

快凝 $\text{Ni}_{70}\text{Ag}_{30}$ 纳米颗粒中 C15 单元的识别*江明香¹⁾ 田泽安^{2)1)†} 谢泉¹⁾ 高廷红¹⁾ 梁永超¹⁾ 陈茜¹⁾

1) (贵州大学大数据与信息工程学院, 先进光电材料与技术研究所, 贵阳 550025)

2) (湖南大学信息科学与工程学院, 长沙 410082)

(2022 年 4 月 10 日收到; 2022 年 5 月 10 日收到修改稿)

模拟计算已经成为材料科学的重要手段, 从模拟计算输出的原子坐标得到体系的结构特征是研究材料结构与性能相关性的前提. 对于晶胞只含 2—6 个原子的简单 (BCC, HCP 和 FCC) 晶体, 数值分析方法只需要确定每个原子的局域特征, 拓扑结构相同的原子相互连接即构成晶体区域. 但要确定含有几十上百个原子的晶胞, 数值方法的计算量极大. 数值分析与可视化相结合是解决此类问题的方法之一. 本文采用分子动力学方法快凝得到 $\text{Ni}_{70}\text{Ag}_{30}$ 纳米颗粒, 发现纳米颗粒含有 FCC 晶体和大量结构复杂的拓扑密堆 (TCP) 结构. 利用基于最大标准团簇的分析软件提供的多种可视分析功能, 结合晶体学相关知识, 采用拓扑构型分析思路, 确定了纳米颗粒中的 TCP 原子构成 C15 相. 本文使用的分析思路为将来开发复杂晶体结构数值识别软件提供了算法逻辑.

关键词: Laves 相, LaSC, 分子动力学模拟, 快速凝固

PACS: 64.75.Nx, 64.70.kd, 61.46.Hk

DOI: 10.7498/aps.71.20220662

1 引言

材料的性能由其微观结构决定, 结构复杂的晶体或非晶可能存在特殊物理和化学性质. 研究发现金属化合物中析出的拓扑密堆 (topologically close-packed, TCP) 相^[1,2], 对机械性能有很大影响. 非晶合金因具有高强度、高断裂韧性、高阻率和耐腐蚀性等性能也被各大领域广泛应用. 实验上利用高分辨电子显微镜、X 射线单晶衍射等方法结合晶体的对称特征, 确定了 A15 相^[3-6]、H 相^[7,8]、 μ 相^[9,10] 等 1500 多种复杂晶体相的结构单元. 然而, 由于实验技术在探测材料内部结构细节上的限制, 导致仍有大量实验样品的内部结构尚未确定; 同样, 非晶结构因缺乏平移和旋转对称性, 用传统的衍射方法获取结构信息时会出现结构信息相互重叠, 内部结构细节难以获取. 计算模拟能够突破实验技术和

成本的限制, 是确定原子体系微观结构重要且有效的手段, 但对于结构复杂的材料, 其特征结构 (最小重复) 单元涉及数十乃至上百个原子, 数值分析和三维可视化相结合是重要的技术手段.

在原子体系微观结构的数值分析中, 确定每个原子的局域结构特征是分析中程和长程结构的基础. 常用的局域结构分析方法有中心对称参数分析 (centrosymmetry parameter, CSP)^[11]、HA-Pair 分析^[12]、共有近邻分析 (common neighbor analysis, CNA)^[13] 和 Voronoi 方法^[14-16] 等, 这些方法对简单和高度对称的晶体结构十分有效, 但难以分析非晶和复杂晶体结构, 如拓扑密堆 (topologically close-packed, TCP) 晶体. 谢卓成^[17] 最近开发了一种表征 TCP 晶体结构的方法, 结合 CNA 和 CSP 来表征 Laves 晶体中原子中程序特征. 然而, 此方法不能识别复杂体系中的结构单元, 且必须预先设定模板和小心设置截断距离才能实施结构分析, 导致分

* 国家自然科学基金 (批准号: 51661005, U1612442) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: tianzean@hnu.edu.cn

析结果存在参数依赖性.

最大标准团簇分析 (the largest standard cluster analysis, LaSCA)^[18,19] 根据每个原子所处的局部特征自动确定截断半径, 能准确识别其局部结构——最大标准团簇 (the largest standard cluster, LaSC), 并根据 LaSC 类型对原子进行分类, 最近还严格定义了 TCP 团簇^[20]. TCP 团簇体现了金属玻璃的基本特征^[21], 能完美解释 PDF 曲线第一峰和第二峰分裂的结构起源^[22], 能成功描述 TCP 相中 sigma 相^[20] 和 A15 相^[23] 的结晶度, 固态非晶体系内的 TCP 原子的含量与其非晶形成能力正相关^[21] 与玻璃化转变的结束温度 T_g 随压强的变化高度一致^[24]. 简言之, LaSCA 能有效分析复杂体系中的短程序和中程序, 结合可视化软件可分析长程序结构.

本文采用分子动力学模拟 Ni₇₀Ag₃₀ 纳米液滴的快凝过程, 用 LaSCA 初步分析后发现, 得到的纳米颗粒中含有 FCC 晶体和大量排列有序, 但分布复杂的 TCP 原子. 利用可视化软件的分析功能深入分析了纳米颗粒中的 TCP 原子的空间分布特征, 确定了 TCP 原子构成 C15 晶体. 本文使用的方法可用于分析其他的复杂晶体相, 并为将来开发复杂晶体结构数值识别算法提供思路.

