

用于 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 分子动力学模拟的长程 Finnis-Sinclair 势函数*

胡志刚 刘益虎 吴永全[†] 沈 通 王召柯

(上海大学上海市现代冶金及材料制备重点实验室, 上海 200072)

(2008 年 12 月 30 日收到 2009 年 3 月 23 日收到修改稿)

用金属势函数描述氧化物是实现金属-氧化物界面分子动力学模拟的关键. 基于此, 通过拟合 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的晶格能、晶格常数、弹性常数, 获得了一套用于描述 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的长程 Finnis-Sinclair (F-S) 势. 通过与已报道的描述 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的 EAM 势、Glue 势和 modified Matsui (m-Matsui) 势的比较, 结果达到或优于前人的结果. 进而, 在 300 K 的温度下对 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 体系进行了 MD 模拟, 模拟结果与实验值也符合较好, 证明了本套势参数对 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 及 Fe- Al_2O_3 界面描述的适用.

关键词: 长程 F-S 势, $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, Fe- Al_2O_3 界面, Al- Al_2O_3 界面

PACC: 7115Q, 7340N, 6185

1. 引 言

Al_2O_3 -金属界面的计算机模拟, 因为相关应用领域(如“氧化物冶金”^[1-7]中的 Fe(liquid)- Al_2O_3 (polycrystal)界面以及陶瓷材料中的 Al_2O_3 -金属界面^[8-10]等)的研究需求, 而成为一个新的研究热点^[11]. 其中, Fe(liquid)- Al_2O_3 (polycrystal)界面的研究碍于高温实验条件(1600 °C 左右), 目前只能诉求于计算机模拟, 尤其是在动力学性能研究上特色突出的分子动力学(molecular dynamics, MD)模拟方法. 然而到目前为止, 能够实现金属-氧化物界面 MD 模拟的报道仍然很少^[12-14], 其主要原因就是势函数的描述上有难度.

由于 Al_2O_3 -金属界面同时涉及氧化物离子体系和金属体系, 这就给势函数描述造成了很大困难, 尤其是界面上具有原子相互渗透的过渡层中的氧化物离子与金属原子之间的相互作用如何描述, 是模拟是否成功的关键所在. 过去, 在纯 Al_2O_3 的 MD 模拟中, 普遍采用的势函数包括 Buckingham 势、Born-

Mayer-Huggins (BMH) 势^[15-19]和 Matsui 势^[20, 21], 模拟结果得到普遍认可. 但 Buckingham 势、BMH 势和 Matsui 势都有其局限性, 它们不能体现金属体系常见而又重要的多体电子效应, 因此无法准确描述金属, 也就无法用于 Al_2O_3 -金属界面的模拟. 与此同时, 为了描述金属的多体电子效应, Daw 和 Baskes 发展出原子嵌入势(embedded atom method, EAM potential)^[22]. Finnis 和 Sinclair 基于紧束缚态密度的二阶动量近似提出过渡金属的简单经验多体势(Finnis-Sinclair, F-S potential)^[23]. Ercolessi 等人提出了由多体电子密度项和一般双体势构成的胶体势(Glue potential)^[24]. 此外, Baskes 等人在原型 EAM 势的基础上提出了改进型 EAM 势(简称 MEAM 势), 在电子密度函数中添加了角度相关项^[25, 26]. 上述四种金属势考虑了局域电子密度对原子间相互作用力的影响, 对于金属的描述显然优于之前所采用的对势形式. 而几种金属势函数的区别主要在于嵌入能的非线性表述不同或者说嵌入密度的测度不一样^[27, 28]. 在最新的研究报道中, 已有学者把金属势函数应用到氧化物-金属界面的模拟研究中^[29-31], 即仅通过一套势函数同时描述金属层、氧化物层及

* 国家自然科学基金重点项目(批准号: 50334050)、国家自然科学基金(批准号: 50504010)、国家自然科学基金委员会和上海宝钢集团公司联合基金(批准号: 50774112)、上海市青年科技启明星计划(批准号: 07QA14021)和长江学者和创新团队发展计划(批准号: JRT0739)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: yqw@staff.shu.edu.cn

金属和氧化物的过渡层,并取得了一定成功,而用于高温的 $\text{Fe}(\text{liquid})\text{-Al}_2\text{O}_3(\text{polycrystal})$ 界面 MD 模拟的势函数描述还未见报道。

