

عنوان مقاله:

جوابهای خودسازگار ساختار الکترونی $\text{Pr Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ با LSDA+U

محل انتشار:

مجله پژوهش فیزیک ایران، دوره 9، شماره 1 (سال: 1388)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسندگان:

محمدرضا محمدی زاده - آزمایشگاه پژوهشی ابررسانایی، دانشکده فیزیک دانشگاه تهران، انتهای خیابان کارگر شمالی، تهران. پژوهشکده علوم نانو، IPM

وحید قنبریان - آزمایشگاه پژوهشی ابررسانایی، دانشکده فیزیک دانشگاه تهران، انتهای خیابان کارگر شمالی، تهران

خلاصه مقاله:

براساس نظریه تابعی چگالی و با روش امواج تخت بهبودیافته در تقریب LSDA+U، ساختار الکترونی $\text{Pr Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ محاسبه شد. یک جواب خودسازگار دیگر علاوه بر آنچه قبلاً آرایه شده بود به دست آمد (نظریه LM بر خلاف جوابهای LM این حل خودسازگار قابلیت توجیه نتایج 17 NMR O نمونه غیر ابررسانای $\text{Pr Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ را دارد. این حل خودسازگار جدید پیشنهاد میکند که 321Pr خالص و بدون هیچ نقصی باید ذاتاً ابررسانا باشد. ناکاملیهای شبکه باعث میشوند حفره های ابررسانایی در نقاط تقارنی $(\pi/a, \pi/b, kz)$ گیر افتاده و باعث اضمحلال ابررسانایی شوند

کلمات کلیدی:

نظریه تابعی چگالی، ساختار الکترونی، $\text{Pr Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/820334>

