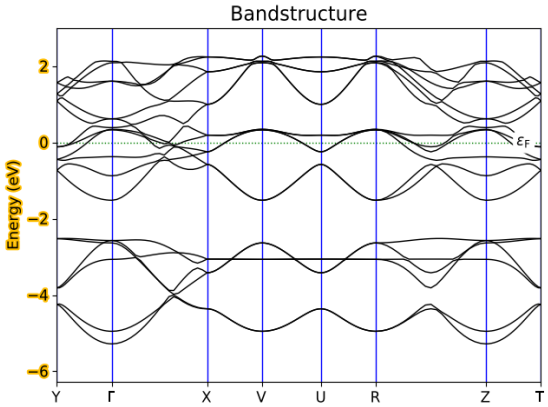
پس از حذف اتمهای الومینیم به روش نرم افزاری سلول اولیه نانوساختار مورد بررسی دراین کاربه صورت یاخته اولیه با سه اتم و به شکل هگزاگونال حادث شد. در واقع لایه‌های بالا و پایین در امتداد محور Z از یک لایه را حذف می‌کنیم تا یک سطح دوبعدی منطبق بر صفحه‌ی X-Y حادث شود. طرحواره‌اي از اینچنین نانوساختاری در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



شکل۱: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، اندازهٔ گاف انرژی در صورت وجود و نوع آن را به دست آورد. گاف نواری یکی از سودمندترین جنبه‌های ساختار نواری است و میزان آن بیانگرویژگیهای نوری و الکتریکی 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 نوارالکترونی در طول راستاهاي تقارنی Γ-X-V-R-T-Γ که نقاط پر تقارن محسوب می‌شوند براي این نانوساختارنشان داده شده است.

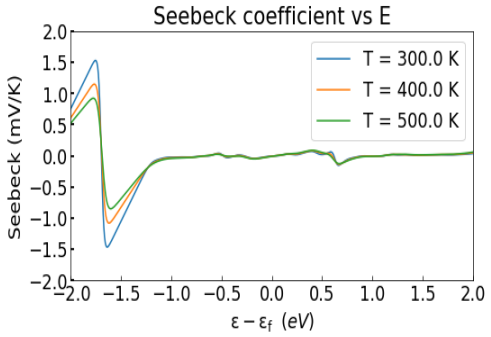


شکل ۲: ساختار نواری Ti_2C

همانطور که در شکل مشاهده می‌شود، این نانوساختار رفتار رسانا از خود نشان می‌دهند، به طوریکه این ساختار با گاف نواري غیرمستقیم بیشینهٔ نوار ظرفیت در مسیر Γ-X، در حوالی نقطه Γ، و کمینه نوار رسانش در نقطه را از خود نشان می‌دهد.

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

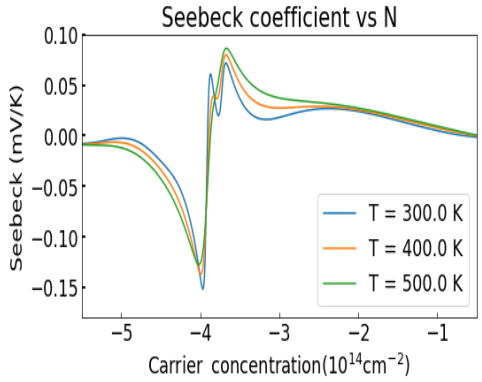
با توجه به آنکه داشتن ضریب سیبک بالا یکی از ویژگی های خوب مواد ترمو الکتریک محسوب می‌شود. در این کار این کمیت نیز مطالعه شده است. همچنین، از آنجا که این ضریب وابستگی دمایی دارد برای به دست آوردن بیشترین آن و کاربردی کردن کار، این کمیت در دماهای مختلف مورد بحث قرار گرفت که نتایج در شکل (۳) آمده-اند.



شکل ۳ : نمودار ضریب سیبک بر حسب انرژی

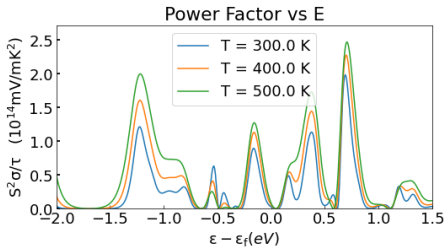
همانطور که در نمودار مشخص است، ضریب سیبک در دمای اتاق (۳۰۰ درجه کلوین) بیشترین مقدار را دارد و در پانصد درجه کلوین کمترین مقدار را دارد. این نتیجه کاملا با ویژگی فیزیکی این ساختار در تطابق است زیرا هر چقدر دما بالا تر می‌رود جنبش حاملهای بار بیشتر و در نتیجه غلظت حاملهای بار در اطراف سطح فرمی کمتر و به طبع ضریب سیبک 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 تزریق حامل بار (حفره یا الکترون) صورت نگرفته پس، میانگین غلظت حاملها در اطراف سطح فرمی برابر هستند.

همانطور که در بالاگفته شد، ضریب سیبک وابستگی شدیدی به غلظت حاملهای بار دارد، پس، تغییرات ضریب سیبک 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 سیبک 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.



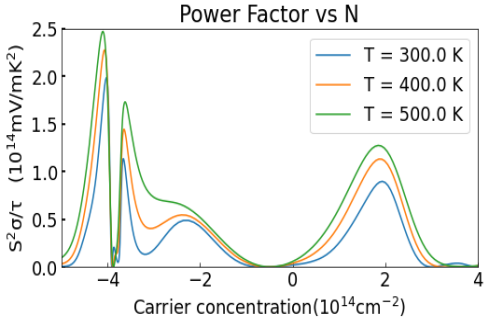
شکل ۴: نمودار تغییرات ضریب سیبک بر حسب غلظت حاملهای بار

کمیت دیگری که بیانگر کیفیت مواد ترموالکتریک است ضریب توان است که با رابطه $PF = \sigma S^2$ تعریف می‌شود. به منظور دستیابي به کارايي ترموالكتريك بالا يا ضريب شايستگی بالا، بايستي توان ترمو الكتريك بالا داشته باشيم. 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 شکلهای (۴) و (۵) آمده‌اند.



شکل ۵: نمودارهای ضریب توان برحسب انرژی

براساس نظر آلتنکیرچ که در بخش مقدمه آورده شده است درحالت کلی اگر یک ماده داراي ضريب سیبک مثبت باشد بدین معنی است که جزئ مواد p-type است و اکثریت حامل هاي بار آن توسط حفره‌ها انجام می پذیرد. و در صورت منفی بودن ضریب سیبک میتوان گفت که اکثر حامل هاي 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 دمای مختلف مورد مطالعه قرار گرفت که نتایج آن در شکل (۶) نشان داده شده است.



شکل ۶: نمودارضرایب 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 هردوی حفره ها و الکترونها در ضرایب سیبک و توان نقش آفرینی می کنند که در نمودارهای شکل (۶) کاملا 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 ماده‌ی دو بعدی جهت استفاده‌ی مصارف ترموالکتریک از جمله در باتری‌ها، ابررساناها، الکتروکاتالیست، ،حسگرهای زیستی، سنسورهای گازی، روان کننده‌ها و همچنین، اینترفیس‌ها توصیه می‌شود.

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).

[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 Ti3AlC2, Advanced materials; 2011, 23, 4248-4253.
[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.

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 NaxRhO2, Scientific Reports; 2014, 4 4390(5).
[30] Hinsche N.F., et al., Thermoelectric transport in $Bi2Te_3/Sb2Te_3$ 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[1*] and H. Mohammadzaheri[2]

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