

熔体初始温度对液态金属 Na 凝固过程中 微观结构影响的模拟研究^{*}

侯兆阳¹⁾²⁾ 刘让苏^{1)†} 王 鑫¹⁾ 田泽安¹⁾ 周群益¹⁾ 陈振华²⁾

1) 湖南大学应用物理系, 长沙 410082)

2) 湖南大学材料科学与工程学院, 长沙 410082)

(2006 年 1 月 20 日收到, 2006 年 5 月 19 日收到修改稿)

采用分子动力学方法对熔体初始温度热历史条件对液态金属 Na 凝固过程中微观结构的影响, 进行了模拟研究, 并采用双体分布函数 $g(r)$ 曲线、键型指数法和原子团类型指数法对凝固过程中的微观结构进行了分析. 结果表明: 液态金属 Na 在不同熔体初始温度条件下以 1×10^{11} K/s 冷速凝固时, 均形成晶化结构, 其中 1661 和 1441 键型或体心立方基本原子团(14608)在凝固过程中对微观结构的转变起决定性作用. 同时发现: 熔体初始温度对凝固微观结构有显著影响, 而对液态和过冷态的微观结构影响并不明显, 只有在晶化起始温度 T_c 附近才充分地展现出来. 不同熔体初始温度对凝固结构的晶化程度有不同的影响, 虽其影响程度是随着熔体初始温度的下降呈非线性变化关系的, 但仍表明是可以改变熔体初始温度来加以控制的. 原子团类型指数法(比键型指数法)更进一步表征了晶化体系中原子团的结构特征, 将有利于对液态金属凝固过程中微观结构的转变机理进行更为深入的研究.

关键词: 液态金属 Na, 熔体初始温度, 微观结构, 分子动力学模拟

PACC: 6120J, 6125M, 6470P, 7115Q

1. 引 言

关于熔体初始温度热历史条件对材料凝固组织和性能的影响, 在实验上已经有许多研究^[1-8]. 其中, Guimbar 和 Gobin^[1]考察了熔体初始温度热历史条件对液态金属 Al 凝固组织硬度的影响; Manov 等^[2]考察了熔体初始温度热历史条件对 Fe-B 和 Pd-Si 等非晶态合金的密度、热膨胀系数、电阻等物理性能的影响; 关绍康等^[3]详细研究了熔体初始温度和保温时间对快凝铝铁基合金显微结构的影响; 魏朋义等^[4]考察了熔体初始温度对 Al-Si 合金微观组织及性能的影响; 王震等^[5]研究了熔体处理温度对高温合金凝固组织枝晶间距的影响等. 但这些研究主要是在实验上的观测, 尚需从微观机理上给出合理解释. 因此, 研究熔体初始温度热历史条件对液态金属凝固过程中微观结构的影响就显得非常重要.

但在目前的实验条件下, 对液态金属凝固过程

中微观结构的转变机理还难以精密测定. 随着计算机技术的发展, 已有可能采用物理概念和物理图像都比较清晰的分子动力学方法来跟踪研究液态金属凝固过程中微观结构的变化, 并取得了许多研究进展^[9-11]. Wang 等^[12]已采用分子动力学方法考察了两个不同熔体初始温度下液态金属 Cu₃Au 快速凝固过程中程序结构的变化, 认为凝固结构的有序度随着熔体初始温度的降低而增加. 文献^[13, 14]也曾采用分子动力学方法研究了同一熔体初始温度、不同保温时间下的热历史对液态金属 Al 快速凝固过程中微观结构演变的影响, 发现热历史条件对微结构转变有重要影响, 且其作用主要是在玻璃转变温度点 T_g 以后才显示出来. 为了深入研究熔体初始温度热历史条件对液态金属凝固过程中微观结构的影响, 本文进一步在原有研究工作的基础上^[15-17], 采用分子动力学方法模拟了七种不同熔体初始温度下的较慢凝固过程(冷速为 1×10^{11} K/s), 并采用 Honeycutt-Andersen (HA)^[18]键型指数法和原子团类

^{*} 国家自然科学基金(批准号 50271026, 50571037)资助的课题.

[†] E-mail: liurangsu@sina.com

型指数法(CTIM)^[19-22],详细研究了熔体初始温度热历史条件对液态金属 Na 凝固过程中微观结构的影响.

2. 模拟计算的条件和方法

本模拟研究将 1000 个 Na 原子置于一个立方盒子中,然后让系统在周期性边界条件下运行.这里采用的原子间相互作用势是由 Wang 等人^[23,24]所发展的扩展非局域模型赝势理论中的双体有效势函数,即

$$V(r) = (Z_{\text{eff}}^2/r) \left[1 - \left(\frac{2}{\pi} \right) \int_0^{\infty} dq F(q) \sin(rq) Y(q) \right] \quad (1)$$

式中 Z 和 $F(q)$ 分别代表有效离子价和归一化能量波数特性函数,其定义详见文献 [23,24]. 双体势的截止距离为 20 a.u.(原子单位).

