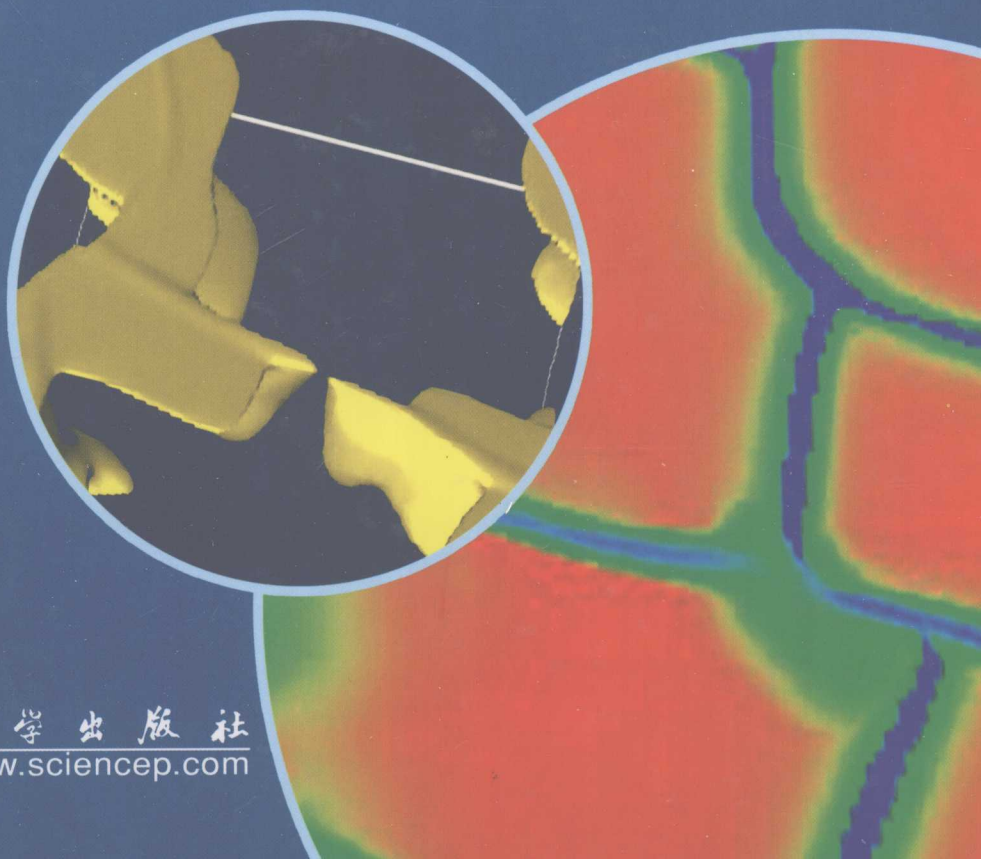


材料变形与破坏 的多尺度分析

Multiscale Analysis for
Deformation and Failure of Materials

范镜泓 著



科学出版社
www.sciencep.com

TB303
FJH

材料变形与破坏的 多尺度分析

Multiscale Analysis for Deformation and Failure of Materials

范镜泓 著



科学出版社

北京

内 容 简 介

围绕将多尺度分析分为两大类以形成大范围分析框架的思路,本书阐述了分子动力学要义及其与量子力学的能量联结,评介了跨原子/连续介质的多尺度分析方法,阐述了提出的嵌套与耦合串行式跨微/细/宏观分析的原理与方法,并以复相弹塑性与损伤复合材料为例,介绍了相关的概念、步骤、结果及其与实验的比较。

本书适合从事固体及计算力学、材料、生物、机械与航空等工程研究与应用的科技工作者阅读使用,也可作为高等院校相关专业研究生和高年级本科生的教材与参考书。

图书在版编目(CIP)数据

材料变形与破坏的多尺度分析=Multiscale Analysis for Deformation and Failure of Materials/范镜泓著. —北京:科学出版社,2008

ISBN 978-7-03-021685-4

I. 材… II. 范… III. ①材料-变形-研究②材料-破坏分析 IV. TB303

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第 054406 号

责任编辑:吴凡洁 / 责任校对:张 琪

责任印制:刘士平/封面设计:耕者设计工作室

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

双 青 印 刷 厂 印 刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2008 年 5 月第 一 版 开本: B5(720×1000)

2008 年 5 月第一次印刷 印张: 23 1/4 插页: 2

印数: 1—3 000 字数: 446 040

定价: 75.00 元

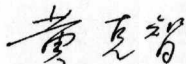
(如有印装质量问题,我社负责调换(双青))

序

纳米科学与技术旨在研究与创造在原子、分子及超分子水平下约 $1\sim 100\text{ nm}$ 的尺度范围工作的材料、装置及系统,它们由于微小结构而具有本质上新性质与功能。为了保持计算机技术的持续高速发展,必须发展纳米技术。有的科学家预言纳米技术的出现可能导致下一次的工业革命。自然界与工程中许多宏观的现象都起源于微观和细观的机制,这正是本书中所强调的基本概念“材料的特性取决于材料的原子结构与微观结构”。也正是基于这一理念,在国际学术界近年兴起多学科交叉与多尺度分析领域。

