

一种从离散模拟到连续介质弹性模拟的过渡方法¹⁾宓思恩^{*,†} 刘小明^{*} 魏悦广^{**,2)}^{*} (中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室, 北京 100190)[†] (中国科学院大学工程科学学院, 北京 100049)^{**} (北京大学工学院力学与工程科学系, 北京 100871)

摘要 提出了一种从离散分子动力学模拟 (MD) 到连续介质弹性有限元计算分析 (FEA) 的过渡方法, 简称 MD-FEA 方法. 首先通过 MD 计算获得晶体材料原子的移动位置, 然后根据晶体结构的周期性特征构造连续介质假设下的有限单元变形模型, 进一步结合材料的力学行为本构关系获得应变和应力场. 为了检验 MD-FEA 方法的有效性, 将该方法应用于详细分析 Al-Ni 软硬组合两相材料纳米柱体的拉伸变形问题和基底材料为 Al 球形压头材料为金刚石的纳米压痕问题. 采用 MD-FEA 方法获得了上述两种问题的应力-应变场, 并将计算结果分别与传统 MD 方法中通过变形梯度计算的原子应变以及原子的位力应力进行了比较, 详细讨论了用 MD-FEA 方法计算的应力-应变场与传统 MD 原子应变和位力应力的区别, 并对 MD-FEA 方法的有效性及其相较于传统 MD 方法所具有的优势进行了探讨. 结论显示, MD-FEA 方法与传统 MD 方法在应力-应变变化平缓的区域得到的结果接近, 但在变化剧烈的区域以及材料的表/界面区域, MD-FEA 方法能够得到更加精确的结果. 同时, MD-FEA 方法避免了传统 MD 方法中, 需要人为选取截断半径以及加权函数所导致的误差. 另外, 当应变较大时, MD-FEA 方法计算的小应变与传统 MD 方法计算的格林应变存在一定差异, 因此, MD-FEA 方法更适合应变较小的情形.

关键词 MD-FEA 方法, 应力-应变场, 原子应变, 位力应力

中图分类号: O343 文献标识码: A doi: 10.6052/0459-1879-21-449

A TRANSITION METHOD FROM DISCRETE SIMULATION TO ELASTIC FEA OF CONTINUOUS MEDIA¹⁾Mi Sien^{*,†} Liu Xiaoming^{*} Wei Yueguang^{**,2)}^{*} (LNM, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)[†] (College of Engineering Science, University of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)^{**} (Department of Mechanics and Engineering Science, College of Engineering, BIC-ESAT, Peking University, Beijing 100871, China)

Abstract A transition method from discrete molecular dynamics (MD) simulation to continuum elastic finite element analysis (FEA) is proposed. Firstly, the moving position and displacement of crystal material atoms is obtained by MD calculation, and then the finite element deformation model under the assumption of continuous medium is constructed according to the characteristics of crystal structure. Further, the strain and stress fields are obtained combined with the

2021-09-06 收稿, 2021-10-13 录用, 2021-10-14 网络版发表.

1) 国家自然科学基金资助项目 (11890681, 12032001, 11521202).

2) 魏悦广, 教授, 主要研究方向: 固体的跨尺度力学, 材料微尺度力学理论. E-mail: weiyg@pku.edu.cn

引用格式: 宓思恩, 刘小明, 魏悦广. 一种从离散模拟到连续介质弹性模拟的过渡方法. 力学学报, 2021, 53(11): 3080-3096

Mi Sien, Liu Xiaoming, Wei Yueguang. A transition method from discrete simulation to elastic FEA of continuous media. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2021, 53(11): 3080-3096

constitutive relationship of material mechanical behavior. In order to test the effectiveness of the MD-FEA method, this method is applied to analyze the tensile deformation of Al-Ni soft-hard composite nano cylinder and the nano indentation of substrate Al with spherical diamond indenter. The stress and the strain fields of the above two problems are obtained by MD-FEA method, and the calculated results are compared with the atomic strain calculated by discrete deformation gradient and the atomic potential stress in traditional MD method. The difference between the stress and strain field calculated by MD-FEA method and the traditional MD atomic strain and potential stress is discussed in detail, and the effectiveness of MD-FEA method and its advantages over traditional MD method are discussed. The result shows that the MD-FEA method and the traditional MD method are consistent when the stress and strain change softly in the volume, and in the area where stress and strain change rapidly and in the surface/interface area, the MD-FEA method can calculate the result more precise. Meanwhile, the MD-FEA method avoid the selection of the cutoff radius and weighting functions, which is necessary in traditional MD method and can lead to human error in some circumstances. When the strain is large, there are obvious difference between the small strain calculated by MD-FEA method and the Green strain calculated by traditional MD method. Thus the MD-FEA method is more suitable for the situation that the stress and strain is small.

Key words molecular dynamics-finite element analysis method, strain/stress field, atom strain, virial stress

引言

先进结构材料基于微纳米结构设计,其宏观力学性能依赖于微纳米结构,具有跨尺度力学特征^[1-4]. 对其跨尺度力学性能的准确模拟,需要采用从微观的离散 MD (molecular dynamics) 模拟到宏观的连续介质表征. 然而从离散体系到连续介质体系的过渡是面临的挑战性科学和技术难题. 原子模拟理论和方法的发展使得材料在纳米尺度下的力学行为得到了充分的研究^[5-9]. 如何将原子模拟方法与基于连续介质力学理论的代表相关联,把握先进材料的跨尺度力学行为,有效地建立先进材料的跨尺度力学理论,从而有效表征其不同尺度下的力学性能成为一个重要的研究方向^[10-13]. 其中,如何在离散原子体系中计算针对连续介质定义的力学变量也是亟需解决的一个重要的科学技术问题. 由于在原子模拟中(如 MD),模型由离散的原子构成,体系中对于应力和应变等连续介质力学理论框架下的力学变量并没有统一的定义. 许多研究都试图在原子模拟中定义与传统连续介质力学等效的应力和应变,由于原子结构及原子运动的多样性和离散特征,基于该过程给出的应力和应变的定义是难以直接与连续介质理论的应力-应变定义形成有效过渡的,在过渡区不可避免地引起非平衡“鬼力”. 为此,本文试图建立一种从离散模拟 (MD) 到连续介质弹性 FEA (finite element analysis) 的过渡方法. 在介绍这一过渡方法

之前,下面首先简要回顾一下若干 MD 模拟研究中相关应力和应变概念的定义和原理.

在离散体系 MD 方法中,人们也曾对应力和应变的概念进行过定义和相关研究,例如, Irving 和 Kirkwood^[14] 在流体力学方程的推导中,根据统计力学原理定义了位力应力 (virial stress) 的概念,其中连续流体中的每一微小部分都被视为由 N 个微粒所组成的系统,应力则被描述为该系统所受的面力,其中包含动能项与微粒间的作用力项. 这种方法在计算过程中引入了适当的时间和空间量的平均,并且在计算微粒间的相互作用力时,为了将统计力学与流体力学运动方程相联系,只考虑通过微粒中心的作用力项,因此在计算微粒间作用力项时,只计算了微粒的正应力. Hardy 等^[15-16] 注意到在 Irving 和 Kirkwood^[14] 的工作中,离散系统中守恒定律的准确性依赖于整体的平均,研究过程中引入了无穷级数和狄拉克 δ 函数,需要通过近似求解确定. Hardy 使用了一种局域函数来代替狄拉克 δ 函数,以克服 Irving 和 Kirkwood 的工作在数学上的复杂性. 这种局域函数代表对一个空间原子的运动产生显著影响的所有原子所占有体积的特征尺度,Hardy 证明了这种局域函数的取值范围可以任意选择,通过取极限,获得稳定的位力应力值. Zimmerman 等^[17] 将 Hardy 提出的计算方法与局部平均的位力应力作对比,显示 Hardy 的方法在绝大多数情况下的精确性更优于局部平均的位力应力. 在这两种表达式中,选

取不同特征体积时计算得到的应力值不同,但其波动的幅度都可以通过适当扩大参与计算的特征体积,或引入适当的时间平均降到最低,以此得到一个稳定值. Tsai^[18]提出了另一种计算应力的方法,该方法考虑了通过特定边界的力和动量通量,来计算边界所包含部分的应力.通过边界的合力的法向分量计算体内的正应力,边界面内的切向分量计算剪应力. Lutsko^[19]进一步发展了 Irving 和 Kirkwood^[14]的研究工作,通过局部的动量平衡方程和体积平均推导出应力张量. Zhou^[20]在其理论中指出,传统的 Cauchy 应力应该与原子的速度无关,只有分子间作用力部分才能真正对应于传统 Cauchy 应力.位力应力的动能项依赖于原子的质量和速度,会违背动量守恒,且不具备明确的物理意义. Liu 和 Qu^[21]则从柯西应力的原始定义出发,论证了在经过合适的时间平均后,基本的拉格朗日原子应力与柯西应力等效,进一步提出了不含原子速度项的拉格朗日应力和欧拉应力,并证明经典的位力应力实际上对应欧拉位力应力. Falk 和 Langer^[22]在研究材料不可逆的剪切变形时,将局部的应变定义为一定范围内,邻近原子相对于中心原子的实际位移与发生均匀变形时的位移的均方差的最小值. Shimizu 等^[23]在测量局部弹性应变时引用了其中均匀应变的计算.这是通过局部变形矩阵计算的拉格朗日应变,本质上反应原子与其邻近原子间的相对运动.虽然应变计算的形式简单,但是 Gullett 等^[24]指出,其中刚体的转动部分可能产生虚构的剪应变,导致计算错误.他们同时在文中介绍了变形梯度的计算,并与传统的连续变形梯度进行对比.同时,为了区分最邻近原子与稍远的原子的不同贡献,在变形梯度计算时引入了权函数.为了建立材料的原子运动离散体系与连续介质体系的应力和应变概念的关联, Mott 等^[25]通过考虑原子结构特征给出了一种定义变形梯度的几何方法,以此获得对应变的定义.

由于原子的位置坐标本质上是离散的,计算所得的原子尺度的应力与应变值也是离散的,同时,以上所有的计算方法都需要选取一个合适范围来确定计算所包含的邻近原子(选取截断半径),该范围的确定在一定程度上是任意的,其明显地对计算结果产生影响.在应力计算时采用的局域函数,以及计算变形梯度时的权函数也是通过不精确地拟合原子相互作用与原子间距离的关系所得,都会使计算结果

受到人为因素的影响.因此,通过传统离散体系 MD 模拟计算的应力与应变与连续介质力学框架下定义应力与应变之间存在一定的差异.

本文针对晶体材料的微观周期性结构特征,提出一种协同考虑材料原子结构、运动、模拟以及连续介质有限元分析的耦合计算方法,即 MD-FEA 方法,将原子模拟结果直接转变为已知有限元节点位移的应力应变场的后处理问题,避免了在后处理过程中仍需选取截断半径的问题.该方法的显著优点体现在:既直接将原子运动离散体系转化为连续介质体系的力学场计算,又避免了传统原子模拟方法在后处理过程中由于选择截断半径而引起的误差.对于许多具有周期性晶格排布的材料(如 FCC, BCC 和 HCP 等),将基本原子结构选为连续介质有限单元十分容易,同时以原子位移作为单元结点位移,计算有限单元内的力学场也十分方便.因此,本文建立了一种结合了分子动力学与有限元分析的计算方法(MD-FEA),针对典型 FCC 晶体材料结构的力学问题(如, Al/Ni 双材料纳米杆的拉伸与纳米压痕),开展新方法 with MD 方法的比对研究,以验证新方法的有效性.

