

عنوان مقاله:

بررسی خصوصیات الکترونیکی و اپتیکی بلور کادمیم تلورید در فاز مکعبی با استفاده از اصول اولیه

محل انتشار:

شانزدهمین همایش بلور شناسی و کانی شناسی ایران (سال: 1387)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسندگان:

خدیجه کلتنه - گروه فیزیک، (آزمایشگاه مواد و الکتروسرامیک) دانشکده علوم پایه، دانشگاه

سید محمد حسینی، - گروه فیزیک، (آزمایشگاه مواد و الکتروسرامیک) دانشکده علوم پایه، دانشگاه

احمد کمپانی - گروه فیزیک، (آزمایشگاه مواد و الکتروسرامیک) دانشکده علوم پایه، دانشگاه

خلاصه مقاله:

خصوصیات الکترونیکی از جمله چگالی الکترونی، ساختار نواری، چگالی حالتها و خواص اپتیکی نظیر طیف اتلاف انرژی الکترون و انرژی پلاسمون برای بلور CdTe در فاز مکعبی محاسبه شده است. نتایج به دست آمده هیبریداسیونی بین تراز 5s اتم کادمیم p5 تم تلور در نوار ظرفیت و یک گاف نواری مستقیم 0/6 eV در جهت G-G را نشان می دهد. نوع پیوند Cd-Te بیشتر از نوع یونی است. با استفاده از طیف اتلاف انرژی CdTe انرژی پلاسمون حدود 17/42 که به دست آمده که به مقدار بدست آمده از روش الکترون آزاد نزدیک است.

کلمات کلیدی:

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/180710>

