



# 银凝固过程中亚临界晶核和晶体团簇的分子动力学模拟

坚增运<sup>①\*</sup>, 陈极<sup>①</sup>, 常芳娥<sup>①</sup>, 曾召<sup>①</sup>, 何坛<sup>①</sup>, 介万奇<sup>②</sup>

① 西安工业大学材料与化工学院, 西安 710032;

② 西北工业大学凝固技术国家重点实验室, 西安 710072

\* E-mail: jianzengyun@yahoo.com

收稿日期: 2010-07-23; 接受日期: 2010-09-26

国家重点基础研究发展计划(“973”计划)(批准号: 2006CB605202)和国家自然科学基金(批准号: 51071115, 50671075)资助项目

**摘要** 用分子动力学模拟方法研究了冷却速度对银最终构型的影响规律. 通过分析银的径向分布函数、HA 键对和最大晶体团簇中的原子数, 确定出了银凝固后形成非晶的冷却速度. 在此基础上, 研究了周期性边界条件下银在凝固过程中亚临界晶核和晶体团簇的平衡结构. 结果表明: 在一定的冷却速度范围内, 银熔体凝固后得到的组织是晶体团簇与非晶的混合体, 最大晶体团簇尺寸随冷速的增加而减小, 当冷速达到一个临界值时, 晶体团簇完全消失. 银熔体在凝固过程中的晶体团簇及结晶后的晶体是由面心立方和密排六方构成的层状偏聚结构. 该层状偏聚结构起源于熔体中的晶胚, 在形核阶段就已经生成, 并非在生长阶段才开始产生.

**关键词**

分子动力学模拟  
非晶  
亚临界晶核  
晶体团簇  
冷却速度

近年来, 无序体系(玻璃态、液态)的微观结构及液/固转变过程中新相与母相在结构上的相关性引起了人们的广泛兴趣, 成为了凝聚态物理和材料科学研究领域的热点之一<sup>[1~3]</sup>. 最近, Bong<sup>[1]</sup>用波动透射电子显微镜(FTEM)首次观察到非晶基体上纳米尺度的亚临界晶核. Gibson<sup>[2]</sup>指出, 研究非晶中亚临界晶核的结构及形成过程对完善和发展结晶动力学具有非常重要的意义. 然而, 目前实验所能获得的最大冷却速率为  $10^9$  K/s, 在这个冷速下许多晶化能力强的金属和合金不能实现玻璃化转变, 这限制了对非晶形成机理和结晶动力学研究工作的开展. 分子动力学模拟方法所能研究的冷却速率比目前实验所能获得的冷却速率要大得多. 它既能模拟物质的静态性

质, 也能模拟系统的动态过程. 可以从原子尺度直接模拟出熔体、玻璃及晶体的微观结构<sup>[4~9]</sup>.

人们应用分子动力学对金属的结晶过程及非晶的形成过程已做了大量工作. 现在已经知道, 非晶态金属的微观结构往往十分复杂, 并不像早期硬球无规则液体模型所认为的那样由各种 Bernal 多面体<sup>[3]</sup>随机堆砌而成, 而是具有某种中程序. 2001 年, Liu 等人<sup>[10]</sup>用紧缚势(TB-SMA)研究了不同冷速下铜的最终微观结构, 发现当冷速高于一临界值时, 面心立方结构(fcc)和密排六方结构(hcp)原子开始共存并形成层状结构. 2009 年, Tian 等人<sup>[11]</sup>对  $10^{11.14} \sim 10^{12.70}$  K/s 冷速范围银的最终构型着重进行了研究, 发现在这个冷速区间始终存在类似 Liu 等人发现的层状结构. 但是,

对这种层状结构是起源于凝固过程的形核阶段还是生长阶段, 以及此层状结构与熔体结构之间的关系等问题目前并不清楚. 而搞清熔体结构与结晶相结构之间的关系是正确认识形核生长特性和规律的前提.

本文通过采用 EAM 多体势函数, 对银形成非晶的冷却速度范围进行了分子动力模拟, 在此基础上研究了银熔体中亚临界晶核的结构、银凝固过程结晶相的结构以及它们之间的关系.

