

اثر تغییر پارامتر هابارد بر خواص الکتریکی، مغناطیسی،
اپتیکی ترکیب YMnO_3

مؤلف

الهام جعفری

(کارشناس ارشد فیزیک حالت جامد)



۱۴۰۰

سرشناسه	: جعفری، الهام، ۱۳۶۲ -
عنوان و نام پدیدآور	: اثر تغییر پارامتر هابارد بر خواص الکتریکی، مغناطیسی، اپتیکی ترکیب $YMnO_3$
مشخصات نشر	: مولف الهام جعفری.
مشخصات ظاهری	: تهران گنجور، ۱۴۰۰.
شابک	: ۴۰۰۰۰ ریال: ۷-۵۲-۷۷۲۶-۶۲۲-۹۷۸
وضعیت فهرست نویسی	: فیپا
یادداشت	: کتابنامه: ص. ۷۳ - ۷۵.
موضوع	: فیزیک حالت جامد -- آزمایش ها
موضوع	: Solid state physics -- Experiments
رده بندی کنگره	: QC۱۷۶
رده بندی دیویی	: ۴۱/۵۳۰
شماره کتابشناسی ملی	: ۷۷۲۹۳۴۹
اطلاعات رکورد	: فیپا
کتابشناسی	

اثر تغییر پارامتر هابارد بر خواص الکتریکی، مغناطیسی و
 ترکیب $YMnO_3$

مؤلف: الهام جعفری

ناشر: گنجور

صفحه آرای: الهام جعفری

طراحی جلد: گنجور

سال و نوبت چاپ: ۱۴۰۰ - اول

شابک: ۷-۵۲-۷۷۲۶-۶۲۲-۹۷۸

شمارگان: ۵۰۰ نسخه

قیمت: ۴۰۰۰۰ تومان

کلیه حقوق این اثر اعم از چاپ و تکتیر، نسخه برداری، ترجمه و
 اقتباس محفوظ می باشد.

آدرس: تهران، میدان انقلاب، ابتدای کارگر جنوبی، کوچه شهدای زاندارمری.

پلاک ۱۲۷

۰۹۱۲۰۶۱۷۲۸۳ - ۰۹۹۰۱۹۱۰۲۰۸ - ۰۲۱۶۴۹۱۰۵۶

www.ganjoorpub.ir

فهرست

فصل اول: کلیات	۷
۱-۱ مقدمه	۷
فصل دوم: نظریه تابعی چگالی	۱۱
۱-۲ مقدمه	۱۱
۲-۲ نظریه تابعی موجی	۱۳
۱-۲-۲ تقریب هارتری-فوک	۱۳
۲-۲-۲ تقریب هارتری-فوک-اسلیتر	۱۴
۳-۲ نظریه تابعی چگالی	۱۶
۴-۲ مدل توماس-فرمی-دیراک	۱۷
۵-۲ قضیه های هوهنبرگ-کوهن	۱۷
۶-۲ رهیافت کوهن-شم	۱۸
۷-۲ تقریب چگالی موضعی (LDA)	۱۸
۸-۲ شبه پتانسیل	۱۹
۱۱-۲ پارامتر هابارد	۲۲
فصل سوم: بررسی خواص مغناطیسی و الکتریکی ترکیب $YMnO_3$	۲۳
۱-۳ مقدمه	۲۳
۲-۳ ساختار پروسکایت و ترکیبات ABO_3 چند تابعی	۲۴
۴-۳ فاز فروالکتریک $YMnO_3$	۲۷
۵-۳ ترتیب مغناطیسی و حالت اسپین مایع $YMnO_3$	۲۸
۶-۳ ویژگی های ساختاری ترکیب $YMnO_3$	۳۰
۷-۳ سرخوردگی مغناطیسی	۳۱
۸-۳ اثرات مگنتوالکتریک در $YMnO_3$	۳۳
۹-۳ منشأ فروالکتریسته در $YMnO_3$ مگنتوالکتریک	۳۳
۱۰-۳ دسته بندی مواد چندفرونیکی	۳۷
۱۱-۳ نتایج و بررسی های انجام شده بصورت تئوری و تجربی تاکنون	۳۸
۱۱-۳-۱ بررسی اثر دوپ شدگی $YMnO_3$ شش ضلعی با یون های Ti	۳۸
۱۱-۳-۲ بررسی اثر دوپ شدگی $YMnO_3$ شش ضلعی با یون های Zr	۳۸
۱۱-۳-۳ بررسی اثر دوپ شدگی $YMnO_3$ شش ضلعی با یون های Fe	۳۸
۱۱-۳-۴ بررسی اثر دوپ شدگی $YMnO_3$ شش ضلعی با یون های F	۳۸
فصل چهارم: محاسبات خواص الکتریکی، مغناطیسی، اپتیکی ترکیب " $YMnO_3$ "	۴۱
۱-۴ مقدمه	۴۱

۴-۲	روش انجام محاسبات	۴۱
۴-۳	معرفی کد محاسباتی	۴۲
۴-۴	بهینه سازی پارامترهای محاسباتی	۴۲
۴-۵	بهینه سازی انرژی قطع تابع موج تخت	۴۳
۴-۶	بهینه سازی تعداد نقاط K	۴۸
۴-۷	عدد اشغال	۵۲
۴-۸	چگالی حالت ها	۵۵
۴-۹	چگالی حالت های جزئی	۵۶
۴-۱۰	خواص الکترونی	۶۵
۴-۱۱	خصوصیات اپتیکی	۶۷
۴-۱۱-۱	تابع دی الکتریک	۶۸
۴-۱۱-۲	رسانندگی اپتیکی	۷۰
	فصل پنجم: سخن آخر	۷۱
۵-۱	نتایج	۷۱
۵-۲	پیشنهادهای	۷۱
	منابع و مأخذ	۷۳