

微弧等离子增材制造 NiCr 合金的分子动力学数值模拟

袁晓静¹, 郭晓辉¹, 关宁¹, 王旭平¹, 占军², 孙磊³

(1. 火箭军工程大学作战保障学院, 西安 710025; 2. 火箭军研究院, 北京, 100010;
3. 中国人民解放军 96864 部队, 洛阳, 431700)

摘要: 微弧等离子增材制造 NiCr 合金快速凝固过程对增材制造的结构件微观组织结构性能具有重要影响。采用分子动力学对微弧等离子增材制造 NiCr 合金构件生长过程中温度场变化及等轴晶生长过程进行模拟。结果表明, 冷却速率为 3.38 K/ps 和 0.675 K/ps 时, Ni-Cr 体系呈现非晶凝固, 0.0775 K/ps 冷却速率下, Ni-Cr 体系自发形核长大, 实现等轴晶凝固结晶过程, 这为微弧等离子增材制造组织演变研究提供了理论支撑。

创新点: (1) 运用 LAMMPS 软件分析了温度控制对微弧等离子增材成形 NiCr 合金构件生长的影响。当冷却速度大于 0.675 K/ps 时, Ni-Cr 体系呈现非晶凝固, 其非晶化转变温度为 850 K。

(2) 在 0.0775 K/ps 冷却速率下, 合金能够自发形核长大, 出现等轴晶凝固结晶, 结晶温度为 940 K。

(3) 当冷却速率减小, 凝固条件达到等轴晶形成条件时, 可以获得微弧等离子增材制造 NiCr 合金等轴晶的形核长大过程演变特征。

关键词: 等离子增材制造; 分子动力学; 数值模拟; NiCr 合金

中图分类号: TG 404 文献标识码: A doi: 10.12073/j.hjxb.20210131001

0 序言

Ni-Cr 合金具有优秀的耐无机酸腐蚀能力, 其中镍铬合金中由于 Cr 元素的存在, 易于生成氧化膜, 有效阻止腐蚀的发生, 在 600 ~ 900 ℃ 环境具有较好的性能, 广泛应用于燃气轮机发动机、核动力设备等航空航天关键构件^[1]。试验显示, 微弧等离子增材制造技术能够实现低成本的快速制造, 并通过改变合金构件的微观结构有效提升 Ni-Cr 合金构件的性能^[2]。

微弧等离子增材制造过程中温度梯度大, 沉积凝固过程中影响因素多且常常涉及到微观层次的演变过程, 因此难以采取试验方法进行观察, 特别是对于镍基高温合金熔凝过程的监测比较困难。目前, 分子动力学数值仿真在原子尺度介观尺度、微观尺度的计算机模拟方法在材料学中的运用越来越成为关注的重点, 当前发展较为迅速的相场法和元胞自动机等方法已经在增材制造领域取得了一

些成果^[3-4]。 Sawant 等人^[4] 用 Dilution 的有限元模拟方法对微弧等离子转移弧增材制造过程进行仿真并对模型进行了验证; 张冬云等人^[5] 采用激光金属熔覆成形过程中温度场演化的三维数值模拟; 马立杰等人^[6] 对增材制造加工过程中的温度场进行了模拟; 黄健康等人^[7] 对旁路耦合微束等离子弧堆垛与熔池动态行为数值模拟, 利用薄壁成形的有限元分析模型掌握了温度分布规律。 Keller 等人^[8] 通过有限元分析模拟激光熔池, 模拟的表面温度与合金原位热像测量结果吻合度较好。

微弧等离子增材制造过程 NiCr 合金的沉积过程中 Ni-Cr 原子组合特征可以采用分子动力学从原子尺度揭示材料微观信息, 从而揭示微弧等离子增材制造过程中 NiCr 微观结构演变规律。因此研究基于 LAMMPS 对 Ni-Cr 合金沉积过程进行数值分析, 探究 Ni-Cr 合金熔点的测量以及增材制造过程中 Ni-Cr 合金等轴晶凝固规律, 将为揭示微弧等离子增材制造 Ni-Cr 合金结构提供理论支撑。

1 模型与计算方法

分子动力学方法运用体系中所有分子所在位

置的变化来求得各分子之间能量及相互作用力, 从统计力学原理角度给出体系统计结果.

1.1 分子动力学基本原理

分子动力学建立在牛顿运动定律之上统计微观粒子运动轨迹和规律. 其基本原理^[9]是

$$m_i = \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} = \vec{f}_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \quad (1)$$

式中: $\vec{r}_i(t)$ 为第 i 个粒子在空间内的位置矢量; $\vec{f}_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$ 为第 i 个粒子受到的作用力; m_i 为第 i 个粒子的质量.

第 i 个粒子所受到的作用力也可以由体系势能函数 U_i 对位置矢量 $\vec{r}_i(t)$ 求一阶导数得到, 即

$$\vec{f}_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) = -\frac{\Delta U_i}{\Delta \vec{r}_i(t)}, \quad i = 1, \dots, N \quad (2)$$

故对于 N 个粒子构成的体系来讲, 每个粒子受到的作用力为

$$\begin{cases} m_i = \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} = \vec{f}_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t) \\ \frac{d \vec{r}_i(t)}{dt} = \vec{v}_i(t) \end{cases} \quad (3)$$

给定体系内第 i 个粒子初始坐标和速度的情况下, 通过式(3) 和原子间势函数, 可以求出第 i 个粒子在 Δt 时间间隔后的位置矢量和速度以及这个粒子该时刻所受到的作用力. 当 $i = 1, \dots, N$ 时, 可以求出整个体系中 N 个粒子的位矢、受力和速度.

