

热-力耦合原子-连续关联模型的 框架及其算法*

李 辉, 崔俊芝, 李博文

(中国科学院 数学与系统科学研究院, 计算数学与科学工程计算研究所;
科学与工程计算国家重点实验室(中国科学院), 北京 100190)

(我刊编委崔俊芝来稿)

摘要: 对热-力耦合的原子-连续关联模型进行了系统研究,给出了计及热-力耦合行为的金属微-纳米构件内材料的瞬态弹性常数,应力、应变、比热容等物理量的具体计算公式及其算法.利用原子运动中的“结构形变”部分来研究微-纳米尺度下多晶原子团簇的非均匀结构变形.将原子团簇晶格结构的变形与连续体的变形关联起来,在准简谐近似假设下,推导出依赖于微观结构变形和热振动的自由能密度、熵密度、内能密度表达式,从而给出了微-纳米尺度下的瞬态热-力学参数.

关键词: 原子-连续关联(ACC)模型; 准简谐近似假设; 自由能密度; 比热容

中图分类号: O344.1 **文献标志码:** A

doi: 10.3879/j.issn.1000-0887.2015.04.001

引 言

材料及其结构在微米以上尺度的行为可以用传统的连续介质模型描述,在纳米(含几十纳米)尺度下的物理和力学行为应该用原子模型,即分子动力学模型描述.对于微-纳米构件和材料在纳-微米尺度下的行为,则必须将连续介质模型与原子模型耦合起来.基于此,人们开始了多尺度耦合模型和算法的研究,已有的方法可以分为两类:一类是将原子和连续模型进行并发式或递进式的耦合,代表性方法有:quasicontinuum method(QC)^[1-3], atomic-scale finite element method (FEAt)^[4-6], coarse-grained molecular dynamics (CGMD)^[7-8], macroscopic atomistic ab initio dynamic (MAAD)^[9], the bridging scale method(BSM)^[10-12], smoothed molecular dynamics(SMD)^[13-14], the heterogeneous multi-scale method (HMM)^[15];另一类是Eringen提出的基于原子相互作用的广义连续模型^[16-17].这些多尺度方法大多针对单一物理场,但是对于多物理场耦合的跨原子-连续介质的多尺度分析,有成效的工作很少.

Xiang(向美珍)等针对微-纳米尺度下的热-力学行为,基于原子间相互作用势,以原子团簇作为代表体积元,在分子动力学和连续介质力学之间构造了一种非局部的热-力耦合的原

* 收稿日期: 2014-09-24; 修订日期: 2015-03-09

基金项目: 国家重点基础研究发展计划(973计划)(2012CB025904)

作者简介: 李辉(1988—),女,湖南人,博士生(通讯作者. E-mail: lihui@lsec.cc.ac.cn);
崔俊芝(1938—),男,河南人,工程院院士,研究员(E-mail: cjz@lsec.cc.ac.cn);
李博文(1987—),男,江苏人,研究员,博士(E-mail: libowen@lsec.cc.ac.cn).

子-连续关联模型^[18]。然而,向美珍的论文没有给出热-力耦合原子-连续关联模型的有效计算方法,也没有针对三维微-纳米构件进行数值模拟。Li(李博文)等在向美珍基础上针对金属材料在微-纳米尺度下的动力学行为,给出了一种 ACCM 模型的有效算法,并具体实现了三维 Cu 纳米线的数值模拟^[19],其算法没有考虑热振动作用对弹性常数, Piola-Kirchhoff 应力的影响。值得指出,直到今天多数研究者在研究热-力耦合模型时,都没有考虑原子间的相互作用对瞬态热振动的影响:例如,文献[20]采用了局部简谐近似,假设各个原子的热振动相互独立,即忽略了 Hamilton(哈密尔顿)量里面不同原子的交叉项;文献[21]在局部简谐近似模型的基础上,采用了 Einstein(爱因斯坦)模型,即忽略了原子团簇(晶体)内原子之间的耦合效应对热振动行为的影响。

