

عنوان مقاله:

بررسی اثر ناخالصی اتم آهن بر روی خواص الکترونی و مغناطیسی نانو ورقه های نیتريد آلومینیوم با استفاده از نظریه تابع چگالی

محل انتشار:

دومین همایش ملی فناوری نانو از تئوری تا کاربرد (سال: 1392)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسندگان:

یادگار سعیدی - دانشجوی کارشناسی ارشد فیزیک، گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد ارومیه

هاله کنگرلو - استادیار، گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی واحد ارومیه

خلاصه مقاله:

در این مقاله محاسبات اولیه مربوط به اثر ناخالصی اتم آهن بر روی خواص الکترونی و مغناطیسی نانو ورقه های نیتريد آلومینیوم خالص انجام شد. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت تقویت شده با پتانسیل کامل در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با بکارگیری نرم افزار WIEN2K صورت گرفته است. بعد از بهینه کردن طول پیوند و اندازه زوایای بین اتم های ساختار، محاسبات مربوط به ساختار نواری، چگالی حالات، گشتاور مغناطیسی و قطبش اسپینی را انجام دادیم و نتیجه گرفتیم با وارد نمودن اتم آهن به جای آلومینیوم، نانو ورقه های نیتريد آلومینیوم از یک نیمه رسانای غیرمغناطیسی به شبه فلزی با گشتاور مغناطیسی در حدود ۵ مگنتون بور تبدیل شدند که تاثیر حضور آهن در ایجاد اثرات مغناطیسی نظیر برهمکنش اسپین مدار و ایجاد تغییر در رفتارهای الکترونی عامل اصلی بوده است.

کلمات کلیدی:

نظریه تابعی چگالی، ساختار نواری، چگالی حالات و قطبش اسپینی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/289049>