1.2 嵌入原子势函数

分子动力学常用的对势包括^[10]: L-J 势、Morse 势、Born-Mayer 势等, 对势主要用来描述离子型化合物或是分子晶体, 但对于金属很难准确描述; 无方向性多体势有嵌入原子势 (embedded-atom method, EAM)、F-S 势等. 根据 Ni-Cr 合金体系特点优选 EAM 势进行表述研究. 系统总能量表示为

$$E'_{tot} = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) \quad (4)$$

式中: F_i 是第 i 个原子的嵌入势能; $\rho_{h,i}$ 是第 i 个原子缺失时“电子云”的密度. 进一步的考虑到核-核之间具有的排斥力, 修正后可表示为

$$E_{tot} = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} \phi_{ij}(r_{ij}) \quad (5)$$

$$\rho_{h,i}(r) = \sum_{j \neq i} f_j(r_{ij}) \quad (6)$$

式中: ϕ_{ij} 为两体势短程函数; r_{ij} 为第 i 和 j 两个原子之间的距离; f_j 为第 j 个原子的电子密度. EAM 势中假设所有的原子情况相同, 故采用 F , ϕ , ρ_e 和 f 替代 F_i , ϕ_{ij} , $\rho_{h,j}$ 和 f_j , 其中 ρ_e 表示平衡状态的“电子云”的电子密度. 令 r_{me} 表示第 m 个临近原子的距离, 有 $\phi_e = \sum_m \phi(r_{me})$, $\rho_e = \sum_m \rho(r_{me})$, 且由式(5) 可得式(7), 即

$$\left\{ \begin{array}{l} A_{ij} + F'(\rho_e) V_{ij} = 0 \\ A_{ij} = \frac{1}{2} \sum_m \frac{\phi'_m r_{me} r_{mej}}{r_{me}} \\ V_{ij} = \sum_m \frac{\rho_m r_{me} r_{mej}}{r_{me}} \end{array} \right. \quad (7)$$

EAM 理论能够克服传统对势理论中和准原子理论中的不足, 建立描述固体粒子相互作用的原子层次理论.

1.3 模型建立及初始体系参数设定

研究构建的 Ni-Cr (Ni:Cr = 0.75:0.25) 二元合金模型, 采用 Atomsk 软件生成 (图 1). 其中, Ni 原子单胞共 4 个原子 (包含盒子外侧), 单胞晶格常数为 3.506, 扩展为 $10 \times 10 \times 10$ 超晶胞, 为 FCC 构型, 共 4 000 个原子; 将超晶胞中 25% 的 Ni 原子替换为 Cr 原子, 分别构建单晶多晶模型.

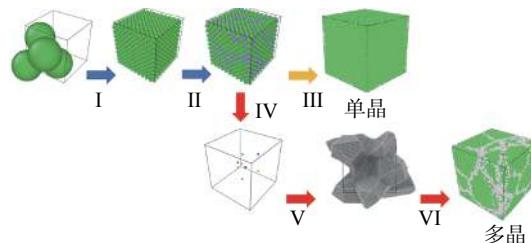


图 1 建立的 Ni-Cr 合金模型 (绿色: 体心立方; 蓝色: 面心立方; 红色: 密排六方; 橙色: 准晶体; 灰色: 其它)

Fig. 1 Established Ni-Cr alloy model (green: FCC; blue: BCC; red: HCP; orange: ICO; gray: other)

所构建的单晶及多晶模型中, Ni 原子约占 75%, Cr 原子约占 25%. 其中, 单晶模型为 $10 \text{ nm} \times 10 \text{ nm} \times 10 \text{ nm}$, 共 1.08×10^5 个原子. 多晶模型^[11] 盒子大小为 $10 \text{ nm} \times 10 \text{ nm} \times 10 \text{ nm}$, 盒子中共含有 8 个晶粒, 运用 Random 方法将种子取向放置在 8 个随机节点位置上, 平均晶粒尺寸为 6.20 nm, 按原子距离优化模型, 最终原子个数为 926 469, 均为 FCC 构型 (图 1).

为获得近乎无限大的体系, 引入周期性边界条件. 分子动力学模型的集成采用 NPT 系综进行模拟计算, 采用径向分布函数表征不同状态下体系内部结构的有序性.

2 讨论分析

2.1 熔点分析与模型确定

脉冲微弧等离子增材制造过程中, Ni-Cr 合金粉末将经历熔化和强制冷却凝固的过程, 根据 Ni-Cr

合金熔点^[12], 选取 2 500 K 为最终温度(结束温度)、300 K 为初始温度进行模拟计算。相关参数如表 1 所示, 体系在 300 K 环境下弛豫, 待系统平衡后再进行熔化过程的模拟。熔化过程采用 NPT 系综、高斯控温法进行体系和温度控制, 整个过程步长设置为 0.002 ps, 步数为 3×10^5 , 升温速率为 5.5 K/ps。

表 1 单晶生长条件
Table 1 Single crystal growth conditions

类别	初始温度 T_0/K	终止温度 T_1/K	步长 $\Delta t/\text{ps}$	步骤	温变速率 $v/(K \cdot \text{ps}^{-1})$	输出步长
熔点分析	300	2 500	0.002	3×10^5	升温: 5.5	1 000
	2 500	300	0.002	2×10^5	降温: 0.675	1 000
凝固演变	1 650	300	0.002	1×10^6	降温: 0.0775	1 000
	1 650	100	0.002	2×10^7	降温: 3.38	1 000

为验证多晶模型的有效性, 选用 EAM 势函数^[13]和 ADP 势函数^[14]分别对单晶和多晶模型的熔化过程进行模拟获得体系总能量, 如图 2 所示。可以看出, 单晶模型的能量曲线在 2 000 K 出现“拐点”, 过度吸热现象是单晶合金在熔化过程 FCC 晶体熔化潜热过大导致。在多晶的模拟过程中, 熔化潜热

