

بررسی خواص الکترونی و گرمایی بلور SnN-InO با روش نظریه تابعی چگالی

مجتبی اشهدی^۱، طاهره شعبانزاده حصار^۲

۱. گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان

۲. مرکز تحقیقات نانو، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی، مشهد

پست الکترونیکی: Tahereh.Shabanzade@alumni.um.ac.ir

(دریافت مقاله؛ دریافت نسخه نهایی:)

چکیده

در این پژوهش، با استفاده از نظریه تابعی چگالی، ویژگی‌های الکترونی و ترموالکتریکی بلور دوبعدی SnN-InO مورد مطالعه قرار گرفته است. نانوساختار SnN-InO، یک ماده ترموالکتریک لانه زنبوری دوبعدی با گاف نواری غیرمستقیم ۰.۵ eV است. با استفاده از ساختار الکترونی به محاسبه ضرایب تراپردی ترموالکتریکی نظیر ضریب سبیک که تعیین‌کننده اصلی خواص ترموالکتریکی است، ضریب رسانندگی الکتریکی و گرمایی الکترونی و معیار شایستگی پرداخته می‌شود. محاسبات نشان می‌دهند که ضریب سبیک با افزایش دما، کاهش می‌یابد و در محدوده تراز فرمی و انرژی‌های منفی، بیشترین مقدار را داراست. همچنین تغییرات معیار شایستگی نسبت به دما بسیار اندک است، بطوری‌که در بازه دمایی ۴۰۰ کلین به مقداری کمتر از ۰.۲، دستخوش تغییرات شده است. بنابراین نانوساختار SnN-InO، می‌تواند بعنوان یک ماده ترموالکتریک خوب با معیار شایستگی ۰.۹ در دمای اتاق مورد توجه قرار گیرد.

واژه‌های کلیدی: بلور دوبعدی SnN-InO، نظریه تابعی چگالی، ضریب سبیک، رسانندگی الکتریکی، رسانندگی گرمایی، معیار شایستگی، معادله

تراپرد بولتزمن

۱. مقدمه

دارند، توجه فراوانی را به خود جلب کرده‌اند. همچنین، مواد با ابعاد کم در مقایسه با مواد حجمی، بواسطه پراکندگی‌های مختلف توسط فونون‌ها، خواص ترموالکتریکی بهتری را نشان می‌دهند [۱، ۲]. عملکرد ماده ترموالکتریک توسط کمیت بدون بعد معیار شایستگی^۱ (ZT) اندازه‌گیری می‌شود، که به شکل زیر تعریف می‌گردد:

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

امروزه با توجه به مشکلات محیطی شدیدی که ناشی از سوزاندن سوخت‌های فسیلی است، تقاضا برای الکتریسیته در حال افزایش است و یافتن منابع سبز و جدید برای تولید الکتریسیته (برق) از اهمیت زیادی برخوردار است. در واقع، بسیاری از فعالیت‌های تحقیقاتی به این امر مهم اختصاص یافته است. در سال‌های اخیر، مطالعات بر روی مواد ترموالکتریکی که بر اساس نانوساختارها ساخته شده‌اند، به دلیل پتانسیل بالایی که در تبدیل انرژی گرمایی به انرژی الکتریکی و یا برعکس

تابعی چگالی و معادله ترابردی نیمه کلاسیکی بولتزمن مورد بررسی قرار می‌دهیم. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش دما ضریب سیبک و معیار شایستگی کاهش می‌یابند، بطوری‌که مقدار ضریب سیبک و معیار شایستگی در پتانسیل شیمیایی صفر ($\mu = 0 \text{ eV}$) بترتیب، از $840 \mu\text{V/K}$ و 1 در دمای 100 کلوین به مقدار $283 \mu\text{V/K}$ و 0.88 در دمای 500 کلوین می‌رسند. نکته مهم این است که، می‌توان ضریب سیبک، ضریب رسانندگی الکتریکی و معیار شایستگی را با توجه به نوع حامل‌های n و p ، به میزان قابل ملاحظه‌ای افزایش داد.

۲. روش محاسبات

در این مقاله ابتدا محاسبات اصول اولیه، با استفاده از کد pwscf و بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو^۱ که مبتنی بر نظریه تابعی چگالی^۲ (DFT) است، انجام می‌شوند [۱۱]. این نرم‌افزار ویژگی‌های حالت پایه نانوساختارها را بر پایه محاسبات خود-سازگار، شامل: چگالی حالت‌های الکترونی^۳ (Dos)، ساختار نواری، انرژی‌های ساختار، بهینه‌سازی و دیگر خواص را محاسبه می‌کند. برای تعیین پتانسیل همبستگی-تبادلی از تقریب شیب تعمیم یافته^۴ (GGA) که توسط پردیو، بورک و ارنزروهوف^۵ (PBE) پارامتریزه شده [۱۲]، استفاده شده است. برای بهینه‌سازی هندسه ساختار و دستیابی به وقت مناسب در محاسبات، از روش موزخورست-پک و انرژی قطع 60 ریدبرگ و با تعداد نقاط k در منطقه اول بریلوئن $(1 \times 12 \times 12)$ ، استفاده کرده‌ایم. برای جلوگیری از اندرکنش بین لایه‌ها در یاخته‌های مجاور، فاصله

