

高密度氦相变的分子动力学研究

张宝玲 宋小勇 侯氢 汪俊

Molecular dynamics study on the phase transition of high density helium

Zhang Bao-Ling Song Xiao-Yong Hou Qing Wang Jun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 016202 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.016202

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.016202>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I1>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于聚龙一号装置的超高速飞片发射实验研究进展

Recent advances in hyper-velocity flyer launch experiments on PTS

物理学报.2014, 63(19): 196201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.196201>

冲击作用下的摩擦力效应实验研究

Experimental study of friction effect under impact loading

物理学报.2013, 62(11): 116203 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.116203>

$\text{Pr}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$  陶瓷晶界势垒的交流特性

AC properties of  $\text{Pr}_{0.7}\text{Ca}_{0.3}\text{MnO}_3$  ceramics

物理学报.2013, 62(2): 026201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.026201>

二硼化钛的高温高压制备及其物性

Characterization of  $\text{TiB}_2$  synthesized at high pressure and high temperature

物理学报.2013, 62(2): 026202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.026202>

钢纤维高强混凝土材料的气体炮试验研究

Performance of steel reinforced high strength concrete investigated in the gas gun experiment

物理学报.2013, 62(1): 016201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.016201>

## 高密度氦相变的分子动力学研究\*

张宝玲<sup>1)2)†</sup> 宋小勇<sup>1)</sup> 侯氢<sup>2)</sup> 汪俊<sup>2)</sup>

1) (华北水利水电大学, 郑州 450045)

2) (四川大学原子核科学技术研究所, 成都 610064)

(2014年4月22日收到; 2014年8月19日收到修改稿)

采用分子动力学方法结合对关联函数分析计算了0—1000 K范围内氦的固—液相变曲线, 与实验数据的对比显示, 在0—500 K之间与实验数据符合很好, 500 K以上还没有相应的实验数据. 另外, 计算了钛金属中不同尺寸氦泡的压强, 并与高密度氦的固—液相变曲线进行了对比. 结果显示, 在低温条件下, 随着温度的降低, 钛晶体中可能会出现固态氦泡; 在300 K以上不会存在固态氦泡.

关键词: 分子动力学, 氦, 固—液相变线

PACS: 62.50.-p, 64.30.Jk, 64.70.D-

DOI: 10.7498/aps.64.016202

## 1 引言

在天体物理和核材料领域, 对高密度氦进行研究均很有必要. 在天体物理中, 氦是一些星体的主要构成成分, 研究高温高密度氦的热动性质对于模拟星体的内部状态有重要意义<sup>[1-4]</sup>. 在核材料领域, 氦通常会由于氚的衰变、中子辐照诱发( $n, \alpha$ )反应等而被引入到材料中. 氦在材料中很难溶解, 易于聚集形成高压氦泡, 高压氦泡会严重破坏材料的力学性能, 因此, 对高密度氦进行研究对于核材料的发展也比较重要<sup>[5-9]</sup>.

人们已经做过不少有关高密度氦的实验研究, Willem等<sup>[4]</sup>研究了高密度氦在200—460 K, 7—24 GPa的相图; Loubeyre等<sup>[2]</sup>研究了高密度氦在46—400 K, 1—58 GPa的X衍射情况, 以上实验均观察到了高密度氦的固—液相变. 但是, 有关金属中是否存在固态氦泡, 人们一直不太清楚. Maji等<sup>[10]</sup>利用正电子生存期的测量对铝金属中的氦泡进行了分析, 结果发现, 当温度降到一定程度时, 正电子的生存期发生了突变, 他们认为这种突

变暗示着氦泡的结构变为了固态, 因为氦泡结构的变化会引起电子密度的重新分布. 本文采用分子动力学方法研究了高密度氦的固—液相变, 计算了0—1000 K范围内氦的固—液相变曲线, 并与以上实验数据进行了对比. 另外, 我们计算了钛金属中氦泡的压强, 并与计算得到的氦的固—液相变曲线进行了对比, 提出了在温度低于300 K时, 随着温度的降低, 钛晶体中可能会出现固态氦泡的推测.