2 模拟条件与分析方法

2.1 分子动力学模拟

采用开源的大规模原子/分子并行模拟软件 (large-scale atomic/molecular massively parallel simulator, lammmps)^[25], 使用周期性边界条件模拟 Ni₇₀Ag₃₀ 纳米液滴的快速凝固过程. 首先将 5000 个原子 (1500 个 Ag 原子和 3500 个 Ni 原子) 放入设定好的立方盒子中, 并在颗粒表面增加 30 Å 的真空层, 确保纳米颗粒的有限边界特征同时不丢失原子, 原子间的相互作用采用 EAM 势来描述^[26], 时间步长设为 1.0 fs. 其次将系统在初始温度 2200 K 下等温弛豫 1 ns 达到平衡态. 并在 NVT 系综下, 以 10¹⁰ K/s 将系统从初始温度 2200 K 到最终温度 200 K 连续降温, 每隔 1 K 记录每个原子的空间位置和系统的其他物理量.

2.2 最大标准团簇分析法 (LaSCA)

最大标准团簇分析 (LaSCA) 克服了分析结果

对 R_c 的依赖性问题^[18]. 当两个原子的距离小于临界值 R_c 时, 互为近邻. 由一个原子 (中心原子) 及其近邻原子组成的局部结构中 (如图 1(a)), 每个近邻原子都可以与中心原子组成一个参考对 (RP), 如图 1(b) 和图 1(c) 中带圈的原子对; 然后由 RP 和它们的共有近邻 (common-neighbor, CNN) 组成中心原子近邻子团簇 (center neighbor sub-cluster, CNS), 如图 1(b) 和图 1(c) 中的结构. CNS 的拓扑结构 (如图 1(d) 和图 1(e)) 可采用 CNS 指数法— S_{ijk} 来描述, 其中“S”是 Sub-cluster 的首字母, i 为 CNN 原子总数, j 为 CNS 成键数, k 为所有 j 个键中最长链的长度. 因此, 图 1(b) 和图 1(c) 中的 CNS 可标记为 S555 和 S666.

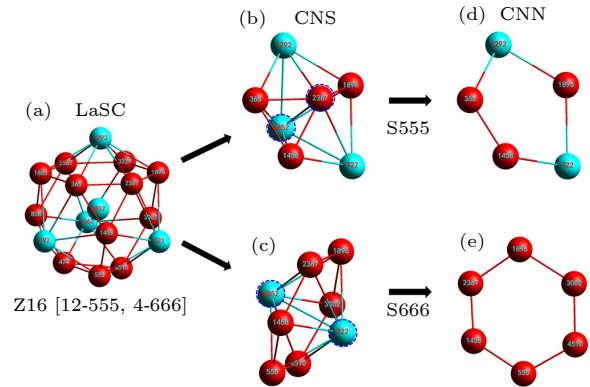


图 1 LaSC 结构特征示例 (a) 以一个中心原子 (4852) 和它的 16 个近邻原子组成的 Z16[12-555, 4-666] LaSC; (b) S555 由 4852 和 2367 组成的根原子对和 5 个 CNN (d) 组成; (c) S666 由 4852 和 322 组成的根原子对及其 6 个 CNN (e) 组成 Fig. 1. A sample for LaSC structural features: (a) a Z16[12-555, 4-666] LaSC composed of a central atom (labelled 4852) and 16 neighbors; (b) a S555 composed of a bonded reference pair (labelled 4852 and 2367) and 5 CNNs (d), a CNS of S666 (c) and its topology represented by 6 CNNs (e).

显然, 随着 R_c 的增加, 每个原子的近邻数目会增多, 中心原子与近邻原子之间的成键数目增加并变得复杂. 当 R_c 超出某一临界值时, 会出现多键点 (multi-bonded point, MBP) 和公有近邻子环 (common neighbor sub-ring, CNSR), 破坏 CNS 指数与其对应空间结构的一一对应关系. 既没有 MBP 也没有 CNSR 的 CNS 称为标准 CNS, 如果一个团簇中的所有 CNS 都是标准 CNS, 就称此团簇为标准团簇 (standard cluster, SC); 以一个原子为中心可以找到多个 SC, 但足够大的 R_c 将破坏 SC 的条件, 因此每个原子周围的最大标准团簇 (LaSC) 是唯一的, 可以通过某种算法唯一地识别表征^[18].

一个标准团簇可以用由 CNS 的种类和数量构成的二元组的集合表示, 如图 1(a) 以 4852 为中心原子和它的 16 个 CNN 组成的 LaSC, 由 12 个 S555 和 4 个 S666 组成, 记为 [12-555, 4-666]. 类似地, 二十面体 (ICO)、面心立方 (FCC)、体心立方 (BCC) 则分别用 [12-555], [12-421], [6-444, 8-666] 来表征. LaSCA 可标定以每个原子为中心的 LaSC 类型, 因此体系内的原子可根据 LaSC 种类进行分类, 如 ICO LaSC 和 FCC LaSC 中心原子分别称之为 ICO 原子和 FCC 原子.

至少含有一个 S555, 且仅由 S444($\times n_4$), S555 ($\times n_5$) 和 S666($\times n_6$) 三类 CNS 组成的 LaSC 称为拓扑密堆团簇 (TCP LaSC)^[20]. TCP LaSC 都是致密的局域结构, 其内部只有四面体间隙, 广泛存在于 TCP 晶体^[27,28] 和金属玻璃中. 由欧拉公式 ($V + F - E = 2$) 很容易证明 $2 \times n_4 + n_5 = 12$. 由于 $n_5 > 0$, 所以 n_4 只能取 6 个值 ($n_4 < 6$); 因此, 每个 TCP LaSC 都可简单、清晰、唯一地由一个字母

和一个整数组成的 TCP 指数“ Ln ”表示. 其中“ L ”用来表示 S444 的个数, 当 $n_4 = 1-5$ 时, “ L ”分别为 A—E, n_4 为 0 时字母“ L ”为 Z; “ n ”表示团簇中心原子数的配位. 根据定义, 图 1(a) 中的 [12-555, 4-666] 是一种 TCP LaSC, 可记为 Z16; ICO 结构 [12-555] 为 Z12.

