

«مقاله پژوهشی»

القای مغناطیسی قابل تنظیم تک لایه 1T-NiTe₂ از طریق الایش اتمی فلزات واسطه V، Cr، Mn، و Fe

مجتبی غلامی^{1*}، مهدی ابراهیمی سرائی²، مهلا حسن پور³

1. مربی، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

2. گروه فیزیک، دانشگاه گیلان، رشت، ایران

3. دانشجو، گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران

تاریخ پذیرش: 1401/06/31

تاریخ دریافت: 1401/05/03

Tunable Magnetic Induction of 1T-NiTe₂ Monolayer via V, Cr, Mn and Fe Transition Metals Atomic Doping

M. Gholami^{*1}, M. Ebrahimi Saraei², M. Hasanpour³

1. Teacher, Department of Physics, Payame Noor University, Tehran, Iran

2. Department of Physics, University of Guilan, P. O. Box 41335-1914, Rasht, Iran

3. Student, Department of Physics, Payame Noor University, Tehran, Iran

Received: 2022/07/25

Accepted: 2022/09/19

Abstract

The induction of magnetization in two-dimensional dichalcogenide materials is one of the potentials of these materials in the manufacture of spintronic devices. Using basic principles calculations and using the 3d transition metal doping technique, the magnetic property of the single-layer dichalcogenide 1T-NiTe₂ was investigated. Results It shows that doping transition metals V, Cr, Mn, and Fe magnetize the structure. The highest and lowest values of induced magnetization are related to the Cr atom and Fe atom, respectively. Cr atoms form a ferromagnetic (FM) coating with adjacent nickel atoms and an antiferromagnetic (AFM) hybrid with telluride atoms. While the Fe atom has hybrid antiferromagnetism with nearby nickel and telluride atoms, which motivates less magnetization in the system.

Keywords

Two-dimensional dichalcogenide, magnetic properties, 3d TM doping.

چکیده

القای مغناطش در مواد دو بعدی دی کالکوئید از پتانسیل‌های بالقوه این مواد در ساخت وسایل اسپینترونیکی می‌باشد. با بکارگیری محاسبات اصول اولیه و با استفاده از تکنیک دوپینگ فلزات واسطه 3d به بررسی خاصیت مغناطیسی تک لایه دی کالکوئید 1T-NiTe₂ پرداخته شد. نتایج نشان می‌دهد که دوپینگ فلزات واسطه میانی V، Cr، Mn، و Fe ساختار را مغناطیسی می‌کند. بیشترین و کمترین مقدار مغناطش القا شده بترتیب مربوط به اتم Cr و اتم Fe می‌باشد. اتم Cr با اتم‌های نیکل مجاور پوشش فرومغناطیس (FM) و با اتم‌های تلورید هیبرید انتی فرومغناطیس (AFM) برقرار می‌کنند. در حالی که اتم Fe با اتم‌های نیکل و تلورید مجاور هیبرید انتی فرومغناطیس دارند که باعث می‌شود مغناطش کمتری در ساختار ایجاد شود.

واژه‌های کلیدی

دی کالکوئید دو بعدی، خواص مغناطیسی، دوپینگ فلزات 3d واسطه

مقدمه

استفاده می‌شود [21]. همچنین براری ارزیابی حالت پلاریزاسیون از تقریب گرادیان تعمیم یافته اسپینی (SGGA) استفاده شده است. با در نظر گرفتن اثر اندازه ابرشبهه [22]، یک ابرشبهه $1 \times 2 \times 2$ تک لایه 1T- NiTe_2 حاوی 9 اتم Ni و 18 اتم Te در این کار به کار گرفته شده است. یک اتم S با اتم‌های NM در تمام سیستم‌های دوپ شده جایگزین می‌شود، انرژی قطع بالا برای پایه موج صفحه 500eV تنظیم شد و شبکه نمونه برداری نقطه $1 \times 7 \times 7$ -k برای ادغام در منطقه بریلوین اول اعمال شد. یک لایه خلاء 16 \AA در امتداد جهت z برای جلوگیری از فعل و انفعالات بین slabs دوره‌ای استفاده می‌شود. بهینه‌سازی ساختاری تا زمانی ادامه می‌یابد که تحمل همگرایی انرژی و حداکثر نیرو به ترتیب کمتر از 10^{-4} eV/atom و 10^{-4} eV/\AA باشد. تمام محاسبات تحت معیارهای ریلکس یکسان انجام می‌شود.

