

## عنوان مقاله:

محاسبه خواص الکترونی ترکیب گرمغناطیسی  $Gd_5Si_4$

## محل انتشار:

کنفرانس علوم و فناوری نانو (سال: 1393)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

## نویسندگان:

مریم جاویر - دانشجوی کارشناسی ارشد فیزیک حالت جامد دانشگاه تربیت مدرس

احمد یزدانی - دانشیار فیزیک حالت جامد دانشگاه تربیت مدرس

زبیده مومنی لاریمی - دانشجوی دکتری فیزیک حالت جامد دانشگاه بیرجند

## خلاصه مقاله:

در این مقاله خواص الکترونی ترکیب گرمغناطیسی  $Gd_5Si_4$  با ساختار بلوری راستگوشی بررسی شده است. محاسبات با روش پتانسیل کامل امواج تخت بهبود یافته خطی (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) با استفاده از تقریب چگالی اسپینی موضعی (LSDA) با همراه کردن پتانسیل هوبارد (Ueff) و با کمک بسته محاسباتی (Wien2k) انجام شده است. نتایج نشان می دهد که الکترون های 5d اسپین پلاریزه برای نظم گیری مغناطیسی در ترکیب مهم هستند حالت های 5d گادولینیم و 3p سیلیسیم نزدیک تر از فرمی Ef را اشغال می کنند و هیبرید شدگی آنها در برهمکنش تبادلی RKKY موثر است.

## کلمات کلیدی:

گرمغناطیسی، خواص الکترونی، گادولونیم، سیلیسیم

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/321440>

