

Ni-Al 合金凝固过程的分子动力学模拟

朱志雄, 张 鸿, 刘超峰, 齐卫宏, 易丹青, 李志成

(中南大学 材料科学与工程学院, 长沙 410083)

摘 要: 利用分子动力学研究 Ni₃Al 和 NiAl 合金在不同冷速下的凝固过程, 分析冷却过程中不同温度下的偶分布函数、能量和体积的变化。研究表明: 冷却速率为 4×10^{13} K/s 时, Ni₃Al 形成非晶结构; 冷却速率为 4×10^{11} K/s 时, Ni₃Al 在 1 100 K 左右结构开始发生变化, 最终形成晶体结构。冷却速率为 4×10^{13} K/s 时, NiAl 形成非晶; 冷却速率为 4×10^{11} K/s 时, NiAl 在 810 K 形成部分的晶体结构。

关键词: Ni₃Al 与 NiAl 合金; 分子动力学模拟; 偶分布函数

中图分类号: O522 **文献标识码:** A

Molecular dynamics simulation for solidification process of Ni-Al alloys

ZHU Zhi-xiong, ZHANG Hong, LIU Chao-feng, QI Wei-hong, YI Dan-qing, LI Zhi-cheng

(School of Materials Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, China)

Abstract: The solidification processes of Ni₃Al and NiAl alloys were studied by molecular dynamics simulation with different cooling rates. The pair correction function at different temperatures, energy and volume changes in the process were analyzed. The results show that with a high cooling rate of 4×10^{13} K/s, the amorphous structure forms in the Ni₃Al alloy; with a lower rate of 4×10^{11} K/s, the micro structure of the Ni₃Al alloy starts to change at about 1 100 K and the crystal structure forms finally. With the cooling rate of 4×10^{13} K/s, the NiAl alloy is amorphous, while with the cooling rate of 4×10^{11} K/s, a certain part of crystal structure forms in the NiAl alloy at 810 K.

Key words: Ni₃Al and NiAl alloy; molecular dynamics simulation; pair correction function

对于金属材料来说, 凝固是加工过程中重要的一步。研究金属凝固过程对于获得优良性能金属材料具有重要意义, 然而液态金属用实验方法来研究有一定难度, 但是计算机模拟却可以弥补这个不足。其中最有效的一个原子模拟方法是分子动力学模拟(MD), 这已在许多文章和书籍中介绍过^[1-2]。随着紧束缚模型(TB)和嵌入原子法(EAM)在研究金属熔体结构方面的广泛应用^[3-4], 近年来分子动力学方法在液态金属凝固过程中的研究也很多, 并取得了较大进展。例如, 李成祥等^[5]用 MD 模拟了金属 Au 在不同冷速和压力下

的性质, 发现采用较慢的冷速并增加压力有利于结晶。郑采星等^[6-8]对 Cu₇₀Ni₃₀、Ag₆Cu₄ 和 Ag_xCu_{1-x} 快速凝固过程进行了分子动力学模拟研究, 认为 Cu₇₀Ni₃₀ 在冷却速率为 2×10^{12} K/s 的深过冷快速凝固过程中形成了 fcc 结构; 而冷却速率为 $2 \times 10^{12} \sim 2 \times 10^{14}$ K/s 时, Ag₆Cu₄ 总是形成非晶态结构。SARKAR 等^[9]模拟了压力对 Al 的凝固过程的影响, 认为较高的压力使结晶趋势加强。YANG 等^[10]对 Ni₃Al 合金的熔点和比热进行了 MD 模拟, 所得合金熔点比实验值高。

Ni₃Al和NiAl因其高熔点和低密度而被认为是一

基金项目: 高校博士点专项科研基金资助项目(20070533119); 中国博士后科学基金资助项目(20080431030); 湖南省科技计划博士后科研资助专项资助项目(2008RS4015)

收稿日期: 2008-10-24; **修订日期:** 2009-02-20

通讯作者: 李志成, 教授, 博士; 电话: 0731-88877740; E-mail: zhchli@mail.csu.edu.cn

类具有广泛应用前景的高温结构材料^[11-12]；另外，它们还可以作为耐蚀材料用于钢铁基体表面热镀^[13]和高温航空材料^[14]。尽管Ni₃Al和NiAl成为研究热点问题之一，但关于其凝固过程只有少数学者进行了一些研究^[13, 15-16]。为了比较Ni₃Al和NiAl凝固过程的不同，已有一些学者用Materials Explorer进行了模拟，但大多是针对单质金属，对于二元系的模拟报道较少。本文作者尝试用Materials Explorer软件来模拟Ni₃Al和NiAl的凝固过程，采用偶分布函数、能量和体积的变化等^[17]手段来了解两种合金在凝固过程中的转变规律。

1 实验

采用 Materials Explorer 软件包来模拟 Ni-Al 系合金的凝固过程，它是由 Fujitsu 公司开发的多功能分子动力学软件。采用的势函数是由 MASSOBRIO 等^[18]提出的 TB 势，其形式如下：

$$\Phi = \sum_i (E_b^i + E_r^i) \quad (1)$$

式中： E_r^i 是二体项，

$$E_r^i = \sum_j A_{\alpha\beta} \cdot \exp\left[-p_{\alpha\beta} \left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1\right)\right]; \quad E_b^i = -\sqrt{\rho_i}, \quad \rho_i$$

是多体项， $\rho_i = \sum_{j \neq i} \zeta_{\alpha\beta}^2 \cdot \exp\left[-2q_{\alpha\beta} \left(\frac{r_{ij}}{r_0^{\alpha\beta}} - 1\right)\right]$ ； α 、 β

