

液态物理概论

孙民华 牛丽 著



科学出版社

013026143

0414
93

哈尔滨师范大学出版基金资助

液态物理概论

孙民华 牛 丽 著



科学出版社

北 京



北航

C1632999

0414
93

内 容 简 介

本书全面介绍液体物理的研究概况、液态结构、液态基本理论框架、液态热力学、动力学以及势能曲面等相关液态物理知识。

由于液态物理的公式极其众多繁杂,初涉液态物理的学者,往往不能搞清楚其来源和相互关系,在阅读液态物理相关文献的时候往往理不清头绪。本书在编著时,考虑到这一点,在介绍液态物理一些方程的同时,也对其相关推导过程作了简明扼要的介绍,力争给出清晰的理论轮廓。本书不但着眼于液态物理的基础知识,还对势能曲面等液态物理领域最新理论进展进行介绍。

本书可作为大学物理专业、材料学或者材料工程专业的本科生教材,也适合作为材料学和材料加工专业的研究生教材;对于专门从事液态物理相关研究的科研人员也有很好的参考价值。

图书在版编目(CIP)数据

液态物理概论/孙民华,牛丽著. —北京:科学出版社,2013

ISBN 978-7-03-035320-7

I. ①液… II. ①孙… ②牛… III. ①液体理论-物理学-概论
IV. ①O552.4

中国版本图书馆CIP数据核字(2012)第191314号

责任编辑:钱 俊/责任校对:刘亚琦
责任印制:钱玉芬/封面设计:东方人华

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

双 青 印 刷 厂 印 刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2013年3月第 一 版 开本:B5(720×1000)

2013年3月第一次印刷 印张:7 1/2

字数:142 000

定价:48.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

目 录

引言	1
第 1 章 液态结构	3
1.1 排列的一般性概念	3
1.2 近程有序	6
1.3 双体分布函数	8
1.4 径向分布函数	11
1.5 结构因子	13
1.6 液体金属的微观结构	14
1.7 中程有序	18
1.8 偏径向分布函数	20
参考文献	23
第 2 章 液态的理论模型	24
2.1 Ornstein-Zernike 方程	24
2.2 Percus-Yevick 近似	26
2.3 Hypernetted-Chain 近似	26
2.4 从液态结构到原子作用函数	27
2.5 关于 $c(k)$ 的进一步讨论	28
2.6 硬球模型	29
2.7 硬球模型的状态方程	30
2.8 二元硬球液体的结构因子	32
2.9 硬球模型的扩散系数	35
2.10 硬球模型的改进	35
2.11 软球模型	36
参考文献	37
第 3 章 液固转变	39
3.1 利得曼熔化准则	40
3.2 结晶与形核的动力学条件	41
3.3 形核率	43
3.4 TTT 曲线	44
3.5 非均匀形核	46

3.6 结构因子与结晶	48
参考文献	49
第 4 章 从液态结构到物理性质	51
4.1 内能和状态方程	51
4.2 液态的压缩系数	52
4.3 液体的比热	54
4.4 液态的熵	55
参考文献	56
第 5 章 液态的多面体序	57
5.1 液态结构序的表示方法	57
5.2 表征液态多面体的新参数	61
参考文献	63
第 6 章 液体动力学	65
6.1 均方位移	65
6.2 范霍夫函数	66
6.3 非高斯参数	70
6.4 中间自散射函数	72
6.5 动态结构因子	75
6.6 速度自相关函数	81
6.7 黏度	83
参考文献	88
第 7 章 液体过冷到玻璃转变	89
7.1 Kauzmann 悖论	90
7.2 液态动力学的强弱	92
7.3 Adam-Gibbs 关系	94
7.4 MCT 理论	95
7.5 自由体积	97
7.6 体积和温度在液态过冷中的作用	98
参考文献	100
第 8 章 液体的势能曲面	102
8.1 势能曲面	102
8.2 强、弱液体的势能曲面	103
8.3 势能曲面对熵的表示	104
8.4 玻璃转变时的势能曲面	107
参考文献	111
索引	113

