سیویلیکا – ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:

تاثیر نقص های نقطه ای بر خواص الکترونیکی و مغناطیسی تک لایه تنگستن دی سولفید مبتنی بر نظریه تابعی چگالی

محل انتشار:

فصلنامه کارافن, دوره 19, شماره 1 (سال: 1401)

تعداد صفحات اصل مقاله: 18

نویسندگان:

مریم نیری – استادیار، گروه مهندسی برق، واحد یزد، دانشگاه آزاد اسلامی، یزد، ایران.

حامد طاهری – دانشجوی دکتری، گروه مهندسی برق، دانشگاه فنی امام علی (ع)، دانشگاه فنی یزد، یزد، ایران.

خلاصه مقاله:

پژوهش حاضر به مطالعه تاثیر نقص های نقطه ای در ساختار تنگستن دی سولفید تک لایه با به کارگیری اصول اولیه می پردازد. این بررسی بر روی شش نقص تهی جای و به منظور بررسی تاثیرات آن ها بر خواص الکترونیکی و مغناطیسی WS۲ تک لایه انجام گرفته است. ساختاری که بررسی می گردد ابرسلولی با ۳۶ اتم است و موقعیت های اتمی نیز بهینه شدند. محاسبات نظریه تابعی چگالی در این مطالعه در چارچوب تقریب چگالی موضعی انجام شد. آنالیز ساختاری این ماده نشان می دهد تک لایه تنگستن دی سولفید دارای شکاف نوار مستقیم و برابر با ۸۹/۱ الکترون- ولت می باشد. نتایج شبیه سازی نشان می دهند بسته به نوع نقص های ایجاد شده در ساختار و موقعیت مکانی آن ها، رفتار ساختار می تواند از نیمه هادی به فلز و غیرمغناطیسی به مغناطیسی تغییر کند؛ برای مثال، حذف اتم تنگستن منجر به فلزی شدن ماده و مغناطیسی شدن ساختار می شود. همچنین، انرژی شکاف نوار WS۲ تک لایه در غیاب اتم گوگرد کاهش می یابد. علاوه بر این، گذاری از نیمه هادی مستقیم به غیرمستقیم و کاهش انرژی شکاف نوار نسبت به ساختار بدون نقص دیده می شود. این موارد بیانگر این موضوع است که وجود نقص در نانوساختارهای نیمه هادی راهی را برای کاربرد این گونه نانوساختارها در الکترونیک تنظیم پذیر، الکترونیک نوری و اسپینترونیک هموار می سازد.

کلمات کلیدی:

تنگستن دی سولفید, نانوالکترونیک, مغناطیسی, نقص, ساختار نوار

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/1740594