

# بررسی خواص ساختاری و مغناطیسی نانو نوارهای گرافنی آلایش یافته با اتم آهن

پروین زنگانه، طیه مولاروی\*

گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود، ایران

## چکیده

در این مقاله پایداری، خواص الکترونی و مغناطیسی در نانو نوارگرافنی با لبه زیگزاگ شکل (ZGNR) آلایش یافته با اتم آهن، با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) بررسی شده است. بر طبق بررسی‌های انجام شده و با توجه به مقادیر به دست آمده برای انرژی تشکیل و انرژی پیوندی بهترین مکان برای جایگزینی اتم آهن با اتم کربن، در لبه ZGNR و با اتم کربنی به دست آمد که با هیدروژن پیوند دارد. همچنین اگر اتم‌های آهن جایگزین اتم‌های هیدروژن شوند نسبت به زمانی که جایگزین اتم‌های کربن می‌شوند، از نظر انرژی ساختار مطلوب‌تری داریم و زمانی که ساختار را با دو اتم آهن آلایش می‌دهیم در هر دو وضعیت فرو و پادفرومغناطیس، در حالت آلایش نزدیک نسبت به آلایش دور، ساختار پایدارتر است. بیشترین گشتاور مغناطیسی برای آلایش آهن در مکان F وقتی جایگزین اتم هیدروژن در ساختار شود، حدود ۵ مگتون بور حاصل می‌شود. با توجه به ساختارهای نواری محاسبه شده، خواص الکترونی و مغناطیسی ZGNR به مکان آلایش اتم آهن بستگی دارند و بسته به اینکه چه مکانی را برای جایگزین کردن اتم آهن انتخاب کنیم فلز مغناطیسی و یا نیم‌رسانای مغناطیسی حاصل خواهد شد.

**کلیدواژگان:** نانو نوار گرافنی زیگزاگ، نظریه تابعی چگالی، خواص ساختاری، خواص مغناطیسی، آلایش آهن.

## مقدمه

اسپینی آن و بسیاری از مزیت‌های دیگری که دارد توجهات زیادی را به خود جلب کرده است [۵]. گرافن یک لایه اتمی از گرافیت است که به طور موفقیت‌آمیزی در آزمایشگاه تولید شده است [۴]. الکترون‌های گرافن شبیه به فرمیون‌های دیراک بدون جرم رفتار می‌کنند [۱]. تحرک بالای الکترون و طول همدموسی بزرگ، گرافن را به ماده‌ای تبدیل کرده است که توجهات زیادی را در حوزه کاربردهای الکترونیک در مقیاس نانو به خود جلب کرده است [۶]. نانو نوارهای گرافنی بنا بر خواص قابل توجه و مختلفی که نشان می‌دهند و ساختار اولیه بالقوه‌ای که می‌توانند داشته باشند برای آینده نانوالکترونیک مبتنی بر کربن پیش‌بینی شده‌اند

در چند سال اخیر تحقیق بر روی مواد گرافنی دو بعدی سریع‌ترین رشد را در زمینه فیزیک نیم‌رساناها داشته است. این به خاطر ترکیب عجیب این ماده و خواص الکترونیکی قابل توجه آن می‌باشد [۱]. نتایج حاصل از این تحقیقات یافته‌های قابل توجهی از قبیل ابررسانایی تحریک شده در گرافن، اثر کوانتومی هال غیرعادی [۲] و تحرک الکترونی خیلی بالا [۳] را در بر دارند. همچنین استفاده کردن از نانونوارهای گرافنی برای اجزای دستگاه‌های الکترونیکی در شرایط محیطی ممکن است آنها را بادوام‌تر کند [۴]. گرافن یک ساختار دو بعدی شش گوشه از کربن است که به دلیل مکانیزم

