

本书出版受华夏
英才基金资助,衷心
感谢!

图书在版编目(CIP)数据

嵌入原子方法理论及其在材料科学中的应用——原子
尺度材料设计理论/张邦维,胡望宇,舒小林著. —长沙:
湖南大学出版社,2002.12

ISBN 7-81053-616-8

I. 嵌... II. ①张... ②胡... ③舒... III. 金属材
料—材料科学 IV. TG14

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 022454 号

嵌入原子方法理论及其在材料科学中的应用

——原子尺度材料设计理论

张邦维 胡望宇 舒小林 著

Theory of Embedded Atom Method and Its Application
to Materials Science

——Atomic Scale Materials Design Theory

Zhang Bangwei Hu Wangyu Shu Xiaolin

☐ 责任编辑 卢宇俞涛

☐ 装帧设计 吴颖辉

☐ 出版发行 湖南大学出版社

社址 长沙市岳麓山

邮码 410082

电话 0731-8821691

0731-8821315

☐ 经 销 湖南省新华书店

☐ 印 装 望城县湘江印刷厂

☐ 开本 880×1230 32 开 ☐ 印张 15.5 ☐ 字数 462 千

☐ 版次 2003 年 4 月第 1 版 ☐ 2003 年 4 月第 1 次印刷

☐ 书号 ISBN 7-81053-616-8/TG·6

☐ 定价 30.00 元

(湖南大学版图书凡有印装差错, 请向承印厂调换)

内 容 提 要

本书着重介绍作者的 MAEAM 理论,包括理论的形成过程,基本框架,对三种典型晶体结构金属的一些性能(结构的稳定性,点缺陷性能,声子谱以及热膨胀),二元合金的热性能,金属间化合物缺陷的输运和扩散性能以及二元合金的表面聚集系统的计算.并对作者认为的另两个层次的材料设计理论,热力学 Miedema 理论和电子理论作了简单的介绍,特别是对原型 EAM 和 AEAM 理论作了专章介绍.

本书可供从事物理学、化学、材料科学等领域研究的高等院校师生和科研工作者参考,其他对材料设计感兴趣的人员亦可参考.

Synopsis

This book places the emphasis on introducing the MAEAM theory by the authors, including the forming process, the basic theoretical frame, and the calculations for some properties (stability of structure, point defects, phonon spectra and thermal expansion) of metals with three typical structures, the thermodynamic properties and surface segregation of binary alloys, the transport and diffusion properties of intermetallic compounds. The brief description for the other two aspects of the materials design theory as the authors' consideration, thermodynamic and electronic theories is involved in the book as well. The Miedema theory, the original EAM and AEAM theories are also introduced in details.

This book could be a reference book for the teachers and students of colleges and universities and the scientific researchers in the fields of physics, chemistry and materials science and engineering. Other people who interest in materials design may also read it as a reference book.

前 言

人类在自己发展的最初阶段,就学会了使用火和石头作工具.工具的使用加快了人类自身从野蛮走向文明、从被动利用自然变成主动改造自然的速度.人类因此创造了灿烂辉煌的世界文明.而在人类主动改造和征服自然的过程中,材料和工具的使用起了至关重要的作用.材料和人类文明密不可分.

纵观人类发展史,材料的使用从最初简单的石料和陶器,发展到后来的青铜和铁器,再发展到现代的各种先进材料乃至纳米材料,真是一部美丽无比的大型史诗.随着物理学、冶金学、化学以及数学的发展和深入,材料科学学科逐步确立了自己的学科地位.发展到今天的材料科学,面临着基础产业、支柱产业和高新技术产业发展对它所提出的多方面的严格的、迫切的要求.传统的测试检验和实验探索研究方法,今天固然仍非常重要,它们仍然是满足这种要求的不可或缺的重要方法和手段,但是已远远不够了.今天材料科学家必须重视开展材料的理论研究,特别是计算材料科学和材料设计理论方面的深入研究,才能适应新的形势和需要.这从下述两个方面可以得到清楚的说明.