本文主要讨论微-纳米尺度下热-力耦合的原子-连续关联模型的有效算法及数值模拟技术;在向美珍、李博文论文的基础上,发展了热-力耦合的原子-连续关联模型(以下简称 TM-CACC 模型)及其算法;针对金属纳米线的热-力学行为给出了数值模拟结果,得到了热-力学参数。具体而言,首先将原子运动分解为“结构形变”和“热振动”两部分,利用“结构形变”部分研究微纳米尺度下多晶原子团簇的非均匀结构变形,通过变形环境一致性假设,将原子团簇晶格结构变形与连续体的变形关联起来。然后,将每个微观的代表体积元作为一个热振动单元,定义了一簇广义、正交、归一的热振动基,沿着每个基向量准简谐近似模型,推导出依赖于微观结构变形和热振动的自由能密度、熵密度、内能密度表达式,给出了微-纳米尺度下的热力学参数,诸如,等容比热容, Piola-Kirchhoff 应力的计算公式。最后,通过数值模拟算例,说明了算法的有效性。

本文的结构如下:第 1 节概述热-力耦合的原子-连续关联模型的物理量,由 4 个小节构成:原子运动的分解,自由能密度,应变、应力,比热容的计算。第 2 节展示了热-力耦合的原子-连续关联模型的计算框架。第 3 节通过纳米线的数值模拟,验证了模型的正确性。文章最后一节是全文的总结。

1 热-力耦合的原子-连续模型的物理量

1.1 原子运动的分解

原子模型和连续模型对热-力学现象的处理方式不同。在连续模型中,结构的形变运动和热振动是分开处理的;但在原子模型中均是用原子的位移场来描述,原子的位移场既包含结构形变运动,也包含热振动,没有显式地分离,所以,为了建立原子模型和连续模型的关系,需要对原子模型中的原子运动进行分解,将其分解成“结构形变”和“热振动”两部分:

$$\mathbf{x}_\alpha = \bar{\mathbf{x}}_\alpha + \tilde{\mathbf{x}}_\alpha, \quad \dot{\mathbf{x}}_\alpha = \dot{\bar{\mathbf{x}}}_\alpha + \dot{\tilde{\mathbf{x}}}_\alpha, \quad (1)$$

其中 \mathbf{x}_α 和 $\dot{\mathbf{x}}_\alpha$ 分别表示原子 α 的瞬时位置和速度, $\bar{\mathbf{x}}_\alpha$ 和 $\dot{\bar{\mathbf{x}}}_\alpha$ 分别表示导致原子团簇微结构形变的原子 α 的位置和速度, $\bar{\mathbf{x}}_\alpha$ 也是热振动的平衡位置;而 $\tilde{\mathbf{x}}_\alpha$ 和 $\dot{\tilde{\mathbf{x}}}_\alpha$ 分别表示由热振动引起的原子 α 偏离微结构平衡位置的位移和速度。

1.2 自由能密度

接下来,针对金属材料微观的多晶原子团簇我们简略地推导含有 M 个原子的代表体积元 Ω_r ^[19] 的总自由能表达式。

代表体积元 Ω_r 的 Hamilton 量为

$$H = \frac{1}{2} (\mathbf{M}^{1/2} \dot{\tilde{\mathbf{x}}})^T (\mathbf{M}^{1/2} \dot{\tilde{\mathbf{x}}}) + (\mathbf{M}^{1/2} \dot{\tilde{\mathbf{x}}})^T (\mathbf{M}^{1/2} \dot{\tilde{\mathbf{x}}}) +$$

$$\frac{1}{2}(\mathbf{M}^{1/2}\dot{\bar{\mathbf{x}}})^T(\mathbf{M}^{1/2}\dot{\bar{\mathbf{x}}}) + U(\bar{\mathbf{x}}) + \frac{1}{2}\bar{\mathbf{x}}^T\mathbf{K}\bar{\mathbf{x}}, \quad (2)$$

其中,矩阵 \mathbf{K} 为势函数的 Hessian 矩阵,是实对称的,称为动力学矩阵.由 $M \times M$ 个 3×3 阶矩阵块 $\mathbf{K}_{\alpha\beta}$ 组成.

$$\mathbf{K}_{\alpha\beta} = \left. \frac{\partial^2 U(\bar{\mathbf{x}})}{\partial \mathbf{x}_\alpha \partial \mathbf{x}_\beta} \right|_{\mathbf{x}=\bar{\mathbf{x}}},$$

$$\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_M)^T = (x_{11}, x_{12}, x_{13}, x_{21}, x_{22}, x_{23}, \dots, x_{M1}, x_{M2}, x_{M3})^T.$$

矩阵 \mathbf{M} 为原子的质量矩阵,是 $3M \times 3M$ 的对角矩阵,对角线由 $M \times M$ 个 3×3 阶矩阵块 $m_\alpha \mathbf{I}_{3 \times 3}$ 组成.

