



بخشی از ترجمه مقاله

عنوان فارسی مقاله :

وابستگی های جهت گیری خواص فصل مشترک
جامد- مایع آهن-لیتیم : شبیه سازی اتمی

عنوان انگلیسی مقاله :

Orientation dependences of the Fe-Li solid-liquid interface
properties: Atomistic simulations



توجه !

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل
با فرمت ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، [اینجا](#) کلیک نمایید.



بخشی از ترجمه مقاله

4. Conclusions

In summary, the Fe(110)-Li and Fe(111)-Li solid-liquid interfaces were investigated with MD, and the results were compared with each other as well as with our previous findings from the Fe(001)-Li solid-liquid interface. The interface properties exhibit significant orientation dependences. Although the three Fe surfaces all relaxed within three to four crystal planes whether contacting or not contacting with liquid Li, they suffered different impacts from the liquid Li on their relaxation behavior. The Fe(001) surface almost totally reversed the relaxation behavior after contacting with the liquid Li, on the contrary just a very small change was observed in the Fe(110) case. For the similar intrinsic properties, the higher stability of the surface atoms, of the Fe(001) and Fe(110) substrates, the liquid side present similar characteristics in the Fe(001)-Li and Fe(110)-Li solid-liquid interfaces.

4. نتیجه گیری

به طور خلاصه، فصل مشترک های جامد-مایع آهن (110) -Li و آهن (111) -Li با MD مورد بررسی قرار گرفت و نتایج با یکدیگر و همچنین با یافته های قبلی ما از فصل مشترک جامد-مایع آهن (001) -Li مقایسه شدند. خواص فصل مشترک وابستگی جهت گیری قابل توجهی را نمایش می دهد. اگرچه سه سطح Fe همگی در حدود سه تا چهار صفحه کریستالی ریلکس شدند، خواه در تماس با لیتیم مایع باشد یا نباشد، متحمل اثرات متفاوتی از لیتیم مایع بر رفتار آرامش خود شدند. سطح آهن (001) پس از تماس با لیتیم مایع تقریباً به طور کامل رفتار آرامش را معکوس کرد، در مقابل فقط یک تغییر بسیار کوچک در مورد آهن (110) مشاهده شد. برای خواص ذاتی مشابه، پایداری بالاتر اتم های سطح، در زیرلایه های آهن (001) و آهن (110)، در سمت مایع ویژگی های مشابهی در فصل مشترک جامد-مایع آهن (001) -Li و آهن (110) -Li عرضه می کند. در این دو مورد، اتم های لیتیم مایع در نزدیکی فصل مشترک لایه بندی شده است و لایه ها درجه بالایی از نظم شبکه ای باتقارن هایی از صفحات کریستالی (001) و (110) به ترتیب ارائه می کند.



توجه!

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، [اینجا](#) کلیک نمایید.

برای جستجوی جدیدترین مقالات ترجمه شده، [اینجا](#) کلیک نمایید.