

(17,0) KARBON NANOBORULARINDA VANADIUM AŞQARLAMASININ ELEKTRON VƏ MAQNİT XASSƏLƏRİNƏ TƏSİRİ: DFT-LSDA YAXINLAŞMASI

X.Ə. HƏSƏNOVA^{1,2}, V.N. CƏFƏROVA¹, N.A. ƏLİYEVƏ²

¹Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universiteti, Azadlıq pr. 20, Az-1010, Bakı, Azərbaycan

²Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi, Fizika İnstitutu,

H. Cavid pr.131, Az-1073, Bakı, Azərbaycan

e-mail: hasanovakhayala.a@gmail.com

Bu tədqiqatda funksional sıxlıq nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində (17,0) tipli ziqzaq təkdivarlı karbon nanoborularının (SWCNT) elektron və maqnit xassələri sistemli şəkildə araşdırılmışdır. Əsas məqsəd nanoboruların təmiz və Vanadium (V) atomu ilə aşqarlanmış strukturlarının elektron zona quruluşu, hal sıxlığı (DOS), Fermi səviyyəsi və maqnit davranışlarının müqayisəli təhlilidir. Qatqsız (17,0) xiralığa malik karbon nanoboruları yarımkəçirici xassə göstərir və qadağan zolağının eni 0.53 eV-dur. Lakin Vanadiumla aşqarlama nəticəsində bu enerji boşluğu tamamilə aradan qalxmış və sistem metal davranış nümayiş etdirmişdir. DFT analizləri göstərmişdir ki, Vanadiumun 3d orbitalları karbonun 2p orbitalları ilə hibridləşərək Fermi səviyyəsi yaxınlığında yeni enerji səviyyələri yaradır. Bu da nanoborunun elektron keçiriciliyini artırır və yarımkəçirici-metal keçidə səbəb olur. Bundan əlavə, Vanadium ilə aşqarlama nanoboruda maqnit momentin yaranmasına səbəb olmuş və sistemdə spin asimetriyası müşahidə edilmişdir. Maqnit momenti 0.881 μ_B qiymət aldığı müəyyən edilmişdir. Nəticələr göstərir ki, Vanadium ilə aşqarlama nanoboruların elektron və maqnit xassələrində dəyişikliklərə səbəb olur və onları nanoelektronika, spintronika və sensor texnologiyaları üçün potensial namizəd materiallara çevirir.

Açar sözlər: DFT, Vanadium aşqarlaması, Karbon nanoborular, Elektron zona quruluşu, Hal sıxlığı (DOS)

DOI: 10.70784/azip.2.2025403

Giriş

Karbon nanoborular (Carbon Nanotubes, CNT) son illərdə nanomateriallar sahəsində ən çox tədqiq olunan strukturlardan biridir. Onların unikal mexaniki, elektrik və istilik xüsusiyyətləri bu materialları nanoelektronika, spintronika və sensor texnologiyaları kimi müxtəlif tətbiq sahələri üçün perspektivli edir [1–3]. Xüsusilə təkdivarlı karbon nanoborular (Single-Walled Carbon Nanotubes, SWCNT) bir ölçülü kvant sistemləri kimi maraqlı elektron və maqnit xassələri nümayiş etdirirlər [4].

CNT-lərin elektron xüsusiyyətləri əsasən onların xiralıq indekslərindən (n , m) asılıdır. Məsələn, ziqzaq tipli (n , 0) nanoborular müəyyən n qiymətlərində yarımkəçirici, digərlərində isə metal davranış göstərə bilər [5]. Bununla yanaşı, tərkibə 3d keçid metallarının (məsələn, Fe, Co, Ni, V və s.) daxil edilməsi CNT-lərin elektron strukturlarında əhəmiyyətli dəyişikliklər yarıda bilər. Belə aşqarlama prosesi nanoboruların keçiricilik və maqnit davranışlarını tənzimləməyə imkan verir və bu da onların spin-elektronika tətbiqləri üçün mühüm əhəmiyyət kəsb edir [6–8].