分别代表原子种类 i 和 j ； $A_{\alpha\beta}$ 、 $\zeta_{\alpha\beta}$ 、 $p_{\alpha\beta}$ 和 $q_{\alpha\beta}$ 是势参数； $r_0^{\alpha\beta}$ 表示最近邻原子距离， r_{ij} 表示原子 i 和原子 j 的距离。Ni-Al 系二元合金的势参数值见表 1，其中 r_{Cu^+} 表示截断半径。TB 势函数可以应用于元素(Al、Ti、Zr、

Co、Cd、Zn、Mg、Ni、Cu、Au、Rh、Pd、Ag、Ir、Pt、Pb)和二元合金(NiAl、CuAu 等)。

将 500 个原子(按照合金成分配比)置于一个立方体盒子中，并让系统在三维周期边界条件下分别以 4×10^{13} 和 4×10^{11} K/s 两种冷却速率进行冷却，时间步长选定为 2.5 fs。模拟过程中采用 NTP 系综，首先让系综在 2 000 K 等温运行 40 000 步以使系综达到平衡态，然后以给定冷却速率逐步冷却到 300 K，最后在 300 K 弛豫 100 ps，每隔 100 步记录一次结果。利用偶分布函数(PCF) $g(r)$ 曲线、系统能量和体积的变化对其凝固过程的结构演变进行分析比较，以便进一步探讨其变化规律。

2 结果与讨论

2.1 Ni₃Al 在不同冷却速率下的偶分布函数

Ni₃Al 在 4×10^{13} 和 4×10^{11} K/s 两种冷却速率下的偏偶分布函数和总偶分布函数曲线分别如图 1 和 2 所示。

从图 1 可以看出，高温时偶分布函数显示典型的液态结构，而低温时 $g_{\text{Ni-Ni}}(r)$ 、 $g_{\text{Ni-Al}}(r)$ 、 $g_{\text{Al-Al}}(r)$ 和 $g_{\text{tot}}(r)$ 第二峰均发生劈裂，标志着非晶结构的形成。与高温液态结构的 $g(r)$ 相比较，一方面，低温时第一峰的宽度变窄，峰的高度增加、变锐，这反映出随着温度的降低，原子配位数增加，短程有序性增强；但另一方面，非晶结构的偶分布函数和液态结构的又没有太大区别，尤其是在第二峰过后更近似，偶分布函数都是比较平缓的曲线，即仍然是长程无序的。这与快速凝固理论相一致，认为只要温度足够高，冷速足够快，几乎所有合金都能制备成非晶态合金^[19]。

从图 2 可以看出，冷却速率为 4×10^{11} K/s 时，偶分布函数变化规律很相似。第一峰的变化情况与前述类似，由于冷却速率的变慢，第一峰的分范围变窄，峰值变大，这表明中心原子的配位数增加，短程有序性增强。同时，与冷却速率为 4×10^{13} K/s 时的偶分布函数相比较，在冷却速率为 4×10^{11} K/s 时，低温偶分布函数第一峰与第二峰之间以及完全分裂的第二峰之后出现许多小峰，这反映出长程有序性的逐步增强；温度高于 1 100 K 时，各 PCF 曲线变化不明显，说明体系的内能结构变化不大；温度降至 900 K 以下时，各 PCF 曲线第一峰与第二峰之间都出现小峰，标志着合金结构发生重大转变，且温度越低越明显，表明体系的有序度达到很高的程度，Ni₃Al 呈现晶体结构。

表 1 Ni-Al 二元合金的 TB 势参数

Table 1 TB potential parameters of Ni-Al binary alloy

Atom1	Atom2	$A_{\alpha\beta}/\text{eV}$	$\zeta_{\alpha\beta}$
Ni	Ni	0.0376	1.07
Al	Al	0.1221	1.316
Ni	Al	0.0563	1.234 9
$p_{\alpha\beta}$	$q_{\alpha\beta}$	$r_0^{\alpha\beta}/\text{\AA}$	$r_{\text{cut}}/\text{\AA}$
16.999	1.189	2.491	6.683 353
8.612	2.516	2.864	7.684 112
14.997	1.282 3	2.522	6.766 526