本书作者范镜泓教授为材料的变形与破坏的多学科、多尺度分析这一新领域的先驱者之一。他是重庆大学固体力学学科的学术带头人。在担任重庆大学固体力学研究所所长、材料本构研究室主任、工程材料力学研究中心主任期间培养了许多优秀人才,推进了材料本构理论的研究。在他近年在海外进行教学科研的同时,仍作为重庆大学教授继续为我国材料与固体力学学科的发展竭尽心力。

本书系统地叙述了国内外近十余年材料变形与破坏的多尺度分析的成果,还包括作者本人及他与重庆大学的同事与学生的合作研究成果。范镜泓教授 2004 年在重庆大学主持召开了首届国际非均质材料力学会议,这次会议非常成功,获得国内外学者的高度评价。今年(2008 年)即将在安徽黄山主持召开第二届会议。这些学术活动与本书的出版都体现了范镜泓教授为促进我国材料与固体力学学科的发展所做的不辞劳苦的努力。我相信本书的出版必将十分有助于实现这一目的。



清华大学工程力学系

2008 年 4 月

Preface

It is by now widely recognized that both natural and synthetic materials are inherently of hierarchical, multiscale character. Properties should not be considered as monolithic quantities that manifest only at macroscopic levels, as historically taught. Rather, important properties and material responses can arise at a myriad of length scales ranging from atomic to microscopic to mesoscopic to macroscopic. Problems of interfaces and nanostructures may effectively require discrete atomistic, fine resolution treatments. Behavior of MEMS devices such as medical implants or chemical sensors have chemical, biological and mechanical property requirements at mesoscopic levels, and are therefore of multi-functional character. Analysis of failure of large structures may proceed from top-down, with observations of failure modes motivating appropriate lower scale models that incorporate material heterogeneity. These notions of multiscale and multi-functional materials are rapidly comprising the foundations of new interdisciplinary fields of study at the intersection of engineering and the sciences. One might call this developing field multi-scale, multi-physics modeling. It cuts across various fields of endeavor, including applications of structural, electronic, magnetic and bioengineered materials, to name a few. In fact, it is likely that solutions to many of the most complex problems facing humankind today—energy, environment, sufficient food and clear water, will require full recognition of the hierarchical and multi-functional nature of materials to properly exploit new, novel compositions or

现在普遍认为天然存在的和人工合成的材料都具有嵌套式多尺度的内在特征。材料特性与响应并非如历史上长期认为的仅仅是宏观上不可分割的量,而是体现在从原子到微观再到细观直至宏观的不同尺度范围中。例如界面与纳米结构的问题需要在离散的原子尺度上有效而精确地处理;对用做医学植入和化学传感器这样的 MEMS 器件,则要求其在细观层次上化学、生物和机械性质有机结合的多功能特性。而对大结构的损伤分析则要自上而下地进行,考察中涉及材料非均匀性的底层模型中得出的损伤模式。这些在多尺度与多功能材料发展中提出的概念正在快速形成工程与科学中一个崭新的多学科交叉领域——多尺度与多物理的分析。它结合了多个领域(如结构、电磁和生物工程材料等)中的研究成果。事实上,对于人类所面临的最为严峻的问题——能源、资源、环境、健康等都需要对材料这种嵌套式的多功能本质有充分的认识,以开发新型的合成或复合材料。

这个领域的研究必然以凝聚

combinations of materials.

Study of this field necessarily draws from foundations in quantum mechanics, the basic building block theory of condensed matter. Engineers and scientists are increasingly drawn together towards this unifying theme. Upon this foundation rests the domain of discrete atomistic simulations based on empirical potentials, permitting access to millions and even billions of atoms, while quantum mechanics is limited at present to several hundred atoms. Even so, molecular dynamics models are inadequate to bridge the range of scales necessary to address realistic mesoscopic scales of arrangements of point and line defects in crystalline solids, or of distributed damage in materials. Moreover, the long time scales of many applications are well beyond its reach. Hence, the classical field of continuum mechanics is brought in to communion with atomistic methods to bridge these gaps. Numerous atomistic-continuum bridging methods are emerging, with various limitations and conditions on accuracy and range of viable applications. Students and practitioners interested in these approaches must develop appropriate background both from the bottom-up and from the top-down perspectives, meaning that quantum theory and classical continuum modeling are both essential elements. This amalgam of fields demands a departure from classical solid mechanics curricula in engineering colleges, as well as condensed matter physics in the fields of physics and chemistry. To this must be added a broad range of methods for informing successively higher length and time scale models to capture cooperative responses, typically with different degrees of freedom, using various hierarchical and self-consistent approaches.