Vanadium (V) elementi, 3d orbitallarının yüksək lokallaşması və karbonun 2p orbitalları ilə güclü hibridləşmə qabiliyyəti səbəbindən nanoboruların elektron sıxlığına və maqnit xassələrinə təsir göstərə biləcək effektiv aşqar kimi qəbul edilir [9]. Əvvəlki tədqiqatlarda göstərilmişdir ki, keçid metallarının CNT strukturlarına daxil edilməsi enerji boşluğunu azalda, hətta bəzi hallarda tamamilə aradan qaldıra bilər, nəticədə yarımkəçirici-metal keçidi baş verir [10–12].

Bu tədqiqatda funksional sıxlıq nəzəriyyəsi (DFT) üsulu ilə (17,0) tipli SWCNT-nin təmiz və Vanadium (V) atomu ilə aşqarlanmış formalarının elektron və maqnit xassələri sistemli şəkildə araşdırılmışdır. Gələcəkdə bu cür nanoboru sistemlərinin daha geniş

miqyaslı analizləri üçün DFT nəticələrinin maşın öyrənmə modelləri ilə birləşdirilməsi, daha səmərəli nəticələr verə bilər [13]. Məqsəd Vanadiumun CNT-nin enerji zona quruluşu, hal sıxlığı (DOS), Fermi səviyyəsi və maqnit momenti üzərində təsirini öyrənmək və bu dəyişikliklərin potensial texnoloji tətbiqlərini qiymətləndirməkdir.

Simulyasiya metodu

Bu tədqiqatda (17,0) tipli ziqzaq təkdivarlı karbon nanoboruların (SWCNT) həm təmiz, həm də vanadium (V) atomu ilə aşqarlanmış formalarının elektron xüsusiyyətləri funksional sıxlıq nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində öyrənilmişdir. CNT strukturlarının diametri 10.57 Å, elementar özəyin həcmi isə 2317.52 Å³-dir. Aşqarlama prosesində V atomunu nanoborunun qəfəsinə yerləşdirilərək sistemə maqnit xüsusiyyəti qazandırılmışdır.

Hesablamalar Quantum Atomistix Tool Kit (ATK, versiya 2023.09-V) proqramında Lokal Spin Sıxlığı Yanaşması (LSDA) əsasında aparılmışdır. İon-elektron qarşılıqlı təsirləri normaqruyan Fritz-Haber İnstitutu psevdopotensialı, mübadilə və korelasiya funksionalları isə Perdew-Zunger sxemi ilə təhlil olunmuşdur. Hesablamalarda atom orbitalların xətti kombinasiyası ilə genişləndirilmiş Kohn-Sham dalğa funksiyaları istifadə edilmişdir.

Elektronların kinetik enerjisi təmiz sistemlər üçün 75 Ha, V-aşqarlanmış nanoborular üçün 100 Ha qəbul edilmişdir. Strukturun həndəsi optimallaşdırılması zamanı qüvvə və gərginlik tenzorları üçün yaxınlaşma kriteriyaları 0.001 eV/Å və 0.001 eV/Å³ olaraq təyin edilmişdir. Tərs fəzada inteqrasiya k -nöqtə olmaqla $1 \times 1 \times 5$ Monkhorst-Pack qridi ilə icra edilmiş, elektron temperaturu 300 K seçilmişdir.

Aşqarlanma karbon atomlarının brinin Vanadium atomu ilə əvəzlənməsi (substitutional doping) ilə həyata keçirilmişdir. V atomlarının spin istiqamətləri (spin-yuxarı və spin-aşağı) sistemin maqnit xassəsini müəyyənləşdirmişdir. Hibrid HSE06 funksionali da test edilsə də, yüksək hesablama vaxtı səbəbindən əsas analizlər LSDA çərçivəsində aparılmışdır.

