

零温下 α 铁晶界结构的分子动力学模拟¹⁾

陈致英 周富信 唐沧雅 丁家强

(中国科学院力学研究所)

吴希俊

(中国科学院固体物理研究所)

提要 本文采用 Johnson 的四参数势和固定体积的假定,应用分子动力学方法对零温下 α 铁的两晶界弛豫结构进行了模拟。计算结果表明,整个结构图形在平行晶界面的两个方向仍然显示出周期性,在垂直晶界面的方向仍然显示出镜面对称分布。本文计算结果与 Vitek 的静力学方法的结果相当一致。

关键词 分子动力学,晶界,铁。

1. 引言

小角度晶界可以用位错阵列来描述,而对大角度晶界十多年来发展了计算机模拟的方法进行处理。计算机模拟是从原子间相互作用的微观信息出发对大量原子运动的直接模拟通过统计平均的办法得出物质的宏观性质,它是物理力学中从微观过渡到宏观的重要手段之一。对于用计算机模拟方法研究晶界的原子弛豫结构,许多作者进行了评述^[1-3]。用分子静力学方法可以得到晶界的原子弛豫结构,但它只能处理零温下的情况,而分子动力学则能处理各种温度下的情况,还可以研究到达平衡过程中的动力学发展。作为第一步,我们用分子动力学方法对零温下 α 铁的两晶界弛豫结构进行了模拟,而对有限温度的情况,今后将进一步研究。

2. 模型

本文讨论 α 铁的以下两种对称重位晶界:

1. 转轴为 [001], 晶界面为 (310), 转角为 $\theta = 36.87^\circ$, $\Sigma = 5$ 。

2. 转轴为 [110], 晶界面为 (1 $\bar{1}$ 4), 转角为 $\theta = 38.94^\circ$, $\Sigma = 9$ 。

在 α 铁单晶体中,选择以下坐标系: 对 $\Sigma = 5$ 的情形,坐标轴选为 X——[310], Y——[$\bar{1}$ 30], Z——[001]。对 $\Sigma = 9$ 的情形,则为 X——[1 $\bar{1}$ 4], Y——[2 $\bar{2}$ 1], Z——[110]。在上述坐标系中,将 $X > 0$ 一侧的晶体以 Z 为轴逆时针旋转 36.87° 或 38.94° , 就得到 $\Sigma = 5$ 或 9 晶界原子的初始位置。

关于边界条件的选取,在 Y、Z 方向均采用周期性边界条件,而在 X 方向采用固定边界条件。对于 $\Sigma = 5$ 和 $\Sigma = 9$ 两种情况,计算中采用的原子数分别为 558 和 560 个。

1) 本工作为中国科学院重大科研项目支持的课题。
本文于 1987 年 10 月 5 日收到。

原子间相互作用势采用 Johnson 的四参数势^[4]:

$$u(r_{ij}) = -a(r_{ij} - b)^3 + cr_{ij} - d \quad (1)$$

式中 u 为第 i 个原子和第 j 个原子在相距为 r_{ij} 处的势能; a, b, c, d 是势参数, 该参数在 r_{ij} 处于不同区间时, 取三组不同值(见表 1); 能量和距离的单位分别为电子伏和埃, 势阱深度为 0.251638, 截断距离为 3.44, 它处于原子的第二和第三近邻中间。

原子的运动由牛顿方程决定:

$$F_i = mr_i, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (2)$$

其中 r_i 和 F_i 分别为第 i 个原子的坐标和它所受到的作用力, N 为总原子数。 F_i 可由下式从相互作用势(1)导出,

$$F_i = - \sum_{j \neq i} \frac{\partial u}{\partial r_{ij}} \frac{r_{ij}}{r_{ij}} \quad (3)$$

其中 r_{ij} 为第 i 个原子相对第 j 个原子的矢量位移。

3. 计算

对运动方程(2), 用下列方程近似求解:

$$r_i(t_{n+1}) = r_i(t_n) + \frac{1}{2} a_i(t_n)(\Delta t)^2 \quad (4)$$

式中 $t_{n+1} = t_n + \Delta t$, a_i 为 t_n 时刻原子的加速度。步长 Δt 的选取十分重要。在实践中, 我们选 $\Delta t = 2.6 \times 10^{-16}$ 秒, 达到平衡最快。由于计算的是零温下的弛豫结构, 我们在计算中每一步后都令原子速度为零。因此, (4) 式中没有初速度项。达到平衡时, 原子的位置不再变, 受力几乎为零, 系统的总势能不再改变。

表 1 势参数

r_{ij}	a	b	c	d
1.9—2.4	2.195976	3.097910	2.704060	7.436448
2.4—3.0	0.639230	3.115829	0.477871	1.581570
3.0—3.44	1.115035	3.066403	0.466892	1.547967

计算中采用无量纲公式。能量单位使用势阱深度 $= 4.03142 \times 10^{-20}$ 焦耳, 长度单位使用晶格长度 $a_0 = 2.8589 \times 10^{-26}$ 米, 质量单位使用原子质量 $m = 9.26967 \times 10^{-26}$ 千克, 其中 a_0 是由常温外推到零度下的值。此外, 计算中采用了恒体积近似, 即保持了固定边界原子的坐标不变。

