金属微纳米构件动力学行为的

多尺度关联模型及其算法

李博文

摘要

随着科学技术的高速发展，特别是微纳米科学的发展，在复合材料及其结构的复杂度越来越高，结构件的尺寸越来越小的同时，对其物性的认知却要求越来越精准。其中，金属微纳米构件及金属基复合材料对于高科技产品有着特殊的重要性。对金属微纳米构件物理和力学性质的预测以及它们在多场耦合作用下动力学行为的模拟成为计算材料学中的一个重要课题。单纯的连续介质力学和分子动力学都无法完美地处理这类问题；以不同机制将多个单一尺度模型组合在一起，发展的"并发式"和"递进式"多尺度方法，虽然取得了一定的结果，但终是存在不少问题，致使其模拟结果常常受到质疑。本论文以金属微纳米构件动力学行为模拟为背景，系统地研究了金属材料微纳米尺度下的原子-连续关联模型及其算法，进而提出一个将宏观-介观-微观三个尺度模型耦合于一体的多尺度计算框架，给出了在各个尺度上按其模型进行内在时-空尺度积分的步骤和算法，实现了不同尺度模型之间的无缝过渡，并以金属纳米线基本变形机制下的动力学行为为例，进行了实际的数值模拟。所取得的主要进展如下：

第一部分给出了金属基复合材料及其结构动力学行为模拟的多尺度和多模型耦合的计算框架；在分别定义时-空尺度的基础上，构造了递归式“预测-校正”的计算模式，即以细尺度——微观尺度——分子动力学模拟的精细时间积分结果，来校正粗尺度——宏观尺度——动力学方程求得的节点位移场的“预测值”。对于相邻尺度之间的过渡问题，从宏观到介观与从介观到宏观分别采用了二阶双尺度方法与均匀化方法；从介观到微观尺度采用了从连续模型到分子动力学的尺度

精细化过渡算法；而从微观到介观尺度采用了原子-连续关联模型。介观尺度作为承上启下的尺度，实现了宏观、微观尺度模型的连接。

第二部分是从连续模型到分子动力学的尺度递降的精细化过渡算法，它是为了实现从介观到微观的过渡，给分子动力学模拟提供初边值条件而提出的。为了实现这一尺度细化的过渡，需要对介观尺度下的局部原子团簇进行能量极小化。本文提出“虚拟”分子动力学模拟，其本质是采用动力松弛来实现能量极小化过程。在构造“虚拟”分子动力学的初始条件时，用到了将原子运动分解为原子团簇的“结构变形”部分和“热振动”部分，这是由于原子模型和连续模型对热传导的处理方式完全不同。

第三部分构造并实现了针对金属微纳米构件从微观到介观的、尺度攀升的原子-连续关联模型和算法。基于原子模型和代表体积元等基本概念，引入了变形环境一致性假设，将微观尺度下的变形环境与宏观尺度的变形梯度联系在一起；针对金属材料的面心立方与体心立方晶格提出了初基六面体与四面体组合两种基本变形单元；对于连续介质动力学中几个重要的物理量，应力、应变以及弹性张量，推导了相应的近似计算公式；对于模型中复杂的占有系数计算给出了具体算法，对于构件表面处的代表体积元选取问题进行了特别说明；最后，利用原子-连续关联模型及其算法，对于单晶铜纳米线在基本变形机制下的动力学行为进行了数值模拟，数值结果显示，与传统的 Virial 应力相比较，本文的模型能够揭示单晶铜纳米线变形的非均匀性，特别是在发生位错之后的变形复杂性。