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

پروین زنگانه، طیبه 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 نظریهٔ تابعی چگالی (DFT) بررسی شده است. بر طبق بررسی‌های انجام شده و با توجه به مقادیر به‌دست آمده برای انرژی تشکیل و انرژی پیوندی بهترین مکان برای جایگزینی اتم آهن با اتم کربن، در لبهٔ ZGNR و با اتم کربنی به‌دست آمد که با هیدروژن پیوند دارد. همچنین اگر اتم‌های آهن جایگزین اتم‌های هیدروژن شوند نسبت به زمانی‌که جایگزین اتم‌های کربن می‌شوند، از نظر انرژی ساختار مطلوب‌تری داریم و زمانی‌که 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 مگنتون 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

در چند سال اخیر تحقیق بر روی مواد گرافنی دو بعدی سریع ترین رشد را در زمینه فیزیک نیم‌رساناها داشته است. این به‌خاطر 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 [٤]. گرافن یک ساختار دو بعدی شش گوشی از کربن است که به‌دلیل مکانیزم اسپینی آن و بسیاری از مزیت‌های دیگری که دارد توجهات زیادی را به‌خود جلب کرده است [۵]. گرافن یک لایه اتمی از گرافیت است که به‌طور موفقیت‌آمیزی در آزمایشگاه تولید شده است [٤]. الکترون‌های گرافن شبیه به فرمیون‌های دیراک بدون جرم رفتار می‌کنند [۱]. تحرک بالای الکترون و طول همدوسی بزرگ، گرافن را به ماده‌ای تبدیل کرده است که توجهات زیادی را در حوزه کاربردهای الکترونیک در مقیاس نانو به‌خود جلب کرده است [٦]. 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

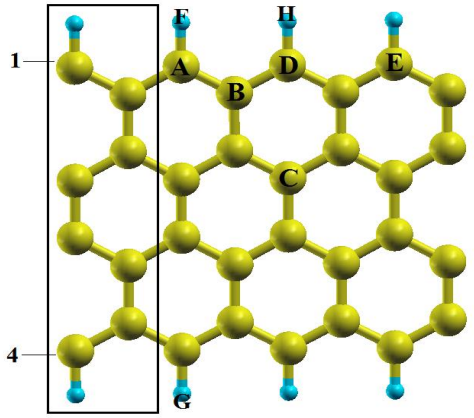
*نویسنده مسئول: web2_tayebeh.movlarooy@shahroodut.ac.ir

[٤]. نانو نوارهای گرافنی روبان‌هایی در اندازه نانومتری از تک لایه گرافن هستند و در زمینه‌های نظری و عملی بسیار مورد توجه واقع شده‌اند [٦]. عامل اصلی در مشخص کردن خواص ترابردی و اپتیکی نانو نوارهای گرافنی، ساختار نوار الکترونی آنها می‌باشد [٤]. خواص الکترونیکی نانو نوارها می‌توانند به‌وسیلهٔ پهنا و هندسه اتم‌ها در امتداد لبه‌ها مشخص شوند که لبه‌ها می‌توانند به شکل زیگزاگ یا دسته صندلی باشند [٦]. محققان برای به‌دست آوردن گاف نواری 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 به‌وسیله 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 به‌عنوان 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 نانونوارهای گرافنی زیگزاگ آلایش یافته با اتم‌های آهن در مکان‌های مختلف شده است.

روش محاسبات

در این مقاله با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی (DFT) به‌کمک کد محاسباتی SIESTA [٧] به بررسی خواص ساختاری، الکترونی و مغناطیسی نانو نوارهای گرافنی زیگزاگ آلایش یافته با اتم آهن 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 وارنزرهورف (GGA-PBE) استفاده شده است [٨]. در این محاسبات مجموعه‌های پایه را به‌صورت DZP [٩] و انرژی قطع به‌جهت مش‌بندی فضای حقیقی ۳۰۰ Ry در نظر گرفتیم. تعداد نقاط k برای مش‌بندی منطقه اول بریلوئن، ۸۰×۱×۱ در نظر گرفته شده است. هر ساختار به‌روش خودسازگار همگرا شده است. برای واهلش ساختار تا جایی که نیروهای روی هر اتم کمتر از ۰٫۰٤ eV/Å 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 لایهٔ کافی خلأ به‌اندازه ۱۰ آنگستروم، در این دو راستا در نظر گرفته شده است. پهنای نانو نوارگرافنی با لبهٔ زیگزاگ شکل به‌صورت تعداد پیوندهای زیگزاگ C-C (N-ZGNR) در نظر گرفته می‌شود که ما در این تحقیق پهنای 4-ZGNR با ٤ سلول واحد را به‌عنوان ابرسلول انتخاب کرده‌ایم که تصویر آن در شکل۱ 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 شکل۱ 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

