

# 用分子动力学方法模拟零温下 铜及其掺银或铋的晶界结构<sup>1)</sup>

周富信 陈致英

(中国科学院力学研究所)

吴希俊 胡斌

(中国科学院固体物理研究所)

**提要** 本文采用五参数对势和固定体积的假定,应用分子动力学方法模拟了零温下纯Cu、Cu-Ag 和 Cu-Bi 合金的晶界弛豫结构。计算结果表明,在上述情况下,原子分布在平行晶界面的两个方向是周期性的,在垂直晶界面的方向是镜面对称的。两种合金弛豫结构与纯铜的结构差别不大。铋原子周围的铜原子离铋原子较近,而银原子周围的铜原子离银原子较远。

**关键词** 分子动力学,晶界,铜,合金。

## 1. 引言

用分子动力学计算机模拟的方法研究合金的晶界弛豫结构,许多作者进行了评述<sup>[1,2]</sup>。本文用分子动力学方法模拟了在0°K下 Cu-Ag 和 Cu-Bi 两种合金的晶界弛豫结构,为的是提供计算 Cu 中 Ag 的电子态和 Cu 中 Bi 的电子态的数据,以便进一步了解合金是脆性还是韧性的原因。此外,还计算了0°K下 Cu 的晶界弛豫结构,和上述两种合金的晶界弛豫结构进行比较。

## 2. 计算方法

我们计算的 Cu 晶界,  $\Sigma = 5$ , 夹角  $36.87^\circ$ , 转轴  $[0\ 0\ 1]$ , 晶界面为  $(3\ 1\ 0)$ , 温度为  $0^\circ\text{K}$ 。

晶界面由  $[0\ 0\ 1]$  和  $[\bar{1}\ 3\ 0]$  两轴构成。计算中分别将它们选为  $z$  轴和  $y$  轴, 并选  $[3\ 1\ 0]$  为  $x$  轴。这样的结构在  $y$  轴和  $z$  轴方向具有周期性。因此, 计算系集的大小在这两个方向上分别选取 2 个和 3 个周期的长度, 同时采用周期性边界条件; 在  $x$  方向上则选取 15.5 个晶格长度, 并采用固定边界条件。于是, 计算中原子数为 588 个。按照上述的晶界原子排列就可以把系集的初始位置确定下来, 并画在图 1 中。为得到 Cu-Ag 或 Cu-Bi 合金晶界和初始位置, 只要将 Ag 或 Bi 原子代替晶界上  $z = 0, 1, 2$  上的 6 个 Cu 原子即可。

计算中采用固定体积和五参数对势:

1) 中国科学院重大科研项目支持。  
本文于 1987 年 10 月 5 日收到  
1988 年 4 月 15 日收到修改稿。

$$\varphi^{ij} = B_1/r_{ij}^4 + B_2 r_{ij}^3 + B_3 r_{ij}^2 + B_4 r_{ij} + B_5 \quad (1)$$

式中  $B_1 - B_5$  为由原子  $i$  和  $j$  的种类而定的常数, 列在表 1 中;  $\varphi^{ij}$  为第  $i$  原子和第  $j$  原子的相互作用势能, 它是原子间距  $r_{ij}$  的函数, 其截断距离为面心立方结构的第三和第四近邻距离的一半。表中 Cu 和 Ag 的势常数取自文献 [3], Bi、Cu-Ag 和 Cu-Bi 的势常数是文献 [4] 的势曲线通过拟合而得到的。

表 1  $\varphi^{ij}$  势中的常数

	$B_1$	$B_2$	$B_3$	$B_4$	$B_5$
Cu	71.2860	-0.0457916	0.327407	0.117547	-3.17803
Ag	102.658	-0.0369658	0.364301	-0.614651	-1.60386
Bi	283.1001	0.23464	-3.897145	21.700830	-40.80853
Cu-Ag	53.42868	-0.098	1.161558	-4.150688	3.879044
Cu-Bi	226.2856	0.413176	-6.059364	29.68936	-48.94484