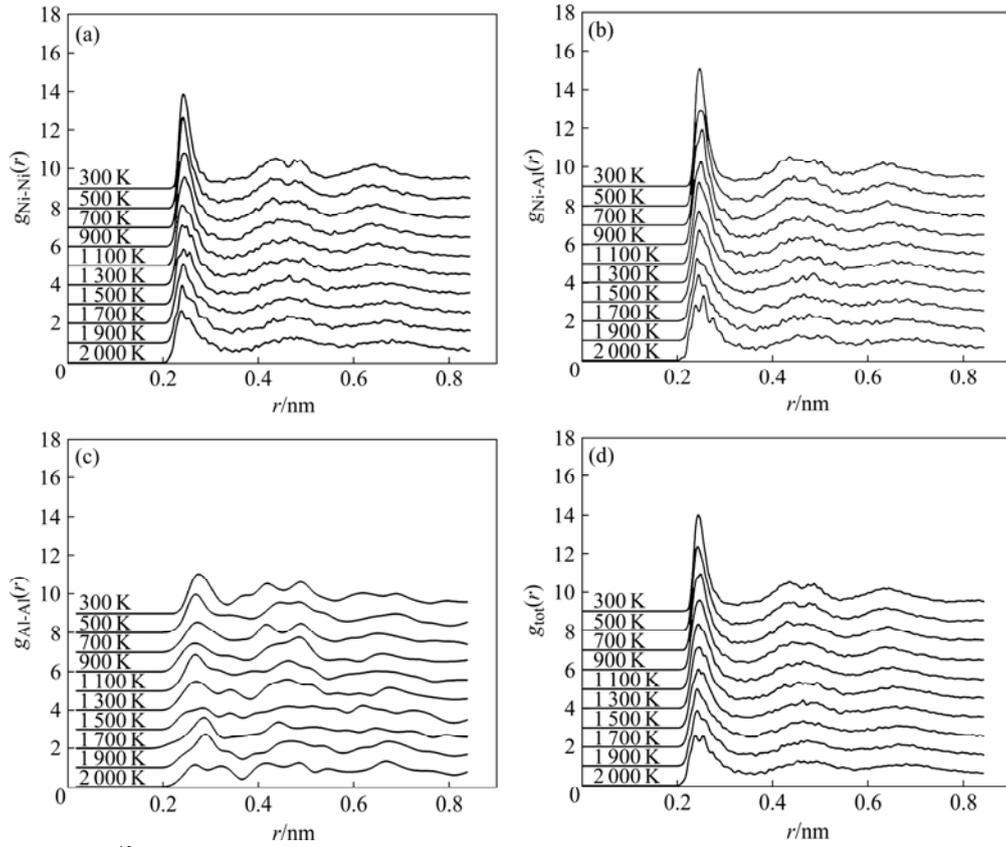


图 1 冷却速率为 4×10^{13} K/s 时不同温度下液态合金 Ni_3Al 的偶分布函数曲线

Fig.1 PCF curves of liquid alloy Ni_3Al at different temperatures with cooling rate of 4×10^{13} K/s: (a) $g_{\text{Ni-Ni}}(r)$; (b) $g_{\text{Ni-Al}}(r)$; (c) $g_{\text{Al-Al}}(r)$; (d) $g_{\text{tot}}(r)$

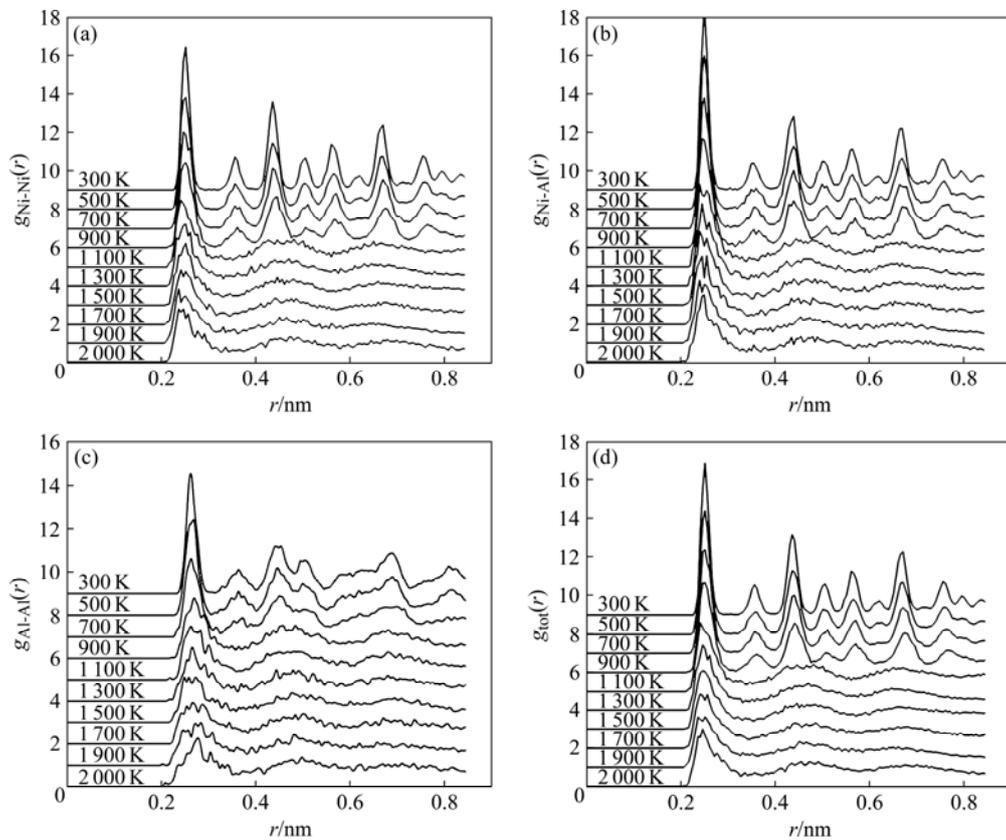


图 2 冷却速率为 4×10^{11} K/s 时不同温度下液态合金 Ni_3Al 的偶分布函数曲线

Fig.2 PCF of liquid alloy Ni_3Al at different temperatures with cooling rate of 4×10^{11} K/s: (a) $g_{\text{Ni-Ni}}(r)$; (b) $g_{\text{Ni-Al}}(r)$; (c) $g_{\text{Al-Al}}(r)$; (d) $g_{\text{tot}}(r)$

从图1和2可以看出,尽管冷却速率不相同,但是在降温过程中, Ni_3Al 的各类偶分布函数的第一峰都逐渐变高、变锐,说明每个原子的第一近邻原子数目越来越多,原子的短程有序度逐渐增强。从3种偏偶分布函数来看,在两种冷却速率的不同温度下, $g_{\text{Ni-Al}}(r)$ 的第一峰都高于 $g_{\text{Ni-Ni}}(r)$ 和 $g_{\text{Al-Al}}(r)$,这充分说明合金中异类原子之间存在较强的相互作用,这与谷廷坤等^[20]的研究结果一致。