对温度影响较为敏感, 且在 1 500 K 左右体系势能和总能量上升, 但温度基本不变, 这是由于熔化过程中存在相变跨越势垒的缘故。

图 3 给出了采用扫描量热法(DSC)测试微弧等离子增材制造 NiCr 合金熔点。对比发现, 基于 EAM 势函数分析的多晶模型模拟结果与实际测量值(1 285 °C = 1 558 K)相符。因此, 多晶模型与 EAM 势函数结合能够满足 NiCr 合金相变的表征模拟研究。

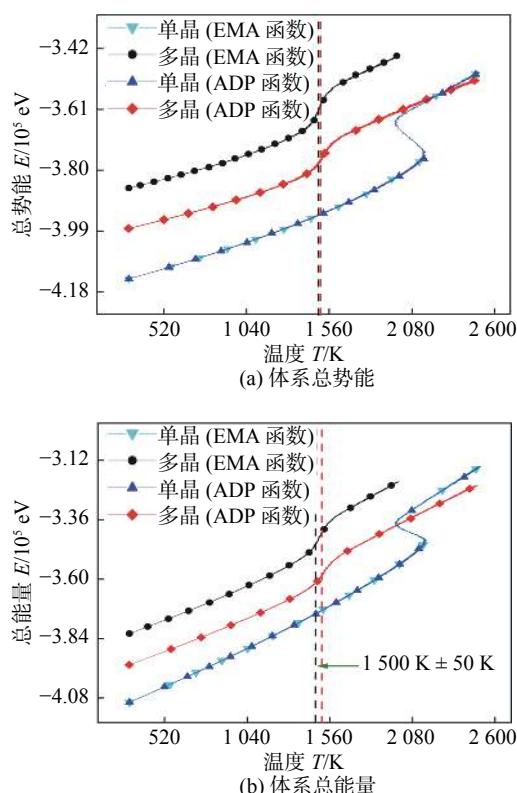


图 2 体系能量变化图

Fig. 2 Energy change diagram of the system. (a) total potential energy of the system; (b) total energy of the system

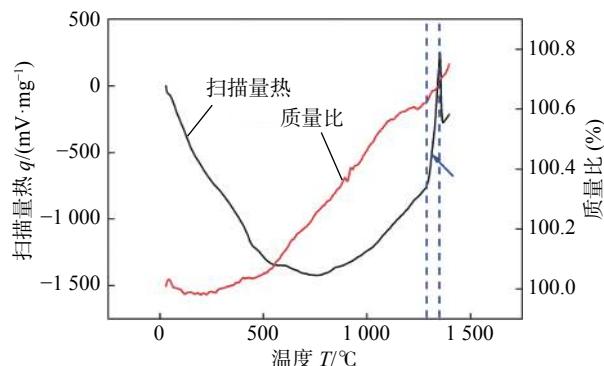


图 3 扫描量热法(DSC) 测量合金熔点
Fig. 3 Scanning calorimetry (DSC) measurement of alloy melting point

2.2 NiCr 合金熔化组织演变

图 4 为熔化过程中合金体系的变化过程, 图 4a~4e 可以看到随着温度的升高原子内能也不断升高, 粒子运动幅度增大且逐渐变为自由粒子; 体系内的晶界变宽致使 FCC 构型破坏且晶粒边界逐渐模糊; 达到熔点后, 晶体初始构型已经相变。图 4f 为不同温度下的径向分布函数(RDF)曲线, 可以看到

