

基于深度势能的 Al-Sc 合金力学性能 分子动力学模拟研究

李 娟, 薛红涛*, 张志军, 常 真, 汤富领, 任军强, 卢学峰, 李俊琛

(兰州理工大学 材料科学与工程学院 省部共建有色金属先进加工与
再利用国家重点实验室, 甘肃 兰州 730050)

摘 要: 基于高通量第一性原理计算拟合深度势能 (DP) 模型有望解决稀土铝合金分子动力学模拟过程中势能函数稀缺的问题。本文首先使用深度学习方法训练 Al-Sc 二元势函数, 并通过对比 DP 与 DFT 的原子间力、能量、能量-体积曲线和弹性模量等对 DP 势函数的精度进行测试。结果表明, DP 预测的原子间力、能量、析出相能量-体积曲线、弹性模量与第一性原理计算结果非常接近, 证明本文开发的 DP 势函数具有较高的精度。在此基础上, 使用 DP 势函数对不同 Sc 含量的 Al-Sc 单晶合金进行了单轴拉伸变形研究, 发现 Al-0.1%Sc (原子分数) 合金具有最高的抗拉强度, 可为高性能稀土铝合金的成分优化提供参考。

关键词: 深度学习; 分子动力学; Al-Sc; 第一性原理; 稀土铝合金

中图分类号: TG146.21

文献标识码: A

文章编号: 1004-0277(2025)06-0038-10

描述原子、分子和离子之间相互作用的原子间势函数在凝聚态物质分子动力学模拟中起着至关重要的作用。迄今为止, 如何准确、高效地表示势能面一直是分子动力学模拟中需解决的问题。原子间势函数的发展可以追溯到早期经验势函数, 以及现在先进的机器学习势函数。可用势函数通常可以分为经验势 (例如 Lennard-Jones 势等^[1])、半经验势 (如 ReaxFF 势等^[2])、第一性原理势 (例如 PAW 势等^[3]) 和机器学习势 (例如, 深度势能等^[4])。

根据实验数据或经验法则拟合参数得到的经验势函数因简单且计算效率高而被广泛使用, 但其预测精度并不高。半经验势函数因在经典力场中加入量子力学效应, 故可以模拟化学反应和化学键的断裂。基于密度泛函理论 (Density functional theory, DFT) 的第一性原理计算方法虽能对材料结构-性能进行精确地验证或预测, 但其计算成本较高。显然, 这就造成一个两难的局面: 第一性原理方法虽准确但效率低, 经验力场方法虽高效但精度

收稿日期: 2024-01-17

基金项目: 国家自然科学基金项目 (12204210); 广西科技计划项目 (桂科 AA22068084); 中国科学院金属研究所项目 (IMR-FWHT-202304-1012); 甘肃省科技重大专项 (22ZD6GA008); 甘肃省基础研究创新群体项目 (25JRRA803)

作者简介: 李 娟 (1996-), 女, 甘肃庆阳人, 硕士研究生, 主要从事稀土铝合金势函数的开发, E-mail: 17393121754@163.com

* 通信作者: 薛红涛, 副研究员, E-mail: xueht@lut.edu.cn

DOI: 10.3724/S1004-0277.202506005

有限。因此,目前急需一种高效且精确的势能模型来计算各种各样材料的物理或化学性质。利用现代机器学习工具,可以通过分析第一性原理计算数据,对结构或结构力场模型进行参数化。借助强大的人工智能算法,研究者可以从具有高度非线性函数依赖关系的庞大、复杂数据集中学习势能面,并成功开发出机器学习势函数^[5-7]。使用机器学习势函数,可实现模拟精度和效率之间的平衡^[8],也为力场开发提供了新的视角^[9-15]。因此,近年来机器学习势得以快速发展,并在计算物理、化学和材料科学等领域实现应用^[16]。其中,北京大学鄂维南院士团队^[17]提出的深度势能(DP)模型成功建立起非原位计算数据、机器学习方法和力场三者之间的桥梁。目前,该团队所开发的 DeePMD-kit 系列软件包已逐渐成为一种深受用户认可的国产深度学习势能框架,原因在其模型训练过程高度自动化、效率高,且训练出的 DP 势函数可方便地应用于知名分子动力学软件包 LAMMPS 进行势函数的验证,有利于 DP 势函数的传播和推广。在稀土铝合金中,目前可用的原子间势函数奇缺,严重阻碍对该合金结构和性质的模拟研究。为解决该瓶颈问题,本工作拟采用深度势能技术,该技术基于密度泛函理论的第一性原理高通量计算结合深度学习方法来开发当前欠缺的稀土铝合金原子势函数,为深入开展稀土铝合金成分设计与性能优化的分子动力学模拟奠定基础。

近几十年来,Al-Sc 合金因具有密度低、刚度和比强度高、高温抗蠕变性能优异等诸多优点^[18-21],受到人们的广泛关注,并在汽车和航空航天工业中得到广泛应用^[22-24]。Fu 等^[25]研究表明,Al₃Sc 在零压下的杨氏模量为 166 GPa,为纯 Al 杨氏模量的两倍以上。为了解更多 Al-Sc 合金性能,学者们还详细研究了 Al₃Sc 的结构和热力学性能^[26,27]。与纯 Al 相比,添加 Sc 可显著提高 Al-Sc 合金的强度和刚度^[28,29]。此外,在 375 °C 老化过程中,Al-Sc、Al-Zr 和 Al-Sc-Zr 合金采用电阻率和 TEP 组合做了溶质演变,发现 Sc 和 Zr 对铝的 TEP 均有正向影

