

冷速对液态金属 Ga 凝固过程中微观结构演变 影响的模拟研究^{*}

张海涛 刘让苏[†] 侯兆阳 张爱龙 陈晓莹 杜生海

(湖南大学应用物理系, 长沙 410082)

(2005 年 7 月 25 日收到, 2005 年 11 月 4 日收到修改稿)

采用分子动力学方法对液态金属 Ga 凝固过程中不同冷却速率对微观结构演变的影响进行了模拟跟踪研究. 运用 HA 键型指数法和原子成团类型指数法(CTIM)分析了金属原子 Ga 的成键类型和形成的基本原子团结构. 结果发现, 冷却速率对凝固过程中的微观结构起着非常重要的作用. 在以 1.0×10^{14} , 1.0×10^{13} , 1.0×10^{12} K/s 的速率冷却时, 系统形成以与 1311, 1301 键型相关的菱面体结构为主, 夹杂着立方体、六角密集等其他团簇结构所构成的非晶态结构. 在以 1.0×10^{11} K/s 的速率冷却时, 系统明显发生结晶, 其结晶转变温度 T_c 约为 198K, 且冷却速率越慢, 结晶转变温度 T_c 越高, 形成以与 1421 键型相关的斜方晶体(经可视化分析确认)为主要构型的晶态结构. 这将为研究液态金属的结晶转变过程提供一种新方法.

关键词: 液态金属 Ga, 凝固过程, 微结构转变, 分子动力学模拟

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

1. 引 言

众所周知, 金属元素 Ga 是半导体工业中一种非常重要的原材料. 但由于它主要以化合物或合金的形式存在(如 GaN, Ga-In 等), 因而关于纯金属 Ga 及其液态结构与性能方面的实验研究只有少量报道^[1-3]. 要深入理解金属元素 Ga 的宏观性能与微观结构的关系, 对纯金属 Ga 由液态到固态的凝固过程进行深入研究, 是十分必要的. 然而在目前的实验条件下, 对于液态金属的凝固过程很难实现微观跟踪研究. 随着计算机技术的飞速发展, 采用计算机模拟快速凝固过程, 可以获得目前在实验上尚无法得到的有关微观结构演变的信息, 近十几年来在结构分析方面已经取得许多重要的研究进展^[4-8]. Tsay 等^[4,5]与 Liu 等人^[6-8]已分析了液态金属 Ga 在高温及不同冷速下的结构因子 $S(q)$ 曲线及双体分布函数 $g(r)$ 曲线随温度的变化关系, 并采用 Honeycutt-Andersen(HA) 键型指数法^[9]分析了系统中原子的近邻成键关系, 但迄今均尚未涉及到凝固过程中更

为重要的各种微观团簇结构的形成与演变机理的研究.

为此, 本文试图在作者原有研究工作的基础上^[6-8], 继续采用分子动力学方法^[10-12], 进一步对液态金属 Ga 在不同冷速下的快速凝固过程进行模拟跟踪研究. 采用 HA 键型指数法^[9]、中心原子法和原子团类型指数法^[12-16], 对凝固过程中的微观结构、特别是近程团簇结构的形成和演变特性, 进行更为深入的研究, 以便为进一步寻找获得具有最佳材料性能的凝固工艺提供理论依据.

2. 模拟计算的条件和方法

本文的模拟计算如下进行: 首先, 将 1000 个 Ga 原子置于一个立方体盒中, 然后让系统在周期性边界条件下运行. 采用的原子间相互作用势是由 Wang 等人^[17, 18]所发展的扩展非局域模型膺势理论中的双体有效势函数, 其表达式为

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

(1)

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

† E-mail: rsliu@mail.hunu.edu.cn

式中 r_{ij} 和 q 分别表示正空间的原子 i, j 间的距离 (或位矢夹角) 和倒空间的波矢大小 (或波数); Z_{eff} 和 $F(q)$ 分别表示有效离子价和归一化能量波数特性函数, 其定义详见文献 [17, 18], 双体势的截止距离为 20 a.u. (原子单位). 运行的时间步长为 10^{-15} s.

模拟计算从 323K (Ga 熔点为 302.8K) 开始, 在该温度下让系统等温运行 100000 步, 以确保其处于平衡态, 再分别以 1.0×10^{14} , 1.0×10^{13} , 1.0×10^{12} , 1.0×10^{11} K/s 的冷却速率依次冷却到 273K, 223K, 173K, 123K, 73K, 43K 及 4K. 在每个温度下又让系统等温运行 4000 步, 每隔 200 步记录一次该系统的结构组态, 即每个原子的空间坐标, 共获得 20 组数据. 然后用 HA 键型指数^[9]、中心原子法和原子团类型指数法^[12-16]进行结构分析, 以测定各有关原子成键类型和成团类型及其指数, 再进一步探讨其微观结构的演变特性.

3. 模拟计算结果分析

3.1. 双体分布函数与结构因子分析

3.1.1. 双体分布函数与实验值的比较

考察由上述模拟所得该系统在冷速为 1.0×10^{13} K/s, 温度为 323K 时的双体分布函数 $g(r)$ 曲线, 与 Waseda 所给出的实验结果^[19]相比较, 如图 1 所示, 可以看出二者相符较好, 只是理论值的峰值强度比实验值稍高, 谷值比实验值稍低, 总体趋势是基本一致的.

