微-纳米材料及构件动力学行为模拟的

局部量子-原子-连续关联模型和算法

韩天思

摘要

本文针对微-纳米材料及构件在外界载荷作用下的动力学行为，开展了相应的多尺度关联模型的算法和数值模拟技术的研究。旨在确定材料微观结构的演化与其宏观物理和力学性质之间的关系，实现不同尺度下、不同模型之间的无缝耦合。本文取得的主要研究成果和结论如下：

1 本文提出了求解原子团簇体系 Kohn-Sham 方程的多中心展开近似算法，并在 FCC 和 BCC 两种晶格结构下对该算法的总能量截断误差进行了计算分析，认为这种近似展开应该取偶数阶以保持晶格的表面效应。在此基础之上，基于局部量子力学和分子动力学模拟求得局部体系的基态能量密度等物理量。能量密度是在尺度上升方向上实现不同层次模型之间耦合的关键。

2 本文使用了修正的 Cauchy-Born 准则确定原子团簇体系的变形梯度张量。对于材料裂纹尖端区域的高阶非线性变形，修正的 Cauchy-Born 准则可以更准确地计算离散体系中原子变形后的位置，进而显式地推导了原子团簇体系的应力、应变和弹性系数等张量的数学列式。为了验证其正确性，数值模拟了三维金属 Cu 纳米线的拉伸和弯曲行为，对材料参数的计算与现有模型的结果十分吻合，对应力的集中与松弛、应变能的存储与耗散过程的精细表达程度是现有模型所达不到的。

3 在尺度下降方向上，本文提出了“虚拟”的分子动力学模拟，这种模拟可以根据原子尺度的高阶非均匀变形插值出有限元单元内的其它原子的位置，进而通过能量极小化过程得到非均匀变形区域中原子团簇的平衡构型，为该区域中的预测解提供了合理的校正。“虚拟”的分子动力学模拟是在尺度下降方向上实现不同层次模型耦合的关键。

4 本文建立了从局部量子模型到宏观连续模型的双方向耦合的“递进”式多尺度关联算法。该算法使用了“宏观预测-微观校正”的计算流程，连续模型的计算得到了该区域中解的预测值，局部量子模型的从头计算则为该区域中提供了校正解和下一时刻的参数更新。该算法可以根据材料微观结构的演化确定材料宏观的动力学行为，实现材料宏-微观尺度耦合的模拟和分析。