

عنوان مقاله:

بررسی خواص اپتیکی CdBr_2 با استفاده از نظریه تابعی چگالی

محل انتشار:

دومین همایش ملی مهندسی اپتیک و لیزر ایران (سال: 1390)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:

حمداله صالحی - گروه فیزیک دانشگاه شهید چمران اهواز

نسترن اساره - گروه فیزیک دانشگاه شهید چمران اهواز

حجت اله بادهییان - گروه فیزیک دانشگاه شهید چمران اهواز

خلاصه مقاله:

در این مقاله خواص اپتیکی CdBr_2 از جمله ثابت دیالکتریک، ضریب جذب، ضریب خاموشی و ضریب بازتاب مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش موج تخت تقویت شدهی خطی با پتانسیل کامل FP-LAPW در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با تقریب شیب تعمیم یافته با نرم افزار wien2k انجام گرفته است. محاسبات انجام شده سازگاری خوبی با دادههای تجربی دارد

کلمات کلیدی:

نظریه تابعی چگالی، شیب تعمیم یافته، ثابت دیالکتریک، CdBr_2

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/112436>