نتایج و بررسی

NiTe_2 یک ترکیب لایه‌ای است که در یک ساختار متقارن مثلثی (trigonal) در داخل نمونه اولیه (گروه فضایی $p3m1$) CdI_2 متبلور می‌شود. یک لایه Ni بین دو لایه Te قرار می‌گیرد، برهمکنش‌های ضعیف واندروالسی بین لایه‌ها و پیوند کوالانسی بین اتم‌های Ni و Te قرار دارد. در این کار، ما خواص ساختاری و الکترونیکی ابرسلول 1T- NiTe_2 دوپ شده را بررسی می‌کنیم. مقدار گشتاور مغناطیسی کل، M_{tot} ، گشتاور مغناطیسی فلزات واسطه 3d، M_d ، گشتاور مغناطیسی اتم‌های تلورید همسایه اول اتم مرکزی TM، M_{s1} ، گشتاور مغناطیسی اتم‌های نیکل همسایه اول اتم مرکزی M_{Ni1} و همچنین طول پیوند بین فلز واسطه و اتم غیر فلز تلورید، $d_{\text{Te-TM}}$ مطابق جدول 1 محاسبه شده است. مقدار طول پیوند با کاهش شعاع اتمی از فلز Sc تا Co کاهش پیدا می‌کند و برهم کنش پیوند کوالانسی بین اتم Te و فلز TM در حال افزایش است. اما طول پیوند کوالانسی از اتم Ni که مربوط به ساختار خالص 1T- NiTe_2 می‌باشد تا فلز Zn زیاد می‌شود. یکی از زمینه‌های تحقیقاتی هیجان انگیز مواد دو بعدی مربوط به بحث مغناطیسی می‌باشد که بارهای پلاریزه چنین سیستم دو بعدی جایگزین شده با TM عمدتاً از الکترون‌های 3d غیرپیوندی موضعی اتم‌های TM ناشی

دی کالکوژنیدهای فلزات انتقالی (TMDs) ترکیباتی هستند که در ساختارهای دو بعدی که از طریق نیروهای واندروالسی بین لایه‌ها با هم پیوند برقرار می‌کنند، متبلور می‌شوند [1-5]. این منجر به تنوع گسترده‌ای از خواص فیزیکی، شیمی و کاربردهای بالقوه می‌شود [6-11]. فرمول عمومی این ترکیبات بصورت MX_2 می‌باشد که M نماینده فلزات واسطه و X نماینده غیرفلزات بویژه گروه ششم جدول تناوبی شامل S، O، Se، و Te می‌باشد [12]. هرچند اکثر مواد دو بعدی دی کالکوژنید از نظر خاصیت الکترونیکی مانند نیمه هادی رفتار می‌کنند اما یک سری از این مواد مانند MX_2 (M=Ti, V, Fe, Ni and X=S, Se, Te) مانند فلز می‌باشند [12]. با توجه به اینکه ساخت ترکیبات کریستالی دو بعدی مغناطیسی یک چالش بزرگ محسوب می‌شود، لذا ایجاد مغناطش موضعی در این مواد می‌تواند تکنیک مناسبی لحاظ گردد. دوپینگ جایگزینی روش مرسوم در جهت مغناطیسی نمودن مواد دو بعدی می‌باشد که با استفاده از جایگزینی فلزات واسطه به جای یک اتم مرکزی M انجام می‌گیرد [13-17]. همچنین جایگزینی غیرفلزات به جای غیر فلز X از نمونه تحقیقاتی بوده که در مقالات مختلف مشاهده شده است [18-20]. NiTe_2 یکی از مواد دو بعدی غیرمغناطیس فلزی می‌باشد که در فاز 1T- NiTe_2 هر اتم Ni با شش اتم Te از طریق پیوند کوالانسی پیوند برقرار می‌کنند. در این مقاله با دوپینگ فلزات دوره 3d، به بررسی جزئیات خاصیت مغناطیسی آن پرداخته می‌شود. دوپینگ فلزات V، Cr، Mn و Fe باعث می‌شوند که ساختار NiTe_2 خاصیت مغناطیسی پیدا کند در حالی که سایر اتم‌های دوره 3d نمی‌توانند در سیستم القای مغناطیسی نمایند. ترکیب ساختارهای NiTe_2 نقش فوق‌العاده‌ای در ساخت وسایل اسپینترونیکی بازی می‌کنند.

