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



چکیدہ

در این پژوهش، با استفاده از نظریه تابعی چگالی، ویژگی های الکترونی و ترموالکتریکی بلور دوبعدی SnN-InO مورد مطالعه قرار گرفته است. نانوساختار SnN-InO، یک ماده ترموالکتریک لانه زنبوری دوبعدی با گاف دواری غیرمستقیم ۵۷ م، است. با استفاده از ساختار الکترونی به محاسبه ضرایب ترابردی ترموالکتریکی نظیر ضدیب سبک که تعیینکننده اصلی خواص ترموالکتریکی است، ضریب رسانندگی الکتریکی و گرمایی الکترونی و معیار شایستگی پرداخته میشود. محاسبات نشان میدهند که ضریب سیبک با افزایش دما، کاهش مییابد و در محدوده تراز فرمی و انرژی های منفی، بیشترین مقدار را داراست. همچنین تغییرات معیار شایستگی نسبت به دما بسیار اندک است، بطوریکه در بازه دمایی ۱۹۰۰ کلوین به مقداری کمتر از ۲۰، دستخوش تغییرات شده است بنابراین نانوساختار SnN-InO میتواند بعنوان یک ماده ترموالکتریک در بازه دمایی معیار شایستگی ۸۰در دمای اتاق مورد توجه قرار گیرد.

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

۱. مقدمه

امروزه با توجه به مشکلات محیطیِ 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 امرِ 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

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 مادهٔ ترموالکتریک توسط کمیت بدون بعد معیار شایستگی (ZT) اندازه گیری می شود، که به شکل زیر تعریف می گردد:

$$ZT = \frac{S^2 \sigma}{\kappa} T \tag{1}$$

1. Figure of merit

که در این رابطه S ضریب سیبک، σ ضریب رسانندگی الکتریکی، (۲۹+۲۵=)۲ ضریب رسانندگی گرمایی (که در آن ۲۵ و ۲۸ بترتیب، رسانندگی گرمایی الکترونها و رسانندگی گرمایی فونونی ناشی از ارتعاشات شبکه میباشند) و T دما میباشد. PF=S²σ) بدیهی است که هر چه مقدار ضریب عامل توان (PF=S²σ) بلاتر و ضریب رسانندگی گرمایی (۲) 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 پالا است.

بعد از کشف گرافین بعنوان ملامای 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 می تواند از فاز عایق به فلز تغییر پیدا کند. به این تر تیب دیک ماده دو بعدی می تواند خصوصیات عایق، نیم رسانا، قلز، نیم فلز یا حتی ابررسانا را نشان دهد. در بین تمام مواد دو بعدی، نیم رساناهای دو بعدی از اهمیت خاصی برخوردارند. در ایس گونه مواد، ضریب سیبک و رسانندگی الکتریکی آنها به شدت با تراکم حاملها مرتبط می باشند [۸ ۹].

در مطالعه اخیری که بر پایه محاسبات اصول اولیه انجام شده است، یک گروه تحقیقاتی اثبات کردند که نانوساختار تک لایه SnN-InO می تواند وجود داشته باشد [۱۰]. طرحواره ای 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 گوشی است که اتمهای Sn و N در هر گوشه قرار گرفته اند 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 همین طور N نسبت به Sn و Nr. باعث بوجود آمدن برهمکنش یونی بین آنها در ترکیبات In و Sn 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

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(μ = ۰ eV) بترتیب، از ۲۸۳ μV/K و ۱ در دمای ۱۰۰ کلوین به مقدار ۲۸۳ μV/K و ۸۸٬۰ در دمای ۵۰۰ کلوین می-رسند. نکته مهم این است که، میتوان ضریب سیبک، ضریب رسانندگی الکتریکی و معیار شایستگی را با توجه به نوع حاملهای n و q ، 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 اسپرسو¹ که مبتنی بر نظریه تابعی چگالی^۲ (DFT) است، انجام می شوند [۱۱]. این نرمافزار ویژ-گیهای 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 می کند. برای تعیین پنانسیل همبستگی- تبادلی از تقریب شیب تعمیم یافته^۴ (GGA) که توسط پردیو، بورک و ارنزرهوف⁶ تعمیم یافته^۴ (GGA) که توسط پردیو، بورک و ارنزرهوف ایرامتریزه شده [۲۱]، استفاده شده است. برای بهینه-سازی هندسه ساختار و دستیابی به دقت مناسب در محاسبات، از روش مونخورست- پک و انرژی قطع ۶۰ ریدبرگ و با تعداد نقاط k در منطقه اول بریلوئیز ۱×۲۱×۱۲، استفاده کردهایم. برای

