

直接相关函数对双模晶体相场模型相图的影响*

郭灿 王志军 王锦程[†] 郭耀麟 唐赛

(西北工业大学, 凝固技术国家重点实验室, 西安 710072)

(2012年11月21日收到; 2012年12月26日收到修改稿)

研究了直接相关函数峰宽及 $k=0$ 处峰对双模晶体相场模型相图的影响. 结果表明, 随着峰宽的增加, 有序相的相区范围不断增大. 而增大峰宽比可使体心立方 (bcc) 相区范围缩小, 面心立方 (fcc) 相区范围大幅增加. 直接相关函数 $k=0$ 峰的引入则使相图被压缩, 两相共存区变窄, 液相稳定区域增加.

关键词: 晶体相场模型, 双模近似, 相图, 直接相关函数

PACS: 81.30.-t, 61.50.Ah, 64.70.-p, 46.15.-x **DOI:** 10.7498/aps.62.108104

1 引言

材料组织形成过程及其性能特点的研究往往涉及多个尺度的耦合作用, 多尺度问题及其模型的建立一直是材料科学领域研究的热点和难点. 随着计算机技术及计算方法的飞速发展, 数值模拟技术已经成为材料科学研究中的重要工具. 其中, 分子动力学 (MD) 方法^[1,2] 是一种在原子分子水平上求解多体问题的重要计算模拟方法, 该方法可以捕获原子尺度上的大部分信息, 被广泛应用于晶体结构、位错运动等研究. 相场法 (PFM)^[3-6] 是当今研究微观组织演化数值模拟的重要方法之一, 然而该方法采用均一密度场, 忽略了原子层面的详细信息, 很难用于原子尺度上的动力学、弹塑性机制及晶体结构的研究. 最近 Elder 等^[7] 提出了晶体相场 (PFC) 模型, 该方法采用周期性密度场来描述体系中的原子分布, 自洽耦合了材料的晶体学特性及原子尺度信息. PFC 模型本质上是一种简化的经典密度泛函理论, 能够同时反映原子空间尺度和扩散时间尺度上的现象, 已成功模拟了晶界迁移、晶体生长、弹塑性形变^[8-10] 等现象.

PFC 模型的优势是显而易见的, 然而作为一种新模型还存在很多不足, 单模近似的 PFC 模型目前仅能用于六角 (2D)、体心立方 (3D) 结构的模拟.

虽然后来研究表明单模 PFC 模型中也可包含面心立方 (fcc) 和密排六方 (hcp) 结构^[11,12], 但其能量差很小, 在噪声作用下很难观察到相变过程. 为了扩大 PFC 模型的适用范围, 很多学者对该模型做了大量改进工作. Jaatinen 等^[13] 发展了一种直接相关函数八阶展开的 PFC 模型, 精确地描述了具有 bcc 结构铁的各项性能, 然而依然得不到稳定的 fcc 密排结构. Wu 等^[14,15] 通过给直接相关函数加入第二个峰, 成功得到了稳定的 fcc(3D)、正方 (2D)、六角 (2D) 相, 但该模型得到的相图不能直接用于 bcc, fcc 相转变的研究, 同时需要确定大量的参数. Greenwood 等^[16,17] 用高斯峰来代替直接相关函数中的尖锐峰, 提出了一种多模近似晶体相场模型, 得到了具有实际物理意义的相图, 并能通过温度控制来进行结构相转变的研究, 但他们没有考虑直接相关函数中小于零的峰, 使得液相自由能几乎不随温度变化, 这与真实物理过程不符.

直接相关函数说明了原子间相互作用, 是体系过剩自由能的核心因素. 在倒易空间, 该函数 ($\hat{C}(k)$) 与结构因子 ($S(k)$) 关联, 符合关系式 $\hat{C}(k) = \frac{S(k)-1}{S(k)}$. 在 PFC 模型中, 对 $\hat{C}(k)$ 做了近似处理来描述原子间相互作用. 通过控制直接相关函数中峰的高度、宽度及个数可以得到不同的相结构. Greenwood 多模近似模型尽管还不够完善,

* 国家自然科学基金 (批准号: 51071128, 51101124) 和国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2011CB610401) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: jchwang@nwpu.edu.cn

但其相关函数构造得很巧妙,是目前最有前景的双模 PFC 模型之一. 由于该模型提出不久,对其相图的认识仍然不够充分,因此有必要对直接相关函数与双模 PFC 模型相图的关联进行深入研究. 本文采用 Greenwood 等提出的 PFC 模型研究了 fcc, bcc 结构的稳定性; 并对直接相关函数中峰高、峰宽及 $k=0$ 处峰对不同相结构稳定性及相图的影响进行了分析.

