

相场晶体法模拟过冷熔体中的晶体生长*

邢 辉 陈长乐[†] 金克新 谭兴毅 范 飞

(西北工业大学凝聚态结构与性质陕西省重点实验室, 西安 710072)

(2010 年 1 月 11 日收到; 2010 年 3 月 1 日收到修改稿)

利用相场晶体(phase-field crystal)模型,采用有限差分法,模拟了过冷熔体中晶体生长过程,研究了不同相区、不同过冷度对晶体生长过程的影响.结果表明,在共存区中,随着演化的进行,晶体生长被抑制,液-晶边界层逐渐变厚;在单相区中,随着过冷度的增大,晶态区面积显著增加,液-晶边界层逐渐变薄.晶体生长速度和过冷度成近似线性的关系.

关键词: 相场晶体, 自由能函数, 过冷熔体, 晶体生长

PACC: 7865E, 8110F, 6470D

1. 引 言

相场法(phase field method)^[1]以 Ginzburg-Landau 相变理论为基础,利用连续性场的动力学模型,模拟相变过程中微观组织的演化和特性,在非平衡微观组织结构形成的研究中取得了显著的进展.由于相场法避免了跟踪复杂的界面,已被广泛应用于模拟 Spinodal 重熔,有序-无序相变动力学,纯金属和多元合金凝固等^[2]相变现象.朱昌盛等人^[3]使用耦合溶质场的相场模型,研究了 Ni-Cu 二元合金枝晶生长过程中固相溶质扩散系数 D_s 对枝晶形貌和微观偏析等方面的影响.龙文元等人^[4]基于 Ginzburg-Landau 理论发展了一个与 WBM 模型和 KKS 模型一致的新相场模型,并利用该模型模拟了二元合金凝固过程中的等轴枝晶生长过程.朱耀产等人^[5]利用多相场模型模拟了在三种变速条件下共晶合金定向凝固的生长过程.然而,传统的相场法却存在一个明显的缺陷:模型方程是建立在平衡态均匀场的基础上的,这样就势必忽略了许多由周期性结构产生的物理特性.为了回避这一问题,研究者对传统相场方法进行扩展,将一个或多个辅助场引入方程中,用来描述位错压力场^[6]、连续张力场^[7]、取向场^[8]等.虽然这些方法在多晶凝固等方面表现出了较强的实用性,但它们仍在弹性塑性形

变、扩散相变动力学、各项异性表面能效应、热力学一致性模型等方面遇到了挑战.

近年来,由相场方法发展而来的相场晶体(phase-field crystal, PFC)^[9]方法逐渐受到研究者的关注.相场晶体模型首先由 Elder 等人^[10]提出,这种方法通过自由能最小驱动的耗散动力学,描述了系统原子密度场的演化.在相场晶体模型中,构造自由能函数的序参量为局域密度,将液态密度考虑为一常数,将固态密度表示成周期性函数的形式,进而通过固态局域密度的分布表现晶体的晶格结构.这样密度场就很自然地与弹性效应、复合晶粒取向和位错的形核与运动等由周期性结构产生的物理特性产生联系. Goldenfeld 等人推导了相场晶体方程的重正化群(RG)形式^[11],并提出了基于自适应网格算法^[12]的相场晶体模型的振幅算法,使相场晶体模型具有多尺度计算的能力. Wu 等人^[13]利用相场晶体模型研究了纯材料 bcc 晶体结构的凝固过程和液/固界面平衡态的性质,并对相场晶体模型做了多尺度分析.随后, Elder 等人^[14]直接利用经典密度泛函理论推导了相场晶体的自由能简化形式及其动力学方程,并建立了基于密度泛函理论的二元合金相场晶体模型.

熔体的过冷度在凝固过程中扮演着重要角色,它不仅与晶体形核方式、生长速度密切相关,而且会直接影响到凝固微观组织的演化和形成.相场晶

* 国家自然科学基金(批准号:50331040,50702046)和西北工业大学基础研究基金(NPU-FFR-JC200821)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: chencl@nwpu.edu.cn

体法作为一种新颖的模拟凝固微观组织形成的方法,其研究多集中于过冷度相等的条件下^[9-12],而不同过冷度对晶体生长过程影响的研究鲜有报道.使用相场晶体模型研究过冷度对晶体生长的影响将有助于加深对该模型的理解,为该模型计算实际合金奠定基础.因此本文使用 Elder 等人^[9,10]建立的相场晶体模型,利用有限差分方法对过冷熔体中的晶体生长过程进行了模拟,研究了不同相区、不同过冷度对晶体生长过程的影响.

