

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

دانشکده علوم پایه

گروه فیزیک

(گرایش حالت جامد)

## اثرات میدان مغناطیسی بر روی بهره وری نانواپزارهای ترموالکتریکی

از:

فرزانه عبادی

استاد راهنما:

دکتر حمید رحیم پور سلیمانی

استاد مشاور:

میشم باقری

اسفند ۱۳۹۱

تقدیم به همسر عزیزم و پدر و مادر فداکارم

با تشکر از تمام دست و فکری که مرا در این کار یاری

کردند.

## فهرست مطالب

عنوان	صفحه
چکیده فارسی.....	ژ
چکیده انگلیسی.....	س
فصل اول: اثر میدان مغناطیسی بر ویژگی های ترموالکتریک مواد.....	۱
۱ + مقدمه.....	۲
۱ ۴ ساختار کلی پایان نامه.....	۳
۱ ۴ مکانیزم ترموالکتریک.....	۴
۱-۲-۱ اثر سی بک.....	۶
۱-۲-۲ اثر پلتیه.....	۸
۱-۲-۳ اثر تامسون.....	۹
۱-۲-۴ ضریب شایستگی ترموالکتریکی.....	۱۰
۱-۳-۱ اثر میدان مغناطیسی بر ویژگی های ترموالکتریکی.....	۱۱
۱-۳-۱ اثر هال.....	۱۳
۱-۳-۲ اثر نرنست.....	۱۴
۱-۳-۳ اثر اتینگشاوزن.....	۱۵
۱-۳-۴ اثر ریگی - لدیوسن.....	۱۶
۱ ۴ ۵ ضریب بهره وری ترمومغناطیسی.....	۱۷
۱ ۴ کاربرد آثار ترمومغناطیسی.....	۱۸

۱۸-۵ نقش نانوتکنولوژی در مواد ترموالکتریک.....

۲۰ فصل دوم : تابع توزیع بولتزمن در حضور میدان مغناطیسی.....

۲۱-۱ مقدمه.....

۲۲-۲ تابع توزیع بولتزمن برای سیستم های الکترون - فونون.....

۲۷-۳ تقریب زمان واهلش.....

۳۲-۴ پراکندگی.....

۳۳-۲-۱-۴ هندسه ی پراکندگی.....

۳۴-۲-۴ پراکندگی ناخالصی ختشی.....

۳۵-۲-۴ فرایندهای پراکندگی کشسان.....

۳۷-۲-۴ پراکندگی ناخالصی یونیزه.....

۳۹-۲-۵ پراکندگی پتانسیل تغییر شکل آکوستیک.....

۴۱ فصل سوم: ضرایب الکتریکی و ترموالکتریکی در حضور میدان مغناطیسی.....

۴۲-۱-۳ مقدمه.....

۴۵-۲-۳ ویژگی های نیمه رساناها.....

۴۶-۳-۳ جرم موثر.....

۴۶-۳-۳-۱ جرم موثر الکترون.....

۴۷-۳-۳-۲ جرم موثر حفره.....

۴۷-۳-۳-۳ جرم موثر چگالی حالت ها.....

۴۸.....	۳-۴ اثر دما بر گاف انرژی.....
۴۹.....	۳-۵ توابع انتقال.....
۴۹.....	۳-۵-۱ محاسبه ی معادله های انتقال از فرایندهای برگشت پذیر ترمودینامیکی.....
۵۳.....	۳-۵-۲ ضرایب ترموالکتریکی بدون حضور میدان مغناطیسی.....
۵۵.....	۳-۵-۳ ضرایب ترموالکتریکی مواد در حضور میدان مغناطیسی.....
۵۸.....	۳-۶ خواص ترموالکتریکی مواد با ابعاد کاهش یافته.....
۵۹.....	۳-۶-۱ ضرایب ترموالکتریکی ساختارهای سه بعدی.....
۶۱.....	۳-۶-۱-۱ اثر دو قطبی.....
۶۳.....	۳-۶-۲ ضرایب ترموالکتریکی ساختارهای دو بعدی در حضور میدان مغناطیسی.....
۶۴.....	۳-۶-۳ ضرایب ترموالکتریکی ساختارهای یک بعدی در حضور میدان مغناطیسی.....
۶۶.....	<b>فصل چهارم : سیستم های تحت بررسی.....</b>
۶۷.....	۴-۱ بیسموت تلوراید.....
۶۷.....	۴-۱-۱ ساختار بلوری بیسموت تلوراید.....
۷۱.....	۴-۱-۲ ساختار نوار انرژی $Bi_2Te_3$ .....
۷۳.....	۴-۲ گرافن.....
۷۵.....	۴-۲-۱ ساختار شبکه ی حقیقی گرافن.....
۷۶.....	۴-۲-۲ ساختار شبکه ی وارون گرافن.....
۷۷.....	۴-۲-۳ خواص الکترونیکی.....