2 模型的建立

PFC 模型起源于经典密度泛函理论,自由能泛函形式为

$$F = k_B T \int d\mathbf{r} \{ \rho(\mathbf{r}) \ln[\rho(\mathbf{r})/\rho_l] - \delta\rho(\mathbf{r}) \} - k_B T \sum_{n=2}^{\infty} \frac{1}{n!} \int \prod_{i=1}^n d\mathbf{r}_i \delta\rho(\mathbf{r}_i) \times C_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_n), \quad (1)$$

式中,第一项代表理想体系自由能,驱动体系演化成均一相;第二项为原子间相互作用项,驱动体系演化为有序相. 粒子密度场 $\rho(\mathbf{r})$, C_n 表示 n 点直接相关函数

$$C_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_n) \equiv \frac{\delta^n \phi}{\prod_{i=1}^n \delta\rho(\mathbf{r}_i)}, \quad (2)$$

其中 $\phi[\rho]$ 表示粒子间总的相互作用势.

定义无量纲密度

$$n(\mathbf{r}) = \frac{\rho(\mathbf{r}) - \rho_l}{\rho_l}, \quad (3)$$

ρ_l 表示参考密度. 采用两点相互作用,即取 $n=2$, 联立 (1), (2), (3) 式得:

$$\Delta F = \int \left[\frac{n(\mathbf{r})^2}{2} - \frac{n(\mathbf{r})^3}{6} + \frac{n(\mathbf{r})^4}{12} \right] d\mathbf{r} - \frac{1}{2} \int n(\mathbf{r}) \int C_2(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) n(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}'. \quad (4)$$

在倒易空间 $k=0$ 附近对 $\hat{C}_2(k)$ 进行泰勒展开:

$$\hat{C}_2(k) = \hat{C}_0 + \hat{C}_2 k^2 + \hat{C}_4 k^4 + \dots, \\ C_2(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = (\hat{C}_0 - \hat{C}_2 \nabla^2 + \hat{C}_4 \nabla^4 - \dots) \times \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (5)$$

通过拟合直接相关函数第一个峰得到三个系数,代入自由能方程得到单模近似晶体相场模型.

在改进的双模 PFC 模型中,Greenwood 等^[16,17]提出的直接相关函数形式为

$$\hat{C}_2(k) = \sum_i e^{-\frac{\sigma^2 k_i^2}{2\rho_i \beta_i}} e^{-\frac{(k-k_i)^2}{2\alpha_i^2}}, \quad (6)$$

上式中, i 表示不同的晶面族, σ 的大小影响直接相关函数的峰高,与实际物理过程中温度对直接相关函数的作用相当,因此,该模型中 σ 可表示温度; k_i 表示直接相关函数中 i 晶面族对应的峰所在的位置,与晶面间距成反比; ρ_i 为晶面的原子数密度; β_i 表示晶面族中晶面个数; α_i 的大小与界面、缺陷及张力对自由能的影响有关,改变 α_i 的值会影响液固界面宽度从而影响表面能,同时改变 α_i 大小还可以控制弹性系数的数量级及其各向异性^[17,18]. 将 (6) 式代入 (4) 式得到自由能密度函数:

$$\frac{\Delta F}{V} = \frac{1}{a^3} \int_0^a \int_0^a \int_0^a \left\{ \left[\frac{n(x,y,z)^2}{2} - \frac{n(x,y,z)^3}{6} + \frac{n(x,y,z)^4}{12} \right] - \frac{1}{2} n(x,y,z) \hat{C}_2(k) \hat{n}(k_x, k_y, k_z) \right\} dx dy dz, \quad (7)$$

上式中, a 为晶格常数. 对 (7) 式进行变分,得到系统演化动力学方程:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \Gamma \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta n} = \nabla^2 \left\{ n - \frac{1}{2} n^2 + \frac{1}{3} n^3 - C_2 n \right\}, \quad (8)$$

这里取 $\Gamma = 1$.

3 计算条件

3.1 相图计算过程

通过对各种相自由能的分析可获得相图,本文主要考虑液相、fcc 及 bcc 相. 有序结构相的相互关联能主要存储在直接相关函数 $\hat{C}_2(k)$ 低频处的峰中, bcc 结构 92% 关联能体现在 $\{110\}$ 晶面族对应的峰中,而 fcc 结构则 70% 体现于 $\{111\}$, 30% 体现于 $\{200\}$ 晶面族所对应的峰中^[17]. 所以采用双模直接相关函数模型来描述 fcc, bcc 有序相的自由能是合理的. 双模 PFC 模型中,液相为均匀密度分布,有序结构相为周期性密度分布. 原子密度场由以下公式给出:

$$n_l = n, \\ n_{\text{fcc}}(x, y, z) = n_{111} + n_{200} + n,$$

$$\begin{aligned}
 n_{\text{bcc}}(x, y, z) &= n_{110} + n_{200} + n, \\
 n_{111} &= A_{111} \sum_{h,k,l=\pm 1} \cos[k_0(hx + ky + lz)], \\
 n_{200} &= A_{200} \{ \cos(2k_0x) + \cos(2k_0y) + \cos(2k_0z) \}, \\
 n_{110} &= A_{110} \{ \cos(k_0x) \cos(k_0y) + \cos(k_0x) \cos(k_0z) \\
 &\quad + \cos(k_0z) \cos(k_0y) \}, \tag{9}
 \end{aligned}$$

上式中, n_1 为液相原子密度, $k_0 = 2\pi/a$, a 为晶格常数, A 为原子密度振幅. 通过动力学方程式 (8) 得到某一温度下最稳态自由能曲线, 然后根据不同温度下的自由能曲线制成相图.

