

عنوان مقاله:

تاثیر ناخالصی اکسیژن بر روی خواص الکترونی و اپتیکی کالکوژنیدهای کلسیوم، استرانسیوم و باریوم

محل انتشار:

مجله پژوهش فیزیک ایران، دوره 10، شماره 3 (سال: 1389)

تعداد صفحات اصل مقاله: 10

نویسندگان:

مهرداد دادستانی - دانشگاه لرستان

راضیه بیرانوند - دانشگاه لرستان

خلاصه مقاله:

ویژگی های الکترونی و اپتیکی کالکوژنیدهای کلسیوم، استرانسیوم و باریوم در ساختار NaCl با به کارگیری روش امواج تخت به ساخته خطی با پتانسیل کامل و بر پایه نظریه تابعی چگالی بررسی شد. برای انرژی تبادل- همبستگی و پتانسیل متناظر با آن از تقریب گرادیان تعمیم یافته با تابعی پردو و همکاران استفاده شده است. محاسبات، وجود یک رابطه خطی میان گاف انرژی و عکس مجذور پارامتر شبکه تعادلی و همچنین ثابت دی الکترونیک بر حسب عکس مجذور پارامتر شبکه تعادلی را نشان می دهد که این رابطه برای ترکیبات اکسیژندار و فاقد اکسیژن از روند متفاوتی پیروی می کند. به نظر می رسد این اختلاف ناشی از تفاوتی است که در ویژگی های پیوندی، Ca-O، Sr-O و Ba-O با سایر پیوندها وجود دارد که نحوه توزیع چگالی بار اطراف هر اتم در این ترکیبات به خوبی این مطلب را تایید می نماید.

کلمات کلیدی:

نظریه تابعی چگالی، روش امواج تخت به ساخته خطی با پتانسیل کامل، کالکوژنید، خواص اپتیکی، خواص الکترونی، گاف انرژی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1802240>

