

# Optoelectronic

## ORIGINAL ARTICLE

# Comprehensive Investigation of the Structural, Electronic, Optical, and Thermoelectric Properties of the Two-Dimensional MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> Material: A Density Functional Theory (DFT)-Based Study

Nosratali Vahabzadeh\*

Assistant Professor, Department of Physics, PaM.C., Islamic Azad University, Parsabad, Iran.

### Correspondence

Nosratali Vahabzadeh

Email: Na.vahabzadeh1352@iau.ac.ir

### How to cite

Vahabzadeh, N. (2026). Comprehensive Investigation of the Structural, Electronic, Optical, and Thermoelectric Properties of the Two-Dimensional MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> Material: A Density Functional Theory (DFT)-Based Study, Optoelectronic, 8(3), 57-66.

### ABSTRACT

In this study, the structural, electronic, optical, and thermoelectric properties of the two-dimensional (2D) material MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> have been investigated using density functional theory (DFT)-based calculations. Energy–volume analysis confirms the thermodynamic stability of MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>, as evidenced by its high bulk modulus, mechanical hardness, and low compressibility. Electronic band structure and density of states (DOS/PDOS) analyses reveal a direct band gap of approximately 2 eV, suggesting its strong potential for optoelectronic applications. Phonon spectrum analysis further validates the material's dynamical stability and indicates favorable phonon characteristics for thermal conductivity and electron–phonon coupling. Optical calculations demonstrate pronounced anisotropy in the dielectric function, absorption spectra, and plasmonic response across the visible and ultraviolet regions. Additionally, the computed thermoelectric parameters, including the Seebeck coefficient and figure of merit (ZT), highlight the promise of MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> for thermoelectric energy conversion technologies. Overall, these findings identify MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub> as a multifunctional 2D material with significant potential for applications in nanoelectronics, optoelectronics, and energy-related devices.

### KEYWORDS

DFT, 2D Material, MoSi<sub>2</sub>N<sub>4</sub>, Thermoelectric.

فصلنامه علمی

## اپتوالکترونیک

«مقاله پژوهشی»

# بررسی جامع خواص ساختاری، الکترونیکی، اپتیکی و ترموالکتریک ماده دوبعدی $\text{MoSi}_2\text{N}_4$ مبتنی بر نظریه تابع چگالی (DFT)

نصرتعلی وهابزاده\*

استادیار، گروه فیزیک، واحد پارساباد معان،  
دانشگاه آزاد اسلامی، پارساباد، ایران.

### چکیده

در این پژوهش، خواص ساختاری، الکترونیکی، اپتیکی و ترموالکتریک ماده دوبعدی  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  با استفاده از محاسبات مبتنی بر نظریه تابع چگالی (DFT) بررسی شده است. نتایج محاسبات انرژی - حجم نشان می‌دهند که  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  از نظر ترمودینامیکی پایدار بوده و مدول بالک بالا، سختی مکانیکی و تراکم‌پذیری پایین این ماده را تأیید می‌کند. تحلیل ساختار نواری و چگالی حالات (DOS/PDOS) گاف نواری مستقیم با مقدار تقریبی ۲ الکترون ولت را آشکار می‌سازد که این ویژگی،  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  را برای کاربردهای اپتوالکترونیکی نویدبخش می‌سازد. بررسی طیف فونونی نیز پایداری دینامیکی ماده را تأیید کرده و نشان می‌دهد که ارتعاشات فونونی شرایط مناسبی برای هدایت حرارتی و برهم‌کنش الکترون - فونون فراهم می‌کنند. نتایج اپتیکی حاکی از ناهمسان‌گردی قابل توجه در ثابت دی‌الکتریک، تابع جذب و پاسخ پلاسمونی در محدوده مرئی و فرابنفش است. علاوه بر این، پارامترهای ترموالکتریک محاسبه‌شده نظیر ضریب سیبک و ضریب میریت ZT، پتانسیل  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  برای کاربرد در فناوری‌های انرژی حرارتی - الکتریکی را برجسته می‌کنند. این یافته‌ها  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  را به‌عنوان یک ماده دوبعدی چندمنظوره با قابلیت‌های بالقوه در نانوالکترونیک، اپتوالکترونیک و انرژی معرفی می‌کنند.

### واژه‌های کلیدی

نظریه تابعی چگالی، ترکیبات دو بعدی،  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$ ، ترموالکتریک.

نویسنده مسئول:

نصرتعلی وهابزاده

رایانامه: Na.vahabzadeh1352@iau.ac.ir

استناد به این مقاله:

نصرتعلی وهابزاده (۱۴۰۵). بررسی جامع خواص ساختاری، الکترونیکی، اپتیکی و ترموالکتریک ماده دوبعدی  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  مبتنی بر نظریه تابع چگالی (DFT). فصلنامه علمی اپتوالکترونیک، ۸(۳)، ۵۷-۶۶

## مقدمه

با کشف گرافن<sup>۱</sup> در سال ۲۰۰۴، وارد عصر جدیدی در فیزیک مواد شدیم که در آن مواد دوبعدی توجه گسترده‌ای را به خود جلب کردند. این دسته از مواد به واسطه ضخامت تنها چند اتمی و نسبت سطح به حجم بسیار بالا، خواص الکترونیکی، حرارتی، مکانیکی و اپتیکی منحصر به فردی دارند. برای مثال توانایی تنظیم باندگپ، پاسخ سریع اپتیکی، قابلیت خم‌پذیری بالا و هدایت حرارتی و الکتریکی عالی باعث شده‌اند که مواد دوبعدی در کاربردهایی مانند نانوترانزیستورها، حسگرها، فوتونیک، اپتوالکترونیک، ذخیره و تبدیل انرژی در خط مقدم تحقیقات باشند [۲،۱].

علاوه بر این، مواد دوبعدی امکان ایجاد هیتروساختار<sup>۲</sup> و ساختارهای پیچیده لایه‌ای را فراهم می‌آورند که در آن برهم‌کنش بین لایه‌ها می‌تواند خواص جدیدی مثل جدایش حامل‌ها، اثرات واری و غیره را ایجاد کند [۳].

ترکیبات دوبعدی 2D به دلیل ویژگی‌های منحصر به فردشان، از جمله نسبت بالای سطح به حجم، یونی بودن زیاد و انرژی پایین فونون، مورد توجه بسیاری قرار گرفته‌اند. مواد دوبعدی با ساختار مشابه گرافن، به دلیل خواص مکانیکی، حرارتی، الکترونیکی، نوری و ترموالکتریکی خود، از مهم‌ترین ساختارها محسوب می‌شوند. این مواد می‌توانند ویژگی‌های مختلفی مانند رسانایی فلزی، نیمه‌رسانایی، عایق بودن و حتی ابررسانایی را نشان دهند [۵،۴].

به همین دلیل، این مواد موضوع جذابی برای مطالعات تجربی و نظری محسوب می‌شوند و در زمینه‌های متعددی مانند الکترونیک، اپتوالکترونیک، ترانزیستورهای لایه نازک، کاتالیز و ذخیره‌سازی انرژی (باتری‌های لیتیوم - یون و ابرخازن‌ها) دارای پتانسیل بالایی هستند [۹-۶].

