

# Study the Electronic Structure and Magnetic Properties of Mxene Nb<sub>2</sub>C Using Ab-initio Study Method<sup>1</sup>

Ali Hossein Mohammad Zaheri<sup>\*2</sup> and Hadi Mohammad Zaheri<sup>3</sup>

## Abstract

Today, research is directed toward finding new materials for various applications, from medicine to energy storage and other optoelectronic devices. Recently, a new phase of materials has been highlighted due to their flexible and machining nature known as Max Phases (Transition Metal<sub>n+1</sub>A(Al/Si)X(C/N)<sub>n</sub>) (MAX Phases). According to them, MAX Nb<sub>2</sub>AlC has been used in this work. Mxenes materials are obtained from these MAX phases by removing aluminum. There are different methods to obtain these two-dimensional materials, which are generally divided into two categories: experimental and simulation. Using the simulation method is more accurate due to being away from laboratory errors and cost-effective. Therefore, in this work, this method has been used to obtain Mxene niobium carbide and related calculations. For this purpose, the density functional theory and ab-initio method, which form the basis of the quantum espresso software package have been used to investigate the electronic and magnetic properties of this two-dimensional material. The obtained results show that this compound has good stability and good electronic conductivity, but it cannot be magnetized. To ensure the results of this research, the obtained results were compared with the results of experimental works and simulations of other researchers and it was found that they correspond very well.

**Keywords:** Niobium Carbide, Mxenes, Quantum Espresso Computing Package, 2D Materials, Density Functional Theory.

---

<sup>1</sup> DOI: 10.22051/ijap.2024.46345.1389

<sup>2</sup> Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Science, Payame Noor University, Hamedan, Iran. (Corresponding Author) Email: ahmzaheri@pnu.ac.ir

<sup>3</sup> Instructor, Department of Computer, Faculty of Engineering, Islamic Azad University, Branch of Arak, Markazi, Iran. Email: hadimohammadzaheri@yahoo.com

# مطالعه ویژگی‌های الکترونیکی و مغناطیسی مکسین $Nb_2C$ به روش محاسبات ابتدا به ساکن<sup>۱</sup>

علی حسین محمد ظاهری\*<sup>۲</sup> و هادی محمد ظاهری<sup>۳</sup>

## چکیده:

امروزه پژوهش‌ها به سمت یافتن مواد جدید برای کاربردهای گسترده، از پزشکی گرفته تا ذخیره انرژی و همچنین سایر اپتوالکترونیک‌ها، سوق داده شده است. به تازگی، فاز جدیدی از مواد به دلیل ماهیت انعطاف‌پذیر و ماشین‌کاری آن‌ها برجسته شده است که با نام  $MAX$  (Transition Metal<sub>n+1</sub>A(Al/Si)X(C/N)<sub>n</sub>) (مکس فازها) شناخته می‌شوند. به عبارت دیگر گروهی از فلزات واسطه و آلومینیوم یا سیلیکون که به صورت شیمیایی با کربن یا نیتروژن ترکیب می‌شوند، مکس فاز نامیده می‌شوند. نمونه‌های رایج از مکس فاز عبارتند از  $Nb_2AlC$ ،  $V_2GeC$ ،  $Ti_2AlN$ ،  $Ti_2AlC$  و غیره که با توجه به اهداف، در این کار از  $Nb_2AlC$  استفاده شده است. مواد مکسین از این مکس فازها بدست می‌آیند. مکسین‌ها دسته‌ای از مواد دو بعدی هستند که به دلیل ویژگی‌های منحصر به فرد و کاربردهای بالقوه خود توجه زیادی را در جامعه علمی به خود جلب کرده‌اند. در حقیقت، کاربردها، کرنیتزیدها و نیتزیدهای فلزات واسطه‌ای دو بعدی، به عنوان مکسین‌ها شناخته می‌شوند. روش‌های مختلفی جهت به دست آوردن مکسین‌ها وجود دارد که به صورت کلی به دو دسته تجربی و شبیه‌سازی تقسیم می‌شوند. استفاده از روش شبیه‌سازی مقرون به صرفه می‌باشد. همچنین، به دلیل دوری از خطاهای آزمایشگاهی دارای دقت بالایی است. از این رو، در کار پیشرو جهت یافتن مکسین  $Nb_2C$  و محاسبات مربوطه این روش بکار گرفته شده است. برای این منظور از تئوری تابعی چگالی و به روش ابتدا به ساکن که مبنای بسته‌ی نرم‌افزاری کوانتوم اسپر سو را تشکیل می‌دهند، جهت بررسی ویژگی‌های الکترونیکی و مغناطیسی مکسین  $Nb_2C$  استفاده شده است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که این ترکیب پایداری خوبی داشته و از لحاظ الکترونیکی رسانایی مناسبی دارد ولی قابلیت مغناطیس‌شدگی ندارد. جهت اطمینان یافتن از نتایج بدست آمده، آن‌ها را با نتایج کارهای تجربی و شبیه‌سازی دیگر پژوهشگران مقایسه و مشخص شد که هماهنگی بسیار خوبی با هم دارند.

**واژگان کلیدی:** کاربردها، نیتروژن، مکسین‌ها، بسته محاسباتی کوانتوم اسپر سو، مواد دو بعدی، تئوری تابعی چگالی.

<sup>۱</sup> DOI: 10.22051/ijap.2024.46345.1389

<sup>۲</sup> استادیار، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه پیام نور، همدان، ایران (نویسنده مسئول). Email: ahmzaheri@pnu.ac.ir

<sup>۳</sup> مربی، گروه کامپیوتر، دانشکده فنی، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد اراک، مرکزی، ایران. Email: hadimhammadzaheri@yahoo.com

## ۱. مقدمه

در دهه گذشته، علاقه به مواد دو بعدی به دلیل چشم انداز کاربرد بسیار زیاد و ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی قابل توجه ذاتی آن‌ها افزایش یافته است [۱,۲]. در حقیقت، از زمان کشف گرافن و انواع آن، علاقه به مواد دو بعدی رشد قابل توجهی داشته است. از این رو، سنتز، ویژگی‌ها و کاربردهای مواد دو بعدی جدید به یکی از جذاب‌ترین حوزه‌های پژوهشی در علم و فناوری تبدیل شده است. مواد دو بعدی به زیرگروه‌هایی چون دی‌کالکوژنیدهای فلزات واسطه [۳]، نیتrideها [۴]، سولفیدهای فلزات دو واسطه، فسفیدها و سلنیدها [۵,۶]، مواد آلنی و فلزی-آلنی [۷]، اکسید فلزات و هیدروکسیدها [۸]، ایکسن‌ها مانند گرافن، بوروفن، فسفرن، سیلیسن، ژرمانن، استنن [۹,۱۰] و همچنین مکسین‌ها طبقه‌بندی می‌شوند. در سال ۲۰۱۱، اولین کاربرد تیتا نیوم دو بعدی ( $Ti_3C_2T_x$  MXene) کشف شد که مسیر را برای خانواده مکسین‌های بدست آمده از کاربردها و نیتrideهای فلزات واسطه دو بعدی هموار کرد [۱۱]. مکسین‌ها از آن زمان به خانواده بزرگ و به سرعت در حال گسترش مواد دو بعدی تبدیل شده‌اند. بابک آناسوری و یوری گوگوتسی خانواده جدیدی از مواد با حدود ۳۰ عضو به نام مکسین تولید کردند [۱۲]. مکسین‌ها دارای فرمول  $M_{n+1}X_nT_z$  ( $n=1,2,3$ ) هستند.