## 2 模拟方法

Loubeyre等<sup>[2]</sup>通过X衍射实验发现了具有稳定的hcp晶体结构的固态氦. 基于Loubeyre等的实验观察, 在研究氦的相变时, 我们首先假设固氦具有hcp结构, 然后增大原子间距, 减小氦的密度, 直至固氦完全不能维持晶体结构. 此时, 我们记录氦的压强, 该压强即可能为氦发生固—液相变的压强. 为了更为准确地确定氦的相变点, 我们运用了具有统计特性的对关联函数 $g(r)$ . 对关联函数是描述物质结构的很有用的方法, 通常指的是距离一个原子为 $r$ 时找到另一个原子的概率, 可以用来研究

\* 国际热核聚变实验反应堆计划专项(批准号: 2009GB106004, 2013GB109000)和华北水利水电大学高层次人才科研启动基金(批准号: 40355)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zbaoling1234@163.com

物质微结构的变化, 例如相变. 图 1 给出了经典的液体三相点附近的对关联函数,  $r$  为原子间距,  $\sigma$  为势能零点,  $g(r)$  为径向分布函数. 由该图可以看出液体三相点附近的对关联函数处于固体与气体之间, 在短的间隔距离内存在几个峰叠加在长距离缓慢衰减的曲线上 [11,12].

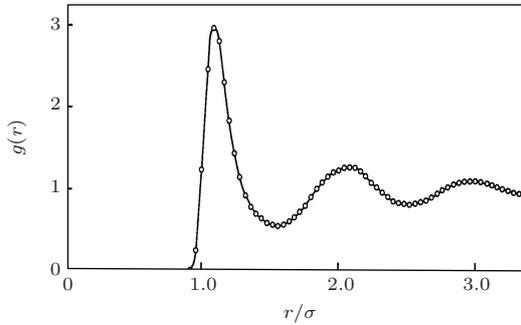


图 1 经典的液体三相点附近的对关联函数

在研究材料中的氦泡时, 我们选用完备的钛晶体作为基底, 并采用直接植入的方法在金属中心产生一个氦泡, 该方法在以前的研究中已有广泛应用 [6,7,13]. 然后, 系统被演化到热动平衡. 在系统达到平衡以后, 开始计算氦泡的压强.

由于以上所有模拟中氦的密度均很高, 理想气体状态方程不能很好地描述其内部状态, 因此, 我们采用如下公式计算高密度氦的压强 [14]:

$$p = \left\langle \frac{1}{V} \right\rangle N k_B T + \frac{1}{3V} \left\langle \sum_{i=1}^N r_i \cdot f_i \right\rangle, \quad (1)$$

其中,  $N$  是氦原子的数目,  $V$  是包含有  $N$  个氦原子的氦的体积,  $k_B$  是玻尔兹曼常数,  $T$  是绝对温度,  $r_i$

是第  $i$  个原子的位置,  $f_i$  是第  $i$  个原子受到的力.

相互作用势的选取决定着模拟结果的可靠性, 我们采用 Exp-6 势 [15,16] 来描述氦原子间的相互作用, 形式如下:

$$\varphi(r) = \varepsilon \left\{ \frac{6}{\alpha - 6} \exp \left[ \alpha \left( 1 - \frac{r}{r^*} \right) \right] - \frac{\alpha}{\alpha - 6} \left( \frac{r^*}{r} \right)^6 \right\}, \quad (2)$$

其中,  $\alpha = 13.1$ ,  $\varepsilon/k_B = 10.8$  K,  $k_B$  是 Boltzmann 常数,  $r^* = 0.29673$  nm. 对于钛原子间的相互作用, 我们选用拟合了金属结合能、空位形成能等实验值的紧束缚势来进行描述 [17]. 氦-钛相互作用势是通过把从头计算的数据拟合为 Lennard-Jones 的形式而得到的 [18].