که در این رابطه S ضریب سیبک، σ ضریب رسانندگی الکتریکی، $\kappa (= \kappa_e + \kappa_i)$ ضریب رسانندگی گرمایی (که در آن κ_e و κ_i بترتیب، رسانندگی گرمایی الکترون‌ها و رسانندگی گرمایی فونونی ناشی از ارتعاشات شبکه می‌باشند) و T دما می‌باشد. بدیهی است که هر چه مقدار ضریب عامل توان $(PF = S^2 \sigma)$ بالاتر و ضریب رسانندگی گرمایی (κ) پایین‌تر باشد، معیار شایستگی بهتر خواهد بود [۳]. در دهه‌ی گذشته، تحقیقات متعددی برای افزایش کارایی مواد ترموالکتریکی انجام شده است. کشف مواد جدید همچنان یک راهکار موثر برای تولید مواد ترموالکتریکی با عملکرد بالا است.

بعد از کشف گرافین بعنوان ماده‌ای با خواص شگفت‌انگیز [۴]، [۵]، مطالعات نظری و تجربی متعددی روی مواد دوبعدی دیگر در حال انجام است و در سال‌های اخیر برخی از این مواد دو بعدی جدید مورد بررسی قرار گرفته‌اند [۶، ۷]. از طرفی، ماهیت الکتریکی یک ماده دو بعدی نیز قابل تغییر است و می‌تواند از فاز عایق به فلز تغییر پیدا کند. به این ترتیب، یک ماده دو بعدی می‌تواند خصوصیات عایق، نیم‌رسانا، فلز، نیم‌فلز یا حتی ابررسانا را نشان دهد. در بین تمام مواد دو بعدی، نیم‌رساناهای دو بعدی از اهمیت خاصی برخوردارند. در این گونه مواد، ضریب سیبک و رسانندگی الکتریکی آن‌ها به شدت با تراکم حامل‌ها مرتبط می‌باشند [۸، ۹].

در مطالعه اخیر که بر پایه محاسبات اصول اولیه انجام شده است، یک گروه تحقیقاتی اثبات کردند که نانوساختار تک لایه SnN-InO می‌تواند وجود داشته باشد [۱۰]. طرح‌واره‌ای از این چنین نانوساختار در شکل ۱ نشان داده شده است. این ساختار از چهار زیرلایه تشکیل شده که هر زیرلایه شامل یک نوع اتم است. نمای بالای صفحه بصورت شش گوشه است که اتم‌های Sn و N در هر گوشه قرار گرفته‌اند و در نمای پایین صفحه نیز اتم‌های In و O به همان صورت قرار دارند. از طرفی به علت الکترونگاتیوی زیاد اتم O نسبت به In و همین‌طور N نسبت به Sn، باعث بوجود آمدن برهمکنش یونی بین آن‌ها در ترکیبات SnN و InO شده است. در این مقاله، با هدف کشف مواد ترموالکتریک با عملکرد بهتر، خواص الکترونی و ترموالکتریکی نانوساختار تک لایه دوبعدی SnN-InO را با استفاده از نظریه

