



# بررسی اصول اولیه ویژگی‌های الکتریکی، ترموالکتریکی و حرارتی نانو ماده دوبعدی $C_{18}N_6$ با نظریه تابعی چگالی

آزاده سادات نعیمی<sup>۱</sup>، لیلا اسلامی<sup>۲</sup>، سمیه احمدی سلطانسرائی<sup>۳\*</sup>

۱- گروه فیزیک، واحد علی آباد کتول، دانشگاه آزاد اسلامی، علی آباد کتول، ایران  
۲ مرکز تحقیقات فیزیک پلاسما، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران،  
۳ گروه فیزیک، دانشگاه بین المللی امام خمینی (ره)، قزوین، ایران

**چکیده:** در این مقاله، ویژگی الکتریکی و پارامترهای ترموالکتریکی نانو ساختار دوبعدی  $C_{18}N_6$  با رویکرد نظریه تابعی چگالی ارائه شده است. نتایج حاکی از آن است که ترکیب  $C_{18}N_6$  یک گاف نواری مستقیم در مرکز منطقه بریلوئن به اندازه  $2/2 \text{ eV}$  دارد. ضریب سیبک این ماده  $2888 \mu\text{V/K}$  است و با افزایش دما کاهش می‌یابد. پارامترهای مربوط به رسانندگی الکتریکی، رسانندگی گرمایی الکتریکی و ضریب توان در مقادیر مثبت پتانسیل شیمیایی بیشینه هستند. همچنین، در بازه دمایی  $500$  تا  $700$  کلوین این ماده ویژگی ترموالکتریکی مناسبی دارد.

**واژگان کلیدی:** ترموالکتریک، رسانندگی الکتریکی، رسانندگی گرمایی، ضریب سیبک.

\*s.ahmadi@sci.ikiu.ac.ir

دوبعدی مبتنی بر کربن، نیتروژن و بورون انجام گرفته است، به طوری که محدودیت گاف نواری صفر گرافن مرتفع شده است. در این راستا نانو ساختارهای دوبعدی گرافنی مبتنی بر کربن متشکل از اتم‌های کربن و نیتروژن [۱۱]، کربن و بورون [۱۲] و کربن و فسفر [۱۳] با پیوند کووالانسی، از موفق‌ترین ساختارها هستند.

به تازگی، نتایج آزمایشگاهی منجر به سنتز نانو ساختار دوبعدی N-Graphdiyne (N-GDY) با ویژگی مطلوب الکتریکی، نوری و مکانیکی شده است [۱۴]. ساختار این خانواده بسیار شبیه گرافن است با این تفاوت که اتم‌های کربن که حلقه‌های شش‌ضلعی را متصل می‌کنند، با اتم‌های نیتروژن جایگزین شده‌اند. ویژگی الکتریکی، نوری و مکانیکی این دسته از ساختارها با استفاده از محاسبات اصول اولیه نیز مطالعه شده است [۱۵].

## ۱- مقدمه

معرفی گرافن و گزارش‌ها در مورد خصوصیات منحصر به فرد آن [۱] باعث ایجاد علاقه‌مندی در بررسی دیگر نانو ساختارهای دوبعدی شد [۲]. گرافن یکی از جذاب‌ترین نانو ساختارهای دوبعدی در نظر گرفته می‌شود که افزون بر ویژگی عالی الکتریکی [۳] و نوری [۴]، ویژگی‌های مکانیکی [۵] و ترموالکتریکی [۶] منحصر به فردی ارائه می‌دهد. با این وجود گاف نواری انرژی گرافن صفر است که استفاده از آن را در ترانزیستورهای دوبعدی محدود می‌کند [۷ و ۸]. این محدودیت گرافن سبب شد که پژوهش‌هایی در زمینه‌ی سنتز و کشف نانو ساختارهای نیم‌رسانای ذاتی دوبعدی جدید [۹ و ۱۰] شتاب گیرد. در سالهای اخیر، مطالعات بسیاری بر نیم‌رساناهای گرافنی



پتانسیل تبادل همبستگی پر دو-بورک-انزروف<sup>۳</sup> [۲۶] با انرژی قطع ۹۰ Ry اعمال شده است. برای بهینه‌سازی هندسه ساختار و استخراج ساختار نواری، گسسته سازی منطقه اول بریلوئن با  $15 \times 15 \times 1$  نقطه شبکه وارون  $K$  به روش مونخارست [۲۷] در نانو ساختار دوبعدی  $C_{18}N_6$  اعمال می‌شود. ما  $10^{-1}$  Ry را به‌عنوان معیار همگرایی انرژی در نظر می‌گیریم و فرایند بهینه‌سازی موقعیت اتم‌ها ادامه می‌یابد تا زمانی که همگرایی نیرو کمتر از  $10^{-5}$  Ry/Å شود. برای جلوگیری از برهم کنش بین لایه‌ها در شرایط مرزی تناوبی، فاصله  $20 \text{ \AA}$  در امتداد جهت  $Z$  در نظر گرفته شده است. ارزیابی خصوصیات ترابرد با استفاده از بسته بولتزپ<sup>۴</sup> تحت چارچوب نظریه تراپردی بولتزمن<sup>۵</sup> با تقریب زمان واهلش ثابت، انجام می‌شود. به منظور دستیابی به دقت لازم، منطقه اول متراکم با  $50 \times 50 \times 1$  نقطه شبکه وارون در نظر گرفته می‌شود. کد بولتزپ برای محاسبه ضرایب تراپردی نیمه کلاسیک مانند  $\sigma$  رسانندگی الکتریکی،  $S$  ضریب سیبک و  $k_e$  رسانندگی گرمایی الکترون از یک درون‌یابی فوریه ساختار باند به شرح زیر استفاده می‌کند [۲۸]:

