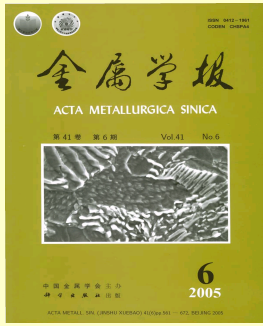


## 本期封面



2005年6期

栏目:

DOI:

论文题目: 金属Cu体熔化与表面熔化行为的分子动力学模拟与分析

作者姓名: 王海龙, 王秀喜, 梁海弋

工作单位: 中国科学技术大学中国科学院材料力学行为和设计重点实验室, 合肥 230026

通信作者: 王秀喜

通信作者Email: [xxwang@ustc.edu.cn](mailto:xxwang@ustc.edu.cn)

文章摘要:

采用Mishin嵌入原子势, 通过分子动力学方法模拟了金属Cu原子体系的体熔化和表面熔化行为, 分析了体熔化过程中系统结构组态和能量变化以及表面熔化过程中固-液界面迁移情况. 模拟结果表明: 在体熔化过程中, 结构组态与能量在1585 K处发生突变; 在表面熔化过程中, 固-液界面在1380 K保持静止. 两种熔化过程的不同发生机制是导致体熔点1585 K高于热力学熔点1380 K的原因. 在实际熔化中, 表面熔化处于支配地位, 实验测量的是热力学熔点. 得到的热力学熔点与实验结果吻合良好, 验证了本文所采用方法是正确和有效的, 同时也说明了Mishin嵌入原子势适合处理复杂无序体系.

关键词: Cu, 分子动力学, 体熔点

分类号: TG146.1, TB115

关闭