

LiF-KCl熔盐溶液的Monte Carlo法计算机模拟研究 II: 熔体结构与物性的关系

徐弛,江乃雄,陈念贻

中国科学院上海冶金研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文用Monte Carlo法对互易盐系LiF-

KCl熔盐溶液的局部结构作了计算机模拟。计算了该熔盐溶液的总势能和势能分布。在1200K模拟温度下,该熔盐溶液中大部份离子组成各种形式的离子团。根据模拟的互易盐系熔盐溶液模型,讨论了熔体局部结构和物性之间的关系。

关键词 [计算](#) [计算机模拟](#) [结构与性能关系](#) [势能](#) [氯化钾](#) [氟化锂](#) [熔盐](#) [蒙特卡罗模拟](#)

分类号 [0645](#)

Computerized simulation molten LiF-KCl solution by Monte Carlo method II: Relation of structure to thermodynamic properties

XU CHI,JIANG NAICIONG,CHEN NIANYI

Abstract The local structures of LiF-KCl molten solns. were simulated by applying the Monte Carlo method. The total potential energies of the melts were calculated and a relationship was established between thermodyn. and structure properties.

Key words [CALCULATION](#) [COMPUTERIZED SIMULATION](#) [STRUCTURE AND PROPERTY CORRELATION](#) [POTENTIAL ENERGY](#) [POTASSIUM CHLORIDE](#) [LITHIUM FLUORIDE](#) [FUSED SALTS](#) [MONTECARLO SIMULATIONS](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(0KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献](#)

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](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 包含“计算”的 相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [徐弛](#)
- [江乃雄](#)
- [陈念贻](#)