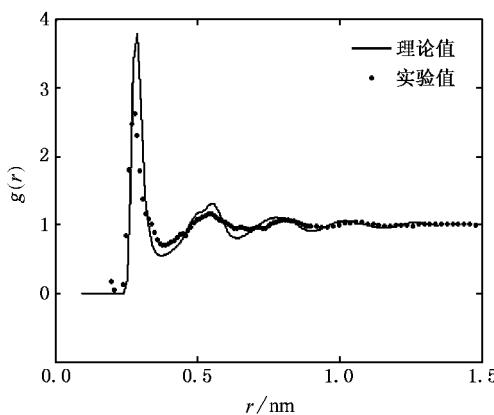


图 1 液态金属 Ga323K 的双体分布函数

3.1.2. 结构因子的反常特性

为使讨论更为深入起见, 我们再给出本文模拟

采用最快和最慢二种冷速 1.0×10^{14} , 1.0×10^{11} K/s 下的 $g(r)$ 曲线所对应的结构因子 $S(q)$ 曲线随温度的变化关系, 分别如图 2(a), (b) 所示.

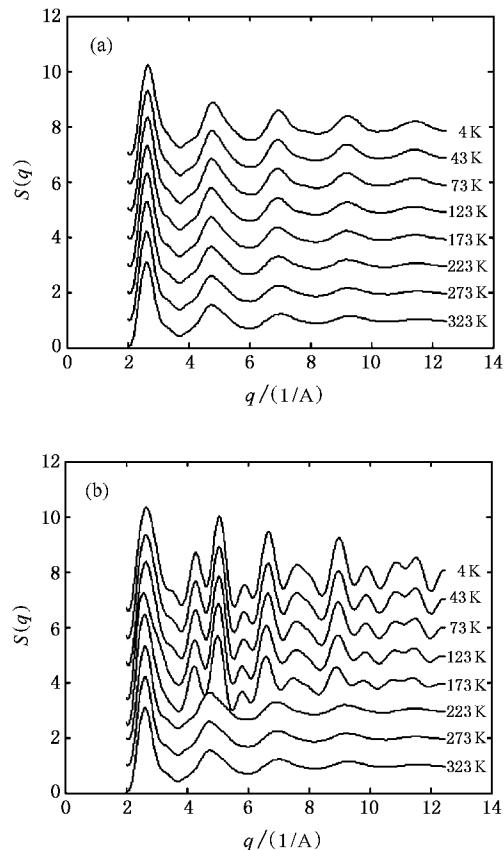


图 2 不同冷却速率下 Ga 的结构因子 $S(q)$ 曲线随温度的变化
(a) 1.0×10^{14} K/s; (b) 1.0×10^{11} K/s

由图明显可见, 它们的第一峰右侧均具有一定的肩形, 以图 2(b) 在低温时最为显著, 与我们熟知的液态金属 Al^[20]截然不同, 而与液态金属 In^[21]却非常相似. 正是这种肩形的出现, 与下面所述的 $g(r)$ 曲线分裂的两个次峰的顺序为前低后高相呼应, 从而出现新的结构特征.

3.1.3. 不同冷却速率下的双体分布函数随温度的变化

对于不同冷却速率下的双体分布函数 $g(r)$ 曲线随温度的变化关系, 如图 3 所示, 由图可见:

1) 在以 1.0×10^{14} , 1.0×10^{13} , 1.0×10^{12} K/s 的冷却速率下降时, 由图 3(a)(b)(c) 可知, 随着温度的下降, 第二峰逐渐分裂成两个次峰, 这正是非晶态金属结构的重要特征之一, 表明非晶态结构的形成. 另一方面, 这分裂的两个次峰的顺序为前低后高, 又反映了液态金属 Ga 的微观结构随温度的变

