

## DƏMİR İLƏ AŞQARLAMANIN (11,0) KARBON NANOBORULARIN ELEKTRON ZONA QURULUŞUNA VƏ MAQNİT XASSƏLƏRİNƏ TƏSİRİ

X.Ə. HƏSƏNOVA

*Azərbaycan Dövlət Neft və Sənaye Universiteti, Azadlıq pr. 20, Az-1010, Bakı, Azərbaycan  
Azərbaycan Respublikası Elm və Təhsil Nazirliyi, Fizika İnstitutu,  
H. Cavid pr.131, Az-1073, Bakı, Azərbaycan  
e-mail: [hasanovakhayala.a@gmail.com](mailto:hasanovakhayala.a@gmail.com)*

Bu tədqiqatda funksional sıxlıq nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində (11,0) tipli ziqzaq təkdivarlı karbon nanoboruların (SWCNT) elektron və maqnit xüsusiyyətləri dəmir (Fe) atomu ilə aşqarlanma kontekstində ətraflı şəkildə araşdırılmışdır. Qatqısız (11,0) nanoborularda qadağan zolağının eni 0.835 eV-a bərabərdir və yarımkəçirici xassə nümayiş etdirir. Fe atomu ilə aşqarlanma nəticəsində qadağan zolağının eni kəskin şəkildə daralaraq 0.14 eV-ə enmiş, bu da sistemin elektron keçiriciliyinin artdığını və yarımkəçirici-metal sərhəddinə yaxınlaşdığını göstərmişdir. Lakin DFT analizləri sübut etmişdir ki, dəmir atomlarının karbon nanoboru strukturu ilə qarşılıqlı təsiri Fermi səviyyəsi yaxınlığında yeni enerji səviyyələri yaramasına səbəb olsa da, sistemdə maqnit momenti yaranmamışdır və spin asimetriyası müşahidə olunmamışdır. Bu nəticələr göstərir ki, Fe ilə aşqarlanma karbon nanoboruların elektron zona quruluşuna əhəmiyyətli təsir göstərsə də, maqnit davranışı yaratmaq üçün kifayət deyil. Beləliklə, dəmir ilə aşqarlanmış nanoborular yüksək keçiriciliyə malik yarımkəçirici materiallar kimi nanoelektronika və termoelektrik tətbiqlər üçün uyğun olsa da, spintronika sahəsində tətbiqi məhdud ola bilər.

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

**DOI:**10.70784/azip.2.2025407

### Giriş

Karbon nanoborular (CNT) son onilliklərdə nanomaterial elminin ən aktual və sürətlə inkişaf edən tədqiqat sahələrindən birinə çevrilmişdir. Onların müstəsna elektrik keçiriciliyi, yüksək mexaniki möhkəmliyi və istilik sabitliyi CNT-ləri nanoelektronika, enerji sistemləri, sensor texnologiyaları və spintronika kimi qabaqcıl texnologiyalar üçün əvəzolunmaz materiallara çevirir [1–3]. Xüsusilə, təkdivarlı karbon nanoborular (SWCNT) kvant məhdudlaşdırması səbəbindən birölçülü sistem kimi davranaraq maraqlı elektron və maqnit xassələr nümayiş etdirirlər [4]. Karbon nanoboruların elektron zona quruluşu onların xirallıq indeksləri ( $n, m$ ) ilə sıx şəkildə bağlıdır. Məsələn, DFT hesablamaları göstərir ki, (11,0) tipli təkdivarlı karbon nanoboru yarımkəçirici davranış nümayiş etdirir. Bu nəticə, aşağı xirallıq indekslərinə ( $n=4,5,6$ ) malik nanoboru strukturlarının metal, daha yüksək indekslərə malik strukturların isə yarımkəçirici olduğunu bildirən əvvəlki hesablamalarla işləri ilə uyğunluq təşkil edir [5]. Bu xüsusiyyət onların quruluşunun dayanıqlığını və elektron xassələrini tənzimləmək üçün yeni imkanlar yaradır. Karbon nanoboruların bu imkanlarını genişləndirmək üçün keçid metallarının – xüsusilə də dəmir (Fe), nikel (Ni), kobalt (Co) və vanadium (V) – atomları ilə aşqarlanma yolu ilə struktura daxil edilməsi xüsusi maraq doğurur [6–8]. Belə aşqarlanma prosesi karbon nanoboruların enerji səviyyələrinə, qadağan zolağına və maqnit davranışlarına birbaşa təsir göstərərək onların elektron quruluşunda və spin-elektronika sahəsində tətbiqini asanlaşdırır. Dəmir (Fe) elementi, özünün ferromaqnit təbiəti və karbon strukturları ilə orbital qarşılıqlı təsirə girmə qabiliyyəti səbəbindən karbon nanoboruların elektron və maqnit xüsusiyyətlərinə təsir etmək baxımından perspektivli aşqar kimi çıxış edir [9]. Əvvəlki nəzəri və