3.2 参数选取

计算区域为 $64 \times 64 \times 64$ 的均匀网格, 即 $\Delta x = \Delta y = \Delta z$, 空间步长为 $\Delta x = 0.125$, 时间步长取为 $\Delta t = 0.0005$, 使用周期性边界条件. fcc 结构晶格常数 $a_{\text{fcc}} = 1$, bcc 取为 $a_{\text{bcc}} = \sqrt{2/3}$. 振幅 A

取值接近稳态密度振幅值时有助于降低最稳自由能求解的计算量. 在一定峰高条件下, 可以通过对系统的自由能进行近似计算, 从而得到估算体系最小自由能对应的振幅大小, 得到振幅初始值^[17]. $\sigma = 0$ 时 fcc 密度场振幅取为 $A_{111} = 0.14274$, $A_{200} = 0.10648$, bcc 密度场振幅取为 $A_{110} = 0.13237$, $A_{200} = 0.05573$. 不同参数条件下的振幅与振幅初始值较为接近. 直接相关函数峰位置 k_i , fcc 结构取值 $k_{111} = 2\sqrt{3}\pi$, $k_{200} = 4\pi$, bcc 结构取值为 $k_{110} = 2\sqrt{3}\pi$, $k_{200} = 2\sqrt{6}\pi$. fcc 晶面 β 取值为 $\beta_{111} = 8$, $\beta_{200} = 6$, bcc 结构取为 $\beta_{110} = 12$, $\beta_{200} = 6$. 面原子密度 ρ , fcc 晶面 $\rho_{111} = 4/\sqrt{3}$, $\rho_{200} = 2$, bcc 取值 $\rho_{110} = 2/\sqrt{2}$, $\rho_{200} = 1$. 温度取为 $\sigma = i \times 0.01$, $i = 0, 1, 2, \dots$.

图 1 给出了由以上参数计算得到的相图示意图, 图 1(a) 为液相-fcc-bcc 相图, 图 1(b) 为在 $\sigma = 0.1$ 时计算得到的平衡态自由能曲线.

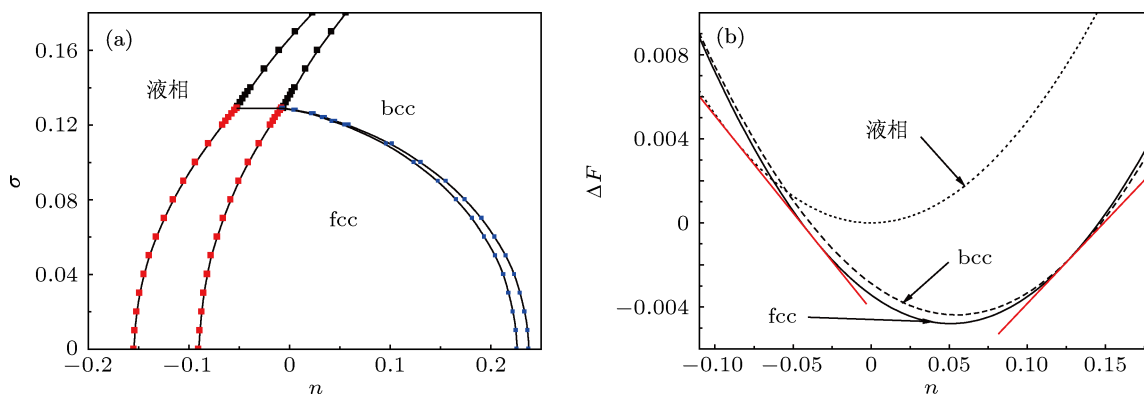


图 1 (a) 液相-fcc-bcc 相图; (b) $\sigma = 0.1$ 时自由能曲线, 其中两条直线分别表示 fcc-bcc 结构和液相-fcc 结构的公切线

4 结果与讨论

直接相关函数 $\hat{C}_2(k)$ 说明了原子间的相互作用, 可用来定量描述物质结构. 直接相关函数中各峰的高度、宽度与相结构的稳定性有直接关系. 本文选取了直接相关函数低频处的两个具有一定峰宽的峰来描述 bcc, fcc 有序结构, 通过温度参数来调整各个峰高, 考察直接相关函数对相图的影响. 直接相关函数峰宽的大小影响材料的弹性系数, 是关联能在直接相关函数各个峰中分布情况的重要控制参数之一. 通过改变峰宽比可以调整弹性各向异性的大小, 当 α_2/α_1 的比值与两峰位置的比值相等时, 材料的弹性各向异性消失^[17]. 本文首先研究了峰宽大小对相图的影响; 进而研究了峰宽比对相图的影响; 最后引入温度对液相的作用项, 考察直

接相关函数在 $k = 0$ 处加入倒高斯峰对相稳定性的影响.