2.2 NiAl 在不同冷却速率下的偶分布函数

图3和4所示分别为 NiAl 在两种冷却速率下的偏偶分布函数和总偶分布函数曲线。

由图3可以看出,冷却速率为 4×10^{13} K/s 时,偶分布函数在高温时变化不明显,在 700 K 以下第二峰出现劈裂,表现出非晶的特征,说明在这种冷却速率下,液态合金 NiAl 形成了非晶结构。

由图4可以看出,冷却速率为 4×10^{11} K/s 时,偶分布函数呈现较明显的变化:在 700 K 以下时,第二峰发生完全劈裂,这是非晶形成的特点;但是,同

时在第一峰与第二峰之间出现了一个小峰,标志着合金的原子结构发生了明显转变,表现出晶体的特征。这说明冷却速率为 4×10^{11} K/s 时,短程有序度继续增强,同时长程有序度也有一定的增强,合金有部分结晶,部分仍为非晶态。

由图3和4可以看出,随着温度的降低,偶分布函数的第一峰不断升高,峰谷不断降低,说明体系的短程有序度不断增强。和 Ni_3Al 的冷却过程相似,两种冷却速率的不同温度下, $g_{\text{Ni-Al}}(r)$ 在3种偏偶分布函数中有最大值,表明异类原子间更容易成键。

2.3 Ni_3Al 在不同冷却速率下的能量和体积的变化

图5和6所示分别为冷却速率为 4×10^{13} 和 4×10^{11} K/s 时 Ni_3Al 的能量和体积随模拟时间的变化。

由图5可见,冷却速率为 4×10^{13} K/s 时,从整个降温过程来看, Ni_3Al 的能量和体积是连续减小的,这对应了非晶的形成。

由图6可见,冷却速率为 4×10^{11} K/s 时, Ni_3Al 的能量和体积在小范围内有波动,整个过程中能量与

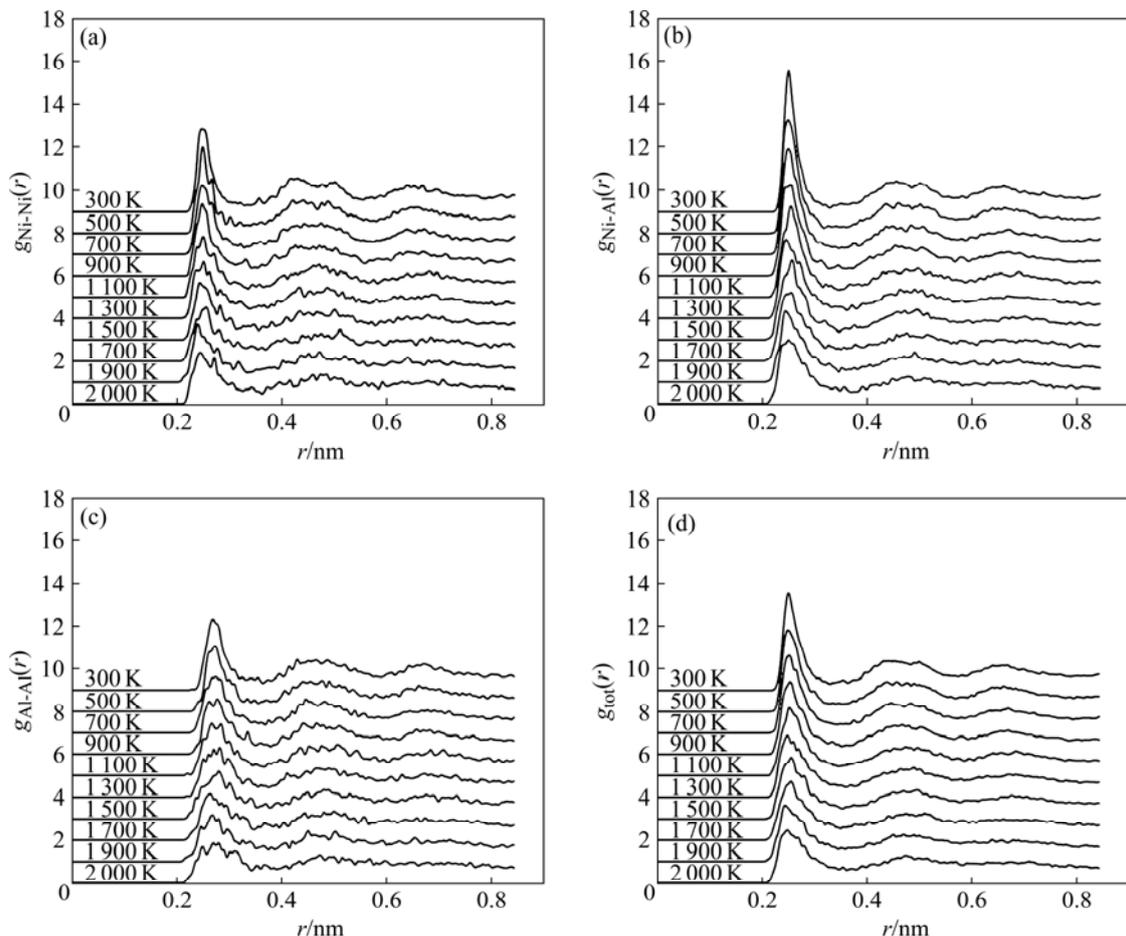


图3 冷却速率为 4×10^{13} K/s 时不同温度下液态合金 NiAl 的偶分布函数曲线

Fig.3 PCF curves of liquid alloy NiAl at different temperatures with cooling rate of 4×10^{13} K/s: (a) $g_{\text{Ni-Ni}}(r)$; (b) $g_{\text{Ni-Al}}(r)$; (c) $g_{\text{Al-Al}}(r)$; (d) $g_{\text{tot}}(r)$