روش‌های متنوعی برای سنتز مواد دوبعدی وجود دارد؛ از جمله لایه‌نشانی اتمی، لایه‌نشانی فیزیکی بخار<sup>۳</sup> (PVD) و لایه‌نشانی شیمیایی بخار<sup>۴</sup> (CVD) با این حال، اغلب این مواد در حضور آب و اکسیژن ناپایدار هستند [۱۱،۱۰].

اخیراً یک خانواده جدید از مواد دوبعدی با فرمول کلی  $MA_2Z_4$  معرفی شده‌اند که M یک فلز واسطه، A یکی از عناصر گروه Si یا Ge و Z یکی از عناصر گروه ۱۴، ۱۵ (N, P, As) است.  $MoSi_2N_4$  نخستین ترکیب از این خانواده بود که با روش CVD سنتز گردید. این ماده یک ساختار

هفت لایه‌ای (N-Si-N-Mo-N-Si-N) دارد؛ به طور کلی  $MoN_2$  بین دو لایه Si-N قرار گرفته است [۱۳،۱۲].

گاف نیمه‌رسانایی با مقدار تقریباً ۱/۹۴ eV گزارش شده است که آن را در حوزه اپتوالکترونیک جذاب می‌کند [۱۴]. مقاومت مکانیکی بالا و پایداری محیطی خوبی دارد که برای کاربردهای عملی خیلی مهم است [۱۶،۱۵].

علاوه بر  $MoSi_2N_4$ ، ترکیبات مشابهی مانند  $WSi_2N_4$  و دیگر اعضای خانواده  $MA_2Z_4$  نیز پیش‌بینی یا سنتز شده‌اند که باندگپ‌ها و خواص متنوعی نشان می‌دهند [۱۸،۱۷].

این فلز واسطه دوبعدی با کیفیت بسیار بالا با استفاده از روش CVD و در ساختارهای بلوری شش‌گوش، مکعبی و ارتورومبیک سنتز شده است. در همین راستا، بی-لون هونگ<sup>۵</sup> و همکارانش با استفاده از گاز  $NH_3$  به عنوان منبع نیتروژن، زیرلایه دولایه Cu/Mo و سیلیسیم عنصری موفق به سنتز  $MoSi_2N_4$  با شکل‌های مثلثی و ضخامت یکنواخت شدند [۲۰،۱۹]. آن‌ها همچنین از نظریه تابع چگالی<sup>۶</sup> (DFT) برای محاسبه خواص الکترونیکی این ماده استفاده کردند و نتایج نشان داد که  $MoSi_2N_4$  یک نیمه‌رسانای با گاف نواری مستقیم با انرژی باند ۱/۷۴۴ الکترون‌ولت است. علاوه بر این، پژوهش‌های دیگری به جذب یون‌های فلزات سنگین روی ساختارهای دوبعدی آلکالایز شده (Mxene) و همچنین پتانسیل این مواد برای ذخیره‌سازی انرژی و باتری‌های لیتیوم-یون پرداخته‌اند. این مطالعات نشان می‌دهند که مواد دوبعدی می‌توانند پلتفرم‌های قدرتمندی برای کاربردهای نوین در نانوالکترونیک، اپتوالکترونیک و انرژی باشند [۲۲،۲۱].

هدف از این پژوهش، مطالعه جامع خواص ساختاری، الکترونیکی، اپتیکی و ترموالکتریکی تک لایه<sup>۷</sup>  $MoSi_2N_4$  با استفاده از نظریه تابعی چگالی<sup>۸</sup> (DFT) در چارچوب روش FP-LAPW است. در این تحقیق، با بهره‌گیری از تقریب GGA-PBE<sup>۹</sup> برای پتانسیل تبدالی - همبستگی و تقریب RPA<sup>۸</sup> برای بخش اپتیکی، پایداری ساختاری، گاف نواری، رفتار اپتیکی و ویژگی‌های ترموالکتریکی این ماده بررسی شده است. هدف نهایی از این مطالعه، درک بنیادی از ویژگی‌های فیزیکی  $MoSi_2N_4$  و ارزیابی پتانسیل آن برای کاربرد در سامانه‌های اپتوالکترونیک و ترموالکتریکی نسل آینده است.

5 Yi-Lun Hong

6 Density Functional Theory

7 Generalized Gradient Approximation

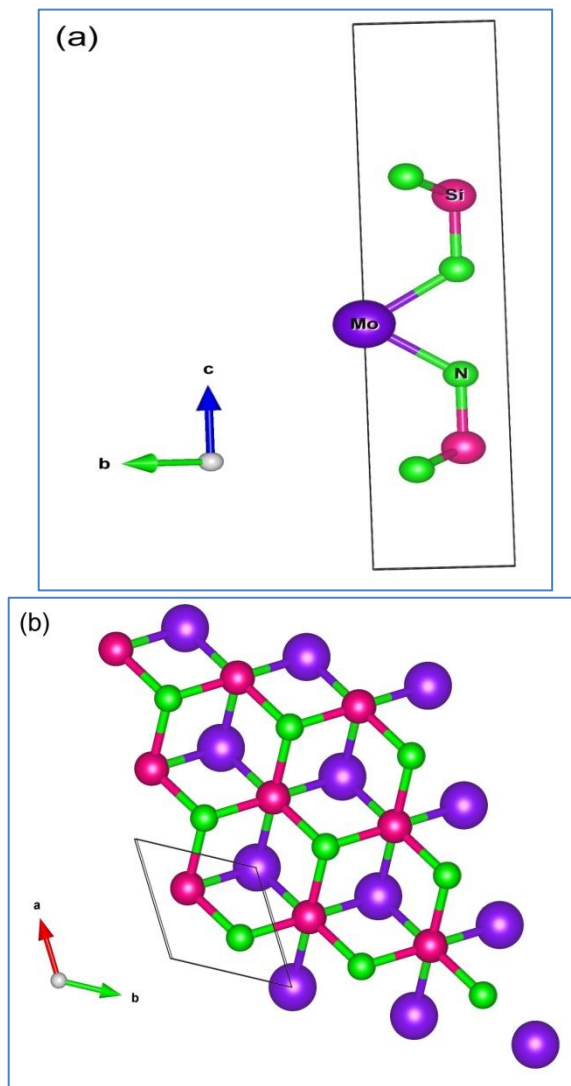
8 Random Phase Approximation

1 Graphene

2 Heterostructures

3 Physical Vapor Deposition

4 Chemical Vapor Deposition



شکل ۱. شکل ساختار گرافن لایک  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$