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

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

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

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

که در اینجا  $V$ ،  $f_0$ ،  $\mu$ ،  $\varepsilon$  و  $T$  و  $N$  به ترتیب حجم سلول واحد، تابع توزیع فرمی-دیراک، پتانسیل شیمیایی، بار الکترون، دما و تعداد نقاط شبکه وارون ( $k$ ) هستند. همچنین،

ساختارهای N-GDY مواد مناسبی برای جذب متان و همچنین مناسب برای باتری‌های لیتیم-سولفور هستند [۱۶ و ۱۷]. ویژگی رسانندگی گرمایی شبکه N-Graphdiyne توسط مرتضوی و همکارانش مطالعه شده است، در این دسته از ساختارها  $C_{18}N_6$  رسانندگی گرمایی شبکه‌ای ضعیف‌تری دارد [۱۸]. با توجه به چالش فزاینده بحران انرژی و آلودگی محیط زیست، جستجوی انرژی پایدار و پاک بیش از پیش ضروری شده است. مواد ترموالکتریک که مستقیم می‌توانند گرما را به الکتریسیته تبدیل کنند و بالعکس، مورد توجه جامعه علمی قرار گرفته‌اند. کارایی یک ماده ترموالکتریک به ضریب سیبک، رسانایی الکتریکی، رسانندگی گرمایی الکتریکی و شبکه وابسته است. یک ماده ترموالکتریک با بازده بالا، به ضریب توان بالا و یا رسانندگی گرمایی الکتریکی و رسانندگی گرمایی شبکه پایین نیاز دارد [۱۹ و ۲۰]. در نانو ساختارها، اثرات کوانتومی موجب بهبود ضریب توان (PF) می‌شود [۲۱ و ۲۲]. همچنین به دلیل پراکندگی فونونی، رسانندگی گرمایی شبکه کاهش می‌یابد [۲۳ و ۲۴]. بنابراین بررسی ویژگی حرارتی ساختارهای دوبعدی N-Graphdiyne نقش مهمی در طراحی و ساخت نانودستگاه‌های پیشرفته با بهره‌گیری از ویژگی برجسته این نانوساختارهای جدید دارد.

هدف از تحقیق حاضر بررسی ویژگی فیزیکی ساختار الکتریکی و ترموالکتریکی N-Graphdiyne با فرمول شیمیایی  $C_{18}N_6$  با استفاده از تئوری تابعی چگالی است. محاسبات نشان می‌دهد که آلایش نوع  $n$  نانو ساختار دوبعدی  $C_{18}N_6$  یک ماده مناسب برای کاربردهای ترموالکتریکی است. این کار دید کلی در مورد خصوصیات ترموالکتریکی یک نیم‌رسانای دوبعدی جدید فراهم می‌کند، از این رو امیدواریم که نتایج به‌دست‌آمده بتواند مطالعات نظری و تجربی آینده را جهت بخشد.

## ۲- روش محاسباتی

تمام محاسبات اصول اولیه با استفاده از نظریه تابعی چگالی به دست می‌آیند که با استفاده از بسته شبیه‌سازی کوانتوم اسپرسو<sup>۱</sup> انجام می‌شوند [۲۵]. تقریب گرادینان تعمیم‌یافته<sup>۲</sup> در

<sup>3</sup> Perdew-Burke\_Ernzerhof (PBE)

<sup>4</sup> Boltztrap

<sup>5</sup> Boltzmann Transport Theory

<sup>1</sup> Quantum Espresso

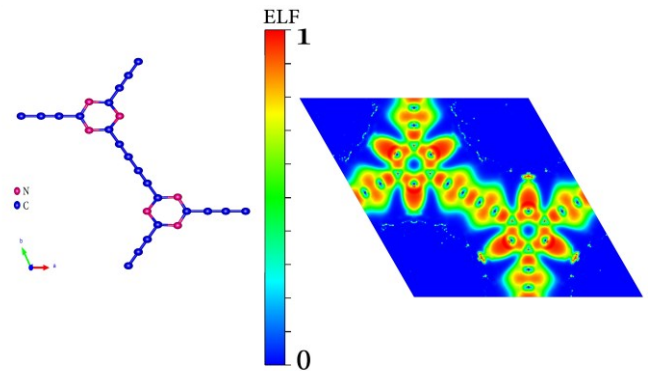
<sup>2</sup> Generalized Gradient Approximation

