

# 金属 Al 表面熔化各向异性的分子动力学模拟<sup>\*</sup>

何安民<sup>†</sup> 秦承森 邵建立 王 斐

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

(2007 年 11 月 1 日收到, 2008 年 4 月 2 日收到修改稿)

采用嵌入原子势, 使用分子动力学方法对金属 Al 不同低指数晶面的表面熔化现象分别进行了模拟. 分析了熔化过程中样品结构组态的变化. 模拟结果表明对于不同的自由表面, 表面熔化呈现出明显的各向异性行为. Al(110)面在低于熔点的温度之下发生预熔化, Al(111)与 Al(001)面都出现过热现象. 与 Al(111)面不同, Al(001)面发生过热现象时表面原子层为类液层, 而 Al(111)面仍然保持很好的晶格结构. 即预熔化的 Al(001)面在高于熔点的温度下, 仍可以在很长的时间内处于相对稳定的亚稳态. 由模拟得到 Al 的热力学熔点为 950 K 左右, 与实验值基本符合.

关键词: 分子动力学, 表面熔化, 过热

PACC: 7115Q, 6842, 6470K

## 1. 引 言

熔化是自然界中的一种普遍现象, 也是材料科学研究中一个重要的相变过程, 一直是人们的研究重点之一. 关于熔化的理论模型有多种<sup>[1,2]</sup>, 如熔化的两相理论、Lindemann 熔化准则、力学不稳定性判据以及缺陷熔化判据等, 但这些唯象模型都不具有普适性. 要理解晶体熔化的本质, 还需从微观原子层次上理解固体的物理、力学以及化学行为. 随着计算机水平的不断发展, 分子动力学 (MD) 方法被广泛用在微观层次上模拟晶体的熔化行为. 实验和模拟结果都表明, 熔化过程中表面或内界面处于支配地位<sup>[3,4]</sup>, 固态晶体的熔化过程都是始于晶体表面或内界面处液体的非均匀形核. 因此, 人们对晶体的表面熔化现象进行了大量研究<sup>[5-11]</sup>.

关于表面熔化的微观理论尚未完全建立, 使用宏观热力学理论可以对表面熔化的部分现象给予解释<sup>[12]</sup>. 按照这种唯象模型, 原则上只要知道与晶向相关的各种界面能, 包括固气界面能  $\gamma_{sv}^{\{hkl\}}$ 、固液界面能  $\gamma_{sl}^{\{hkl\}}$  以及液气界面能  $\gamma_{lv}$ , 就可以预言晶体的表面熔化行为. 如果

$$\Delta\gamma^{\{hkl\}} \equiv \gamma_{sv}^{\{hkl\}} - (\gamma_{sl}^{\{hkl\}} + \gamma_{lv}) > 0,$$

则晶体表面会在低于熔点的温度下发生熔化, 当温

度达到熔点时, 晶体完全熔化. 如果  $\Delta\gamma^{\{hkl\}} < 0$ , 则表面会保持稳定, 出现过热现象. 由于界面能与晶向有关, 因此对同一种晶体的不同表面可能会出现不同的表面熔化行为. 实际上, 由于实验只能精确确定液气界面能  $\gamma_{lv}$ , 而  $\gamma_{sv}^{\{hkl\}}$  与  $\gamma_{sl}^{\{hkl\}}$  都无法精确确定, 甚至实验误差都大于界面能值, 依靠这种唯象模型无法预言晶体的表面熔化行为<sup>[6]</sup>, 因此数值模拟成为研究表面熔化现象的重要手段之一.

使用 MD 方法, 人们对多种晶体的表面熔化现象进行了模拟. 其中对于金属 Al 的研究主要有以下结果: Al(110)面在低于熔点的温度下发生预熔化<sup>[6,7]</sup>; Al(111)面存在过热现象<sup>[13,14]</sup>, 过热温度达到 150 K 左右; 对 Al(001)面的研究较少, 一般认为它与 Al(111)面一样, 都出现过热现象, 只是过热温度没有 Al(111)面高<sup>[8]</sup>, 约为 90 K.