响,并且电阻率随老化时间的变化而不断减小,电阻率的降低可归因于析出相形成时固溶体的耗竭^[30]。在 5056 铝合金退火热处理中,发现 280 °C 保温 2 h 为适宜的退火制度^[31]。然而,Sc 的昂贵价格和稀缺性导致 Al-Sc 合金成本较高,严重制约其大规模应用。计算模拟能以较低的经济和时间成本对 Al-Sc 合金进行系统研究,既有助于节约研发成本和时间,又可避免稀土资源快速消耗或浪费。

为获得高度适用且准确的 DP 势,本研究的训练数据集采集了纯 Al、纯 Sc 以及全浓度 Al-Sc 合金对应的能量、原子间力和维里应力。通过将 Al-Sc 合金的结构和物理性质与第一性原理计算结果进行比较,以检验 DP 势的准确性。例如,通过比较 DP 势和第一性原理计算的体系能量、原子间受力以及状态方程等,证明了 DP 势和第一性原理计算结果的偏差较小。在此基础上,进一步研究了 Al-Sc 合金的单轴拉伸变形行为和弹性等力学性能。

1 计算方法

深度神经网络势函数由 DP-GEN 方案构建和测试,由三个过程组成:Init、Run 和 Autotest,如图 1 所示。Init 阶段依次进行结构弛豫、结构微扰和从头算分子动力学模拟以得到初始数据集。Run 阶段是势函数拟合阶段,该阶段利用类似于主动学习的策略不断采集新数据、扩充训练集,以此来获得更为优质的势函数模型。最后通过 Autotest 程序对体系性质进行预测对比,从而验证势函数精度。势函数训练过程中,本文主要考虑了面心立方(FCC)、体心立方(BCC)和密排六方(HCP)结构的 Al、Sc 以及全浓度范围的 Al-Sc 中间合金。在初始数据集构建阶段,首先对单胞进行弛豫,然后使用 2×2×2 的超晶胞进行结构微扰,原子坐标的扰动幅度为 0.01 Å,超胞盒子的扰动幅度为 0.03 Å。对于每个结构相,共生成 30 个微扰构型。最后,在 50 K 下对每个微扰构型进行 10 fs 的从头算分子动力学模拟,以此增加初始训练数据集的数量。

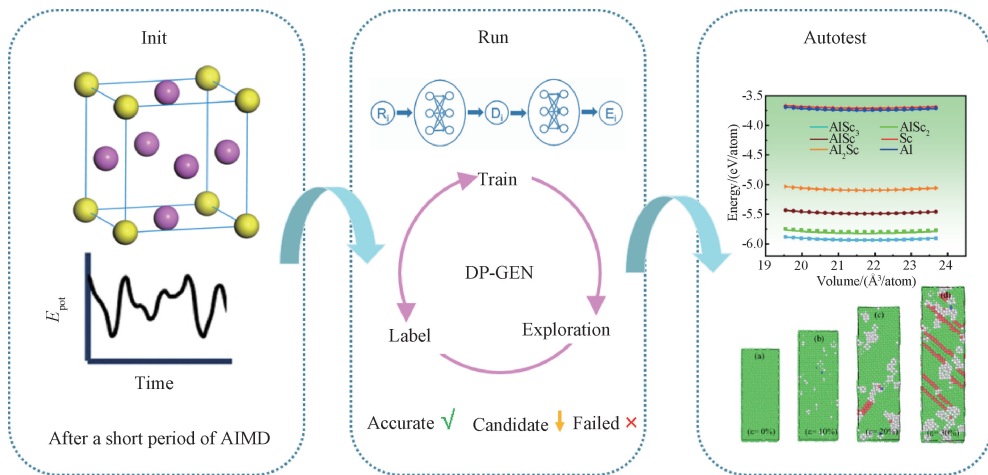


图 1 DP-GEN 模型训练流程图

Fig. 1 Flowchart of DP-GEN model training

在 Run 阶段, 本工作共执行了 32 次 DP-GEN 迭代, 迭代过程覆盖了从 50 K 至 $2T_m$ 的温度范围和 1×10^5 Pa 至 5×10^9 Pa 的压力范围, 其中 T_m 是 Al-Sc 合金的最高熔点, 取值为 1808 K。对于大量结构探索阶段, 温度范围可均分为四个区间: $[50 \text{ K}, 0.5T_m)$ 、 $[0.5T_m, T_m)$ 、 $[T_m, 1.5T_m)$ 和 $[1.5T_m, 2T_m)$ 。在每个温度区间内, 进一步将温度均分, 对于每个给定温度下的构型, 分别施加 8 个不同的压力 (即 1×10^5 Pa、 10×10^5 Pa、 100×10^5 Pa、 1000×10^5 Pa、 5000×10^5 Pa、 10000×10^5 Pa、 20000×10^5 Pa 和 50000×10^5 Pa)。每个迭代过程均包含探索、标记和训练三个步骤。

探索: 使用 4 个经过同步训练但尚不成熟的深度势能模型, 利用分子动力学模拟进行结构模型的推理和候选构型的探索。此处的分子动力学模拟工作均使用原子/分子大规模并行模拟器 (LAMMPS) 展开, 每个分子动力学模拟时长为 2.4 ps。此外, 置信区间也是从模型偏差的结果中筛选候选结构的关键参数, 其下限和上限 (σ_{lo} 和 σ_{hi}) 分别设置为 $0.10 \text{ eV}/\text{\AA}$ 和 $0.2 \text{ eV}/\text{\AA}$ 。每个探索的结构模型偏差 ε_i 存在以下三种可能情形。(1) $\varepsilon_i < \sigma_{lo}$: 深度势能模型已经可以精确地预测所探索的结构;