۱) تابع جایگزیدگی الکترونی<sup>۶</sup> (ELF) را نشان می‌دهد. در اینجا ELF یک تابع وابسته به مکان است که مقدار آن از ۰ تا ۱ تغییر می‌کند. در این حالت، مقادیر ELF نزدیک به ۱ مربوط به منطقه‌ای است که الکترون با احتمال زیاد یافت می‌شود. ELF=0 و ELF=۰.۵ به ترتیب نشان دهنده عدم وجود الکترون و ناحیه مربوط به گاز الکترونی هستند [۲۹]. مقادیر ELF در اطراف مرکز پیوندهای C-C و C-N بیشتر از ۰.۸ است، که وجود پیوند کووالانسی در این ساختار را تأیید می‌کند. جایگزیدگی الکترون در اطراف اتم‌های نیتروژن قابل توجه است که دلیل آن الکترون‌های ظرفیت بیشتر در نیتروژن نسبت به کربن است. همچنین الکترونگاتیویته<sup>۷</sup> بالایی نیتروژن سبب می‌شود که ابر الکترونی پیوند به سمت نیتروژن هدایت شود.

به منظور بررسی ویژگی الکترونیکی، در شکل ۲ نمودار ساختار نوار انرژی نانو ساختار دوعبده C<sub>18</sub>N<sub>6</sub> نشان داده شده است. این ساختار دارای گاف انرژی مستقیم است زیرا در مرکز منطقه بریلوئن (Γ) لبه نوار ظرفیت دقیقاً بالای لبه نوار رسانش قرار گرفته است. گاف انرژی اندازه‌گیری شده این ساختار برابر با ۲/۲۰ eV است. نتایج به دست آمده با نتایج ارائه شده در مرجع ۱۸ در توافق کامل است.

ضریب سیبک برحسب پتانسیل شیمیایی در دماهای متفاوت در شکل ۳ الف نشان داده شده است. برای محاسبه‌ی ویژگی ترموالکتریک از تقریب نوار صلب<sup>۷</sup> استفاده شده است، که در آن فرض می‌شود به منظور شبیه‌سازی آرایش الکترون و حفره، تراز فرمی به ترتیب به بالا و پایین جابجا می‌شود و ساختار نواری بدون تغییر باقی می‌ماند. این تقریب تا زمانی اعتبار دارد که مقدار آرایش مورد استفاده، باعث تغییر ویژگی پیوندی ماده نشود [۳۰]. همچنین، برای سادگی فرض می‌شود که ساختار نواری در دماهای محدود بدون تغییر می‌ماند [۳۱ و ۳۲] و اثر آرایش بر ضریب انتقال ترموالکتریک را می‌توان با تغییر موقعیت سطح فرمی به دست آورد.

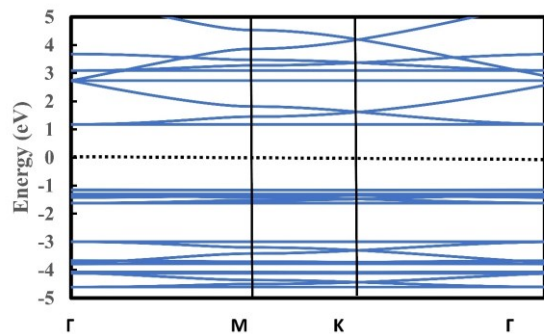
به انرژی را نشان می‌دهد. در اینجا  $\tau_{i,k}$ ،  $\varepsilon_{i,k}$  و  $\bar{\sigma}_{xy}(i,k) = e^2 \tau_{i,k} v_x(i,k) v_y(i,k)$  تانسور رسانندگی وابسته به انرژی را نشان می‌دهد. در اینجا  $\tau_{i,k}$ ،  $\varepsilon_{i,k}$  و  $v(i,k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{i,k}}{\partial k}$  به ترتیب زمان واهلش، ساختار باند و سرعت گروه را نشان می‌دهند. همچنین، اندیس  $i$  نشان‌دهنده شاخص باند (ظرفیت یا رسانش) است.



الف

ب

شکل ۱: الف) نمای از بالا و کنار ساختار اتمی تک لایه N-GDY، C<sub>18</sub>N<sub>6</sub> مورد مطالعه در این مقاله (ب) منحنی مقیاس رنگ، تابع جایگزیدگی الکترونی (ELF) را در سلول‌های واحد نشان می‌دهد. به طوری که ELF مقداری بین ۰ و ۱ می‌گیرد، ELF = 1 مربوط به جایگزیدگی کامل الکترون و ELF = 0.5 مربوط به گاز الکترونی است.