本文使用 MD 方法, 对金属 Al 三个不同低指数晶面的熔化现象分别进行了模拟. 使用粒子数密度曲线、面径向分布函数、结构有序参数、均方位移以及缺陷原子数等参数对不同表面的模拟结果进行了分析. 模拟结果同样表明: Al(110)面在低于熔点的温度之下会发生预熔化; Al(111)面出现过热现象, 过热温度大约为 120 K; Al(001)面也出现了过热现象. 但我们发现二者过热时表面原子层具有不同的结构组态. Al(111)面过热时表面保持很好的晶格结

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金委员会和中国工程物理研究院联合基金(批准号:10476027)和中国工程物理研究院科学技术发展基金(批准号:2007A09001)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: he-anmin@iapcm.ac.cn

构,而 Al(001)面的表面原子层为类液层,即表面已经熔化的 Al(001)面在高于熔点的温度下仍可以在很长的时间内处于相对稳定的亚稳态,出现过热现象.由模拟得到的本模型对应的 Al 的热力学熔点为  $950 \text{ K} \pm 9 \text{ K}$ ,与实验值基本符合.

## 2. 势函数与结构分析参数

### 2.1. 势函数

本文采用的势函数为嵌入原子势(EAM)<sup>[15,16]</sup>. EAM 是基于有效介质理论的半经验多体势函数.许多模拟结果都表明,相对于其他对势,EAM 更能正确反映金属中原子之间的相互作用,在模拟金属表面行为(如熔化、重构以及其他缺陷性质)时都取得了很大的成功,其形式如下:

$$V = \sum_{j \neq i} \Phi(q_{ij}) + \sum_i F(\rho_i), \quad (1)$$

其中,  $q_{ij}$  是原子  $i$  与  $j$  之间的距离;右端第一项是原子  $i$  与  $j$  之间的短程势能,采用传统的对势形式;  $F(\rho)$  为嵌入能,  $\rho_i = \sum_{i \neq j} \rho_j(q_{ij})$  是原子  $i$  位置的基体密度.

### 2.2. 结构分析参数

对模拟结果进行分析时,我们采用的结构分析参数有径向分布函数(RDF)<sup>[17]</sup>、结构有序参数(SOP)<sup>[17]</sup>、均方位移(MSD)和粒子数密度.

RDF 是描述一层原子是否短程有序,对于理想晶格结构,RDF 在不同近邻位置出现峰值,温度升高导致某些峰值减弱甚至消失,关键峰值的变化表征熔化的开始.二维 RDF 的定义如下:

$$g(r) = \frac{2A}{N^2} \sum_{i < j} \delta(r - r_{ij}), \quad (2)$$

其中,  $\cdot$  表示 MD 平均,  $A$  为表面面积,  $N$  为原子数,  $r_{ij}$  是原子  $i$  与  $j$  之间的距离.

SOP 是局部密度函数的傅里叶变换,用以描述体系的长程有序程度.理想晶构的 SOP 值为 1,随温度升高不断减小,相变后液态的 SOP 值接近 0. SOP 的定义式为

$$s(k) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \exp(-ik \cdot r_i), \quad (3)$$

其中,  $N$  为面内原子总数,  $k$  为面内倒格矢量,  $r$  为原子位置矢量.

MSD 是原子位移平方的平均值,根据其随时间

的变化可考察系统的扩散性质.

粒子数密度则用于考察样品沿  $z$  方向的结构信息.

### 2.3. 缺陷原子数 $N_{\text{def}}$

引入  $N_{\text{def}}$  来度量系统中“缺陷原子”的数量<sup>[18]</sup>.为确定某一原子是否为缺陷原子,首先定义  $r_{\text{def}}$  为当前温度下理想晶格第一近邻与次近邻半径的中间值.对于某一原子,如果在  $r_{\text{def}}$  范围内的原子数不等于理想晶格下最近邻原子数,则认为此原子是缺陷原子.假设固液界面是一个平面,并假设缺陷原子数的增加值等于一个原子层内的原子数时,固液界面向前移动一个层间距,这样固液界面的移动速度就可由缺陷原子数的变化率给出,即

$$v_s(T) = (d_0/N_0) \partial N_{\text{def}}(t, T) / \partial t, \quad (4)$$

其中,  $d_0$  为原子层间距离,  $N_0$  为层内原子数.得到了不同温度下固液界面的移动速度  $v_s(T)$  ( $T > T_m$ ) 后,将  $v_s(T)$  线性外推至零值时所对应的温度就是热力学熔点  $T_m$ <sup>[9,18]</sup>.