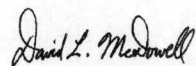
I have outlined above the essence of

态理论的基石——量子力学为基础。工程师和科学家在这个主题下的相互合作将越来越多。在此之上则是基于经验势函数的对离散分子的模拟。分子模拟可以对包含数百万甚至几十亿个原子的系统进行计算,而目前量子力学的计算则仅限于几百个原子。但即便如此,分子动力学模型的尺度仍不足以模拟诸如晶体中细观点、线缺陷或者材料中的损伤分布等问题,并且不少需要大时间尺度的应用也超出了它的范围。而传统的连续介质力学恰恰可以与分子模拟方法相结合来满足这些要求。目前已经涌现了一些原子-连续介质相结合的方法,可以在不同的条件和情况下处理不同的问题,并达到相应的精度。对这些方法感兴趣的学生和工作者必须对自下而上以及自上而下的分析方法有充分的了解。这意味着量子理论和经典连续介质模型的知识都是不可或缺的。正是这种多领域的融合使得传统工科的固体力学以及物理化学系的凝聚态物理等课程都不再能满足要求,迫切需要增加一门在更大的空间、时间尺度模型上获得协同响应的课程。它应包括在不同自由度下的各种嵌套式的和自洽的方法。

以上就是我的同事范镜泓教授所著的《材料变形与破坏的多尺度分析》的主要内容。本书清

this book by my colleague Professor Jinghong Fan. With clear articulation of the notion of multiscale structure-property relations, and building upon the foundations of quantum theory and empirical approaches of molecular dynamics, Fan delves into the realm of coupling these methods with coarse-grained and continuum models to be relevant for engineering purposes to higher scale behaviors that make contact with design requirements of devices and products. With subsequent emphasis on multiscale modeling of mechanical properties, this book provides a digestible introduction to the complexities of this interdisciplinary field of multiscale modeling of deformation and failure analysis of materials, respecting the reader's need to critically think and absorb both information and perspective. I trust you will benefit from this monograph.

晰地阐述了多尺度结构-性能关系的概念。在介绍量子理论和分子动力学经验方法的基础上,范教授深入地探讨了如何把这些方法与粗晶粒和连续介质模型相结合,并应用到工程上所关心的大尺度问题中,以满足器件与产品的设计要求。该书进一步强调了机械性能的多尺度模型,深入浅出地介绍了多尺度材料变形和破坏分析这一交叉学科领域,并特别留意了读者主动吸收信息、深入理解思考以及展望前景所需的知识与方法。我相信该书一定会令读者获益匪浅。



David L. McDowell

Georgia Institute of Technology

Atlanta, GA, USA

January 2008

前 言

写作本书的原动力来自首届与第二届国际非均质材料力学会议上作者与英国牛津大学 Alan Cocks 教授先后共同组织的“多尺度方法”专题讨论会。从 1984 年在丹麦举行的第 16 届国际理论与应用力学大会把“非均质材料力学”列为其主题之一,到 2004 年在重庆市成功地组织首届国际非均质材料力学会议,其间整整经历了 20 年。这说明从采用均质性假设发展到采用非均质特性来进行材料的力学分析跨出了艰难与充满希望的一步。不少先驱者在非均质材料力学这一陡峭的研究之路上,克服概念上、方法上的种种困难,不断攀登,才使固体力学与材料科学更紧密地结合,迎来了研究向纵深发展的曙光。在我国,一些学者特别是青年学者在这方面的研究才刚刚开始,了解材料变形与破坏的多尺度分析这一国际研究前沿领域内的各种观点和新的进展,找到开展研究的生长点与衔接点,学习和了解先进的理论和方法是必要的。作者感到写出自己的研究成果和心得、介绍国际研究状况是自己的一种责任。这是促成作者写作本书的主要原因。

本书在强调材料科学的基本概念,即“材料的特性取决于材料的原子结构与微观结构”的基础上阐述了多尺度分析的研究目标、内容、概况、分类及相关的实例,强调了进行多尺度分析的必要性及这一基础性研究的科学意义与应用价值。

针对材料的原子结构与微观结构对材料性能影响的区别,本书将多尺度分析分成相关联的两大类,第一类是跨原子至连续介质微观尺度的多尺度分析,对这一类采用的是并行式多尺度分析方法,即在原子与微观连续介质尺度上同时进行分析的方法;第二类是跨连续介质微/细/宏观的多尺度分析,对这一类采用的是串行式多尺度分析方法。其中第二类多尺度分析是细观力学的进一步发展,涉及材料微观结构对材料性能的影响,对材料设计有重要意义。

围绕将多尺度分析分为两大类以形成大范围多尺度分析框架的基本思路,本书内容除第 1 章导论外分成两大部分。第一部分包括第 2~4 章,其内容属于第一类多尺度分析。第 2 章阐述分子动力学要义及其与量子力学的能量连接,它是第一类多尺度分析的基础。第 3 章对 7 种纳米、亚微米尺度范围内的跨原子/连续介质的多尺度分析方法进行了介绍与评价。第 4 章介绍了作者在广义质点动力学方面所做的工作。

