

عنوان مقاله:

خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله سیلیکون کارباید (4,4) آلاینده با عناصر واسطه

محل انتشار:

ششمین همایش ملی فناوری نانو از تئوری تا کاربرد (سال: 1396)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:

زهرا افشون - دانشکده فیزیک مهندسی هسته ای، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود

طیبه مولاری - دانشکده فیزیک مهندسی هسته ای، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود

خلاصه مقاله:

در این مقاله خواص الکترونی و مغناطیسی نانولوله سیلیکون کارباید دسته صندلی (4,4) در حالت های خالص و آلاینده با عناصر واسطه Sc,Ti,V,Cr,Mn,Fe,Co,Ni,Cu به کمک نظریه تابعی چگالی بررسی شده است. گشتاور مغناطیسی کل و سهم گشتاور مغناطیسی جزئی هر یک از اتم ها در ساختار محاسبه شده است. نتایج به دست آمده نشان می دهد که نانو لوله سیلیکون کارباید در حالت خالص قطبش اسپینی ندارد و نیم رسانای غیر مغناطیسی است، اما با آلاینده دادن نانولوله با عناصر واسطه می تواند خاصیت مغناطیسی پیدا کند. ضمناً پایداری نانو لوله سیلیکون کارباید بعد از آلاینده با فلزات واسطه افزایش پیدا کرده است.

کلمات کلیدی:

عناصر واسطه، نظریه ی تابعی چگالی، گشتاور مغناطیسی کل، قطبش اسپینی، نانولوله ی سیلیکون کارباید

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/773953>

