

بررسی خواص الکترونیکی و مشخصه‌ی جریان بین لایه‌ای مواد دوبعدی نامتقارن

 $\text{MoSi}_2\text{As}_m\text{Sb}_n$ و $\text{MoSi}_2\text{P}_m\text{As}_n$ نیره قبادی^{۱*}

چکیده	اطلاعات مقاله
این مقاله به بررسی خواص ساختاری و الکترونیکی مواد دو بعدی نامتقارن $\text{MoSi}_2\text{P}_m\text{As}_n$ و $\text{MoSi}_2\text{As}_m\text{Sb}_n$ با استفاده از نظریه تابع چگالی می‌پردازد. در ابتدا، پایداری ساختارها توسط پراکندگی فونون اثبات شده است. در ادامه، ساختار نوارهای انرژی مواد به دست آمده است که نشان می‌دهد به جز ساختار $\text{MoSi}_2\text{As}_3\text{Sb}$ ، بقیه ساختارها ماهیت نیمه‌هادی دارند. همچنین چگالی حالت‌های مبتنی بر اوربیتال نشان می‌دهد که نوار هدایت و ظرفیت همه ساختارها عمدتاً از اوربیتال d اتم مولیبدن تشکیل شده است. به منظور اثبات وجود یک میدان الکتریکی عمودی ذاتی در این مواد، توزیع پتانسیل، توزیع بار و توابع کار در دو صفحه اتمی بالا و پایین ساختارها محاسبه و مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است. در ادامه برای تنظیم خواص الکترونیکی ساختارها، کرنش دومحوره داخل صفحه‌ای اعمال شده است. شکاف انرژی مواد در کرنش کوچکی به مقدار ماکزیمم خود می‌رسد، سپس در کرنش‌های بزرگتر کاهش یافته و در کرنش فشاری و کششی مشخصی به صفر می‌رسد و گذار از نیمه‌هادی به فلز روی می‌دهد. در انتها، ترابرد بین لایه‌ای در این مواد مورد مطالعه قرار گرفته است و جریان بین صفحه‌ای به دست آمده است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که ترابرد بین لایه‌ای و در نتیجه میزان جریان عمودی به پیکربندی ساختار وابسته می‌باشد و در ساختار X_3Y بیشترین جریان به دست می‌آید. نتایج به دست آمده و عدم تقارن ناشی از میدان داخلی در مقادیر جریان مثبت و منفی اثبات می‌کند که این مواد گزینه‌های مناسبی برای استفاده در ادوات نانوالکترونیک و به ویژه یکسوسازها می‌باشند.	<p>نوع مقاله: پژوهشی</p> <p>دریافت مقاله: ۱۴۰۰/۱۰/۰۲</p> <p>بازنگری مقاله: ۱۴۰۱/۰۲/۲۶</p> <p>پذیرش مقاله: ۱۴۰۱/۰۳/۳۱</p> <p>واژگان کلیدی:</p> <p>مواد دو بعدی، مواد نامتقارن، کرنش دومحوره صفحه‌ای، جریان بین لایه‌ای، نظریه تابع چگالی.</p>

۱- مقدمه

است که محققان مواد دوبعدی دیگری را جستجو و بررسی کنند که از آن جمله می‌توان به کالکوژناید های فلزات واسطه (TMD) [۸]، فسفرین [۹]، آنتیمون [۱۰]، ایندیم سلناید [۱۱]، سیلیسن [۱۲]، ژرمان [۱۳] و نیتريد کربید (Mxene) [۱۴] اشاره کرد.

در کالکوژناید های فلزات واسطه مانند MoS_2 ، فلز واسطه (Mo) بین دو اتم کالکوژن (S) در یک شبکه شش ضلعی قرار گرفته است. این ماده دارای خصوصیات مکانیکی بسیار خوب شامل ماجول یانگ برابر ۰/۲ تراپاسکال و کرنش

پس از کشف گرافن در سال ۲۰۰۴ مواد دو بعدی به علت خواص بی نظیر الکترونیکی، مکانیکی و نوری بسیار مورد توجه دانشمندان قرار گرفتند [۷-۱]. بنابراین کشف و ساخت مواد دوبعدی جدید به یکی از مهمترین چالش‌ها و زمینه‌های تحقیقاتی تبدیل شد. با وجود خصوصیات فوق‌العاده‌ی گرافن، عدم وجود شکاف انرژی در آن، استفاده از این ماده را در کاربردهای نوری و الکترونیکی و به عنوان کانال ترانزیستور محدود کرده است. این مشکل باعث شده

* پست الکترونیک نویسنده مسئول: n.ghobadi@znu.ac.ir

۱. استادیار، دانشکده مهندسی برق، دانشگاه زنجان

ترتیب تک لایه MoSi_2N_4 با مساحت ۱۵ در ۱۵ میلی‌متر به روش CVD تولید شده است [۳۲]. برای ساخت MoSi_2N_4 ، گاز NH_3 به عنوان منبع نیتروژن، دو لایه Cu/Mo به عنوان بستر و عنصر Si با ضخامت یکنواخت استفاده شده است [۳۲]. MoSi_2N_4 یک نیمه‌هادی غیرمستقیم با شکاف انرژی ۱/۹۴ الکترون‌ولت می‌باشد. این ماده از اکثر مواد دوبعدی حتی MoS_2 پایدارتر است [۳۲-۳۵].

با تحلیل ساختار MoSi_2N_4 با هفت لایه اتمی با پیکربندی N-Si-N-Mo-N-Si-N، به این نتیجه می‌رسیم که این ماده از قرار دادن MoN_2 با ساختاری شبیه به MoS_2 نوع 2H با سه لایه اتمی در میان Si_2N_2 با ساختاری شبیه به InSe نوع آلفا با ۴ لایه اتمی ساخته شده است. این روش قرار دادن یک لایه بین دو لایه و غیرفعال‌سازی لایه وسط روش جدیدی برای ساخت و توسعه مواد دو بعدی ایجاد کرده است. همانگونه که می‌دانیم MoS_2 دو ساختار مشاهده شده‌ی 2H با گروه فضایی $P6m2$ ^۵ و ساختار 1T با گروه فضایی $P3m1$ دارد. همچنین برای InSe دو ساختار آلفا با گروه فضایی $P6m1$ و بتا با گروه فضایی $P3m1$ گزارش شده است [۳۶]. با توجه به گروه‌های فضایی ذکر شده، دو پیکربندی پایدار برای خانواده MA_2Z_4 به دست می‌آید: (۱) ترکیب 2H-MZ_2 و $\alpha\text{-AZ}_2$ که منجر به ایجاد $\alpha\text{-MA}_2\text{Z}_4$ می‌شود و (۲) ترکیب 1T-MZ_2 و $\beta\text{-AZ}_2$ که نتیجه آن $\beta\text{-MA}_2\text{Z}_4$ می‌باشد [۳۳]. با استفاده از دیگر فلزات واسطه (گروه ۴ تا ۶ عناصر واسطه)، عناصر گروه چهار (Si, Ge) و عناصر گروه پنج (N, P, As, Sb)، ساختارهای دیگری از خانواده MA_2Z_4 نوع آلفا ساخته می‌شوند که خواص الکتریکی و مکانیکی متفاوتی دارند. از جمله ساختارهای MA_2Z_4 بتا میتوان به ترکیب عناصر قلیایی خاکی (Mg, Ca, Sr) و یا عناصر گروه دو واسطه (Zn, Cd, Hg) به عنوان M، عناصر گروه ۳ مثل Al و Ga به عنوان A، و اتم‌های کالکوژناید (S, Se, Te) به عنوان Z اشاره کرد [۳۳]. بسته به ساختار مورد بررسی، مواد خانواده MA_2Z_4 خواص الکترونیکی متفاوتی از فلز آنتی فرومغناطیسی تا نیمه فلز، عایق توپولوژیکی و نیمه هادی با رنج گسترده شکاف انرژی از ۰/۳ تا ۲/۶ الکترون

شکست بیش از ۱۰ گیگا پاسکال می‌باشد [۱۵]. MoS_2 توده^۱ دارای شکاف انرژی غیرمستقیم برابر ۱/۲ الکترون‌ولت می‌باشد [۱۶]. با روش لایه‌برداری مکانیکی^۲، MoS_2 به صورت تک لایه به دست می‌آید که یک نیمه‌هادی با شکاف انرژی مستقیم، به اندازه ۱/۸ الکترون‌ولت می‌باشد [۱۷]. MoS_2 تک‌لایه دارای قابلیت حرکت حامل‌های بالایی می‌باشد و به همین دلیل ماده مناسبی برای ساخت ترانزیستورهای اثر میدانی توان پایین می‌باشد. ترانزیستورهای مبتنی بر MoS_2 دارای جریان روشن و نسبت جریان روشن به خاموش بالایی می‌باشند [۱۸-۲۱]. در تحقیقات عملی و تئوری ثابت شده است که ایجاد یک ساختار نامتقارن (جانوس)^۳ یک روش مؤثر برای بهبود خواص فیزیکی و شیمیایی مواد دوبعدی می‌باشد [۲۲ و ۲۳]. اولین کالکوژناید فلز واسطه نامتقارن به نام MoSSe با شکستن تقارن عمود بر صفحه در ساختار MoS_2 در سال ۲۰۱۷ با روش لایه‌نشانی بخار شیمیایی^۴ ساخته شد [۲۴] و [۲۵]. در این ساختار اتم‌های سولفور در یک طرف MoS_2 با اتم‌های سلنیم جایگزین شده‌اند. این ساختار علاوه بر خواص الکترونیکی مطلوب MoS_2 ، یک گشتاور دوقطبی الکتریکی ذاتی عمود بر صفحه دارد که منجر به بهبود اثر پیزوالکتریک می‌شود [۲۶ و ۲۷]. این ساختارها می‌توانند به عنوان یک کاتالیست نوری برای جداسازی اتم‌های آب استفاده شوند [۲۸]. همچنین وجود یک میدان الکتریکی داخلی در جهت عمود بر صفحه با ایجاد اثر راشبا این ساختارها را مناسب برای کاربردهای اسپینترونیکی می‌کند [۲۹]. علاوه بر کالکوژناید‌های فلزات واسطه نامتقارن، ساختارهای نامتقارن کالکوژناید‌های عناصر گروه ۳ که بسیار مناسب جداسازی اتم‌های تشکیل‌دهنده آب هستند [۳۰] و ترکیبات نامتقارن عناصر گروه ۴ و ۵ هم مورد بررسی قرار گرفته‌اند و خواص الکترونیکی و پیزوالکتریکی منحصر به فرد آن‌ها مطالعه شده است [۳۱].

اخیراً یک روش تولید مواد دوبعدی بدون داشتن معادل سه بعدی ارائه شده است. برای این کار عناصر مناسبی مانند سیلیکون برای غیرفعال‌سازی نیتريد فلزات واسطه که نمی‌توانند با تکنیک ورقه ورقه کردن مستقیم به صورت دوبعدی با مساحت بزرگ به دست آیند، به کار بسته شده‌اند. به این

⁴ Chemical Vapor Deposition (CVD)

⁵ Space group

¹ Bulk

² Exfoliation

³ Janus Structures

فراهم می‌کند. علاوه بر کرنش صفحه ای، نتایج کارهای گذشته نشان می‌دهد خصوصیات الکتریکی MoSi_2N_4 تک لایه و دو لایه از جمله شکاف انرژی آن به شدت با کرنش عمودی تغییر می‌کند و منجر به تغییر ماهیت آن از نیمه هادی به فلز می‌شود [۳۴ و ۴۲].

این مواد به علت خصوصیات منحصر به فرد خود برای استفاده به عنوان کانال ترانزیستور بسیار مناسب می‌باشند. استفاده از MoSi_2N_4 و WSi_2N_4 به عنوان کانال یک ترانزیستور دوگیتی منجر به دستیابی به نسبت جریان روشن به خاموش بزرگ‌تر از 10^6 شده است. همچنین کرنش دو محوری به طور مؤثری میزان جریان روشن و نسبت جریان روشن به خاموش این ترانزیستور را افزایش می‌دهد [۴۳]. در [۴۴] اتصال الکتریکی MoSi_2N_4 با نیمه فلز گرافن و فلز دو بعدی NbS_2 مورد بررسی قرار گرفته است که نتایج نشان می‌دهد که اتصال الکتریکی این نیمه و سد شاتکی ایجاد شده قابلیت کنترل با میدان الکتریکی و تغییر فاصله بین لایه‌ای را دارا می‌باشد. بنابراین ساختارهای نامتجانس مبتنی بر خانواده MA_2Z_4 قابلیت زیادی برای استفاده به عنوان ادوات گوناگون الکترونیکی دارند.