第二部分包括第 5 章和第 6 章,系统地阐述了作者及其合作者提出的串行嵌套式与串行耦合式跨连续介质微/细/宏观多尺度分析的原理与方法,它们分别以复相材料弹塑性循环载荷下的多尺度分析与损伤层合复合材料的多尺度分析为

例,对所提出的方法和概念、分析步骤、数值结果及其与实验结果的比较进行了介绍。

多物理与多尺度方法及应用的研究在国际上是正在发展的前沿学科,本书涉及的知识面包括物理、化学、生物、材料科学与力学等多个学科,且本书是首部在材料变形与破坏的多尺度分析方面研究的专著,加上作者知识水平有限,不妥之处在所难免,敬请读者予以批评指正。

作者愿借此机会对重庆大学的领导和同事致以谢意。作者针对重庆市地处我国大西部的特殊情况,在担任重庆大学材料本构研究室主任、重庆大学力学研究所所长与重庆大学工程材料力学研究中心主任时所提出的“别具一格”的工作思路与方法,得到了他们的理解、鼓励与长年的支持,正是这种支持使本书得以完成。特别是本书交稿前夕,作者的同事彭向和、严波、陈斌与曾忠教授及北京大学的黄筑平与王建祥教授还专门对本书的部分内容进行了讨论,提出了宝贵的意见。重庆大学力学系青年教师皮文丽及作者的博士生还阅读了全书,校正了书稿中的一些错误。作者对已离开重庆大学工程力学系的张俊乾、曾祥国、杨运民教授,贺岩松副教授及钱正芳博士等表示谢意,他们与作者进行了共同的研究工作,促进了本书的写作。同时也对国家自然科学基金委员会通过项目“弹塑性多尺度分析(10372119)”对作者多尺度研究工作的支持表示谢意。

最后作者愿以本书献给亲爱的妻子王正英、女儿范英、儿子范强,深切地感谢他们在作者长年的学术生涯中所做出的大力支持与各种牺牲。

作 者

谨识于歌乐山下

2007年12月20日

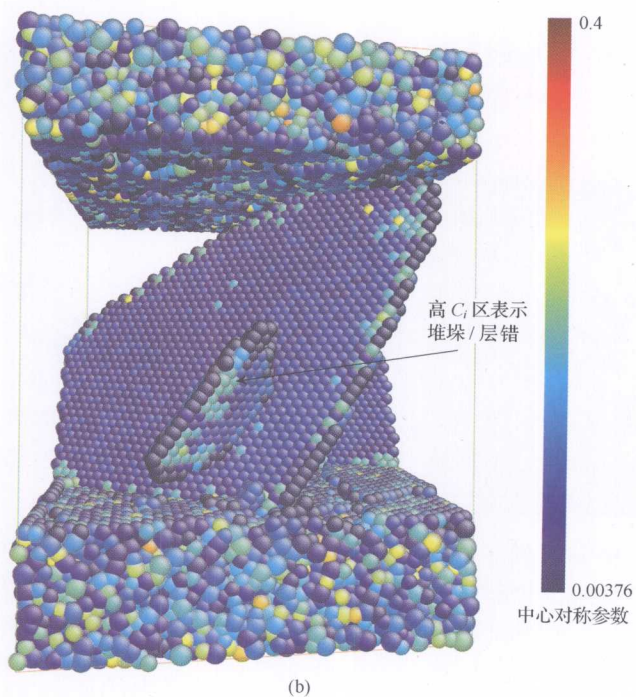
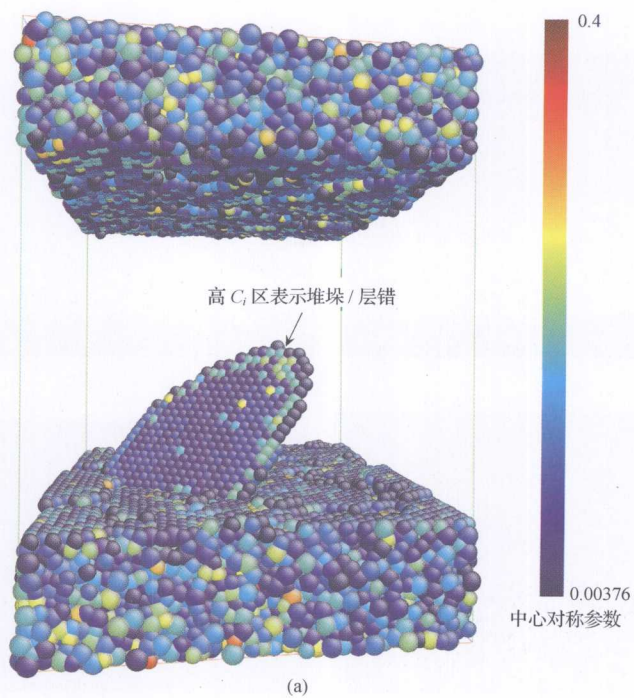


