

Hf₂CF₂ 单层热传输及热电性质的第一原理研究

董文欣¹, 李铁平¹, 张莉¹, 丁迎春², 何开华¹

(1. 中国地质大学(武汉) 数学与物理学院, 武汉 430074; 2. 宜宾学院 材料与化学工程学部, 宜宾 644000)

摘要: 二维 MXene 材料是一种新型的功能性材料, 其在热电领域具有潜在应用价值. 本文采用第一性原理计算方法, 通过求解声子和电子的玻尔兹曼输运方程, 计算研究了 MXene Hf₂CF₂ 单层的热传输特征和热电性质. 声子谱揭示了 Hf₂CF₂ 单层具有热力学稳定性. 在室温条件下, Hf₂CF₂ 单层的晶格热导率为 14.25 Wm⁻¹K⁻¹, 且随着温度的升高而降低; 电子热导率却随着温度和掺杂浓度的增加而升高. 电输运性质中, 电导率和 Seebeck 系数随载流子浓度的变化相反, 确保能够获得优异的热电性能. 在 600 K 条件下, n 型 MXene Hf₂CF₂ 单层的最大功率因子可以达到 61.24 mW/(mK²). 载流子迁移率具有较高的各向异性, 且电子的迁移率远远高于空穴的迁移率. 基于热导及电导计算结果, n 型 MXene Hf₂CF₂ 单层沿 x 轴方向的热电优值可达到 1.75, 高于其他已报道的类似结构的热电优值, 表明了 MXene Hf₂CF₂ 单层是一种潜在的高性能 n 型热电材料.

关键词: MXene Hf₂CF₂; 热电性能; 晶格热导率; 第一性原理

中图分类号: O469

文献标志码: A

DOI: 10.19855/j.1000-0364.2025.046007

First-principles study of the thermal transports and thermoelectric properties of MXene Hf₂CF₂ monolayer

DONG Wen-Xin¹, LI Tie-Ping¹, ZHANG Li¹, DING Ying-Chun², HE Kai-Hua¹

(1. Faculty of Maths and Physics, China University of Geosciences, Wuhan 430074, China;

2. Department of Material and Chemical Engineering, Yibin University, Yibin 644000, China)

Abstract: As a new functional material, two dimension MXene materials have potential application in the thermoelectric field. In this work, we calculated the thermal transports and thermoelectric properties of the MXene Hf₂CF₂ monolayer by first-principles and solving Boltzmann transport equation for both phonon and electron components. The Hf₂CF₂ monolayer is found to be stable from phonon spectra. At room temperature, the calculated lattice thermal conductivity of Hf₂CF₂ is 14.25 Wm⁻¹K⁻¹, and it decreases with the increasing temperature. However, the electronic thermal conductivity increases with increasing temperature and doping concentration. In terms of electrical transport properties, the variations of electrical conductivity and Seebeck coefficient with carrier concentration are completely opposite, allowing the Seebeck coefficient and electrical conductivity to work together to produce excellent thermoelectric performance. Meanwhile, the largest value of power factor can reach 61.24 mW/(mK²) for the n-type MXene Hf₂CF₂ monolayer at 600 K. In addition, we also calculated the carrier mobility and found that it exhibits high anisotropy, with electron mobility significantly higher than hole mobility. This suggests that the thermoelectric performance of the material is likely dominated by n-type doping. The n-type MXene Hf₂CF₂ monolayer achieves an optimal figure of merit of 1.75 at 600 K and carrier concentration of 1.80 × 10¹³ cm⁻². This study indicates that the MXene Hf₂CF₂ monolayer is a potential high-

收稿日期: 2023-11-28

基金项目: 国家自然科学基金(41474067); 四川省科技支持计划(2023YFSY0036)

作者简介: 董文欣(1999—), 女, 硕士研究生, 主要研究方向为凝聚态物理. E-mail: 1747835693@qq.com

通信作者: 何开华. E-mail: khhe@cug.edu.cn

performance n - type thermoelectric material.

Key words: MXene Hf_2CF_2 monolayer; Thermoelectric property; Lattice thermal conductivity; First - principles

1 引言

热电材料作为新型能源材料,因其能将热能和电能相互转化,有效解决能源和环境问题而备受关注. 塞贝克效应和珀耳帖效应为热电能量转换器和热电制冷的应用提供了理论依据,该类材料具有巨大的优势和应用前景. 热电优值(ZT)用于评估热电材料的性能^[1,2],可以通过热电材料的热导率、电导率和 Seebeck 系数来计算得出,如公式(1)所示

$$ZT = S^2 \sigma T / (\kappa_l + \kappa_e) \quad (1)$$

其中,功率因子(Power Factor)表示为 Seebeck 系数(S)的平方和电导率(σ)的乘积,而式中 T 、 κ_e 和 κ_l 分别表示温度、电子热导率和晶格的热导率. 通常情况下,优良的热电材料需要具有较高的功率因子和较低的热导率^[3-5],以实现更加高效的热电转换效率.

近年来,层状材料由于其特殊的结构和可调节的电子结构,在热电领域引起了广泛关注^[6-11],特别是二维过渡金属碳化物(MXenes). MXenes 具有高导电性和良好的热稳定性,使其成为理想的热电材料候选者^[12-14]. Khazaei 等人的研究表明,适当的表面功能化可以调节 MXene 的电子结构从而获得半导体特性,且在较低温度下获得较大的 Seebeck 系数^[15,16]. Yorulmaz 等人系统的研究了 80 种功能化 MXene 结构的热力学和力学稳定性,给出了最稳定的构型^[17]. Sevil 等人报道了 MXene M_2CO_2 (Ti_2CO_2 、 Zr_2CO_2 、 Hf_2CO_2 和 Sc_2CO_2) 单层的热电性质,结果表明 n 型单层呈现出较高的热电优值^[18].