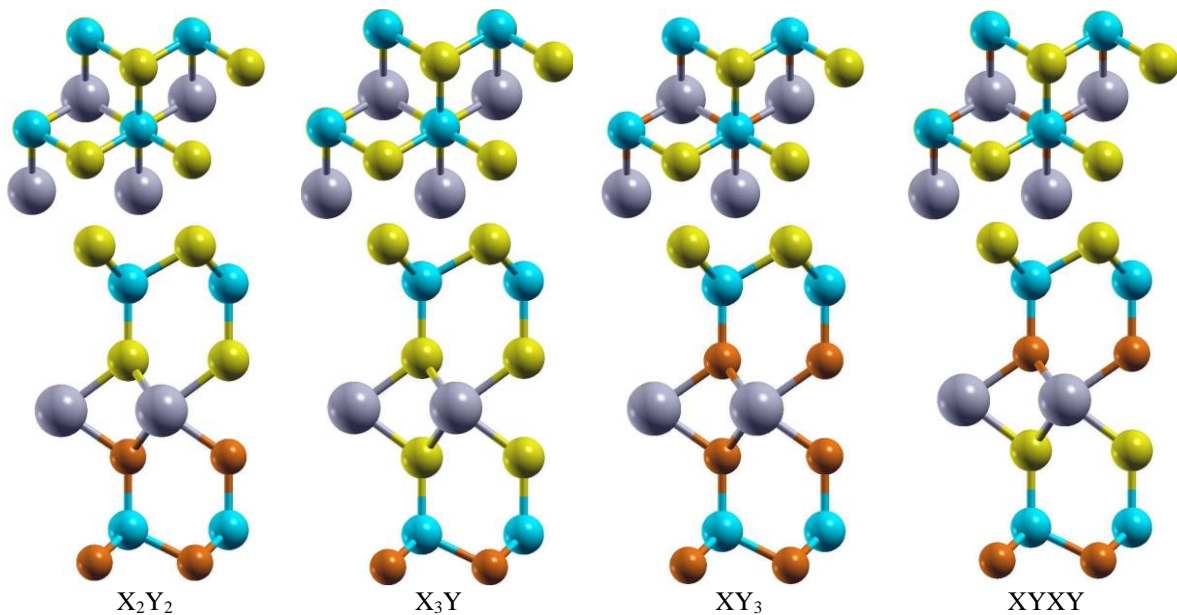
همان‌گونه که پیش‌تر ذکر شد، ساختارهای نامتقارن یا جانوس به علت خواص فوق‌العاده خود از جمله وجود میدان الکتریکی ذاتی به شدت مود توجه قرار گرفته‌اند. در [۴۵] ساختارهای جانوس MoSiGeN_4 و WSiGeN_4 مورد بررسی قرار گرفته‌اند. به دلیل عدم تقارن آینه‌ای^۱، در این ساختارها ضریب پیزو الکتریک خارج صفحه‌ای غیر صفر و شکاف اسپینی راشبا دیده شد. همچنین این ساختارها دارای لبه‌های نوار با انرژی مناسب، ضریب جذب نوری بالا و قابلیت حرکت حامل‌های بالایی می‌باشند که برای کاربرد به عنوان کاتالیست نوری برای جداسازی اتم‌های آب بسیار مناسب می‌باشند. میدان داخلی ذاتی این مواد جداسازی الکترون‌ها و حفره‌های تولید شده توسط نور را تسهیل می‌کند [۴۶]. علاوه بر این با ایجاد ساختار نامتجانس عمودی این مواد نامتقارن با گرافن می‌توان اتصالات شاتکی نوع n یا p بسته به جهت اتصال ایجاد کرد [۴۷]. SrAlGaSe ماده جانوس دیگری از خانواده MA_2Z_4 با ساختار بتا می‌باشد

ولت از خود نشان می‌دهند. برای مثال نظریه تابع چگالی (DFT) ثابت می‌کند که WSi_2N_4 شکاف انرژی بزرگتری نسبت به MoSi_2N_4 دارد. MoSi_2P_4 و MoSi_2As_4 شکاف انرژی مستقیم دارند و VSi_2N_4 به ماده مغناطیسی است [۳۳-۳۵]. علاوه بر شکاف انرژی مستقیم، ساختارهای MoSi_2P_4 و MoSi_2As_4 دارای قابلیت حرکت حامل‌های بالا و ضریب جذب نوری قابل توجهی هستند. ادوات نوری مبتنی بر این ساختارها پاسخ دهی فوتونی و بازده کوانتومی خارجی بالایی دارند و برای کاربردهای الکترونیک نوری بسیار مناسب می‌باشند [۳۷]. ساختارهای MoSi_2N_4 ، WSi_2N_4 و WGe_2N_4 با داشتن لبه‌های نوار با انرژی مناسب، قابلیت حرکت حامل‌های عالی و جذب مناسب نور مرئی، برای استفاده به عنوان کاتالیست نوری برای جداسازی اتم‌های آب بسیار مناسب می‌باشند [۳۸].

MoSi_2N_4 و WSi_2N_4 دارای رسانایی گرمایی عالی برابر ۴۴۰ تا ۵۰۰ وات بر کلون متر و ماجول یانگ حدود ۵۰۰ گیگا پاسکال می‌باشند [۳۸]. این ماجول یانگ حدود نصف گرافن و دو برابر MoS_2 می‌باشد. بررسی‌ها نشان می‌دهد MoSi_2N_4 قابلیت تحمل فشار تا ۵۰ گیگا پاسکال و کرنش دو محوره صفحه‌ای تا حدود ۲۰ درصد و کرنش تک‌محوره تا حدود ۲۷ درصد در جهت زیگزاگ و حدود ۱۸ درصد در جهت آرمچر را دارا می‌باشد که بسیار نزدیک به مقادیر گزارش شده برای MoS_2 می‌باشد [۳۹]. بررسی خواص پیزوالکتریکی ساختارهای MA_2Z_4 نشان می‌دهد که MoSi_2N_4 دارای ضریب d_{11} برابر $1/15$ پیکومتر بر ولت می‌باشد و مقدار این ضریب در MoSi_2As_4 به مقدار ماکزیمم $6/23$ پیکومتر بر ولت می‌رسد. همچنین با اعمال کرنش دو محوره این ضرایب به طور چشمگیری افزایش می‌یابند [۴۰].

کرنش صفحه‌ای و عمودی تأثیر بسزایی در تغییر خواص الکتریکی مواد دو بعدی دارند. نتایج ارائه شده در [۴۱] نشان می‌دهد که کرنش دو محوره و میدان الکتریکی خارجی شکاف انرژی MoSi_2N_4 و WSi_2N_4 دو لایه را تغییر می‌دهند و حتی کرنش فشاری قادر است شکاف انرژی غیرمستقیم را به مستقیم تبدیل کند. همچنین تغییر توزیع بار ایجاد شده توسط میدان الکتریکی خارجی هم امکان تبدیل نیمه‌هادی به فلز را در ساختارهای دو لایه

¹ Mirror Symmetry



شکل ۱- نمای از بالا (ردیف بالا) و نمای از کنار (ردیف پایین) ساختارهای اتمی $\text{MoSi}_2\text{X}_m\text{Y}_n$. اتم مولیبدن با رنگ بنفش، اتم سیلیکون با رنگ آبی، اتم گروه پنج کوچکتر (X) با رنگ زرد و اتم گروه پنج بزرگتر (Y) با رنگ نارنجی مشخص شده است.

اند. همچنین در انتها ترابرد الکترونی بین لایه‌ای در این ساختارها با استفاده از ماجول ترنسیستا^۳ از نرم افزار سیستا مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج به دست آمده نشان می‌دهد که ترابرد بین لایه‌ای و در نتیجه میزان جریان عمودی به نوع ماده و ترتیب قرارگیری اتم‌های گروه ۵ وابسته می‌باشد و جریان در ساختارهای AsSb بیشتر از PAS می‌باشد. همچنین بین ساختارهای مختلف PAS ، پیکربندی P_3As انتقال الکترون بیشتری دارد. به علت ساختار نامتقارن و میدان الکتریکی ذاتی این مواد، با اعمال ولتاژهای مثبت و منفی برابر، مقادیر جریان متفاوتی از این ساختارها عبور می‌کند. در حالیکه در ساختارهای متقارن جریان بین لایه‌ای به ازای ولتاژ مثبت و منفی برابر می‌باشد. در ساختار As_2Sb_2 بیشترین عدم تقارن دیده می‌شود. تحقیقات انجام شده در این مقاله و این مشخصه جریان-ولتاژ نامتقارن ثابت می‌کند که ساختارهای نامتقارن مبتنی بر خانواده MA_2Z_4 گزینه‌های بسیار مناسبی برای کاربرد در مدارات الکترونیکی و به ویژه یکسوسازها می‌باشند.

۲- روش مدل سازی و شبیه سازی

برای محاسبه مشخصات الکتریکی ساختارهای نامتقارن $\text{MoSi}_2\text{X}_m\text{Y}_n$ ، محاسبات نظریه تابع چگالی با استفاده از نرم افزار سیستا انجام شده است [۵۰]. تقریب شیب تعمیم

که می‌تواند به عنوان عایق توپولوژیکی مورد استفاده قرار گیرد [۴۸]. جایگزینی تعدادی از اتم‌های نیتروژن با کربن در MoSi_2N_4 نیز منجر به ایجاد ساختارهای نامتقارنی با ماهیت نیمه فلز، فلز یا نیمه هادی با خواص مغناطیسی می‌شود [۴۹].

با این وجود، ساختارهای نامتقارن $\text{MoSi}_2\text{PmAs}_n$ و $\text{MoSi}_2\text{As}_m\text{Sb}_n$ از خانواده MA_2Z_4 و خواص ساختاری و الکتریکی آن‌ها هنوز مورد بررسی قرار نگرفته است. بنابراین در این مقاله به بررسی خواص ساختاری و الکتریکی ساختارهای نامتقارن این خانواده شامل فلز واسطه Mo ، عنصر گروه چهار Si و عناصر گروه پنج P ، As و Sb پرداخته ایم. برای این منظور نظریه تابع چگالی^۱ در نرم افزار سیستا^۲ به کار رفته است. پایداری، خواص ساختاری و الکتریکی ۸ ساختار نامتقارن $\text{MoSi}_2\text{PmAs}_n$ و $\text{MoSi}_2\text{As}_m\text{Sb}_n$ (m و n برابر ۱، ۲ یا ۳ می‌باشند به این ترتیب که جمع m و n در هر ماده برابر ۴ می‌باشد) بررسی شده است. با توجه به اینکه تنش صفحه‌ای می‌تواند به طور مؤثر خصوصیات مواد دوبعدی این خانواده را تغییر دهد [۴۱ و ۴۳]، بنابراین در ادامه برای تنظیم خواص الکتریکی این ساختارها تنش دومحوره صفحه‌ای به آن‌ها اعمال شده و تغییرات شکاف انرژی ایجاد شده مورد بررسی قرار گرفته

³ TRANSIESTA

¹ DFT
² SIESTA

فضای خالی به اندازه ۳۰ آنگستروم در جهت عمود بین لایه ها در نظر گرفته شده است که از برهم کنش لایه‌ها جلوگیری کند. همچنین تحلیل انتقال بار بین اتم‌ها با روش بدر^۳ انجام شده است [۵۲]. کرنش صفحه‌ای دومحوره به صورت رابطه (۱) تعریف شده است.

$$\varepsilon = \frac{a - a_0}{a_0} \quad (1)$$

در این رابطه a_0 ثابت شبکه در حالت تعادل و a ثابت شبکه تحت تنش می‌باشد. بعد از اعمال هر کرنش، سیستم دوباره به طور کامل ریلکس شده است.

یافته^۱ پردو-بورگ-ارنزهوف^۲ به عنوان انرژی تبدیلی و همبستگی به کار رفته است [۵۱]. برای توصیف ناحیه اول بریلوئن تعداد نقاط k برابر $15 \times 15 \times 1$ بر پایه روش مونخورست-پک در نظر گرفته شده است. انرژی قطع برای انتگرال گیری در فضای حقیقی برابر ۲۰۰ ریدبرگ در نظر گرفته شده است و تابع پایه زتا دوگانه با قطبش استفاده شده است.

خطای قابل تحمل برای همگرایی انرژی 10^{-5} در نظر گرفته شده و سیستم به طور کامل ریلکس شده تا نیروی وارد بر هم اتم کمتر از 0.02 الکترون ولت بر آنگستروم باشد. یک

جدول ۱- پارامترهای ساختاری $MoSi_2X_mY_n$ در حالت تعادل. ثابت شبکه (a)، طول پیوند Mo-X (d_{Mo-X})، طول پیوند Mo-Y (d_{Mo-Y})، طول پیوند Si-X (d_{Si-X})، فاصله عمودی بین Si و X (Δ_{Si-X})، فاصله عمودی بین Si و Y (Δ_{Si-Y})، ضخامت ساختار (t) و انرژی تشکیل E_{coh} .