模拟计算分别从 973 K, 873 K, 773 K, 673 K, 573 K, 473 K, 373 K 开始(Na 的熔点为 371 K),首先让各系统分别等温运行 20000 步使之处于平衡态,然后对于每一个不同熔体初始温度体系均以 1×10^{11} K/s 的冷速冷却至 23K,其中每隔 50K 让系统等温运行 4000 步,以测量该系统的结构组态,即每个原子的空间坐标.再用 HA 键型指数法^[18]和原子团类型指数法^[19-22]对每个温度下的 20 组结构数据进行统计分析,以测定各有关原子成键类型和成团类型及其指数,再进行各种分析比较,以探讨其微观结构的演变规律.

3. 模拟计算结果与分析

3.1. 双体分布函数分析和可视化方法

首先将 573 K 时本模拟计算所获得的双体分布函数 $g(r)$ 在熔体初始温度为 973 K 的体系)与 Waseda 所给出的实验结果^[25]同绘于图 1 中,发现二者甚为相符.这就表明,本模拟研究所采用的有效双体势函数比较成功地反映了该系统在微观结构方面的客观物理本质,因而由此获得的其他有关微观结构方面的模拟计算结果,也就具有一定的可信度.

为了进一步分析熔体初始温度这一热历史条件对凝固微结构的影响,在图 2 中给出了七种不同熔体初始温度下,以相同冷速凝固到 23 K 时的双体分布函数 $g(r)$ 曲线.由图 2 可见,这七个体系在 23 K

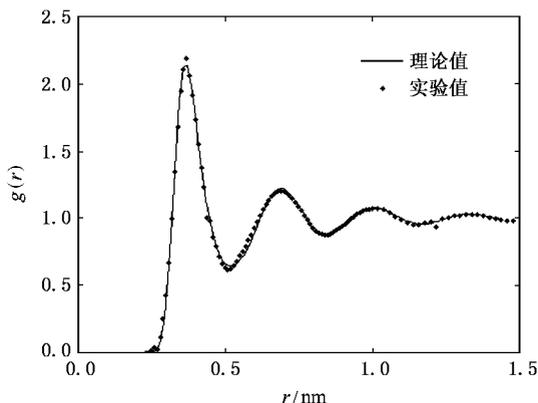


图 1 液态金属 Na 在 573 K 时的双体分布函数(理论值为熔体初始温度为 973 K 体系)

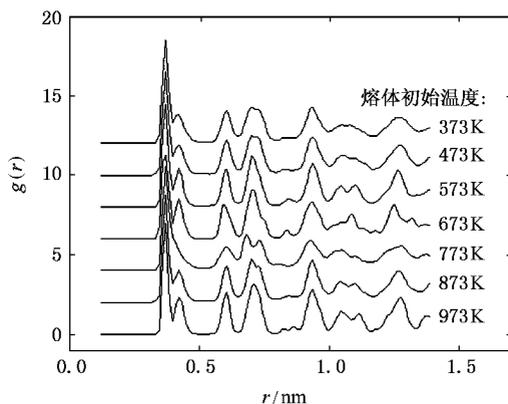
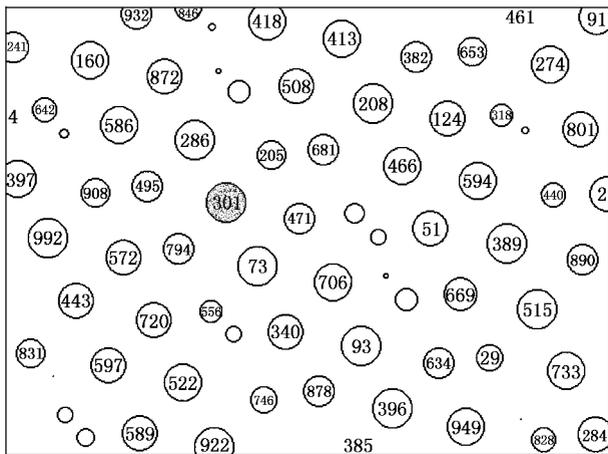