以 LaSC 为核心, 本团队自主开发了可视化分析软件, 本文后续分析中的数据和图片均由该软件获得.

3 结果和讨论

3.1 相变与结构

平均原子势能随温度的变化 ($E-T$) 曲线能简单直观地反映相变的初步特征^[29]. 如图 2(a) 所示, $\text{Ni}_{70}\text{Ag}_{30}$ 纳米颗粒快速凝固过程的 $E-T$ 曲线上有两个明显的突变点, 表明发生了一级相变. 图 2(b) 显示, FCC, Z16 和 Z12 原子数量百分比在相变期间急剧增加, 200 K 时总量大于 65%.

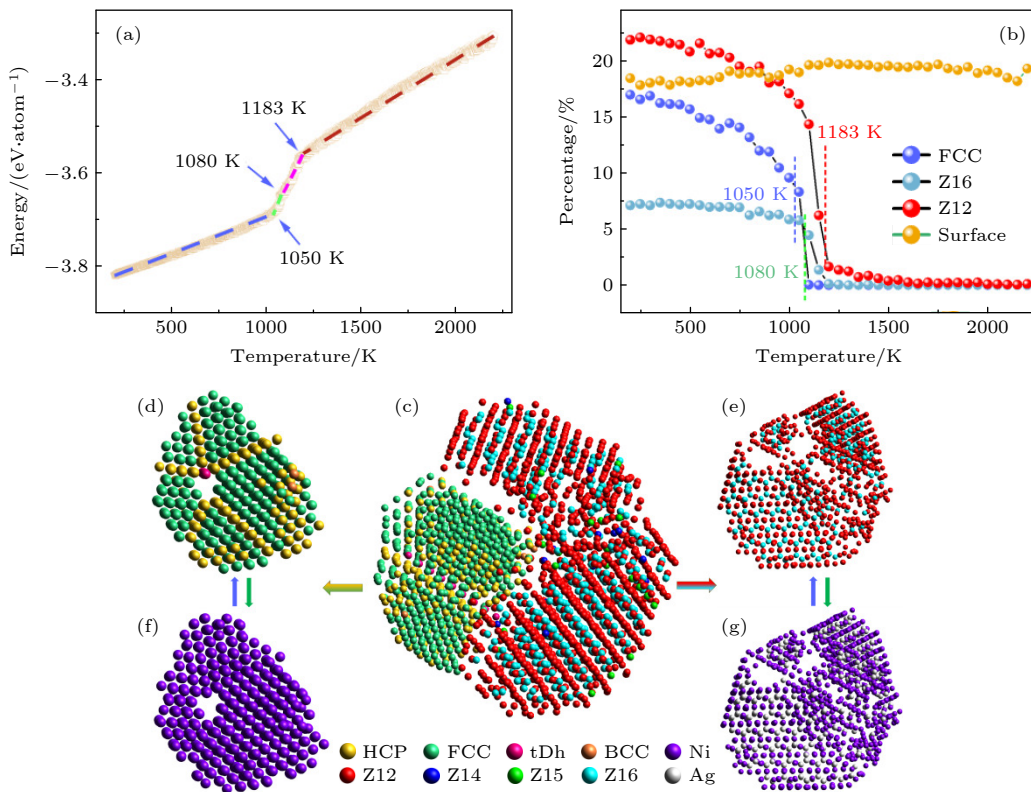


图 2 $\text{Ni}_{70}\text{Ag}_{30}$ 纳米液滴凝固过程中 (a) 平均原子势能和 (b) 原子数量百分比随温度的变化, 以及 200 K 时 (c) 纳米颗粒的结构分解, (d) FCC 晶区和 (e) TCP 晶区. 对 (d) 和 (e) 中的晶区按原子元素分类得到 (f) 和 (g)

Fig. 2. (a) The average atomic potential energy and (b) atomic number percentage as a function of temperature for $\text{Ni}_{70}\text{Ag}_{30}$ nanoparticles. (c) The structural decomposition of nanoparticles, (d) FCC region and (e) TCP region at 200 K. The element-based color encoded versions (f) and (g) to the FCC and TCP regions, respectively.

图 2(c) 中 200 K 时的纳米颗粒可以分为主要由 Ni 原子构成的 FCC 晶体区 (图 2(d)) 和主要由 Z12 和 Z16 原子组成的 TCP 晶体结构, 如图 2(e). FCC 晶区具有五重对称性, HCP 原子构成孪生共格界面, 但是 TCP 晶区的晶体类型需要深入分析才能确定. 另外, 从图 2(f) 可以看到, FCC 晶体完全由 Ni 原子构成, 不含 Ag 原子, 而图 2(g) 显示 TCP 晶体由 Ni 和 Ag 两种原子构成.