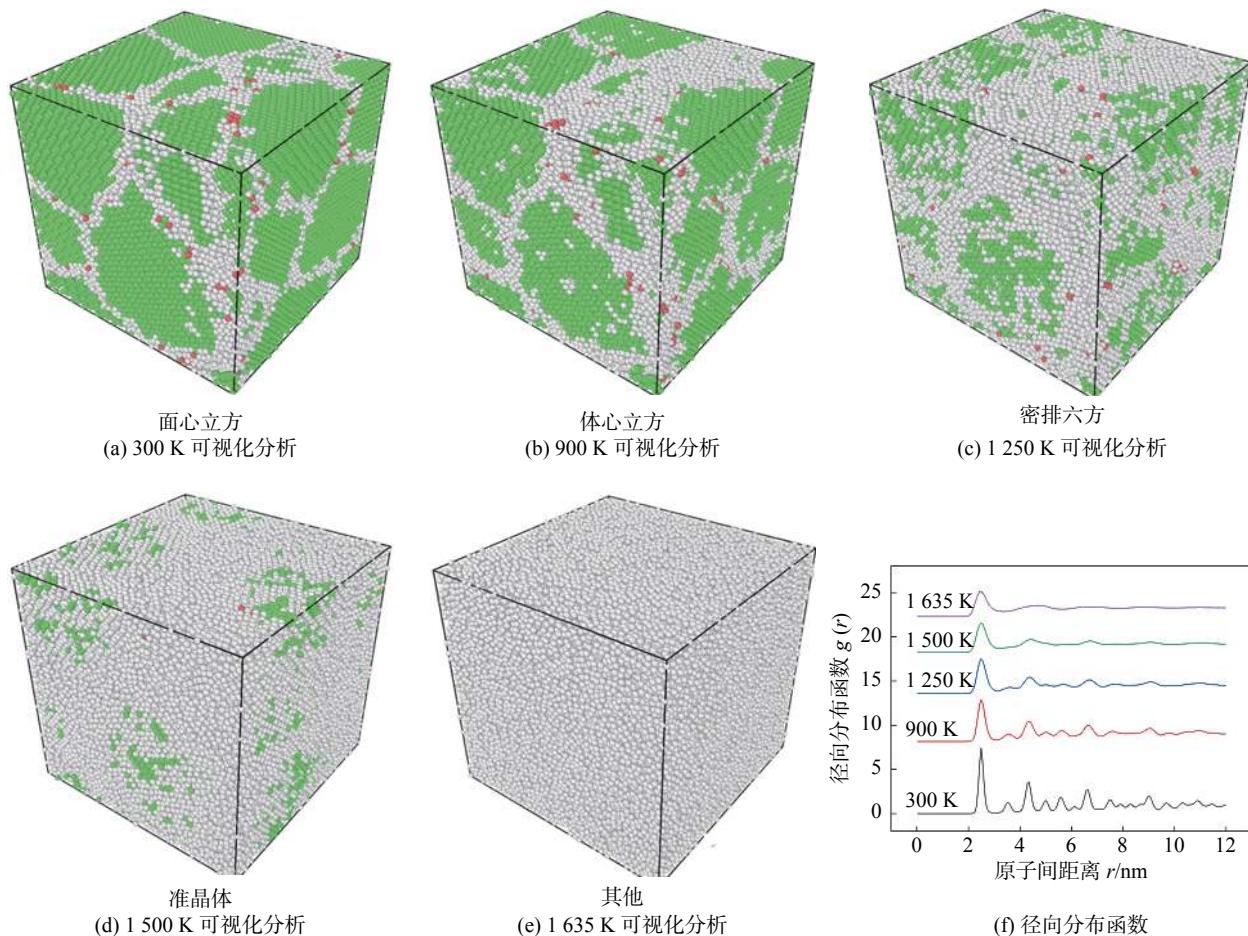


图 4 熔化过程可视化分析及径向分布函数变化过程(绿色: 面心立方; 蓝色: 体心立方; 红色: 密排六方; 橙色: 准晶体; 灰色: 其他)

Fig. 4 Visual analysis of the melting process and the change process of the radial distribution function (green: FCC; blue: BCC; red: HCP; orange: ICO; gray: other). (a) visual analysis at 300 K; (b) visual analysis at 900 K; (c) visual analysis at 1250 K; (d) visual analysis at 1500 K; (e) visual analysis at 1635 K; (f) radial distribution function

初期尖锐的波峰随着温度的升高逐渐圆润且高度降低, 波峰波谷的区分逐渐平缓, 呈现出显著的液相特征.

2.3 NiCr 合金非晶体系的形成

前述研究发现多晶+EAM 势的运用具有明显优势, 选用 EAM 势函数针对多晶模型进行研究. 如表 1 所示, Ni-Cr 合金体系在 300 K 下驰豫 20 000 步, 步长为 0.002 ps, 采用 NPT 系综控制整个体系; 在高温驰豫阶段, 采用 NPT 系综高斯控温法控制温度达到 1 650 K, 驰豫 20 000 步. 当体系处于稳定态后分别采用不同的降温速率控制凝固过程. 在 1 650 K 等温驰豫之后, 设置最终温度为 300 K, 步长 0.002 ps, 共计算 2×10^5 步, 冷却速率为 3.38 K/ps, 期间每隔 1 000 步输出 MSD 数据及体系势能和体系总势能, 并将不同温度下的 RDF 函数导出绘制成图, 如图 5 所示.

图 5a 为凝固过程中体系的总势能随步长的变化曲线, 随着凝固过程进行, 体系的温度不断下降, 体系的总势能也随之降低, 没有出现明显的拐点位置, 整个凝固过程平稳进行, 体系势能与温度呈正相关性. 图 5b 为凝固过程中原子均方位移函数 (mean squared displacement, MSD) 随凝固过程的变化曲线, 当 70 000 步时, MSD 曲线的上升过程放缓, 达到 100 000 步左右趋于平稳, 这是因为随着凝固过程的进行, 温度和体系能量逐渐降低, 扩散过程逐渐减弱.

逐渐增加步数以减小冷却速率, 在 1 650 K 等温驰豫之后, 设置结束温度为 300 K, 步长 0.002 ps, NPT 系综降温, 共计算 1×10^6 步, 期间每隔 1 000 步输出 MSD 数据及体系势能和体系总能量并绘制成图. 此过程的冷却速率为 0.675 K/ps. 图 5a 为冷却速率 0.675 K/ps 凝固过程中体系的总