eksperimental tədqiqatlar göstərmişdir ki, keçid metallarının karbon nanoborularla hibridləşməsi nəticəsində qadağan zolağının eni darala, hətta tamamilə yox ola bilər, bu da yarımkəçirici-metal keçidinə və keçiriciliyin əhəmiyyətli dərəcədə artmasına səbəb olur [10–12]. Bu işdə funksional sıxlıq nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində (11,0) tipli ziqzaq SWCNT-nin təmiz və dəmir (Fe) atomu ilə aşqarlanmış formalarının elektron və maqnit strukturları müqayisəli şəkildə araşdırılmışdır. Tədqiqatın məqsədi Fe aşqarlamasının nanoborunun enerji zona quruluşuna, hal sıxlığına (DOS), Fermi səviyyəsinə və maqnit momentinə necə təsir etdiyini öyrənmək, eləcə də bu dəyişikliklərin potensial texnoloji tətbiq imkanlarını qiymətləndirməkdir. Gələcəkdə bu kimi modellərin maşın öyrənməsi ilə inteqrasiyası nanotexnologiyada daha effektiv dizayn yanaşmalarının inkişafına şərait yarada bilər [13].

### Hesablama metodu

Bu tədqiqatda (11,0) tipli ziqzaq təkdivarlı karbon nanoboruların (SWCNT) həm təmiz, həm də dəmir (Fe) atomu ilə aşqarlanmış formalarının elektron xüsusiyyətləri funksional sıxlıq nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində öyrənilmişdir. CNT strukturlarının diametri 10.57 Å, elementar özəyin həcmi isə 2317.52 Å<sup>3</sup>-dir. Aşqarlanma prosesində Fe atomunu nanoborunun qəfəsinə əvəzləmə metodu ilə yerləşdirilmişdir.

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

Enerji kəsim dəyərləri təmiz sistemlər üçün 75 Hartree, Fe-aşqarlanmış nanoborular üçün 100 Hartree qəbul edilmişdir. Struktur optimizasiyası zamanı qüvvə və gərginlik üçün yaxınlaşma kriteriyaları  $0.001 \text{ eV/Å}$  və  $0.001 \text{ eV/Å}^3$  olaraq təyin edilmişdir. Tərs fəzada integrasiya  $1 \times 1 \times 5$  Monkhorst-Pack  $k$ -nöqtə nümunələməsi ilə icra edilmiş, elektron temperaturu 300 K seçilmişdir.

Aşqarlanma karbon atomlarının birinin dəmir atomu ilə əvəzlənməsi (substantial doping) ilə həyata keçirilmişdir. Fe atomlarının spin istiqamətlərinə (spin-up və spin-down) sistemin maqnit xassəsinə təsiri müəyyənləşdirmişdir. Hibrid HSE06 funksionalı da test edilərsə də, yüksək hesablama vaxtı səbəbindən əsas analizlər LSDA çərçivəsində aparılmışdır.