3.2 TCP 晶体相结构分析

仅仅使用数值计算来确定复杂的拓扑密堆晶体的结构单元极其困难, 借助具有分析功能的可视化软件可大大降低工作的难度. 本文使用基于最大标准团簇分析法的可视化软件结合直觉思维, 确定 TCP 晶体的结构单元. 首先研究此 TCP 相主要构成元素 (Z12 和 Z16 原子) 的空间分布特征. 设置“同类直连”搜索方式, 然后以位于 TCP 区域中间位置编号为 3659 的 Z12 原子和编号为 4852 的 Z16 原子为中心, 连续两次搜索“当前近邻”; 并将“原子着色”设置为“LaSC 类型”, 将 Z12 和 Z16 原子分别设置为红色和青色, 得到图 3 所示的结果.

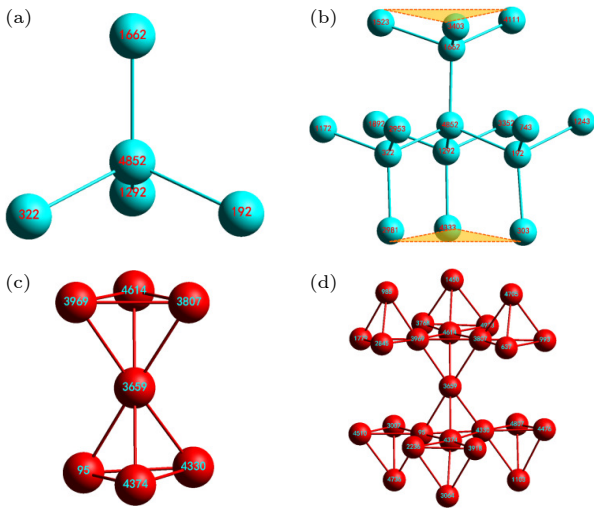


图 3 Z16 和 Z12 原子的空间分布特征. Z16 原子 (4852) 为中心, 包含 (a) 第一近邻和 (b) 第二近邻的结构; Z12 原子 (3659) 为中心, 包含 (c) 第一近邻和 (d) 第二近邻的结构. 图 (b) 中两个黄色三角形相互平行但取向相反

Fig. 3. The spatial distribution characteristics of Z16 and Z12 atoms. The structures composed of Z16 atoms, including (a) the nearest neighbors and (b) the second neighbors. The structures composed of Z12 atoms, including (c) the nearest neighbors and (d) the second neighbor. The two yellow triangles in panel (b) are parallel but opposite.

图 3(a) 显示, 每个 Z16 原子有 4 个 Z16 近邻, 构成典型的四面体结构, 图 3(b) 进一步明确 Z16 原子占据闪锌矿晶体的点阵位置^[30]; 但是图 3(c) 和图 3(d) 显示 Z12 原子在空间的分布没有构成简单晶体结构. 因此 Z16 原子的分布具有空间平移对称性, 可构成 TCP 晶体骨架.

3.3 确定晶胞骨架

继续图 3 的方式, 只能得到具有中心的壳层性结构, 这样的结构单元难以直观体现晶体材料的平移对称性和旋转对称性. 参照闪锌矿晶胞的结构 (如图 4(a)), 通过可视化分析来确定这个 TCP 晶体相中 Z16 原子构成的骨架结构.

图 4(a) 显示, 闪锌矿晶体的晶胞包含的 18 个原子可以划分为 5 层, 结合数值分析可视化软件的逐层搜索功能, 从位于图 4(a) 第三层的原子出发, 在纳米颗粒体系内逐步筛选符合空间分布特征的其他原子, 得到 TCP 晶体的晶胞.

在图 2(c) 右下角的 TCP 区域的中心位置找到一个原子 (编号为 933), 把它定位于图 4(a) 中第三层最左侧的原子. 使用“同类直连”近邻搜索模式, 查找第一近邻得到图 4(b). 参照图 4(a), 去掉图 4(b) 左侧两个原子 2112 和 4501; 查找剩下的 3 个原子的近邻, 可得到图 4(c), 图中已经出现了 5 层原子.

在图 4(c) 中, {933, 4863, 3852, 4603, 2753} 处于晶胞的边界位置 (参照图 4(a), 下同), 且都是 4882 和 3403 的近邻原子, 可先去掉, 查找剩余 (图 4(c) 虚线框中) 4 个原子的近邻得到图 4(d).

去掉不属于本结构单元的 4 个原子得到图 4(e), 继续去掉本结构单元最外端的 5 个原子和 {1662, 2381}. 查找剩下 (图 4(e) 虚线框中) 4 个原子的近邻即可得到图 4(f). 图中从上往下 5 层各原子层依次是 {4863, 3852, 2683}, {4882, 1523}, {933, 1662, 2381, 2141}, {3403, 3381} 和 {4603, 2753, 2423}. 对照图 4(a) 和图 4(f) 可知, 长方体 8 个顶点中的 4 个还未确定, 且这 4 个顶点与晶胞内其他原子不成键, 因此不能通过简单的近邻查找来确定.

对于理想的闪锌矿, 在图 4(a) 中每层原子都处于同一平面内, 且五层原子所在的平面相互平行; 在图 4(f) 中所示的情况下只有第三层的 4 个原子中任意三个不在同一直线上, 可以用来确定平

面的方向指数. 然后按以下步骤, 确定最后 4 个顶点原子.

利用软件的“三点截面”功能, 以原子{933, 1662, 2381}得到图 5(a) 的截面, 此时软件自动保存当前截面的方向矢量. 然后使用软件的“指数截面”功能, 指定截面的“通过颗粒”为第一层的中心原子 3852, “截取厚度 W ”取 0.5 (略大于一层原子厚度), 可得到以 3852 为中心的第一层平面内的

所有原子如图 5(b) 所示. 如图 5 中虚线框所示, {4863, 3852, 2683}在一条直线上, 与之垂直的直线上距离 3852 最近的两个原子是 2813 和 2711, 则第一层原子为{4863, 3852, 2683, 2813, 2711}. 同理, 将平面通过原子 2753, 可以得到如图 5(c) 的结果, 得到第五层原子为{4603, 2753, 2423, 322, 1132}. 至此, 得到了 TCP 相中以 Z16 原子为骨架的晶体原胞结构, 如图 6(a) 所示.

