



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

### مجتبی اشهدی<sup>۱</sup> و طاهره شعبانزاده حصاری<sup>۲</sup>

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: ۱۴۰۲/۱۱/۰۳؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۳/۰۴/۰۶)

#### 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 لانه‌زنبوری دوبعدی با گاف نواری غیرمستقیم ۰.۵ eV است. با استفاده از ساختار الکترونی به محاسبه ضرایب تراپردی ترموالکتریکی نظیر ضریب سیبک 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 انرژی‌های منفی، بیشترین مقدار را دارد. همچنین تغییرات معیار شایستگی نسبت به دما بسیار اندک است، به طوری که در بازه دمایی ۴۰۰ کلوین به مقداری کمتر از ۰.۲، دستخوش تغییرات شده است. بنابراین نانوساختار SnN-InO، می‌تواند به عنوان 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 سیبک، رسانندگی الکتریکی، رسانندگی گرمایی، معیار شایستگی، معادله تراپرد بولتزمن

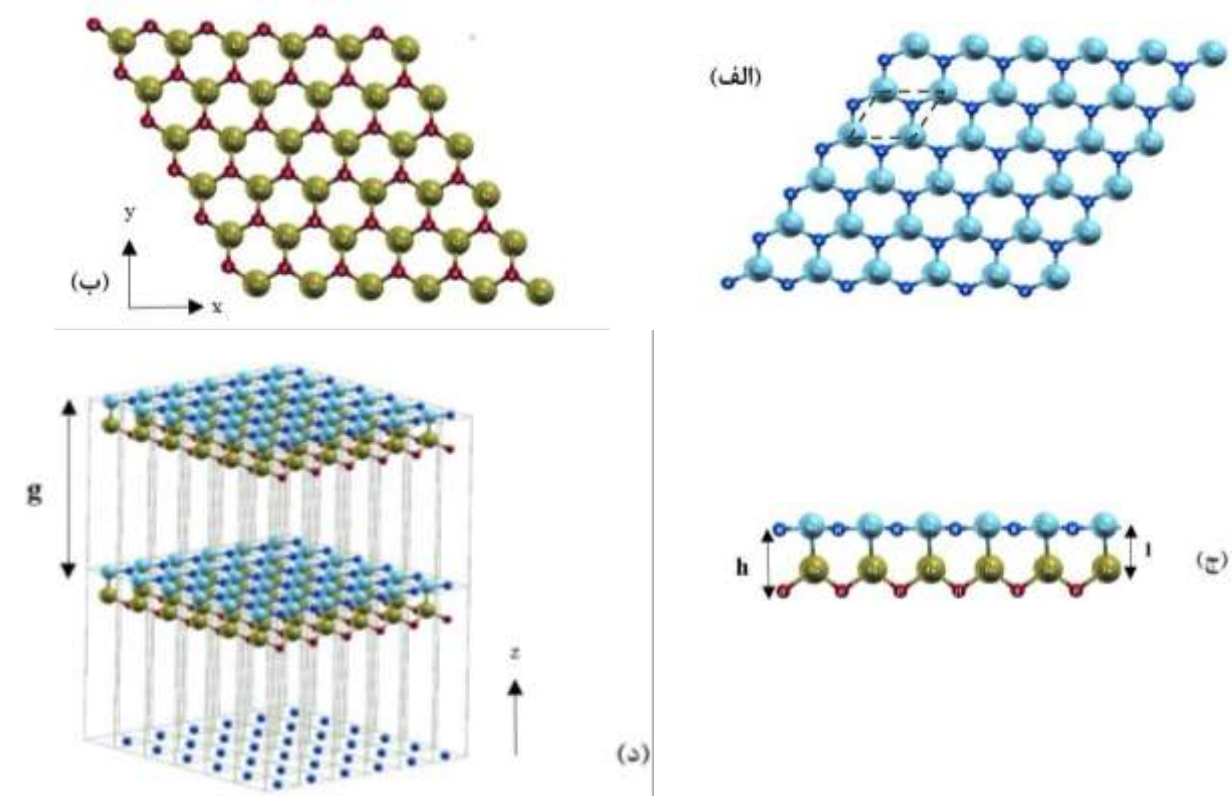
#### ۱. مقدمه

ابعاد کم در مقایسه با مواد حجمی، به واسطه پراکندگی‌های مختلف توسط فونون‌ها، خواص ترموالکتریکی بهتری را نشان می‌دهند [۱ و ۲]. عملکرد ماده ترموالکتریک توسط کمیت بدون بعد معیار شایستگی<sup>۱</sup> (ZT) اندازه‌گیری می‌شود، که به شکل زیر تعریف می‌شود:

