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

عنوان مقاله:
نرم افزار محاسبه ثابت مادلونگ برای شبکه بلورهای یونی مکعبی مرکز سطحی و مکعبی مرکز پر

محل انتشار:
کنفرانس فیزیک ایران 1385 (سال: 1385)

تعداد صفحات اصل مقاله: 4

نویسندگان:
سجاد روانخواه - *دانشگاه یاسوج، یاسوج*

صادق حسین زاده - *دانشگاه یاسوج، یاسوج*

سیدمحمدباقر قرشی - *گروه فیزیک دانشگاه یاسوج، یاسوج*

خلاصه مقاله:
مقدار ثابت مادلونگ در نظریه ی مربوط به بلور های یونی از اهمیت خاصی برخوردار است محاسبه این ثابت برای بدست آوردن انرژی مادلونگ در بلورهای یونی ضروری است برای خط بی پایانی از یونها محاسبه این ثابت راحت است اما برای حالت سه بعدی که معمولاً از روش همگرایی سری ها استفاده می شود دشوارتر است . نرم افزاری که جهت بدست آوردن این ثابت برای بلورهای یونی مکعبی مرکز سطحی FCC نوع NaCl و مکعبی مرکز پر BCC نوع CsCl تهیه شده بسیار راحت تر از حل سری های پیچیده بوده و به آسانی با دادن اعداد مختلف که بیانگر تعداد صفحات بلور می باشد و رسم نمودار می توان همگرایی جملات مربوط به این ثابت را بدست آورد

کلمات کلیدی:

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/24883