## 3. 模拟过程

对于 Al(001)面,初始构型均为  $10a \times 10a \times 25a$  ( $a$  为不同温度下 Al 的晶格常数,由体熔化模拟结果给出),共 2500 个元胞,10000 个原子.  $x, y, z$  坐标轴分别对应 [100] [010] 和 [001] 方向.在  $x-y$  面内采用周期性边界条件,  $z$  方向采用自由边界条件.模拟过程中采用 Langvin 等温控制方法的速度 Verlet 形式<sup>[19]</sup>对系统的温度进行控制.首先将样品在低于熔点的温度下(例如  $T = 500 \text{ K}$ )弛豫 2500 步,之后每隔 2000 步升高 100 K,直到所需温度.共模拟了 8 个温度值,分别为 930, 970, 1000, 1020, 1040, 1060, 1080, 1100 K.对于前四个温度值,时间步长为 2fs,各模拟 50 万步,其余温度下的时间步长为 1fs,各模拟了 10 万步.

对于 Al(110)面,初始构型均为  $10.606a \times 12a \times 17.678a$ ,共 2250 个元胞,9000 个原子.  $x, y, z$  坐标轴分别对应  $\bar{1}10$  [001] 和  $\bar{1}10$  方向.其余控制方法与(001)表面相同.在 7 个温度下进行了模拟,分别为 900, 940, 960, 980, 1000, 1020, 1040 K.

对于 Al(111)面,初始构型均为  $7.071a \times 6.124a \times 23.094a$ ,共 3000 个元胞,12000 个原子.  $x, y, z$  坐标轴分别对应  $\bar{1}10$  [ $\bar{1}\bar{1}2$ ] 和  $\bar{1}11$  方向.控

制方法同上. 分别在 1040, 1060, 1080, 1100, 1125, 1140, 1165 K 的温度下进行模拟.

## 4. 结果分析

### 4.1. Al(001) 面

图 1(a) 是样品在温度为 930 K 下 0.5 和 1 ns 时 Al(001) 面各层 SOP 变化图(以下均是关于样品半部分的分析图示). 从图 1(a) 可以看出, 虽然最外两层

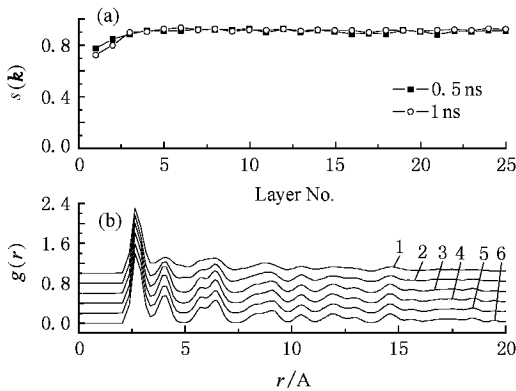


图 1 930 K 下 Al(001) 面的 SOP(a) 面内 RDF(b) 和  $z$  方向粒子数密度(c)

的 SOP 值略低于内部其余各层, 但仍远在零值以上, 且在很长的模拟时间内几乎不随时间发生变化, 表明各层均处于长程有序状态. 图 1(b) 是样品在温度为 930 K 时模拟 50 万步后表面 6 层原子的 RDF. 从图 1(b) 可以看出, 各层 RDF 均具有一系列明显的峰值, 表明其均处于短程有序状态. 图 1(c) 为相同时刻样品沿  $z$  方向粒子数密度曲线. 从图 1(c) 可以看出, 曲线呈现一系列均匀、尖锐的峰值, 所有的峰与峰之间的值均为零, 表明样品沿纵轴保持很好的晶体结构, 层与层之间无间隙原子.

图 2(a) 是样品在温度为 970 K 下 0.5 和 1 ns 时 Al(001) 面各层 SOP 的变化. 从图 2(a) 可以看出, 最低两层的数值较其余各层低得多, 1 ns 时接近零, 说明这两层处于长程无序状态. 其余各层 SOP 值在 1 ns 时比 0.5 ns 时有下降, 但降幅不大, 仍处于长程有序状态. 说明样品在很长的模拟时间内处于稳定状态, 表面的无序状态不向样品内部扩展. 图 2(b) 是样品在温度为 970 K 时模拟 50 万步后表面 6 层原子的 RDF. 从图 2(b) 可以看出, 与其余各层相比

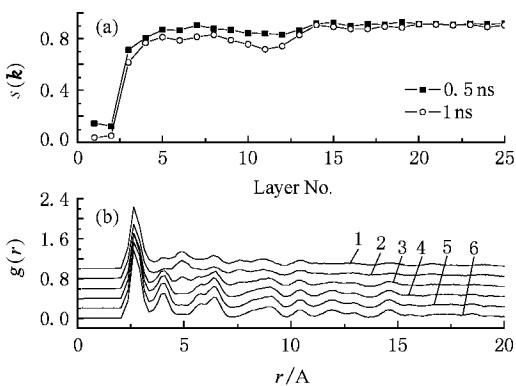


图 2 970 K 下 Al(001) 面 SOP(a) 面内 RDF(b) 和不同原子层的的面内 MSD(c)

较, 第 1 层、第 2 层 RDF 的次近邻峰几乎消失. 次近邻峰的消失表明这两层处于短程无序状态.