## 1 模拟过程及分析方法

### 1.1 模拟过程

模拟软件选用了 LAMMPS<sup>[12]</sup>. MD 模拟中心原胞中包含 23328 个银原子, 采用周期性边界条件. 所用的势函数为 Williams 等人<sup>[13]</sup>得到的 EAM 势函数. MD 步长为 2 fs, 采用 Nose-Hoover 控温控压算法来控制系统温度和压力. 在常压下, 先将系统在 1770 K(过热 500 K)下运行 300000 步使其达到平衡液态; 然后将其以  $10^{12}$  K/s 的冷速冷却到其熔点温度 1270 K(此熔点用固/液共存技术<sup>[14]</sup>得到)并保温 450000 步; 最后以  $10^{12}$ ,  $10^{12.30}$ ,  $10^{12.70}$ ,  $10^{13}$ ,  $10^{13.30}$ ,  $10^{13.70}$ ,  $10^{13.78}$ ,  $10^{14}$ ,  $10^{15}$  K/s 的冷速降温到 50 K 并保温弛豫 200000 步. 为了获得原子坐标及其他参数信息, 在最后的 100000 步中每 200 步取一个构型以待分析.

### 1.2 结构分析方法

#### ① 径向分布函数(RDF)

径向分布函数  $g(r)$  定义为

$$\rho g(r) = N^{-1} \left\langle \sum_{i \neq j} \delta(r + R_i - R_j) \right\rangle, \quad (1)$$

式中  $\rho$  是系统的平均数密度,  $r$  是原子的位置,  $\langle \rangle$  表示时间平均,  $\delta$  是 Dirac 函数,  $N$  为原子数. 其物理含义是距离一个原子  $r$  处找到另外一个原子的几率. 它是理论与实验对照的基本依据, 也是表征熔体和非晶态结构的最重要函数, 可以定量描述液体和非晶的短程序. 除此之外, 它可以给出体系的许多结构信息, 如原子半径、原子间平均间距、配位数等. 径向分布函数  $g(r)$  与 X 射线衍射实验得到的干涉函数也互为傅里叶变换.

#### ② HA 键型指数

H-A 键型指数法<sup>[15]</sup>即键对分析技术, 可以方便地分析由计算机模拟生成体系的原子近程结构, 可以有效地描述液态、非晶态、晶态及其相互转变过程中结构演化. 在这个技术中, 当两个原子间距小于特定截断半径时, 则这两个原子成键. 为了区分键对, 该技术采用了四个参数( $i j k l$ ).  $i=1$  或  $i=2$  表示构成根原子对的两个原子是否成键;  $j$  代表根原子对共有的近邻原子数;  $k$  表示共有近邻原子之间的成键总数;  $l$  是为了区别前三个指数相同的不同类型结构而引入的参数. 在典型液态或非晶态中, 1551, 1541 和 1431 键对大量存在; fcc 型晶体以 1421 键为特征键对; hcp 型晶体则以 1422 和 1421 键对为特征键对. bcc 型晶体中存在大量的 1661 和 1441 键对.

## 2 结果及其分析

### 2.1 初始液态结构平衡性验证

初始液态结构对后续凝固过程具有直接影响. 体系的原子数不同, 其达到平衡所需的时间不同. 为了验证初始的液态结构是否平衡, 我们研究了 1.1 节所述条件下, 体系中的原子数对液态银的径向分布函数的影响, 结果见图 1. 可以看出, 虽然两个体系中的原子数不同, 但其径向分布函数却完全相同. 这说明两个体系的液态结构是一致的. 所以, 可以认为经过 450000 步的保温弛豫过程能够使液态银达到平衡.