این ویژگی دلالت بر تراکم‌پذیری پایین ماده دارد. این نتایج نشان می‌دهد که  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  علاوه بر برخورداری از پایداری انرژی و مکانیکی، دارای سختی بالایی نیز هست که با ویژگی‌های مورد انتظار از ترکیبات دوبعدی جدید بر پایه نیتريد فلزات واسطه هم‌خوانی دارد. چنین ویژگی‌هایی، در کنار قابلیت تنظیم خواص الکترونیکی،  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  را به گزینه‌ای امیدبخش برای کاربردهای آینده در نانوالکترونیک، اپتوالکترونیک و فوتونیک تبدیل می‌نماید. حجم تعادلی برابر با  $643/7 \text{ a.u.}^3$  به‌دست آمده که با مینیمم انرژی محاسبات انرژی - حجم مطابقت دارد. بالک مدول حدود  $207/9 \text{ GPa}$  محاسبه شد که نشان‌دهنده سختی مکانیکی بالا و تراکم‌پذیری کم است که در مقایسه با ترکیباتی مانند تنگستن و آهن که بالک مدول عددی برابر با ۳۱۰ و ۱۷۰ گیگا پاسکال دارند، مناسب است. مقدار مشتق مدول بالک  $B' = 4/49$  نزدیک به مقادیر معمول مواد پایدار است و رفتار نرمال ماده در برابر فشار را نشان می‌دهد. این نتایج تأیید

## روش محاسبات

محاسبات ساختاری، الکترونی، اپتیکی و ترموالکتریک تک‌لایه  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  بر پایه نظریه تابعی چگالی (DFT) و در چارچوب روش موج تخت تقویت‌شده تمام‌پتانسیلی (FP-LAPW) با استفاده از بسته محاسباتی WIEN2k [۲۳] انجام شد. در این پژوهش، برای توصیف پتانسیل تبدیلی - همبستگی از تقریب گرادیان تعمیم‌یافته (GGA) بر اساس فرمول‌بندی PBE [۲۹] استفاده گردید.

به‌منظور بهینه‌سازی ساختار هندسی و یافتن حالت پایه، فرایند ریلکساسیون با دستور mini انجام شد تا نیروی وارد بر هر اتم به کمتر از  $0/01 \text{ eV/\AA}$  کاهش یابد. برای تضمین هم‌گرایی انرژی، مقدار پارامترهای محاسباتی به‌صورت بهینه انتخاب شدند؛ بدین ترتیب مقدار  $R_{\text{MTKmax}}=7.0$  و پارامتر بیشینه عدد کوانتومی زاویه‌ای  $L_{\text{max}}=10$  در نظر گرفته شد. شبکه نقاط  $k$  در ناحیه بریلون با تراکم ۳۵۰ نقطه  $k$  انتخاب گردید تا دقت لازم در محاسبات الکترونی و اپتیکی تأمین شود. برای محاسبات اپتیکی، از تقریب میدان تصادفی (RPA) [۳۰] بر پایه نتایج حاصل از محاسبات الکترونی استفاده گردید. خواص اپتیکی نظیر تابع دی‌الکتریک، ضریب جذب و بازتاب، با استفاده از خروجی‌های حاصل از محاسبات انرژی نوارها و چگالی حالات الکترونی محاسبه شدند.

محاسبات فونونی با استفاده از بسته محاسباتی Quantum ESPRESSO انجام گرفت تا پایداری دینامیکی ساختار بررسی شود. در این مرحله مقدار  $\text{ecut}$  برابر با ۸۰ و شبکه  $q$   $2 \times 2 \times 2$  استفاده شد. در نهایت، خواص ترموالکتریک شامل ضریب سیبک، رسانندگی الکتریک و ضریب قدرت با استفاده از خروجی‌های به‌دست‌آمده از WIEN2k و با بهره‌گیری از کد BoltzTraP [۲۸-۲۴] محاسبه گردیدند.

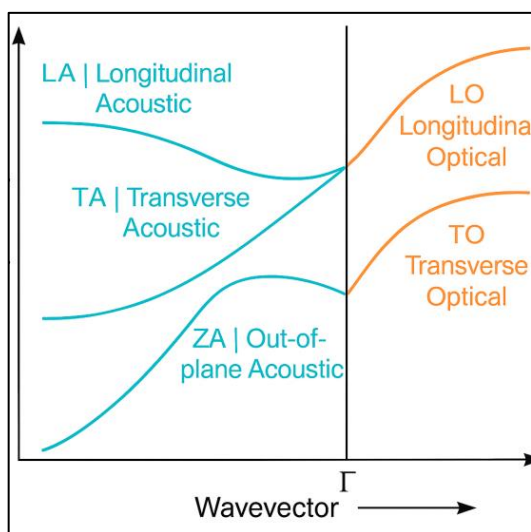
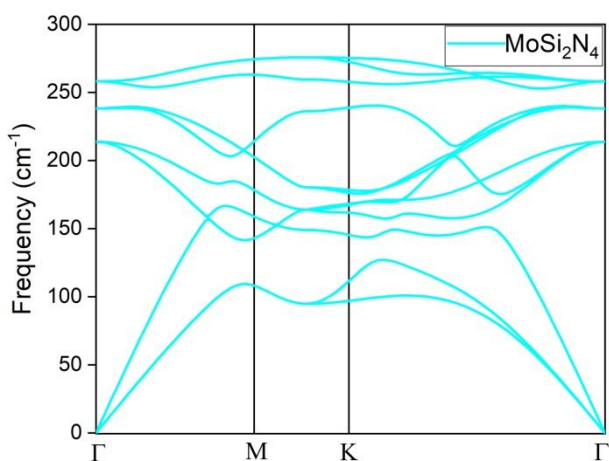
## نتایج و بحث‌ها

در شکل (۲) به‌منظور بررسی پایداری ساختاری و خواص تعادلی  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$ ، انرژی کل برای مجموعه‌ای از حجم‌های مختلف سلول واحد با استفاده از کد WIEN2k محاسبه شد. داده‌های انرژی - حجم به‌دست‌آمده با معادله حالت Birch-Murnaghan برازش گردید. شکل (۲) منحنی انرژی - حجم دارای یک مینیمم مشخص است که بیانگر پایداری ترمودینامیکی ساختار است. خمیدگی نسبتاً زیاد نمودار در اطراف نقطه مینیمم، نشان‌دهنده بالک مدول بالا و در نتیجه سختی مکانیکی قابل توجه  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  است.

شاخه ZA نزدیک به نقطه  $\Gamma$  رفتار خمیده دارد که یکی از ویژگی‌های متداول در مواد دوبعدی لایه‌ای است.

