

عنوان مقاله:

بررسی خواص ساختاری و الکترونی بلور LiOH با استفاده از روش FP-LAPW

محل انتشار:

دومین همایش ملی پژوهش های کاربردی در ریاضی و فیزیک (سال: 1393)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:

حمدا... صالحی - گروه فیزیک دانشگاه شهیدچمران اهواز

سیدصادق موسوی - گروه فیزیک دانشگاه شهیدچمران اهواز

محمد سورمه - دانشکده علوم دانشگاه پیام نور اهواز

خلاصه مقاله:

در این مقاله با استفاده از روش امواج تخت تقویت شده ی خطی با پتانسیل کامل FP-LAPW در چارچوب نظریه ی تابعی چگالی خواص ساختاری و الکترونی بلور LiOH در ساختار پایدار تتراگونال از جمله ثابتهای شبکه مدول حجمی چگالی جرمی چگالی حالت ها و ساختار نواری مطالعه شده است نتایج بدست آمده از ساختار نواری و چگالی حالت نشان میدهند که ترکیب LiOH در این فاز یک عایق است که سازگاری خوبی با دیگر محاسبات دارد

کلمات کلیدی:

بلور ، FP-LAPW LiOH

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/381271>