در حقیقت، نام "MXene" از فرمول شیمیایی این مواد گرفته شده است، جایی که "M" نشان دهنده یک فلز انتقالی اولیه (مانند تیتانیوم، وانادیم، یا نیوبیم و کروم)، "X" نشان‌دهنده کربن یا نیتروژن، و "ene" نشان‌دهنده حذف عنصر "A" از مکس (MAX) فاز مادر است. حذف عنصر "A" طی یک فرآیند شبیه‌سازی که جملگی به حذف عنصر آلومینیم از مکس فازها منجر می‌شود، انجام می‌گیرد و  $T_z$  نشان‌دهنده پایان‌های مختلف چون هیدروکسیل، فلوئور و (یا) اتم‌های اکسیژن است. دو تا چهار لایه از M با لایه‌های کربن و (یا) نیتروژن در ساختار خود در هم آمیخته شده‌اند [۱۳].

بر خلاف گرافن، سطح مکسین به دلیل پایانه‌های O و (یا OH) آب دوست است [۱۴]. چند نمونه از مکسین‌ها عبارتند از،  $Ti_2C$ ،  $Ti_3C_2$ ،  $Nb_2C$ ،  $Ti_2N$ ،  $Nb_2C$ ،  $Cr_2C$  که در این کار به بررسی ویژگی‌های الکترونیکی و مغناطیسی  $Nb_2C$  پرداخته شده است. از ویژگی‌های کلیدی مکسین‌ها می‌توان به ساختار دو بعدی، رسانایی بالا (این مواد به دلیل وجود فلزات واسطه در ساختار خود، رسانایی الکتریکی عالی از خود نشان می‌دهند)، مساحت سطح بالا، آب دوستی، (مکسین‌ها ذاتاً آب دوست هستند، به این معنی که می‌توانند به راحتی با آب تعامل کنند که این ویژگی آن‌ها را برای کاربرد در تصفیه آب و نمک‌زدایی مناسب می‌کند) و استحکام مکانیکی اشاره کرد. همچنین

این مواد دارای کاربردهای بالقوه‌ای مانند دستگاه‌های ذخیره‌سازی انرژی، (چون ابرخازن‌ها و باتری‌ها) محافظت داخل الکترومغناطیسی (EMI)، کاتالیزور، حسگرها، تصفیه آب می‌باشند. با توجه به اینکه در این کار ویژگی‌های مکسین  $Nb_2C$  مورد بررسی قرار گرفته است، در ادامه برخی از ویژگی‌های کلیدی این ماده به صورت خلاصه آمده است:

ساختار کریستالی: این مکسین به صورت معمول دارای ساختار بلوری شش ضلعی است. رسانایی:  $Nb_2C$  دو بعدی دارای رسانایی الکتریکی خوبی است که آن را در کاربردهای الکترونیکی و الکتروشیمیایی مفید می‌کند.

مکانیکی: مکسین‌ها به صورت کلی دارای ویژگی‌های مکانیکی خوبی از جمله استحکام کششی بالا و مدول الاستیک هستند. که کاربرد نیویوم نیز از این قاعده مستثنی نیست. ویژگی‌های حرارتی: این ماده‌ی دوبعدی پایداری حرارتی خوبی با نقطه ذوب و هدایت حرارتی بالا از خود نشان می‌دهد.

ویژگی‌های الکتروشیمیایی: این کاربرد سطحی به دلیل ویژگی‌های الکتروشیمیایی عالی آن اغلب در برنامه‌های ذخیره‌سازی و تبدیل انرژی استفاده می‌شود. هنگامی که مکس فازها به مکسین‌های دو بعدی لایه‌برداری می‌شوند، ویژگی‌های مغناطیسی، الکتریکی، الکتروشیمیایی و نوری را نشان می‌دهند که بسته به فلزات واسطه در سطح، ضخامت و عملکرد سطح، به ندرت در مکس فازهای اصلی آن‌ها دیده می‌شود [۱۵،۱۶]. گروه‌های عاملی جذب شده بدون تأثیر قابل توجهی بر رسانایی کل خود، ویژگی‌های مکسین از جمله آب دوستی، الکترون‌گاتیوی، شکاف نواری قابل تنظیم و قابلیت تنظیم ساختار سطحی را ارائه می‌کنند. افزون بر این، فاصله بین لایه‌های مکسین را می‌توان بدون تغییر ساختار لایه‌ای آن‌ها تغییر داد [۱۷]. می‌توان با استفاده از ویژگی‌ها و ساختار مکسین‌ها در مقادیر کافی، مواد کامپوزیتی بر پایه مکسین با پلیمرها، ماکرومولکول‌ها، نانوذرات معدنی و نانو ساختارها تهیه کرد [۱۸،۱۹]. فرصت‌های زیادی در رابطه با سطح منحصر به فرد مکسین وجود دارد، اما چالش‌های زیادی نیز در رابطه با زیست سازگاری و ایمنی آن‌ها وجود دارد.

ویژگی‌های همه‌کاره و کاربردهای امیدوارکننده مکسین‌ها منجر به پژوهش‌ها و اکتشافات گسترده در زمینه علم و مهندسی مواد شده است که پتانسیل ایجاد تحول در صنایع و فناوری‌های مختلف را دارد. در این کار این مواد به روش شبیه‌سازی مدل شدند. از این رو، مکسین‌ها منجر به پیشرفت‌های گوناگونی از جمله آنتن‌های مکسینی [۲۰]، قلم‌های مکسینی [۲۱]، غشاء مکسینی [۲۲]، ابرخازن‌ها [۲۳]، و باتری‌های قابل شارژ [۲۴] شده‌اند. به دلیل ساختار لایه‌ای خود، این‌ها می‌توانند به راحتی به نانو صفحات تک دوبعدی بسیار نازک (نانو صفحات مکسینی، و نقاط کوانتومی مکسینی) (صفر

بعدی) تبدیل شوند [۲۶،۲۵]. همانطور که روند افزایشی در چاپ مقالات مربوط به این مواد نشان می‌دهد، مکسین‌ها در سال‌های کنونی به عنوان یک کانون پژوهشی در حال ظهور هستند. همچنین، آن‌ها نتایج امیدوارکننده‌ای را برای کاربردها در دستگاه‌های تقسیم آب، اصلاح محیط، پلاسمون‌های سطحی، حسگرهای زیستی، زیست‌پزشکی و بیوفناوری نشان داده‌اند [۲۷-۲۹]. افزون بر این، آن‌ها ثابت کرده‌اند که یک ماده الکتروکاتالیز برای دستگاه‌های تبدیل انرژی چون نانو ژنراتورهای تریوالکتریک هستند [۳۰].