4.1 直接相关函数峰宽大小对相图的影响

图 2 给出了 $\alpha_1 = \alpha_2$, 以及 $\alpha_2/\alpha_1 = \sqrt{3}/2$ 时不同峰宽对应的相图. 图中 bcc 相区在 fcc 相区之上, 表明当 n 取在三相点 $+n$ 方一侧时对熔体缓慢降温将依次得到 bcc, fcc 有序结构. 由直接相关函数分析, 当 σ 值增大即温度升高时, 第一个峰的增高程度远远超过了第二个峰, 从而在关联能中起主要作用. 在 bcc 结构中 90% 以上的关联能存储在直接相关函数第一个峰中, 远高于 fcc 的 70%, 随着温度不断升高, 直接相关函数由双模逐渐演变为单模形式, 在相图上表现为 fcc 结构转变为 bcc 结构.

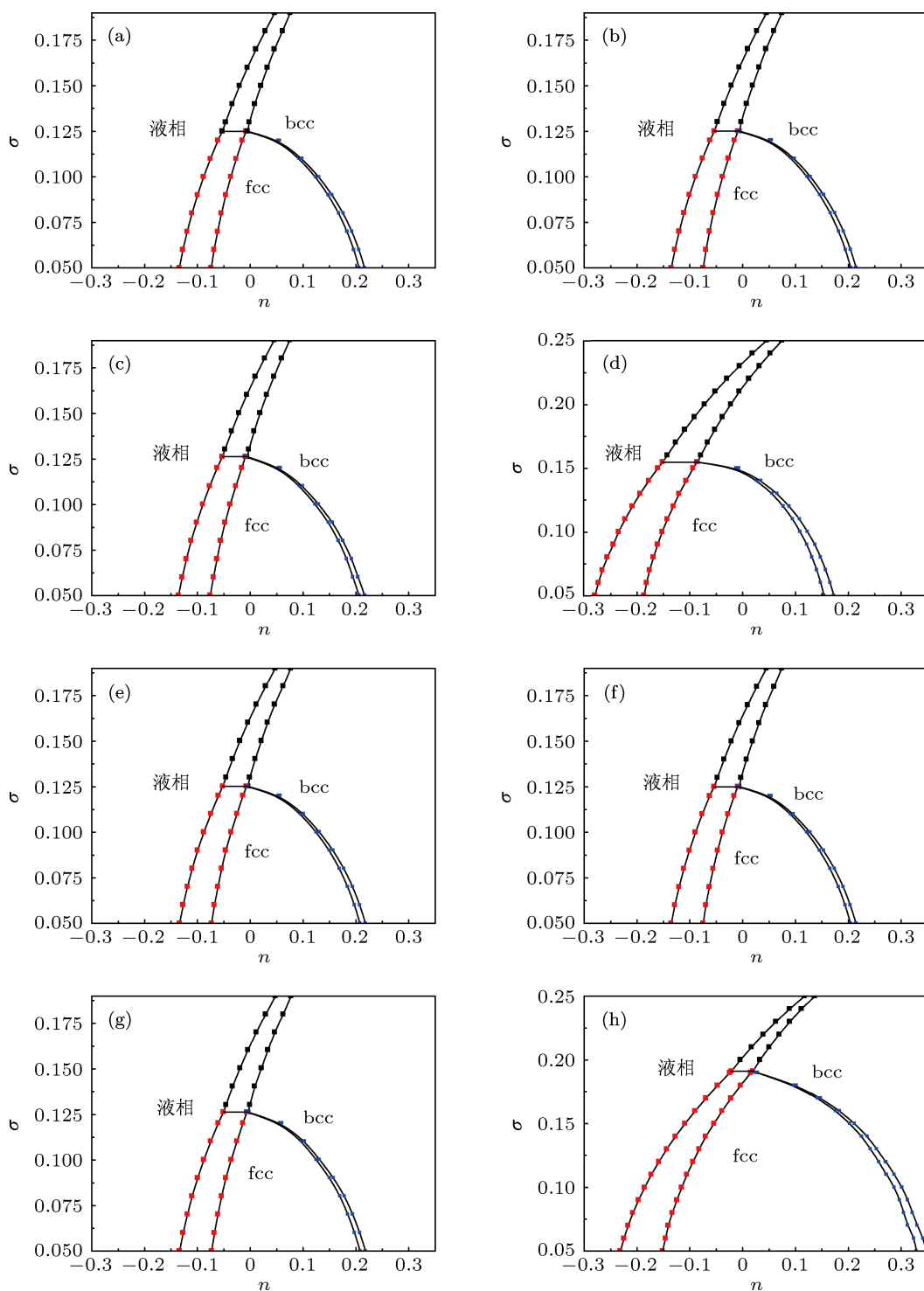


图2 峰宽取不同值时计算所得相图 (a)—(d)为 $\alpha_1 = \alpha_2$ 时 α_1 分别取值为 0.1, 0.2, 0.4, 0.8 时的相图; (e)—(h)为 $\alpha_2/\alpha_1 = \sqrt{3}/2$ 时 α_1 分别取值为 0.1, 0.2, 0.4, 0.8 时的相图

图2表明,当 α_1 取值在 0.1 到 0.4 之间时,相图差别不大,自由能曲线接近.考察直接相关函数发现,在 $\alpha_1 < 0.4$ 时,直接相关函数的两个峰相互独立,几乎没有叠加,峰宽大小不影响两峰峰高.因此在 $\alpha_1 < 0.4$ 时,峰宽大小对相区分布影响不大.然而,当 $\alpha_1 > 0.4$ 时,直接相关函数的峰宽对峰高

有重要的影响,从而影响到系统的自由能,进而影响到相图.如图2(d),2(h)中,bcc-fcc,液相-fcc,液相-bcc三个两相共存区的范围都明显增加.随 α_1 增大三相点位置不断升高,同时有序相区范围不断增大,这表明 α_1 越大有序相越稳定.由直接相关函数分析发现,随着 α_1 增大,两个峰开始叠加互相增

强, 影响到了能量在直接相关函数中的分布, 这时表现为有序相的稳定性增强, 从而解释了为什么有序相区不断扩大.

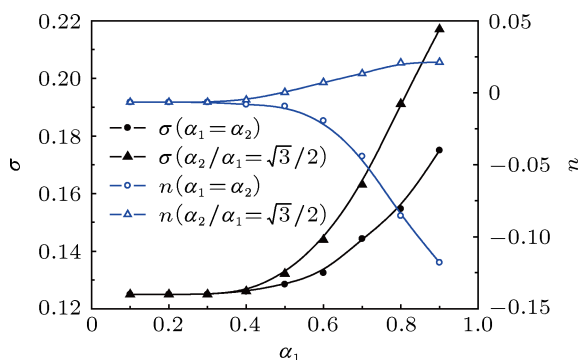