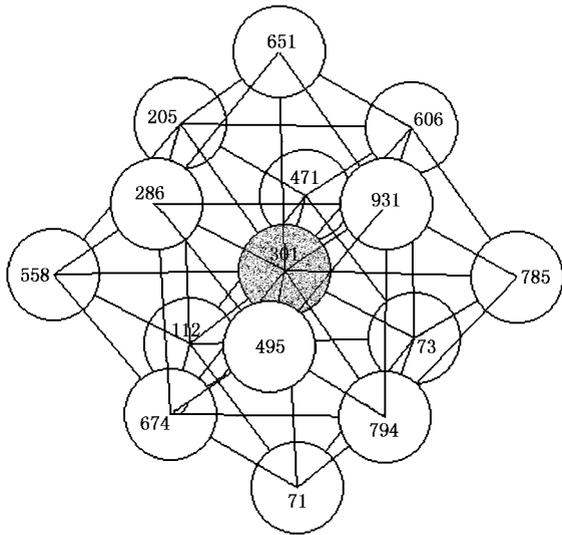
图 2 不同熔体初始温度条件下各体系在 23 K 时的双体分布函数

温度下,各双体分布函数均在几乎相同的位置出现了许多明显尖锐的小峰,这对应于体系晶化结构的形成,而且从小峰的数目和强度上可以看出,凝固结构的晶化程度有所不同.由此说明在不同熔体初始温度下以 1×10^{11} K/s 冷速凝固的结构均为晶化结构,而且熔体初始温度对凝固微结构有明显影响,但要定量判断影响的程度,还需进一步采用 HA 键型指数法和原子团类型指数法来确定.

为了直观判断凝固结构的结构特征,我们采用可视化方法清晰展现了不同熔体初始温度下的凝固结构组态.为了简单起见,我们只将熔体初始温度为 973 K 的体系,在 23 K 时的原子分布二维(111)截面和单个体心立方(bcc)基本原子团的具体配位情况分别示于图 3(a)(b)中.由图 3(a)可见,体系中的原子已经处于相当规则的密排面上的结晶状态,只是在一些位置上具有不同程度的缺陷而已.为进一



(a)



(b)

图 3 熔体初始温度为 973 K 体系在 23 K 时的 (a) 二维 (111) 截面图 (b) 301 号原子为中心的 bcc 基本原子团.

步确认该晶体结构的所属的晶格类型,我们在图 3 (b)中展示了包含图 3(a)中显示的密排面上标号为 301 的原子为中心的晶胞的近邻原子配位情况,可以清晰地看到:在图 3(b)中 301 号原子的周围有 8 个最近邻原子(标号为 606, 205, 286, 931, 73, 112, 674 和 794)位于立方体的顶角,6 个次近邻原子(标号为 651, 558, 495, 785, 471 和 71)位于立方体六个面的正上方,共计 14 个近邻原子,为标准的 bcc 晶胞;而且,在图 3(a)二维 (111)截面上 301 号原子的周围有 6 个近邻原子依次为 73, 471, 205, 286, 495 和 794,这些原子在图 3(b)体心立方晶胞中仍处在同一个 (111)密排面上.这样可以直观上看出,在熔体初始温度为 973 K 条件下,以 1×10^{11} K/s 冷速凝固到 23 K 时,形成晶化固体的结构主要为 bcc 结构.

3.2. 键型指数分析

虽然双体分布函数 $g(r)$ 曲线和可视化方法可以定性或直观地反映体系微观结构的特征,但要定量深入描述体系原子结构组态,就必须对每个原子与其近邻原子的成键关系有进一步的了解. HA 键型指数法是目前对液态、非晶态等无序体系和一些晶化体系的微观结构进行分析研究的一种重要方法^[18, 19, 26-28]. 当用 HA 键型指数来描述局域原子结构组态时,在典型液态或非晶态中,以 1551, 1541 和 1431 键型的大量存在为特征;而对于相应的各种晶体结构, bcc 晶体则以 1661 (8 个) 和 1441 (6 个) 键型的存在为特征,面心立方 (fcc) 晶体则以 1421 (12 个) 键型的存在为特征,六角立方 (hcp) 晶体则以 1421 (6 个) 和 1422 (6 个) 键型的存在为特征.

根据现有的模拟结果,可以获得七种不同熔体初始温度下各体系每个温度的相对成键数,为讨论方便,这里只展示出熔体初始温度为 973 K 体系中各种键型的相对数目与温度的关系,如图 4 所示. 由图 4 可见,各种键型的相对数目在 273 K 附近急剧变化,该温度对应体系的晶化起始温度 T_c . 其中,液态或非晶态结构的特征键型 1551, 1541 和 1431, fcc 晶体结构中的特征键型 1421 和 hcp 晶体中的特征键型 1422 的相对数目,在晶化起始温度 T_c 附近均急剧减少,最后甚至消失;只有反映体心立方结构特征的 1661 和 1441 键型的相对数目在 T_c 附近开始急剧增加,在晶化过程中对微观结构的转变起决定性的作用. 因此,为了便于比较,这里只展示出七个熔体初始温度下每个体系中 1661 和 1441 键型的相对数目随温度的变化情况,如图 5(a)(b)所示. 由