Nəticə və müzakirələr

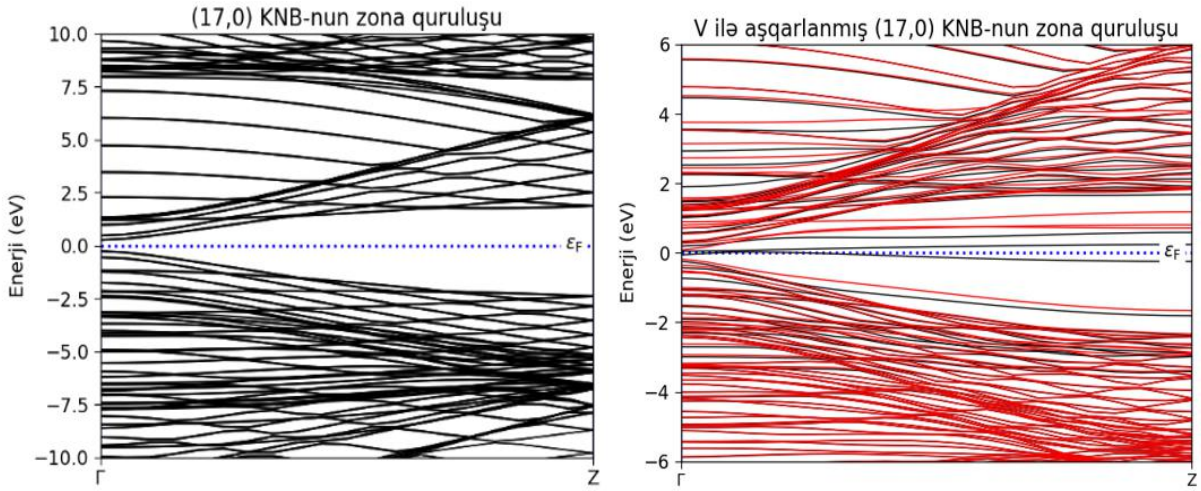
Bu işdə funksional sıxlıq nəzəriyyəsi (DFT) metodu ilə (17,0) xirallığa malik təkdivarlı karbon nanoboruların (SWCNT) elektron və maqnit xassələri təhlil edilmiş, xüsusilə Vanadium (V) atomu ilə aşqarlanmanın bu xassələrə təsiri araşdırılmışdır. Simulyasiyalar nəticəsində aşqarlama prosesinin həm elektron zona strukturlarında, həm də maqnit davranışlarda əhəmiyyətli dəyişikliklərə səbəb olduğu müəyyən edilmişdir.

Qatqsız (17,0) CNT strukturu yarımkeçirici xarakter nümayiş etdirərək, 0.53 eV-lik qadağan zolağına

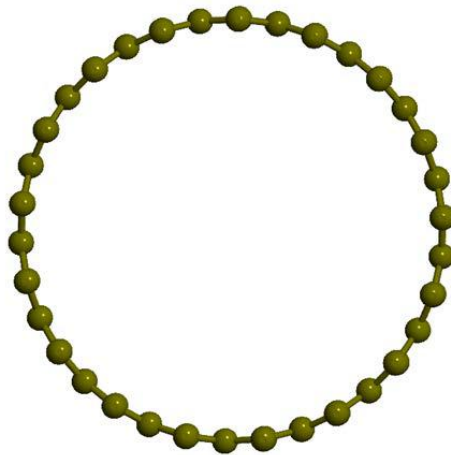
malik olmuşdur. Bu nəticə CNT-lərin kvant məhdudlaşdırılmış sistemlərdə elektronların davranışına uyğun gəldiyini göstərmişdir. Hal sıxlığı (DOS) və zonaların struktur təhlili də bu sistemi zəif keçiriciliklə xarakterizə etmişdir. Lakin Vanadium atomunun struktura daxil edilməsi bu balansı pozmuş və nanoborunun yarımkeçirici xassəsini metal davranışla əvəz etmişdir. DFT analizləri göstərmişdir ki, Vanadiumun 3d orbitalları karbonun 2p orbitalları ilə hibridləşərək Fermi səviyyəsi yaxınlığında yeni lokal enerji səviyyələri formalaşdırır. Bu hallar nanoborunun elektron keçiriciliyini artıraraq qadağan zolağını tamamilə aradan qaldırmışdır.

Şəkil 1-də (17,0) xirallığa malik təkdivarlı karbon nanoboruların Vanadium atomu ilə aşqarlanmadan əvvəl və sonra hesablanmış enerji zona quruluşları təqdim olunmuşdur. Bu nəticələr funksional sıxlıq nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində aparılan hesablamalara əsaslanır.

Şəkil 2-də 68 atomdan ibarət təkdivarlı (17,0) karbon nanoborusunun yuxarıdan görünüşü təqdim olunmuşdur.