图3 不同 α_1 值下三相点位置的变化, 实心圆曲线和空心圆曲线分别表示 $\alpha_1 = \alpha_2$ 时三相点所在位置的浓度及温度随 α_1 值的变化情况; 实心三角曲线和空心三角曲线分别表示 $\alpha_2/\alpha_1 = \sqrt{3}/2$ 时三相点所在位置的浓度及温度随 α_1 值的变化情况

4.2 峰宽比对相图的影响

图 2(d) 和 (h) 表明直接相关函数第二个峰的宽度对相图中 bcc 和 fcc 相的分布存在显著影响. 本节讨论峰宽比对相图的影响, 首先考察相图中三相点的迁移, 图 3 给出了不同峰宽比下三相点位置随峰宽的变化. 在 $\alpha_1 < 0.4$ 时, 三相点对应的密度和温度均没有太大变化, 表明在第一个峰独立时峰宽比对三相点没有影响. 随着峰宽的增加, 三相点位置不断升高, 对应的原子数密度发生偏离. 在 $\alpha_1 > 0.4$ 时, 峰宽比对三相点的影响逐渐增大, 峰宽相等时, 三相点向左偏移; 而 $\alpha_2/\alpha_1 = \sqrt{3}/2$ 时, 三相点向右偏移. 相对于峰宽相等时, $\alpha_2/\alpha_1 = \sqrt{3}/2$ 对应的三相点位置上升得更快, 这是因为后者的第二个峰峰宽较窄, 对两个峰的能量比影响较前者显著.

在 $\alpha_1 > 0.4$ 时, 峰宽比对相区位置及范围有显著影响. 如图 2(d) 和 2(h) 所示, 相对等峰宽时, $\alpha_2/\alpha_1 = \sqrt{3}/2$ 对应的相图中有序结构相区整体向右移动, 同时伴随 fcc 相区的扩大以及 bcc 相区的收缩. 对两相共存区的影响主要表现在: 两相共存区结线长度在 $\alpha_2/\alpha_1 = \sqrt{3}/2$ 时比等峰宽时小, 液相-bcc 共存区差别量在 5%—10%, 液相-fcc 共存区大概在 10%—20%, 对 bcc-fcc 共存区影响较小. 从根本上讲, 相区的变化与直接相关函数有直接关系. 图 4 给出了两峰存在重叠时峰宽比对直接相关函数峰的影响. 观察直接相关函数可以看到, 加入了峰宽比后两个峰的强度比不断随 α_1 变化, 以至

于当 α_1 增大到 0.8 时主峰位置发生了变动, 由第一个峰转移到了第二个峰. 4.1 中分析指出峰高对有序相稳定性有着十分重要的影响, 随着第一个峰相对强度的降低, bcc 结构稳定性降低.

