

عنوان مقاله:

مطالعه نانوخوشه های سیلیکان بوسیله روش مونت کارلوی پخشی

محل انتشار:

کنفرانس فیزیک ایران 1386 (سال: 1386)

تعداد صفحات اصل مقاله: 4

نویسندگان:

لیلا اسماعیلی سرشکی - گروه فیزیک دانشگاه الزهراء، تهران

رضا ثابت داریانی - دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران؛ تهران

افشین نمیرانیان - دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران؛ تهران، پژوهشکده نانو، پژوه

خلاصه مقاله:

این مقاله به مطالعه نانوخوشه های سیلیکان بوسیله روش مونت کارلوی پخشی پرداخته است . در این روش مدل ساده ای از نانوخوشه ها به صورت تعریف شرایط مرزی کره، مکعب و بیضی گون غیر قابل نفوذ در نظر گرفته شده است . انرژی و طول پیوند تعداد مشخصی اتم سیلیکان (کمتر از ده اتم) بدون در نظر گرفتن الکترونها، در محاسبه شده اند . انرژی پیوند در جعبه کروی کمتر است در نتیجه Tersoff جعبه های کروی، مکعب و بیضی گون با حجمهای مساوی و با در نظر گرفتن پتانسیل تجربی می توان ادعا کرد این سیستمها متمایل به شکل گیری با تقارن کروی هستند . همچنین در مطالعه تاثیر فشار روی طول پیوند برای Si 4 با کاهش حجم طول پیوند نیز کاهش یافت .

کلمات کلیدی:

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/22517>

