

عنوان مقاله:

پارامترهای ساختاری و ساختارنوارهای انرژی SrHfO_3 در فاز تتراگونال

محل انتشار:

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران، دوره 1، شماره 1 (سال: 1390)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:

حمدا. صالحی - دانشگاه شهید چمران، اهواز،

سارا دادگر - علوم و تحقیقات، آزاد اهواز

خلاصه مقاله:

در این مقاله ساختار نوارهای انرژی و پارامترهای ساختاری ترکیب از جمله ثابت شبکه، مدول حجمی، تراکمپذیری و بهینه سازی حجم در سرامیک در فاز تتراگونال محاسبه شده است. محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل در چارچوب نظریه تابعی چگالی اختلالی و با استفاده از نرم افزار محاسبه شده است. ساختار نوارهای انرژی یک گاف نواری مستقیم به اندازه $5/4\text{eV}$ در نقطه دارد که با نتایج تجربی و نظری به دست آمده از دیگر روش ها سازگاری خوبی دارد. نتایج نشان می دهد که نوار ظرفیت عمدتاً شامل اربیتال های نواری رسانش شامل حالت های و است.

کلمات کلیدی:

نظریه تابعی چگالی اختلالی، شبه پتانسیل، نوار انرژی، سرامیک

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/862657>