1 MD-FEA 方法

由于晶体材料中原子的排布具有周期性(如 FCC, BCC 和 HCP 等),有利于将整个晶体材料的原子模型分割为有规律的单元体,进而整个模型的力学行为便可以运用有限元分析,通过各个单元的变形进行描述.以图 1 中的面心立方晶体为例,分子动

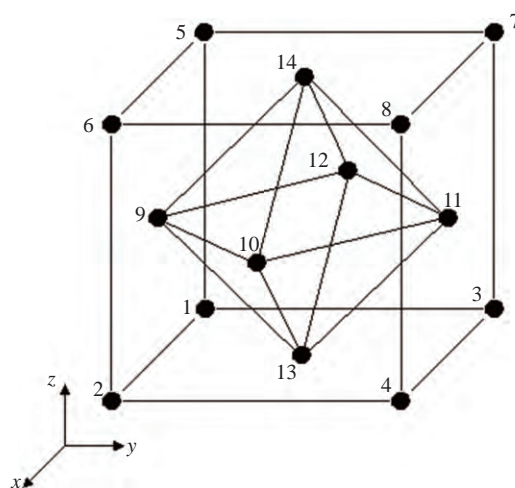


图 1 14 节点单元示意图

Fig. 1 Schematic diagram of a 14-node element

力学模型中的原子可以分割成若干有限元中的六面体单元, 每个 MD 模型中原子都可以视为单元中的节点. 因此, 每个 FEA 六面体单元包含 14 个节点, 8 个位于六面体的顶点, 6 个位于六面体的面心. 每个顶点的原子同属于 8 个单元, 面心的原子同属于 2 个单元. 因此, 通过 MD 模拟得到每个原子的位移即为对应单元的节点位移, 六面体单元的应变场可以通过属于该单元的 14 个节点的位移进行插值计算. 与传统 FEA 方法不同的是, 这种方法不需要计算模型的刚度矩阵, 每个节点的位移都是通过 MD 模拟获得的.

1.1 MD 模拟的相关基本关系

求解原子的牛顿运动基本方程为

$$m_i \ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{P}_i = -\frac{\partial U(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)}{\partial \mathbf{r}_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (1)$$

其中 $\mathbf{r}_i, m_i, \mathbf{P}_i$ 分别为原子 i 的位置、质量和其受到的作用力, U 为 n 个原子所组成的系统的总势能, 由系统中每个原子的作用势求和得到. 对晶体结构金属材料, 常用的两种原子作用势为: Lennard-Jones (L-J) 作用势和镶嵌原子势 (EAM 势).

对于 Lennard-Jones 作用势, 单个原子的作用势 E_i 为

$$E_i = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad r_{ij} < r_0 \quad (2)$$

其中 r_{ij} 为原子 i 与 j 之间的距离, ε, σ 和 r_0 分别为两个原子的结合能, 平衡距离和截断距离.

对于 EAM 原子作用势^[17-18]

$$E_i = F_\alpha \sum_{j \neq i} \rho_\beta(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij}) \quad (3)$$

其中 E_i 是原子 i 的总势能, α 和 β 分别为原子 i 和 j 的类别, F 代表原子的镶嵌能, 是该原子电子密度 ρ 的函数, r_{ij} 是原子 i 和 j 之间距离, ϕ 为对势.

1.2 FEA 相关基本关系

对于一个由面心立方晶体构成的 14 个原子的结构, 转换成有限元的单元结构即为由 14 节点构成的空间六面体单元, 其结构如图 1 所示. 常采用的等参元的位移场可以描述为

$$u(\xi, \eta, \zeta) = a_1 + a_2\xi + a_3\eta + a_4\zeta + a_5\xi\eta + a_6\eta\zeta + a_7\zeta\xi + a_8\xi\eta\zeta + a_9\xi^2 + a_{10}\eta^2 + a_{11}\zeta^2 + a_{12}\xi^2\eta + a_{13}\eta^2\zeta + a_{14}\zeta^2\xi \quad (4)$$

其中, $-1 \leq \xi, \eta, \zeta \leq 1$ 为等参元的坐标分量.

由此可以确定单元的形函数 N 为

$$N = \frac{1}{16} \begin{bmatrix} 1 \\ \xi \\ \eta \\ \zeta \\ \xi\eta \\ \eta\zeta \\ \zeta\xi \\ \xi\eta\zeta \\ \xi^2 \\ \eta^2 \\ \zeta^2 \\ \xi^2\eta \\ \eta^2\zeta \\ \zeta^2\xi \end{bmatrix}^T \begin{bmatrix} -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 4 & 4 & 4 & 4 & 4 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & -8 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -8 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -8 & 8 \\ 2 & -2 & -2 & 2 & 2 & -2 & -2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & -2 & -2 & -2 & -2 & 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & -2 & 2 & -2 & -2 & 2 & -2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 2 & 2 & -2 & 2 & -2 & -2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -4 & 4 & -4 & 4 & -4 & -4 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 4 & -4 & 4 & -4 & -4 & -4 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & -4 & -4 & -4 & -4 & 4 & 4 \\ -2 & -2 & 2 & 2 & -2 & -2 & 2 & 2 & 8 & 0 & -8 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & -2 & -2 & -2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 8 & -8 \\ -2 & 2 & -2 & 2 & -2 & 2 & -2 & 2 & 0 & -8 & 0 & 8 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

因此单元内一点处的应变分量为

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{N} \cdot \boldsymbol{\delta}^e = \mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\delta}^e \quad (6)$$

其中 $\boldsymbol{\delta}^e$ 是由原子位移确定的节点的位移矢量, 应变-位移矩阵 \mathbf{B} 可以分割为

$$\mathbf{B}_i = \mathbf{L} \cdot \mathbf{N}_i = \begin{bmatrix} N_{i,x} & 0 & 0 \\ 0 & N_{i,y} & 0 \\ 0 & 0 & N_{i,z} \\ N_{i,y} & N_{i,x} & 0 \\ 0 & N_{i,z} & N_{i,y} \\ N_{i,z} & 0 & N_{i,x} \end{bmatrix}, \quad i = 1, 2, \dots, 14 \quad (7)$$

其中

$$\begin{Bmatrix} N_{i,x} \\ N_{i,y} \\ N_{i,z} \end{Bmatrix} = \mathbf{J}^{-1} \begin{Bmatrix} N_{i,\xi} \\ N_{i,\eta} \\ N_{i,\zeta} \end{Bmatrix} \quad (8)$$

雅可比矩阵 \mathbf{J} 描述了实际单元与等参元的坐标转换关系.

如果考虑材料为线性弹性情况, 单元的应力场与应变能密度分别为

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \quad (9)$$

$$U = \frac{1}{2} \boldsymbol{\delta}_i^T \int_{\Omega} \mathbf{B}_i^T \cdot \mathbf{D}_i \cdot \mathbf{B}_i d\Omega \cdot \boldsymbol{\delta}_i = \frac{1}{2} \iiint \boldsymbol{\varepsilon}^T \cdot \mathbf{D} \cdot \boldsymbol{\varepsilon} \cdot |\mathbf{J}| d\xi d\eta d\zeta \quad (10)$$

其中

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} \lambda + 2G & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2G & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2G & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & G & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & G & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & G \end{bmatrix} \quad (11)$$

为弹性矩阵, $\lambda = \frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)}$ 和 $G = \frac{E}{2(1 + \nu)}$ 为材料的拉梅常数, 其中 E 和 ν 分别为材料的弹性模量和泊松比.

可应用式 (4)、式 (6) 和式 (9) 通过节点位移插值直接计算单元内高斯点处的位移、应变和应力. 若考虑 $3 \times 3 \times 3$ 的高斯积分点方案, 则单元内有 27 个高斯积分点 (通常简称高斯点).

2 MD-FEA 方法的应用

下面通过两个典型物理问题的研究, 通过比较本文 MD-FEA 方法的结果与 MD 模拟结果, 以检验本文方法的有效性.

2.1 软硬两种金属 (Al/Ni) 等截面纳米杆串联结构的拉伸问题

研究的问题如图 2 所示.

首先采用分子动力学软件 LAMMPS^[26] 建立由 Al 和 Ni 构成的双材料纳米杆拉伸模型, 原子间的相互作用采用 EAM 势函数^[26-27](见式 (3)). 整个系统由 233 568 个原子 (93 296 个 Al 原子和 140 272 个 Ni 原子) 构成, 模型在 x 方向上长为 44 nm (Al 和 Ni 段的长度各为 22 nm) 截面为边长 8 nm 的正方形. 模型的初始构型如图 2 所示. Al 和 Ni 晶体的 [1 0 0] 晶向与 x 轴平行, 模型在 x 方向的两端设为刚体, y, z 方向的 4 个面为自由表面. 整个系统在 NVT 系综下保持温度为 0.01 K.

需要指出的是, 许多研究^[28-30] 表明, 实际情况下的 Al/Ni 界面十分复杂, 难以进行准确的原子模型建模. 为了方便研究, Gurtin 与 Murdoch^[31] 建立了简化的材料表/界面模型: 假定材料的表/界面厚度为 0 且具有一定的力学性质, 并在连续介质力学框架下根据这个模型建立了材料的表/界面弹性理论. 根据这个假设, 同时也为了简化计算, 在本模型中, Al 和 Ni 在界面处各取一层原子层, 并在 x 方向上进行固定, 使得界面原子在运动中整体保持在同一平面内. 界面处原子的相互作用采用 L-J 势式 (2), 以改变不同工况下的界面性能. 另外, 在纳米杆拉伸模型中, 通常采用杆整体的应变变化作为外部载荷, 由于计算规模的限制, 应变率通常在 $10^6 \sim 10^8 \text{ s}^{-1}$ 之间. 而在本模型中, 为了保证界面在变形过程中保持平面, 限制了界面原子在 x 方向的位移, Al 和 Ni 之间的变形无法通过界面进行有效地传递. 因此, 本模型采用力加载的方式, 在模型 x 方向两端施加 $p =$



图 2 Al/Ni 双材料纳米杆拉伸分子动力学模型. 界面及端部标注为黄色

Fig. 2 Molecular Dynamics model of the Al/Ni composite nano cylinder system. The interface layers and the boundaries are marked yellow

160.2 N/s 的外部载荷取代模型整体的应变加载, 系统在整个加载过程中保持平衡. 系统的时间步长设为 0.001 ps. 由图 3 的应变-时间关系可知, Al, Ni 两相的应变率分别为 $4 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$ 和 $1.7 \times 10^7 \text{ s}^{-1}$, 并且在整个模拟过程中基本保持一致.

模型中 Al 和 Ni 的应力应变曲线如图 4 所示. 在达到极限应力 $\sigma_{xx}=7.56 \text{ GPa}$ 之前, Al 和 Ni 整体上都符合弹性变形.

达到极限应力后, Al 在界面附近发生破坏, 如图 5 所示.

根据模型的应力-应变关系, 可知 Al 和 Ni 的杨氏模量分别为 72.2 GPa 与 134.6 GPa, 这与其他研

究^[27,32]中, 根据 EAM 势的下的 Al 和 Ni 体积模量分别为 79 GPa 和 181 GPa, 泊松比分别为 0.35 与 0.385 计算所得的弹性模量分别为 71 GPa 和 125.3 GPa 相近. 整个模型在弹性阶段的杨氏模量为 92.1 GPa.

通过 MD-FEA 方法计算模型每个单元高斯点处的拉伸应变 ϵ_{xx} 代表整个模型的连续应变场. 在极限应力 $\sigma_{xx} = 7.56 \text{ GPa}$ 下, 模型在 $z = 4 \text{ nm}$ 处的 x - y 截面的拉伸应变 ϵ_{xx} 如图 6 所示, 界面位置分别为 $x = -22 \text{ nm}$ 和 $x = 22 \text{ nm}$. 材料 Al 内部的拉伸应变为 0.12, 材料 Ni 内部拉伸应变为 0.05, 与图 4 的结论一致, 而在材料的界面和端部, 由于边界条件的影响, 拉伸应变与材料内部有所区别.