۷۸..... ۳-۴ سیلیکون

۷۹..... ۱-۳-۴ مدل های ساختار باند سیلیکون

۸۳ ..... فصل پنجم: نتایج عددی

۸۴..... ۱-۵ ضرایب انتقال بیسموت تلوراید

۹۲..... ۲-۵ ضرایب انتقال گرافن

۹۴..... ۳-۵ ضرایب انتقال نانوسیم سیلیکونی در حضور میدان مغناطیسی

۹۹..... ۴-۵ نتایج

۱۰۰ ..... پیشنهاد برای ادامه ی کار

۱۰۱ ..... مراجع



## فهرست جدول ها

عنوان ..... صفحه

جدول (۱-۳): جرم موثر چگالی حالت ها برای نیم رساناهای گوناگون ..... ۴۸

جدول ۲-۳: پارامترهای مرتبط با تغییر دمایی گاف انرژی ..... ۴۸

جدول ۱-۴: طول پیوند و زاویه های بین پیوند ها در  $Bi_2Te_3$  ..... ۷۰

## فهرست شکل ها

- عنوان ..... صفحه
- شکل ۱-۱: طرح کلی قطعه ی ترموالکتریکی؛ (a) ژنراتور ترموالکتریکی، (b) یخچال ترموالکتریکی..... ۴
- شکل ۲-۱: الگویی برای نشان دادن جهت شارش بار و گرما در ژنراتورها و یخچال های ترموالکتریکی ..... ۵
- شکل ۳-۱: ترموالمنت - حامل بار را پخش می کند؛ در این نمونه، الکترون ها حامل های بار هستند که با دایره های زرد مشخص شده اند. گرادیان دما باعث می شود حامل های بار به طور مستقیم به قسمت سردتر حرکت کنند تا حالت تعادل برقرار شود ..... ۶
- شکل ۴-۱: نمایش ساده ی یک ترموکوپل - در مدار فوق دو فلز غیر هم جنس A و B در دو نقطه  $T_1$  و  $T_2$  با یکدیگر در تماس هستند ..... ۷
- شکل ۵-۱: اثر پلتیه در مدار فلز-نیمه رسانا (a) در پیوندگاه راست فقط الکترون های گرم می توانند به باند رسانش نیمه رسانا وارد شوند. این الکترون ها گرما را از پیوندگاه انتقال می دهند و باعث سردی آن می شود. در پیوندگاه چپ الکترون ها از نیم رسانا به فلز وارد می شوند و نزدیک انرژی فرمی فلز گرم می شوند. این باعث گرم شدن پیوندگاه چپ می شود. (b) جهت جریان بر عکس می شود در نتیجه پیوندگاه چپ سرد و پیوندگاه راست گرم می شود ..... ۸
- شکل ۶-۱: پیشرفت تدریجی ضریب شایستگی،  $ZT$ ، در طول پنجاه سال اخیر. از سال ۱۹۵۰  $ZT$ ، در مقدار ۱ بدون تغییر مانده بوده تا آن که از سال ۹۰ از طریق آزمایشات بر روی ترکیبات نانوساختار تا نزدیک ۲/۵ رسیده است ..... ۱۱
- شکل ۷-۱: اختلاف دما در نیمه رسانا باعث ایجاد میدان الکتریکی و نهایتاً میدان مغناطیسی می شود ..... ۱۲
- شکل ۸-۱: اثر هال و حرکت حامل های بار (a) حفره ها (b) الکترون ها ..... ۱۳
- شکل ۹-۱: اثر نرنست، با جهت های در نظر گرفته ضریب نرنست مثبت است ..... ۱۴