## ۲. روش محاسبات

یکی از روش‌های مطالعه‌ی سامانه‌های بس‌ذره‌ای در جامدات دوره‌ای تمرکز بر تئوری تابعیت چگالی می‌باشد. حل معادله شرودینگر برای سامانه‌های بس‌ذره‌ای نیاز به راه حل جایگزین دارد. نظریه تابعی چگالی (DFT<sup>۱</sup>) نظریه‌ای در چارچوب مکانیک کوانتومی برای بررسی ساختار الکترونی مواد در سامانه‌های بس‌ذره‌ای است که می‌توان گفت جایگزین و یا روشی برای حل معادله شرودینگر است. این نظریه ریشه در مدل توماس-فرمی دارد و بر پایه دو قضیه هوهنبرگ-کوهرن بنا شده است. از این رو پژوهشگران، دانشگاه‌ها و مؤسسات علمی-پژوهشی و حتی صنعتی بر آن شدند که با استفاده از ترکیب سخت‌افزار، نرم‌افزار، و فیزیک به پاسخگویی این ابرمسئله‌های ماده چگال اقدام کنند. در این راستا روش‌های شبیه‌سازی مختلفی ارائه شد که یکی از آن‌ها کوانتوم اسپرسو می‌باشد. تهیه و معرفی بسته‌ی کوانتوم اسپرسو به وسیله مرکز شبیه‌سازی ملی CNR-IOM DEMOCRITOS در تریست (ایتالیا) و شرکای آن با همکاری مراکز مختلف در سراسر جهان مانند MIT، دانشگاه پرینستون، دانشگاه مینه‌سوتا انجام شده است. این پروژه به واسطه بنیاد کوانتوم اسپرسو هماهنگ می‌گردد. این بسته نرم‌افزاری مجموعه‌ای برای محاسبات ساختار الکترونیکی و مدل‌سازی مواد است که به صورت رایگان و به عنوان نرم‌افزار رایگان و باز توزیع شده است. از جمله مهم‌ترین ویژگی‌های این بسته محاسباتی می‌توان به این نکته اشاره کرد که اجزای اصلی توزیع کوانتوم اسپرسو به گونه‌ای طراحی شده‌اند که برای بهره‌برداری از معماری ابررایانه‌های امروزی قابل استفاده می‌باشد که با سطوح و لایه‌های گوناگون ارتباط بین پردازنده‌ها مشخص می‌شوند. این ویژگی به ما کمک می‌کند که به وسیله‌ی موازی‌سازهایی چون MPI و OPENMP و با امکان موازی‌سازی، بتوان، برای اجرای محاسبات تعداد هسته‌های به مراتب بیشتری را به کار گرفت که این کار سبب کاهش زمان اجرای محاسبات خواهد شد. سازگاری بسیار بالا با دستگاه

<sup>1</sup> Density Functional Theory

عامل‌های پایه لینوکس از دیگر ویژگی‌های این بسته محاسباتی می‌باشد، که به دسترسی آزاد و رایگان این نرم‌افزار مزیت بالایی را می‌افزاید.

این بسته محاسباتی بر اساس تئوری تابعیت چگالی و به صورت شبه‌پتانسیلی عمل می‌کند. شبه‌پتانسیل‌ها تقریبی هستند که زمان محاسباتی را با جایگزینی الکترون‌های هسته با پتانسیل ساده شده کاهش می‌دهند. در مکانیک کوانتومی و علم مواد محاسباتی، شبه‌پتانسیل یک تقریب ریاضی است که برای ساده‌سازی رفتار الکترون‌ها در محاسبات ساختار الکترونیکی اتم‌ها و جامدات استفاده می‌شود. هدف شبه‌پتانسیل‌ها کاهش زمان محاسباتی شبه‌سازی‌ها در عین حفظ دقت در توصیف ویژگی‌های الکترونیکی ماده مورد مطالعه است. ایده اصلی شبه‌پتانسیل‌ها جایگزینی نمایش دقیق محاسبات برهمکنش الکترون-الکترون، به ویژه شامل الکترون‌های هسته‌ای با پیوند محکم، با پتانسیل موثری است که ویژگی‌های اساسی برهمکنش را به تصویر می‌کشد. این به پژوهشگران اجازه می‌دهد تا منابع محاسباتی را بر روی رفتار الکترون‌های ظرفیت متمرکز کنند، که بیشتر به ویژگی‌های شیمیایی و فیزیکی یک ماده مرتبط هستند. در حقیقت، شبه‌پتانسیل جایگزین برهمکنش واقعی الکترون-یون می‌شود. در نتیجه برهمکنش هسته اتم و تمامی الکترون‌ها به استثنای بیرونی‌ترین لایه ظرفیتی توسط شبه‌پتانسیل توصیف می‌گردد. میدان پتانسیل که در فاصله نزدیک هسته اتمی با سرعت در حال تغییر است با تابعی صاف‌تر<sup>۱</sup> که می‌تواند به درستی میدان پتانسیل با فاصله دور از هسته را شبیه‌سازی کند جایگزین می‌گردد. مزیت این روش این است که، به پایه‌های موج صفحه‌ای کمتری برای بسط تابع موج اصلی نیاز دارد و این امر سبب افزایش سرعت محاسبات می‌شود.