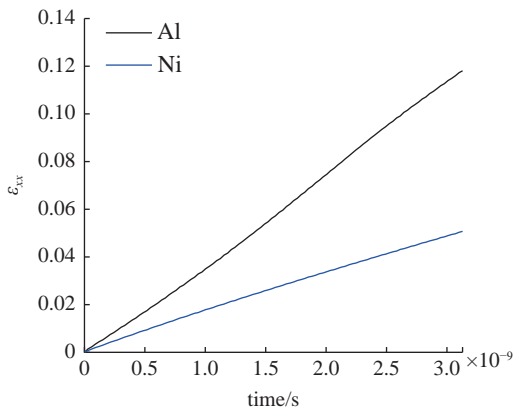


图 3 拉伸载荷下 Al 和 Ni 的应变-时间曲线
Fig. 3 The strain-time relation of Al and Ni under uniform force loading

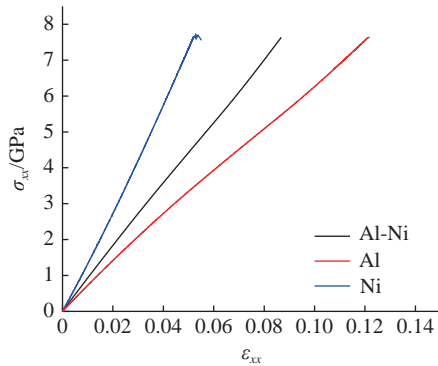


图 4 Al-Ni 系统和两相材料的应力-应变关系
Fig. 4 Stress-strain relation of the Al-Ni system and the phases

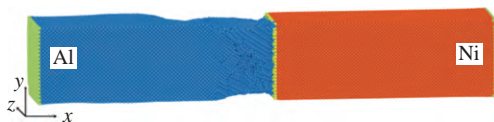


图 5 超过极限应力 $\sigma_{xx}=7.56 \text{ GPa}$ 后 Al-Ni 系统的变形
Fig. 5 Deformed Al-Ni system after the critical tensile stress $\sigma_{xx}=7.56 \text{ GPa}$

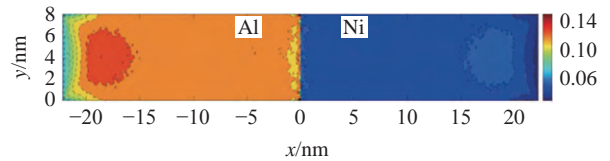


图 6 拉伸载荷 $\sigma_{xx}=7.56 \text{ GPa}$ 下, Al 和 Ni 在中截面处的应变 ϵ_{xx} , 界面位置为 $x=0 \text{ nm}$
Fig. 6 ϵ_{xx} at the middle section of Al and Ni under $\sigma_{xx}=7.56 \text{ GPa}$. The interface at $x=0 \text{ nm}$

图 6 为材料在 $z = 4 \text{ nm}$ 处的中截面的拉伸应变 ϵ_{xx} . 在截面上, 材料 Al 和 Ni 从模型底部 ($y = 0 \text{ nm}$) 到模型中部 ($y = 4 \text{ nm}$) 的应变分布如图 7 所示. 应变在刚体边界附近趋向于零, 并朝着材料内部急剧增加, 并经过少许的降低后, 在材料 Al 和 Ni 的体内分别稳定在 0.122 和 0.053. 在材料的界面附近, 材料 Al 处的应变随着与界面距离的减少整体上有少许的降低, 而材料 Ni 处的应变有少许增加, 且与体内应变相比具有较大的分散性. 界面附近应变的变化集中在距离界面 4 nm 内的区域中.

在相同的拉伸应力下, 界面附近的拉伸应变 ϵ_{xx} 在材料 Al 处的降低和材料 Ni 处的升高主要是由于材料性能的不同引起的. 根据 EAM 势函数的结论与应力应变关系曲线, 可知 Al 和 Ni 在 $[100]$ 晶向上的杨氏模量分别为 72.2 GPa 和 134.6 GPa, 泊松比分别为 0.35 和 0.385. 因此, Al 和 Ni 在 y 方向平行于界面的正应变分别为

$$\left. \begin{aligned} \epsilon_{yy}^{\text{Al}} &= \frac{\nu_{\text{Al}}}{E_{\text{Al}}} \sigma_x \\ \epsilon_{yy}^{\text{Ni}} &= \frac{\nu_{\text{Ni}}}{E_{\text{Ni}}} \sigma_x \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

设 Al 和 Ni 在界面处平行于界面的正应变的差值为失配应变

$$\Delta\varepsilon_{yy} = \varepsilon_{yy}^{Al} - \varepsilon_{yy}^{Ni} = \left(\frac{\nu_{Al}}{E_{Al}} - \frac{\nu_{Ni}}{E_{Ni}} \right) \sigma_x \quad (13)$$

根据界面处的无滑移边界条件, 需要在界面处引入额外的平行于界面的正应力 σ_{yy}^{exc} , 以保证在 $x = 0$ 的界面处, 满足

$$\varepsilon_{yy}^{Al}|_{x=0} = \varepsilon_{yy}^{Ni}|_{x=0} \quad (14)$$

假设界面处完全是弹性变形, 且界面两边材料中额外引入的应力使得界面整体保持平衡. 因此

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{yy}^{excAl} - \varepsilon_{yy}^{excNi} &= \Delta\varepsilon_{yy} \\ E_{Al}\varepsilon_{yy}^{excAl} + E_{Ni}\varepsilon_{yy}^{excNi} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

其中 ε_{yy}^{excAl} 和 ε_{yy}^{excNi} 分别为 Al 和 Ni 由额外引入的界面应力产生的应变, 因此

$$E_{Al}\varepsilon_{yy}^{excAl} = -E_{Ni}\varepsilon_{yy}^{excNi} = \frac{E_{Ni}\nu_{Al} - E_{Al}\nu_{Ni}}{E_{Al} + E_{Ni}} \sigma_x \quad (16)$$

在 z 方向上同理. 由此可得 Al 和 Ni 在 x 方向上的拉伸应变

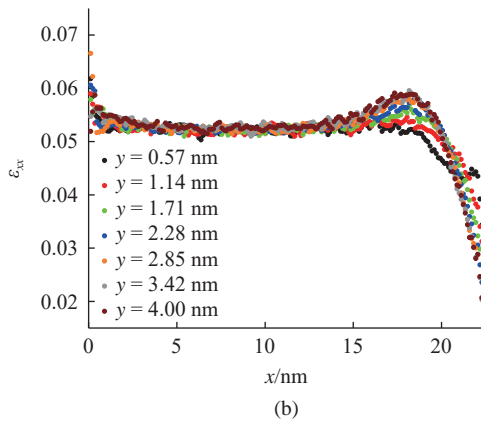
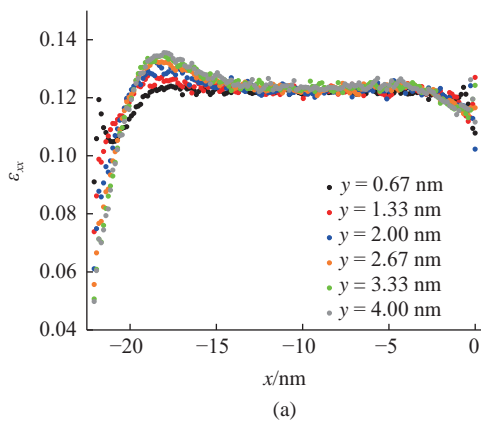


图 7 材料中截面内不同位置的拉伸应变. (a) Al, (b) Ni

Fig. 7 Tensile strain in (a) Al and (b) Ni at the different location of the middle section

$$\left. \begin{aligned} \varepsilon_{xx(x=0)}^{Al} &= \frac{\sigma_x}{E_{Al}} \left[1 - \frac{2\nu_{Al}(E_{Ni}\nu_{Al} - E_{Al}\nu_{Ni})}{E_{Al} + E_{Ni}} \right] \\ \varepsilon_{xx(x=0)}^{Ni} &= \frac{\sigma_x}{E_{Ni}} \left[1 + \frac{2\nu_{Ni}(E_{Ni}\nu_{Al} - E_{Al}\nu_{Ni})}{E_{Al} + E_{Ni}} \right] \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

由式 (18) 计算可得, 模型中 Al 在 x 方向上的拉伸应变在界面处减小 6.5%, Ni 的拉伸应变在界面处增大 7.2%, 这与图 7 的结论一致.

在分子动力学模拟中可以得到模型的原子应变. 根据文献 [16-17] 的研究, 原子的应变可以通过变形梯度计算得到

$$\varepsilon_i = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_i^T \mathbf{F}_i - \mathbf{I}) \quad (18)$$

变形梯度 \mathbf{F}_i 通过求下式的最小值得到

$$\sum_{j \in N_i^0} |d_{ji}^0 \mathbf{F}_i - d_{ji}^0|^2 \rightarrow \mathbf{F}_i = \left(\sum_{j \in N_i^0} d_{ji}^{0T} d_{ji}^0 \right)^{-1} \left(\sum_{j \in N_i^0} d_{ji}^{0T} d_{ji} \right) \quad (19)$$

其中 d_{ji} 和 d_{ji}^0 分别为即时构型和初始构型下原子 j 到原子 i 的矢量. 计算原子应变的截断半径设为 0.7 nm, 且不设置加权函数. 拉伸载荷下, 在模型的整体拉伸应变从 0.02 到 0.08 的变形过程中, 通过两种方法计算得到的模型中心 ($y = z = 4$ nm) 处沿 x 方向的拉伸应变 ε_{xx} 如图 8 所示. 使用 MD-FEA 方法计算得到的材料内部的拉伸应变 (MF) 与通过变形梯度计算的原子应变 (AS) 在模型整体应变达到 0.12 之前基本相同. 在之后的变形过程中, 原子应变计算的拉伸应变大于使用 MD-FEA 方法得到的拉伸应变. 这主要是由于 MD-FEA 计算了在弹性变形中常用的小应变张量, 而原子应变基于变形梯度计算的

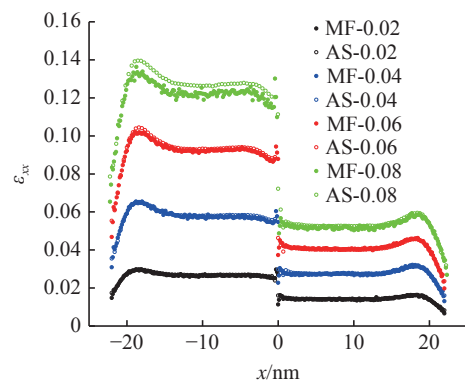


图 8 模型整体应变 0.02~0.08 的变形过程中 MD-FEA 方法计算的应变与原子应变的对比

Fig. 8 Strain computed by MD-FEA method and deformation gradient with the system strain from 0.02 to 0.08

是格林-拉格朗日应变张量. 这两种应变在变形较小时的差异可忽略不计, 但对于计算应变达到 0.12 的材料 Al, 其结果有明显的差异.

同时, 本文计算了 7.56 GPa 拉伸载荷下, 模型中心在截断半径 0.4~0.7 nm 下原子应变计算的拉伸应变值, 如图 9 所示. 不同截断半径下, 计算的原子拉伸应变在模型端部和体内基本保持一致, 但在距离界面 2 原子层内产生明显的差异. 考虑到图 7 所示的两种材料的拉伸应变在界面附近的横截面内有较大的分散性, 可以认为这种复杂的应变分布是导致不同截断半径下计算得到的界面处的拉伸应变有较大差异的主要原因.