- شکل ۱-۱۰: اثر اتینگشاوزن؛ گرادیان دمایی است که در حضور یک میدان مغناطیسی به سبب توزیع گرمایی در سرعت های الکترونی رخ می دهد ..... ۱۵
- شکل ۱-۱۱: اثر ریگی - لدیوس؛ گرادیان دمایی عرضی ناشی از شارش گرمایی طولی است ..... ۱۷
- شکل ۱-۱۲: المنت یک یخچال اتینگشاوزن. منبع گرمایی در  $y = 0$  و سینک گرمایی  $y = L_y$  قرار دارد ..... ۱۷
- شکل ۱-۱۳: چگالی حالت های الکترونی؛ (a) نیمه رسانای کریستالی 3D بالکی، (b) چاه کوانتومی 2D، (c) نانو سیم یا نانو تیوب 1D، و (d) کوانتوم دات 0D ..... ۱۹
- شکل ۱-۱۴: ضریب شایستگی ترموالکتریکی سیم کوانتومی و چاه کوانتومی بر حسب تابعی از طول قطعه ..... ۱۹
- شکل ۲-۱: گروهی از الکترون ها تحت تاثیر میدان های خارجی با جذب یا گسیل فونون ها به سمت دیگری از فضای فاز حرکت می کنند ..... ۲۳
- شکل ۲-۲: فضای محدود شده بوسیله ی زاویه ی فضایی  $d\Omega$  ..... ۳۳
- شکل ۲-۳: نمای طرحوار حالت اولیه و حالت های دسترس پذیر نهایی حامل پراکنده شده. .... ۳۶
- شکل ۳-۱: نمودار تابع توزیع فرمی بر حسب  $(E - \epsilon_f) / k_B T$  ..... ۴۳
- شکل ۳-۲: نمودار ساده ی باند انرژی ..... ۴۴
- شکل ۳-۳: رسانندگی مواد گوناگون در دمای اتاق (ابر رساناها که در نزدیکی صفر کلین رسانایی بزرگتر از مس دارند نشان داده نشده اند، رسانایی نیمه رساناها بر حسب دما و درجه خلوص تغییرات شدیدی دارد) ..... ۴۵
- شکل ۳-۴: گاف نواری نانوسیم بیسموت 1D، به قطر سیم وابسته است ..... ۶۵
- شکل ۴-۱: یاخته ی اصلی رامبوهدرال ..... ۶۷
- شکل ۴-۲: شبکه ی برآوه ی هگزاگونال ساده ..... ۶۸
- شکل ۴-۳: ساختار بلوری تنگ پکیده ی هگزاگونال ..... ۶۸