模拟所用的盒子均含有五万个左右的原子, 并沿三维方向运用周期性条件. 模拟的温度范围为 0—1000 K, 并利用声-电耦合维持系统恒温 [19].

### 3 氦的固—液相变线

图 2 展示了固氦在 150 K 时的相变过程. 在图 2(a), 氦原子间距为 0.181 nm, 相应的压强为 68 GPa, 固氦呈现出完备的 hcp 晶体结构. 在图 2(b), 原子间距被增加至 0.227 nm, 晶格发生了变形, 但基本能够维持 hcp 晶体结构. 接下来, 原子间距被进一步增大至 0.238 nm, 相应的压强降为 3.4 GPa, 此时, 固氦已经完全不能维持晶体结构, 原子呈现出无序状排列, 如图 2(c) 所示. 因此, 3.4 GPa 可能为固氦在 150 K 时的相变点压强.

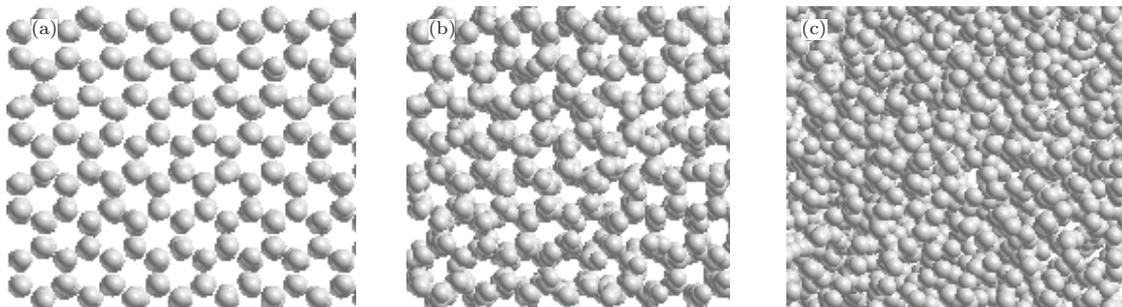


图 2 150 K 条件下固氦的相变过程. 平均原子间距分别为 (a) 0.181 nm; (b) 0.227 nm; (c) 0.238 nm

为进一步确认固氦的固—液相变点, 我们采用对关联函数来分析纯高密度氦的结构变化, 如图 3 所示. 在距离  $r$  趋于 0 时, 三幅图中  $g(r)$  均趋于零, 这是由于原子无限靠近时原子之间存在强排

斥作用, 不可能在距离  $r$  趋于 0 时找到另一个粒子. 在图 3(a) 中, 原子间距为 0.181 nm, 对关联函数的峰较多、较强, 呈现出明显的晶体特征; 当原子间距增加为 0.227 nm 时, 峰的数目减少, 强度减弱, 在  $r$

值为1.4附近的第二个峰已经接近消失,如图3(b)所示;在图3(c)中,原子间距增至0.238 nm,第一个峰的强度再次减弱,第二个峰则完全消失,并且在 $r$ 值大于3时,所有的峰均很不明显.通过与经典的液体三相点附近的对关联函数(图1)进行对比可以看出,在图3(c)中晶体已经处于相变点.因此,3.4 GPa被进一步确认为150 K时固态氦的固—液相变点压强.