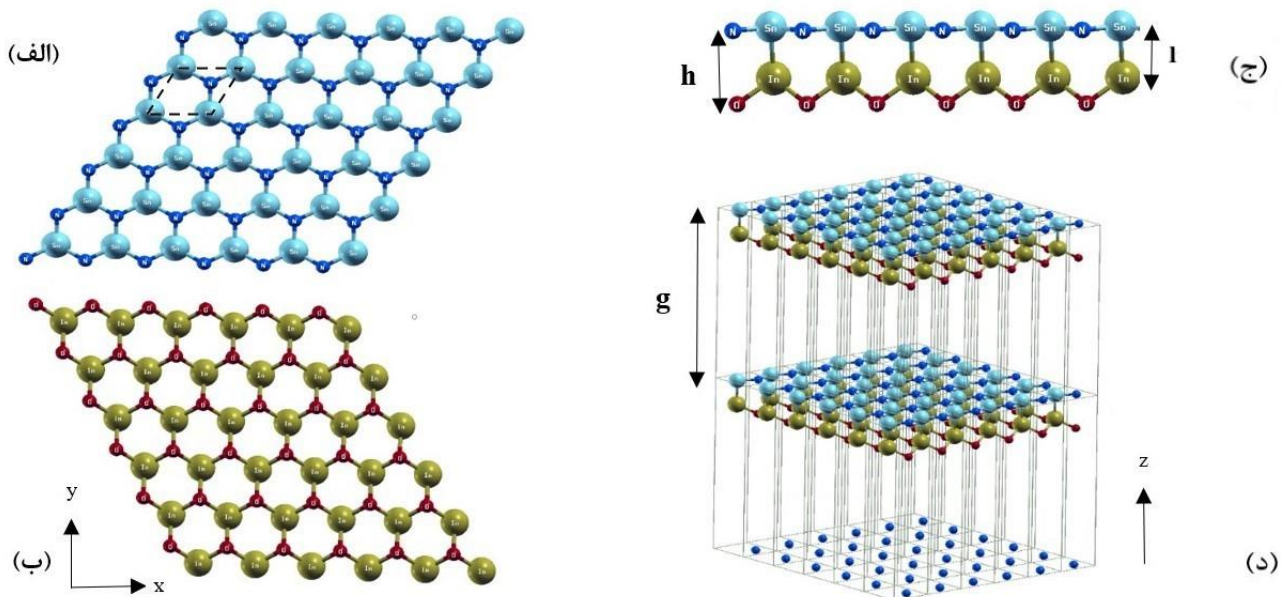
۱. Quantum Espresso

۲. Density functional theory

۳. Density of state

۴. Generalized Gradient Approximation

۵. Perdew-Burke-Ernzerhof



شکل ۱. (الف) نمای بالای صفحه، شامل سلول واحد ساختار تک لایه دوبعدی SnN-InO، (ب) نمای پایین صفحه (ج) نمای جانبی (h) ضخامت لایه‌ای و همچنین فاصله بین لایه‌های اتمی O و N، l فاصله بین لایه‌های اتمی Sn و In (صفحات بلوری) (د) صفحات بلوری (g فاصله بین صفحات بلوری).

جدول ۱. ثابت‌های شبکه بهینه‌سازی شده، ضخامت لایه‌ای، h گاف نواری، E_g و طول‌های پیوند ساختار تک لایه SnN-InO

	a=b (Å)	h(Å)	d_{Sn-N} (Å)	d_{In-O} (Å)	I_{Sn-In} (Å)	E_g (eV)
SnN-InO	۳٫۴۲	۴٫۴۹	۲٫۱۱	۲٫۱۳	۲٫۹۴	۰٫۵

دقیق به ساختار SnN-InO مشاهده می‌شود که این ساختار از دو صفحه شش ضلعی قلع- نیتروژن (شامل شش ضلعی‌های Sn-N با طول پیوند $d_{Sn-N}=2/11 \text{ \AA}$ و ایندیوم-اکسیژن (شامل شش ضلعی‌های In-O با طول پیوند $d_{In-O}=2/13 \text{ \AA}$) که توسط پیوندهای Sn-In با طول پیوند $I_{Sn-In}=2/94 \text{ \AA}$ متصل هستند، تشکیل شده است. طول پیوندهای محاسبه شده در این پژوهش با آنچه که برای تک لایه SnN [۱۴] و همچنین برای تک لایه InO [۱۵] گزارش شده است، توافق قابل قبولی دارند. نتایج در جدول ۱ ارائه شده است.

در شکل ۲ ساختار نواری الکترونی و طیف چگالی حالت‌ها الکترونی در راستاهای تقارنی Γ -M-K- Γ برای نانوساختار تک

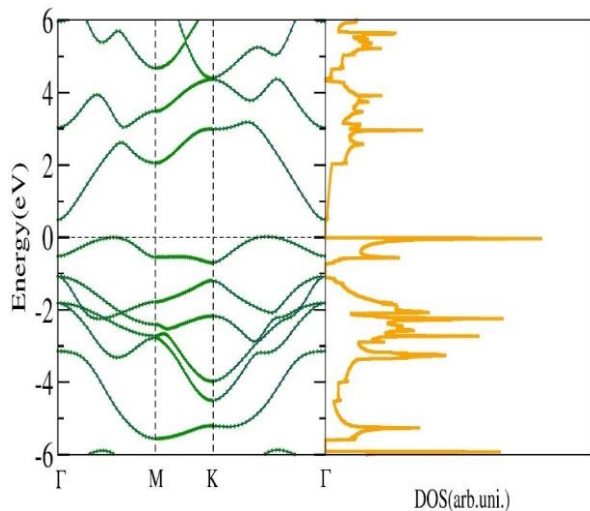
بین صفحات، $g=20 \text{ \AA}$ در نظر گرفته شده است. سپس، برای محاسبه ضرایب ترازبندی ترموالکتریکی از جمله: ضریب سبیک، ضریب رسانندگی الکتریکی، ضریب رسانندگی گرمایی، عامل توان و معیار شایستگی، از حل معادله نیمه کلاسیکی بولتزمن در تقریب زمان واهلس، توسط بسته محاسباتی BoltzTraP استفاده شده است [۱۳].

