

## عنوان مقاله:

بررسی خواص الکترونی نانولوله های کربنی تک دیواره و دو دیواره

## محل انتشار:

دومین همایش دانشجویی فناوری نانو (سال: 1386)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

## نویسندگان:

رستم مرادیان - گروه فیزیک دانشگاه رازی ، دانشک

سام آزادی - گروه فیزیک دانشگاه رازی ، دانشکده علوم ، کرمانشاه، مرکز تحقیقات علوم

## خلاصه مقاله:

با استفاده از روش محاسبات آغازین و تقریب تابع چگالی ، خواص الکترونی نانو تیوب کربنی تک دیواره و دو دیواره مورد بررسی قرار گرفته است . در حالت نانو تیوب کربنی تک دیواره ، اثر تزریق ناخالصی بورون و نیتروژن ، در درصدهای مختلف ، بر روی گاف انرژی کربن نانو تیوب زیگزاگ ( ) 10,0 بررسی شده است. چگالی حالات و تغییرات گاف انرژی برای تزریق ناخالصی در درصدهای مختلف محاسبه و رسم شده است . در نانو تیوبهای کربنی دو لایه ، اثرات ناشی از برهمکنش بین لایه ها در خواص الکترونی نانو لوله های کربنی دو دیواره مورد بررسی قرار گرفته است . برای این منظور نانو لوله های کربنی دو دیواره بر حسب فلز و یا نیمرسانا بودن نانو لوله داخلی و خارجی به چهار گروه تقسیم شده است : فلز - فلز ، فلز - نیمرسانا ، نیمرسانا - فلز و نیمرسانا - نیمرسانا . برای تمام حالات ساختار باندی و چگالی حالات جایگزیده برای لایه داخلی و خارجی محاسبه و رسم شده است . برای بررسی اثرات ناشی از برهمکنش بین لایه ها نانو لوله های با قطر های مختلف در نظر گرفته شده است.

## کلمات کلیدی:

تئوری تقریب تابع چگالی ، نانو لوله های کربنی دو دیواره ، نانو لوله های کربنی تک دیواره ، چگالی حالات ، ساختار باندی

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/23015>