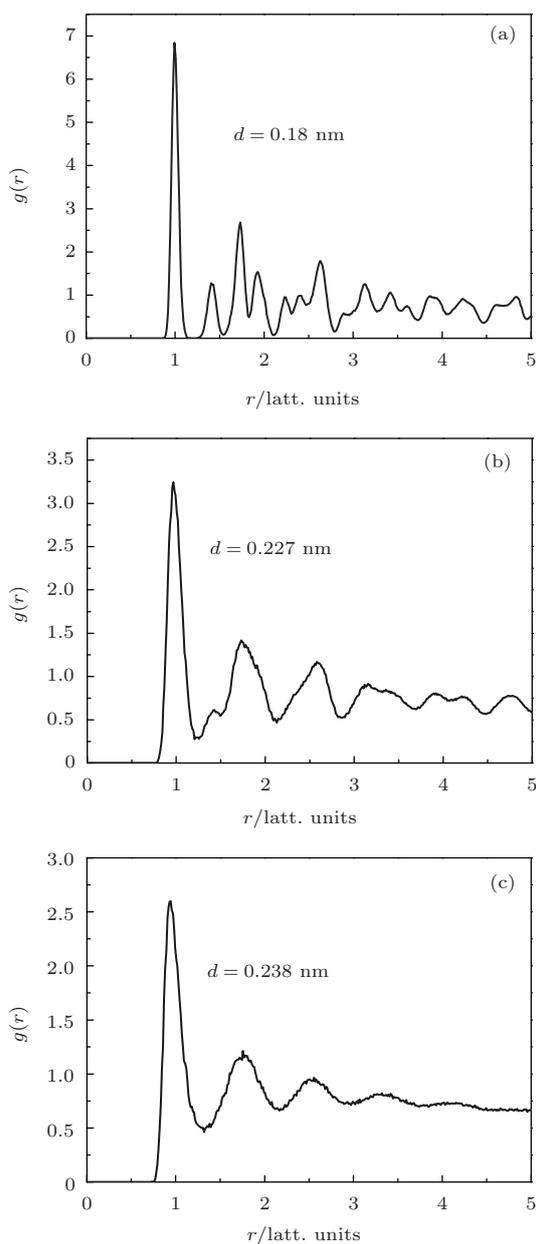


图3 原子间距分别为0.181, 0.227, 0.238 nm时纯氦的对关联函数

基于以上方法,我们计算了固氦在0—1000 K温度范围的固—液相变曲线,并与已有的实验数据进行了对比,如图4所示.与实验数据的对比显示,

在0—500 K之间计算得到的固—液相变曲线与实验数据符合很好;在600 K以上,由于缺少相应的实验数据而无法进行比较.

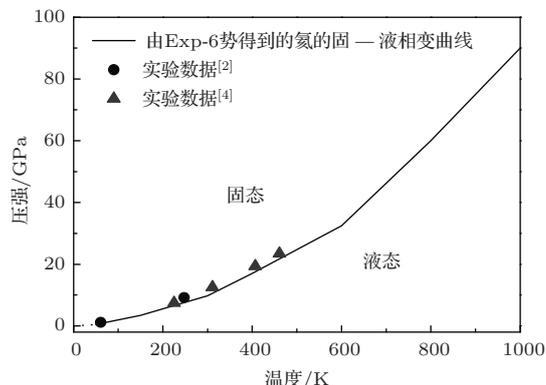


图4 氦的固—液相变曲线

#### 4 钛金属中的固态氦泡

为分析钛金属中是否可能存在固态氦泡,我们计算了钛金属中一个直径为1.77 nm的氦泡的压强,并把该氦泡的压强与我们计算得到的氦的固—液相变曲线进行了对比,如图5所示.该氦泡的 $p$ - $T$ 曲线与氦的固—液相变曲线的交叉点出现在150 K,即在温度高于150 K时该氦泡为液态,在温度低于150 K时可能为固态.另外,我们把温度扩展到0 K,很直观地观察了0 K附近该氦泡内氦原子的分布情况.初始时,氦泡内的氦原子是随机分布的,如图6(a)所示.随着系统被降温至0 K,处于高密度状态的氦原子的排列越来越有序,如图6(b)所示.可见,在低温条件下,有序的排列才是氦原子较低的能量状态.因此,我们推测钛金属中可能存在固态氦泡.