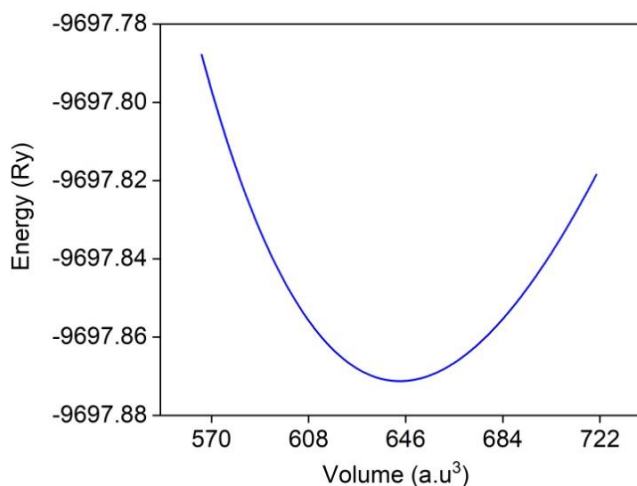
مدهای نوری در بازه  $150-270 \text{ cm}^{-1}$  قرار دارند، در این بازه مدهای اپتیکی فونون قرار گرفته اند. این مدها ناشی از ارتعاشات نسبی بین اتم‌های سنگین (Mo) و سبک‌تر (Si,N) هستند. در نزدیکی نقطه  $\Gamma$ ، شاخه‌های نوری به دو دسته تقسیم می‌شوند: مدهای نوری طولی (LO): ارتعاشات در راستای بردار موج. مدهای نوری عرضی (TO): ارتعاشات عمود بر بردار موج.

جدایش بین مدهای LO و LO-TO splitting) TO در نقطه  $\Gamma$  ناشی از برهم‌کنش الکترون - فونون و قطبش یونی در شبکه است. عدم وجود فرکانس منفی در کل مسیر نشان‌دهنده پایداری دینامیکی کامل  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  است. جدایش آشکار بین مدهای آکوستیکی و نوری بیانگر آن است که ارتعاشات اتم‌های سنگین و سبک در شبکه به‌طور نسبی از یکدیگر جدا هستند.



شکل ۳. پراکندگی فونونی

می‌کنند که  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  از نظر ترمودینامیکی پایدار است و در عین حال سختی بالایی دارد. چنین ویژگی‌هایی، همراه با ساختار لایه‌ای، این ماده را برای کاربردهای نوظهور در زمینه‌های نانوالکترونیک، اپتوالکترونیک و فوتونیک بسیار مناسب می‌سازد.



شکل ۲. نمودار انرژی بر حسب حجم

جدول ۱. ثابت شبکه، حجم تعادلی، بالک مدول،

مشتق بالک مدول

| parameter                     | $\text{MoSi}_2\text{N}_4$ |
|-------------------------------|---------------------------|
| $a=b(\text{bohr})$            | 5.499                     |
| $C(\text{bohr})$              | 24.56                     |
| $\text{Volume}(\text{a.u}^3)$ | 643.7010                  |
| $B(\text{Gpa})$               | 207.8572                  |
| $B'$                          | 4.4877                    |

شکل (۳) بررسی پایداری دینامیکی ساختار  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$ .

طیف فونونی در امتداد مسیرهای تقارنی  $\Gamma \rightarrow M \rightarrow K \rightarrow \Gamma$  نشان داده شد. نتایج به‌دست‌آمده اطلاعات ارزشمندی درباره ماهیت ارتعاشات اتمی و پایداری شبکه ارائه می‌دهد.

در نقطه  $\Gamma$ ، سه مد آکوستیکی از مقدار صفر شروع می‌شوند که یکی ویژگی‌های ضروری یک شبکه پایدار است.

این سه مد شامل:

مد آکوستیکی طولی (LA): مربوط به ارتعاشات کشسان

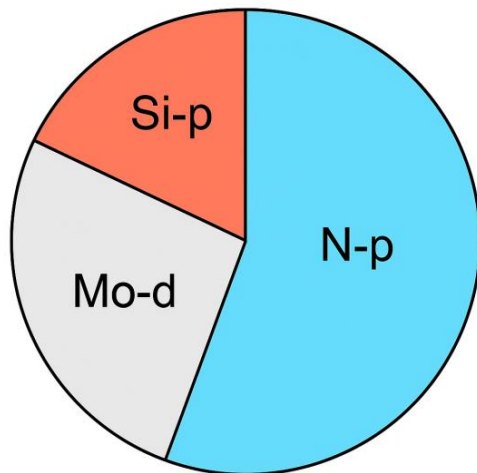
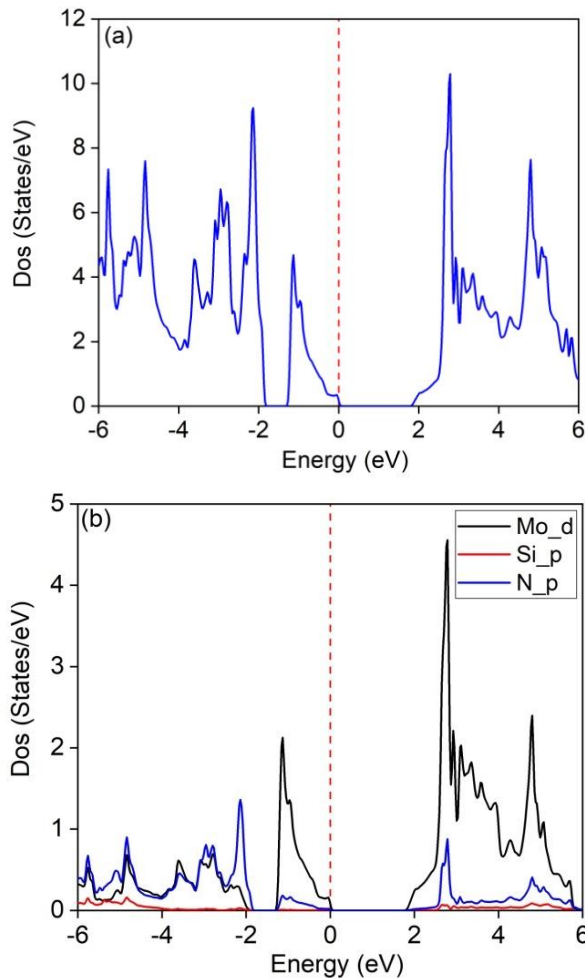
در راستای بردار موج؛

مد آکوستیکی عرضی (TA): ارتعاشات عرضی اتم‌ها

نسبت به راستای انتشار موج؛

مد آکوستیکی خارج از صفحه (ZA): که در مواد

دوبعدی بسیار مهم است و نشان‌دهنده ارتعاشات خمشی صفحه است.



شکل ۴. چگالی حالات الکترونی، چگالی حالات جزئی

در شکل (۵) ساختار نواری محاسبه شده در مسیرهای تقارنی  $\Gamma \rightarrow \text{M} \rightarrow \text{K} \rightarrow \Gamma$  نشان داده شده است. سطح فرمی به عنوان مرجع انرژی در 0 eV در نظر گرفته شده است. نتایج و مشاهدات یک گاف انرژی مستقیم<sup>۲</sup> در نقطه  $\Gamma$  مشاهده می شود که مقدار آن حدود 2 eV است. نوار ظرفیت<sup>۳</sup> بالاترین

این نتایج نشان می دهد که  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  از نظر ارتعاشی و مکانیکی پایدار است و ارتعاشات فونونی آن شرایط مناسبی برای انتقال حرارت، پایداری حرارتی و برهم کنش های الکترون - فونون ایجاد می کنند. بنابراین  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  کاندیدای مناسبی برای کاربردهای پیشرفته در نانوالکترونیک، اپتوالکترونیک و ترموالکتریک محسوب می شود.

