استمارة مستخلصات رسائل واطاريح الماجستير والدكتوراه في جامعة البصرة

الكلية : التربية للعلوم الصرفة | اسم الطالب : نهاية هادي عبد الوهاب

القسم : الفيزياء | اسم المشرف: د. جبار منصور خلف

التخصص : فيزياء المادة المكثفة | الشهادة : الماجستير

عنوان الرسالة او الاطروحة : دراسة نظرية للخواص الالكترونية والمغناطيسية للحجم والسطح للمركبات MBi (M=V, Cr, Mn) والحد الفاصل MnBi/HgTe.

ملخص الرسالة او الاطروحة : قدمنا في هذه الدراسة باستخدام حسابات المبادئ الأولية، توضيحات مهمة حول الخصائص الالكترونية والمغناطيسية لحجم المركبات MBi (M= V, Cr, Mn) والسطوح(001), (110) و(111) لـ ZB-MnBi والحدود الفاصلة لـ (111),(001), (110) MnBi/HgTe. في حالة الحجم، هذه المركبات MBi (M=V, Cr, Mn) إنصاف معادن فيرومغناطيسية مع فجوات طاقة (فجوات نصف المعدن) تساوي 1.27(0.37 eV) على التوالي في حالة البرم باتجاه الأسفل عند ثوابت الشبيكة (6.412, 6.37, 6.421 Å) على التوالي. العزوم المغناطيسية الكلية المحسوبة لهذه المركبات 4,3,2μ_B على التوالي وفقا لقواعد سليتر-باولنك. إذا توضح النتائج إن الصفة النصف معدنية المثبتة في الحجم ZB-MnBi يكون محفوظ للسطوح المعتبرة هنا ماعدا السطوح (001) المنتهي بالنهاية Bi و(111) المنتهي بالنهاية Mn. علاوة على ذلك، وجدنا بان برم العزوم المغناطيسية عند السطوح (001), (110), (111) يزداد مقارنة مع الحجم ZB-MnBi، بينما يتناقص عند السطوح الثانوية (001), (110) و(111). فضلاً عن ذلك، حسبنا طاقة الالتصاق ووجد بأنها أكثر استقراراً في الحد الفاصل. كذلك وجدنا بان الهيئة Bi-Te (001) تكون أكثر استقراراً بين الهيئات المحتملة للحد الفاصل MnBi/HgTe (001). وللأسف الشديد، تظهر هيئات الحد الفاصل أن الصفة النصف معدنية المثبتة في الحجم ZB- MnBi قد تحطم عند جميع هيئات الحد الفاصل المحتملة.

College : Education for Pure Sciences | **Name of student :** Nihaya H. Abdul-Wahhab

Dept : Physics | Name of supervisor: Jabbar Mansoor Khalaf

Certificate : MSC | Specialization : Condensed Matter Physics

Title of thesis : A Theoretical Study of electronic and magnetic properties of the bulk and surface of compounds MBi (M= V, Cr, Mn) and the interfaces of MnBi/HgTe

Absract of thesis : In this study, important illustrations about the first-principle calculations of structural, electronic and magnetic properties of the bulk MBi (M= V, Cr, Mn) on surfaces (111), (110), and (001) of zinc-blende (ZB) manganese bismuth and the MnBi/HgTe (001), (110) and (111) interfaces is undertaken. In case of the bulk, the compounds MBi (M= V, Cr, Mn) half-metallicity with an energy gaps (half metallic gaps) equal (1.28 (0.43), 1.47 (0.43), 1.27 eV (0.37 eV)) respectively in the minority-spin direction at the equilibrium lattice constants of (6.412, 6.37, 6.421 Å) respectively Calculated total magnetic moments of 4, 3, 2μ_B follow the Slater-Pauling rule quite well. The results show that the half-metallicity of this bulk ZB-MnBi is well preserved on the surfaces considered here except for the Biterminated (001) and Mn-terminated (111) surfaces. Moreover, we find that the spin magnetic moments at the (111), (001) and (110) surfaces increase compared to those of the bulk MnBi, while they decrease on the (111), (001) and (110) subsurfaces. In addition to, we calculated the adhesion energy, it is found to be the most stable interface. We found as will that the Bi-Te (001) configuration is the most stable between the two possible configurations of the MnBi/HgTe (001) interface. Regrettably, interfacial configurations show that the half-metallicity of bulk MnBi is ruined for all possible configurations.

Uni. of Basra
College of Arts
Advisory Bureau

جامعة البصرة
كلية الآداب
المكتب الاستشاري

تصديق على صحة الترجمة
المكتب غير مسؤول عن محتوى الوثيقة

No العدد ٣٢١
Date التاريخ ١/٤/٢٠١٨

01/04/2018
M.H.