

## عنوان مقاله:

محاسبه گاف انرژی بلور LiF آلائیده شده با ناخالصی Mg

## محل انتشار:

دومین کنفرانس بین المللی دستاوردهای نوین در علوم مهندسی و پایه (سال: 1393)

تعداد صفحات اصل مقاله: 5

## نویسنده:

محمدرضا جلالی - گروه فیزیک دانشگاه پیام نور اصفهان

## خلاصه مقاله:

در این کار محاسباتی به محاسبه بستگی ساختار بلور LiF پرداخته می شود به وسیله حل معادله شرودینگر برای هر ساختار اتمی و ملوکولی می توان به ویژگیهای انرژی آن پی برد. بررسی برهمکنش انرژی و ماده باید اطلاعات دقیقی از فاصله گذارها و همچنین احتمال انجام گذارها بدست آورد. معادله شرودینگر تمام این اطلاعات را در حد غیر نسبیته در اختیار ما قرار می دهد ولی یک مساله وجود دارد: حل این معادله برای سیستمهای چند اتمی کار بسیار مشکلی است و بجای حل تحلیلی از حلهای عددی استفاده می شود. از طرفی دیگر با توجه به پیچیدگی های معادله شرودینگر نیاز به انجام تقریبهایی در انجام محاسبات هستیم این تقریبها زمان محاسبات را کوتاه و دقت انجام محاسبات را تعیین می کنند.

## کلمات کلیدی:

نظریه تابعی چگالی فلوریدلیتیوم گاف انرژی نرم افزار گوسین

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/358877>

