سیویلیکا – ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

## عنوان مقاله:

مطالعه ساختار، ویژگی های الکترونی و پایداری نانو صفحه ی دوبعدی C۶N۷ و مقایسه آن با سیلیکون کاربید بر اساض نظریه تابعی چگالی

## محل انتشار:

دومین کنفرانس بین المللی تحقیقات پیشرو دانشجویان نانو فناوری (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

## نویسنده:

حمیدرضا پوست فروشان – گروه فیزیک دانشگاه تربیت دبیر شهید رجایی، تهران، ایران

## خلاصه مقاله:

نانوساختارهای دو بعدی امروزه کاربردهای گسترده ای در زمینه ای مختلفی مانند نانو الکترونیک پیدا کرده اند. مهندسی گاف انرژی این نانو ساختارها و همچنین مطالعه خواص الکترونیکی و پایداری مواد دو بعدی دیگر مورد توجه بسیاری قرار گرفته است. در این مطالعه که بر پایه نظریه تابعی چگالی است ساختار اتمی و خواص الکترونی نانو صفحه ی C۶N۷ مورد بررسی قرار گرفته است. برای بررسی پایداری این ساختار انرژی بستگی آن محاسبه گردیده و با انرژی بستگی سیلیکون کاربید مقایسه شده است. سیلیکون کاربید یک نیم رسانا با گاف انرژی زیاد است که در ساخت وسایل الکترونیکی و همچنین بستری برای رشد و سنتز مواد دیگر کاربرد دارد و دارای ساختاری پایدار حتی در دماهای بالا است. برای بررسی خواص الکترونیکی نانو صفحه ی C۶N۷ ساختار نوار الکترونی و چگالی حالات آن محاسبه شده است و براساس داده های به دست آمده، گاف انرژی نانو صفحه ی C۶N۷ محاسبه شده است. با مقایسه گاف انرژی، C۶N۷ با سیلیکون کاربید، رسانایی الکتریکی این دو صفحه با یکدیگر مقایسه شده است. نتایج نشان می دهد نانوصفحه C۶N۷ دارای انرژی بستگی منفی است و از پایداری خوبی برخوردار است ولی در مقایسه با سیلیکون کاربید دارای پایداری کمتری است. همچنین نانو صفحه ی C۶N۷ دارای گاف انرژی غیر صفر است و یک نیم رسانا است و در مقایسه با سیلیکون کاربید از رسانایی الکتریکی بیشتری برخوردار است.

## کلمات کلیدی:

صفحات نیترید ربن، نانو صفحه C۶N۷، خواص الکترونی، نظریه تابعی چگالی، گاف انرژی، سیلیکون کاربید

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/1861722