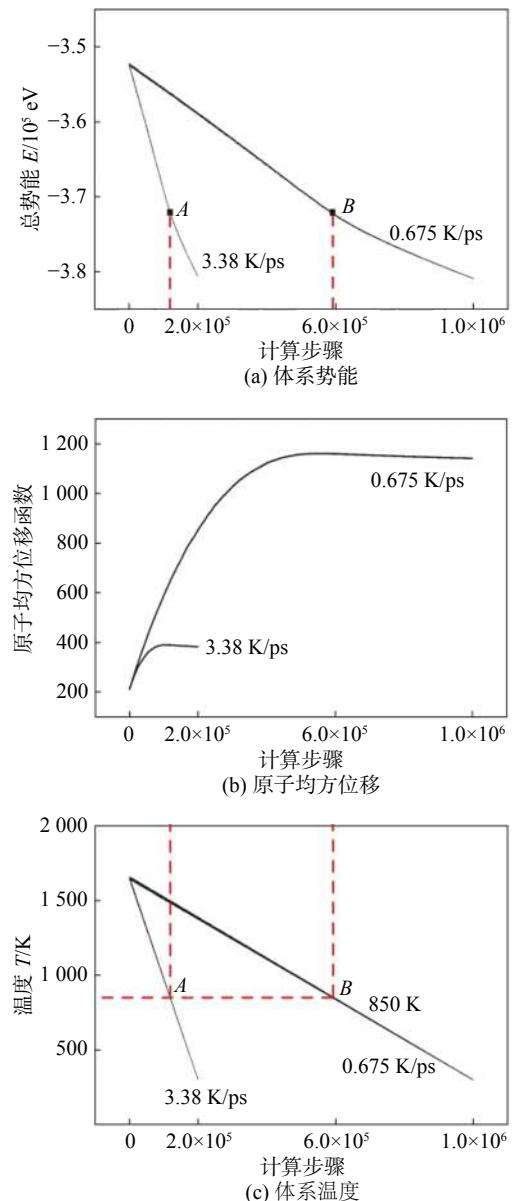


图 5 不同冷却速率下体系势能、原子均方位移及温度变化

Fig. 5 System potential energy, atomic mean square displacement and temperature changes under different cooling rates. (a) potential energy of the system; (b) mean square displacement of atoms; (c) temperature of the system

势能随步长增加逐渐降低, 图 5b 呈现了凝固过程中原子均方位移函数随凝固过程的变化曲线, 整个过程与冷却速度 3.38 K/ps 下的变化趋势基本相同。

对比发现, 无论是冷却速度 3.38 K/ps 还是 0.675 K/ps 下, 总势能的降低并非呈比例下降, 中途存在速率变化点(图 5a 中的 A, B 点)。到达速率拐点后, 曲线斜率变小、总势能下降速率放缓。此时, 对应温度点相同约为 850 K, 速率变化点对应温度为非晶转变温度。

将不同时间步长下的径向分布函数 (radial distribution function, RDF) 曲线绘制成图 6, 可以发

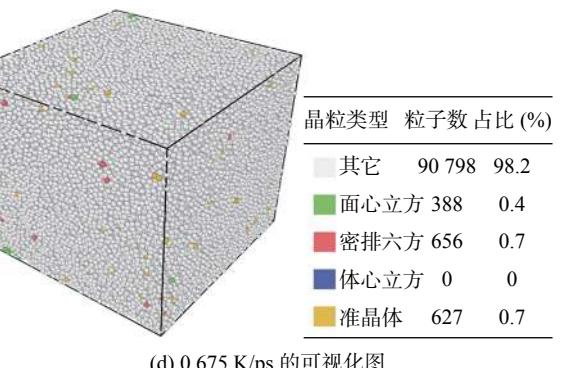
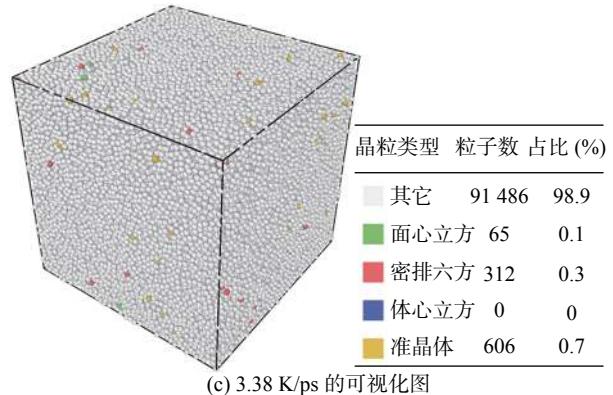
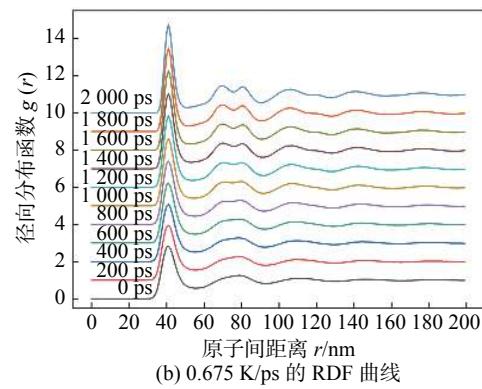
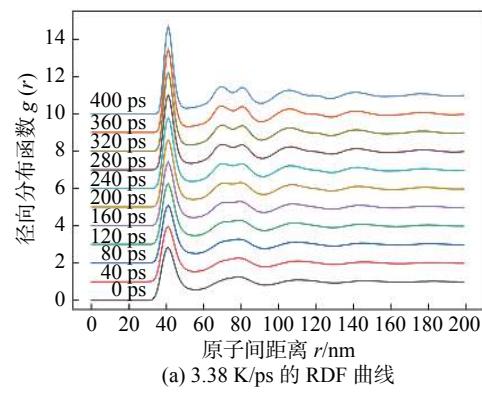


图 6 不同冷却速度下的 RDF 曲线及可视化图

Fig. 6 RDF curves and visualization diagrams at different cooling rates. (a) RDF curves of 3.38 K/ps; (b) RDF curves of 0.675 K/ps; (c) visualized graphs at 3.38 K/ps; (d) visualized graphs at 0.675 K/ps

现图 6a 对应的 3.38 K/ps 和图 6b 对应的 0.675 K/ps 冷却速率下, RDF 曲线没有明显的晶体特征峰, 相

同的是两个冷速下的 RDF 曲线第二峰位置都出现了“分裂峰”形状，呈现典型的非晶态特点。图 6c 中大量构型未转变为晶态构型。将图 5 中的“速率变化点”对应的时间点进行推算，分别约为 238 ps 和 1186 ps，可以证明镍铬合金的非晶态转变温度约为 850 K。这也说明微弧等离子增材制造 NiCr 合金中存在非晶态结构，因而具备良好性能。