为此,本课题组已在室温到液相 Fe 温度范围内推导得到了一套完整的描述纯铁各相的长程 F-S 势函数^[32],并已实现采用一套长程 F-S 势函数模拟出纯 Fe 的 γ 相 $\rightarrow\delta$ 相及 δ 相 \rightarrow 液相的相变过程(相关论文正在撰写中)。同时在模拟界面原子扩散的方法方面还提出了一种新的加速分子动力学方法^[33]。在此基础上,本文通过拟合 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 晶体的结构、能量及弹性常数,获得了一套描述 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的长程 F-S 势参数,再将获得的势函数应用于 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的 MD 模拟,进一步证实了这套势函数的可行性,从而为最终得到一套完整的描述高温 $\text{Fe}(\text{liquid})\text{-Al}_2\text{O}_3(\text{polycrystal})$ 界面原子扩散及晶体长大的长程 F-S 势函数打下了基础。

2. 长程 F-S 势函数及其参数拟合

1984 年, Finnis 和 Sinclair 提出了 F-S 势,他们认为多体相互作用的函数具有电子密度平方根的形式,并且虽然 F-S 势的作用范围仅扩展到第三近邻而没有 $1/r^6$ 这一范德华尾项,但该势相对于 L-J 等对势在物理意义上能更为准确地描述金属的特性;同时, L-J 对势却又能很好地描述长程相互作用。基于此, Sutton 和 Chen 综合考虑了原子间相互作用的长程性和物理意义的明确性,对二者做了折中处理,发展成程 F-S 势^[34],其总能量由原子间的对势和体现电子密度对总能量贡献的多体势组成:

$$E_r = \epsilon \left[\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \sum_{i \neq j} V(r_{ij}) - c \sum_i \sqrt{\rho_i} \right], \quad (1)$$

$$V(r_{ij}) = (a/r)^n, \quad (2)$$

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \left(\frac{a}{r_{ij}} \right)^m, \quad (3)$$

(2) 式中的 $V(r_{ij})$ 为长程相互作用,代表排斥项。(3) 式中的 ρ_i 是基于紧束缚理论中二阶动量近似的多体势,代表引力项。 r_{ij} 是原子 i 和 j 的间距; c 为正的无量纲参数,是引力项相对于排斥项的缩放比例; ϵ 是具有能量量纲的参数,用于调整总能量的数值范围; a 是具有长度量纲的参数,它的存在使 $V(r_{ij})$ 和 ρ_i 无量纲化; m 和 n 是正整数,且 $n > m$ 。在长程 F-S 势中,对不同体系的描述主要就体现于这五个参数 (ϵ, a, n, m 和 c) 的确定。

采用长程 F-S 势函数描述 Al_2O_3 体系,存在三

对原子对之间的相互作用: Al-Al, Al-O, O-O。针对每对原子相互作用的描述都涉及五个参数: ϵ, a, n, m 和 c , 故总共需确定 $3 \times 5 = 15$ 个参数。但由于本文推导的势函数是以用于氧化物-金属界面的描述为先导,因此在涉及金属原子间的相互作用的描述时,将直接采用对应的纯金属或合金的原子间的势参数,这样在用于描述氧化物-金属界面过程中才能实现从氧化物到金属的连续过渡。据此, Al-Al 间的势参数直接采用了 Sutton 和 Chen^[34] 模拟 fcc-Al 的 Al-Al 势参数,剩下 Al-O, O-O 间的势参数通过拟合 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的晶格能、晶格常数、弹性常数得到。

根据拟合的最小二乘法,由拟合得到的势参数计算的晶格能、晶格常数、弹性常数与对应目标值(实验值或从头算所得)偏差的平方和 F 定义如下:

$$F = \sum_{\text{all observables}} \omega (f_{\text{calc}} - f_{\text{obs}})^2, \quad (4)$$

f_{calc} 是由拟合的势参数计算所得值, f_{obs} 是目标值, ω 是权重因子。权重因子的大小取决于目标值的相对大小和数据的可靠性及重要性(例如晶格常数通常要比弹性常数的可靠性和重要性高得多),目标值的绝对值相对较小且可靠性、重要性好,则权重因子取值大。

