سیویلیکا - ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:

بررسی خصوصیات الکترونیکی بلور پروسکایت Pb(Zr0.5Ti0.5)O3 بادر نظر گرفتن اثراربیتالهای جایگزیده d

محل انتشار:

کنفرانس فیزیک ایران 1386 (سال: 1386)

تعداد صفحات اصل مقاله: 4

نویسندگان:

جواد باعدی - *گروه فیزک ، آزمایشگاه الکتروسرامیک دانشگاه فردوسی مشهد، گروه فیزیک د*

احمد کمپانی - *گروه فیزک ، آزمایشگاه الکتروسرامیک دانشگاه فردوسی مشهد*

سیدمحمد حسینی - *گروه فیزک ، آزمایشگاه الکتروسرامیک دانشگاه فردوسی مشهد*

خلاصه مقاله:

در این مقاله خواص الکترونیکی از جمله ساختار نواری وچگالی حالتها برای سرامیک پروسکایت Pb(Zr0.5Ti0.5)O3 درفاز بلوری منوکلینک ارائـه شـده اسـت. محاسبه به روش پتاسیل کامل امواج تخت تقویت شده خطی (FP-LAPW) درچارچوب نظریه تابعی چگـالی (DFT)بـا تقریـب شـیب تعمـیم یافتـه(GGA, GGA+U و با در نظر گرفتن 1.5Red ,1.1., U=0.6 بترتیب برای اتم هایسرب، زیر کونات و تیتانیم گاف انرژی برابر Eg=3.02eV و Eg=2.923eV بدست آمد . این مقادیر خیلی نزدیکتر به مقدار تجربی یعنی 3.25eV است و نشان می دهد که وارد کردن اثر اسپین الکترون در اربیتال d منجر به نتایج بهتری می شود .

کلمات کلیدی:

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/22584