

عنوان مقاله:

اثر فشار بر گاف انرژی، پهنای نوارها و جرم موثر الکترون و حفره در ترکیب Be_3As_2

محل انتشار:

نهمین کنفرانس ماده چگال (سال: 1387)

تعداد صفحات اصل مقاله: 4

نویسندگان:

متین صدیقی - آزمایشگاه شبیه سازی، گروه فیزیک، دانشگاه شهرکرد

علی مختاری

خلاصه مقاله:

خواص ساختاری و الکترونی ترکیب نیمرسانای Be_3As_2 بعنوان یک دستگاه بس ذره ای، در شرایط متعارفی و تحت فشار، با استفاده از نظریه تابعی چگالی مورد مطالعه قرار گرفته است. تابعی انرژی تبادلی- همبستگی با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) محاسبه شده است و برای بررسی خواص ساختاری این ترکیب مورد استفاده قرار گرفته است. همچنین برای بررسی خواص الکترونی این بلور در فشار متعارفی، با تغییر پارامتر شبکه توانسته ایم اثر فشار بر کمیت های فیزیکی مرتبط با این بلور همچون گاف انرژی پادتقارنی، پهنای نوارهای والانس و جرم موثر الکترون و حفره در مسیرهای تقارنی مختلف را مورد مطالعه قرار دهیم.

کلمات کلیدی:

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/64661>

