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

عنوان مقاله:
محاسبات ساختار نوارهای انرژی و ساختار الکترونی بلور SrTiO3 با استفاده از نظریه تابعی چگالی

محل انتشار:
چهاردهمین همایش بلور شناسی و کانی شناسی ایران (سال: 1385)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسنده:
حمدا... صالحی - *گروه فیزیک دانشگاه شهید چمران اهواز*

خلاصه مقاله:
ساختار الکترونی و ساختار نوارهای انرژی در بلور SrTiO3 در فاز مکعبی مورد مطالعه قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) با تقریب های مختلف انجام گرفته است. یکی از پارامترهای مهم در این محاسبات ثابت شبکه است. این پارامتر بطور تجربی اندازه گیری شده و در دسترس می باشد که معمولا مورد استفاده قرار می گیرد. با این وجود، برای تایید نظری نسئله محاسبه گردید. نتایج به دست امده بیانگر این است که محاسبات با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) سازگاری بهتری نسبت به بقیه تقریب ها با نتایج تجربی و تئوری بدست امده از روشهای دیگر دارد. محاسبات ساختار نواری یک گاف نواری مستقمی 2/5Ev را در نقطه G نشان میدهد.

کلمات کلیدی:
ساختار الکترونی ، FP-LAPW ، SrTiO3 ، نظریه تابعی چگالی ، GGA

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/33994