

عنوان مقاله:

محاسبه تابع طیفی یک سیستم یک بعدی در مدل هابارد با استفاده از یک روش بازگشتی جدید

محل انتشار:

دومین همایش دانشجویی فناوری نانو (سال: 1386)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:

ادریس فیض آبادی - دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، دانشگاه علم و صنعت ایران

مهدی سلیمانی - دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی

محمد رضا خیاط زاده - دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی

خلاصه مقاله:

در این مقاله یک روش جدید برای محاسبه ویژه حالات برانگیخته و تابع طیفی یک سیستم یک بعدی ارائه شده است. یک روش جایگزین بجای روش حالات حاصل ضرب ماتریسی که در روش الگوریتم باز بهنجارش ماتریس چگالی استفاده می شود توضیح داده شده است. بدون استفاده از خود انرژی ها و با استفاده از یک فرمول بازگشتی یافته شده تابع طیفی گسیل برای ماده آلی TTF_TCNQ به دست آمده است که در توافق خوبی با روشهای پیشین است.

کلمات کلیدی:

DMRG ، MPSTTF_TCNQ تابع طیفی گسیل

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/22813>