- ۲. Quantum Espresso
- ۳. Density functional theory
- ۴. Density of state
- ۵. Generalized Gradient Approximation
- ۶. Perdew-Burke-Ernzerhof



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

ای پیوند ساختار تک لایه SnN-InO	ی، E _g ، و طول ه	ضخامت لايهاي، h گاف نو	جدول ۱. ثابتهای شبکه بهینهسازی شده،
---------------------------------	-----------------------------	------------------------	-------------------------------------

	a=b (Å)	h(Å)	d _{Sn-N} (Å)	dIn-O (Å)	lsn-In(Å)	Eg(eV)
SnN-InO	4.4Y	4,49	۲/۱۱	۲٫۱۳	۲/۹۴	۵, ۰

بین صفحات، Å ۲۰Å =g در نظر گرفته شده است. سپس، برای محاسبه ضرایب ترابردی ترموالکتریکی از جمله: ضریب سیبک، ضریب رسانندگی الکتریکی، ضریب رسانندگی گرمایی، عامل توان و معیار شایستگی، از حل معادله نیمه کلاسیکی بولتزمن در تقریب زمان واهلش، توسط بسته محاسباتی BoltzTraP استفاده شده است [۱۳].

۳. خواص ساختاری و الکترونی
۶۱۸ با توجه به فرآیند بهینهسازی، ساختار تکلایه دوبعدی -SnN در یک شبکه a=b=۳٬۴۲Å
۹ با ثابتهای شبکه شش ضلعی با ثابتهای شبکه InO و با ضخامت لایهای h=۴٬۴۹Å

دقیق به ساختار SnN-InO مشاهده می شود که این ساختار از دو صفحه شش ضلعی قلع – نیتروژا (شامل شش ضلعی های Sn-N با طول پیوند Ådsn-N=۲/۱۱Å و لیدیوم – اکسیژن (شامل شش ضلعی های In-O با طول پیوند Ådsn-N=۵ متصل هستند، پیوندهای Is-In با طول پیوند Åls-In=۲/۹۴ متصل هستند، تشکیل شده است. طول پیوندهای محاسبه شده در این پژوهش با آنچه که برای تک لایه SnN [۲۴] و همچنین برای تک لایه InO [۵۵] 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 ۲-M-K-۲ برای نانوساختار تک به ZT نزدیک می شود. در دماهای بسیار پایین، تعداد کمی از الکترونها برانگیخته می شوند که منجر به رسانندگی گرمایی الکترونی کم می شود. 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 می کند. هنگامی که دما افزایش پیدا می کند، بویژه برای دماهای بالاتر از دمای اتاق، الکترونهای بیشتری برانگیخته می شوند که منجر به افزایش رسانندگی الکترونی می شود، در حالی که سهم شبکه به دلیل افزایش پراکندگی های فونونی ناشی از ارتعاشات شبکه، کاهش می یابد. بنابراین، همان طور که دما به مقادیر بالاتر افزایش می یابد، نسبت عTe

در محاسبات ترابردی بولتزمن، ضریب سیبک، مستقل از زمان واهلش r است، در صورتی که رسانندگی الکتریکی بطور خطی به r 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 eV ۵٫۰ در راستاهای تقارنی، (۰ ،۰ ،۰) ، نواری میده (۰ ،۵٫۰ ،۵٫۰) م و (۰ ،۰ ،۰) ، 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–Μ و مینیمم نوار رسانش در نقطه ۲ قرار دارد که یک گاف نواری غیر مستقیم به میزان eV ۵٬۵ را از خود نشان میدهد (مبدأ انرژى بطور دلخواه بعنوان بيشينه نوار ظرفيت انتخاب شده است). این گاف نواری از گافهای نواری مواد ترموالکتریک مرسوم (eV ۰/۱ برای Bi₂Te₃ و ۱۴ eV برای Sb2Te3) بزرگتر سبت [۱۶]، که این تفاوت باعث ایجاد تغییرات قابل توجهی در خواص ترموالکتریکی میشود. ضرايب ترابردي عمدتاً به خواص الكتروني وابسته هستند، بنابراین گاف نواری بزرگ میتواند غلظت حامل های بار در نزدیکی سطح فرمی را کاهش دهد. این کاهش می تواند باعث افزایش ضریب سیبک شود. علاوه بر این، با استفاده ان آلایش مناسب حاملهای بار، میتوان ضریب عامل توار و معیار شایستگی بالا را کسب کرد. همچنین با توجه به شکل ۲، چگالی حالتهای الکترونی مطابقت کاملی با ساحتار نواری الکترونی دارد که می تواند دلیلی بر صحت محاسبات انجام شد 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 كاهش مي يابد.