经过科学工作者的努力,今天,如果我们去稍微专业一点的科学图书馆,翻开任何一本金属与合金或其他材料方面的参考书,就会发现其中充满了许许多多关于制备、结构、性能及应用等的基本数据,包括晶格常数、弹性常数、膨胀系数、熔点、形成热、相图、表面能、扩散系数、化合物的成分与结构、合金元素的相互作用、表面和晶界偏析、抗张强度和其他力学性能、磁性性能、腐蚀性能以及焊接性能等等.这些大量的实验数据,除了少数的已经能够被理论解释之外(这类解释多半只是定性的或半定量的),真正完全定量的深入的物理意义深刻的解释不多,其余的绝大多数结果则没有得到任何解释.这就是说,今天在材料科学领域,我们已经知道了许许多多的“是什么的”结果,可并不知道为什么有这么许多结果.科学固然要知道自然现象是什么,但同样重要的,或许更为重要的是知道其“为什么”.只有这样,我们才能说真正懂得了所研究的自然现象,因而才能驾驭它,使之成为人类的文

明与发展服务.从这个意义上来说,材料科学理论是大片大片未开垦的处女地.材料科学家有的是用武之地.

另一方面,生产和科技的发展,要求材料科学家不仅能够解决“是什么”和“为什么”的问题,更要求他们能够对已有材料性能的改善提供理论指导,而且能够按照性能需求进行新材料设计.即使是材料科学理论尚无法进行完全意义上的理论指导和精确的设计,大体方向或局部较准确的指导和设计,也将在减少盲目性、缩短研制周期、降低研制经费和成本方面发挥重要的作用.

此外,我们的国家和民族面临着激烈的竞争,为了使我国的技术和产品在这种激烈竞争中立于不败之地,我们必须不断发展基础材料的品种,提高其质量,改进其性能.而且,要求结合国家资源情况,将资源优势尽快转化为产业和产品优势,创造和研制各种新型能源材料、生态环境材料和航空航天等新材料.所有这些都要求我国尽快地深入开展材料基础理论和材料设计的研究.只有这方面的研究站到了国际前列,才能真正保证我国技术和产品在国际竞争中长盛不衰.

今天,人们对塑料、碳、陶瓷以及各种非金属复合材料等进行了广泛深入的研究,使它们的性能得到很大的改进,它们对金属和合金材料构成了很大的挑战.这当然是科技进步的好现象,应当鼓励和促进.但是,就下述三个方面而言,在世界范围内,在激烈的市场竞争中,金属和合金仍无法为其他非金属材料所取代.首先是廉价性.工程应用的各种金属和合金仍保持着很高的性价比.其次是可信的抗拉强度.工程应用中,往往是抗拉强度比抗压强度更为重要.金属和合金具有远比非金属材料为优越的抗拉强度.第三是可靠性.工程应用的金属和合金具有良好的抵抗外部振动和冲击而不断裂的性能.因此,我们在本书中所讨论的论题,是以金属和合金为对象的.

目前,金属和合金材料基础理论和设计大体上可划分为三个层次.一是宏观热力学理论.它不涉及到原子结构,更不考虑电子的相互作用,而是从热力学理论出发,利用经验参数进行理论描述和预测.从物理深刻程度来说,宏观热力学理论相对于其他两个层次的理论较为逊色.但是由于使用经验参数,它对金属和合金问题的理论描述以及预测都是相当不错的;加之它的简单性,使用起来方便,因而有着相当广泛的用途.在这方面,比较公认的、有代表性的理论是 Miedema 理论.该理论不仅对几乎周期表上各种金属基体的二元合金的形成热进

行描述和预测,而且对合金系的许多问题,比如表面能、空位形成能、合金的表面聚集、合金中电荷迁移、稀土金属的价态以及非晶态合金的晶化温度等,能够进行计算和预测。

二是原子层次理论.它涉及到晶体结构,原子的运动以及原子间的相互作用,但是它未直接考虑电子的相互作用.其物理实质比宏观热力学理论深刻但逊色于电子理论.由于它并不是从头算起而基本上是一种半经验理论,计算又不太复杂,因此能在各方面包括电子理论目前应用起来尚比较困难的领域中应用,效果也比较好.目前影响较大的是嵌入原子方法(EAM)理论.它能对金属和合金的许多基本性质进行理论描述和计算,包括弹性常数,声子谱、空位、间隙原子和扩散性能,合金形成热和其他热力学性能,表面、界面能及合金表面聚集、合金表面结构、位错和层错以及断裂和其他力学性能等。