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، ۱۱و۱۲]. 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 ٤ سلول واحد به‌عنوان 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 لبهٔ زیگزاگ شکل (ZGNR) را مورد بررسی قرار دهیم. به این منظور ابتدا اتم آهن را در موقعیت‌های B، C و 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 به‌هم 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 به‌هم را بر روی خواص مورد نظر در ساختار بررسی کنیم. در حالت دور دو اتم آهن را در مکان های 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. به‌این دلیل این مکان‌ها را برای آلایش 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 می‌کرد 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 به‌عنوان مکان‌هایی برای آلایش ساختار با اتم آهن انتخاب نمودیم.

الف: بررسی پایداری ساختارها

برای بررسی پایداری نانونوار گرافنی زیگزاگ آلایش یافته با اتم آهن (Fe-ZGNR) در ابتدا انرژی پیوندی[1] (BE)، انرژی لازم برای جداکردن اتم ناخالصی از ZGNR، را با استفاده از رابطهٔ ۱ [۱۳] برای هریک از حالت‌های انتخاب شده برای جایگزینی اتم آهن با

[1]. binding energy

اتم‌های کربن و هیدروژن که مکان آلایش‌ها در شکل۱ نشان داده شده است، محاسبه می‌کنیم:

۱

$$E_b = E(\text{Fe-ZGNR}) - E(\text{ZGNR}) - n\,E(\text{Fe})$$

که در آن E(Fe-ZGNR) انرژی کل مربوط به نانو نوار آلایش 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 اتم‌های ناخالصی می‌باشد. مقادیر به‌دست آمده برای انرژی پیوندی وقتی یک اتم آهن را جای یک اتم کربن یا یک اتم هیدروژن قرار می‌دهیم در جدول۱ آورده شده است، همچنین مقادیر به‌دست آمده برای انرژی پیوندی وقتی دو اتم آهن را در دو وضعیت فرومغناطیسی و پادفرومغناطیسی نسبت به‌هم در مکان‌های انتخاب شده با دو اتم کربن یا دو اتم هیدروژن جایگزین می‌کنیم در جدول۲ خلاصه شده است. هرچه مقدار انرژی پیوندی به‌دست آمده طبق رابطه۱ در ساختاری کمتر باشد پیوند بین اتم‌ها در آن ساختار قوی‌تر خواهد بود، بنابراین در حالت جانشانی یک اتم آهن وقتی اتم ناخالصی را جای یک اتم هیدروژن قرار می‌دهیم ساختار دارای بیشترین میزان پایداری خواهد بود. همچنین بهترین مکان برای جایگزینی اتم آهن با اتم کربن، در مکان D در شکل۱ در لبه ZGNR و با اتم کربنی است که با اتم هیدروژن پیوند دارد. در وضعیتی که دو اتم ناخالصی را وارد ساختار می‌کنیم در هر دو وضعیت فرومغناطیس یا پاد فرومغناطیس، اگر آلایش جایگزین دو اتم کربن در 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 رابطهٔ۱ ساختارهایی که انرژی پیوندی کمتری دارند پایدارتر هستند بنابراین نتایج به‌دست آمده در جداول۱ و ۲ بیانگر این می‌باشند که پایدارترین ساختار از نظر انرژی پیوندی زمانی حاصل می‌شود که اتم آهن جایگزین اتم هیدروژن شود. سپس برای بررسی اینکه کدام ساختار از نظر انرژی مناسب تر و پایدارتر است انرژی تشکیل[۲] (FE) را نیز با استفاده از رابطه۲ [۱٤] محاسبه کردیم:

