

عنوان مقاله:

محاسبه ی چگالی ابر الکترونیو تراکم پذیری پوشش SnO₂ در صفحه های (110) و (100) در فاز مکعبی با استفاده از نظریه ی تابعی چگالی

محل انتشار:

دهمین سمینار ملی مهندسی سطح و عملیات حرارتی (سال: 1388)

تعداد صفحات اصل مقاله: 10

نویسندگان:

حمدا.. صالحی - گروه فیزیک دانشگاه شهید چمران اهواز

ماهرخ آریادوست - گروه فیزیک دانشگاه شهید چمران اهواز

خلاصه مقاله:

در این مقاله خصوصیات الکترونی پوشش سرامیک SnO₂ از جمله پارامترهای شبکه، مدول حجمی و تراکم پذیری در فاز مکعبی مورد بررسی قرار می گیرد. همچنین بار مؤثر اتم های تشکیل دهنده ی آن و چگالی ابر الکترونی SnO₂ در صفحه های (110) و (100) بررسی شد. محاسبات با استفاده از روش امواج تخت تقویت شده ی خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) و در چارچوب نظریه ی تابعی چگالی و با تقریب های مختلف، با استفاده از نرم افزار WIEN2k صورت گرفته است. نتایج به دست آمده سازگاری خوبی با نتایج دیگران دارد.

کلمات کلیدی:

ثابت شبکه، مدول حجمی، سرامیک SnO₂، چگالی ابر الکترونی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/69607>

