

RbCl熔解的分子动力学模拟研究

程兆年, 丁弘, 雷雨, 许立

中国科学院上海冶金研究所, 上海 200050

摘要:

采用等压分子动力学模拟方法, 研究了从晶相到液相不同温度下RbCl体系的结构和性质. 等压模拟给出与等容模拟一致的平衡性质、输运性质和结构特征. 键序参数计算表明, 在不计及导热过程情形下, 体系在振荡弛豫时间量级内完成熔化过程. 由于不需要密度数据, 等压模拟有望发展成为材料设计中的一种手段

关键词: RbCl 熔解过程 等压分子动力学模拟

收稿日期 1994-12-31 修回日期 1995-03-07 网络版发布日期 1995-10-15

通讯作者: 程兆年 Email:

本刊中的类似文章

1. 李林尉; 褚德莹; 刘瑞麟. RbCl由H₂O至混合溶剂(H₂O-DMF)标准迁移熵的测定[J]. 物理化学学报, 1999, 15(03): 265-268
2. 李林尉; 褚德莹; 刘瑞麟. RbCl在H₂O-DMF混合溶剂中活度系数的测定[J]. 物理化学学报, 1998, 14(08): 691-697

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1013KB)

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

▶ RbCl

▶ 熔解过程

▶ 等压分子动力学模拟

本文作者相关文章

▶ 程兆年

▶ 丁弘

▶ 雷雨

▶ 许立