三是电子层次理论.它深入到了原子结构中的电子层次,不仅考虑原子核之间的相互作用,原子核与电子间的相互作用,而且考虑电子间的相互作用.因此在物理实质上它是非常深刻的,是前两个层次的材料科学理论所无法比拟的.电子理论基于量子力学第一原理计算,通过解多电子 Schödinger 方程式,得出体系的总能量.有了总能量,人们所关心的绝大多数金属和合金的结构和稳定性问题,以及热力学或其他基本性能,都可以计算和了解.因此,原则上说,基于量子力学第一原理计算的电子理论,可以解决金属和合金的所有理论问题,而且也可以获得实验尚未测定的新信息,按需求来进行合金设计.因此,有些对材料科学中的许多问题未仔细考虑而又偏爱理论的固体理论物理学家对那些主要从事实验研究工作的材料和冶金学家们,不去用量子力学从理论上解决问题产生了误解.如早在 1956 年,著名的固体理论物理学家 Slater^[1] 这样说过:“我真不明白为什么你们冶金学家们总是忙于在实验上去研究多元体系的组织结构(晶体结构与相图).我们知道元素的原子结构,我们有量子力学定律,我们还有电子计算机,我们可以相当快速地去解相应的方程式.”然而,实际上,一种固体系统总能量的严格计算是非常困难的,迄今尽管计算技术和计算机相当不错,但进展仍然不大.这主要是由于下述事实:第一, Schödinger 方程只能对氢原子的两体问题有精确解^[2],对于一般固体系,它包含了 10^{24} 个原子核和电子,要求解含有 10^{24} 个变量的 Schödinger 方程,至少目前是不可能的^[3].第二,一个孤立原子的能量

大约是 10^6 eV, 而固体中原子间的结合能都只有约 $1 \sim 10$ eV $\cdot$ atom $^{-1}$, 这样人们必须掌握能计算到 10^{-6} 或更高精确度的理论方法, 才能精确计算出总能量^[4]. 第三, 人们对原子间互相作用的性质至今仍然不是很清楚, 特别是准确地建立定量表达式仍存在困难. 因此, 尽管所采用的是物理学精深的量子力学第一原理计算方法, 在实际计算中也必须做近似处理^[2], 使得所得结果往往相距实验数据甚远, 不如经验的或半经验的理论结果为好. 这也就是为什么前两个层次的理论始终发达, 继续受到大力重视而不衰, 电子理论在可预见的时期内无法一统天下的原因. 由于在解 Schödinger 方程时, 必须采用近似, 不同的近似方法就形成各自的理论方法, 因此电子理论中有各式各样不同名称的理论. 再加之, 大多理论方法皆很难脱离数值计算, 一种理论方法很难推广至许多问题, 也就是说, 至少在目前很难形成比较公认的系统性电子理论. 恐怕正因为如此, 诚如 Paxton^[5]所指出的, 冶金学家往往持有这样的观点, 即量子力学在合金设计中不会起到什么作用. 责备实验材料科学家不注重于量子力学和责难量子力学在合金设计中无用, 两者截然相反, 但思想认识上都有共同点, 那就是皆只注重一面而忽视了另一面, 都走上了极端. 我们对两者都不敢苟同. 不论是过去、现在还是将来, 哪怕是纯粹的实验学家或纯粹的理论学家, 他们的工作都不可或缺, 都同样重要. 当然, 最好的情况是做实验研究的, 也熟悉和重视理论研究成果; 做理论研究的, 重视和熟悉实验结果, 携手共进, 科技发展当因此更为迅速.

在众多的金属与合金的电子理论中, 除了早期的自由电子及近自由电子和能带理论外, 20 世纪 70 年代则主要集中于密度泛函理论为基础的各种理论. 特别是我国著名合金设计电子理论专家王崇愚院士提出和创立的材料缺陷能量学理论, 在许多材料物理的重要问题上进行了有成效的应用. 包括结合能、空位形成能、体积模量、格位能等晶体与晶界的基本性能计算, 原子间键合强度和掺杂以及脆-塑判据的研究, 位错和杂质缺陷复合体与位错运动行为的研究, 以及晶格振动和声子谱的计算等等.

严格来说, 一个完善的材料设计理论, 必须满足三个方面的要求, 第一是理论所要求的参数只是合金各元素的基本性能, 同时理论具有系统性. 第二是能够解释已有的材料实验现象和数据. 第三是能够只运用合金元素的基本性能数据按照需要对新合金进行设计以及

对已有合金系统性能的改善和提高提供切实可行的理论指导. 迄今所发展的所有三个层次上的材料设计理论远没有完成这一任务. 而要完成这一任务, 决非短期内就能够达到的. 因此, 材料科学家任重道远.