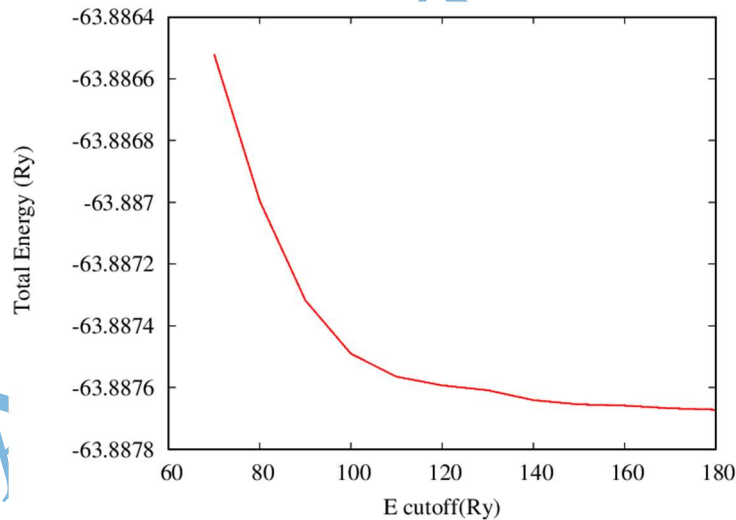
شاید مهمترین و کاربردی‌ترین مجموعه کوانتوم اسپرسو، بسته PWSCF<sup>۱</sup> (میدان امواج تخت خود سازگار) دانست چرا که در بیشتر ویژگی‌ها و اهدافی که در مورد مواد در نظر گرفته می‌شود کاربرد دارد. این بسته پاسخ معادلات کوهن-شم خودسازگار مربوط به یک جامد تناوبی را بدست می‌آورد. با حل این معادلات می‌توان به مقادیر انرژی نهایی سامانه، بهینه‌ترین ثابت شبکه و بهینه‌ترین محل قرارگیری اتم‌ها در داخل سلول واحد دست یافت و این مرحله از محاسبات را می‌توان اساس و اولین قدم در آغاز محاسباتی همچون ویژگی‌های الکترونیکی، اپتیکی، فونونی و غیره دانست. با توجه به مطالبی که در بالا بیان شده، محاسبات مربوطه در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با استفاده از این بسته نرم‌افزاری انجام شده است. برای این منظور از بستگی تبدیلی [۳۱-۳۲]، تقریب شیب تعمیم‌یافته [۳۳] و روش برهم نهی امواج تخت [۳۴] جهت بهینه‌سازی ساختاری و

<sup>۱</sup> Plane-Wave Self-Consistent Field

محاسبه ساختار نواری استفاده شد. جهت رسیدن به یک بهینه حجم، کمینه انرژی، کمینه نیروی بین اتم‌ها و موقعیت‌های اتمی از یک الگوریتم شبه-نیوتنی [۳۵] استفاده شده است.

### ۳. نتایج و بحث

داشتن اطلاعات قابل اتکاء و مطمئن نیازمند همگرایی با دقت بالا در فایل‌های ورودی مورد نظر می‌باشد. از جمله مقادیر ورودی همگرایی انرژی قطع<sup>۱</sup> می‌باشد. برای این منظور به ازای مقادیر مختلف ولی منظم انرژی قطع، محاسبات SCF انجام می‌شود. سپس انرژی کل را برحسب انرژی قطع ترسیم می‌شود. ملاحظه می‌شود در نمودار ایجاد شده از میزان انرژی قطع مشخصی به بعد دیگر شاهد تغییر در نمودار نمی‌باشیم و نمودار به صورت افقی در می‌آید. نقطه‌ی آغاز قسمت افقی نمودار را می‌توان مقدار انرژی قطع بهینه دانست. با انجام مراحل بیان شده، نتایج در شکل (۱) آمده است و میزان انرژی بهینه ۱۵۰ Ry در نظر گرفته شد.



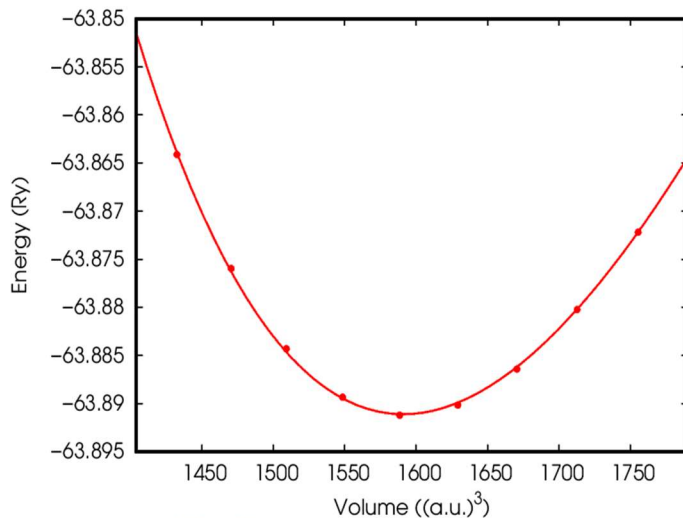
شکل ۱ نمودار انرژی کل بر حسب انرژی قطع.

گام مهم و مشخص کننده دیگر، محاسبات مش بندی ناحیه‌ی اول کاهش ناپذیر بریلوئن می‌باشد که با توجه به دو بعدی بودن مکسین به صورت  $1 \times K_x \times K_y$  می‌باشد. برای بدست آوردن بهینه این مقادیر، نمودار انرژی کل بر حسب مقادیر مختلف نقاط  $K$  رسم و با توجه به نمودار این بهینه‌ها

<sup>۱</sup> Ecutoff

بدست آمد. مرحله‌ی دیگری که در دقت محاسبات نقش اساسی دارد، مشخص کردن ثابت شبکه و بهترین موقعیت مکانی اتم‌ها در سلول پایه است.

برای این منظور به وسیله رابطه بریچ مورناگون نمودار انرژی بر حسب حجم برای این سامانه رسم شده است. این نمودار می‌تواند تاییدی بر پایداری سامانه باشد، چرا که وجود انرژی کمینه یکی از دلایل پایداری سامانه است (شکل (۲)). همانگونه که در نمودار نیز دیده می‌شود میزان حجم بهینه این ساختار در حدود ۱۶۰۰ در واحد حجم اتمی می‌باشد. از طرفی بعد از این بهینه‌سازی‌ها، ثابت شبکه در حدود  $a=3.124 \text{ \AA}$  و  $b=5.4112 \text{ \AA}$  و طول پیوند Nb-C برابر ۲.۱۷۸ آنگستروم و طول پیوند Nb-Nb برابر ۳.۰۲۶۲ آنگستروم می‌باشد.

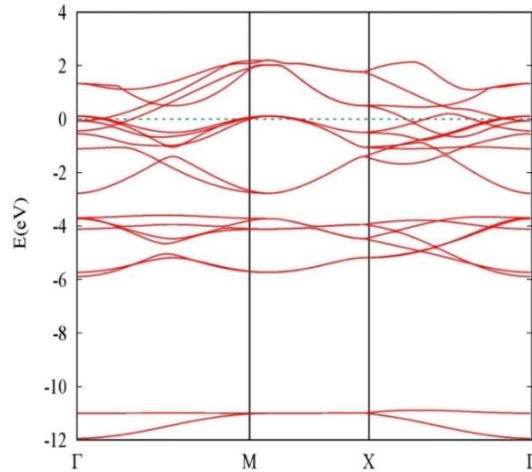


شکل ۲ نمودار انرژی کل بر حسب حجم.