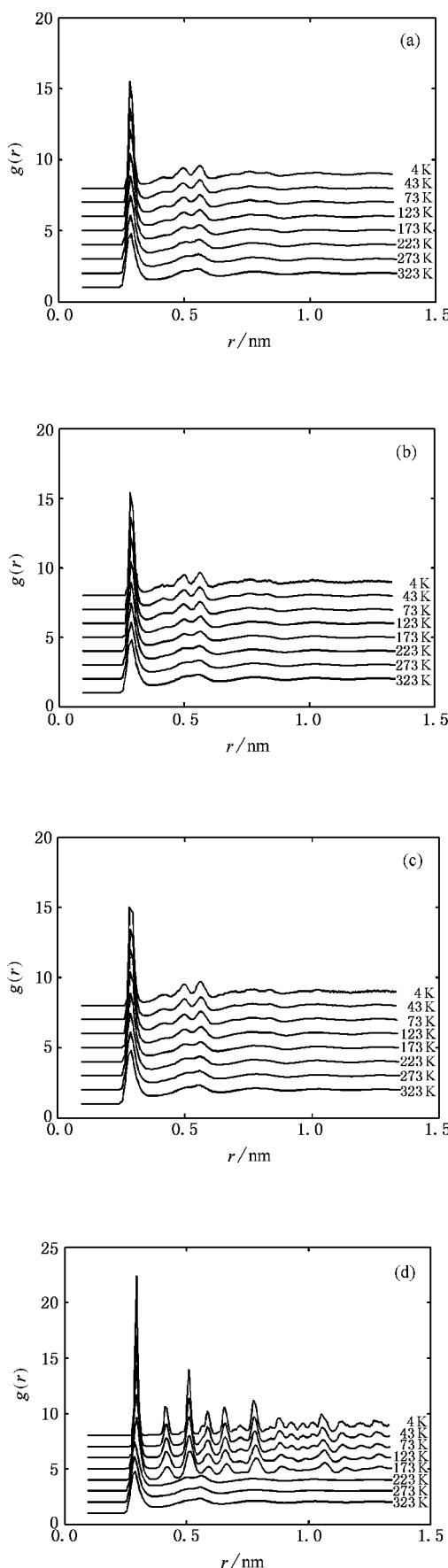


图3 不同冷却速率下Ga的双体相关分布函数 (a) 1.0×10^{14} K/s; (b) 1.0×10^{13} K/s; (c) 1.0×10^{12} K/s; (d) 1.0×10^{11} K/s (e) 1.0×10^{11} K/s

化特征与液态金属In的微观结构特征基本相同(分裂的两个次峰的顺序也为前低后高)^[22],但却与通常的晶态时为面心立方结构的金属的 $g(r)$ 曲线(如Al, 其分裂的第二峰的顺序为前高后低)^[12-15]明显不同. 且随着温度的降低, 逐渐分裂成三个清晰的次峰. 这一点, 却又是液态金属Ga的微观结构随温度的变化特征与液态金属In的微观结构特征(没有第三个次峰)^[22]的不同之处. 这也表明本模拟所采用的双体有效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信息, 也就具有一定的可信度. 但这种Ga与In在双体分布函数 $g(r)$ 曲线上的差别, 在结构因子 $S(q)$ 曲线上是如何具体反映的, 还有待进一步研究.

2)当温度以 1.0×10^{11} K/s 速率下降时, 由图3 (d)可知, 双体分布函数的第二峰出现许多尖锐小峰, 表明在此冷却速率下得到的固态已经明显晶化. 其结晶转变温度 T_c 应在 223—173K 之间, 约为 198K. 为证实这一点, 我们进一步给出以同一冷速在 223—173K 之间的 $g(r)$ 曲线, 如图3(e)所示, 明显可见, 其结晶转变温度的确处于 193—203K 之间. 从文献[8]可知, 当冷却速率为 3.38×10^{11} K/s 和 2.01×10^{11} K/s 时, 其 T_c 分别为 100K 和 133K. 当比较这三种冷速和相应的结晶转变温度 T_c 值时, 充分证明冷却速率越慢, 结晶转变温度越高.

3)该系统的非晶形成的临界冷却速率应在 1.0×10^{12} K/s 到 1.0×10^{11} K/s 之间. 在此冷速以上形成非晶, 在此冷速以下形成晶体.

3.2. 平均原子总能量分析

当我们根据系统平均原子总能量随温度的变化关系来考察上述不同冷却速率对微观结构转变的影响时, 得到在不同冷却速率下的系统平均原子总能量随温度的变化情况, 如图 4 所示。

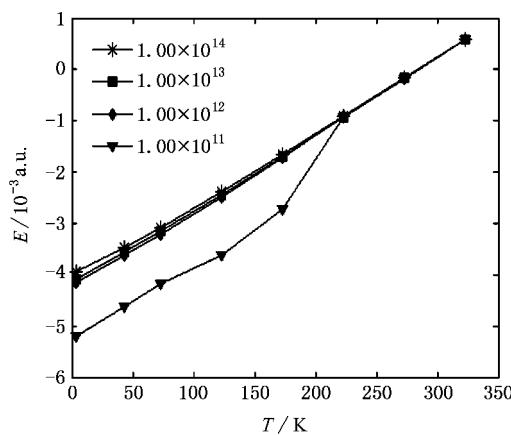


图 4 不同冷却速率下 Ga 的平均原子总能量

从图 4 可见, 在冷却速率为 1.0×10^{14} , 1.0×10^{13} , 1.0×10^{12} K/s 时, 系统的平均原子总能量 E 随温度 T 的变化是连续的, 为二级相变, 对应着系统发生非晶态转变。而在 1.0×10^{11} K/s 的冷却速率下, 系统的平均原子总能量 E 随温度 T 的变化是不连续的, 在 223K 至 173K 之间出现能量跳跃下降, 呈现一级相变的特征, 表明此时系统发生明显的晶化转变。该温度即为结晶转变温度 T_c , 其结晶转变温度 T_c 约为 198K。与前述双体分布函数分析的结果相一致。这也充分说明冷却速率对 Ga 的结构转变特性有着非常重要的影响。