为确定处于无序状态的第 1 层、第 2 层原子是否为液态, 还需考察其是否具有流动性. 图 2(c) 为相应 6 层的的面内 MSD  $r_{xy}^2(t)$  随时间的演化曲线. 从图 2(c) 可以看出第 1 层、第 2 层的 MSD 随时间增长而增加, 而其余各层的 MSD 几乎都为零, 表明第 1 层、第 2 层的原子具有一定的流动性.

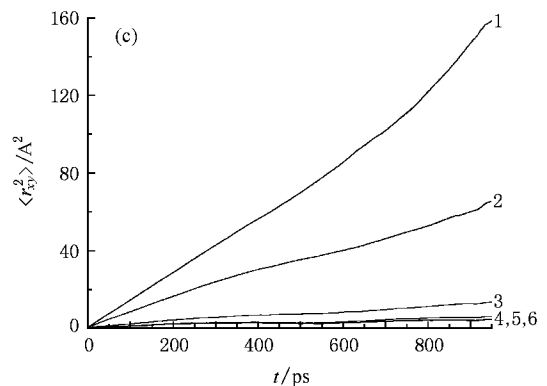


图 3(a)和(b)是 Al(001)面各原子层在温度 1000 K 下 0.36 和 0.4 ns 两个时刻的  $z$  方向粒子数密度曲线和 SOP 的变化.从图 3 可以看出,此时熔化由表面逐步向内部推进,熔化后各层的 SOP 值几乎

为零.粒子数密度大约为  $(57 \pm 7)/\text{nm}^3$ ,与理论值  $53.4/\text{nm}^3$  符合很好,不同温度下熔化后的粒子数密度有微小改变.

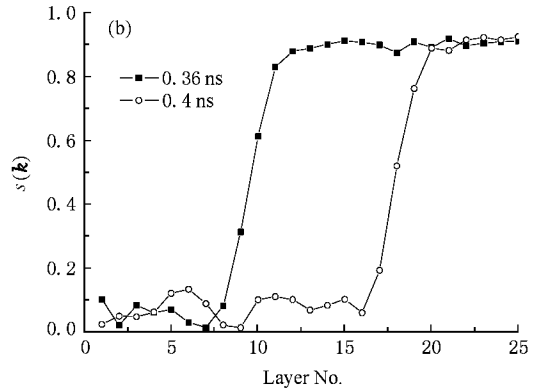
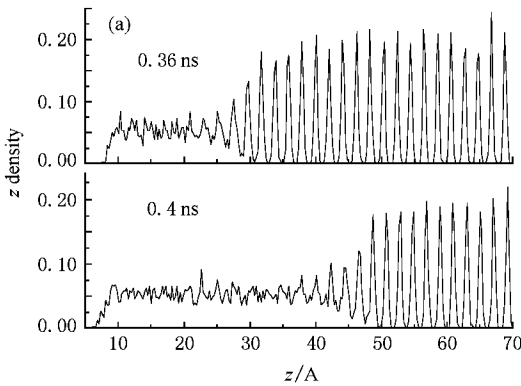


图 3 1000 K 下 Al(001)面不同时刻的粒子数密度(a)和结构有序参数(b)

由以上分析可知,对于 Al(001)面,在接近熔点的温度(930 K)下,很长的模拟时间内(1 ns),整个样品几乎保持为完整晶体,没有预熔化现象发生.在高于熔点的一定温度范围内,最外的两个原子层会首先发生熔化,形成类液层,但在很长的时间内,不向内部扩展.这说明预熔化的 Al(001)面在高于熔点的温度下,仍可以在很长的时间内处于相对稳定的亚稳态,出现过热现象.在此模型下(001)面可以承受的最高过热温度  $T_i$  在 970—1000 K 之间.