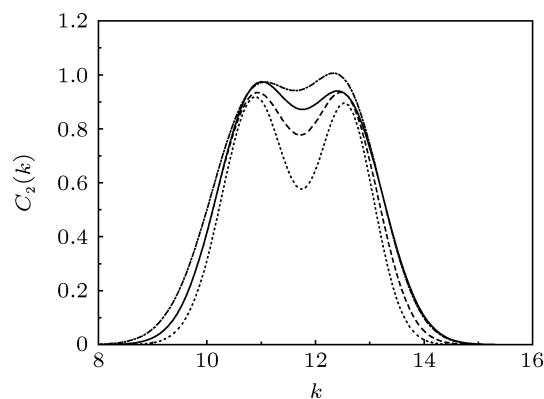


图4 峰宽与直接相关函数关系 实线是 $\alpha_1 = \alpha_2 = 0.7$ 时的曲线, 点线、虚线、点-虚线分别为 $\alpha_2/\alpha_1 = \sqrt{3}/2$ 时 α_1 取值在 0.6, 0.7, 0.8 时的曲线

4.3 $k = 0$ 处峰对相图的影响

Greenwood 等在构造相关函数时忽略了直接相关函数 $k = 0$ 处的峰, 其结果虽然增强了有序相的稳定性, 但与实际物理过程不符. 真实体系中, $k = 0$ 处存在一个倒峰, 并具有实际物理意义, 与材料的体压缩系数相联系^[16,17], 随峰高增加材料体模量增大. $k = 0$ 处峰对材料的性能及结构稳定性有影响, 因此本节在 $k = 0$ 处构造一个倒高斯峰来近似描述直接相关函数的第一个峰, 并考察其对自由能及相图的影响. 倒高斯峰形式为

$$\hat{C}(k)_0 = C(0) e^{-\frac{\sigma^2}{2}} e^{-\frac{k^2}{2\alpha_0^2}}, \quad (10)$$

其中 $C(0)$ 为小于零的常数, 其值与材料的体模量相关, 该值绝对值越大体模量越大; 文中取 $\alpha_0 = 2.0$. 图 5(a) 给出了不同 $C(0)$ 值时的直接关联函数. 当 k 趋于零时, $\hat{C}(k)$ 与温度成正比, 符合实际物理过程^[19], 同时温度项采用与其他峰相一致的指数形式与原双模近似模型自洽, 故而 $k = 0$ 处倒高斯峰形式合理. 加倒峰后, 随着倒峰高度的增加, 自由能曲线变陡, 以 $n = 0$ 为中心变化, 见图 5(b).

图 6 给出了不同倒峰高时的相图. 由图 6 可知, 相图三相点位置、相区分布变化很小. 随着峰高增加相图不断被压缩, 三个两相共存区结线长度 Δn 不断变小. 图 7 给出了三个两相区结线长度在三相点附近随倒峰高的变化情况, 不难看出其改变量遵循相同的规律, 通过拟合曲线得到:

