

عنوان مقاله:

مطالعه نظری تابع دی الکتریک و گذارهای اپتیکی در نانو لوله کربنی زیگزاگ (10.0)

محل انتشار:

شانزدهمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران (سال: 1388)

تعداد صفحات اصل مقاله: 4

نویسندگان:

طیبه مولاروی - گروه فیزیک (آزمایشگاه مواد و الکتروسرامیک) دانشگاه فردوسی مشهد گروه فی

احمد کمپانی - گروه فیزیک (آزمایشگاه مواد و الکتروسرامیک) دانشگاه فردوسی مشهد

سیدمحمد حسینی - گروه فیزیک (آزمایشگاه مواد و الکتروسرامیک) دانشگاه فردوسی مشهد

Claudia Ambrosch-Draxl - دانشگاه لئوبن، اتریش

خلاصه مقاله:

در این مقاله ساختار الکترونی تابع دی الکتریک و گذارهای اپتیکی نانولوله کربنی زیگزاگ (0.10) به کمک نظریه تابعی چگالی و با استفاده از اصول اولیه مطالعه شده است. ساختار نواری محاسبه شده این نانولوله نشان می دهد که نانولوله کربنی (10.0) نیمرسانا و دارای گاف انرژی مستقیم در حدود 0.71eV در نقطه r است. توابع اپتیکی نانولوله کربنی (10.0) برای هر دو راستای میدان اعمالی موازی و عمودی با محور نانولوله محاسبه شده است. تابع دی الکتریک ناهمسانگرد و در راستای میدان اعمالی موازی دارای مقدار بیشتری نسبت به میدان اعمالی عمودی است. مقدار ثابت دی الکتریک در حالت قطبش موازی $16/2$ و در قطبش عمودی $5/55$ بدست آمده است. اولین، دومین، سومین و چهارمین گذارهای اپتیکی نانولوله کربنی (10.0) به ترتیب در انرژیهای $0/72$ و $2/1$ و $2/4$ و 3eV رخ می دهد. مقدار گاف اپتیکی محاسبه شده در راستای میدان اعمالی عمودی حدود $1/2\text{eV}$ بدست آمد. که بیشتر از گاف اپتیکی محاسبه شده در راستای قطبش موازی $0/72\text{eV}$ است.

کلمات کلیدی:

نانولوله کربنی (10.0)، نظریه تابعی چگالی، گذارهای اپتیکی، تابع دی الکتریک

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/73627>