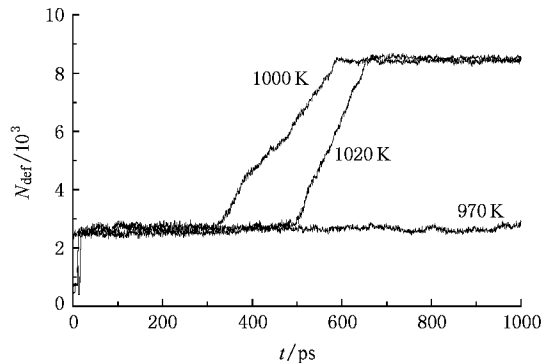


图 4 不同温度下 Al(001)面熔化过程中缺陷原子数随时间的变



表 1 各表面不同温度下固液界面移动速度(单位为 m/s)

界面	Al(110)	Al(001)	Al(111)
960	0.0643		
980	0.138		
1000	0.215	0.220	
1020	0.294	0.334	
1040	0.460	0.430	
1060		0.500	0.532
1080		0.634	0.672
1100		0.744	0.720
1125			0.910
1140			1.020
1165			1.100
$T_m/K$	$950 \pm 9$	$957 \pm 9$	$964 \pm 8$

图 4 为 970,1000,1020 K 时,系统  $N_{\text{def}}$  随时间的演化.温度 970 K 下,曲线斜率为零,缺陷原子数目保持不变,而 1000 K 与 1020 K 时,在熔化阶段  $N_{\text{def}}$  随时间线性增长,一段时间后达到极大值不再变化,表明熔化结束,整个系统进入液相.根据(4)式可以推算出固液界面移动速度.将得到的不同温度下的固液界面移动速度线性外推至零值,所得到的相应温度就是热力学熔点  $T_m$ .推算结果见表 1.在计算过程中,仅考虑  $N_{\text{def}}$  线性增长时间内的数值.

#### 4.2. Al(110)面

图 5(a)和(b)是 Al(110)面在温度 900 K 下模拟 30 万步后沿  $z$  方向的粒子数密度和表面 6 层原子的 RDF.从图 5(a)可以看出,前两个峰值明显低于其他峰值,峰与峰之间的密度值也明显不为零.这表明样品靠近表面的若干层之间均出现了大量的间隙原子,且在第一原子层外部出现一个新的原子层——吸附原子层(图中箭头所指).从图 5(b)的 RDF

可以看出,第 1 层—第 3 层的次近邻峰几乎都消失,表明这些层均处于短程无序状态.从图 5(c)中 0.3 和 0.6 ns 时刻 SOP 的变化也可以看出,除表面几层

原子处于无序状态以外,其余各层的结构有序参数几乎未发生变化.图 5(d)的面内 MSD 表明第 1 层—第 3 层的原子流动性较其余各层强很多,第 4 层—

第 6 层原子的 MSD 几乎为零,表明其仍为固态晶体,没有流动性.这与粒子数密度曲线以及 RDF 的结果均相符.

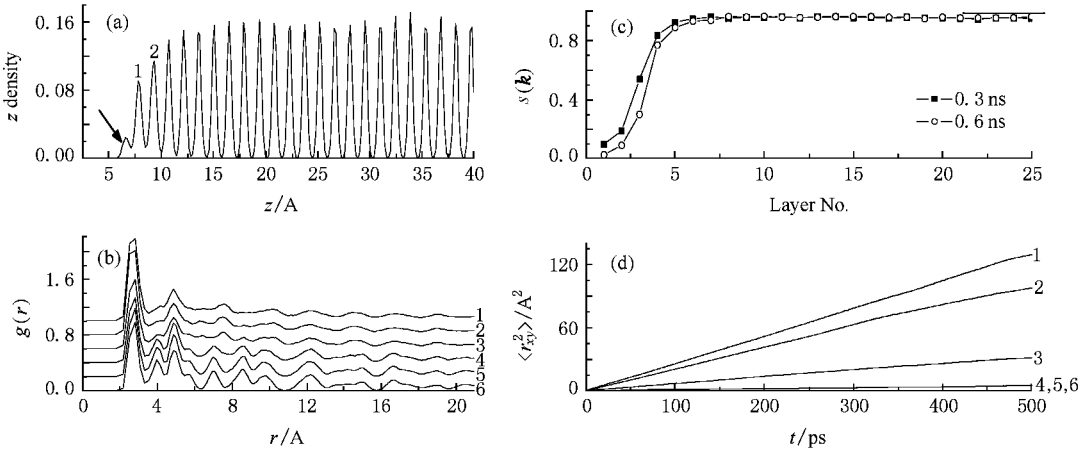


图 5 900 K 下 Al(110) 面 z 方向粒子数密度 (a) 面内 RDF (b) SOP (c) 和不同原子层的面内 MSD (d)

图 6 是 Al(110) 面各原子层在温度为 940 K, 0.25 和 0.5 ns 两个时刻 SOP 的变化.从图 6 可以看出,无序的原子层在 0.5 ns 时刻比 0.25 ns 时刻更靠近样品内部,表明熔化由表面向内部推进,熔化后各层 SOP 几乎为零,但熔化速度极慢.因此可以想象,这种情况下 Al 的熔点应该在 940 K 左右,与实验值基本符合.当温度继续升高,表面熔化以更快的速度向晶体内部扩散.

