

عنوان مقاله:

محاسبه ی ثابتهای کشسانی و بررسی پایداری مکانیکی ترکیب سه تایی Cu₃ZnN

محل انتشار:

سومین همایش ملی تحقیقات نوین در شیمی و مهندسی شیمی (سال: 1390)

تعداد صفحات اصل مقاله: 3

نویسندگان:

مرضیه قوهستانی - دانشکده علوم پایه گروه فیزیک دانشگاه ولی عصر عجل رفسنجان

سیدمهدی بیضایی

علی رحمتی

حجت اله باده یان

خلاصه مقاله:

در کار حاضر ویژگیهای ساختاری از جمله ثابت شبکه مدول حجمی تراکم پذیری بهینه سازی حجم و ثابتهای الاستیکی ترکیب سه تایی Cu₃ZnN محاسبه شده است محاسبات به روش امواج تخت بهبود یافته خطی با پتانسیل کامل FP-LAPW درچارچوب نظریه ی تابعی چگالی با استفاده از کد محاسباتی WIEN2K(2011 و اعمال تقریب شیب تعمیم یافته GGA برای انرژی تبدلی - همبستگی انجام شده است.

کلمات کلیدی:

نریه ی تابعی چگالی، ثابت های الاستیکی، مدول حجمی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/130350>