شکل ۲: نمودار ساختار نوار انرژی نانو ساختار دوعبده C<sub>18</sub>N<sub>6</sub> محاسبه شده با استفاده از تابع PBE

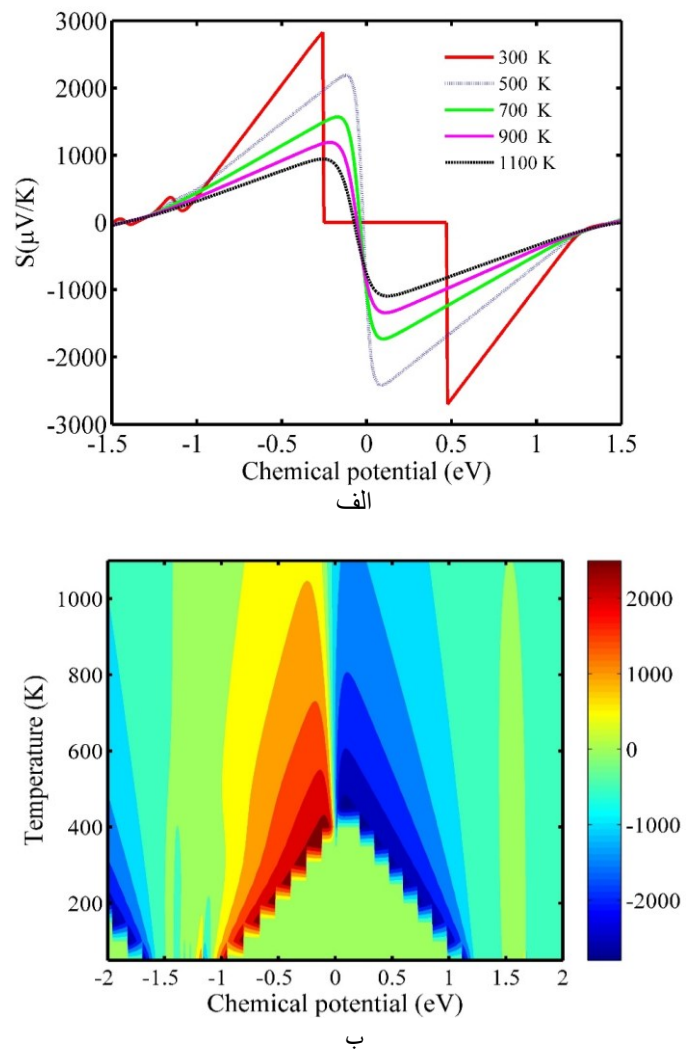
### ۳- نتایج و بحث

در شکل ۱ الف نمای از بالا ساختار هندسی تک لایه N-GDY، با فرمول شیمیایی C<sub>18</sub>N<sub>6</sub> نشان داده شده است. ثابت شبکه شش ضلعی ۹/۷ Å و طول پیوند C-C و C-N به ترتیب ۱/۴۴ Å و ۱/۳۵ Å محاسبه شده است. شکل

<sup>6</sup> Electron Localization Function

<sup>7</sup> Rigid band approximation

مقدار ضریب سیبک را در دمای  $T=300\text{ K}$  برای آلایش نوع P و n به ترتیب  $2828\ \mu\text{V/K}$  و  $-2702\ \mu\text{V/K}$  است. این ضرایب سیبک در مقایسه با سایر مواد دوبعدی همچون گرافن  $(180\ \mu\text{V/K})$  [۳۵] و گرافداین معمولی  $(756\ \mu\text{V/K})$  [۳۶] مقادیر بسیار بزرگی هستند. این مقدار بزرگ ضریب سیبک ناشی از گاف نواری بزرگ تک لایه  $\text{C}_{18}\text{N}_6$  در دمای اتاق است. بنابراین می-توان انتظار داشت نانو ساختار دوبعدی  $\text{C}_{18}\text{N}_6$  در دمای اتاق عملکرد ترموالکتریکی خوبی داشته باشد. برای بررسی همزمان تغییرات ضریب سیبک با پتانسیل شیمیایی و دما، از منحنی مقیاس رنگ<sup>۸</sup> مطابق شکل ۳ استفاده شده است. همان طور که در این شکل مشاهده می-شود، در اطراف تراز فرمی و در دماهای نزدیک به  $300\text{ K}$  بیشترین تغییرات ضریب سیبک در این ماده رخ می-دهد و با افزایش دما ضریب سیبک کاهش می-یابد. همچنین با دور شدن از تراز فرمی ضریب سیبک مستقل از دما می-شود. در بازه پتانسیل شیمیایی  $-0.5 \leq \mu \leq 0.5\text{ eV}$  و ناحیه دمای  $300-500\text{ K}$  بیشترین مقادیر برای ضریب سیبک مشاهده می-شود. رسانندگی گرمایی نشان دهنده توانایی انتقال گرما توسط الکترون ها ( $K_e$ ) و فونون ها ( $K_l$ ) است. در اینجا  $K_e$  بر اساس قانون ویدمان-فرانتس<sup>۹</sup> [۳۷] به رسانندگی الکتریکی  $(K_e/T\sigma = L)$  وابسته می-شود که در آن ثابت تناسب  $L$  عدد لورنتز<sup>۱۰</sup> است.  $K_e/\tau$  برحسب تابعی از پتانسیل شیمیایی در دماهای متفاوت در شکل ۴ رسم شده است. همان طور که مشاهده می-شود کمترین رسانندگی گرمایی الکتریکی برای نانو ساختار دوبعدی  $\text{C}_{18}\text{N}_6$  در تمامی دماها در بازه پتانسیل شیمیایی بین  $-0.5\text{ eV}$  تا  $+0.5\text{ eV}$  به دست می-آید. همچنین، برای سایر مقادیر پتانسیل شیمیایی، رسانایی گرمایی الکترونی با افزایش دما افزایش می-یابد. این امر ناشی از آن است که با افزایش دما الکترون ها انرژی بیشتری کسب کرده و شارش آن ها افزایش می-یابد. از سوی دیگر، رسانایی گرمایی الکترون برای پتانسیل های شیمیایی منفی کوچک تر از مقادیر مثبت آن است. هرچه مقدار رسانندگی گرمایی کاهش یابد عملکرد ترموالکتریکی ماده بهتر می-شود.



