

4 讨论

从表1中可以看出在输出函数噪声水平小于4.0的情况下,近似方法给出的误差与精确模拟法给出的基本相同,说明此方法是可靠的.而计算误差所需计算机时,前者只是后者的1%.结合广义最小二乘法等快速参数拟合方法,可以实现基于Voxel的葡萄糖代谢率及其误差计算,为单个被试自身及单个被试与单个被试相互间的统计对照提供了可能.

参 考 文 献

- 1 Huang S C, et al. Noninvasive determination of local cerebral metabolic rate of glucose in man. *Am J Physiol*, 1980, 238: E69
- 2 Patlak C S, et al. Graphical evaluation of blood-to-brain transfer constants from multiple-time uptake data. *J Cereb Blood Flow Metabol*, 1983, 3: 1
- 3 Frackowiak R S J, et al. *Human Brain Function*. San Diego, London, Boston, New York, Sydney, Tokyo, Toronto: Academic Press, 1997
- 4 Feng D G, et al. An evaluation of the algorithms for determining local cerebral metabolic rates of glucose using positron emission tomography dynamic data. *IEEE Trans Med Imag*, 1995, 14(4): 697
- 5 Feng D G, et al. Models for computer simulation studies of input functions for tracer kinetic modeling with positron emission tomography. *Int J Biomed Comput*, 1993, 32: 95
- 6 Eadie W T, et al. *Statistical Methods in Experimental Physics*. Amsterdam and London: North-Holland Publishing Co, 1971
- 7 Lyons L. *Statistics for Nuclear and Particle Physicists*. Cambridge, London, New York, New Rochelle, Melbourne, Sydney: Cambridge Univ Press, 1986

从原子层次揭示晶体过热时的熔化机制

——卢柯等从事的晶体熔化及过热研究受国际同行瞩目

晶体熔化是最常见的自然现象,与材料的制备和性能密切相关.通常情况下,过冷液态可以亚稳态存在而不发生凝固,但实现高于熔点的过热却相当困难.因此过热成为学者们关注的一个基本科学问题.

世界各国学者近年来先后提出了多种晶体过热极限理论.中国科学院金属研究所材料科学国家重点实验室卢柯博士和金朝晖博士等近年来一直致力于这一领域的实验与理论研究,取得了多项创新性成果,1998年提出了晶体熔化的均匀形核灾变动力学极限理论.最近,他们与德、美两国学者合作通过计算模拟从原子层次揭示了晶体在极限过热时的熔化过程机制,从理论角度阐明了现有多种晶格失稳熔化机制之间的内在联系.美国《Phys Rev Lett》于2001年7月30日刊出了他们的研究成果.

剑桥大学材料学家罗伯特-坎在2001年10月4日出版的《Nature》上对卢柯研究组的最新进展进行了评述.罗伯特-坎教授评价主要体现在以下几个方面:

(1) 长期以来,关于熔化的林德曼判据和玻恩判据的微观机制(熔化判据)一直存在着分歧.此项工作第一次证明,对于无表面的理想晶体,这两种熔化判据与均匀形核灾变判据是统一的.

(2) 这一计算模拟结果不但证明了多种熔化判据的统一,还揭示出在熔化过程中几种机制的内在联系,从原子尺度上展示了过热晶体熔化的一个完整图像.

(3) 此工作揭示了在晶体过热极限温度时原子团的特性与远低于平衡熔点时固体表面的特性相似,这一发现解决了长期以来关于熔化及过热机制中的一个基本问题.

这些研究结果将晶体熔化的林德曼热振幅判据、玻恩刚性失稳机制和动力学均匀形核失稳机制紧密联系起来,提供了过热晶体熔化的完整图像,大大深化了人们对晶格热稳定性的认识,为进一步理解和利用材料的过热行为提供了理论基础.

(供稿:靳达申)