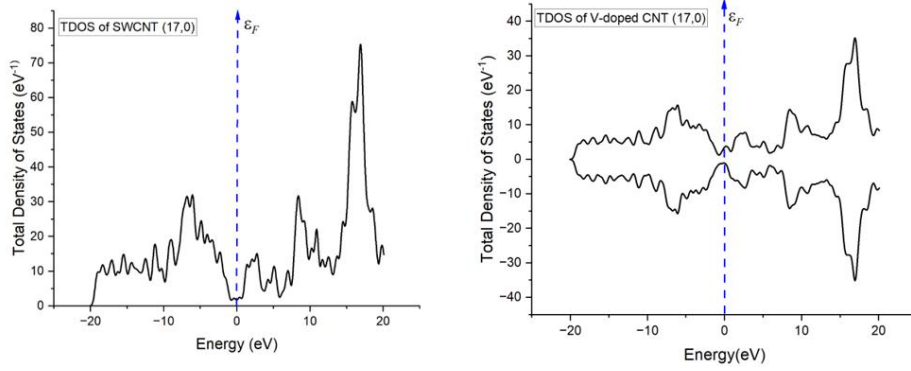
Şəkil 1. Qatqsız və Vanadium ilə aşqarlanmış (17,0) karbon nanoborusunun zona quruluşu.



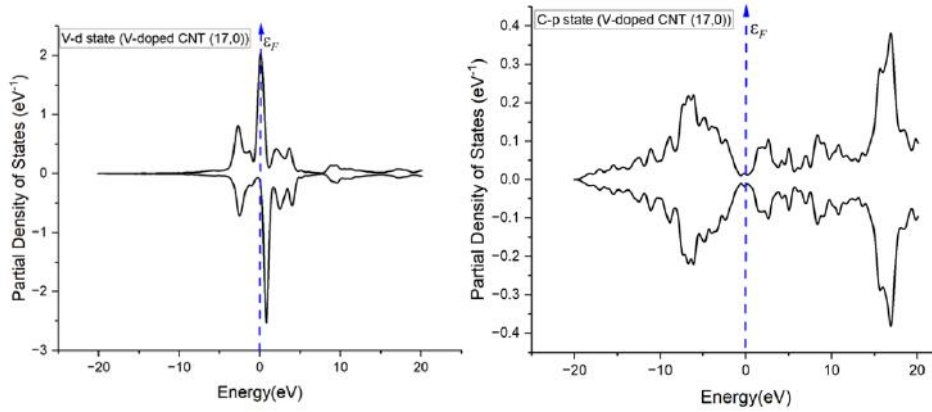
Şəkil 2. 68 atomdan ibarət təkdivarlı (17,0) karbon nanoborusunun yuxarıdan görünüşü.

Şəkil 3-də qatqsız və Vanadium ilə aşqarlanmış (17,0) təkdivarlı karbon nanoborularının funksional sıxlıq nəzəriyyəsi (DFT) əsasında hesablanmış tam hal sıxlığı (TDOS) verilmişdir. Sol qrafikdə Fermi səviyyəsi

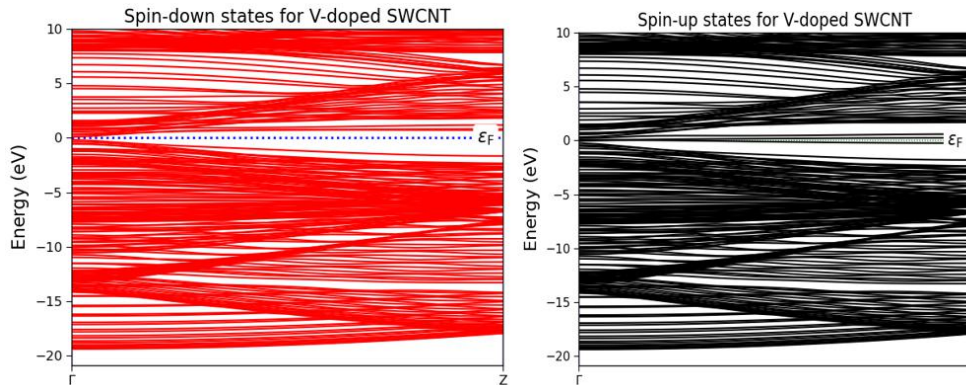
yəsində hal sıxlığı sıfır olduğu üçün sistem yarımkeçirici, sağ qrafikdə isə Fermi səviyyəsində sıx hallar mövcud olduğu üçün sistem metal və maqnit xassəli material kimi xarakterizə olunur.