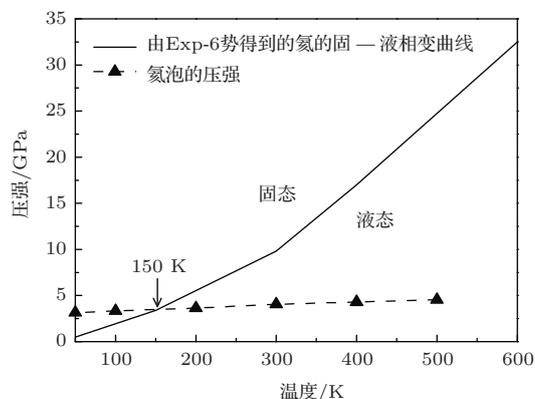


图5 钛金属中直径为1.77 nm的氦泡的相

根据以上方法, 改变氦泡尺寸, 我们得到了钛晶体中不同尺寸氦泡的相变点温度和压强, 并计算了该压强下氦泡内的氦密度, 结果示于表 1. 由该表可以看出, 随着氦泡尺寸逐渐增大, 相变点的温度逐渐降低, 相应的压强和氦泡内的氦密度均逐渐减小.

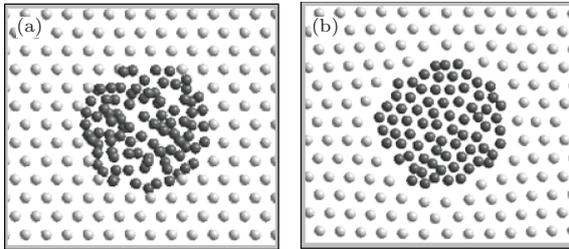


图 6 0 K 条件下钛金属中氦泡内氦原子分布 (a) 初始; (b) 0 K

表 1 钛晶体中不同尺寸氦泡的固—液相变点温度和压强

氦泡直径 /nm	相变点温度 /K	相变点压强 /GPa	氦泡内氦原子数 /nm <sup>-3</sup>
0.94	266	8.4	127
1.77	150	3.4	98
2.36	90	1.7	88
2.95	57	0.7	56

当温度高于 300 K 时, 我们计算了直径在 0.89—2.95 nm 之间的一系列氦泡的压强, 结果发现, 氦泡的压强均小于高密度氦固—液相变点的压强. 因此, 300 K 以上钛晶体中不可能存在固态氦泡. 其原因在于一定温度下钛晶体中氦泡内的氦密度不能持续增大, 当密度达到一定值时就会冲出位错环, 氦泡内高压得到释放, 内部氦密度降低.

## 5 结 论

本论文采用分子动力学方法结合对关联函数分析, 计算了高密度氦的固—液相变曲线, 并与已有的实验数据进行了对比. 结果显示, 在 0—500 K 范围内计算结果与实验数据符合很好, 600 K 以上还没有相应的实验数据. 另外, 我们计算了钛金

属中直径在 0.89—2.95 nm 之间一系列氦泡的压强, 并与我们计算得到的固氦的固—液相变线进行了对比. 通过对比发现, 在温度低于 300 K 时, 随着温度的降低, 氦泡的压强逐渐高于高密度氦固—液相变点的压强, 因此, 低温条件下钛晶体中可能会出现固态氦泡. 在 300 K 以上, 氦泡的压强均小于高密度氦固—液相变点的压强, 钛晶体中不会存在固态氦泡.