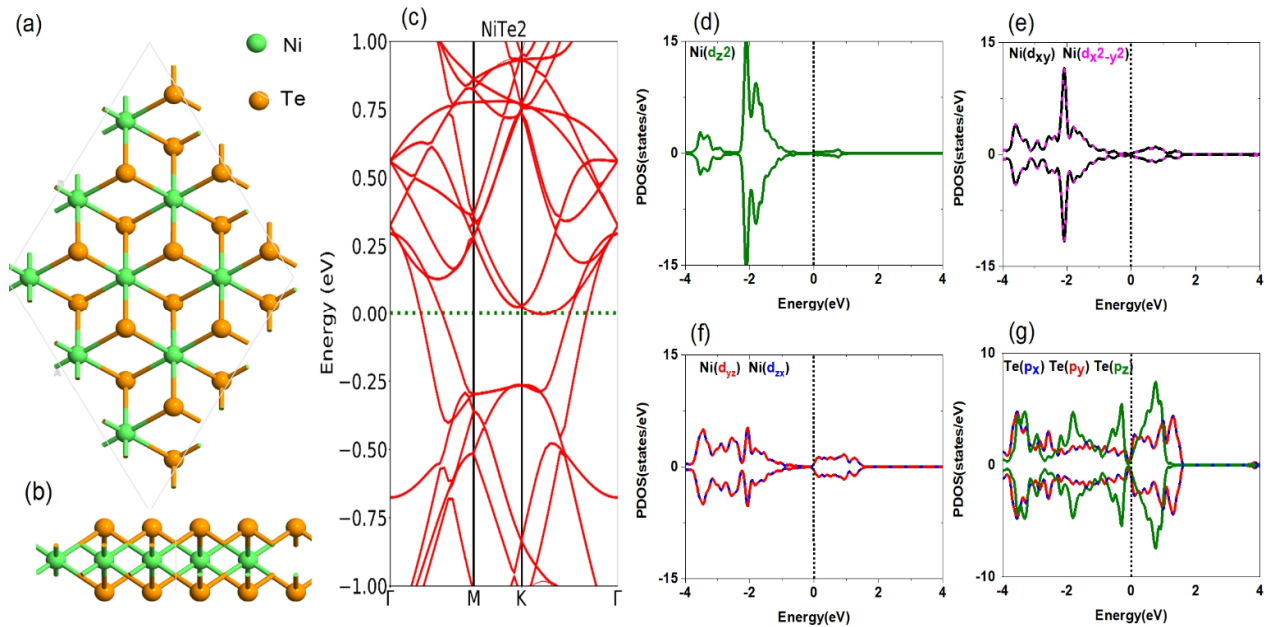
محاسبات

مطالعه اصول اولیه در چارچوب تئوری تابعی چگالی با استفاده از بسته شبیه سازی سیستا (VASP) انجام شد. موج تقویت شده پیش‌بینی شده (PAW) و تابع (PBE) Perdew-BurkeErnzerhof از تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) به ترتیب برای برهمکنش‌های الکترون-یون و پتانسیل تبادل-همبستگی

می‌شوند. محاسبات انجام شده نشان می‌دهد که دوپینگ فلزات واسطه V، Cr، Mn، و Fe روی ماده دو بعدی 1T-NiTe2 به ترتیب مقادیر مغناطش برابر با 2.745، 1.984، 2.473 و 0.833 μ_B تولید می‌کند. همچنین دوپینگ فلزات واسطه Zn، Cu، Ni، Co، Ti، Sc مقدار مغناطیسی در ساختار ایجاد نمی‌کند. برای بحث بیشتر خاصیت مغناطیسی سیستم 1T-NiTe2 دوپ شده از نمودار چگالی حالت اوربیتال 3d TM و اوربیتال Te-4p استفاده می‌کنیم. مطابق شکل 1(d-g) نمودار اسپین بالا و پایین چگالی حالت‌های 3d TM و Te-4p مربوط به سیستم 1T-NiTe2 اولیه دارای تقارن بوده و ساختار خاصیت مغناطیسی ندارد. در میدان کریستالی اوربیتال‌های 3d-TM به گونه‌ای شکسته می‌شوند که پنج اوربیتال 3d به دو تراز تبهگن دو تایی $e_{1g}(d_{xy}, d_{x^2-y^2})$ و $e_{2g}(d_{yz}, d_{zx})$ و یک تراز منفرد $(d_z^2 a_{1g})$ تبدیل می‌شوند [23]. با توجه به ارایش الکترونی $Ni(3d^8 4s^2)$ می‌توان پیش‌بینی کرد که در ساختار 1T-NiTe2 هر اتم نیکل شش الکترون در اختیار اتم تلورید قرار داده و چهار الکترون باقی مانده در ترازهای d اتم نیکل به نحوی جهت‌گیری اسپینی دارند که ساختار فاقد مغناطش می‌باشد. چنانچه از روی شکل پیداست تراز d_z^2 در پایین‌ترین سطح و دو تراز (d_{xy}, d_{zx}) بالاترین سطح انرژی قرار دارند. همچنین دو تراز $(d_{xy}, d_{x^2-y^2})$