جهت انجام محاسبات، پس از انجام مراحل بیان شده در بالا، ساختار مناسب است. لذا جهت بررسی ویژگی الکترونیکی دو کمیت ساختار نواری و چگالی حالات مورد مطالعه قرار می‌گیرند. این نمودارها نشان‌دهنده ویژگی مهم رسانندگی یا عدم رسانندگی می‌باشند. از این نظر که اگر در محدوده انرژی صفر (سطح فرمی) دارای حالت یا تراز باشیم، ماده دارای ویژگی رسانندگی و در صورت عدم وجود این تراز یا حالت‌ها ماده بدون رسانندگی و یا بسته به میزان شکاف موجود در این تراز دارای ویژگی نیمه‌رسانایی می‌باشد. نتیجه در شکل (۳) آمده است. نمودار نشان از آن دارد که ماده دارای ویژگی مناسب رسانایی بوده و می‌توان گفت این ماده رسانای خوبی برای بحث الکترونیکی می‌باشد. چون ترازهای انرژی در محدوده فرمی این سطح را قطع می‌کند و الکترون‌ها می‌توانند به راحتی از نوار ظرفیت به نوار رسانش بروند و در بحث رسانندگی شرکت خوبی داشته

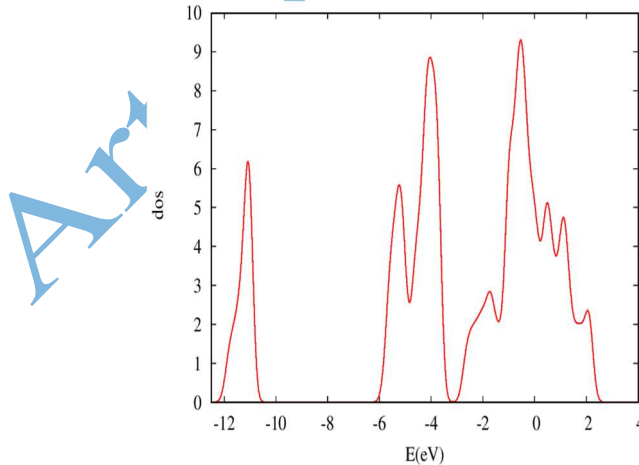


باشند. اما باید بدانیم شیب ترازها در محدوده گفته شده می تواند نشان از سرعت گروه باشد که در مورد این ساختار شیب بسیار تندی را در این ناحیه مشاهده نمی شود.



شکل ۳ نمودار ساختار نواری مکسین کاربید نیوبوم.

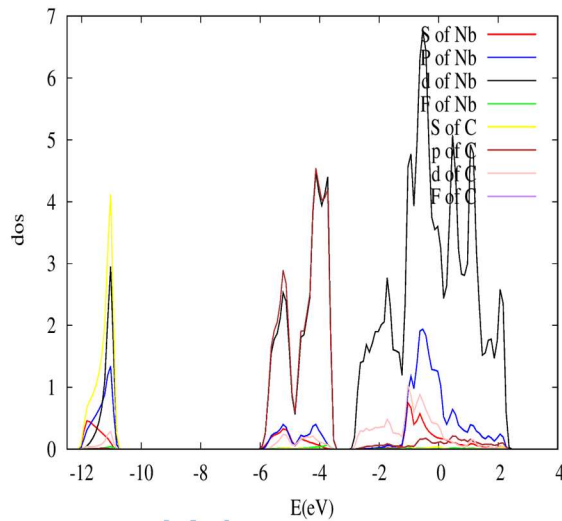
اگرچه در این محدوده از انرژی، تبهگنی مناسبی مشاهده می شود که چند تراز دارای همپوشانی بالایی می باشند. اما بررسی نمودار بسیار مفید چگالی حالات که بیانگر احتمال وجود الکترون ها در ترازهای مربوطه است و در عمل بیان دیگری از ساختار نواری ماده مورد بحث است، ضروری است و این نمودار در شکل (۴) آمده است.



شکل ۴ نمودار چگالی حالات کلی  $Nb_2C$ .

رسانندگی دوباره در این نمودار نیز مشهود است چون در انرژی صفر ( $E=0$ ) یا همان سطح فرمی شکافی مشاهده نمی شود و در این محدوده دارای قلّه احتمال هستیم. از طرفی شکاف درون نواری

پهنی که در نمودار ساختار نواری آمده نیز در محدوده ظرفیت مشاهده می شود. برای بررسی دقیق تر ویژگی های الکترونیکی، نمودار چگالی حالات جزئی بررسی می شود. در این بحث نقش اوربیتال ها بر ساختار ماده به شکل جداگانه مورد مطالعه قرار می گیرد. نتیجه این مطالعه در شکل (۵) آمده است.



شکل ۵ نمودار چگالی حالات جزئی.

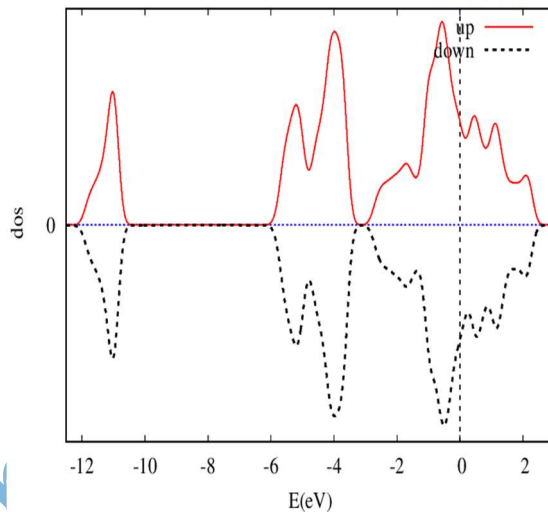
با توجه به جایگاه اتم ها در جدول مندلیف در این نمودار مشاهده می شود که سهم اوربیتال های d , p , در اتم های Nb دارای مقدار بالاتری می باشد، چرا که این عنصر در جمع عناصر واسطه قرار داشته و این اوربیتالشان در حال پر شدن است. همچنین، الکترون های موجود در آن ها دارای آزادی عمل بیشتری در بحث رسانندگی می باشند. اما در نزدیکی سطح فرمی سهم دیگر اوربیتال ها مقدار کمتری دارد و الکترون های موجود در آن ها وظیفه اشتراک و به وجود آوردن پیوندهای سیگما و پای را بر عهده دارند و در رسانندگی شرکت فعالی ندارند.

