

Analisis Sifat Termoelektrik Bahan Nodal Line Semimetals TiS dan Mg₃Bi₂ dengan Metode First-Principles dan Model Dua band = Thermoelectric Properties Analysis of Nodal Line Semimetals Material TiS and Mg₃Bi₂ with First-Principles Method and Two band Model

Mohammad Norman Gaza Laksono, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=9999920538373&lokasi=lokal>

Abstrak

Efek dari struktur pita elektronik bahan nodal line semimetals (NLS) terhadap sifat termoelektriknya ditinjau melalui kombinasi metode semianalitik dan first-principles dengan TiS sebagai contoh bahan untuk NLS tipe-I dan Mg₃Bi₂ untuk NLS tipe-II. Respons termoelektrik keseluruhan (S , σ , PF, ZT) dari kedua bahan diselidiki menggunakan linearized Boltzmann transport equation dengan relaxation time approximation yang diimplementasikan dalam kode BoltzTraP2. Kami juga menggunakan model dua band untuk mengoptimasi nilai power factor (PF) dan dimensionless figure of merit ZT untuk kedua bahan. Hasil perhitungan dengan kombinasi metode first-principles dan BoltzTraP2 menunjukkan bahwa masing-masing bahan menunjukkan nilai puncak ZT sebesar ~ 0.014 untuk TiS dan ~ 0.112 untuk Mg₃Bi₂ pada nilai potensial kimia dari energi Fermi E_F masing-masing sekitar -0.23 eV dan -0.17 eV. Sedangkan, hasil dengan menggunakan model dua band menunjukkan peningkatan nilai koefisien sifat termoelektrik yang cukup signifikan di sekitar E_F untuk kedua bahan NLS. Diperoleh nilai ZT optimal untuk kecepatan Fermi v_F $8 \text{ eV } \text{\AA}^{-2}$ dan massa efektif holes $m^* 27.352 \text{ eV}^{-1} \text{\AA}^{-2}$ untuk TiS, sedangkan untuk Mg₃Bi₂ diperoleh ketika $v_F 9.95 \text{ eV } \text{\AA}^{-2}$ dan $m^* 27.352 \text{ eV}^{-1} \text{\AA}^{-2}$. Peningkatan ini diduga diakibatkan oleh persilangan pita energi NLS di sekitar E_F . Hasil kami menunjukkan bahwa kedua bahan NLS ini mungkin dapat menjadi bahan semimetal yang menjanjikan untuk termoelektrik.

.....The effect of electronic band structure of nodal line semimetals (NLS) on their thermoelectric properties investigated through a combination of semi-analytical methods and first-principles method using TiS as NLS type-I and Mg₃Bi₂ as NLS type-II as example materials. A detailed thermoelectric response (S , σ , PF, ZT) investigated using linearized Boltzmann transport equation with relaxation time approximation implemented in BoltzTraP2 codes. We also use two-band model to optimize the power factor (PF) and dimensionless figure of merit ZT values for both materials. The calculation results using first-principles methods and BoltzTraP2 showed that each NLS material showed a peak ZT value ~ 0.014 for TiS and ~ 0.112 for Mg₃Bi₂ for certain chemical potential value of Fermi energy E_F about -0.23 eV and -0.17 eV, respectively. The results using model exhibits significant thermoelectric properties values increase around E_F for both NLS. Optimum ZT value for TiS and Mg₃Bi₂ is obtained for Fermi velocity v_F of $8 \text{ eV } \text{\AA}^{-2}$ and $9.95 \text{ eV } \text{\AA}^{-2}$ and holes effective mass m^* of $27.352 \text{ eV}^{-1} \text{\AA}^{-2}$ and $27.352 \text{ eV}^{-1} \text{\AA}^{-2}$, respectively. This increase is allegedly due to energy bands crossing around E_F . Our results suggest that these NLS materials might be promising thermoelectric materials in semimetals class.