

引用信息: ZHANG Tao;GU Ting-Kun;QI Yuan-Hua. Acta Phys. -Chim. Sin., 2005, 21 (02): 173-176 [张弢;谷廷坤;齐元华. 物理化学学报, 2005, 21(02): 173-176]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

熔体快速冷凝过程的微观结构演化

张弢;谷廷坤;齐元华

山东大学物理与微电子学院, 济南 250061; 山东大学电气工程学院, 济南 250061

摘要:

采用分子动力学模拟技术研究了金属间化合物AuCu₃熔体的双体分布函数、键对、多面体、配位数等在快速凝固条件下随温度的变化情况,详细考察了AuCu₃中微观组团随温度的演化特点.结果表明,AuCu₃熔体降温至700 K时双体分布函数的第二峰已发生劈裂,液态金属中已经产生了非晶态;同时液体中的键对数及多面体数与温度的关系都表明,在上述向非晶转变的过程中,AuCu₃熔体的确发生了微观结构组态的变化,其中以液体中的缺陷多面体随温度变化最为剧烈.

关键词: FS(Finnis-Sinclair)多体作用势 分子动力学模拟 快速冷凝

收稿日期 2004-06-16 修回日期 2004-09-15 网络版发布日期 2005-02-15

通讯作者: 张弢 Email: venessazh@sdu.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(1697KB\)](#)

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

▶ [FS\(Finnis-Sinclair\)多体作用势](#)

▶ [分子动力学模拟](#)

▶ [快速冷凝](#)

本文作者相关文章

▶ [张弢](#)

▶ [谷廷坤](#)

▶ [齐元华](#)