多晶原子团簇的动力学模型和算法

杨彦韬

摘 要

随着计算技术的高速发展，在材料科学的研究中，利用计算机对材料的组织、结构和性能进行模拟，通过数学物理模型和数值计算预测材料的物理、力学和化学性能，已经成为与传统的实验检测方法同样重要的研究手段.

多晶结构是材料在微-纳米尺度下一种常见的构造形态，因此发展适用于多晶结构数值模拟的数学物理模型和算法，通过数值计算手段预测材料的物理和力学性能具有重要的理论意义和实际应用价值. 由于组成多晶团簇结构材料的晶粒尺度往往是亚微米和纳米量级，单纯采用连续介质力学的模型和方法，不仅难以表征其微观构造的几何和行为特征，而且难以仿真材料在微观尺度下的物性特征；又由于多晶材料包含的原子数量巨大，必然导致超大规模的计算量和存储量，即使在有了 E-级计算机的今天，仍然难以将宏-细观材料的物性预测全部按照原子模型进行模拟. 因此，为了理解多晶材料的微观构造对宏观性能的影响，必须采用多尺度的分析方法，将原子模型和连续介质力学模型耦合起来进行数值模拟.

本文的主要内容是利用多尺度关联模型和算法，对多晶原子团簇结构的动力学模型和算法展开研究，取得的主要成果和结论如下：

1. 针对微纳米尺度下的多晶团簇结构，考虑到每个晶粒的原子运动会受到周围晶粒的阻尼、约束和激励，在离散的分子动力学方程中引入阻尼项. 通过从原子模型到连续介质力学模型的映射，建立了连续化的阻尼模型；进一步通过考虑晶粒之间在晶界上的摩擦阻尼做功，利用能量守恒原理推导了晶粒阻尼系数的表示式. 进而，考虑晶粒尺寸非常之小，接近于零，给出了阻尼系数的近似表示，并在此基础上给出了阻尼系数的计算方法. 然后，利用双尺度均匀化方法推导了含阻尼项的宏观连续体动力学方程，得到了均匀化的阻尼系数表示式. 文中，针对一个随机生成的 Cu 多晶原子团簇样本，利用上述模型和算法，结合分子动力学模拟，具体地显示了 Cu 多晶原子团簇样本的阻尼系数.

2. 本文针对金属材料中常见的 BCC 和 FCC 晶格，以其为基本变形单元构造了满足物理要求的高阶插值基函数，相比于文献中常用的斜交 Bravais 六面体变形单元，能够保持每个晶格各原子占位所形成的物理特征，从而能更准确地描述晶体的非

线性变形特征．由于原子-连续关联模型是采用基本变形单元的插值方法来实现从原子模型到连续模型的过渡，采用不同的基本变形单元插值，会导致不同的连续动力学方程的计算误差．本文借鉴有限元误差估计的理论和方法，基于 BCC 和 FCC 晶格的高阶插值方法，严格地分析了原子-连续关联模型所得到的动力学方程的计算误差，给出了精细的误差估计，并通过三维算例验证了误差阶的正确性．

3. 基于原子-连续关联模型、线性小变形假设和已知的弹性常数，利用基于 BCC 和 FCC 晶格的高阶插值方法给出了应变能的近似计算方法；这种计算方法不依赖于经验势函数，不需要弹性常数以外的经验参数，可以得到应变能的闭形式表示式．最后，对应变能的计算误差进行了估计，给出了误差的上界．这种计算原子团簇应变能的方法仅适用于已知弹性常数和线性小变形情形．

关键词： 多晶，原子团簇，阻尼，多尺度，原子-连续关联模型