### Nəticə və müzakirələr

Şəkil 1-də qatqısız və dəmir (Fe) ilə aşqarlanmış (11,0) tipli təkdivarlı karbon nanoboruların (KNB) elektron zon quruluşları müqayisəli şəkildə təqdim olunmuşdur.

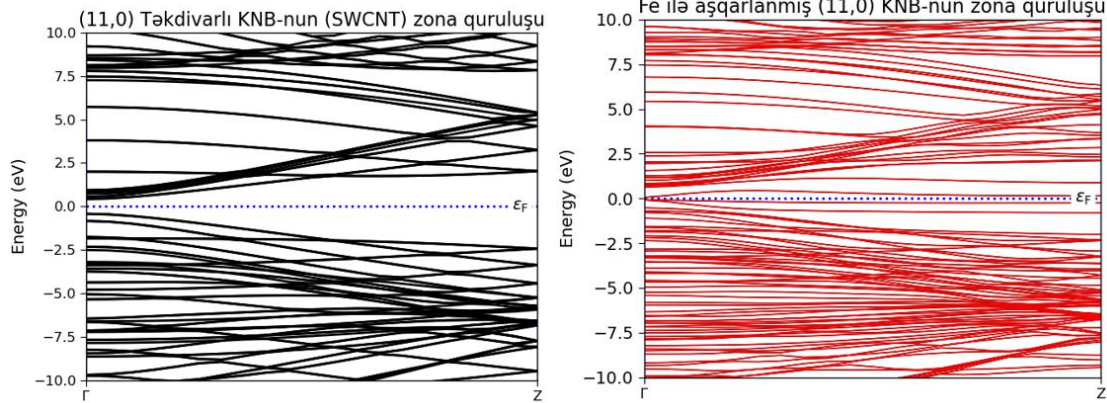
Sol şəkildə göstərilən qara xətlər qatqısız, yəni təmiz (11,0) SWCNT-yə aid zona quruluşunu əks etdirir. Bu strukturda Fermi səviyyəsi sıfır enerji səviyyəsində (mavi xətlə) göstərilmişdir. Göründüyü kimi, valent və

keçiricilik zonaları arasında nəzərəcarpacaq enerji boşluğu mövcuddur. Bu boşluğun ölçülməsi nəticəsində qadağan zolağının eni təxminən  $0.835 \text{ eV}$  olaraq müəyyən edilmiş və bu da nanoborunun yarımkeçirici xassəyə malik olduğunu sübut edir.

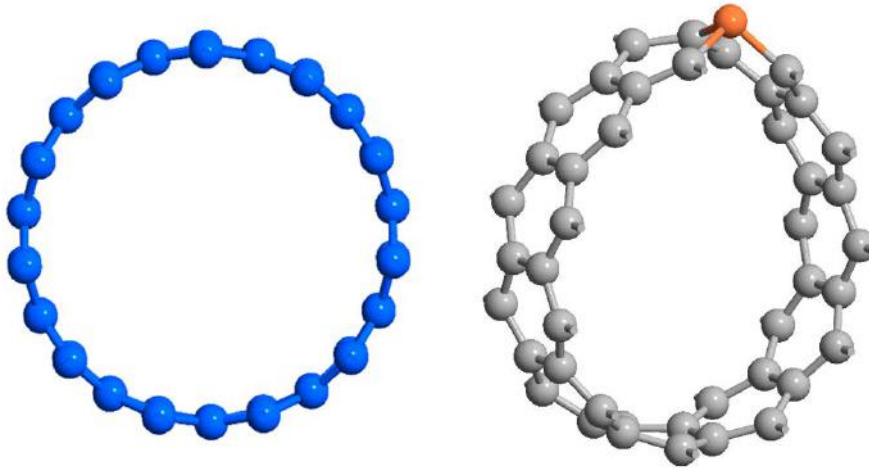
Sağ şəkildə isə dəmir atomu ilə aşqarlanmış eyni nanoboru üçün elektron zona quruluşu verilmişdir. Burada zona strukturu qırmızı xətlərlə göstərilmişdir və Fermi səviyyəsinin ətrafında bir neçə enerji səviyyəsinin kəsişdiyi müşahidə olunur. Bu hal qadağan zolağının sıfıra yaxınlaşması və ya  $0.14 \text{ eV}$ -ə qədər daralması ilə nəticələnmişdir. Bu da nanoborunun keçiriciliyinin artmasını və yarımkeçirici-metal sərhəddinə yaxınlaşan davranış nümayiş etdirdiyini göstərir.

