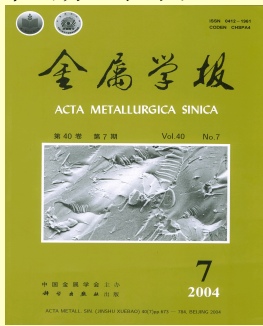


本期封面



2004年7期

栏目:

DOI:

论文题目: 过冷及非晶态Cu扩散性质的分子动力学模拟

作者姓名: 陈芳芳 张海峰 胡壮麒

工作单位: 中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家(联合)实验室, 沈阳 110016

通信作者: 张海峰

通信作者Email: hfzhang@imr.ac.cn

文章摘要: 采用分子动力学方法, 模拟了液态Cu在快速凝固过程中处于过冷态和非晶态时原子的扩散行为, 原子间相互作用势采用镶嵌原子(EAM)势, 扩散性质由平均方差(MSD)时间关联函数描述, 结构分析使用偶关联函数和对分析技术. 计算结果表明扩散运动对于晶体的产生起着重要的作用. 给出了不同弛豫时刻的微观结构信息.

关键词: 分子动力学, 扩散, 过冷态

分类号: TG139.8

关闭