



## 氟化钾团簇的相变、成核和重结晶的分子动力学模拟

### Molecular Dynamics Simulation of Phase Transition, Nucleation, Recrystallization of KF Clusters

摘要点击: 28 全文下载: 21

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

中文关键词: [分子动力学模拟](#) [相变](#) [成核](#) [重结晶](#) [氟化钾团簇](#)

英文关键词: [molecular dynamics simulation](#) [phase transition](#) [nucleation](#) [recrystallization](#) [potassium fluoride cluster](#)

基金项目:

作者	单位
<a href="#">王国勋</a>	<a href="#">南京工业大学化学化工学院, 南京 210009</a>
<a href="#">朱小蕾</a>	<a href="#">南京工业大学化学化工学院, 南京 210009</a>
<a href="#">杨操</a>	<a href="#">南京工业大学化学化工学院, 南京 210009</a>

中文摘要:

我们利用Born-Mayer-Huggins相互作用势函数对 $(\text{KF})_N$ ( $N=108, 256, 500$ 和 $864$ )团簇进行了分子动力学(MD)模拟。为了避免周期性边界条件对相变、成核和重结晶的干扰作用, 对体系采用了自由边界。基于MD模拟结果, 对团簇的熔化温度、熔化焓、扩散系数、成核速率、固液界面自由能、临界核大小等进行了计算和讨论。在对 $(\text{KF})_{864}$ 双晶团簇的热退火模拟中, 观察到了固态的重结晶和晶粒的生长。经典的成核理论成功地解释了 $(\text{KF})_{864}$ 双晶团簇的重结晶MD模拟结果。

英文摘要:

Molecular dynamics (MD) simulations are performed on clusters comprised of 108, 256, 500 and 864  $\text{K}^+\text{F}^-$  ion pairs represented by a Born-Mayer-Huggins interaction potential. Clusters with free boundaries are chosen in order to avoid the interference with phase transition, nucleation, and recrystallization caused by periodic boundary conditions. The melting points, heats of fusion, diffusion coefficients, nucleation rates, solid-liquid interfacial free energy, critical nucleus sizes are computed and discussed based on the results of MD simulations. Solid state recrystallization and grain growth from twin crystal  $(\text{KF})_{864}$  cluster are observed during the thermal annealing process in MD simulations. Classical nucleation theory (CNT) is successful used to explain the results of MD simulations for nucleation of recrystallization.

您是第595041位访问者

主办单位: 中国化学会 单位地址: 南京大学化学楼

服务热线: (025)83592307 传真: (025)83592307 邮编: 210093 Email: [wjhx@netra.nju.edu.cn](mailto:wjhx@netra.nju.edu.cn)

[本系统由北京勤云科技发展有限公司设计](#)