(2) $\sigma_{lo} < \varepsilon_i < \sigma_{hi}$: 相应的结构将作为标记的候选构型; (3) $\sigma_{hi} \leq \varepsilon_i$: 构型因结构畸变严重或能量过高, 无法进入标记阶段。

标记: 如果候选构型数量大于 50 个, 则在每次 DP-GEN 迭代中随机选取 50 个候选构型进行标记; 或者如果候选构型数量不足 50 个, 则对所有候选构型进行标记并采样。候选构型的数量可通过“fp_task_max”参数进行调节控制。在本文中, 所有的标记工作通过第一性原理维也纳软件包 (VASP) 计算完成。在单点能计算过程中, 采用广义梯度近似^[32]中的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 泛函描述电子交换相关能; 平面波截断能设置为 500 eV, 布里渊区采样采用以 Γ 点为中心、网格间距为 $0.20 \text{ \AA}^{-1}$ 的 k 点网格^[33], 能量收敛标准设为 $1 \times 10^{-6} \text{ eV}$ 。

训练: 深度势能模型的训练拟合采用 DeePMD-kit 程序。训练过程中, 使用局部原子环境描述符的平滑版本 se_a^[34], 截断半径设置为 $8 \text{ \AA}$, 逆距离 $1/r$ 从 $2 \text{ \AA}$ 平滑衰减到 $8 \text{ \AA}$ 以消除截断引入的不连续性影响, 使用 Adam^[35] 的随机梯度下降法和不同的随机数种子同时训练四个深度势能模型; 每次迭代的训练步数为 400000, 学习率从 1.0×10^{-3} 呈指数衰减到 3.5×10^{-8} 。嵌入网络^[36]具有类 ResNet 结构、

大小为 25,50,100,拟合网络由三层组成,每层包含 240 个节点。在本工作中,最终的数据集包含原子坐标、力、能量、晶胞形状张量和维里张量等共计约四万条数据。

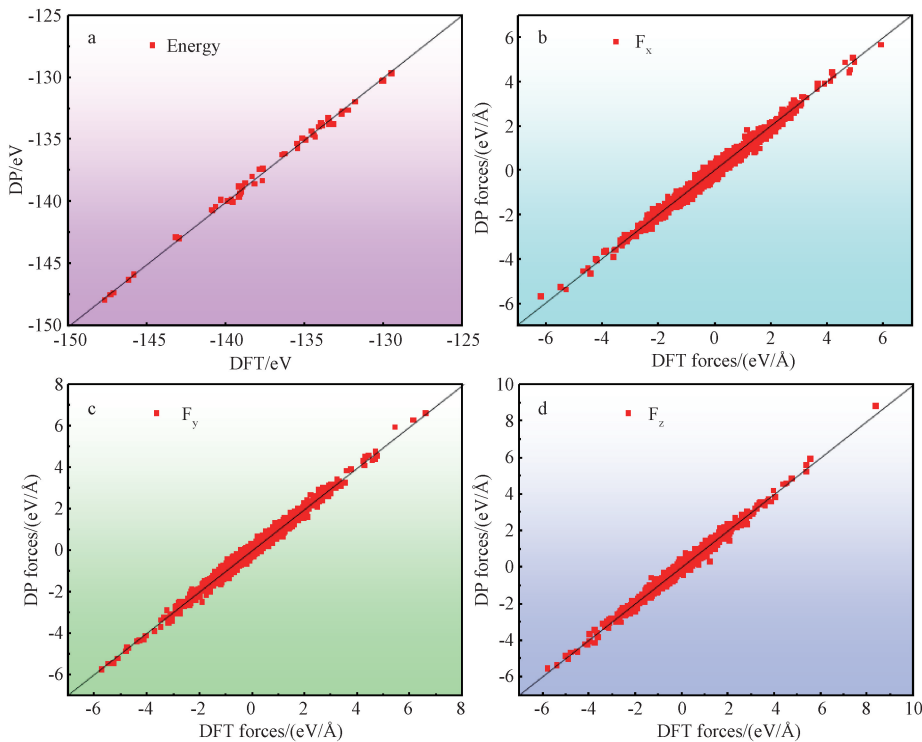
2 结果与讨论

2.1 能量与原子受力预测

为构建深度学习所需的数据集,首先对 Al-Sc 体系进行[0,1]全成分范围、不同温度和压力下的分子动力学模拟和高通量第一性原理计算,模拟过程中采用 NPT 系综,时间步长设置为 1 fs。对计算输出结果中的原子位置、能量、原子受力和维里应力等信息进行提取并构建训练数据集,采用深度学习方法经 12000000 训练步后拟合得到 Al-Sc 体系

的 DP 势函数。

如图 2 所示,DP 与 DFT 预测的能量和原子力均存在明显的线性关系。DP 与 DFT 的预测结果紧紧围绕“DP = DFT”的对角线分布,这表明 DP 预测结果与 DFT 计算结果吻合良好。一般来说,合金体系的 DP 势函数所给出的能量和原子受力的均方根误差分别小于 2 meV/atom 和 60 meV/Å^[37]。本工作 DP 势函数所预测的 Al-Sc 能量和原子受力的均方根误差分别为 0.17 meV/atom 和 12 meV/Å,这意味着与高精度的第一性原理计算结果相比,本工作所开发的 DP 势函数误差在合理范围内,可准确再现 Al-Sc 的能量和原子受力,因此可进一步用于 Al-Sc 体系原子间相互作用的研究。



a: 能量; b, c, d: 原子受力

图 2 DFT 与 DP 计算的 Al-Sc 合金体系能量和原子受力比较

a: Energies; b, c, d: Atomic forces

Fig. 2 Comparison of energies and atomic forces for the Al-Sc alloy system calculated by DFT and DP