图 2-13 铜/锆非晶与晶体复合纳米片层分子动力学结果由 AtomEye 的中心对称参数 C_i 显示的堆垛/层错^[137,139] (本图由发展 AtomEye 的美国宾夕法尼亚大学李巨教授友情赠送)

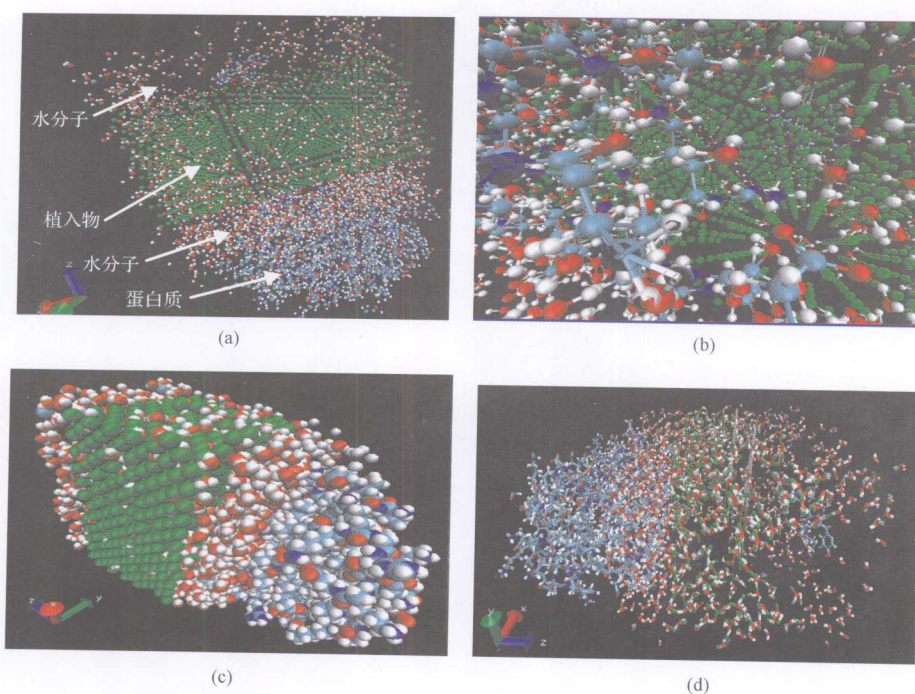


图 2-14 用 VMD 1.86 软件显示的蛋白质-水-植入物相互作用的四种不同的表示图形
其中(b)给出的是局部区域原子及其连接的表示

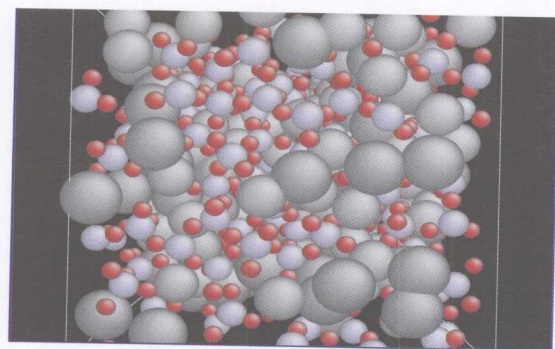


图 2-15 钾-钠-二氧化硅的构形显示
图中大的灰色球表示钠原子,较小的灰色球
表示钾原子,银灰色的小球表示硅原子,
而红色小球表示的是氧原子

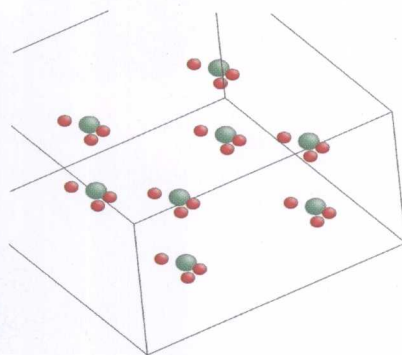


图 2-16 采用 AtomEye 不显示无关
原子的技术,求得了 PO_3 磷酸根的
