

عنوان مقاله:

مطالعه ابتدا به ساکن جذب اتم رودیوم بر روی نانولوله کربنی تک دیواره (8و0)

محل انتشار:

سومین کنفرانس ملی فناوری در مهندسی برق و کامپیوتر (سال: 1397)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسنده:

زهرا کرمی هرستانی - استادیار، گروه مهندسی برق، واحد شیراز، دانشگاه آزاد اسلامی، شیراز، ایران

خلاصه مقاله:

اتم رودیوم در فاصله تعادلی 1,98 آنگستروم از دیواره نانولوله و در موقعیت Bridge بر روی نانولوله 0,8 جذب میشود. جذب این اتم بر روی نانولوله، فرایندی خود به خودی (گرماده) با انرژی جذب 0,88 eV است و موجب ایجاد مغناطش در ساختار غیرمغناطیسی نانولوله کربنی میگردد. بنابراین میتوان از آن در ساخت نانواهنرپاها استفاده نمود. جذب اتم رودیوم موجب تغییرات قابل ملاحظه ای در ساختار نواری نانولوله میشود به طوری که علاوه بر جدا نمودن حالت‌های تبهگن موجب کاهش گاف نانولوله کربنی از مقدار 0,58 به 0,4 eV میشود. جذب اتم رودیوم موجب میشود تا پیوند کربن-کربن مجاور آن ضعیف شود که نتیجه آن کاهش چگالی بار بین دو کربن نسبت به حالت قبل از جذب و ایجاد دوقطبی بین این اتمها و کربنهای مجاور آنها است. دو قطبی ایجاد شده موجب ایجاد دوقطبی حول اتم رودیوم میشود. بررسی میزان بار اتم رودیوم بعد از جذب نشان میدهد که بار کل اتم رودیوم نسبت به حالت آزاد به میزان 0/22 بار واحد الکترون کم شده است. محاسبه تابع کار نانولوله کربنی قبل و بعد از جذب اتم رودیوم حاکی از کاهش آن به میزان 0,15eV است.

کلمات کلیدی:

نظریه تابعی چگالی، نانولوله کربنی 0,8، اتم رودیوم

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/790022>