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

که S ضریب سیبک،  $\sigma$  ضریب رسانندگی الکتریکی،  $\kappa (= \kappa_e + \kappa_l)$  ضریب رسانندگی گرمایی (که در آن  $\kappa_e$  و  $\kappa_l$  به ترتیب، رسانندگی گرمایی الکترون‌ها و رسانندگی گرمایی فونونی ناشی از ارتعاشات شبکه هستند) و T دما است. بدیهی است که هر چه مقدار ضریب عامل توان (PF= $S^2\sigma$ ) بالاتر و

امروزه با توجه به مشکلات محیطی شلیددی 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 دارند، توجه فراوانی را به خود جلب کرده‌اند. همچنین، مواد با



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) و (د) صفحات بلوری  $g$  فاصله بین صفحات بلوری).

تراکم حامل‌ها مرتبط هستند [۸ و ۹].

در مطالعه اخیر که بر پایه محاسبات اصول اولیه انجام شده است، یک گروه تحقیقاتی اثبات کردند که نانو ساختار تک لایه SnN-InO، می‌تواند وجود داشته باشد [۱۰]. طحواره‌ای از چنین نانو ساختاری در شکل ۱ نشان داده شده است. این ساختار از چهار زیر لایه تشکیل شده که هر زیر لایه شامل یک نوع اتم است. نمای بالای صفحه به صورت 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 به وجود 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 نانو ساختار تک لایه دوبعدی SnN-InO را با استفاده از نظریه تابعی چگالی و معادله تراپردی نیمه کلاسیکی بولتزمن مورد

ضریب رسانندگی گرمایی ( $\kappa$ ) پایین تر باشد، معیار شایستگی بهتر خواهد بود [۳]. در دهه گذشته، تحقیقات متعددی برای افزایش کارایی مواد ترموالکتریکی انجام شده است. کشف مواد جدید همچنان یک راهکار مؤثر برای تولید مواد ترموالکتریکی با عملکرد بالا است.

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

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

تقریب زمان واهلش، توسط بسته محاسباتی BoltzTraP استفاده شده است [۱۳].

### ۳. خواص ساختاری و الکترونی

با توجه به فرایند بهینه‌سازی، ساختار تک‌لایه دوبعدی SnN-InO در یک شبکه شش‌ضلعی با ثابت‌های شبکه  $a=b=3.42 \text{ \AA}$  و ضخامت لایه‌ای  $h=4.49 \text{ \AA}$  به پایداری می‌رسد. با نگاهی دقیق به ساختار SnN-InO، مشاهده می‌شود که این ساختار از دو صفحه شش‌ضلعی قلع-نیتروژن (شامل شش‌ضلعی‌های Sn-N با طول پیوند  $d_{Sn-N}=2.11 \text{ \AA}$  و ایندیوم-اکسیژن (شامل شش‌ضلعی‌های 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 حالت‌های الکترونی در راستاهای تقارنی  $\Gamma$ -M-K- $\Gamma$  برای نانوساختار تک لایه دوبعدی SnN-InO، نشان داده شده است. همان‌طور که از شکل ۲ مشاهده می‌شود، این نانو ساختار رفتار نیم‌رسانا از خود نشان می‌دهد؛ به طوری که بیشینه نوار ظرفیت در مسیر  $\Gamma$ -M و کمینه نوار رسانش در نقطه  $\Gamma$  قرار دارد که یک گاف نواری غیر مستقیم به میزان  $0.5 \text{ eV}$  را از خود نشان می‌دهد (مبدأ انرژی به طور دلخواه به‌عنوان بیشینه نوار ظرفیت انتخاب شده است). این گاف نواری از گاف‌های نواری مواد ترموالکتریک مرسوم ( $0.1 \text{ eV}$  برای  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  و  $0.14 \text{ eV}$  برای  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ ) بزرگ‌تر است [۱۶]، که این تفاوت باعث ایجاد تغییرات قابل توجهی در

