

عنوان مقاله:

خواص الکترونی، نوری و مغناطیسی تک لایه مولیبدن دی سولفید در حضور نقص های نقطه ای با استفاده از اصول اولیه

محل انتشار:

فصلنامه عصر برق، دوره 7، شماره 14 (سال: 1399)

تعداد صفحات اصل مقاله: 4

نویسنده:

خلاصه مقاله:

چکیده-این پژوهش به مطالعه در خصوص نقص های تهی جای مولیبدن دی سولفید تک لایه بر پایه اصول اولیه می پردازد. روش محاسبات اصول اولیه مبتنی بر تئوری تابعی چگالی (DFT) به مطالعه و بررسی ساختار الکترونی اتم ها، مولکول ها و جامدات می پردازد و روش دقیق و هوشمندانه ای برای جایگزینی مسائل چند ذره ای محسوب می شود. ابرسلول در نظر گرفته شده در این ساختار شامل ۳۶ اتم می باشد و از تقریب شیب تعمیم یافته برای پتانسیل تبادل-همبستگی استفاده شده است. مولیبدن دی سولفید تک لایه ذاتی دارای شکاف نوار مستقیم با انرژی ۸۲/۱ eV می باشد. وجود نقص در این ساختار منجر به تغییرات قابل توجهی در خواص الکترونیکی و مغناطیسی ماده می گردد. نتایج نشان می دهند حذف یک اتم مولیبدن و یا حذف یک اتم مولیبدن به همراه دو اتم گوگرد منجر به تغییر حالات اسپینی و مغناطیسی شدن ماده می گردد. به علاوه، حذف یک و دو اتم گوگرد منجر به انرژی شکاف نوری کمتر از حالت ذاتی می شود. با برداشتن یک اتم گوگرد اولین بیشینه قسمت موهمی تابع دی الکتریک در حوالی شکاف نوار رخ می دهد. حذف دو اتم گوگرد و یا یک اتم مولیبدن با یک اتم گوگرد نیز منجر به غیرمستقیم شدن شکاف نوار می گردد. مطالعه عیوب ساختاری می تواند فرصت های نوینی را برای رهیافت در خصوص رشد و سنتز نانومواد فراهم سازد.

کلمات کلیدی:

Dielectric function, transmission spectrum, magnetic, molybdenum disulfide, defect

تابع دی الکتریک، طیف انتقال، مغناطیسی، مولیبدن دی سولفید، نقص

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1229631>

