

本期封面



2002年3期

栏目:

DOI:

论文题目: 液态合金NiAl₃冷却过程中的分子动力学模拟

作者姓名: 徐昌业 张弢 吴爱玲 张晓茹

工作单位: 山东大学物理与微电子学院, 济南250061

通信作者: 徐昌业

通信作者Email: xcy5611@sohu.com

文章摘要: 采用反映原子间多体相互作用的F-S势模型, 对液态NiAl₃在不同冷却速率下的微观结构及其转变机制进行了分子动力学模拟, 得到了不同温度、不同冷速下NiAl₃的偶关联函数, 结构分析采用键取向序和对分析技术. 计算结果表明, 冷却速率对液态NiAl₃的结构转变有重要影响, 给出了不同冷却速率下液态NiAl₃结构转变的微观信息.

关键词: F-S多体势, 液态金属, 分子动力学模拟

分类号: TG391.9

关闭