بررسی قرار می‌دهیم. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش دما ضریب سیبک و معیار شایستگی کاهش می‌یابند، به طوری که مقدار ضریب سیبک و معیار شایستگی در پتانسیل شیمیایی صفر ( $\mu=0 \text{ eV}$ ) به ترتیب، 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<sup>۱</sup> که مبتنی بر نظریه تابعی چگالی<sup>۲</sup> (DFT) است، انجام می‌شوند [۱۱]. این نرم‌افزار ویژگی‌های حالت پایه نانوساختارها را بر پایه محاسبات خودسازگار، شامل: چگالی حالت‌های الکترونی (Dos)، ساختار نواری، انرژی‌های ساختار، بهینه‌سازی و دیگر خواص محاسبه می‌کند. برای تعیین پتانسیل همبستگی-تبادلی از تقریب شیب تعمیم یافته<sup>۳</sup> (GGA) که توسط پردیو، بورک و ارنزروهوف (PBE) پارامتری شده [۱۲]، استفاده شده است. برای بهینه‌سازی هندسه ساختار و دستیابی به دقت مناسب در محاسبات، از روش مونخورست-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 بین صفحات،  $g=20 \text{ \AA}$  در نظر گرفته شده است. سپس، برای محاسبه ضرایب تراپردی ترموالکتریک از جمله: ضریب سیبک، ضریب رسانندگی الکتریکی، ضریب رسانندگی گرمایی، عامل توان و معیار شایستگی، از حل معادله نیمه‌کلاسیکی بولتزمن در

۱. Quantum Espresso

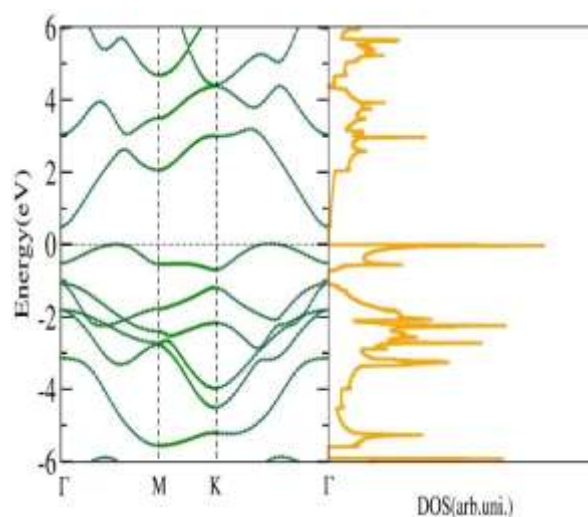
۲. Density functional theory

۳. Generalized Gradient Approximation

مطالعه قرار می‌دهیم. رسانندگی گرمایی شامل دو مؤلفه 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 ( $\kappa_l$ ) در مقایسه با جمله الکترونی ( $\kappa_e$ ) ناچیز باشد،  $ZT_e$  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، به ویژه 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 [۱۷-۲۰].

در محاسبات تراپردی بولتزمن، ضریب سیبک، مستقل از زمان و اهلش  $\tau$  است، در صورتی که رسانندگی الکترونی به‌طور خطی به  $\tau$  وابسته است.

به علاوه، رسانندگی گرمایی الکترونی نیز طبق قانون ویدمان-فرانتس ( $L = \frac{k_e}{\sigma T}$ ) ثابت لورنتس است) نیز وابسته به  $\tau$  است. البته با وجود متفاوت بودن سازوکار پراکندگی در رسانندگی الکترونی و رسانندگی گرمایی، زمان‌های اهلش در این دو مورد یکسان نیست. در این مقاله، زمان و اهلش ثابت  $1 \times 10^{-14}$  s در نظر گرفته می‌شود [۲۰ و ۲۱]. از طرفی، وابستگی زیادی بین این ضرایب با حامل‌های بار ( $n$ ) وجود دارد، به طوری که با افزایش حامل‌های بار، ضریب سیبک کاهش و ضرایب رسانندگی الکترونی و گرمایی افزایش می‌یابند، در نتیجه معیار شایستگی که با مجذور ضریب سیبک رابطه مستقیم دارد، با افزایش حامل‌ها، کاهش می‌یابد. از آنجایی که مکان  $\mu$  (پتانسیل شیمیایی) در ساختار نواری مشخص‌کننده سهم الکترون‌های ظرفیت و یا رسانش در تراپرد است، می‌تواند روی ضریب سیبک و رسانندگی الکترونی تأثیر