Şəkil 3. Qatqsız və Vanadium ilə aşqarlanmış (17,0) təkdivarlı KNB-nun (SWCNT) təməl prinsiplər əsasında hesablanmış tam hal sıxlığı.



Şəkil 4. Vanadium ilə aşqarlanmış (17,0) KNB-nun Vanadiumun d və Karbonun p hal sıxlığı.



Şəkil 5. Vanadium ilə aşqarlanmış (17,0) təkdivarlı karbon nanoborunun (SWCNT) spin-yuxarı və spin-aşağı hallar üzrə enerji zona quruluşları.

Şəkil 4-də (sol qrafik) Vanadium atomunun $3d$ elektronlarının enerji paylanması təsvir olunub. Göründüyü kimi, Fermi səviyyəsinə yaxın (0 eV ətrafında) güclü piklər mövcuddur. Bu, V atomunun d -orbitallarının aktiv hibridləşmədə iştirak etdiyini göstərir. Piklərin spin-yuxarı və spin-aşağı oxları üzrə asimmetrik paylanması sistemdə maqnit momentin formalaşdığını sübut edir. Sağ qrafikdə isə Vanadiumun aşqarlanması nəticəsində karbon atomlarının $2p$ orbitallarında da dəyişiklik müşahidə olunur. Fermi səviyyəsi yaxınlığında Karbon p -halları aktivləşir. Bu hallar Vanadiumun d -orbitalları ilə hibridləşmənin nəticəsi olaraq yaranır və elektron keçiriciliyin artmasına səbəb olur.

Mühüm nəticələrdən biri də Vanadium aşqarlanması nəticəsində sistemdə maqnit momentin yaranması olmuşdur. Hesablamalar göstərmişdir ki, bu struktur $0.881 \mu_B$ maqnit momenti ilə spin asimmetrik bir

sistem kimi çıxış edir. Bu, Vanadium atomunun spin-yuxarı və spin-aşağı halları arasında enerji fərqləri yaratması və bu fərqlərin nanoborunun maqnit strukturuna təsiri ilə bağlıdır. DOS təhlili də spin-yuxarı və spin-aşağı kanallarında qeyri-simmetrik piklərin mövcudluğunu göstərmiş, bu da sistemin ferromaqnit xarakterini sübut etmişdir.

Bu nəticələr nanoboru strukturlarının sadəcə passiv yarımkəçirici sistemlər olmadığını, kimyəvi aşqaralama vasitəsilə onların elektron və maqnit xassələrinin tənzimlənmə bildiyini təsdiq edir. Xüsusilə nanoelektronika, maqnit sensor texnologiyaları və spintronika sahəsində bu tip materialların tətbiq imkanlarını artırır. Vanadium aşqarlanması nanoboru strukturlarına funksional imkanlar qazandıraraq onları çoxfunksiyalı nanomateriallara çevirir.

Beləliklə, aparılan DFT əsaslı simulyasiyalar karbon əsaslı nanoboru strukturlarının mühəndislik və texnoloji baxımdan yeni istiqamətlərə yönəldilə biləcəyini göstərir. Nanotexnologiya sahəsində gələcək cihaz dizaynı üçün bu nəticələr yeni elmi və praktiki yanaşmalara zəmin yaradır.

Nəticə

Bu tədqiqatda funksional sıxlıq nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində (17,0) təkdivarlı karbon nanoborularının (KNB) elektron və maqnit xüsusiyyətləri sistemli şəkildə araşdırılmışdır. Aparılan hesablamalar nanoborunun həm qatqsız, həm də Vanadium (V) ilə aşqarlanmış formaları üçün enerji zona strukturu, hal sıxlığı (DOS), Fermi səviyyəsi və maqnit davranışını əhatə etmişdir.

Qatqsız (17,0) karbon nanoborunun yarımqeçirici xarakterə malik olduğu və 0.53 eV enerji boşluğuna sahib olduğu müəyyən edilmişdir. Vanadium aşqarlanması nəticəsində bu enerji boşluğu tamamilə aradan

qalxmış, yeni elektron halları yaranmış və sistem metal davranış sərgiləmişdir. Bu dəyişiklik Vanadiumun 3d orbitallarının karbonun 2p orbitalları ilə hibridləşməsi nəticəsində Fermi səviyyəsi yaxınlığında yeni enerji hallarının yaranması ilə izah olunur.

