ชื่อเรื่อง การตรวจสอบสมบัติอิเล็กทรอนิกและเทอร์โมอิเล็กทริกของโลหะไทเทเนียม–นิกเกิล–ดีบุก ฮาร์ฟฮอยส์เลอร์ ด้วยทฤษฎีฟังก์ชันความหนาแน่น
ผู้วิจัย มีนา ฤทธิร่วม
ที่ปรึกษาหลัก รองศาสตราจารย์ ดร.ทศวรรษ สีตะวัน
ที่ปรึกษาร่วม รองศาสตราจารย์ ดร.อนุชา แยงไธสง
ปริญญา ปร.ด. (ฟิสิกส์)
สถาบัน มหาวิทยาลัยราชภัฏสกลนคร
ปีที่พิมพ์ 2562

บทคัดย่อ

วัสดุเทอร์โมอิเล็กทริกไททาเนียมนิกเกิลดีบุก (TiNiSn) ฮาร์ฟฮอยส์เลอร์ มีค่าไดเมนชันเลสฟิกเกอร์ออฟเมอริท (ZT) ~0.3 ที่ช่วงอุณหภูมิ 600 – 800 เคลวิล อย่างไรก็ตาม ค่า ZT ของโลหะ TiNiSn ยังมีค่าน้อยกว่าวัสดุเทอร์โมอิเล็กทริกบิสมัทเทลลูไรด์ (Bi_2Te_3) ซึ่งเป็นปัญหาของโลหะนี้ งานวิจัยนี้จึงเสนอการตรวจสอบเชิงทฤษฎีเกี่ยวกับสมบัติอิเล็กทริกนิกและเทอร์โมอิเล็กทริกของโลหะ TiNiSn ฮาร์ฟฮอยส์เลอร์ ซึ่งประกอบด้วยการบกพร่องด้วยตัวเองของ TiNiSn และการเจือธาตุในตำแหน่งของ Ti และ Sn บน TiNiSn ตรวจสอบสมบัติอิเล็กทรอนิก เชิงความร้อน และเทอร์โมอิเล็กทริกภายใต้พื้นฐานทฤษฎีฟังก์ชันความหนาแน่นกับสมการการส่งผ่านของโบลทซ์มันน์ และแบบจำลองกึ่งฮาร์มอนิกของเดอบาย ผลการตรวจสอบพบว่า การบกพร่องด้วยตัวเองของ TiNiSn เปลี่ยนแปลงความเข้มข้นของอิเล็กตรอนและเพิ่มประสิทธิภาพของเทอร์โมอิเล็ก–ทริก การเจือโลหะทรานซิชันในตำแหน่งของ Ti สามารถปรับปรุงโครงสร้างและสมบัติเชิงความร้อน ยิ่งไปกว่านั้นยังลดสภาพนำความร้อนเชิงแลตทิซได้ นอกจากนี้การเจือร่วมโลหะทรานซิชันในตำแหน่งของ Ti และธาตุหมู่ 5A เจือในตำแหน่งของ Sn สามารถปรับปรุงโครงสร้างอิเล็กทรอนิกอย่างมีนัยสำคัญและทำให้ค่า ZT เพิ่มร้อยละ 40 – 175

คำสำคัญ การคำนวณหลักการแรก โลหะฮาร์ฟฮอยส์เลอร์ สมการการส่งผ่านของโบลทซ์มันน์ สมบัติเชิงความร้อน วัสดุเทอร์โมอิเล็กทริก

มหาวิทยาลัยราชภัฏสกลนคร

TITLE Investigation of electronic and thermoelectric properties of Ti–Ni–Sn half Heusler alloys by density functional theory

AUTHOR Meena Rittiruam

ADVISOR Assoc. Prof. Dr. Tosawat Seetawan

CO–ADVISOR Assoc. Prof. Dr. Anucha Yangthaisong

DEGREE Ph.D. (Physics)

INSTITUTION Sakon Nakhon Rajabhat University

YEAR 2019

ABSTRACT

The maximum dimensionless figure of merit (ZT) of TiNiSn half Heusler thermoelectric (TE) materials is ~0.3 at 600 – 800 K. However, the ZT of TiNiSn alloy is still less than that of Bi_2Te_3–based TE materials, which is a problem for these alloys. This work presents a theoretical investigation on electronic and thermoelectric properties of TiNiSn–based half Heusler alloys. This investigation is composed of self–defects and elements doped at the Ti– and Sn–sites of TiNiSn. The electronic, thermal, and thermoelectric properties are investigated using density functional theory–based calculations, Boltzmann transport equation, and quasi–harmonic Debye model. The results show that self–defects affect the electron concentration and enhanced the TE performance. Doping transition metals (TM) at the Ti–site modified the structural and thermal properties, as well as reduced the lattice thermal conductivity. Codoping TM at the Ti–site and doping group 5A elements at the Sn–site significantly improved the power factor and the ZT increased by 40 – 175%.

Keywords First–principles calculation, half Heusler alloys, Boltzmann transport equation, thermal properties, thermoelectric materials