

液态金属铝及其凝固过程的微观结构转变特性⁽¹⁾

李基永 刘让苏* 周 征 谢* 彭 平*

(湖南大学化学化工系, * 应用物理系, 长沙 410082)

摘 要 采用分子动力学方法对液态金属 Al 及其凝固过程中的微观结构转变特性进行了模拟研究, 发现在 1 800~ 350K 的温度区间内, 对全局结构组态起重要作用的 HA 键型组态有 1551、1541、1431、1311、1321 和 1422 等, 其中以 1551 键型组态最为显著, 它在全过程的微观结构转变中起着主导作用, 是其双体分布函数 $g(r)$ 曲线的第二峰出现由光滑正弦峰 $\rightarrow$ 平台 $\rightarrow$ 分裂为二个次峰的转变过程的决定性因素。

关键词 液态金属 凝固过程 微观结构转变 计算机模拟

长期的实验证实, 固态金属材料的宏观性能主要是由其微观结构决定的, 而固态微观结构又是由其液态母体微观结构在凝固过程中不断转变后得到的。因而, 如何测定和控制这种微观结构转变的过程就成为当代材料科学领域的关键问题之一。70 年代以来采用急冷法可以使有些液态金属的微观结构在固态中得到一定程度的保留, 而成为非晶态结构, 同时可以使性能得到改善和提高, 为解决这一问题提供了重要的手段。但由于对液态金属的微观结构目前尚难精确测定, 特别是在急冷过程中这些微观结构如何进行转变的具体机制更难测定和描述, 因而使这一领域的深入研究进展较慢。

随着计算机技术的发展和分子动力学在计算机模拟研究中的应用, 已使上述微观结构及其转变过程的研究, 取得了许多重要的进展^[1-5]。

本文在原有研究工作^[4,7]的基础上, 进一步在一个大温度区间 (1800~ 350K) 对液态多属 Al 的高温加热和急冷凝因的全过程进行分子动力学模拟研究, 考察了各种微观结构组态在这一大温度区间的转变特性。探讨了对由过热 ($\sim 2T_m$) $\rightarrow$ 过冷液态 $\rightarrow$ 固态整个过程中

起决定作用的结构因素及其变化规律。

1 模拟计算条件与方法

本文采用分子动力学方法对 500 个 Al 原子的液态金属在升温 and 急冷凝固过程中的微观结构组态变化进行模拟研究。

首先将由 500 个 Al 原子组成的系统置于一个立方体盒中并按周期性边界条件运行。原子间的有效相互作用势采用与实验符合较好的由 Wang 等人^[8,9]所发展起来的能量独立非局域模型势:

$$V(r_{ij}) = (Z_{\text{eff}}^2 / r_{ij}) [1 - (2/\pi)] \times \int_0^\infty F(q) \sin r_{ij} / q dq \quad (1)$$

式中 Z_{eff} 和 $F(q)$ 分别表示有效离子价和归一化能量波数特徵函数, 其定义详见文献 [8, 9], 其势能曲线如图 1 所示。双体势的截止距离为 20a.u (原子单位)。运行的时间步长为 10^{-15} s。

模拟计算从熔点 (933K) 附近的 943K 开始, 在该温度下, 让系统运动 20 000 次以确保其处于平衡态, 先以 4×10^{13} K/s 的升温速

① 国家自然科学基金 (编号 : 5917142) 和湖南省自然科学基金 (编号: 94~ 028) 资助项目

收稿日期: 1996-12-19; 修回日期: 1997-02-15 李基永, 女 54 岁, 副教授

率由 $943 \rightarrow 1800\text{K}$; 再从 943K 开始, 以 $4 \times 10^{13}\text{K/s}$ 的冷却速率由 $943 \rightarrow 350\text{K}$ 。每隔 50K 为一个结构测试的温度点, 在该点运行 $4\,000$ 步, 每隔 200 步记录一次系统的原子结构组态。然后用 Honeycutt- Andersen (HA) 键型指数法^[10,11]测定各个温度下的原子键组态。再进行分析比较以探讨其结构变化的特殊规律。

