



## بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

محاسبه انرژی های سطحی در مدل بار نقطه ای

الکترواستاتیک . II : کاربرد در زیرکون

عنوان انگلیسی مقاله :

Computation of Surface Energies in an Electrostatic  
Point Charge Model: II. Application to Zircon ( $ZrSiO_4$ )



توجه !

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، [اینجا](#) کلیک نمایید.



## بخشی از ترجمه مقاله

نتایج

- (1) در زیرکون PBC ها با  $\langle 100 \rangle$ ،  $\langle 1/2 \ 1/2 \ 1/2 \rangle$ ، و  $\langle 001 \rangle$  موازی هستند. تنها شکل های F منشور  $\{100\}$  و دو هرمی  $\{011\}$  هستند.
- (2) سطح منشور  $\{100\}$  از اکسیژن های متعلق به یون های سیلیکات تشکیل شده است. مرز  $\{011\}$  با یون های سیلیکات منفی یا یون های مثبت زیرکون اشغال شده است. شکل  $\{011\}$  می تواند با لایه های رشد مقدماتی با ضخامت  $d_{022}$  نیز رشد کند.
- این امر ظاهر منشوری شکل های رشد نظری را افزایش می دهد. در این مدل های رشد شکل S  $\{031\}$  می تواند حاضر باشد اگر بار اکسیژن  $q_{e_0} = -21e$  و پیوندهای قوی اضافی با جذب ناخالصی ها در سطح تامین شوند.
- (3) جذب پروتون ها، کمپلکس های سیلیس یا مولکول های آب در سطح بلور زیرکون در طول رشد می تواند منجر به پیوندهای هیدروژنی اضافی موازی با  $\langle 110 \rangle$  شود. این پیوندها می توانند کارکتر S  $\{110\}$  و  $\{001\}$  را به کاراکتر وجوه F تغییر دهند.

Conclusions 1) In zircon the PBCs are parallel to  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 1/2 \ 1/2 \ 1/2 \rangle$ ,  $\langle 001 \rangle$  and  $\langle 1/2, 1/2, 11/2 \rangle$ . The only F forms are the prism  $\{100\}$  and the dipyramid  $\{011\}$ . 2) The surface of the prism  $\{100\}$  consists of the oxygens belonging to the silicate ions. The boundary of  $\{011\}$  is occupied either by negative silicate ions or by positive zircon ions. The form  $\{011\}$  can also grow with elementary growth layers with thickness  $d_{022}$ . This enhances the prismatic habit of the theoretical growth forms. On these growth models the S form  $\{031\}$  could be present, if the oxygen charge  $q_{e_0} = -21e$  and additional strong bonds are provided by the adsorption of impurities on the surface. 3) Adsorption of protons, water molecules or silica complexes on the crystal surface of zircon during the growth could lead to additional hydrogen bonds parallel to  $\langle 110 \rangle$ . These bonds could change the S character of  $\{110\}$  and  $\{001\}$  into that of F faces.



توجه!

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، [اینجا](#) کلیک نمایید.

برای جستجوی جدیدترین مقالات ترجمه شده، [اینجا](#) کلیک نمایید.