拟合软件采用 General Utility Lattice Program code (GULP)^[35], 拟合过程简言之就是调整势参数来搜索函数 F 的全局最小值。在拟合时,长程 F-S 势的 L-J 项的势参数为组合式 ϵa^n , 多体电子密度项的势参数为组合式 $\epsilon^2 c^2 a^m$, L-J 势和多体势的截断半径都取 8 \AA , 铝离子和氧离子的电荷根据电负性平衡法^[29] 计算所得,分别取 2.841 和 -1.894。

在具体拟合过程中,因 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 具有 hcp 结构,所以 $6 \leq m \leq 10, m+1 \leq n \leq 20$ ^[34]。对应每一种 n, m 组合,需分别给出 O-O 间势参数 $\epsilon a_{(O-O)}^n$ 和 $\epsilon^2 c^2 a_{(O-O)}^m$, Al-O 间势参数 $\epsilon a_{(Al-O)}^n$ 的初值, GULP 自动调整势参数来搜索函数 F 的全局最小值,从而得到上述势参数的值。对于每一组 n, m , 可能需要多次不同初值的拟合过程,直到 F 不能变得更小。衡量拟合好坏的偏差平方和 F 的值见表 1。从中可知,当 Al-Al, O-O, Al-O 的 n, m 分别为 (7, 6) (11, 6), (10, 6) 时, F 值最小,为 44.32。这时得到了 $n, m, \epsilon a_{(O-O)}^n, \epsilon^2 c^2 a_{(O-O)}^m, \epsilon a_{(Al-O)}^n$ 的值,在确定各自合适的 a 值后,便可依次得到 O-O 间的五个参数 ϵ, a, n, m, c 和 Al-O 间的三个参数 ϵ, a, n , 因为 Al-O 间的势参数 m 和 c 在拟合过程中是伪参数,即没有参与实

表 1 对应 Al-O, O-O 不同的 n, m 组合, 偏差平方和 F 的值

编号	n, m (Al-Al)	n, m (O-O)	n, m (Al-O)	偏差平方 和 F
1	7, 6	7, 6	7, 6	47415.82
2	7, 6	8, 6	7, 6	93197.67
3	7, 6	9, 6	7, 6	20291.78
4	7, 6	10, 6	7, 6	14482.80
5	7, 6	11, 6	7, 6	13324.79
6	7, 6	12, 6	7, 6	10341.72
7	7, 6	7, 6	8, 6	42255.10
8	7, 6	8, 6	8, 6	60613.33
9	7, 6	9, 6	8, 6	18134.42
10	7, 6	10, 6	8, 6	8909.32
11	7, 6	11, 6	8, 6	4004.59
12	7, 6	12, 6	8, 6	6800.32
13	7, 6	7, 6	9, 6	12490.29
14	7, 6	8, 6	9, 6	12069.96
15	7, 6	9, 6	9, 6	4221.16
16	7, 6	10, 6	9, 6	1628.16
17	7, 6	11, 6	9, 6	86.64
18	7, 6	12, 6	9, 6	83.68
19	7, 6	7, 6	10, 6	10004.51
20	7, 6	8, 6	10, 6	29217.24
21	7, 6	9, 6	10, 6	1096.85
22	7, 6	10, 6	10, 6	90.92
23	7, 6	11, 6	10, 6	44.32
24	7, 6	12, 6	10, 6	77.83

注 限于篇幅, 表 1 只列出 $m=6$ 的拟合结果, 其他 $m=7, 8, 9, 10$ 等的拟合结果一般都较 $m=6$ 的结果差, 因此没有列出。

实际的拟合过程, 所以是根据组合法则^[36, 37] $c_{Al-O} = \sqrt{c_{Al-Al} \times c_{O-O}}$, $m_{Al-O} = (m_{Al-Al} + m_{O-O})/2$ 分别获得的。

3. 结果与讨论

拟合长程 F-S 势参数用到的 α -Al₂O₃ 各项物性参数数值及本文拟合结果见表 2, 并与前人文献所做的 EAM 势^[29]、Glue 势^[31] 和 modified Matsui 势^[38] (m-Matsui) 的计算结果做了比较。