Bundan əlavə, Fe atomu ilə aşqarlanmanın nəticəsində zona strukturlarında daha sıx enerji səviyyələri müşahidə edilir. Bu, Fe-un  $3d$  orbitalları ilə karbonun  $2p$  orbitalları arasında hibridləşmənin baş verdiyini göstərir. Bu orbital qarşılıqlı təsir yeni lokal enerji səviyyələrinin yaranmasına və Fermi səviyyəsi yaxınlığında yerləşməsinə səbəb olmuşdur.

Lakin zona quruluşunda spin asimetriyası və ya maqnit bölünmə müşahidə edilmir. Bu da sistemdə maqnit momentinin yaranmadığını göstərir, yəni Fe aşqarlanmasına baxmayaraq nanoboru maqnit davranış göstərmir.



Şəkil 1. Qatqısız və dəmir ilə aşqarlanmış (11,0) KNB-nun zona quruluşu.



Şəkil 2. 44 atomdan ibarət təkdivarlı (11,0) təmiz və Fe ilə aşqarlanmış KNB-nun yuxarıdan görünüşü.

Şəkil 2-də 44 atomdan ibarət olan (11,0) tipli təkdivarlı karbon nanoboruların (KNB) təmiz və dəmir (Fe) atomu ilə əvəzləmə yolu ilə aşqarlanmış konfigurasiyalarının yuxarıdan görünüşü təqdim edilmişdir.

Sol şəkildəki model qatqısız, ideal nanoboru strukturunu təsvir edir. Bu nanoboru yalnız karbon atomlarından ibarətdir və simmetrik, mükəmməl boruvari quruluşa malikdir. Belə strukturlarda elektron və

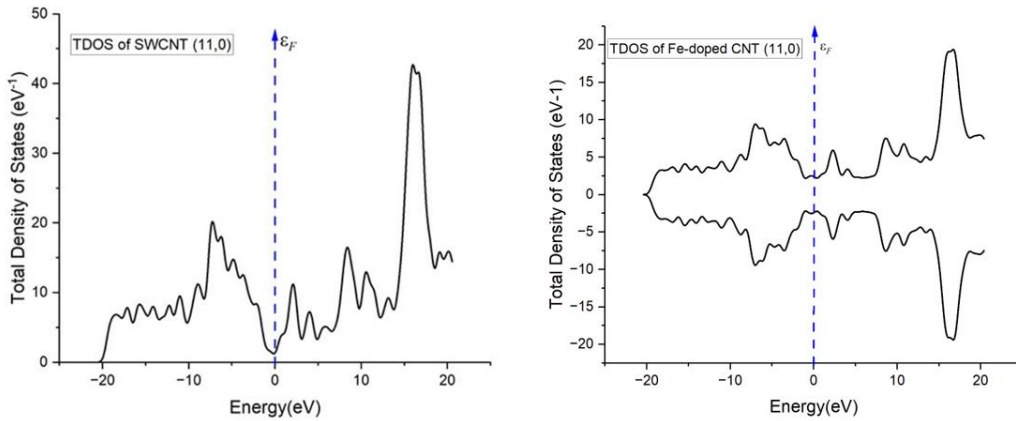
maqnit xassələr yalnız karbon-karbon qarşılıqlı təsirləri ilə müəyyən edilir və nanoboru yarımkəçirici davranış göstərir.