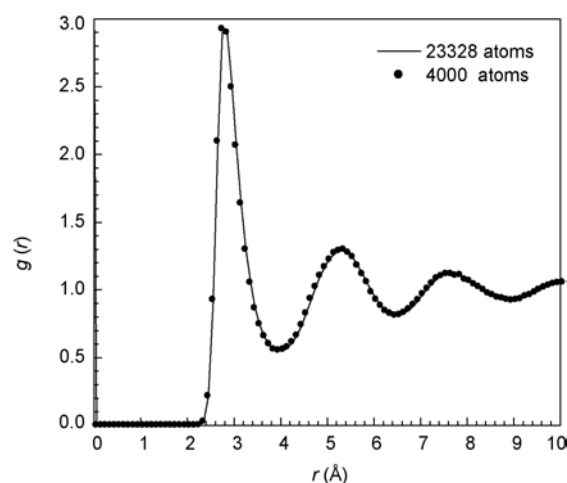


图 1 不同原子数体系中液态银在熔点时的径向分布函数

## 2.2 非晶形成的冷速范围

### 2.2.1 径向分布函数分析

图 2 为银在液态及以不同速度冷却凝固后体系的径向分布函数. 其中曲线 1 为 1270 K 时银在液态时的径向分布函数; 曲线 2~6 分别为以  $10^{16}$ ,  $10^{14}$ ,  $10^{13}$ ,  $10^{12.30}$  和  $10^{12}$  K/s 的冷速降温到 50 K 时体系的径向分布函数曲线. 从整体上看, 随着冷速增大, 径向分布函数的变化很连续, 表明随着冷速增大, 晶态开始缓慢向非晶态转变过程中, 并不是一个突变, 而是一个结构连续变化的过程. 观察曲线 2 可以发现它非常接近于曲线 1, 表明了其结构大致是液态结构的冻结. 曲线 2~4 的第二峰同曲线 1 相比(液态径向分布函数)开始分裂为两个峰, 且第一峰和第二峰之间并无小峰形成, 表明了在这些冷速下的凝固的最终结构中非晶占了大部分比例. 曲线 5 同曲线 1 相比(液态径向分布函数), 其第一峰和第二峰之间形成一个小峰, 表明其结构具有了晶态特征, 同曲线 6 相比(晶态特征径向分布函数), 一些晶态峰又明显发生了钝化, 说明在该冷速下凝固的最终结构同冷速为  $10^{12}$  K/s 凝固的最终结构相比, 其原子迁移至平衡位置的能力受到了一定抑制, 原子排布发生了一定程度无序化而形成部分非晶. 当冷速大于  $10^{12}$  K/s 时, 晶态峰开始钝化, 表明了当冷速大于  $10^{12}$  K/s 时, 开始形成非晶. 也就是说,  $10^{12}$  K/s 是形成非晶所需要的最小冷速.

