سیویلیکا – ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:

خواص ساختاری، الکترونی و ارتعاشی ترکیب BaHfO۳ در فاز مکعبی بر پایه ی محاسبات اصول اولیه

محل انتشار:

مجله شیمی کاربردی روز, دوره 11, شماره 38 (سال: 1395)

تعداد صفحات اصل مقاله: 17

نویسندگان:

heidarali shafiegol – دانشگاه سیستان وبلوچستان، دانشکده علوم، گروه فیزیک

morteza fazelzadeh – گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران

خلاصه مقاله:

در این تحقیق، خواص ساختاری، الکترونی و ارتعاشی فاز مکعبی BaHfO۳ به روش شبه پتانسیل، در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با دو تقریب LDA و GGA مورد بررسی قرار می گیرند. اجرای محاسبات در بسته نرم افزاری کوانتوم اسپرسو نشان می دهد که ساختار نواری BaHfO۳ شامل یک گاف نواری مستقیم ۳.۶۷ eV و ۳.۸۸ eV در نقطه ی G (مرکز شبکه وارون) برای تقریب های LDA و GGA است که الکترون های ظرفیت اتم O Ba در پایین ترین نوارها، Hf در بالای نوار ظرفیت و اتم در پایین نوار رسانش بیشترین نقش را دارند. همچنین از مطالعه ی پربند های چگالی بار استنباط می شود که پیوند بین اتم های Ba و O خصلت یونی و بین اتم های Hf Oو خصلت یونی–کووالانسی دارند. طیف ارتعاشی BaHfO۳ نشان می دهد که تعداد نوارهای ارتعاشی در بازه ی (۴۰۰-۰ cm-۱)در مقایسه با فرکانس های بالاتر بیشتر بوده و بیشترین تبهگنی های فرکانسی به نقاط R,G و M اختصاص دارند که در این حالت، مدهای با فرکانس بالا، بیشترین نقش را در رفتارهای اپتیکی بلور بازی می کنند. تقارن مکعبی ساختار سبب شده است تا دو تانسور دی الکتریک (۴.۴۸۲) و قطبش پذیری (۲۲.۳۹۲) ماده که پاسخ دینامیکی به میدان های خارجی اند، قطری گردند. اختلاف بارموثر بورن اتم های شرکت کننده (در ترکیب) با مقدار اسمی یونیشان، نتایج حاصل از محاسبات چگالی بار (مبنی بر خصلت یونی–کووالانسی BaHFO۳) را تائید می کند.

کلمات کلیدی:

Electronic properties, vibrational mode, polarization, dielectric, BaHfO۳, effective charge

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/2075055