۳. خواص ساختاری و الکترونی

با توجه به فرآیند بهینه‌سازی، ساختار تک لایه دوبعدی SnN-InO در یک شبکه شش ضلعی با ثابت‌های شبکه $a=b=3/42 \text{ \AA}$ و با ضخامت لایه‌ای $h=4/49 \text{ \AA}$ به پایداری می‌رسد. با نگاهی

به ZT نزدیک می‌شود. در دماهای بسیار پایین، تعداد کمی از الکترون‌ها برانگیخته می‌شوند که منجر به رسانندگی گرمایی الکترونی کم می‌شود. بنابراین، ممکن است که رسانندگی گرمایی توسط سهم شبکه بیان شود به این معنی که جمله مربوط به رسانندگی گرمایی فونونی ناشی از ارتعاشات شبکه نقش عمده را در ZT بازی می‌کند. هنگامی که دما افزایش پیدا می‌کند، بویژه برای دماهای بالاتر از دمای اتاق، الکترون‌های بیشتری برانگیخته می‌شوند که منجر به افزایش رسانندگی الکترونی می‌شود، در حالی که سهم شبکه به دلیل افزایش پراکندگی‌های فونونی ناشی از ارتعاشات شبکه، کاهش می‌یابد. بنابراین، همان‌طور که دما به مقادیر بالاتر افزایش می‌یابد، نسبت ZT_e تخمین خوبی از ZT است [۲۰-۱۷].

در محاسبات تراپردی بولتزمن، ضریب سیبک، مستقل از زمان و اهلس τ است، در صورتی که رسانندگی الکترونی بطور خطی به τ وابسته است.