3.3. 键型指数分析

由于双体分布函数 $g(r)$ 曲线只能给出系统中原子分布方面的统计信息, 为要深入了解系统的原子结构组态, 就必须对每个原子与其近邻的成键关系有进一步的了解。目前, 已经得到广泛采用的键型分析法、特别是 HA 键型指数法可以用来进行比较清晰地描述^[10-16], 本文的模拟结果, 采用该方法分析, 对于冷速分别为 1.0×10^{14} , 1.0×10^{13} , 1.0×10^{12} , 1.0×10^{11} K/s 时的成键数(按百分比%)随温度的变化关系, 如图 5(a)–(g) 所示。由图 5 可见:

1) 在以冷却速率 1.0×10^{14} , 1.0×10^{13} , 1.0×10^{12} K/s 凝固时, 其键型变化的总体趋势是一致的, 都属

于非晶化过程。其变化过程是由液态时以 1551, 1541 等与二十面体结构相关的键型为主体向固态时以 1311, 1301 等与菱面体结构相关的键型为主体的变化最为明显, 在凝固过程中对微观结构的变化起关键作用; 而以 1421, 1422 等与 fcc, 及 hcp 结构相关的键型变化为次, 最后形成以菱面体结构为主, 夹杂着与 fcc, 及 hcp 相关等其他团簇结构所构成的非晶态结构。但是在冷却速率为 1.0×10^{14} K/s 时, 在 273–223K 区间, 即有键型开始发生突变现象; 而在冷却速率为 1.0×10^{13} , 1.0×10^{12} K/s 时, 在 223–173K 区间, 1551, 1541, 1421, 1422, 1301, 1311 键型都出现了一个较大的突变; 而在 123–73K 区间, 三种冷却速率下的几乎所有键型都出现了更大的突变。这是因为, 在以冷却速率 1.0×10^{14} K/s 下降时, 由于冷速过快, 由过冷态向非晶固态转变的过程, 只有到 123–73K 区间时才能完成; 而在以冷却速率 1.0×10^{13} , 1.0×10^{12} K/s 下降时, 由于冷却速率变慢, 其由过冷态向非晶固态转变的过程, 在 223–173K 区间, 就已经出现了转化现象, 直到 123–73K 温度区间, 非晶转化过程才算全部完成, 明显呈现出两个阶段。这就进一步说明, 不同的冷速所形成的非晶态结构的组态是不相同的。

2) 在以冷却速率 1.0×10^{11} K/s 下降时, 发生明显的晶化现象, 在 223–173K 区间时, 1551, 1541, 1431 键型由 16.5%, 18.6%, 21.4% 下降为 0.1%, 4.3%, 3.5%。说明以 1551, 1541, 1431 键型的大量存在为特征的液态和非晶态结构已经基本消失; 而 1421 键型由 4.9% 突增为 66.6%, 说明此时面心立方晶体(fcc)结构组态已在体系中占据主要地位, 具有非常鲜明的晶体特征。所以, 在此冷却速率下的结晶转变温度 T_c 应在 223–173K 之间, 与前述双体分布函数分析及平均原子总能量分析的结果相一致。此外, 1311 键型由 5.5% 变为 12.9%, 而不像 1551 键型那样基本消失, 说明菱面体结构在体系中依然具有一定作用。

3) 在以冷却速率 1.0×10^{14} , 1.0×10^{13} , 1.0×10^{12} K/s 下降时, 1421 键型在 43K 时分别为 7.9%, 8.6%, 9.8%, 即随着冷却速率的降低, 1421 键型占总键型数的百分比是逐渐升高的; 1422 键型则基本上是与 1421 键型同步变化的, 只是起点较高、终点更高而已。这说明随着冷却速率的下降, 体系中已经存在着从非晶结构向晶态结构进行小量渐变的趋势。

