

液态金属铝的结构转变模拟研究*

易双萍** 刘让苏 郑采星

(广东工业大学物理系 广州 610643) (湖南大学物理系 长沙 410082)

【摘要】采用分子动力学方法对液态金属 Al 的凝固过程中微观结构转变特性进行了模拟研究。发现在 943~50 K 的温度区间凝固过程中，与二十面体结构相关的1551键型数目的变化最为显著，对系统结构组态的变化起关键作用。结果表明：随着温度降低，系统有序度增加，无序度下降。

关键词 液态金属；结构转变；计算机模拟；分子动力学

中图分类号 O522.2

固态金属材料的宏观性能主要是由其微观结构组态决定的，同样的合金成分在不同的凝固条件下可以获得不同的微观结构组态，从而使材料具有不同的宏观性能。如何测定和控制这种微观结构随温度变化的规律，具有重要的理论和实际意义。然而在目前的实验条件下，对于液态金属凝固过程很难实现跟踪研究。特别是在急冷过程中，这些微观结构进行转变的具体机制更难测定和描述。随着计算机技术的发展，可以采用分子动力学方法对微观系统进行模拟研究，目前已取得了许多重要进展^[1,2]。

1 计算机模拟条件和方法

本文对5 000个 Al 原子在温度区间(943~50 K)的急冷过程进行了分子动力学模拟研究，对模拟计算结果的微观机理作了解释。

选取与实验吻合较好，能量独立非局域模型膺势作用系统内原子间相互作用的有效双体势^[3]

$$V_{r_{ij}} = \frac{Z_{\text{eff}}^2}{r_{ij}} \left[1 - \frac{2}{\delta} \int_0^{\infty} dq F_q \frac{\sin(r_{ij}q)}{q} \right]$$

式中 Z_{eff} 和 F_q 分别表示有效离子价和归一化能量波函数特征函数。双体势的截止距离为20 au(原子单位)，运行的时间步长为 10^{-15} s。系统中5 000个 Al 原子置于一个立方体盒中，并按周期性边界条件运行。

模拟计算从熔点(933 K)附近的943 K开始，在该温度下，将系统运行15 000次，以确保其处于平衡态。以 4×10^{13} K/s 的冷却速率降温，第一次由943 K冷却至900 K，以后每隔50 K为一次，再将系统运行4 000步，使其达到平衡态。每隔200步记录一次系统的原子结构组态，然后再用 H-A 键型指数测定各个温度下的原子键组态^[4]，再分析比较以探讨其结构变化的规律。

2 模拟计算结果

首先考察由上述模拟得到的该系统在943 K时的双体分布函数 $g(r)$ ，与文献[5]给出的实验结果相吻合，如图1所示。由此可见，本模拟采用上述有效双体势函数反映了客观物理本质。

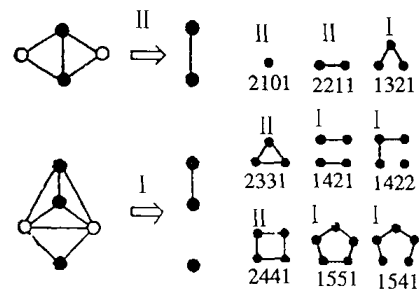
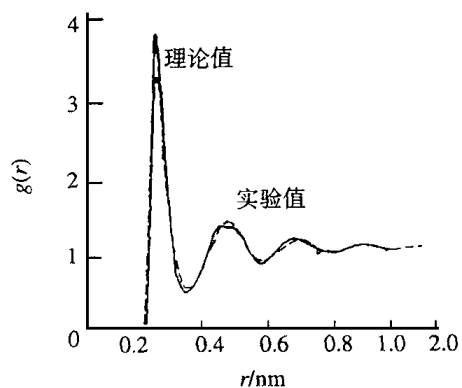
根据上述模拟方法，得到各种 H-A 键型指数如表1所示。由表1可知，随着温度下降，1551键型数明显增加，由16.0%增加到33.8%；1541键由13.8%增加到17.0%；1441、1422、1421、1321、