2.4 脉冲微弧等离子增材制造 NiCr 等轴晶演变

前述研究发现，由于较大体系中步长的变化容易导致不稳定、丢失原子，根据表 1 所述参数，在 1650 K 等温驰豫之后，设置结束温度为 100 K，步长 0.002 ps，NPT 系统降温，共计算 2×10^7 步，期间每隔 1000 步输出 MSD 数据及体系势能和体系总能量，并将不同温度下的 RDF 函数导出绘制成图。此过程的冷却速率为 0.0775 K/ps。

图 7 为 0.0775 K/ps 冷却速率下的体系能量、MSD 及 RDF 曲线图。可以看出体系总能量曲线与温度下降成正相关性，在 940 K 出现拐点，体系能量骤降且温度维持恒定，这是结晶的初始状态突破能垒消耗了一部分能量所导致，且在拐点之后，体系总能量下降速率减缓；MSD 曲线中同样出现了

拐点，MSD 出现明显阶梯下降后保持水平发展；RDF 曲线进行了多次输出，9400 ps 后晶体特征峰逐渐显现，随着凝固过程的进行，特征峰逐渐尖锐，晶体结构逐渐呈现。

晶体和非晶体转变同样可以通过公共近邻域分析加以区别，如图 8 所示。可以看到较高的凝固温度得到的非晶结构中未形成特殊键对呈现非晶体特征，而相对较低的冷却速率 (0.0775 K/ps) 下，熔体能够正常结晶，FCC 构型和 HCP 构型的原子增多，其它原子则逐渐减少，若进一步降低凝固速度，则立方构型的原子将会更多，凝固过程更加贴近实际情况。从图 9 中能够更为直观地看到较为详尽的凝固结晶过程，NiCr 合金熔体经历了液态合金降温、达到结晶温度、自发形核、晶核长大的结晶过程。

2.5 等轴晶区的试验验证

增材制造过程中形核方式几乎都为异质形核，但均质形核的过程也是存在的，如柱状晶-等轴晶转变。少部分等轴晶形成的原因是局部熔体的凝固条件达到了均质形核所需条件，分子动力学模拟很好地展现等轴晶区域凝固结晶过程^[15]。

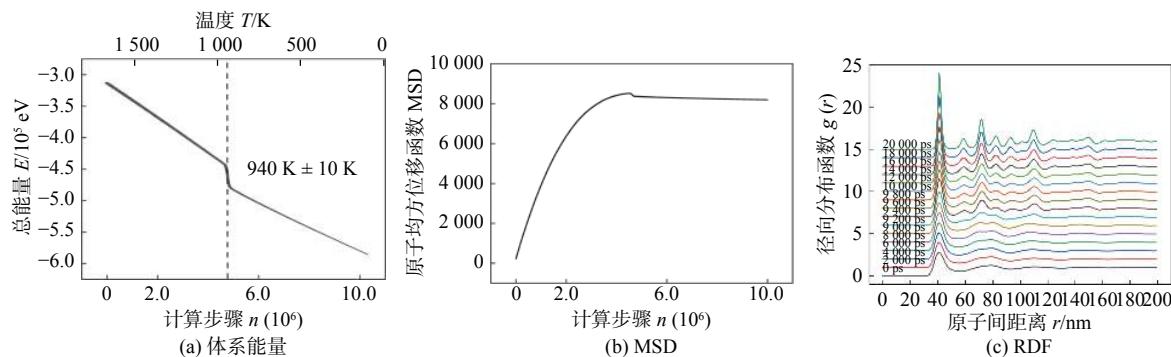


图 7 冷却速率下的体系能量、MSD 及 RDF 曲线

Fig. 7 System energy, MSD and RDF curves under cooling rate. (a) system energy; (b) MSD curve; (c) RDF curve

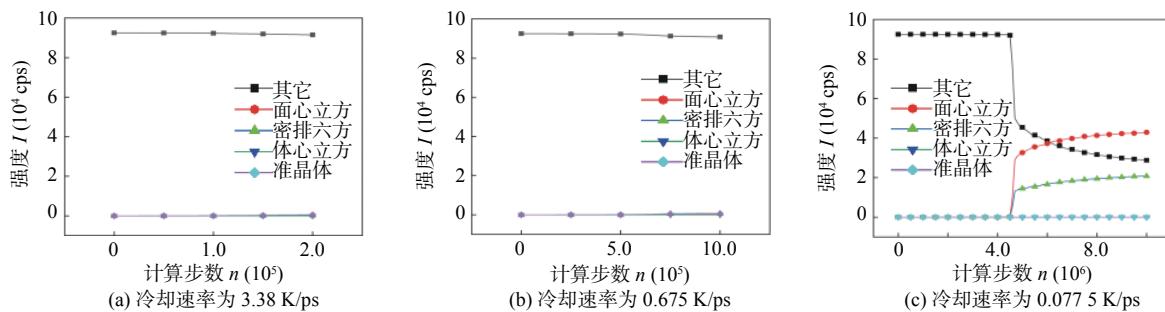


图 8 不同冷却速率下的公共近邻域分析图

Fig. 8 Common neighborhood diagram under different cooling rates. (a) the cooling rate is 3.38 K/ps; (b) the cooling rate is 0.675 K/ps; (c) the cooling rate is 0.0775 K/ps