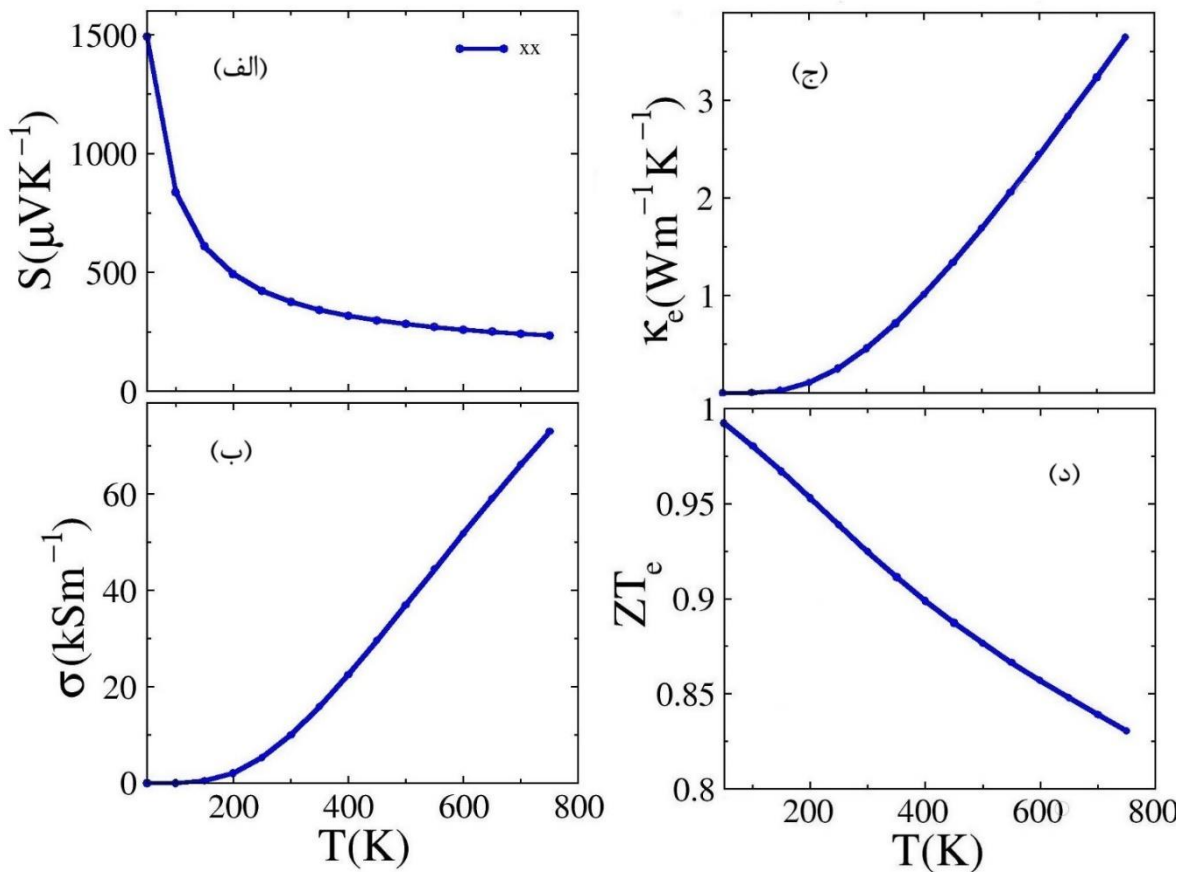


شکل ۲. ساختار نواری (سمت چپ) و چگالی حالت‌های الکترونی (سمت راست) نانو ساختار تک لایه SnN-InO با گاف نواری غیر مستقیم ۰/۵ eV در راستاهای تقارنی، $\Gamma(0, 0, 0)$ ، $M(0.5, 0.5, 0)$ ، $K(0.6, 0.3, 0)$ و $\Gamma(0, 0, 0)$ ، رسم شده است.

لایه دوبعدی SnN-InO، نشان داده شده است. همان‌طور که از شکل ۲ مشاهده می‌شود، این نانو ساختار رفتار نیم‌رسانا را از خود نشان می‌دهد. بطوری‌که، ماکزیمم نوار ظرفیت در مسیر Γ -M و مینیمم نوار رسانش در نقطه Γ قرار دارد که یک گاف نواری غیر مستقیم به میزان ۰/۵ eV را از خود نشان می‌دهد (مبدأ انرژی بطور دلخواه بعنوان بیشینه نوار ظرفیت انتخاب شده است). این گاف نواری از گاف‌های نواری مواد ترموالکتریک مرسوم (۰/۱ eV برای Bi_2Te_3 و ۰/۱۴ eV برای Sb_2Te_3) بزرگ‌تر است [۱۶]، که این تفاوت باعث ایجاد تغییرات قابل توجهی در خواص ترموالکتریکی می‌شود. ضرایب تراپردی عمدتاً به خواص الکترونی وابسته هستند، بنابراین گاف نواری بزرگ می‌تواند غلظت حامل‌های بار در نزدیکی سطح فرمی را کاهش دهد. این کاهش می‌تواند باعث افزایش ضریب سیبک شود. علاوه بر این، با استفاده از آرایش مناسب حامل‌های بار، می‌توان ضریب عامل توان و معیار شایستگی بالا را کسب کرد. همچنین با توجه به شکل ۲، چگالی حالت‌های الکترونی مطابقت کاملی با ساختار نواری الکترونی دارد که می‌تواند دلیلی بر صحت محاسبات انجام شده باشد. در این نمودار، چگالی حالت‌های الکترونی در زیر تراز فرمی و در محدوده نوار ظرفیت دارای قله تیزی می‌باشد. در محدوده گاف نواری، به علت عدم وجود توزیع انرژی‌های الکترونی در این ناحیه، چگالی حالت‌های الکترونی به مقدار صفر کاهش می‌یابد.

۴. خواص ترموالکتریکی

در ادامه، خواص ترموالکتریکی نانو ساختار تک لایه SnN-InO از جمله ضرایب تراپرد الکتریکی مانند ضریب رسانندگی الکتریکی، ضریب سیبک، ضریب رسانندگی گرمایی و کمیت بدون بعد معیار شایستگی ZT، را مورد مطالعه قرار می‌دهیم. رسانندگی گرمایی شامل دو مولفه رسانندگی گرمایی الکترونی و فونونی است که در این پژوهش تنها بخش الکترونی (ZT_e)، مورد بررسی قرار گرفته است. اگر سهم شبکه در رسانندگی گرمایی (κ_l) در مقایسه با جمله الکترونی (κ_e) ناچیز باشد، ZT_e