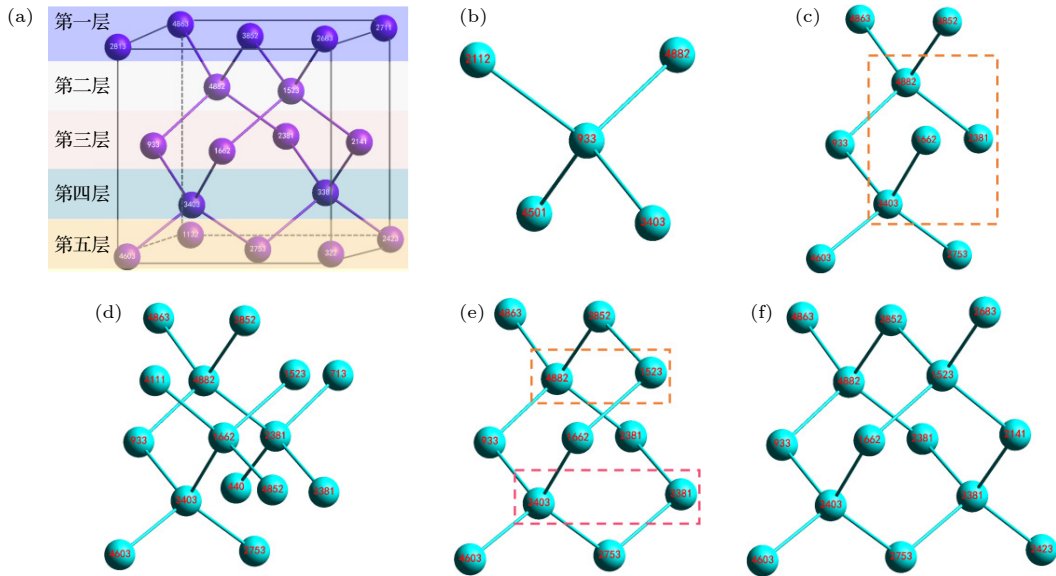


图 4 通过可视化软件的限定条件搜索功能, 确定由 Z16 原子构成的 TCP 晶体骨架结构的过程 (a) 闪锌矿晶体结构及其分层特征; (b) 原子 933 及其第一近邻; (c) 原子 4882 和 3403 及其第一近邻; (d) 原子 4882, 3403, 1662 和 2381 及其第一近邻; (e) 从 (d) 中去掉不属于本晶胞的原子后的结构; (f) 原子 4882, 1523, 3403 和 3381 及其第一近邻

Fig. 4. A step-by-step three dimensional (3D) visualization for the identification of a periodic structural unit composed of Z16 atoms through search function with specific conditions (only Z16 atoms are considered) provided by the software: (a) Crystal structure of sphalerite and its layering characteristics with a Z16 atom labelled 933 being leftmost in the third layer; (b) an atom labelled 933 and its nearest neighbors; (c) two atoms {4882, 3403} and their nearest neighbors; (d) four atoms {4882, 3403, 1662, 2381} and their nearest neighbors; (e) the structure after removing atoms (not in the unit) from (d); (f) five atoms {4882, 1523, 3403, 3381} and their nearest neighbors.

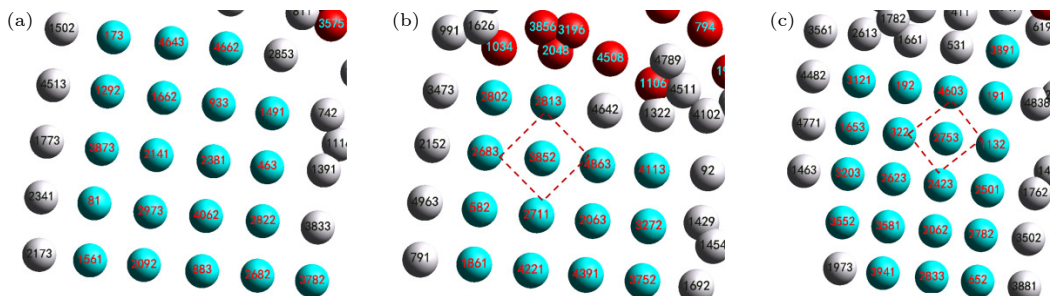


图 5 寻找闪锌矿结构单元中的 4 个顶点原子 (与内部原子不成键) (a) 第三层原子“933, 1662, 2381”所在平面; (b) 通过原子 3852 的截面; (c) 通过原子 2753 的截面. (b) 和 (c) 中虚线框涉及的原子为图 4(a) 中的第一和第五层

Fig. 5. Search for four vertex atoms in the sphalerite structural unit (not bonded to internal atoms): (a) The plane of the third layer atoms (933, 1662, 2381); (b), (c) the sections of 4852 and 2753 atoms respectively. The atoms involved in the dashed boxes in panels (b) and (c) are the first and fifth layers in Fig. 4(a).