2. 相场晶体模型

相场晶体模型基于传统相场方法的思想构建,将周期性函数形式引入模型中.在这里将密度写成无量纲形式,在液态时, $\psi_l = \psi_0$;在晶态(固态)时, $\psi_s(x, y) = \psi_0 + \psi(x, y)$,其中 ψ_0 是平均密度, $\psi(x, y)$ 是与位置相关的周期性函数.依照 Elder 等人^[10]的推导,在液/晶系统中,最简单的无量纲自由能方程可以写成

$$F = \int dr \left\{ \frac{\psi}{2} [-\alpha + (1 + \nabla^2)^2] \psi + \frac{1}{4} \psi^4 \right\}, \quad (1)$$

其中 F 是自由能函数, ψ 是局域原子密度, α 为与 $(T_m - T)$ 成正比的量,即无量纲过冷度.此外,定义无量纲化学势为

$$\mu = \frac{\delta F}{\delta \psi} = -\alpha \psi + (1 + \nabla^2)^2 \psi + \psi^3, \quad (2)$$

由自由能最小驱动的耗散动力学可以得到原子密度场的演化方程是一个时间相关的 Cahn-Hilliard (CH)^[15,16] 方程,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \nabla^2 \frac{\delta F}{\delta \psi} + \zeta \\ &= \nabla^2 (-\alpha + (1 + \nabla^2)^2) \psi + \nabla^2 \psi^3 + \zeta, \end{aligned} \quad (3)$$

其中 ζ 为高斯噪声项,满足 $[\zeta(\mathbf{r}_1, t_1)\zeta(\mathbf{r}_2, t_2)] = D \nabla^2 \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \delta(\tau_1 - \tau_2)$. 在本文的模拟中,忽略了噪声项对晶体生长的影响.

在液态中,密度函数表示为 $\psi_l = \psi_0$,称这种密度函数表示的相为液相(liquid phase).在一维体系中,自由能函数通过 $\psi_s(x)$ 的解取得最小,其一维解在单模近似的条件下可以表示成 $\psi_s(x) \approx A \sin(qx) + \psi_0$ 的形式,称由这种一维密度函数表示的晶相(固相)为带状相(stripe phase).在二维系统中,自由能函数通过 $\psi_s(x, y)$ 的解取得最小,其二维解可以写成如下一般形式:

$$\psi_s(\mathbf{r}) = \sum_{n,m} a_{n,m} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} + \psi_0, \quad (4)$$

其中 $\mathbf{G} \equiv n\mathbf{b}_1 + m\mathbf{b}_2$, \mathbf{b}_1 与 \mathbf{b}_2 为倒格矢.对于面心立方晶体(fcc) (111) 面的格子,倒格矢可以写成如下形式:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= \frac{2\pi}{a} (\sqrt{3}/2 \mathbf{i} + \mathbf{j}/2), \\ \mathbf{b}_2 &= \frac{2\pi}{a} \mathbf{j}, \end{aligned} \quad (5)$$

在单模近似的条件下,将(5)式代入(4)式中,可以得到二维体系中晶态(固态)无量纲局域密度的解

$$\begin{aligned} \psi_s(\mathbf{r}) &= A_l \left[\cos(qx) \cos\left(\frac{qy}{\sqrt{3}}\right) + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{2qy}{\sqrt{3}}\right) \right] \\ &+ \psi_0. \end{aligned} \quad (6)$$

把这种二维密度函数表示的晶相(固相)称为六角相(hexagonal phase),这样就得到了六角形点阵结构的二维密度函数表达式.将密度函数的表达式代入自由能函数表达式(1)式中,并对 A_l 和 q 取最小,得到液相、带状相和六角相的自由能表达式.使用公切线法计算共存相区域,可以得到二维相场晶体相图^[9,10].图1是二维相场晶体模型的 α - ψ_0 相图,由于相区关于纵坐标轴对称,图中只显示了 ψ_0 大于 0 的相区,其中共分为五个对称的区域,液相区(L)、带状区(S)、六角相区(H)以及液相-六角相(H-L)、六角相-带状相(H-S)两个共存区.

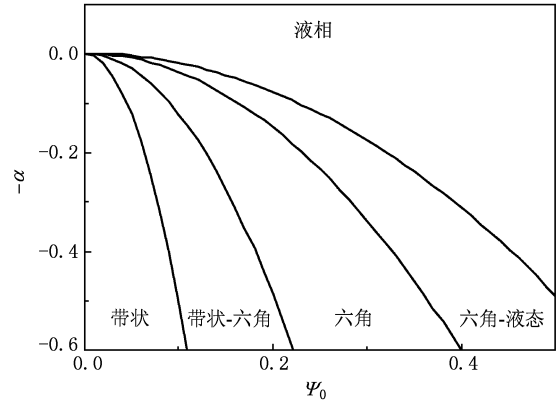


图1 在单模近似下二维相场晶体 α - ψ_0 相图

3. 计算方法

3.1. 数值计算方法

对控制方程均采用有限差分法进行离散,对时

间的离散使用 Euler 离散格式,对所有的拉普拉斯算子使用九点离散格式.对时间的离散格式可以写成

$$\begin{aligned} \psi_{i,j}^{n+1} = & \psi_{i,j}^n + (1 - \alpha) \nabla^2 \psi_{i,j}^n + 2 \nabla^4 \psi_{i,j}^n \\ & + \nabla^6 \psi_{i,j}^n + \nabla^2 (\psi_{i,j}^n)^3, \end{aligned} \quad (7)$$