می‌پردازیم. برای محاسبه برهم‌کنش بین الکترون‌های ظرفیت و هسته‌های اتمی از تقریب شبه‌پتانسیل و برای محاسبه تابع تصحیح-تبادلی از تقریب شیب تعمیم یافته پردو، برک و ارزهرورف (GGA-PBE) استفاده شده است [۸]. در این محاسبات مجموعه‌های پایه را به صورت DZP [۹] و انرژی قطع به جهت مش‌بندی فضای حقیقی  $300 \text{ Ry}$  در نظر گرفتیم. تعداد نقاط  $k$  برای مش‌بندی منطقه اول بریلون،  $1 \times 1 \times 80$  در نظر گرفته شده است. هر ساختار به روش خودسازگار همگرا شده است. برای واهلش ساختار تا جایی که نیروهای روی هر اتم کمتر از  $0.04 \text{ eV/\AA}$  شود ساختار همگرا شده است. همچنین با توجه به این نکته که راستای رشد، در راستای محور  $Z$  می‌باشد، برای جلوگیری از برهم‌کنش‌های نانو نوار با تصاویر دوره‌ای آن در راستای محورهای  $X$  و  $Y$  با بهینه‌سازی ساختار، یک لایه کافی خلأ به اندازه  $10$  آنگستروم، در این دو راستا در نظر گرفته شده است. پهنای نانو نوارگرافنی با لبه زیگزاگ شکل به صورت تعداد پیوندهای زیگزاگ C-C (N-ZGNR) در نظر گرفته می‌شود که ما در این تحقیق پهنای 4-ZGNR با ۴ سلول واحد را به عنوان ابرسلول انتخاب کرده‌ایم که تصویر آن در شکل ۱ آورده شده است. همچنین در این شکل محل‌های انتخاب شده برای جایگزینی اتم‌های کربن و هیدروژن با اتم آهن، با حروف الفبای لاتین نمایش داده شده‌اند. همان‌طور که در شکل ۱ می‌بینیم، گرافن دارای ساختار شش ضلعی منتظم می‌باشد بر این اساس اتم‌های کربن در وسط نانو نوار با سه اتم کربن دیگر پیوند دارند اما اتم‌های کربن موجود در لبه‌ها با دو اتم کربن دیگر

[۴]. نانو نوارهای گرافنی روبان‌هایی در اندازه نانومتری از تک لایه گرافن هستند و در زمینه‌های نظری و عملی بسیار مورد توجه واقع شده‌اند [۶]. عامل اصلی در مشخص کردن خواص تراپردی و اپتیکی نانو نوارهای گرافنی، ساختار نوار الکترونی آنها می‌باشد [۴]. خواص الکترونیکی نانو نوارها می‌تواند به وسیله پهنای هندسه اتم‌ها در امتداد لبه‌ها مشخص شوند که لبه‌ها می‌توانند به شکل زیگزاگ یا دسته‌صندلی باشند [۶]. محققان برای به دست آوردن گاف نوار مناسب در گرافن از نقص‌ها و ناخالصی‌ها استفاده می‌کنند. ناخالصی‌ها در گرافن می‌توانند جذب و یا جایگزینی عناصر با یکدیگر باشند. قطبش بالای اسپینی در گرافن می‌تواند به وسیله جای‌گزینی بعضی عناصر و یا گروه‌های تابعی در آن حاصل شود که این موضوع در حوزه اسپینترونیک دارای اهمیت می‌باشد. داشتن مقدار کمی ناخالصی‌های فلزی در گرافن برای استفاده در اسپینترونیک، سنسورها و کاربردهای نانوالکترونیکی مورد بررسی قرار گرفته است. اتم‌های عناصر واسطه از نظر داشتن خواص مغناطیسی ویژه بسیار شناخته شده هستند، بنابراین ناخالصی فلزات واسطه می‌تواند به عنوان منبعی برای خاصیت مغناطیسی در گرافن در نظر گرفته شود. ناخالصی‌های فلزات واسطه می‌تواند خواص نانو نوار گرافنی را برای کاربردهای اسپینترونیکی تنظیم کند. این الهام بخش ما برای بررسی خواص الکترونی مربوط به نانو نوارهای گرافنی زیگزاگ آرایش یافته با اتم‌های آهن در مکان‌های مختلف شده است.

### روش محاسبات

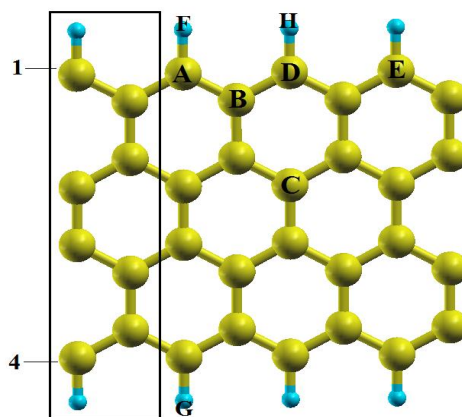
در این مقاله با استفاده از نظریه تابعی چگالی (DFT) به کمک کد محاسباتی SIESTA [۷] به بررسی خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی نانو نوارهای گرافنی زیگزاگ آرایش یافته با اتم آهن

