

液体界面现象及表面张力的分子动力学模拟

丁家强

中国科学院力学研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 本文利用分子动力学计算机模拟的方法,研究了氩的固-液、液-气和气-固的界面现象。显示了液体的零级径向分布是有序的,与固体相邻的液体部分有类晶结构,固体表面出现了气体吸附层。表面张力计算结果与实验值很好的吻合,证明Lennard-Jones势对球形原子的相互作用作了很好的描述,在表面张力计算中可以忽略去截断效应。

关键词 [氩](#) [分子动力学](#) [界面现象](#) [表面张力](#)

分类号

MOLECULAR DYNAMIC SIMULATION FOR INTERFACE PHENOMENA AND SURFACE TENSION OF LIQUID

中国科学院力学研究所

Abstract

In this paper, the interface phenomenon including solidliquid, liquid-gas and gas-solid of krypton is studied by means of the molecular dynamic computer simulation method. It is shown that the zero radial distribution of liquid is arranged in order, atoms at the side of the liquid near the interface of solid-liquid have similar-crystal structure, and at the surface of solid there is an absorptive layer with gases. The result of surface tension obtained is in agreement with the experimental data. This fact s...

Key words [氩](#) [分子动力学](#) [界面现象](#) [表面张力](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(182KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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“氩”的 相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章
- [丁家强](#)