

Al-Mg 合金熔体快速凝固过程中微观结构 演化机理的模拟研究*

侯兆阳^{1)†} 刘丽霞²⁾ 刘让苏³⁾ 田泽安³⁾

1) 长安大学应用物理系, 西安 710064)

2) 西安电子科技大学理学院, 西安 710071)

3) 湖南大学应用物理系, 长沙 410082)

(2008 年 10 月 15 日收到, 2008 年 12 月 8 日收到修改稿)

采用分子动力学方法对 $Al_{50}Mg_{50}$ 合金熔体的快速凝固过程进行了模拟, 并采用双体分布函数、键型指数法和原子团类型指数法等方法, 从微观结的不同层面对 Al-Mg 合金熔体快速凝固过程中微观结构的演化机理进行了深入的分析研究. 结果表明, 本模拟所获得的 Faber-Ziman 偏结构因子与实验结果符合较好. $Al_{50}Mg_{50}$ 合金熔体具有遗传性, 在快速凝固过程形成了非晶态结构, 其中二十面体短程序结构对非晶态结构的形成起决定性作用. 基于原子团类型指数法的团簇分析表明, $Al_{50}Mg_{50}$ 非晶态合金的微观结构由许多不同结构类型的短程有序结构单元构成, 其中二十面体基本原子团是其主要的短程有序结构单元, 短程有序区包含各种不同尺寸的团簇结构. 其微观结构不能采用 Bernal 模型来表征.

关键词: Al-Mg 合金熔体, 快速凝固过程, 分子动力学模拟, 微观结构

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

1. 引 言

金属熔体的快速凝固过程是一种非平衡过程, 往往生成非晶、准晶和纳米晶等亚稳相. 而凝固固体的宏观性能主要由其凝固过程形成的微观结构决定. 因此研究高温熔体凝固过程中微观结构的演化机理, 特别是原子团簇的演变规律, 对深入理解液—固相变的微观机理, 寻求最佳凝固工艺具有重要实际意义.

受具体实验条件的限制, 对金属熔体快凝固过程中冷速的控制和微观结构的精密测定尚比较困难. 而分子动力学方法不但能够从原子层次研究金属熔体凝固过程微观结构的变化, 而且还可以模拟超快冷速、超高压等实验上难以实现条件下的凝固过程, 并对大量纯金属和 Al 基、Cu 基、Ni 基等合金体系的快速凝固过程进行了模拟, 取得了许多重要的研究进展^[1-6]. 但对 Al-Mg 合金这一被广泛应用的合金则很少被涉及, 其中, Wang 等^[7]采用 EAM

(embedded atom method) 多体势模拟了 $Al_{12}Mg_{17}$ 合金的快速凝固过程, 并采用 Honeycutt-Andersen (HA) 键型指数法^[8]进行了结构分析. 但迄今这些研究工作很少涉及到凝固过程中原子团簇结构的演变信息. 其中一个主要的原因是目前尚未定出一套行之有效的关于原子团簇结构的识别与表征方法; 另一方面, 目前大量的分子动力学模拟研究工作仍限于包含原子数目很少(一般为 500—1000 个原子)的小系统, 对于这样的小系统, 难以对自身就已包含几百个原子的纳米团簇进行研究.

为此, 本文在作者原有研究工作的基础上^[9-12], 采用由 Wang 等人^[13, 14]发展起来的广义非局域模型赝势 (general nonlocal model pseudopotential, GNMP), 对包含 50000 个原子的 $Al_{50}Mg_{50}$ 熔体的快速凝固过程进行了模拟. 采用双体分布函数、HA 键型指数法和原子团类型指数法 (cluster-type index method, CTIM)^[15, 16]等方法, 从微观结构的不同层面对 Al-Mg 合金熔体快速凝固过程中微观结构的演化进行了深入的分析研究.

* 国家自然科学基金(批准号: 50571037)资助的课题.

† E-mail: houzy@chd.edu.cn

2. 模拟计算的条件和方法

2.1. 原子间相互作用势

原子间相互作用势是分子动力学模拟的基础,其准确性直接影响到计算结果的正确性.本文 Al-Mg 合金中原子间相互作用势采用 GNMP 理论中的双体有效势函数. GNMP 虽然不及 EAM 更为精确,但仍能够正确地反映简单金属和合金的热力学、动力学和微观结构等方面的特性^[13,14,17-19],而且更适宜于作大规模运算,同时兼顾了精确性和计算效率两个方面.

根据 GNMP 理论^[13,14],原子 i 和 j 之间的有效对势可表示为

$$V_{ij}(r) = \frac{Z_{\text{eff},i} Z_{\text{eff},j}}{r} \left\{ 1 - \left(\frac{1}{\pi} \right) \int_0^{\infty} dq [F_{i,j}(q) + F_{j,i}(q)] \times \frac{\sin(rq)}{q} \right\}, \quad (1)$$

式中 $Z_{\text{eff},i}$ 和 $Z_{\text{eff},j}$ 分别表示原子 i 和原子 j 的有效离子价, r 表示原子 i 和原子 j 间的距离, q 代表波矢, $F_{i,j}(q)$ 表示归一化能量波数特性函数,并且

$$F_{i,j}(q) = - \frac{\Omega_0 q^2}{2\pi Z_{\text{eff},i} Z_{\text{eff},j}} [G_{i,j}(q) + \Delta G_{i,j}(q) + H_{i,j}(q) + \Delta H_{i,j}(q)], \quad (2)$$

式中 Ω_0 表示原子体积, $G_{i,j}(q)$ 和 $\Delta G_{i,j}(q)$ 分别表示模型势下电子能量的二阶微扰项与考虑交换和关联作用对其的修正, $H_{i,j}(q)$ 和 $\Delta H_{i,j}(q)$ 分别表示屏蔽电子之间的相互作用与考虑交换和关联作用对其的修正.有关 GNMP 更详细的计算参见文献^[13,14].由(1)和(2)式计算的 $\text{Al}_{50}\text{Mg}_{50}$ 合金的势函数曲线如图 1 所示,双体势的截止距离为 20 a.u.(原子单位).