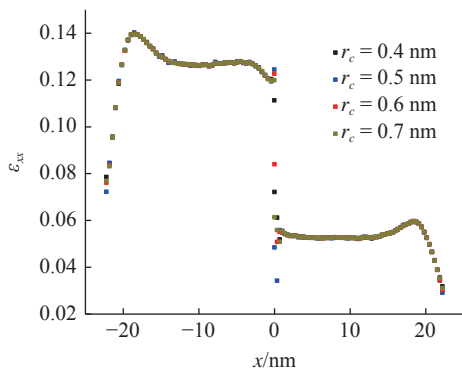


图 9 不同截断半径下计算的原子应变

Fig. 9 Atom strain computed in different cutoff radius

在模型两端均匀的拉伸载荷下, 材料 Al 和 Ni 在界面附近的拉伸应变在同一横截面内表现出一定的周期性变化, 如图 10 所示. 除了由于应力集中出现在 4 个角落的最大应变外, 在材料 Al 界面附近第 2 层原子处, 中心附近的拉伸应变大于四周边界附近的拉伸应变, 边界附近的部分区域有着较大的拉伸应变, 并在靠近材料内部时急剧减小. 第 2 层 Ni 原子处, 四角附近的拉伸应变大于材料中心区域, 并且有规律地, 在某些位置的拉伸应变明显减小. 在两种材料界面附近的第 4 层原子处, 大致能观察到与各自第 2 层原子处相反的应变分布, 且应变在横截面内的变化幅度明显减小. 这表明界面附近的拉伸应变场在平行与垂直界面方向上都有波动, 且随着与界面距离的增加, 波动幅度逐渐降低. 在距离界面第 6 层原子处, 应变波动基本消失, 除边界附近应变与内部稍有变化外, 材料内部的应变与远离界面的应变基本相同.

界面原子在弛豫过程中发生重构时, 在对其应力应变的研究中也观察到了类似的波动现象^[33]. 但

是, 本文选择了弛豫后的构型为参考构形, 消除了弛豫过程中残余应变的影响, 这表明界面处的应变波动也会由外部施加的拉伸载荷引起. 材料 Al 在横截面上有 20 × 20 个晶格, 材料 Ni 有 23 × 23 个晶格. 界面处的晶格失配与应变波动的周期相吻合. 因此

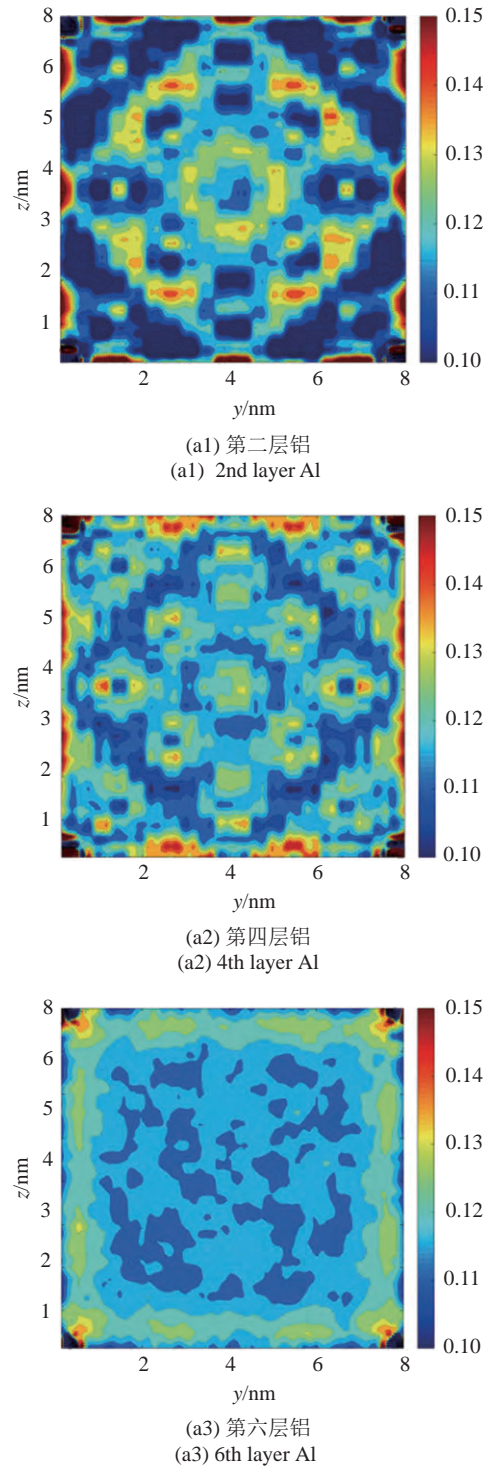
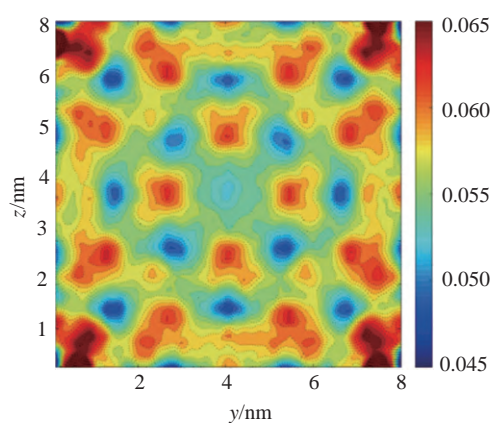
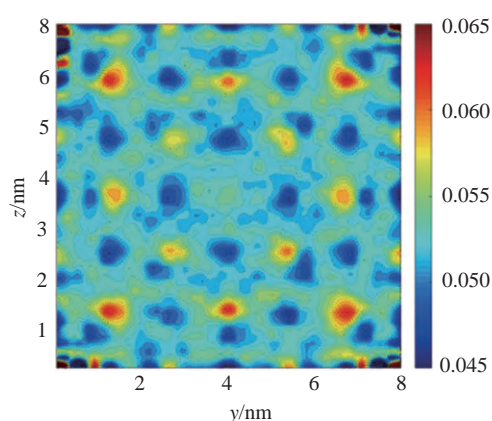


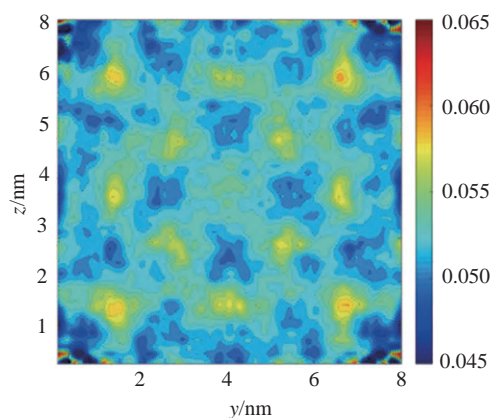
图 10 (a) Al 和 (b) Ni 在距界面第 2, 4, 6 层截面原子处的拉伸应变
Fig. 10 Tensile strain of the 2nd, 4th and 6th layers of the cross section near the interface for (a) Al and (b) Ni



(b1) 第二层镍
(b1) 2nd layer Ni



(b2) 第四层镍
(b2) 4th layer Ni



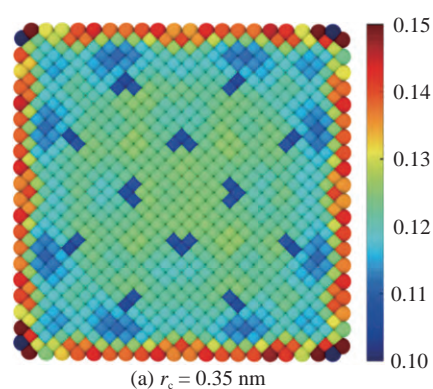
(b3) 第六层镍
(b3) 6th layer Ni

图 10 (a) Al 和 (b) Ni 在距界面第 2, 4, 6 层截面原子处的拉伸应变 (续)

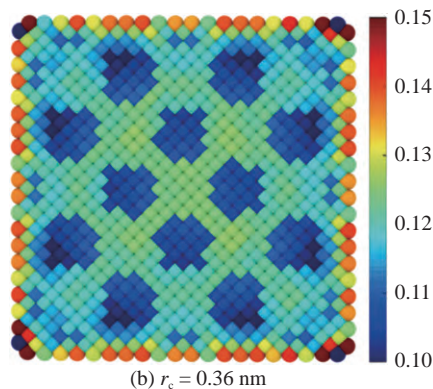
Fig. 10 Tensile strain of the 2nd, 4th and 6th layers of the cross section near the interface, for (a) Al and for (b) Ni (continued)

可以认为界面的原子失配不仅仅引起界面处的残余应变, 同时也改变了界面处的材料性能, 使得界面截面的不同位置在相同的拉伸载荷下产生不同的拉伸应变。

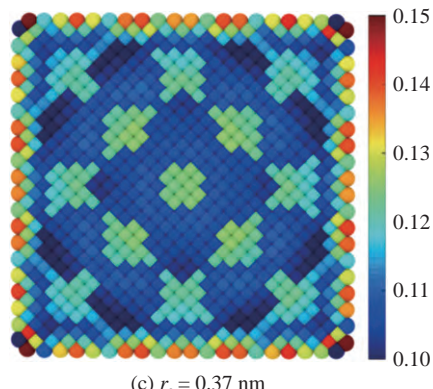
拉伸应变在界面附近处的剧烈变化是原子应变在不同的截断半径下得到的结果产生巨大差异的主要原因之一. 图 11 展示了 Al 在距界面第 2 层原子处的原子应变在不同截断半径下的分布, 作为与 MD-FEA 方法得到的结果 (图 10(a1)) 的对比. 截断半径 r_c 设置在 0.35~0.38 nm 之间. 结果显示截断半径 $r_c = 0.36$ nm 和 $r_c = 0.37$ nm 下的原子应变分布与 MD-FEA 方法的结果有相似之处, 而 $r_c = 0.35$ nm 和 $r_c = 0.38$ nm 的结果却截然不同. 同时, 相比于 MD-FEA 方法, 原子应变的分布规律显得较为粗略,



(a) $r_c = 0.35$ nm



(b) $r_c = 0.36$ nm



(c) $r_c = 0.37$ nm

图 11 截断半径为 0.35~0.38 nm 时, 距界面第 2 层 Al 原子截面处的拉伸应变分布

Fig. 11 Atom strain at 2th layer in phase Al with the cutoff radius r_c from 0.35 to 0.38

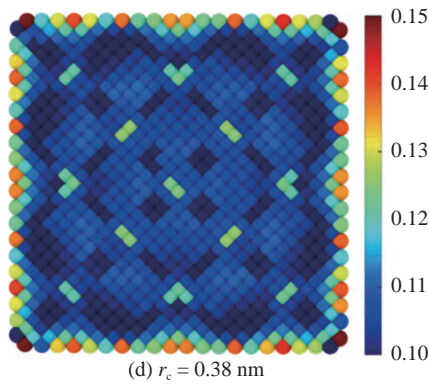


图 11 截断半径为 0.35~0.38 nm 时, 距界面第 2 层 Al 原子截面处的拉伸应变分布 (续)

Fig. 11 Atom strain at 2th layer in phase Al with the cutoff radius r_c from 0.35 to 0.38 (continued)

忽略了许多细节. 对于 FCC 晶体, 每个晶体单元拥有 4 个原子, 因此每个单元根据原子位移得到 4 个原子应变值, 而 MD-FEA 方法准确计算了每个单元在 27 个高斯点处的应变, 因此能够提供更多的应变细节, 得到的应变场也更加精确.