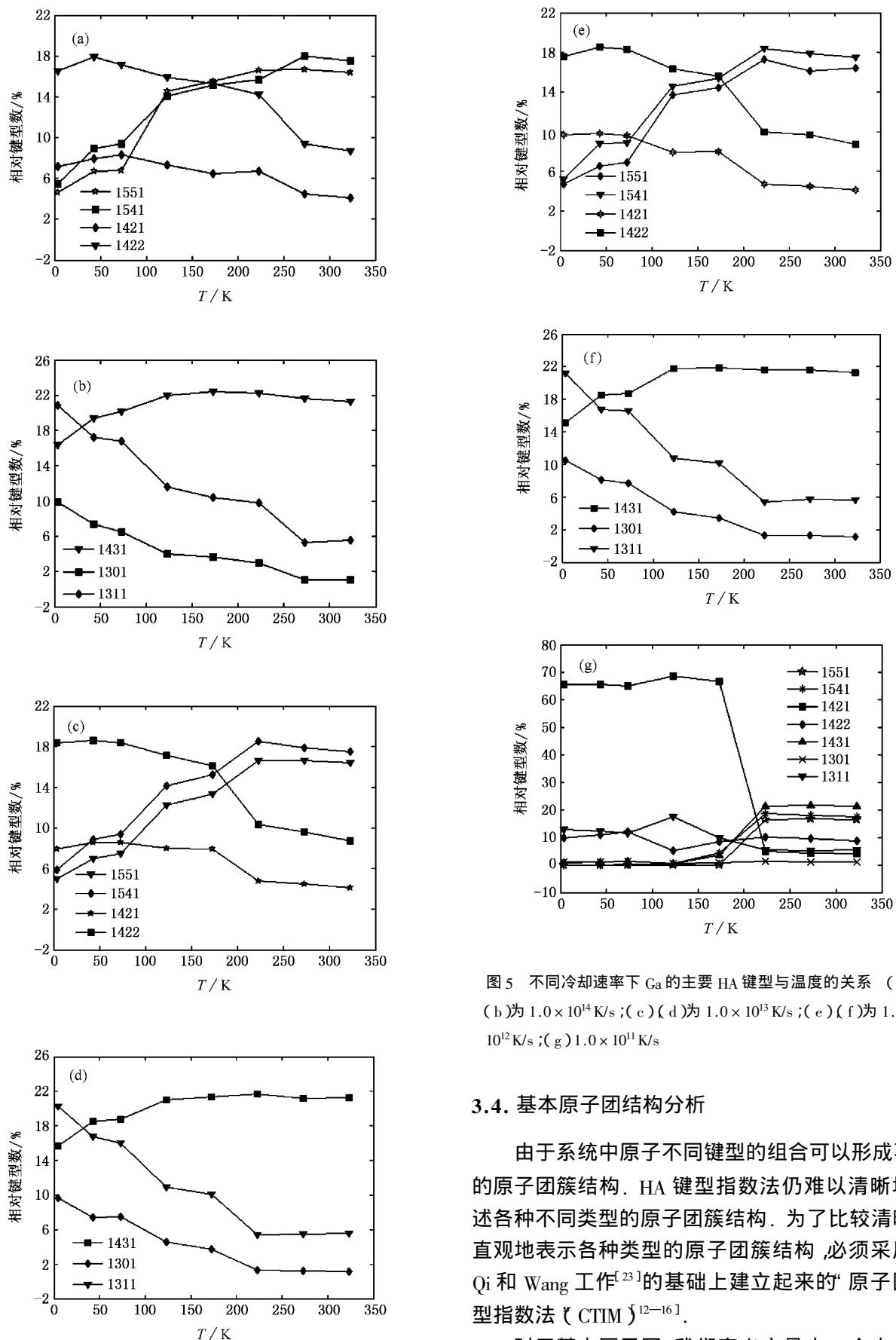


图 5 不同冷却速率下 Ga 的主要 HA 键型与温度的关系 (a), (b) 为 1.0×10^{14} K/s; (c) (d) 为 1.0×10^{13} K/s; (e) (f) 为 1.0×10^{12} K/s; (g) 1.0×10^{11} K/s

3.4. 基本原子团结构分析

由于系统中原子不同键型的组合可以形成不同的原子团簇结构, HA 键型指数法仍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, 必须采用在 Qi 和 Wang 工作^[23]的基础上建立起来的“原子团类型指数法”(CTIM)^[12-16]。

对于基本原子团, 我们定义它是由一个中心原

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该原子团的核心。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。

根据 CTIM 法,我们得到模拟系统在不同冷速下各种基本原子团的数目随温度变化的统计结果,因限于篇幅,现只将其在冷速为 1.0×10^{11} K/s 时出现晶化现象的基本原子团与温度的关系展现出来,如表 1 所示。

由表 1 明显可见,系统中各种基本原子团的数目在 223K 与 173K 之间发生了突变,全部转变为 0。这一方面说明,此时系统的确已经结晶,其晶化温度应在 223K 与 173K 之间,取中间值,为 198K,与前述结果相同。同时,也从另一方面说明,此时晶化所形成的晶体结构的基本组态已经超出现有的 CTIM 法所能检测到的基本原子团类型的范围。为要能够检测出这些新的基本原子团,必须对 CTIM 进行新的修改和完善。

在晶化前,系统中出现次数较多的基本原子团为 (12 0 12 0) (13 1 10 2) (14 2 8 4) (13 3 6 4), (14 2 8 2) 等五种类型,从系统中任意选出其结构简图,如图 6 所示。由图 6 明显可见,图 6(a) 是由一个

表 1 冷却速率 1.0×10^{11} K/s 时 Ga 的原子团簇与温度的关系

原子团簇 \ T/K	323	273	223	173	123	73	43	4
(12 0 12 0)	1.90	2.50	2.35	0	0	0	0	0
(14 0 12 2)	0.25	0.25	0.25	0	0	0	0	0
(15 0 12 3)	0	0.20	0.25	0	0	0	0	0
(13 1 10 2)	1.80	2.00	1.65	0	0	0	0	0
(14 1 10 3)	0.55	0.60	0.40	0	0	0	0	0
(15 1 10 4)	0.30	0.25	0.40	0	0	0	0	0
(16 1 10 5)	0	0.10	0.10	0	0	0	0	0
(11 2 8 1)	0.05	0.05	0.05	0	0	0	0	0
(12 2 8 2)	1.25	1.10	0.85	0	0	0	0	0
(13 2 8 3)	0.15	0.40	0.20	0	0	0	0	0
(14 2 8 4)	1.45	1.70	1.10	0	0	0	0	0
(15 2 8 5)	0.55	0.15	0.30	0	0	0	0	0
(16 2 8 6)	0.15	0.10	0.10	0	0	0	0	0
(12 3 6 3)	0.25	0.20	0.30	0	0	0	0	0
(13 3 6 4)	1.00	1.35	1.30	0	0	0	0	0
(14 3 6 5)	0.80	0.65	0.85	0	0	0	0	0
(15 3 6 6)	0	0.25	0.30	0	0	0	0	0
(16 3 6 7)	0	0.10	0	0	0	0	0	0
(12 4 4 4)	0	0.10	0	0	0	0	0	0
(13 4 4 5)	0.20	0.30	0.20	0	0	0	0	0
(14 4 4 6)	0.35	0.20	0.80	0	0	0	0	0
(15 4 4 7)	0.20	0.05	0.10	0	0	0	0	0