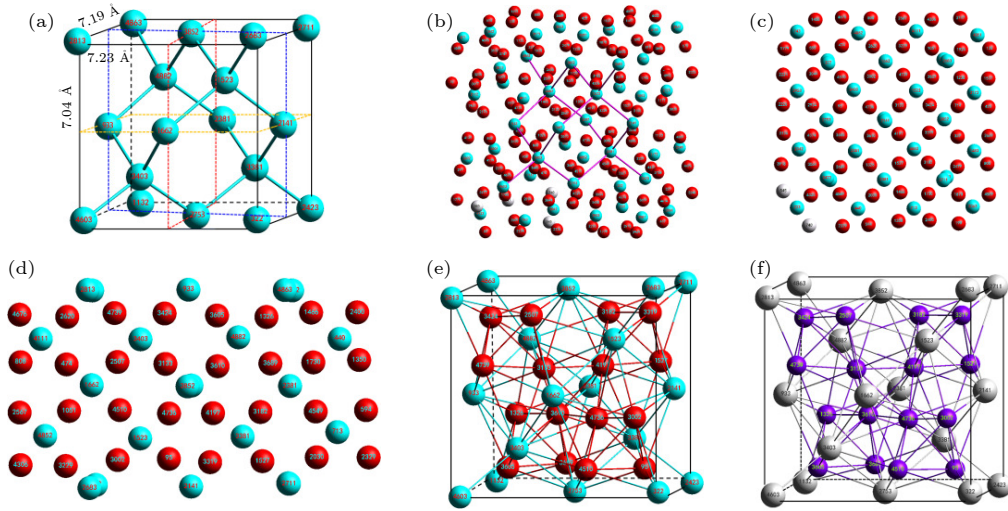


图 6 根据晶胞骨架两两正交的 3 个均分面交集获得晶胞完整结构的过程 (a) 晶胞骨架及 3 个均分面. (b) 在晶胞骨架基础上, 一次“近邻搜索”得到的结构, 截取厚度 $d \in (0.5d_0, 0.6d_0)$, d_0 为晶格常数; 在图 (b) 上依次取 (a) 中红色虚线框截面得到 (c), 取橙色虚线框截面得到 (d), 取蓝色虚线框得到 (e). (f) 基于原子元素分类得到的晶胞. (a), (e), (f) 中的黑色实线为人工添加, 以便观察, 不表示成键关系

Fig. 6. The process of obtaining the complete structure of the cell is based on the intersection of three equipartition planes of the biorthogonal cell skeleton: (a) Cell skeleton and three equipartition planes. (b) The structure obtained by one "nearest neighbor search" based on the cytoskeleton; section thickness $d \in (0.5d_0, 0.6d_0)$, where d_0 is the lattice constant. In panel (b), atoms on the red, orange, and blue dashed boxes in panel (a) are taken for the section to obtain (c), (d) and (e). (f) Crystal cell based on classification of atomic elements. The solid black lines in panels (a), (e), and (f) are added manually for observation.

3.4 晶胞内的其他原子

基于图 6(a) 的结构在“无类型限制”前提下进行一次“近邻搜索”, 可以得到图 6(b) 所示的结构. 这个结构除了包含晶胞内的所有原子外, 还包含了一些属于邻近晶胞的原子. 需要去掉这些多余的, 得到单一晶胞的结构.

理想的闪锌矿晶胞中有 3 个两两垂直的均分面, 分别是 $\{3852, 1662, 2753, 2381\}$, $\{933, 1662, 2141, 2381\}$ 和 $\{3852, 933, 2753, 2141\}$, 如图 6(a) 中红、橙、蓝虚线框所示. 晶胞内的原子到这 3 个平面的距离均小于等于晶格常数的一半, 而晶胞外的原子则大于晶格常数的一半. 因此可通过求这 3 个均分面的近邻原子的交集得到单个晶胞内的所有原子, 具体操作如下.

保持“截取厚度”为 4.0 (略大于晶格常数的一半) 和“只考虑当前显示粒子”, 在图 6(b) 的基础上, 用 $\{3852, 1662, 2381\}$ “三点截面”, 可得到图 6(c). 在图 6(c) 基础上, 使用 $\{933, 1662, 2141\}$ “三点截面”, 得到图 6(d). 同样, 在图 6(d) 基础上继续使用 $\{3852, 933, 2141\}$ “三点截面”, 得到图 6(e).

图 6(e) 所示即为 TCP 晶体的晶胞, 由图 6(f) 可知, Ag 原子占据 Z16 位置, 而 Ni 原子占据 Z12 原子位置. 其中 Z16 原子构成闪锌矿晶胞骨架, 其

间填充了 4 个 Z12 原子构成的四面体 (称为 Z12 四面体), 而且这 4 个 Z12 四面体各出一个顶点构成一个四面体, 此四面体的中心与整个晶胞的中心重合. 整个晶胞内含有 24 个原子: 顶点原子 1 个 ($8 \times (1/8) = 1$), 面心原子 3 个 ($6 \times (1/2) = 3$), 内部原子 20 个 ($34 - 8 - 6 = 20$). 且 Z12 与 Z16 原子的比例为 2:1, 根据这些特征可确定模拟得到的 TCP 相属于 Laves 相^[31,32] 中的 C15 相^[33], 且各原子的 Wyckoff 占位如表 1 所列^[34,35].

