بررسی خواص الکترونی ساختارهای مکس وسیستمهای دوبعدی آنها (مکسین) با استفاده ازمحاسبات اصول اولیه

خزائی، محمد

دانشکده فیزیک دانشگاه تهران، انتهای خیابان کارگر شمالی، تهران

چکیده

ساختارهای فازهای مکس، خانواده بزرگی از سرامیک های لایه ای با فرمول شیمیایی $M_{n+1}AX_n$ را تشکیل می دهند که در آن M یکی ازعناصر گروه واسطه، A یکی ازعناصرگروه های ۱۳ یا ١٤ جدول تناوبی، وX کربن یا نیتروژن میباشد. اخیراً با استفاده از محلولهای اسیدی مناسب از بعضی از ساختار های مکس، لایه های A حذف می شود. با توجه به اینکه تعداد زیادی از ساختار های فازهای مکس تا کنون ساخته شده اند یا قابل ساخت هستند، از اینرو تعداد زیادی ساختارهای دو بعدی مکسین با خواص الترونی مختلف رامی توان بدست آورد. مکسین ها کاربردهای بالقوه بسیاری در دستگاه های الکترونیکی، سنسورها، باطری ها، وغیره پیدا کرده اند. در اینجا، من می خواهم به معرفی بعضی از خصوصیات الکترونیکی فازهای مکس و مکسین و برخی از کاربردهای احتمالی آنها که از محاسبات اصول اولیه بدست آمده بپردازم.

Electronic properties of MAX phases and their 2D MXene from first-principles prespective

Khazaei, Mohammad

Department of Physics, University of Tehran, North Kargar Ave., Tehran, Iran

Abstract

MAX phases —— a large family of layered ceramics with $M_{n+1}AX_n$ chemical formula, where n = 1, 2, or 3, "M" is an early transition metal, "A" is A group elements, mostly groups 13 and 14 elements, and "X" is carbon and/or nitrogen——have recently been exfoliated into two-dimensional (2D) single and/or multi $M_{n+1}X_n$ layers by using appropriate acid solutions. The resulting 2D-$M_{n+1}X_n$ transitional metal carbides and nitrides have been named as MXenes. Considering a large number of compositional possibilities of MAX phase compounds, a large number of MXenes with unprecedented properties could also be obtained in the future. MXenes have found many potential applications in electronic, optoelectronic, and energy devices. Here, I would like to give some insights on the electronic properties of MAX phases and 2D MXenes and some of their possible applications, obtainned from frirst-prnciples calculations.