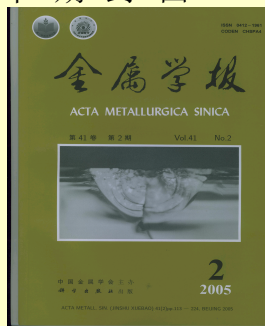


本期封面



2005年2期

栏目:

DOI:

论文题目: Cu-50%Ni合金快速凝固过程中原子团簇演变的分子动力学模拟

作者姓名: 刘俊 赵九洲 胡壮麒

工作单位: (中科院金属研究所, 沈阳 110016)

通信作者: 赵九洲

通信作者Email: jzzhao@imr.ac.cn

文章摘要: 采用NPT分子动力学模拟方法, 应用周期边界条件, 模拟了Cu-50%Ni(原子分数)合金熔体在不同冷却过程中原子团簇的演变情况, 给出了以 1×10^{14} K/s冷速冷却至室温时Cu-50%Ni非晶体系中存在的各种结构单元, 并研究了Cu, Ni原子在这些结构单元中的排列情况. 结果表明, 较高冷速下形成的非晶具有较高的能量和较高的非晶转变温度(T_g). 在冷却过程中, 原子间的短程作用逐渐加强, PCF图第一峰值逐渐增大. 1551键对非晶体系中占主导地位, 且受冷速影响较大. 体系中除了正二十面体外, 还存在着各种缺陷多面体, 其中含1551键对较多的缺陷多面体其数目也较多. FK多面体与Bernal多面体数目始终很少. 大原子(Cu)易于占据多面体顶点, 而小原子(Ni)则倾向于占据各多面体中心较大的空隙. 随着冷速的降低, 各多面体数目均有不同程度的下降.

关键词: Cu-Ni合金, 快速凝固, 原子团簇

分类号: 0561.1

关闭