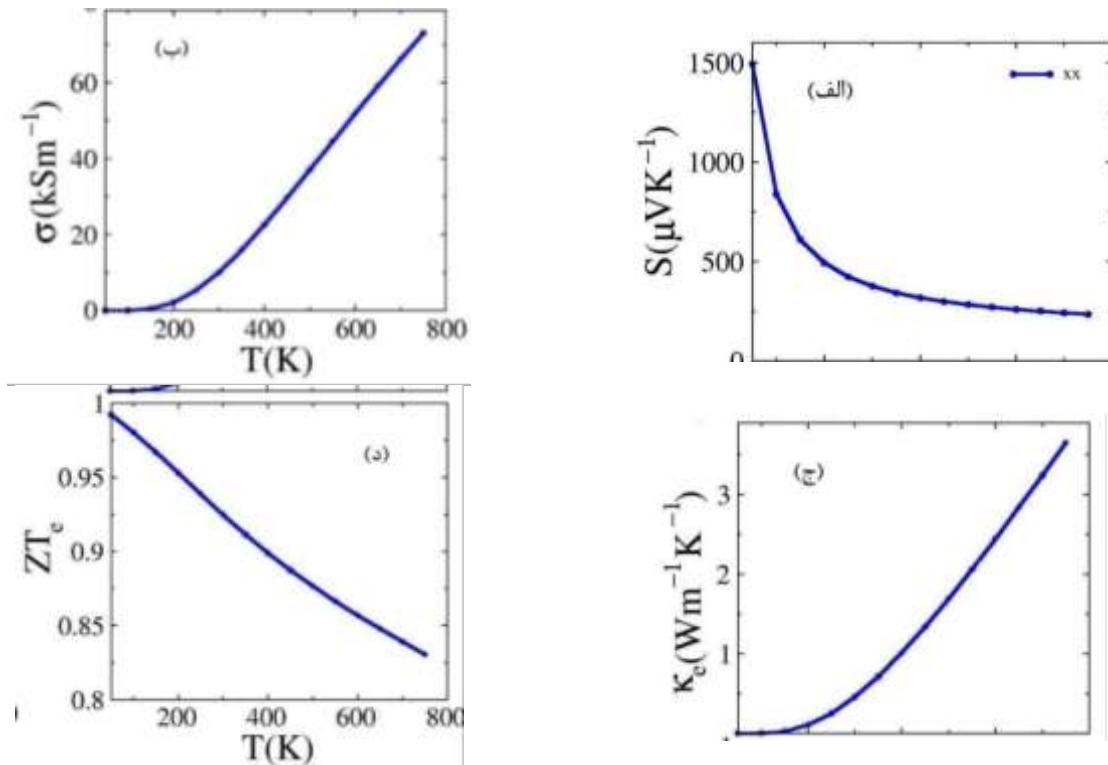


شکل ۲. ساختار نواری (سمت چپ) و چگالی حالت‌های الکترونی (سمت راست) نانو ساختار تک لایه SnN-InO با گاف نواری غیر مستقیم ۰.۵ eV در راستاهای تقارنی،  $\Gamma(0, 0, 0)$ ،  $M(0.5, 0.5, 0)$ ،  $K(0.6, 0.3, 0)$  و  $\Gamma(0, 0, 0)$  رسم شده است.

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 آلایش 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 قله تیزی دارد. 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 الکترونی مانند ضریب رسانندگی الکترونی، ضریب سیبک، ضریب رسانندگی گرمایی و کمیت بدون بعد معیار شایستگی  $ZT$ ، را مورد



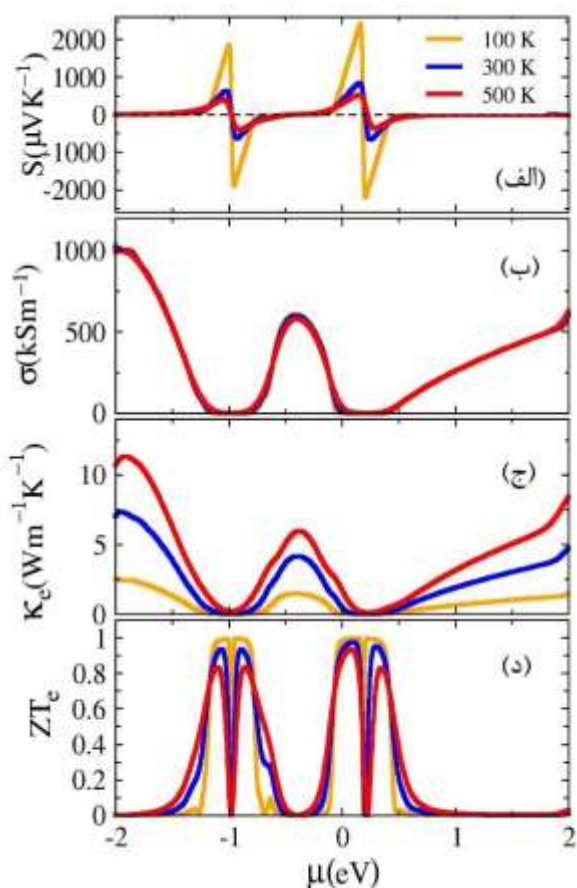
شکل ۳. نمودار تغییرات ضرایب ترابرد الکتریکی در طول راستای x برحسب تابعی از دما و در تقریب زمان واهلش برای نانو ساختار تک لایه SnN-InO رسم شده است که در آن، (الف) ضریب سبیک، (ب) ضریب رسانندگی الکتریکی، (ج) ضریب رسانندگی گرمایی و (د) معیار شایستگی است. نتایج به ازای پتانسیل شیمیایی صفر ( $\mu = 0 \text{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