2 模拟计算结果

根据上述模拟计算, 我们得到各种 HA 键型指数如表 1 所示。为了更清楚地看出各种键型的演变过程, 我们再将其表示为图 2。

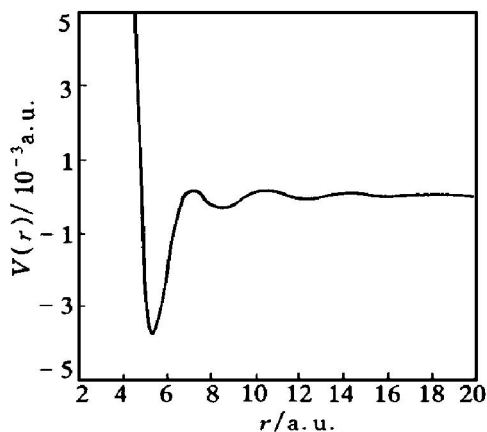


图 1 液态金属 Al 在 943K 时的有效双体势曲线

表 1 液态金属 Al 及其凝固过程中不同键型成键数 (%) 与温度 (K) 的关系

T/K	键 型										
	1551	1541	1421	1422	1431	1201	1211	1301	1311	1321	1441
1 800	7.3	10.3	4.2	8.6	19.8	4.1	3.2	2.1	12.2	9.7	2.3
1 750	7.4	10.7	4.2	8.6	20.0	3.6	3.3	1.8	11.8	9.8	2.5
1 700	8.0	11.0	4.0	8.5	20.7	3.5	3.1	1.8	11.3	9.6	2.6
1 650	8.3	11.4	4.1	8.5	20.3	3.3	2.8	1.9	11.0	9.4	2.7
1 600	8.3	11.5	4.1	8.7	21.0	3.1	2.9	1.6	10.8	9.4	2.6
1 550	8.7	11.5	4.0	8.7	20.7	2.9	2.5	1.8	11.0	9.0	2.8
1 500	8.9	11.7	4.0	8.4	20.9	2.9	2.5	1.6	10.4	9.0	3.0
1 450	9.3	11.5	4.0	8.4	20.7	2.8	2.3	1.7	10.3	8.9	3.0
1 400	10.3	12.2	4.0	8.1	21.3	2.5	2.3	1.5	9.7	8.7	3.2
1 350	10.6	12.7	3.9	8.2	21.4	2.4	2.0	1.5	9.6	8.5	3.4
1 300	11.2	12.6	3.9	8.1	21.4	2.4	2.0	1.4	9.3	8.4	3.4
1 250	11.9	13.3	3.9	7.8	21.8	2.2	1.9	1.3	8.8	8.0	3.7
1 200	12.4	13.2	3.5	7.7	21.9	2.1	1.8	1.2	8.6	8.0	3.9
1 150	12.5	13.5	3.9	7.8	21.8	1.8	1.6	1.1	8.0	7.7	4.0
1 100	13.6	13.8	3.6	7.6	21.7	1.7	1.5	1.1	7.8	7.3	4.2
1 050	14.8	13.9	3.5	7.4	21.3	1.7	1.4	1.1	7.5	7.1	4.4
1 000	16.1	14.0	3.3	7.1	22.2	1.6	1.3	1.0	6.9	7.0	4.7
943	16.5	14.4	3.3	7.1	21.6	1.3	1.1	1.1	6.6	6.6	6.6
900	18.3	14.7	3.0	7.1	21.7	1.3	1.2	0.9	6.3	6.6	5.0
850	17.7	14.5	3.2	6.9	22.1	1.3	1.1	0.8	6.3	6.4	4.9
800	19.3	14.5	3.0	6.5	21.7	1.1	1.3	0.7	5.9	6.2	5.4
750	21.8	15.4	2.8	6.2	22.0	1.0	1.0	0.7	5.1	6.0	5.5
700	23.1	15.3	2.8	6.2	1.4	1.0	0.9	0.7	5.1	5.7	5.5
650	24.5	15.7	2.6	5.8	21.3	0.8	0.9	0.6	4.6	5.3	6.0
600	25.7	15.7	2.7	5.9	20.9	0.8	0.9	0.6	4.9	5.3	5.6
550	26.2	15.7	2.7	6.1	21.9	0.7	0.8	0.6	4.7	5.0	5.4
500	29.2	15.7	2.4	5.5	20.9	0.7	0.8	0.5	4.3	4.9	5.9
450	29.2	15.7	2.4	5.5	20.9	0.7	0.8	0.5	4.3	4.9	5.9
400	31.0	14.9	2.2	5.0	21.3	0.7	0.9	0.4	4.2	5.4	5.4
350	30.4	15.0	2.3	5.4	21.7	0.7	0.8	0.6	4.7	5.1	5.1