2.2. 分子动力学模拟的基本过程

本文分子动力学模拟在包含 50000 个原子(25000 个 Al 原子,25000 个 Mg 原子)的立方盒子中进行,施加周期性边界条件,运动方程的求解采用 leap-frog 算法,时间步长为 5 fs.模拟计算从 1373 K 开始($\text{Al}_{50}\text{Mg}_{50}$ 合金的熔点 T_m 约为 730 K),首先让系统等温运行,使之处在平衡态(以系统的能量处于平衡为准),然后再让系统以 1×10^{12} K/s 的速度快速冷却至 273 K,其中每隔 100 K 让系统等温运行 40

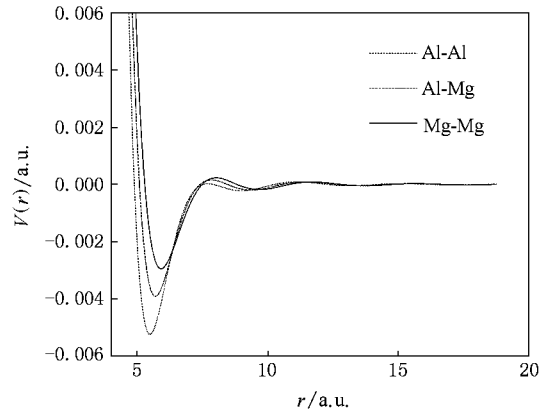


图 1 液态 $\text{Al}_{50}\text{Mg}_{50}$ 合金原子间相互作用势曲线(1073 K)

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^[8]和原子成团类型指数法^[15,16]进行结构分析,进一步探讨 $\text{Al}_{50}\text{Mg}_{50}$ 合金熔体快速凝固过程微观结构的演化规律.

3. 模拟计算结果分析

为了验证模拟结果的可靠性,我们首先将液态时本模拟所获得的 Faber-Ziman 偏结构因子与 Waseda^[20]所给出的实验结果进行比较,如图 2 所示.由图 2 可以看出,除 $S_{\text{Mg-Mg}}(Q)$ 的第一峰和第二峰与实验结果稍有偏差外,模拟结果与实验结果符合较好.这表明,本模拟所采用的有效对势比较成功地反映了 Al-Mg 合金体系在微观结构方面的客观物理本质.

3.1. 双体分布函数分析

双体分布函数 $g(r)$ 与 X 射线衍射实验所获得的结构因子 $S(Q)$ 互为 Fourier 变换,因而它被广泛用来描述液态、非晶态和晶态等体系的结构特征.图 3 给出了 $\text{Al}_{50}\text{Mg}_{50}$ 合金熔体快速凝固过程中全双体分布函数随温度的演化过程.由图 3 可知,随着温度的降低, $g(r)$ 曲线的第一峰逐渐变锐、变高,表明体系内相邻原子成键概率越来越大,短程有序度逐渐提高.在室温 273 K 时, $g(r)$ 曲线的第二峰已经劈裂成两个次峰,这正是非晶态结构的重要特征之一,表明 $\text{Al}_{50}\text{Mg}_{50}$ 非晶态金属的形成.采用 Wendt-Abraham 的 $R = g(r)_{\text{min}}/g(r)_{\text{max}}$ 方法^[21],测得其玻璃转变温度 $T_g \approx 550$ K,如图 4 所示.此结果与文献^[7]中采用 EAM 模型势的计算结果($T_g = 502$ K)非常接近.而且,由图 3 可见, $g(r)$ 曲线的第二峰在过冷温度区

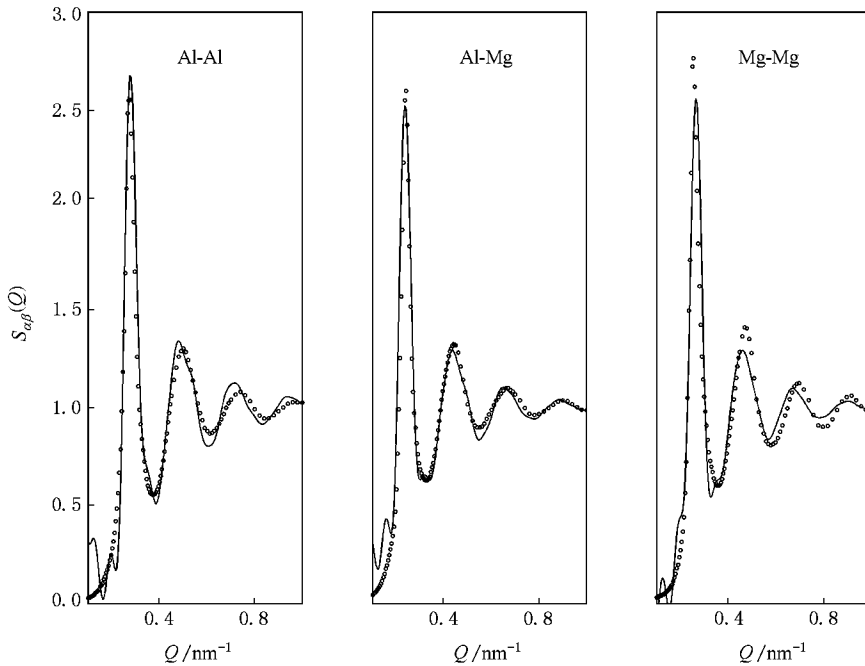


图2 Al₅₀Mg₅₀合金在液态时(873 K)的 Faber-Ziman 偏结构因子 (实线为模拟值, 实心点为实验值)