### بخش الکترونی

در شکل (۴) پنل (a) تحلیل چگالی حالات الکترونی (DOS) و پنل (b) چگالی حالات جزئی (PDOS)  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  نشان می دهد که در اطراف سطح فرمی یک گاف انرژی (Band Gap) وجود دارد. مقدار این گاف حدود 2 eV تخمین زده می شود که نشان دهنده نیمه رسانا بودن  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  است. در ناحیه انرژی های پایین تر -6 تا -2 eV، قله های مشخصی از حالات الکترونی مشاهده می شود که بیانگر پیوندهای قوی بین اتم هاست. قله های تیز بالای نوار رسانش (حدود 2 تا 4 eV) نشان دهنده چگالی بالای حالات در این محدوده است که می تواند در انتقال الکترون نقش مهمی داشته باشد. شکل (b) سهم اوربیتال های مختلف به صورت زیر مشخص شده است:

Mo-d بیشترین سهم را در نوار رسانش (بالای سطح فرمی) دارد. بنابراین رفتار الکترونی  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  به شدت تحت تأثیر الکترون های d مولیبدن است. N-p عمدتاً در ناحیه ظرفیت -6 تا 0 eV مشارکت دارد و نقش کلیدی در پیوندهای شیمیایی ایفا می کند. Si-p سهم کمتری دارد؛ اما در برخی قله ها با اوربیتال های d مولیبدن و p نیتروژن برهم کنش نشان می دهد.

هم پوشانی<sup>۱</sup> بین اوربیتال های Mo-d و N-p به ویژه در حوالی 2 eV- و نیز نزدیک به لبه نوار رسانش قابل مشاهده است. این امر تأیید می کند که پیوند Mo-N نقش اصلی را در پایداری الکترونیکی و ساختاری ماده دارد. این نتایج نشان دهنده آن است که خواص الکترونیکی  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  عمدتاً توسط برهم کنش های Mo-N کنترل می شود و این ویژگی آن را برای کاربردهای الکترونیکی و اپتوالکترونیکی مناسب می سازد.

2 Direct Band Gap  
3 Valence Band

1 Hybridization

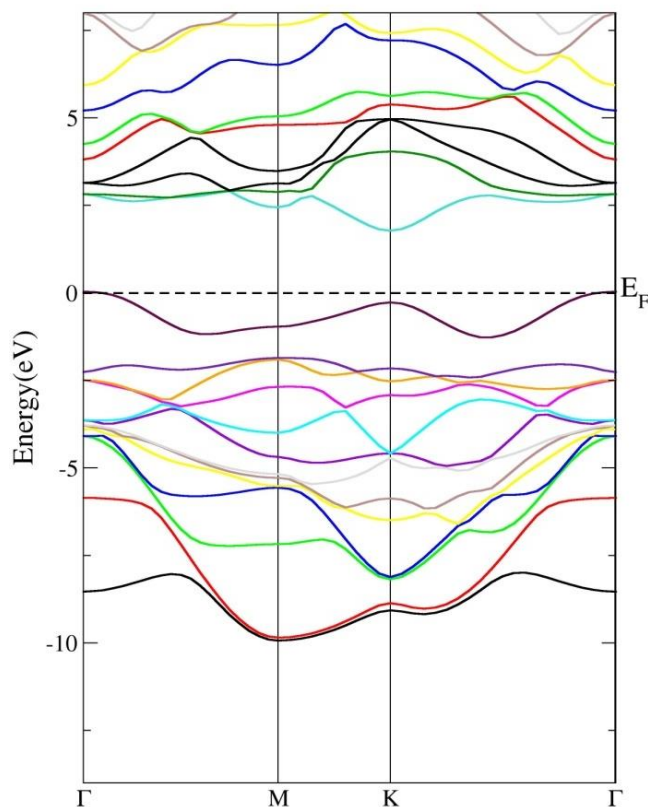
## بخش اپتیک

شکل (۶) پنل (a) بخش حقیقی تابع دی‌الکتریک<sup>۲</sup> را نشان می‌دهد که مقدار  $\text{Re}_\varepsilon$  در انرژی صفر، ثابت دی‌الکتریک استاتیکی را نشان می‌دهد که برای جهت‌های xx و zz متفاوت است. این موضوع بیانگر ناهمسانگردی اپتیکی در  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  است. در انرژی‌های پایین تا حدود ۵ eV، قله‌های بزرگی مشاهده می‌شود که مربوط به انتقال‌های الکترونی بین نوار ظرفیت و نوار رسانش هستند. در انرژی‌های بالاتر،  $\text{Re}_\varepsilon$  کاهش یافته و حتی در برخی نقاط مقادیر منفی می‌گیرد که بیانگر امکان رفتار فلزی - پلاسماگونه در فرکانس‌های خاص است. وجود چندین قله در محدوده ۳-۶ eV نشان‌دهنده پاسخ اپتیکی قوی در محدوده فرابنفش است که برای کاربردهای اپتوالکترونیکی مانند فتودیود و فیلترهای نوری اهمیت دارد.

پنل (b) بخش موهومی تابع دی‌الکتریک<sup>۳</sup>  $\text{Im}_\varepsilon$  شدت جذب نوری را نشان می‌دهد. قله‌های اصلی در محدوده ۳ تا ۸ eV مشاهده می‌شوند که مربوط به انتقال‌های الکترونی قوی Mo-d به N-p است. حضور قله‌های متعدد نشان می‌دهد که  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  قابلیت جذب نوری قابل توجهی در ناحیه فرابنفش و بخشی از طیف مرئی دارد. مقایسه جهت‌های xx و zz بیانگر ناهمسانگردی در جذب نور است. در راستای xx در محدوده ۳ تا ۱۰ الکترون ولت بیشترین جذب و در ۴ تا ۱۲ الکترون ولت در راستای zz بیشترین جذب اتفاق افتاده است.

پنل (c) تابع اتلاف انرژی را نشان می‌دهد که بیانگر پاسخ پلاسما و پیک‌های انرژی از دست‌رفته الکترون‌های پرانرژی است. قله اصلی در حدود ۲۲-۲۴ eV قرار دارد که متناظر با فرکانس پلاسما ماده است. شدت بالای این قله نشان می‌دهد که  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  دارای پایداری الکترونی خوبی در برابر برانگیزش‌های پرانرژی است. نتایج محاسبات اپتیکی نشان می‌دهد که  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  یک ماده نیمه‌رسانای ناهمسان‌گرد با پاسخ اپتیکی قوی در محدوده مرئی و فرابنفش است. انتقال‌های الکترونی عمدتاً از اوربیتال‌های d مولیدن به اوربیتال‌های p نیتروژن رخ می‌دهند. وجود پیک‌های واضح در تابع اتلاف انرژی بیانگر رفتار پلاسما در انرژی‌های بالا است. این ویژگی‌ها  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  را برای کاربردهای اپتوالکترونیک و فوتونیک مانند جاذب‌های نوری و ادوات پلاسما - نوری مناسب می‌سازد.

