

## 氟化磷烯熱電效率之探討

黃茂家<sup>1</sup>、顏順通<sup>1</sup>、鄭弘泰<sup>2</sup>、王德賢<sup>3\*</sup>

1.國立陽明交通大學電子工程學系 2.國立清華大學物理系 3.國立臺東大學應用科學系

### 摘要

在本文中，我們預測了一種新的材料結構-氟化磷烯並以第一原理及波茲曼方程計算其熱電特性。我們發現 P 型的氟化磷烯展現極大的功率因子，其可高達  $1.4 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$ ，比 P 型的磷烯和氧化磷烯大約 9 倍。反之 N 型的氟化磷烯的功率因子為  $0.35 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$ ，與 N 型的磷烯( $0.36 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$ )十分接近但遠大於 N 型的氧化磷烯。此外磷烯、氧化磷烯和氟化磷烯的熱電傳輸有明顯的方向性。磷烯(氧化磷烯)的 armchair (zigzag) 方向的功率因子遠大於 zigzag (armchair) 方向。P (N) 型的氟化磷烯 armchair (zigzag) 方向的功率因子遠大於 zigzag (armchair) 方向。

**關鍵字:** 熱電材料、二維材料、氟化磷烯

## Thermoelectric Properties of Phosphorene Fluoride

Mao-Jia Huang<sup>1</sup>, Shun-Tung Yen<sup>1</sup>, Horng-Tay Jeng<sup>2</sup>, Te-Hsien Wang<sup>3\*</sup>

1. Department of Electronics Engineering, National Yang Ming Chiao Tung University 2. Department of Physics National Tsing Hua University 3. Department of Applied Science, National Taitung University.

### Abstract

In this paper, we investigate the thermoelectric properties of the phosphorene fluoride through the density functional theory and the Boltzmann transport equation. We find that the p-type phosphorene fluoride exhibits the power factor as large as  $1.4 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$ , which is about nine times larger than the p-type phosphorene and p-type phosphorene oxide. On the other hand, the n-type phosphorene fluoride has a relatively lower power factor,  $0.35 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$ , which is comparable with that of n-type phosphorene  $0.36 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$  but much larger than that of n-type phosphorene oxide. The thermoelectric properties are highly anisotropic. The power factor of the phosphorene (phosphorene oxide) along the armchair (zigzag) direction is much larger than that of the zigzag (armchair) direction for both n-type and p-type cases. The p-type (n-type) phosphorene fluoride has a larger power factor in the armchair (zigzag) direction than in the zigzag (armchair) direction.

**Keywords:** thermoelectric, two-dimensional materials, phosphorene fluoride

---

黃茂家-國立陽明交通大學電子工程學系碩士班

顏順通-國立陽明交通大學電子工程學系教授

鄭弘泰-國立清華大學物理系教授

王德賢(通訊作者)-國立臺東大學應用科學系助理教授。E-mail: [thwang@nthu.edu.tw](mailto:thwang@nthu.edu.tw)

## 壹、前言

科技快速發展帶來生活的便利，但同時也提高了能源的使用量。過去由於燃燒化石燃料造成溫室氣體的排放使得全球暖化的問題日益加劇。隨著未來人類使用能源量逐步攀升，科學家渴望能找到在不影響氣候的條件下增加可使用能源量的方法。

一般而言解決能源問題方法主要可分為兩大類：一是開發低污染之能源如核能發電、太陽能發電、風力及水力發電。用對環境低負擔的方式增加發電的電量。二則是提高能源之使用效率。根據美國勞倫斯利佛摩國家實驗室 2020 年的統計，在美國能源從生產的過程到實際被使用在運輸、民用照明及工程，只有約 33% 的能量被有效的利用，而剩餘的 67% 則以廢熱的形式逸散到環境中(Lawrence Livermore National Laboratory, 2021)。尤其像是在發電廠及重工業生產都伴隨著大量的廢熱。若我們能回收再利用這些廢熱就能提高能源使用之效率的同時減少冷卻這些設備的成本。而該如何使用這些廢熱並轉換成我們能使用的能量呢？熱電材料或許就是解答。所謂的熱電材料就是能夠有效地將熱能轉化為電能的材料。其原理是將熱電表現優秀的材料做成之裝置兩端放置在不同溫度，此時材料會因本身物理特性在其兩端形成電動勢。若我們將熱電材料一端放在會產生大量廢熱的設備上，就能將部份的廢熱回收轉換成電能。這相當於提高了現有的能源使用效率，同時還減少了處理這些廢熱的成本。

熱電材料除了能夠用來發電之外，還能在供給電流時將一端之熱能運輸到另一端將熱導出藉此達到製冷的效果。若與傳統壓縮機做比較的話，這種作法好處是由於沒有可移動機械結構帶來的耗損，提升了使用壽命並減少製冷時的噪音。