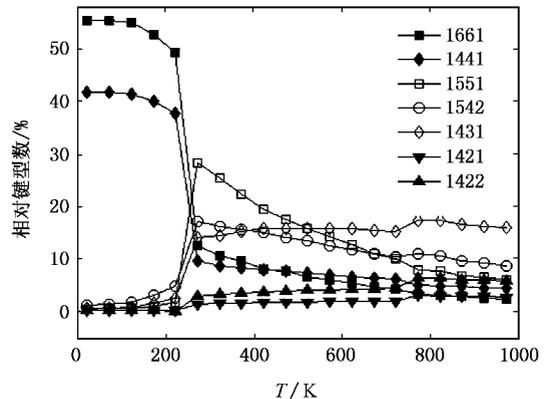


图 4 熔体初始温度为 973 K 体系中各种键型相对数与温度的关系

图 5(a)(b)可见,在不同熔体初始温度体系的凝固过程中,1661 和 1441 键型的相对数目均在 273 K 附近发生急剧变化,即这七个体系具有共同的晶化起始温度 $T_c \approx 273$ K.而且,在晶化起始温度 T_c 以上的液态和过冷态区,在所有不同熔体初始温度体系中,随着温度的降低,1661 和 1441 键型的相对数目几乎都以相同的比率增加;但在晶化起始温度 T_c 以下时,其相对数目对于不同的熔体初始温度体系将以不同的比率增加,并有显著的变化.由此可以认为,在液态金属 Na 凝固过程中,不同熔体初始温度热历史条件对凝固微结构有显著影响,而对液态和过冷态的微观结构影响并不明显,但其影响已经孕育其中,只有在晶化起始温度 T_c 附近才充分地展现出来,这一点,与我们在文献 [13,14] 中研究同一熔体初始温度、不同保温时间下的热历史对液态金属 Al 快速凝固过程中微观结构演变的影响时,发现热历史条件对微结构转变的重要影响主要是在玻璃转变温度 T_g 以后才显示出来,是相当一致的,只不过一个是快速凝固形成非晶态结构,一个是慢速凝固形成晶态结构而已.且由图 6 可见,随着熔体初

始温度的降低,23 K 时 1661 和 1441 键型相对数目经历了降低→升高→降低→升高的变化过程,呈非线性变化关系.而且可以看出,熔体初始温度为 973 K,673 K 和 373 K 的体系其凝固结构的晶化程度较高,而熔体初始温度为 773 K 和 473 K 的体系其凝固结构的晶化程度较低,且凝固结构的晶化程度随熔体初始温度的降低呈非线性变化关系.

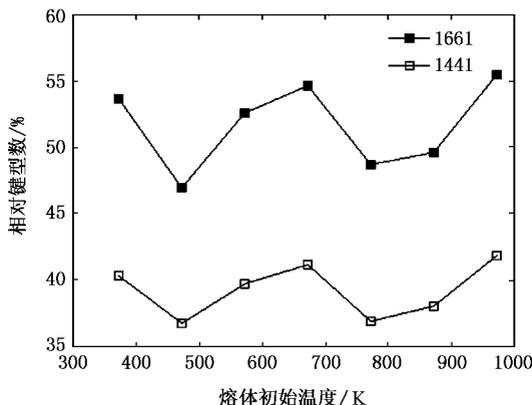


图 6 熔体初始温度与其凝固结构中 1661 键型和 1441 键型相对数的关系(23 K 时)