2.2 Al-Sc 中间相的能量-体积状态方程

为深入检验所开发的 DP 势函数,本工作利用

分子动力学模拟方法计算了全成分范围内 Al-Sc 中间相和终端相的能量-体积曲线,并将其与基于密

度泛函理论 (DFT) 的第一性原理计算结果进行比较。如图 3 所示,基于 DP 势函数的分子动力学模拟所得到的各相能量-体积曲线与第一性原理计算结果在 $19 \text{ \AA}^3/\text{atom} \sim 24 \text{ \AA}^3/\text{atom}$ 整个体积范围内 (对应 $\pm 24\%$ 的体积应变)完全吻合。

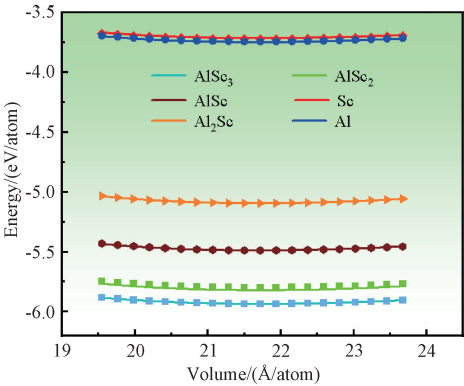


图 3 Al、Sc 以及 Al-Sc 中间相的总能量随体积变化曲线 (其中点和线分别表示 DP 和 DFT 的计算结果)

Fig. 3 Total energy versus volume curves for Al, Sc and Al-Sc intermediate phases (Where points and solid lines represent the results from DP and DFT calculations, respectively)

2.3 Al-Sc 中间相的弹性性质

弹性张量元的计算首先需要在每个应变分量 (ε_{xx} 、 ε_{yy} 、 ε_{zz} 、 ε_{xy} 、 ε_{xz} 和 ε_{yz}) 上施加一组 1% 左右的小应变,然后通过基于 DP 的分子动力学模拟和基于 DFT 的第一性原理计算方法得到每个应变对应的应力数据,然后对得到的应力-应变数据进行最小二乘法拟合,从而获得体系的弹性张量元。

如表 1 所示,本工作列出了 Al_3Sc 、 Al_2Sc 、 AlSc 和 AlSc_2 等中间相的独立弹性常数。可以看到,DP 预测的各中间相的弹性常数与 DFT 计算结果基本一致,两者之间最大和最小偏差均是 AlSc_2 结构的 C_{44} 和 C_{13} 差,分别为 39.72% (24 GPa) 和 1.2% (0.8 GPa)。DP 预测 AlSc_2 弹性常数的偏差稍大,但对于 AlSc 弹性常数的预测偏差则较小,最大 (C_{11}) 和最小 (G_v) 偏差分别是 4.0% (3.87 GPa) 和 0.8% (0.46 GPa)。其中将 Al_3Sc 的弹性常数和其

他文献数据进行对比发现,DP 数据和文献数据对比偏差为 C_{11} (11.4%)、 C_{12} (21.8%)、 C_{44} (1.2%)、 G_v (8.7%),同时与 DFT 的数据相比,偏差也非常小。中间相 Al_2Sc 计算的 DP 结果和 DFT 结果相比只有 C_{12} (15.2%) 略大。

表 1 References、DFT 和 DP 预测的 Al-Sc 中间相弹性常数、体积模量 (B_v) 和剪切模量 (G_v)

Table 1 Elastic constants, bulk modulus (B_v) and shear modulus (G_v) of the Al-Sc intermediate phase as predicted by References、DFT and DP

Intermediate phase	Elastic properties	DFT/ GPa	DP/ GPa	References/ GPa	DP-DFT deviation/%
Al_3Sc	C_{11}	18.17	167.43	189 ^[38]	8.6
	C_{12}	37.80	5.36	43 ^[38]	38.5
	C_{44}	70.58	66.77	66 ^[38]	5.4
	B_v	86.26	90.72	—	5.2
	G_v	71.42	6.08	69 ^[38]	11.7
Al_2Sc	C_{11}	19.07	18.66	185.5 ^[39]	5.4
	C_{12}	5.07	59.98	37.89 ^[39]	15.2
	C_{44}	70.82	68.34	66.61 ^[39]	3.5
	B_v	99.07	100.87	85.04 ^[39]	1.8
	G_v	70.69	65.54	69.4 ^[39]	7.3
AlSc	C_{11}	95.89	99.76	—	4.0
	C_{12}	69.90	69.10	—	1.1
	C_{44}	9.61	91.82	—	0.9
	B_v	78.56	79.32	—	0.97
	G_v	60.76	61.22	—	0.8
AlSc_2	C_{11}	136.65	11.38	—	17
	C_{12}	59.35	49.84	—	16
	C_{13}	27.43	27.59	—	0.6
	C_{33}	139.68	14.90	—	2.3
	C_{44}	48.41	29.18	—	39.7
	B_v	71.26	64.41	—	9.6
	G_v	51.67	40.43	—	21.8

表 1 中弹性常数满足传统的机械稳定的条件, $C_{11} > 0$, $C_{44} > 0$, $C_{11} > |C_{12}|$, $C_{11} + 2C_{12} > 0$, 表明 Al_3Sc 、 Al_2Sc 、 AlSc 和 AlSc_2 中间相具有机械稳定性。利用