بین دو سطح انرژی ترازهای فوق واقع شده اند. از این رو دو الکترون با اسپین‌های مخالف اوربیتال d_z^2 را اشغال می‌کنند و دو الکترون دیگر در اوربیتال‌های $(d_{xy}, d_{x^2-y^2})$ قرار می‌گیرند. ترازهای Te-p_x و Te-p_y در اثر میدان کریستالی در یک سطح انرژی دیده می‌شوند و برهم منطبق هستند در حالی که رفتار تراز Te-p_z متفاوت می‌باشد. شکل 1(c) نشان می‌دهد که سطح فرمی به‌وسیله نمودار اسپین‌های بالا و پایین قطع شده و ساختار رفتار فلزی دارد. در حالت دوپینگ فلزات (V, Cr, Mn, Fe)، قدرت برهم کنش اسپینی بر قدرت میدان کریستالی غلبه می‌کند و قرارگیری الکترون‌های این فلزات بر اساس مفهوم ساده ارایش الکترونی اتم نیکل قابل توجیه نیست. در حالتی که دوپینگ فلزات (V, Cr, Mn, Fe) 3d مغناطش در ساختار ایجاد می‌کنند نمودارهای اوربیتال‌های 3d و Te-p مطابق شکل 2 نشان داده است. با یک نگاه اجمالی به شکل 2(a-d) می‌توان دید که در اثر میدان کریستالی جدید نحوه شکسته شدن اوربیتال‌های 3d-TM مانند حالت بدون دوپینگ می‌باشد.

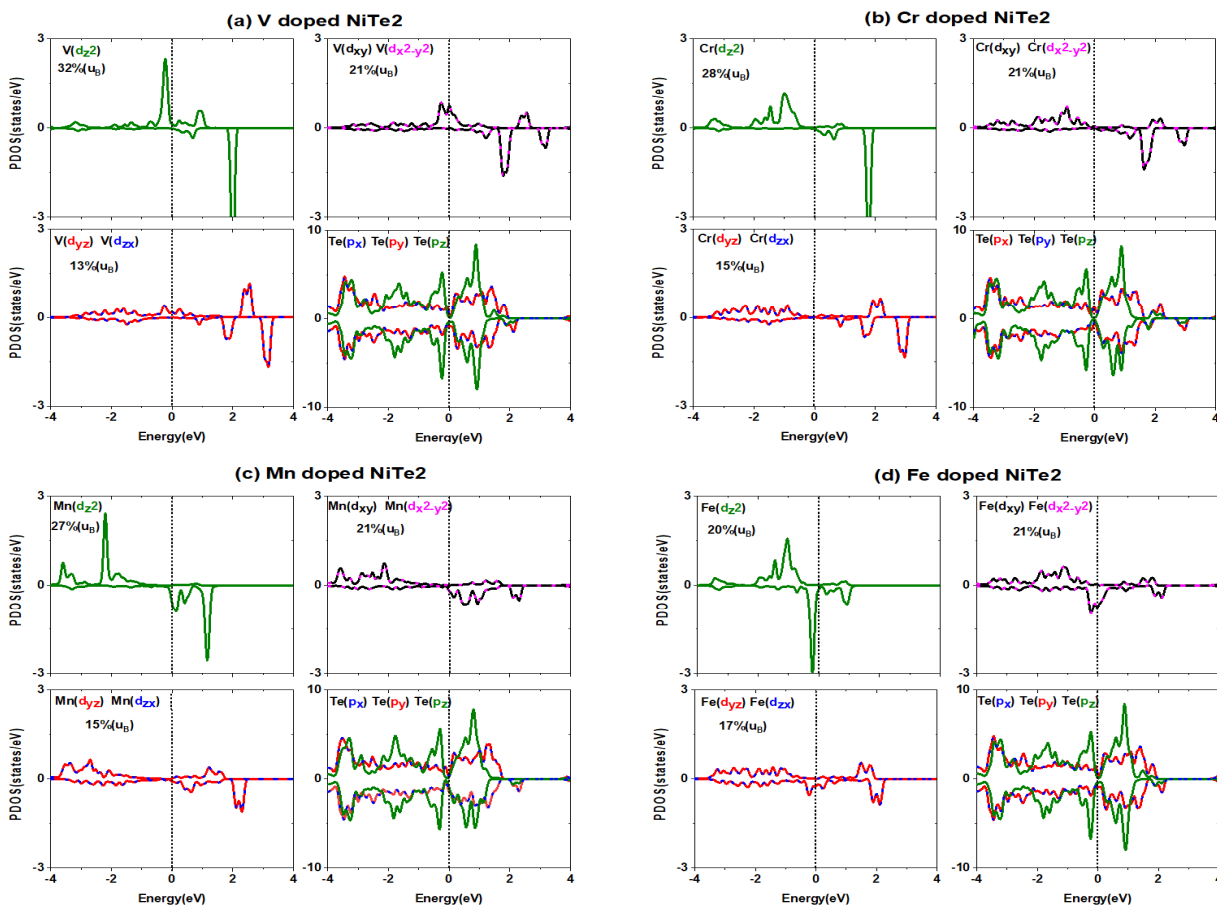
با دوپینگ فلز و انادیم هم الکترون‌های اوربیتال‌های V-3d و هم الکترون‌های اوربیتال‌های Ni-3d همسایه اول دارای جهت‌گیری یکسانی شده و به‌صورت اسپین بالا



