金属微-纳米构件热-力耦合的原子-连续关联模型及其算法

李辉

摘要

随着科学技术的高速发展，尤其是微纳米科学和技术的发展，依靠实验方法很难满足新材料的研发需求，因此计算机模拟方法成为了解材料不同层次结构和性质的重要手段。由于材料在不同尺度上的结构差异，诸如宏观结构、微观结构，晶体结构和缺陷，导致了不同尺度上材料性质和模拟方法的不同。对于微损伤和裂纹，这种受宏观尺度和微观尺度影响的现象，单尺度的模拟方法必然会造成上、下两个尺度所含的信息丢失，从而必须发展多尺度方法。另外，由于材料及其结构的许多行为都是受热场和力场共同作用的，使得对材料及其结构的多尺度分析变得更加复杂。 在已经发展的多尺度方法中，由于不同模型巨大的时空尺度差异，在不同模型和尺度交界处出现了虚波反射、鬼力等现象。这些问题对进一步实施动力学和热- 力学的多尺度模拟带来了困难，寻找一种高效的多尺度方法成为当前的研究热点。基于此，针对微-纳米尺度下金属材料的热-力耦合问题，本文研究了热- 力耦合的原子- 连续关联模型及其算法，所取得的进展如下：

第一个工作是基于分子动力学模拟，在广义非局部的准简谐近似假设下，发展了连续意义下的热-力学物理量的计算模型(Thermo Mechanical Atomic Continuum Model，简称 TM-ACC 模型)。 为了统一原子模型和连续模型对热现象的描述，本文将原子的运动分解为“结构形变”和“热振动”，同时将原子模型中的能量传递形式的分解为“做功”和“热传递”。基于变形环境一致性假设，将原子模型中的变形环境和连续介质力学模型中的变形梯度联系起来，建立了适用于描述非均匀变形的高阶 Cauchy-Born 准则。考虑到原子间相互作用的热振动行为，基于代表性体积元的广义非局部基，在准简谐近似假设下，将强耦合的原子的热振动， 通过一簇广义正交基分解为相互独立的简谐振子组合，同时给出了每个简谐振子的运动方程和形式解，推导了代表体积元的自由能、平均温度的表达式。 此外， 还给出了应力、应变、弹性张量、比热容等热- 力学物理量的表达式，得到了微纳米尺度下热- 力耦合的连续方程组。原子间的非局部作用在热- 力学的本构关系中得到了体现。最后， 展示了 3 维铜纳米线中的局部应力、应变、弹性张量分布情况。

第二个工作是基于分子动力学模拟，在非简谐近似假设下，得到了连续意义下的热-力学物理量。由于热膨胀是非简谐项作用的宏观表现，故在准简谐近似假设下，无法解释材料的热膨胀现象。因此，我们引入了一阶非简谐项的作用，并利用一簇广义正交基向量，对强耦合的哈密尔顿量进行分解，将代表体积元的热振动分解成一系列非简谐振子组合。利用椭圆函数的性质，给出了非简谐振子的形式解， 进而推导了代表体积元中的平均温

度表达式。解析地表达了哈密尔顿量中的非线性项对总自由能的贡献，给出了非简谐项的自由能，以及代表体积元的总自由能。从而，推导了代表体积元中的非局部作用的应力、应变、弹性张量、比热容等热- 力学物理量。

第三个工作是发展了将宏观连续模型、介观 TM-ACC 模型、微观原子模型三模型耦合的多尺度算法。以裂纹扩展问题为例，将材料的区域划分为 3 个区域：线性小变形区域、弱非线性变形区域、强非线性变形区域。在整个区域上使用连续介质力学有限元方法，在给线性变形区域使用 TM-ACC 模型，强非线性变形区域使用分子动力学模拟来获得裂纹尖端的原子尺度信息。对于连续模型，利用软件 ANSYS 求解得到 I 型裂纹的应力强度因子 KI，根据应力强度因子与应力载荷的关系，得到了介观尺度区域的应力载荷。在介观尺度上也使用有限元方法做离散，基于物质点法得到分子动力学模拟区域的边界条件，从而可以跟踪裂纹尖端原子尺度的变化情况。最后通过 2 维数值算例，展示了带有裂纹的铜平板的连续模型、TM-ACC 模型和 MD 模型相耦合的裂纹扩展的模拟结果。 具体来说，就是利用连续模型、TM-ACC 模型生成原子模型的边界条件，用分子动力学方法跟踪了裂纹尖端的扩展情况.

关键词：分子动力学，热-力耦合的原子-连续关联模型，广义非局部的准简谐近似假设，哈密尔顿量，自由能