空间分布
其中绿色表示磷,红色表示氧

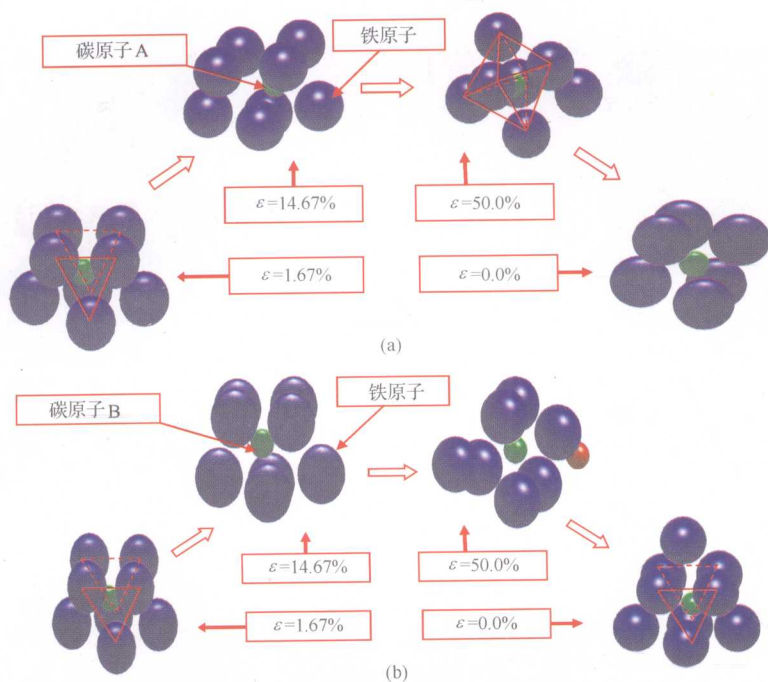


图 4-11 在一个完整的加卸载过程中围绕着 A、B 碳原子的渗碳体结构的演化
 (a) 碳原子 A 位于渗碳体与铁素体的界面上, 它周围的结构产生了相变;
 (b) 碳原子 B 位于渗碳体片层中心, 它周围的结构未产生相变

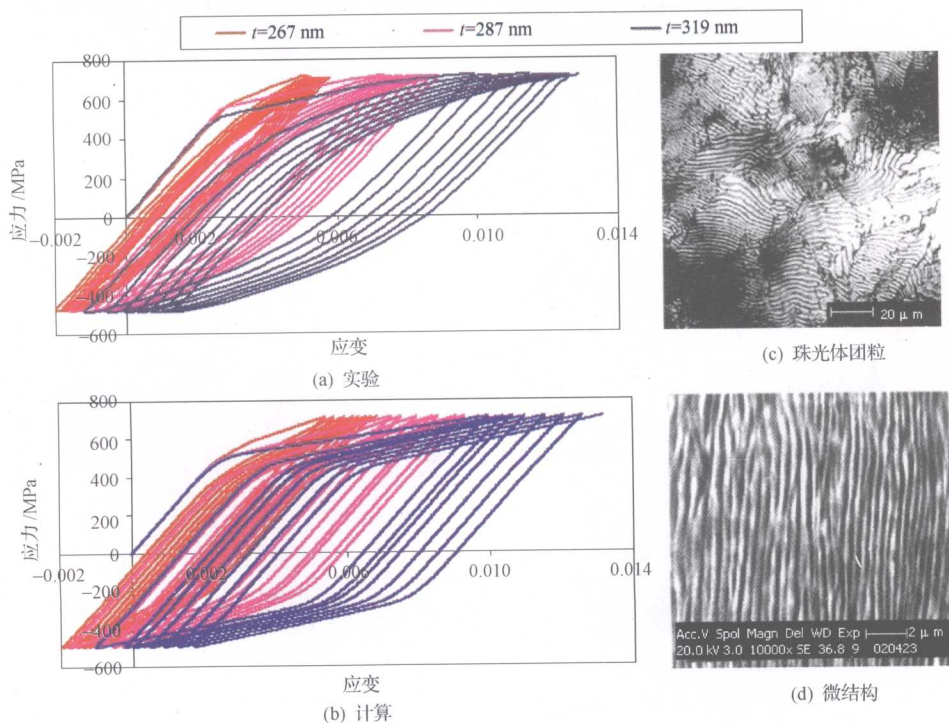


图 5-9 钢轨钢的循环实验数据与三尺度循环蠕变模拟计算结果的比较

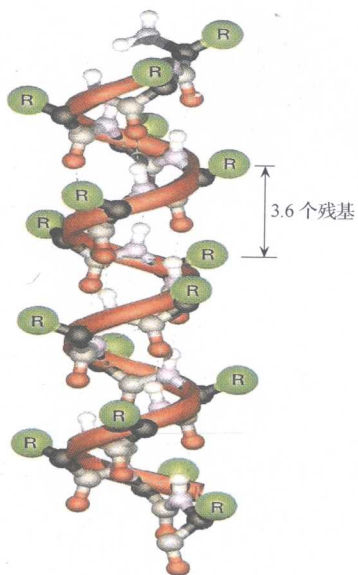
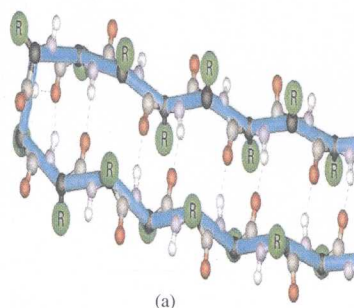
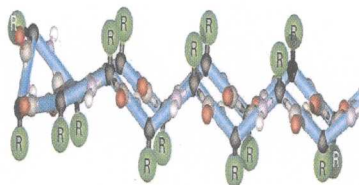


图 A-30 蛋白质 α -螺旋二级结构^[1]