要完成本文所述的复杂晶体原胞结构的识别, 软件必须提供以下可视化分析功能: 1) 标定每个原子的局域结构特征; 2) 在可视化中显示每个原子的编号; 3) 可由用户指定需要显示的原子; 4) 在限定条件下查找近邻原子; 5) 支持多种形式的截面分析功能; 6) 支持分析过程中的逻辑与操作. 本文所述的识别过程对软件使用者的晶体学专业水平要求高, 一般从业者难以掌握, 因此需要探索更容易使用的复杂晶体结构识别方法和开发相应的可视化分析功能. 一种思路是发挥数值分析方法的优点 (擅长描述局域拓扑特征), 人工分析每一种复杂晶体的拓扑特征, 然后构造对应的拓扑规则, 由程序根据拓扑规则来识别. 另一种思路是使用 AI 技术, 构造所有已知的复杂晶体的标准结构,

表 1 C15 相中各原子的 Wyckoff 占位
Table 1. Wyckoff positions of atoms in the C15 phase.

Type	Multiplicity	Wyckoff letter	Site symmetry	Coordinates
Z16	8	<i>b</i>	$\bar{4}3m$	$\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4}\right)$
	8	<i>a</i>	$\bar{4}3m$	$(0, 0, 0) \left(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4}\right)$
Z12	16	<i>d</i>	$\bar{3}m$	$\left(\frac{5}{8}, \frac{5}{8}, \frac{5}{8}\right) \left(\frac{3}{8}, \frac{7}{8}, \frac{1}{8}\right) \left(\frac{7}{8}, \frac{1}{8}, \frac{3}{8}\right) \left(\frac{1}{8}, \frac{3}{8}, \frac{7}{8}\right)$
	16	<i>c</i>	$\bar{3}m$	$\left(\frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8}\right) \left(\frac{7}{8}, \frac{3}{8}, \frac{5}{8}\right) \left(\frac{3}{8}, \frac{5}{8}, \frac{7}{8}\right) \left(\frac{5}{8}, \frac{7}{8}, \frac{3}{8}\right)$

并进行数据增强处理, 得到带标签的含有非标准结构的数据集, 然后使用合适的神经网络模型进行有监督学习, 训练好的模型就可以用来识别数值模拟系统中的复杂晶体.

4 总 结

利用分子动力学方法, 对 $\text{Ni}_{70}\text{Ag}_{30}$ 纳米颗粒的快速凝固过程进行模拟及分析. 结果发现, 快凝得到的纳米颗粒包含不同的晶体区域, 利用基于 LaSCA 的三维可视化软件结合专业知识确定了晶体的类型, 得出以下结论.

1) $\text{Ni}_{70}\text{Ag}_{30}$ 纳米液滴的凝固经历了结晶相变, 得到含有两个晶相的纳米颗粒——Z12 和 Z16 组成的复杂晶体相, 以及五重孪生 FCC 晶相.

2) 利用基于 LaSCA 的可视化软件, 确定复杂晶体相中 Z16 原子占据闪锌矿晶体的点阵位置, 构成晶体骨架, 而 Z12 原子为间隙原子. 这两种原子构成 C15 晶体相.

3) C15 晶体相中 Ag 原子占据 Z16 位置, 而 Ni 原子占据 Z12 原子位置, 且原子数比例为 $\text{Ni}:\text{Ag} = 2:1$; 而 FCC 晶体仅由 Ni 原子组成, 不含 Ag 原子.

参考文献

- [1] Greer A L 1993 *Nature* **366** 6453
- [2] Li C, Li J C, Zhao M, Jiang Q 2009 *J. Alloys Compd.* **475** 752
- [3] Turchi P, Treglia G, Ducastelle F 1983 *J. Phys. F:Met. Phys.* **13** 2543
- [4] Hartsough L D 1974 *J. Phys. Chem. Solids* **35** 1691
- [5] Turchi P E A, Finel A 1992 *Phys. Rev. B* **46** 702
- [6] Moriarty J A 1994 *Phys. Rev. B* **49** 12431
- [7] Ye H Q, Zhu J 1989 *Acta Cryst B* **45** 1
- [8] Li D X, Kuo K H 1985 *Philos. Mag. A* **51** 849
- [9] Rehman H UR, Durst K, Neumeier S, Parsa A B, Kostka A, Eggeler G, Göken M 2015 *Mater. Sci. Eng. A* **634** 202
- [10] Rae C M F, Reed R C 2001 *Acta Mater.* **49** 4113
- [11] Kelchner C L, Plimpton S J, Hamilton J C 1998 *Phys. Rev. B* **58** 11085
- [12] Honeycutt J D, Andersen H C 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 4950
- [13] Faken D, Jónsson H 1994 *Comput. Mater. Sci.* **2** 279
- [14] Wang S Y, Tian Z A, Dong K J, Xie Q 2021 *J. Alloys Compd.* **854** 156983
- [15] Mauro N A, Wessels V, Bendert J C, Klein S, Gangopadhyay A K, Kramer M J, Hao S G, Rustan G E, Kreyssig A, Goldman A I, Kelton K F 2011 *Phys. Rev. B* **83** 184109
- [16] Voronoi G. De Gruyter 1908 *Journal für die reine und angewandte Mathematik (Crelles Journal)* **134** 198
- [17] Xie Z C 2021 *J. Mater. Res.* **36** 15
- [18] Tian Z A, Liu R S, Dong K J, Yu A B 2011 *EPL* **96** 36001
- [19] Tian Z A, Dong K J, Yu A B 2015 *Ann. Phys.* **354** 499
- [20] Wu Z Z, Mo Y F, Lang L, Yu A B, Xie Q, Liu R S, Tian Z A 2018 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **20** 28088
- [21] Lang L, Deng H Q, Tian Z A, Gao F, Hu W Y, Wen D D, Mo Y F 2019 *J. Alloys Compd.* **775** 1184
- [22] Li J J, Tian Z A 2020 *Low. Temp. Phys. Lett.* **42** 81 (in Chinese) [栗晶晶, 田泽安 2020 低温物理学报 **42** 81]
- [23] Mo Y F, Tian Z A, Lang L, Liu R S, Zhou L L, Hou Z Y, Peng P, Zhang T Y 2019 *J. Non-Cryst. Solids* **513** 111
- [24] Zhou L L, Tian Z A, Liang Y C, Mo Y F, Wang C J, Li F Z 2021 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **23** 25933
- [25] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [26] Pan Z L, Borovikov V, Mendelev M I 2018 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **26** 075004
- [27] Frank F C, Kasper J S 1958 *Acta Crystallogr.* **11** 184
- [28] Frank F C, Kasper J S 1959 *Acta Crystallogr.* **12** 483
- [29] Ahmed E, Akhter J I, Ahmad M 2004 *Comput. Mater. Sci.* **31** 309
- [30] Zheng Q, Xiao T, Tian Z A, Gao T H, Liang Y C, Chen Q, Xie Q 2021 *Cryst. Growth Des* **21** 4746
- [31] Pettifor D G, Seiser B, Margine E R, Kolmogorov A N, Drautz R 2013 *Philos. Mag.* **93** 3907
- [32] Zhu J H, Liu C T, Pike L M, Liaw P K 2002 *Intermetallics* **10** 579
- [33] Hajiw S, Pansu B, Sadoc J F 2015 *ACS Nano* **9** 8116
- [34] Kong Y Y, Duan Y H, Ma L S, Li R Y 2016 *Mater. Res. Express* **3** 106505
- [35] Ma L S, Duan Y Y, Li R 2017 *Philos. Mag.* **97** 2406