中心原子(灰色)与 12 个近邻原子(都与中心原子形成 1551 键型)组成相当标准的二十面体基本原子团结构(12 0 12 0),除中心原子外,它的每一个近邻原子(白色)又都有五个近邻原子(白色)与其成键形成五边形结构,整体成为一个准晶结构单元,它是目前

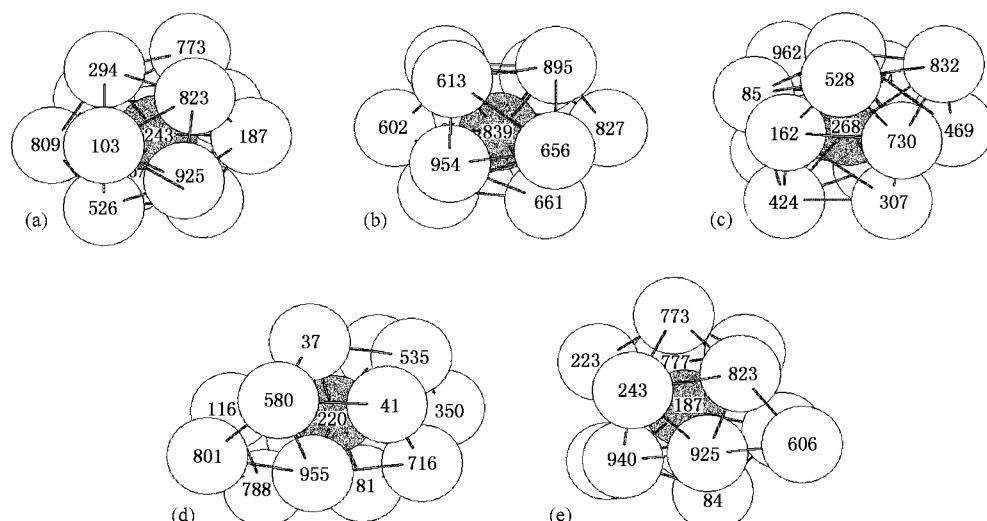


图 6 在冷速为 1×10^{11} K/s 的系统中二十面体与四种不同基本原子团结构简图(在 273K 时)(a)中心原子编号为 243 的二十面体基本原子团(12 0 12 0)(b)中心原子编号为 839 的基本原子团(13 1 10 2)(c)中心原子编号为 268 的基本原子团(14 2 8 4)(d)中心原子编号为 220 的基本原子团(13 3 6 4)(e)中心原子编号为 187 的基本原子团(12 2 8 2)

已知形成非晶结构的重要组成部分。图 6(b)是由一个中心原子(灰色)即为体心)与 13 个近邻原子(其中 1 个最近邻原子与中心原子形成 1441 键型,10 个近邻原子与中心原子形成 1551 键型,2 个近邻原子与中心原子形成 1661 键型)组成一种基本原子团结构(13 1 10 2)。以此类推,图 6(c)是由一个中心原子(灰色)与 14 个近邻原子所构成的一种基本原子团结构(14 2 8 4)。图 6(d)是由一个中心原子(灰色)与 13 个近邻原子所构成的一种基本原子团结构(13 3 6 4)。图 6(e)是由一个中心原子(灰色)与 12 个近邻原子所构成的一种基本原子团结构(14 2 8 2)。

3.5. 微观结构的可视化分析

为了在键型分析的基础上进一步探讨液态金属凝固过程中系统原子的总体分布和具体配位情况,我们采用原子标号和中心原子法,通过 Visual Basic(VB)操作系统下作图,可以非常清晰地看到不同凝固条件下的微观结构组态。为简便起见,我们只在图 7(a)(b)上分别示出系统在冷速为 1×10^{13} K/s,

温度为 123K 时和冷速为 1×10^{11} K/s,温度为 43K 时的 2D(100)截面图,图 7(c)示出 3D 菱面体结构图。由图 7(a)明显可见,系统的原子的确是处于短程有序、长程无序的非晶状态。由图 7(b)则可见,系统原子的确已经处于相当规则的结晶状态,只是在一些位置具有不同程度的缺陷而已。为更进一步确认该晶体结构的确是属于斜方晶体结构,我们在图 7(c)中展示了包含图 7(b)中显示的原子规则排列面上以标号为 206 的原子为中心的近邻原子的配位情况,可以很清晰地看到在(b)中 206 号原子的周围有 6 个近邻原子依次为 470,253,662,96,326,82 等,这些原子在(c)中仍处在同一个排列面上,且排列顺序方向也相同。但可明显看到,上层有 4 个原子依次为 970,697,887,49 堆积在所显示的上层密排面上的 6 个可堆位置中的 4 个相应位置上,形成一个非常典型的斜方(菱形)面结构;而不是像在文献[24]所研究的液态金属 Ni 凝固形成的面心立方晶态结构中,只有 3 个原子堆积在所显示的密排面上的 6 个可堆位置中的 3 个相应位置上。再仔细考察所示的密排面本身,也可清晰地看到,中心原子周围