前人的工作报道 MXene Hf_2CF_2 单层与 Hf_2CO_2 单层具有类似的晶格常数和稳定性,揭示该单层材料可以呈现出半导体特性^[19]. 目前,对该材料的热传输性质以及热电性质仍不清楚,对其进行系统的研究是十分有必要的. 本研究将采用基于第一性原理计算和玻尔兹曼输运理论,深入探索 MXene Hf_2CF_2 单层的热传输性质及热电性能. 计算研究表明, MXene Hf_2CF_2 单层具有较低的热导率和适度的带隙,与其他热电材料相比,在中低温区具备更优秀的热电优值. 这表明单层 MXene Hf_2CF_2 在热电器件领域具有潜在的应用价值.

2 计算细节

本研究采用第一性原理计算软件包 VASP 进行几何结构优化和电子结构性质计算^[20]. 为了避免层间相互作用,沿 c 轴方向(面外)构建了一个 21 Å 的真空层,结构如图 1 所示. 交换关联函数采用广义梯度近似(GGA)的 Perdew - Burke - Ernzerhof (PBE)泛函^[21]. 为了获得 MXene Hf_2CF_2 单层的准确电子能带结构和带隙,能带计算采用了混合密度杂化泛函(HSE06)进行计算^[22]. 计算中平面波截断能设置为 700 eV, k 网格采用了 Γ 点中心,其大小为 $10 \times 10 \times 1$ ^[23]. 收敛标准经过测试,总能量和原子力收敛标准各设置为 1×10^{-8} eV/cell 和 10^{-4} eV/cell.

采用基于准谐近似的 PHONOPY 软件计算二阶力常数和声子谱,采用的方法是有限位移法^[24]. 声子热传导是一个非谐过程,本研究中考虑到了三阶原子间相互作用力常数. 在计算中,采用了 $2 \times 2 \times 1$ 超胞以及第六次近邻原子距离来计算三阶力常数. 为确保晶格热导率的准确性, q 网格经过测试后使用 $45 \times 45 \times 1$ 网格,继续增加 q 网格大小晶格热导率的变化不超过 1%.

研究热电性质时,需要将获得的电子结构与基于弛豫时间的半经典玻尔兹曼传输方程相结合^[25]. 对于 MXene Hf_2CF_2 单层,我们根据形变势理论(DP)来计算不同单元体积下的能带结构,并以 $0.01V_0$ 的步长在 $0.98 V_0 \sim 1.12 V_0$ 范围内进行计算^[26,27]. 载流子迁移率根据下式进行推导

$$\mu_{2D} = \frac{e\hbar^3 C_{2D}}{\kappa_B T m^* m_d^* E_l^2} \quad (3)$$

其中,物理参数和下标的描述与文献[17]中相同. 电子弛豫时间和载流子迁移率之间存在直接关系: $\tau_e = \frac{m^* \mu}{e}$.

玻尔兹曼方程将 Seebeck 系数和电导率积分函数表示为^[28,29]:

$$S = \frac{e}{\sigma T} \int_{BZ} \left(- \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \tau(k) v^2(k) (\varepsilon(k) - u) d\varepsilon \quad (4)$$

$$\sigma = \frac{e^2}{\Omega} \int_{BZ} \tau(k) v^2(k) \left(- \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon \quad (5)$$

$$\kappa_e = \frac{1}{\Omega} \int \tau(k) v^2(k) \frac{(\varepsilon(k) - u)^2}{T} \left(- \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) d\varepsilon - S^2 \sigma T \quad (6)$$

其中, Ω 是系统的体积, τ 是弛豫时间, v 是群速度, $f(\varepsilon)$ 是费米分布, ε 是费米能级.

3 结果与讨论

3.1 声子谱和能带结构

前人的研究表明 Hf_2CF_2 完全氟化的单层有四种不同的几何构型, 在本研究中, 选择了具有半导体特征的构型(功能性原子位于空穴位和碳原子的顶部)^[15]. 优化后的 Hf_2CF_2 单层的晶格常数(面内) $a = 3.20 \text{ \AA}$, 与前人计算得到的结果 $a = 3.232 \text{ \AA}$ 一致^[30]. 图 2 给出了该单层材料的声子谱和能带结构. 声子谱由 3 个声学支(LA、TA 和 ZA 表示纵向、横向和平面外声学波)和 12 个光学

支组成. 所有声学支都没有负的振动模式, 表明该结构具有热力学稳定性. 使用杂化泛函 HSE06 计算得到的 Hf_2CF_2 单层的带隙为 0.68 eV, 略大于前人用 GGA + PBE 泛函计算得到的结果 0.31 eV 和 0.39 eV^[30,31], 这是因为 GGA + PBE 函数会低估电子能带带隙. 能带结构在价带和导带之间的差异, 表明内部的电子和空穴之间的有效质量存在差异.

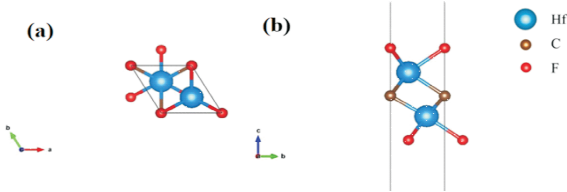


图 1 $\text{MXene Hf}_2\text{CF}_2$ 单层的结构示意图. (a) 和 (b) 分别为俯视图和侧视图.

Fig. 1 Structure of $\text{MXene Hf}_2\text{CF}_2$ monolayer. (a) and (b) represent top and side views.