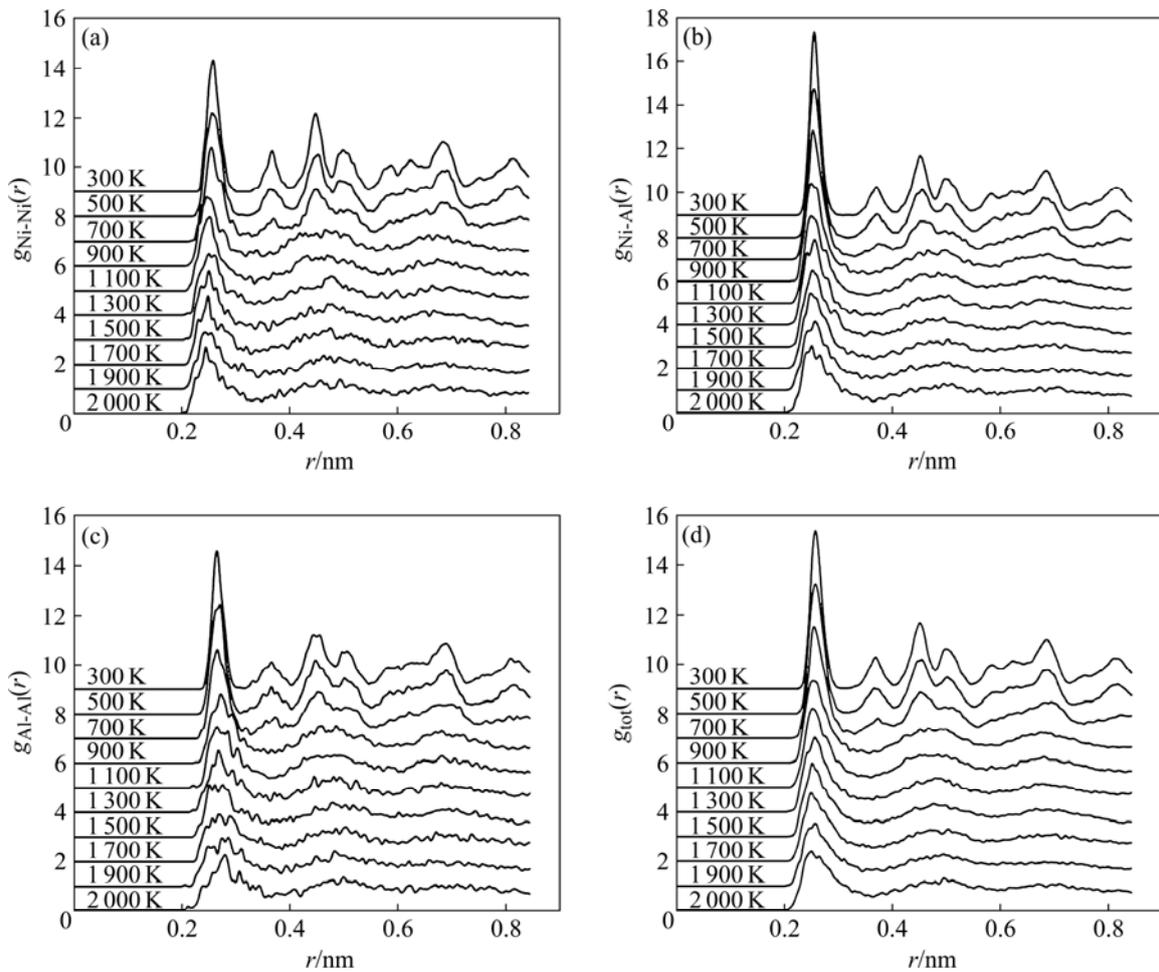


图 4 冷却速率为 4×10^{11} K/s 时不同温度下液态合金 NiAl 的偶分布函数曲线

Fig.4 PCF curves of liquid alloy NiAl at different temperatures with cooling rate of 4×10^{11} K/s: (a) $g_{Ni-Ni}(r)$; (b) $g_{Ni-Al}(r)$; (c) $g_{Al-Al}(r)$; (d) $g_{tot}(r)$

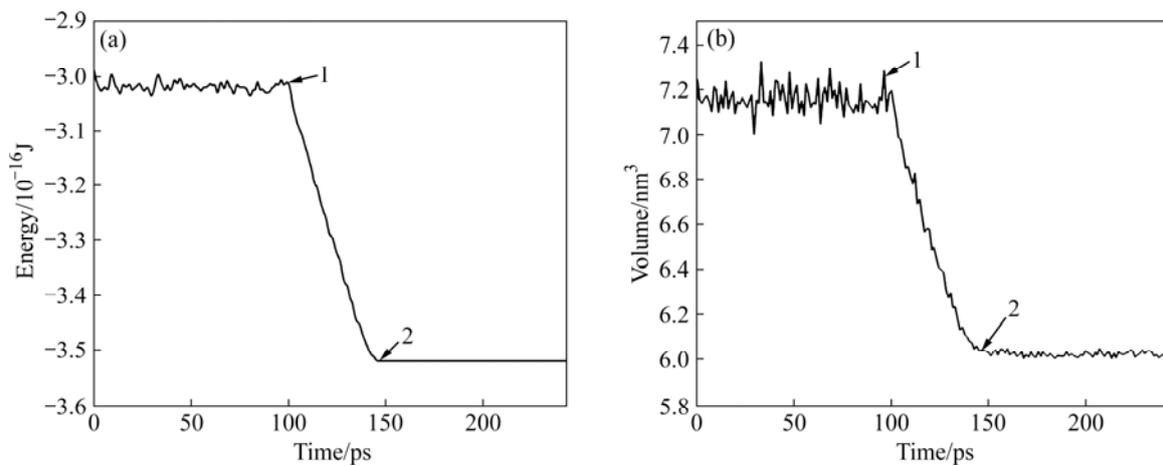


图 5 冷却速率为 4×10^{13} K/s 时 Ni_3Al 的能量(a)和体积(b)随模拟时间的变化

Fig.5 Change of energy (a) and volume (b) of Ni_3Al versus simulation time with cooling rate of 4×10^{13} K/s