从表 2 可知, 本文模拟结果与 EAM 势、Glue 势和 m-Matsui 势的计算结果比较发现: 本文用拟合得出的这套长程 F-S 势参数计算出的 α -Al₂O₃ 的晶格能、晶格常数、弹性常数与实验值符合得较为理想, 晶格常数 a, c 与实验值的相对误差分别为 0.423% 和 0.278%, 仅较 Glue 势的 -0.025% 和 -0.0015% 及 m-Matsui 势的 0.262% 和 -0.009% 稍差; 权重因子最大的原子位置分数坐标参数 u, v 的相对误差分别为 -0.0028% 和 -0.185%, 优于提供了数据的 m-Matsui 势模拟的 1.005% 和 -1.548%; 弹性常数 C_{13}, C_{14}, C_{44} 的相对误差较大, 但其他相对更为重要的弹性常数 ($C_{11}, C_{12}, C_{33}, C_{66}$) 的相对误差都小于 2.5%, 拟合结果理想。在表 2 中, 我们还给出了各种势函数计算结果与实验值进行比较的 F 值。需要说明的是, 对于文献中没有给出的计算数据, 我们都按

表 2 拟合势参数时用到的 α -Al₂O₃ 各项物性参数值和本文结果

	权重因子 ω	他人拟合结果			Experimental 或	本文结果
		EAM ^[29]	Glue ^[31]	m-Matsui ^[38]	ab initio	
晶格能 (eV/Al ₂ O ₃)	1.0	-31.6	-31.8	—	-31.8 ^[39]	-31.5
$a/\text{\AA}$	1000.0	4.7455	4.759	4.7727	4.7602 ^[39]	4.7803
$c/\text{\AA}$	1000.0	13.0073	12.991	12.990	12.9912 ^[40]	13.0273
u	10000.0	—	—	0.35566	0.35212 ^[41]	0.35211
v	10000.0	—	—	0.30150	0.30624 ^[41]	0.30567
C_{11}/GPa	0.01	537	505.9	714.5	497 ^[40]	487.76
C_{12}/GPa	0.01	180	188.2	327.5	164 ^[40]	161.41
C_{13}/GPa	0.01	106	97.77	187.8	111 ^[40]	156.05
C_{33}/GPa	0.01	509	469.23	709.3	498 ^[40]	494.27
C_{14}/GPa	0.01	-30	-64.98	—	-24 ^[40]	-13.49
C_{44}/GPa	0.01	130	165.97	99.7	147 ^[40]	191.63
C_{66}/GPa	0.01	179	-	193.5	167 ^[42]	163.17
F		25.22	37.07	1275.747	0	44.32

注: a, c 晶格常数; u, v 原子位置的分数坐标; C_{ij} 弹性常数; F 偏差平方和 (文献未提供计算数据的按照与实验值完全相等的条件下求得)。

照其与实验值完全相等的条件进行 F 值的计算,在这种情况下,本文拟合得到的长程 F-S 势函数的 F 值稍高于 EAM 势、Glue 势计算得到的 F 值(25.22 和 37.07),远优于 m-Matsui 势的 F 值(1275.747)。综合各项结构参数和物性参数的相对误差来看,本文

结果与已有文献的结果比较,除弹性常数 C_{13} , C_{14} , C_{44} 符合情况稍差外,其他参数符合情况都达到或优于已有的文献报道。最终获得的用于描述 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的整套长程 F-S 势参数列于表 3。

对于所获得的势函数,我们的目标是将其用于

表 3 拟合得到的用于描述 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的长程 F-S 势参数

	ϵ/eV	a/nm	n	m	c
Al-Al ^[34]	0.0331	0.4050	7	6	16.3990
O-O	0.0817	0.2815	11	6	9.6847
Al-O	1.3623	0.1860	10	6	12.6023

相关模拟,如 MD 或者 MC 模拟。为此,我们还用获得的这套势函数参数对 900(O)+600(Al)的体系($V = X \times Y \times Z = 23.801 \times 23.801 \times 25.982 \text{ \AA}^3$)进行了 MD 模拟。模拟采用 DL_POLY 软件^[43],每次模拟总时间长度为 45 ps,时间步长为 1 fs,即总的模拟步数

为 45000。为使体系充分达到平衡,趋衡时间定为 40 ps。模拟体系为 Hoover-Nose 法控温的 NVT 系综,采用 Ewald 求和计算长程静电势,截断半径取 8 \AA 。图 1 所示为 300 K 下模拟得到的 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的双体分布函数 $g(r)$ 及其配位数。