مقدار خود را در نزدیکی نقطه  $\Gamma$  دارد در حالی که نوار رسانش<sup>۱</sup> نیز در همان نقطه حداقل مقدار خود را نشان می‌دهد. این موضوع تأیید می‌کند که  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  یک نیمه‌رسانای مستقیم باندگپ است. پهنای نوارها نشان‌دهنده میزان برهم‌کنش اتمی است. نوارهای پهن‌تر در ناحیه ظرفیت -10 تا -2 eV مربوط به برهم‌کنش قوی بین اوربیتال‌های p نیتروژن و d مولیدن هستند. در ناحیه رسانش غالباً اوربیتال‌های d مولیدن مشارکت اصلی دارند که با نتایج چگالی حالات (DOS/PDOS) همخوانی دارد. وجود گاف مستقیم نشان می‌دهد که  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  می‌تواند کارایی بالایی در کاربردهای اپتوالکترونیکی مانند جذب نور، سلول‌های خورشیدی دوبعدی و دیودهای نشر نور داشته باشد. برهم‌کنش قوی Mo-N باعث پایداری الکترونی ماده و همچنین انتقال الکترونی کارآمد می‌شود. قرار گرفتن لبه‌های نوار رسانش و ظرفیت در یک نقطه ( $\Gamma$ ) ویژگی‌ای است که معمولاً در مواد دوبعدی نوظهور با پتانسیل بالا در فناوری‌های الکترونیک نوری مشاهده می‌شود.



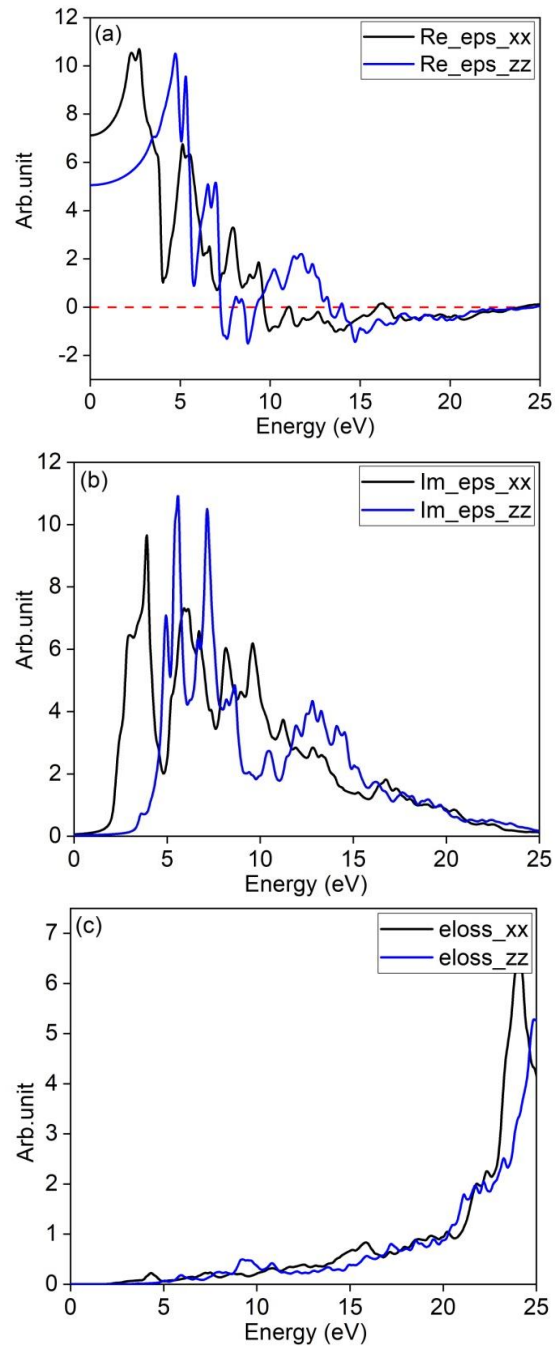
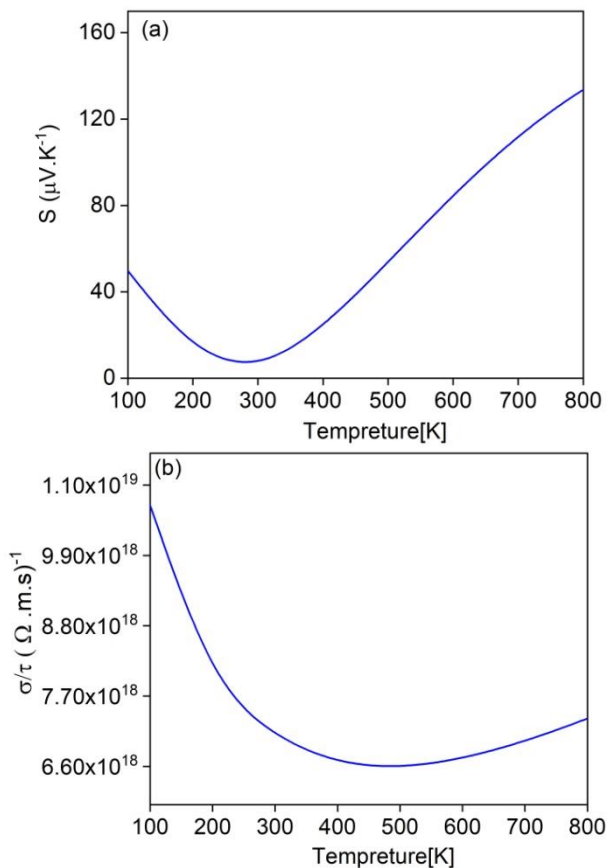
شکل ۵. ساختار نواری ترکیب  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$

می‌دهد. پنل (c) رسانندگی گرمایی الکترونی با افزایش دما رشد می‌کند و در محدوده ۸۰۰ K به حداکثر مقدار خود می‌رسد. افزایش رسانندگی گرمایی الکترونی ناشی از افزایش انرژی حامل‌ها در دماهای بالاتر است.

پنل (d) ضریب مریت ترموالکتریک پارامتر کلیدی برای کارایی مواد ترموالکتریک است و به صورت زیر تعریف می‌شود مقدار ZT با افزایش دما رشد می‌کند و در ۸۰۰ K به حدود ۰/۴۵ می‌رسد. این مقدار گرچه پایین‌تر از مواد ترموالکتریک تجاری (مانند  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$  با  $ZT=1$ ) است؛ اما برای یک ماده دوبعدی جدید قابل توجه است.

روند صعودی ZT در دماهای بالا نشان‌دهنده پتانسیل  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  برای کاربرد در تولید انرژی ترموالکتریک در دماهای متوسط تا بالا است.