注:  $\varphi^{ij}$  和  $r$  的单位分别为电子伏和埃。

在选定的时间步长  $\Delta t$  下, 用下列方程求解原子的位置,

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

式中  $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ ,  $m_i$  为第  $i$  个原子的质量,  $F_i(t_n)$  为  $t_n$  时刻第  $i$  个原子位于  $r_i(t_n)$  处所受到的作用力,

$$F_i(t_n) = \sum_j - \frac{\partial \varphi^{ij}}{\partial r_{ij}(t_n)} \cdot \frac{r_{ij}(t_n)}{r_{ij}(t_n)} \quad (3)$$

本文选取的最佳步长  $\Delta t = 2.3 \times 10^{-13}$  秒。由系集的初始位置, 用 (3) 式计算出  $F_i(t_0)$ , 用 (2) 式求出  $r_i(t_1)$ , 按上述方法同样可求  $r_i(t_2)$ , 以此类推。计算到  $t_n$  时刻位置与  $t_{n-1}$  时刻的位置差, 小于规定的偏差, 同时, 系集势能几乎不变, 由于就得出晶界

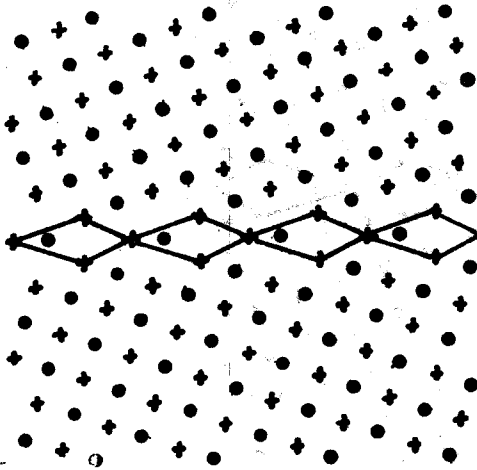


图 1 纯铜晶界原子初始位形, 面心立方,  
 $\Sigma = 5, \theta = 36.87^\circ$

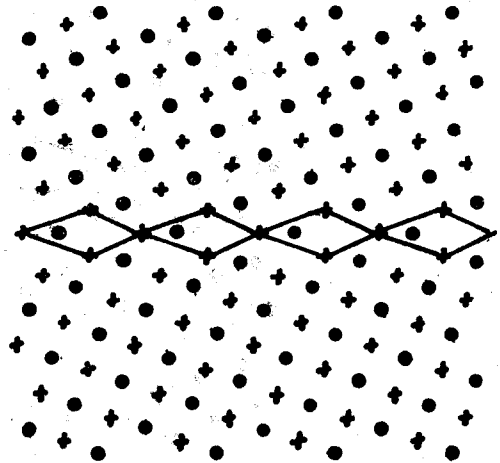


图 2 纯铜晶界的弛豫结构

的弛豫结构。

### 3. 计算结果和讨论

本文计算了三种晶界的弛豫结构,对 Cu 的结果画在图 2 中,对 Cu-Ag 的结果画在图 3 中,对 Cu-Bi 的结果画在图 4 中。

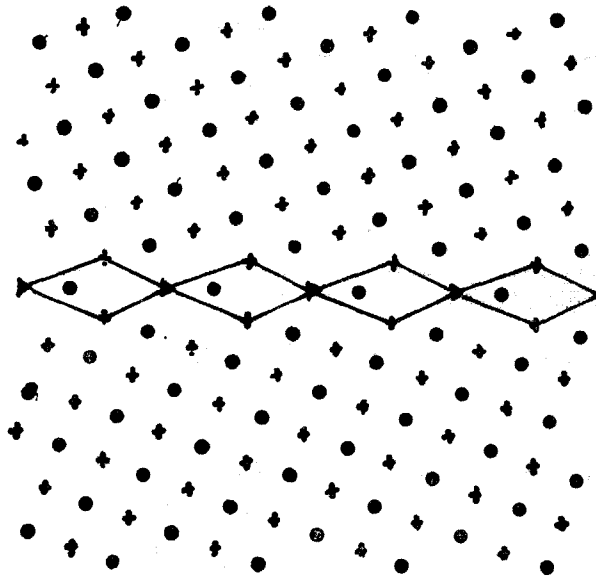


图3 Cu-Ag 合金晶界弛豫结构

▶ 掺杂的 Ag 原子

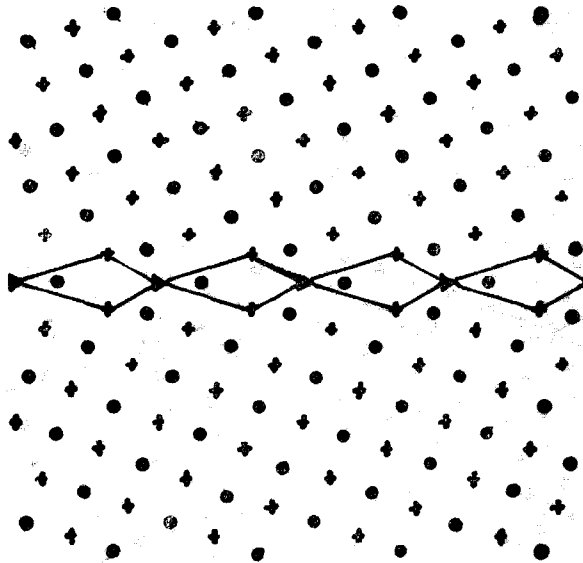


图4 Cu-Bi 合金晶界弛豫结构

▶ 掺杂的 Bi 原子

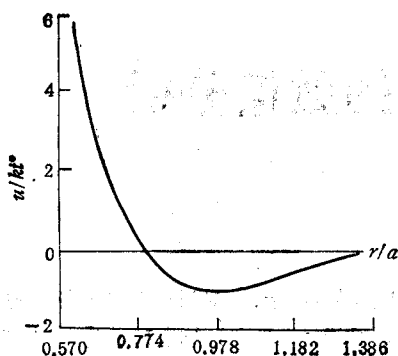


图 5 铜-银的原子间势曲线

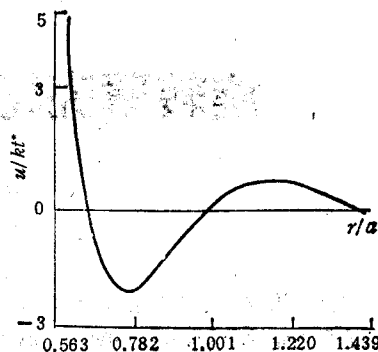


图 6 铜-铋的原子间势曲线

从这些图可以看出,原子分布在  $y$  方向仍保持周期性,  $x$  方向对于晶界面对称的。