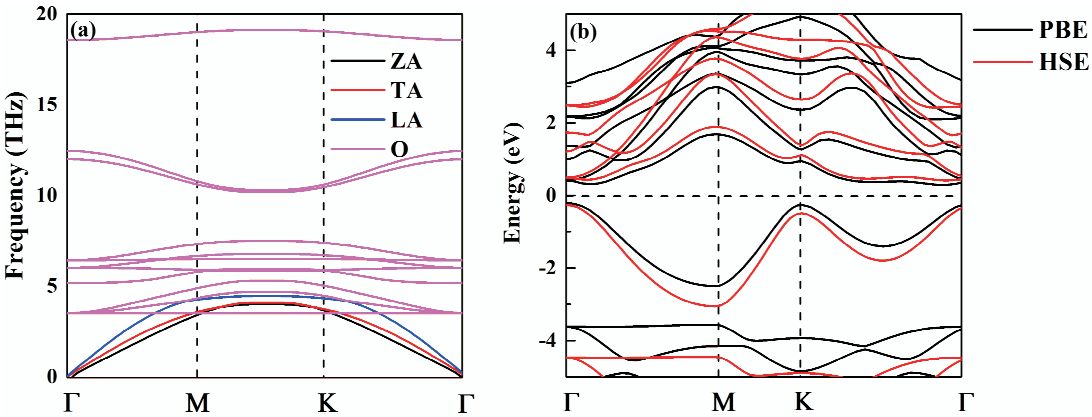


图 2 $\text{MXene Hf}_2\text{CF}_2$ 单层的声子谱(a)电子能带结构(b).

Fig. 2 Phonon dispersion (a) and band structure (b) of $\text{MXene Hf}_2\text{CF}_2$ monolayer.

3.2 载流子迁移率和弛豫时间

要得到电导率和电子热导率, 弛豫时间是必不可少的参数. 在形变势(DP)理论的框架下, 计算结果包括载流子迁移率 μ 、弛豫时间 (τ_e)、有效质量 (m^*)、DP 常数 (E_l) 和二维弹性常数 (C_{2D}), 这些结果列在表 1 中. 可以看出, 载流子电子迁移率在室温下显示出显著的各向异性, 沿 x 轴和 y 轴分别为 $154.01 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 和 $216.90 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$. 对于空穴载流子, 迁移率分别为 $35.05 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ 和 $19.06 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, 这与能带变化趋势密切相关: 导带底部比价带顶部更陡峭. 并且电子的迁移率远远高于空穴的迁移率, 而高的迁移率往往对应较长的弛豫时间和较弱的散射. 计算得到的电子弛豫时间沿 x 轴明显大于

y 轴方向: 在 300 K 条件下分别为 71.34 fs 和 21.99 fs. 而对于空穴载流子, 弛豫时间的趋势相反: 在 300 K 条件下沿 x 轴和 y 轴方向分别为 16.94 fs 和 42.07 fs. 对于电子来说, 迁移率越大, 散射较弱, 使得弛豫时间较长; 而对于空穴来说, 空穴的行为受价带顶部的限制, 其受到的散射较强, 使得弛豫时间较短. 因此, 电子和空穴具有不同的能带结构和运动特性, 使得它们的弛豫时间与载流子迁移率之间出现了反相关的关系.

3.2 电输运性质

$\text{MXene Hf}_2\text{CF}_2$ 单层的 Seebeck 系数、电导率随温度和载流子浓度的变化关系如图 3 所示. 可以看出, Seebeck 系数随着载流子浓度的增加, 呈现下降的趋势; 与 p 型 Hf_2CF_2 单层相比, n 型 Hf_2CF_2 单

表 1 MXene Hf₂CF₂单层的载流子有效质量、弹性常数、迁移率和弛豫时间

Table 1 Effective masses, elastic constants, mobilities and relaxation time of carriers in MXene Hf ₂ CF ₂ monolayer							
Carrier type	Direction	m^* (m_0)	m_d (m_0)	C_{2D} (Jm ⁻²)	E_I (eV)	μ (cm ² V ⁻¹ s ⁻¹)	τ (10 ⁻¹⁵ s)
Hole	x	1.36	1.62	116.66	5.67	35.06	16.94
	y	1.94	1.62	115.64	6.41	19.06	42.07
Electron	x	1.73	0.96	116.66	3.11	154.01	71.34
	y	0.54	0.96	115.64	4.67	216.90	21.99