我們一般會以熱電材料的 ZT 值(熱電優值)衡量不同材料的熱電能源轉換效率。其可寫成：

$$ZT = \frac{S^2 \sigma T}{\kappa} \quad (1)$$

其中  $T$  是絕對溫度、 $\sigma$  是電導率、 $S$  是賽貝克係數，其為在不同溫度之兩端，每單位溫度差下因為熱電效應能形成的電位差( $\Delta V = S\Delta T$ )、 $\kappa$  是熱導率，其包含電子貢獻  $\kappa_e$  和聲子的貢獻  $\kappa_l$ 。因此好的熱電材料往往具有高電導率( $\sigma$ )以降低內部電阻而生成廢熱、大的賽貝克係數( $S$ )以在同樣溫度差下產生更高的電位差以及低的熱導率( $\kappa$ )來控制住兩側的溫度差。一般而言，材料的 ZT 值至少要達到 3 才有機會達到傳統發電機或壓縮機之能源轉換效率。

熱電效應雖早在 1821 年就被 Thomas Seebeck 發現(Hooshmand Zaferani et al., 2021)，但直到 1950 年代 Abram Ioffe 發現摻雜後的半導體能有更高的熱電特性，並提出使用半導體作為製冷設備的可能性之後(Mahan et al., 1997)，熱電材料才引起科學家們的廣泛關注，並發現了如  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  及  $\text{Pb}(\text{Te}, \text{Se})$  等 ZT 值接近 1 的材料(Zhu et al., 2017)。1993 年 Hicks 與 Dresselhaus 預測可以利用低維度的奈米材料以提高 ZT 值後(Hicks & Dresselhaus, 1993)，科學家們開始探討奈米結構對於熱電效應之影響，並發現許多 ZT 值大於 1 的材料甚至大於 2 的材料。但到今日仍未找公認 ZT 值大於 3 的材料。

提高材料的 ZT 值的困難在於熱電參數(電導率、賽貝克係數、電子和聲子貢獻的熱導率)彼此是相關連的。當我們優化其中一個參數，往往會造成其它參數的劣化。以金屬為例，由於金屬主要是藉由電子而非聲子傳導熱能，其總熱導率幾乎等於電子熱導率( $\kappa \approx \kappa_e$ )。根據維德曼-夫蘭茲定理(Wiedemann-Franz law)，在定溫下電導率和熱導率的比值為一定值。因此提升電導率會同時提升熱導率使得金屬的 ZT 幾乎完全由賽貝克係數決定。然而金屬的賽貝克係數往往都很小使其通常不會為一個好的熱電材料。

通常好的熱電材料是半導體。相對於金屬，半導體具有相對大的賽貝克係數。然而隨著載子濃度的上升，半導體的電導率雖然會上升但賽貝克係數的值會下降。此外我們通常可以透過在半導體中加入摻雜降低聲子熱導率，但這往往會降低載子遷移率( $\mu$ )進而減少電導率。

在奈米結構對 ZT 值(熱電優質)提高獲得實驗證實後，科學家開始嘗試以不同的奈米結構觀察結構對電子散射及聲子散射的影響。經過多年的努力，有許多優秀熱電材料結構被提出。而在這之中又以二維材料受到許多關注。自從 2004 年科學家發現石墨烯具有許多新奇的物理特性後(Novoselov et al., 2004)，各式各樣的二維材料逐漸地被發展與研究。像是過渡金屬二硫化物(transition metal dichalcogenide, TMDC)與黑磷製成的磷烯(phosphorene)。這些二維材料展現了許多新奇的物理特性與具有做為熱電材料之潛力。

過往許多研究指出黑磷具有發展成熱電材料的潛力(Fei & Yang, 2014)，其為高度異向性之結構，在 armchair 方向及 zigzag 方向的電導率及熱導率有顯著差異。在 armchair 方向能展現很好的熱電特性如賽貝克係數至  $335 \mu\text{VK}^{-1}$  及高載子遷移率至  $1000\text{cm}^2(\text{Vs})^{-1}$ 。根據實驗結果，若用層數較少的黑磷的賽貝克係數可高達  $510 \mu\text{VK}^{-1}$  (Saito et al., 2016)。在 2014 年單層的磷烯結構(phosphorene)被成功地從三維的黑磷塊材剝落下來後(Li et al., 2014)。有不少與黑磷和磷烯有關的熱電理論預測相繼被提出。例如 J. Zhang 的團隊預測若透過適當摻雜 Sb 原子到黑磷 ZT 值可以高達 6(Zhang et al., 2016)。Young-Kyun Kwon 的團隊預測氧化磷烯可能是不錯的熱電材料，並建議若氧化磷烯摻雜成 N 型半導體可能是不錯且環保的熱電材料(Lee et al., 2021)。有鑒於目前許多相關研究之發展，我們希望能使用第一原理計算與氧化磷烯結構相近的氟化磷烯結構並觀察是否具有高 ZT 值之特性。