引言

液体是一种有趣而重要的物质，液体对于我们有着十分重要的意义。没有液体，就没有我们的地球，也没有生机勃勃的生命。

地球是一个充满液体的星球。液态水覆盖着地球四分之三的面积，水汽蒸腾，升而为云，降而为雨。雨水汇集成河流，充溢江河湖海。地球的生命正是借着这液态水的滋润，才能繁衍生息，运转不止。同时，水也冲刷着地表，塑造了山川谷底，造就了今日姿态万千的地貌。

很早，人们就认识到水对世界的重要性，并开始关注水的性质。老子在道德经里面，对水赋予了极高的赞美。他说“上善若水，水善利万物而不争”，他甚至把水的性质提高到哲学的高度，认为“水几于道：道无所不在，水无所不利，避高趋下，未尝有所逆，善处地也；空处湛静，深不可测，善为渊也；损而不竭，施不求报，善为仁也；圜必旋，方必折，塞必止，决必流，善守信也；洗涤群秽，平准高下，善治物也；以载则浮，以鉴则清，以攻则坚强莫能敌，善用能也；不舍昼夜，盈科后进，善待时也。”

几乎同一时代的孔子也关注着水，他看到了奔腾不息的河水，感叹时间的流逝，世界的变化，一去不复返，说“逝者如斯夫，不舍昼夜”。

古人们认识到水对生命和世界的重要性，也对水的性质感到十分神秘。在实践中，逐渐对水的性质有了一些感性的认识。例如，古人认识到水的流动性——“天道西转，水流东注”，认识到水对火的克制。但是，限于古代的科学技术水平，人们对水只能从其表象上进行研究，还不能对液体的结构有更深入的了解。



图 0-1 孔子见老子 (山东嘉祥宋山画像石)

水只是液体的一种。随着科学的发展,人们不但对水的物理和化学性质有了更深的认识,并且把视野转向了水以外的液体,对这些液体的结构和性质进行了广泛的研究,取得了许多有趣的结果。随着人们研究的深入,人类对液体的了解也越来越多。

本书将全面介绍人们对液态的探索所获得的一些最新认识。

第1章 液态结构

所谓的液态结构，在原子层次指的是液体中原子的排列方式。人们的问题是：液体原子的排列是混乱的还是规律可循？如果有规律，这种规律是什么？为了说明这个原子排列的问题，需要先从原子排列的基本概念谈起。

1.1 排列的一般性概念

众所周知，所有物质都是由原子组成的。不同物质中，原子的排列情况是不一样的。在讨论原子排列的时候，需要搞清楚两个基本概念：一个是排列的最小单元，即排列的基本图案；另一个是基本图案排列的形式，即点阵。为了说明这两个概念，从一维的排列说起。

一维排列

图 1-1 最上面的图案是四辆汽车按照直线排列。可以很简单地把这个图案分成基本图案和点阵的组合：基本图案是小车，而排列的点阵则是一维的有序点，如图 1-1 最下面的黑点所示意的。点阵上黑点的间距固定，周期性出现。

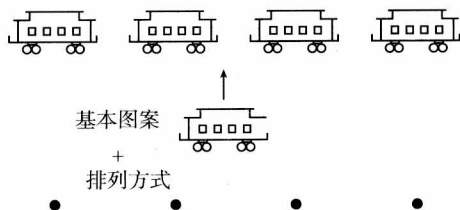


图 1-1 一维排列

二维排列

图 1-2 的图案排列是一种二维排列，其复杂程度比一维排列更大。初观察的时候很难看出图 1-2 中 (a), (b), (c) 之间的关系，但是，我们按照基本图案和点阵的方式，依然可以把每个图片分解成基本图案和点阵的组合。可以看出，虽然基本图案不同，但是其排列方式（二维点阵）却是一样的。

三维排列

晶体的原子排列是一种三维排列。世界上有数量众多的晶体，它们各有不同的排列方式。人们力图把它们的排列方式进行归纳，找出一般的规律。当把上面所说的概念推广到三维的时候，我们就能从纷繁复杂的晶体中得到晶体的原子排列规律。