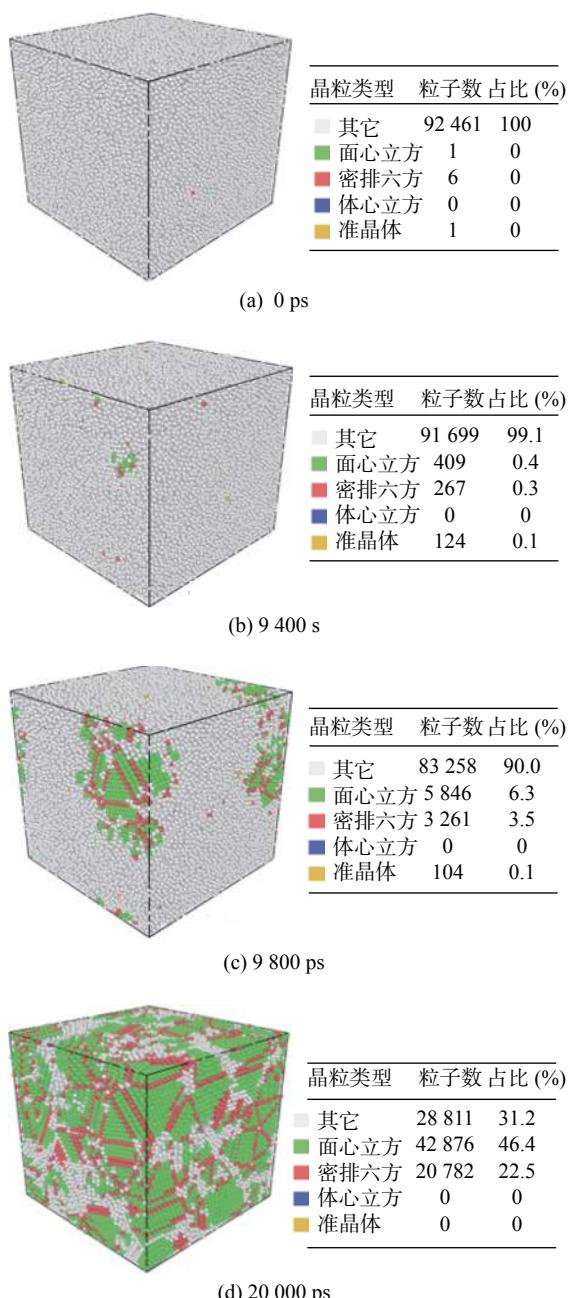


图 9 凝固结晶过程的可视化分析

Fig. 9 Visual analysis of solidification and crystallization process. (a) 0 ps; (b) 9 400 s; (c) 9 800 ps; (d) 20 000 ps

图 10 为分子动力学模拟与增材制造 NiCr 合金构件等轴晶的电镜对比. 其中图 10a, 10b 为分子动力学模拟 NiCr 合金多晶模型和多晶凝固模拟结果, 图 10c, 10d 为薄壁构件顶部区域形貌的局部放大图. 可以看出, 多晶凝固模拟结果能够与 NiCr 合金熔覆层顶部区域的等轴晶区形貌较好吻合, 凝固组织由各向同性的等轴晶粒组成. 由于顶部区域凝固条件的特殊性, 等轴晶通过均质形核方式形核并逐渐长大, 长大的晶粒相互靠近、挤压形成晶界.

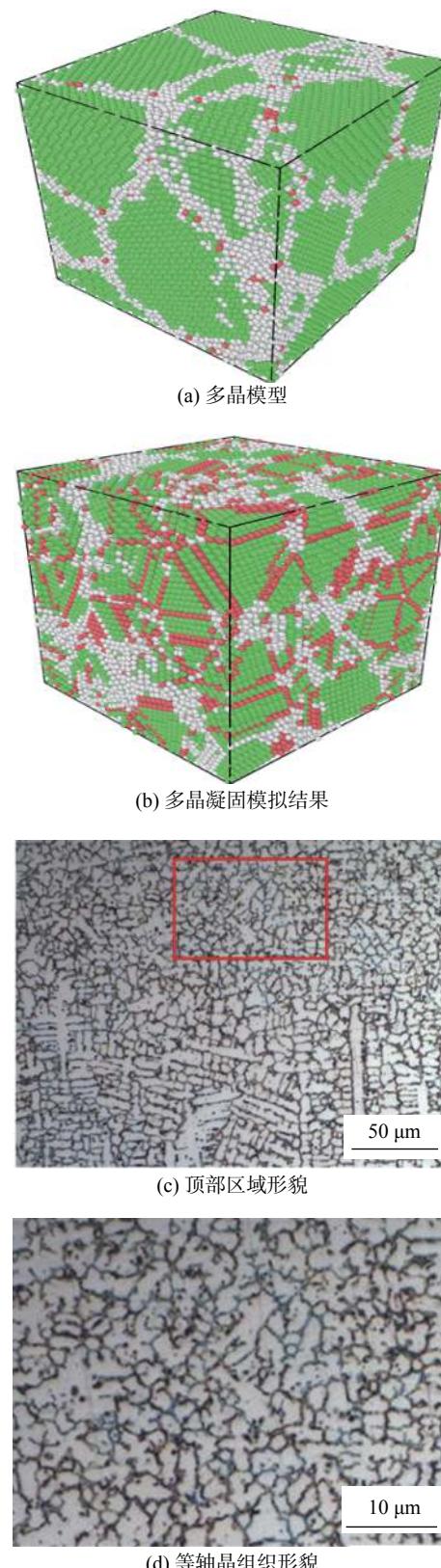


图 10 分子动力学模拟与等轴晶区电镜照片对比图

Fig. 10 Comparison of molecular dynamics simulation and electron microscope photos of equiaxed crystal regions. (a) polycrystalline model; (b) polycrystalline solidification simulation results; (c) top region morphology; (d) equiaxed crystal structure morphology

3 结论

(1) 采用分子动力学构建了单晶、多晶模型, 对镍铬合金体系的熔化过程进行了模拟。结果发现, 微弧等离子增材制造的 NiCr 合金在 3.38 和 0.675 K/ps 冷却速率下, 存在非晶态合金, 其非晶化转变温度为 850 K。

