

α 铁晶界熵及表面张力的分子动力学模拟

丁家强, 陈致英

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 晶界也是一种界面。表面张力是晶界的一个重要的热力学量。本文采用计算机分子动力学模拟(CMD)方法计算 α -Fe, $\Sigma=9$ 的晶界在不同温度和压力下的表面张力, 结果与实验值的比较是满意的。发现熵对晶界的表面张力的贡献是很小的, 通常可以忽略不计。

关键词 [分子动力学计算机模拟](#) [\$\alpha\$ 铁](#) [熵](#) [表面张力](#) [晶界](#)

分类号

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF ENTROPY AND SURFACE TENSION FOR GRAIN BOUNDARY OF α -Fe

中国科学院力学研究所

Abstract

The grain boundary is an interface, and the surface tension is one of its important thermodynamic property. In this paper, the surface tension of the grain boundary for α -Fe, $\Sigma=9$ at various temperatures and pressures is calculated by means of Computer Molecular Dynamics (CMD). The results agree satisfactorily with the experimental data. It is shown that the contribution of entropy to surface tension of α -iron grain boundary can be ignored. The grain boundary is an interface, and the surface tension is one of its i...

Key words [entropy](#) [surface tension](#) [\$\alpha\$ -iron](#) [computer molecular dynamics simulation](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(217KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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 “分子动力学计算机模拟” 的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)

- [丁家强](#)
- [陈致英](#)