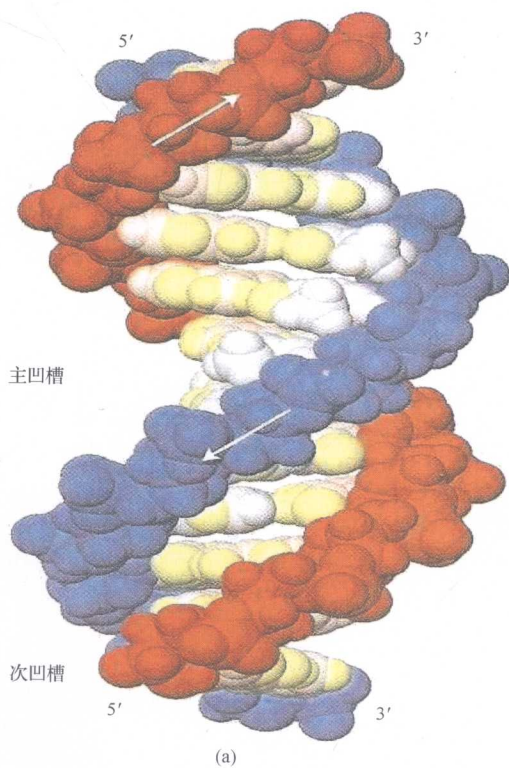


(a)

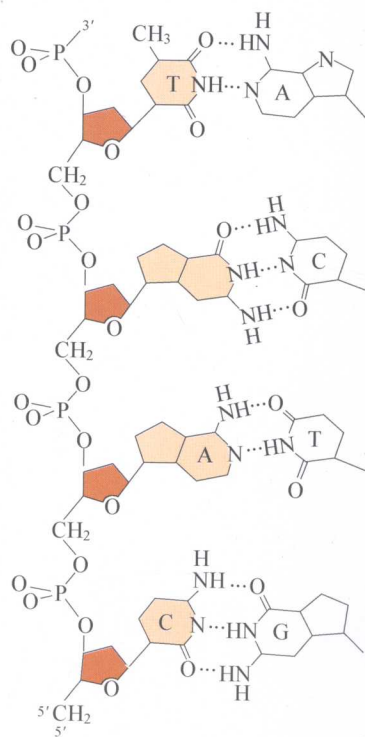


(b)

图 A-31 蛋白质 β -片二级结构^[1]



(a)



(b)

图 A-36 脱氧核糖核酸(DNA)的双螺旋结构

(a) DNA 的双螺旋结构;(b) 两股双螺旋间由碱基 A-T 对与 C-G 对通过氢键连接^[1]

目 录

序

Preface

前言

第 1 章 导论	1
1.1 材料的特性源自材料的原子结构与微观结构	1
1.2 多尺度分析的研究目标、内容及串行式与并行式的研究方法	3
1.3 材料设计中多尺度分析方法的选择	5
1.4 两类空间多尺度问题及时间多尺度	6
1.4.1 两类空间多尺度问题	6
1.4.2 两类问题的基本区别	7
1.4.3 时间多尺度问题	9
1.5 不同应用背景下多尺度问题的示例	10
1.5.1 珠光体钢轨钢力学行为的微、细、宏观多尺度分析	10
1.5.2 生物活跃材料与人体医疗植入物的多尺度分析	12
1.5.3 纳米陶瓷涂层抗腐蚀的多尺度分析	16
1.5.4 波形蛋白质纤维的嵌套结构与多物理、多尺度性能	18
1.5.5 材料脆韧转换分析中原子尺度与连续介质尺度的连接	25
1.6 国际上多尺度分析的发展概况	26
1.6.1 总的态势	27
1.6.2 跨原子/连续介质(第一类)多尺度分析	28
1.6.3 跨连续介质微/细/宏观(第二类)多尺度分析	28
1.6.4 时间多尺度分析	29
1.6.5 存在的问题及所作的努力	29
1.7 兼顾前瞻性的内容设置	31
思考与探索	32
参考文献	34
第 2 章 分子动力学要义及其与量子力学的能量连接	40
2.1 分子动力学的发展概况及其重要性	40
2.1.1 从发展趋势看研究分子动力学的意义	40
2.1.2 分子动力学的一些研究领域	41

