

## عنوان مقاله:

تولید شبه پتانسیل هیدروژن و اکسیژن و استفاده از آن در بررسی بلور یخ مکعبی

## محل انتشار:

چهاردهمین همایش بلور شناسی و کانی شناسی ایران (سال: 1385)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

## نویسندگان:

مریم واحدی - گروه فیزیک دانشگاه بیرجند

هادی عربی - گروه فیزیک دانشگاه بیرجند

علی مختاری - گروه فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان

## خلاصه مقاله:

در این مقاله بر اساس نظریه تابعی چگالی و استفاده از شبه پتانسیل، ساختار بلور یخ مکعبی مورد مطالعه قرار گرفته است. رای ای منظور شبه پتانسیل اتمهای هیدروژن و اکسیژن به روشهای کرک و بهینه (QC) (QC-Tuning) تولید شده و سپس با استفاده از تقریب شیب تعمیم یافته (GGA) انرژی تبادل هبمستگی و در نهایت خواص ساختاری و الکترونی بلور یخ مکعبی بررسی و محاسبه شده است. مقایسه نتایج حاصل نشان میدهد که شبه پتانسیل بهینه تنظیم QC نسبت به کرک از انرژی قطع کمتری برخوردار است. شبه پتانسیل QC دارای انرژی قطع 800eV و شبه پتانسیل کرک دارای انرژی قطع 1200eV می باشد لذا استفاده از شبه پتانسیل QC از نظر دما و هزینه محاسباتی با صرفه تر است و برای بررسی ساختار بلوری یخ مکعبی از این شبه پتانسیل استفاده شده است. اعمال فشار به بلور به روش سنتی (تغییر پارامتر شبکه) انجام گرفته و برای کمینه کردن انرژی از روشگرادیانهای همیوگ استفاده شد و سپس توسط معادله حالت مورناگون، منحنی انرژی بر حسب حجم را برازش داد و از روی آن حجم تعادلی پارامتر شبکه، مدول حجمی و مشتق آن را محاسبه کردیم، مقدار ثابت شبکه 6/356 آنگستروم بدست آمده است که با مقدار تجربی 0/03% اختلاف دارد.

## کلمات کلیدی:

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/34012>