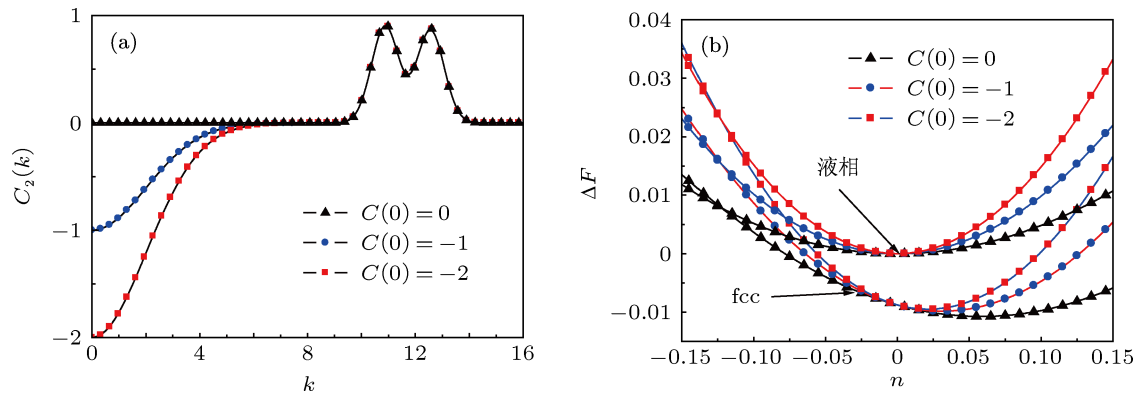


图5 (a) 加倒高峰后的直接相关函数; (b) $\sigma = 0$ 时, $k = 0$ 处加倒峰后的自由能曲线

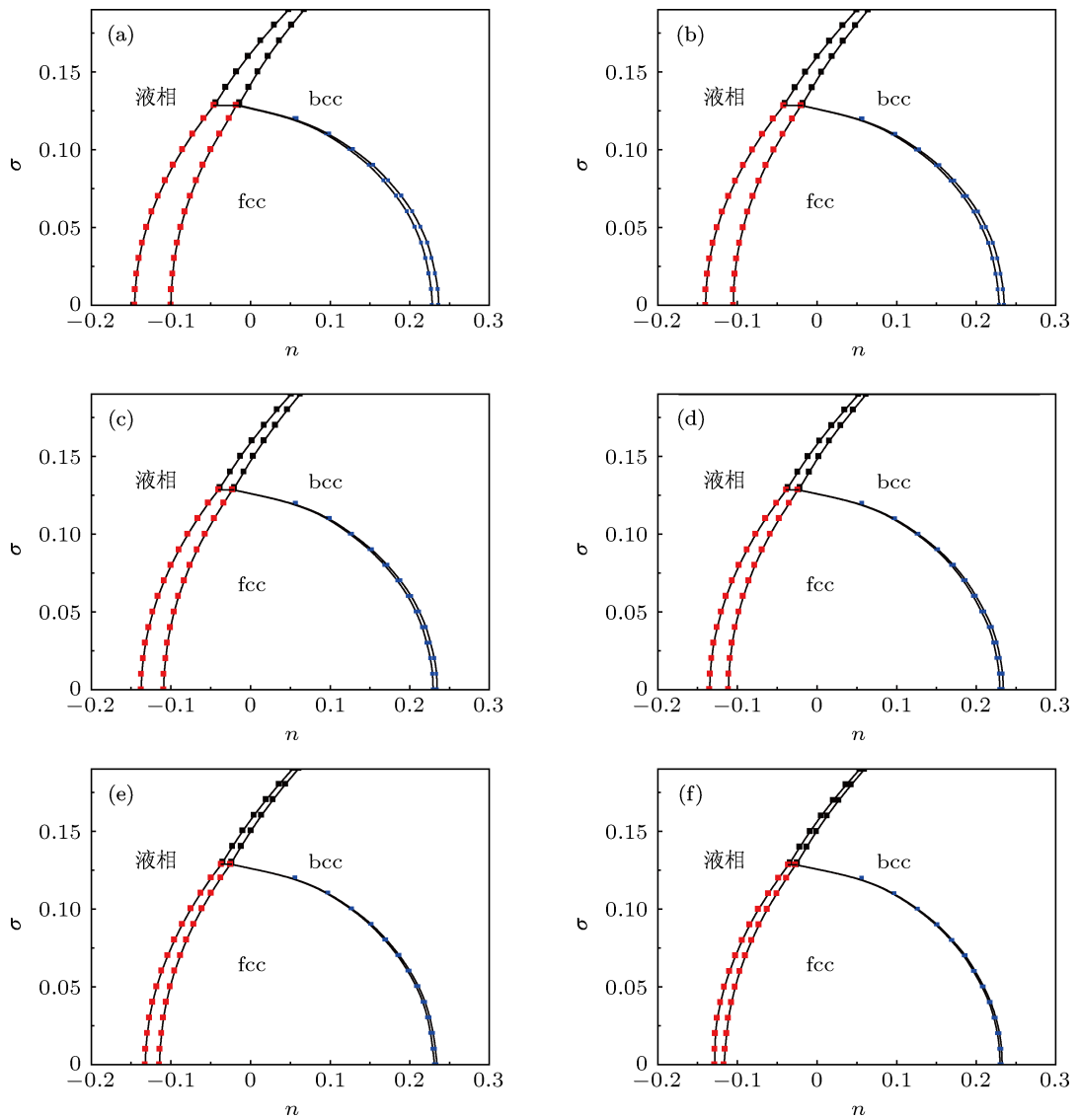


图6 倒峰峰高取不同值时计算所得相图 (a)–(f) 取值分别为 $-0.5, -1, -1.5, -2, -3, -4$

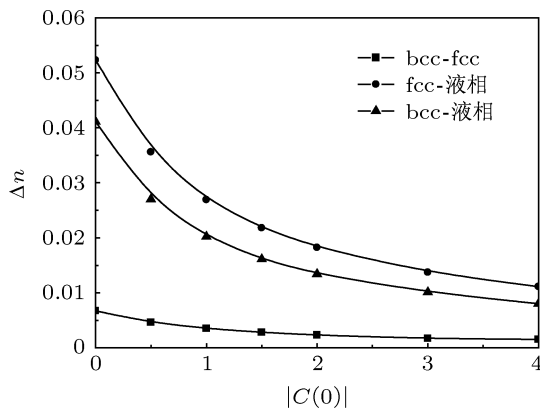


图7 两相共存区结线长度随倒峰高 $C(0)$ 的变化情况

$$\Delta n = B e^{-0.67 \times |C(0)|^{0.65}}, \quad (11)$$

其中 Δn 表示两相区结线长, B 为常数, $C(0)$ 为 $k=0$ 处倒峰高度. 结合自由能曲线分析, 在原子数密度远离 $n=0$ 处随着倒峰高的增加液相变得更加稳定.

