

عنوان مقاله:

بررسی ساختار نواری و چگالی حالت ها در ترکیبات $Y=Ga,Ge$ UY_2 با استفاده از روش شبه پتانسیل

محل انتشار:

سومین کنفرانس ملی مهندسی مواد، مهندسی شیمی و ایمنی صنعتی (سال: 1396)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسندگان:

حمدا.. صالحی - دانشیار، دانشکده علوم، گروه فیزیک دانشگاه شهید چمران اهواز

فاطمه اسدی - دانشجو، دانشکده علوم، گروه فیزیک دانشگاه شهید چمران اهواز

پیمان امیری - دانشیار، دانشکده علوم، گروه فیزیک دانشگاه شهید چمران اهواز

خلاصه مقاله:

در این مقاله ساختار نواری و چگالی حالت های ترکیبات $Y=Ga,Ge$ $2UY$ با استفاده از روش شبه پتانسیل در چارچوب نظریه تابعی چگالی با استفاده از کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو انجام شده است. شبه پتانسیل مورد استفاده تحت شرایط فوق نرم ساخته شده و تابعی تبدلی همبستگی آن از نوع GGA-PBE می باشد. نتایج به دست آمده از ساختار نواری و چگالی حالت ها نشان می دهد که این ترکیبات فلز بوده و دارای خاصیت مغناطیسی می باشند که با دیگر داده های موجود سازگاری دارند

کلمات کلیدی:

چگالی حالت، ساختار نواری، نظریه تابعی چگالی، کوانتوم اسپرسو

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/700523>