شکل ۳: الف) ضریب سیبک برحسب پتانسیل شیمیایی در دماهای متفاوت ب) منحنی مقیاس رنگ ضریب سیبک برحسب پتانسیل شیمیایی در دماهای متفاوت و دما.

پتانسیل شیمیایی منفی با انتقال تراز فرمی به سمت نوار ظرفیت، آلایش نوع P را نشان می-دهد و می-توان ضریب سیبک مثبت را به دست آورد. به همین ترتیب پتانسیل شیمیایی مثبت، با انتقال تراز فرمی به سمت نوار هدایت آلایش نوع n و ضریب سیبک منفی را نتیجه می-دهد [۳۳]. همان طور که از شکل مشاهده می-شود در پتانسیل های شیمیایی نزدیک به تراز فرمی حداکثر ضریب سیبک با افزایش دما، کاهش می-یابد که این مربوط به تغییر گاف انرژی است [۳۴] و با دور شدن از تراز فرمی ضریب سیبک مستقل از دما است. در مجاورت سطح فرمی، ضریب سیبک دو قله مشخص را برای انواع P و n در دماهای متفاوت نشان می-دهد. در نانو ساختار دوبعدی  $\text{C}_{18}\text{N}_6$ ، بالاترین

<sup>8</sup> Contour plot

<sup>9</sup> Wiedemann-Franz Law

<sup>10</sup> Lorenz number

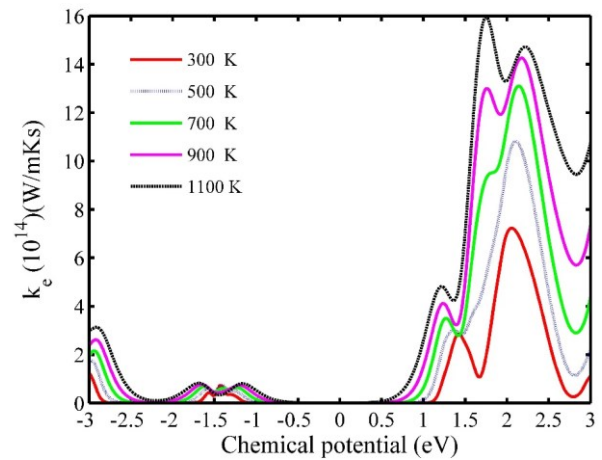
و  $\mu = 2.02 \text{ eV}$  بیشترین مقدار رسانندگی الکتریکی و برابر با  $10.35 \times 10^{19} \text{ (S/ms)}$  است.

یک ماده ترموالکتریک کارآمد نیازمند مقدار بالای ضریب توان<sup>۱۱</sup> ( $PF = S^2 \sigma$ ) است. بدین منظور هرچه ضریب سیبک و رسانندگی الکتریکی بالاتر باشند ماده بازدهی بیشتری خواهد داشت. ضریب توان (PF) برحسب تابعی از پتانسیل شیمیایی در دماهای متفاوت در شکل ۵ الف نشان داده شده است. بیشترین مقدار PF در ناحیه n در دمای ۷۰۰ K اتفاق می‌افتد و مقدار آن برابر با  $5.5 \times 10^{11} \text{ W/msK}^2$  است. از سوی دیگر در پتانسیل شیمیایی  $\mu = 1.75 \text{ eV}$  به ازای تمامی دماها بالاترین مقدار PF را خواهیم داشت. درحالی‌که برای نوع p ساختار بالاترین مقدار PF در پتانسیل شیمیایی  $\mu = -2.8 \text{ eV}$  برابر با  $2.7 \times 10^8 \text{ W/msK}^2$  است که در مقایسه با نوع n ماده به شدت کاهش می‌یابد. بنابراین ضریب توانایی ترموالکتریکی این ماده با آرایش نوع n می‌تواند افزایش قابل توجهی پیدا کند. برای بررسی دقیق‌تر نتایج یاد شده برای PF منحنی مقیاس رنگ PF برحسب پتانسیل شیمیایی و دما در شکل ۵ ب رسم شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، برای تمامی دماها بیشترین مقدار PF در ناحیه n ماده مشاهده می‌شود و بهترین ناحیه کارکرد دمایی ماده در پتانسیل شیمیایی  $\mu = 1.75 \text{ eV}$  در گستره دمایی ۵۰۰ K تا ۷۰۰ K است. از آنجا که رسانندگی گرمایی شبکه‌ای این ماده در مقایسه با گرافن و ساختارهای مشابه بسیار ناچیز است،  $C_{18}N_6$  می‌تواند ماده مناسبی برای کاربردهای ترموالکتریکی باشد [۱۸].