D جای یک اتم کربن و در موقعیت F جای یک اتم هیدروژن قرار دادیم، سپس دو اتم آهن را در دو وضعیت فرومغناطیس و پاد فرومغناطیس نسبت به هم در دو حالت دور و نزدیک از یکدیگر جای دو اتم کربن و دو اتم هیدروژن، قرار دادیم تا اثر حالت‌های دور و نزدیک بودن اتم‌های ناخالصی نسبت به هم را بر روی خواص مورد نظر در ساختار بررسی کنیم. در حالت دور دو اتم آهن را در مکان‌های A و E با دو اتم کربن و در مکان‌های F و G با دو اتم هیدروژن جایگزین کردیم. در حالت نزدیک دو اتم آهن را در مکان‌های A و D جای دو اتم کربن و در مکان‌های F و H جای دو اتم هیدروژن قرار دادیم. به این دلیل این مکان‌ها را برای آرایش ساختار با اتم آهن در نظر گرفتیم که فقط در مکان‌های ذکر شده برای جایگزین کردن اتم‌های کربن و هیدروژن با اتم آهن، ساختار شکل خود را حفظ می‌کند و پیوندهای بین اتم‌های آهن و کربن یا هیدروژن، کربن-کربن و یا کربن هیدروژن از هم جدا نمی‌شدند بنابراین با توجه به اینکه در این موقعیت‌ها ساختار پایدار است آنها را به عنوان مکان‌هایی برای آرایش ساختار با اتم آهن انتخاب نمودیم.

### الف: بررسی پایداری ساختارها

برای بررسی پایداری نانونوار گرافنی زیگزاگ آرایش یافته با اتم آهن (Fe-ZGNR) در ابتدا انرژی پیوندی<sup>۱</sup> (BE)، انرژی لازم برای جدا کردن اتم ناخالصی از ZGNR، را با استفاده از رابطه<sup>۱</sup> [۱۳] برای هریک از حالت‌های انتخاب شده برای جایگزینی اتم آهن با

پیوند دارند بنابراین اتم‌های کربن موجود در لبه دارای یک پیوند آزاد می‌باشند، این پیوندهای آویزان یا آزاد روی خواص الکترونی ساختار تأثیر می‌گذارند، نتایج تحقیقات انجام شده دیگران نیز این مطلب را تأیید می‌کند [۱۰، ۱۱ و ۱۲]. لذا در این بررسی برای از بین بردن تأثیر پیوندهای آویزان روی خواص الکترونی نانو نوار، اتم‌های کربن در دو لبه را با هیدروژن محدود کرده‌ایم.



شکل ۱. ساختار 4-ZGNR با ۴ سلول واحد به عنوان ابرسلول نمایش داده شده است. قسمت مستطیل، سلول اولیه را مشخص می‌کند و نقاط A، B، ...، G، نشان‌دهنده مکان انتخاب شده برای جایگزینی اتم‌های کربن و هیدروژن با اتم آهن است. اتم کربن با رنگ زرد و اتم هیدروژن با رنگ آبی مشخص شده است.

### بحث و نتایج

در این پژوهش می‌خواهیم اثر جایگزین شدن اتم‌های کربن و هیدروژن با اتم آهن را بر روی پایداری و خواص الکترونی و مغناطیسی در نانو نوار گرافنی با لبه زیگزاگ شکل (ZGNR) را مورد بررسی قرار دهیم. به این منظور ابتدا اتم آهن را در موقعیت‌های B، C و

<sup>۱</sup>. binding energy

حالت نزدیک یعنی مکان AD و یا جایگزین دو اتم هیدروژن در حالت نزدیک یعنی مکان FH صورت پذیرد، ساختار دارای بیشترین پایداری خواهد بود. با توجه به رابطه<sup>۱</sup> ساختارهایی که انرژی پیوندی کمتری دارند پایدارتر هستند بنابراین نتایج به دست آمده در جدول ۱ و ۲ بیانگر این می باشد که پایدارترین ساختار از نظر انرژی پیوندی زمانی حاصل می شود که اتم آهن جایگزین اتم هیدروژن شود. سپس برای بررسی اینکه کدام ساختار از نظر انرژی مناسب تر و پایدارتر است انرژی تشکیل<sup>۲</sup> (FE) را نیز با استفاده از رابطه<sup>۲</sup> [۱۴] محاسبه کردیم:

۲

$$E_F = E_{T1} + n E(C, H) - [E_{T2} + n E(Fe)]$$

که در آن  $E_{T1}$  (انرژی نهایی مربوط به ZGNR آرایش یافته با Fe (ZGNR خالص) می باشد و  $E(C, H)$  و  $E(Fe)$  به ترتیب انرژی نهایی برای تک اتم کربن یا هیدروژن و تک اتم آهن می باشند، و  $n$  تعداد اتم های آهن جایگزین شده با اتم کربن یا هیدروژن است. مقادیر به دست آمده برای انرژی تشکیل وقتی یک اتم آهن جایگزین یک اتم کربن یا یک اتم هیدروژن می شود در جدول ۳ و وقتی دو اتم آهن در وضعیت فرو یا پادفرو نسبت به هم قرار دارند جایگزین دو اتم کربن یا دو اتم هیدروژن می شود در جدول ۴ آورده شده است. طبق رابطه<sup>۲</sup> نیز ساختاری که دارای میزان انرژی تشکیل کمتری باشد از نظر پایداری مطلوب تر است، بنابراین با توجه به مقادیر به دست آمده