令 $\tilde{\mathbf{K}} = \mathbf{M}^{-1/2}\mathbf{K}\mathbf{M}^{-1/2}$, $\tilde{\mathbf{K}}$ 的特征值为 $\omega_i^2, i = 1, 2, \dots, 3M$,特征向量为 $\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_2, \dots, \boldsymbol{\varphi}_{3M}$,特征向量是相互正交的,以特征向量作为列向量的矩阵记为 $\boldsymbol{\Phi} = [\boldsymbol{\varphi}_1, \boldsymbol{\varphi}_2, \dots, \boldsymbol{\varphi}_{3M}]$.则有 $\boldsymbol{\Phi}^T \tilde{\mathbf{K}} \boldsymbol{\Phi} = \mathbf{D}$, \mathbf{D} 是以 $3M$ 个 ω_i^2 为对角元素的对角阵.

作坐标变换:

$$\mathbf{Q} = \boldsymbol{\Phi}^T \mathbf{M}^{1/2} \bar{\mathbf{x}}, \quad (3)$$

$$\mathbf{B} = \boldsymbol{\Phi}^T \mathbf{M}^{1/2} \dot{\bar{\mathbf{x}}}. \quad (4)$$

Hamilton 量(2)改写成

$$H = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3M} \dot{B}_i^2 + \sum_{i=1}^{3M} \dot{B}_i \dot{Q}_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3M} \dot{Q}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3M} \omega_i^2 Q_i^2 + U(\bar{\mathbf{x}}), \quad (5)$$

其中, $Q_i, i = 1, 2, \dots, 3M$ 为简正坐标分量,每个 Q_i 独立做圆频率为 ω_i 的简谐振动.

从式(5)可以看出,Hamilton 量可以分解成沿 $3M$ 个相互独立的广义基方向的热振动之和,将强耦合的 M 个原子的热振动变换成 $3M$ 个独立的简谐振动,从而实现了振动方程的解耦.

接下来,可以通过量子力学^[22]或者统计力学^[23]方法得到代表体积元的自由能.本文仅给出利用量子力学方法推导的自由能结果.

由量子力学^[22]可知, $3M$ 个独立 ω_i^2 的简谐振动所产生的自由能为

$$A(\bar{\mathbf{x}}, T) = -k_B T \ln Z = U(\bar{\mathbf{x}}, T) - 3Mk_B T \ln \frac{k_B T}{\hbar} + \sum_{i=1}^{3M} k_B T \ln \omega_i. \quad (6)$$

对于代表体积元的总势能 $U(\bar{\mathbf{x}}, T)$,由于一些原子处于代表体积元的边界或者邻近边界处,这些原子和处于代表体积元内部的原子对代表体积元总势能的贡献率不一样,因此必须引入占有系数.

占有系数 η_α 的定义为

$$\eta_\alpha = \frac{|C_\alpha \cap \Omega_r|}{|C_\alpha|}, \quad (7)$$

C_α 为集合 A_N 内原子 α 的 Voronoi 单胞, $|C_\alpha|$ 表示 C_α 的体积.不难看出,原子 α 的占有系数 η_α 实际上表征了其代表体积元能量的贡献率.

结合式(6)和(7),可立即得到,在当前时刻 t 代表体积元的总自由能为

$$A_r = \sum_{\alpha \in A_r} \eta_\alpha U_\alpha + \left(-3Mk_B T \ln \frac{k_B T}{\hbar} + \sum_{i=1}^{3M} k_B T \ln \omega_i \right). \quad (8)$$

另外,在 \mathbf{x} 处的自由能密度定义为

$$A(\mathbf{x}) = \frac{1}{V} A_r.$$

由此可知由量子力学推导出的代表体积元的总自由能密度为

$$A_0 = \frac{1}{V_r} \left\{ E_{\text{vib}} + \sum_{\alpha \in \Lambda_r^x} \eta_\alpha^t U_\alpha^x \right\} = \frac{1}{V_r} \left\{ -3Mk_B T \ln \frac{k_B T}{\hbar} + \sum_{i=1}^{3M} k_B T \ln \omega_i + \sum_{\alpha \in \Lambda_r^x} \eta_\alpha^t U_\alpha^x \right\}. \quad (9)$$