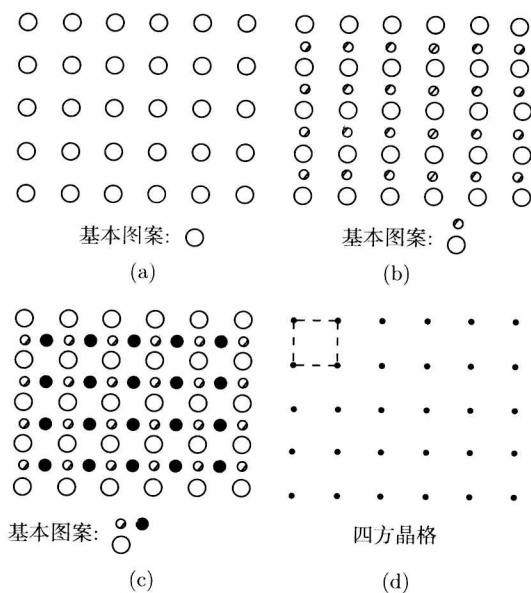


图 1-2 二维图案的排列方式

晶体的原子排列方式依然是：空间点阵+基本图案=晶体结构。作为晶体排列的基本图案，既可以是单个原子，也可以是多个原子的组合，即晶胞。晶胞是组成晶体的最小单元，根据晶胞的各种特征参量的差异，可以将晶胞分为 7 类，分别为：

立方 cubic(c) $a=b=c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ (只有一个晶胞参数 a)；

四方 tetragonal(t) $a=b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ (有 2 个晶胞参数 a 和 c)；

六方 hexagonal(h) $a=b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$ (有 2 个晶胞参数 a 和 c)；

正交 orthorhombic(o) $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ (有 3 个晶胞参数 a, b 和 c)；

单斜 monoclinic(m) $a \neq b \neq c, \alpha = \gamma = 90^\circ, \beta \neq 90^\circ$ (有 4 个晶胞参数 a, b, c 和 β)；

三斜 triclinic(a) $a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$ (有 6 个晶胞参数 a, b, c, α, β 和 γ)；

菱方 rhombohedral(r) $a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$ (有 2 个晶胞参数 a 和 α)。

如图 1-3 所示。晶胞的特征参量含义如图 1-4 所示。

根据原子在晶胞内的位置，又可以将晶胞分为如下 5 种排列方式，分别是简单立方 (primitive cubic)，原子位于晶胞的角上、底心排列 (base-face centered)、面心排列 (all-face centered)、体心排列 (body-centered) 以及六方排列 (primitive rhombohedral)，分别用字母 P, C, F, I, R 来标识。根据 7 种晶胞以及晶胞内原子的 5 种排列方式，法国晶体学家布拉维 (Bravais) 于 1850 年用数学群论的方法推导出晶体空间点阵只能有 14 种，这就是 14 种布拉维点阵，或者称为布

拉维格子，这 14 种格子包括 3 种立方类型 (cubic)、2 种四方 (tetragonal)、4 种正交 (orthorhombic)、2 种单斜 (monoclinic)、1 种菱形 (rhombohedral)、1 种六角 (hexagonal) 以及 1 种三斜 (triclinic)。