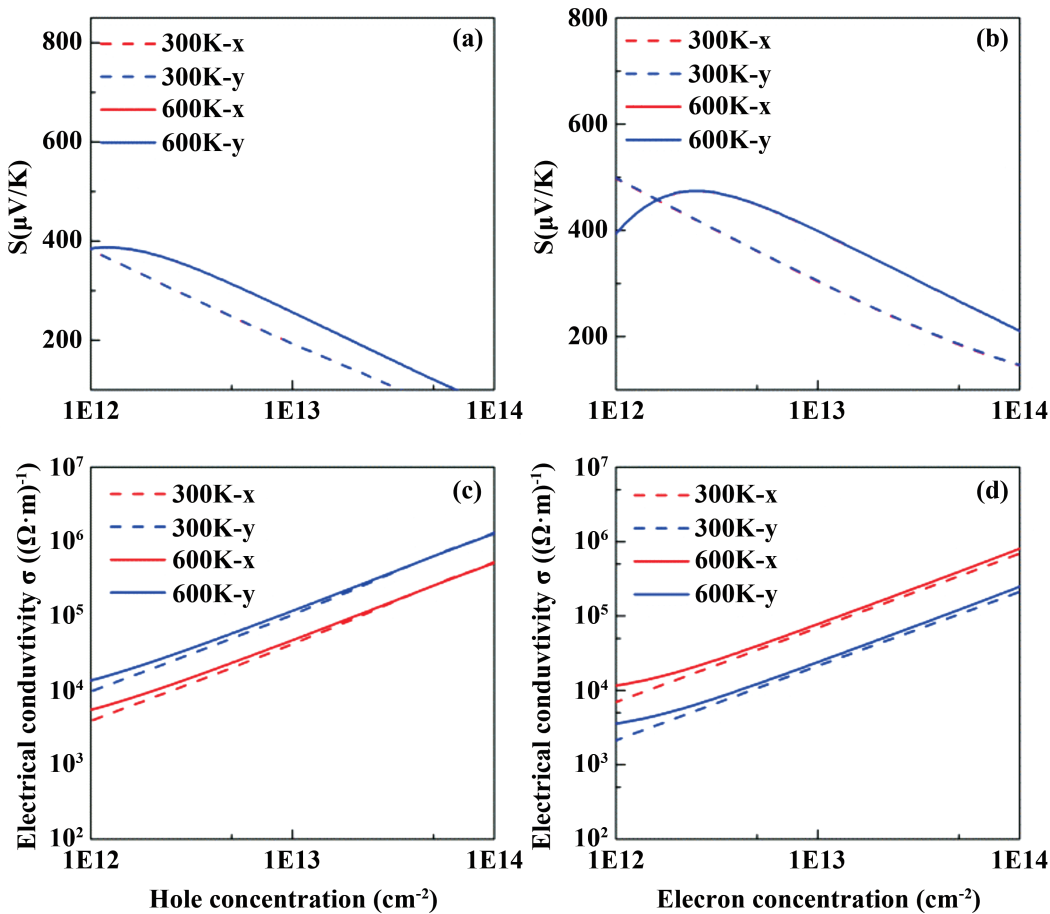


图 3 MXene Hf₂CF₂单层沿 x 和 y 轴方向的电子输运系数 Seebeck 系数(a, b)和电导率(c, d)随载流子浓度变化的曲线。

Fig. 3 Carrier concentration dependences of electronic transport coefficients of MXene Hf₂CF₂ monolayer along x and y axes.

层的 Seebeck 系数受温度的影响更为明显。不同于 Seebeck 系数的变化, x 轴和 y 轴方向电导率都随载流子浓度的增加而增加, 而且 p 型和 n 型单层之间都呈现出强烈的各向异性。电子热导率与电导率的关系可以通过 Wiedemann – Franz 定律 ($\kappa_e = L\sigma T$) 得出, 其中 L 是洛伦兹常数^[32–34]。图 4 (a)比较了 MXene Hf₂CF₂单层的电子热导率在 300 K 和 600 K 时与载流子浓度的关系。电子热导率和电导率有相似的曲线, 电子热导率随着温度和载流子浓度的增大而增大, 这是因为热电

子的扩散速度随温度增加而更加快速^[35]。功率因子是反映材料电运输的关键参数, 与温度和载流子浓度有关。如图 4 (b) 所示, 随着载流子浓度的增加, 功率因子先增大再减小, 这是 Seebeck 系数和电导率之间耦合的结果。此外, n 型 MXene Hf₂CF₂单层的功率因子要高于 p 型单层, 这可能是由于 n 型 Hf₂CF₂单层有的较大 Seebeck 系数。在载流子浓度为 2.91×10^{14} (2.25×10^{14}) cm⁻², 温度为 300 K (600 K) 时, 沿 x 轴的功率因子为 32.89 (61.24) mW/(mK²), 比其他报道的结果如

