

عنوان مقاله:

مطالعه ابتدا به ساکن بلور $CeIn_3$ در فشارهای بالا

محل انتشار:

مجله پژوهش فیزیک ایران، دوره 8، شماره 2 (سال: 1387)

تعداد صفحات اصل مقاله: 9

نویسندگان:

- منصوره ایلخانی
- محمدرضا ابوالحسنی
- سعید جلالی اسدآبادی

خلاصه مقاله:

گرادیانهای میدان الکتریکی (EFG's) در مکان In و ممان مغناطیسی اسپینی در مکان Ce در ترکیب $CeIn_3$ محاسبه شده‌اند. محاسبات با افزایش تدریجی فشار از ۵- تا $+22\text{Gpa}$ و با استفاده از نظریه تابعی چگالی و روش امواج تخت بهبود یافته به علاوه ارییتال موضعی و به کارگیری تقریب $PBE-GGA+U$ و $WC-GGA+U$ انجام شده‌اند. نتایج گویای کاهش تق ر بیا خطی ممان مغناطیسی اسپینی سریم با افزایش فشار است. از نتایج به دست آمده مشاهده می‌شود که گرادیانهای میدان الکتریکی محاسبه شده در مکان In؛ به عکس، با افزایش فشار افزایش می‌یابند. گرادیانهای میدان الکتریکی در فشار صفر را با نتایج نظری دیگران و نتایج تجربی مقایسه کرده‌ایم. مقایسه انجام شده نشان می‌دهد که گرادیانهای میدان الکتریکی نسبت به نتایج دیگران با تجربه در فشار صفر سازگاری بیشتری دارد. نتایج نشان می‌دهند که ممان مغناطیسی اسپینی در یک نقطه بحرانی کوانتومی خاص فرو نشانده می‌شود.

کلمات کلیدی:

WC-GGA, PBE-GGA, LSDA+U, DFT, چگالی حالتها، ممان مغناطیسی، گرادیان میدان الکتریکی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1802182>