نام ماده	a (Å)	d_{Mo-Y} (Å)	d_{Mo-X} (Å)	d_{Si-Y} (Å)	d_{Si-X} (Å)	Δ_{Si-Y} (Å)	Δ_{Si-X} (Å)	t (Å)	E_{coh} (eV/atom)
MoSi ₂ P ₂ As ₂	۳/۵۶۶	۲/۵۰۲	۲/۵۷۸	۲/۳۵۲	۲/۳۶۲	۱/۱۶	۱/۰۰۹	۹/۷۵۷	-۶/۴۹۳
MoSi ₂ P ₃ As	۳/۵۴۱	۲/۴۹۹	-	۲/۳۵۵	-	۱/۱۷	۱/۰۲۱	۹/۵۷۲	-۶/۶۳۶
MoSi ₂ PAs ₃	۳/۵۹۳	-	۲/۵۸۳	-	۲/۳۶۵	۱/۱۴۸	۱/۰۰۳	۹/۹۶۱	-۶/۳۵۲
MoSi ₂ PAsPAs	۳/۵۶۷	۲/۵۰۴	۲/۵۷۸	۲/۳۴۷	۲/۳۶۷	۱/۱۵۷	۱/۰۱۲	۹/۷۵۸	-۶/۴۹۲
MoSi ₂ As ₂ Sb ₂	۳/۷۸	۲/۶۲۶	۲/۷۶۹	۲/۳۷۲	۲/۵۷۹	۱/۳۳۴	۱/۰۷۶	۱۰/۵۲۴	-۵/۹۲۷
MoSi ₂ As ₃ Sb	۳/۷۳۱	۲/۶۱۹	-	۲/۳۷۲	-	۱/۳۵۷	۱/۰۹۶	۱۰/۱۶۹	-۶/۰۴۶
MoSi ₂ AsSb ₃	۳/۸۲۲	-	۲/۷۷	-	۲/۵۸۶	۱/۳۱۵	۱/۰۷۳	۱۰/۹۱۲	-۵/۸۱۴
MoSi ₂ AsSbAsSb	۳/۷۷۹	۲/۶۲۸	۲/۷۶۶	۲/۳۶۷	۲/۵۹۱	۱/۳۳۱	۱/۰۸۸	۱۰/۵۴۳	-۵/۹۲۳

$9 \times 15 \times 1$ گریدبندی شده است. برای محاسبه ترابرد با تی بی ترنس ناحیه دیوایس به اندازه $18 \times 30 \times 1$ گریدبندی شده است. همچنین در شبیه سازی‌های ترابرد روش گریم^۴ برای مدل کردن برهم کنش وان دروالس^۵ بین لایه‌ها استفاده شده است [۵۳].

۳- نتایج و بحث

ساختارهای اتمی $MoSi_2X_mY_n$ در شکل (۱) نشان داده شده‌اند. برای تشکیل این ساختارهای نامتقارن، یک تا سه اتم فسفر در $MoSi_2P_4$ با آرسنیک، و یک تا سه اتم آرسنیک در $MoSi_2As_4$ با آنتیموان جایگزین شده‌اند و ساختارهای $MoSi_2XY_3$ ، $MoSi_2X_3Y$ ، $MoSi_2X_2Y_2$ و $MoSi_2XYXY$ را با حفظ ساختار شش وجهی تشکیل داده‌اند. در واقع این ساختارها از هفت زیرلایه‌ی اتمی

شبیه سازی ترابرد الکترونی با ماجول ترنسیستا و تی بی ترنس از نرم افزار سیستا انجام شده است. برای محاسبه ترابرد الکترونی ساختارهای $MoSi_2P_mAs_n$ و $MoSi_2As_2Sb_2$ در نظر گرفته شده‌اند. الکترودهای چپ و راست از سلول واحد مستطیلی متشکل از یک لایه $MoSi_2X_mY_n$ تشکیل شده‌اند. ناحیه دیوایس وسط نیز از سلول واحد مستطیلی متشکل از یک لایه $MoSi_2X_mY_n$ تشکیل شده است. مکان اتم‌های این ساختار سه لایه به طور کامل توسط نرم افزار سیستا ریلکس شده است و این مکان‌های اتمی ریلکس شده برای شبیه سازی ترابرد توسط ترنسیستا به کار رفته است. شرایط مرزی متناوب در هر سه جهت x ، y و z به کار رفته است. ناحیه اول بریلوئن در الکترودها به اندازه $9 \times 15 \times 3$ و در ناحیه دیوایس به اندازه

⁴ Grimme (DFT-D2)
⁵ Van der Waals interaction

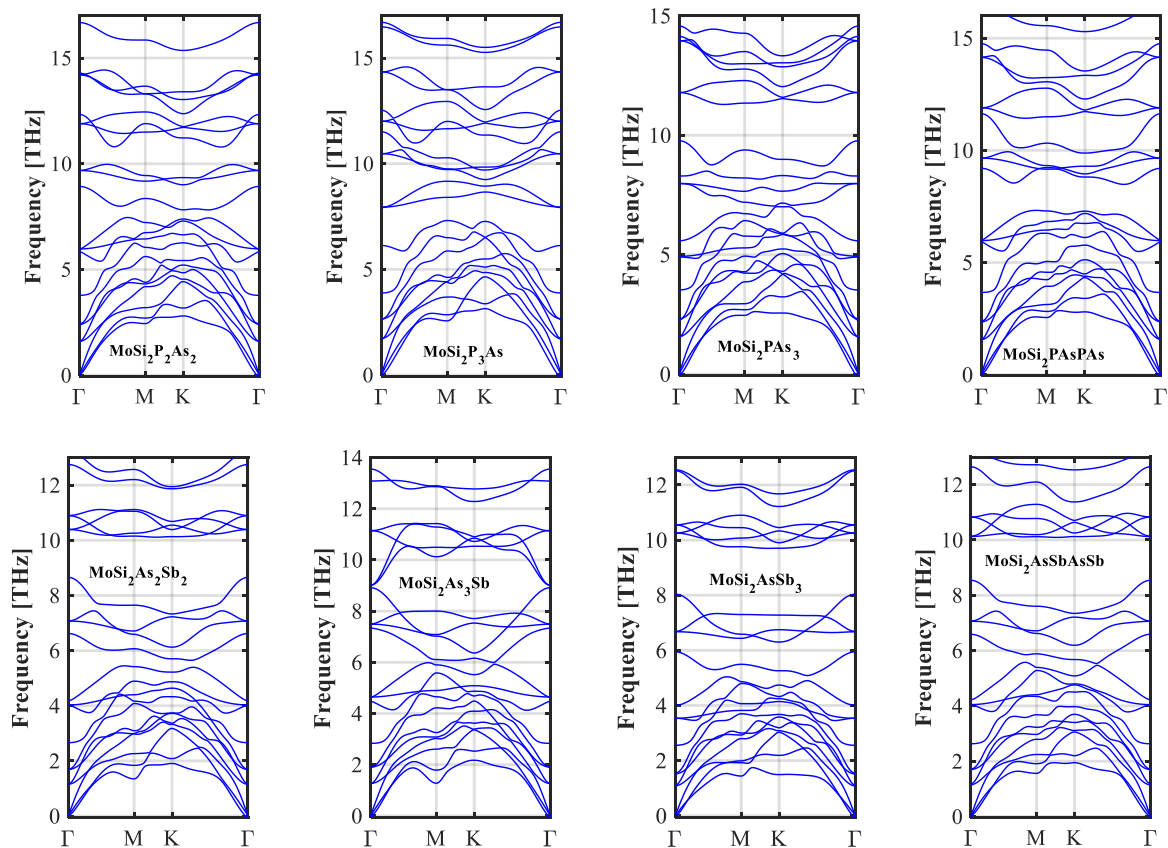
¹ GGA
² PBE
³ Bader Charge Analysis

تشکیل ساختارهای مختلف در جدول نشان داده شده است. برای بررسی پایدار بودن ساختارهای مورد بررسی، انرژی تشکیل ساختارها با واحد الکترون ولت بر اتم از رابطه زیر به دست می‌آید [۳۲]:

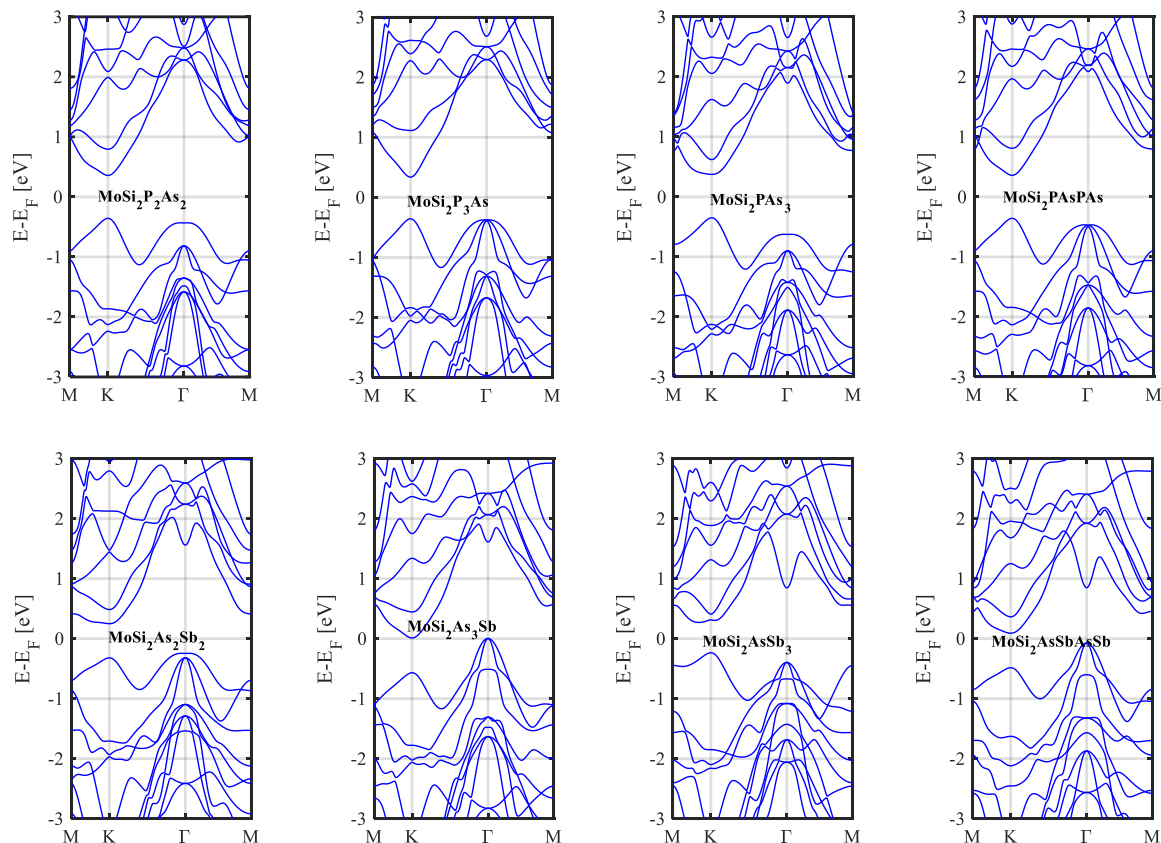
$$E_{coh} = \frac{E_{tot} - E_{Mo} - 2 \times E_{Si} - m \times E_X - n \times E_Y}{n_{tot}} \quad (2)$$

در این رابطه E_{tot} ، E_{Mo} ، E_{Si} ، E_X و E_Y به ترتیب انرژی کل ساختار و انرژی اتم‌های مجزای Mo ، Si ، X و Y می‌باشند. n_{tot} هم تعداد اتم‌ها در یک سلول واحد می‌باشد. ساختار $\text{MoSi}_2\text{X}_3\text{Y}$ دارای کمترین انرژی تشکیل و پایدارترین ساختار می‌باشد. همچنین برای بررسی پایداری ساختارها، محاسبات پراکندگی فونون در امتداد نقاط با تقارن بالا در ناحیه بریلوئن انجام شده و در شکل (۲) نشان داده شده است. محاسبات فونون در یک سوپرسل متشکل از 5×5 سلول واحد انجام شده است. همانگونه که دیده می‌شود، هشت ساختار مورد بررسی هیچ فرکانس موهومی اطراف نقطه Γ ندارند و به صورت دینامیکی پایدار می‌باشند.

تشکیل شده‌اند. برای مثال در ساختار $\text{MoSi}_2\text{PAS}_3$ این هفت لایه به ترتیب برابرند با: فسفر، سیلیکون، آرسنیک، مولیبدن، آرسنیک، سیلیکون و آرسنیک. در این مواد علاوه بر عدم وجود تقارن وارونگی، تقارن آینه‌ای هم از بین می‌رود که سبب ایجاد یک میدان الکتریکی داخلی و خواص الکترونیکی، اسپینترونیکی و پیزوالکتریکی منحصر به فردی می‌شود. ثابت شبکه، طول پیوندها و انرژی تشکیل ساختارهای $\text{MoSi}_2\text{X}_m\text{Y}_n$ در جدول ۱ مقایسه شده‌اند. ثوابت شبکه ساختارهای MoSi_2P_4 و MoSi_2As_4 به ترتیب برابر $3/471$ و $3/621$ آنگستروم گزارش شده‌اند [۳۴]. همانگونه که دیده می‌شود، ثابت شبکه در ساختارهای نامتقارن $\text{MoSi}_2\text{P}_m\text{As}_n$ بین ثابت شبکه ساختارهای MoSi_2P_4 و MoSi_2As_4 قرار گرفته‌اند. بیشترین ثابت شبکه را ساختار $\text{MoSi}_2\text{PAS}_3$ و کمترین را ساختار $\text{MoSi}_2\text{P}_3\text{AS}$ دارد. همانگونه که انتظار می‌رود، با افزایش عدد اتمی و به کارگیری اتم‌های سنگین‌تر، ثابت شبکه و طول پیوندها افزایش می‌یابد. همچنین انرژی



شکل ۲- پراکندگی فونون در ساختارهای $\text{MoSi}_2\text{X}_m\text{Y}_n$



شکل ۳- ساختار نوارهای انرژی ترکیبات $MoSi_2X_mY_n$

جدول ۲- شکاف انرژی (E_g), محل مینیمم نوار هدایت (CBM), محل ماکزیمم نوار ظرفیت (VBM), فاصله E_C از سطح فرمی ($E_C - E_F$), فاصله E_V از سطح فرمی ($E_V - E_F$) و گشتاور دوقطبی الکتریکی (μ).

