

通讯

熔融CaF₂的径向分布函数

程兆年; 郑正明; 张静; 陈念贻

中国科学院上海冶金研究所, 中国科学院计算机化学开放实验室, 上海 200050

摘要:

关键词: 径向分布函数 熔融CaF₂ 分子动力学模拟

收稿日期 1993-02-20 修回日期 1993-03-22 网络版发布日期 1993-08-15

通讯作者: 程兆年 Email:

本刊中的类似文章

1. 冯望生; 房艳; 徐继香; 房春晖; 贾全杰; 王焕华; 姜晓明. 高斯多峰拟合在径向分布函数中的应用[J]. 物理化学学报, 2008, 24(03): 497-501
2. 沈秋婵; 梁婉春; 胡兴邦; 李浩然. 甲酰胺水溶液的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008, 24(07): 1169-1174
3. 陈聪 李维仲. 甘油水溶液氢键特性的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009, 25(03): 507-512
4. 吴晓萍; 刘志平. 室温离子液体[bmim][BF₄]和水混合物的计算机模拟研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(09): 1036-1041
5. 付一政, 刘亚青, 兰艳花. 端羟基聚丁二烯/增塑剂共混物相容性的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009, 25(07): 1267-1272
6. 殷开梁; 邹定辉; 张雪红; 席海涛; 夏庆. 含金纳米粒子链相关性探讨及其热稳定性的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2007, 23(08): 1207-1212
7. 郭立平; 韩甫田; 成之绪. 半结晶聚酯的两相分离及其可靠性分析 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(04): 372-376
8. 叶雅静; 张立同; 成来飞; 徐永东. 分子动力学模拟无定形BCN体系结构特征[J]. 物理化学学报, 2006, 22(07): 878-882
9. 金文正; 汪文川. Monte Carlo NPT系综法模拟考察几种水模型[J]. 物理化学学报, 1999, 15(09): 799-804
10. 王建召; 童张法; 韦藤幼; Yiping TANG. 由L-J流体的FMSA状态方程计算流体的PVT性质[J]. 物理化学学报, 2006, 22(06): 661-665
11. 张婉静; 稽天浩; 孟宪平; 刘英骏; 林炳雄. 嵌入Y型分子筛中钨簇合成与结构的研究[J]. 物理化学学报, 1996, 12(07): 609-614

扩展功能

本文信息

PDF(775KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 径向分布函数

▶ 熔融CaF₂

▶ 分子动力学模拟

本文作者相关文章

▶ 程兆年

▶ 郑正明

▶ 张静

▶ 陈念贻