Archive of SID
Iranian Journal of Science & Technology, Transaction A, Vol. 34, No. A2
Printed in the Islamic Republic of Iran, 2010
© Shiraz University

ELECTRONIC AND STRUCTURAL PROPERTIES OF TIN DIOXIDE IN CUBIC PHASE*

H. SALEHI, M. ARYADOUST** AND M. FARBOD

Department of Physics, Shahid Chamran University, Ahvaz, I. R. of Iran
Email: aryadoustm@yahoo.com

خواص ساختاری و الکترونی دی‌اکسید قلع در فاز مکعبی

ح. صالحی، م. آریادوست و م. فربد

گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، جمهوری اسلامی ایران

چکیده: ساختار الکترونی، ساختار نوار انرژی و چگالی الکترونی سرامیک SnO_2 در فاز مکعبی با استفاده از اصل اولیه روش امواج تخت تقویت شده خطی با پتانسیل کامل (FP-LAPW) در نظریه‌ی تابعی چگالی بررسی شده است. این محاسبات با استفاده از تقریب چگالی موضعی (LDA) و تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) براساس بهینه ساری انرژی تبادلی- همبستگی انجام گرفته است. گاف نواری در نقطه‌ی Γ و در منطقطه بریلوئن ۲/۲ ev مشاهده شده است. محاسبات ساختار نواری و ساختار الکترونی SnO_2 در تقریب‌های مختلف سازگاری خوبی با نتایج تجربی و نظری دیگران داشت. علاوه بر این چگالی ابر الکترونی نشان می‌دهد که پیوند میان اتم‌های اکسیژن و قلع یونی می‌باشند.

*Received by the editor August 31, 2009 and in final revised form October 6, 2010
**Corresponding author

www.SID.ir