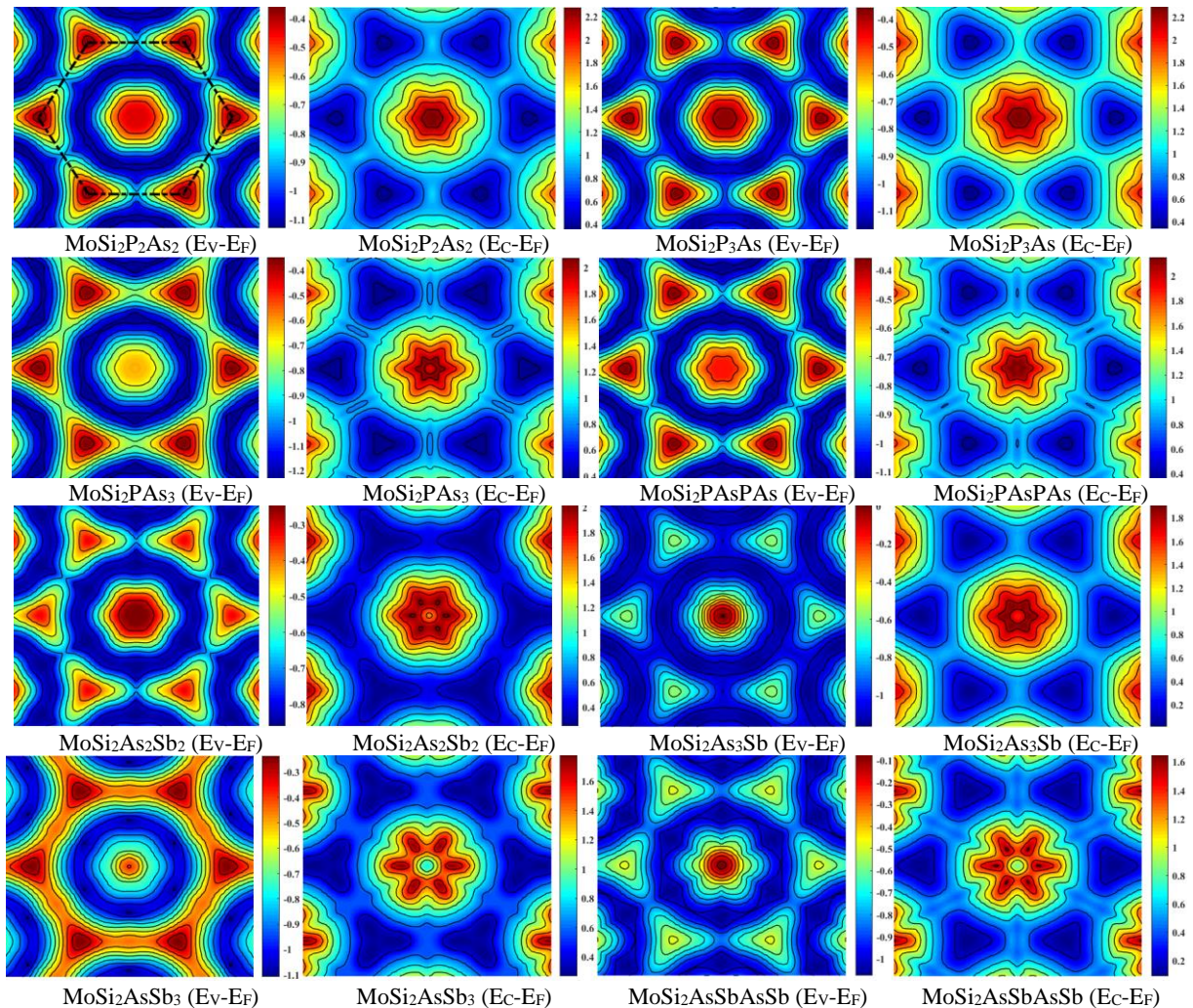
μ (Debye)	$E_V - E_F$ (eV)	$E_C - E_F$ (eV)	VBM	CBM	E_g (eV)	نام ماده
۰/۱۷۴	-۰/۳۵۷	۰/۳۵۸	K	K	۰/۷۱۵	$MoSi_2P_2As_2$
۰/۰۶۳۴	-۰/۳۵۸	۰/۳۴	K	K	۰/۶۹۸	$MoSi_2P_3As$
۰/۰۶۰۳	-۰/۳۴۹	۰/۳۷۹	K	K	۰/۷۲۸	$MoSi_2PA_3$
۰/۰۴۹۸	-۰/۳۵۷	۰/۳۵۸	K	K	۰/۷۱۵	$MoSi_2PASAs$
۰/۱۷۶۹	-۰/۲۵۱	۰/۲۵۹	Γ	K	۰/۵۱	$MoSi_2As_2Sb_2$
۰/۰۴۶۵	۰/۰۰۵	۰/۰۰۹	Γ	K	۰/۰۰۴	$MoSi_2As_3Sb$
۰/۰۱۷۳	-۰/۲۳۴	۰/۲۶۸	K	M-K	۰/۵۰۳	$MoSi_2AsSb_3$
۰/۱۲۰۶	-۰/۰۷۵	۰/۰۹۱	Γ	K	۰/۱۶۶	$MoSi_2AsSbAsSb$

مینیمم نوار هدایت هر دو در نقطه K قرار گرفته‌اند. برخلاف ترکیبات PAS، ساختارهای AsSb شکاف انرژی غیرمستقیم دارند و ماکزیمم نوار ظرفیت و مینیمم نوار هدایت برای ساختار $AsSb_3$ به ترتیب در نقاط K و در مسیر M-K در نزدیکی K، و برای بقیه ترکیبات $AsSb$ به ترتیب در نقاط Γ و K قرار گرفته‌اند. برای درک بهتر نوارهای انرژی و دره‌ها و قله‌های مؤثر در نوار هدایت و

ساختار نوارهای انرژی ترکیبات مورد بررسی در شکل (۳) نشان داده شده است و مقادیر مربوط به شکاف انرژی، محل نوار هدایت و ظرفیت، فاصله نوار هدایت و ظرفیت از سطح فرمی و گشتاور دوقطبی الکتریکی در جدول ۲ لیست شده اند. به جز ساختار $MoSi_2As_3Sb$ ، بقیه ساختارها نیمه‌هادی هستند. ترکیبات $MoSi_2P_mAs_n$ نیمه هادی با شکاف انرژی مستقیم هستند که ماکزیمم نوار ظرفیت و

انرژی در ساختار As_3Sb به نزدیکی صفر می‌رسد. برای بررسی نقش اوربیتال‌های اتمی مختلف در نوارهای انرژی، چگالی حالت‌های مبتنی بر اوربیتال^۳ هر یک از ساختارها در شکل (۵) نشان داده شده‌اند. شکاف انرژی در چگالی حالت‌ها کاملاً منطبق بر نوارهای انرژی می‌باشد. از منحنی چگالی حالت‌ها می‌توان به این نتیجه رسید که اوربیتال‌های موثر در ماکزیمم نوار ظرفیت و مینیمم نوار هدایت اوربیتال‌های d اتم‌های مولیبدن می‌باشد. اوربیتال‌های p اتم‌های X و Y، به خصوص اوربیتال‌های p از اتم‌های Y در ساختارهای XY_3 هم در لبه نوار هدایت و ظرفیت موثر هستند، ولی نقش آن‌ها کمتر از اوربیتال d اتم مولیبدن می‌باشد.

ظرفیت، خطوط انرژی یکسان^۱ نوارهای هدایت و ظرفیت در ناحیه بریلوئن^۲ برای ۸ ساختار مورد بررسی در شکل (۴) رسم شده است. همانگونه که دیده می‌شود، انرژی قله Γ در نوار ظرفیت ساختارهای P_2As_2 ، P_3As و PAsPAS به انرژی VBM، و انرژی دره M در نوار هدایت ساختارهای As_2Sb_2 ، As_3Sb و PAs_3 به انرژی CBM نزدیک و در هدایت مؤثر هستند. همچنین در ساختار As_2Sb_2 انرژی نقطه K از نوار ظرفیت به نقطه Γ ، و انرژی دره M از نوار هدایت به نقطه K بسیار نزدیک است و در هدایت نقش دارد. با توجه به جدول ۲، بیشترین شکاف انرژی مربوط به ساختارهای XY_3 ، و کمترین شکاف انرژی مربوط به ساختارهای X_3Y می‌باشد که این میزان کمینه شکاف

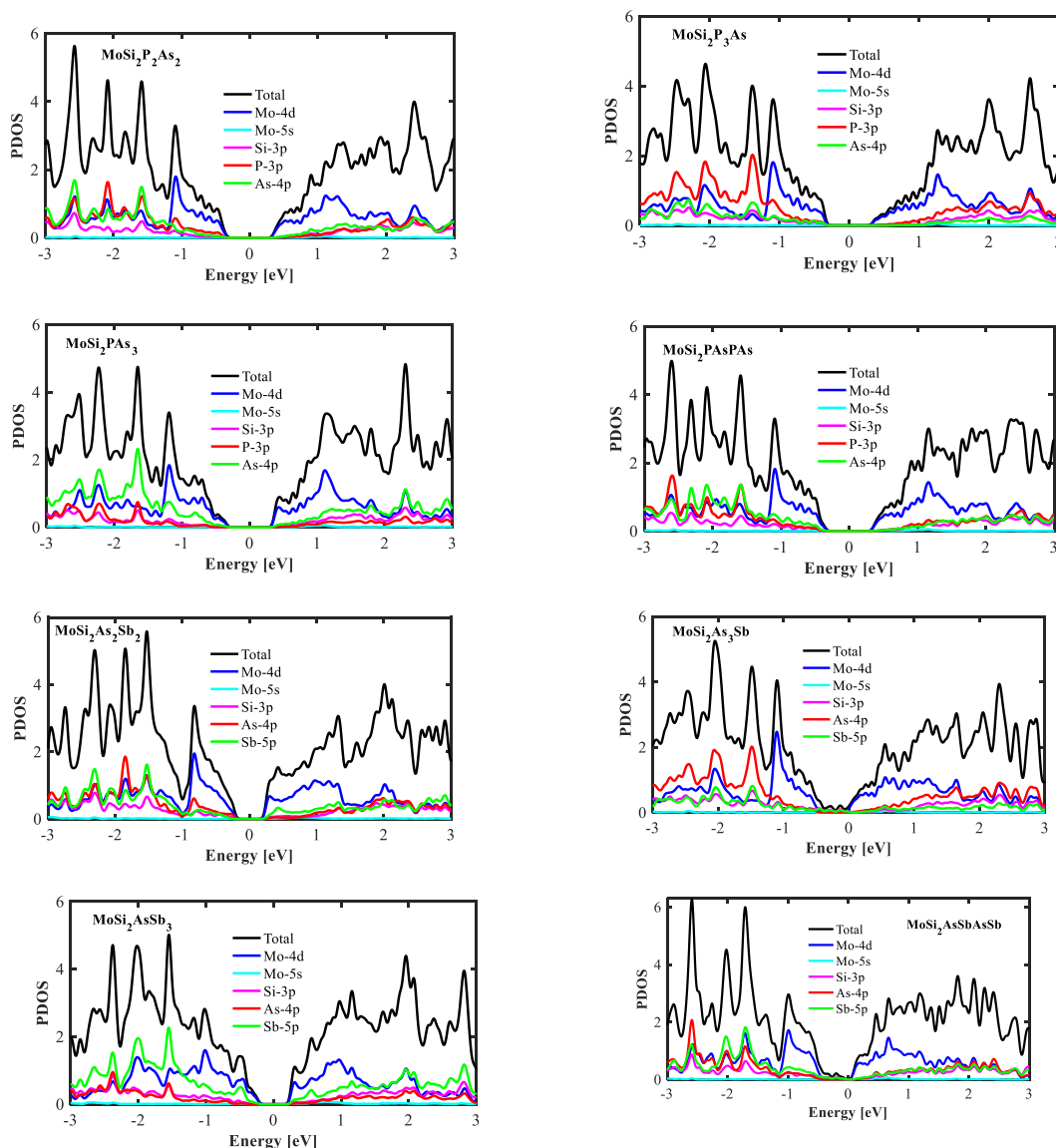


شکل ۴- خطوط انرژی یکسان نوارهای هدایت و ظرفیت در ناحیه بریلوئن برای ساختارهای $\text{MoSi}_2\text{X}_m\text{Y}_n$ (ناحیه بریلوئن در شکل اول با خط چین مشخص شده است).

