

研究论文

EuB₆的光电导率和能量损失函数谱的理论指认

姜骏; 卞江; 黎乐民

北京大学化学与分子工程学院, 稀土材料化学及应用国家重点实验室, 北京分子科学国家实验室, 北京 100871

摘要:

基于更高精度的能带结构计算结果, 计算EuB₆的光电导率和能量损失函数谱, 结果与实验一致. 通过具体计算找出在0-40 eV能量区间内所有可能发生的能带间电子跃迁, 在第一布里渊区中发生跃迁的区域和跃迁概率, 得到了各电子跃迁的始态和末态的单电子波函数. 利用计算结果详细分析了光电导率和能量损失函数各谱峰与能带间电子跃迁的联系. 在此基础上对实验测得的谱峰作出指认, 证实了Kimura等人根据实验结果所作经验指认的合理部分, 指出其中一些不准确的指认, 并补充了他们没有考虑到的一些对谱峰有重要贡献的电子跃迁.

关键词: EuB₆ 光电导率 能量损失函数 谱指认

收稿日期 2007-09-21 修回日期 2007-10-15 网络版发布日期 2007-11-13

通讯作者: 黎乐民 Email: lilm@pku.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(207KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ EuB₆

▶ 光电导率

▶ 能量损失函数

▶ 谱指认

本文作者相关文章

▶ 姜骏

▶ 卞江

▶ 黎乐民