

عنوان مقاله:

شبیه سازی و بررسی ساختارهای مختلف نانولوله های کربنی تک دیواره به کمک VASP

محل انتشار:

دومین کنفرانس ملی توسعه دانش بنیان صنایع نفت، گاز و پتروشیمی و ششمین کنفرانس روز مهندسی پتروشیمی بندر امام (سال: 1394)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسندگان:

هادی انصاف - دانشکده فیزیک، دانشگاه علمی کاربردی شیراز،

وحید دادمهر - دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهراء، تهران

محمدرضا میرزایی - دانشکده فیزیک، دانشگاه علمی کاربردی شیراز

محمدرضا طلوع - دانشکده فیزیک، دانشگاه علمی کاربردی شیراز

خلاصه مقاله:

ساختار الکترونی نانولوله های کربنی بوسیله رشتهایی از نوارها که از شرایط مرزی بر روی محیط نانولوله وجود دارد مشخص می شود که به قطر و کایرالیستی نانولوله وابسته است. در این مقاله به کمک بسته نرم افزاری VASP که نرم افزاری پیچیده است و براساس روش- های APW، شبه پتانسیل و DFT کار میکند. ساختار نواری و چگالی حالات نانولوله های کربنی تک دیواره را مورد بررسی قرار داده و با روشهای دیگر از جمله تقریب منطقه تا شده مقایسه میشود. نرم افزار VASP نشان میدهد که برخی از نانولوله های زیگ-زاگ که تاکنون نیمه رسانا بودند به صورت فلزی عمل میکنند و برخی از نانولوله هایی که خاصیت فلزی دارند، در حقیقت نیمه رساناهایی با گاف باریک هستند.

کلمات کلیدی:

نانولوله های کربنی، نظریه تابعی چگالی، VASP

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/403067>