当计算一种材料的原子应变时, 截断半径内可能同时包含其他材料的原子, 这也会明显影响计算的结果. 如图 12 所示, 当计算界面附近 Al 原子的应变时, 截断半径内参与计算的不仅有附近的 Al 原子, 同时也包含了部分 Ni 原子. 随着截断半径的增大, 使得界面附近的 Al 原子计算结果误差也随之增大. 在相同的拉伸载荷下, 材料 Al 的应变明显大于 Ni 的应变, 这使得界面附近 Al 原子的应变随着截断半径的增大而减小, Ni 的原子应变随截断半径的增大而增大.

以距界面第 2,4,6 层原子层截面处中线上 ($z =$

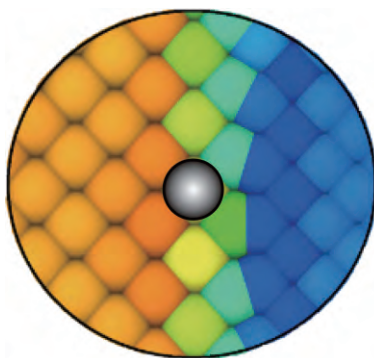


图 12 $r_c=0.8$ nm 下, 界面原子附近参与原子应变计算的 Al 原子 (黄色和橙色) 和 Ni 原子 (绿色和蓝色) 数量示意图

Fig. 12 A schematic diagram of the number of atom Al (yellow and orange) and Ni (blue and green) that participated in the calculation of the atom strain of the selected atom near the interface with $r_c=0.8$ nm

4 nm) 的拉伸应变为例, 在 7.56 GPa 的拉伸载荷下, 由 MD-FEA 方法计算的结果与不同截断半径下原子应变的结果如图 13 所示.

在截断半径为 0.4 nm 时, 距离界面第 2 层原子层的截面内计算的 Al 和 Ni 原子应变表现出明显的波动, 并且随着截断半径的增大, 这种波动幅度明显减小. 同时, 随着截断半径的增大, Al 的平均原子应

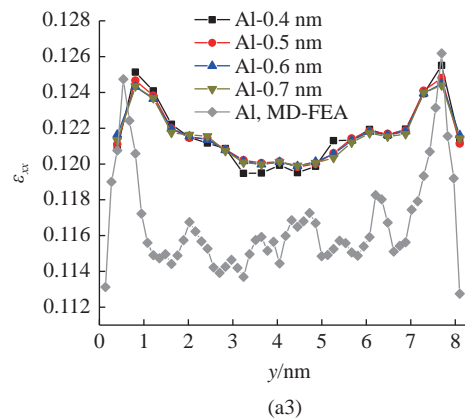
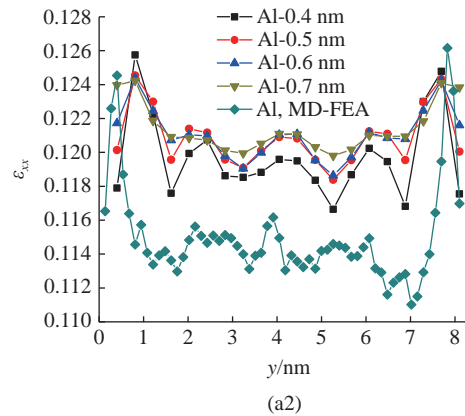
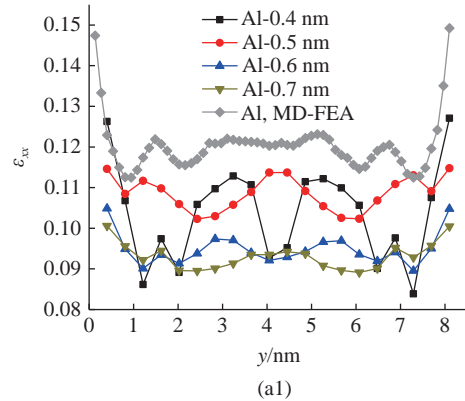


图 13 不同截断半径下, 距离界面第 2, 4, 6 层原子层截面中线上 (a1)-(a3) Al 原子和 (b1)-(b3) Ni 原子的原子应变分布以及同一位置下 MD-FEA 方法计算的应变

Fig. 13 MD-FEA strain and atom strain of the 2nd, 4th and 6th layers of (a1)-(a3) Al and (b1)-(b3) Ni in the middle line of interface section computed by different cutoff radius

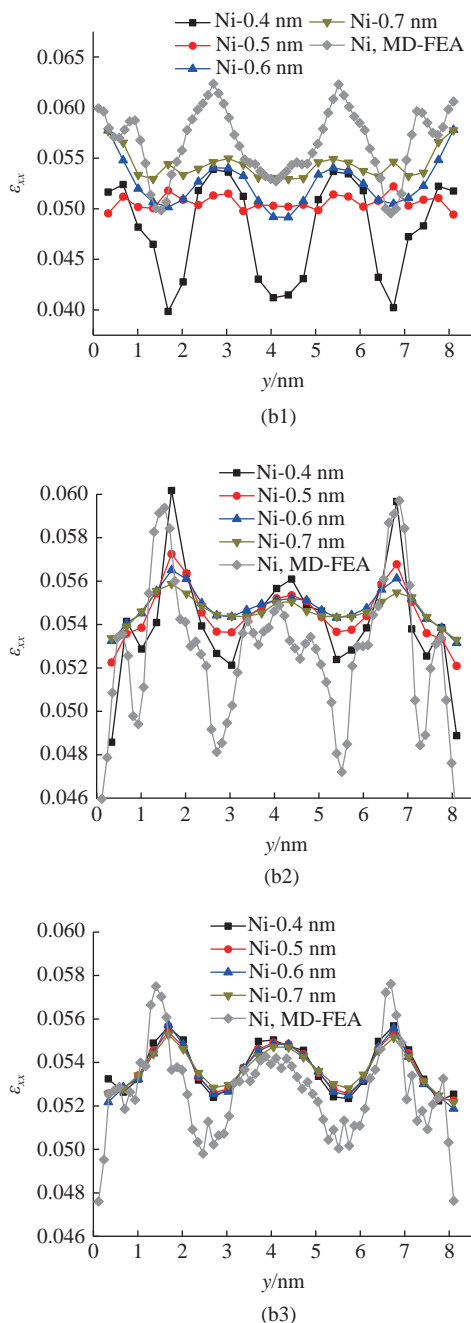


图 13 不同截断半径下, 距离界面第 2, 4, 6 层原子层截面中线上的 (a1)-(a3) Al 原子和 (b1)-(b3) Ni 原子的原子应变分布以及同一位置下 MD-FEA 方法计算的应变 (续)

Fig. 13 MD-FEA strain and atom strain of the 2nd, 4th and 6th layers of (a1)-(a3) Al and (b1)-(b3) Ni in the middle line of interface section computed by different cutoff radius (continued)

变呈现逐渐减小的趋势, 而 Ni 的平均原子应变逐渐增大. 在此截面上, 通过 MD-FEA 方法计算的应变大于原子应变的计算值, 且在截面中线上, 应变的变化趋势也与某一特定截断半径下的原子应变类似 ($r_c = 0.6$ nm 的 Al 与 $r_c = 0.4$ nm 的 Ni). 而在距离界面第 4 层原子层处, 不同截断半径下计算的原子应

变较为一致, 随着截断半径的增大, Al 和 Ni 原子的原子应变计算值均稍有增大, 在距离界面第 6 层原子层处, 不同截断半径下计算的原子应变基本相同. 在第 4 层与第 6 层原子层处, 原子应变的计算值均大于 MD-FEA 方法的计算值, 而这两种方法计算的应变沿着截面中线的变化趋势较为一致, 且原子应变的变化幅度明显小于 MD-FEA 方法计算的应变. 随着与界面距离的增加, 不同方法计算的 Al 原子的应变稍有增大, Ni 原子的应变稍有减小, 这与图 7 和图 8 的结论相吻合.

在 MD-FEA 方法中, 应变是以参考构型中的一个单元为基本单元计算的, 这种方法消除了人为选取的截断半径的影响. 单元的体积由材料的晶格常数确定, 每个单元的节点 (原子) 数量相同, 且单元的体积足够小, 从而能得局部的精确结果. 在 MD-FEA 方法中, 每个单元都只包含了同一种原子, 界面附近的 Al 原子只能通过相互作用改变界面另一边 Ni 原子的构型来间接反应对 Ni 原子的影响, 而不能 Al 原子构型的变化直接参与 Ni 原子处应变的计算, 反之亦然. 用这种方法计算界面附近的应变场更加合理.

图 14 展示了模型在 1.26 GPa 的拉伸载荷下中截面的应力分布. 位力应力由下式计算得到

$$\sigma_{\text{virial}} = \frac{1}{V} \left(- \sum_i m_i v_i \otimes v_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i} r_{ij} \otimes f_{ij} \right) \quad (20)$$

其中 m_i , v_i 分别为原子 i 的质量与速度, r_{ij} , f_{ij} 分别为原子 i 与原子 j 之间的距离与作用势, V 为原子体积.

根据图 14(a) 和图 14(b) 可知, MD-FEA 方法计算的应力明显大于原子的位力应力. 在加载的拉伸应力为 1.26 GPa 时, MD-FEA 方法计算的 Al 和 Ni 在模型体内的应力为 1.32 GPa 见图 14(a), 而位力应力计算的应力值明显较小, 且在两种材料中并不一致见图 14(b). 这主要是由于在 MD-FEA 方法中, 选择弛豫后的构型为参考构形, 而在参考构形中计算的位力应力有一定残余的压应力存在见图 14(c).

图 14(d) 展示了 MD-FEA 方法与消除了残余应力的位力应力在模型轴心处的对比, 可见两种方法计算的结果较为一致. 在使用 MD-FEA 方法计算应力时, 假设模型的杨氏模量和泊松比在变形过程中

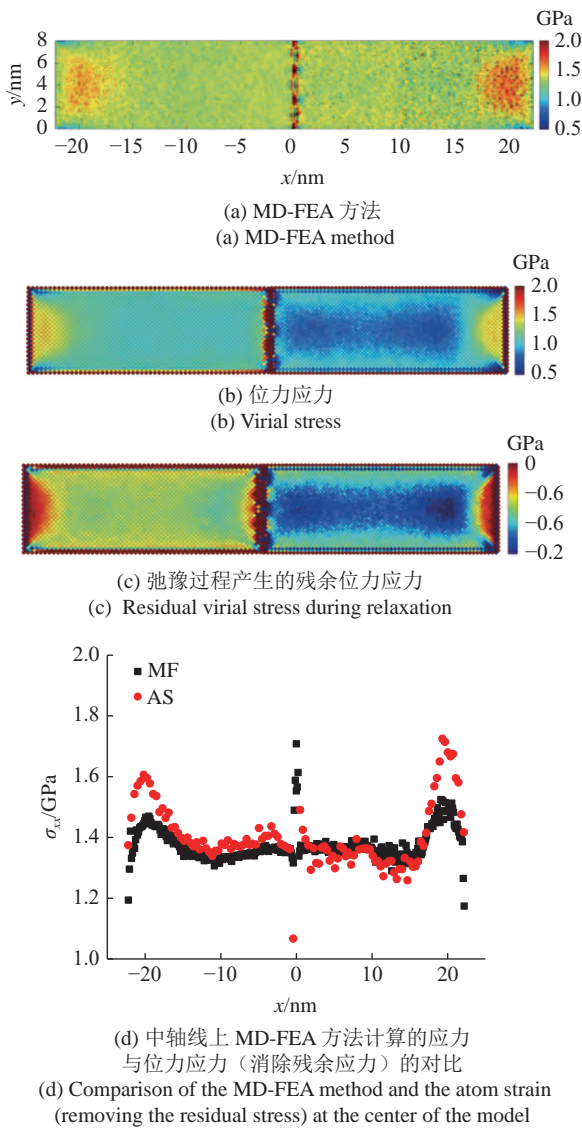


图 14 拉伸应力为 1.26 GPa 时, 不同方法计算的模型中截面应力分布

Fig. 14 Distribution of the stress on the cross section computed by different methods under the applied tensile stress 1.26 GPa

保持不变, 而通过模型的应力-应变关系可知, 材料的杨氏模量在变形较大时有轻微的变化. 因此, 鉴于选取的材料参数为小变形下的参数, 可以认为用 MD-FEA 方法计算的应力在模型的变形较小时较为精确. 同时, MD-FEA 方法计算的应力在模型的表面与内部较为一致, 而位力应力的结果显示了由于邻近的原子构型的差异, 在同一拉伸载荷下, 模型表面原子和内部原子计算的应力有显著的差异. 因此, MD-FEA 方法更能准确地计算模型的应力分布.

