

引用信息: Cheng Zhao-Nian; Jia Zheng-Ming; Xu Li; Chen Nian-Yi. Acta Phys. -Chim. Sin., 1994, 10(08): 676-679 [程兆年; 郝正明; 许立; 陈念贻. 物理化学学报, 1994, 10(08): 676-679]

[本期目录](#) | [下期目录](#) | [过刊浏览](#) | [高级检索](#)

[\[打印本页\]](#) [\[关闭\]](#)

熔融NaCaF₃、Na₂CaF₄和Na₃CaF₅的分子动力学模拟

程兆年; 郝正明; 许立; 陈念贻

中国科学院上海冶金研究所, 中国科学院计算机化学开放实验室, 上海 200050

摘要:

通过分子动力学模拟, 研究了熔盐溶液NaCaF₃、Na₂CaF₄和Na₃CaF₅体系, 模拟表明, 三种二元混合系的径向分布函数十分接近. 由模拟所得到的摩尔混合焓很好地与实验值一致. 混合焓与Na⁺离子势阱深度之间表现出很好的线性关系. 模拟表明, 在Na₂CaF₄体系中, 即NaF-CaF₂二元系处于低共熔混合组分比NaF:CaF₂=2:1时, Na⁺, Ca²⁺和F⁻离子的自扩散系数出现很大的反常.

关键词: NaF-CaF₂ 熔盐溶液 分子动力学模拟

收稿日期 1993-03-23 修回日期 1993-05-10 网络版发布日期 1994-08-15

通讯作者: 程兆年 Email:

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

[PDF\(592KB\)](#)

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

▶ [NaF-CaF₂](#)

▶ [熔盐溶液](#)

▶ [分子动力学模拟](#)

本文作者相关文章

▶ [程兆年](#)

▶ [郝正明](#)

▶ [许立](#)

▶ [陈念贻](#)