بررسی خواص ساختاری و الکترونی چگالی تابعی نظریه از استفاده با CO2MnSi

الهام امین برزگر *,آقای دکتر سید جواد موسوی,

1397-8-2

چکیده امروزه بصورت گسترده ای استفاده از خواص ساختاری و الکترونی موادی چون نیمه فلزات، بصورت تجربی و نظری مورد مطالعه قرار گرفته است. نیمه فلزات مواد فرو مغناطیسی هستند که در یک جهت اسپینی مانند فلز و در جهت اسپینی دیگر نیز مانند نیم فلز رفتار می کنند.در این بین، آلیاژهای هویسلر از جمله موادی هستند که خاصیت نیم فلزی برای آنها با استفاده از محاسبات تجربی پیش بینی می شود. هدف اصلی این پایان نامه مطالعه و بررسی ساختار ی و الکترونی آلیاژ تمام هویسلر C02MnSi است. برای این کار از روش تئوری تابعی چگالی استفاده شده است که یکی از قویترین روشهای حل یک دستگاه N الکترونی به شمار می آید. در آلیاژ تمام هویسلر C02MnSi بررسی محاسبات ساختاری و الکترونی با استفاده از نرم افزار متریال استدیو صورت گرفته و نتایج بدست آمده به کمک تقریبهای حاصل از LDAوGGA و U LDA نیز با نتایج تجربی موجود مقایسه شده است.در این بین نمودار چگالی حالت الکترونی به کمک تقریب U LDA در حالت اسپین پایین گاف نواری را ایجاد نمود که به مقدار تجربی بسیار نزدیک بوده و نشانگر خاصیت نیمه فلزی آلیاژ C02MnSi است.

کلمات کلیدی : کلید واژه ها: نظریه تابعی چگالی، نیمه فلزات، آلیاژ های هویسلر، studio Material

Islamic Azad University, Rasht Branch - Thesis Database
دانشگاه آزاد اسلامی واحد رشت - سامانه بانک اطلاعات پایان نامه ها