

عنوان مقاله:

تحرك پذیری و ویژگی های ترموالکتریکی دیامان های نیمه هادی

محل انتشار:

مجله پژوهش فیزیک ایران، دوره 22، شماره 1 (سال: 1401)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسنده:

سمیه احمدی سلطانسرائی - گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه بین المللی امام خمینی (ره)، قزوین

خلاصه مقاله:

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 آلایش نوع p بیشینه ضریب سیبک به ترتیب برابر است با ۲۸۱۱، ۲۷۳۳ $\mu V/K$ و ۲۲۰۱ و برای آلایش نوع n ، بیشینه ضریب سیبک مواد فوق به ترتیب ۲۷۶۷، -۲۶۹۶ و -۲۲۶۹ $\mu V/K$ 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 آلایش نوع n می توانند مواد ترموالکتریکی مناسب تری باشند. همچنین هر سه ساختار در بازه دمایی ۵۰۰-۲۰۰ کلوین بیشینه ضریب توان را دارند.

کلمات کلیدی:

تحرك پذیری، ترموالکتریک، رسانندگی الکتریکی، رسانندگی گرمایی، ضریب سیبک، نظریه تابعی چگالی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1580427>