2000年8月30日收稿

* 国家自然科学基金资助项目，编号：59871016

** 女 35岁 硕士 讲师

1311键出现不同程度的下降; 1301、1211、1201稍有下降, 但占的比例很少, 其中1431键几乎没有变化。



(a) 成键结构类型 (b) 成键指数分类法

图1 液态金属 Al 的双体相关函数曲线 $g(r)$ (943 K)

图2 Honeycutt-Andersen 成键指数示意图

表1 各种类型成键数与温度的关系

| 温度/K | 各类键型成键数/(%) | | | | | | | | | | |
|------|-------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| | 1551 | 1541 | 1531 | 1431 | 1422 | 1421 | 1321 | 1311 | 1301 | 1211 | 1201 |
| 943 | 16.0 | 13.8 | 6.8 | 21.1 | 7.8 | 3.8 | 7.0 | 6.9 | 1.5 | 1.4 | 1.7 |
| 900 | 17.5 | 14.2 | 6.6 | 21.2 | 7.5 | 3.6 | 6.8 | 6.6 | 1.4 | 1.4 | 1.6 |
| 850 | 18.6 | 6.2 | 14.2 | 21.3 | 7.3 | 3.5 | 1.3 | 6.7 | 6.1 | 1.3 | 1.5 |
| 800 | 19.3 | 14.5 | 5.9 | 21.3 | 7.0 | 3.2 | 6.5 | 5.9 | 1.0 | 1.3 | 1.4 |
| 750 | 20.9 | 14.9 | 5.8 | 21.5 | 6.8 | 3.1 | 6.1 | 5.5 | 1.0 | 1.2 | 1.2 |
| 700 | 22.8 | 15.0 | 5.9 | 21.3 | 6.3 | 3.0 | 5.9 | 5.2 | 0.8 | 1.1 | 1.0 |
| 650 | 24.8 | 15.3 | 5.9 | 21.5 | 6.3 | 2.8 | 5.6 | 5.1 | 0.8 | 0.9 | 0.9 |
| 600 | 26.2 | 15.9 | 5.5 | 21.3 | 5.9 | 2.8 | 5.3 | 5.0 | 0.8 | 1.0 | 0.9 |
| 550 | 29.1 | 16.1 | 5.4 | 21.7 | 5.9 | 2.7 | 4.9 | 5.1 | 0.6 | 0.9 | 1.0 |
| 500 | 30.1 | 15.9 | 5.5 | 21.9 | 5.9 | 2.7 | 4.8 | 5.0 | 0.6 | 0.9 | 0.9 |
| 450 | 30.9 | 15.9 | 5.4 | 21.6 | 5.7 | 2.5 | 4.6 | 5.0 | 0.5 | 0.8 | 0.8 |
| 400 | 31.8 | 16.2 | 5.3 | 21.5 | 5.6 | 2.6 | 4.8 | 4.8 | 0.5 | 0.8 | 0.7 |
| 350 | 32.1 | 16.2 | 5.1 | 21.2 | 5.5 | 2.6 | 4.8 | 4.8 | 0.6 | 0.8 | 0.8 |
| 300 | 32.5 | 16.3 | 5.1 | 20.9 | 5.3 | 2.3 | 4.3 | 4.5 | 0.5 | 0.7 | 0.7 |
| 250 | 32.8 | 16.3 | 4.8 | 21.1 | 5.0 | 2.3 | 4.2 | 4.6 | 0.5 | 0.7 | 0.6 |
| 200 | 33.0 | 16.5 | 4.7 | 21.3 | 5.0 | 2.2 | 4.2 | 4.3 | 0.5 | 0.7 | 0.6 |
| 150 | 33.3 | 16.8 | 4.5 | 21.2 | 4.8 | 2.0 | 4.2 | 4.0 | 0.5 | 0.7 | 0.5 |
| 100 | 33.4 | 16.8 | 4.5 | 21.3 | 4.8 | 2.0 | 4.1 | 4.1 | 0.5 | 0.7 | 0.5 |
| 50 | 33.8 | 17.0 | 4.5 | 21.1 | 4.6 | 2.0 | 4.0 | 3.9 | 0.5 | 0.7 | 0.5 |