由图2明显可见, 在由1800 $\rightarrow$ 350K的全过程中, 随着温度的下降, 只有1551、1541等键型数呈现出明显的增加, 其中尤以1551键型最为突出, 由1800K时占总成键7.3%上升到350K时的30.4%, 净增23%; 1541键型次之, 仅由10.3% $\rightarrow$ 15%, 净增约5%。另一些键型如1311、1321、1201、1422等的键型数却呈现出程度不同的下降。只有1311键型数的变化达到7.5%, 其余键型数的变化都只在3%~5%以内。而在1800K时已占20%的1431键型在整个过程中却总是在20%~22%之间徘徊, 没有什么大的起伏。

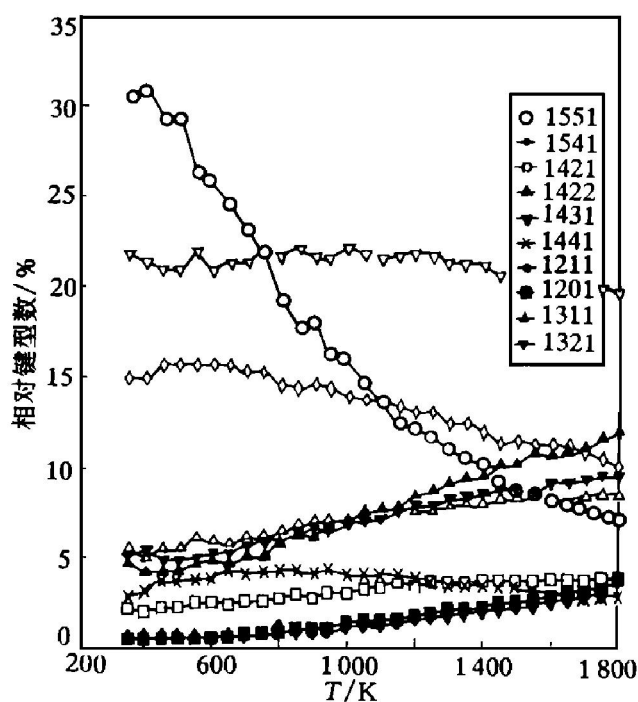


图2 液态金属Al及其凝固过程中各键型数与温度的关系

3 结论

根据上述结果, 我们可以清楚地看到: 在所有各种键型中, 只有1551键型在整个温区中变化最大, 而且穿过1422、1321、1311、1541、1431等5种键型的变化曲线。从统计热力学的观点来看, 系统的结构因子 $S(q)$ 和双体分布函数 $g(r)$ 的形状应由所有参与成键的键型结构数统计平均值确定。而其形状

的变化则应主要由变化程度较大的键型数所引起。由此可见, 对于液态金属Al由液态 $\rightarrow$ 固态的过程中微观结构的变化主要就应由1551键型所引起。