本书介绍和讨论原子尺度材料设计理论 EAM 理论及其应用. 主要有两方面的内容. 一是 EAM 理论的基础和基本内容, 包括 20 世纪 80 年代中期最初由 Daw 和 Baskes 所提出的 EAM 理论原型, 以及 80 年代末期发展起来的 Johnson 分析型 EAM (AEAM) 理论. 另一方面着重介绍和讨论 EAM 原型理论的改进和发展, 主要内容放在我们所发展的改进分析型 EAM (MAEAM) 理论及其应用上. 为了说明 EAM 理论在材料设计理论中的地位, 也适当地对材料设计的另两类理论——热力学理论和电子理论简要作些介绍和讨论.

著者水平有限, 恳请读者和专家对书中可能存在的不当和谬误之处予以斧正.

本书内容的研究得到过两次国家自然科学基金、教育部跨世纪优秀人才计划基金以及教育部科学技术研究重点项目基金的资助, 在此表示衷心的感谢. 同时对于多年来理解、支持和帮助的各方面人士表示衷心的感谢.

诚挚感谢华夏英才基金资助和中共中央统战部对本书出版的支持.

张邦维

2002 年 8 月

参考文献

- [1] J. C. Slater, Theory of Alloy Phases. American Society for Metals, 1956, Cleveland, OH.
- [2] J. Hafner, 合金设计的电子理论. [英] D. G. Pettifor, A. H. Cottrell 主编, 辽宁科学技术出版社, 沈阳, 1997 年, P. 47.
- [3] A. H. Cottrell, 合金设计的电子理论. [英] D. G. Pettifor, A. H. Cottrell 主编, 辽宁科学技术出版社, 沈阳, 1997 年, P. 297.
- [4] J. R. Chelikowsky, in Encyclopedia of Applied Physics, V. 3, VCH Publishers, Weinheim. 1991, P. 1.
- [5] A. T. Paxton, 合金设计的电子理论. [英] D. G. Pettifor, A. H. Cottrell 主编, 辽宁科学技术出版社, 沈阳, 1997 年, P. 163.

目 次

序	王崇愚 (1)
前 言	(4)
1 材料设计的热力学理论——Miedema 理论	
1.1 Miedema 理论模型	(1)
1.2 二元合金形成热的经验关系式	(3)
1.2.1 形成热表达式的得出	(3)
1.2.2 成分和体积变化对形成能的影响	(6)
1.2.3 模型参数与比例常数	(7)
1.2.4 某些元素因结构所引起的转变能	(12)
1.2.5 固溶体中形成能的附加项	(12)
1.2.6 合金形成能理论计算与实验结果比较	(15)
1.3 Miedema 形成热理论在非过渡族二元合金系及三元合金 系的扩展应用	(18)
1.3.1 碱金属基二元合金系的形成热	(19)
1.3.2 碱金属-Al, Mg 二元合金系的形成热	(21)
1.3.3 稀土-Al, Mg 及稀土-4d 金属二元合金形成热	(24)
1.3.4 三元合金系的形成焓	(28)
1.4 Miedema 理论在纯金属及二元合金表面界面性质及缺陷 上的应用	(33)
1.4.1 纯金属的表面能	(33)
1.4.2 纯金属和金属间化合物的单空位形成能	(35)
1.4.3 过渡族金属二元合金中的表面聚集	(37)
1.5 Miedema 理论在非晶态合金中的应用	(38)
1.5.1 Miedema 理论在非晶态合金形成上的应用	(38)
1.5.2 Miedema 理论在非晶态合金形成区的应用	(40)
1.5.3 Miedema 理论在非晶态合金晶化温度上的应用 ...	(43)
1.6 Miedema 理论在合金固溶度中的应用	(43)
参考文献	(45)

2 材料设计的电子理论

2.1	从头计算方法	(51)
2.2	密度泛函理论	(54)
2.2.1	Thomas-Fermi 模型	(55)
2.2.2	Hohenberg 和 Kohn 的密度泛函理论	(55)
2.3	电子理论在材料科学中的应用	(58)
2.3.1	缺陷能量学	(58)
2.3.2	相结构及稳定性	(62)
2.3.3	缺陷形成能	(64)
	参考文献	(68)