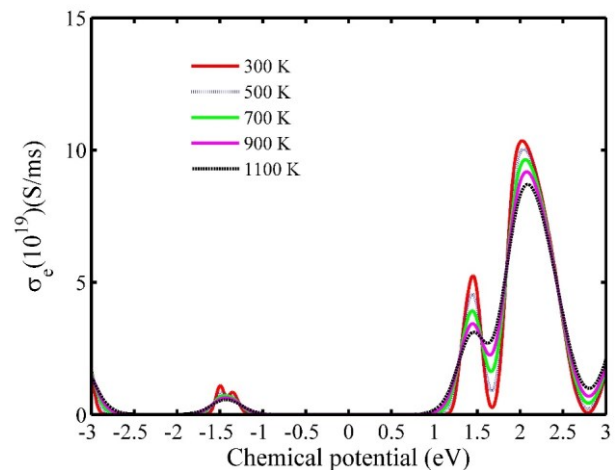
## ۴- نتیجه‌گیری

خصوصیات الکترونیکی، ترموالکتریکی نانو ساختار دوبعدی  $C_{18}N_6$  توسط محاسبات اصول اولیه بررسی شده است. گاف نوار انرژی این ترکیب مستقیم و برابر  $2/2 \text{ eV}$  محاسبه شده است. بیشترین مقدار ضریب سیبک به دست آمده  $\mu\text{V/K}$  در ۲۸۸۸ K است. محاسبات نشان می‌دهد آرایش نوع n ماده سبب افزایش رسانندگی الکتریکی و در نتیجه افزایش عملکرد ترموالکتریکی آن می‌شود. همچنین این ماده در

شکل ۴ رسانندگی الکتریکی ( $\sigma/\tau$ ) برحسب پتانسیل شیمیایی در دماهای متفاوت را نمایش می‌دهد.



الف



ب

شکل ۴: الف) رسانندگی گرمایی الکترون در واحد زمان و اهلهش ( $K_e/\tau$ ) برحسب پتانسیل شیمیایی در دماهای متفاوت ب) رسانندگی الکتریکی در واحد زمان و اهلهش  $\tau$  برحسب پتانسیل شیمیایی در دماهای متفاوت.

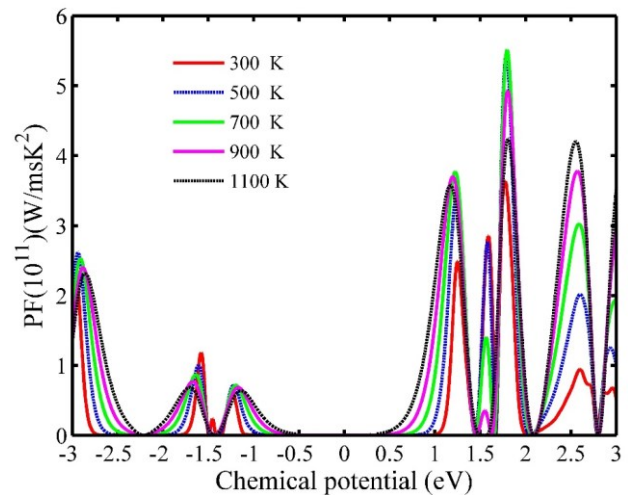
مشاهده می‌شود که در اطراف انرژی فرمی رسانندگی الکتریکی ضعیف است. همچنین  $\sigma/\tau$  در آرایش الکترونی ( $\mu > 0$ ) خیلی بیشتر از آرایش حفره ( $\mu < 0$ ) است این ویژگی کارایی ترموالکتریکی برای آرایش نوع n نانو ساختار دوبعدی  $C_{18}N_6$  را بیشتر می‌کند. همچنین، به ازای  $\mu > 1$  دو زوج قله-دره مشاهده می‌شود که رسانندگی الکتریکی با افزایش دما، در قله‌ها کاهش و در دره‌ها افزایش می‌یابد. در دمای ۳۰۰ K

<sup>11</sup> Power Factor

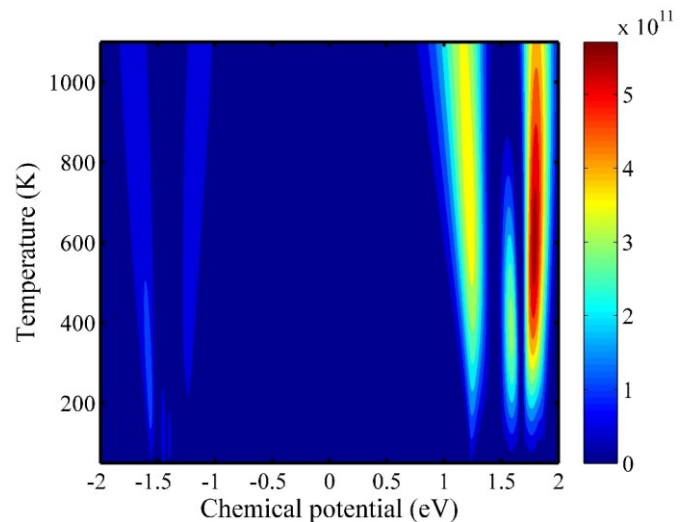
## مراجع

دمای میانی ۵۰۰ تا ۷۰۰ کلین می‌تواند کاندیدای خوبی به عنوان یک ماده ترموالکتریکی دوبعدی در نظر گرفته شود. همچنین می‌توان این ماده را در طراحی خنک‌کننده‌های ترموالکتریکی در دماهای پایین در نظر گرفت.