بگذارد، به طوری که می توان با تغییر پتانسیل شیمیایی، مقدار ضریب سبیک 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 به وجود آوردن یک جریان گرمایی می شود. در نتیجه تجمع الکترون ها در دمای پایین و بارهای مثبت در دمای بالا، میدان ترموالکتریکی در جهت جریان گرمایی به وجود می آید که به این پدیده اثر سبیک می گویند. طبق رابطه  $E = S \Delta T$  ضریب سبیک است که علامت آن نشان دهنده نوع حامل های بار است و هرچه برای یک ماده مقدار بالاتری داشته باشد، با یک اختلاف دمایی اندک می توان ولتاژ بالاتری تولید کرد. با توجه به این که SnN-InO یک بلور دوبعدی است، مؤلفه  $S_z$  در راستای z را به دلیل کوچک بودن نسبت به دو مؤلفه 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 محاسبات مان، همان طور 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 سبیک بر حسب دما را نشان می دهد. همان طور که مشخص است، با افزایش دما ضریب سبیک کاهش می یابد، به طوری که مقدار ضریب سبیک، از  $840 \mu\text{V/K}$  در دمای  $100$  کلوین به مقدار  $283 \mu\text{V/K}$  در دمای  $500$  کلوین می رسد. این رفتار با نتایج گزارش شده در مراجع [۲۰ و ۲۲]، توافق قابل قبولی دارند.

مطابق شکل ۳ ب رسانندگی الکتریکی تا دمای نزدیک  $200$  کلوین صفر است و بعد از آن با افزایش دما به صورت تقریباً خطی افزایش می یابد. یعنی در محدوده دمایی  $300$  تا  $800$  کلوین، هنگامی که حامل های بار بیشتری در اثر افزایش دما برانگیخته می شوند، افزایش سریعی در رسانندگی الکتریکی مشاهده می شود.

در جامدات رسانندگی گرمایی در اثر گرادیان دمایی اتفاق می افتد، به طوری که الکترون ها و فونون ها عامل ایجاد جریان گرمایی بین نواحی سرد و گرم هستند. در نتیجه، چگالی



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 است.

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 آرایش (n یا p) رسانندگی الکتریکی را تغییر داد، به طوری که بیشینه مقدار رسانندگی الکتریکی در آرایش نوع p حامل‌ها به میزان  $10^3 \text{ kS/m}$  اتفاق می‌افتد که در آن S واحد زیمنس (واحد رسانندگی الکتریکی) است.

در شکل ۴. ج، نمودار تغییرات رسانندگی گرمایی الکترونی بر حسب تابعی از پتانسیل شیمیایی برای نانو ساختار SnN-InO در دماهای مختلف، به منظور بهینه‌سازی عملکرد حرارتی این نانو ساختار، رسم شده‌اند. همان‌طور که مشاهده می‌شود، با افزایش

جریان گرمایی (مقدار انرژی گرمایی است که در واحد زمان از واحد سطح عمود بر جهت جریان عبور می‌کند) طبق رابطه  $\mathbf{J}_q = -\kappa \nabla T$  خواهد بود. این چگالی در خلاف جهت گرادیان دمایی است که به واسطه اختلاف دمای دو سر ماده (الکترون‌ها از ناحیه با دمای بالاتر به ناحیه با دمای پایین‌تر حرکت می‌کنند) ایجاد می‌شود. 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 کلوین مقدار صفر را نتیجه می‌دهد و به ازای دمای بیشتر از ۲۰۰ کلوین، این ضریب به صورت خطی افزایش پیدا می‌کند. این رفتار با افزایش رسانندگی الکتریکی نشان داده شده در شکل ۳. ب به دلیل رابطه متناسب بین رسانندگی الکتریکی 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، به طوری که مقدار معیار شایستگی در پتانسیل شیمیایی صفر ( $\mu = 0 \text{ eV}$ ) از ۱ در دمای ۱۰۰ کلوین به مقدار حدود ۰/۸۸ در دمای ۵۰۰ کلوین می‌رسد.