#### ۴. ویژگی های مغناطیسی

یکی از ویژگی های مهم نانو ساختارها، ویژگی مغناطیسی می باشد. این ویژگی توسط بررسی نمودارهای چگالی حالات و ساختار نواری برای اسپین های مختلف انجام می شود. سهم هر اسپین در چگالی حالات و ساختار نواری نشان از رفتار مغناطیسی مواد دارد. مواد مغناطیسی در اسپین های

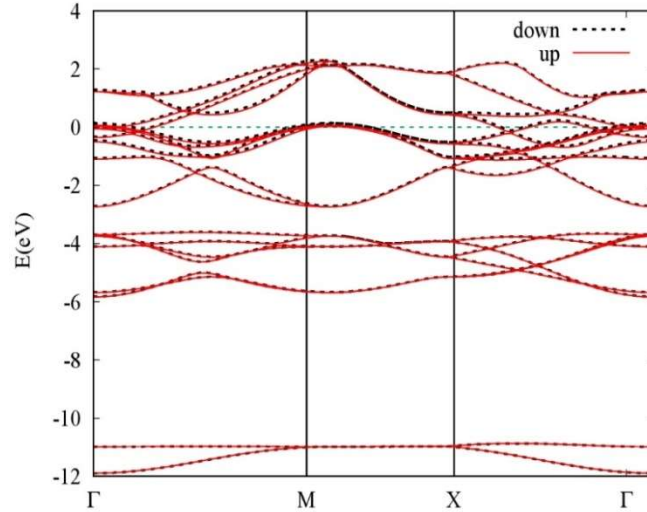
مختلف رفتارها و ترازهای مختلفی توسط الکترون‌ها با اسپین‌های مختلف اشغال می‌شود. مواد مغناطیسی با ویژگی‌های مغناطیسی بالا حتی تا جایی می‌توانند دارای اهمیت باشند که در بعضی از مواد، که به مواد نیم فلز معروف هستند، در یک اسپین رفتار رسانایی نشان می‌دهد و در اسپین دیگر دارای ویژگی نیمه‌رسانایی می‌باشد. این مواد در میدان‌های خارجی رفتار در خور با آن میدان در اسپین مورد نظر را از خود نشان می‌دهند که این ویژگی سبب می‌شود که در صورت هدایت خارجی توسط عوامل مغناطیسی، از یک ماده دو نوع رفتار رسانایی و یا نیم‌رسانایی مشاهده شود. البته می‌توان در قطعات الکترونیک از این سویچ‌ها استفاده کرد.

به این منظور در این کار ساختارهای نواری و چگالی حالات را برای اسپین‌های بالا و پایین به صورت جداگانه و مقایسه‌ای محاسبه و نتایج آن‌ها به ترتیب در شکل‌های (۶) و (۷) نشان داده شده است. در شکل زیر نمودار چگالی هر اسپین به صورت جداگانه ترسیم شده است.



شکل ۶ نمودار چگالی حالات اسپینی مکسین  $Nb_2C$ .

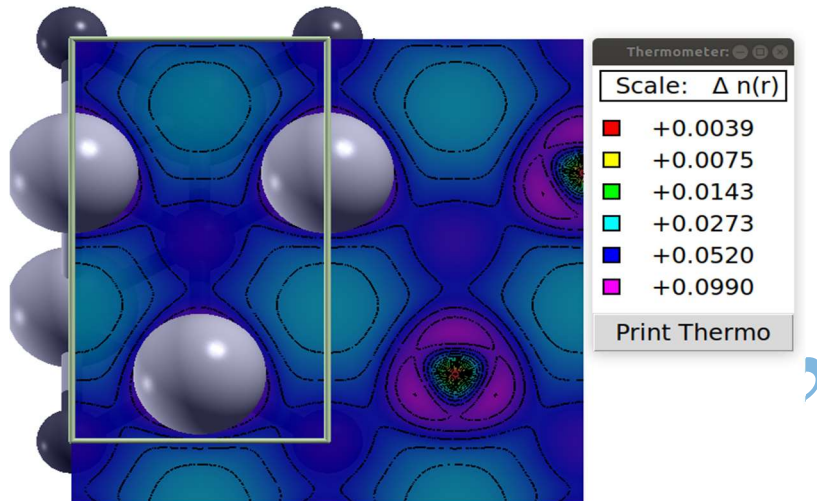
همانطور که در شکل (۶) ملاحظه می‌گردد در هر دو اسپین ماده مورد نظر ما دارای ویژگی رسانایی بوده که این اتحاد در رفتار سبب آن شده که ماده در حالت کلی نیز دارای ماهیت رسانایی باشد. اما با مقایسه هر دو اسپین می‌توان دید که برای هر دو اسپین بالا و پایین هماهنگی زیادی در هر دو اسپین دیده می‌شود و این تشابه نشان از این دارد که ماده مورد بررسی بدون ویژگی مغناطیس بوده و در میدان‌های مغناطیسی خارجی ویژگی‌های خود را حفظ می‌کند. در ادامه نمودار ساختار نواری برای اسپین‌های بالا و پایین در شکل (۷) به ترتیب با خطوط پر و نقطه چین نشان داده شده است.



شکل ۷ نمودار ساختار نواری اسپینی.

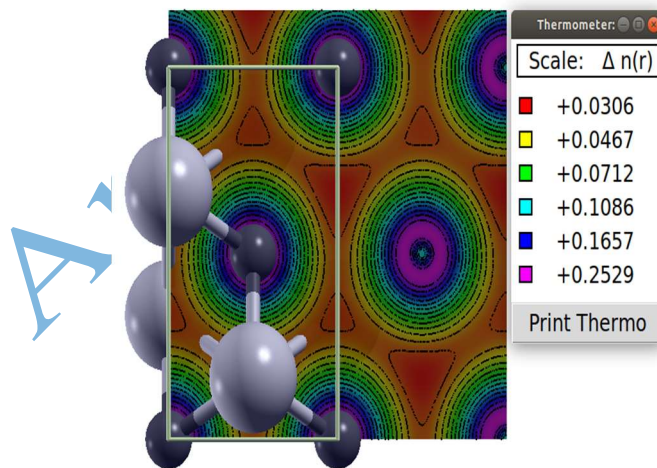
ملاحظه می‌شود در این نمودار نیز همانند چگالی حالات تشابه بسیار بالایی به ویژه در ناحیه انرژی فرمی وجود دارد. همچنین، به صورت بسیار اندکی در بعضی جاها اسپین پایین دارای مقدار بالاتری است که اصلاً قابل توجه نمی‌باشد و در فایل‌های خروجی نیز مقدار مغناطیدگی بسیار پایینی در حدود  $0.17 \text{ bohr mag/cell}$  می‌باشد که نشان از غیرمغناطیسی بودن ماده مورد مطالعه دارد. این شاید به صورتی مزیت به حساب آید چرا که این ماده در جاهایی که دارای میدان مغناطیسی مزاحم است کاربرد خود را حفظ می‌کند.

اما در ادامه به عنوان مرحله نهایی از بررسی ویژگی‌های الکترونیکی چگالی بار در دو سطح از ساختار به تصویر کشیده شده است که توسط آن‌ها می‌توان تجمع بارها در اطراف اتم‌های موجود و درون فضای سلول پایه را مشاهده نمود.



شکل ۸ نمودار چگالی بار در اطراف اتم‌ها.