شکل 1. (a) نمای روبه‌رو و (b) نمای جانبی از ساختار تک لایه 1T-NiTe2. (c) ساختار باند 1T-NiTe2 در حالت خالص. (d) نمودار چگالی حالت اوربیتال $Ni(d_z^2)$. (e) نمودار چگالی حالت اوربیتال‌های تبهگن $Ni(d_{xy})$ و $Ni(d_{x^2-y^2})$. (f) نمودار چگالی حالت اوربیتال‌های $Ni(d_{yz})$ و $Ni(d_{zx})$. (g) نمودار اوربیتال‌های $Te(p_x)$ ، $Te(p_y)$ ، $Te(p_z)$

سهام مغناطش هریک از اوربیتال‌های پنج گانه V-3d روی نمودار شکل 2(a) مشخص است. اوربیتال $V(d_z^2)$ تقریباً 32 درصد مقدار مغناطش 2.035 مگنتون بور را از آن

قرار می‌گیرند. اما اسپین الکترون‌های Te-p دارای اسپین پایین بوده و مقدار مغناطش کل ساختار را کاهش می‌دهد.



شکل 2. (a) نمودار چگالی حالت برای دوپینگ فلز V. (b) نمودار چگالی حالت برای دوپینگ فلز Cr. (c) نمودار چگالی حالت برای دوپینگ فلز Mn و (d) نمودار چگالی حالت برای دوپینگ فلز Fe.

خود می‌کند. اوربیتال $V(d_z^2(up))$ در ناحیه باند ظرفیت قرار دارد و اشغال شده است در حالی که اوربیتال

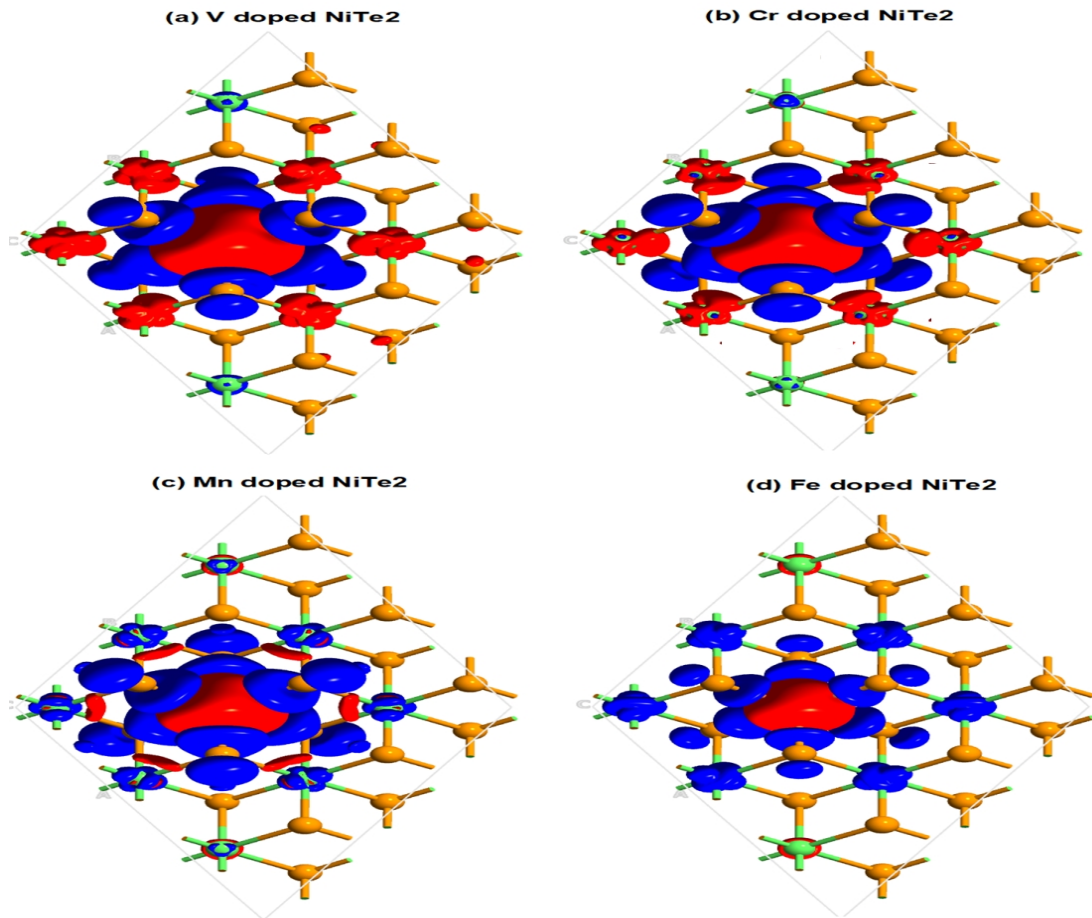
شکل 3(a) به خوبی نمودار چگالی اسپینی $(\rho = \rho(up) - \rho(down))$ ناشی از دوپینگ فلز وانادیوم را نشان می‌دهد.