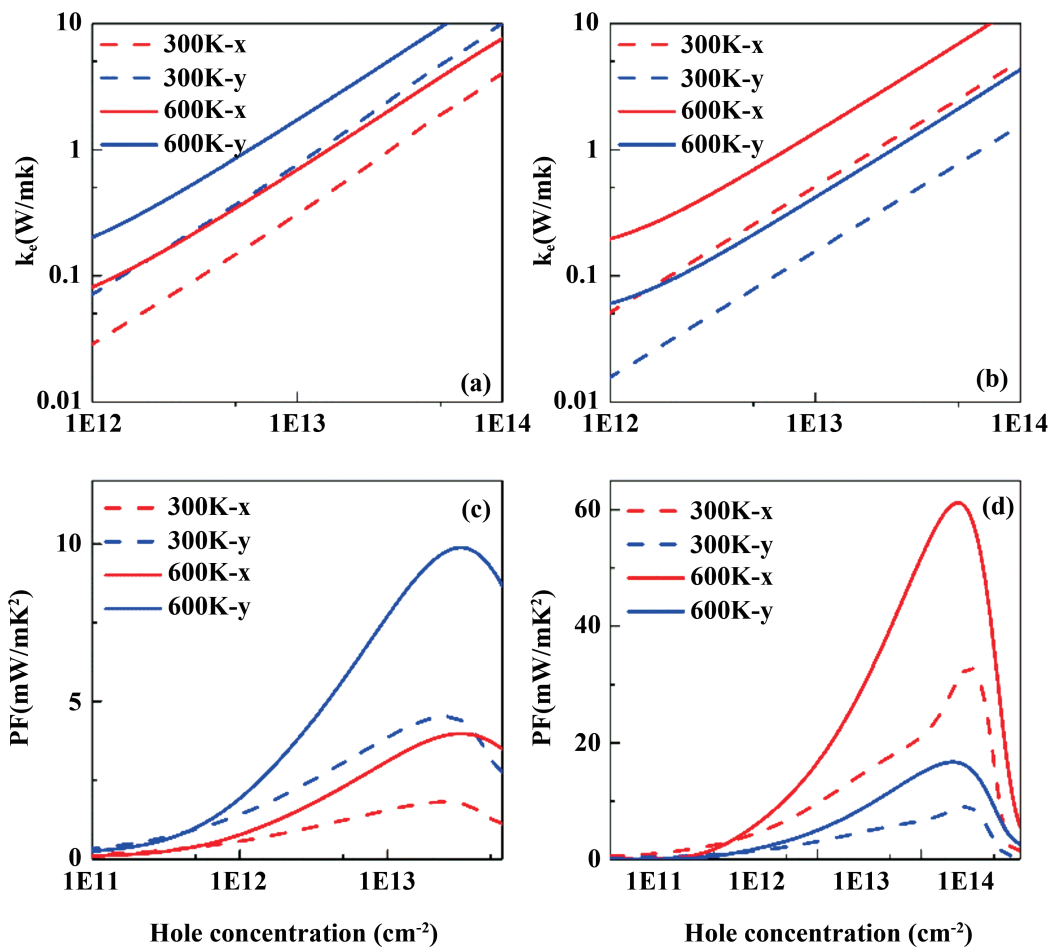


图 4 MXene Hf_2CF_2 单层沿 x 和 y 轴方向的功率因子(a, b)和电子热导率(c, d)随载流子的变化关系。
Fig. 4 Carrier concentration dependences of electronic transport coefficients of MXene Hf_2CF_2 monolayer along x and y axes.

PbTe ($2.5 \text{ mW}/(\text{mK}^2)$) 更高^[36].

3.3 晶格热导率

随着温度的升高晶格热导率逐渐减小, 即温度越高, 声子对热导率的贡献不断降低(图 5). 这是由于随着温度的升高, 声子散射率会逐渐增加^[37]. 由累积晶格热导率随着频率的关系可以看出, 晶格热导率的主要贡献来源于低于 5.7 THz 的声子贡献, 即声学波的贡献, 因此讨论影响晶格热导率的内在机制需要关注此部分声子的群速度和声子寿命. 从低频部分声子不难看出, LA 分支的群速度最大, 其次是 TA 和 ZA 分支. 从声子寿命来看, ZA 分支的声子寿命最短, 这与其在低频下具有更高的散射率有关系. 格林艾森常数是决定三声子散射强度的关键因素之一. 高的散射强度对应着较大的声子散射率和较大的格林艾森常数, 导致材料的晶格热导率降低^[38]. 如图 6 所示, ZA 分支具有较大的格林艾森常数, TA 和 LA 分支较小, 格林艾森常数越大表示非谐效应强,

导致声子散射率增加和热导率降低. 综上所述, 在 300 K 条件下, MXene Hf_2CF_2 单层的热导率为 $14.25 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}$, 低于其他前人报道的单层热电材料, 如 MoS_2 ($26.2 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}$), ZrS_3 ($17 \text{ Wm}^{-1} \text{ K}^{-1}$)^[33,39].

3.4 晶格振动模式

图 7 给出了 MXene Hf_2CF_2 单层每个分支对晶格热导率的贡献百分比及其随温度变化的情况. 首先来看单层面内热传导, 在 300 K 条件, LA、TA 和 ZA 三声学波分支在层内热传导中发挥着重要作用, 其中 LA 分支最大, ZA 分支最小, 三支声学波对总晶格热导率的贡献接近 91% . 光学分支对热传输影响较小, 对总热导率的贡献约为 9% . 随着温度的升高, 三支声学波对总晶格热导率的贡献都有小幅度减小, 而光学波的贡献有小幅增加. 对于面外热传导, 三支声学波对总晶格热导率的贡献与面内热传导类似, 但是对总热导率贡

