

عنوان مقاله:

بررسی تأثیر پیوندهای آویزان و اندازه بر پایداری و گاف انرژی نانوسیمهای فاز ورتسایت InAs با استفاده از روش شبهپتانسیل

محل انتشار:

اولین کنفرانس ملی نانو الکترونیک ایران (سال: 1391)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسندگان:

حمداله صالحی - آزمایشگاه ماده چگال محاسباتی، گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران،

صغری بهرامی ده توتی - آزمایشگاه ماده چگال محاسباتی، گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران،

خلاصه مقاله:

در این مقاله تأثیرات اندازه و پیوندهای آویزان بر پایداری و گاف انرژی نانوسیمهای فاز ورتسایت InAs بررسی شده است. محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی و به روش شبه پتانسیل توسط بسته نرم افزاری Espresso با تقریب LDA انجام شده است. با مقایسه انرژی تشکیل نانوسیمها، پایداری آنها مورد بررسی قرار گرفت. نتایج بدست آمده نشان می دهد با افزایش قطر، چگالی پیوندهای آویزان کمتر و پایداری نانوسیمها بیشتر میشود. همچنین مقدار گاف نواری برای حالت توده و نانوسیمها محاسبه شد. در قطره های کوچک با افزایش گاف مواجه هستیم، اما در قطره های بزرگتر روندی نزولی در گاف نواری دیده میشود و به مقدار گاف حالت توده همگرا میشود

کلمات کلیدی:

ایندیوم آرسناید، تابعی چگالی، شبهپتانسیل، نانوسیم

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/193256>

