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

عنوان مقاله:
مدل سازی هدایت یونی در ساختارکاتد LSMاپیل سوختیاکسید جامد

محل انتشار:
چهارمین همایش پیل سوختی (سال: 1389)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

نویسندگان:
وحید نجفی - *دانشگاه آزاد اسلامی واحد شازند*

اصغر ملکی فر

خلاصه مقاله:
یکی از مهترین روش های درک بسیاری از پدیده های فیریکی در جامدات بررسی حرکت و نحوه توسعه عیوب ساختاری شکل گرفته در آنها می باشد. در این مقاله علل شکل گیری عیوب ساختاری حاصله از برخورد های آبشاری در La1-xSrxMnO3 با در نظر گرفتن تابع پتانسیلZiegler–Biersack–Littmarkبا استفاده از شبیه سازی دینامیک ملکولی مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج حاصله از این شبیه سازی بیانگر این موضوع است که نوساناتی غیر خطی بین زوج های از اتم های نوسانگر بر این سیستم تحمیل می شودکه این امر باعث شکل گیری مجموعه حالتهای جدیدی با ساختارهای پایدار در این بلور ها می شود. انرژی شکل گیری خوشه های کوچکی از جاهای خالی در ساختار بلوری این مواد با افزایش اندازه خوشهها از 160ev تا 20ev کاهش مییابد. نتایج حاصله از این شبیه سازی نشان می دهد این خوشه های کوچک از جاهای خالی درLSMتادمای تقریبا900oK دارای ساختاری پایدار می باشند که این با نتایج تجربی بدست آمده همخوانی دارد

کلمات کلیدی:
مدل سازی ، تابع پتانسیل ، هدایت یونی،Ziegler–Biersack–Littmark

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/116691