۴. خواص ترموالکتریکی

در ادامه، خواص ترموالکتریکی نانوساختار تک لایه SnN-InO از جمله ضرایب ترابرد 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)، مورد بررسی قرار گرفته است. اگر سهم شبکه در رسانندگی گرمایی (۲۵) در مقایسه با جمله الکترونی (۲۵) ناچیز باشد، عZT



شکل۳. نمودار تغییرات ضرایب ترابرد الکتریکی در طول راستای x برحسب تابعی از دما و در تقریب زمان واهلش برای نانو سـاختار 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 میباشد. نتایج به ازای پتانسیل شیمیایی صفر (µ = • eV) رسم شده است.

به علاوه، رسانندگی گرمایی الکترونی نیز طبق قانون ویدمان – فرانتس ($\frac{k_e}{\sigma T}$ L ثابت لورنتس است) نیز وابسته به τ می – باشد. البته با وجود متفاوت بودن سازوکار پراکندگی در رسانندگی الکتریکی و رسانندگی گرمایی، زمانهای واهلش در این دو مورد یکسان نیست که در این مقاله، زمان واهلش ثابت این دو مورد یکسان نیست که در این مقاله، زمان واهلش ثابت مالا در نظر گرفته میشود [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

مشخص کننده سهم الکترون های ظرفیت و یا زمانش در ترابرد می باشد، می تواند روی ضریب سیم و رسانندگی الکتریکی تأثیر بگذارد، بطوری که می توان با تغییر پنانسیل شیمیایی، مقدار ضریب سیبک را به میزان قابل توجهی تغییر داد. به دلیل اختلاف دما در دو سر یک ماده، الکترون ها ز 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 مشود. در نتیجهی تجمع الکترون ها پدیده اثر سیبک می گویند. طبق رابطه TVS-3 ک می ریب سیبک است که علامت آن نشان دهنده نوع حامل های بار است و هرچه برای یک ماده مقدار بالاتری داشته باشد، با یک 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(eV • = µ) از ۱ در دمای ۱۰۰ کلوین به مقدار حدود ۸۸٬۰ در دمای ۵۰۰ کلوین میرسد.



شکل ۴. نمودار تغییرات ضرایب نرابرد الکتریکی در دماهای مختلف بر حسب پتانسیل شیمیایی، برای نانو ماختار 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 کلوین) برحسب پتانسیل شیمیایی برای نانوساختار SnN-InO رسم شده است. از آنجاییکه پتانسیل شیمیایی eV ها در بالاترین نوار ظرفیت این نانوساختار انتخاب شده است، پتانسیل شیمیایی مثبت (منفی) اختلاف دمایی اندک می توان ولتاژ بالاتری تولید کرد. با توجه به اینکه SnN-InO یک بلور دوبعدی است، مولفه S در راستای z را بدلیل کوچک بودن نسبت به دو مولفه دیگر در نظر نمی-گیریم. همچنین داده ها نشان می دهند، ضرایب ترابرد برای راستای X و Y با هم برابرند، که نشان دهنده همسانگرد بودن بلور است و ما در محاسباتمان، همان طور که در شکل π هم نشان داده شده است، نتایج را فقط در طول راستای X در نظر دما را نشان می دهاند همان طور که مشخص است، با افزایش دما ضریب سیبک کاهش می یابد، بطوری که مقدار ضریب سیبک، از فریب سیبک ماهش می یابد، بطوری که مقدار ضریب سیبک، از مریب میرک (الف) ماه در مای ۱۰۰ کارین به مقدار مراب مار با نتایج گزارش شده در مراجع ۵۰۰ کلوین می رسد. این رفتار با نتایج گزارش شده در مراجع ۲۰، ۲۲]، توافق قابل قبولی دارند.