对所有的含有拉普拉斯算子的项使用九点离散格式

$$\begin{aligned} \nabla^2 f_{i,j}^n = & [(f_{i+1,j}^n + f_{i-1,j}^n + f_{i,j+1}^n + f_{i,j-1}^n) / 2 \\ & + (f_{i+1,j+1}^n + f_{i-1,j+1}^n + f_{i+1,j-1}^n + f_{i-1,j-1}^n) / 4 \\ & - 3f_{i,j}^n] / (\Delta x)^2. \end{aligned} \quad (8)$$

3.2. 参数选取

本文模拟过冷熔体中纯物质六角相晶体的生长情况,并不涉及具体材料的物性参数,所用参数均已无量纲化.计算区域为均匀网格区域,即 $\Delta x = \Delta y$.将(6)式代入(1)式中,对一个周期进行积分,将所得结果分别对 A_i 和 q 取最小,得到

$$\begin{aligned} A_i = & \frac{4}{5} \left(\psi_0 + \frac{1}{3} \sqrt{15\alpha - 36\psi_0^2} \right), \\ q = & \sqrt{3}/2, \end{aligned} \quad (9)$$

通过(9)式,可知 A_i 与平均密度 ψ_0 、无量纲过冷度 α 的值相关.取空间步长为 $\Delta x = \pi/4$,时间步长为 $\Delta t = 0.0075$.依据 α - ψ_0 相图,取 $\psi_0 = 0.3$, α 分别取

0.3, 0.35, 0.4, 0.45, 0.5 和 0.55.

3.3. 初始条件和边界条件

计算区域为 200×200 的均匀网格,初始晶核设置为 10×10 的正方形固态六角相,该区域外部为液相.设该固态结晶区域的边界为 S_L ,则

$$(x, y) \leq S_L,$$

$$\psi(x, y) = A_i \left[\cos(qx) \cos\left(\frac{qy}{\sqrt{3}}\right) + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{2qy}{\sqrt{3}}\right) \right] + \psi_0,$$

$$(x, y) > S_L, \psi(x, y) = \psi_0, \quad (10)$$

在计算区域边界处,使用周期性边界条件.

4. 模拟结果与分析

本文利用 PFC 模型研究了不同相区、不同冷度条件下的晶粒生长情况,得到了单相区与两相共存区中的晶粒演化特征,并研究了过冷度对晶粒生长速度的影响.

4.1. 晶粒生长的基本特征

图2是 $\alpha = 0.45$ 的过冷熔体中晶体生长过程,图中反应了局域密度场 ψ 演化的模拟结果,其中

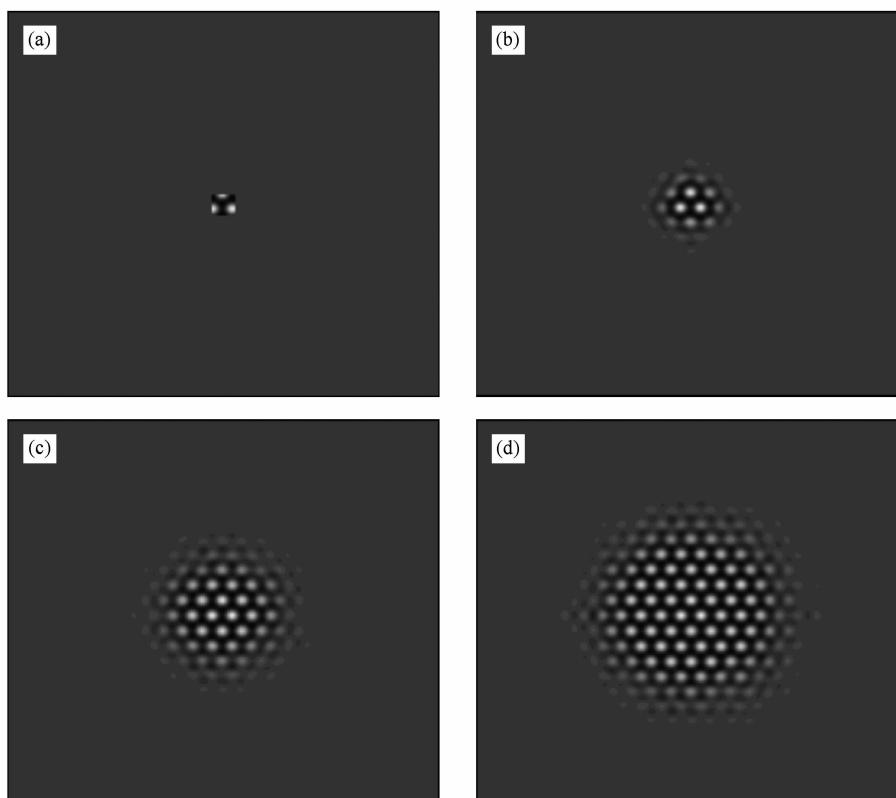


图2 $\alpha = 0.45$ 的过冷熔体中晶体生长过程 (a), (b), (c) 和 (d) 表示的演化时间分别为 0, 1000, 3000 和 5000

(a), (b), (c), (d) 表示的演化时间分别为 0, 1000, 3000, 5000.

