

عنوان مقاله:

بررسی ویژگی های ساختاری و چگالی ابر الکترونی ترکیب هیدروکسید سدیم با استفاده از رهیافت نظریه تابعی چگالی

محل انتشار:

اولین کنفرانس بین المللی و چهارمین کنفرانس ملی مهندسی مواد، متالورژی و معدن (سال: 1399)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسندگان:

حمدا... صالحی - عضو هیئت علمی دانشیار گروه فیزیک دانشکده علوم دانشگاه شهید چمران اهواز ایران

عباس کاظم حسن - دانشجوی کارشناسی ارشد گروه فیزیک دانشکده علوم دانشگاه شهید چمران اهواز ایران

پیمان امیری - عضو هیئت علمی استادیار گروه فیزیک دانشکده علوم دانشگاه شهید چمران اهواز ایران

خلاصه مقاله:

در این مقاله ویژگی های ساختاری و چگالی ابر الکترونی ترکیب هیدروکسید سدیم در فاز ساختاری اورتورومبیک با استفاده از نظریه تابعی چگالی اختلالی مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات با استفاده از روش شبه پتانسیل و با استفاده از کد محاسباتی PWscf انجام شده است. شبه پتانسیل مورد استفاده تحت شرایط فوق نرم و بارپایسته ساخته شده و تابعی تبادل همبستگی آن از نوع GGA, LDA می باشد. خواص ساختاری شامل پارامترهای ساختاری، مدول حجمی و مشتق آن و خواص الکترونی شامل چگالی ابر الکترونی می باشد. نتایج ساختار نواری نشان می دهد که سدیم هیدروکسید در فاز ساختاری اورتورومبیک دارای یک گاف نواری مستقیم در نقطه Γ به اندازه $2/50$ الکترون ولت می باشد، که بیشترین سهم در نوار ظرفیت مربوط به اتم اکسیژن و در نوار رسانش مربوط به اتم سدیم است. نتایج نمودار چگالی ابر الکترونی نشان می دهد که ترکیب هیدروکسی سدیم دارای پیوند کووالانسی است. در کل نتایج به دست آمده با دیگر داده های موجود سازگاری دارد.

کلمات کلیدی:

هیدروکسید سدیم، اورتورومبیک، اسپرسو، شبه پتانسیل

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1250611>