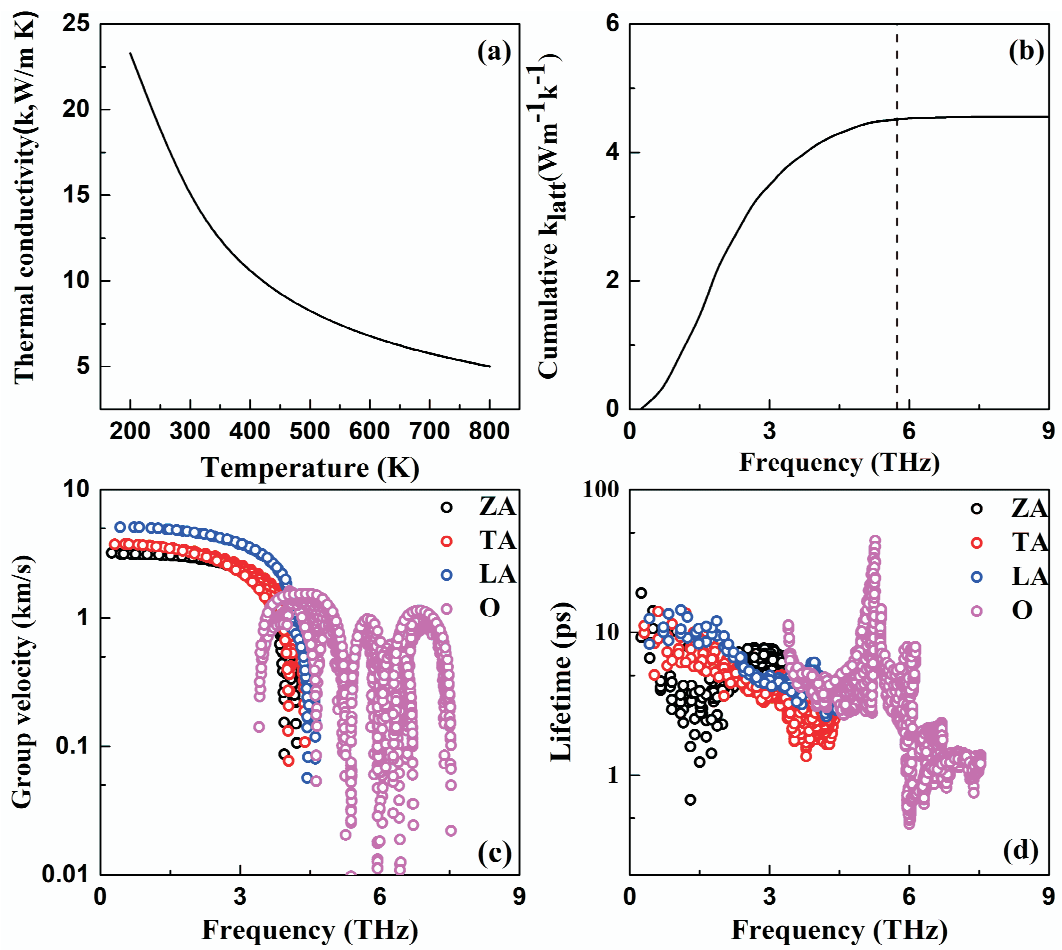


图5 (a)300 K 条件下, MXene Hf_2CF_2 单层的晶格热导率随温度的变化关系; (b)在 300 K 条件下 累计晶格热导率随频率的变化关系; (c)在 300 K 条件下, 群速度随频率的变化关系; (d)在 300 K 条件下, 声子寿命随频率的变化关系

Fig. 5 (a) Temperature dependences of κ_l (a), cumulative κ_l as a function of frequency at 300 K (b), group velocity (c) and lifetime (d) at 300 K of MXene Hf_2CF_2 monolayer.

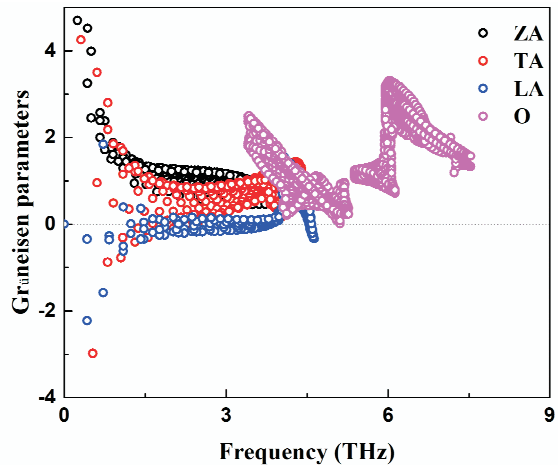


图6 MXene Hf_2CF_2 单层的格林艾森常数
Fig. 6 Mode – Grüneisen parameters of MXene Hf_2CF_2 monolayer

献最大的是 ZA 分支, LA 分支的贡献反而最小, 这种 ZA 分支的行为也在其他二维结构中观察到,

比如 SnSe_2 、石墨烯和锡烯^[5,38,41].

3.5 热电优值

图8是 MXene Hf_2CF_2 单层在 300 K 和 600 K 条件下热电优值随载流子浓度的变化关系. 无论是 n 型还是 p 型 Hf_2CF_2 单层, 随载流子浓度增加热电优值都会先增加而后减小, 温度升高热电优值增加明显. 对于 p 型 Hf_2CF_2 单层, 沿着 y 轴方向的热电优值比沿 x 方向的要大, 而 n 型 Hf_2CF_2 单层却恰好相反, 这与弛豫时间沿 x 轴和 y 轴方向的规律是一致的. 在 300 K 和 600 K 条件下, n 型 MXene Hf_2CF_2 的最大热电优值约为 0.82 和 1.75, 这一值要高于前人研究的报道的一些类似材料, 如 tellurene 在 700 K 时为 0.83, PbTe_2 在 300 K 时的 0.72, 以及 PtSe_2 在 300 K 时的 0.68^[36, 37], 这表明 MXene Hf_2CF_2 单层具有优秀的热电性能.

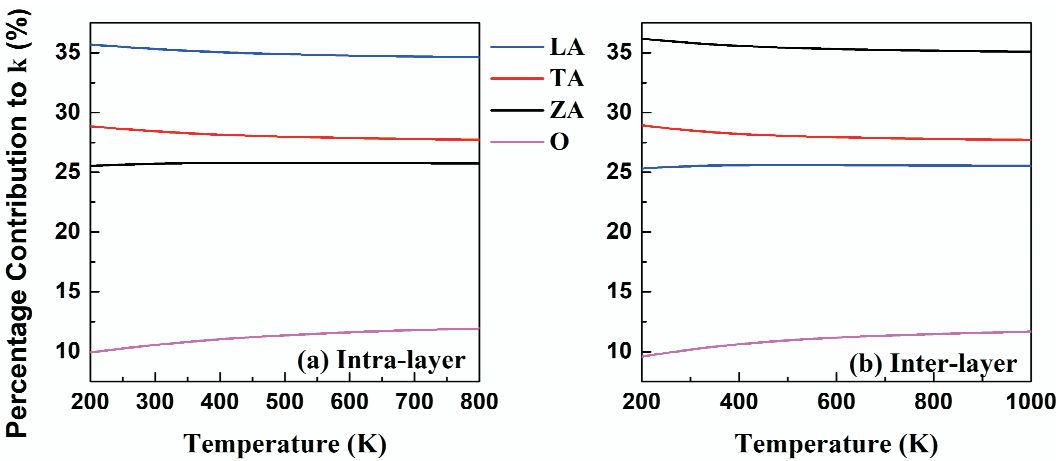


图 7 温度相关的 MXene Hf_2CF_2 单层的声学支和光学支对总晶格热导率贡献

Fig. 7 Temperature dependences of percentage contributions of acoustic and optical branches.