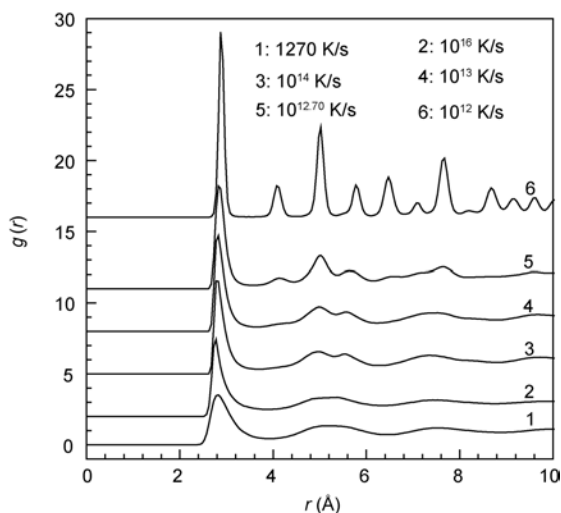


图 2 Ag 在 1270 K 下液态时及以不同冷速降温到 50 K 后得到平衡构型的径向分布函数

### 2.2.2 键对分析

图 3 为不同冷速下 1421, 1422, 1551, 1541, 1431 键对分数随冷速的变化. 可以看出, 代表 fcc 晶态结构的 1421 键对分数在冷速为  $10^{12}$  K/s 时占主导地位(分数约为 0.87), 随着冷速的增加呈现迅速降低后缓慢降低的规律; 代表 hcp 晶态结构的 1422 键对分数在冷速为  $10^{12}$  K/s 时只有少量(分数约为 0.13), 随着冷速的增加, 1422 键对分数呈现先增加后减少的规律, 并在  $10^{12.70}$  K/s 时候达到最大值; 代表非晶结构的 1551, 1541, 1431 键对的分数在冷速为  $10^{12}$  K/s 时几乎为 0, 随着冷速的增加, 其分数呈现逐渐增加的趋势. 这说明冷速为  $10^{12}$  K/s 时, 得到的是晶态组织; 冷速大于  $10^{12}$  K/s 后, 随冷速的增加晶态所占的比例逐渐减少而非晶所占的比例逐渐增加. 这与上述径向分布函数分析的结果是一致的. 值得注意的是当冷速大于  $10^{14}$  K/s 时, 所有的键对数目都在一个水平上波动, 表明了冷速大于  $10^{14}$  K/s 时系统的结构趋于稳定.

### 2.2.3 最大晶体团簇中的原子数分析

采用了文献[16]中的晶体团簇结构表征方法, 研究了不同冷速下的平衡构型中最大晶体团簇中的原子数. 该表征方法为: 当中心原子与 12 个近邻原子形成 12 个 1421 键对时, 认为该原子为 fcc 晶态原子; 当中心原子与 12 个近邻原子形成 6 个 1421 键对, 6 个 1422 键对时, 认为该原子为 hcp 晶态原子; 当中心

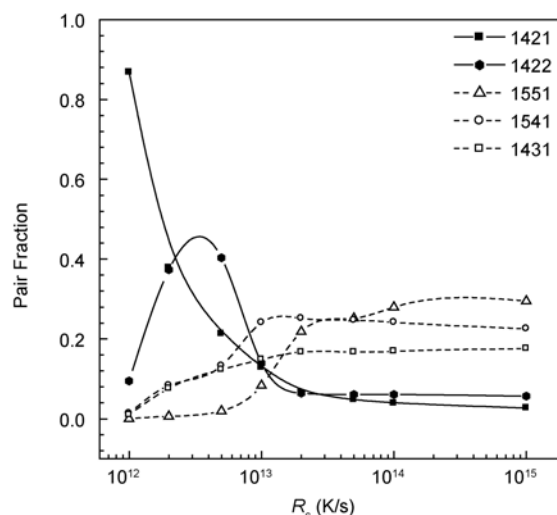


图 3 最终平衡构型中各键对分数随冷速的变化

原子与 12 个近邻原子形成 6 个 1441 键对, 6 个 1661 键对时, 认为该原子为 bcc 晶态原子. 若两个或多个晶态(可以是不同类型晶体)原子成键(间距小于键长), 则认为两者构成一个晶态团簇. 得到的各个冷速下最大晶体团簇原子数  $N_c$ 、最大晶体团簇中 fcc 晶态原子数  $N_{fcc}$ 、最大晶体团簇中 hcp 晶态原子数  $N_{hcp}$  随冷速的变化如表 1 所示.

表 1 不同冷速  $R_c$  下最大晶体团簇中的原子数  $N_c$ , fcc 原子数  $N_{fcc}$  和 hcp 原子数  $N_{hcp}$

| $R_c$ (K/s)  | $N_c$ | $N_{fcc}$ | $N_{hcp}$ |
|--------------|-------|-----------|-----------|
| $10^{12.30}$ | 34964 | 27176     | 7788      |
| $10^{12.70}$ | 3600  | 2244      | 1356      |
| $10^{13.00}$ | 1864  | 1367      | 497       |
| $10^{13.30}$ | 110   | 98        | 12        |
| $10^{13.70}$ | 17    | 6         | 11        |
| $10^{13.78}$ | 5     | 3         | 2         |
| $10^{14.00}$ | 0     | 0         | 0         |

可以看出, 最大晶体团簇是由 fcc 和 hcp 构成的混合结构(在最大晶体团簇中并未观察到 bcc 晶态原子).  $N_c$ ,  $N_{fcc}$ ,  $N_{hcp}$  均随冷速的增加而减少. 当冷速达到  $10^{14}$  K/s 时,  $N_c$ ,  $N_{fcc}$ ,  $N_{hcp}$  均为 0, 表明此时体系结晶