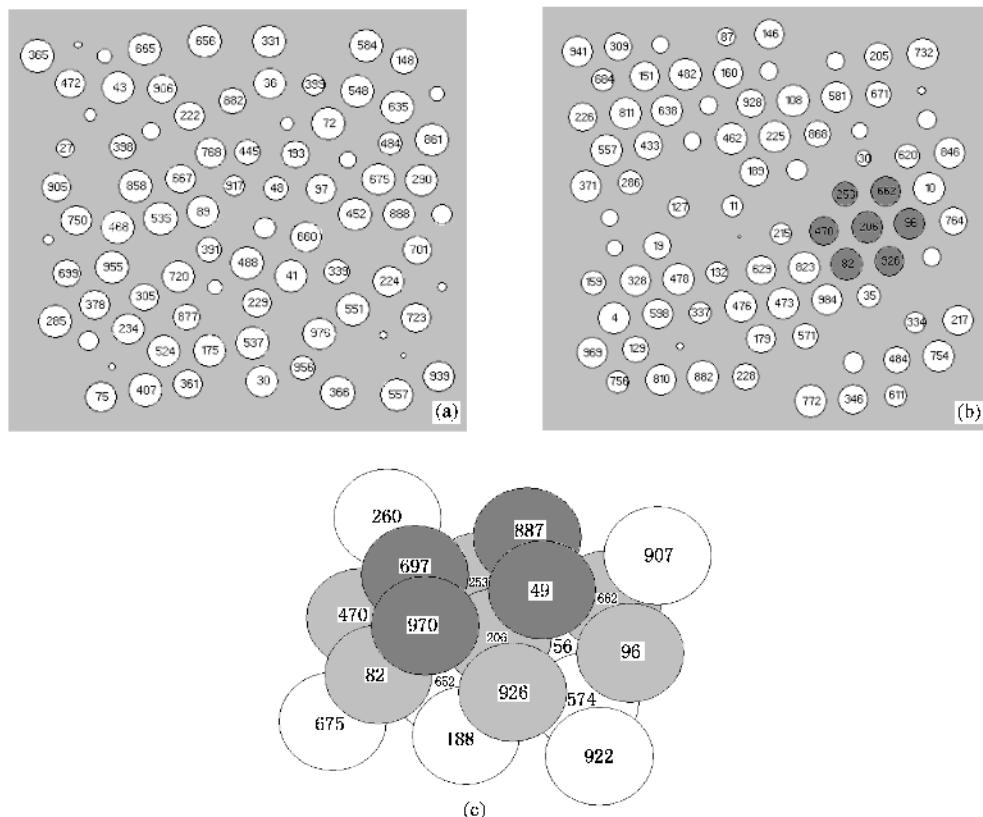


图 7 系统在不同冷速、温度下的原子分布简图 (a)冷速为 1×10^{13} K/s,温度为 123K 的 2D(100)截面图 (b)冷速为 1×10^{11} K/s,温度为 43K 的 2D(100)截面图 (c)斜方晶体的 3D 结构图

的 6 个原子的确也并不都是等距分布的,这就导致系统中斜方晶体结构的形成。这就进一步证实了系统最后的确形成以斜方晶体结构为主体的晶态结构。

在这里,需要特别指出的是本文对 Ga 的键型分析与文献 24 对 Ni 的键型分析中,形成晶体结构的特征都是体现在 1421 键型数的突然上升,直达 80% 以上。然而,在严格的晶体结构分析中,确实对应着两种不同的晶体:面心立方与斜方晶体结构。这正好说明,由于在 1421 键型的定义上只严格限定最近邻的数目,而未严格限定键长和键角,因而导致难于严格区分出面心立方与斜方晶体结构来。本文采用可视化分析,却在一定程度上弥补了 HA 键型分析法的不足。

4. 结 论

由以上分析我们可以看出:

1. 冷却速率对 Ga 的凝固特性有着极其重要的影响,在对 323K 液态 Ga 进行凝固时,冷却速率大于 1.0×10^{12} K/s 时,将得到非晶态结构;冷却速率小于 1.0×10^{11} K/s 时,将发生结晶。非晶形成的临

界冷却速率在 1.0×10^{12} K/s 到 1.0×10^{11} K/s 之间。在结晶时,冷却速率越慢,结晶转变温度 T_c 越高。在冷却速率为 1.0×10^{11} K/s 时,其结晶转变温度 T_c 约为 198K。