本文包含以下內容，第二部分計算方法主要簡述如何運用第一原理模擬磷烯、氧化磷烯及氟化磷烯之結構，並使用波茲曼傳輸理論及形變位勢理論和等效質量假設計算三種結構在不同方向的電導率、賽貝克係數及功率因子。在第三部分結果與討論中，我們展示了不同結構的熱電特性，以此來做比較並分析可能造成熱電特性的原因為何，在最後結論預測氟化磷烯是否具有做為高 ZT 值材料的可能性。

## 貳、計算方法

### 一、電子結構

我們利用第一原理計算結構的最低能量狀態為穩定狀態。第一原理(Ab initio)是指不以任何經驗或者實驗得到的方程式做計算，而是從材料最基本的元素排列及薛丁格方程式計算該結構系統的物理特性。由於密度泛函理論(density functional theory)，我們明白材料最低能量狀態(基態)其實是電子密度的泛函數(Hohenberg & Kohn, 1964)。我們就能夠透過假設得到與真實材料接近的晶體結構與能帶結構，這裡我們所使用的是 Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP)作計算(Kresse & Furthmüller, 1996a, 1996b; Kresse & Hafner, 1993)。而在計算密度泛函理論中最難處理的交換相關能項，我們則是使用廣義梯度近似假設(GGA)的 PBE 參數來近似(Perdew et al., 1996)，總能量差異  $10^{-6}$  eV 作為收斂與否的判定條件。以 Monkhorst-Pack k-meshes  $10 \times 7 \times 1$  在倒晶格空間取樣分段(Monkhorst & Pack, 1976)，透過第一原理計算出穩定的晶體結構與其能帶結構圖及能量狀態密度以提供更進一步的運算。

## 二、熱電傳輸特性

我們利用波茲曼傳輸方程(Boltzmann transport equation) 在弛豫時間近似(Wang & Jeng, 2019)(relaxation time approximation)計算電導率 $\sigma$ 、賽貝克係數(S)及對應的功率因子( $PF = S^2\sigma$ )。詳細的方程式可參考(Wang & Jeng, 2019)。

在計算熱電參數時所需要的弛豫時間(relaxation time)則是利用形變位勢理論來求得，其最早是由 Bardeen 跟 Shockley 在 1950 年提出(Bardeen & Shockley, 1950)。在此我們假設電子-聲子散射為主要的散射機制(Fang et al., 2020; Long et al., 2009; Xi et al., 2012)其可寫為

$$\tau_j^i = \frac{\hbar^3 C_j}{k_B T m^* E_j^{i2}} \quad (2)$$

$\hbar$  是約化普朗克常數、 $k_B$  是波茲曼常數、 $m^*$  是等效質量、 $C_j$ 是彈性常數、 $E_j^i$ 是形變位勢(deformation potential)常數。上標 $i$ 代表導帶( $i = c$ )或是價帶( $i = v$ )，下標 $j$ 表示 zigzag 方向或是 armchair 方向)。其中 $C_j$ 可以透過對結構於特定方向增減晶格長度產生形變觀察總能量變化並以方程式

$$\frac{E - E_0}{V_0} = C_j \left(\frac{\Delta l}{l_0}\right)^2 / 2 \quad (3)$$

擬合得到。在此 $E$ 是計算形變後結構得到的系統總能量， $E_0$ 是形變前系統總能量， $V_0$ 是二維的原始單位晶胞面積， $\Delta l$ 是在所考慮的傳輸方向(如 zigzag 或 armchair)上的形變量， $l_0$ 是該方向之原始晶格常數。而形變位勢 $E_j^i$ 也可以透過結構在特定方向增減晶格常數觀察所造成的能帶位移來擬合。計算時須將內層不受形變影響之能帶定為基準點並計算變化量並以