³ PDOS

¹ Equi-energy contours

² Brillouin Zone



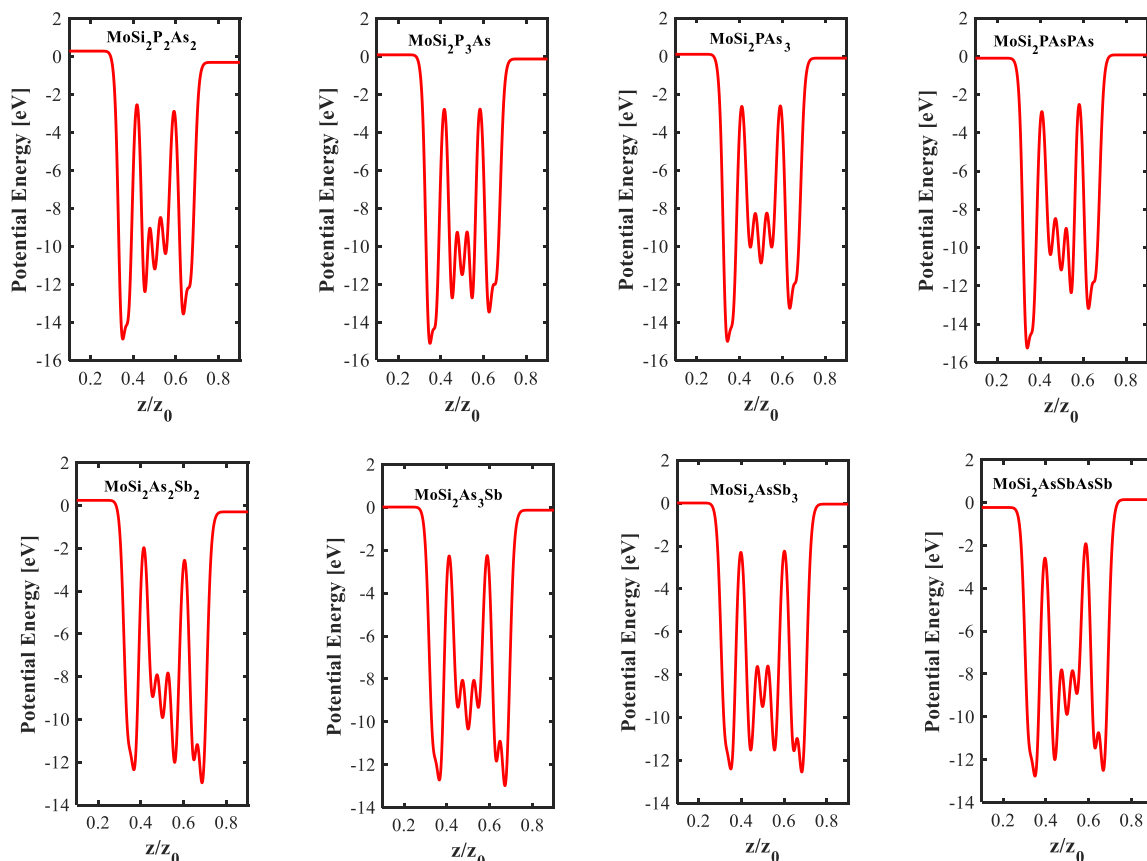
شکل ۵- چگالی حالت‌های مبتنی بر اوربیتال ساختارهای $MoSi_2X_mY_n$

به منظور درک بهتر وجود میدان الکتریکی عمودی داخلی، متوسط صفحه‌ای پتانسیل الکتروستاتیکی نسبت به ارتفاع نسبی در سلول واحد در شکل (۶) رسم شده است. مطابق انتظار توزیع پتانسیل الکتروستاتیکی نامتقارن در همه ساختارها دیده شود. این به دلیل از بین رفتن تقارن آینه ای در این ترکیبات و الکترونگاتیویتهی متفاوت اتم‌های X و Y می‌باشد و منجر به یک اختلاف پتانسیل عمود بر صفحه و در نتیجه میدان الکتریکی می‌شود. میدان داخلی ایجاد شده از ماده با الکترونگاتیویتهی کمتر به سمت ماده با الکترونگاتیویتهی بیشتر است. این جهت میدان به دلیل تجمع بیشتر الکترون‌ها اطراف ماده با الکترونگاتیویته بیشتر است که سبب می‌شود میدان از اتم با تجمع الکترون کمتر و در نتیجه بار خالص مثبت‌تر (الکترونگاتیویته کمتر) به اتم

از آنجاییکه در ساختارهای نامتقارن اتم‌های دو طرف ساختار متفاوت هستند، گشتاور دوقطبی الکتریکی در جهت عمود بر صفحه ایجاد می‌شود. گشتاور دوقطبی الکتریکی ایجاد شده در ساختارهای مورد بررسی در جدول ۲ نشان داده شده اند و همانگونه که دیده می‌شود گشتاور دوقطبی الکتریکی عمودی غیرصفر، وجود یک میدان الکتریکی داخلی عمود بر صفحه را تأیید می‌کند. رفتار گشتاور دوقطبی الکتریکی در یک ماده به نحوه قرارگیری اتم‌های گروه ۵ ($X_2Y_2, X_3Y, XY_3, XYXY$) وابسته می‌باشد. برای مثال همانگونه که در جدول ۲ دیده می‌شود، ساختارهای X_2Y_2 نسبت به سایر ساختارها قطبی‌تر می‌باشند و دارای بیشترین گشتاور دوقطبی الکتریکی هستند.

برای مثال در ساختارهای PAS اتم‌های سیلیکون و مولیبدن الکترون از دست می‌دهند و فسفر و آرسنیک الکترون به دست می‌آورند. به علت وجود اتم‌های متفاوت در دو سمت ساختار، مجموع بار الکتریکی در دو سمت اتم مرکزی یعنی Mo متفاوت می‌باشد که این منجر به ایجاد میدان از اتم‌های با مجموع الکترون کمتر به سمت اتم‌های با مجموع الکترون بیشتر می‌شود و برای مثال در ساختار P_2As_2 این میدان از سمت As به P می‌باشد.

با تجمع الکترون بیشتر و در نتیجه بار خالص منفی‌تر (الکترونگاتیویته بیشتر) باشد. برای اثبات این نحوه‌ی تجمع بار، تحلیل بار بدر برای بررسی انتقال بار بین اتم‌ها در ساختارهای مورد بررسی انجام شده‌است. نتایج به دست آمده در جدول ۳ دیده می‌شوند که در آن مقادیر منفی بیانگر از دست دادن الکترون و مقادیر مثبت بیانگر دریافت الکترون می‌باشند. میزان بار منتقل شده بین اتم‌ها بستگی به اختلاف الکترونگاتیویته‌ی دو اتم و عدد اتمی اتم‌ها دارد.



شکل ۶- متوسط صفحه‌ای پتانسیل الکترواستاتیکی برای ساختارهای $\text{MoSi}_2\text{X}_m\text{Y}_n$. z_0 ضخامت سلول واحد و z متغیر مختصات در جهت عمودی است. بنابراین z/z_0 ارتفاع نسبی در سلول واحد است.

وجود دارند، تابع کار بزرگ‌تر در سمت اتم با Y الکترونگاتیویته‌ی بیشتر دیده می‌شود. همانطور که در جدول ۴ دیده می‌شود برای مثال در ساختار P_2As_2 تابع کار سمت اتم فسفر برابر $4/42$ الکترون‌ولت و سمت اتم آرسنیک برابر $3/82$ الکترون‌ولت می‌باشد.

همانگونه که در شکل توزیع پتانسیل دیده می‌شود، برخلاف ساختارهای متقارن، در این مواد سطح خلاء در دو طرف ساختار متفاوت است که منجر به توابع کار^۱ متفاوت در دو سمت ساختار می‌شود. در واقع تجمع بیشتر الکترون‌ها منجر به افزایش تابع کار می‌شود [۵۴ و ۵۵] و در نتیجه به جز ساختار XYYX که در هر دو طرف ساختار اتم‌های X و

^۱ Work Function

جدول ۳- نتایج تحلیل انتقال بار بین اتمها به روش بدر. اعداد ذکر شده تعداد الکترونهای از دست داده یا دریافت شده توسط اتمها را نشان می دهند. علامت منفی به معنای از دست دادن الکترون و علامت مثبت به معنی به دست آوردن الکترون می باشد. اتمهای گروه ۵ به ترتیب از پایین به بالا با X1 تا X4 مشخص شده اند.

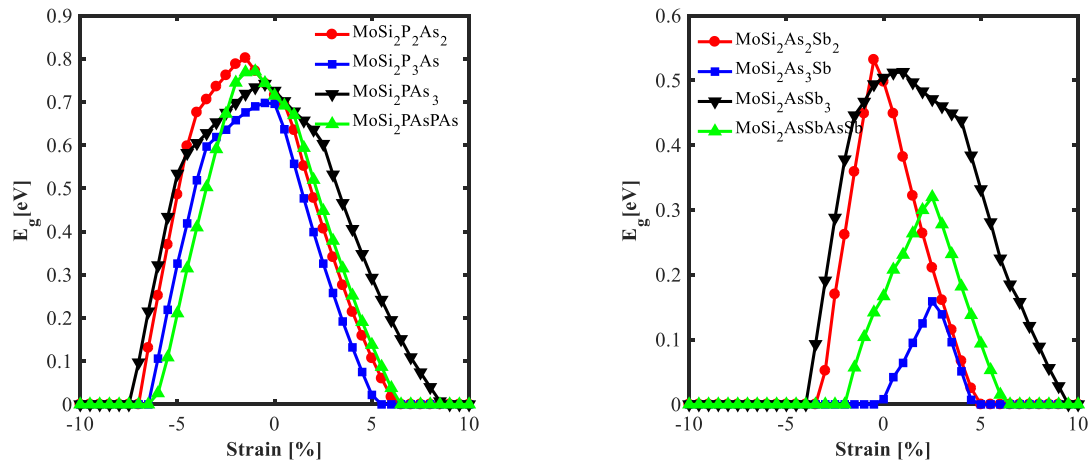
X4 (e)	Si2 (e)	X3 (e)	Mo (e)	X2 (e)	Si1 (e)	X1 (e)	
۲/۷۷۶	-۳/۷۹	۱/۴۱۲	-۰/۹۸۸	۱/۵۹۷	-۳/۷۹۹	۲/۷۹۱	MoSi ₂ P ₂ As ₂
۲/۷۶	-۳/۷۹۱	۱/۵۶۳	-۱/۰۹۳	۱/۵۹	-۳/۷۹۷	۲/۷۶۸	MoSi ₂ P ₃ As
۲/۸۰۲	-۳/۷۹۱	۱/۳۹۵	-۰/۸۲۴	۱/۴۰۳	-۳/۷۹۷	۲/۸۱۱	MoSi ₂ PAs ₃
۲/۷۶۷	-۳/۷۹۱	۱/۵۹۹	-۰/۹۸۹	۱/۴۰۱	-۳/۷۹۴	۲/۸۰۷	MoSi ₂ PAsPAs
-۳/۱۶۲	۴/۲۸۵	-۰/۹۷۹	-۰/۵۹۲	۱/۴۶	-۳/۷۷	۲/۷۵۸	MoSi ₂ As ₂ Sb ₂
-۳/۱۹	۲/۲۱	۱/۳۹۲	-۰/۸۵۳	۱/۴۴۸	-۳/۷۸۱	۲/۷۷۵	MoSi ₂ As ₃ Sb
-۳/۱۹۶	۴/۳۲۹	-۱/۰۰۷	-۰/۲۶۴	-۰/۹۹۵	-۰/۸۹۶	۲/۰۲۹	MoSi ₂ AsSb ₃
-۳/۲۰۸	۲/۲۱۹	۱/۴۳۵	-۰/۵۹	-۰/۹۳۵	-۱/۰۱	۲/۰۹	MoSi ₂ AsSbAsSb

جدول ۴- توابع کار مواد مورد بررسی در دو سمت مختلف ساختار و مربوط به صفحات اتمهای X و Y

WF _Y (eV)	WF _X (eV)		WF _Y (eV)	WF _X (eV)	
۳/۶	۴/۱۳	MoSi ₂ As ₂ Sb ₂	۳/۸۲	۴/۴۲	MoSi ₂ P ₂ As ₂
۳/۶۶	۳/۸۱	MoSi ₂ As ₃ Sb	۴/۱۶	۴/۳۸	MoSi ₂ P ₃ As
۳/۷۳	۳/۷۸	MoSi ₂ AsSb ₃	۳/۸۶	۴/۰۶	MoSi ₂ PAs ₃
۳/۸۵	۳/۴۸	MoSi ₂ AsSbAsSb	۴/۱۹	۴/۰۲	MoSi ₂ PAsPAs

این کرنشهای گذار از نیمه هادی به فلز در جدول ۵ آمده است. برای ساختارهای PAs کرنش فشاری گذار بین ۶/۵٪- و ۷/۵٪- و کرنش کششی گذار بین ۵/۵٪ تا ۹٪ است که بیشترین کرنش کششی گذار مربوط به ساختار PAs₃ می باشد. در ساختارهای AsSb، به جز As₂Sb₂ که در کرنش ۵/۰٪- به ماکزیمم شکاف انرژی می رسد، بقیه ساختارها در کرنشهای کششی به ماکزیمم می رسند. برای ساختارهای AsSb کرنش فشاری گذار بین منفی نیم درصد و منفی دو درصد و کرنش کششی گذار بین پنج تا نه و نیم درصد است که در جدول ۳ آمده است. نکته قابل توجه این است که ساختار As₃Sb که در حالت تعادل دارای شکاف انرژی صفر و رفتار فلزی است، با اعمال تنش دارای شکاف انرژی تا ۰/۱۶ الکترون ولت می شود و بنابراین اعمال تنش یک روش موثر برای ایجاد شکاف انرژی در مواد می باشد. این تغییر شکاف انرژی با تنش در ترانزیستورها می تواند باعث افزایش نسبت جریان روشن به خاموش ترانزیستور شود و بنابراین کنترل بسیار مؤثر خواص الکتریکی این ساختارها با کرنش، این مواد را برای کاربردهای پیزوالکتریکی و الکترومکانیکی بسیار مناسب می کند.

