

引用信息: DING Yuan-Fa; ZHANG Yue; ZHANG Fan-Wei; ZHANG Da-Hai; LI Zhong-Ping. Acta Phys. -Chim. Sin., 2008, 24(05): 788-792 [丁元法;张跃;张凡伟;张大海;李仲平. 物理化学学报, 2008, 24(05): 788-792]

本期目录 | 在线预览 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

石英玻璃高温分子动力学模拟中的势函数

丁元法; 张跃; 张凡伟; 张大海; 李仲平

北京航空航天大学材料科学与工程学院, 北京 100083; 航天材料及工艺研究所, 北京 100076

摘要:

根据石英玻璃高温下的分子动力学研究, 分析了势函数中多体势在高温应用下的局限性, 认为离子型对势在模拟石英玻璃高温结构方面优于多体势. 在原子电荷转移方面, 计算并分析了Si和O原子电荷大小对计算原子自扩散系数的影响, 发现用原子电荷转移较少的Morse势函数计算的原子自扩散激活温度比BKS势函数计算的低, 而且在同一温度下, 自扩散系数的计算值也随着原子电荷的减小而增大, 因此, 较小的原子电荷转移应该有利于石英玻璃在高温下的动力学性能的研究.

关键词: 石英玻璃 高温 分子动力学 多体势 电荷转移

收稿日期 2007-10-11 修回日期 2008-02-18 网络版发布日期 2008-03-19

通讯作者: 张跃 Email: zhangy@buaa.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\(257KB\)](#)

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

▶ [石英玻璃](#)

▶ [高温](#)

▶ [分子动力学](#)

▶ [多体势](#)

▶ [电荷转移](#)

本文作者相关文章

▶ [丁元法](#)

▶ [张跃](#)

▶ [张凡伟](#)

▶ [张大海](#)

▶ [李仲平](#)