弹性常数,根据 Voigt 方程可进一步得到 Al_3Sc 、 Al_2Sc 、 AlSc 和 AlSc_2 的体积弹性模量和剪切模量。从表 1 可以看到,DP 预测的 AlSc 体积模量和剪切模量与 DFT 计算结果的偏差分别为 0.97% 和 0.76%,而 AlSc_2 体积模量和剪切模量的偏差分别为 9.6%和 21.8%。 AlSc_2 的体积模量和剪切模量均高于 AlSc 、 Al_3Sc 或 AlSc_2 。此外, B/G 值的大小与脆性息息相关。Pugh 等^[40]引入了金属的断裂范围,如果 B/G 值大于断裂范围(1.74~6.14),说明材料表现为韧性,反之,则说明材料表现为脆性。表 1 中计算结果显示,四种化合物 B/G 值均小于断裂范围(1.74~6.14),说明材料表现为脆性。

2.4 Sc 含量对 Al-Sc 合金力学性能影响的分子动力学模拟研究

本工作采用 ATOMSK 软件对 Al-Sc 合金进行构建模型尺寸为 $40\text{ \AA}\times40\text{ \AA}\times100\text{ \AA}$ 、包含 10000 个原子的 Al-Sc 合金模型,其中 Sc 原子含量分别为 0.03%(原子分数,下同)、0.1%、0.2%和 0.3%,相应的 Sc 原子质量分数在 0.05%~0.5%之间,以研究 Sc 含量对铝合金性能的影响。

如图 4a 所示,在 Sc 含量为 0.1%的 Al-Sc 合金模型中,白球为 Sc 原子,其他为 Al 原子。基于已开发的 Al-Sc 深度势能模型,采用分子动力学模拟软件 LAMMPS 对 Al-Sc 合金在 300 K 下的单轴拉伸变形过程进行模拟,用 OVITO 软件包对拉伸结果进行可视化后处理。如图 4b 所示,随着应变量的增加,不同 Sc 含量的 Al-Sc 合金体系总能变化趋势一致,均先平滑上升,达到第一个峰值后下降,最后呈锯齿状持续波动。随着合金中 Sc 含量的增加,总能曲线上的第一峰值逐渐降低,这与 Sc 原子的能量较低有关。

图 5 为单轴拉伸作用下不同 Sc 含量的 Al-Sc 合金力学和微结构响应,如图 5a 所示,随着单轴拉伸应变量的增大,不同 Sc 含量 Al 合金的应力变化趋势一致:先发生弹性变形,后出现屈服现象,应力呈断崖式下降,随后进入塑性变形阶段。随着 Sc 含量由 0.03%升高至 0.1%,合金的屈服强度由 6.29

GPa 升高至 6.33 GPa,此时屈服强度达到最大值,表明体系中掺入 Sc 会增强合金的力学性能,随着 Sc 含量的进一步升高,合金的屈服强度逐渐下降。但此时合金体系的屈服强度均高于纯 Al 体系的屈服强度,强度值约高出 1.30 GPa 左右。因此,为使单晶 Al-Sc 合金具有优异的力学性能和较低的成本,Sc 含量应控制在 0.1%左右。随着应变量继续增大,应力发生陡降,随后进入位错运动主导的塑性变形阶段。

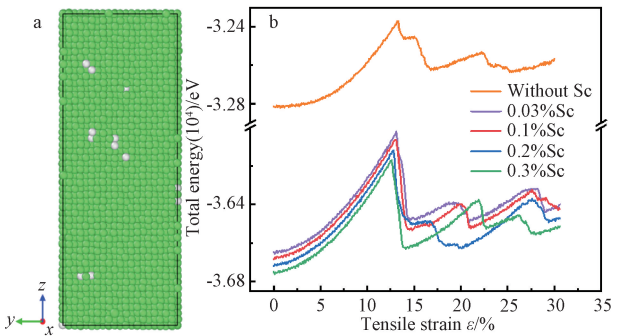


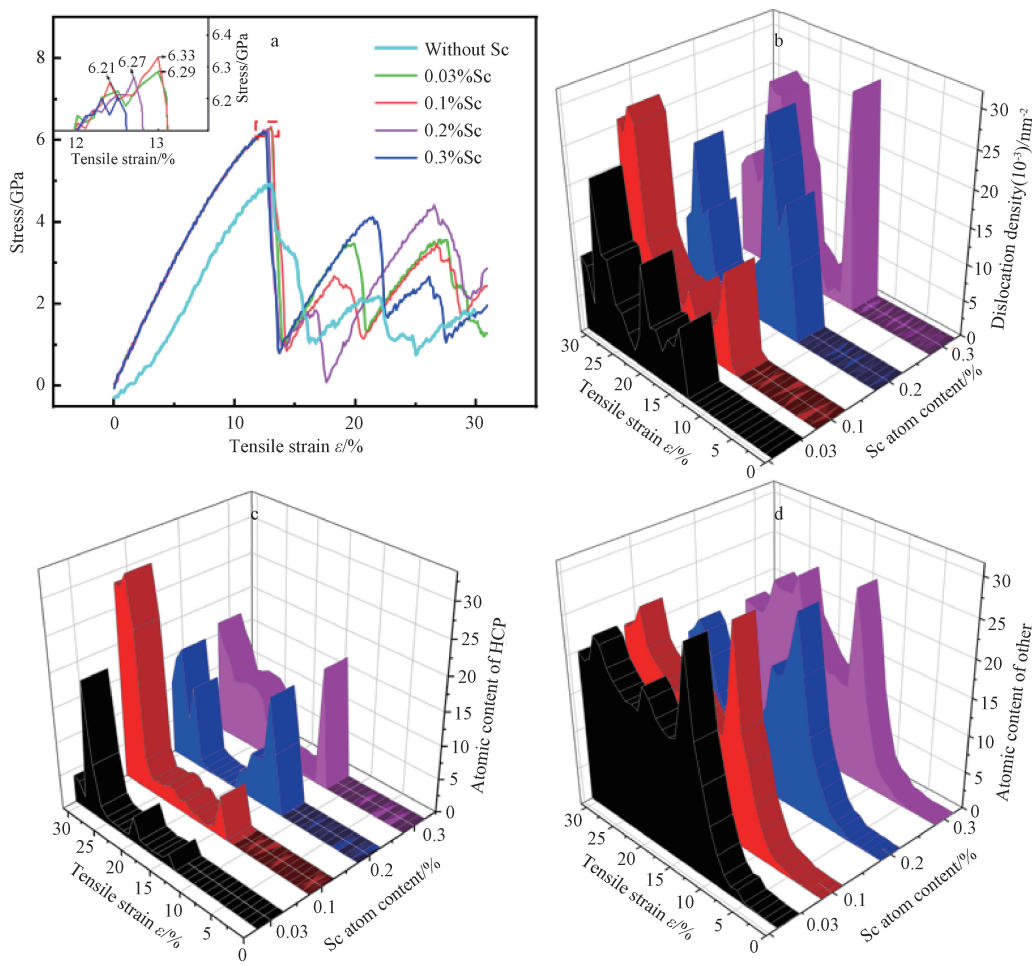
图 4 (a) Al-0.1%Sc(原子分数)合金原子模型,白色原子为 Sc,其他为 Al;(b)不同 Sc 含量的 Al 合金总能-应变曲线

