

## 小尺寸金属团簇熔化过程的分子动力学模拟

陈莹; 王秀英; 赵俊卿

山东建筑大学理学院, 济南250101

摘要:

运用分子动力学方法模拟了小尺寸金属团簇的熔化过程, 原子之间的作用采用嵌入原子法(EAM)模型, 计算了均方根键长涨落 $\delta$ 随温度的变化, 以及升温过程中团簇热容的变化. 包含55、56个原子的面心立方(FCC)结构Au团簇的熔化过程是基本相同的. 而同样结构和数目Cu团簇的熔化过程却呈现出不同的趋势. Cu55、Cu56在模拟过程中都出现了FCC结构到二十面体结构的转变. 但由于表面多出了一个原子, Cu56的热容曲线比Cu55多了一个峰, 体系出现了预熔化现象. 这表明小尺寸团簇的固液转变的过程与团簇的原子类型、几何结构和原子数目密切相关.

关键词: 团簇 熔化 分子动力学模拟

收稿日期 2008-04-21 修回日期 2008-08-17 网络版发布日期 2008-09-29

通讯作者: 陈莹 Email: chen\_ying@126.com

### 本刊中的类似文章

1. 郭彩红; 贾建峰; 郭玲; 武海顺.  $\text{Ga}_x\text{P}_y$  ( $x+y=8$ )及其阴离子团簇的结构与性质的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(10): 1253-1259
2. 盛六四, 齐飞, 高辉, 罗志勇, 张允武.  $\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}$ 分子团簇内部离子-分子反应产生 $\text{C}_4\text{H}_5\text{Cl}^+$ 的研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(11): 1004-1007
3. 马晨生, 李海洋, 张晓光, 白吉玲, 王秀岩, 张桂秋, 王利, 何国钟, 楼南泉. 铜氧团簇负离子的产生[J]. 物理化学学报, 1996, 12(02): 185-189
4. 史扬, 高振, 朱起鹤, 孔繁敖. 气相中原子分子成簇动力学 I. 动力学的基本模型[J]. 物理化学学报, 1996, 12(03): 196-201
5. 胡义华; 王小涓; 詹业宏; 宁铎; 陈丽; 刘美希; 陆文云; 杨世和. Van der Wals团簇 $\alpha$ -xylene  $\text{N}_2$ 的共振双光子电离光谱[J]. 物理化学学报, 1997, 13(04): 289-292
6. 王丽; 杨华; 边秀房; 李喜珍. 自由表面的Ni原子团簇的熔化[J]. 物理化学学报, 2001, 17(12): 1097-1101
7. 李玥; 王秀岩; 张晓光; 李连斌; 楼南泉; 盛六四; 张允武. van der Waals团簇ArHCl的光电离研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(04): 322-327
8. 郭向云. 钼团簇形成和增长机理的Monte Carlo研究[J]. 物理化学学报, 2003, 19(02): 174-176
9. 张霞; 唐紫超; 高振. 镨分族元素二元团簇及其与Co形成的团簇离子[J]. 物理化学学报, 2003, 19(01): 4-8
10. 于忠德; 张南; 高振; 孔繁敖; 朱起鹤. 铜硫团簇离子的形成与光解[J]. 物理化学学报, 1994, 10(02): 97-99
11. 张南; 于忠德; 冯万永; 武小军; 高振; 朱起鹤; 孔繁敖. 含氢碳原子团簇的初步研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(02): 126-129
12. 张南; 于忠德; 武小军; 高振; 朱起鹤; 孔繁敖. 钼硫原子簇的形成及激光裂解的初步研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(01): 44-49
13. 李海洋; 马晨生; 白吉玲; 何国钟. Mn/O团簇负离子的组成规律及增长机理[J]. 物理化学学报, 1997, 13(10): 946-949
14. 张小岗; 郭向云; 钟炳; 彭少逸. 甲醇在超临界环己烷中形成簇团的Monte Carlo初探[J]. 物理化学学报, 1997, 13(10): 898-903
15. 李海洋; 马晨生; 白吉玲; 何国钟. 样品价态对激光气化产生Cu/Cl团簇的组成和稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 1997, 13(10): 933-937
16. 徐灿; 朱莉芳; 高晨阳; 曹娟. 硅氧团簇( $\text{SiO}_2$ ) $n\text{O}_2\text{H}_4$ 的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(02): 152-155
17. 马文瑾; 武海顺.  $\text{AlmN}_2^-$  ( $m=1\sim 8$ )团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2006, 22(02): 178-182
18. 邵士勇; 李海洋; 罗晓琳; 肖雪; 牛冬梅; 温丽华; 王宾; 梁峰; 侯可勇. 乙腈团簇增强的激光高价电离现象的质谱研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(10): 1113-1116
19. 张材荣; 陈宏善; 陈玉红; 冯旺军; 李维学; 许广济; 寇生中.  $\text{Al}_8\text{P}_8$ 团簇环状结构与性质的密度泛函理论研究[J]. 物