- شکل ۴-۴: ساختار بلوری  $Bi_2Te_3$  ..... ۶۹
- شکل ۴-۵: آرایش اتمی در شبکه ی پنج گانه ..... ۷۰
- شکل ۴-۶: چندوجهی متناسب سازنده در ساختار  $Bi_2Te_3$  از  $Te^{(2)}$  و  $Te^{(1)}$  و  $Bi$  ..... ۷۱
- شکل ۴-۷: سمت چپ - ساختار باندهای بیسموت تلوراید؛ سمت راست - دره های اولین نوار رسانش (منطقه ی بریلوئن شبکه رامبوهدرال) ..... ۷۲
- شکل ۴-۸: تعداد انتشارات گرافن در بیست سال گذشته ..... ۷۴
- شکل ۴-۹: (a) اتم های کربن در الگوی هگزاگونال در لایه ی گرافن قرار گرفته اند. (b) نمایش دوره ای سلول واحد های گرافن. ..... ۷۶
- شکل ۴-۱۰: ساختار شبکه ی گرافن در فضای وارون. شش ضلعی هاشور زده شده، منطقه ی اول بریلوئن را معین می کند ..... ۷۷
- شکل ۴-۱۱: سمت راست - ساختار باندهای سیلیکون؛ سمت چپ - دره های اولین نوار رسانش (منطقه ی بریلوئن شبکه الماسی). ..... ۸۰
- شکل ۵-۱: رسانندگی الکتریکی الکترون های  $Bi_2Te_3$  (a) بر حسب میدان مغناطیسی در یک دمای ثابت ( $T=300K$ ) و (b) بر حسب دما در میدان مغناطیسی ثابت ( $B=2T$ )، به ازای پراکندگی های مختلف ..... ۸۴
- شکل ۵-۲: مقاومت اندازه گیری شده ی بیسموت تلوراید سه بعدی به ازای تغییرات میدان مغناطیسی ..... ۸۵
- شکل ۵-۳: ضریب سی بک اندازه گیری شده ی  $Bi_2Te_3$  به ازای (a) تغییرات میدان مغناطیسی و (b) تغییرات دما ..... ۸۶
- شکل ۵-۴: رفتار ضریب سی بک  $Bi_2Te_3$ ، (a) بر حسب تغییرات میدان مغناطیسی در دمای اتاق ( $T=300K$ ) و (b) بر حسب تغییرات دما در میدان مغناطیسی ثابت ( $B=2T$ )، برای ازای پراکندگی های مختلف ..... ۸۶

- شکل ۵-۵: تغییرات رسانندگی گرمایی الکترونی  $Bi_2Te_3$ ، (a) بر حسب تغییرات میدان مغناطیسی در دمای اتاق
- ۸۶ (b) بر حسب تغییرات دما در میدان مغناطیسی ثابت ( $B=2T$ )، به ازای پراکندگی های مختلف ....
- شکل ۶-۵: ضریب رسانندگی گرمایی اندازه گیری شده ی  $Bi_2Te_3$  به ازای (a) تغییرات میدان مغناطیسی، و (b) تغییرات دما.....
- شکل ۷-۵: ضریب شایستگی الکترون های  $Bi_2Te_3$  (a) بر حسب میدان مغناطیسی در یک دمای ثابت ( $T=300K$ )، (b) بر حسب تغییرات دما در میدان مغناطیسی ثابت ( $B=2T$ ) برای پراکندگی های مختلف .....
- شکل ۸-۵: ضریب شایستگی اندازه گیری شده ی  $Bi_2Te_3$  به ازای تغییرات میدان مغناطیسی .....
- شکل ۹-۵: تغییرات ضریب هال (a) بر حسب تغییر میدان مغناطیسی در یک دمای ثابت ( $T=300K$ )، (b) بر حسب تغییر دما در میدان مغناطیسی ثابت ( $B=2T$ ) برای پراکندگی های مختلف .....
- شکل ۱۰-۵: ضریب هال اندازه گیری شده ی بیسموت تلوراید به ازای تغییرات میدان مغناطیسی .....
- شکل ۱۱-۵: تغییرات ضریب ریگی-لدیوس  $Bi_2Te_3$ ، بر حسب تغییرات میدان مغناطیسی برای (a) پراکندگی ناخالصی یونیزه، (b) پراکندگی فونون اپتیکی و (c) پراکندگی فونون آکوستیکی در دمای ثابت ۳۰۰ کلوین .....
- شکل ۱۲-۵: (a) ضریب رسانندگی الکتریکی، (b) ضریب سی بک، (c) ضریب رسانندگی گرمایی و (d) ضریب بهره وری بر حسب دما، برای پراکندگی فونون آکوستیکی با میدان مغناطیسی مختلف .....
- شکل ۱۳-۵: (a) ضریب رسانندگی الکتریکی، (b) ضریب سی بک، (c) ضریب رسانندگی گرمایی و (d) ضریب بهره وری بر حسب نسبت دما به دمای فرمی در گرافن با در نظر گرفتن پراکندگی ناشی از حضور ناخالصی یونیزه در میدان های مغناطیسی مختلف.....
- شکل ۱۴-۵: وابستگی رسانندگی الکتریکی نانوسیم سیلیکونی (a) به میدان مغناطیسی در یک دمای ثابت ( $T = 300 K$ ) و (b) به دما در میدان مغناطیسی ثابت ( $B=2T$ )، به ازای پراکندگی های مختلف .....