Fig. 4 (a) Atomic model of Al-0.1% Sc(Atomic fraction) alloy. The white atoms represent Sc, while the remaining ones correspond to Al; (b) Total energy-strain curves of Al alloys with different Sc contents

从图 5b 可以看到,在开始的小变形阶段,由于原子结构未发生转变、合金处于弹性变形阶段,合金体系中位错密度为零;当达到屈服点后,位错开始大量形核和发射,此后进入塑性变形阶段,Al-0.1%Sc 和 Al-0.3%Sc 合金在该阶段表现出较高的位错密度;如图 5c 所示,在屈服点之后,体系中 HCP 层错原子含量与位错密度具有相关性,这说明屈服之后的拉伸变形过程存在着不全位错的运动和增殖;如图 5d 所示,其他类型原子含量随着应变量的增加而逐渐升高,在合金屈服之后其含量始终保持在 20%以上,这与 FCC 原子在位错拖曳作用下离开平衡位置、转变为过渡态原子有关。

由于 Al-0.1%Sc 合金在拉伸过程中表现出最高的屈服(抗拉)强度,因此,本工作重点分析了该合金的微观变形过程。图 6 为不同拉伸应变量下 Al-0.1%Sc 合金体系的原子结构演化。如图 6a 所示,在变形之前,Al-0.1%Sc 合金模型中均为 FCC 原子。如图 6b 所示,随着应变量增加到 10%,模型内的原子开始发生位移、偏离平衡位置,部分原子转变为 BCC 或其他类型原子(FCC、BCC、HCP 和金刚石结构之外的原子类型)。如图 6c 所示,

随着应变进一步增加到 20%,体系内逐渐出现 HCP 层错原子,这说明不全位错运动开始介入拉伸变形过程。如图 6d 所示,随着应变增加到 30%,体系内 HCP 原子明显增多,这些 HCP 原子实际上为孪晶界和层错。由于层错扩展和孪晶生长均与不全位错运动和增殖有关,因此合金体系在该阶段发生了以不全位错运动主导的塑性变形,该情形在应力-应变曲线上表现为曲线的锯齿状波动,详见图 5a。



a: 应力-应变曲线; b: 位错密度; c: HCP 原子含量; d: 其他类型原子含量

图 5 单轴拉伸作用下不同 Sc 含量的 Al-Sc 合金力学和微结构响应

a: Stress-strain curves; b: Dislocation densities; c: HCP atom content; d: Other atom content

Fig. 5 Mechanical and microstructural response of Al-Sc alloys with different Sc contents under uniaxial stretching

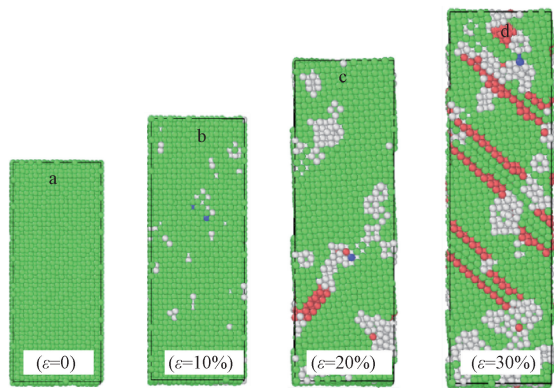


图 6 单轴拉伸过程中 Al-0.1%Sc 合金体系的原子结构
随应变量的变化

Fig. 6 Variation of the atomic structure of the Al-0.1%Sc alloy system with strain during uniaxial stretching

3 结论

利用机器学习方法开发了稀土铝合金 Al-Sc 的深度神经网络势能模型,简称深度势能(DP)模型。通过将 DP 模型预测的一系列物理性质与 DFT 计算和前人的研究数据进行系统比较,验证了所训练 Al-Sc 深度势能模型的精度与可靠性。与 DFT 结果相比,DP 模型预测的 Al-Sc 体系能量和原子受力的均方根误差分别为 0.17 meV/atom 和 12 meV/Å,表明所开发的 DP 模型能够以 DFT 精度描述 Al-Sc 合金体系的能量和原子受力。DP 模型所预测的各相能量-体积曲线和弹性性质也与 DFT 结果相一致,其中弹性常数的最大和最小偏差分别为 39.72% (24 GPa) 和 0.6% (0.16 GPa)。基于该 DP 模型,进一步采用分子动力学方法对不同 Sc 含量的 Al-Sc 合金进行了单轴拉伸变形研究,发现 DP 势函数可以成功描述 Al-Sc 合金在拉伸变形过程中的弹性阶段、屈服阶段和塑性变形等阶段,且变形过程中可观察到不全位错的运动和增殖;与纯 Al 相比,Sc 原子的添加使不同 Sc 含量合金体系的抗拉强度均升高,且 Sc 含量为 0.1% 合金的力学性能最佳、成本较低。