(2) 在 0.0775 K/ps 冷却速率下, 合金自发形核长大, 出现等轴晶凝固结晶, 其结晶温度为 940 K。

(3) 当冷却速率减小, 凝固条件达到等轴晶形成条件时, 可以获得微弧等离子增材制造 NiCr 合金等轴晶的形核长大过程演变特征。这为微弧等离子增材制造微观组织演变提供了理论支撑。

参考文献

- [1] 高钰璧, 丁雨田, 孟斌, 等. Inconel 625 合金中析出相演变研究进展 [J]. *材料工程*, 2020, 48(5): 13–22.
Gao Yubi, Ding Yutian, Meng Bin, et al. Research progress in evolution of precipitated phases in Inconel 625 super alloy[J]. Journal of Materials Engineering, 2020, 48(5): 13–22.
- [2] Wang K, Liu Y, Sun Z, et al. Microstructural evolution and mechanical properties of Inconel 718 superalloy thin wall fabricated by pulsed plasma arc additive manufacturing[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2020, 819: 1–10.
- [3] 耿汝伟, 杜军, 魏正英, 等. 金属增材制造中微观组织相场法模拟研究进展 [J]. *材料导报*, 2018, 32(7): 1145–1150, 1180.
Geng Ruwei, Du Jun, Wei Zhengying, et al. Current research status of phase field simulation for microstructures of additively manufactured metals[J]. *Materials Reports*, 2018, 32(7): 1145–1150, 1180.
- [4] Sawant M, Jain N K, Nikam S. Theoretical modeling and finite element simulation of dilution in micro-plasma transferred arc additive manufacturing of metallic materials[J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2019, 164: 1–10.
- [5] 张冬云, 吴瑞, 张晖峰, 等. 激光金属熔覆成形过程中温度场演化的三维数值模拟 [J]. *中国激光*, 2015, 42(5): 104–115.
Zhang Dongyun, Wu Rui, Zhang Huifeng, et al. Numerical simulation of temperature field evolution in the process of laser metal deposition[J]. *Chinese Journal of Lasers*, 2015, 42(5): 104–115.
- [6] 马立杰. AISI316 激光熔覆成形过程数值模拟研究 [D]. 北京: 北京理工大学硕士学位论文, 2015.
Ma Lijie. The research of AISI 316 of numerical simulation in laser cladding forming (LCF)[D]. Beijing: Master Thesis of Beijing Institute of Technology, 2015.
- [7] 黄健康, 杨茂鸿, 余淑荣, 等. 旁路耦合微束等离子弧堆垛与熔池动态行为数值模拟 [J]. *机械工程学报*, 2018, 54(2): 70–76.
Huang Jiankang, Yang Maohong, Yu Shurong, et al. Study on the dynamic behavior of metal pool during the stationary pileup of the double-electrode micro plasma arc welding[J]. *Journal of Mechanical Engineering*, 2018, 54(2): 70–76.
- [8] Keller T, Lindwall G, Ghosh S, et al. Application of finite element, phase-field, and CALPHAD-based methods to additive manufacturing of Ni-based superalloys[J]. *Acta Materialia*, 2017, 139: 244–253.
- [9] 梁永超, 刘让苏, 朱轩民, 等. 液态 Mg₇Zn₃ 合金快速凝固过程中微观结构演变机理的模拟研究 [J]. *物理学报*, 2010, 59(11): 7930–7940.
Liang Yongchao, Liu Rangsu, Zhu Xuanmin, et al. Simulation study of evolution mechanisms of microstructures during rapid solidification of liquid Mg₇Zn₃ alloy[J]. *Acta Physica Sinica*, 2010, 59(11): 7930–7940.
- [10] 陈强, 曹红红, 黄海波. 分子动力学中势函数研究 [J]. *天津理工学院学报*, 2004, 20(2): 101–105.
Chen Qiang, Cao Honghong, Huang Haibo. A research on the interatomic potential in molecular dynamics(MD)[J]. *Journal of Tianjin Institute of Technology*, 2004, 20(2): 101–105.
- [11] Hirel P. Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files[J]. *Computer Physics Communications*, 2015, 197: 212–219.
- [12] Tsuzuki H, Branicio P S, Rino J P. Structural characterization of deformed crystals by analysis of common atomic neighborhood[J]. *Computer Physics Communications*, 2007, 177(6): 518–523.
- [13] 方向, 赵云松, 张剑, 等. 固溶热处理对一种第三代镍基单晶高温合金组织及高温持久性能的影响 [J]. *重庆大学学报*, 2017, 40(10): 87–98.
Fang Xiang, Zhao Yunsong, Zhang Jian, et al. Effect of solution heat treatment on microstructures and stress rupture properties of a third generation Ni-based single crystal superalloy[J]. *Journal of Chongqing University*, 2017, 40(10): 87–98.
- [14] Bonny G, Terentyev D, Pasianot R C, et al. Interatomic potential to study plasticity in stainless steels: the FeNiCr model alloy[J]. *Modelling & Simulation in Materials Science & Engineering*, 2011, 19(8): 85008–85021.
- [15] 刘志勇, 许庆彦, 柳百成. 铸造镁合金的枝晶生长模拟 [J]. *金属学报*, 2007, 43(4): 367–373.
Liu Zhiyong, Xu Qingyan, Liu Baicheng. Modeling of dendrite growth for the cast magnesium alloy[J]. *Acta Metallurgica Sinica*, 2007, 43(4): 367–373.

第一作者:袁晓静, 博士, 副教授, 博士研究生导师; 主要从事装备综合防护与增材制造技术; E-mail: yuanxj2003@163.com.

(编辑: 张基隆)