体积呈减小趋势,但是在冷却过程中能量和体积有一个骤降的阶段,即:图 6 中点 2 (约 1 110 K)和点 3 (约

1 080 K)之间的阶段,能量和体积曲线的斜率均发生变化。这说明结晶发生在这一阶段,液态合金形成了

晶体结构。由于 4×10^{11} K/s 的冷却速率相对比较慢，因而原子有充分的时间重新排列，从而形成的结构长程有序度更高。这一点还可以从前面对应的偶分布函数分析中看出。而张晓茹等^[21]用对分析技术和均方位移等手段研究的结果表明，Ni₃Al 在慢冷时 1 180 K 开始发生结晶，我们的结果与这基本相符。

由图 5 和 6 可以看出，能量—时间曲线在高温与低温区均为直线，这也是实际液态和固态的一般特征。在图 6 中能量—时间曲线在 1 100 K 附近陡降，结晶开始温度约为 1 100 K。由于模拟过程是理想净化的快速凝固，容易导致深过冷，所以这一结晶温度低于 Ni-Al 合金平衡相图的实验温度。

2.4 NiAl 在不同冷速下的能量和体积的变化

图 7 所示为冷却速率为 4×10^{13} K/s 时 NiAl 的能量和体积随时间的变化。

如图 7 所示，冷却速率为 4×10^{13} K/s 时，NiAl

的能量和体积的变化与 Ni₃Al 的相同，也是能量和体积在小范围内有一定的波动，降温过程中呈线性下降趋势，说明这一过程中液态合金形成了非晶。

图 8 所示为冷却速率为 4×10^{11} K/s 时 NiAl 的能量和体积随时间的变化。由图 8 可见，冷却过程可以分为 3 个阶段：点 1 和点 2 之间能量连续衰减，合金处于液态；点 2 (约 810 K) 和点 3 (约 770 K) 之间，能量和体积有一个骤降，说明合金已经开始发生转变，从点 2 开始结晶，到点 3 时结晶已完成。谷廷坤等^[20]按照 Abraham 方法确定的转变温度为 790 K，这验证了本研究的模拟结果。但是这个过程与图 6 中的 Ni₃Al 在相同的冷却速率下的冷却过程相比，点 2 和点 3 之间能量和体积随时间的变化速率减慢。由前面的偶分布函数分析可知，NiAl 在此时只是部分结晶，还有部分非晶形成，这是图 8 中点 2 和点 3 之间能量和体积随时间的变化速率减慢的原因。

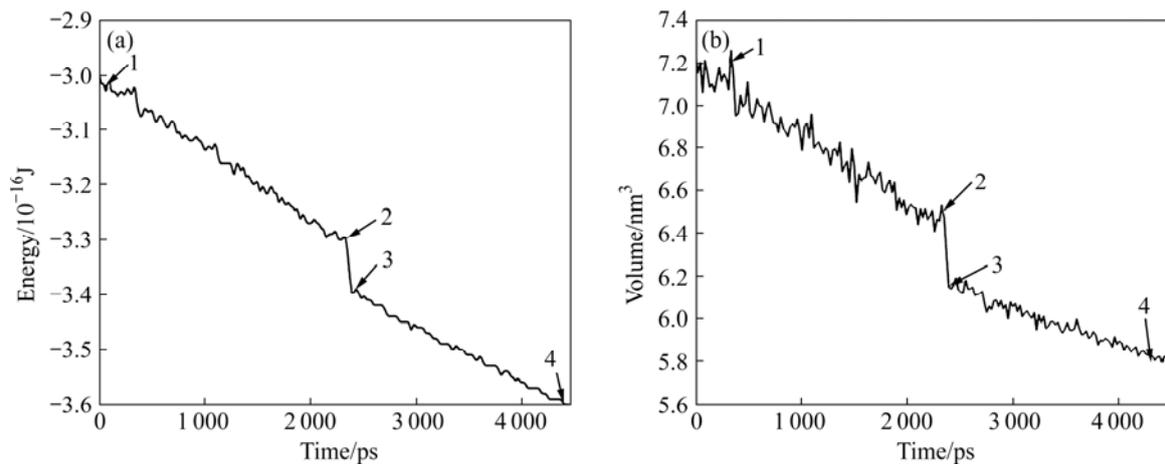


图 6 冷却速率为 4×10^{11} K/s 时 Ni₃Al 的能量(a)和体积(b)随模拟时间的变化

Fig.6 Change of energy (a) and volume (b) of Ni₃Al versus simulation time with cooling rate of 4×10^{11} K/s