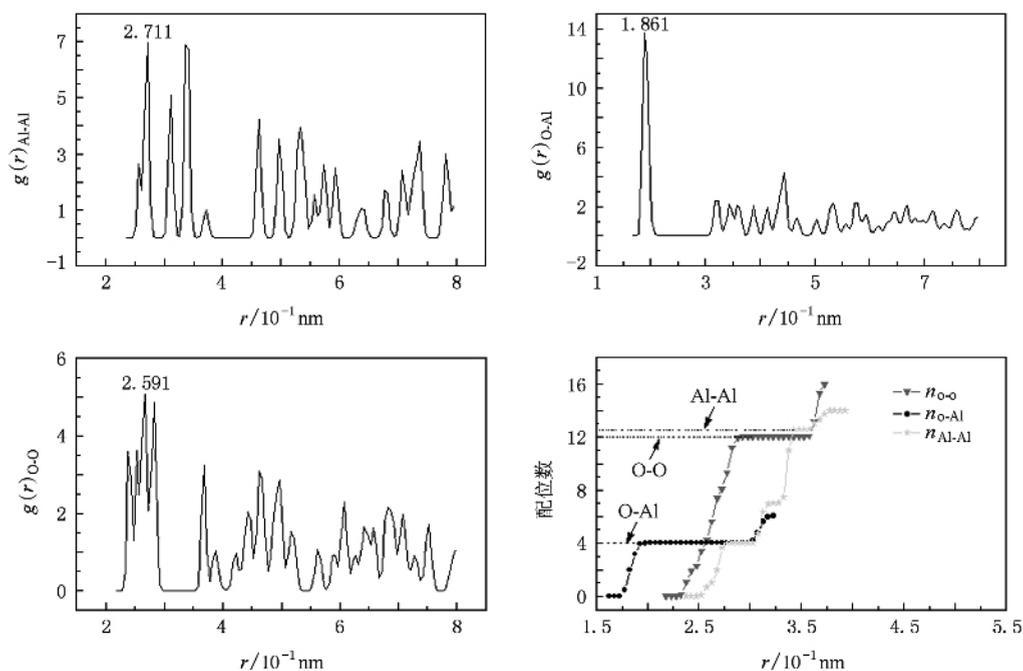


图 1 采用表 3 所列势函数参数进行 MD 模拟得到的 300 K 时 Al_2O_3 的双体分布函数 $g(r)$ 和配位数函数

因为 $g(r)_{\text{O-O}}$ 的首峰劈裂成 4 个小峰, $g(r)_{\text{Al-Al}}$ 存在预峰,同时,相对峰宽,各首峰的数据点都较为稀疏,为了获得准确的首峰位置,我们对这三个 $g(r)$ 的首峰都进行了高斯拟合,最后将拟合得到的高斯峰的中心位置作为 $g(r)$ 的首峰位置,首峰位置与实验得到的 Al-Al, O-Al, O-O 最近邻距离符合较

好,见表 4。同时, Al-Al 和 O-O 的配位数的模拟值分别为 12.54 和 11.98,非常接近 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 晶体常温稳定结构的配位数 12; O-Al 的配位数模拟值为 4,与 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 晶体的 O-Al 配位数完全符合。

局域结构单元及其连接的有价值的信息不仅由键长和配位数提供,还由键角提供。Ishizawa 等人^[44]

表 4 300 K 下对 α -Al₂O₃ 进行 MD 模拟得到的 $g(r)$ 的首峰位置与 X 射线衍射实验^[44]及用 Buckingham 势^[45]模拟得到的 Al-Al, O-Al, O-O 最近邻距离的比较

单位 /Å	采用 Buckingham 势的 MD 模拟结果 ^[45]	X 射线衍射实验结果 ^[44]	采用本文长程 F-S 势的 MD 模拟结果
Al-Al	2.77	2.657	2.711
O-Al	1.855	1.852	1.861
O-O	2.565	2.619	2.591

在 1980 年用 X 射线衍射实验考察了 α -Al₂O₃ 在 300 K 的结构, 给出了 α -Al₂O₃ 结构投射到 ($\bar{1}30$) 上的特定原子间的键长和键角. 在此, 我们也将模拟得到的 α -Al₂O₃ 结构投射到 ($\bar{1}30$) 上得到相应原子间的键长和键角, 并与实验结果作一个对比 (见表 5), 同时还给出了 Rambaut 等人^[45]用 Buckingham 势模拟 α -Al₂O₃ 得到的相应键长和键角. 由表 5 可知, 键长值与实验值的相对误差最大为 3.59%, 最小为