由图 1 可知, (α, ψ_0) 参数选在相图的六角相 (hexagonal phase) 区中. 初始晶核设定在计算区域中心, 它包含了三个不完整的原子, 如图 2(a) 所示; 经过一定时间的演化, 首先形成了完整的原子和晶格结构 (图 2(b)). 随着晶相逐渐向液相中延伸, 形成了由周围模糊的点阵结构组成的液-晶两相共存区 (图 2(c) 和图 2(d)), 即边界层, 边界层厚度约为 2—3 个原子, 在生长过程中, 边界层的原子层数近

似保持不变. 在演化中, 当局域密度的振幅达到最大值的时候, 认为该计算区域完全晶化. 随着时间的推移, 晶相不断从液相中形成, 液-晶两相共存的边界层继续扩张, 最终将形成单相晶态. 由于在各相同性条件下, 晶体各方向的生长速度相同, 因此可以通过研究中心线 ($y = 100$), 即界面法线方向上局域密度的分布来近似表示各方向上晶体的生长情况. 图 3 是中心线上各点的局域密度分布, 其中 (a), (b), (c) 和 (d) 所示的演化时间分别为 0, 1000, 3000 和 5000.

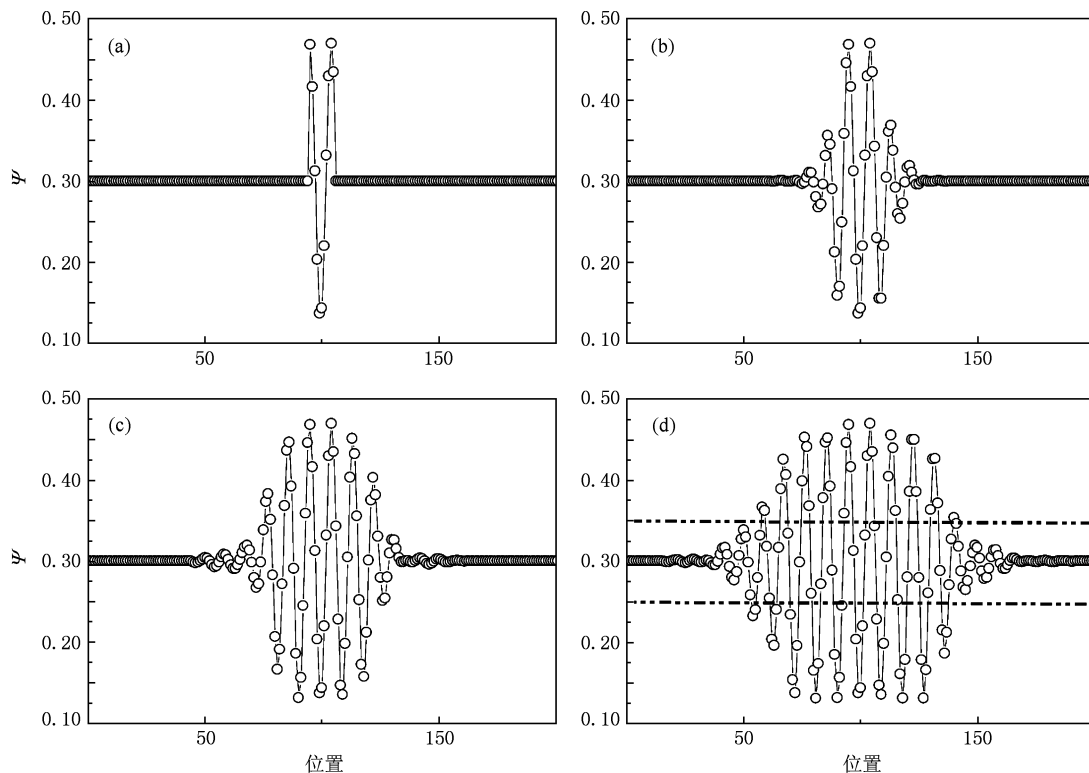


图 3 中心线上局域密度分布 (a), (b), (c) 和 (d) 所示的演化时间分别为 0, 1000, 3000 和 5000

从图 3 中可以清楚地看出计算开始时, 中心线上各点的局域密度呈中心对称形式 (图 3(a)), 并在随后的演化中保持了这样的中心对称性 (图 3(b)—(d)). 结合图 2 的唯象的描述和图 3 的定量的描述可知, 虽然在模拟中初始晶核所包含的原子并不完整, 晶体结构并不明显, 但随着时间的推移, 局域密度逐渐向对称和完整的形式演变, 并在演化过程中保持这种对称性, 在无任何外加条件的影响下, 晶体生长将按照初始晶相的原子结构进行. Ramalingam 等人^[17] 使用蒙特卡罗 (MC) 方法模拟了 Ni-Cu 合金液-晶界面 (100) 面法线方向的原子密度的分布, 如图 4 所示, 其中实线与虚线分别表示