Sağ şəkiləki modeldə isə substisional doping təbiiq olunmuşdur. Burada nanoborunun karbon atomlarından biri dəmir (Fe) atomu ilə əvəz olunmuşdur. Nəticə olaraq göstərilən Fe atomu karbon skeletinin birbaşa tərkib hissəsinə çevrilmiş, beləliklə nanoborunun elektron quruluşuna lokal orbital və yük redistribusiyası yolu ilə güclü təsir göstərmişdir.

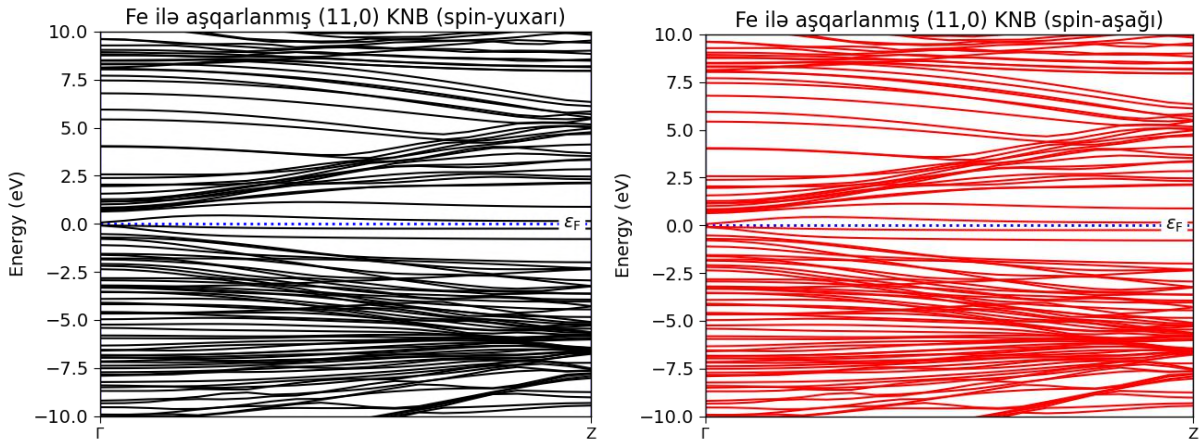
Şəkil 3-də (11,0) tipli təkdivarlı karbon nanoboruların (SWCNT) qatqısız və dəmir (Fe) ilə əvəzləmə yolu ilə aşqarlanmış formaları üçün funksional sıxlıq nəzəriyyəsi (DFT) əsasında hesablanmış ümumi hal sıxlığı (Total Density of States – TDOS) təqdim olunmuşdur.

Sol tərəfdəki qrafik qatqısız (təmiz) nanoboru üçün hal sıxlığı funksiyasını əks etdirir. Şəkilə Fermi səviyyəsi sıfır enerji səviyyəsində mavi şaquli oxla göstərilmişdir. TDOS əyrisində Fermi səviyyəsi ətrafında minimum sıxlıq müşahidə olunur, yəni bu nöqtədə elektron halı yoxdur. Bu hal zona quruluşu analizində müşahidə olunan 0.835 eV-lik enerji boşluğu ilə uyğundur və nanoborunun yarımkəçirici xassəyə malik olduğunu sübut edir.

Sağ tərəfdə isə Fe atomu ilə əvəzləmə yolu ilə aşqarlanmış nanoboru üçün TDOS göstərilmişdir. Burada qrafik spin komponentləri ayrılmış şəkildə – yuxarı və aşağı spinlər üçün asimmetrik şəkildə verilmişdir. Bu fərq ilk baxışda spin asimmetriyasının ola biləcəyi təəssüratı yaratsa da, ayrılar bir-birinə yaxın və balanslı olduğuna görə nəticəvi maqnit moment sıfırdır, yəni maqnitlik müşahidə olunmamışdır.