جدول 1. مقدار مغناطش کل، مغناطش فلزات واسطه، مغناطش تلوریدهای همسایه اول فلزات واسطه، مغناطش اتم‌ها نیکل همسایه اول فلزات واسطه و همچنین طول پیوند در ساختار 1T-NiTe2 نشان داده شده است

	TM	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn
$M_{Tot}(u_B)$		0	0	1.98	2.74	2.47	0.83	0	0	0	0
$M_d(u_B)$		0	0	2.03	3.07	2.97	1.21	0	0	0	0
$M_{Te1}(u_B)$		0	0	-0.5	-0.66	-0.53	-0.15	0	0	0	0
$M_{Ni1}(u_B)$		0	0	0.31	0.17	-0.01	-0.16	0	0	0	0
$d_{Te-TM}(A^0)$		2.86	2.75	2.67	2.62	2.59	2.55	2.55	2.56	2.67	2.78

دوپینگ اتم Cr بیشترین مقدار مغناطش برابر با 2.745 μ_B در ساختار القا می کند که مطابق شکل 2(b) اوربیتال $Cr(d_z^2(up))$ دارای یک الکترون با مقدار مغناطش 1 μ_B می باشد. مقدار مغناطش باقیمانده 1.745 μ_B میان سایر اوربیتالها پخش می شود که سهم اوربیتالهای $Cr-d_{xy}$ و $Cr-d_{x^2-y^2}$ از اوربیتالهای Cr- d_{zx} و d_{yz} بیشتر است. هرچند که ساختار در حضور اتم Cr رسانا می باشد ولی هیچ یک از اوربیتالهای اتم Cr نقش اساسی در آن ندارند. چنانچه از شکل 2(b) پیداست اوربیتالهای $Te-p_x$ و $Te-p_y$ خاصیت رسانایی ساختار را با

$V(d_z^2(down))$ بالاتر از سطح فرمی واقع شده و کاملاً غیراشغال است. هریک از دو اوربیتال تهیگن d_{xy} و $d_{x^2-y^2}$ مقدار 21 درصد و در مجموع 42 درصد از کل مغناطش 2.035 مگنتون بور به خود اختصاص می دهند. کمترین مقدار مغناطش مربوط به اوربیتالهای d_{zx} و d_{yz} با مقدار تقریبی 0.52 مگنتون بور می باشد. با توجه به شکل 2(a) با دوپینگ V ساختار همچنان خاصیت فلزی خود را حفظ می کند که اوربیتالهای $Te-p$ ، $V-d_{xy}$ و $V-d_{x^2-y^2}$ با قطع نمودن سطح فرمی بیشترین نقش در رسانش ساختار 1T-NiTe₂ دارند.



شکل 3. (a) چگالی اسپینی ناشی از دوپینگ فلز V. (b) چگالی اسپینی ناشی از دوپینگ فلز Cr. (c) چگالی اسپینی ناشی از دوپینگ فلز دوپینگ فلز Mn و (d) چگالی اسپینی ناشی از دوپینگ فلز Fe

اتم‌های V و Cr با اوربیتال اتم‌های Ni براساس پدیده فرومغناطیس (FM) کوپل می‌شوند. در حالی اوربیتال‌های اتم S با اوربیتال‌های اتم‌های V و Cr کوپل انتی فرومغناطیس (AFM) دارند. عبارتی اتم‌های نیکل همسایه اول مقدار مغناطش کل را تقویت می‌بخشد در حالی که اتم‌های سولفور همسایه اول مقدار مغناطش کل را کاهش می‌دهند.