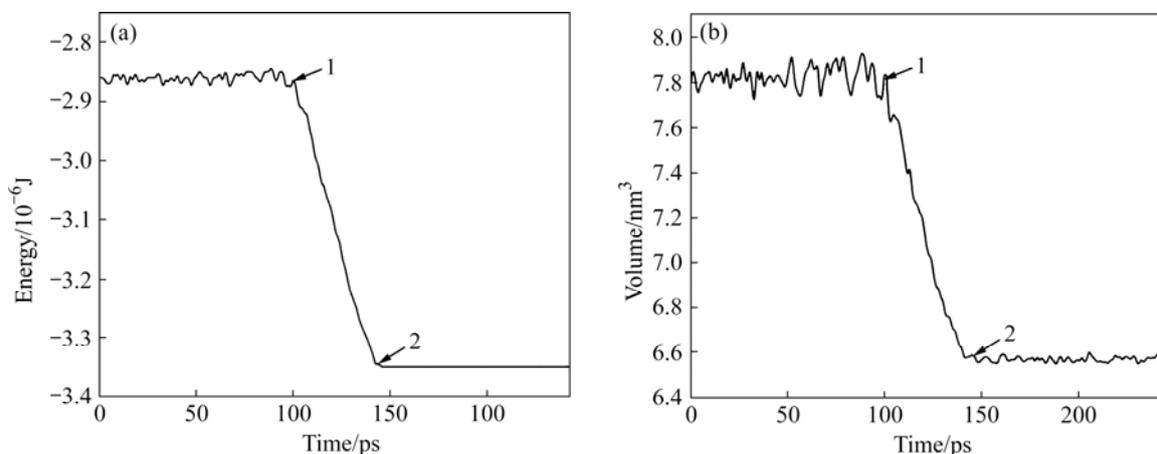


图 7 冷却速率为 4×10^{13} K/s 时 NiAl 的能量(a)和体积(b)随模拟时间的变化

Fig.7 Change of energy (a) and volume (b) of NiAl versus simulation time with cooling rate of 4×10^{13} K/s

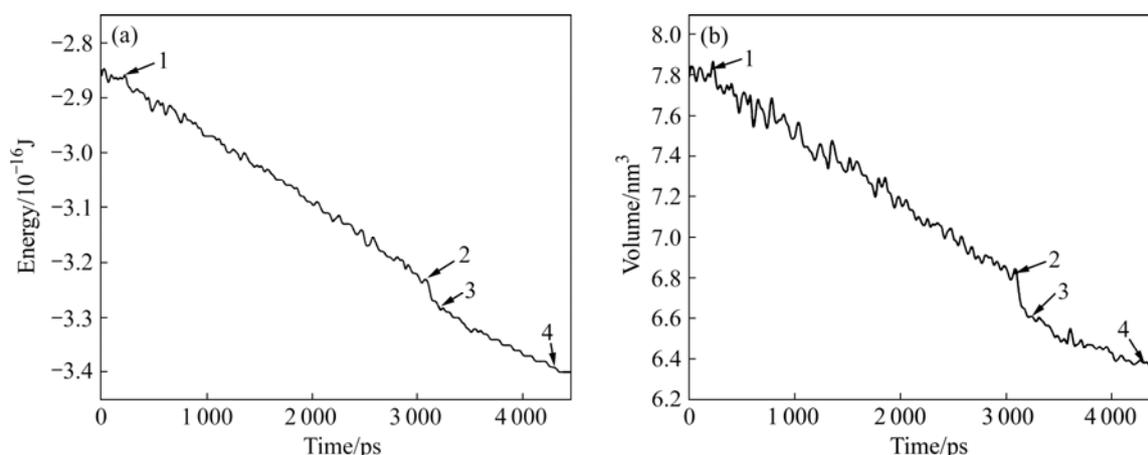


图 8 冷却速率为 4×10^{11} K/s 时 NiAl 的能量(a)和体积(b)随模拟时间的变化

Fig.8 Change of energy (a) and volume (b) of NiAl versus simulation time with cooling rate of 4×10^{11} K/s

3 结论

1) 基于 TB 势函数, 采用 Materials Explorer 分子动力学软件包可以较好地描述二元液态合金 Ni_3Al 和 NiAl 凝固过程的结构变化特征。

2) 在模拟液态合金凝固过程中, 冷却速率对降温过程中液体合金的结构转变快慢和最后结构有重要影响。在较快的冷却速率(4×10^{13} K/s)下, Ni_3Al 形成了非晶结构; 在相对较慢的冷却速率(4×10^{11} K/s)下, Ni_3Al 在 1 100 K 左右结构开始发生了变化, 最终形成了晶体结构。在冷却速率为 4×10^{13} K/s 时, NiAl 形成了非晶, 在冷却速率为 4×10^{11} K/s 时, NiAl 在 810 K 有部分晶体开始形成。