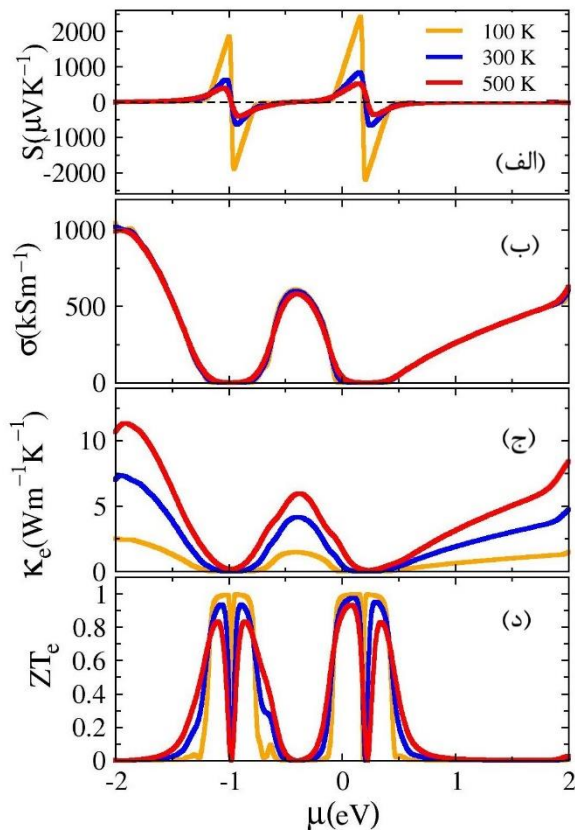


شکل ۳. نمودار تغییرات ضرایب ترابرد الکتریکی در طول راستای x بر حسب تابعی از دما و در تقریب زمان واهلش برای نانو ساختار تک لایه SnN-InO رسم شده است که در آن (الف) ضریب سیبک (ب) ضریب رسانندگی الکتریکی (ج) ضریب رسانندگی گرمایی و (د) معیار شایستگی می باشد. نتایج به ازای پتانسیل شیمیایی صفر ($\mu = 0$ eV) رسم شده است.

مشخص کننده سهم الکترون های ظرفیت و یا رسانش در ترابرد می باشد، می تواند روی ضریب سیبک و رسانندگی الکتریکی تأثیر بگذارد، بطوری که می توان با تغییر پتانسیل شیمیایی، مقدار ضریب سیبک را به میزان قابل توجهی تغییر داد. به دلیل اختلاف دما در دو سر یک ماده، الکترون ها از ناحیه با دمای بالاتر به ناحیه با دمای پایین تر حرکت می کنند که باعث بوجود آوردن یک جریان گرمایی می شود. در نتیجهی تجمع الکترون ها در دمای پایین و بارهای مثبت در دمای بالا، میدان ترموالکتریکی در جهت جریان گرمایی بوجود می آید که به این پدیده اثر سیبک می گویند. طبق رابطه $E = S \nabla T$ ، ضریب سیبک است که علامت آن نشان دهنده نوع حامل های بار است و هرچه برای یک ماده مقدار بالاتری داشته باشد، با یک

به علاوه، رسانندگی گرمایی الکترونی نیز طبق قانون ویدمان-فرانتس ($L = \frac{\kappa_e}{\sigma T}$)، ثابت لورنتس است) نیز وابسته به τ می باشد. البته با وجود متفاوت بودن سازوکار پراکندگی در رسانندگی الکتریکی و رسانندگی گرمایی، زمان های واهلش در این دو مورد یکسان نیست که در این مقاله، زمان واهلش ثابت 1×10^{-14} s در نظر گرفته می شود [۲۰، ۲۱]. از طرفی، با توجه به وابستگی زیادی که بین این ضرایب با حامل های بار (n) وجود دارد، بطوری که با افزایش حامل های بار، ضریب سیبک کاهش و ضرایب رسانندگی الکتریکی و گرمایی افزایش می یابند، در نتیجه معیار شایستگی که با مجذور ضریب سیبک رابطه مستقیم دارد، با افزایش حامل ها، کاهش می یابد. از آنجایی که مکان μ (پتانسیل شیمیایی) در ساختار نواری

و رسانندگی گرمایی الکترونی مطابقت دارد. در شکل ۳ (د) نمودار تغییرات معیار شایستگی بر حسب دما رسم شده است. مشابه رفتار شکل ۳ (الف) برای ضریب سیبک، معیار شایستگی نیز با افزایش دما کاهش می‌یابد. بطوری‌که مقدار معیار شایستگی در پتانسیل شیمیایی صفر ($\mu = 0$ eV) از ۱ در دمای ۱۰۰ کلین به مقدار حدود ۰/۸۸ در دمای ۵۰۰ کلین می‌رسد.



شکل ۴. نمودار تغییرات ضرایب ترابرد الکتریکی در دماهای مختلف بر حسب پتانسیل شیمیایی، برای نانو ساختار تک لایه SnN-InO رسم شده است که در آن (الف) ضریب سیبک (ب) ضریب رسانندگی الکتریکی (ج) ضریب رسانندگی گرمایی الکترونی و (د) معیار شایستگی می‌باشد.

در شکل ۴ نمودار تغییرات ضرایب ترابرد الکتریکی در دماهای مختلف (۱۰۰، ۳۰۰ و ۵۰۰ کلین) بر حسب پتانسیل شیمیایی برای نانو ساختار SnN-InO رسم شده است. از آنجایی‌که پتانسیل شیمیایی $\mu = 0$ eV در بالاترین نوار ظرفیت این نانو ساختار انتخاب شده است، پتانسیل شیمیایی مثبت (منفی)

اختلاف دمایی اندک می‌توان ولتاژ بالاتری تولید کرد. با توجه به اینکه SnN-InO یک بلور دوبعدی است، مولفه S_x در راستای z را بدلیل کوچک بودن نسبت به دو مولفه دیگر در نظر نمی‌گیریم. همچنین داده‌ها نشان می‌دهند، ضرایب ترابرد برای راستای x و y با هم برابرند، که نشان‌دهنده همسانگرد بودن بلور است و ما در محاسباتمان، همان‌طور که در شکل ۳ هم نشان داده شده است، نتایج را فقط در طول راستای x در نظر خواهیم گرفت. شکل ۳ (الف) تغییرات ضریب سیبک بر حسب دما را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشخص است، با افزایش دما ضریب سیبک کاهش می‌یابد، بطوری‌که مقدار ضریب سیبک، از $840 \mu V/K$ در دمای ۱۰۰ کلین به مقدار $283 \mu V/K$ در دمای ۵۰۰ کلین می‌رسد. این رفتار با نتایج گزارش شده در مراجع [۲۰، ۲۲]، توافق قابل قبولی دارند.