شکل ۵-۱۵: وابستگی توان گرمایی نانوسیم سیلیکونی، (a) به میدان مغناطیسی در یک دمای ثابت ( $T = 300 \text{ K}$ ) و (b)

به دما در میدان مغناطیسی ثابت ( $B=2T$ ) " به ازای پراکندگی های مختلف ..... ۹۶

شکل ۵-۱۶: وابستگی رسانندگی گرمایی نانوسیم سیلیکونی، (a) به میدان مغناطیسی در یک دمای ثابت ( $T = 300 \text{ K}$ )

و (b) به دما در میدان مغناطیسی ثابت ( $B=2T$ )، به ازای پراکندگی های مختلف ..... ۹۶

شکل ۵-۱۷: وابستگی ضریب نرنست نانوسیم سیلیکونی (a) به میدان مغناطیسی در یک دمای ثابت ( $T = 300 \text{ K}$ )،

(b,c) به دما در میدان مغناطیسی ثابت ( $B=2T$ )، برای پراکندگی های مختلف ..... ۹۷

شکل ۵-۱۸: وابستگی ضریب شایستگی الکترون های نانوسیم سیلیکونی (a) به میدان مغناطیسی در یک دمای ثابت (

$T = 300 \text{ K}$ )، (b) به دما در میدان مغناطیسی ثابت ( $B=2T$ )، برای پراکندگی های مختلف ..... ۹۸

شکل ۵-۱۹: تغییرات ضریب ریگی-لدیوس نانوسیم سیلیکونی، بر حسب تغییرات میدان مغناطیسی برای، (a)

پراکندگی ناخالصی یونیزه و (c) پراکندگی فونون آکوستیکی در دمای ثابت ۳۰۰ کلوین، (b) وابستگی ضریب ریگی-

لدیوس نانوسیم سیلیکونی به دما در میدان مغناطیسی ثابت برای پراکندگی های مختلف ..... ۹۸

## اثرات میدان مغناطیسی بر روی بهره وری نانو ساختارهای ترموالکتریکی

فرزانه عبادی

مشخصه یابی مواد از روی سنجش ویژگی های انتقالی، بینش ارزشمندی را درباره ی خصوصیات فیزیکی آنها ارائه می دهد. برخی از معمولترین پدیده های انتقالی عبارتند از رسانندگی، اثر سی بک و اثر هال. پدیده های کمتر شناخته شده دیگر عبارتند از اثر نرنست، اثر اتینگشاوزن و اثر ریگی - لدیوس. در این پژوهش ضرایب گفته شده در موادی از قبیل نیمه رساناهایی با ساختارهای سه بعدی و نانو ساختار های دو بعدی و یک بعدی بررسی شده است. مهمترین ویژگی فیزیکی مورد بررسی تغییرات ضریب شایستگی الکتریکی مواد،  $ZT$  است. هرچه مقدار این ضریب بیشتر باشد ماده ی مورد نظر می تواند انرژی حرارتی اتلافی بیشتری را به انرژی الکتریکی تبدیل کند.  $ZT$  وابسته به رسانندگی الکتریکی، ضریب سی بک و رسانندگی گرمایی است. به علاوه اثر میدان مغناطیسی بر ضریب شایستگی الکتریکی مواد به صورت نظری مورد مطالعه قرار گرفته است. برای توصیف این ضرایب از روش نیمه کلاسیکی معادله ی انتقال بولتزمن با تقریب زمان واهلش استفاده می شود. حرکت حامل ها در نتیجه ی فرایندهای پراکندگی و سوق صورت می گیرد، بر اساس این که پراکندگی حامل ها مهم ترین نقش را در شبیه سازی انتقال بار ایفا می کند، پراکندگی های ناخالصی یونیزه و فونون آکوستیک را که منجر به زمان واهلش های مجزا می شود معرفی شده است. در ادامه با داشتن اطلاعات کافی از معادله ی انتقال بولتزمن، ضرایب ترموالکتریکی به ازای پراکندگی های مختلف در حضور میدان مغناطیسی برای ساختارهای ذکر شده بدست می آید.