۲

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

که در آن E_{T1} (E_{T2}) انرژی نهایی مربوط به ZGNR آلایش یافته با Fe (ZGNR خالص) می باشد و E (C,H) و E (Fe) به‌ترتیب انرژی نهایی برای تک اتم کربن یا هیدروژن و تک اتم آهن می‌باشند، و n تعداد اتم‌های آهن جایگزین شده با اتم کربن یا هیدروژن است. مقادیر به‌دست آمده برای انرژی تشکیل وقتی یک اتم آهن جایگزین یک اتم کربن یا یک اتم هیدروژن می‌شود در جدول۳ و وقتی دو اتم آهن در وضعیت فرو یا پادفرو نسبت به‌هم قرار دارند جایگزین دو اتم کربن یا دو اتم هیدروژن می‌شود در جدول٤ آورده شده است. طبق رابطهٔ۲ نیز ساختاری که دارای میزان انرژی تشکیل کمتری باشد از نظر پایداری مطلوب‌تر است، بنابراین با توجه به مقادیر به‌دست آمده

۲. formation energy

از انرژی تشکیل و انرژی پیوندی، وقتی ساختار را با یک تک اتم آهن آلایش می‌دهیم اگر اتم ناخالصی در مکان F جایگزین یک اتم هیدروژن شود، از نظر انرژی ساختار مطلوب‌تری را خواهیم داشت. همچنین زمانی‌که ساختار را با دو اتم آهن آلایش می‌دهیم در هر دو وضعیت فرو و پادفرو، در حالت آلایش نزدیک ساختار پایدارتر است. با توجه به مقادیر به‌دست آمده برای انرژی تشکیل که در جدول۳ و ٤ آورده شده است، وقتی اتم آهن را جای اتم هیدروژن قرار می‌دهیم از نظر انرژی پایدارترین ساختار را خواهیم داشت.

جدول۱. 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)	۱٦۳٫٥۱۳٦۲۲
Fe-ZGNR (C)	۱٦٥٫٥۷٤٥۳٥
Fe-ZGNR (D)	۱٦۱٫۱٥۹۷۸٥
Fe-ZGNR (F)	۱٤٫۹٤۲۹۳۲

جدول۲. انرژی پیوندی(eV) وقتی دو اتم آهن در دو وضعیت فرو و پادفرو نسبت به‌هم 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)	۳۲۰٫٥۰٥۸٥٥	۳۲۱٫۳۰۷٦۷٤
Fe-ZGNR (AE)	۳۲۱٫۹۰۳۲۲۷	۳۲۲٫۸٥۹۱۹۸
Fe-ZGNR (FG)	۲۹٫٤٦۹۷۱	۲۹٫٤۳٦۳٤٤
Fe-ZGNR (FH)	۲۸٫۸۹٥۹٤۳	۲۸٫۸۲۱٦۷۸

جدول۳. 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)	۹٫۹٤۹۰۷٥
Fe-ZGNR (C)	۱۲٫۰۰۹۹۹۸
Fe-ZGNR (D)	۷٫٥۹٥۲٤۸
Fe-ZGNR (F)	۱٫٥٦۲۸۲۲