مطابق شکل۳ (ب) رسانندگی الکتریکی تا دمای نزدیک ۲۰۰ کلوین صفر است و بعد از آن با افزایش دما بصورت تقریباً خطی افزایش مییابد. بطوریکه، در محدوده دمایی مع تا مم کلوین، 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 می-افتد، بطوری که الکترون ها و فونون ها 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 می کند) طبق رابطه ی TX۲ - = ر خلاف جهت گرادیان دمایی که بواسطه اختلاف دمای دو سر ماده (الکترون ها از ناحیه با دمای بالاتر به ناحیه با دمای پایین تر حرکت می کنند) ایجاد می شود، خواهد بود. در شکل ۳ رج) نمودار تغییرات رسانندگی گرمایی الکترونی، بر حسب دما مشاهده می شود، رسانندگی گرمایی الکترونی تقریباً تا دمای از ۲۰۰ کلوین مقدار صفر را نتیجه می دهد و به ازای دمای بیشتر از می در افزایش رسانندگی الکتریکی نشان داده شده در این رفتار با افزایش رسانندگی الکتریکی نشان داده شده در این رفتار با افزایش رسانندگی الکتریکی نشان داده شده در

متناظر با آلایش نوع n (p) حامل های بار است. همان طور که در شکل ۴ (الف) نشان داده شده است، ضریب سیبک در محدوده کوچکی در اطراف eV $= \mu$ و eV $= -\mu$ تغییرات زیادی دارد، بویژه برای eV $= -\mu$ می توان مقدار قابل توجهی از ضریب سیبک را از طریق آلایش حامل های نوع n یا p بدست آورد. همچنین، بیشینه مقدار ضریب سیبک برای این نانوساختار با افزایش دما کاهش می یابد بطوری که مقدار آن از ۵۰% کلوین در دمای ۱۰۰ کلوین به مقدار X۲۳ مراح در دمای ۵۰۰ کلوین می رسد.

نمودار تغییرات رسانناگی الکتریکی نانوساختار 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، نظوریکه بیشینه مقدار رسانندگی الکتریکی در آلایش نوع p حاملها به میزان ۱۰۳۸kS/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 نانوساختار SnN-InO در دماهای مختلف، بمنظور بهینهسازی عملکرد حرارتی این نانوساختار، رسم شدهاند. همانطور که مشاهد می شود، با افزایش دما، ضریب رسانندگی گرمایی الکترونی، افزایش می-یابد، بطوری که برای ۲۰ eV مقدار آن از از $^{-1}K^{-1}$ Wm یابد، بطوری که برای ۲۰ eV مقدار آن از از از $^{-1}K^{-1}$ Wm در دمای ۱۱/۳ Wm در دمای ۱۰۰ کلوین به مقدار $^{-1}K^{-1}$ در دمای ۰۰۵ کلوین می رسد [۳۳]. در محدوده اطراف eV $\circ = \mu e$ V 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 می شود، مقدار ZTe این ترکیب در مقایسه با نمودار ضریب سیبک، ضریب رسانندگی الکتریکی و ضریب رسانندگی گرمایی الکترونی، در محدوده کوچکی اطراف eV ه= ۹ و eV ۱-= ۹ به بیشینه مقدار خود می رسد. مقدار معیار شایستگی بزرگتری در دمای ۱۰۰ کلوین و ۳۰۰ کلوین مشاهده می شود، بطوری که برای آلایش نوع n و

p حاملها، بترتیب مقدار ۱ و ۹/۹ 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 ۲/۹، دستخوش تغییرات شده است.

۵. نتیجهگیری

در این پژوهش، ویژگیهای الکترونی و ترموالکتریکی بلور SnN-InO توسط محاسبات اصول اوليه، با استفاده از بسته نرمافزاری کوانتوم اسپرسو در تقریب شیب تعمیمیافته GGA، مورد مطالعه قرار گرفتند. این نانو ساختار همسانگرد بوده و دارای شبکه شش گوشی با ثابت شبکه ۳٬۴۲Å و متشکل از چهار زیر لایه است. گاف نواری این ساختار غیر مستقیم و برابر با eV ه/ه 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 نانوساختار بدست آورد. بنابراین، می توان انظار داشت که این ماده نامزد خوبی برای مواد ترموالکتریک با کارایی بالا میباشد. همچنین، نانوساختار SnN-InO ویژگیهای نسبی برجستهی ترموالکتریکی را از خود نمایش میدهد، بطوریکه مقدار ضریب سیبک و معیار شایستگی در دمای اتاق و برای پتانسیل شیمایی صفر بترتیب، ۳۷۶ µV/K و ۰٫۹ بهدست

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.