

关联参照模型和位错发射过程的分子动力学模拟

汤奇恒, 王自强

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 提出关联参照模型和随位错位置变化的柔性位移边界条件. 提供了一个在固定位移边界条件下位错穿越边界的方法. 应用三维分子动力学方法研究了体心立方 (BCC) 金属晶体钼裂尖发射位错的力学行为.

关键词 [关联参照模型](#) [分子动力学](#) [位错发射](#) [柔性边界条件](#)

分类号

THE CORRELATIVE REFERENCE MODEL AND THE MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF THE DISLOCATION EMISSION

中国科学院力学研究所

Abstract

A correlative reference model for the computer simulation of the molecular dynamics is proposed in this paper. Supposing that there is an infinite elastic continuum with a single edge crack, its elastic constants, such as E, G, ν , are the same as those of the simulated crystal. There is a correlation between the realistic sample and the reference model. Two requirements must be satisfied in the simulation, see Figs. 1a and 1b. (1) The atomic displacement in the region 2 in Fig. 1a is determined by that o...

Key words [correlative reference model](#) [molecular dynamics](#) [dislocation emission](#) [flexible displacement boundary](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(535KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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“[关联参照模型](#)”的 [相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [汤奇恒](#)
- [王自强](#)