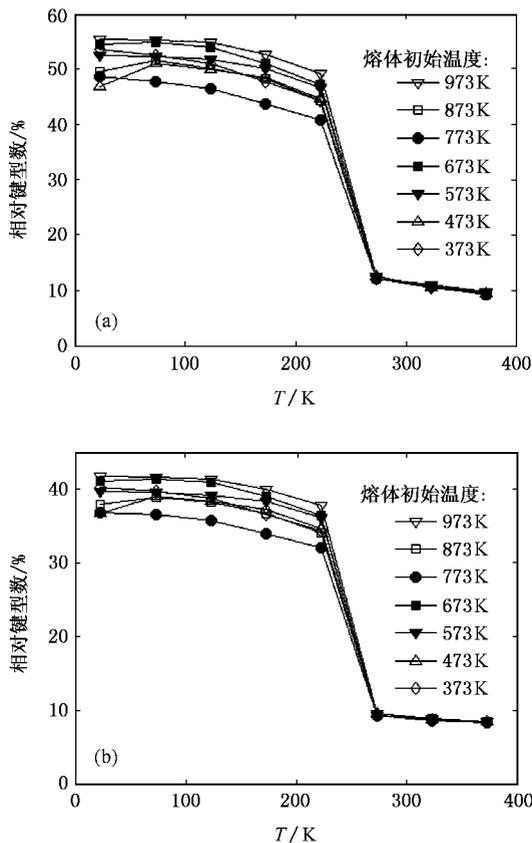


图 5 不同熔体初始温度体系中(a)1661 键型 (b)1441 键型相对数与温度的关系

3.3. 团簇结构分析

由于系统中原子的不同键型的组合可以形成不同的原子团簇结构,HA 键型指数法就难以清晰地描述各种不同类型的原子团簇结构.为了比较清晰而直观地表示各种类型的原子团簇结构,必须进一步采用我们在 Qi 和 Wang 工作的基础上^[29]已初步建立起来的原子团类型指数法 (CTIM)^[19-22].该法是采用四个数码来描述每一种基本原子团,这四个数码表示的含义依次分别为:第一个数码表示(与中心原子)组成原子团的原子数目(又称配位数);第二、第三、第四个数码分别表示成键原子与中心原子组成 1441,1551 和 1661 键型的数目.例如 (12 0 12 0) 表示一个由 13 个原子(1 个中心原子,配位数为 12)组成,以 12 个 1551 键型连结而成的二十面体基本原子团;(14 6 0 8)表示一个有由 6 个 1441 键型和 8 个 1661 键型组成的 bcc 基本原子团;Frank-Kasper 多面体原子团则用 (14 0 12 2)表示,这些原子团的结构模型如图 7(a)(b)(c)所示.

根据现有的模拟结果,可以获得七种不同熔体温度热历史条件下各体系每个温度的不同类型基本原子团,为了讨论方便,这里只展示出熔体初始温度为 973 K 体系中各种类型基本原子团数目与温度的

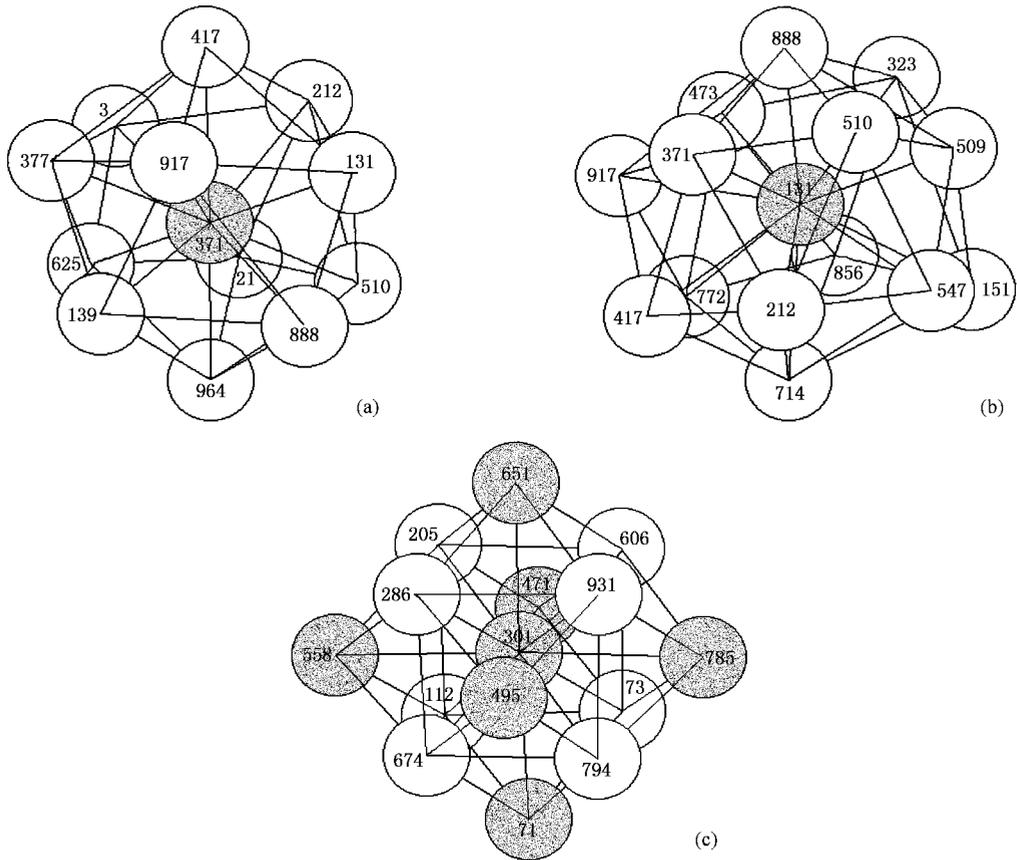


图 7 熔体初始温度为 973 K 体系中二十面体、Frank-Kasper 多面体和 bcc 基本原子团结构简图 (a) 中心原子编号为 371 的二十面体基本原子团(12 0 12 0); (b) 中心原子编号为 131 的 Frank-Kasper 多面体基本原子团(14 0 12 2); (c) 中心原子编号为 301 的 bcc 基本原子团(14 6 0 8)