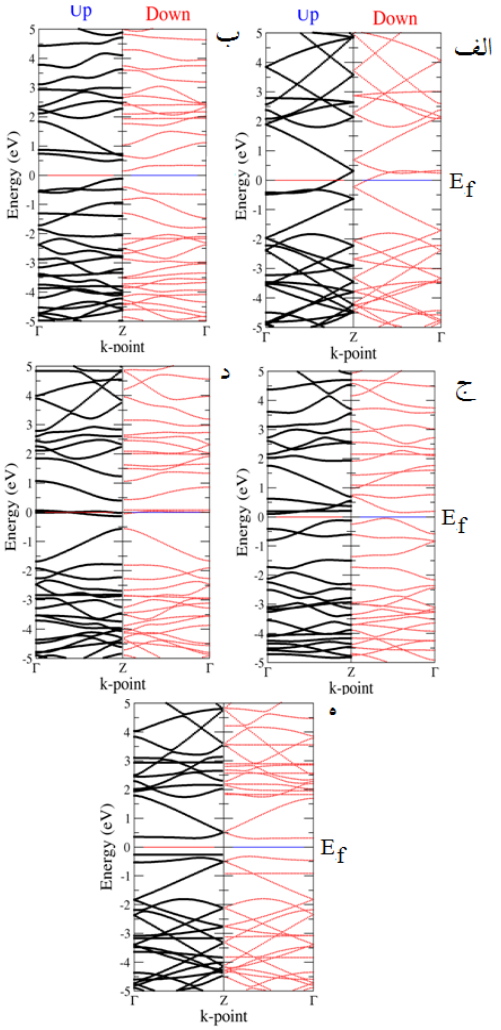
جدول٤. انرژی تشکیل(eV) وقتی دو اتم آهن در دو وضعیت فرو و پادفرو نسبت به‌هم جایگزین دو اتم کربن در حالت دور (AE) و در حالت نزدیک (AD) و جایگزین دو اتم هیدروژن در حالت دور (FG) و در حالت نزدیک (FH) شوند.

ساختار	فرومغناطیس	پادفرومغناطیس
Fe-ZGNR (AD)	۱۳٫۳۷٦۷۸۱	۱٤٫۱۷۸٦
Fe-ZGNR (AE)	۱٤٫۷۷٤۱٥۳	۱٥٫۷۳۰۱۲٤
Fe-ZGNR (FG)	۲٫۷۰۹٤۹	۲٫٦۷٦۱۲٤
Fe-ZGNR (FH)	۲٫۱۳٥۷۲۳	۲٫۰٦۱٤٥۸

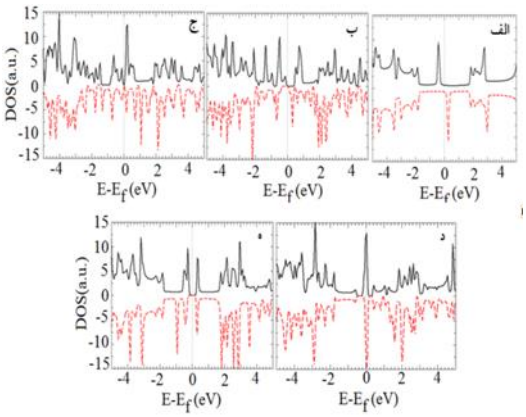
ب: خواص الکترونی و مغناطیسی

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 به‌دست آورد. برای محاسبه ساختار نواری ابتدا محاسبات خودسازگار انجام می‌شود تا انرژی فرمی به‌دست 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 بریلوئن به‌منظور 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 محاسبهٔ 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 آلایش یافته با تک اتم آهن در مکان‌های B، C، D و F برای هر دو اسپین بالا