- [1] K. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, "Electric field effect in atomically thin carbon films," *Science*, 306, 666-669, 2004.
- [2] G. R. Bhimanapati, Z. Lin, V. Meunier, Y. Jung, J. Cha, S. Das, D. Xiao, Y. Son, M. S. Strano, V. R. Cooper, L. Liang, "Recent advances in two-dimensional materials beyond graphene," *ACS nano*, 9, 11509-11539, 2015.
- [3] F. Zhao, T. Thoung Nguyen, M. Golsharifi, S. Amakubo, K. P. Loh, and R. B. Jackman, "Electronic properties of graphene-single crystal diamond heterostructures," *Journal of Applied Physics*, 114, 053709- 053714, 2013.
- [4] H. M. Dong, K. Han, and W. Xu, "Dynamic optical properties in graphene: Length versus velocity gauge," *Journal of Applied Physics*, 115, 063503-063508, 2014.
- [5] C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, "Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene.," *Science*, 321, 385-388, 2008.
- [6] S. Ghosh, W. Bao, D. L. Nika, S. Subrina, E. P. Pokatilov, C. N. Lau, A. A. Balandin, "Dimensional crossover of thermal transport in few-layer graphene," *Nature materials*, 9, 555-558, 2010.
- [7] D. Funes Rojas, D. Sun, and M. Ponga, "Twinning in two-dimensional materials and its application to electronic properties," *Electronic structure*, 1, 025001-025044, 2019.
- [8] F. Withers, M. Dubois, and A. K. Savchenko, "Electron properties of fluorinated single-layer graphene transistors," *Physical Review B*, 82, 073403-073408, 2010.
- [9] A. K. Geim and I. V. Grigorieva, "Van der Waals heterostructures," *Nature*, 499, 419-425, 2013.
- [10] M. S. Strano, A. Kis, J. N. Coleman, Q. H. Wang, and K. Kalantar-Zadeh, "Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides," *Nature Nanotechnology*, 7, 699-712, 2012.
- [11] A. Thomas, A. Fischer, F. Goettmann, M. Antonietti, J.-O. Müller, R. Schlögl, J. M. Carlsson, "Graphitic carbon nitride materials:



الف



ب

شکل ۵: الف) ضریب توان (PF) در واحد زمان واهلش  $\tau$  ( $PF/\tau$ ) برحسب پتانسیل شیمیایی در دماهای متفاوت ب) منحنی مقیاس رنگ PF را برحسب پتانسیل شیمیایی و دما.