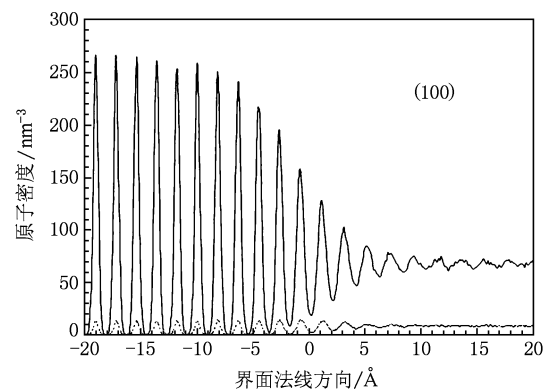


图 4 MC 方法模拟的 Ni-Cu 合金液-晶界面法线方向的原子密度的分布^[17]

Ni 与 Cu 的原子分布. 从图中可以看出, 相场晶体模型得到了与之相近的结果.

4.2. 两相共存区的晶体生长

选用位于 α - ψ_0 相图六角相-液相共存区中的参

数(0.3, 0.3)来模拟两相共存区中的晶体生长情况. 图5是两相共存区过冷熔体中晶体生长过程, 图中反应了局域密度场 ψ 演化的模拟结果, 其中(a), (b), (c)和(d)所示的演化时间分别为1000, 6000, 10000和14000.

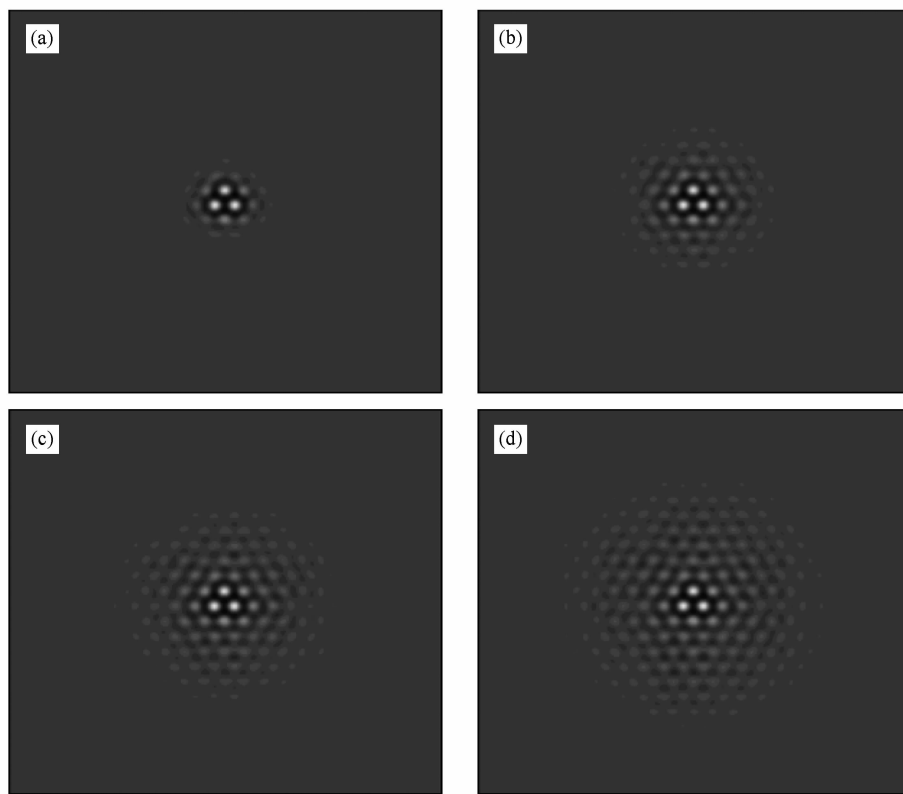


图5 两相共存区过冷熔体中晶粒生长过程 (a), (b), (c)和(d)所示的演化时间分别为1000, 6000, 10000和14000

在形成计算中心的三个完整的原子(如图5(a))后, 晶相不断向液相中扩展, 与在单相区的情况相似, 逐渐形成了由模糊的点阵结构组成的液-晶两相共存的边界层. 然而, 虽然边界层随着时间的推移不断向液相中扩展, 边界层的厚度不断增加, 但除了初始的晶相区域以外, 没有形成任何晶相区域, 如图5(b)所示. 为了更加深入地研究两相共存区中晶粒的生长情况, 进一步延长演化的时间, 如图5(c)与(d)所示, 虽然边界层继续扩大, 但晶态区的面积仍保持不变, 最终除初始晶粒外的所有区域均以两相共存的形式存在. 这表明, 在 α - ψ_0 相图的两相共存区中, 晶体的生长被抑制, 演化区域停留在两相共存的状态. 在这种情况下, 只有进一步增加过冷度, 晶体生长才能继续进行.