پنل (e) ضریب توان  $\text{PF}=S^2\sigma$  افزایش شدید PF در دماهای بالا مشاهده می‌شود. این روند نشان‌دهنده بهبود کارایی تبدیل انرژی در شرایط دمایی بالا است.  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  یک ماده p-type نیمه‌رسانا با ضریب سیبک مثبت است. با افزایش دما، علی‌رغم کاهش رسانندگی الکتریکی، افزایش سیبک باعث رشد ZT می‌شود. مقدار ZT ۰/۴۵ در ۸۰۰ K،  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  را به یک کاندیدای بالقوه برای کاربردهای ترموالکتریک در فناوری‌های نوین انرژی تبدیل می‌کند.



شکل ۶. نمودار بخش حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک و تابع اتلاف انرژی الکترون

### خواص ترموالکتریک

شکل (۷) پنل (a) ضریب سیبک را نشان می‌دهد که با افزایش دما از حدود  $40 \mu\text{V/K}$  در دمای پایین شروع شده، پس از یک کاهش در حوالی ۲۵۰-۳۰۰ K، با افزایش دما تا ۸۰۰ K به بیش از  $120 \mu\text{V/K}$  می‌رسد. این رفتار نشان‌دهنده وابستگی قوی رسانش حامل‌ها به دماست. مقادیر مثبت ضریب سیبک نشان می‌دهد که حامل‌های غالب، حفره‌ها (p-type) هستند. پنل (b) مقدار رسانندگی با افزایش دما کاهش یافته و سپس در دماهای بالاتر تقریباً به حالت اشباع می‌رسد. این کاهش به دلیل افزایش پراکندگی الکترون - فونون در دماهای بالا رخ

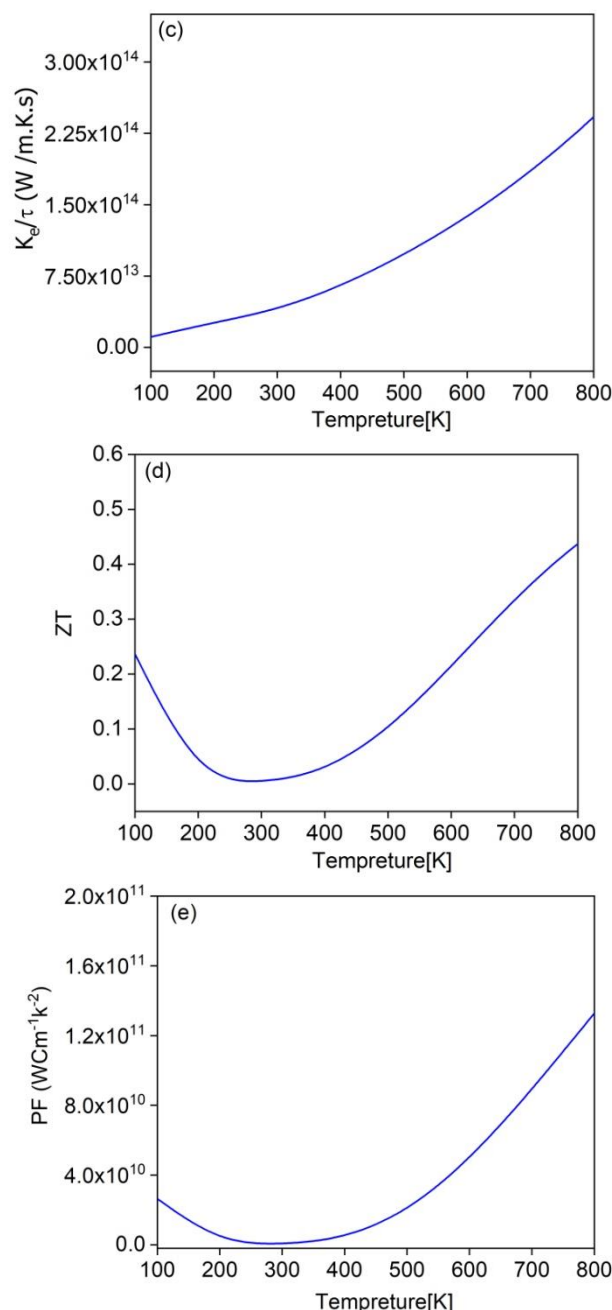
## نتیجه گیری

در این پژوهش، ماده دوبعدی  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  از جنبه‌های ساختاری، الکترونیکی، اپتیکی و ترموالکتریک بر پایه نظریه تابعی چگالی (DFT) بررسی شد. نتایج محاسبات نشان داد که این ماده از پایداری ترمودینامیکی و دینامیکی بالایی برخوردار است و دارای گاف نواری مستقیم در حدود ۲ eV است که آن را به عنوان یک نیمه‌رسانای امیدبخش برای کاربرد در ادوات نانوالکترونیکی و اپتوالکترونیکی معرفی می‌کند.

مقایسه نتایج با مواد دوبعدی شناخته شده مانند  $\text{MoS}_2$  نشان می‌دهد که اگرچه مقدار گاف نواری  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  حدود ۱/۹ تا ۲ eV با  $\text{MoS}_2$  حدود ۱/۸ eV مشابه است؛ اما پایداری محیطی و مکانیکی بالاتر و ناهمسان‌گردی اپتیکی قوی‌تر در  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  مشاهده می‌شود. این ویژگی‌ها سبب می‌شوند که این ماده در طراحی ادوات نوری ناهمسان‌گرد و فتودیودهای زاویه‌پذیر برتری داشته باشد.

علاوه بر این، بررسی خواص ترموالکتریک نشان داد که مقدار ضریب سیبک (S) و ضریب شایستگی ترموالکتریک (ZT) در  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  در دماهای بالا قابل توجه بوده و در مقایسه با  $\text{MoS}_2$  اندکی افزایش دارد که این امر بیانگر پتانسیل بالاتر در تبدیل انرژی گرمایی به الکتریکی است.

در مجموع، ترکیب پایداری ساختاری و محیطی بالا، خواص الکترونیکی قابل تنظیم، پاسخ اپتیکی ناهمسان‌گرد و عملکرد ترموالکتریک مطلوب، ماده  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  را به یکی از کاندیداهای برتر نسل جدید مواد دوبعدی برای کاربرد در نانوالکترونیک، اپتوالکترونیک و انرژی ترموالکتریک تبدیل می‌نماید.



