

液态金属Al凝固过程中的团簇结构与幻数特性

刘让苏; 刘凤翔; 董科军; 郑采星; 刘海蓉; 彭平; 李基永

湖南大学, 应用物理系; 材料科学与工程学院; 化学化工学院, 长沙 410082

摘要:

采用分子动力学方法,对含有100000个Al原子的液态金属系统在凝固过程中团簇结构的形成特性进行了模拟研究,并采用原子团类型指数法(CTIM)来描述各种类型的团簇结构组态. 研究结果显示:在液态金属Al的凝固过程中,只有与1551键型相关的二十面体原子团(12 0 12 0)及其组合形成的各种团簇结构,对微结构的演变起着关键的、决定性的作用;由不同数目、不同类型基本原子团组成的各种层次的团簇结构,都在一定的原子数区段内呈现出峰值,即幻数点;系统的幻数序列为:13(13), 19(21), 25~28(27), 31~33(29~30), 37、39,...(括号内为液态时对应的幻数值),与Harris等人的实验结果甚为相符.本模拟研究所用的团簇结构按层次区段来研究幻数序列的方法,可为实验结果提供更为合理的模型解释.

关键词: 液态金属 凝固过程 团簇结构 幻数 计算机模拟

收稿日期 2004-03-05 修回日期 2004-04-26 网络版发布日期 2004-09-15

通讯作者: 刘让苏 Email: rslu@mail.hunu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 张爱龙; 刘让苏; 梁佳; 郑采星. 冷却速率对液态Ni凝固过程中微观结构演变影响的模拟研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(04): 347-353
2. 刘让苏, 周群益, 李基永. 液态金属结构变化的分子动力学模拟研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(08): 755-757
3. 刘让苏; 刘凤翔; 李基永; 董科军; 郑采星. 液态金属铝的热历史对凝固微结构的影响[J]. 物理化学学报, 2003, 19(09): 791-794
4. 林艳; 刘让苏; 田泽安; 侯兆阳; 周丽丽; 余亚斌. 冷却速率对液态金属Zn快速凝固过程中微观结构的影响[J]. 物理化学学报, 2008, 24(02): 250-256
5. 李辉; 边秀房; 李玉忱; 刘洪波; 陈魁英. 贵金属Au的液态结构分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1998, 14(07): 630-634

扩展功能

本文信息

PDF(1689KB)

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

▶ 液态金属

▶ 凝固过程

▶ 团簇结构

▶ 幻数

▶ 计算机模拟

本文作者相关文章

▶ 刘让苏

▶ 刘凤翔

▶ 董科军

▶ 郑采星

▶ 刘海蓉

▶ 彭平

▶ 李基永