اتم های کربن و هیدروژن که مکان آرایش ها در شکل ۱ نشان داده شده است، محاسبه می کنیم:

۱

$$E_b = E(Fe-ZGNR) - E(ZGNR) - n E(Fe)$$

که در آن  $E(Fe-ZGNR)$  انرژی کل مربوط به نانو نوار آرایش یافته با اتم آهن،  $E(ZGNR)$  انرژی کل مربوط به نانو نوار خالص،  $E(Fe)$  انرژی نهایی مربوط به یک تک اتم Fe و  $n$  تعداد اتم های ناخالصی می باشد. مقادیر به دست آمده برای انرژی پیوندی وقتی یک اتم آهن را جای یک اتم کربن یا یک اتم هیدروژن قرار می دهیم در جدول ۱ آورده شده است، همچنین مقادیر به دست آمده برای انرژی پیوندی وقتی دو اتم آهن را در دو وضعیت فرومغناطیسی و پادفرومغناطیسی نسبت به هم در مکان های انتخاب شده با دو اتم کربن یا دو اتم هیدروژن جایگزین می کنیم در جدول ۲ خلاصه شده است. هرچه مقدار انرژی پیوندی به دست آمده طبق رابطه<sup>۱</sup> در ساختاری کمتر باشد پیوند بین اتم ها در آن ساختار قوی تر خواهد بود، بنابراین در حالت جاننشانی یک اتم آهن وقتی اتم ناخالصی را جای یک اتم هیدروژن قرار می دهیم ساختار دارای بیشترین میزان پایداری خواهد بود. همچنین بهترین مکان برای جایگزینی اتم آهن با اتم کربن، در مکان D در شکل ۱ در لبه ZGNR و با اتم کربنی است که با اتم هیدروژن پیوند دارد. در وضعیتی که دو اتم ناخالصی را وارد ساختار می کنیم در هر دو وضعیت فرومغناطیس یا پاد فرومغناطیس، اگر آرایش جایگزین دو اتم کربن در

جدول ۴. انرژی تشکیل (eV) وقتی دو اتم آهن در دو وضعیت فرو و پادفرو نسبت به هم جایگزین دو اتم کربن در حالت دور (AE) و در حالت نزدیک (AD) و جایگزین دو اتم هیدروژن در حالت دور (FG) و در حالت نزدیک (FH) شوند.

ساختار	فرومغناطیس	پادفرومغناطیس
Fe-ZGNR (AD)	۱۳,۳۷۶۷۸۱	۱۴,۱۷۸۶
Fe-ZGNR (AE)	۱۴,۷۷۴۱۵۳	۱۵,۷۳۰۱۲۴
Fe-ZGNR (FG)	۲,۷۰۹۴۹	۲,۶۷۶۱۲۴
Fe-ZGNR (FH)	۲,۱۳۵۷۲۳	۲,۰۶۱۴۵۸

### ب: خواص الکترونی و مغناطیسی

با بررسی ساختار نواری از مقدار گاف نواری، مستقیم یا غیر مستقیم بودن آن و همچنین با توجه به روند تغییرات آن می‌توان بسیاری از خواص فیزیکی ساختار را به دست آورد. برای محاسبه ساختار نواری ابتدا محاسبات خودسازگار انجام می‌شود تا انرژی فرمی به دست آید. در تمام نمودارهای ساختار نواری سطح انرژی صفر بیانگر موقعیت تراز فرمی می‌باشد که با خط افقی مستقیمی در شکل‌ها نشان داده شده است. بعد از انجام محاسبات خودسازگار، انتخاب مسیر انتگرال‌گیری در فضای وارون در ناحیه کاهش‌ناپذیر بریلونن به منظور محاسبه نوارهای انرژی نکته مهم می‌باشد زیرا این مسیر دارای بیشترین تقارن می‌باشد. از آنجا که سیستم ساختاری یک بعدی در راستای محور Z می‌باشد مسیر انتگرال‌گیری در فضای وارون برای محاسبه ساختارهای نواری از  $\Gamma(0,0,0)$  به Z  $(0,0,0.5)$  می‌باشد که مختصات نقاط برحسب بردارهای شبکه وارون تعیین می‌شوند. ساختار نواری برای نانو نوار گرافنی خالص و آرایش یافته با تک اتم آهن در مکان‌های B, C, D و F برای هر دو اسپین بالا

