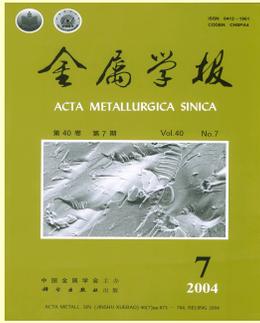


本期封面



2004年7期

栏目:

DOI:

论文题目: 分子动力学法对Cu--Ag合金熔化及凝固过程的模拟

作者姓名: 威力 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: 借助镶嵌原子势(EAM)利用等压等温的分子动力学方法(NPT--MD)模拟共晶Cu40Ag60合金的熔化、凝固过程. 利用径向分布函数和对分析技术研究Cu40Ag60合金在不同的冷却速率($1 \times 10^{\{11\}}$, $1 \times 10^{\{12\}}$, $5 \times 10^{\{12\}}$, $1 \times 10^{\{13\}}$ 及 $1 \times 10^{\{14\}}$ K/s)下的非晶形成能力和微观结构演化. 研究发现Cu40Ag60合金形成非晶态需要极大的冷却速率. 模拟中的结构分析揭示了合金在冷却过程中微观结构的演化规律.

关键词: Cu40Ag60合金, 镶嵌原子势, 分子动力学

分类号: TG139.8

关闭