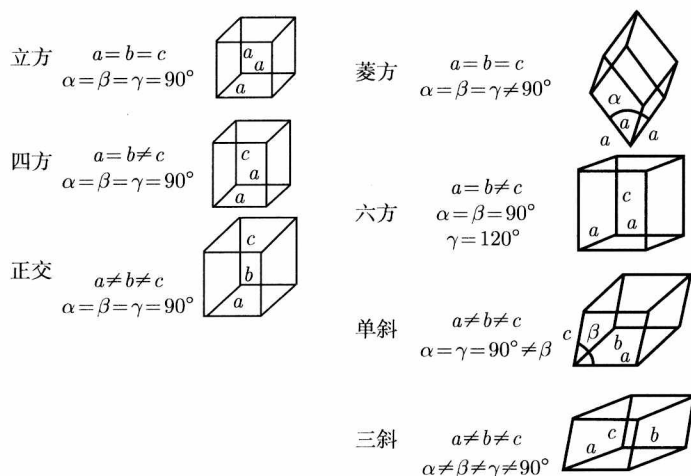


图 1-3 7 种基本晶胞

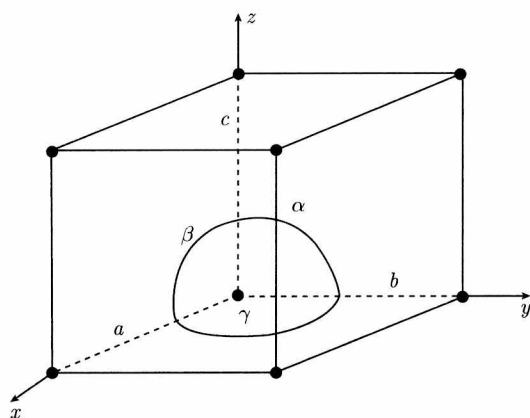


图 1-4 晶胞的特征参量包括晶胞的尺寸 a, b, c 以及内角 α, β, γ

图 1-5 是 14 种布拉维点阵以及它们的符号。所有的晶格类型都可以用这 14 种晶格点阵表示出来。晶体的排列会采用其中一种空间点阵，不同的晶体可能拥有不同的空间点阵；或基本图案不一样，或者是点阵的具体长度不一样。对于晶体更详细的理解可以看相关的晶体学教科书。

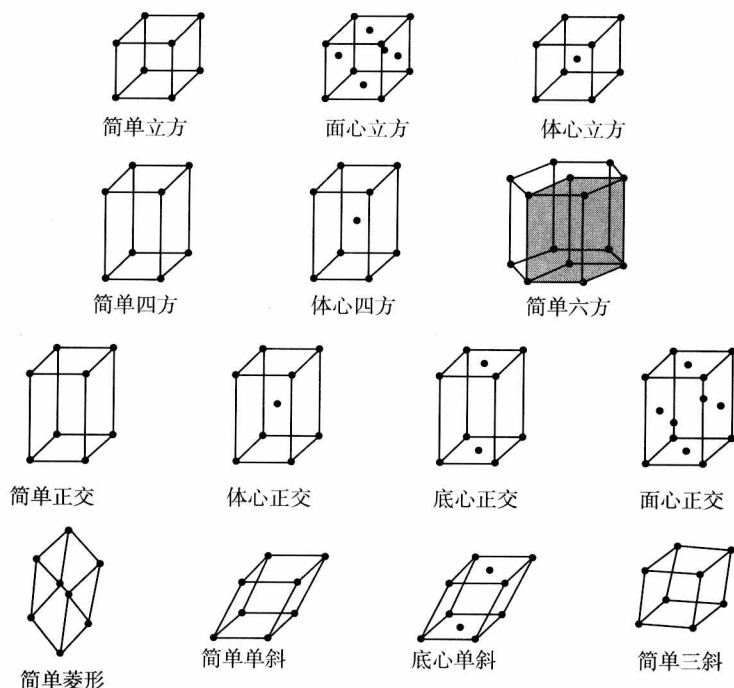


图 1-5 14 种布拉维点阵以及它们的符号

1.2 近程有序

如果把晶体看成是一个巨大的建筑物，那么晶胞就是构成这个建筑物的砖头，只要一个水平不是很高的工人，把一块块的晶胞按照一定的排列方式堆积起来，就会得到一块完美的晶体。

晶体的原子按照点阵排列的特征，可以用一句诗来描述，“横看成岭侧成峰”。无论在哪个方向看，原子都是有规律地向远方延伸，从理论上说，这种延伸可以无限长，但是具体到实际的晶体，由于晶界等缺陷的存在，其点阵排列方式不可能无限延伸，排列的长度大约为几千个原子。这种排列叫做长程有序。所谓的长程有序，是由于这种排列的长度相对于两个原子之间的距离来说是长的。一般来说，如果排列的长度是原子直径的 10 倍以上，就认为是一种长程有序排列。图 1-6 是 NaCl 晶体的原子排列示意图，可以清楚地看到，Na 原子与 Cl 原子在空间以点阵的方式有序排列，充分显示了晶体点阵排列的完美形式。

如果把原子看成球形，那么，原子的直径一般在几个埃的量级 ($1\text{\AA}=10^{-10}\text{m}$)。虽然不同原子的原子量差别会很大，但是原子直径的差别并不大。氧原子的直径为 $1.52\text{\AA}$ ，几种常见的原子与氧原子的大小对比如图 1-7 所示，可以看出，虽然原子的