بحث و نتیجه‌گیری

دوپینگ جایگزینی یکی از تکنیک‌های حائز اهمیت در القای مغناطیسی مواد دو بعدی دی کالکوژنید می‌باشد. فلزات V، Cr، Mn و Fe به ترتیب مقادیر مغناطش 1.984، 2.745، 2.473 و 0.833 در ساختار 1T-NiTe₂ ایجاد می‌کنند. برای فلز وانادیوم که از تعداد الکترون کمتری در اوربیتال d برخوردار است نقش اوربیتال d_{z²} نسبت به سایر اوربیتال‌ها در مغناطش سیستم بارزتر می‌باشد. هر چقدر تعداد الکترون‌ها زیاد می‌شود، اوربیتال‌های d_{yz} و d_{xz} بیشتر در مغناطش سیستم سهیم می‌شوند به گونه‌ای که بیشترین سهم مربوط به اتم Fe می‌باشد. اتم Cr با اتم‌های نیکل مجاور رفتار فرومغناطیسی دارند به همین دلیل بیشترین مقدار مغناطش در سیستم القا می‌کنند. در حالی که اتم Fe با اتم‌های نیکل و تلورید مجاور هیبرید انتی فرومغناطیس دارند و برابند جهت‌گیری اسپین‌ها در راستای کاهش مغناطش می‌باشد. با دوپینگ فلزات 3d می‌توان مقدار مغناطش در ساختار 1T-NiTe₂ تنظیم کرد که اساس ساخت ترکیبات اسپینترونیکی می‌باشد.

قطع نمودن سطح فرمی حفظ می‌کنند. رفتار نمودار چگالی حالت ناشی از دوپینگ اتم Mn شکل 2(c) همانند نمودار چگالی حالت اتم‌های V و Cr می‌باشد که اوربیتال (Mn(d_{z²(up))) کاملاً اشغال شده است در حالی که اوربیتال (Mn(d_{z²(down))) در ناحیه بالاتر از سطح فرمی قرار دارد و خالی از الکترون می‌باشد. مطابق جدول 1 فلز Fe مقدار مغناطش 0.833μ_B در سیستم القا می‌کند که نسبت به فلزات V، Cr، و Mn به مراتب کمتر است. از روی شکل 2(b) می‌توان نتیجه گرفت که اوربیتال‌های (Fe(d_{z²(up))) و (Fe(d_{z²(down))) در زیر سطح فرمی قرار دارند و اسپین بالا و پایین اثر مغناطش همدیگر را کاهش می‌دهند. به همین دلیل اوربیتال (Fe(d_{z²)) نسبت به اتم‌های V، Cr، و Mn دارای سهم کمتری از مغناطش می‌باشد. اوربیتال‌های Fe-d_{xy} و Fe-d_{x²-y²} با قطع نمودن تراز فرمی نقش مهمی در انتقال الکترون از ناحیه ظرفیت به ناحیه رسانش دارند. با توجه به شکل 2(a-d)، نقش مغناطیسی اوربیتال‌های (Fe(d_{yz}), d_{zx}) از سه اتم دیگر بیشتر است. زیرا با افزایش عدد اتمی از چپ به راست جدول تناوبی، تعداد الکترون‌های اوربیتال‌ها نیز زیاد شده و احتمال اشغال اوربیتال‌های ترازهای بالاتر مانند d_{yz}, d_{zx} نیز زیادتر می‌شود.}}}}}

برای توضیح بیشتر و کامل‌تر تاثیر دوپینگ اتم‌های فوق می‌توان از شکل چگالی اسپینی 3 استفاده کرد. مطابق جدول 1 در هر چهار حالت مقدار مغناطش کل از مقدار مغناطش اتم TM کمتر می‌باشد. با توجه به جدول 1 و شکل 4(a-b) نتیجه می‌شود که گشتاور مغناطیسی اتم‌های نیکل و سولفور همسایه اول اتم‌های V و Cr در خلاف جهت هم قرار گرفته و پلاریزه می‌شوند. اوربیتال

References

- [1] P. Joensen, R. Frindt, and S. Morrison, Single-layer MoS₂, Mater. Res. Bull. 21, 457 (1986).
- [2] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim, Two-dimensional atomic crystals, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 102, 10451 (2005).
- [3] K.F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan, and T.F. Heinz, Atomically Thin MoS₂: A New Direct-Gap Semiconductor, Phys. Rev. Lett. 105, 136805 (2010).