间($T_m - T_g$)已经出现劈裂,这一特点与 Al 熔体快速凝固过程非常相似^[22],但与大量金属和合金系统不同^[23-25],其 $g(r)$ 曲线的第二峰一直到 T_g 以下才开始出现劈裂. Liu 等^[22]的研究表明,金属 Al 过冷熔体中 $g(r)$ 曲线第二峰的劈裂是由于体系中二十面体团簇结构的大量出现引起的.我们在下文的讨论中发现,Al₅₀Mg₅₀合金中 $g(r)$ 曲线第二峰的劈裂同样是由于二十面体团簇结构的大量出现引起的.

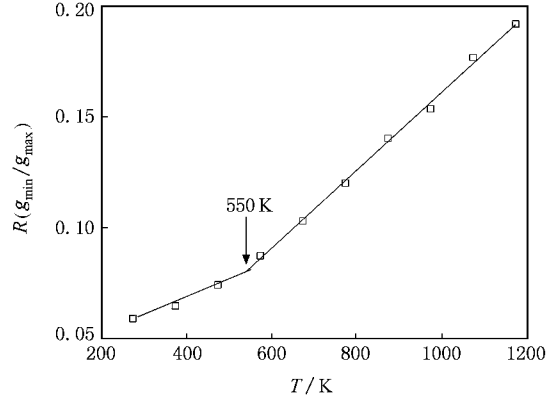


图4 Al₅₀Mg₅₀熔体快速凝固过程中 $R(g_{\min}/g_{\max})$ 随温度 T 的变化

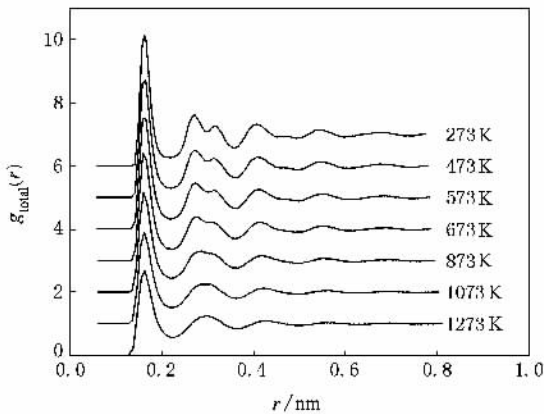


图3 不同温度下 Al₅₀Mg₅₀合金的全双体分布函数

偏双体分布函数随温度的变化情况.由图5可知,在三个偏双体分布函数中, $g_{\text{Al-Al}}(r)$ 第一峰的峰值最高.由此表明,Al-Al 原子对之间相互作用较强(如图1所示),Al-Al 原子对稍有偏聚,Al₅₀Mg₅₀合金中没有明显的化学短程序.而大量研究表明^[26,27],化学短程序显著存在于过渡金属-类金属和过渡金属-过渡金属玻璃体系之中,而且是金属合金容易形成金属玻璃的先决条件之一. Al-Mg 合金中不存在明显的化学短程序,这可能正是 Al-Mg 合金不易形成非晶,目前在实验上还难以获得的原因之一.

图5 给出了 Al₅₀Mg₅₀合金熔体快速凝固过程中

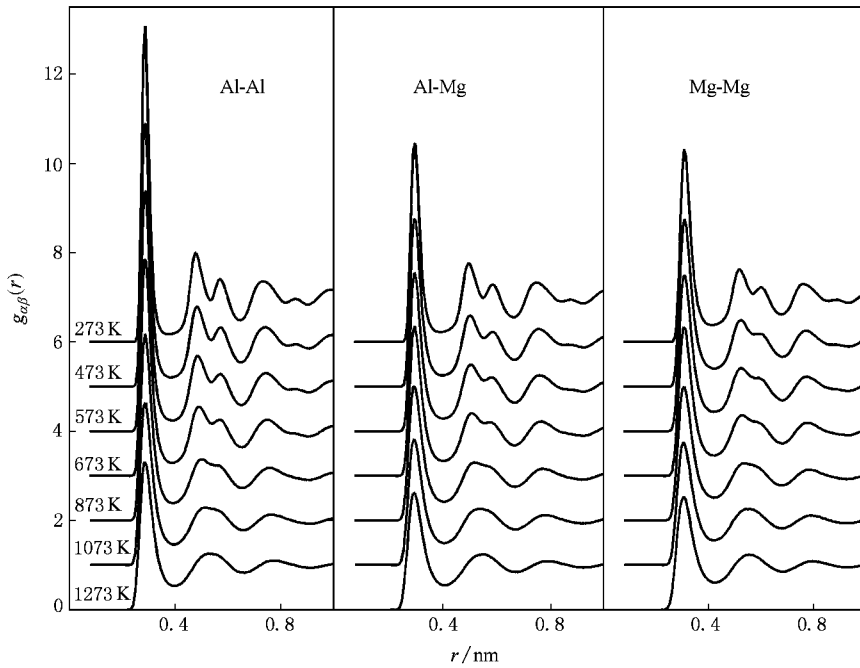


图 5 不同温度下 $Al_{50}Mg_{50}$ 合金的偏双体分布函数

3.2. HA 键型指数分析

由于双体分布函数 $g(r)$ 只能描述系统中原子的近邻、远邻原子的数量分布,而不能反映体系中原子短程排布的几何特点. HA 键型指数法是目前描述液态、非晶态和晶态体系原子结构组态及其相互转变过程中微观结构演化特点的一种有效方法^[2,4-12].