2.2 金刚石压头/AI 基体的纳米压痕实验分析

使用分子动力学软件 LAMMPS 建立纳米压痕模型, 基体长和宽分别为 40 个晶格, 高为 15 个晶格

的 Al, 压头为由半径为 10 nm 的金刚石球形压头. 初始构形中压头尖端与基体表面距离为 1.156 nm, 并在每时间步中对压头施加 0.05 晶格的位移 (约 0.02 nm) 后, 对整个模型弛豫. 模型中的 Al 基体采用 EAM 势^[27], 金刚石压头采用 tersoff 势^[34], Al 和金刚石之间的相互作用使用 L-J 势描述, 其中, 结合能 $\epsilon = 31.5 \times 10^{-3}$ eV, 平衡距离为 2.976 Å, 截断半径为 10 Å^[35]. 基体的底部与四周为固定边界, 整个系统采用 NVE 系综. 温度设定为 0.01 K. 模型的初始构型见图 15(a). 图 15(b) 展示了载荷与压入深度 D 之间的关系.

从 $D = -0.55$ nm 开始, 基体和压头之间表现出相互吸引, 压头受到基体向下的拉力, 并在 $D = -0.4$ nm 时达到最大值. 直到 $D = -0.1$ nm 时, 拉力转变为压力, 且在 $D = 0.15$ nm 之前不断增大, 在 $D = 0.15$ nm 时压力出现第一次波动, 基体开始出现位错, 此时压力为 150 nN.

基体的应变分量 ϵ_{xx} 和 γ_{xz} 在临界压入深度下的分布如图 16 所示. 在这两种计算方法中, ϵ_{xx} 的影响区域较为接近, 而 MD-FEA 方法计算的反对称的剪

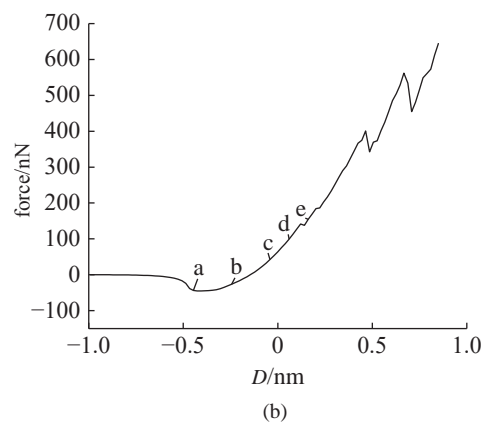
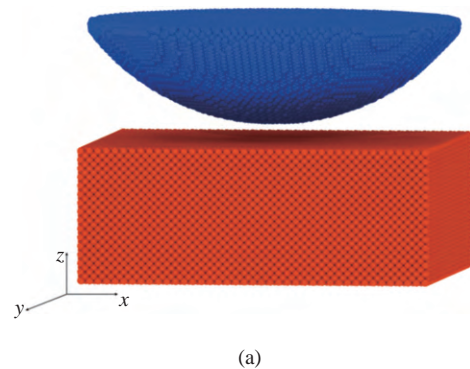


图 15 (a) 纳米压痕的分子动力学模型和 (b) 载荷-压入深度曲线
Fig. 15 (a) Molecular dynamics model of the indentation and (b) the force-depth relation during the simulation

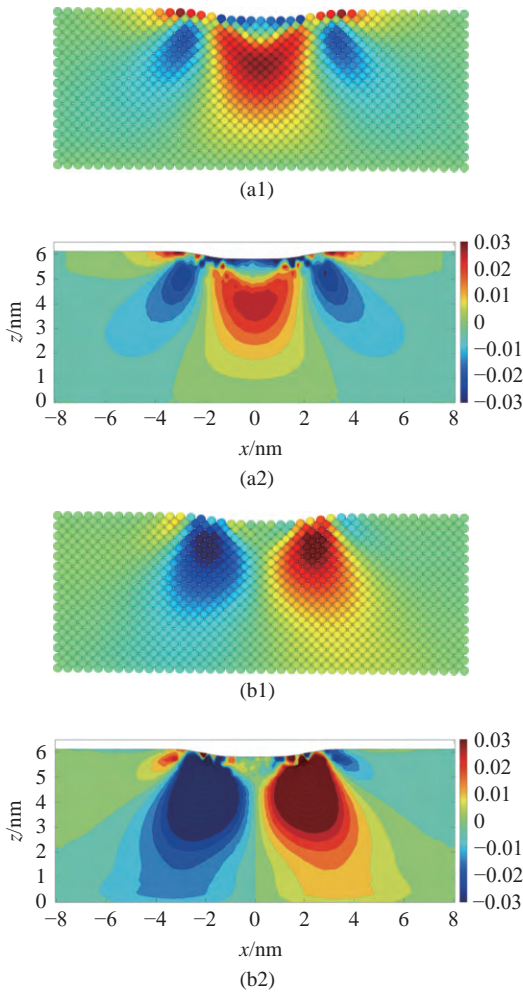


图 16 MD-FEA 方法计算的应变分量 (a1)-(a2) ϵ_{xx} 与 (b1)-(b2) γ_{xz} 和对应原子应变的对比

Fig. 16 Comparison of (a1)-(a2) ϵ_{xx} and (b1)-(b2) γ_{xz} computed by the atom strain and MD-FEA method

应变 γ_{xz} 的大小和影响范围都明显大于原子应变的结果.

图 17 展示了用 MD-FEA 方法计算的基体中截面在压痕过程中, 位错出现前的各个阶段 (图 15(a)-图 15(e)) 的应变场, 并与原子应变进行了对比. 计算原子应变的截断半径取为 $r_c=0.45$ nm.

由 MD-FEA 方法计算得到的基体内部的应变场 ϵ_{zz} 和原子应变的结果基本相同. 基体的应变主要集中在压头下方, 并随着压入深度的增加不断扩大. 压坑周围出现一圈拉伸应变区域, 并随着压入深度的增加不断往外扩张, 这与其他研究的结论类似^[36]. 在压入深度为 0.1 nm 位错出现之前, 压缩应变主要分布在压痕表面下方约 3.5 nm 的区域内, 压缩应变的最大值并不在压痕与基体的接触表面, 而是出现在压痕表面下方约 1 nm 的区域中. 在出现位错时,

位错位置计算得到的应变值显著增大, 因此能明确判别出位错产生的位置.

由两种方法计算得到的基体中心的应变分量 ϵ_{zz} 和 ϵ_{xx} 的在压痕过程中的对比如图 18 所示. 在应

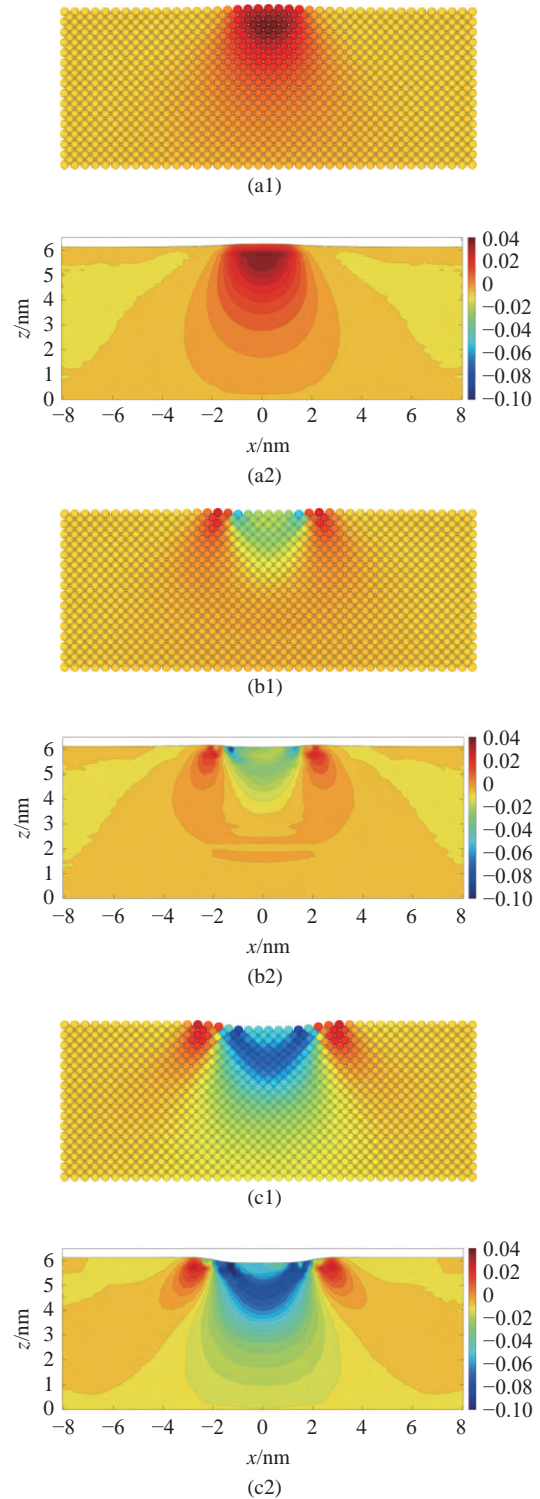


图 17 压痕过程中 (a1)-(e1) 原子应变与 (a2)-(e2) MD-FEA 应变分量 ϵ_{zz} 的对比

Fig. 17 (a1)-(e1) Atom strain and (a2)-(e2) the strain field computed by MD-FEA method of ϵ_{zz} during the indentation

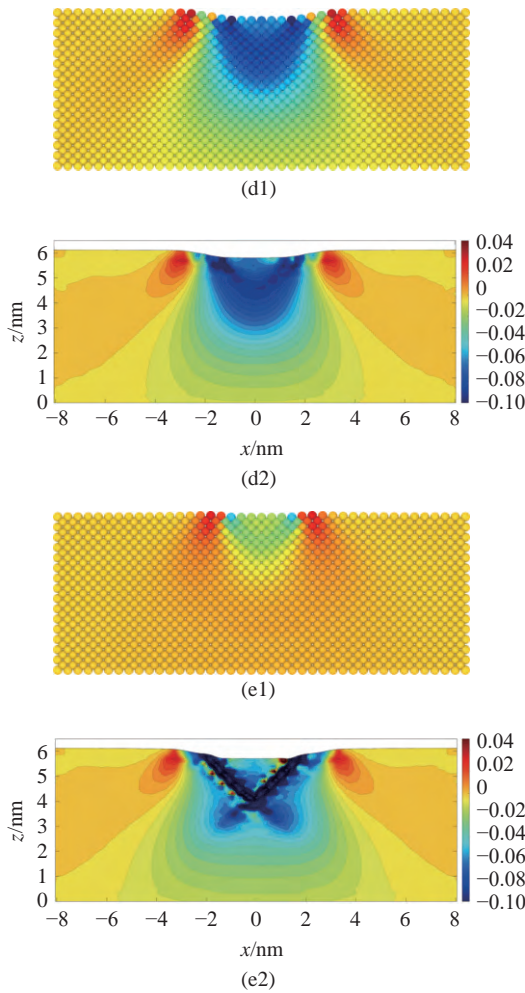


图 17 压痕过程中 (a1)-(e1) 原子应变与 (a2)-(e2) MD-FEA 应变分量 ϵ_{zz} 的对比 (续)