过程完全被抑制, 晶体团簇完全消失. 综上所述可以得出: 当冷速小于  $10^{12}$  K/s 时, 得到的是完全的晶态组织; 当冷速处于  $10^{12} \sim 10^{14}$  K/s 之间时, 得到的是由非晶相和晶体团簇组成的混合体; 当冷速达到  $10^{14}$  K/s 后, 得到的是不含晶体团簇的非晶态组织.

## 2.3 晶胚与晶体团簇之间的关系

### 2.3.1 晶体团簇的结构

为了更真实地表征各个冷速下最大晶体团簇的微观结构, 应用周期性边界对每个构型进行了处理, 即如果边界处的晶态原子同周期性镜像中的晶态原子成键, 则镜像中的晶态原子也作为真实的原子坐标输出, 从而可以更真实地反映晶体团簇的结构形貌. 图 4 为用 atomeye 分子可视化软件<sup>[17]</sup>显示的  $10^{12}$ ,  $10^{12.30}$ ,  $10^{12.70}$ ,  $10^{13}$ ,  $10^{13.70}$  和  $10^{13.78}$  K/s 冷速下最大晶体团簇的结构.

可以发现: 在所模拟的冷速范围内, 最大晶体团簇的始终为由 fcc 和 hcp 组成的混合结构, 并呈现层状偏聚形式. 当冷速为  $10^{12}$  K/s 时, 晶体团簇的尺寸可以认为无限大, 具有完整的周期性. 随冷速的增加, 最大晶体团簇的尺寸逐渐减小, 直到完全转变为非晶.

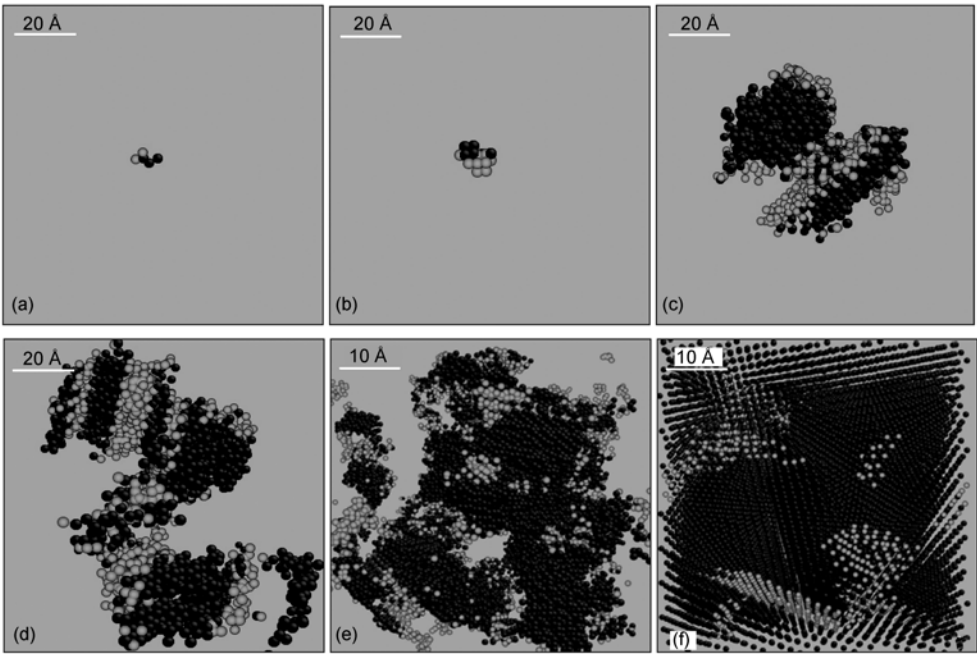


图 4 不同冷速下最终平衡构型中的最大晶体团簇的结构(白色的表示 hcp 晶态原子, 黑色表示 fcc 晶态原子)  
(a)  $10^{13.78}$  K/s; (b)  $10^{13.70}$  K/s; (c)  $10^{13}$  K/s; (d)  $10^{12.70}$  K/s; (e)  $10^{12.30}$  K/s; (f)  $10^{12}$  K/s

