

مطالعه ابتدا به ساکن ویژگی‌های الکترونی و ترمودینامیکی تیتانات کلسیم

معصومه رضانی کیوانی *، 159،

1397-3-29

خواص ساختاری و الکترونی CaTiO_3 در فاز مکعبی مورد محاسبه قرار گرفت. محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی و تقریب های چگالی موضعی و گرادیان چگالی موضعی انجام گرفت. پس از بهینه سازی ویژگیهای ساختاری و چک کردن توانایی ما در محاسبات ویژگیهای ساختاری و الکترونی ویژگیهای ترمودینامیکی CaTiO_3 با استفاده از بسته محاسباتی گیبس محاسبه گردید. مطالعه ویژگیهای ترمودینامیکی مواد از نظریه‌ی ساده‌ی ما در خصوص رفتارهای ویژه مواد وقتی که تحت شرایط خاص از جمله فشار و دمای بالا قرار می‌گیرند دارای اهمیت است. به منظور انجام محاسبات ترمودینامیکی باید اطلاعات دقیقی از معادله حالت و ویژگیهای ترمودینامیکی در دست داشت. پس از تست کردن همگرایی های مورد نیاز، انرژی کل محاسبه شده به معادله حالت مورناگان برآزش داده می‌شود. نتایج حاصل از اندازه گیری پارامترهای شبکه و مدول حجمی توافق خوبی با تجربه نشان می‌دهند. ویژگیهای ترمودینامیکی در بازه دمایی صفر تا 1000 کلوین یعنی محدوده ای که مدل شبه هارمونیک کاملاً موفق است اندازه گیری شد. آثار فشار در محدوده صفر تا 60 گیگا پاسکال مطالعه گردید. تغییرات گرمای ویژه بر حسب دما و فشار نشان داد که تغییرات آن در دماهای پایین به صورت T^3 و در دماهای بالا به یک حد اشباع می‌رسد که با تجربه سازگار است.

کلمات کلیدی : مطالعه ابتدا به ساکن ویژگی‌های الکترونی و ترمودینامیکی تیتانات کلسیم

[Islamic Azad University, Rasht Branch - Thesis Database](#)

[دانشگاه آزاد اسلامی واحد رشت - سامانه بانک اطلاعات پایان نامه ها](#)