2.1.3 分子动力学的时空尺度	42
2.2 分子动力学的运动方程、势能函数、力与应力	44
2.2.1 质点运动的拉格朗日方程	44
2.2.2 势能函数 U 及作用于原子上的力与应力	46
2.3 分子动力学的算法及其精度	54
2.3.1 数值积分过程	54
2.3.2 差分表达式	55
2.3.3 Verlet 数值算法、精度分析及简例	56
2.3.4 其他常用的算法	59
2.4 力的计算与边界条件的处理	61
2.4.1 分子动力学程序中的力的计算算法	61
2.4.2* 分子动力学程序中的力的并行算法	62
2.4.3 分子动力学中边界条件的处理方法	65
2.5 多体交互作用与嵌入原子法	68
2.5.1* 考虑多体作用的 Tersoff 与 Brenner 对势	68
2.5.2 嵌入原子法	70
2.6 陶瓷材料分子动力学模拟	79
2.6.1 引言	79
2.6.2 Born 固体模型与考虑极化的壳体模型	80
2.7 如何确定经验势中的参数	81
2.7.1 LJ 对势函数参数 ϵ 与 σ 的估算	82
2.7.2 LB 混合律对指数势及 Morse 势三参数的估算	84
2.7.3 陶瓷氧化物势函数及其参数的确定	90
2.7.4 用于研究磷酸盐生化活跃材料的势函数	93
2.7.5 分数式离子键固体势函数	95
2.8 如何确定分子动力学模型的原子结构坐标及进行图形显示	99
2.8.1 分子动力学模型原子结构坐标的确定	99
2.8.2 分子动力学的图形显示	102
2.9 如何采用软件进行分子动力学的计算	105
2.9.1 DL_Poly 软件简介	105
2.9.2 DL_Poly_2.18 的文件库及输入文件的内容	105
2.9.3 DL_Poly_2.18 的输出文件	109
2.10 量子力学与分子动力学的能量连接	111
2.10.1 原子内的能量平衡及量子力学的基本概念	111
2.10.2 分子动力学与量子力学的耦合	112

2.10.3	薛定谔方程求解孤立原子的能量	113
2.10.4	耦合系统的能量	118
2.10.5	求解量子力学基本方程实现耦合的三种基本方法	119
2.10.6*	紧束缚方法	121
2.10.7*	Hartree-Fock 理论及其相关的方法	122
2.10.8*	电子密度泛函理论	124
2.11	实例:纳米涂层及植入物与液体界面分析中的分子动力学计算 ..	125
2.11.1	基本方法	126
2.11.2	对势函数的确定	127
2.11.3	氮化铁与基体铁界面剪切抗力的计算	127
2.11.4	植入物与水-蛋白质系统界面的分子动力学计算	129
参考文献		132
第3章 跨原子/连续介质多尺度分析		140
3.1	引言	140
3.2	跨第一原理/原子/宏观多尺度变形与破坏分析	141
3.2.1	模型区域的分割及其耦合	141
3.2.2	系统的总哈密顿量及其分解	143
3.2.3	握手区的一般设计及 MAAD 的特点	144
3.2.4	MAAD 存在的问题	146
3.3	一维模型	148
3.3.1	FE/MD 耦合运动方程的推导	150
3.3.2	分子动力学与有限元耦合的数值例子	152
3.4	Cauchy-Born 法则及跨原子-连续介质尺度的解析方法	154
3.4.1	Cauchy-Born 法则	154
3.4.2*	关于 Cauchy-Born 法则精度的讨论	158
3.4.3	基于 Cauchy-Born 法则的跨原子/连续介质尺度的解析方法	159
3.4.4	解析方法的应用	162
3.5*	变形与破坏的拟连续介质多尺度分析	164
3.5.1	QC 方法的基本模型及能量计算	164
3.5.2	QC 方法边界的不协调性及鬼力	166
3.5.3	QC 方法的特殊贡献	167
3.5.4	全部非局部化的 QC 方法	167
3.6	QC 与离散位错动力学耦合的多尺度分析	169
3.6.1	基本模型	169
3.6.2	解法:三种边值问题的叠加	169

3.6.3*	过渡区的处理及位错穿越过渡区	172
3.7	用于动力学模拟的搭接区多尺度分析	175
3.8*	用于动力学模拟的桥接区多尺度分析	177
3.8.1	位移场在两个不同尺度的分解	177
3.8.2	运动的多尺度方程及其讨论	178
3.8.3	桥接法多尺度框架及广义朗之万方程	180
3.8.4	数值例题	187
3.8.5	对桥接法的简短评论	189
3.9	几种模型界面不协调性的比较	189
	参考文献	194
第4章	广义质点动力学多尺度模拟方法	198
4.1	引言	198
4.2	广义质点动力学方法的多尺度几何模型	199
4.2.1	多尺度区的形成	199
4.2.2	广义质点的级别与其表征的原子数的定量关系	201
4.2.3	模型实例	203
4.3	逆映射法求解广义质点系动力学方程	204
4.3.1	对等价刚度规则的质疑	204
4.3.2	映射与逆映射	205
4.4	多尺度区的自然边界条件	212
4.4.1	原子区与连续介质区边界的内禀不协调性	212
4.4.2	广义质点动力学各尺度区间的自然边界	212
4.5	广义质点动力学方法的验证	214
4.6	广义质点动力学方法的初步应用	217
4.6.1	相变	218
4.6.2	相变的机制	219
	参考文献	222
第5章	串行嵌套式多尺度方法及复相材料循环弹塑性多尺度分析	224
5.1	引言	224
5.2	跨微/细/宏观三尺度分析的基本框架及尺度间的信息传递	225
5.3	基于改进的自洽模型的细-宏观定量关系	227
5.3.1	改进的自洽模型	227
5.3.2	基于改进的自治方法的宏/细观定量关系	228
5.4	非均质材料组成相的弹塑性本构关系	229
5.4.1	带耗散的弹簧——滑块模型对弹塑性材料本构关系的描述	231