HA 键型指数法用四个指数 $ijkl$ 来描述某对原

子与周围原子的键合状况,如图 6 所示. i 代表所考察的两个原子本身的成键关系, $i = 1$ 为成键, $i = 2$ 为未成键; j 代表该两原子的共有最近邻原子数; k 代表共有最近邻原子之间的成键数; 要唯一地表示某种结构,仅用前三个指数是不够的,所以对于前三个指数相同而结构不同的状态要用第四个指数 l 值来加以区分. 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

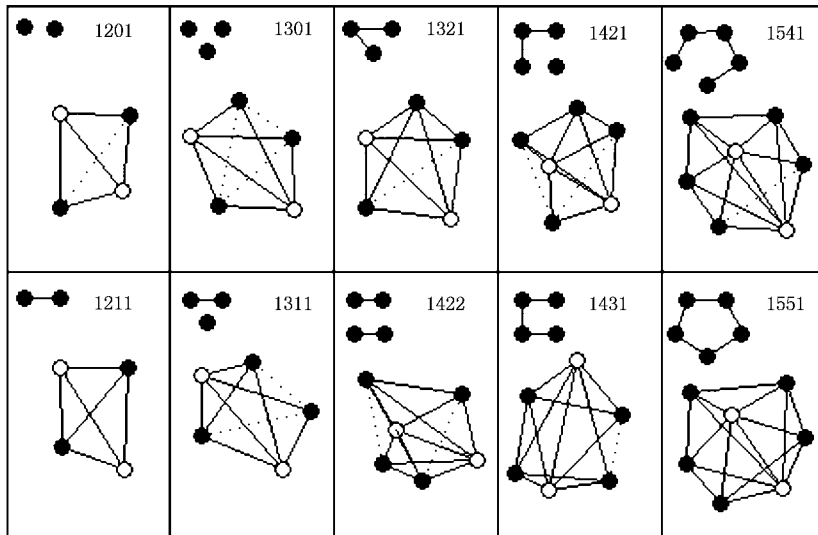


图 6 几种常见 HA 键型指数的结构示意图

体结构, bcc 晶体则以 144I (6 个) 和 166I (8 个) 键型的存在为特征; fcc 晶体则以 142I (12 个) 键型的存在为特征; hcp 晶体则以 142I (6 个) 和 142X (6 个) 键型的存在为特征。

图 7 给出了 $Al_{50}Mg_{50}$ 合金熔体快速凝固过程中几种主要键型的相对数目随温度的演化过程。由图 7 可见, $Al_{50}Mg_{50}$ 合金熔体中包含了各种不同类型的键型, 但与二十面体和缺陷二十面体结构密切相关的 1551, 1541 和 1431 键型数目之和始终占总数的 50% 以上, 对体系微观结构特性起决定性作用。而且随着温度的降低, 只有 1551 键型的数目迅速增加, 而其他键型变化很小。由此表明, 在 $Al_{50}Mg_{50}$ 合金熔体中存在大量不同类型的短程有序结构 (HA 键型指数法中表征为不同类型的键型指数), 在急冷过程中, 这些短程有序结构还来不及重排就冻结下来, 因此液态金属具有遗传性, 非晶态固体可被看成“冻结的液体”。但非晶态固体并不是液态金属的简单冻结, 其中具有二十面体对称性的结构组态在快速凝固过程中显著增加, 对 $Al_{50}Mg_{50}$ 非晶态结构的形成起决定性作用。

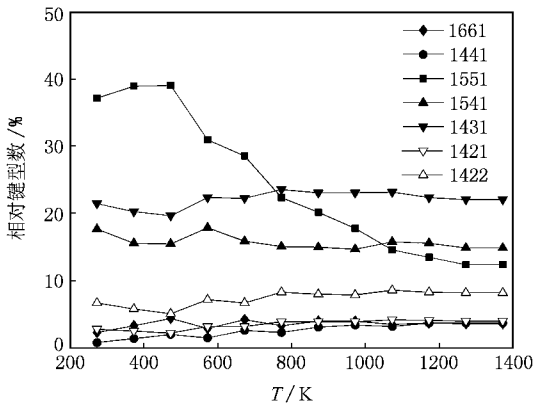


图 7 $Al_{50}Mg_{50}$ 熔体快速凝固过程中各种键型相对数目随温度 T 的变化

3.3. 原子团簇分析

由于 HA 键型指数法只能描述不超过 10 个原子的结构组态, 难以清晰地描述出各种不同类型的原子团簇结构。为了比较清晰且直观地表征各种类型的原子团簇结构, 这里进一步采用我们在 Qi-Wang 工作^[28]的基础上已经初步建立起来的“原子团类型指数法 (CTIM)”^[15,16]。

为使概念更为明确起见, 我们必须进一步区分

基本原子团与多面体结构的内涵。我们定义基本原子团是一个由中心原子与周围近邻原子所构成的最小原子团, 即每个基本原子团必须有一个原子作为其核心。一个大原子团簇, 既可以是以一个基本原子团为核心按一定规则不断长大而成, 也可以是由若干个基本原子团相互结合而成。而对于一个多面体结构, 按照惯例, 我们定义: 它是由几个原子组成的一个空心多面体, 没有中心原子作为核心, 这是与基本原子团的基本区别, 如熟知的 Bernal 多面体即是如此。然而, 当一个基本原子团按其近邻所构成的多面体外形来命名时, 也可以称其为某种多面体原子团, 如二十面体原子团、Bernal 多面体原子团等。