شکل ۷. نمودارهای ضریب سیبک، رسانندگی، گرمایی، ضریب مریت و ضریب پاور فاکتور

## References

- [1] Srivastava, M., Srivastava, A., & Pandey, S. K. (2020). Suitability of graphene monolayer as sensor for carcinogenic heavy metals in water: A DFT investigation. *Applied Surface Science*, 517 : 146021.
- [2] Chilukuri, B., Mazur, U., & Hipps, K. W. (2020). Structure, properties, and reactivity of porphyrins on surfaces and nanostructures with periodic DFT calculations. *Applied Sciences*, 10 :740.
- [3] Khosravi, M., Moafpourian, G., & Badehian, H. A. (2020). Optical spectra of carbon-substituted silicene: A first principle study. *Optik*, 218 : 165247.
- [4] Yin, J., Li, J., Hang, Y., Yu, J., Tai, G., Li, X., ... & Guo, W. (2016). Boron nitride nanostructures:

## منابع

- fabrication, functionalization and applications. *Small*, 12 :2942-2968.
- [5] Yoshida, M., Ye, J., Nishizaki, T., Kobayashi, N., & Iwasa, Y. (2016). Electrostatic and electrochemical tuning of superconductivity in two-dimensional  $\text{NbSe}_2$  crystals. *Applied Physics Letters*, 108 .
  - [6] Kang, S., Lee, D., Kim, J., Capasso, A., Kang, H. S., Park, J. W., ... & Lee, G. H. (2020). 2D semiconducting materials for electronic and optoelectronic applications: potential and challenge. *2D Materials*, 7 :022003.
  - [7] Eda, G., Fanchini, G., & Chhowalla, M. (2008). Large-area ultrathin films of reduced graphene oxide as a transparent and flexible electronic

- material. *Nature nanotechnology*, 3 :270-274.
- [8] Huang, X., Leng, M., Xiao, W., Li, M., Ding, J., Tan, T. L., ... & Xue, J. (2017). Activating basal planes and S-terminated edges of  $\text{MoS}_2$  toward more efficient hydrogen evolution. *Advanced functional materials*, 27 :1604943.
- [9] Bonaccorso, F., Colombo, L., Yu, G., Stoller, M., Tozzini, V., Ferrari, A. C., ... & Pellegrini, V. (2015). Graphene, related two-dimensional crystals, and hybrid systems for energy conversion and storage. *Science*, 347:1246501.
- [10] Cha, E., Patel, M. D., Park, J., Hwang, J., Prasad, V., Cho, K., & Choi, W. (2018). 2D  $\text{MoS}_2$  as an efficient protective layer for lithium metal anodes in high-performance Li-S batteries. *Nature nanotechnology*, 13:337-344.
- [11] Simon, P., & Gogotsi, Y. (2008). Materials for electrochemical capacitors. *Nature materials*, 7 : 845-854..
- [12] Yang, S., Zhang, P., Nia, A. S., & Feng, X. (2020). Emerging 2D materials produced via electrochemistry. *Advanced Materials*, 32 : 1907857.
- [13] Ren, X., Pang, L., Zhang, Y., Ren, X., Fan, H., & Liu, S. F. (2015). One-step hydrothermal synthesis of monolayer  $\text{MoS}_2$  quantum dots for highly efficient electrocatalytic hydrogen evolution. *Journal of Materials Chemistry A*, 3: 10693-10697.
- [14] Tao, J., Chai, J., Lu, X., Wong, L. M., Wong, T. I., Pan, J., ... & Wang, S. (2015). Growth of wafer-scale  $\text{MoS}_2$  monolayer by magnetron sputtering. *Nanoscale*, 7: 2497-2503.
- [15] Pyeon, J. J., Kim, S. H., Jeong, D. S., Baek, S. H., Kang, C. Y., Kim, J. S., & Kim, S. K. (2016). Wafer-scale growth of  $\text{MoS}_2$  thin films by atomic layer deposition. *Nanoscale*, 8: 10792-10798.
- [16] Cai, Z., Liu, B., Zou, X., & Cheng, H. M. (2018). Chemical vapor deposition growth and applications of two-dimensional materials and their heterostructures. *Chemical reviews*, 118: 6091-6133.
- [17] Pawbake, A. S., Pawar, M. S., Jadkar, S. R., & Late, D. J. (2016). Large area chemical vapor deposition of monolayer transition metal dichalcogenides and their temperature dependent Raman spectroscopy studies. *Nanoscale*, 8: 3008-3018.
- [18] Kong, D., Wang, H., Cha, J. J., Pasta, M., Koski, K. J., Yao, J., & Cui, Y. (2013). Synthesis of  $\text{MoS}_2$  and  $\text{MoSe}_2$  films with vertically aligned layers. *Nano letters*, 13: 1341-1347.
- [19] Hong, Y. L., Liu, Z., Wang, L., Zhou, T., Ma, W., Xu, C., ... & Ren, W. (2020). Chemical vapor deposition of layered two-dimensional  $\text{MoSi}_2\text{N}_4$  materials. *Science*, 369: 670-674.
- [20] Guo, J., Peng, Q., Fu, H., Zou, G., & Zhang, Q. (2015). Heavy-metal adsorption behavior of two-dimensional alkalization-intercalated MXene by first-principles calculations. *The Journal of Physical Chemistry C*, 119: 20923-20930.
- [21] Nyamdelger, S., Ochirkhuyag, T., Sangaa, D., & Odkhuu, D. (2020). First-principles prediction of a two-dimensional vanadium carbide (MXene) as the anode for lithium ion batteries. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 22: 5807-5818.
- [22] Almeida, H. V., Tenreiro, M. F., Louro, A. F., Abecasis, B., Santinha, D., Calmeiro, T., ... & Serra, M. (2021). Human extracellular-matrix functionalization of 3D hiPSC-based cardiac tissues improves cardiomyocyte maturation. *ACS applied bio materials*, 4: 1888-1899.
- [23] Rezazadeh, H., Hantehzadeh, M., & Boochani, A. (2022). Surface Effect on Electronic, Magnetic and Optical Properties of  $\text{PtMnBi}$  Half-Heusler: A DFT Study. *Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques*, 16: 548-561.
- [24] Jazideh, A., Boochani, A., Arghavani Nia, B., & Rezaee, S. (2024). Mechanical Stability, Magneto Optic, of  $\text{CoRuVGa}$  Heusler. *Quarterly Journal of Optoelectronic*, 6: 43-50. [In Persian]
- [25] Rani, D., Bainsla, L., Suresh, K. G., & Alam, A. (2019). Experimental and theoretical investigation on the possible half-metallic behaviour of equiatomic quaternary Heusler alloys:  $\text{CoRuMnGe}$  and  $\text{CoRuVZ}$  ( $Z = \text{Al, Ga}$ ). *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 492, 165662.
- [26] Mondal, S., Mazumdar, C., Ranganathan, R., Alleno, E., Sreeparvathy, P. C., Kanchana, V., & Vaitheeswaran, G. (2018). Ferromagnetically correlated clusters in semimetallic  $\text{Ru}_2\text{NbAl}$  Heusler alloy and its thermoelectric properties. *Physical Review B*, 98: 205130.
- [27] Born, M., & Oppenheimer, R. (1927). Zur Quantentheorie der Molekeln. *Annalen der Physik*, 389, 457-484
- [28] Hohenberg, P., & Kohn, W. (1964). Inhomogeneous electron gas. *Physical review*, 136:864.
- [29] Kohn, W., & Sham, L. J. (1965). Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical review*, 140: 1133.
- [30] Blaha, P., Schwarz, K., Sorantin, P., & Trickey, S. B. (1990). Full-potential, linearized augmented plane wave programs for crystalline systems. *Computer physics communications*, 59: 399-415.