此外, 应该指出的是, 如果加入较大的噪声项,

边界层中的局域密度的振幅可能瞬时达到最大, 从而改变晶态区的面积, 对模拟结果产生较大的影响. 然而, 如果选择大小合适的噪声项将不会对晶态区面积和微观组织性质产生影响, Elder 等人^[9, 10]在相场晶体模型中对噪声项振幅的取值做出了一定的限制, 噪声项振幅最大不超过0.1. 在这样的噪声影响下, 噪声项的加入将不会对模拟结果造成重大影响.

4.3. 过冷度对晶粒生长的影响

图6为不同过冷度条件下经过相同的演化时间后晶粒的生长情况, 图中反应了局域密度场 ψ 的演化模拟结果, 其中(a), (b), (c)与(d)分别表示 $\alpha = 0.35, 0.4, 0.45$ 和 0.5 , 演化时间为 $t = 5000$.

从图6中可以看出, 随着过冷度 α 的增加, 晶态

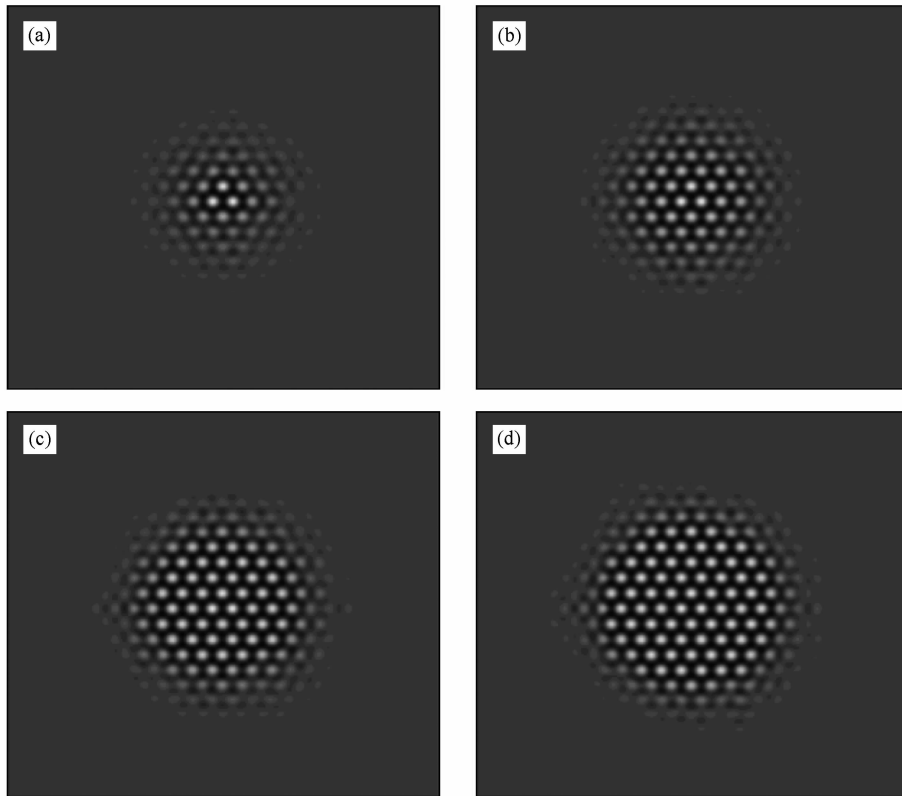


图 6 不同过冷度条件下的晶粒生长 (a),(b),(c)与(d)分别表示 $\alpha = 0.35, 0.4, 0.45$ 和 0.5 , 演化时间为 $t = 5000$

结构不会发生改变,但边界层厚度逐渐减小,完全晶化区的面积显著增大.由于晶体生长的边界是弥散的,很难确定液-晶界面的位置,假设在一个原子控制区域(9×9 的格点面积)中,如果某点的局域密度达到最大值的 $1/3$,就将该点定义为液-晶界面,

如图 3(d) 间断线所示. 通过这样的假设,可以近似得到界面的位置,由于在该计算尺度下结晶过程是各相同性的,可以用一维界面的推进速度来表示晶粒界面的生长速度.