CTIM 采用四个指数 (N, n_1, n_2, n_3) 来描述每一种基本原子团, 其中 N 表示 (与中心原子) 组成原子团的原子数目 (又称配位数); n_1, n_2, n_3 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 0 12 2) 表示一个由 12 个 1551 键型和 2 个 1661 键型组成的配位数为 14 的 CN14 Frank-Kasper 多面体基本原子团; (10 2 8 0) 表示一个由 2 个 1441 键型和 8 个 1551 键型组成的配位数为 10 的 Bernal 多面体中的阿基米德反三棱柱基本原子团。这些原子团的结构模型如图 8(a)~(c) 所示。

根据 CTIM, 我们可以得到 $Al_{50}Mg_{50}$ 合金熔体快速凝固过程中各个温度下基本原子团类型的统计结果, 如表 1 所示。由表 1 可见, $Al_{50}Mg_{50}$ 合金高温熔体中包含了各种不同类型的基本原子团, 随着温度的降低, 这些基本原子团的总数目迅速增加。其中, 二十面体基本原子团 (12 0 12 0) 的数目在 1373 K 时仅有 45 个, 占体系基本原子团总数的 21.33%; 熔点 T_m 附近, 其数目开始急剧增加, 相对数目已经大于 50%, 在各种类型基本原子团中逐渐处于主体地位; 到 273 K 非晶固体时, 二十面体基本原子团的数目已经高达 4309 个, 相对数目为 90.68%, 远远高于其他所有基本原子团的数目。由此表明, 二十面体基本原子团对 $Al_{50}Mg_{50}$ 合金熔体快速凝固过程中微观结构的演变起着关键的、决定性作用; $Al_{50}Mg_{50}$ 合金过冷熔体和非晶固体中 $g(r)$ 曲线第二峰的劈裂是由于大量二十面体团簇结构的出现而引起的。

非晶态金属的随机密堆 Bernal 模型^[29]认为: 非晶态合金中原子的分布主要构成 5 种特定形状的

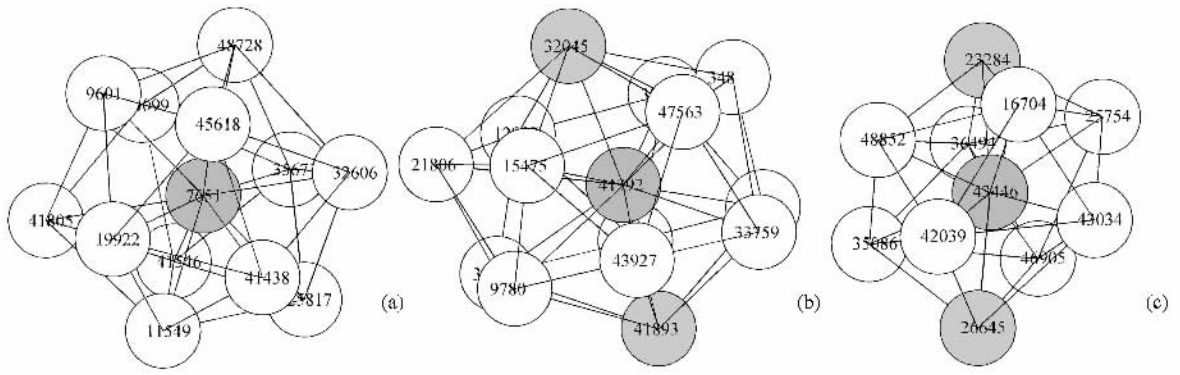


图 8 273 K 时二十面体、CN14 Frank-Kasper 多面体和阿基米德反三棱柱基本原子团结构简图 (a)以 7651 号原子为中心的二十面体基本原子团(12 0 12 0)(b)以 41392 号原子为中心的 CN14 Frank-Kasper 多面体基本原子团(14 0 12 2)(c)以 43446 号原子为中心的阿基米德反三棱柱基本原子团(10 2 8 0)