$$E_j^i = \frac{\Delta V_i}{\Delta l / l_0} \quad (4)$$

擬合出形變位勢常數。在此 $\Delta V_i$ 是在第 $i$ 個能帶的能帶邊緣在外加形變 $\Delta l$ 下能量的改變。圖片一為實際擬合結果。

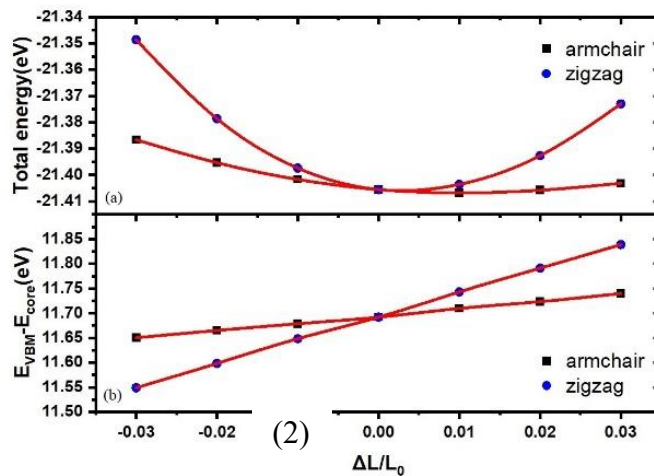


圖 1. 擬合磷烯在導電帶於兩方向之(a)彈性常數 $C_j$ (b) 形變位勢常數 $E_j^i$

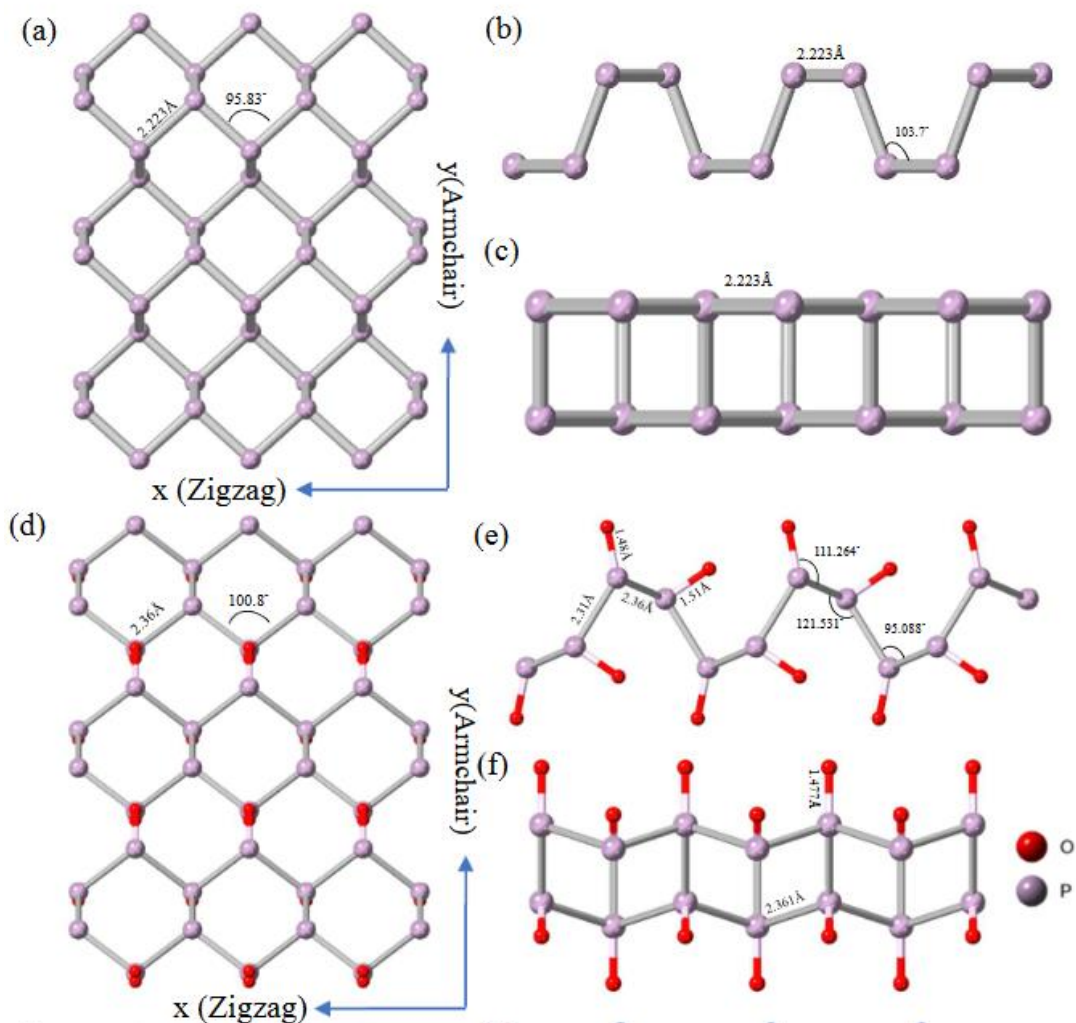
## 參、結果與討論

### 一、晶體結構

表 1 是三種晶體結構在 x 方向(zigzag)及在 y 方向(armchair)的晶格常數。圖片 2 為磷烯、氧化磷烯及氟化磷烯經由第一原理計算後收斂至最低能量之原子位置。可以發現在使用第一原理計算後，原本的磷烯結構會產生變形，在 y 方向從原本的水平扶手椅結構轉為如圖片 2(e)有傾斜角度的蜿蜒結構。在此我們仍分別定義 x 和 y 方向為 zigzag 方向及 armchair 方向。由圖片 2(d-i)我們看到雖然氟化磷烯和氧化磷烯的結構十分相近，但它們的鍵長和鍵角都有顯著地差異。