大小不同,但是,基本上都在埃的数量级上。

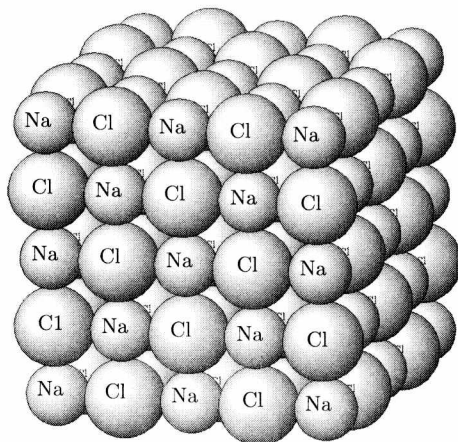


图 1-6 NaCl 晶体的 Na 原子和 Cl 原子按照点阵方式排列

资料来源: Nickels J E, Fineman M A, Wallace W E. Journal of Physical Chemistry, 1949, 53: 625

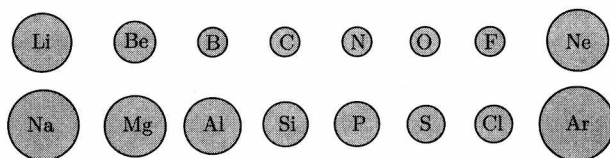


图 1-7 原子在埃的数量级上的体积比较

再来看一下气体原子的有序度,气体原子由于相互之间的距离很大,原子位置不固定,因此,气体原子的排列无论是在长程或者近程上,都是没有规律可言的。气体的原子排列概括为长程近程都无序。

液体的原子排列则介于晶态和气态这两个极端中间。液体原子的排列既不是气态那样完全没有规律,也不是晶体原子那样完全有规律。液体的原子在近程上有一定的排列特征,类似晶体,而从长程看又没有规律可言,这种排列规律被称为:近程有序,长程无序。

为了更直观地理解液体的有序性,可以假设有一个观察者站在液体中的一个原子上,往周围看去,他会发现离他最近的一层的原子的排列还是有规律可循的,能看出比较明显的几何形状特征,但是,当再往远处看第二层原子的时候,就会发现,排列的规律性就差多了,当看到第三层原子的时候,就会发现原子的排列基本上已经没有规律可循了,再往远处看去完全和气态原子一样的混乱的排列了。

晶体、液体和气体的原子有序度如图 1-8 所示,笼统地说,“近程有序,长程无序”,这八个字几乎就概括了人类目前对液态原子排列的认识水平。虽然世界上有

许多科学家想进一步弄清楚液态的原子排列细节,也取得了显著的进步。但是,不得不遗憾地说,总体上,人们对液态结构的认识还没有超出“近程有序,长程无序”的认识水平。

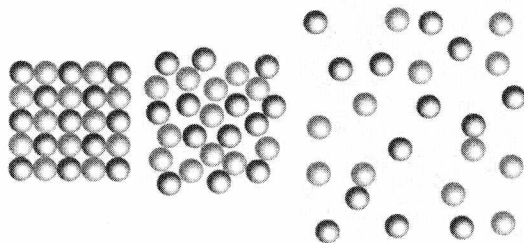


图 1-8 从左到右分别是晶体、液体和气体的原子排列示意图

1.3 双体分布函数

对液态结构的描述,如果只是“近程有序,长程无序”这样一个笼统、表象的描述是不够的。现代科学之所以成为现代科学,一个重要的原因就是必须用数学工具对所研究的对象进行描述。

对液态结构的描述方法有多种,可以粗略地分为两种类型:第一种是统计学的方法,通过对大量原子的位置进行统计,研究液态原子在空间排布的统计规律;第二种方法,就是取出小块体积的液体,研究液态原子的具体排列方式。在本章和以后的章节里,我们将简述目前这两种方法对液态结构研究所得到的结果。对于液态结构数学描述,多种书籍有大同小异的描述,本书在编写过程中参考了书籍文献 [1]~文献 [5]。

本章先简述统计学的方法对液态结构的描述。

对分布函数,在 N 个原子的体系中,定义一个局域密度函数

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (1-1)$$

式 (1-1) 中, $\rho(\vec{r})$ 的物理意义是在 $\vec{r}$ 处找到其他原子的个数,如果在 $\vec{r}$ 处有一个原子,则其在 $\vec{r}$ 处的密度为 1, 否则为 0。

