

本期封面



2003年10期

栏目:

DOI:

论文题目: 铝单晶中位错交割过程的分子动力学模拟

作者姓名: 李明, 褚武扬, 高克玮, 乔利杰

工作单位: 北京科技大学材料物理系, 北京 100083

通信作者: 褚武扬

通信作者Email: ljqiao@public.bta.net.cn

文章摘要: 利用EAM势对含160万个原子的Al单晶中位错的交割过程进行了分子动力学模拟. 结果表明, 当处在不同滑移面上的两个位错相交后, 有可能产生1/3空位或1/3间隙原子, 它们是晶体中的最小点缺陷, 可作为相交位错的节点而单独存在. 也可由1/3空位列或1/3间隙原子构成扩展割阶. 不同类型的位错相交后, 在运动位错的后面可留下一列空位或一系列间隙原子, 但也可能不留下点缺陷.

关键词: 分子动力学模拟, Al, 位错交割

分类号: 077

关闭