- [4] J. N. Coleman, M. Lotya, A. O'Neill, S. D. Bergin, P. J. King, U.Khan, K. Young, A. Gaucher, S. De, R.J. Smith, I.V. Shvets, S. K. Arora, G. Stanton, H.-Y. Kim, K. Lee, G. T. Kim, G. S. Duesberg, T. Hallam, J. J. Boland, J. J. Wang, J. F. Donegan, J. C. Grunlan, G. Moriarty, A. Shmeliov, R. J. Nicholls, J. M. Perkins, E.M. Grieveson, K. Theuwissen, D.W. McComb, P.D. Nellist, and V. Nicolosi, Two-dimensional nanosheets produced by liquid exfoliation of layered materials, *Science* 331, 568 (2011).
- [5] C. Ataca, H. Sahin, and S. Ciraci, Stable, single-layer MoX₂ transition-metal oxides and dichalcogenides in a honeycomblike structure, *J. Phys. Chem. C* 116, 8983 (2012).
- [6] A. Splendiani, L. Sun, Y. Zhang, T. Li, J. Kim, C.-Y. Chim, G. Galli, and F. Wang, Emerging photoluminescence in monolayer MoS₂, *Nano Lett.* 10, 1271 (2010).
- [7] C. Ataca and S. Ciraci, Functionalization of single-layer MoS₂ honeycomb structures, *J. Phys. Chem. C* 115, 13303 (2011).
- [8] B. Radisavljevic, A. Radenovic, J. Brivio, V. Giacometti, and A. Kis, Single-layer MoS₂ transistors, *Nat. Nanotechnol.* 6, 147 (2011).
- [9] S. Cahangirov, C. Ataca, M. Topsakal, H. Sahin, and S. Ciraci, Frictional Figures of Merit for Single Layered Nanostructures, *Phys. Rev. Lett.* 108, 126103 (2012).
- [10] B. Hinnemann, P. G. Moses, J. Bonde, K. P. Jørgensen, J. H. Nielsen, S. Horch, I. Chorkendorff, and J. K. Nørskov, Biomimetic hydrogen evolution: MoS₂ nanoparticles as catalyst for hydrogen evolution, *J. Am. Chem. Soc.* 127, 5308 (2005).
- [11] M. Bernardi, M. Palummo, and J. C. Grossman, Extraordinary sunlight absorption and one nanometer thick photovoltaics using two-dimensional monolayer materials, *Nano Lett.* 13, 3664 (2013).
- [12] Ataca, C., Sahin, H., and Ciraci, S. 2012. Stable, Single-Layer MX₂ Transition-Metal Oxides and Dichalcogenides in a Honeycomb-Like Structure. *J. Phys. Chem. C* 116, 8983–8999.
- [13] Ch. Zhao, Ch.Jin, J. Wu, W. Ji., Magnetism in molybdenum disulphide monolayer with sulfur substituted by 3d transition metals. *J. Appl. Phys.* 120, 144305 (2016).
- [14] Cecil N.M. Oumaa, Kingsley O. Obodoa, Cemal Parlakb, George O. Amoloc., Effect of 3d transition metal substitutional dopants and adatoms on mono layer TcS₂ ab initio insights. *PhysicaE: Low-dimensional Systems and Nanostructures* 123, 114165 (2020).
- [15] M. Wu, X. Yao, Y. Hao, H. Dong, Y. Cheng et al., Electronic structures, magnetic properties and band alignments of 3d transition metal atoms doped monolayer MoS₂, *Physics Letters A*, S0375-9601(2017).
- [16] M. Benali Kanoun., Tuning magnetic properties of two-dimensional MoTe₂ monolayer by doping 3d transition metals: Insights from first principles calculation. *Journal of Alloys and Compounds*, S0925-8388(2018).
- [17] M. Gholami, Z. Golsanamlou & H. Rahimpour Soleimani., Effects of 3d transition metal impurities and vacancy defects on electronic and magnetic properties of pentagonal PdS₂: Competition between exchange splitting and crystal fields. *Scientific Reports*, 12: 10838, 2022.
- [18] Y. Zhang., Y.Zhao, Y. Xu, L. He., Tuning magnetic and optical properties of monolayer WSe₂ by doping C, N, P, O, S, F, and Cl: First principles study. *Solid State Communications* 327, 114233 (2021).
- [19] A.Ur Rahmana, H. Ullahc, M. Vermad, Sh. Khanc., Functionalization of monolayer-CdS by metal and non-metal

- elemental substitution: First-principle understanding. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 515, 16721 (2020).
- [20] M. Gholami, H. Rahimpour So-leimani., Magnetic and Electronic Properties of Pd₂S₄ Monolayer Dichal-cogenid under Doping of Atoms Adja-cent to Sulfur Atom. *BiQuarterly Jour-nal of Optoelectronic* (P 105-111) 2022.
- [21] J. P. Perdew, K. Burke and M. Ern-zerhof, *Phys. Rev. Lett* **77**, 3865–3868;(1996).
- [22] P. E. Blöchl, *Phys. Rev. B* **50**, 17953–17979;(1994).
- [23] M. Aras , ÇKılıç., Magnetic ground state in FeTe₂, VS₂, and NiTe₂ mono-layers: Antiparallel magnetic moments at chalcogen atoms. *PHYSICAL RE-VIEW B* 101, 054429 (2020).

COPYRIGHTS



© 2022 by the authors Licensee PNU, Tehran, Iran This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution 4 0 International (CC BY4 0) (<http://creativecommons.org/licenses/by/4 0>)