اعمال کرنش صفحه ای یک روش معمول و مؤثر برای تغییر خواص الکترونیکی مواد می باشد [۲۸ و ۳۱ و ۴۱ و ۴۳]. ما در این مقاله کرنش بین ۱۰٪- تا ۱۰٪+ به ساختارهای مورد بررسی اعمال کرده ایم و تغییرات شکاف انرژی ساختارها نسبت به کرنش اعمالی در شکل (۷) گزارش شده است. کرنش باعث تغییر ثابت شبکه و طول پیوند بین اتمها در ساختارهای مورد بررسی می شود. همچنین کرنش کششی (فشاری) درون صفحه ای باعث ایجاد کرنش فشاری (کششی) در جهت عمود می شود و همه این موارد سبب ایجاد تغییرات قابل توجهی در شکاف انرژی می شود. روند تغییرات شکاف انرژی در جدول ۵ خلاصه شده است. شکاف انرژی ساختارها در کرنش خاصی به ماکزیمم می رسد. این کرنش (ϵ_{max}) و شکاف انرژی ماکزیمم (E_{gmax}) به دست آمده در جدول ۵ لیست شده اند. شکاف انرژی ساختارهای PAs در کرنشهای فشاری کوچک به ماکزیمم می رسند و با کرنش فشاری بیشتر یا کرنش کششی کاهش می یابند. شکاف انرژی همه ساختارها در کرنش فشاری ($\epsilon_{trans}(Compressive)$) و کرنش کششی ($\epsilon_{trans}(Tensile)$) خاصی به صفر می رسد و ساختارها تبدیل به فلز می شوند. مقادیر



شکل ۷- تغییرات شکاف انرژی ساختارهای $\text{MoSi}_2\text{X}_m\text{Y}_n$ با اعمال کرنش

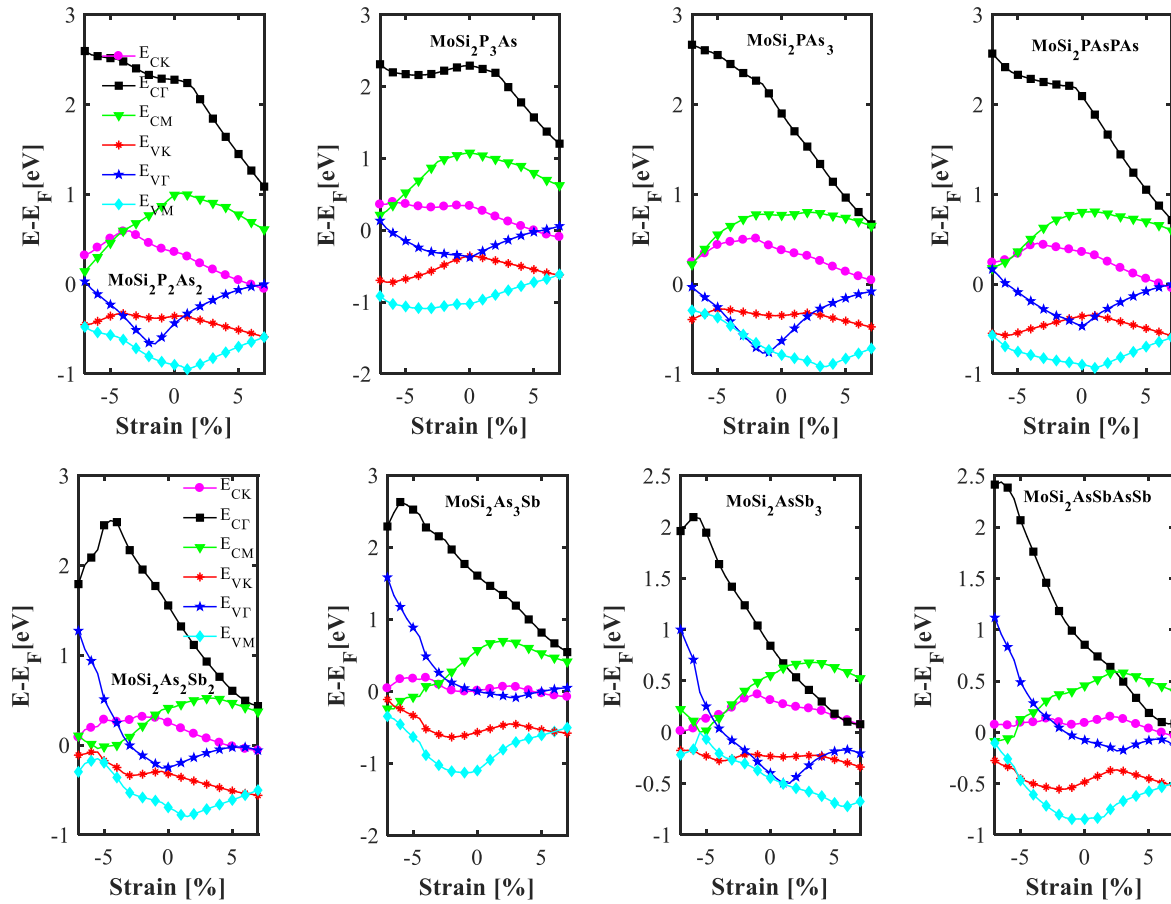
جدول ۵- شکاف انرژی در حالت تعادل (E_g)، ماکزیمم شکاف انرژی به دست آمده با اعمال کرنش (E_{gmax})، کرنش متناظر با ماکزیمم شکاف انرژی (ϵ_{max})، کرنش فشاری انتقال از نیمه‌هادی به فلز (ϵ_{trans} (Compressive)) و کرنش کششی انتقال از نیمه‌هادی به فلز

(ϵ_{trans} (Tensile))

ϵ_{trans} (%) (کششی)	ϵ_{trans} (%) (فشاری)	ϵ_{max} (%)	E_{gmax} (eV)	E_g (eV)	
۶/۵	-۷	-۱/۵	۰/۸۰۲	۰/۷۱۵	$\text{MoSi}_2\text{P}_2\text{As}_2$
۵/۵	-۶/۵	-۰/۵	۰/۶۹۸	۰/۶۹۸	$\text{MoSi}_2\text{P}_3\text{As}$
۹	-۷/۵	-۰/۵	۰/۷۴۲	۰/۷۲۸	$\text{MoSi}_2\text{PAS}_3$
۶/۵	-۶/۵	-۱	۰/۷۷۱	۰/۷۱۵	$\text{MoSi}_2\text{PASPAS}$
۵	-۳/۵	-۰/۵	۰/۵۳۲	۰/۵۱	$\text{MoSi}_2\text{As}_2\text{Sb}_2$
۵	-۰/۵	۲/۵	۰/۱۵۹	۰/۰۰۴	$\text{MoSi}_2\text{As}_3\text{Sb}$
۹/۵	-۴	۱	۰/۵۱۳	۰/۵۰۳	$\text{MoSi}_2\text{AsSb}_3$
۶/۵	-۲	۲/۵	۰/۳۲	۰/۱۶۶	$\text{MoSi}_2\text{AsSbAsSb}$

محل CBM از نقطه K به M تغییر می‌کند. ساختارهای AsSb در حالت تعادل شکاف انرژی غیرمستقیم دارند. در پیکربندی‌های As_2Sb_2 و AsSb_3 محل CBM و VBM در اثر کرنش تغییر می‌کند و در ساختار AsSb_3 در بازه ۳- تا ۴ درصد شکاف انرژی بین نقاط K از نوار ظرفیت و هدایت قرار می‌گیرد و مستقیم می‌شود. برای درک بهتر تغییر ساختار نوارهای انرژی در اثر کرنش، خطوط انرژی یکسان در ناحیه بریلوئن ساختار P_2As_2 در سه حالت بدون کرنش، با کرنش منفی پنج درصد و کرنش مثبت پنج درصد در شکل (۹) مقایسه شده‌اند. همان‌گونه که در شکل دیده می‌شود، ماکزیمم نوار ظرفیت در کرنش منفی پنج و مثبت پنج درصد از محل تعادل یعنی نقطه K به قله Γ منتقل می‌شود. همچنین CBM که در حالت تعادل در دره K قرار دارد، با اعمال کرنش منفی پنج درصد به نزدیکی نقطه M تغییر می‌کند.

نتایج شبیه‌سازی‌ها نشان می‌دهد که اعمال کرنش دو محوره به طور مؤثری محل ماکزیمم نوار ظرفیت و مینیمم نوار هدایت را تغییر می‌دهد و می‌تواند نوع نیمه‌هادی را از مستقیم به غیرمستقیم یا برعکس تغییر دهد. تغییرات انرژی دره‌ها و قله‌های Γ ، M، و K از نوار هدایت و ظرفیت نسبت به کرنش اعمالی در شکل (۸) نشان داده شده است. در هر مقدار کرنش، قله با بالاترین انرژی محل VBM و دره با پایین‌ترین انرژی محل CBM ساختار می‌باشند. ساختارهای PAS در حالت تعادل شکاف انرژی مستقیم دارند، ولی همان‌گونه که در شکل دیده می‌شود، VBM پیکربندی‌های P_2As_2 ، P_3As ، PAS_3 و PASPAS به ترتیب در کرنش‌های فشاری ۴-، ۱-، ۵- و ۱- درصد، و در کرنش‌های کششی ۱، ۱، ۲ و ۱ درصد از نقطه K به نقطه Γ تغییر می‌کند و شکاف انرژی غیرمستقیم می‌شود. همچنین در بازه‌های کرنش کوچکی در P_2As_2 و P_3As ،

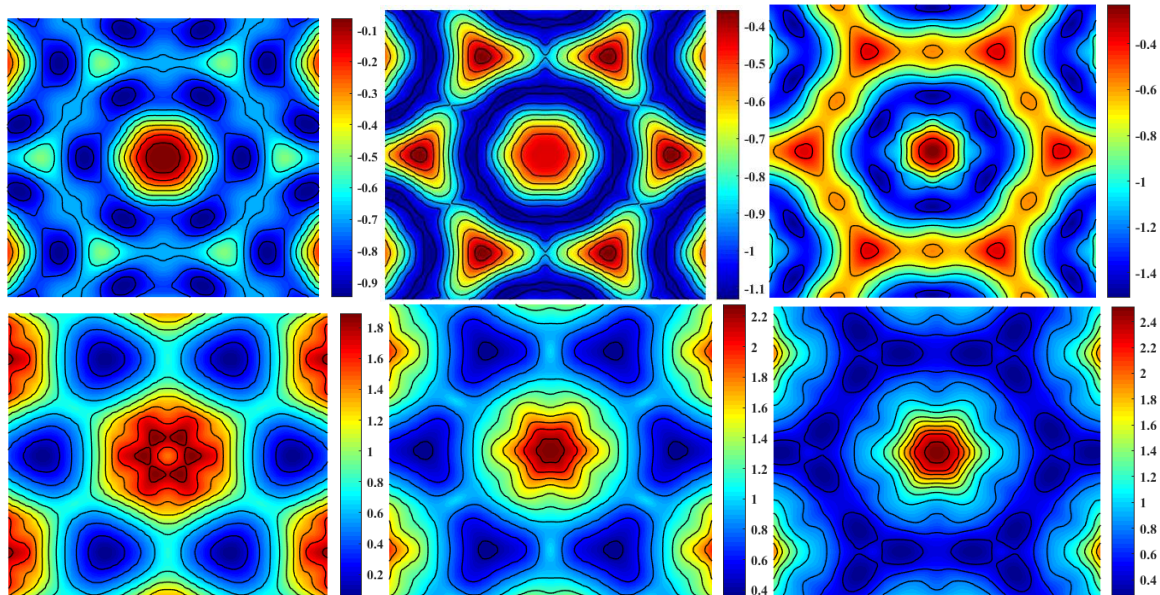


شکل ۸- تغییرات انرژی دره‌ها و قله‌های Γ ، M و K از نوار هدایت و ظرفیت نسبت به کرنش اعمالی

-۵٪

۰٪

۵٪



شکل ۹- خطوط انرژی یکسان نوار ظرفیت (ردیف اول) و نوار هدایت (ردیف دوم) در ناحیه بریلوئن ساختار $MoSi_2P_2As_2$ در حالت

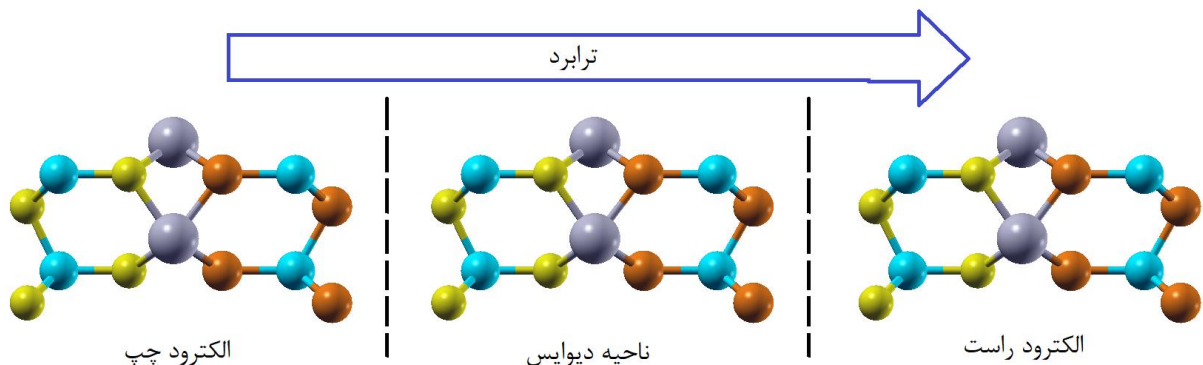
تعادل و تحت کرنش‌های منفی پنج و مثبت پنج درصد

یکسوسازی بالاتری ایجاد می‌کند. نسبت ماکزیمم جریان به ازای اعمال ولتاژ مثبت، به اندازه ماکزیمم جریان در ولتاژ منفی برای مشخصه‌های رسم شده در شکل ۱۱ محاسبه شده است که برای ساختار As_2Sb_2 برابر $2/0.84$ و در ساختارهای P_2As_2 ، P_3As ، PAs_3 و PAsPAs به ترتیب برابر با $1/566$ ، $1/169$ ، $1/102$ و $1/15$ می‌باشد. بنابراین همانطور که انتظار می‌رود، ساختار X_2Y_2 که قطبی‌ترین پیکربندی است و بیشترین گشتاور دوقطبی الکتریکی را دارد، بهترین ساختار از نظر عدم تقارن جریان مثبت و منفی برای کاربرد در یکسوسازها می‌باشد.