Şəkil 3. Qatqısız və dəmir ilə aşqarlanmış (11,0) təkdivarlı KNB-nun (SWCNT) təməl prinsiplər əsasında hesablanmış ümumi hal sıxlığı.



Şəkil 4. Dəmir ilə aşqarlanmış (11,0) təkdivarlı karbon nanoborunun (SWCNT) spin-yuxarı və spin-aşağı hallar üzrə enerji zona quruluşu.

Şəkil 4-də (11,0) tipli karbon nanoborunun (KNB) dəmir (Fe) ilə yerdəyişmə yolu aşqarlanmış formasının spin-yuxarı və spin-aşağı hallar üzrə enerji zona quruluşu təqdim olunmuşdur. Bu qrafiklər funksional sıxlıq nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində spin-qütblü hesablamalar əsasında əldə edilmişdir və sistemdə maqnit davranışın olub-olmamasını qiymətləndirmək üçün istifadə olunur.

Zonalar arasında spin degenerasiyası qorunub – spin-yuxarı və spin-aşağı zonalar demək olar ki, üst-üstə düşür.

Spin qütbləşməsi baş verməyib, yəni sistemdə spontan maqnit momenti yaranmayıb. Bu nəticə maqnit momentin sıfıra yaxın olduğunu və Fe ilə aşqarlanmaya baxmayaraq paramaqnit və ya qeyri-maqnit davranış müşahidə olunduğunu göstərir.

#### Nəticə

Bu işdə funksional sıxlıq nəzəriyyəsi (DFT) çərçivəsində (11,0) tipli təkdivarlı karbon nanoboruların

elektron və maqnit xassələrinə dəmir (Fe) ilə aparılan əvəzləmə yolu ilə aşqarlamamanın təsiri araşdırılmışdır. Tədqiqat nəticələri göstərmişdir ki, aşqarlama nanoborunun elektron zona quruluşuna mühüm dəyişikliklər gətirmişdir. Təmiz strukturların yarımkeçirici təbiəti saxlanılarkən, dəmir atomu ilə aşqarlama nəticəsində qadağan zolağının eni nəzərəcarpacaq dərəcədə daralmış və nanoboru metalvari keçiricilik nümayiş etdirmişdir. Bu dəyişiklik karbonun  $2p$  və dəmirin  $3d$  orbitalları arasında yaranan hibridləşmənin nəticəsidir.

Elektron hal sıxlığı analizləri də aşqarlama Fermi səviyyəsi yaxınlığında yeni enerji səviyyələrinin əmələ gəlməsinə səbəb olduğunu, bunun da elektron keçiriciliyini artırdığını göstərmişdir. Lakin, aparılan spin-qütblü hesablamalar sistemdə spin-yuxarı və spin-aşağı hallar üzrə ciddi fərqin olmadığını göstərmiş, nəticədə

maqnit momenti yaranmamışdır. Bu hal, sistemdə spin degenerasiyasının qorunub saxlanması ilə izah olunur və onu maqnit baxımından neytral material kimi xarakterizə etməyə əsas verir. Ümumilikdə, aşqarlama prosesi karbon nanoborunun elektron xassələrini əhəmiyyətli dərəcədə dəyişdirərək onun yarımkeçirici təbiətini aradan qaldırmış və metal xarakterli quruluşa çevrilməsinə səbəb olmuşdur. Bu da onun elektrik keçirici material kimi istifadəsini genişləndirə bilər. Lakin maqnit momentinin müşahidə olunmaması onu spintronik tətbiqlər üçün uyğun olmayan bir sistem kimi müəyyənləşdirir. Bu nəticələr göstərir ki, Fe ilə aşqarlama elektron strukturun tənzimlənməsi baxımından effektiv metod olsa da, maqnit davranışın induksiya olunması üçün əlavə faktorların və ya fərqli aşqarların araşdırılması zəruridir.