图 7(a) 为不同过冷度条件下液-晶界面位置随

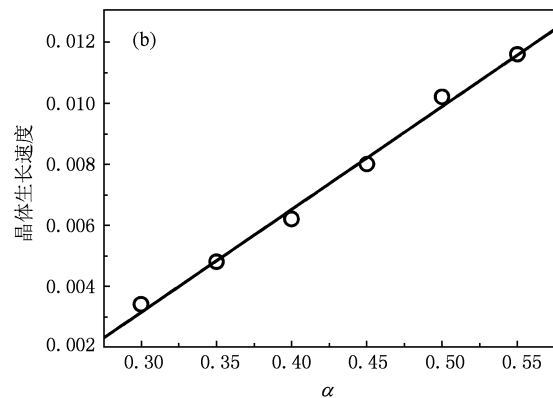
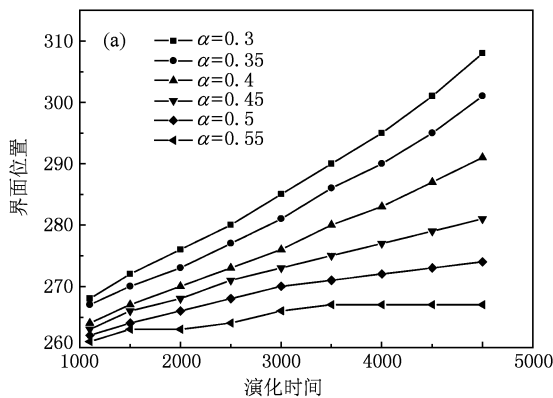


图 7 (a) 不同过冷度条件下液-晶界面位置与演化时间的关系;(b) 过冷度与平均晶体生长速度的关系

时间的变化.可以看出,在演化时间相同的情况下,随着过冷度的增加,液固界面远离计算区域中心的距离逐渐增加,即液-晶界面向液相一侧的推进速度

逐渐增大.此外还可以发现,当过冷度大于 0.35 时,界面位置随时间的变化近似线性变化,而在过冷度为 0.3 时,界面变化十分缓慢,近似趋于某一稳定

值. 这是因为当过冷度小于 0.35 时, 参数取值在相图中位于单相区, 液-晶界面不断向液相一侧推进, 晶相不断生长; 而过冷度为 0.3, 参数取值进入了两相共存区, 边界层随着时间的推移不断向液相中扩展, 但晶相面积没有增加, 由于其局域密度很难满足之前假设的界面位置的密度值, 表现为界面位置没有移动, 其值近似趋近于一个常数. 在晶体连续长大的生长方式中, 当扩散系数与温度无关时, 生长速度与过冷度的关系为 $V = \mu \Delta T$, μ 为常数, 即长大速度与过冷度成线性关系^[18]. 图 7(b) 为晶体平

均生长速度随过冷度的变化, 从图中可以看到, 生长速度随着过冷度的增加而增加, 其增长近似满足线性关系, 与过冷度较小的情况下晶体连续生长机理相符合. 模拟结果表明在过冷度较小的情况下, 较大的过冷度有利于晶体的生长, 这与已有的实验和模拟^[19,20]的结果相近, 如图 8 所示. 相场晶体模型着眼于在周期性晶格结构基础上的微观晶体的生长过程, 这将进一步丰富和加深对晶体生长的理解, 为研究晶体生长界面演化的微观机理提供了新的方法.

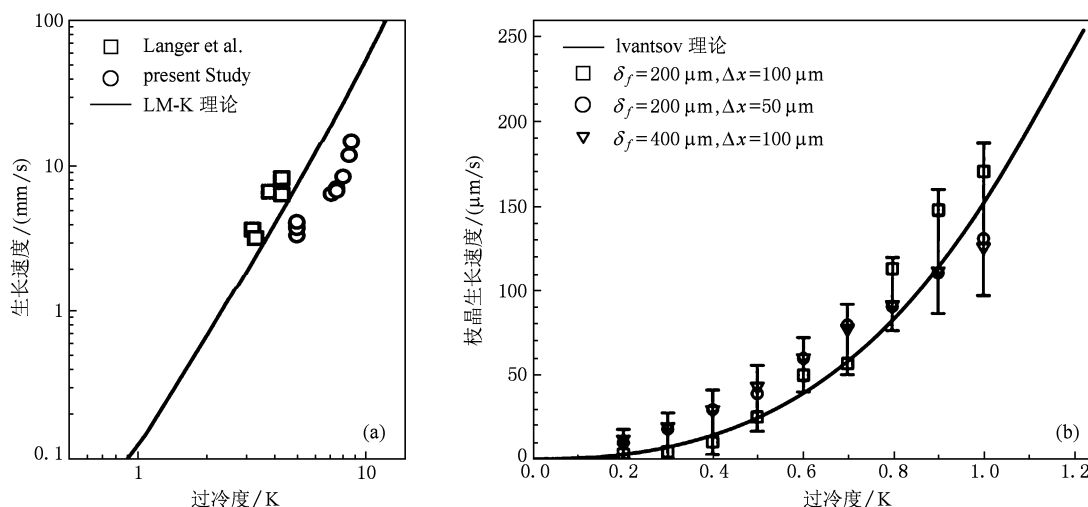


图 8 (a) 过冷液体水中枝晶生长速度^[19]; (b) 模拟得到的 SCN 枝晶生长速度与过冷度的关系^[20]

5. 结 论

本文利用相场晶体模型研究了不同相区、不同无量纲过冷度条件下的晶粒生长情况, 研究了不同相区、不同过冷度对晶体生长过程的影响, 得到了以下结论:

1. 当参数取值位于单相区时, 随着时间的推移, 晶相逐渐向液相中生长, 两相共存的边界层厚度保持不变, 晶体不断长大, 形成完整的晶格结构.
2. 当参数取值位于两相共存区时, 晶体生长被抑制, 边界层的厚度逐渐增加, 完全结晶面积始终

保持不变.

