استمارة مستخلصات رسائل و أطاريح الماجستير والدكتوراه في جامعة البصرة

الكلية: كلية التربية للعلوم الصرفة

أسم الطالب: عمار عبد الجبار كاظم

القسم: الفيزياء

أسم المشرف: أ.د. جبار منصور خلف

التخصص: فيزياء المادة المكثفة

الشهادة: الماجستير

عنوان الرسالة أو الاطروحة:

دراسة نظرية للتركيب الالكتروني والخواص المغناطيسية الحجمية (Bulk) والسطحية (Surface) لسبيكة رباعي هيوسلر CoXMnSi (X:Nb,Ru)

ملخص الرسالة او الاطروحة:

باستخدام حسابات المبادئ الاولى وبالاستناد الى نظرية الكثافة الوظيفية، تمت دراسة التركيب الإلكتروني والخصائص المغناطيسية والخاصية نصف المعدنية في الحجم و السطح (001) لسبيكة هيوسلر الرباعية CoNbMnSi, و السطوح (111) و (110) و (001) والحدود الفاصلة مع CdS (111) لسبيكة هيوسلر الرباعية CoRuMnSi. بالنسبة للحجم، يُظهر المركب CoNbMnSi الخاصية نصف المعدنية مع فجوة حزمة تبلغ 0.5 eV في البرم باتجاه الاسفل عند ثابت شبيكة التوازن Å 5.88. عند ثابت الشبيكة نفسه عند الاتزان، الخاصية نصف المعدنية المثبتة في الحجم CoNbMnSi, تكون محطمة عند نهايتي السطوح والسطوح الثانوية -NbSi و -MnCo. تظهر الحسابات بأن الخاصية نصف المعدنية تكون محفوظة في السطح والسطح الثانوي (111) المنتهي بـ Si, في حين أن الخاصية نصف المعدنية المبرهنة في الحجم CoRuMnSi, تكون محطمة عند السطوح والسطوح الثانوية (111) المنتهية بـ Co و Ru و Mn. للحد الفاصل CoRuMnSi / CdS (111)، الخاصية النصف معنية للحجم تكون محطمة في الهيئتين Si-Cd وSi-S.

College: College of Education for Pure Sciences

Name of student: Ammar Abduljabar Kahdim

Dep: Physics

Name of supervisor: Prof. Dr. Jabbar Mansoor Khalaf

Certificate: Master of Condensed Matter Physics

Title of thesis:

The study of the theory for electronic and magnetic properties of bulk and surface of the quaternary Heusler alloy CoXMnSi (X:Nb,Ru)

Abstract of thesis:

Using first-principles calculations based on density-functional theory, has been studied the electronic structures, magnetic properties, and half-metallicity in the bulk and (001) surface of quaternary Heusler alloy CoNbMnSi, and The (111), (110) and (001) surfaces and the interfaces with CdS (111) substrate of the quaternary Heusler alloy CoRuMnSi. For the bulk, the CoNbMnSi compound shows half-metallicity with a band gap of 0.5 eV in the down-spin direction at a equilibrium lattice constant of 5.88 Å. At a similar equilibrium lattice constant, the half-metallicity confirmed in the bulk CoNbMnSi, is ruined at both NbSi- and MnCo-terminated (001) surfaces and subsurfaces. The calculations exhibit that the half metallicity can be preserved for the Si-terminated (111) surface and subsurface, while the half-metallicity approved in the bulk CoRuMnSi, is destroyed at Co, Ru, and Mn-terminations (111) surfaces and subsurfaces. Regrettably, the surface states ruin the gap in the spin-down channel at both MnSi- and CoRu-terminated (001) surfaces and subsurfaces.. For the interface of CoRuMnSi/CdS (111), the bulk half-metallicity is destroyed at Si-Cd and Si-S configurations.