- [1] S. Iijima. Helical microtubules of graphitic carbon. *Nature*, 354(6348), 56–58, 1991.
- [2] M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, P. Avouris (Eds.). *Carbon nanotubes: synthesis, structure, properties, and applications*. Springer, 2001.
- [3] E. Pop, D. Mann, Q. Wang, K. Goodson, H. Dai. Thermal conductance of an individual single-wall carbon nanotube above room temperature. *Nano Letters*, 6(1), 96–100, 2006.
- [4] R. Saito, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. *Physical properties of carbon nanotubes*, Imperial College Press, 1998.
- [5] 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.
- [6] K.J.Lee, H.J.Kim, M.J.Choi, S.H.Park, Y.K.Jung. Doping effects of carbon nanotubes and graphene on the needle-punched carbon/carbon (C/C) matrix, *Materials*, 16(20), 6801, 2023.
- [7] B. Kumanek, G. Stando. Doping engineering of single-walled carbon nanotubes by various nitrogen-bearing compounds. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 14(21), 24597–24607, 2022.
- [8] K.Z. Milowska, J.A. Majewski. Effective doping of single-walled carbon nanotube films: enhancement of electrical and thermoelectric properties. *Synthetic Metals*, 285, 117029, 2022.
- [9] T.M.G. Mohiuddin, M.A. Khan, M.A. Rehman, M. Hasan. Electronic and magnetic properties of Fe-decorated single-walled carbon nanotubes: a DFT study. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 407, 84–91, 2016.
- [10] S. Zhou, Y. Liu, X. Chen, J. Wang, Q. Zhang. Advances and outlooks for carbon nanotube-based thermoelectric materials and devices. *Advanced Materials*, 37(12), 2204569, 2025.
- [11] Y.K. Chen, R. Zhao, J. Wen. Theoretical studies of transition-metal-doped single-walled carbon nanotubes. *The Journal of Physical Chemistry C* Vol 115, Issue 19, 2011.
- [12] S. Zhang, J. Li, X. Wu, X. C. Zeng. Electronic structure and magnetic properties of transition metal-doped carbon nanotubes: a first-principles study. *Physica B: Condensed Matter*, 405(5), 1220–1225, 2010.
- [13] G. Pilania, C. Wang, X. Jiang, S. Rajasekaran, R. Ramprasad. Accelerating materials property predictions using machine learning. *Scientific Reports*, \* 3, 2810, 2013.

**Kh.A. Hasanova**

### **THE EFFECT OF IRON DOPING ON THE ELECTRONIC BAND STRUCTURE AND MAGNETIC BEHAVIOR OF (11,0) CARBON NANOTUBES**

In this study, the electronic and magnetic properties of zigzag (11,0) single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) were comprehensively investigated within the framework of density functional theory (DFT) under the influence of iron (Fe) doping. The pristine (11,0) nanotubes exhibited semiconducting behavior with an energy band gap of 0.835 eV. Upon Fe doping, the band gap significantly decreased to 0.14 eV, indicating enhanced electronic conductivity and a transition tendency toward a semiconductor–metal boundary. However, DFT analyses revealed that although the interaction between Fe atoms and the carbon nanotube structure introduced new electronic states near the Fermi level, no magnetic moment was formed, and no spin asymmetry was observed. These results demonstrate that Fe doping has a pronounced effect on the electronic band structure of carbon nanotubes but is insufficient to induce magnetic behavior. Consequently, Fe-doped carbon nanotubes can serve as highly conductive semiconducting materials suitable for nanoelectronic and thermoelectric applications, though their use in spintronic devices may be limited.

*Qəbul olunma tarixi: 23.10.2025*