در شکل ۴، نمودار تغییرات ضرایب ترابرد الکتریکی در دماهای مختلف (۱۰۰، ۳۰۰ و ۵۰۰ کلوین) بر حسب پتانسیل شیمیایی برای نانو ساختار SnN-InO رسم شده است. از آنجایی که پتانسیل شیمیایی  $\mu = 0 \text{ eV}$  در بالاترین نوار ظرفیت این نانو ساختار انتخاب شده است، پتانسیل شیمیایی مثبت (منفی) متناظر با آرایش 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، به ویژه برای  $\mu = 0 \text{ eV}$ ، می‌توان مقدار قابل توجهی از ضریب سیبک را از طریق آرایش حامل‌های نوع n یا p به دست آورد. همچنین، بیشینه مقدار ضریب سیبک برای این نانو ساختار با افزایش دما کاهش می‌یابد به طوری که مقدار آن از  $239 \mu\text{V/K}$  در دمای ۱۰۰ کلوین به مقدار  $522 \mu\text{V/K}$  در دمای ۵۰۰ کلوین می‌رسد.

## ۵. نتیجه گیری

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 شبکه شش‌گوشی با ثابت شبکه  $3.42 \text{ \AA}$  دارد و متشکل از چهار زیر لایه است. گاف نواری این ساختار غیر مستقیم و برابر با  $0.5 \text{ eV}$  محاسبه شده است. نتایج، خواص ترموالکتریک برجسته‌ای برای این نانو ساختار را نشان می‌دهد. به طوری که می‌توان ضریب سیبک بزرگ، رسانندگی‌های گرمایی پایین و معیار شایستگی بالایی را برای این نانوساختار به دست آورد. بنابراین، می‌توان انتظار داشت که این ماده نامزد خوبی برای مواد ترموالکتریک با کارایی بالا باشد. همچنین، نانوساختار SnN-InO ویژگی‌های نسبی برجسته ترموالکتریکی را از خود نمایش می‌دهد، به طوری که مقدار ضریب سیبک و معیار شایستگی در دمای اتاق و برای پتانسیل شیمیایی صفر به ترتیب،  $376 \mu\text{V/K}$  و  $0.9$  به دست آمدند.

دما، ضریب رسانندگی گرمایی الکترونی، افزایش می‌یابد، به طوری که برای  $\mu = -2 \text{ eV}$  مقدار آن از  $2.5 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  در دمای  $100$  کلوین به مقدار  $11.3 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  در دمای  $500$  کلوین می‌رسد [۲۳]. در محدوده اطراف  $\mu = -1 \text{ eV}$  و  $\mu = 0 \text{ eV}$  با توجه به عدم چگالی حالت‌های الکترونی (شکل ۲) مقدار رسانندگی گرمایی الکترونی (مشابه نمودار شکل ۴. ج) 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 می‌رسند. مقدار معیار شایستگی بزرگ‌تری در دمای  $100$  کلوین و  $300$  کلوین مشاهده می‌شود، به طوری که برای آلایش نوع  $n$  و  $p$  حامل‌ها، به ترتیب مقدار  $1$  و  $0.9$  را نشان می‌دهد، که نشان‌دهنده عملکرد خوب SnN-InO در دمای اتاق است. همچنین تغییرات معیار شایستگی نسبت به دما بسیار اندک است، به طوری که در بازه دمایی  $400$  کلوین به مقداری کمتر از  $0.2$ ، دستخوش تغییرات شده است.

## مراجع

1. N F Hinsche, et al., *Phys. Rev. B* **86** (2012) 085323.
2. G Shi and E Kioupakis, *J. Appl. Phys.* **117** (2015) 065103.
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 and S Ciraci, *Phys. Rev. B* **84** (2011) 035452.
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.
20. G Ding, G Gao, and 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.