**کلید واژه:** ترموالکتریک، اثر سی بک، کمیت شایستگی، رسانندگی گرمایی، رسانندگی الکتریکی، نانو ساختار های دو

بعدی و یک بعدی.

## Abstract

### **Magnetic field effects on the efficiency of thermoelectric nanostructures**

**Farzane ebadi**

The characterization of materials by studying their transport properties gives rise to valuable insights of their physical properties. Some of the most common transport phenomena include conductivity, Seebeck effect and Hall Effect. Other examples not as known as the phenomena mentioned above are Nernst, Ettingshausen and Righi-Leduc effects. In this research, the above-mentioned coefficients have been investigated for cases such as bulk semiconductors, two-dimensional and one-dimensional nanostructures. The most significant studied physical property is variations in figure of merit ( $ZT$ ) of materials. By increasing the amount of this coefficient to the maximum, material converts the more dissipated heat to electrical energy.  $ZT$  depends on electrical conductivity, Seebeck coefficient and thermal conductivity. Moreover, the effect of magnetic field on figure of merit is theoretically studied. The semiclassical method used to determine these coefficients is Boltzmann transport equation solved by relaxation time approximation. Carrier transport is caused by scattering and drift processes. Based on the fact that carrier scattering plays the most important role in simulation of charge transport; we introduce ionized impurity and acoustic phonon scattering. These scatterings lead to discrete relaxation time. Then by gaining enough information from Boltzmann equation, thermoelectric coefficients of mentioned structures for various scatterings in the presence of magnetic field are achieved.

Key word: Thermoelectric, Seebeck effect, Figure of merit ( $ZT$ ), Thermal conductivity, Electrical conductivity, Two-dimensional and one-dimensional nanostructures.



## فصل اول

اثر میدان مغناطیسی بر ویژگی های

ترموالکتریک مواد

ترموالکتريک، ذاتاً یکی از موضوعات بسیار جذاب فیزیک است. به عنوان مثال، با گرم کردن یک انتهای میله ای، حامل های بار از انتهای با دمای بیشتر به سمتی که دمای کمتری دارد، حرکت می کنند. در واقع اختلاف دمای بین دوسرمیله باعث به وجود آمدن میدان الکتریکی در آن می شود.