### 2.3.2 晶体团簇的结构

为了确定由 fcc 和 hcp 组成的混合结构是在形核阶段形成的, 还是生长阶段形成的, 我们需要确定比较不同冷速下最大晶体团簇中的原子数  $N_c$  和该冷速下在对应形核过冷度下形核时临界晶核中的原子数  $N_n$ . 当  $N_c > N_n$  时, 即模拟出的最大晶体团簇中的原子数大于临界晶核中的原子数, 意味着模拟出的最大晶体团簇已是长成一定尺寸的晶体;  $N_c = N_n$  时, 即模拟出的最大晶体团簇中的原子数等于临界晶核中的原子数, 意味着模拟出的最大晶体团簇是临界晶核;  $N_c < N_n$  时, 即模拟出的最大晶体团簇中的原子数小于临界晶核中的原子数, 意味着模拟出的最大晶体团簇是亚临界晶核. 显然, 如果  $N_c \leq N_n$ , 说明由 fcc 和 hcp 组成的混合结构起源于凝固时的形核阶段; 如果  $N_c > N_n$ , 说明由 fcc 和 hcp 组成的混合结构是起源于凝固时的生长阶段.

为了确定  $N_n$ , 需要知道一定冷速下熔体的均质形核过冷度. 均质形核过冷度  $\Delta T_v$  可用如下方程来确定

$$\int_0^{\Delta T_v} I_v V \frac{1}{R_c} d\Delta T = 1, \quad (2)$$

式中  $V$  为试样体积;  $I_v$  为均质形核率;  $\Delta T$  为过冷度.  $I_v$  表达式为<sup>[18]</sup>

$$I_v = A_v \exp \left[ -\frac{\Delta G_d}{k(T_m - \Delta T)} \right] \times \exp \left[ -\frac{\beta \sigma^3 V_m^2}{k \Delta S_m^2 (T_m - \Delta T) \Delta T^2} \right], \quad (3)$$

式中  $A_v$  近似为一个常数(对金属而言  $A_v$  为  $10^{41 \pm 1} \text{ m}^{-3} \text{ s}^{-1}$ <sup>[18]</sup>);  $\Delta G_d$  是原子在固/液界面上的迁移激活能;  $\beta$  是一个由晶核形状决定的参数 (对球状晶核而言  $\beta = 16\pi/3$ );  $\sigma$  为固/液界面能;  $k$  为波尔兹曼常数;  $T_m$  为熔点;  $\Delta S_m$  为熔化熵.

表 2 银的物理化学参数

| $T_m(\text{K})$ | $\Delta S_m(\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1})$ | $V_l(\text{m}^3)$      | $V_s(\text{m}^3)$      | $\Delta G_d(\text{J} \cdot \text{mol}^{-1})$ | $\Delta H(\text{J} \cdot \text{mol}^{-1})$ | $c_{pl}(\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1})$ | $c_{ps}(\text{J} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1})$ |
|-----------------|------------------------------------------------------------------|------------------------|------------------------|----------------------------------------------|--------------------------------------------|--------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------|
| 1234            | 9.12                                                             | $11.54 \times 10^{-6}$ | $11.16 \times 10^{-6}$ | 22200                                        | $9.61 \times 10^8$                         | 30.56                                                        | $21.31 + 8.54 \times 10^{-3} T + 1.51 \times 10^{-5} T^2$    |

表 3 银在不同冷速下的均质形核过冷度及临界晶核中的原子数

| Parameter              | Value        |              |           |              |              |              |
|------------------------|--------------|--------------|-----------|--------------|--------------|--------------|
| Cooling Rate (K/s)     | $10^{12.30}$ | $10^{12.70}$ | $10^{13}$ | $10^{13.30}$ | $10^{13.70}$ | $10^{13.85}$ |
| $\Delta T_v(\text{K})$ | 481          | 490          | 499       | 506          | 517          | 517          |
| $N_c$                  | 29           | 26           | 24        | 21           | 18           | 17           |