表 5 300 K α -Al₂O₃ 结构投射到 ($\bar{1}30$) 上的特定原子间的键长 (Å) 和键角 (°)

键长和键角	采用 Buckingham 势的 MD 模拟结果 ^[45]	X 射线衍射实验结果 ^[44]	采用本文长程 F-S 势的 MD 模拟结果
Al ⁱ -O ⁱⁱ	1.977	1.971	1.978
Al ⁱ -O ^{ix}	1.855	1.852	1.861
Al ⁱ -Al ⁱⁱ	2.71	2.657	2.713
Al ⁱ -Al ⁱⁱⁱ	2.77	2.789	2.784
Al ⁱ -Al ^{iv}	3.149	3.214	3.211
Al ⁱ -Al ^v	3.504	3.496	3.571
O ⁱⁱ -O ^{vi}	2.538	2.522	2.547
O ⁱⁱ -O ^{viii}	2.841	2.863	2.913
O ⁱⁱ -O ^{viii}	2.565	2.619	2.676
O ⁱⁱ -O ^{ix}	2.67	2.724	2.822
\angle Al ⁱ -O ⁱⁱ -Al ⁱⁱ	91.27	84.76	86.297
\angle Al ⁱ -O ^{vi} -Al ⁱⁱⁱ	94.32	93.61	95.099
\angle Al ⁱ -O ^{ix} -Al ^{iv}	119.91	120.38	115.317
\angle Al ⁱ -O ⁱⁱ -Al ^v	131.86	132.19	131.839
\angle O ⁱⁱ -Al ⁱ -O ^{vi}	78.35	79.53	77.918
\angle O ⁱⁱ -Al ⁱ -O ^{ix}	87.21	86.40	92.331
\angle O ^{ix} -Al ⁱ -O ⁱⁱⁱ	102.40	101.20	99.429
\angle O ⁱⁱ -Al ⁱ -O ⁱⁱⁱ	162.05	164.13	164.891

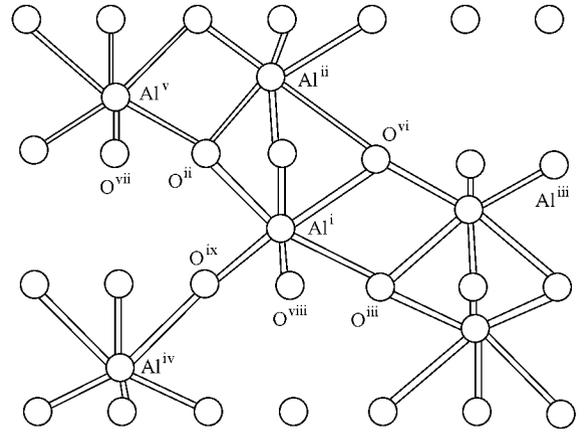


图 2 投射到 ($\bar{1}30$) 上的 α -Al₂O₃ 结构

0.09%. 键角与实验值的相对误差最大为 4.21%, 其他的相对误差都小于 2%. 上述分析进一步说明本文的势函数参数能较好地描述 α -Al₂O₃ 的结构及相关性质.

4. 结 论

从金属-氧化物界面的 MD 模拟的考虑出发, 本文采用了用描述金属的势函数来描述金属氧化物的思想, 通过拟合获得了一套理想的描述 α -Al₂O₃ 的长程 F-S 势函数参数. 具体结论如下:

1. 通过拟合 α -Al₂O₃ 的结构和物性参数得到了一套可用于描述 α -Al₂O₃ 的长程 F-S 势参数, 并通过用该套势参数计算的晶格能、晶格常数、弹性常数与相应的实验数据比较, 以及与前人报道的 EAM 势、Glue 势及 m-Matsui 势的结果比较, 说明采用该套势参数的计算结果与实验值符合较好, 且符合度能够达到或优于已有的文献报道.

2. 用所获得的长程 F-S 势模拟了 300 K 温度下的 α -Al₂O₃ 体系, 模拟得到的双体分布函数的首峰位置、配位数、键长、键角与实验值也符合较好.