表 1 各基本原子团类型的数目与温度的关系

基本原子团类型	温度(K)和与其相应基本原子团的数目											
	1373	1273	1173	1073	973	873	773	673	573	473	373	273
(12 0 12 0)	45	76	118	209	368	620	997	1706	2509	4195	4462	4309
(14 0 12 2)	4	6	5	7	23	36	36	87	87	243	218	147
(15 0 12 3)	2	1	4	5	13	11	26	36	43	96	70	43
(16 0 12 4)	2	0	3	2	1	3	4	3	8	21	21	8
(16 0 12 5)	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0
(13 1 10 2)	35	59	69	69	138	145	158	296	197	424	283	131
(14 1 10 3)	14	12	13	16	22	44	27	70	47	119	74	36
(15 1 10 4)	6	1	9	7	9	17	18	44	25	102	72	17
(16 1 10 5)	0	0	0	2	1	3	4	14	4	25	18	2
(10 2 8 0)	1	0	1	1	1	1	0	1	0	1	0	0
(11 2 8 1)	7	16	20	13	17	12	6	16	6	9	6	1
(12 2 8 2)	12	40	44	43	66	75	49	100	44	109	85	23
(13 2 8 3)	9	12	16	17	22	20	12	25	12	33	10	2
(14 2 8 4)	21	22	16	23	45	47	36	57	41	91	40	15
(15 2 8 5)	5	5	1	10	8	15	15	16	7	38	18	3
(16 2 8 6)	1	2	2	1	4	2	0	2	2	3	3	0
(9 3 6 0)	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
(10 3 6 1)	4	5	0	2	0	0	0	0	0	0	0	0
(11 3 6 2)	0	0	2	3	2	3	1	1	0	1	0	0
(12 3 6 3)	8	14	14	6	17	13	7	15	2	10	3	0
(13 3 6 4)	19	33	28	23	44	55	31	56	28	53	28	8
(14 3 6 5)	8	9	15	8	12	17	6	15	5	13	3	4
(15 3 6 6)	2	3	2	2	8	3	5	7	2	3	2	3
(16 3 6 7)	0	1	1	1	0	0	0	1	0	0	1	0
(11 4 4 3)	1	1	2	4	1	0	2	1	0	0	0	0
(12 4 4 4)	4	5	8	3	5	4	1	0	0	0	0	0
(13 4 4 5)	3	4	3	4	2	4	1	2	0	3	0	0
(14 4 4 6)	6	7	5	2	4	8	4	5	4	5	2	0
(15 4 4 7)	1	0	1	2	1	2	1	2	1	2	0	0
(16 4 4 8)	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0
(12 5 2 5)	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0
(13 5 2 6)	1	0	1	1	2	1	2	1	0	1	0	0
(14 6 0 8)	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	1	0
基本原子团的总数目	221	334	403	486	838	1162	1451	2581	3074	4602	5421	4752
基本原子团中二十面体基本原子团(12 0 12 0)的比例/%	20.26	22.75	29.28	43.00	43.91	53.36	68.71	66.10	81.62	74.91	82.31	90.68
以 Al 原子为中心的(12 0 12 0)占有(12 0 12 0)的比例/%	82.32	85.53	83.05	83.05	90.76	90.65	93.18	92.79	95.62	95.49	95.99	96.03

Bernal 多面体,其中半径较小的原子一般位于较大原子所构成多面体的间隙之中.而我们对 $Al_{50}Mg_{50}$ 非晶态合金的模拟结果显示(如表 1 所示): $Al_{50}Mg_{50}$ 非晶态合金在 273 K 温度下包含了 4752 个基本原子团,并由多种不同结构类型组成.其中 (10 2 8 0)和 (9 3 6 0)两种 Bernal 多面体基本原子团并不存在;而二十面体基本原子团的比例高达 90.68%,而且其中 96.03%是以半径较小的 Al 原子为中心.这些基本原子团所包含的原子数目占体系所有原子数目的 70.36%,如图 9 所示.由此表明, $Al_{50}Mg_{50}$ 非晶态合金的微观结构是由许多不同结构类型的短程有序结构单元(CTIM 中表征为不同类型的基本原子团)构成,其中二十面体基本原子团是其主要的短程有

序结构单元.这一结构特征与随机密堆模型中只有 5 种特定形状的 Bernal 多面体不太一致,但与 Sheng 和 Ma^[3]所提出的“准等同团簇模型”一致;而且实验^[30,31]已经表明,许多非晶态金属中存在大量的二十面体团簇结构.

3.4. 可视化分析

为了直观反映 $Al_{50}Mg_{50}$ 非晶态合金中原子排布的总体情况,我们采用可视化方法清晰展现了 373 K(非晶态)时体系原子总体分布的 2D(111)截面示意图,如图 10(a)和(b)所示.由图 10(a)和(b)可见,体系原子的分布具有非晶态结构的特征.从整体上看体系原子分布杂乱无章,不具有长程序结构特征;而在局部有原子相对密集的区域,形成了不同尺寸的原子团簇结构,具有短程序结构特征.的确,我们在 373 K 时,发现了由 57 个基本原子团构成的包含 274 个原子的纳米级大团簇结构,如图 11(a)和(b)所示.由图 11(b)所示的该团簇结构的中心原子结构图明显可见,各个基本原子团的中心在整个团簇中是相互成键连接的,有的是单线连接,有的则是互相纽结.单线连接表明,有两个近邻基本原子团的中心原子互为近邻的;互相纽结则表明,有三个及三个以上近邻基本原子团的中心互为近邻的,因而互相纽结比单线连接更为紧密、稳定.由于团簇结构中基本原子团之间大量单线连接的存在,使团簇具有若干个突出的角隅,而不具有晶体结构特征.由图 10(a)和(b)还可以发现, $Al_{50}Mg_{50}$ 合金中体系中 Al 原子稍有偏聚,这与双体分布函数分析结果一致.

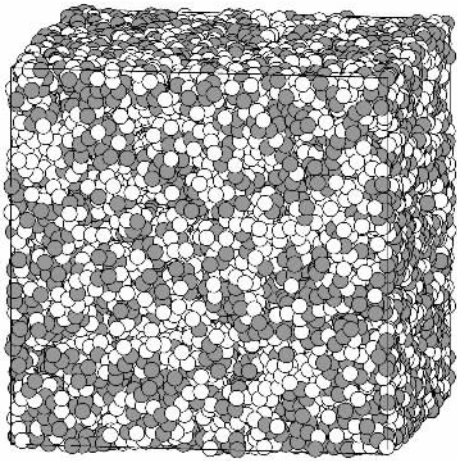


图 9 $Al_{50}Mg_{50}$ 非晶态合金中所包含 5421 基本原子团的结构简图(273 K 时)(图中黑色小球代表 Al 原子,白色小球代表 Mg 原子)