از انرژی تشکیل و انرژی پیوندی، وقتی ساختار را با یک تک اتم آهن آرایش می‌دهیم اگر اتم ناخالصی در مکان F جایگزین یک اتم هیدروژن شود، از نظر انرژی ساختار مطلوب‌تری را خواهیم داشت. همچنین زمانی که ساختار را با دو اتم آهن آرایش می‌دهیم در هر دو وضعیت فرو و پادفرو، در حالت آرایش نزدیک ساختار پایدارتر است. با توجه به مقادیر به دست آمده برای انرژی تشکیل که در جدول ۳ و ۴ آورده شده است، وقتی اتم آهن را جای اتم هیدروژن قرار می‌دهیم از نظر انرژی پایدارترین ساختار را خواهیم داشت.

جدول ۱. انرژی پیوندی (eV) وقتی یک اتم آهن در مکان‌های B, C و D با یک اتم کربن و در مکان F با یک اتم هیدروژن جایگزین شود.

Fe-ZGNR (B)	۱۶۳,۵۱۳۶۲۲
Fe-ZGNR (C)	۱۶۵,۵۷۴۵۳۵
Fe-ZGNR (D)	۱۶۱,۱۵۹۷۸۵
Fe-ZGNR (F)	۱۴,۹۴۲۹۳۲

جدول ۲. انرژی پیوندی (eV) وقتی دو اتم آهن در دو وضعیت فرو و پادفرو نسبت به هم جایگزین دو اتم کربن در حالت دور (AE) و در حالت نزدیک (AD) و جایگزین دو اتم هیدروژن در حالت دور (FG) و در حالت نزدیک (FH) شوند.

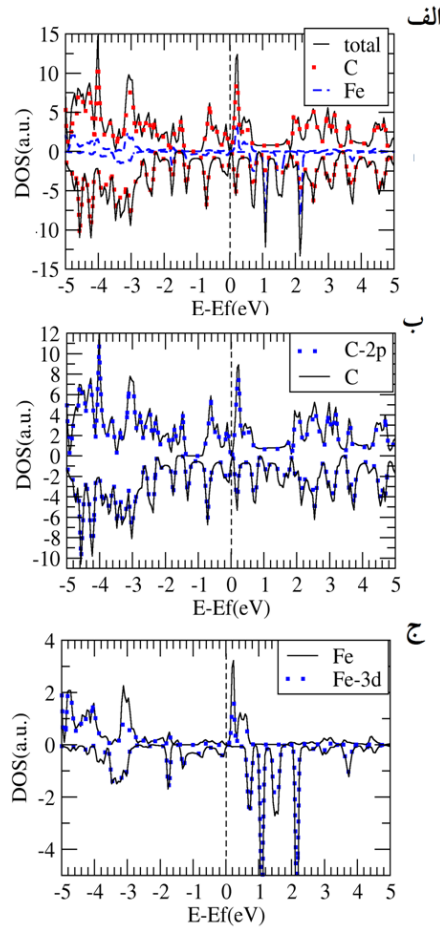
ساختار	فرومغناطیس	پادفرومغناطیس
Fe-ZGNR (AD)	۳۲۰,۵۰۵۸۵۵	۳۲۱,۳۰۷۶۷۴
Fe-ZGNR (AE)	۳۲۱,۹۰۳۲۲۷	۳۲۲,۸۵۹۱۹۸
Fe-ZGNR (FG)	۲۹,۴۶۹۷۱	۲۹,۴۳۶۳۴۴
Fe-ZGNR (FH)	۲۸,۸۹۵۹۴۳	۲۸,۸۲۱۶۷۸

جدول ۳. انرژی تشکیل (eV) وقتی یک اتم آهن در مکان‌های B, C و D با یک اتم کربن و در مکان F با یک اتم هیدروژن جایگزین شود.