扩展功能

本文信息

PDF(648KB)

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

▶ 团簇

▶ 熔化

▶ 分子动力学模拟

本文作者相关文章

▶ 陈莹

▶ 王秀英

▶ 赵俊卿

20. 宋燕;陈宏善;张材荣;王广厚.(BN)<sub>n</sub>(n≤12)团簇的结构及成键性质[J]. 物理化学学报, 2005,21(07): 735-739
21. 刘让苏;刘凤翔;董科军;郑采星;刘海蓉;彭平;李基永.液态金属Al凝固过程中的团簇结构与幻数特性[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1093-1098
22. 吕瑾;许小红;武海顺.Co<sub>n</sub>(n=2~10)团簇的结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1118-1122
23. 白玉林;陈向荣;杨向东;芦鹏飞.硫团簇S<sub>n</sub>(n=2~8)结构的朗之万分子动力学计算[J]. 物理化学学报, 2003,19(12): 1102-1107
24. 牛冬梅;张树东;张先焱;李海洋.激光溅射Cu等离子体与气相C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH团簇的反应[J]. 物理化学学报, 2003,19(12): 1114-1118
25. 马文瑾;武海顺.Al<sub>m</sub>N<sub>2</sub> (m=1~8)团簇结构与稳定性的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 290-295
26. 李志伟;李香芝;许先芳;赵存元;陈六平.NaP<sub>4</sub>及其正负离子的结构和光谱性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 670-674
27. 吕瑾;许小红;武海顺.(CoCr)<sub>n</sub> (n=1-5)合金团簇的结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1252-1256
28. 马文瑾;张献明;许小红;王艳宾;武海顺.C<sub>n</sub>Al<sub>2</sub> (n=1-10)团簇的结构特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1477-1480
29. 罗小艳;贾文红;张聪杰.In<sub>n</sub>Na和In<sub>n</sub>Na<sup>+</sup>(n=2-8)的团簇结构和电子性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 261-266
30. 张妍宁;王丽;边秀房.中介尺度Au纳米团簇熔化的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2003,19(01): 35-39
31. 沈少来;唐景昌;曹松;汪雷.Cl/GaAs(111)表面近边X射线吸收精细结构的多重散射研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(11): 1054-1058
32. 马文瑾;武海顺.Al<sub>m</sub>N(m=2~9)团簇结构与稳定性的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(10): 927-932
33. 刘守新;孙承林.负载Ag对TiO<sub>2</sub>界面光生电子转移效率的影响[J]. 物理化学学报, 2004,20(06): 621-625
34. 王利江;张聪杰;武海顺.C<sub>n</sub>B<sup>δ</sup>(δ=0, ±1; n=1~6)团簇的结构、稳定性和光谱[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 244-249
35. 陈文武;高毅勤;吴国胜;杨达林;盛六四;武国华;叶为全;张允武.六氢吡啶团簇的研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(12): 1067-1070
36. 马晨生;李海洋;白吉玲;何国钟.幻数团簇离子Mn<sup>+</sup><sub>5</sub>[J]. 物理化学学报, 1996,12(10): 926-928
37. 许宗荣;高艳玲.Si<sub>4+</sub>Si<sub>3</sub>反应动力学: 振动激发态对反应的影响[J]. 物理化学学报, 1996,12(05): 396-399
38. 杨忠志 刘永军.精密从头算与ABEEM/MM模型对水团簇(H<sub>2</sub>O)<sub>11</sub> 9种低能结构的计算[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 928-934
39. 葛桂贤, 唐光辉, 井群, 罗有华.CO与Pd<sub>n</sub>(n=1-8)团簇的相互作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1195-1200
40. 李向富;陈宏善;孟凡顺;刘百幸.(AgI)<sub>n</sub>团簇熔化行为的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 103-106
41. 葛桂贤 罗有华 张建玮.FMBe<sub>n</sub>(FM=Fe, Co, Ni; n=1-12)团簇结构和电子性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1891-1896
42. 雷雪玲;祝恒江;王先明;罗有华.用密度泛函理论研究Zr<sub>n</sub>B(n=1-13)团簇的结构及性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1655-1661
43. 邱玮玮;林梦海.过渡金属团簇Nb<sub>n</sub>、Co<sub>n</sub>(n≤4)和Nb<sub>x</sub>Co<sub>y</sub>(x+y≤8)的芳香性[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1573-1578
44. 张强;杨忠志.水分子团簇分子力场方法的比较研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1565-1571
45. 姜勇;储伟;江成发;王耀红.Pd<sub>n</sub>(n=1-7)团簇及其与甲烷相互作用的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1723-1727
46. 熊海灵;袁勇智;李航;朱华玲;蒋先军.长程范德华力导向作用下胶体凝聚的计算机模拟[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1241-1246
47. 王艳宾;马文瑾;张静 武海顺.C<sub>n</sub>Al (n=2-11)团簇的结构特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 873-876
48. 黄卡玛;贾国柱;杨晓庆.微波频率下氯化钠溶液电导率的非线性特性[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 20-24
49. 张静;王艳宾;武海顺.(BCO)<sup>+</sup><sub>n</sub>(n=1-12)团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 733-737
50. 吴国胜;高毅勤;陈文武;杨达林;盛六四;武国华;叶为全;张允武.四氢吡喃的同步辐射光电离研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(02): 188-192
51. 王丽;衣粟;边秀房.Ni<sub>3</sub>Al合金液态与非晶中的原子团簇 [J]. 物理化学学报, 2002,18(04): 297-301

