

عنوان مقاله:

بررسی اصول اولیه خواص اپتیکی ترکیب اپتیکی غیرخطی $\text{LiMoO}_3(\text{IO}_3)$

محل انتشار:

شانزدهمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران (سال: 1388)

تعداد صفحات اصل مقاله: 4

نویسندگان:

جواد باعدی - گروه فیزیک، دانشگاه تربیت معلم، سبزوار

ایمان عباسپور کارزونی - گروه مهندسی برق، دانشگاه تربیت معلم، سبزوار

محسن خانی پرشکوه - گروه مهندسی برق، دانشگاه تربیت معلم، سبزوار

خلاصه مقاله:

در این مقاله خواص اپتیکی (ضریب شکست، ضریب خاموشی، چگالی حالت‌های انرژی و هدایت اپتیکی) ترکیب $\text{LiMoO}_3(\text{IO}_3)$ با $106.863^\circ(6) =$ $a=5.4104(4)\text{A}$ ، $b=5.3158(3)\text{A}$ ، $\beta = 9.0025(7)^\circ\text{A}$ و $c = 9.0025(7)\text{A}$ در فاز هگزاگونال محاسبه و بررسی می‌شود. $\text{LiMoO}_3(\text{IO}_3)$ یک ماده اپتیکی غیرخطی (NLO) جدید با خواص پیزوالکتریک و پایروالکتریک است. محاسبات با تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) با روش پتانسیل کامل امواج تحت تقویت شده خطی (FP-LAPW) در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) صورت گرفته است. بعضی از نتایج خواص اپتیکی (ضریب شکست، گاف انرژی و ...) در این محاسبه به مقادیر تجربی نزدیک می‌باشد.

کلمات کلیدی:

پیزوالکتریک، خواص اپتیکی، ماده اپتیکی غیرخطی (NLO)

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/73769>