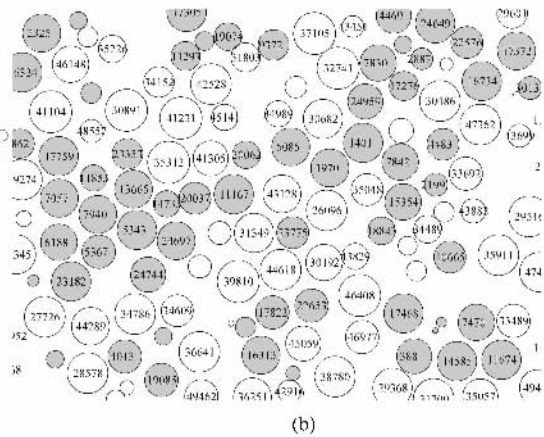
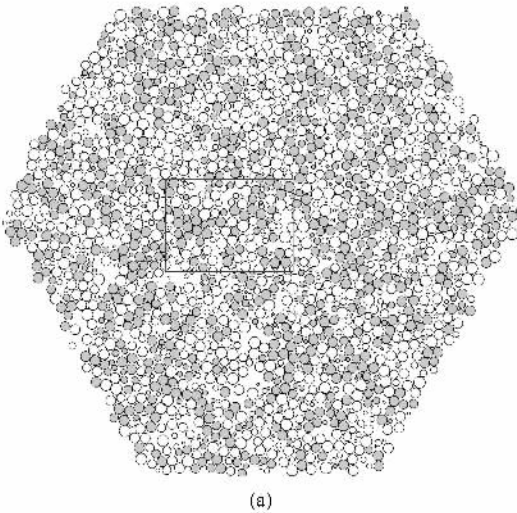


图 10 $Al_{50}Mg_{50}$ 非晶态合金的 2D(111)截面示意图(373 K 时)(图中黑色圆圈代表 Al 原子;白色圆圈代表 Mg 原子)(a)整个(111)截面图(b)(111)截面图的局部放大($\times 4$ 倍))

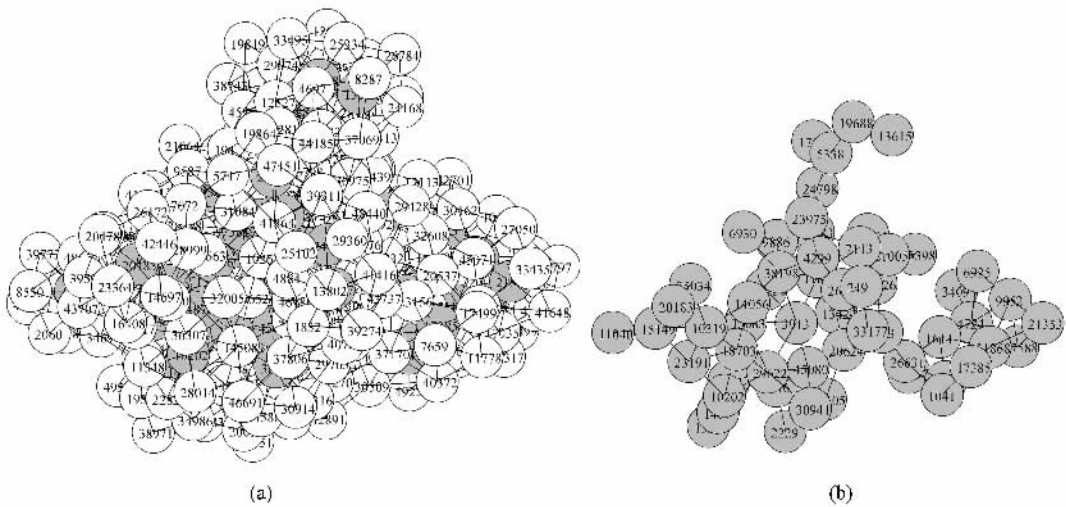


图 11 $\text{Al}_{50}\text{Mg}_{50}$ 非晶态合金中一个由 57 个基本原子团构成的包含 274 个原子的纳米级大团簇结构示意图 (373 K 时 X 图中黑色小球为基本原子团的中心原子) (a) 整体原子图 ;(b) 中心原子图

4. 结 论

本文基于 GNMP 理论的双体有效势函数,采用分子动力学方法对 $\text{Al}_{50}\text{Mg}_{50}$ 合金熔体的快速凝固过程进行了模拟,采用双体分布函数、HA 键型指数法和原子团类型指数法 (CTIM) 等微观结构表征方法,从不同层面对 Al-Mg 合金熔体快速凝固过程中微观结构的演化机理进行了深入地分析研究,结果表明:

1. 本模拟所获得的 Faber-Ziman 偏结构因子与实验结果符合较好,基于 GNMP 理论的双体有效势函数能够很好地反映 Al-Mg 合金体系的微观结构特征。
2. $\text{Al}_{50}\text{Mg}_{50}$ 合金熔体具有遗传性,在快速凝固过程中形成了非晶态结构,玻璃转变温度 $T_g \approx 550$ K。

$\text{Al}_{50}\text{Mg}_{50}$ 合金过冷熔体和非晶固体中 $g(r)$ 曲线第二峰的劈裂是由于体系中大量二十面体团簇结构的出现引起的,二十面体短程序结构对 $\text{Al}_{50}\text{Mg}_{50}$ 非晶态结构的形成起决定性作用。

3. 基于 CTIM 的团簇分析表明, $\text{Al}_{50}\text{Mg}_{50}$ 非晶态合金的微观结构是由许多不同结构类型的短程有序结构单元 (CTIM 中表征为不同类型的基本原子团) 构成,其中二十面体基本原子团是其主要的短程有序结构单元,其结构模型不能采用随机密堆的 Bernal 模型来表征。