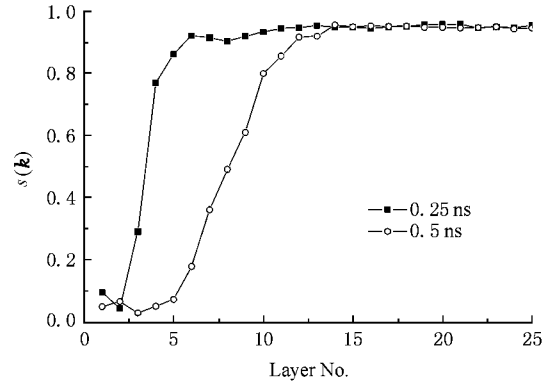


图 6 940 K 下 Al(110) 面不同时刻的 SOP

由以上分析可知,对于 Al(110) 表面,在低于熔点的温度(900 K)下,表面的几层原子会发生熔化,形成类液层,且在很长的时间内不向内部扩散.当温度高于熔点之后,表面的类液层会向晶体内部扩散,直到晶体全部熔化进入液相并达到平衡.

### 4.3. Al(111) 面

图 7(a) 和 (b) 是 Al(111) 面在 1040 K 下、50 万步

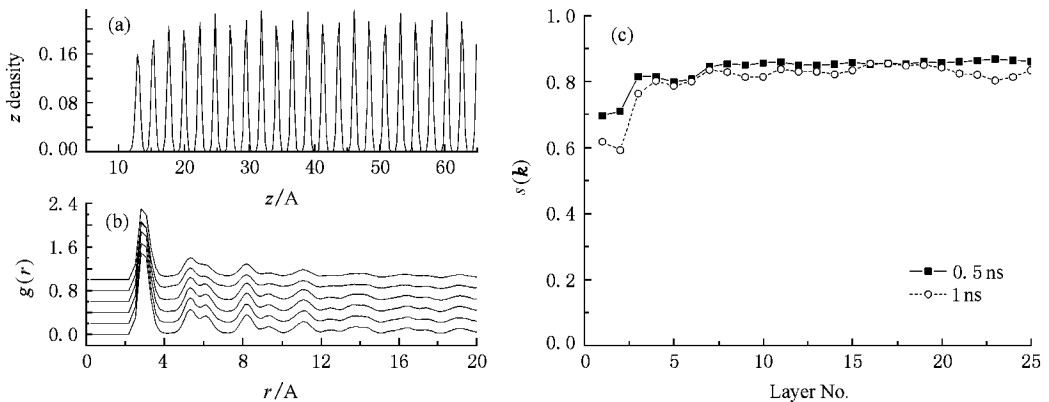


图 7 1040 K 下 Al(111) 面 z 方向粒子数密度 (a) RDF (b) 和 SOP (c)

后沿  $z$  方向的粒子数密度以及表面 6 层原子的 RDF. 图 7(a) 可以看出,  $1\text{ns}$  之后样品层与层之间没有间隙原子也没有附加原子层出现. 图 7(b) 中最外层与内部各层的 RDF 几乎一致. 从图 7(c) 可以看出, 在  $0.5$  与  $1\text{ns}$  时刻虽然最外两层的 SOP 值略低于内部各层, 但仍远在零值以上, 且几乎不随时间发生变化.

Al(111) 面在更高的温度 ( $1060\text{K}$ ) 下, 熔化由表面逐步向内部推进, 直至样品完全熔化.

由以上分析可知, 对于 Al(111) 表面, 在远高于熔点的温度 ( $1040\text{K}$ ) 下, 很长的模拟时间内 ( $1\text{ns}$ ) 均处于相对稳定的亚稳态, 出现过热现象. 与 (001) 面不同, 此时样品表面一直保持为完整晶体, 可以承受的最高过热温度在  $1040\text{—}1060\text{K}$  之间, 过热程度达

到了  $120\text{K}$  左右.