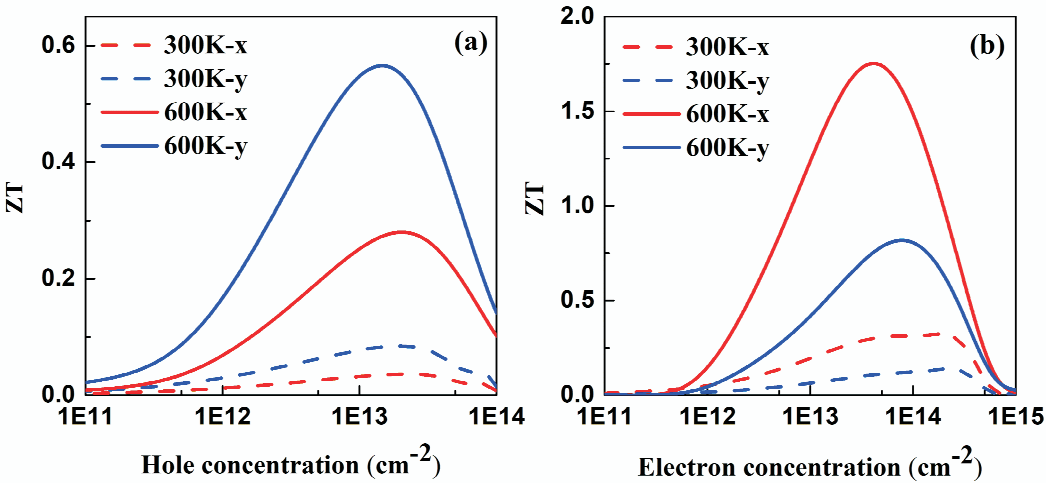


图 8 p 型 (a) 和 n 型 (b) MXene Hf_2CF_2 单层的热电品质因子与载流子浓度关系.

Fig. 8 Changes of thermoelectric ZT value of p - type (a) and n - type (b) MXene Hf_2CF_2 monolayers with carrier concentration at 300 K and 600 K.

4 结 论

采用第一性原理和求解玻尔兹曼传输方程, 计算研究了 MXene Hf_2CF_2 单层的热传输及热电性质. 首先验证了 MXene Hf_2CF_2 单层的热力学稳定性及具有较小的带隙. 在电输运性能方面, 基于 DP 理论计算了电子的弛豫时间, 并得到了电子热导率和电导率. 电子热导率随温度升高而增大; 电导率随着载流子浓度和温度的增大而增大, 但载流子浓度对电导率的影响明显大于温度的影响. 载流子迁移率的结果显示电子迁移率比空穴迁移率更大, 因此材料的 n 型掺杂时的热电性能可能更为优异. 在 300 K 条件下, Hf_2CF_2 单层的晶格热导率为 $14.25 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$, 随温度的变化非常接近于 $1/T$ 的关系, 与传统半导体的结论一致. 在电子浓度为 2.91×10^{14} (2.25×10^{14}) cm^{-2} 和温度

为 300 (600) K 的条件下, x 轴方向获得了较高的功率因子, 分别为 32.89 (61.24) $\text{mW}/(\text{mK}^2)$. 功率因子和热导率共同决定了 n 型掺杂时 MXene Hf_2CF_2 单层具有更高的热电优值, 在 600 K 和 $1.80 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ 的电子浓度下, n 型 Hf_2CF_2 的最大热电优值可达到 1.75, 较其他一些已报道类似材料的热电优值要高. 因此, MXene Hf_2CF_2 单层是一种高效二维热电材料.

参考文献:

[1] Heremans J P, Dresselhaus M S, Bell L E, *et al.* When thermoelectrics reached the nanoscale [J]. *Nature Nanotech.*, 2013, 8: 471.

[2] Zhao L D, Dravid V P. The panoscopic approach to high performance thermoelectrics [J]. *Energy Environ. Sci.*, 2014, 7: 251.

