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

عنوان مقاله:
بررسی تاثیر آلائیدگی آمونیاک بر خواص اپتوالکترونی نانوسیم کربنی اشباع شده با استفاده از نظریهی تابعی چگالی

محل انتشار:
سیزدهمین همایش علمی دانشجویی مهندسی مواد و متالورژی ایران (سال: 1395)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:
سیدمصطفی منوری - *دانشجوی کارشناسی ارشد فیزیک ماده چگال*

فرح مرصوصی - *استادیار و عضو هیئت علمی دانشگاه صنعتی امیرکبیر*

خلاصه مقاله:
در این پژوهش تاثیر آلائیدگی با مولکول آمونیاکNH3 بر خواص اپتوالکترونی نانوسیم کربنی با ساختار الماسی اشباع شده با هیدروژن DNw:H بررسی شده است. این بررسی به روش نظریهی تابعی چگالی و حل معادلات بسذرهای کوهن-شم با رهیافت میدان خودسازگار SCF و تقریب چگالی موضعیLDA انجام شده است. مورفولوژی نانوسیم الماس از نوع استوانهای با قطر مقطع nm0/88 و جهتگیری رشد در جهت صفحهی) 100 (انتخاب شده است. نتایج محاسبات نشان میدهد گاف اپتیکی نانوسیم الماس اشباع شده با هیدروژن به علت بالابودن نسبت سطح به حجم و به وجود آمدن ترازهای سطحی میان گاف اپتیکی، به میزان 2/71 نسبت به گاف اپتیکی الماس حجیم کاهش یافته است. همچنین افزودن مولکول آمونیاک به یکی از اتمهای کربن سطح جانبی نانوسیم الماس اشباع شده با هیدروژن، منجر به رسانا) شدن نانوسیم شده است. بعلاوه اثر افزایش مولکولهای آمونیاک بر خواص اپتوالکترونی نانوسیم الماس رشد یافته در جهت صفحهی) 100 بررسی گردید. طی این بررسی مشخص شد گاف اپتیکی و چگالی حالات الکترونی نانوسیم با افزایش تعداد مولکولهای آمونیاک به میزان دو و سه برابر حالت اولیه)یک مولکول آلائی(کاهش مییابد، به گونهای که تغییرات گاف اپتیکی از مرتبه دهم الکترون ولت است. علت این امر افزایش اندازهی ابر سلول و به تبع آن افزایش اثر حصر کوانتومی است

کلمات کلیدی:
آلائی، مولکول آمونیاک، نانوسیم الماس، نظریهی تابعی چگالی، گاف اپتیکی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/557820