ساختارهای عمودی تشکیل شده از یک ماده^۱ یا دو ماده مختلف (ساختارهای نامتجانس^۲) مهم‌ترین و بهترین انتخاب برای ادوات الکترونیکی بر پایه مواد دوبعدی می‌باشند [۵۶]. به علت عدم وجود باندهای رها^۳ و برهم کنش بین لایه‌ای وان‌دروالس، امکان پشته‌سازی مواد مختلف بدون محدودیت ثابت شبکه وجود دارد. برای ساخت یکسوساز با استفاده از این مواد می‌توان از پشته سازی چند لایه از یک نوع از این مواد جانوس ولی با دوپینگ‌های مختلف استفاده کرد. در [۵۷] ثابت شده است که اعمال ناخالصی جانیشینی از نوع فلز واسطه تابع کار MoSi_2N_4 را به طور مؤثری تغییر می‌دهد. برای مثال ناخالصی‌های Mn ، Tc و Ru می‌توانند MoSi_2N_4 را از یک ماده نوع p به ماده نوع n تغییر دهند. همچنین می‌توان از پشته‌سازی دو نوع مختلف از این مواد با شکاف انرژی متفاوت (جدول ۲)، و توابع کار مختلف (جدول ۴) و یا از پشته‌سازی این مواد با مواد دوبعدی دیگر مانند MoS_2 یکسوسازهایی با ضریب یکسوسازی بالا ساخت.

در ادامه این کار ترابرد الکترونی در ساختارهای $\text{MoSi}_2\text{X}_m\text{Y}_n$ مورد بررسی قرار گرفته است. برای این منظور جریان عمودی در ساختارهای P_2As_2 و As_2Sb_2 مقایسه شده‌اند. سپس جریان بین لایه‌ای در چهار ساختار P_mAs_n باهم مقایسه شده‌اند. ساختار شبیه‌سازی شده برای ترابرد الکترونی در شکل (۱۰) نشان داده شده است. در این ساختار لایه‌ها دقیقاً رو هم قرار گرفته‌اند و اتم‌های گروه پنج نزدیک به هم بین دو لایه غیر هم نام هستند. فاصله بین لایه‌ای ریلکس شده در ساختار As_2Sb_2 برابر با $3/866$ آنگستروم می‌باشد. فاصله‌ی بین لایه‌ای در ساختارهای P_mAs_n تقریباً باهم برابر و بین $3/66$ تا $3/67$ آنگستروم می‌باشد. جریان بین لایه‌ای برای پنج ساختار مورد بررسی در شکل (۱۱) مقایسه شده‌اند.

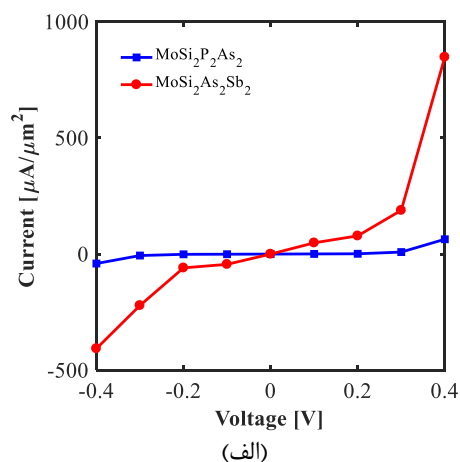
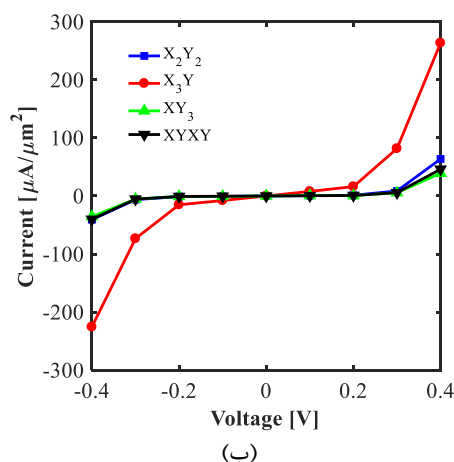
همان‌گونه که دیده می‌شود جریان بین لایه‌ای در ساختار AsSb نسبت به PAS بزرگتر است. این به دلیل شکاف انرژی کوچکتر ساختار AsSb و اتم‌های بزرگتر است که منجر به افزایش جریان تونل‌زنی بین لایه‌ای می‌شود. همچنین بین ساختارهای مختلف P_mAs_n ، ساختار P_3As به دلیل شکاف انرژی کمتر رسانایی و جریان بیشتری دارد. ماکزیمم جریان به ازای ولتاژ 0.4 ولت در ساختار As_2Sb_2 برابر $848/1$ و در ساختارهای P_2As_2 ، P_3As ، PAs_3 و PAsPAs به ترتیب برابر است با $63/8$ ، $263/6$ ، $39/1$ و $46/1$ میکروآمپر بر میکرومتر مربع می‌باشد. نکته قابل توجه در این ساختارها این است که به دلیل وجود میدان داخلی ناشی از عدم تقارن ماده، مقدار جریان به ازای ولتاژهای مثبت و منفی متفاوت می‌باشد. بنابراین استفاده از این مواد جانوس در یکسوسازها در مقایسه با مواد متقارن ضریب



شکل ۱۰- ساختار شبیه‌سازی شده برای به دست آوردن جریان بین لایه‌ای (در شکل ساختار X_2Y_2 نشان داده شده است)

³ Dangling-bonds

¹ Homostructure
² Heterostructure



شکل ۱۱- مقایسه منحنی جریان-ولتاژ در ساختارهای (الف) P_2As_2 و As_2Sb_2 (ب) P_mAs_n

۴- نتیجه گیری

در این مقاله، خواص ساختاری و الکترونیکی مواد دو بعدی نامتقارن $MoSi_2As_mSb_n$ و $MoSi_2P_mAs_n$ با استفاده از نظریه تابع چگالی مطالعه شده است. برای هر ماده چهار پیکربندی عمودی X_2Y_2 ، X_3Y ، XY_3 و $XYXY$ در نظر گرفته شده است. با استفاده از پراکندگی فوفون ثابت می شود که همه ساختارها از پایدار دینامیکی خوبی برخوردار هستند. به جز ساختار $MoSi_2As_3Sb$ ، بقیه ساختارها نیمه هادی هستند و همچنین ترکیبات PAs ، شکاف انرژی مستقیم و ترکیبات $AsSb$ شکاف انرژی غیرمستقیم دارند. چگالی حالت های مثبتی بر اوربیتال ساختارها نشان می دهد که اوربیتال مؤثر در ماکزیمم نوار ظرفیت و مینیمم نوار هدایت اوربیتال d اتم مولیبدن می باشد. به علت ساختار نامتقارن و عدم تقارن آینه ای در این مواد، گشتاور دوقطبی الکتریکی غیرصفر و یک میدان الکتریکی ذاتی در جهت عمود بر صفحه ایجاد می شود. ساختارهای X_2Y_2 نسبت به سایر ساختارها قطبی تر می باشند و دارای بیشترین گشتاور دوقطبی الکتریکی هستند. همچنین توزیع پتانسیل، تحلیل توزیع بار و تابع کار متفاوت در دو صفحه اتمی بالا و پایین ساختار، وجود این میدان الکتریکی داخلی در این مواد را اثبات می کند. در ادامه برای تنظیم خواص الکتریکی ساختارها، کرنش دومحوره داخل صفحه ای اعمال شده است که در اثر آن

شکاف انرژی ساختارها در کرنش خاصی به ماکزیمم می رسد. ساختارهای PAs در کرنش های کوچک فشاری به شکاف انرژی ماکزیمم می رسند و با کرنش فشاری بیشتر یا کرنش کششی کاهش می یابند. به جز As_2Sb_2 ، در بقیه ساختارهای $AsSb$ شکاف انرژی در کرنش های کششی به ماکزیمم مقدار خود می رسد. شکاف انرژی همه ساختارها در کرنش فشاری و کرنش کششی خاصی به صفر می رسد و ساختارها تبدیل به فلز می شوند. ساختار As_3Sb که در حالت تعادل دارای شکاف انرژی صفر است و رفتار فلزی دارد، با اعمال تنش دارای شکاف انرژی تا 0.16 الکترون ولت می شود. در انتها، ترابرد بین لایه ای در این مواد مطالعه شده است و جریان بین صفحه ای به دست آمده است. نتایج به دست آمده نشان می دهد که ترابرد بین لایه ای و در نتیجه میزان جریان عمودی به نوع و پیکربندی ماده وابسته است و جریان در ساختارهای $AsSb$ بیشتر از PAs می باشد. همچنین بین پیکربندی های مختلف PAs ، ساختار P_3As انتقال الکترون بیشتری دارد. عدم تقارن در مقدار جریان مثبت و منفی نشان می دهد که این ساختارها برای استفاده در یکسوسازها بسیار مناسب می باشند. تحقیقات انجام شده در این مقاله ثابت می کند که ساختارهای نامتقارن $MoSi_2P_mAs_n$ و $MoSi_2As_mSb_n$ گزینه های مناسبی برای کاربردهای الکترونیکی و الکترومکانیکی می باشند.

مراجع

- [1] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. Dubonos, I. Grigorieva, and A. Firsov, "Electric field effect in atomically thin carbon films", *Science*, Vol. 306, No. 5696, 2004, pp. 666-669.
- [۲] مهدیه نیری و مریم نیری، "طراحی و شبیه سازی مدار جمع کننده پنج ارزشی جدید مبتنی بر ترانزیستور نانو نوار گرافن"، نشریه مدل سازی در مهندسی، دوره ۱۸، شماره ۶۳، زمستان ۱۳۹۹، صفحه ۴۱-۵۰.
- [۳] مهناز ذاکری و امید افضل نژاد، "بررسی اثر زاویه کایرال بر کماتش محوری و پیچشی نانولوله های کربنی تک جداره به کمک روش اجزا محدود"، نشریه مدل سازی در مهندسی، دوره ۱۵، شماره ۴۸، بهار ۱۳۹۶، صفحه ۶۱-۷۱.
- [۴] بهروز عبدی تهنه و علی نادری، "ساختار جدید ترانزیستور اثر میدانی نانو لوله کربنی تونل زنی با دوپینگ خطی در ناحیه درین: شبیه سازی عددی کوانتومی"، نشریه مدل سازی در مهندسی، دوره ۱۶، شماره ۵۲، بهار ۱۳۹۷، صفحه ۱۱۷-۱۰۹.
- [۵] رضیه السادات حسینی المدواری، مریم نیری، سمیه فتوحی، "مطالعه خواص الکترونیکی و نوری تک لایه سولفید گالیم آلیش شده با محاسبات اصول اولیه"، نشریه مدل سازی در مهندسی، دوره ۲۰، شماره ۶۸، بهار ۱۴۰۱، صفحه ۴۷-۵۸.
- [6] S. Manzeli, D. Ovchinnikov, D. Pasquier, O. V. Yazyev, and A. Kis, "2D transition metal dichalcogenides", *Nature Reviews Materials*, Vol. 2, No. 8, 2017, pp. 1-15.
- [7] W. Choi, N. Choudhary, G. H. Han, J. Park, D. Akinwande, and Y. H. Lee, "Recent development of two-dimensional transition metal dichalcogenides and their applications", *Materials Today*, Vol. 20, No. 3, 2017, pp. 116-130.
- [8] B. Radisavljevic, A. Radenovic, J. Brivio, V. Giacometti, and A. Kis, "Single-layer MoS_2 transistors", *Nature Nanotechnology*, Vol. 6, No. 3, 2011, pp. 147-150.
- [9] J. Guan, Z. Zhu, and D. Tománek, "Phase coexistence and metal-insulator transition in few-layer phosphorene: a computational study", *Physical Review Letters*, Vol. 113, No. 4, 2014, p. 046804.
- [10] S. Zhang, Z. Yan, Y. Li, Z. Chen, and H. Zeng, "Atomically thin arsenene and antimonene: semimetal-semiconductor and indirect-direct band-gap transitions", *Angewandte Chemie*, Vol. 127, No. 10, 2015, pp. 3155-3158.
- [11] G. W. Mudd, S. A. Svatek, T. Ren, A. Patané, O. Makarovskiy, L. Eaves, P. H. Beton, Z. D. Kovalyuk, G. V. Lashkarev, Z. R. Kudrynskiy, and A. I. Dmitriev, "Tuning the bandgap of exfoliated InSe nanosheets by quantum confinement", *Advanced Materials*, Vol. 25, No. 40, 2013, pp. 5714-5718.
- [12] H. Oughaddou, H. Enriquez, M. R. Tchalala, H. Yildirim, A. J. Mayne, A. Bendounan, G. Dujardin, M. A. Ali, and A. Kara, "Silicene, a promising new 2D material", *Progress in Surface Science*, Vol. 90, No. 1, 2015, pp. 46-83.
- [13] A. Acun, L. Zhang, P. Bampoulis, M. V. Farmanbar, A. van Houselt, A. N. Rudenko, M. Lingenfelder, G. Brocks, B. Poelsema, M. I. Katsnelson, and H. J. Zandvliet, "Germanene: the germanium analogue of graphene", *Journal of Physics: Condensed matter*, Vol. 27, No. 44, 2015, p. 443002.
- [14] Y. Gogotsi, and B. Anasori, "The rise of MXenes", *ACS Nano*, Vol. 13, No. 8, 2019, pp. 8491-8494.
- [15] J. W. Jiang, Z. Qi, H. S. Park, and T. Rabczuk, "Elastic bending modulus of single-layer molybdenum disulfide (MoS_2): finite thickness effect", *Nanotechnology*, Vol. 24, No. 43, 2013, p. 435705.
- [16] K. K. Kam and B. A. Parkinson, "Detailed photocurrent spectroscopy of the semiconducting group VIB transition metal dichalcogenides", *Journal of Physical Chemistry*, Vol. 86, No. 4, 1982, pp. 463-467.
- [17] K. F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan, and T. F. Heinz, "Atomically Thin MoS_2 : A New Direct-Gap Semiconductor", *Physical Review Letters*, Vol. 105, No. 13, 2010, p. 136805.
- [18] B. Radisavljevic, A. Radenovic, J. Brivio, V. Giacometti, and A. Kis, "Single-layer MoS_2 transistors", *Nature Nanotechnology*, Vol. 6, No. 3, 2011, pp. 147-150.
- [19] L. Liu, S. Kumar, Y. Ouyang, and J. Guo, "Performance Limits of Monolayer Transition Metal Dichalcogenide Transistors", *IEEE Transactions Electron Devices*, Vol. 58, No. 9, 2011, pp. 3042-3047.
- [20] Y. Yoon, K. Ganapathi, and S. Salahuddin, "How good can monolayer MoS_2 transistors be?", *Nano Letters*, Vol. 11, No. 9, 2011, pp. 3768-3773.

