

## خواص الکترونی و مغناطیسی نانونوار ترکیبی AGNR-BP-GNR

ذیهاب صحبت زاده<sup>۱</sup> محمود رضایی رکن آبادی<sup>۲</sup>

۱- زاهدان، دانشگاه سیستان و بلوچستان، گروه فیزیک

۲- مشهد، دانشگاه فردوسی مشهد، گروه فیزیک

### خلاصه

خواص الکترونی و مغناطیسی در یک ساختار هیبریدی AGNR-BP-GNR مورد مطالعه واقع شده است. سه آرایش متفاوت مد نظر قرار گرفته اند: AGNR-BP-GNR اولیه و جایگزینی اتم های آهن بجای اتم های فسفر و بورون در لبه نانو نوار BP. محاسبات نظری اصول اولیه بیانگر این است که نانو نوارهای بورون-فسفاید (ABPNRs) قابلیت بلوری شدن را دارند. با این حال خواص الکترونی آنها به دلیل ساختارهای الکترونی متفاوت کربن (C)، بورون (B) و فسفر (P) می تواند متفاوت باشد. بنابراین این نانونوارها را می توان در ساخت نانو ساختارهای هیبریدی با فصل مشترک های همدوس پایدار و با قابلیت های متنوع به کار برد. قطبش اسپینی قابل توجهی را می توان در نانو نوارهای گرافنی (GNR) با آلاییدن برخی اتم های فلزات واسطه خصوصاً فلزات فرومغناطیس سنتی به دست آورد. اتم های فرومغناطیس (آهن، کبالت، نیکل) دارای خواص مغناطیسی شناخته شده ای بوده و می توانند بعنوان منشا خواص مغناطیسی در GNR ها مورد استفاده قرار گیرند. این ناخالصی های فرو مغناطیسی می توانند خواص GNR ها را به منظور کاربردهای اسپینترونیک تنظیم نمایند. بر اساس بررسی های انجام شده اطلاعات کافی در خصوص خواص الکترونی و مغناطیسی مرتبط با اتم های مغناطیسی جاسازی شده در نانو نوارهای شبه گرافنی هیبریدی در دسترس نیست. بر این اساس خواص الکترونی و مغناطیسی قطعه مورد نظر را که در آن اتم آهن بصورت جایگزین سایر اتم ها در جایگاه های مختلف افزوده شده است را مورد بررسی قرار می دهیم.

**کلمات کلیدی:** نانونوارهای شبه گرافنی هیبریدی، نانونوارهای بورون - فسفاید، خواص الکترونی و مغناطیسی،

اسپینترونیک