关系如图 8 所示。由图 8 可见,在晶化起始温度 273 K 附近,液态或非晶态结构的主要特征原子团(12 0 12 0)(13 1 10 2)(14 2 8 4)(13 3 6 4)和(14 3 6 5)的数目急剧减少,甚至消失,而反映体心立方结构特征的(14 6 0 8)基本原子团数目开始急剧增加,并且其数目占绝对优势,在晶化过程中对体系微观结构的转变起决定性作用。为了便于比较,这里只展示出七个熔体初始温度下每个体系中体心立方基本原子团的数目随温度的变化情况,如图 9 所示。由图 9 可见,在晶化起始温度 273 K 以上的液态和过冷态区,在所有不同熔体初始温度体系中,体心立方基本原子团的数目都很少,几乎为零,但在晶化起始温度附近,体心立方基本原子团的数目对于不同熔体初始温度体系将以不同的比率增加,并有显著的变化。为便于讨论,我们再将不同熔体初始温度体系在 23 K 时的体心立方基本原子团的数目均展示在图 10 中。由图 10 可见,随着熔体初始温度的降低,23 K 时体心立方基本原子团的数目,与前面键型分析中的

1441,1661 键型数目随熔体初始温度的变化相类似,同样经历了降低→升高→降低→升高的变化过程,呈非线性变化关系,即从体心立方基本原子团(14 6 0 8)的数目受熔体初始温度的影响的变化规律与键型指数分析的结果是相当一致的。这一方面说明我们所采用的原子团类型分析方法的有效性,另一方面也说明它将为液态金属凝固过程中微观结构演变规律的研究提供一条新途径,从而使我们对微观结构细节的研究又可向前深入一步。

在上述对系统的键型分析和基本原子团分析中,当用键型数和基本原子团数表示时,均得到凝固结构的晶化程度随熔体初始温度的降低呈非线性变化关系。这一点似乎与文献[12]中所得到的凝固结构的有序度随着熔体初始温度的降低呈线性增加的结果有所不同,可能是由于后者仅只计算了两个不同的熔体初始温度,而未遇到非线性现象所致。然而,当我们进一步分析图 6 和图 10 所显示的非线性变化关系时,却可以清晰地看到,这种非线性变化关

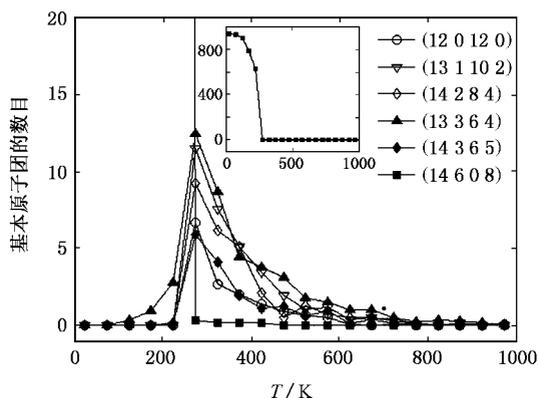


图 8 熔体初始温度为 973 K 时体系中基本原子团数目与温度的关系

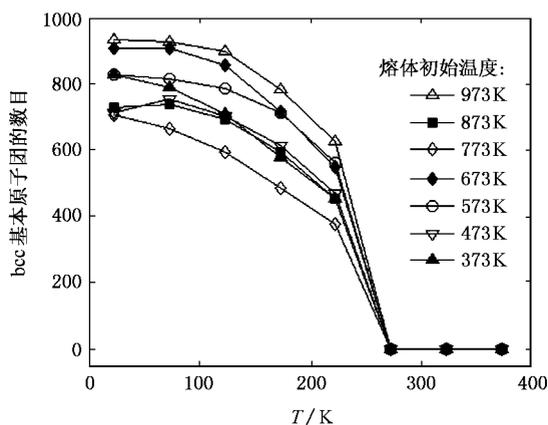


图 9 不同熔体温度体系中体心立方基本原子团(14 6 0 8)数目与温度的关系

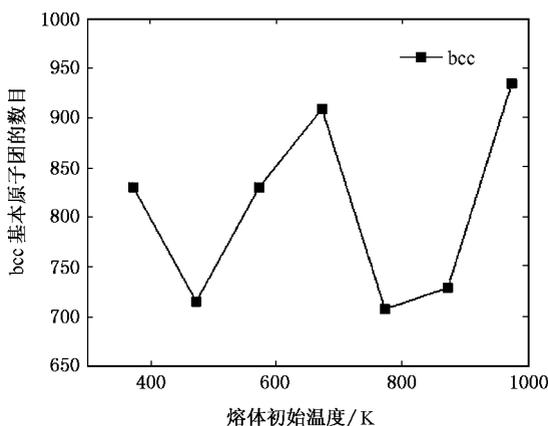


图 10 熔体初始温度与其凝固结构中体心立方基本原子团(14 6 0 8)的数目的关系(23 K 时)