52. 曾祥华;徐秀莲;王锋;张丰收.新团簇形成的动力学研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 26-29
53. 梁汉东;刘敦一金-硫团簇负离子组成特征的探讨 [J]. 物理化学学报, 2001,17(09): 859-864
54. 蔡永;朱熙文;颜旻;陈永泰;高克林.过渡金属团簇 $M_2^+$  (M=Fe、Co、Ni)与CO的化学反应[J]. 物理化学学报, 1999,15(02): 162-166
55. 刘剑波;韩春英;郑卫军;高振;孔繁敖.铅、硫团簇的形成、反应与光解[J]. 物理化学学报, 1999,15(01): 22-27
56. 韩春英;刑小鹏;张霞;高振;朱起鹤.铁、钴、镍/磷二元团簇离子的形成与光解[J]. 物理化学学报, 2000,16(09): 818-824
57. 李月;胡勇军;吕日昌;王秀岩. $C_4H_5N-(NH_3)_n$ 氢键团簇的多光子电力与从头计算[J]. 物理化学学报, 2000,16(09): 810-817
58. 王诚;刘磊;李郁芬. $(SiO_2)_n$ 团簇的基态能量和结构[J]. 物理化学学报, 1999,15(02): 143-149
59. 王利江;张聪杰. $B_2C_n^+$  ( $n=1\sim 9$ )团簇的结构及其稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 726-731
60. 曹玉群;黄荣彬;郑兰荪.激光溅射下原子团簇生长的非平衡动力学[J]. 物理化学学报, 1999,15(04): 345-350
61. 石土金;刘力;杨达林;朱起鹤.1,4-二氧六环和氨分子氢键团簇的从头算[J]. 物理化学学报, 2000,16(05): 416-421
62. 曹玉群;黄荣彬;郑兰荪.激光溅射下原子团簇生长的非平衡动力学[J]. 物理化学学报, 2000,16(07): 621-626
63. 刘剑波;韩春英;曾嵘;高振;朱起鹤.硅、锗、锡、铅/磷二元原子团簇的形成、光解和结构[J]. 物理化学学报, 1999,15(10): 883-889
64. 郑化桂;曾京辉;梁家和;刘方新.溶剂化团簇银的制备及表征[J]. 物理化学学报, 1999,15(11): 980-985
65. 刘鹏;曾嵘;高振;朱起鹤.银和硫团簇的反应[J]. 物理化学学报, 2000,16(01): 93-95
66. 胡义华;刘美希;王小涓;周金运;杨新;杨世和.两聚物 $(C_6H_5F)_2^+$ 的光解离光谱[J]. 物理化学学报, 1999,15(12): 1057-1059
67. 钱萍;杨忠志.应用ABEEM/MM模型研究水分子团簇 $(H_2O)_n$  ( $n=11\sim 16$ )的性质[J]. 物理化学学报, 2006,22(05): 561-568
68. 陈莹;边秀房;孙民华;王丽.铝原子Bernal多面体团簇的理论研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(03): 242-245
69. 张树东;朱湘君;王艳;孔祥和.甲醇团簇的多光子电离质谱及其从头算[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 379-383
70. 史扬;张南;高振;朱起鹤;孔繁敖.铝硫二元团簇的组分及其光解规律[J]. 物理化学学报, 1993,9(03): 299-301
71. 马文瑾;王艳宾;张静;武海顺.  $BmN$  ( $m=2\sim 9$ )团簇结构的特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(02): 169-172
72. 高廷红, 刘让苏, 周丽丽, 田泽安, 谢泉.液态 $Ca_7Mg_3$ 合金快速凝固过程中团簇结构的形成特性[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2093-2100
73. 陈秀敏, 杨斌, 陶东平, 戴永年. $AlCl_3$ 歧化反应分解法制备金属铝过程中 $[AlCl]_n$ 的形成机理[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
74. 唐典勇, 黄雪娜, 邹婷, 金诚, 胡建平, 伏秦超.金钡二元小团簇的几何结构与电子性质[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0