4. $\text{Al}_{50}\text{Mg}_{50}$ 非晶态合金的短程有序区域包含各种不同尺寸的团簇结构,构成纳米级大团簇结构的基本原子团之间的大量单线连接,使团簇具有若干个突出的角隅,而不具有晶体结构特征。

[1] Streitz F H, Glosli J N, Patel M V 2006 *Phys. Rev. Lett.* **90** 225701
 [2] Li H, Ding F, Wang J L, Bian X F, 2001 *J. Chem. Phys.* **114** 6413
 [3] Sheng H W, He J H, Ma E 2002 *Phys. Rev. B* **44** 184203
 [4] Wang L, Zhang Y N, Mao X M, Peng C X 2007 *Chin. Phys. Lett.* **24** 2319
 [5] Liu J, Zhao J Z, Hu Z Q 2007 *Intermetallics* **15** 1361
 [6] Wang L, Li Hui, Bian X F *et al* 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 45 (in Chinese) [王 丽、李 辉、边秀房等 2000 物理学报 **49** 45]
 [7] Wang L H, Liu H Z 2006 *J. Non-Cryst. Solids* **352** 2880
 [8] Honeycutt J D, Andersen H C 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 4950

[9] Hou Z Y, Liu R S, Liu H R *et al* 2007 *J. Chem. Phys.* **127** 174503
 [10] Hou Z Y, Liu R S, Liu H R *et al* 2007 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **15** 911
 [11] Hou Z Y, Liu R S, Wang X *et al* 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 376 (in Chinese) [侯兆阳、刘让苏、王 鑫等 2007 物理学报 **56** 376]
 [12] Hou Z Y, Liu R S, Li C S, Zhou Q Y, Zheng C X 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5723 (in Chinese) [侯兆阳、刘让苏、李琛珊、周群益、郑采星 2005 物理学报 **54** 5723]
 [13] Wang S, Lai S K 1980 *J. Phys. F* **10** 2717
 [14] Li D H, Li X R, Wang S 1986 *J. Phys. F* **16** 309

- [15] Liu R S , Dong K J , Tian Z A *et al* 2007 *J. Phys. : Condens. Matter* **19** 196103
- [16] Liu H R , Liu R S , Zhang A L 2007 *Chin. Phys.* **16** 3747
- [17] Lai S K , Matsuura M , Wang S 1983 *J. Phys. F* **13** 2033
- [18] Nakano H , Qi D W , Wang S 1989 *J. Chem. Phys.* **90** 1871
- [19] Jin Z H , Lu K , Gong Y D , Hu Z Q 1997 *J. Chem. Phys.* **106** 8830
- [20] Waseda Y 1980 *The structure of Non-Crystalline Materials* (New York : McGraw-Hill)
- [21] Wendt H R , Abraham F F 1978 *Phys. Rev. Lett.* **41** 1244
- [22] Liu R S , Qi D W , Wang S 1992 *Phys. Rev. B* **45** 451
- [23] Chen F F , Zhang H F , Qin F X , Hu Z Q 2004 *J. Chem. Phys.* **120** 1826
- [24] Wang L , Bian X F , Zhang J X 2002 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **10** 331
- [25] Pei Q X , Lu C F , Fu M W 2004 *J. Phys. : Condens. Matter* **15** 743
- [26] Hafner J 1980 *Phys. Rev. B* **21** 406
- [27] Sheng H W , Luo W K , Alamgir F M *et al* 2006 *Nature* **26** 439
- [28] Qi D W , Wang S 1991 *Phys. Rev. B* **44** 884
- [29] Bernal J 1959 *Nature* **183** 141
- [30] Takagi T , Ohkubo T , Hirotsu Y *et al* 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 485
- [31] Louzguine D V , Yavari A R , Inoue A 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 041906

Simulation of evolution mechanisms of microstructures during rapid solidification of Al-Mg alloy melt^{*}

Hou Zhao-Yang^{1)†} Liu Li-Xia²⁾ Liu Rang-Su³⁾ Tian Ze-An³⁾

1) *Department of Applied Physics , Chang 'an University , Xi 'an 710064 , China)*

2) *College of Science , Xidian University , Xi 'an 710071 , China)*

3) *Department of Applied Physics , Hunan University , Changsha 410082 , China)*

(Received 15 October 2008 ; revised manuscript received 8 December 2008)

Abstract

The rapid solidification of Al₅₀Mg₅₀ alloy melt has been simulated by using molecular dynamics method , and the evolution mechanism of microstructures at different levels during the rapid solidification process have been deeply studied with the pair distribution function , the bond-type index method and the cluster-type index method. It is demonstrated that the simulated Faber-Ziman partial structure factors are in good agreement with the experimental results. The Al₅₀Mg₅₀ alloy melt possesses heredity. The Al₅₀Mg₅₀ amorphous structure is formed during the rapid solidification process , and the icosahedron short-rang-order structure plays a critical role in the formation of amorphous structure. The atomic cluster analyses based on the cluster-type index method shows that the microstructures of Al₅₀Mg₅₀ amorphous alloy is built from some different types of short-rang-order structures , and the icosahedron is the main short-rang-order structure. There are various cluster structures with different sizes in the short-rang-order regions. But it can not be described with the Bernal model.

Keywords : Al-Mg alloy melt , rapid solidification process , molecular dynamics simulation , microstructure

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

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50571037).

[†] Corresponding author. E-mail : houzy@chd.edu.cn