

本期封面



2002年12期

栏目:

DOI:

论文题目: 铝元素的添加对锆基合金非晶形成能力影响的电子结构模型

作者姓名: 王晓东 齐民 董闯

工作单位: 大连理工大学材料工程系, 大连116024

通信作者: 齐民

通信作者Email: mingqi@dlut.edu.cn

文章摘要: 通过构建非晶合金的团簇模型, 利用离散变分法从电子层次研究了Al元素对Zr-Ni, Zr-Cu非晶合金中团簇稳定性的影响. 结果表明, Al原子的引入提高了团簇中原子间的亲和力, 并且随着Al原子数的增加, 亲和力增大, 导致新的团簇产生, 从而破坏了非晶的团簇结构. Al含量对Zr-Al-Ni非晶合金的稳定性的影响可通过Fermi能级处的态密度大小来反映.

关键词: 锆基非晶合金, Al添加, 短程有序

分类号: TB383, TG139.8

关闭