表 1 磷烯、氧化磷烯和氟化磷烯計算所得的晶格常數

材料	晶格常數 a(Å)	晶格常數 b(Å)
磷烯	3.3	4.57
氧化磷烯	3.64	5.17
氟化磷烯	3.4	4.62





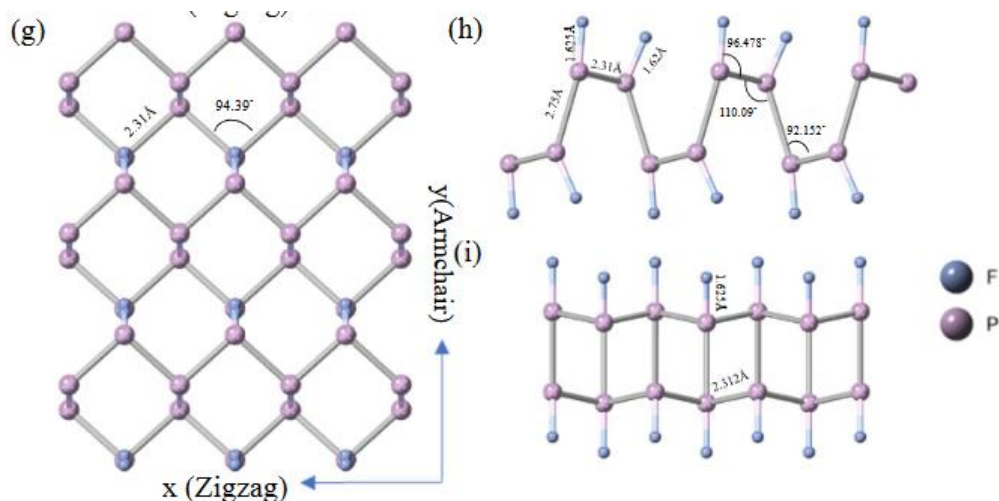


圖 2. 晶體在第一原理計算後得到的結構圖:磷烯之俯視圖(a)側視圖(b-c), 氧化磷烯之俯視圖(d)側視圖(e-f), 氟化磷烯之俯視圖(g)側視圖(h-i)

## 二、電子結構

圖片 3 為三種材料之能帶結構及能帶結構路徑。三種材料都是二維的矩形晶系結構, 在這三個材料中磷烯與氧化磷烯仍具有直接能隙之特性, 但氟化磷烯則是間接能隙結構。而磷烯能隙約為 0.86 eV, 在氧化之後能隙變小達 0.6 eV, 氟化後能隙則提高為 1.8 eV。

