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

عنوان مقاله:
بررسی خواص ساختاری و الکترونی نانو ورقه وانبوهه ی CoSi2 با استفاده از نظریه تابعی چگالی

محل انتشار:
سومین همایش ملی فناوری نانو از تئوری تا کاربرد (سال: 1393)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:
زینب خاقانی اصل - *استان خوزستان شهرستان بهبهان*

فرامرز کنجوری - *دانشکده فیزیک دانشگاه خوارزمی، کرج*

خلاصه مقاله:
در این مقاله خواص الکترونی نانو ورقه وانبوهه ی CoSi2 مورد بررسی قرار گرفته است.محاسبات،بر پایه نظریه تابعی چگالی (DFT) و با استفاده روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در تقریب GGA انجام شده است.برای انجام محاسبات از کد محاسباتی WIEN2K استفاده شده است.آنالیز ساختار نواری وچگالی حالت برای نانو ورقه وانبوهه CoSi2 نشان می دهد که این ترکیب در تقریب GGA و mbj یک فلز با گاف صفر است.

کلمات کلیدی:
خواص الکترونی- نانو ورقه ی - CoSi2 انبوهه ی - CoSi2 ساختار نواری چگالی حالت

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/391250