Fe-ZGNR (B)	۹,۹۴۹,۰۷۵
Fe-ZGNR (C)	۱۲,۰۰۹۹۹۸
Fe-ZGNR (D)	۷,۵۹۵,۲۴۸
Fe-ZGNR (F)	۱,۵۶۲,۸۲۲

تراز فرمی افزایش می‌یابد که این ناشی از هیبریداسیون قوی بین اوربیتال های  $3d$  اتم آهن و  $2p$  اتم کربن می‌باشد. در شکل ۴ چگالی حالت‌های کلی و چگالی حالت‌های جزئی برای اتم های آهن و کربن و اوربیتال های  $3d$  اتم آهن و  $2p$  اتم کربن رسم شده است. همان‌طور که در شکل ۴-ب می‌بینیم بیشترین سهم در چگالی حالت‌های اتم کربن ناشی از اوربیتال  $2p$  آن می‌باشد و بر طبق شکل ۴-ج بیشترین سهم در چگالی حالت‌های اتم آهن ناشی از اوربیتال  $3d$  آن می‌باشد، لذا هیبریداسیون بین اوربیتال‌های  $2p$  کربن و  $3d$  آهن باعث ایجاد تعداد حالت های الکترونی اضافی اطراف تراز فرمی می‌شود. همچنین منحنی‌های چگالی حالت‌ها بیانگر این مطلب است که نانونوار گرافنی زیگزاگ در حالت خالص یک فلز مغناطیسی است در حالی که با آرایش آهن به‌جای اتم کربن در مکان‌های  $B$ ،  $C$  و  $F$  نیم‌رسانای مغناطیسی و در مکان  $D$  یک فلز مغناطیسی حاصل می‌شود. گشتاور مغناطیسی کل برحسب مگنتون بور ( $\mu_B$ ) برای ساختارهای مورد مطالعه با توجه به قرار گرفتن اتم ناخالصی در مکان‌های مختلف در جدول ۵ گزارش شده است. این مقادیر نشان می‌دهند اضافه کردن ناخالصی به ساختار ZGNR باعث افزایش خاصیت مغناطیسی ساختار می‌شود، همچنین بیان می‌کنند که خاصیت مغناطیسی ZGNR به مکان انتخاب شده برای جای‌گذاری اتم آهن بسیار حساس است.

و پایین در شکل ۲ رسم شده است. بر طبق ساختارهای الکترونی محاسبه شده در این شکل مشاهده می‌شود که ساختار نواری برای اسپین بالا و پایین هم در حالت خالص و هم در ساختارهای آرایش یافته با یکدیگر متفاوت است و این بدان معناست که تمامی ساختارها دارای خاصیت مغناطیسی می‌باشند. با توجه به ساختار نواری محاسبه شده در شکل ۲-الف مشاهده می‌شود که نانونوار گرافنی زیگزاگ در حالت خالص یک فلز مغناطیسی است، نتایج دیگر تحقیقات انجام شده در این زمینه نیز این مطلب را به‌خوبی تأیید می‌کند که ZGNR در حالت خالص، یک فلز مغناطیسی است [۱۵و ۱۶]. با جایگزینی اتم آهن به‌جای اتم کربن در مکان‌های  $B$ ،  $C$  و  $F$  نیم‌رسانای مغناطیسی و با جایگزینی اتم ناخالصی در مکان  $D$  یک فلز مغناطیسی حاصل می‌شود. بنابراین خواص الکترونی و مغناطیسی نانونوارهای گرافنی به مکان آرایش اتم آهن بستگی دارند و بسته به اینکه چه مکانی را برای جایگزین کردن اتم آهن با اتم کربن انتخاب کنیم فلز مغناطیسی و یا نیم‌رسانای مغناطیسی حاصل خواهد شد. چگالی حالت‌های محاسبه شده برای نانونوار گرافنی با لبه زیگزاگ شکل خالص و آرایش یافته با تک اتم آهن، در شکل ۳ آورده شده است. در منحنی چگالی حالت‌ها نیز همچون ساختار نواری، سهم اسپین بالا و پایین هم در حالت خالص و هم در ساختارهای آرایش یافته با یکدیگر متفاوت است و این بدان معناست که تمامی ساختارها دارای خاصیت مغناطیسی می‌باشند. با توجه به نمودارهای چگالی حالت می‌بینیم با افزودن ناخالصی به ساختار ZGNR تعداد حالت های الکترونی اطراف