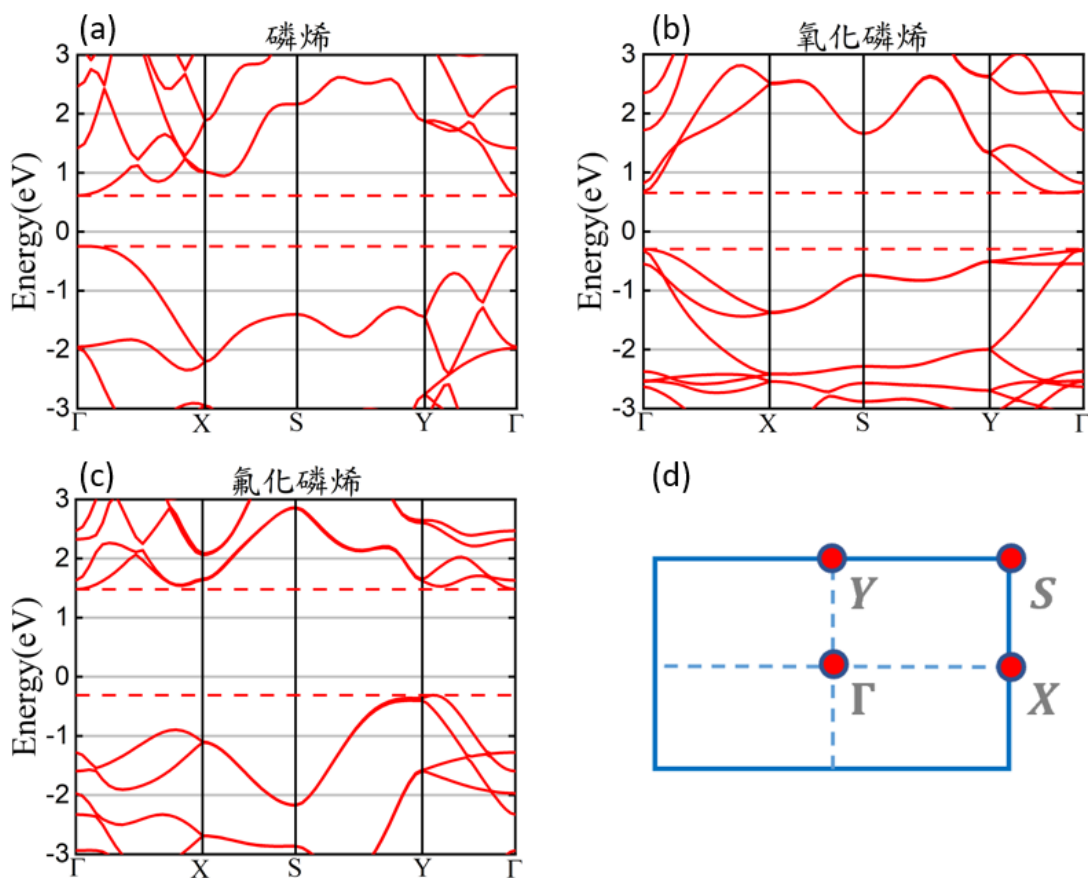


圖 3. 磷烯(a)、氧化磷烯(b)和氟化磷烯(c)之能帶結構及能帶結構路徑(d)

### 三、弛豫時間

表 2 為使用形變位勢理論所計算而得到之弛豫時間。可以觀察到氟化磷烯在價帶的弛豫時間明顯比氧化磷烯還長。這是因為氟化磷烯在價帶的兩方向的等效質量和形變位勢常數較氧化磷烯還小。此外氧化磷烯因為其彈性常數較磷烯和氟化磷烯還小使得其具有較短的弛豫時間。

**表 2** 三種材料在不同方向之弛豫時間計算結果

材料	能帶	x 方向( $10^{-14}$ s)	y 方向( $10^{-14}$ s)
磷烯	導帶	4.48	64.39
	價帶	38.92	16.37
氧化磷烯	導帶	8.04	9.55
	價帶	41.87	2.87
氟化磷烯	導帶	46.43	19.55
	價帶	130.41	355.81

註: x 方向為 zigzag 方向, y 方向為 armchair 方向, 單位皆為  $10^{-14}$ s

### 四、熱電特性

圖 4 為磷烯、氧化磷烯及氟化磷烯的熱電參數對費米能階作圖。半導體的費米能階和對應的載子濃度可以利用在材料中引入適當的摻雜來調整。當我們引入 N (P)型的摻雜時會在材料中引入電子(電洞)使得費米能階往導帶(價帶)移動, 並且增加電導率如圖 4a-c 所示。然而摻雜同時會造成賽貝克係數的下降(圖 4(d-f)) 因此我們能作的就是藉由適度地摻雜來調整費米能階以獲得最大的功率因子。由圖 4(g-i)所示, 對於 N (P)型半導體, 三種材料最佳化的費米能階皆是位於導帶邊緣(價帶邊緣)附近。

在圖 4 中可觀察到三種材料的電導率及功率因子都有明顯的方向性。磷烯在 armchair 方向電導率皆明顯高於 zigzag 方向, 而最佳功率因子出現於 N 型磷烯的 armchair 方向為  $0.36 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$ 。氧化磷烯在 zigzag 方向導電率高於 armchair 方向, 最佳功率因子在 P 型的 zigzag 方向為  $0.15 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$ 。P 型氟化磷烯導電率在 armchair 方向高於 zigzag 方向, N 型情況則相反。若比較不同方向的功率因子則是在 armchair 方向 P 型氟化磷烯有最佳的功率因子  $1.4 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$ 。此高異向性的特性主要是由 armchair 方向和 zigzag 方向電子弛豫時間有顯著的不同所造成。

比較三種材料特性, 在三種材料中 P 型的氟化磷烯有最優秀的功率因子, 為 P 型的磷烯及氧化磷烯的 9 倍。而 N 型的氟化磷烯的功率因子為  $0.35 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$ , 與 N 型的磷烯 ( $0.36 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-2}$ )接近但遠大於 N 型的氧化磷烯。我們知道功率因子就是賽貝克係數的平方乘以電導率。除了因為高弛豫時間導致電導率與其他材料相比約有一個數量級的差異之外, 我們可以由 3c 看到氟化磷烯的價帶的能帶邊緣並非在最高對稱  $\Gamma$  點, 而是在  $\Gamma$ -Y 的路徑上。此外其導帶邊緣雖然在  $\Gamma$  點, 其能量第二高和第三高的導帶邊緣與導帶邊緣十分接近。它們與導帶邊緣的能量差分別為 0.05 和 0.06eV。因此不論是 N 型或是 P 型氟化磷烯具有高能帶簡併(high band degeneracy)。這會使得電子的電導率和賽貝克係數同時提升造就其高的功率因子。