Fig. 17 (a1)-(e1) Atom strain and (a2)-(e2) the strain field computed by MD-FEA method of ϵ_{zz} during the indentation (continued)

变较小时, MD-FEA 方法计算得到应变值和原子应变完全一致, 在应变较大时, MD-FEA 方法计算的压应变 ϵ_{zz} 较原子应变稍大. 应变分量 ϵ_{zz} 和 ϵ_{xx} 的最大值都出现在压头下方的基体内部而不是压痕表面, 且这两者出现的位置并不一致. ϵ_{zz} 的最大值出现在

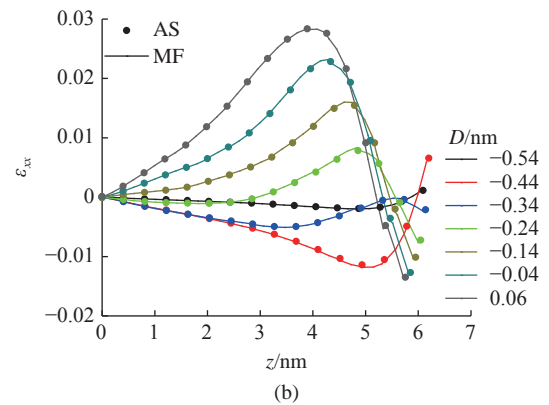
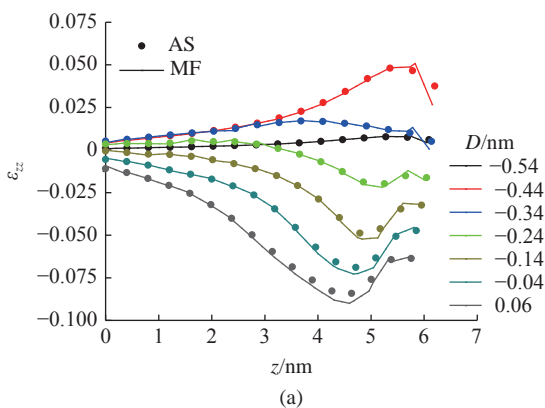


图 18 由 MD-FEA 应变和原子应变在基体中心处的应变分量 ϵ_{zz} 和 ϵ_{xx} 的对比

Fig. 18 Comparison of ϵ_{zz} and ϵ_{xx} at the center of the substrate between MD-FEA method (MF) and atom strain (AS) during the indentation

压痕表面约 1 nm 的位置, 而 ϵ_{xx} 的最大值出现在压痕表面约 1.5 nm

截断半径在计算压痕过程中基体原子应变的影响较小. 在截断半径 $r_c=0.4$ nm 和 $r_c=0.8$ nm 下计算的基体中截面的应变分布如图 19 所示, 应变分量 ϵ_{zz} 和 ϵ_{xx} 在不同截断半径下的结果在基体内部基本一致, 仅在压痕表面的原子处有所差异. $r_c=0.8$ nm 下计算的应变分量 ϵ_{zz} 在压痕表面的值较 $r_c=0.4$ nm 时稍大, 而分量 ϵ_{xx} 在压痕表面的值则较 $r_c=0.4$ nm 时稍小. 这种差异在分析压痕过程中基体的整体变形时可忽略不计, 但在关注压痕表面的变化时必须加

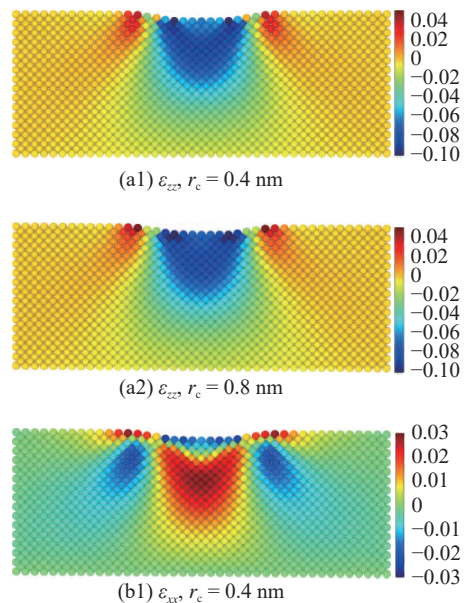
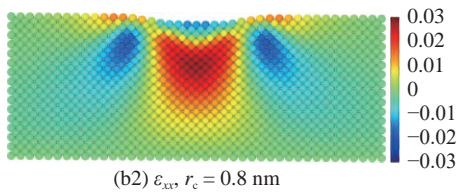


图 19 截断半径 $r_c=0.4$ nm 和 $r_c=0.8$ nm 下中截面上的原子应变分量 (a1)-(a2) ϵ_{zz} 与 (b1)-(b2) ϵ_{xx} 分布图

Fig. 19 Atom strain of (a1)-(a2) ϵ_{zz} and (b1)-(b2) ϵ_{xx} with the cutoff radius $r_c=0.4$ nm and $r_c=0.8$ nm



(b2) ϵ_{xx} , $r_c = 0.8 \text{ nm}$

图 19 截断半径 $r_c=0.4 \text{ nm}$ 和 $r_c=0.8 \text{ nm}$ 下中截面上的原子应变分量 (a1)-(a2) ϵ_{zz} 与 (b1)-(b2) ϵ_{xx} 分布图 (续)

Fig. 19 Atom strain of (a1)-(a2) ϵ_{zz} and (b1)-(b2) ϵ_{xx} with the cutoff radius $r_c=0.4 \text{ nm}$ and $r_c=0.8 \text{ nm}$ (continued)

以考虑.

图 20 展示了由两种方法计算的基体中心不同深度的应力分量 σ_{zz} 和 σ_{xx} 在压痕各阶段的对比. 在位力应力的计算中, 基体的杨氏模量设为 72.2 GPa , 泊松比为 0.35 . σ_{zz} 在基体不同深度均有体现, σ_{xx} 则主要影响了距离压痕表面 2 nm 以内的区域. 除了基体表面位力应力计算不准确的部分, 两种方法计算的基体内部的应力在变形较小时基本一致, 在变形接近产生位错的临界状态时, 计算的位力应力值略大于 MD-FEA 方法计算的结果.

图 21 展示了由 MD-FEA 方法计算的图 15(b)

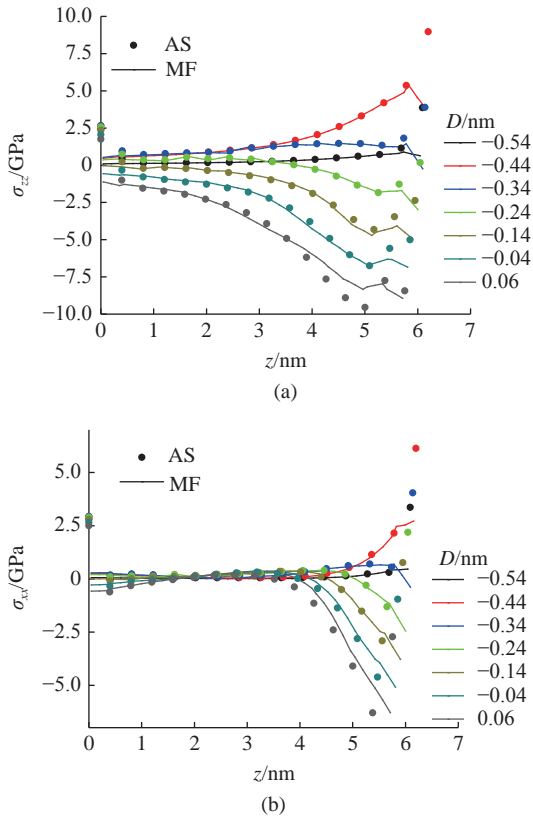


图 20 压痕过程中由 MD-FEA 方法 (MF) 计算的应力分量与位力应力 (AS) 分量 σ_{zz} 和 σ_{xx} 的对比

Fig. 20 Comparison of σ_{zz} and σ_{xx} between MD-FEA method (MF) and atom virial stress (AS) during indentation

中从 a~e 状态下的正应力 σ_{zz} 在中截面处的分布, 并与对应位置处原子的位力应力进行了对比. 由于原子构型的差异, 基体表/界面处原子的位力应力结果

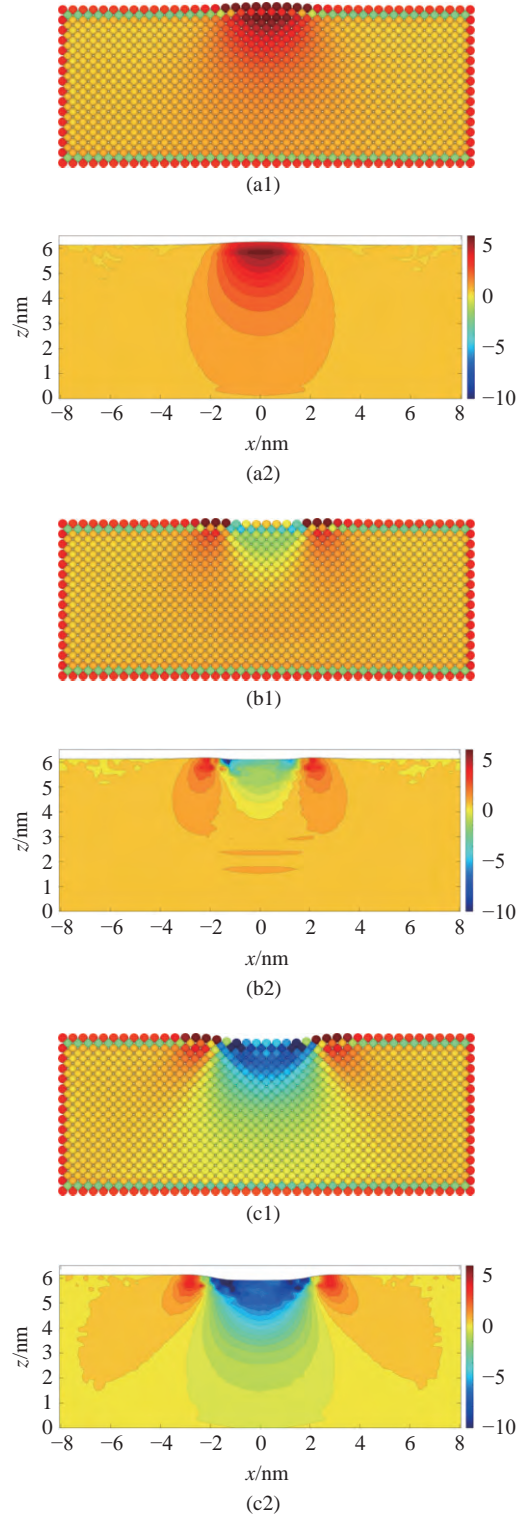


图 21 压痕过程中基体截面处 (a1)-(e1) 原子位力应力与 (a2)-(e2) MD-FEA 应力场的对比

Fig. 21 (a1)-(e1) Virial stress and (a2)-(e2) the stress field computed by MD-FEA method on the middle section of the substrate during indentation