مطابق شکل ۳ (ب) رسانندگی الکتریکی تا دمای نزدیک ۲۰۰ کلین صفر است و بعد از آن با افزایش دما بصورت تقریباً خطی افزایش می‌یابد. بطوری‌که، در محدوده دمایی ۳۰۰ تا ۸۰۰ کلین، هنگامی که حامل‌های بار بیشتری در اثر افزایش دما برانگیخته می‌شوند، افزایش سریعی در رسانندگی الکتریکی مشاهده می‌شود.

در جامدات رسانندگی گرمایی در اثر گرادیان دمایی اتفاق می‌افتد، بطوری‌که الکترون‌ها و فونون‌ها عامل ایجاد جریان گرمایی بین نواحی سرد و گرم هستند. در نتیجه، چگالی جریان گرمایی (مقدار انرژی گرمایی است که در واحد زمان از واحد سطح عمود بر جهت جریان عبور می‌کند) طبق رابطه $J_q = -\kappa \nabla T$ در خلاف جهت گرادیان دمایی که بواسطه اختلاف دمای دو سر ماده (الکترون‌ها از ناحیه با دمای بالاتر به ناحیه با دمای پایین‌تر حرکت می‌کنند) ایجاد می‌شود، خواهد بود. در شکل ۳ (ج) نمودار تغییرات رسانندگی گرمایی الکترونی، بر حسب دما برای نانو ساختار SnN-InO رسم شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، رسانندگی گرمایی الکترونی تقریباً تا دمای ۲۰۰ کلین مقدار صفر را نتیجه می‌دهد و به ازای دمای بیشتر از ۲۰۰ کلین، این ضریب بصورت خطی افزایش پیدا می‌کند. این رفتار با افزایش رسانندگی الکتریکی نشان داده شده در شکل ۳ (ب) به دلیل رابطه متناسب بین رسانندگی الکتریکی

p حامل‌ها، بترتیب مقدار ۱ و ۰٫۹ را نشان می‌دهد، که نشان دهنده عملکرد خوب SnN-InO در دمای اتاق است. همچنین تغییرات معیار شایستگی نسبت به دما بسیار اندک است، بطوری‌که در بازه دمایی ۴۰۰ کلوین به مقداری کمتر از ۰٫۲، دستخوش تغییرات شده است.

۵. نتیجه‌گیری

در این پژوهش، ویژگی‌های الکترونی و ترموالکتریکی بلور SnN-InO توسط محاسبات اصول اولیه، با استفاده از بسته نرم‌افزاری کوانتوم اسپرسو در تقریب شیب تعمیم‌یافته GGA، مورد مطالعه قرار گرفتند. این نانو ساختار همسانگرد بوده و دارای شبکه شش‌گوشی با ثابت شبکه 3.42\AA و متشکل از چهار زیر لایه است. گاف نواری این ساختار غیر مستقیم و برابر با 0.5 eV محاسبه شده است. نتایج، خواص ترموالکتریک برجسته‌ای برای این نانو ساختار را نشان می‌دهد. بطوری‌که می‌توان ضریب سیبک بزرگ، رسانندگی‌های گرمایی پایین و معیار شایستگی بالایی را برای این نانو ساختار بدست آورد. بنابراین، می‌توان انتظار داشت که این ماده نامزد خوبی برای مواد ترموالکتریک با کارایی بالا می‌باشد. همچنین، نانو ساختار SnN-InO ویژگی‌های نسبی برجسته‌ی ترموالکتریکی را از خود نمایش می‌دهد، بطوری‌که مقدار ضریب سیبک و معیار شایستگی در دمای اتاق و برای پتانسیل شیمیایی صفر بترتیب، $376\text{ }\mu\text{V/K}$ و 0.9 به‌دست آمدند.

متناظر با آلایش نوع n (p) حامل‌های بار است. همان‌طور که در شکل ۴ (الف) نشان داده شده است، ضریب سیبک در محدوده کوچکی در اطراف $\mu=0\text{ eV}$ و $\mu=-1\text{ eV}$ تغییرات زیادی دارد، بویژه برای $\mu=0\text{ eV}$ ، می‌توان مقدار قابل توجهی از ضریب سیبک را از طریق آلایش حامل‌های نوع n یا p بدست آورد. همچنین، بیشینه مقدار ضریب سیبک برای این نانو ساختار با افزایش دما کاهش می‌یابد بطوری‌که مقدار آن از $2390\text{ }\mu\text{V/K}$ در دمای ۱۰۰ کلوین به مقدار $522\text{ }\mu\text{V/K}$ در دمای ۵۰۰ کلوین می‌رسد.

