

## عنوان مقاله:

بررسی خاصیت نیمه فلزی سطوح نانو ساختارهای Ca 001 و As 001 در ساختار بلند روی

## محل انتشار:

کنفرانس ملی نانو ساختارها، علوم و مهندسی نانو (سال: 1395)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

## نویسندگان:

محمد رضا ثالثی - گروه فیزیک ، واحد شهرضا ، دانشگاه آزاد اسلامی ، شهرضا ، ایران،

فرزاد احمدیان - گروه فیزیک ، واحد شهرضا ، دانشگاه آزاد اسلامی ، شهرضا ، ایران

## خلاصه مقاله:

در این مطالعه خواص الکترونی و مغناطیسی ترکیب CaAs در حالت کپه ای و سطوح 001 و Ca و 001 As در ساختار بلند روی در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با روش FPLAPW+lo مطالعه شده است. ترکیب CaAs در حالت کپه ای در ساختار بلند روی از خاصیت نیمه فلزی برخوردار است وگاف نیم فلزی در این ترکیب برابر 0/50 eV است. همچنین گشتاور مغناطیسی این ترکیب عدد صحیح 1/00 B $\mu$  است و از قانون B  $\mu$  (فرمول در متن اصلی مقاله) پیروی می کند. سطوح ختم به Ca 001 و As 001 هر دو خاصیت نیمه فلزی خود را حفظ می کنند.

## کلمات کلیدی:

نظریه تابعی چگالی، روش FPLAPW+lo

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/651942>

