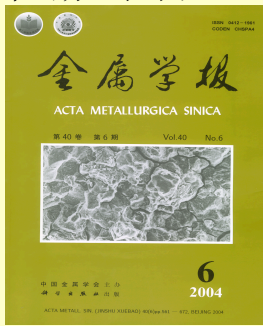


## 本期封面



2004年6期

栏目:

DOI:

论文题目: 金属高Miller指数表面能的分子动力学研究

作者姓名: 王晓春 贾瑜 姚乾凯 王飞 马健新 胡行

工作单位: 郑州大学物理工程学院材料物理重点实验室, 郑州 450052

通信作者: 贾瑜

通信作者Email: [jiayu@zzu.edu.cn](mailto:jiayu@zzu.edu.cn)

文章摘要: 利用嵌入原子型原子间相互作用势的分子动力学, 计算了金属Al, Cu, Ni位于两个晶带上([001]晶带和[-110]晶带)一系列高Miller指数面的表面能. 推广了基于表面结构单元模型的经验公式. 计算结果表明, 利用本文推广的经验公式可根据几个低Miller指数面的表面能估计出高Miller指数面的表面能和表面结构特征. 最密排面的表面能最低; 最密排面(111)和次密排面(110), (100)的表面能分别是表面能值随晶向角度 $\varphi$ 变化曲线上的极小值; 理论模拟结果、公式计算结果和已有的实验数据三者符合得较好.

关键词: 高Miller指数表面, 表面能, 分子动力学模拟

分类号: TG111, 0647.1

关闭