3 嵌入原子方法理论及其与电子密度函数理论的关系

3.1	原子对势理论	(71)
3.2	准原子理论和有效介质理论	(74)
3.3	嵌入原子方法(EAM)理论基础	(75)
3.4	EAM 理论与密度函数理论的关系	(77)
3.5	EAM 理论中函数与参数的确定	(79)
3.6	EAM 原型理论对纯元素性质的计算	(83)
3.6.1	点缺陷	(84)
3.6.2	弹性常数	(85)
3.6.3	体声子散射谱	(85)
3.6.4	元素的热力学性质(自由能,热膨胀和熔点)	(87)
3.7	EAM 原型理论对纯元素表面和晶界性质的计算	(89)
3.7.1	表面能量和结构	(90)
3.7.2	金属表面上的原子吸附	(95)
3.7.3	晶界结构	(99)
3.7.4	晶界的弹性性能	(101)
3.8	EAM 原型理论对合金性能的计算	(103)
3.8.1	fcc 金属合金的稀溶解热	(104)
3.8.2	稀合金表面聚集	(105)
3.8.3	fcc 金属合金系的表面聚集	(106)
3.8.4	合金表面层有序结构	(109)

3.8.5 合金晶界及位错区的成分聚集	(112)
3.9 EAM 原型理论对金属元素力学性能的计算	(118)
3.9.1 应力、温度及杂质对位错运动的影响	(118)
3.9.2 加载对裂纹尖端的影响	(122)
3.10 F-S 理论	(125)
3.10.1 F-S 理论及其对 bcc 金属某些性质的计算	(125)
3.10.2 F-S 理论存在的问题及改进	(129)
参考文献	(133)

4 Johnson 分析型 EAM 理论

4.1 Johnson AEAM 理论的基本思想和具体形式	(141)
4.1.1 fcc 金属 AEAM 理论	(141)
4.1.2 fcc 和 hcp 金属皆适用的 AEAM 理论	(147)
4.1.3 bcc 金属 AEAM 理论	(159)
4.1.4 EAM 模型的不变性及有效两体势	(169)
4.2 Johnson AEAM 模型在合金中的应用	(172)
4.2.1 fcc 金属合金 AEAM 模型	(172)
4.2.2 合金模型的不变性及合金势	(173)
4.2.3 fcc 二元合金热力学性能的 AEAM 理论计算	(175)
4.2.4 bcc 金属合金 AEAM 模型及其对热力学性能 的计算	(179)
4.2.5 hcp 金属合金 AEAM 模型及其对热力学性能 的计算	(187)
参考文献	(192)

5 Baskes 改进型 EAM 理论

5.1 Baskes 改进型 EAM 理论基础	(199)
5.1.1 原型 EAM 理论在描述 Si, Ge 时产生的问题	(199)
5.1.2 Baskes 的 MEAM 理论	(201)
5.2 Baskes MEAM 理论的应用	(204)
5.2.1 Si 和 Ge 弹性常数的计算	(204)
5.2.2 Si 和 Ge 的点缺陷	(204)
5.2.3 Si 和 Ge 的表面结构与能量	(206)

5.2.4 Si 的原子团簇	(209)
5.3 MEAM 理论的进一步扩展	(210)
5.3.1 扩展至金属元素和气体的 MEAM 理论	(210)
5.3.2 MEAM 理论对 hcp 金属的扩展	(216)
5.3.3 MEAM 理论在 fcc, bcc 金属元素和非金属元素上的应用	(223)
5.3.4 MEAM 理论计算 fcc 二元合金的溶解热	(227)
5.3.5 MEAM 理论在 hcp 金属上的应用	(229)
5.4 Pasianot 等的嵌入缺陷势理论	(236)
参考文献	(240)

6 MAEAM 理论

6.1 计及次近邻原子的 MAEAM 理论	(245)
6.1.1 MAEAM 理论模型	(245)
6.1.2 模型参数的确定	(247)
6.2 计及更远近邻原子的 MAEAM 理论	(251)
6.2.1 bcc 金属的对势函数	(251)
6.2.2 fcc 金属的对势函数	(253)
6.2.3 hcp 金属的对势函数	(254)
参考文献	(257)