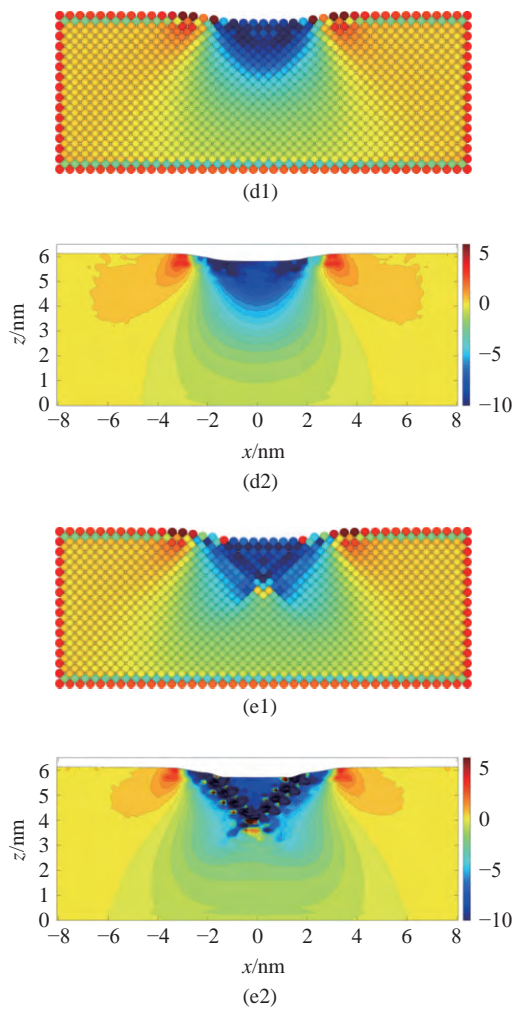


图 21 压痕过程中基体截面处 (a1)-(e1) 原子位力应力与 (a2)-(e2) MD-FEA 应力场的对比 (续)

Fig. 21 (a1)-(e1) Virial stress and (a2)-(e2) the stress field computed by MD-FEA method on the middle section of the substrate during indentation (continued)

与体内原子有明显差异, 因此明显影响了压痕表面的应力结果. 忽略起始阶段由于压头与基体相互吸引产生的拉应力, 基体最大压应力出现在压痕表面下方, 且比同一状态下最大压应变 ϵ_{zz} 出现的位置更接近压痕表面. 在产生位错的临界状态下, 压应力 σ_{zz} 的最大值达到 10 GPa.

3 结论及讨论

本文提出了一种通过结合分子动力学 (MD) 和有限元分析 (FEA) 来计算原子模型中的应力和应变的新方法 (MD-FEA). 这种方法通过离散的原子坐标和位移数据, 计算连续介质力学框架下的计算连续的应力和应变场. 本文通过建立 Al/Ni 双材料纳米杆拉伸模型和金刚石压头/铝基体的纳米压痕模型,

将 MD-FEA 方法计算得到的应力/应变场和在传统的原子模型中广泛使用的位力应力, 以及通过离散的变形梯度计算得到的原子应变进行对比. 结果显示, 在模型体内, MD-FEA 方法计算的应变分量和原子应变相一致, 但在原子位移急剧变化的模型表/界面上有明显的差异. 这主要是由于原子应变在计算过程中平均了邻近原子的应变, 且包含了截断半径内不同类型, 材料参数有差异的原子. 除了模型表/界面处由于原子构型的差异, 位力应力计算不准确外, MD-FEA 方法计算的应力与位力应力在模型体内变形较小时完全一致. 由于 MD-FEA 方法通过杨氏模量和泊松比将原子模型中的应力和应变相联系, 在大变形下, 由于材料参数可能发生变化, 计算的应力不精确. 因此通过这种方法计算应力时应限定在小变形下.

结果显示: 在应变较为均匀的区域, MD-FEA 方法计算的应变场与基于 MD 变形梯度计算的原子应变相一致, 而在界面附近应变变化剧烈的区域, MD-FEA 方法能够提供精确的应变场, 而原子应变只能得到较大范围内的平均值. 用 MD-FEA 方法计算的应力场与位力应力在模型体内相一致, 但在模型界面与表面区域, 由于邻近原子的构型发生变化, 位力应力的计算有很大的误差, 而 MD-FEA 方法仍能得到准确的应力场. MD-FEA 方法避免了用应变梯度算法计算原子应变时截断半径的选取, 以及计算位力应力时原子体积的确定, 也不需要引入加权函数, 消除了人为因素对应力应变结果的影响. 同时, MD-FEA 方法得到的是原子模型中连续的应力应变场, 将离散的原子模型和传统连续介质力学理论框架之间建立了联系.

需要指出的是: 按本文提出的计算模型, 原子的位置完全是按照 MD 计算给出的, 所以本文方法与 MD 计算结果对于原子的位移来说完全相同, 而应变和应力则不同; 本文将一个晶格处理为一个有限元单元, 事实上这里的有限元单元可以扩大至一个单元代表多个晶格的情况, 只要初始划分的单元的节点能够与原子的初始位置对应即可, 但此时由两种模型给出的应力和应变结果的差异将会更大一些, 这个将在后续研究中作进一步研究和讨论.

参 考 文 献

- 1 Reddy SR, Yoshida S, Bhattacharjee T, et al. Nanostructuring with structural-compositional dual heterogeneities enhances strength-

- ductility synergy in eutectic high entropy alloy. *Scientific Reports*, 2019, 9(1): 1-9
- 2 Ma E, Wu XL. Tailoring heterogeneities in high-entropy alloys to promote strength-ductility synergy. *Nature Communications*, 2019, 10(1): 1-10
- 3 Barkia B, Aubry P, Haghi-Ashtiani P, et al. On the origin of the high tensile strength and ductility of additively manufactured 316L stainless steel: Multiscale investigation. *Journal of Materials Science & Technology*, 2020, 41: 209-218
- 4 Wu XL, Zhu YT, Lu K. Ductility and strain hardening in gradient and lamellar structured materials. *Scripta Materialia*, 2020, 186: 321-325
- 5 Wood MA, Cusentino MA, Wirth BD, et al. Data-driven material models for atomistic simulation. *Physical Review B*, 2019, 99(18): 184305
- 6 Sahraei AA, Mekarizadeh AH, Foroutan M, et al. Atomistic simulation of interfacial properties and damage mechanism in graphene nanoplatelet/epoxy composites. *Computational Materials Science*, 2020, 184: 109888
- 7 Song SC, Wang Y, Wang Y, et al. Atomistic simulation on the twin boundary migration in Mg under shear deformation. *Materials*, 2019, 12(19): 3129
- 8 Zhu JQ, Liu X, Yang QS. Atomistic simulation of the nanoindentation behavior of graphene/Al multilayered nanocomposites. *Materials Science and Engineering*, 2019, 531(1): 012055
- 9 Du JF, Meng J, Li XY, et al. Multiscale atomistic simulation of metal nanoparticles under working conditions. *Nanoscale Advances*, 2019, 1(7): 2478-2484
- 10 Knap J, Ortiz M. An analysis of the quasicontinuum method. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2001, 49(9): 1899-1923
- 11 Chen JR, Ming PB. Ghost force influence of a quasicontinuum method in two dimension. *Journal of Computational Mathematics*, 2012, 30: 657-683
- 12 Wu B, Liang LH, Ma HS, et al. A trans-scale model for size effects and intergranular fracture in nanocrystalline and ultra-fine polycrystalline metals. *Computational Materials Science*, 2012, 57: 2-7
- 13 Song JR, Wei YG. A method to determine material length scale parameters in elastic strain gradient theory. *Journal of Applied Mechanics*, 2020, 87(3): 031010
- 14 Irving JH, Kirkwood JG. The statistical mechanical theory of transport processes. IV The equations of hydrodynamics. *The Journal of Chemical Physics*, 1950, 18(6): 817-829
- 15 Hardy RJ. Formulas for determining local properties in molecular-dynamics simulations: Shock waves. *The Journal of Chemical Physics*, 1982, 76(1): 622-628
- 16 Hardy RJ, Root S, Swanson DR. Continuum properties from molecular simulations. *American Institute of Physics*, 2002, 620(1): 363-366
- 17 Zimmerman JA, Webb III EB, Hoyt JJ, et al. Calculation of stress in atomistic simulation. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2004, 12(4): S319-S332
- 18 Tsai DH. The virial theorem and stress calculation in molecular dynamics. *The Journal of Chemical Physics*, 1979, 70(3): 1375-1382
- 19 Lutsko JF. Stress and elastic constants in anisotropic solids: molecular dynamics techniques. *Journal of Applied Physics*, 1988, 64(3): 1152-1154
- 20 Zhou M. A new look at the atomic level virial stress: on continuum-molecular system equivalence. *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 2003, 459(2037): 2347-2392
- 21 Liu B, Qiu XM. How to compute the atomic stress objectively? *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 2009, 6(5): 1081-1089
- 22 Falk ML, Langer JS. Dynamics of viscoplastic deformation in amorphous solids. *Physical Review E*, 1998, 57(6): 7192-7205
- 23 Shimizu F, Ogata S, Li J. Theory of shear banding in metallic glasses and molecular dynamics calculations. *Materials Transactions*, 2007, 48(11): 2923-2927
- 24 Gullett PM, Horstemeyer MF, Baskes MI, et al. A deformation gradient tensor and strain tensors for atomistic simulations. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2007, 16(1): 015001
- 25 Mott PH, Argon AS, Suter UW. The atomic strain tensor. *Journal of Computational Physics*, 1992, 101(1): 140-150
- 26 Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1-19
- 27 Purja Pun GP, Mishin Y. Development of an interatomic potential for the Ni-Al system. *Philosophical Magazine*, 2009, 89(34-36): 3245-3267
- 28 Ma E, Thompson CV, Clevenger LA. Nucleation and growth during reactions in multilayer Al/Ni films: The early stage of Al₃Ni formation. *Journal of Applied Physics*, 1991, 69(4): 2211-2218
- 29 Lopez GA, Sommadossi S, Gust W, et al. Phase characterization of diffusion soldered Ni/Al/Ni interconnections. *Interface Science*, 2002, 10(1): 13-19
- 30 Rogachev AS, Vadchenko SG, Baras F, et al. Structure evolution and reaction mechanism in the Ni/Al reactive multilayer nanofolios. *Acta Materialia*, 2014, 66: 86-96
- 31 Gurtin ME, Murdoch AI. A continuum theory of elastic material surfaces. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, 1975, 57(4): 291-323
- 32 Wang Y, Liu ZK, Chen LQ. Thermodynamic properties of Al, Ni, NiAl, and Ni₃Al from first-principles calculations. *Acta Materialia*, 2004, 52(9): 2665-2671
- 33 王帅, 姚寅, 杨亚政等. 双层金属界面能密度的尺寸效应. *力学学报*, 2017, 49(5): 978-984 (Wang Shuai, Yao Yin, Yang Yazheng, et al. Size effect of the interface energy density in bi-nano-scaled-metallic plates. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2017, 49(5): 978-984 (in Chinese))
- 34 Tersoff J. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems. *Physical Review B*, 1989, 39(8): 5566-5568
- 35 Xu S, Wan Q, Sha ZD, et al. Molecular dynamics simulations of nano-indentation and wear of the γ Ti-Al alloy. *Computational Materials Science*, 2015, 110: 247-253
- 36 李启楷, 张跃, 褚武扬. 纳米压痕变形过程的分子动力学模拟. *金属学报*, 2004, 40(12): 1238-1242 (Li Qikai, Zhang Yue, Chu Wuyang. Molecular dynamics simulation of plastic deformation during nanoindentation. *Acta Metallurgica Sinica*, 2004, 40(12): 1238-1242 (in Chinese))