3. 用长程 F-S 势描述氧化物 α -Al₂O₃ 体系的成功为后续的金属-氧化物界面模拟打下了基础. 在此基础上, 如果再获得 FeO 体系的长程 F-S 势参数, 结合我们已经获得的描述纯 Fe 的长程 F-S 势参数, 就将得到一套完整的描述 α -Al₂O₃-Fe (liquid) 界面的势函数, 从而为相关的界面模拟研究提供了核心支撑.

- [1] Hasegawa M , Takeshita K 1978 *Metall. Trans.* **9B** 383
- [2] Mizoguchi S Z , Takamura J I 1990 *Proceedings of the sixth international iron and steel congress* , Nagoya : ISIJ 598
- [3] Sawai T , Wakoh M , Ueshima Y 1990 *Proceedings of the sixth international iron and steel congress* , Nagoya : ISIJ 605
- [4] Ogibayashi R , Yamaguchi K , Hirai M 1990 *Proceedings of the sixth international iron and steel congress* , Nagoya : ISIJ 612
- [5] Garland J R , Kirkwood P R 1975 *Metal Construction* **23** 275
- [6] Ito Y , Nakamura M , Jsuse K 1976 *Sumitomo Search* **13** 275
- [7] Ricks R A , Howell P B , Barritte G S 1982 *J. Mater. Sci.* **17** 762
- [8] Zhang W , Smith J R 2000 *Phys. Rev. B* **61** 16883
- [9] Batyrev I G , Alavi A , Finnis M W 2000 *Phys. Rev. B* **62** 4698
- [10] Zhang W , Smith J R 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 3225
- [11] Wang S Q , Ye H Q 2006 *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* **10** 26
- [12] Zhang Q , Cagin T , van Duin A , Goddard W A 2004 *Phys. Rev. B* **69** 045423
- [13] Dmitriev S V , Yoshikawa N , Kohyama M , Tanaka S , Yang R , Kagawa Y 2004 *Acta Mater.* **52** 1959
- [14] Zhang W , Smith J R , Evans A G 2002 *Acta Mater.* **50** 3803
- [15] Zhun C Z , Zhang P X , Xu Q M , Liu J H , Ren X Z , Zhang Q L , Hong W L , Li L L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4795 [in Chinese] 朱才镇、张培新、许启明、刘剑洪、任祥忠、张黔玲、洪伟良、李琳琳 2006 *物理学报* **55** 4795]
- [16] Wu Y Q , Jiang G C , You J L , Hou H Y , Chen H , Xu K D 2004 *J. Chem. Phys.* **121** 7883
- [17] Hoang V V , Oh S K 2005 *J. Phys. : Condens. Matter* **17** 3025
- [18] Hung P K , Vinh L T 2006 *J. Non-Cryst. Solids* **352** 5531
- [19] Wu Y Q , Jiang G C , You J L , Chen H , Xu K D 2006 *J. Phys. : Conf. Series* **29** 77
- [20] Matsui M 1994 *Mineral. Mag.* **58** 571
- [21] Matsui M 1996 *Phys. Chem. Miner.* **23** 345
- [22] Daw M S , Baskes M I 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1285
- [23] Finnis M W , Sinclair J E 1984 *Philos. Mag. A* **50** 45
- [24] Ercolessi F , Tosatti E , Parrinello M 1986 *Phys. Rev. Lett.* **57** 719
- [25] Baskes M I , Nelson J S , Wright A F 1989 *Phys. Rev. B* **40** 6085
- [26] Zhang B W , Hu W Y , Shu X L 2002 *Theory of Embedded Atom Method and Its Application to Materials Science - Atomic Scale Materials Design Theory* (Changsha : Hunan University Press) p. 199 (in Chinese] 张邦维、胡望宇、舒小林 2002 嵌入原子方法理论及其在材料科学中的应用-原子尺度材料设计理论(长沙:湖南大学出版社)第 199 页]
- [27] Chen L , Wang H P , Wei B B 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 0384 [in Chinese] 陈乐、王海鹏、魏炳波 2009 *物理学报* **58** 0384]
- [28] Li H , Wang G H , Bian X F , Ding F 2002 *Phys. Rev. B* **65** 035411
- [29] Streitz F H , Mintmire J W 1994 *Phys. Rev. B* **50** 11996
- [30] Zhou X W , Wadley H N G , Filhol J S , Neurock M N 2004 *Phys. Rev. B* **69** 035402
- [31] Tomar V , Zhou M 2006 *Phys. Rev. B* **73** 174116
- [32] Cheng J W , Zhang X M , Wu Y Q , Wang X L , Zheng S B , Jiang G C 2007 *Acta Phys. -Chim. Sin.* **23** 779 [in Chinese] 程江伟、张先明、吴永全、王秀丽、郑少波、蒋国昌 2007 *物理化学学报* **23** 779]
- [33] Zhang X M , Yang L H , Wu Y Q , Shen T , Zheng S B , Jiang G C 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 2392 [in Chinese] 张先明、杨立红、吴永全、沈通、郑少波、蒋国昌 2008 *物理学报* **57** 2392]
- [34] Sutton A P , Chen J 1990 *Philos. Mag. Lett.* **61** 139
- [35] Gale J D , Rohl A L 2003 *Mol. Simul.* **29** 291
- [36] Kart S O , Tomak M , Uludogan M , Cagin T 2004 *J. Non-Cryst. Solids* **337** 101
- [37] Zhang Y G , Guo G J 2000 *Phys. Earth Planet. In.* **122** 289
- [38] Sun J , Stirner T , Hagston W E , Leyland A , Matthews A 2006 *J. Cryst. Growth* **290** 235
- [39] Weast R C 1984 *Handbook of Chemistry and Physics* (Boca Raton , FL : CRC)
- [40] Wachtman J B Jr , Tefft W E , Lam D G Jr , Apstein C S 1961 *Phys. Rev.* **122** 1754
- [41] Wyckoff R W G 1964 *Crystal Structures* (New York : Interscience Publishers) vol. 2
- [42] Wachtman J B Jr , Tefft W E , Lam D G , Stinchfield R P 1960 *J. Res. Natl. Bur. Stand.* **64A** 213
Wachtman J B Jr 1969 *Mechanical and Thermal Properties of Ceramics* (Washington : NBS) p139
- [43] Smith W , Forester T R 1996 *J. Mol. Graphics* **14** 136
- [44] Ishizawa N , Miyata T , Minato I , Marumo F , Iwai S 1980 *Acta Crystallogr. B* **36** 22
- [45] Rambaut C , Jobic H , Jaffrezic H , Kohanoff J , Fayeulle S 1998 *J. Phys. : Condens. Matter* **10** 4221