3 结果分析

根据文献[4]的描述, 每一种键型都用四个数码表示。其中第一个数码表示所要研究的原子对(又称基本原子对)所属的类型, 彼此为近邻则表示为1, 不为最近邻则表示为2; 第二个数码表示研究的原子对所共享的近邻成键数; 第3个数码表示这些共享的近邻中又相互为近邻的成键数。然而

对于有些结构组态用这三个数码尚不足以唯一地确定,只有再用第四个数码来加以区分。第四个数码的数值是任意的,可以根据所需要区分的前三个数码相同的几种类型结构,按序一一对应即可,如图2所示。图中的1441与1422所示的不同结构就是由第四个数码来加以区分的,但一经定义,就不能再任意改动。

各 H-A 键型指数所代表的结构模式与典型的晶体结构的关系如下:与二十面体密切相关的键型指数有1551、1541;与立方结构、六角密集结构有关的键型指数有1441、1431、1421等;与菱面结构有关的键型指数有1321、1311、1301、1201等。对于本文所涉及各个键型,其所属原子团的有序度的高低呈依次递减:1551、1541、1441、1431、1421、1321、1311、1301、1211、1201等。模拟结果表明,随着温度下降,系统有序度增加,无序度下降。而从热力学角度看,当温度降低时,系统内原子热运动减弱,相互碰撞几率减小,导致系统有序度增加,模拟结果与热力学预期结果一致。

4 结束语

本模拟研究采用有效双体势函数得到的径向分布函数 $g(r)q$ 曲线与实验值吻合较好。随着温度下降,系统有序度增加,无序度下降。在整个凝固过程中,以1551键型数目变化最为显著,它对凝固过程及凝固后微观结构的变化起关键作用。根据模拟所得各种键型转变的趋势,可选择恰当的凝固起始温度和冷却速度,以获得优良的材料性能。

参 考 文 献

- 1 Liu R S, Li J Y, Zhou Q Y, A simulation study on the transition feature of the microstructure in the forming processes of amorphous metals. Chinese Science Bulletin, 1995, 40: 1 429
- 2 胡壮麒, 王鲁红, 刘 轶. 电子和原子层次材料行为的计算机模拟. 材料研究学报, 1998, 1: 1~19
- 3 Wang S, Lai S K. Structure and electrical resistivities of Liquid binary alloys. J Phys F, 1980, 10: 2 717
- 4 Honeycutt J D, Andersen H C. Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard Jones clusters. J Phys Chem, 1987, 91: 4 950
- 5 Waseda Y. The structure of Non-crystalline materials, liquid and amorphous solids. New York: McGraw-Hill International Book Company, 1980: 270

A Simulation Study on Structure Transition of Liquid Metal

Yi Shuangping

(Department of Physics, Guangdong University of Technology Guangzhou 510643)

Liu Rangsuo Zheng Caixing

(Department of physics, Hunan University Changsha 410082)

Abstract A simulation study on the transition properties of microstructures in the solidification process of liquid metal Al is performed using the molecular dynamics method. It is found that in the range of temperature of 943~50 K, the relative numbers of 1551 bonds related to the icosahedral structure increase remarkably, which play a critical role in the variation of structural configurations during the rapid cooling process. It is also demonstrated that with the decrease of temperature, the degree of the order of the system increases, while, the degree of disorder of the system decreases.

Key words liquid metal; microstructure transition; computer simulation; molecular dynamics