#### 4.4. 推算熔点

根据其他温度下的模拟结果, 分别确定了 Al(001), Al(110), Al(111) 各表面熔化过程中缺陷原子数的变化. 根据 (4) 式推算出 3 个表面在不同温度下的固液界面移动速度, 所得结果列于表 1. 将速度线性外推至零点, 如图 8 所示, 就得到了金属 Al 的热力学熔点, 列在表 1 最后一行. 由 Al(110) 表面熔化推算出的金属 Al 的熔点为  $950\text{K} \pm 9\text{K}$ . 对于 Al(001) 与 Al(111) 两个表面熔化模拟, 由于存在过热现象, 得到的热力学熔点依次比 Al(110) 面的结果要更高一些.

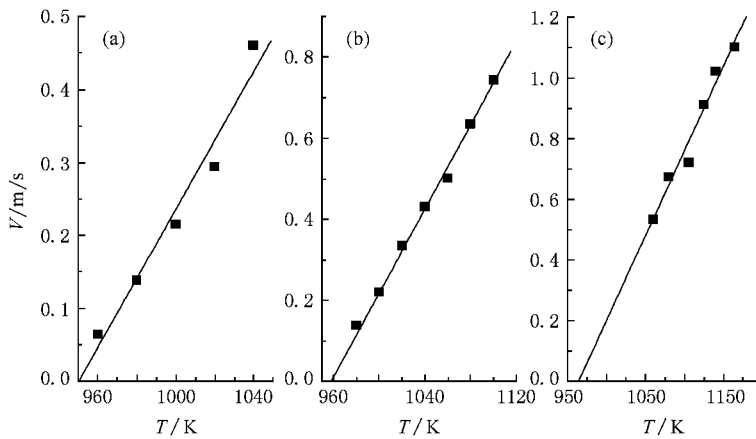


图 8 金属 Al 不同指数表面的熔化速度与温度关系 (a) Al(110) (b) Al(001) (c) Al(111)

使用 MD 模拟确定熔点的常用方法有三种. 一是在一定压力下, 分别模拟得到不同温度下固相以及液相的 Gibbs 自由能, 将二者自由能外推后相交点所对应的温度就是熔点. 二是两相模拟法, 即将样品一部分保持为固体另一部分加热熔化为液体, 保持总能量不变使样品向平衡态演化, 当固液共存时样品的温度就是热力学熔点. 三是本文使用的熔化速度外推法. 这三种方法各有优缺点, 但在确定熔点的精确度上是相当的. 文献 [16] 采用两相模拟法得到的 Al 的熔点为  $939\text{K} \pm 5\text{K}$ . 考虑到速度外推法使用的线性近似在接近熔点的温度范围内有效, 在我们的 Al(110) 面的拟合结果中, 如果不考虑比熔点高很多的  $1040\text{K}$  这一点, 线性外推得到的熔点则为  $943\text{K} \pm 9\text{K}$ , 与文献 [20] 的结果基本符合. 并且在 Al(110) 面的模拟中, 当温度为  $940\text{K}$  时已经观察到熔化由表面非常缓慢地向内部推进, 也说明此模型

的熔点就在  $940\text{K}$  附近. 因此, 使用速度外推法所得到的熔点值与其他方法的结果具有相同的精度.

使用 MD 方法对金属 Al 三个不同低指数表面的表面熔化行为分别进行了模拟. 从模拟结果可以看出, 表面熔化呈现出下列明显的各向异性行为: (110) 面在低于熔点的温度之下发生预熔化, (111) 面与 (001) 面则出现过热现象. 这与文献 [8, 13] 中的结论一致. 通过对处于过热状态的 (111) 面与 (001) 面结构组态的具体分析比较, 我们发现二者的过热现象存在明显不同. 处于过热状态的 (111) 面, 表层原子保持为完整的晶格结构; 而处于过热状态的 (001) 面, 最外的两个原子层为类液层, 即在高于熔点的温度下, 表面已经熔化的 Al(001) 面仍可以在很长的时间内处于相对稳定的亚稳态, 出现过热现象, 过热温度为  $50\text{K}$  左右. (111) 面的过热行为可以用过热的唯象模型 [12] 解释, 而 (001) 面则无法用该模

型进行解释.

根据表面熔化唯象模型,表面熔化有预熔化以及过热两种不同的行为,而具体出现哪种行为则由该表面的固气、固液以及液气界面之间界面能的关系决定.这三种界面能不但因表面不同而不同,且与温度相关.目前还没有合理的方法在某个温度下同时比较精确地测定这三种界面能,因此无法使用这种模型来预言晶体的表面熔化行为.至于(111)面与(001)面所呈现出的不同过热行为的原因还不是很清楚,需要做更进一步的研究.