假设一液态体系有 N 个粒子,体积 V 和温度 T 恒定,此系统即 NVT 系统,根据密度函数的定义,局域密度的平均值应该和整个系统的平均密度相等,即

$$\langle \rho(\vec{r}) \rangle_{\text{NVT}} = \rho = N/V \text{ (注: 后文为了方便,把 } \langle \rangle_{\text{NVT}} \text{ 都用 } \langle \rangle \text{ 代替)} \quad (1-2)$$

距离为 $\vec{r}$ 的两个点的密度函数的空间相关性可用函数 $G(\vec{r})$ 来表示。在均匀液体或

玻璃中, 这种相关性只由距离 $\vec{r}$ 决定, 即

$$G(\vec{r}' - \vec{r}'') = \langle [\rho(\vec{r}') - \rho][\rho(\vec{r}'') - \rho] \rangle \quad (1-3)$$

$$G(\vec{r}' - \vec{r}'') = \langle \rho(\vec{r}') \rho(\vec{r}'') \rangle - \rho^2 \quad (1-4)$$

$$G(\vec{r}' - \vec{r}'') = \sum_i \sum_j \langle \delta(\vec{r}' - \vec{r}_i) \delta(\vec{r}'' - \vec{r}_j) \rangle - \rho^2 \quad (1-5)$$

双求和号可分为 $i = j$ 和 $i \neq j$ 。定义 $\vec{r} = \vec{r}' - \vec{r}''$, 可以得到

$$G(\vec{r}) = \frac{N}{V} \delta(\vec{r}) + \frac{1}{V} \sum_i \sum_{j(\neq i)} \langle \delta(\vec{r} + \vec{r}_i - \vec{r}_j) \rangle - \rho^2 \quad (1-6)$$

$$G(\vec{r}) = \rho \delta(\vec{r}) + \rho^2 g(\vec{r}) - \rho^2 \quad (1-7)$$

其中 $g(\vec{r})$ 即为对分布函数,

$$\rho^2 g(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_i \sum_{j(\neq i)} \langle \delta(\vec{r} + \vec{r}_i - \vec{r}_j) \rangle \quad (1-8)$$

$$\rho^2 g(\vec{r}) = \rho \sum_{j(\neq i)} \langle \delta(\vec{r} + \vec{r}_i - \vec{r}_j) \rangle \quad (1-9)$$

$$\rho g(\vec{r}) = \frac{1}{N} \sum_i \sum_{j(\neq i)} \langle \delta(\vec{r} + \vec{r}_i - \vec{r}_j) \rangle \quad (1-10)$$

对分布函数代表在距离一个粒子为 $\vec{r}$ 处找到其他粒子的概率。如果液体或者玻璃固体是各向同性的, 即 $g(\vec{r})$ 与 $\vec{r}$ 的方向无关, 只与两个原子 i 和 j 之间的距离 $\vec{r}$ 的绝对值 $r = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ 有关, 则 $g(\vec{r}) \equiv g(r)$, 称为偶分布函数, 有时候也称为双体分布函数。

液体里面有一个体积为 V 的体积, 这个体积里面所有的液态原子数目为 N , 则把 $\rho_0 = N/V$ 称作液体原子的数密度。原子数密度的单位是 $1/\text{\AA}^3$, 表示在 $1\text{\AA}^3$ 这样的盒子里大约有几个原子。取一原子为观测原点, 以 $1\text{\AA}$ 的间距往外画出一层层同心壳层。然后统计一下每一壳层里面的原子数密度 $\rho(r)$ 计算出它与液体平均密度 ρ_0 的比值, 就能得到该液体的双体分布函数。它在一定程度上表示出了液体中原子排列的有序性。

双体分布函数是描述液体的一种重要函数, 是人们能够用实验的手段直接得到的一种结构信息。利用 X 射线衍射或者中子衍射实验得到不同液体的双体分布函数, 对得到的相关函数进行分析, 可以获得液体原子的微观结构信息。不同液体的分布函数各不相同, 但是, 也有一些共同的特点, 图 1-9 是典型的简单液态的双体分布函数图, 可以从其上面看到液态双体分布函数的一些共有的特点。