5 结论

采用双模近似晶体相场模型对 fcc, bcc 结构最稳态自由能进行数值求解, 研究了直接相关函数对相图的影响. 结果表明:

1) 随着峰宽的增加, 有序结构相区范围扩大, 稳定性增强;

2) 峰宽比对能量在直接相关函数中的分布有很大影响, 它不仅影响相区的相对位置, 还改变相区范围;

3) $k=0$ 处加倒高斯峰后相图被压缩, 两相区变窄, 在参考密度取值远离 $n=0$ 处随着倒峰高度的增加液相变得更加稳定.

综上所述, 直接相关函数对材料的结构、性能有很大影响, 通过调整相关函数的形态, PFC 方法将能够应用于多种晶体结构的研究工作.

[1] Kalikmanov V I, Dongen M E H 1993 *Europhys. Lett.* **21** 645
 [2] Liu J, Zhao J Z, Hu Z Q 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 031903
 [3] Castro M 2003 *Phys. Rev. B* **67** 035412
 [4] Warren J A, Kobayashi R, Lobkovsky A E, Carter W C 2003 *Acta Mater.* **51** 6035
 [5] Li J J, Wang J C, Xu Q, Yang G C 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1514 (in Chinese) [李俊杰, 王锦程, 许泉, 杨根仓 2007 物理学报 **56** 1514]
 [6] Wang Y Q, Wang J C, Li J J 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 118103 (in Chinese) [王雅琴, 王锦程, 李俊杰 2012 物理学报 **61** 118103]
 [7] Elder K R, Katakowski M, Haataja M, Grant M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 245701
 [8] Elder K R, Grant M 2004 *Phys. Rev. E* **70** 051605
 [9] Tegze G, Tóth G I, Gránásy L 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 195502
 [10] Ren X, Wang J C, Yang Y J, Yang G C 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3595

(in Chinese) [任秀, 王锦程, 杨玉娟, 杨根仓 2010 物理学报 **59** 3595]
 [11] Tóth G I, Tegze G, Pusztai T, Tóth G, Gránásy L 2010 *J. Phys.: Condens. Matter* **22** 364101
 [12] Jaatinen A, Nissila T A 2010 *J. Phys.: Condens. Matter* **22** 205402
 [13] Jaatinen A, Achim C V, Elder K R, Nissila T A 2009 *Phys. Rev. E* **80** 031602
 [14] Wu K A, Adland A, Karma A 2010 *Phys. Rev. E* **81** 061601
 [15] Wu K A, Plapp M, Voorhees P W 2010 *J. Phys.: Condens. Matter* **22** 364102
 [16] Greenwood M, Provas N, Rottler J 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 045702
 [17] Greenwood M, Rottler J, Provas N 2011 *Phys. Rev. E* **83** 031601
 [18] Majaniemi S, Provas N 2009 *Phys. Rev. E* **79** 011607
 [19] Waseda Y 1980 *The Structure of Non-Crystalline Materials: Liquid and Amorphous Solids* (New York: McGraw-Hill Inc) pp34-36

Effect of the direct correlation function on phase diagram of the two-mode phase field crystal model*

Guo Can Wang Zhi-Jun Wang Jin-Cheng[†] Guo Yao-Lin Tang Sai

(State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

(Received 21 November 2012; revised manuscript received 26 December 2012)

Abstract

Effects of the width of direct correlation function peak and the peak at $k = 0$ on the phase diagram for the two-mode phase field crystal model are examined carefully. The results indicate that increasing the width of direct correlation function peak will expand the stability region of the ordered phases; however, increasing the ratio of peak width will significantly increase the fcc phase region but reduce the bcc phase region. Adding a negative Gaussian peak at $k = 0$ to the two-mode approximate direct correlation function will compress the phase diagram and make the two-phase coexisting region narrow.

Keywords: phase field crystal model, two-mode approximation, phase diagram, direct correlation function

PACS: 81.30.-t, 61.50.Ah, 64.70.-p, 46.15.-x

DOI: 10.7498/aps.62.108104

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51071128, 51101124) and the National Basic Research Program of China (Grant No. 2011CB610401).

[†] Corresponding author. E-mail: jchwang@nwpu.edu.cn