Numerical recognition of C15 unit in rapid solidification $\text{Ni}_{70}\text{Ag}_{30}$ nanoparticles*

Jiang Ming-Xiang¹⁾ Tian Ze-An^{2)1)†} Xie Quan¹⁾ Gao Ting-Hong¹⁾
Liang Yong-Chao¹⁾ Chen Qian¹⁾

1) (*Institute of Advanced Optoelectronic Materials and Technology, School of Big Data and
Information Engineering, Guizhou University, Guiyang 550025, China*)

2) (*College of Computer Science and Electronic Engineering, Hunan University, Changsha 410082, China*)

(Received 10 April 2022; revised manuscript received 10 May 2022)

Abstract

Simulation has become an important tool in materials science, it is a prerequisite to study the correlation between the structure and properties of materials, in that the structural characteristics of the system from the atomic coordinates output can be obtained by simulations. For simple (FCC, HCP, and BCC) crystals containing only 2-6 atoms, in the numerical analysis method, what needs to be determined is only the local characteristics of each atom. However, it is extremely computationally intensive to determine the cells containing tens or hundreds of atoms. The combination of numerical analysis and visualization is one of the methods to solve this kind of problem. In this work, $\text{Ni}_{70}\text{Ag}_{30}$ nanoparticles are simulated by molecular dynamics. It is found that the nanoparticles contain FCC crystals and a large number of complex topologically close-packed (TCP) structures. Using the analysis software based on the largest standard cluster analysis (LaSCA), the C15 phase of TCP atoms in nanoparticles is determined by topology configuration analysis and crystallography knowledge. The analytical ideas provide the algorithm logic for developing the numerical recognition software for complex crystal structures in the future.

Keywords: Laves phase, LaSC, molecular dynamics simulation, rapid cooling

PACS: 64.75.Nx, 64.70.kd, 61.46.Hk

DOI: 10.7498/aps.71.20220662

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51661005, U1612442).

† Corresponding author. E-mail: tianzean@hnu.edu.cn



快凝Ni₇₀Ag₃₀纳米颗粒中C15单元的识别

江明香 田泽安 谢泉 高廷红 梁永超 陈茜

Numerical recognition of C15 unit in rapid solidification Ni₇₀Ag₃₀ nanoparticles

Jiang Ming-Xiang Tian Ze-An Xie Quan Gao Ting-Hong Liang Yong-Chao Chen Qian

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 176402 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220662

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220662>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

不同尺寸Cu₆₄Zr₃₆纳米液滴的快速凝固过程分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of rapid solidification of Cu₆₄Zr₃₆ nanodrops of different sizes

物理学报. 2021, 70(24): 246401 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20211235>

分子动力学模拟冷却速率对非晶合金结构与变形行为的影响

Molecular dynamics simulation of effect of cooling rate on the microstructures and deformation behaviors in metallic glasses

物理学报. 2020, 69(11): 116101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191781>

Fe合金FCC-BCC原子尺度台阶型马氏体相界面迁移行为的分子动力学模拟研究

Molecular dynamics simulation of migration behavior of FCC-BCC atomic terrace-step phase boundary in iron-based alloy

物理学报. 2020, 69(13): 136102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191903>

孪晶界对Cr₂₆Mn₂₀Fe₂₀Co₂₀Ni₁₄高熵合金力学行为影响的分子动力学模拟

Effect of twin boundary on mechanical behavior of Cr₂₆Mn₂₀Fe₂₀Co₂₀Ni₁₄ high-entropy alloy by molecular dynamics simulation

物理学报. 2021, 70(18): 186201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210324>

镁中位错和非晶作用机制的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of mechanism of interaction between dislocation and amorphism in magnesium

物理学报. 2022, 71(14): 143101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212318>

高温下钙蒙脱石膨胀特性的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of swelling properties of Ca-montmorillonite at high temperatures

物理学报. 2022, 71(4): 043102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211565>