

·成果简介·

## 国家自然科学基金支持我们走向世界

刘让苏

(湖南大学应用物理系,长沙 410082)

[关键词] 凝固,液态结构,团簇,演变,模拟

自1993年首次获得国家自然科学基金资助以来,在国家科学基金的持续资助和促进下,我们在液态金属凝固过程中微观结构演变机理的模拟研究方面不断取得新的进展,并已开始从中国走向世界。回顾这十年来科研工作的实践历程,我们的每一步进展都是在国家自然科学基金委员会(以下简称自然科学基金会)的支持和鼓励下取得的,我们是基金制的直接受益者。

众所周知,金属材料的宏观性能主要是由其在液态凝固过程中所形成的微观结构决定的,为了能够获得具有优良宏观性能金属材料,就必须对液态金属的凝固过程及其微观机制,特别是对微结构演变过程中所必须经历的极其重要的结构组态——原子团簇(即小短程有序区)以及由这些团簇结构演变而成为整个非晶、晶体结构的微观机制进行更为深入的研究。因为对这些结构及其演变机理的研究,无论在凝固过程的理论研究上还是实际应用上都具有非常重要的意义。

然而,在目前,无论是理论研究还是实验研究,都尚未真正触及液态金属凝固过程中的团簇结构。其原因在于:从实验研究来看,在现有的实验条件下,对于处于熔点以上高温液态金属的微观结构以及在凝固过程中各阶段团簇结构的变化,特别是纳米级的大团簇结构的变化,很难进行精确的测定,更无法对其结构的演化过程进行跟踪测量。从理论研究来看,要能对纳米级以上的大团簇结构的形成和演变过程进行模拟跟踪研究,一方面,至少需要计算10—100万个原子以上的较大系统,才能获得一个边长约为50—100原子的小立方体以进行最基本的研究。而要使研究的系统更接近于实际情况,则需要更大系统。而要真正实现对100万个原子以上的

大系统的模拟研究,无论在计算机硬件还是软件方面,都还存在着相当大的困难;另一方面,特别重要的是,还必须建立一套科学、简便而又完整地描述(表征)各种原子团簇、特别是纳米团簇的方法,才能从错综复杂的大量原子系统中,识别出各种团簇结构并观测到它们的形成和演变规律来。正因为如此,才使得液态金属凝固过程中纳米级以上大团簇结构的形成、演变机理的研究成为一个重要的材料科学研究领域。

随着计算机技术的飞速发展,已有可能将分子动力学方法这一物理概念和物理图像都十分清晰的手段用于对液态金属凝固过程模拟研究。在国家自然科学基金的持续资助下,我们已经在“银河机”上成功地实现了对拥有5万、10万个液态金属原子的较大系统的凝固过程的模拟研究。接着又在与我们有合作关系的澳大利亚的Clare超级计算机上实现了40万个原子的模拟研究。目前正在进行100万个原子的模拟研究,为进一步实现100万个以上原子的大系统的模拟研究打下了坚实的计算技术基础。

另一方面,我们在前述的研究中,对凝固过程中的巨大的无序系统的描述也取得了重要的研究进展。主要是“原子团簇键型指数法”的提出,它已开始成为我们在液态金属无序系统的茫茫大海中寻找各种团簇的形成与演变规律以及凝固过程的控制途径的关键手段。因为随着我们能够进行模拟计算的原子数目的成十倍、成百倍、甚至上万倍的提高,我们对模拟研究计算中所获得的极其复杂、数量巨大的有关微观结构的数据(数以上千万个计),如何进行分析与检测,也就成为能否继续前进的关键所在。为此,我们在原来提出的“原子示踪法”、“中心原子

本文于2004年2月2日收到。

法”的基础上,又进一步结合 Honeycutt-Andersen 的“键型指数法”,提出了“原子团簇键型指数法”,相当成功地描述了拥有 100—150 个原子左右的较大的原子团(其尺度已达到纳米级)的复杂的微观结构组态的形成与演变过程。当用这一方法分析 5 万、10 万、40 万个原子的较大系统时,获得的结果分别发表在《中国科学》、*Mater. Sci. Eng. B*、*J. Phys.: Condens. Matter*、*Chin. Phys. Lett.*、*J. Mater. Sci. Lett.* 等国内外刊物上,并立即得到有关同行专家、学者的密切关注。特别是 *Mater. Sci. Eng. B* 的评审人给予了相当高的评价:“Good discussions for a very difficult task, scientific merit high”。根据这一对极为复杂的无序系统的微观结构的描述思路和方法的初步成功,我们更深信自己完全有能力形成一套比较完整的描述无序系统的理论与方法,为液态金属凝固过程研究这一重要领域作出新的贡献。

在自然科学基金会的支持下,我们在国际交流方面不断取得新的进展。随着我们研究工作初步成果的取得,已开始引起国际上同行专家的密切关注和高度重视。首先,我们收到首届国际“材料智能加工与制造”学术会议(IPMM'97)主席、澳大利亚 Wollongong 大学 T. Chandra 教授的热情邀请,并在信中赞誉我们为“该领域的先驱研究者”。我们应邀在会上报告了自己的工作,受到与会者的欢迎。其后,我们相继收到第二、第三、第四届国际会议主席、加拿大 British Columbia 大学 J. A. Meech 教授的热情邀请,担任大会学术委员会委员(中国只有一名委员)并在会上作题为“液态金属急冷过程中微结构的遗传与控制”的特邀主题报告(Key Note Talk)。现又相

继收到第四届国际无机材料学术会议(IM-2004)大会主席、美国西北大学 K. R. Peoppelmeier 教授的来信,以及第八届世界系统论、控制论与信息论学术会议(SCI-2004)大会主席 N. Callaos 教授等多家的来信,均邀请我们递交报告论文。应当说,这些国际会议的大会主席对我们的这种热情邀请和信任,既是国际学术界对我们科学基金资助下所进行的现有研究工作的学术地位的肯定,也是我国科学界在该学科领域内获得的一种信誉。

同时,在自然科学基金会的支持下,我们的国际合作研究也正在深入地开展起来。自首届国际会议(IPMM'97)结束后,访问澳大利亚 New South Wales 大学材料科学与工程学院以来,开展了实质性的国际合作研究。经过多次相互访问,在许多问题上取得了共识。正是在对方的大力支持下,我们在对方的 Clare 超级计算机上完成了 40 万个原子大系统的模拟研究。

总之,我们在国家自然科学基金的持续资助下,经过较长时间的艰苦奋斗,已经初步形成一个具有自己特色的关于液态金属凝固过程中微观结构、特别是原子团簇结构的演变与遗传特性模拟研究的新领域。我们的初步研究成果已经开始从中国走向世界,在国际学术界产生一定的影响,且正在不断提高。国际交流与合作也正在不断向纵深发展。只要我们能够不失时机地抓住这一强劲的发展势头,认真坚持下去,进行深入的研究,就一定可以攀上该领域的高峰,在我们从事的“液态金属凝固过程中微结构转变与控制的模拟研究”方向得到更快的发展,为凝固科学与技术的发展做出新的贡献。

## SUPPORTED BY NSFC, MARCHING ON THE ROAD FROM CHINA TO THE WORLD

Liu Rangsu

(Applied Physics Department, Hunan University, Changsha 410082)

**Key words** solidification, liquid structure, cluster, evolution, simulation