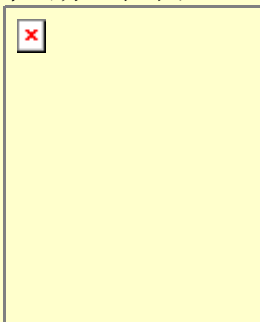


## 本期封面



2003年7期

栏目:

DOI:

论文题目: Ag粒子与Ni包覆Ag粒子熔化特性的价键分析

作者姓名: 彭平 韩绍昌 郑采星

工作单位: 湖南大学材料科学与工程学院 长沙410082

通信作者: 彭平

通信作者Email: [ppeng@imr.ac.cn](mailto:ppeng@imr.ac.cn)

文章摘要: 采用非相对论第一原理分子轨道DV-X $\alpha$ 模型簇方法, 计算了Ag纳米粒子自由表面与Ag-Ni半共格界面的电子结构, 并从键重叠聚居数QAB, 层内与层间原子的部分键合强度(PBO)以及界面原子的总键合强度(TBO)几个方面, 对Ag的(111), (100)与(110)自由表面和Ag-Ni半共格界面的价键结构进行了比较, 进而对其熔化特性进行了分析。初步提示了自由表面“预熔化”与共格界面“过热”的电子机制, 并从电子层次上考察了(111), (100)和(110)表面与界面的预熔化与过热程度及其熔化方式。

关键词: Ag纳米粒子 熔化 DV-X $\alpha$ 法

分类号: TG111.5

关闭