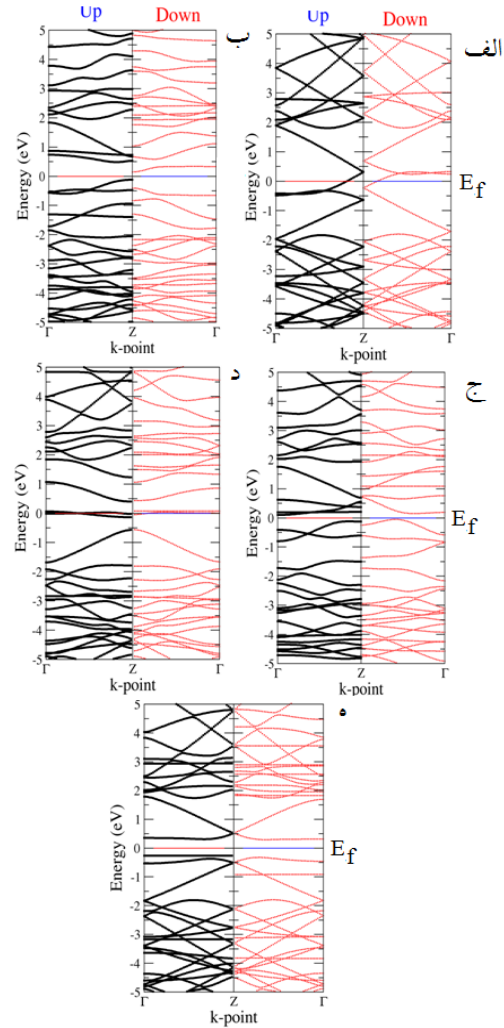
شکل ۴. الف) چگالی حالت‌های کلی و چگالی حالت‌های کلی اتم آهن و کربن برای ZGNR آرایش یافته با اتم آهن در مکان C. ب) چگالی حالت‌های جزئی برای اتم کربن و اوربیتال 2p آن و ج) چگالی حالت‌های جزئی برای اتم آهن و اوربیتال 3d آن.

جدول ۵. گشتاور مغناطیسی کل برحسب مگنتون بور ( $\mu_B$ ) در حالت خالص و آرایش یافته با یک اتم آهن در مکان‌های B, C, D, E و F.

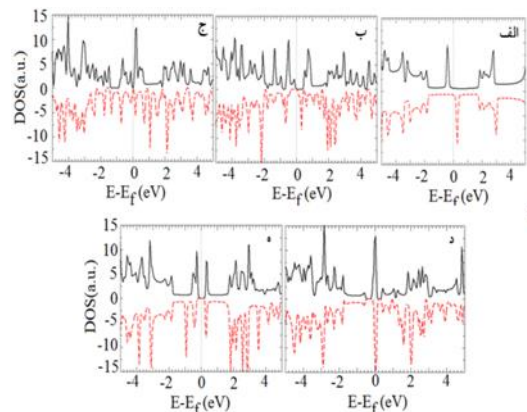
ساختار	گشتاور مغناطیسی کل
ZGNR خالص	۱/۶۴
Fe-ZGNR (B)	۳/۹۹
Fe-ZGNR (C)	۲/۰۱
Fe-ZGNR (D)	۴/۵۴
Fe-ZGNR (F)	۴/۹۹

### نتیجه‌گیری

در جمع‌بندی، تأثیر ناخالصی آهن بر روی نانو نوار گرافنی زیگزاگ در مکان‌های مختلف با استفاده از نظریه تابعی چگالی بررسی شد. باتوجه به مقادیر



شکل ۵. ساختار نواری برای نانو نوار گرافنی الف) خالص، و آرایش یافته با تک اتم آهن در مکان B, C, D, E و F.



شکل ۶. نمودار چگالی حالت‌های نانو نوار گرافنی با لبه زیگزاگ برای الف) خالص، و آرایش یافته با تک اتم آهن در مکان‌های B, C, D, E و F.

[4] L. Yang, C.H. Park, Y.W. Son, M.L. Cohen, S.G. Louie, Quasiparticle energies and band gaps in graphene nanoribbons, *Physical Review Letters* 99 18 (2007) 186801.

[5] N. Kheirabadi, A. Shafiekhani, M. Fathipour, Review on graphene spintronic, new land for discovery, *Superlattices and Microstructures* 74 (2014) 123-145.

[6] S.S. Chauhan, P. Srivastava, A.K. Shrivastava, Electronic and transport properties of boron and nitrogen doped graphene nanoribbons: an ab initio approach, *Applied Nanoscience* 4 4 (2014) 461-467.

[7] I.V. Zozoulenko, F.A. Maa, E.H. Hauge, Coherent magnetotransport in confined arrays of antidots. I. Dispersion relations and current densities, *Physical Review B* 53 12 (1996) 7975.

[8] I.S. hnatsenka, I.V. Zozoulenko, Spatial spin polarization and suppression of compressible edge channels in the integer quantum Hall regime, *Physical Review B* 73 15 (2006) 155314.

[9] E. Artacho, D. Sánchez-Portal, P. Ordejón, A. Garcia, J.M. Soler, Linear-scaling ab-initio calculations for large and complex systems, *arXiv preprint Condensed Matter* 9904159 (1999).

[10] L.P. An, N.H. Liu, The spin-dependent transport properties of zigzag graphene nanoribbon edge-defect junction, *New Carbon Materials* 27 3 (2012) 181-187.