REFERENCES

- [1] HUMPHREY W, DALKE A, SCHULTEN K. VMD: Visual molecular dynamics[J]. Journal of Molecular Graphics, 1996, 14(1): 33-38.
- [2] RAPAPORT D C. The art of molecular dynamics simulation [M]. 2nd ed. New York: Cambridge University Press, 2004: 11-43.
- [3] FINNIS M W, SINCLAIR J E. A simple empirical n-body potential for transition-metals[J]. Phil Mag A, 1984, 50(1): 45-55.
- [4] DAW M S, BASKES M I. Embedded atom method derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals[J]. Phys Rev B, 1984, 29(12): 8486-8495.
- [5] 李成祥, 孟庆元, 杨立军. Au快速凝固及晶体生长的分子动力学模拟[J]. 哈尔滨工业大学学报, 2008, 40(5): 705-708.
- [6] LI Cheng-xiang, MENG Qing-yuan, YANG Li-jun. Molecular dynamics simulation of high-speed solidification and crystal growth of gold (Au)[J]. Journal of Harbin Institute of Technology, 2008, 40(5): 705-708.
- [7] 郑采星, 刘让苏, 周群益, 田泽安, 王鑫, 李强. $\text{Cu}_{70}\text{Ni}_{30}$ 合金快速凝固及晶体结构的模拟研究[J]. 中国科学G辑, 2005, 35(4): 408-414.
- [8] ZHENG Cai-xing, LIU Rang-chu, ZHOU Qun-yi, TIAN Ze-an, WANG Xin, LI Qiang. Simulation research of high-speed solidification and crystal structure of $\text{Cu}_{70}\text{Ni}_{30}$ alloy[J]. Science in China Ser G, 2005, 35(4): 408-414.
- [9] 郑采星, 刘让初, 彭平. 液态金属 Ag_6Cu_4 凝固过程中非晶转变的分子动力学模拟[J]. 中国有色金属学报, 2003, 13(6): 1333-1337.
- [10] ZHENG Cai-xing, LIU Rang-chu, PENG Ping. Molecular dynamics simulation of amorphous formation during solidification processes of liquid metal Ag_6Cu_4 [J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2003, 13(6): 1333-1337.
- [11] 郑采星, 刘让苏, 田泽安, 周群益, 彭平. 二元液态金属 $\text{Ag}_x\text{Cu}_{1-x}$ 快速凝固过程的分子动力学模拟研究[J]. 稀有金属材料与工程, 2005, 34(3): 350-354.
- [12] ZHENG Cai-xing, LIU Rang-chu, TIAN Ze-an, ZHOU Qun-yi, PENG Ping. Molecular dynamics simulations of the rapid cooling processes in binary liquid metals: $\text{Ag}_x\text{Cu}_{1-x}$ [J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2005, 34(3): 350-354.
- [13] SARKAR A, BARAT P, MUKHERJEE P. Molecular dynamics simulation of rapid solidification of aluminum under pressure[J]. International Journal of Modern Physics B, 2008, 22(17): 2781-2785.
- [14] YANG Hong, LÜ Yong-jun, CHEN Min, GUO Zeng-yuan. A molecular dynamics study on melting point and specific heat of Ni_3Al alloy[J]. Sci China Ser G, 2007, 50(4): 407-413.

- [11] 王 刚, 张秉刚, 冯吉才, 何景山, 马一兵. 镍基高温合金叶片焊接修复技术的研究进展[J]. 焊接, 2008(1): 20-23.
WANG Gang, ZHANG Bing-gang, FENG Ji-cai, HE Jing-shan, MA Yi-bing. Research progress in repair welding technology of Ni-based superalloy blades[J]. Welding & Joining, 2008(1): 20-23.
- [12] 郭建亭, 张光业, 杜兴蒿. 定向凝固 NiAl 合金的超塑性行为[J]. 中国有色金属学报, 2004, 14(4): 521-527.
GUO Jian-ting, ZHANG Guang-ye, DU Xing-hao. Investigation of superplasticity in directionally solidified NiAl alloys[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2004, 14(4): 521-527.
- [13] 张长桥, 张晓茹. 耐蚀合金 Al_3Ni 和 Ni_3Al 液态冷凝过程的比较研究[J]. 化学物理学报, 2002, 15(6): 447-453.
ZHANG Chang-qiao, ZHANG Xiao-ru. The comparison of the solidification of liquid Al_3Ni and Ni_3Al [J]. Chinese Journal of Chemical Physics, 2002, 15(6): 447-453.
- [14] 张光业, 张 华, 张厚安, 尹何迟, 郭建亭. 航空用高温合金防护涂层的研制及其应用的发展[J]. 材料导报, 2006, 20(5): 59-62.
ZHANG Guang-ye, ZHANG Hua, ZHANG Hou-an, YIN He-chi, GUO Jian-ting. Progress in preparation and application of corrosive resistance coating for aerospace superalloys[J]. Materials Review, 2006, 20(5): 59-62.
- [15] WANG Li, BIAN Xiu-fang, YANG Hua. Structural simulation of clusters in liquid Ni-Al alloy[J]. Phys Lett A, 2002, 302(5/6): 318-324.
- [16] LIU J, ZHAO J Z, HU Z Q. MD study of the glass transition in binary liquid metals: Ni_6Cu_4 and Ag_6Cu_4 [J]. Intermetallics, 2007, 15(10): 1361-1366.
- [17] QI Wei-hong, HUANG Bai-yun, WANG Ming-pu, YIN Zhi-ming. Freezing of silver cluster and nanowire: A comparison study by molecular dynamics simulation[J]. Computational Materials Science, 2008, 42: 517.
- [18] MASSOBRIO C, PONTIKIS V, MARTIN G. Amorphization induced by chemical disorder in crystalline $NiZr_2$: A molecular-dynamics study based on an n -body potential[J]. Phys Rev Lett, 1989, 62(10): 1142-1145.
- [19] 王焕荣, 石志强, 腾新营, 闵光辉, 叶以富. 合金非晶形成能力的研究进展[J]. 功能材料, 2002, 33(4): 357-359.
WANG Huan-rong, SHI Zhi-qiang, TENG Xin-ying, MIN Guang-hui, YE Yi-fu. Progress in amorphous forming ability of alloys[J]. Journal of Functional Materials, 2002, 33(4): 357-359.
- [20] 谷廷坤, 齐元华, 秦敬玉. 液态合金NiAl凝固过程中微观结构转变的分子动力学模拟[J]. 化学物理学报, 2003, 16(5): 385-389.
GU Ting-kun, QI Yuan-hua, QIN Jing-yu. Molecular dynamics simulations of solidification of liquid NiAl[J]. Chinese Journal of Chemical Physics, 2003, 16(5): 385-389.
- [21] 张晓茹, 张 弢, 吴爱玲. 液态合金 Ni_3Al 慢冷过程的计算机模拟[J]. 原子与分子物理学报, 2004(4): 365-368.
ZHANG Xiao-ru, ZHANG Tao, WU Ai-ling. Molecular dynamics simulations of solidification of liquid NiAl[J]. Journal of Atomic and Molecular Physics, 2004(4): 365-368.

(编辑 何学锋)