در حقیقت، یکی از نمودارها و کمیت‌های مهم، نمودار چگالی بار می‌باشد. این نمودار نیز شامل داده‌های مهمی از ترکیبات مورد بررسی می‌باشد. در این مورد نیز، برای بررسی این ویژگی‌های در دو مقطع مختلف اقدام به محاسبه و نتایج توسط نمودارهای چگالی بار در شکل‌های (۸) و (۹) به نمایش درآمده‌اند.



شکل ۹ نمودار چگالی بار در اطراف اتم‌ها.

در شکل‌های (۸) و (۹)، صفحه‌ی موردنظر را در بین ترکیب مورد بررسی به گونه‌ای قرار داده‌ایم که بتوانیم اتم کربن را روی این صفحه ببینیم و کمیت یاد شده را در نزدیکی این اتم بررسی کنیم.

طبق این شکل می‌بینیم که در نزدیکی این اتم‌ها تجمع بالایی از الکترون را خواهیم داشت و در این محدوده، تراکم بالاتری دارد و با فاصله گرفتن از آن نیز درمی‌یابیم که این مقدار کاهش یافته است. بر اساس این نمودار مشاهده می‌شود که ترکیبات موجود در این ساختارها از نوع یونی بوده و تجمع حالات بیشتر در نزدیکی این عناصر می‌باشد. نتیجه بدست آمده از این نمودار با نمودارهای چهار و پنج کاملاً همخوانی دارد.

این نکته قابل توجه است که نتایج بدست آمده از این کار با نتایج پژوهش به روش تجربی دینش کمار و همکارانش [۳۶] و نیز پژوهش به روش مطالعه‌ی ابتدا به ساکن که توسط جینگ‌ونگ و همکارانش [۳۷] با استفاده از بسته نرم‌افزاری VASP انجام شده در هماهنگی بسیار خوبی است.

## ۵. نتیجه‌گیری

این کار منجر به شناخت هرچه بیشتر مکسین‌ها به ویژه کاربرد نیویوم گردید و همانطور که در قسمت‌های پیشین بیان شد، این ماده‌ی دو بعدی دارای ویژگی رسانایی بوده ولی عاری از هرگونه ویژگی مغناطیسی می‌باشد. مکسین‌ها توجه علمی قابل تاملی را در زمینه‌های مختلف از جمله خازن الکتروشیمیایی ظرفیت بالا، ویژگی‌های پلاسمونیک، رسانایی الکتریکی عالی، پایداری حرارتی و مکانیکی و توانایی تشکیل محلول‌های کلوئیدی بسیار پایدار به خود جلب نموده‌اند لذا کاربردهای وسیعی در صنایع مختلف برای این دسته از مواد پیش‌بینی می‌شود.

## منابع

- [1] Chia, X. and Pumera, M., "Characteristics and performance of two-dimensional materials for electrocatalysis", *Nature Catalysis* 1(12), 909-921, 2018. <https://doi.org/10.1038/s41929-018-0181-7>.
- [2] Luo, B., Liu, G. and Wang, L., "Recent advances in 2D materials for photocatalysis", *Nanoscale* 8(13), 6904-6920, 2016. <https://doi.org/10.1039/C6NR00546B>.
- [3] Choi, W., Choudhary, N., Han, G.H., Park, J., Akinwande, D. and Lee, Y.H., "Recent development of two-dimensional transition metal dichalcogenides and their applications", *Materials Today* 20(3), 116-130, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2016.10.002>.
- [4] Merlo, A., Mokkaapati, V.R.S.S., Pandit, S. and Mijakovic, I., "Boron nitride nanomaterials: biocompatibility and bio-applications", *Biomaterials science* 6(9), 2298-2311, 2018. <https://doi.org/10.1039/C8BM00516H>.
- [5] Mohajerani, A., Faraci, Z. and Jafari, S.A., "NMR diagnosis of pseudo-scalar superconductivity in 3D Dirac materials", *Journal of Physics: Condensed Matter* 30(50), 50LT01, 2018. <https://doi.org/10.1088/1361-648X>
- [6] Ao, K.L., Shao, Y., Chan, I.N., Shi, X., Kawazoe, Y., Yang, M., Ng, K.W. and Pan, H.,

"Design of novel pentagonal 2D transitional-metal sulphide monolayers for hydrogen evolution reaction", *International Journal of Hydrogen Energy* 45(32), 16201-16209, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.04092>

[7] Colson, J.W. and Dichtel, W.R., "Rationally synthesized two-dimensional polymers", *Nature chemistry* 5(6), 453-465, 2013. <https://doi.org/10.1038/nchem.1628>

[8] Ma, R. and Sasaki, T., "Nanosheets of oxides and hydroxides: ultimate 2D charge-bearing functional crystallites", *Advanced materials* 22(45), 5082-5104, 2010. <https://doi.org/10.1002/adma.201001722>

[9] Molle, A., Goldberger, J., Houssa, M., Xu, Y., Zhang, S.C. and Akinwande, D., "Buckled two-dimensional Xene sheets", *Nature materials* 16(2), 163-169, 2017. <https://doi.org/10.1038/nmat4802>

[10] Grazianetti, C., Martella, C. and Molle, A., "The Xenenes generations: a taxonomy of epitaxial single-element 2D materials", *physica status solidi (RRL)–Rapid Research Letters* 14(2), 1900439, 2020. <https://doi.org/10.1002/pssr.201900439>

[11] Naguib, M., Kurtoglu, M., Presser, V., Lu, J., Niu, J., Heon, M., Hultman, L., Gogotsi, Y. and Barsoum, M.W., "Two-dimensional nanocrystals produced by exfoliation of Ti<sub>3</sub>AlC<sub>2</sub>", In *MXenes*, pp. 15-29. Jenny Stanford Publishing, 2011. <https://doi.org/10.1002/adma.201102306>.

[12] Gogotsi, Y. and Anasori, B., "The rise of MXenes", *ACS nano* 13(8), 8491-8494, 2019. <https://doi.org/10.1021/>

[13] Anasori, B., Xie, Y., Beidaghi, M., Lu, J., Hosler, B.C., Hultman, L., Kent, P.R., Gogotsi, Y. and Barsoum, M.W., "Two-dimensional, ordered, double transition metals carbides (MXenes)", *ACS nano* 9(10), 9507-9516, 2015. <https://doi.org/10.1021/acsnano.5b03591>

[14] Anasori, B., Lukatskaya, M.R. and Gogotsi, Y., "2D metal carbides and nitrides (MXenes) for energy storage", *Nature Reviews Materials* 2(2), 1-17, 2017. <https://doi.org/10.1038/natrevmats.2016.98>

[15] Khazaei, M., Mishra, A., Venkataramanan, N.S., Singh, A.K. and Yunoki, S., "Recent advances in MXenes: From fundamentals to applications", *Current Opinion in Solid State and Materials Science* 23(3), 164-178, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.cossms.2019.01.002>