2. 在 Ga 由液态向非晶态转变的过程中,以 1311,1301 等与菱面体结构相关的键型的变化最为明显,以 1421,1422 等与 fcc 及 hcp 结构相关键型变化为次,在凝固过程中对微观结构的变化起关键作用。最后形成以菱面体结构为主,夹杂着立方体、六角密集等其他团簇结构所构成的非晶态结构。

3. 在 Ga 由液态向晶态转变的过程中,与 fcc 及斜方晶系结构相关的 1421 键型在 T_c 以下时占据支配地位,具有明显的晶体特征。经可视化分析,可以确认此系统的结晶主要为斜方晶系结构。

4. 平均原子总能量分析可以用来判断其凝固过程是晶化过程还是非晶化过程,将为研究液态金属的微观结构演变提供新的工具。

5. 利用 Ga 的这种模拟结果,可以合理地预测 Ga 在不同冷却速率下凝固过程的微观结构演变情况,这对如何控制冷却速率获得性能优良的材料有重要的指导意义。

-
- [1] Bererhi A, Bosio L, Cortes R 1979 *J. Non-Crystalline Solids* **30** 253
- [2] Wei S Q, Liu W H, Hu T D *et al* 1998 *Chin. Sci. Bull.* **43** 396
- [3] Hosokawa S, Pilgrim W C, Sinn H *et al* 2004 *Physic B* **350** 262
- [4] Tsay S F, Wang S 1994 *Phys. Rev. B* **50** 108
- [5] Tsay S F 1994 *Phys. Rev. B* **50** 103
- [6] Liu R S, Li J Y, Du H Q 1993 *Chin. Sci. Bull.* **38** 1861
- [7] Yi S P, Liu R S, Dong K J 2001 *Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics* **18** 203 (in Chinese) [易双萍、刘让苏、董科军 2001 原子与分子物理学报 **18** 203]
- [8] Yi S P, Liu R S, Li J Y *et al* 2001 *The Chinese Journal of Nonferrous Metals* **11** 257 (in Chinese) [易双萍、刘让苏、李基永等 2001 中国有色金属学报 **11** 257]
- [9] Honeycutt J D, Andersen H C 1987 *J. Phys Chem.* **91** 4950
- [10] Li H, Pederiva F 2003 *Phys. Rev. B* **68** 054210
- [11] Wang L, Li H, 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]
- [12] Liu R S, Li J Y 1995 *Acta Phys. Sin.* **44** 1582 (in Chinese) [刘让苏、李基永 1995 物理学报 **44** 1582]
- [13] Liu R S, Li J Y, Dong K J *et al* 2002 *Mater. Sci. Eng. B* **94** 141
- [14] Zheng C X, Liu R S, Dong K J *et al* 2002 *Science in China A* **45** 233
- [15] Dong K J, R S Liu, Yu A B *et al* 2003 *J. Phys : Condens. Matter.* **15** :743
- [16] Liu R S, Dong K J, Li J Y *et al* 2005 *J. Non-Crystalline Solids* **351** 612
- [17] Wang S, Lai S K 1980 *J. Phys. F* **10** 2717
- [18] Li D H, Li X R, Wang S 1986 *J. Phys. F* **16** 309
- [19] Waseda Y 1980 *The structure of Non-crystalline Materials* (New York: McGraw-Hill) 270
- [20] Liu R S, Qi D W, Wang S 1992 *Phys. Rev. B* **45** 451
- [21] Liu R S, Wang S 1992 *Phys. Rev B* **46** 12001
- [22] 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]
- [23] Qi D W, Wang S 1991 *Phys Rev B* **44** 884
- [24] Zhang A L, Liu R S, Liang J *et al* 2005 *Acta Phys. Chim. Sin.* **21** 347 (in Chinese) [张爱龙、刘让苏、梁 佳等 2005 物理化学报 **21** 347]

A simulation study for the effects of cooling rate on evolution of microstructures during solidification of liquid metal Ga^{*}

Zhang Hai-Tao Liu Rang-Su[†] Hou Zhao-Yang Zhang Ai-Long Chen Xiao-Ying Du Sheng-Hai

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

(Received 25 July 2005 ; revised manuscript received 4 November 2005)

Abstract

A simulation tracing study has been performed for the effects of different cooling rates on the evolution of microstructures during solidification process of liquid metal Ga by means of molecular dynamics method. The bond-types and basic cluster structures of metal Ga have been analyzed by using HA bond-type index method and cluster-type index method. It has been found that the cooling rate plays an important role to the microstructures in the solidification processes. At the cooling rates of 1.0×10^{14} K/s, 1.0×10^{13} K/s and 1.0×10^{12} K/s, the amorphous structures would be formed in the system with the rhombohedron related to 1311, 1301 bond-types as the main body, and coexist with the fcc, hcp and other structures; at the cooling rate of 1.0×10^{11} K/s, crystallization would take place in the system, the crystalline transition temperature T_c being about 198K, and the lower the cooling rate, the higher the T_c . The crystal would have the orthorhombic structure related to 1421 bond-type (determined by visualized method) as the main body. This gives us a new way for researching the crystalline transition processes of liquid metals.

Keywords : liquid metal Ga, solidification process, microstructure transition, molecular dynamics simulation

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

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

[†] E-mail : rsliu@mail.hunu.edu.cn