- [21] B. Radisavljevic, M. B. Whitwick, and A. Kis, "Integrated circuits and logic operations based on single-layer MoS₂", *ACS Nano*, Vol. 5, No. 12, 2011, pp. 9934-9938.
- [22] R. Li, R., Y. Cheng, and W. Huang, "Recent progress of Janus 2D transition metal chalcogenides: from theory to experiments", *Small*, Vol. 14, No. 45, 2018, p. 1802091.
- [23] M. Yagmurcukardes, Y. Qin, S. Ozen, M. Sayyad, F. M. Peeters, S. Tongay, and H. Sahin, "Quantum properties and applications of 2D Janus crystals and their superlattices", *Applied Physics Reviews*, Vol. 7, No. 1, 2020, p. 011311.
- [24] A. Y. Lu, H. Zhu, J. Xiao, C. P. Chuu, Y. Han, M. H. Chiu, C. C. Cheng, C. W. Yang, K. H. Wei, Y. Yang, and Y. Wang, "Janus monolayers of transition metal dichalcogenides", *Nature Nanotechnology*, Vol. 12, No. 8, 2017, pp. 744-749.
- [25] J. Zhang, S. Jia, I. Kholmanov, L. Dong, D. Er, W. Chen, H. Guo, Z. Jin, V. B. Shenoy, L. Shi, and J. Lou, "Janus monolayer transition-metal dichalcogenides", *ACS Nano*, Vol. 11 No. 8, 2017, pp. 8192-8198.
- [26] L. Dong, J. Lou, and V. B. Shenoy, "Large in-plane and vertical piezoelectricity in Janus transition metal dichalcogenides", *ACS Nano*, Vol. 11, No. 8, 2017, pp. 8242-8248.
- [27] H. Cai, Y. Guo, H. Gao, and W. Guo, "Tribo-piezoelectricity in Janus transition metal dichalcogenide bilayers: a first-principles study", *Nano Energy*, Vol. 56, 2019, pp. 33-39.
- [28] Z. Guan, S. Ni, and S. Hu, "Tunable electronic and optical properties of monolayer and multilayer Janus MoSSe as a photocatalyst for solar water splitting: a first-principles study", *The Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 122, No. 11, 2018, pp. 6209-6216.
- [29] T. Hu, F. Jia, G. Zhao, J. Wu, A. Stroppa, and W. Ren, "Intrinsic and anisotropic Rashba spin splitting in Janus transition-metal dichalcogenide monolayers", *Physical Review B*, Vol. 97, No. 23, 2018, p. 235404.
- [30] Y. Bai, Q. Zhang, N. Xu, K. Deng, and E. Kan, "The Janus structures of group-III chalcogenide monolayers as promising photocatalysts for water splitting", *Applied Surface Science*, Vol. 478, 2019, pp. 522-531.
- [31] S. B. Touski, and N. Ghobadi, "Structural, electrical, and Rashba properties of monolayer Janus Si₂XY (X, Y= P, As, Sb, and Bi)", *Physical Review B*, Vol. 103, No. 16, 2021, p. 165404.
- [32] Y. L. Hong, Z. Liu, L. Wang, T. Zhou, W. Ma, C. Xu, S. Feng, L. Chen, M. L. Chen, D. M. Sun, and X. Q. Chen, "Chemical vapor deposition of layered two-dimensional MoSi₂N₄ materials", *Science*, Vol. 369, No. 6504, 2020, pp. 670-674.
- [33] L. Wang, Y. Shi, M. Liu, A. Zhang, Y. L. Hong, R. Li, Q. Gao, M. Chen, W. Ren, H. M. Cheng, and Y. Li, "Intercalated architecture of MA₂Z₄ family layered van der Waals materials with emerging topological, magnetic and superconducting properties", *Nature Communications*, Vol. 12, No. 1, 2021, pp. 1-10.
- [34] S. B. Touski, and N. Ghobadi, "Vertical strain-induced modification of the electrical and spin properties of monolayer MoSi₂X₄ (X= N, P, As and Sb)", *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. 54, No. 48, 2021, p. 485302.
- [35] A. Bafekry, M. Faraji, D. M. Hoat, M. Shahrokhi, M. M. Fadlallah, F. Shojaei, S. A. H. Feghhi, M. Ghergherehchi, and D. Gogova, "MoSi₂N₄ single-layer: a novel two-dimensional material with outstanding mechanical, thermal, electronic and optical properties", *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. 54, No. 15, 2021, p.155303.
- [36] B. Özdamar, G. Özbal, M. N. Çınar, K. Sevim, G. Kurt, B. Kaya, and H. Sevinçli, "Structural, vibrational, and electronic properties of single-layer hexagonal crystals of group IV and V elements", *Physical Review B*, Vol. 98, No. 4, 2018, p. 045431.
- [37] H. Yao, C. Zhang, Q. Wang, J. Li, Y. Yu, F. Xu, B. Wang, and Y. Wei. "Novel two-dimensional layered MoSi₂Z₄ (Z= P, As): New promising optoelectronic materials", *Nanomaterials*, Vol. 11, No. 3, 2021, p. 559.
- [38] B. Mortazavi, B. Javvaji, F. Shojaei, T. Rabczuk, A. V. Shapeev, and X. Zhuang, "Exceptional piezoelectricity, high thermal conductivity and stiffness and promising photocatalysis in two-dimensional MoSi₂N₄ family confirmed by first-principles", *Nano Energy*, Vol. 82, 2021, p. 105716.
- [39] Q. Li, W. Zhou, X. Wan, and J. Zhou, "Strain effects on monolayer MoSi₂N₄: Ideal strength and failure mechanism", *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, Vol. 131, 2021, p. 114753.
- [40] S. D. Guo, Y. T. Zhu, W. Q. Mu, and W. C. Ren, "Intrinsic piezoelectricity in monolayer MSi₂N₄ (M= Mo, W, Cr, Ti, Zr and Hf)", *Europhysics Letters*, Vol. 132, No. 5, 2020, p. 57002.

- [41] Q. Wu, L. Cao, Y. S. Ang, and L. K. Ang, "Semiconductor-to-metal transition in bilayer MoSi_2N_4 and WSi_2N_4 with strain and electric field", *Applied Physics Letters*, Vol. 118, No. 11, 2021, p. 113102.
- [42] H. Zhong, W. Xiong, P. Lv, J. Yu, and S. Yuan, "Strain-induced semiconductor to metal transition in MA_2Z_4 bilayers (M= Ti, Cr, Mo; A= Si; Z= N, P)," *Physical Review B*, Vol. 103, No. 8, 2021, p. 085124.
- [43] N. Ghobadi, M. Hosseini, and S. B. Touski, "Field-Effect Transistor Based on MoSi_2N_4 and WSi_2N_4 Monolayers Under Biaxial Strain: A Computational Study of the Electronic Properties", *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 69, No. 2, 2022, pp. 863-869
- [44] L. Cao, G. Zhou, Q. Wang, L. K. Ang, and Y. S. Ang, "Two-dimensional van der Waals electrical contact to monolayer MoSi_2N_4 ", *Applied Physics Letters*, Vol. 118, No. 1, 2021, p. 013106.
- [45] S. D. Guo, W. Q. Mu, Y. T. Zhu, R. Y. Han, and W. C. Ren, "Predicted septuple-atomic-layer Janus MSiGeN_4 (M= Mo and W) monolayers with Rashba spin splitting and high electron carrier mobilities", *Journal of Materials Chemistry C*, Vol. 9, No. 7, 2021, pp. 2464-2473.
- [46] Y. Yu, J. Zhou, Z. Guo, and Z. Sun, "Novel two-dimensional Janus MoSiGeN_4 and WSiGeN_4 as highly efficient photocatalysts for spontaneous overall water splitting", *ACS Applied Materials & Interfaces*, Vol. 13, No. 24, 2021, pp. 28090-28097.
- [47] N. T. Binh, C. Q. Nguyen, T. V. Vu, and C. V. Nguyen, "Interfacial Electronic Properties and Tunable Contact Types in Graphene/Janus MoGeSiN_4 Heterostructures", *The Journal of Physical Chemistry Letters*, Vol. 12, No. 16, 2021, pp. 3934-3940.
- [48] S. D. Guo, Y. T. Zhu, W. Q. Mu, X. Q. Chen, "A piezoelectric quantum spin Hall insulator with Rashba spin splitting in Janus monolayer SrAlGaSe_4 ", *Journal of Materials Chemistry C*, Vol. 9, No. 23, 2021, pp. 7465-7473.
- [49] B. Li, J. Geng, H. Ai, Y. Kong, H. Bai, K. H. Lo, K. W. Ng, Y. Kawazoe, and H. Pan, "Design of 2D materials– $\text{MSi}_2\text{C}_x\text{N}_{4-x}$ (M= Cr, Mo, and W; $x= 1$ and 2)–with tunable electronic and magnetic properties," *Nanoscale*, Vol. 13, No. 17, 2021, pp. 8038-8048.
- [50] J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, and D. Sánchez-Portal, "The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation", *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 14, No. 11, 2002, p. 2745.
- [51] J. P. Perdew, and A. Zunger, "Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems", *Physical Review B*, Vol. 23, No. 10, 1981, p. 5048.
- [52] W. Tang, E. Sanville, and G. Henkelman, "A grid-based Bader analysis algorithm without lattice bias", *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 21, No. 8, 2009, p. 084204.
- [53] S. Grimme, "Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction", *Journal of Computational Chemistry*, Vol. 27, No. 15, 2006, pp. 1787-1799.
- [54] W. Zhou, J. Chen, Z. Yang, J. Liu, and F. Ouyang, "Geometry and electronic structure of monolayer, bilayer, and multilayer Janus WS_2 ", *Physical Review B*, Vol. 99, No. 7, 2019, p. 075160.
- [55] M.Y. Liu, L. Gong, Y. He, C. Cao, "Tuning Rashba effect, band inversion, and spin-charge conversion of Janus XS_2Y monolayers via an external field", *Physical Review B*, Vol. 103, No. 7, 2021, p. 075421.
- [56] R. Frisenda, A. J. Molina-Mendoza, T. Mueller, A. Castellanos-Gomez, and H. S. Van Der Zant, "Atomically thin p–n junctions based on two-dimensional materials", *Chemical Society Reviews*, Vol. 47, No. 9, 2018, pp. 3339-3358.
- [57] M. A. Abdelati, A. A. Maarouf, and M. M. Fadlallah. "Substitutional transition metal doping in MoSi_2N_4 monolayer: structural, electronic and magnetic properties", *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 24, No. 5, 2022, pp. 3035-3042.