3. 在不同过冷度的条件下, 随着过冷度的增大, 演化相同时间后, 两相共存的边界层厚度变薄, 液-晶界面的推进速度随之增加, 完全结晶区域显著增大, 平均生长速度与过冷度成近似线性的关系, 这与过冷度较小的条件下晶体连续生长机理相符合.

感谢美国 Oakland 大学物理系 Ken Elder 教授与西北工业大学空间材料科学与技术实验室解文军教授的建议与讨论.

[1] Boettinger W J, Warren J A, Beckermann C, Karma A 2002 *Annual Review of Materials Research* **32** 163
 [2] Yu Y M, Yang G C, Zhao D W, Karma A, Beckermann C 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2423 (in Chinese) [于艳梅、杨根仓、赵达

文、Karma A、Beckermann C 2001 *物理学报* **50** 2423]
 [3] Zhu C S, Wang Z P, Jing T, Xiao R Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1502 (in Chinese) [宋昌盛、王智平、荆涛、肖荣振 2006 *物理学报* **55** 1502]

- [4] Long W Y, Cai Q Z, Wei B K 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 256 (in Chinese) [龙文元、蔡启舟、陈立亮、魏伯康 2005 物理学报 **54** 256]
- [5] Zhu Y C, Wang J C, Yang G C, Yang Y J 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5542 (in Chinese) [朱耀产、王锦程、杨根仓、杨玉娟 2007 物理学报 **56** 5542]
- [6] Wang Y U, Jin Y M, Cuitino A M, Khachaturyan A G 2001 *Appl. Phys. Lett.* **78** 2324
- [7] Chen L Q, Khachaturyan A G 1991 *Scr. Metall. Mater.* **25** 61
- [8] Warren J A, Kobayashi R, Carter W C 2000 *J. Cryst. Growth* **18** 211
- [9] Elder K R, Grant M 2004 *Phys. Rev. E* **70** 051605
- [10] Elder K R, Katakowski M, Haataja M, Grant M 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 245701
- [11] Goldenfeld N, Athreya B P, Dantzig J A 2005 *Phys. Rev. E* **72** 020601
- [12] Athreya B P, Goldenfeld N, Dantzig J A Greenwood M, Provatas N 2007 *Phys. Rev. E* **76** 056706
- [13] Wu K A, Karma A, Hoyt J J, Asta M 2006 *Phys. Rev. B* **73** 094101
- [14] Elder K R, Provatas N, Berry J, Stefanovic P Grant M, 2007 *Phys. Rev. B* **75** 064107
- [15] Cahn J W, Hilliard J E 1957 *J. Chem. Phys.* **28** 258
- [16] Cahn J W 1961 *Acta. Metall.* **9** 795
- [17] Ramalingam H, Asta M, Walle A, Hoyt J J 2002 *Inter. Sci.* **10** 149
- [18] Flemings M C 1974 *Solidification Processing* (New York: McGRAW-HILL) p290
- [19] Ohsaka K, Trinh E H, 1998 *J. Cryst. Growth* **194** 128
- [20] Steinbach I, Berckermann C, Kauerauf B, Li Q, Guo J 1999 *Acta Mater.* **47** 971

Simulation of crystal growth using phase-field crystal method*

Xing Hui Chen Chang-Le[†] Jin Ke-Xin Tan Xing-Yi Fan Fei

(The Laboratory of Condensed Matter Structure and Properties, School of Science, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

(Received 11 January 2010; revised manuscript received 1 March 2010)

Abstract

The phase-field crystal (PFC) model is used to simulate crystal growth from undercooled liquid by the finite difference method. The effects of phase region and undercooling on crystal growth process are analyzed. The simulation results show that crystal growth is inhibited in the region of liquid-crystal coexistence where liquid-crystal boundary becomes thicker gradually. In the single crystal phase region, crystallization is enhanced with undercooling increasing, while liquid-crystal boundary becomes thinner. It is found that there is a linear relationship between crystal growth velocity and undercooling.

Keywords: phase-field crystal, free energy function, undercooled liquid, crystal growth

PACC: 7865E, 8110F, 6470D

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 50331040, 50702046), NPU Foundation for Fundamental Research (Grant No. NPU-FFR-JC200821).

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