Long-range Finnis-Sinclair potential for molecular dynamics simulation of $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ *

Hu Zhi-Gang Liu Yi-Hu Wu Yong-Quan[†] Shen Tong Wang Zhao-Ke

(Shanghai Key Laboratory of Modern Metallurgy & Materials Processing , Shanghai University , Shanghai 200072 , China)

(Received 30 December 2008 ; revised manuscript received 23 March 2009)

Abstract

The molecular dynamics (MD) simulation of metal-metal oxide interface requires a uniform potential to simultaneously describe metal and metal oxide. Accordingly , we obtained a set of long-range Finnis-Sinclair (F-S) potential parameters of $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. All of the parameters were fitted to the targets , i. e. the experimental lattice energy , lattice constants , and elastic constants of $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$. Meanwhile , we compared our results with those reported by EAM , Glue and modified Matsui (m-Matsui) potentials and found that our results are equivalent or better. After that , MD simulation of $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ at 300 K with our long-range F-S potential was performed and the pair correlation functions , coordination numbers were calculated. The good agreement between calculation results and experiments validated the feasibility of this set of F-S potential parameters to the description of $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ system.

Keywords : long-range Finnis-Sinclair potential , $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, Fe- Al_2O_3 interface , Al- Al_2O_3 interface

PACC : 7115Q , 7340N , 6185

* Project supported by the State Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50334050) , the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50504010) , the Joint Funds of the National Natural Science Foundation of China and Shanghai Baosteel Corporation , China (Grant No. 50774112) , the “ Qimingxing ” Program for Young Scientists of Shanghai , China (Grant No. 07QA14021) and the Program for Changjiang Scholars and Innovative Research Team in University (No JRT0739).

[†] Corresponding author. E-mail : yqwu@staff.shu.edu.cn