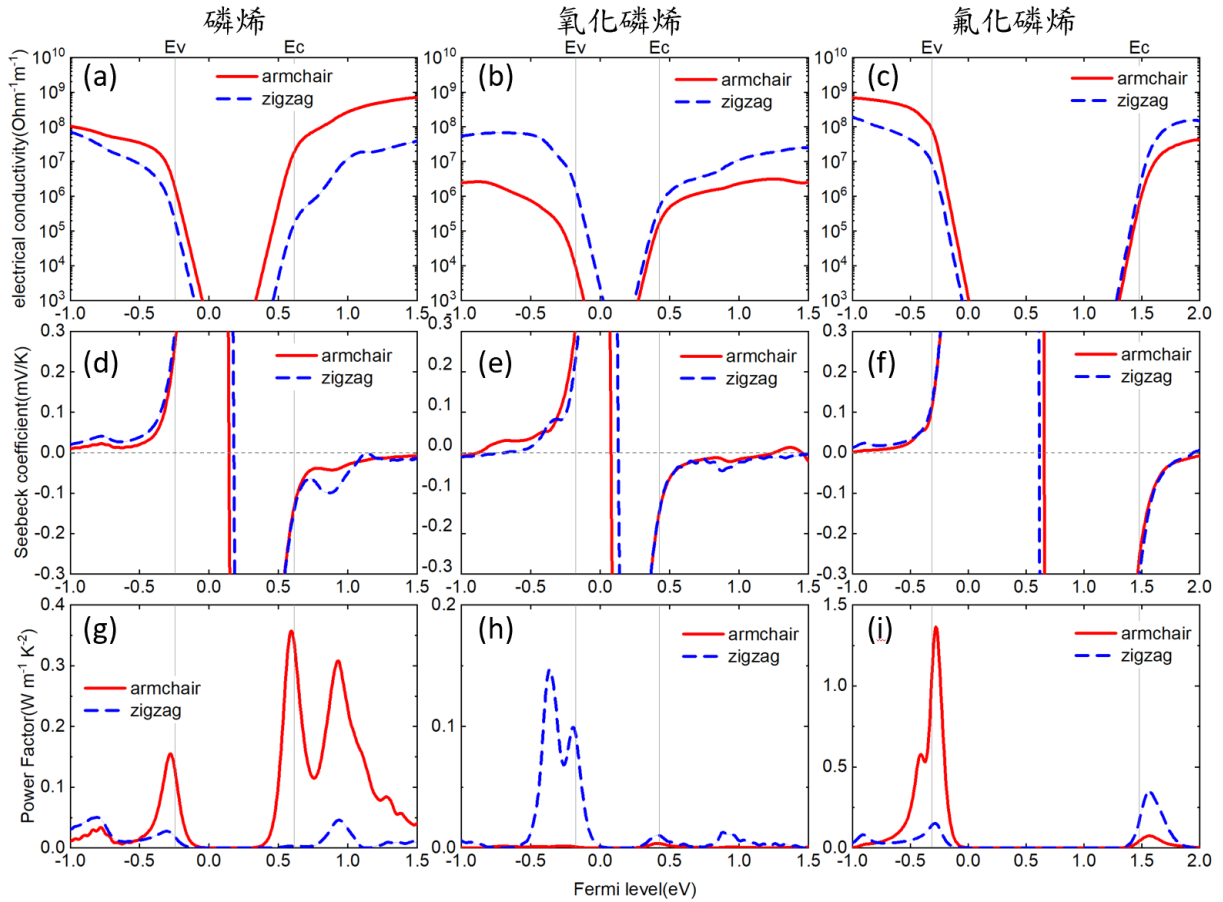


圖 4. (a-c)依序為磷烯、氧化磷烯和氟化磷烯之電導率對費米能階作圖、(d-f)為三種材料之賽貝克係數對費米能階作圖(g-i)為三種材料之功率因子對費米能階作圖，圖中 $E_c$ 和 $E_v$ 分別標示導帶和價帶邊緣的位置。

## 肆、結論

本研究使用第一原理計算磷烯、氧化磷烯及氟化磷烯材料結構和電子能帶，並引入形變位勢理論以計算弛豫時間，利用茲曼方程在弛豫時間近似下計算電導率與賽貝克係數。我們的結果顯示由於氟化磷烯具有高能帶簡併(high band degeneracy)與高弛豫時間之特性，其具有優秀的電導率、賽貝克係數及功率因子。代表氟化磷烯材料應該是非常好的熱電材料。接下來我們會進一步計算其熱導率和 ZT 值來驗證我們的想法。