- conductor,” *Physical Review B*, 47, 16631, 1993.
- [22] R. Venkatasubramanian, E. Siivola, T. Colpitts, B. O’Quinn, “Thin-film thermoelectric devices with high room temperature figures of merit,” *Nature*, 413, 597-602, 2001.
- [23] D. Vashaee, A. Shakouri, “Electronic and thermoelectric transport in semiconductor and metallic superlattices,” *Journal of Applied Physics*, 95, 1233-1238, 2004.
- [24] G. Zeng, X. Fan, C. LaBounty, E. Croke, Y. Zhang, J. Christofferson, D. Vashaee, A. Shakouri, J.E. Bowers, “Thermal Nanosystems and Nanomaterials,” *MRS Proc*, 2003.
- [25] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G. L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A. Dal Corso, S. Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougoussis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A. P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari, R. M. Wentzcovitch, “QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21, 395502, 2009.
- [26] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, “Generalized Gradient Approximation Made Simple,” *Physical Review Letters*, 77, 3865-3868, 1996.
- [27] H. J. Monkhorst, J. D. Pack, “Special points for Brillouin-zone integrations,” *Physical Review B*, 13, 5188-5192, 1976.
- [28] G. K. H. Madsen, D. L. Singh, “BoltzTraP. A code for calculating band-structure dependent quantities,” *Computer Physics Communications*, 175, 67-71, 2006.
- [29] B. Silvi, A. Savin, “Classification of Chemical Bonds Based on Topological Analysis of Electron Localization Functions,” *Nature*, 371, 683-686, 1994.
- [30] H. J. Goldsmid, “Introduction to Thermoelectricity,” Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2010.
- variation of structure and morphology and their use as metal-free catalysts,” *Journal of Materials Chemistry*, 18, 4893-4908, 2008.
- [12] H. Zhang, Y. Liao, G. Yang, *et al.* Theoretical studies on the electronic and optical properties of honeycomb BC<sub>3</sub> monolayer: a promising candidate for metal-free photocatalysts. *ACS Omega*. 3, 10517-10525, 2018.
- [13] T. Yu, Z. Zhao, Y. Sun, A. Bergara, J. Lin, S. Zhang, H. Xu, L. Zhang, G. Yang, and Y. Liu, “Two-Dimensional PC<sub>6</sub> with Direct Band Gap and Anisotropic Carrier Mobility,” *J. Am. Chem. Soc.*, 141, 1599-1605, 2019.
- [14] Y. Z. Abdullahi, T. L. Yoon, M. M. Halim, M. R. Hashim, and T. L. Lim, “Mechanical and electronic properties of graphitic carbon nitride sheet: First-principles calculations,” *Solid State Commun.*, 248, 144-150, 2016.
- [15] B. Mortazavi, M. Shahrokhi, M. E. Madjet, T. Hussain, X. Zhuang and T. Rabczuk, “N-, B-, P-, Al-, As-, and Ga-graphdiyne/graphyne lattices: first-principles investigation of mechanical, optical and electronic properties,” *J. Mater. Chem. C.*, 7, 3025-3036, 2019.
- [16] W. Xu, Y. Chen, Y. Zhao, M. Zhang, R. Tian, and C. Zhang, “Methane adsorption properties of N-doped graphdiyne: a first-principles study,” *Structural Chemistry*, 32, 1517-1527, 2021.
- [17] I. Muhammad, U. Younis, H. Xie, Y. Kawazoe, and Q. sun, “Graphdiyne-Based Monolayers as Promising Anchoring Materials for Lithium-Sulfur Batteries: A Theoretical Study,” *Advanced Theory and Simulations*, 3, 1900236 (1-7), 2020.
- [18] B. Mortazavi, M. Makaremi, M. Shahrokhi, Z. Fan, and T. Rabczuk, “N-graphdiyne two-dimensional nanomaterials: Semiconductors with low thermal conductivity and high stretchability,” *Carbon*, 137, 57-67, 2018.
- [19] A.F. Ioffe, L.S. Stil’bans, E.K. Iordanishvili, T. S. Stavitskaya, A. Gelbtuch, “Semiconductor Thermoelements and Thermoelectric Cooling,” *Physics Today*, 12, 42, 1959.
- [20] S. Shimizu, J. Shiogai, N. Takemori, S. Sakai, H. Ikeda, R. Arita, T. Nojima, A. Tsukazaki, Y. Iwasa, “Giant thermoelectric power factor in ultrathin FeSe superconductor,” *Nature Communication*, 10, 825, 2019.
- [21] L.D. Hicks, M.S. Dresselhaus, “Thermoelectric figure of merit of a one-dimensional

- [31] T. J. Scheidemantel, C. Ambrosch-Draxl, T. Thonhauser, J. V. Badding, and J. O. Sofo, "Transport coefficients from first-principles calculations," *Physical Review B*, 68, 125210-125217, 2003.
- [32] Y. Wang, Y. Hu, S. L. Shang, B. C. Zhou, Z. K. Liu, L. Q. Chen, "First-principles thermodynamic theory of Seebeck coefficients," *Physical Review B*, 98, 224101-224125, 2018.
- [33] N. T. Hung, A. R. Nugraha, R. Saito R, "Two-dimensional InSe as a potential thermoelectric material," *Applied Physics Letters*, 111, 092107-092112, 2017.
- [34] H. Goldsmid, J. Sharp, "Estimation of the thermal band gap of a semiconductor from Seebeck measurements," *Journal of electronic materials*, 28, 869–872, 1999.
- [35] D'Souza, R.; Mukherjee, S. First-principles study of the electrical and lattice thermal transport in monolayer and bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, 95, 85435, 2017.
- [36] L. Sun, P. H. Jiang, H. J. Liu, D. D. Fan, J. H. Liang, J. Wei, L. Cheng, J. Zhang, and J. Shi, "Graphdiyne: a two-dimensional thermoelectric material with high figure of merit," *Carbon*, 90, 255-259, 2015.
- [37] A. Bejan, A. D. Allan, "Heat Transfer Handbook," New York, Wiley, 1338, 2003.





# First-principles study of electronic, thermoelectric and thermal properties of two-dimensional nanomaterials $C_{18}N_6$ by density functional theory

A.Naeimi<sup>1</sup>, L.Eslami<sup>2</sup>, S. Ahmadi Soltansaraie<sup>3,\*</sup>

1-Department of Physics, Aliabad Katoul Branch, Islamic Azad University, Aliabad Katoul, Iran  
2- Plasma Physics Research Center, Science and Research Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran.  
3-Department of physics, Science Faculty, Imam Khomeini International University, Qazvin, Iran

**Abstract:** A theoretical study of the electronic, thermoelectric and thermal properties of two-dimensional nanomaterial  $C_{18}N_6$  is presented using density functional theory (DFT). Our calculations indicate that two-dimensional nanomaterials  $C_{18}N_6$  have a direct band gap in the center of the Brilluin region of 2.2 eV. The predicted Seebeck coefficient is 2888  $\mu V/K$  and decreases with increasing temperature. Electrical conductivity, thermoelectric conductivity and power factor are in maximum positive chemical potential values. It also has good thermoelectric properties in the temperature range of 500 to 700 K.

**Keywords:** Thermoelectric, Electrical Conductivity, Thermal Conductivity, Seebeck Coefficient.