参考文献:

- [1] Wang X P, Ramírez-Hinestrosa S, Dobnikar J, Frenkel D. The lennard-Jones potential: When (not) to use it [J]. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2020, 22 (19): 10624-10633.
- [2] Lloyd A, Cornil D, van Duin A C T, van Duin D, Smith R, Kenny S D, Cornil J, Beljonne D. Development of a ReaxFF potential for Ag/Zn/O and application to Ag deposition on ZnO[J]. *Surface Science*, 2016, 645: 67-73.
- [3] Thirumdas R, Kothakota A, Annapure U, Siliveru K, Blundell R, Gatt R, Valdramidis V P. Plasma activated water (PAW): Chemistry, physico-chemical properties, applications in food and agriculture[J]. *Trends in Food Science & Technology*, 2018, 77: 21-31.
- [4] Zhang L F, Han J Q, Wang H, Car R, Weinan E. Deep potential molecular dynamics: A scalable model with the accuracy of quantum mechanics [J]. *Physical Review Letters*, 2018, 120(14): 143001.
- [5] Behler J, Parrinello M. Generalized neural-network representation of high-dimensional potential-energy surfaces [J]. *Physical Review Letters*, 2007, 98(14): 146401.
- [6] Bartók A P, Payne M C, Kondor R, Csányi G. Gaussian approximation potentials: The accuracy of quantum mechanics, without the electrons[J]. *Physical Review Letters*, 2010, 104(13): 136403.
- [7] Trott C R, Hammond S D, Thompson A P. SNAP: Strong scaling high fidelity molecular dynamics simulations on leadership-class computing platforms[A]. *High Performance Optimizations for the Nuclear Physics Code MFDn on KNL*[C]. London: Springer Chemical, 2014.
- [8] Ling Y L, Li K, Wang M, Lu J F, Wang C L, Wang Y L, He H Y. Revisiting the structure, interaction, and dynamical property of ionic liquid from the deep learning force field[J]. *Journal of Power Sources*, 2023, 555: 232350.
- [9] Huan T D, Batra R, Chapman J, Krishnan S, Chen L H, Ramprasad R. A universal strategy for the creation of machine learning-based atomistic force fields[J]. *NPJ Computational Materials*, 2017, 3: 37.
- [10] Behler J. Perspective: Machine learning potentials for atomistic simulations [J]. *The Journal of Chemical*

- Physics, 2016, 145(17): 170901.
- [11] Friederich P, Häse F, Proppe J, Aspuru-Guzik A. Machine-learned potentials for next-generation matter simulations[J]. Nature Materials, 2021, 20(6): 750-761.
- [12] Gastegger M, Behler J, Marquetand P. Machine learning molecular dynamics for the simulation of infrared spectra[J]. Chemical Science, 2017, 8(10): 6924-6935.
- [13] Liu Q Y, Shang C, Liu Z P. *In situ* active site for CO activation in Fe-catalyzed Fischer-Tropsch synthesis from machine learning[J]. Journal of the American Chemical Society, 2021, 143(29): 11109-11120.
- [14] Montes-Campos H, Carrete J, Bichelmaier S, Varela L M, Madsen G K. A differentiable neural-network force field for ionic liquids[J]. Journal of Chemical Information and Modeling, 20, 62:88-101.
- [15] Wang K, Xu H J, Yang C, Qiu T. Machine learning-based ionic liquids design and process simulation for CO₂ separation from flue gas[J]. Green Energy & Environment, 2021, 6(3): 432-443.
- [16] Unke O T, Chmiela S, Sauceda H E, Gastegger M, Poltavsky I, Schütt K T, Tkatchenko A, Müller K R. Machine learning force fields[J]. Chemical Reviews, 2021, 121(16): 10142-10186.
- [17] Zhang Y Z, Wang H D, Chen W J, Zeng J Z, Zhang L F, Wang H, Weinan E. DP-GEN: A concurrent learning platform for the generation of reliable deep learning based potential energy models[J]. Computer Physics Communications, 2020, 253: 107206.
- [18] Marquis E A, Hyde J M. Applications of atom-probe tomography to the characterisation of solute behaviours[J]. Materials Science and Engineering: R: Reports, 2010, 69(4-5): 37-62.
- [19] Yan K, Chen Z W, Zhao Y N, Ren C C, Lu W J, Aldeen A W. Morphological characteristics of Al₃Sc particles and crystallographic orientation relationships of Al₃Sc/Al interface in cast Al-Sc alloy[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2021, 861: 158491.
- [20] Knipling K E, Dunand D C, Seidman D N. Criteria for developing castable, creep-resistant aluminum-based alloys—A review[J]. International Journal of Materials Research, 2022, 97(3): 246-265.
- [21] Clouet E, Laé L, Épicier T, Lefebvre W, Nastar M, Deschamps A. Complex precipitation pathways in multi-component alloys[J]. Nature Materials, 2006, 5: 482-488.
- [22] Lee W S, Chen T H, Lin C F, Chen M S. Impact deformation behaviour and dislocation substructure of Al-Sc alloy[J]. Journal of Alloys and Compounds, 2010, 493(1-2): 580-589.
- [23] Smola B, Stulikova I, Buch F V, Mordike B I. Structural aspects of high performance Mg alloys design[J]. Materials Science & Engineering, 2002, 324(1): 113-117.
- [24] Aghion E, Bronfin B, Eliezer D, Buch V F, Schumann S, Friedrich H E. The art of developing new magnesium alloys for high temperature applications[J]. Materials Science Forum, 200, 419-422:407-418.
- [25] Fu C L. Electronic, elastic, and fracture properties of trialuminide alloys: Al₃Sc and Al₃Ti[J]. Journal of Materials Research, 1990, 5(5): 971-979.
- [26] Thayer G E, Bartelt N C, Ozolins V, Schmid A K, Chiang S, Hwang R Q. Linking surface stress to surface structure: Measurement of atomic strain in a surface alloy using scanning tunneling microscopy[J]. Physical Review Letters, 2002, 89(3): 036101.
- [27] Kuzovkov V N, Popov A I, Kotomin E A, Monge M A, González R, Chen Y. Kinetics of nanocavity formation based on F-center aggregation in thermochemically reduced MgO single crystals[J]. Physical Review B, 2001, 64(6): 064102.
- [28] Røyset J, Ryum N. Scandium in aluminium alloys[J]. International Materials Reviews, 2005, 50(1): 19-44.
- [29] Marquis E A, Seidman D N. Nanostructural evolution of Al₃Sc precipitates in an Al-Sc-Mg alloy by three-dimensional atom probe microscopy[J]. Surface and Interface Analysis, 2004, 36(5-6): 559-563.
- [30] Dorin T, Babaniaris S, Jiang L, Cassel A, Eggeman A, Robson J. Precipitation sequence in Al-Sc-Zr alloys revisited[J]. Materialia, 2022, 26: 101608.
- [31] 赵倩, 闫丽珍, 李锡武, 李志辉, 张永安, 熊柏青. 退火热处理对 5056 铝合金线材微观组织与力学性能的影响[J]. 稀有金属, 2023, 47(10): 1359-1368.
- Zhao Q, Yan L Z, Li X W, Li Z H, Zhang Y A, Xiong B Q. Microstructure and properties of 5056 alloys with