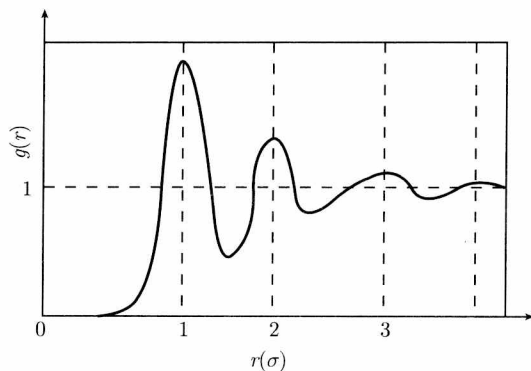


图 1-9 典型的简单液态的双体分布函数图

第一，双体分布函数最显著的特点是存在几个高低不一的峰，并且峰高随着距离而迅速衰减。当距离在 3 个原子直径（原子直径简写为 σ ）以上时，液态的分布函数围绕着 1 而上下波动，这说明在距离中心 3σ 距离时，其原子数密度已经与平均液态密度一致了。这是很好理解的，因为到 3σ 这个距离时，由于半径很大，壳层会包含大量的原子，其原子数密度的平均值必然接近液体的平均原子数密度。

第二，在 $0 \sim 0.5\sigma$ 这个区间上，液态的分布函数为 0，这是因为在 $0 \sim 0.5\sigma$ 这个距离上是观察者所在原子所占的空间，在这个空间不可能再放上第二个原子。

第三，最使研究者感兴趣的是在大约 1σ 的位置上，存在着一个高峰，一般称为第一峰。第一峰峰型比较尖锐，表明该距离的原子数密度比平均密度高出很多，原因是这个距离为包围中心原子的第一层原子。

第四，双体分布函数的第一峰的高度不一定是最高。虽然许多的简单液态，都有一个最高的第一峰。但是，这并不是普遍规律。有些液体，如水，其最高峰是双体分布函数上的第二个峰。

大部分液体的分布函数表面上看起来是有些类似，但是细致看起来，还是能看出有许多的差别。因为，各种液体的分布函数从本质上来讲，是液体结构的一种反映，结构上的变化将会在分布函数上有所反映。例如 Si，它是一种等共价键液体，由于其原子呈四面体排列，其中心 Si 原子周围一般有 4 个紧邻的 Si 原子，这种排列特点在其分布函数上显示出来就是其第一峰和第二峰比较明显，有一个很深的第一波谷^[6]。

不同压强时 4000K 温度下 Ni 的 $g(r)$ 如图 1-10 所示。Ni 的 $g(r)$ 可以看出，Ni 是一种典型的液态结构。在压强增大的过程中，曲线的所有峰位稍微向小 r 处移动，且峰值高度逐渐增加，同时，第三峰和第四峰也越来越明显。这说明，在高压的作用下，原子间的平均距离减小，原子排列越来越紧密，各配位层逐渐明显，近程有序度增强。这符合液态物质结构在高压下的变化规律。

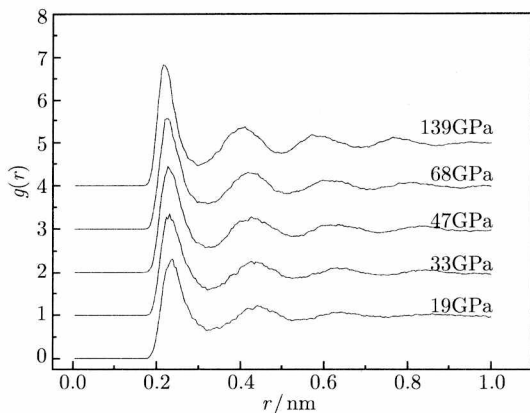


图 1-10 4000K 温度下液体 Ni 在不同压强下的双体分布函数

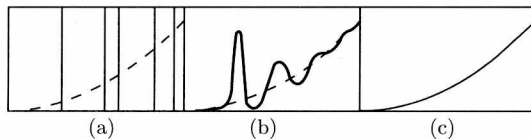
1.4 径向分布函数

为了更清楚地表示出原子个数随壳层半径增加的情况，人们还习惯于画出液体的径向分布函数。液态的径向分布函数 (radial distribution functions, RDF) 定义如下：

$$\text{RDF} = 4\pi r^2 \rho_0 g(r) = 4\pi r^2 \rho_0 + \frac{2r}{\pi} \int_0^\infty q[S(q) - 1] \sin(qr) dq \quad (1-11)$$