دانشمندی به نام «سی بک»<sup>۱</sup> در سال ۱۸۲۱ دریافت، اگر محل اتصال دو فلز متفاوت دارای اختلاف دما باشد، افت ولتاژی در آن ایجاد می شود. بعدها این پدیده به نام «اثر سی بک» شناخته شد [۱]. حالت معکوس این پدیده آن است که اگر افت ولتاژی در محل اتصال این دو فلز ایجاد شود، یکی از آنها گرم و دیگری سرد می شود که به آن «اثر پلتیه»<sup>۲</sup> می گویند [۱]. در سال های بعد دانشمندان دیگری، قطره ی آبی را در محل اتصال سیم هایی از جنس آنتیموان و بیسموت ریختند و نشان دادند چنانچه جریان الکتریسیته از سیم ها عبور کند، قطره ی آب یخ خواهد زد و زمانی که جهت جریان برعکس شود، یخ ذوب می شود [۲]. این موضوع از اصول سرمایش<sup>۳</sup> ترموالکتریکی به شمار می رود. علت این پدیده آن است که با اعمال ولتاژ باتری به سیستم ترموالکتريک، حامل های بار منفی و مثبت انرژی گرمایی را از یک سطح لایه ی خروجی دریافت و آن را در سطح طرف دیگر آزاد می کنند. سطحی که انرژی گرمایی از آن جذب می شود سرد می گردد و سطح مخالف که انرژی گرمایی را دریافت می کند گرم می شود. با استفاده از این روش ساده، "تلمبه ی گرمایی"، فن آوری ترموالکتريک در کاربردهای گسترده ای از قبیل خنک کننده های لیزری کوچک، یخچال های قابل حمل، خنک کننده های مایع و غیره استفاده می شود. انتقال گرما توسط حامل های بار در یک وسیله ی خنک کننده ی ترموالکتريکی خیلی شبیه به روشی است که خنک کننده های کمپرسی، گرما را در یک سیستم مکانیکی انتقال می دهند. در سیستم خنک کننده کمپرسی، مایعات گردش گرما را از بار گرمایی به تبخیر کننده ای که در آن گرما می تواند پخش شود انتقال می دهد.

امروزه با توجه به افزایش قیمت حامل های انرژی در سطح جهان، دانشمندان در پی آن هستند که با بهره گیری از مواد ترموالکتريک بتوانند با استفاده از حرارت های اتلافی، الکتریسیته تولید کنند [۳]. همان طور که می دانید در موتورهای

---

<sup>1</sup> Seebeck

<sup>2</sup> Peltier

<sup>3</sup> Refrigeration

بخار از حرارت برای تولید بخار جهت به حرکت درآوردن تجهیزات استفاده می شود. در تجهیزات ترموالکتریکی نیز به طریق مشابه می توان از حرارت برای حرکت الکترون ها در مسیر مورد نیاز بهره جست. از آنجایی که در اکثر تجهیزات مکانیکی و الکتریکی حرارت غیرمفید تولید می شود، می توان با بهره گیری از مواد ترموالکتریک از این حرارت مقادیر زیادی انرژی مفید به دست آورد. با قرار دادن قطعات کوچکی از مواد ترموالکتریک در سطوح گرم (مثل آگزوز خودروها یا پرسور کامپیوترها) ، می توان انرژی تولید کرد. با توسعه ی مواد ترموالکتریک می توان امیدوار بود در آینده بتوان از انرژی های حرارتی اتلافی در نیروگاه های برق و به خصوص دود خروجی از توربین های گازی ، مجدداً الکتریسته تولید کرد.

## ۲-۱ ساختار کلی پایان نامه

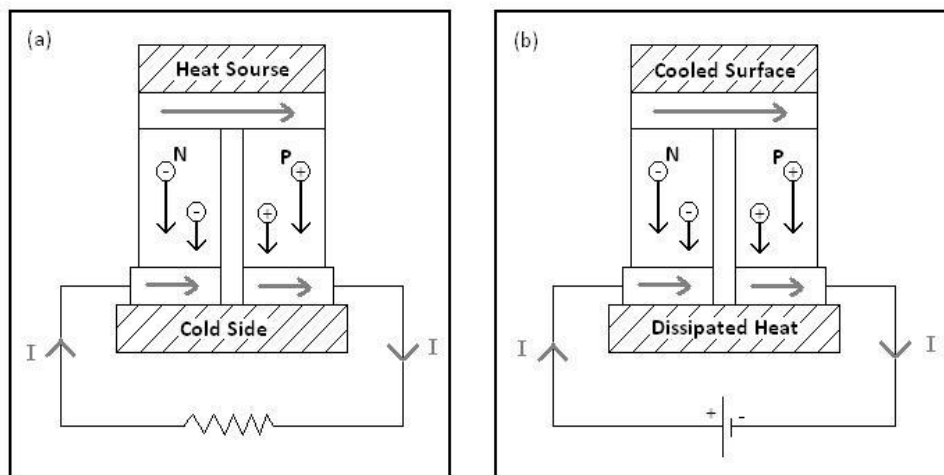
جزئیات این پایان نامه در فصل های زیر سازماندهی شده است :