知道了均质形核过冷度, 可由(4)式确定出临界晶核半径  $r^*$ , 由(5)式确定出临界晶核中的原子数目  $N_n$ .

$$r^* = \frac{-2\sigma V_m}{\Delta S_m \Delta T_v}, \quad (4)$$

$$N_n = \frac{4\pi r^{*3} N_A}{3V_m}, \quad (5)$$

式中  $V_m$  为固相摩尔体积,  $N_A$  为阿佛加德罗常数. 除固/液界面能  $\sigma$  外, (2)~(5)式中的物理化学参数可方便的从有关手册中查到. 银的物理化学参数见表 2. 文献[19]给出了银固/液界面能随温度的变化关系. 表 3 列出了将表 2 银的物理化学参数和文献[19]给出的固/液界面能关系代入(2)~(5)式后, 计算得到的银在不同冷速下的均质形核过冷度及临界晶核中的原子数.

为了比较最大晶体团簇中的原子数与临界晶核中原子数的相对大小, 图 5 表示出了银最大晶体团簇中的原子数与临界晶核中原子数随冷速的变化关系. 可以看出, 当冷速等于  $10^{13.70} \text{ K/s}$  时, 模拟出的最大晶体团簇中的原子数等于临界晶核中的原子数, 这说明冷速等于  $10^{13.70} \text{ K/s}$  时, 模拟出的最大晶体团簇是临界晶核; 在冷速大于  $10^{13.70} \text{ K/s}$  后, 模拟出的最大晶体团簇中的原子数小于临界晶核中的原子数, 这说明当冷速大于  $10^{13.70} \text{ K/s}$  后, 模拟出的晶体团簇不是临界晶核, 也不是生长成为一定尺寸的晶体, 而是亚临界晶核(即晶胚). 从图 4(a)可以看出, 亚临界晶核(即晶胚)仍由 hcp 和 fcc 的混合偏聚结构构成. 这说明结晶后得到的由 fcc 和 hcp 构成的混合偏聚结构起源于熔体中的晶胚, 而并非起源于晶体的生长阶段. 这直接证明熔体的结构与其结晶后的结构是有直接内在联系的.

临界晶核中原子数  $N_n$  的可靠性取决于由(2)~(5)式对  $N_n$  计算时有关物理化学参数的准确性. 为了说明本文对银临界晶核中原子数  $N_n$  计算的可靠性, 将表 3

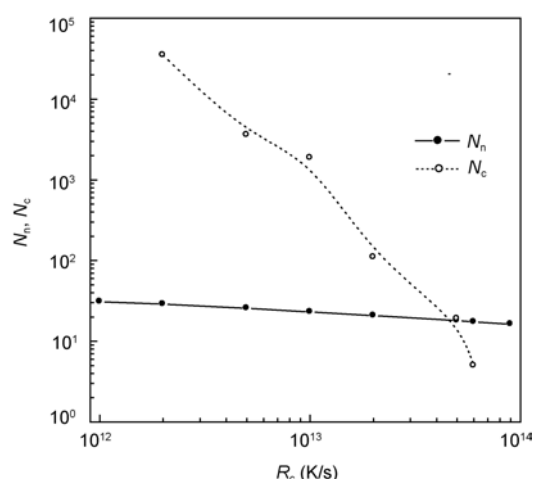


图5 最大晶体团簇中原子数  $N_c$  及临界晶核中的原子数  $N_n$  随冷速的变化关系

银的有关物理化学参数和文献[19]给出的固/液界面能关系代入(3)和(2)式, 对银熔体中不发生形核的临界冷速进行了计算. 方法是: 先将表2中银的有关物理化学参数和文献[19]给出的固/液界面能关系代入

(3)式, 确定出最大形核率下的过冷度, 然后将确定出的最大形核率下的过冷度代入(2)式, 即可计算出银熔体中不发生形核的临界冷速. 计算结果显示由23328个原子组成的银熔体中不发生形核的临界冷速为  $10^{14.78}$  K/s, 这非常接近本文的分子动力学模拟结果( $10^{14}$  K/s). 这说明由表3银的有关物理化学参数和文献[19]给出的固/液界面能关系计算得到其临界晶核中的原子数  $N_n$  是可靠的.

