

固体微观塑性跨时间尺度原子模拟

王云江^{*}

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

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, 大大扩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事件的时间尺度通常为“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。本报告将以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: (1) 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体扩散的模式转变 [1]; (2) 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非仿射变形引导的单位错形核的机制转变 [2]。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: 固体塑性; 位错形核; 扩散; 加速分子动力学

参考文献:

1. Y. J. Wang*, J. P. Du, S. Shinzato, L. H. Dai* and S. Ogata*, A free energy landscape perspective on the nature of collective diffusion in amorphous solids, *Acta Mater.* **157**, 165 (2018).
2. J. P. Du, Y. J. Wang*, Y. C. Lo, L. Wan and 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).

*基金项目: 国家自然科学基金项目 (11672299)

通讯作者: 王云江, 1981.7, 副研究员, 材料力学行为多尺度模拟、物理力学, E-mail: yjwang@imech.ac.cn