系又呈现出在一定范围内的上下波动,且有随着熔体初始温度的降低而波动范围逐步缩小的趋势。虽因所展现的初始温度点数有限,尚难以确定其最小

的波动范围,但存在上、下限这一点却是明显的。特别值得注意的是,在文献[30]中采用透明模型合金在不同的初始条件下进行定向凝固研究时,竟然在实验上“发现枝晶一次间距存在一个较大的容许范围,凝固系统选择这个范围的上、下限而不是平均值。枝晶的平均一次间距具有明显的历史相关性,而上、下限的选择则具有很强的动力学必然性。”虽然这个实验与我们研究的对象有所不同,但在探讨初始历史条件对凝固微结构的影响,且得到其影响程度都存在上、下限这一点上,二者却是相当一致的。虽然熔体初始温度对凝固结构的晶化程度的影响呈现非线性变化关系与上、下限,将给寻找最佳的熔体初始温度以获得优化的凝固结构带来较大的困难,但仍然表明是可以通过改变熔体初始温度来加以控制的。

究竟是什么原因使得热历史对凝固微结构的影响呈现出非线性变化关系,且其影响的程度存在上、下限的结果?目前尚难以给出正确、合理的解释,希望能引起有关学者的讨论。但作者认为,整个凝固过程、特别是快速凝固过程是一个典型的非线性、非平衡热力学过程。凝固过程中所形成的各种不同类型的微结构、团簇结构,正是普利高津(I. Prigogine)耗散结构理论中的“耗散结构”^[31],它们是在系统远离平衡态时通过系统内各个原子、微结构之间的“非线性”相互作用形成的。这种系统内各原子、微结构之间相互作用的“非线性”特征,主要来源于系统内出现热涨落的偶然性,与相互作用时动力学的随机性共同影响的结果,其具体机理是非常复杂的,不具有线性的相关性。但从热力学涨落的观点来看,对于具有不同初始温度的熔体,应有不同的热涨落幅度(即变化范围),一般情况下,应是熔体的初始温度越高,其热涨落的变化幅度(即变化范围)越大,因而由热涨落所引起的能量变化范围也越大;由于相互作用时动力学的随机性,系统所处的实际状态只能是热涨落所引起的变化范围(亦即其拥有上、下限)中的任意一种状态,而不是系统可能具有所有状态的统计平均值。因而由热历史对系统结构状态造成的影响程度具有上、下限的结果,在定性上也是可以理解的。关于其具体的影响机理,还有待于进一步深入研究、探讨。

4. 结 论

根据上述不同熔体初始温度热历史条件下液态

金属 Na 凝固过程中微观结构的模拟研究结果和讨论,可得如下结论:

1. 液态金属 Na 在不同熔体初始温度下以 1×10^{11} K/s 冷速凝固的结构均为晶化结构,1661 和 1441 键型或体心立方基本原子团(14 6 0 8)在凝固过程中对微结构的转变起决定性作用.

2. 在液态金属 Na 凝固过程中,熔体初始温度对凝固微结构有显著影响,而对液态和过冷态的微观结构影响并不明显,只有在晶化起始温度附近才

充分地展现出来.

3. 熔体初始温度对液态金属 Na 凝固结构的晶化程度的影响,随熔体初始温度的降低呈非线性变化关系,且其影响的程度存在一个上、下限的范围.

4. 原子团类型指数法(比键型指数法)更进一步表征了某些晶化体系的原子团结构特征,这将更有利于我们对液态金属凝固过程中微观结构的实际转变机理进行更为深入的研究.