### 3 结论

1) 在一定的冷却速度范围内, 银熔体凝固后得到的组织是晶体团簇与非晶组成的混合体, 最大晶体团簇尺寸随着冷速的增加而减小.

2) 银凝固过程中的晶体团簇和结晶后的晶体是由面心立方和密排六方构成的层状偏聚结构.

3) 银熔体结晶后由面心立方和密排六方构成的层状组织偏聚结构起源于熔体中的晶胚, 在形核阶段就已经生成, 并非在生长阶段才开始产生.

### 参考文献

- Bong S L, Geoffrey W B, Robert M S, et al. Observation of the role of subcritical nuclei in crystallization of a glassy solid. *Science*, 2009, 326: 980–984
- Gibson J M. Viewing the seeds of crystallization. *Science*, 2009, 326: 942–943
- Bernal J D. A geometrical approach to the structure of liquid. *Nature*, 1959, 183: 141–147
- Cobb M, Drabold D A. Ab initio molecular-dynamics study of liquid GeSe<sub>2</sub>. *Phys Rev B*, 1997, 56: 3054–3065
- Li Y D, Hao Q H, Cao Q L, et al. Two-order-parameter description of liquid Al under five different pressures. *Phys Rev B*, 2008, 78: 174202
- Cheng Z N, Luo X C, Ma J P, et al. Molecular dynamics studies of bond orientational order in molten and quenched-vitreous state of LiCl. *Sci China Ser A-Math*, 1992, 35: 223–234
- Hui X D, Liu X J, Gao R, et al. Atomic structures of Zr-based metallic glasses. *Sci China Ser G-Phys Mech Astron*, 2008, 51: 400–413
- Liu H R, Liu R S, Zhang A L, et al. A simulation study of microstructure evolution during solidification process of liquid metal Ni. *Chin Phys*, 2007, 16: 3747–3753
- Li J Y, Liu R S, Zhou Z, et al. Microstructural transitions during the rapid cooling process of liquid metal Al. *J Mater Sci Technol*, 1998, 14: 461–464
- Liu C S, Xia J C, Zhu Z G, et al. The cooling rate dependence of crystallization for liquid copper: A molecular dynamics study. *J Chem Phys*, 2001, 114: 7506–7513
- Tian Z A, Liu R S, Liu H R, et al. Molecular dynamics simulation for cooling rate dependence of solidification microstructures of silver. *J Non Cryst Sol*, 2008, 354: 3705–3712
- Plimpton S J. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *J Comp Phys*, 1995, 117: 1–19
- Williams P, Mishin Y, Hamilton J. An embedded-atom potential for the Cu–Ag system. *Modell Simul Mater Sci Eng*, 2006, 14: 817–833
- Morris J R, Wang C Z, Ho K M, et al. Melting line of aluminum from simulations of coexisting phases. *Phys Rev B*, 1994, 49: 3109–3115
- Honeycutt J D, Andersen H C. Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters. *J Phys Chem*, 1987, 91: 4950–4963
- Zhao Y, Zhao J Z, Hu Z L. Molecular dynamics simulation of the nucleation in a supercooled liquid Ni<sub>3</sub>Al. *Acta Metall Sin*, 2008, 44: 1157–1160
- Li J. Atom Eye: An efficient atomistic configuration viewer. *Modell Simul Mater Sci Eng*, 2003, 11: 173–177
- Jian Z Y, Chang F E, Ma W H, et al. Nucleation and undercooling of metal melt. *Sci China Ser E-Tech Sci*, 2000, 43: 10–14
- Jian Z Y, Kazuhiko K, Jie W Q. Solid-liquid interface energy of metals at melting point and undercooled state. *Mater Trans*, 2002, 43: 721–734