[11] N.K. Jaiswal, P. Srivastava, First principles calculations of armchair graphene nanoribbons interacting with Cu atoms, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 44 1 (2011) 75-79.

[12] N.K. Jaiswal, P. Srivastava, Ab-Initio Study of Transition Metal (Ni) Interaction with Zigzag Graphene Nanoribbons, *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience* 9 4 (2012) 555-559.

به دست آمده برای انرژی پیوندی و انرژی تشکیل، بهترین مکان برای جایگزینی یک اتم آهن با اتم کربن، در لبه ZGNR و با اتم کربنی است که با اتم هیدروژن پیوند دارد. همچنین اگر اتم های آهن جایگزین اتم های هیدروژن شوند نسبت به زمانی که جایگزین اتم های کربن شوند، از نظر انرژی ساختار مطلوب تری را خواهیم داشت و زمانی که ساختار را با دو اتم آهن آرایش می دهیم در هر دو وضعیت فرو و پادفرو، در حالت آرایش نزدیک ساختار پایدارتر است. بیشترین گشتاور مغناطیسی برای آرایش آهن در مکان F و D حدود ۵ و ۶٫۵ مگنتون بور حاصل شد. با توجه به ساختارهای نواری محاسبه شده، خواص الکترونی و مغناطیسی ZGNR به مکان آرایش اتم آهن بستگی دارند و بسته به اینکه چه مکانی را برای جایگزین کردن اتم آهن انتخاب کنیم فلز مغناطیسی و یا نیم رسانای مغناطیسی حاصل خواهد شد. نتایج حاصل از این تحقیق نشان می دهد خواص الکترونی و مغناطیسی نانو نوار گرافنی زیگزاگ را می توانیم با جای گذاری اتم آهن در مکان های مختلف در ساختار کنترل کنیم.

## مرجع ها

[1] U. Treske, F. Ortmann, B. Oetzel, K. Hannewald, F. Bechstedt, Electronic and transport properties of graphene nanoribbons, *physica status solidi (a)* 207 2 (2010) 304-308.

[2] A.K. Geim, K.S. Novoselov, The rise of graphene, *Nature materials* 6 3 (2007) 183-191.

[3] K.I. Bolotin, K.J. Sikes, Z. Jiang, M. Klima, G. Fudenberg, J. Hone, H.L. Stormer, Ultrahigh electron mobility in suspended graphene, *Solid State Communications* 146 9 (2008) 351-355.



- [13] N.K. Jaiswal, P. Srivastava First principles calculations of cobalt doped zigzag graphene nanoribbons, *Solid State Communications* 152 15 (2012) 1489-1492.
- [14] N.K. Jaiswal, P. Srivastava, Structural stability and electronic properties of Ni-doped armchair graphene nanoribbons, *Solid State Communications* 151 20 (2011) 1490-1495.
- [15] S.S. Chauhan, P. Srivastava, A.K. Shrivastava, Electronic and transport properties of boron and nitrogen doped graphene nanoribbons: an ab initio approach, *Applied Nanoscience* 4 4 (2014) 461-467.
- [16] T.B. Martins, A.J. da Silva, R.H. Miwa, A. Fazzio,  $\sigma$ -and  $\pi$ -Defects at graphene nanoribbon edges: building spin filters, *Nano letters* 8 8 (2008) 2293-2298.

## Investigation of structural and magnetic properties of graphene nanoribbons doped with Fe atoms

Parvin Zanganeh, Tayebeh Movlaroooy\*

Department of Physics, Shahrood University of Technology, Shahrood

### Abstract

In this paper, the stability, electronic and magnetic properties of rapheme nanoribbons with zigzag edge shape (ZGNR) doped by Fe atoms have been investigation using density functional theory (DFT) have been investigated. According to our investigations and obtained values for the formation and binding energy, the best situation for the substitution of Fe atoms by carbon atoms was found at the edge of ZGNR and with the carbon atoms which are bonded to the hydrogen atoms. Also, if Fe atoms substituted by Hydrogen atoms instead of carbon atoms, the structure would be more energy desirable and when the structure is doped by two Fe atoms in both ferro and anti ferromagnetic phases, close doping is more stable than far doping. The maximum magnetic moment is found about  $5 \mu_B$  for Fe doping when substituted by Hydrogen atoms in F site. According to the electronic band structure calculations, the electronic and magnetic properties of ZGNR depend on the situation of substituted Fe atoms and depending on what location is chosen to replace the iron atoms, magnetic metal or magnetic semiconductors will be achieved.

**Keywords:** zigzag graphene nanoribbon, density functional theory, structural properties, magnetic properties, Fe doping.

---

\*Corresponding Author: web2\_tayebah.movlaroooy@shahroodut.ac.ir