## 5. 结 论

使用 MD 方法,对金属 Al 不同低指数表面的熔

化现象分别进行了模拟.结果表明,对于不同指数的自由表面,表面熔化呈现出明显的各向异性.同时还发现存在两种不同的过热行为:(111)面过热时,表层原子保持为完整的晶格结构,而(001)面最外的两个原子层为类液层.

使用速度外推法,得到本模型中 Al 的热力学熔点为  $950\text{K} \pm 9\text{K}$ ,与实验值基本符合.本文得到的(001)面和(111)面的过热温度比文献[8,13]中的过热温度要低,这是由于在模拟过程中我们采用了 Langvin 等温控制方法.与速度标度法相比,这种温度控制方法允许模拟过程中温度存在涨落,更接近于真实的实验环境.也正因为如此,使得样品在相对低的过热温度下由于热涨落而熔化.

- [ 1 ] Cotterill R M J 1980 *J. Cryst. Growth* **48** 582
- [ 2 ] Ubbelohde R 1965 *Melting and Crystal Structure* (Oxford:Clarendon Press)
- [ 3 ] Foiles S M, Adams J B 1989 *Phys. Rev. B* **40** 5909
- [ 4 ] Pluis B, van der Gon A W D, Frenken J W M, van der Veen J F 1987 *Phys. Rev. Lett.* **59** 2678
- [ 5 ] Jeremy Q B, Leslie V W 1978 *J. Phys. C* **11** 2743
- [ 6 ] van der Gon A W D, Smith R J, Gay J M 1990 *Surf. Sci.* **227** 143
- [ 7 ] Stoltze P, Norskov J K, Landman U 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 440
- [ 8 ] Molenbroek A M, Frenken J W M 1994 *Phys. Rev. B* **50** 11132
- [ 9 ] Wang H L, Wang X X, Wang Y, Liang H Y 2006 *Acta Phys. Chim. Sin.* **22** 1367 (in Chinese)[王海龙、王秀喜、王宇、梁海戈 2006 物理化学学报 **22** 1367]
- [ 10 ] Xie G F, Wang D W, Ying C T 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2254 (in Chinese)[谢国锋、王德武、应纯同 2003 物理学报 **52** 2254]
- [ 11 ] Zhuang J, Liu L 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 2418 (in Chinese)[庄军、刘磊 1997 物理学报 **46** 2418]
- [ 12 ] Pluis B, Frenkel D, van der Veen J F 1990 *Surf. Sci.* **239** 282
- [ 13 ] Tolla F D, Ercolessi F, Tosatti E 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 3201
- [ 14 ] Bilalbegovic G 1997 *Phys. Rev. B* **55** 16450
- [ 15 ] Daw M S, Baskes M I 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 1285
- [ 16 ] Ercolessi F, Adams J B 1994 *Europhys. Lett.* **26** 583
- [ 17 ] Rapaport D C 1995 *The Art of Molecular Dynamics Simulation* (Cambridge:Cambridge University Press) p90
- [ 18 ] Luskto J F, Wolf D, Phillpot S R, Yip S 1989 *Phys. Rev. B* **40** 2841
- [ 19 ] Paterlini M G, Ferguson D M 1998 *Chem. Phys.* **236** 243

# Molecular dynamics simulation of the anisotropy of surface melting of metal Al<sup>\*</sup>

He An-Min<sup>†</sup> Qin Cheng-Sen Shao Jian-Li Wang Pei

( *Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China* )

( Received 1 November 2007 ; revised manuscript received 2 April 2008 )

## Abstract

Molecular dynamics simulations are used to investigate the surface melting processes of three low-index surfaces of aluminum. We find that the surface melting is anisotropic for different surfaces by analyzing the variation of the microstructures during melting. Although (001) and (111) surfaces can both sustain overheating, the microstructures of them are different. There is a thin disordered quasi-liquid film on (001) surface when overheated while the (111) surface is crystalline. It is surprising that the melted (001) surface can be overheated. The velocity of melting is calculated for all the surfaces at different temperatures, and the melting point is extrapolated to be  $950 \text{ K} \pm 9 \text{ K}$  which agrees with the experimental data of  $933.5 \text{ K}$ .

**Keywords** : molecular dynamics , surface melting , overheating

**PACC** : 7115Q , 6842 , 6470K

---

<sup>\*</sup> Project supported by the Joint Project of NSAF ( Grant No. 10476027 ) and the Science and Technology Development Foundation of China Academy of Engineering Physics ( Grant No. 2007A09001 ).

<sup>†</sup> E-mail : he\_anmin @iapcm. ac. cn