نمودار تغییرات رسانندگی الکتریکی نانو ساختار SnN-InO در شکل ۴ (ب) رسم شده است. نمودار تقریباً مقدار مستقل از دما را نشان می‌دهد. همچنین، می‌توان با افزایش نوع آلایش (n یا p) رسانندگی الکتریکی را تغییر داد، بطوری‌که بیشینه مقدار رسانندگی الکتریکی در آلایش نوع p حامل‌ها به میزان 1038 kS/m اتفاق می‌افتد که در آن S واحد زیمنس (واحد رسانندگی الکتریکی) می‌باشد.

در شکل ۴ (ج) نمودار تغییرات رسانندگی گرمایی الکترونی برحسب تابعی از پتانسیل شیمیایی برای نانو ساختار SnN-InO در دماهای مختلف، بمنظور بهینه‌سازی عملکرد حرارتی این نانو ساختار، رسم شده‌اند. همان‌طور که مشاهده می‌شود، با افزایش دما، ضریب رسانندگی گرمایی الکترونی، افزایش می‌یابد، بطوری‌که برای $\mu=-2\text{ eV}$ مقدار آن از $2.5\text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ در دمای ۱۰۰ کلوین به مقدار $11.3\text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ در دمای ۵۰۰ کلوین می‌رسد [۲۳]. در محدوده اطراف $\mu=0\text{ eV}$ و $\mu=-1\text{ eV}$ با توجه به نبود هیچ چگالی حالت الکترونی، شکل ۲ دیده شود، مقدار رسانندگی گرمایی الکترونی، مشابه نمودار شکل ۴ (ب) برای رسانندگی الکتریکی، تقریباً صفر است.

همان‌طور که از شکل ۴ (د) مشاهده می‌شود، مقدار ZT_e این ترکیب در مقایسه با نمودار ضریب سیبک، ضریب رسانندگی الکتریکی و ضریب رسانندگی گرمایی الکترونی، در محدوده کوچکی اطراف $\mu=0\text{ eV}$ و $\mu=-1\text{ eV}$ به بیشینه مقدار خود می‌رسد. مقدار معیار شایستگی بزرگ‌تری در دمای ۱۰۰ کلوین و 300 کلوین مشاهده می‌شود، بطوری‌که برای آلایش نوع n و

1. N F Hinsche, *et al.*, *Phys. Rev. B* **86** (2012) 085323(13).
2. G Shi and E Kioupakis, *J. Appl. Phys.* **117** (2015) 065103(10).
3. G J Snyder and E S Toberer, *Nat. Mater.* **7** (2008) 105.
4. K S Novoselov, *et al.*, *Science* **306** (2004) 666.
5. H Sahin, S Ciraci, *Phys. Rev. B* **84** (2011) 035452(7).
6. S Zhang, *et al.*, *Nano Lett.* **17** (2017) 3434.
7. S Zhang, *et al.*, *Chem. Soc. Rev.* **47** (2018) 982.
8. H J Goldmid, *Semicond. Semimet.* **69** (2001) 1.
9. J C Zheng, *Front. Phys. China* **3** (2008) 269.
10. D R Zhu, *et al.*, *Phys. E: Low Dimens. Syst. Nanostructures* **124** (2020) 114214.
11. P Giannozzi, *et al.*, *J. Phys. Condens. Matter* **21** (2009) 395502.
12. J P Perdew, K Burke, and M Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996) 3865.
13. G K H Madsen and D. J. Singh, *Comput. Phys. Commun.* **175** (2006) 67.
14. A K Bhojani, *et al.*, *J. Appl. Phys.* **135** (2024) 095106.
15. R B d Santos, *et al.*, *CrystEngComm* **23** (2021) 6661.
16. N F Hinsche, *et al.*, *Phys. Rev. B* **86** (2012) 085323.
17. N Gaonkar and R G Vaidya, *Phys. Lett. A* **384** (2020) 126912.
18. L D Zhao, *et al.*, *Nature* **508** (2014) 373.
19. B Peng, *et al.*, *Sci. Rep.* **6** (2016) 20225(10).
20. G Ding, G Gao, K Yao, *Sci. Rep.* **5** (2015) 9567.
21. S Yabuuchi, *et al.*, *Appl. Phys. Express* **6** (2013) 025504.
22. J J Gong, *et al.*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18** (2016) 16566.
23. S Ouardi, *et al.*, *Phys. Rev. B* **82** (2010) 085108.