[16] Khazaei, M., Ranjbar, A., Esfarjani, K., Bogdanovski, D., Dronskowski, R. and Yunoki, S., "Insights into exfoliation possibility of MAX phases to MXenes", *Physical Chemistry Chemical Physics* 20(13), 8579-8592, 2018. <https://doi.org/10.1039/C7CP08645H>

[17] Wu, X., Huang, B., Wang, Q. and Wang, Y., "High energy density of two-dimensional MXene/NiCo-LDHs interstratification assembly electrode: understanding the role of interlayer ions and hydration", *Chemical Engineering Journal* 380, 122456, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.122456>

[18] Zhang, S. and Han, W.Q., "Recent advances in MXenes and their composites in lithium/sodium batteries from the viewpoints of components and interlayer engineering", *Physical Chemistry Chemical Physics* 22(29), 16482-16526, 2020. <https://doi.org/10.1039/D0CP02275F>

[19] Faruk, M.O., Ahmed, A., Adak, B., Marzana, M., Hossain, M.M. and Mukhopadhyay, S., "High performance 2D MXene based conducting polymer hybrids: synthesis to emerging applications", *Journal of Materials Chemistry C* 9(32), 10193-10215, 2021. <https://doi.org/10.1039/D1TC02240G>.

[20] Faruk, Md Omar, Abbas Ahmed, Bapan Adak, Maliha Marzana, Md Milon Hossain, and Samrat Mukhopadhyay. "High performance 2D MXene based conducting polymer hybrids: synthesis to emerging applications", *Journal of Materials Chemistry C* 9, no. 32 (2021): 10193-10215. <https://doi.org/10.101126/sciadv.aau092>

[21] Quain, E., Mathis, T.S., Kurra, N., Maleski, K., Van Aken, K.L., Alhabeef, M., Alshareef, H.N. and Gogotsi, Y., "Direct writing of additive-free MXene-in-Water ink for electronics and energy storage", *Advanced Materials Technologies* 4(1), 1800256, 2019. <https://doi.org/10.101126/sciadv.aau092>



- [22] Wu, Y., Ding, L., Lu, Z., Deng, J. and Wei, Y., "Two-dimensional MXene membrane for ethanol dehydration", *Journal of Membrane Science* 590, 117300, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2019.117300>
- [23] Hu, M., Li, Z., Li, G., Hu, T., Zhang, C. and Wang, X., "All-solid-state flexible fiber-based MXene supercapacitors", *Advanced Materials Technologies* 2(10), 1700143, 2017. <https://doi.org/10.1002/admt.201700143>
- [24] Zhao, D., Zhao, R., Dong, S., Miao, X., Zhang, Z., Wang, C. and Yin, L., "Alkali-induced 3D crinkled porous Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub> MXene architectures coupled with NiCoP bimetallic phosphide nanoparticles as anodes for high-performance sodium-ion batteries", *Energy & Environmental Science* 12(8), 2422-2432, 2019. <https://doi.org/10.1039/C9EE00308H>
- [25] Xue, Q., Zhang, H., Zhu, M., Pei, Z., Li, H., Wang, Z., Huang, Y., Deng, Q., Zhou, J., Du, S. and Huang, Q., "Photoluminescent Ti<sub>3</sub>C<sub>2</sub> MXene Quantum Dots for Multicolor Cellular Imaging", *Advanced Materials (Deerfield Beach, Fla.)* 29(15), 2017. <https://doi.org/10.1002/adma.201604847>
- [26] Soleymaniha, M., Shahbazi, M.A., Rafieerad, A.R., Maleki, A. and Amiri, A., "Promoting role of MXene nanosheets in biomedical sciences: therapeutic and biosensing innovations", *Advanced healthcare materials* 8(1), 1801137, 2019. <https://doi.org/10.1002/adhm.201801137>
- [27] Chen, L., Dai, X., Feng, W. and Chen, Y., "Biomedical applications of MXenes: from nanomedicine to biomaterials", *Accounts of Materials Research* 3(8), 785-798, 2022. <https://doi.org/10.1021/accountsmr.2c00025>
- [28] Kim, H., Wang, Z. and Alshareef, H.N., "MXetronics: Electronic and photonic applications of MXenes", *Nano Energy* 60, 179-197, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2019.03.020>
- [29] Sun, Y. and Li, Y., "Potential environmental applications of MXenes: A critical review", *Chemosphere* 271, 129578, 2021.
- [30] Jiang, Q., Wu, C., Wang, Z., Wang, A.C., He, J.H., Wang, Z.L. and Alshareef, H.N., "MXene electrochemical microsupercapacitor integrated with triboelectric nanogenerator as a wearable self-charging power unit", *Nano Energy* 45, 266-272, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2018.01.004>
- [31] Yuan, Y., Xu, R., Xu, H.T., Hong, F., Xu, F. and Wang, L.J., "Nature of the band gap of halide perovskites ABX<sub>3</sub> (A= CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>, Cs; B= Sn, Pb; X= Cl, Br, I): First-principles calculations", *Chinese Physics B* 24(11), 116302, 2015. <https://doi.org/10.1088/1674-1056/24/11/116302>
- [32] Lang, L., Yang, J.H., Liu, H.R., Xiang, H.J. and Gong, X.G., "First-principles study on the electronic and optical properties of cubic ABX<sub>3</sub> halide perovskites", *Physics Letters A* 378(3), 290-293, 2014. <https://doi.org/10.48550/arXiv.1309.0070>
- [33] Perdew, John P., Kieron Burke, and Matthias Ernzerhof. "Generalized gradient approximation made simple." *Physical review letters* 77(18), 3865, 1996. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
- [34] Torrent, M., Jollet, F., Bottin, F., Zerah, G. and Gonze, X., "Implementation of the projector augmented-wave method in the ABINIT code: Application to the study of iron under pressure." *Computational Materials Science* 42(2), 337-351, 2008. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2007.07.020>
- [35] Pulay, P., "Convergence acceleration of iterative sequences. The case of SCF iteration", *Chemical Physics Letters* 73(2), 393-398, 1980. [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(80\)80396-4](https://doi.org/10.1016/0009-2614(80)80396-4)
- [36] Ponnalagar, D., Hang, D.R., Islam, S.E., Liang, C.T. and Chou, M.M., "Recent progress in two-dimensional Nb<sub>2</sub>C MXene for applications in energy storage and conversion." *Materials & Design* 231, 112046, 2023. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2023.112046>
- [37] Xu, G., Wang, J., Zhang, X. and Yang, Z., "First principles study on geometric and electronic properties of two-dimensional Nb<sub>2</sub>CT<sub>x</sub> MXenes", *Chinese Physics B* 31(3), 037304, 2022. <https://doi.org/10.1088/1674-1056/ac322e>



Article in Press