Əlavə olaraq, Vanadium atomlarının spin asimmetrik yerləşməsi nəticəsində nanoboruda maqnit moment yaranmış və sistem ferromaqnit davranış göstərmişdir. Hesablamalara görə nanoborunun maqnit momenti 0.881 μ_B təşkil etmişdir ki, bu da nanoborunun spintron cihazlarda istifadə üçün potensial daşdığına göstərir.

Ümumilikdə, nəticələr göstərir ki, Vanadium aşqarlanması nanoborunun elektron zona strukturunu dəyişdirərək yarımqeçirici-metal keçidə və maqnitləşməyə səbəb olur. Bu isə təkdivarlı karbon nanoborularını gələcəkdə nanoelektronika, spintronika və sensor texnologiyaları üçün funksional və tənzimlənə bilən materiallar kimi təqdim edir.

- [1] R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. Physical Properties of Carbon Nanotubes. Imperial College Press, 1998.
- [2] P. Avouris, Z. Chen, V. Perebeinos. Carbon-based electronics. Nature Nanotechnology, 2, 605–615, 2007.
- [3] J.C. Charlier et al. Electronic and transport properties of nanotubes. Rev. Mod. Phys., 79, 677–732, 2007.
- [4] X. Blase et al. Hybridization effects and metallicity in small radius carbon nanotubes. Phys. Rev. Lett., 72, 1878, 1994.
- [5] C.L. Kane, E.J. Mele. Size, shape, and low energy electronic structure of carbon nanotubes. Phys. Rev. Lett., 78, 1932, 1997.
- [6] C.K. Yang, J. Zhao, J.P. Lu. Magnetism of transition-metal doped carbon nanotubes. Phys. Rev. Lett., 90, 257203, 2003.
- [7] S. Dag et al. Adsorption and dissociation of transition-metal atoms on carbon nanotubes. Phys. Rev. B, 67, 165424, 2003.
- [8] X.H. Peng et al. Magnetic and electronic properties of transition-metal doped carbon nanotubes. J. Chem. Phys., 120, 4251, 2004.
- [9] Y. Wang et al. First-principles study of vanadium-doped CNTs: Electronic structure and magnetic properties. Nano, 11, 2268, 2021.
- [10] H. H. Hsu, Y. H. Chang. Electronic structure of metal-doped carbon nanotubes, Carbon, 44, 1763–1771, 2006.
- [11] H.S. Kim et al. Transition metal doped CNTs for spintronic devices. J. Appl. Phys., 109, 07C108, 2011.
- [12] Z. Zeng et al. Electronic structure and magnetism of vanadium-doped SWCNTs. Physica E, 41, 1696–1700, 2009.
- [13] V.N. Jafarova, D. Dey Roy, K.A. Hasanova, M.L. Barhalescu, I.C. Scurtu, Device-level modelling for predicting the total density of states of single-walled CNTs with increasing chirality: a fusion of ab initio modeling and a machine learning framework, Nanoscale, 17, 23549–23569, 2025.

Kh.A. Hasanova, V.N. Jafarova, N.A. Aliyeva

EFFECT OF VANADIUM DOPING ON THE ELECTRONIC AND MAGNETIC STRUCTURE OF (17,0) CARBON NANOTUBES: DFT- LSDA STUDY

In this study, within the framework of Density Functional Theory (DFT), the electronic and magnetic properties of zigzag (17,0) single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) were systematically investigated. The main objective was to comparatively analyze the electronic band structure, density of states (DOS), Fermi level, and magnetic behavior of pristine and Vanadium (V)-doped nanotubes. Pristine (17,0) nanotubes exhibit semiconducting characteristics with a band gap of 0.53 eV. However, upon Vanadium doping, this band gap completely disappeared, and the system exhibited metallic behavior. DFT analyses revealed that the 3d orbitals of Vanadium hybridize with the 2p orbitals of carbon, forming new energy levels near the Fermi level. This enhances the electrical conductivity of the nanotube and leads to a semiconductor-to-metal transition. In addition, Vanadium doping induced a magnetic moment in the nanotube, and spin asymmetry was observed in the system. The magnetic moment was determined to be 0.881 μ_B . The results indicate that Vanadium doping significantly alters the electronic and magnetic structures of nanotubes, making them potential candidate materials for nanoelectronics, spintronics, and sensor technologies.

Qəbul olunma tarixi: 22.10.2025