- different annealing heat treatment[J]. Chinese Journal of Rare Metals, 2023, 47(10): 1359-1368.
- [32] Pašti I A, Jovanović A, Dobrota A S, Mentus S V, Johansson B, Skorodumova N V. Atomic adsorption on pristine graphene along the Periodic Table of Elements-From PBE to non-local functionals[J]. Applied Surface Science, 2018, 436: 433-440.
- [33] Morgan W S, Jorgensen J J, Hess B C, Hart G L W. Efficiency of generalized regular k-point grids[J]. Computational Materials Science, 2018, 153: 424-430.
- [34] Pan G, Chen P, Yan H, Lu Y T. A DFT accurate machine learning description of molten ZnCl_2 and its mixtures: 1. Potential development and properties prediction of molten ZnCl_2 [J]. Computational Materials Science, 2020, 185: 109955.
- [35] Kingma D P, Ba J. Adam: A method for stochastic optimization [A]. Proceedings of the 3rd International Conference on Learning Representation [C]. San Diego: International Conference on Learning Representations, 2017.
- [36] He K M, Zhang X Y, Ren S Q, Sun J. Deep residual learning for image recognition [A]. Abstract Book-CVPR-2016 Main Conference and Workshops [C]. Las Vegas: Proceedings of the IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, 2016.
- [37] Zhai B, Wang H P. Accurate interatomic potential for the nucleation in liquid Ti-Al binary alloy developed by deep neural network learning method[J]. Computational Materials Science, 2023, 216: 111843.
- [38] Fu C L. Electronic, elastic, and fracture properties of trialuminide alloys: Al_3Sc and Al_3Ti [J]. Journal of Materials Research, 1990, 5(5): 971-979.
- [39] Çiftci Y Ö, Çolakoğlu K, Deligöz E, Bayhan Ü. First-principles calculations on structure, elastic and thermodynamic properties of Al_2X ($\text{X}=\text{Sc}, \text{Y}$) under pressure [J]. Journal of Materials Science & Technology, 201, 28(2): 155-16.
- [40] Pugh S F. XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals [J]. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 1954, 45(367): 823-843.

Deep-learning Potential Molecular Dynamics Simulations of the Mechanical Properties of Al-Sc Alloys

LI Juan, XUE Hong-tao^{*}, ZHANG Zhi-jun, CHANG Zhen, TANG Fu-ling,
REN Jun-qiang, LU Xue-feng, LI Jun-chen

(State Key Laboratory of Advanced Processing and Recycling of Non-ferrous Metals, School of Materials Science and Engineering, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China)

Abstract: The deep potential (DP) model based on high-throughput first-principles calculation is expected to solve the problem of potential function scarcity in the molecular dynamics simulation of rare earth aluminium alloys. Firstly, the Al-Sc binary potential function was trained by deep-learning method, and the accuracy of the DP potential function was tested by comparing the interatomic force, energy, energy-volume curve and elastic modulus of DP and DFT. The results show that the interatomic force, energy, energy-volume curve and elastic modulus of precipitated phase predicted by DP are very close to the first-principles calculation results, which proves that the DP potential function developed in this paper has high accuracy. On this basis, the DP potential function was used to study the uniaxial tensile deformation of aluminium single-crystal alloys with different Sc contents. It is found that Al-0.1%Sc alloy has the highest tensile strength, which will provide a reference for the composition optimization of high-performance rare earth Al-Sc alloys.

Key words: deep-learning; molecular dynamics; Al-Sc; first-principles; rare earth aluminium alloy