

عنوان مقاله:

بررسی و تحلیل خصوصیات ابرشبکه ی ترکیب $\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_3$

محل انتشار:

کنفرانس فیزیک ایران 1393 (سال: 1393)

تعداد صفحات اصل مقاله: 4

نویسندگان:

سمانه غلام پور - گروه فیزیک دانشگاه حکیم سبزواری سبزوار

جواد باعدی - گروه فیزیک دانشگاه حکیم سبزواری سبزوار

فرشید قلعه نوی - گروه فیزیک دانشگاه حکیم سبزواری سبزوار

خلاصه مقاله:

ابرسلول ترکیب های BNTZ , BNT درچارچوب نظریه ی تابعی چگالی DFT بااستفاده ازروش پتانسیل کامل وامواج تخت افزوده خطی شده FP-LAPW وبابکارگیری تقریب شیب تعمیم یافته GGA مورد بررسی قرارگرفت ثابت های شبکه به ازای کمینه کردن انرژی کل سیستم محاسبه شد و نتایج بدست آمده با مقادیرآن ازتجربه مقایسه شد داده های محاسبه شده برای ترکیب BNT برابر $c = 16.0417$ $a = b = 5.5419$ و همچنین برای ترکیب BNTZ $c = 7.7526$ $a = b = 5.6884$ بدست آمده است داده های محاسبه شده نسبت به داده های تجربی تغییرات قابل قبولی دارند

کلمات کلیدی:

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/960195>