7 MAEAM 理论对纯金属元素结构与性能的计算

7.1 结构稳定性	(259)
7.1.1 bcc 金属的结构稳定性	(260)
7.1.2 fcc 金属的结构稳定性	(261)
7.1.3 hcp 金属的结构稳定性	(263)
7.2 声子谱	(268)
7.3 态密度	(280)
7.4 晶格比热	(286)
7.5 Debye 温度与 Grüneisen 常数	(290)
7.6 热膨胀系数	(292)
参考文献	(297)

8 MAEAM 理论对纯金属元素点缺陷和扩散性能的计算

8.1 空位	(299)
8.1.1 bcc 金属	(299)
8.1.2 fcc 金属	(302)
8.1.3 hcp 金属	(306)
8.2 双空位	(313)
8.2.1 bcc 金属	(313)
8.2.2 fcc 金属	(317)
8.2.3 hcp 金属	(326)
8.3 自间隙原子	(348)
8.3.1 bcc 金属	(348)
8.3.2 hcp 金属	(350)
参考文献	(353)

9 MAEAM 理论对二元合金热力学性质的计算

9.1 形成焓	(357)
9.1.1 bcc 金属的二元合金形成焓	(358)
9.1.2 碱金属二元合金形成焓	(362)
9.1.3 fcc 金属的二元合金形成焓	(363)
9.1.4 hcp 金属的二元合金形成焓	(367)
9.1.5 交叉结构二元合金的形成焓	(370)
9.2 稀溶解热	(373)
9.2.1 bcc 二元合金的稀溶解热	(374)
9.2.2 fcc 二元合金的稀溶解热	(376)
9.2.3 hcp 二元合金的稀溶解热	(377)
9.2.4 交叉结构二元合金的稀溶解热	(378)
9.3 镁-稀土二元合金系热力学性质计算	(378)
9.3.1 镁-稀土合金的稀溶解热	(379)
9.3.2 镁-稀土合金无序固溶体的形成焓	(380)
9.3.3 镁-稀土合金有序合金形成焓	(380)
9.4 铜与钛、锆、钎二元合金系热力学性质计算	(385)
9.4.1 稀溶解热的计算	(385)

9.4.2	无序固溶体的形成热	(386)
9.4.3	有序结构的形成热	(386)
参考文献		(388)

10 MAEAM 理论在金属间化合物中的应用

10.1	金属间化合物的物理性质及点缺陷的计算方法	(392)
10.1.1	物理量的计算方法	(392)
10.1.2	点缺陷及扩散性质的计算	(392)
10.1.3	模型参数 f_e 的确定	(393)
10.2	金属间化合物的物理性质	(395)
10.2.1	Fe-Al 合金系物理性质	(395)
10.2.2	Ni-Al 合金系物理性质	(396)
10.2.3	Co-Al 合金系物理性质	(397)
10.2.4	TiAl 合金系物理性质	(398)
10.3	金属间化合物的点缺陷	(400)
10.3.1	B2 FeAl 点缺陷	(400)
10.3.2	D0 ₃ Fe ₃ Al 计算结果和讨论	(404)
10.3.3	B2 NiAl 点缺陷形成能	(406)
10.3.4	L1 ₂ Ni ₃ Al 点缺陷形成能	(409)
10.3.5	CoAl 点缺陷形成能	(410)
10.3.6	Co ₃ Al 点缺陷形成能	(412)
10.3.7	TiAl 点缺陷形成能	(413)
10.4	金属间化合物中的原子扩散	(415)
10.4.1	FeAl 扩散性质	(415)
10.4.2	Fe ₃ Al 原子自扩散性质	(418)
10.4.3	NiAl 原子自扩散性质	(419)
10.4.4	Ni ₃ Al 点缺陷扩散性质	(421)
10.4.5	Co-Al 合金系统原子自扩散	(421)
10.4.6	TiAl 原子自扩散	(422)
参考文献		(425)

11 MAEAM 理论计算二元合金的表面聚集

11.1	Monte Carlo 模拟方法	(433)
------	------------------------	-------

11.2	表面聚集 Monte Carlo 模拟的计算步骤和框图		(435)
11.3	二元合金系统的表面聚集		(437)
11.3.1	fcc-fcc 二元合金系		(438)
11.3.2	交叉结构的二元合金系		(449)
11.4	纯元素表面能和合金元素表面聚集能		(459)
11.4.1	纯元素表面能		(459)
11.4.2	合金元素的表面聚集能		(461)
	参考文献		(464)