## 参考文献

- [1] Mills R L, Liebenberg D H, Bronson J C 1980 *Phys. Rev. B* **21** 5137
- [2] Loubeyre P, LeToullec R, Pinceaux J P, Mao H K, Hu J, Hemley R J 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2272
- [3] Cai L C, Chen Q F, Gu Y J, Zhang Y, Zhou X M, Jing F Q 2005 *Sci. China* **35** 369 (in Chinese) [蔡灵仓, 陈其峰, 顾云军, 张颖, 周显明, 经福谦 2005 中国科学 **35** 369]
- [4] Vos W L, Van H M G E, Schouten J A 1990 *Phys. Rev. B* **42** 6106
- [5] Wang J, Zhang B L, Zhou Y L, Hou Q 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 106601 (in Chinese) [汪俊, 张宝玲, 周宇璐, 侯氢 2011 物理学报 **60** 106601]
- [6] Zhang B L, Wang J, Hou Q 2011 *Chin. Phys. B* **20** 036105
- [7] Zhang B L, Wang J, Li M, Hou Q 2013 *J. Nucl. Mater.* **438** 178
- [8] Chen M 2011 *Acta. Phys. Sin.* **60** 126602 (in Chinese) [陈敏 2011 物理学报 **60** 126602]
- [9] Zhou H B, Jin S, Zhang Y, Shu X L, Niu L L 2014 *Chin. Phys. B* **23** 056104
- [10] Maji S, Singh A, Nambissan P M 2001 *Phys. Lett. A* **281** 76
- [11] de Kuijper A, Vos W L, Barrat J L, Hansen J P, Schouten J A 1990 *J. Chem. Phys.* **93** 5187
- [12] Apaja V, Saarela M 2008 *Europhys. Lett.* **84** 40003
- [13] Wang L, Hu W Y, Deng H Q, Xiao S F, Yang J Y, Gao F, Heinisch H L, Hu S L 2011 *J. Mater. Res.* **26** 416
- [14] Allen M P, Tildesley D J 1987 *Computer Simulation of Liquids* (New York: Clarendon Press Oxford) p46
- [15] Ross M, Young D A 1986 *Phys. Lett. A* **118** 463
- [16] Cai L C, Chen Q F, Jing F Q, Chen D Q 2000 *Sci. China* **30** 266
- [17] Cleri F, Rosato V 1993 *Phys. Rev. B* **48** 22
- [18] Wang J, Hou Q 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 093510
- [19] Hou Q, Hou M, Bardotti L, Prével B, Mélinon P, Perez A 2000 *Phys. Rev. B* **62** 2825

# Molecular dynamics study on the phase transition of high density helium\*

Zhang Bao-Ling<sup>1)2)†</sup> Song Xiao-Yong<sup>1)</sup> Hou Qing<sup>2)</sup> Wang Jun<sup>2)</sup>

1) (*North China University of Water Resources and Electric Power, Zhengzhou 450045, China*)

2) (*Institute of Nuclear Science and Technology, Sichuan University, Chengdu 610064, China*)

( Received 22 April 2014; revised manuscript received 19 August 2014 )

## Abstract

The melting curve of helium has been calculated over the temperature range of 0—1000 K using molecular dynamics method. Comparisons of the calculated melting curve and the experimental data show that the consistence between the melting curve and the experimental data may reach 500 K. When the temperature is above 600 K, no reliable experimental data have been found for comparison. In addition, the pressures inside the helium bubbles of various sizes existing in metal titanium are calculated and have a comparison with the melting curve. Results show that, at low temperatures, the helium bubbles may be in solid state as the temperature decreases. When the temperature is above 300 K, no solid helium bubble may exist.

**Keywords:** molecular dynamic, helium, melting curve

**PACS:** 62.50.-p, 64.30.Jk, 64.70.D-

**DOI:** [10.7498/aps.64.016202](https://doi.org/10.7498/aps.64.016202)

---

\* Project supported by the National Magnetic Confinement Fusion Program of China (Grant Nos. 2009GB106004, 2013G-B109000), and the Scientific Research Project of High-Level Talents of North China University of Water Resources and Electric Power (Grant Nos. 40355).

† Corresponding author. E-mail: [zbaoling1234@163.com](mailto:zbaoling1234@163.com)