Cu-Ag 和 Cu-Bi 两种合金弛豫结构与纯 Cu 的差别是不大的。同时,计算结果也表明,原子在  $z$  方向仍保持周期性的分布,事实上,在  $z$  方向的位移为零。比较图 3 和图 4,可以看出, Bi 原子周围的 Cu 原子更加靠近 Bi 原子,而 Ag 原子周围的 Cu 原子则离得较远。这是由于 Cu-Bi 的势曲线中的特征半径较小的缘故。(参见图 5 和图 6)

### 参 考 文 献

- [1] Maeda, K. et al., *Acta Metall.* 30(1982), 2011.
- [2] Hashimoto, M. et al., *Acta Metall.* 32(1984), 1.
- [3] Vitek, V. et al., *Surface Science*, 144(1984), 196.
- [4] Maeda, K. et al., *Acta Metall.* 30(1982), 2001.

## MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS OF GRAIN BOUNDARY STRUCTURES AT 0°K IN COPPER WITH SUBSTITUTIONAL IMPURITIES

Zhou Fuxin, Chen Zhiying

(Institute of Mechanics, Academia Sinica)

Wu Xijun, Hu Bin

(Institute of Solid State Physics, Academia Sinica)

**Abstract** The 0°K relaxed structures of grain boundaries in Cu and its alloys (Cu-Ag, Cu-Bi) were simulated with molecular dynamics method by using a five-parameter potential and constant volume assumption.

In these cases, the results showed that the atomic distribution was periodic in the two directions parallel to the grain boundary and it was mirror-symmetric in the direction perpendicular to the boundary. The difference between relaxed structures of Cu and its alloys was small, nevertheless, the host atoms were closer to the bismuth atom than to the silver atom.

**Key words** molecular dynamics, grain boundary, copper, alloy