- [1] Guimbard J, Gobin P, Buler P I *et al* 1967 *Brit. J. Appl. Phys.* **18** 1641
- [2] Manov V P, Popel S I, Buler P I *et al* 1991 *Mater. Sci. Eng. A* **133** 535
- [3] Guan S K, Tang Y L, Shen N F *et al* 1994 *Acta Aeronautica et Astronautica Sinica* **15** 1396 (in Chinese) [关绍康、汤亚力、沈宁福等 1994 航空学报 **15** 1395]
- [4] Wei P Y, Fu H Z 1996 *Acta Metallurgica Sinica* **32** 817 (in Chinese) [魏朋义、傅恒志 1996 金属学报 **32** 817]
- [5] Wang Z, Li J G, Zhao N R *et al* 2002 *Acta Metallurgica Sinica* **38** 920 (in Chinese) [王震、李金国、赵乃仁等 2002 金属学报 **38** 920]
- [6] Takayama S, Oi T 1979 *J. Appl. Phys.* **50** 1595
- [7] Wen Y H, Li N, Tu M J 2001 *Scripta Mater* **44** 1113
- [8] Xu Y F, Sun G X, Chen H *et al* 1990 *Acta Phys. Sin.* **39** 836 (in Chinese) [许应凡、孙帼显、陈红等 1990 物理学报 **39** 836]
- [9] Cape J N, Finney J L and Woodcock L V 1981 *J. Chem. Phys.* **75** 2366
- [10] Hou H Y, Chen G L, Chen G 2005 *Chin. Phys.* **14** 1009
- [11] Geng H R, Sun C J, Yang Z X *et al* 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1320 (in Chinese) [耿浩然、孙春静、杨中喜等 2006 物理学报 **55** 1320]
- [12] Wang Li, Cong H R, Zhang Y N *et al* 2005 *Physica. B* **355** 140
- [13] Li J Y, Liu R S, Zhou Z *et al* 1998 *Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics* **15** 193 (in Chinese) [李基永、刘让苏、周征等 1998 原子与分子物理学报 **15** 193]
- [14] Liu R S, Liu F X, Li J Y *et al* 2003 *Acta. Phys. Chem.* **19** 791 (in Chinese) [刘让苏、刘凤翔、李基永等 2003 物理化学学报 **19** 791]
- [15] Liu R S, Qin S P, Hou Z Y *et al* 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3119 (in Chinese) [刘让苏、覃树萍、侯兆阳等 2004 物理学报 **53** 3119]
- [16] Hou Z Y, Liu R S, Li C S *et al* 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5723 (in Chinese) [侯兆阳、刘让苏、李琛珊等 2005 物理学报 **54** 5723]
- [17] Zhang H T, Liu R S, Hou Z Y *et al* 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2409 (in Chinese) [张海涛、刘让苏、侯兆阳等 2006 物理学报 **55** 2409]
- [18] Honeycutt J D, Andersen H C 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 4950
- [19] Liu R S, Li J Y, Dong K J *et al* 2002 *Mater. Sci. Eng. B* **94** 141
- [20] Dong K J, Liu R S, Yu A B *et al* 2003 *J. Phys: Condens. Matter.* **15** 743
- [21] Liu R S, Dong K J, Liu F X *et al* 2005 *Science in China, Series G* **48** 101
- [22] Liu R S, Dong K J, Li J Y *et al* 2005 *J. Non-cryst. Solids.* **351** 612
- [23] Wang S, Lai S K 1980 *J. Phys. F* **10** 2717
- [24] Li D H, Li X R, Wang S 1986 *J. Phys. F* **16** 309
- [25] Waseda Y 1980 *The structure of Non-Crystalline Materials* (New York: McGraw-Hill) p268
- [26] Li H, Wang G H, Bian X F *et al* 2001 *Phys. Rev.* **65** 35411
- [27] Li H, Wang G H, Zhao J J *et al* 2002 *J Chem. Phys.* **116** 10809
- [28] Liu C S, Xia J C, Zhu Z G *et al* 2001 *J Chem. Phys.* **114** 7506
- [29] Qi D W, Wang S 1991 *Phys. Rev. B* **44** 884
- [30] Huang W D, Ding G L, Zhou Y H 1995 *Chinese Journal of Materials Research* **9** 193 (in Chinese) [黄卫东、丁国陆、周尧和 1995 材料研究学报 **9** 193]
- [31] Zhan K H, Shen X F 1982 *I. Prigogine and Theory of the dissipative structures* p60 (in Chinese) [湛垦华、沈小峰 1982 普利高津与耗散结构理论(陕西科技出版社)第 60 页]

Simulation study of effects of initial melt temperature on microstructure of liquid metal Na during solidification processes^{*}

Hou Zhao-Yang¹⁾²⁾ Liu Rang-Su^{1)†} Wang Xin¹⁾ Tian Ze-An¹⁾ Zhou Qun-Yi¹⁾ Chen Zhen-Hua²⁾

1) (Department of Physics , Hunan University , Changsha 410082 , China)

2) (College of Materials Science and Engineering , Hunan University , Changsha 410082 , China)

(Received 20 January 2006 ; revised manuscript received 19 May 2006)

Abstract

Molecular dynamics simulation study has been performed on the effects of thermal history of initial melt temperature on microstructures during solidification of liquid metal Na. The pair distribution function $g(r)$ curves, the bond-type index method and the cluster-type index method have been used to analyze the variations of microstructures during the solidification process. The results show that the solidification structures of liquid metal Na at the cooling rate of 1×10^{11} K/s with different initial melt temperatures are always crystalline. The 1661 and 1441 bond-types or the bcc basic cluster (14 6 0 8) in the system play the critical role in the microstructure transitions. At the same time, it has been found that the effects of initial melt temperature on solidification microstructures are very remarkable, while they are not obvious in liquid and supercooled states, and the effects can be fully displayed only near the crystallization temperature T_c . The results also demonstrate that the effects of initial melt temperature on the crystallinity of solidification structures are different for different initial melt temperatures. Although the degree of influence is not linearly varying with the decrease of initial melt temperature, it still demonstrates that the influence degree can be controlled through the change of initial melt temperature. The cluster-type index method more clearly describes the cluster configurations in crystal system than the bond-type index method, so it is valuable to deeply investigate the evolution mechanisms of microstructures in liquid metal during solidification processes.

Keywords : liquid metal Na , initial melt temperature , microstructure , molecular dynamics simulation

PACC : 6120J , 6125M , 6470P , 7115Q

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 50271026 , 50571037).

[†] Corresponding author. E-mail : liurangsu@sina.com