در فصل اول مفاهیم اصلی پدیده ی ترموالکتریک شده و توضیح مختصری درباره ی مکانیزم ترموالکتریک و آثار مربوط به آن بیان می شود. و در ادامه آثار بوجود آمده و ضریب بهره وری در حضور میدان مغناطیسی بررسی می شود . همچنین خواص ترموالکتریکی نانو ساختارها مورد ارزیابی قرار می گیرد. در فصل دوم تابع توزیع بولتزمن در حضور میدان مغناطیسی با تقریب زمان واهلش و همگن در نظر گرفتن مواد محاسبه می شود. و در ادامه ی این فصل هندسه ی پراکندگی و همچنین نرخ زمان واهلش برای پراکندگی های ناخالصی یونیزه و پتانسیل تغییر شکل آکوستیک بیان می شود. در فصل سوم ویژگی های نیم رساناها بررسی می شود و جرم موثر الکترون ها و حفره ها و همچنین به تاثیر دما بر گاف انرژی پرداخته می شود. و از طریق توابع انتقال و تابع توزیع بدست آمده در فصل دوم، ضرایب ترموالکتریکی مواد در حضور و عدم حضور میدان مغناطیسی محاسبه می شود. و برای ساختارهای سه بعدی اثر دو قطبی و همچنین روابط بین ضرایب ترموالکتریکی آن ها در حضور میدان مغناطیسی بررسی می شود. و در فصل چهارم برای ساختارهای سه بعدی بیسموت تلوراید ، برای ساختارهای دو بعدی گرافن و برای ساختارهای یک بعدی نانوسیم سیلیکونی بررسی می شود. و از ضرایب ترموالکتریکی بدست آمده در ساختارها برای محاسبه ی عددی این مواد استفاده می شود. که در فصل پنجم این نتایج به صورت نمودارهایی رسم شده اند.

## ۲-۱ مکانیزم ترموالکتریک

مکانیزم ترموالکتریکی می تواند با جریان گرمایی در مواد ترموالکتریکی توصیف شود. وقتی ماده در معرض گرادیان دمایی قرار می گیرد، حامل های بار (الکترون ها و حفره ها) پخش می شوند و از قسمت با دمای بیشتر به سمت قسمت با دمای کمتر حرکت می کنند. در این صورت حامل های بار، اختلاف ولتاژی تولید می کنند که به ولتاژ ترموالکتریکی مشهور است. در تعادل دمایی نرخ پخش حامل ها از قسمت سرد و گرم در جهت های مخالف برابر است، بدین معنی که در مدار جریان خالص وجود ندارد. بدلیل ناکاملی مواد و تولید گرما توسط نوسانات شبکه (فونون)، حامل های بار از حالت تعادل پخش و به صورت حامل های بار نامتعادل تبدیل می شوند. این اثر به فلز خصوصیت ترموالکتریکی نوع  $n$  و نوع  $p$  را می دهد، که بستگی به غلبه ی حامل های گرم یا حامل های سرد<sup>۱</sup> دارد.

در وسایل ترموالکتریکی از قبیل ژنراتور و یخچال معمولاً از دو ماده ی ترموالکتریک جفت<sup>۲</sup> شده استفاده می شود. آن هایی که رساناهای نوع  $n$  و  $p$  هستند بازو یا پایه های ترموکوپل یا المان های دمایی نامیده می شوند. همانطور که در شکل (۱-۱) دیده می شود، این المان ها از نظر الکتریکی به صورت سری و از نظر گرمایی به صورت موازی متصل شده اند [۴].



شکل ۱-۱: طرح کلی قطعه ی ترموالکتریکی؛ (a) ژنراتور ترموالکتریکی، (b) یخچال ترموالکتریکی [۴].

<sup>۱</sup> منظور از حامل های سرد و گرم، پخش حامل های بار به ترتیب از قسمت سرد یا گرم است.

<sup>۲</sup> کوپل شده