## 伍、數據可用性聲明

支持此研究之數據可以在合理的情況下向通訊作者要求獲得。

## 陸、引用文獻

- Bardeen, J., & Shockley, W. (1950). Deformation Potentials and Mobilities in Non-Polar Crystals. *Physical Review*, 80(1), 72-80. <https://doi.org/10.1103/physrev.80.72>
- Fang, R., Cui, X., Stampfl, C., Ringer, S. P., & Zheng, R. (2020). High mobility in  $\alpha$ -phosphorene isostructures with low deformation potential. *Physical Chemistry Chemical*



- Physics*, 22(4), 2276-2282. <https://doi.org/10.1039/c9cp05828a>
- Fei, R., & Yang, L. (2014). Strain-Engineering the Anisotropic Electrical Conductance of Few-Layer Black Phosphorus. *Nano Letters*, 14(5), 2884-2889. <https://doi.org/10.1021/nl500935z>
- Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous Electron Gas. *Physical Review*, 136(3B), B864-B871. <https://doi.org/10.1103/physrev.136.b864>
- Hooshmand Zaferani, S., Jafarian, M., Vashae, D., & Ghomashchi, R. (2021). Thermal Management Systems and Waste Heat Recycling by Thermoelectric Generators—An Overview. *Energies*, 14(18), 5646. <https://doi.org/10.3390/en14185646>
- Kresse, G., & Furthmüller, J. (1996a). Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Computational Materials Science*, 6(1), 15-50. [https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0927-0256\(96\)00008-0](https://doi.org/https://doi.org/10.1016/0927-0256(96)00008-0)
- Kresse, G., & Furthmüller, J. (1996b). Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical Review B*, 54(16), 11169-11186. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>
- Kresse, G., & Hafner, J. (1993). Ab initio molecular dynamics for liquid metals. *Physical Review B*, 47(1), 558-561. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.47.558>
- Lawrence Livermore National Laboratory. (2021). *Estimated U.S. Energy Consumption in 2020*. [https://flowcharts.llnl.gov/content/assets/docs/2020\\_United-States\\_Energy.pdf](https://flowcharts.llnl.gov/content/assets/docs/2020_United-States_Energy.pdf)
- Lee, S., Song, J.-P., Kang, S.-H., & Kwon, Y.-K. (2021). Oxidation-enhanced thermoelectric efficiency in a two-dimensional phosphorene oxide. *Scientific Reports*, 11(1), 18525. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-97943-8>
- Li, L., Yu, Y., Ye, G. J., Ge, Q., Ou, X., Wu, H., Feng, D., Chen, X. H., & Zhang, Y. (2014). Black phosphorus field-effect transistors. *Nature Nanotechnology*, 9(5), 372-377. <https://doi.org/10.1038/nnano.2014.35>
- Long, M.-Q., Tang, L., Wang, D., Wang, L., & Shuai, Z. (2009). Theoretical Predictions of Size-Dependent Carrier Mobility and Polarity in Graphene. *Journal of the American Chemical Society*, 131(49), 17728-17729. <https://doi.org/10.1021/ja907528a>
- Monkhorst, H. J., & Pack, J. D. (1976). Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical Review B*, 13(12), 5188. <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.13.5188>
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Grigorieva, I. V., & Firsov, A. A. (2004). Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, 306(5696), 666-669. <https://doi.org/doi:10.1126/science.1102896>
- Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Physical Review Letters*, 77(18), 3865-3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- Saito, Y., Iizuka, T., Koretsune, T., Arita, R., Shimizu, S., & Iwasa, Y. (2016). Gate-Tuned Thermoelectric Power in Black Phosphorus. *Nano Letters*, 16(8), 4819-4824. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b00999>
- Wang, T.-H., & Jeng, H.-T. (2019). Topological insulator nanoribbons – A new paradigm for high thermoelectric performance. *Nano Energy*, 66, 104092. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2019.104092>
- Xi, J., Long, M., Tang, L., Wang, D., & Shuai, Z. (2012). First-principles prediction of charge mobility in carbon and organic nanomaterials [10.1039/C2NR30585B]. *Nanoscale*, 4(15), 4348-4369. <https://doi.org/10.1039/C2NR30585B>
- Zhang, J., Liu, H. J., Cheng, L., Wei, J., Liang, J. H., Fan, D. D., Jiang, P. H., Sun, L., & Shi, J. (2016). High thermoelectric performance can be achieved in black phosphorus [10.1039/C5TC03238E]. *Journal of Materials Chemistry C*, 4(5), 991-998. <https://doi.org/10.1039/C5TC03238E>