- [3] He J, Tritt T M. Advances in thermoelectric materials research: looking back and moving forward [J]. *Science*, 2017, 357: 6358.
- [4] Zhao L D, Lo S H, Zhang Y, *et al.* Ultralow thermal conductivity and high thermoelectric figure of merit in SnSe crystals [J]. *Nature*, 2014, 508: 373.
- [5] Snyder G, Toberer E. Complex thermoelectric materials [J]. *Nature Mater.*, 2008, 7: 105–114.
- [6] Anasori B, Lukatskaya M R, Gogotsi Y. 2D metal carbides and nitrides (MXenes) for energy storage [J]. *Nat. Rev. Mater.*, 2017, 2: 16098.
- [7] Nicolosi V, Chhowalla M, Kanatzidis M G, *et al.* Liquid exfoliation of layered materials [J]. *Science*, 2013, 340: 1226419.
- [8] Barsoum M W. The $M_{n+1}AX_n$ Phases: a new class of solids: thermodynamically stable nanolaminates [J]. *Prog. Solid State Chem.*, 2000, 28: 201.
- [9] Ganatra R, Zhang Q. Few – layer MoS_2 : a promising layered semiconductor [J]. *ACS Nano*, 2014, 8: 4074.
- [10] Zhou J Y, Lin Z Y, Ren H Y, *et al.* Layered intercalation materials [J]. *Adv. Mater.*, 2021, 33: 2004557.
- [11] Osada M, Sasaki T. Two – Dimensional dielectric nanosheets: novel nanoelectronics from nanocrystal building blocks [J]. *Adv. Mater.*, 2012, 24: 210.
- [12] Naguib M, Kurtoglu M, Presser V, *et al.* Two – dimensional MXene Ti_3C_2 produced by exfoliation of Ti_3AlC_2 [J]. *Adv. Mater.*, 2011, 23: 4248.
- [13] Khazaei M, Ranjbar A, Arai M, *et al.* Topological insulators in the ordered double transition metals $M_2'M''C_2$ MXenes ($M' = Mo, W$; $M'' = Ti, Zr, Hf$) [J]. *Phys. Rev. B*, 2016, 94: 125152.
- [14] Seong H W, Lee M S, Ryu H J. First – principles study for discovery of novel synthesizable 2D high – entropy transition metal carbides (MXenes) [J]. *Mater. Chem. C*, 2017, 5: 3438.
- [15] Khazaei M, Arai M, Sasaki T, *et al.* Novel electronic and magnetic properties of two – dimensional transition metal carbides and nitrides [J]. *Adv. Funct. Mater.*, 2013, 23: 2185.
- [16] Dahlqvist M, Rosen J. The rise of MAX phase alloys – large – scale theoretical screening for the prediction of chemical order and disorder [J]. *Nanoscale*, 2022, 14: 10958.
- [17] Yorulmaz U, Ozden A, Perkgoz N K, *et al.* Vibrational and mechanical properties of single layer MXene structures: a first – principles investigation [J]. *Nano-technology*, 2016, 27: 335702.
- [18] Sarikurt S, Çakir D, Keceli M, *et al.* The influence of surface functionalization on thermal transport and thermoelectric properties of MXene monolayers [J]. *Nanoscale*, 2018, 10: 8859.
- [19] Li W, Carrete J, Katcho N A, *et al.* ShengBTE: a solver of the Boltzmann transport equation for phonons [J]. *Comput. Phys. Commun.*, 2014, 185: 1747.
- [20] Kresse G, Furthmüller J. Efficiency of *ab – initio* total energy calculations for metals and semiconductors using a plane – wave basis set [J]. *Comput. Mater. Sci.*, 1996, 61: 15.
- [21] Ziesche P, Kurth S, Perdew J P, *et al.* Density functionals from LDA to GGA [J]. *Comput. Mater. Sci.*, 1998, 11: 122.
- [22] Heyd J, Scuseria G E, Ernzerhof M. Erratum: hybrid functionals based on a screened Coulomb potential [J]. *Chem. Phys.*, 2003, 118: 8207.
- [23] Monkhorst H J, Pack J D. Special points for Brillouin – zone integrations [J]. *Phys. Rev. B*, 1976, 13: 5188.
- [24] Togo, A, Tanaka I *et al.* First principles phonon calculations in materials science [J]. *Scr. Mater.*, 2015, 108: 1.
- [25] May A F, Toberer E S, Saramat A, *et al.* Characterization and analysis of thermoelectric transport in n – type $Ba_8Ga_{16x}Ge_{30+x}$ [J]. *Phys. Rev. B*, 2009, 80: 125205.
- [26] Bardeen J, Shockley W. Deformation potentials and mobilities in non – polar crystals [J]. *Phys. Rev.*, 1950, 80: 72.
- [27] Pizzi G, Volja D, Kozinsky B, *et al.* BoltzWann: a code for the evaluation of thermoelectric and electronic transport properties with a maximally – localized wannier functions basis [J]. *Comput. Phys. Commun.*, 2014, 185: 422.
- [28] Bruzzone S, Fiori G. *Ab – initio* simulations of deformation potentials and electron mobility in chemically modified graphene and two – dimensional hexagonal boron – nitride [J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2011, 99: 222108.
- [29] Li J, Wang B, Xu F, *et al.* Spin – dependent Seebeck effects in graphene – based molecular junctions [J]. *Phys. Rev. B*, 2016, 93: 195426.
- [30] Saha K K, Markussen T, Thygesen K S, *et al.* Multi-terminal single – molecule – graphene – nanoribbon junctions with the thermoelectric figure of merit optimized via evanescent mode transport and gate voltage [J].

- Phys. Rev. B*, 2011, 84: 041412.
- [31] Khazaei M, Arai M, Estili M, *et al.* Two – dimensional molybdenum carbides: potential thermoelectric materials of the MXene family [J]. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2014, 16: 7841.
- [32] Wu J, Liu Y, Liu Y, *et al.* Kondo impurities in two dimensional MoS_2 for achieving ultrahigh thermoelectric powerfactor [J]. *arXiv*, 2019, 1901: 04661.
- [33] Tu Y T, Sankar D S. Wiedemann – Franz law in graphene [J]. *Phys. Rev. B*, 2023, 107: 085401.
- [34] Fatemeh S, Maryam M. Energy storage applicability of novel two – dimensional transition metal nitride alloys: first principle study [J]. *Solid State Commun.*, 2022, 358: 115002.
- [35] Nina G, Dino N. Dynamical renormalization of electron – phonon coupling in conventional superconductors [J]. *Phys. Rev. B*, 2023, 107: 064310.
- [36] Hu X K, Jood P, Ohta M, *et al.* Power generation from nanostructured PbTe – based thermoelectrics: comprehensive development from materials to modules [J]. *Energy Environ. Sci.*, 2016, 9: 517.
- [37] Madsen G K H, Singh D J. BoltzTraP. A code for calculating band – structure dependent quantities [J]. *Comput. Phys. Commun.*, 2009, 79: 155413.
- [38] Pang G J, Zhang B, Meng F C, *et al.* Quantifying the lattice and electronic thermal conductivity of arsenic from first principles [J]. *Phys. Rev. B* 2023, 108: 054303.
- [39] Ding Y C, Xu B, Tang G, *et al.* Transport Properties and high thermopower of SnSe_2 : a full *ab – initio* investigation [J], *J. Phys. Chem. C*, 2017, 121: 225.
- [40] Wang C, Zheng C, Gao G. Bulk and monolayer ZrS_3 as promising anisotropic thermoelectric materials: a comparative study [J]. *J. Phys. Chem. C*, 2020, 124: 6536.
- [41] Peng B, Zhang H, Shao H Z. Low lattice thermal conductivity of stanene [J]. *Phys Rev. B*, 2016, 94: 245420.