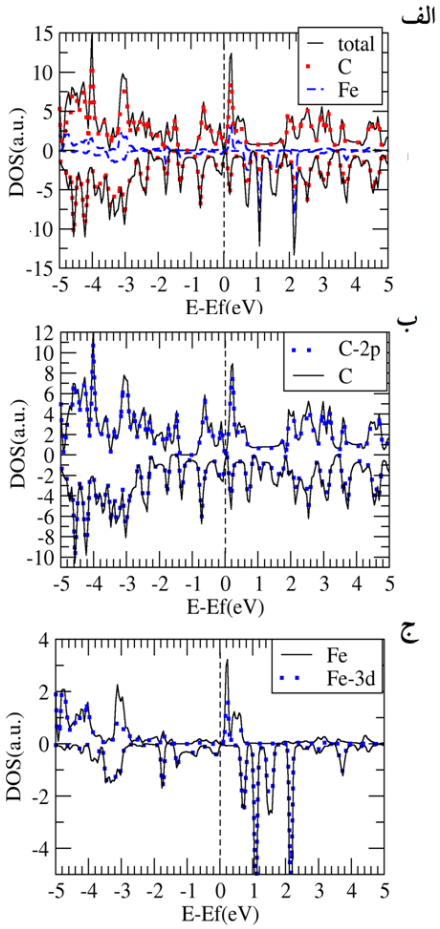
و پایین در شکل۲ رسم شده است. بر طبق ساختارهای الکترونی محاسبه شده در این شکل مشاهده می‌شود که ساختار نواری برای اسپین بالا و پایین هم در حالت خالص و هم در ساختارهای آلایش یافته با یکدیگر متفاوت است و این بدان معناست که تمامی ساختارها دارای خاصیت مغناطیسی می‌باشند. با توجه به ساختار نواری محاسبه شده در شکل۲-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 4-ZGNR در حالت خالص، یک فلز مغناطیسی است [۱۵و۱٦]. 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 آلایش 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 وآلایش یافته با تک اتم آهن، در شکل۳ آورده شده است. در منحنی چگالی حالت‌ها نیز همچون ساختار نواری، سهم اسپین بالا و پایین هم در حالت خالص و هم در ساختارهای آلایش 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 تراز فرمی افزایش می‌یابد که این ناشی از هیبریداسیون قوی بین اوربیتال های 3d اتم آهن و 2p اتم کربن می‌باشد. در شکل٤ 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 شکل٤-ب می‌بینیم بیشترین سهم در چگالی حالت‌های اتم کربن ناشی از اوربیتال 2p آن می‌باشد و بر طبق شکل ٤-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 حالی‌که با آلایش 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 (μ_B) برای ساختارهای مورد مطالعه با توجه به قرار گرفتن اتم ناخالصی در مکان‌های مختلف در جدول۵ گزارش شده است. این مقادیر نشان می‌دهند اضافه کردن ناخالصی به ساختار ZGNR باعث افزایش خاصیت مغناطیسی ساختار می‌شود، همچنین بیان می‌کنند که خاصیت مغناطیسیZGNR به مکان انتخاب شده برای جای‌گذاری اتم آهن بسیار حساس است.



شکل۲. ساختار نواری برای نانو نوار گرافنی الف) خالص، و آلایش‌یافته با تک اتم آهن در مکان ب) B، ج) C، د) D، و ه) F.



شکل۳. نمودار چگالی حالت‌های نانو نوار گرافنی با لبه زیگزاگ شکل برای الف) خالص، وآلایش‌یافته با تک اتم آهن در مکان‌های ب) B، ج) C، د) D، و ه) F.



شکل٤. الف) چگالی حالت های کلی و چگالی حالت‌های کلی اتم آهن و کربن برای ZGNR آلایش 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.

جدول٥. گشتاور مغناطیسی کل برحسب مگنتون بور (μ_B) در حالت خالص و آلایش یافته با یک اتم آهن در مکان‌های B، C، D و F.

ساختار	گشتاور مغناطیسی کل
ZGNR خالص	۱/٦٤
Fe-ZGNR (B)	۳/۹۹
Fe-ZGNR (C)	۲/۰۱
Fe-ZGNR (D)	٤/٥٤
Fe-ZGNR (F)	٤/۹۹

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

به‌دست 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 اتم‌های آهن جای‌گزین اتم‌های هیدروژن شوند نسبت به زمانی‌که جای‌گزین اتم‌های کربن شوند، از نظر انرژی ساختار مطلوب‌تری را خواهیم داشت و زمانی‌که ساختار را با دو اتم آهن آلایش می‌دهیم در هر دو وضعیت فرو و پادفرو، در حالت آلایش نزدیک ساختار پایدارتر است. بیشترین گشتاور مغناطیسی برای آلایش آهن در مکان F و D حدود ۵ و ٤/٥ مگنتون بور حاصل شد. 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. نتایج حاصل از این تحقیق نشان می‌دهد خواص الکترونی و مغناطیسی نانو نوار گرافنی زیگزاگ را می‌توانیم با جای‌گذاری اتم آهن در مکان‌های مختلف در ساختار کنترل کنیم.

مرجع‌ها

[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.

[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. Maao, 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.

[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, σ-and π-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 Movlarooy*

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 $_B$ 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_ tayebeh.movlarooy@shahroodut.ac.ir