

固体塑性微观机制加速分子动力学模拟*

王云江¹

(¹中国科学院力学研究所, 非线性力学国家重点实验室, 100190, 北京;
yjwang@imech.ac.cn)

摘要 在过去的几十年里, 分子动力学模拟在固体材料塑性的微观机制研究中发挥了重要的作用, 极大地拓展了人类对于固体微观塑性机理的原子尺度认知。但是, 实验室加载条件下固体塑性的典型时间尺度为“秒”量级, 大大超过了目前最先进计算机的计算能力(微妙量级), 从而限制了分子动力学模拟的实用范围。本文将以前两类典型固体塑性事件, 即非晶态固体扩散与晶体固体晶界位错形核为例, 阐述加速分子动力学方法在跨时间尺度塑性机理研究中的应用。研究发现: 非晶扩散机制随时间尺度变化发生从一维链式扩散到三维集团扩散的运动模式转变; 从分子动力学加载应变率到实验室加载条件, 金属晶界位错形核发生从多位错集体形核到晶界原子重排引导的单元位错形核的机制转变。以上研究扩展了原子模拟在多尺度力学中的应用并揭示可能的新型塑性机制, 并对经典分子动力学模拟塑性的有效性提出挑战。

关键词: 固体塑型, 分子动力学, 时间尺度, 非晶扩散, 位错形核。

一、引言

分子动力学方法的基本原理为牛顿第二定律, 基于经验的原子间作用势, 数值求解原子运动方程, 可以在原子层次研究固体的微观变形机制。作为实验技术的有效补充, 分子动力学极大地拓展了人类对于固体微观塑性机理的原子尺度认知。但是, 分子动力学的时间步长一般为 fs (10^{-15} s) 量级, 而目前最先进的超级计算机的典型计算能力为 μ s (10^{-6} s) 量级, 与实验室时间尺度 (s, 10^0 s) 存在大概 10 个数量级的差别, 大大限制了其应用范围。

二、加速分子动力学思想

为克服分子动力学的时间尺度限制, 著名物理学家 M. Parrinello 提出了 Metadynamics 的思想 (1)。如图 1 所示, 根据过渡态理论预测 (2), 某个动力学时间发生的频率为 $\nu = \nu_0 \exp\left[-\frac{\Delta G(\tau, T)}{k_B T}\right]$, 其中 $\Delta G(\tau, T)$ 为激活自由能势垒。如果在原始的自由能面上加速驱动势 ΔV , 则势垒降低, 相应时间尺度减小, 从而实现加速模拟, 物理时间与分子动力学抽样时间转换关系为 $t_{\text{physical}} = t_{\text{sampling}} \exp\left[\frac{\Delta V(A)}{k_B T}\right]$ 。

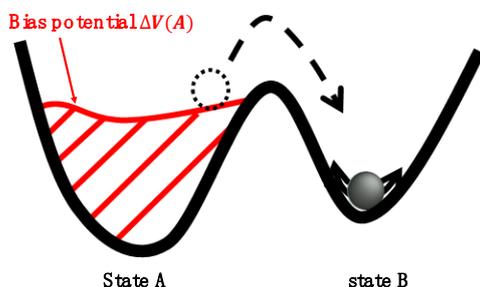
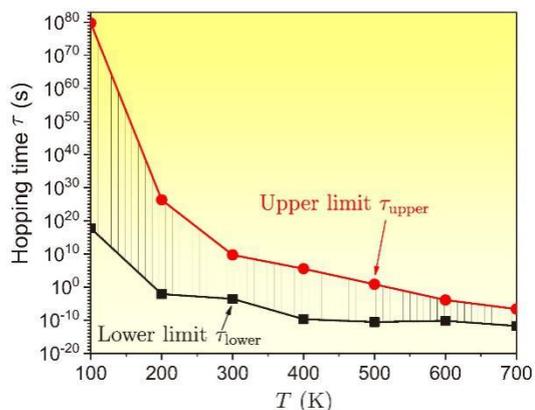


图1 加速分子动力学思想示意图。

*该研究工作得到了国家自然科学基金委、材料基因工程国家重点研究计划、中科院青促会的资助。

三、 结论

3.1 非晶固体扩散机制



使用计算分子动力学方法 (Metadynamics), 我们实现了非晶合金从极低温 100 K (设置更低问题), 到玻璃转变温度 (700 K) 大温度范围的扩散模拟 (3), 结果如图 2 所示, 而经典分子动力学只能模拟高温下的扩散行为。

图2 大温度范围预测非晶固体扩散时间的
时间尺度。

3.2 晶界位错形核

同时, 我们也发展了一种自适应加速分子动力学算法 (Adaptive-boost molecular dynamics), 该方法可以实现驱动势的自适应调整, 从而可以更高效、更准确的预测事件的时间尺度和自由能势垒 (4)。如图 3 所示, 我们实现了从声子到实验室时间尺度的晶界位错行为的跨时间尺度模拟, 发现金属晶界位错形核发生从多位错集体形核到晶界原子重排引导的单位错形核的机制转变。

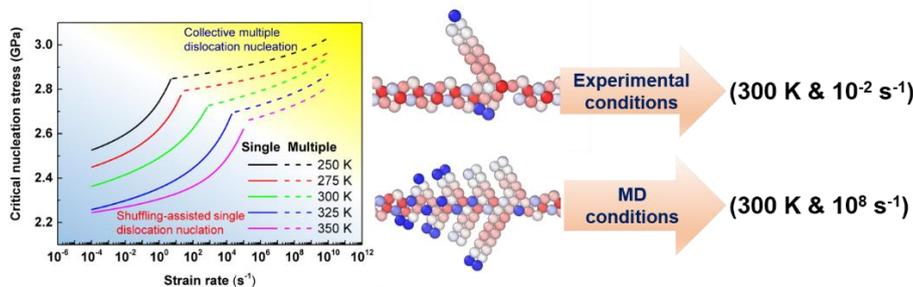


图3 晶界位错形核的应变率效应。

参 考 文 献

- 1 A. Laio, M. Parrinello, Escaping free-energy minima. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **99**, 12562–12566 (2002).
- 2 H. Eyring, The Activated Complex in Chemical Reactions. *J. Chem. Phys.* **3**, 107 (1935).
- 3 Y.-J. Wang, J.-P. Du, S. Shinzato, L.-H. Dai, S. Ogata, A free energy landscape perspective on the nature of collective diffusion in amorphous solids. *Acta Mater.* **157**, 165–173 (2018).
- 4 J.-P. Du, Y.-J. Wang, Y.-C. Lo, L. Wan, S. Ogata, Mechanism transition and strong temperature dependence of dislocation nucleation from grain boundaries: An accelerated molecular dynamics study. *Phys. Rev. B.* **94**, 104110 (2016).