

عنوان مقاله:

مطالعه خواص الکترونی و اپتیکی ترکیب CrSe

محل انتشار:

اولین کنفرانس ملی نانوالکترونیک ایران (سال: 1391)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:

فاطمه صحرایی - دانشگاه آزاد اسلامی واحد کرج

علیرضا هژبری - دانشگاه آزاد اسلامی واحد کرج

آرش بوچانی - دانشگاه آزاد اسلامی واحد کرمانشاه

خلاصه مقاله:

در این مقاله ویژگیهای الکترونی و اپتیکی ترکیب CrSe بر پایه نظریه تابعی چگالی انرژی و محاسبات با کد کامپیوتری Wien2k مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج حاکی از آن است که گاف انرژی ترکیب برابر $3/2\text{eV}$ است و بیشترین سهم رسانندگی ناشی از اربیتال d اتم Cr است. قسمت های موهومی و حقیقی تابع دی الکتریک و تابع اتلاف انرژی محاسبه شده است. نتایج محاسبه حاکی از آن است که سهم اصلی در گذارهای اپتیکی ناشی از حالت های d اتم Cr به عنوان حالت اولیه و نهایی است. یکی از مهم ترین کمیت ها به منظور بررسی خواص ماکروسکوپی و میکروسکوپی جامدات تابع اتلاف انرژی است که با توجه به نمودار انرژی پلاسمونی ترکیب برابر 20eV محاسبه شد.

کلمات کلیدی:

خواص الکترونی، خواص اپتیکی، طیف اتلاف انرژی الکترون

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/193222>