4. 结果和讨论

计算得到的 α 铁 $\Sigma = 5$ 和 $\Sigma = 9$ 两种晶界原子弛豫结构分别如图 1 和图 2 所示。从图中可以看出, 虽然原子偏离了它们原来的位置, 但整个结构图形仍然显示出在 Y 方向的周期性结构和在 X 方向关于界面的对称分布。同时, 计算结果也表明, 原子在 Z 方向仍保持周期分布, 事实上, 在 Z 方向的位移为零。这说明我们使用的计算模块在 Y 和 Z 方向上用周期性边界条件并未给计算带来不利的影响, 因此, 对于零温下对称重位晶界的模拟在 Y 和 Z 方向的尺度还可以取得小一些。事实上, 我们也做了更小模块的计算, 结果同上述的完全一致。在 X 方向上所做的不同长度的模拟对结果有微小的影响, 因此在 X 方向

上的尺度取得大些是有好处的。此外,为了比较,在图 1 的说明中也列出了 Vitek 用静力学法得出的一些数据^[7],两者符合得很好。最后,值得指出,我们目前使用的方法运行的步数较多,约 1500—2000 步才能达到平衡。我们也采用了类似[6]文中使用的准动力学方法进行了模拟,所需时间可以缩短数倍,值得今后进一步研究。

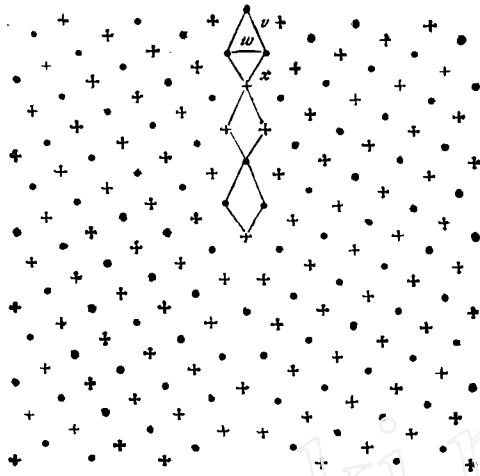


图 1 零温下 α 铁晶界的原子弛豫结构

$\Sigma = 5$	$\theta = 36.67^\circ$		
本文	W	V	X
	0.83	1.00	0.93
Vitek	0.82	1.00	0.92

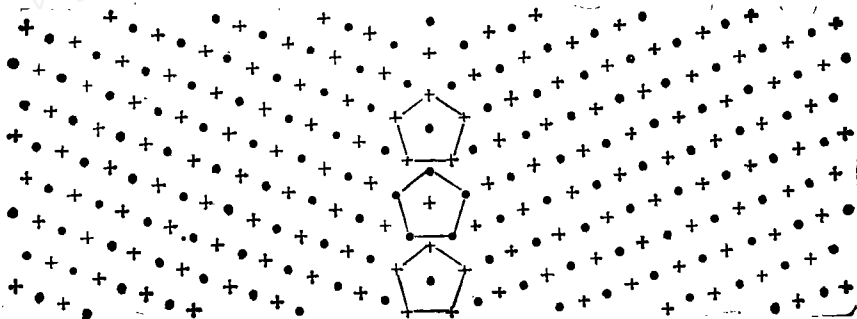


图 2 零温下 α 铁晶界的原子弛豫结构

$\Sigma = 9$ $\theta = 38.94^\circ$

参 考 文 献

- [1] Harrison, R. J., Bruggeman, G. A. & Bishop, G. H., in *Grain Boundary Structure and Properties*, Ed. by Chadwick, G. A. & Smith, D. A., Academic Press, New York (1976), 45.
- [2] Vitek, V., Sutton, A. P., Smith, D. A. & Pond, R. C., in *Grain Boundary Structure and Kinetics*, Ed. by Balluffi, R. W., ASM, Cleveland, OH (1980), 115.
- [3] Bristowe, P. D., *Journal De Physique*, Colloque C6, supplément au n°12, Tome 43 (1982), C6-33.
- [4] Johnson, R. A., *Physical Review*, 134, 5A(1964), A1329.
- [5] Vitek, V., Smith, D. A. & Pond, R. C., *Philosophical Magazine A*, 41, 5 (1980), 649.
- [6] Dahl, R. E., Beeler, J. R. & Bourquin, R. D., *Computer Physics Communications*, 2(1970), 301.

MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS OF GRAIN BOUNDARY STRUCTURES AT 0°K IN α IRON

Chen Zhiying, Zhou Fuxin, Tang Cangya, Ding Jiaqiang

(Institute of Mechanics, Academia Sinica)

Wu Xijun

(Institute of Solid State Physics, Academia Sinica)

Abstract Molecular dynamics simulations on the 0°K relaxed structures of $\Sigma=5$ (310) and $\Sigma=9$ (1 $\bar{1}$ 4) grain boundaries in α iron were carried out by using Johnson's four-parameter potential and constant volume assumption.

The results showed that the atomic distribution in two directions parallel to the grain boundary kept periodic and that in the direction perpendicular to the grain boundary was still mirror-symmetrical. The results agreed with those from Vitek's molecular statics method.

Key words molecular dynamics, grain boundary, iron

www.cnki.net