径向分布函数与偶分布函数包含的信息相似，是原子排布的另一种表示方法，径向分布函数更直观地表示出随着远离中心原子，液体原子数目增加的情况。

图 1-11 是三种物质状态的径向分布函数的比较。图 1-11(a) 是 fcc 晶体的径向分布函数图，晶体的径向分布函数是一条条的竖线，显示出晶体原子的有序排列；图 1-11(b) 是液体的径向分布函数，原子排列的有效性介于晶体与气体之间；图 1-11(c) 是气体的径向分布函数，显示出完全无序的原子排列。

图 1-11 三种物质状态的径向分布函数比较^[7]

(a), (b), (c) 分别是晶体、液态和气态物质，(a) 和 (b) 中的虚线为气体的径向分布函数，用以与晶体和液体的分布函数进行对比

为了更好地表征液体中的原子排列，人们提出了原子团簇的概念。认为液态的

原子是以团簇方式排列。在分布函数上, 把 $g(r_0) \leq 1 \pm 0.02$ 的位置 r_0 作为液态中原子团簇的尺寸。这是出于如下的考虑: 当半径大于 r_0 时, 液态的局部原子密度和整个液态密度已经差别很小; 当小于该距离时, 团簇的原子密度与周围液态原子的密度还能区分开。因此把 r_0 作为液态原子团簇尺寸。

图 1-12 是 Sn 原子的径向分布函数, 可以看出液态的原子数随着半径的增长而增加的情况。图中的点线是由实验得到的, 而图中的实线代表 $4\pi r^2 n$, 表示当液体中的原子是均匀排列的时候, 其径向分布函数的形状。可以在径向分布函数上看到 4 个峰, 分别是 $3.1\text{\AA}$ 、 $6.2\text{\AA}$ 、 $9.0\text{\AA}$ 、 $11.6\text{\AA}$, 分别对应于液态原子的第 1 壳层、2 壳层、3 壳层、4 壳层。

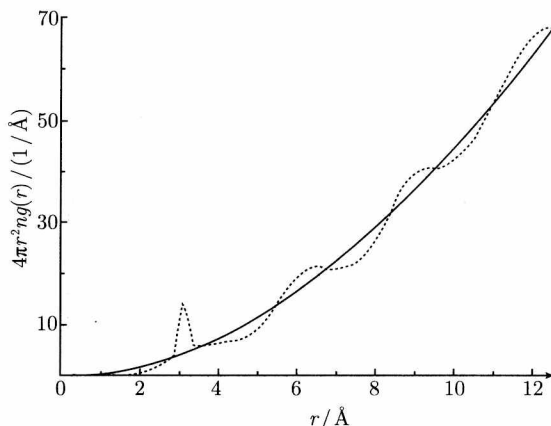


图 1-12 液态 Sn 的径向分布函数

实线为液态 Sn 的径向分布函数, 虚线为相同密度下的气体的径向分布函数, 温度为 232°C , 平均原子数密度 (单位为 $1/\text{\AA}^3$) $n = 3.54 \times 10^{-2}$

通过径向分布函数可以得到液态的最近邻原子, 液态的最近邻原子的获得有两种积分方法, 分别为

$$Z1 = 2 \int_0^{R_{\max}} \rho g(r) 4\pi r^2 dr \quad (1-12)$$

$$Z2 = \int_0^{R_{\min}} \rho g(r) 4\pi r^2 dr \quad (1-13)$$

虽然两种方法会得到不同的配位数结果, 但是, 每种方法都有其道理所在, 其物理意义如图 1-13 所示, 相比较而言, 第二种方法得到了更广泛的应用。第一种方法可以用于径向分布函数第一峰对称的液态, 当将其用于 Sn 等第一峰不对称液态的时候, 会得到较大的误差。