

Theoretical study of thermoelectric transport on Half-Heusler Semiconductors = Studi teoritis pada transpor termoelektrik di Semikonduktor Half-Heusler

Janice Aphrodite Tombeg, author

Deskripsi Lengkap: <https://lib.ui.ac.id/detail?id=20523269&lokasi=lokal>

Abstrak

Untuk memenuhi keperluan teknologi termoelektrik, para ilmuwan mengembangkan perangkat termoelektrik yang dapat mengubah energi panas menjadi energi listrik. Salah satu material yang digunakan dalam penelitian ini adalah semikonduktor Half Heusler. Beberapa penelitian sebelumnya menunjukkan bahwa material ini adalah kandidat yang baik untuk perangkat termoelektrik. Material ini memiliki stoikiometri XYZ, dimana X dan Y merepresentasikan metal transisi dan Z merepresentasikan unsur golongan utama. Penelitian ini dilaksanakan dengan metode komputasi menggunakan Quantum ESPRESSO untuk membentuk grafik struktur pita dan Density of states dari material ini dan BoltzTraP untuk menghitung properti termoelektrik dari material 12 jenis material Half Heusler. Keduabelas material ini memiliki celah pita yang menunjukkan material ini adalah semikonduktor, yang merupakan kandidat yang baik untuk menghasilkan konduktivitas elektrik dan koefisien Seebeck yang tinggi, serta nilai figure of merit (ZT) yang mengkarakterisasi efisiensi perangkat termoelektrik. Selain itu, penelitian kami menunjukkan bahwa semikonduktor Half Heusler lebih baik digunakan untuk alat termoelektrik tipe p karena nilai properti termoelektrik pada area tipe p lebih tinggi dari area tipe n.

.....For providing the need of thermoelectric technology, scientists develop thermoelectric device that can convert heat energy to electrical energy. One of the material that can be used in this research is Half Heusler semiconductor. Recent studies shown that this material is a good candidate to be a material for thermoelectric device. This material has a stoichiometry of XYZ, where X and Y represent transition metal and Z is a main group element. This research use a computational method using Quantum ESPRESSO to generate the graph of Band structure and Density of states of the material and BoltzTraP to calculate the thermoelectric properties of 12 kind of half-Heusler materials. All of these 12 material have band gap that indicate that they are asemiconductors, which are good candidates for high value good electrical conductivity, Seebeck coefficient and of figure of merit (ZT) that characterize the efficiency of a thermoelectric device. In addition, our result indicates that Half Heusler semiconductor is better to be used for p-type thermoelectric devices because the thermoelectric properties in p-type region is higher than in n-type region.