根据这一观点, 对于如图3所示的双体分

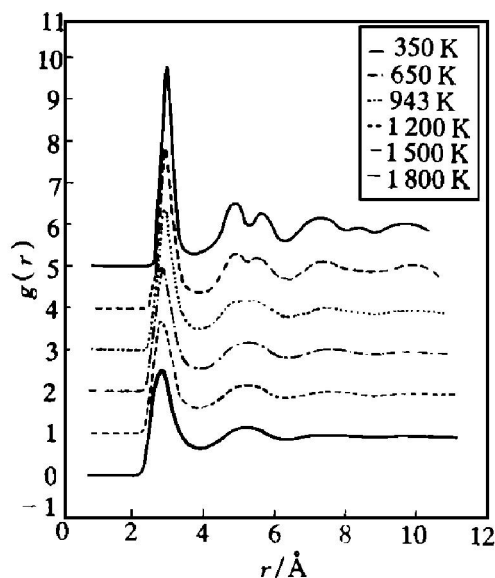


图3 液态金属Al及其凝固过程中的 $g(r)$ 曲线

布函数 $g(r)$ 曲线的变化情况, 我们可以有更深刻的理解。由图3明显可见, 当温度由1800 $\rightarrow$ 350K的过程中, 其中 $g(r)$ 的第二峰由比较光滑正弦波形逐步演变成比较平缓的台阶, 再进一步分裂成二个明显的峰头, 且愈来愈尖。按照作者在文献[4]中所述的观点; 与1551键型相关的二十面体的存在是造成Al的 $g(r)$ 出现第二峰分裂的原因, 这第二峰的逐步分裂正是由于1551键型的数目在不断增加所致。

参考文献

- 1 Fincham D, Heyes D M. Adv Chem Phys, 1985, 63: 493.
- 2 Allen M P, Tildesley D J. Computer Simulation of Lipuid. Oxford: Clarendon Press, 1987.
- 3 Qi D W, Wang S. Phys Rev B, 1991, 44: 884.
- 4 Liu R S, Qi D W, Wang S. Phys Rev B, 1992, 45: 451.
- 5 Liu R S, Phys Rew B, 1992, 46: 12001.

- 6 刘让苏, 李基永, 杜怀勤, 科学通报, 1993, 38, 409
- 7 刘让苏, 李基永, 周益群. 科学通报, 1995, 40: 979.
- 8 Wang S, Lai S K. J Phys F, 1980, 10: 2717.
- 9 Li D H, Li X R, Wang S. J Phys F, 1986, 18, 309.
- 10 Honeycutt J D, Andersen H C, J Phys Chem, 1987, 91: 4950.
- 11 Swope W C, Andersen H C. Phys Rev B, 1990, 41: 7042.

TRANSITION PROPERTIES OF MICROSTRUCTURES IN LIQUID METAL Al AND ITS SOLIDIFICATION PROCESS

Li Jiyong, Liu Rangsu^{*}, Zhou Zheng, Xie Quan^{*}, Peng Ping^{*}

Department of Chemistry, Hunan University, Changsha 410012

^{*} *Department of Physics, Hunan University, Changsha 410012*

ABSTRACT A simulation study on the transition properties of microstructures in liquid metal Al and its solidification process has been performed by molecular dynamics method. It has been found that in the range of temperature of 1 800~350 K, the 1551, 1541, 1431, 1311, 1321, and 1422 bond- types represented by Honeycutt- Andersen (HA) index play an important role for the entire structure configuration. Of these bond- types the 1551 bond- type is the most remarkable, which plays a leading role during the whole process of microstructure transitions and is the decisive factor for the second peak of the pair distribution function $g(r)$ being changed from a smooth sine peak into two split secondant peaks via a platform during the transition process

Key words liquid metal solidification process microstructure transition computer simulation

(编辑 彭超群)

(From page 51)

CHARACTERISTICS OF TEMPERATURE INCREASE OF MINERALS AND COMPOUNDS IN MICROWAVE FIELD

Peng Jinhui, Liu Chunpeng

Department of Metallurgy, Kunming University of science and Technology, Kunming 650093

ABSTRACT The characteristics of temperature increase of minerals and compounds in the microwave field were investigated and the curve of temperature increase was described quantitatively, aimed at exploring newly theoretical foundation many nonferrous metallurgical methods of nonferrous metals. The results showed that, temperature increasing rate of many nonferrous metals minerals in microwave field is mainly dependent upon their own characteristics and adsorptivity to microwave. In addition, their temperature increasing rate equations were derived as follows: $T = at + b$ (first stage) and $T = (ct + d)^{1/2}$ (second stage).

Key words minerals microwave characteristics of temperature increase

(编辑 李军)