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

عنوان مقاله:
بررسی اثر اتم La بر روی خصوصیات الکترونیکی بلور $Pb_{0.91}La_{0.09}(Zr_{0.66}Ti_{0.33})O_3$

محل انتشار:
نهمین کنفرانس ماده چگال (سال: ۱۳۸۷)

تعداد صفحات اصل مقاله: ۴

نویسندگان:
جواد باعدی - گروه فیزیک، دانشگاه تربیت معلم سبزوار

مسعود مجیدیان - گروه فیزیک ، دانشگاه تربیت معلم سبزوار

هادی عربشاهی - گروه فیزیک ، دانشگاه فردوسی مشهد

خلاصه مقاله:
در این مقاله خواص الکترونیکی از جمله ساختار نواری، چگالی حالت ها، گاف نواری و نوع پیوندهای ترکیب $Pb_{0.91}La_{0.0}$ ارائه شده است. محاسبه به روش پتانسیل کامل امواج تخت تقویت شده ی خطی (FP-LAPW) در چارچوب نظریه ی تابعی چگالی (DFT) با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) انجام شده است. مقدار گاف مستقیم برای این ترکیب حدود ۲/۲۹eV به دست آمده است.

کلمات کلیدی:

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/۶۴۶۸۹