1.3 应变、应力

下面以金属材料为例,讨论原子间的相互作用势,进而给出第一 Piola-Kirchhoff 应力的表达式.在本文中,采用 EAM 势,由文献[24]可知, U_α 的表达式为

$$U_\alpha = e_l \left(\sum_{\substack{\beta \neq \alpha \\ \beta \in \Lambda_N^\alpha}} \rho_J(r_{\alpha\beta}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\beta \neq \alpha \\ \beta \in \Lambda_N^\alpha}} \phi_{IJ}(r_{\alpha\beta}). \quad (10)$$

将式(10)代入式(9)可知,代表体积元的总自由能密度为

$$A_0 = \frac{1}{V} \left\{ k_B T \sum_{i=1}^{3M} \ln \left(2 \sinh \frac{\hbar \omega_i}{2k_B T} \right) + \sum_{\alpha \in \Lambda_r^x} \eta_\alpha^t \left(e_l \left(\sum_{\substack{\beta \neq \alpha \\ \beta \in \Lambda_N^\alpha}} \rho_J(r_{\alpha\beta}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\beta \neq \alpha \\ \beta \in \Lambda_N^\alpha}} \phi_{IJ}(r_{\alpha\beta}) \right) \right\}. \quad (11)$$

由连续介质力学^[25]可知,第一类 Piola-Kirchhoff 应力为

$$P_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{\partial A_0}{\partial F_{ij}} = \frac{1}{V} \sum_{\alpha \in \Lambda_r^x} \eta_\alpha^t \left\{ e_l \left(\sum_{\substack{\gamma \neq \alpha \\ \gamma \in \Lambda_N^\alpha}} \rho_J(r_{\alpha\gamma}) \right) \sum_{\substack{\beta \neq \alpha \\ \beta \in \Lambda_N^\alpha}} \int_0^1 \left(\frac{\partial \rho_J}{\partial r^i} (I_\beta(s)) R_{\alpha\beta}^j \right) ds \right\} + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\beta \neq \alpha \\ \beta \in \Lambda_N^\alpha}} \int_0^1 \left(\frac{\partial \phi_{IJ}}{\partial r^i} (I_\beta(s)) R_{\alpha\beta}^j \right) ds \left\} + \frac{\hbar}{2V} \sum_{s=1}^{3M} \coth \left(\frac{\hbar \omega_s}{2k_B T} \right) \frac{\partial \omega_s}{\partial F_{ij}}, \quad (12)$$

其中, F_{ij} 为变形梯度 \mathbf{F} 的分量,关于利用基本变形单元求解变形梯度可以参考 Li(李博文)的文章^[19],且有

$$I_\beta(s) = \int_0^1 \mathbf{F}(\mathbf{X} + (s' - s)\mathbf{R}_{\alpha\beta}) ds' \cdot \mathbf{R}_{\alpha\beta}.$$

1.4 比热容的计算

在每个时程积分步骤里,假定描述温度的局部热振动行为与系统的结构变形相互独立.由此可知自由能为平衡构型 \mathfrak{R} 、应变梯度 \mathbf{F} 和温度 T 的函数,即可以表示成 $A = A(\mathbf{F}, \mathfrak{R}, T)$.

由统计力学^[23],利用由量子力学推导出的自由能密度 A_0 (见式(9)),可得熵密度

$$S_0(\mathbf{X}) = - \frac{1}{V_r} \left\{ -3Mk_B \ln \frac{k_B T}{\hbar} - 3Mk_B + \sum_{s=1}^{3M} k_B \ln \omega_s \right\}; \quad (13)$$

内能密度

$$e_0(\mathbf{X}) = \frac{1}{V_r} \sum_{\alpha \in \Lambda_r} \eta'_\alpha \left\{ e_I \left(\sum_{\substack{\gamma \neq \alpha \\ \gamma \in \Lambda_N^x}} \rho_J(r_{\alpha\gamma}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\beta \neq \alpha \\ \beta \in \Lambda_N^x}} \phi_{IJ}(r_{\alpha\beta}) \right\} + \frac{1}{V_r} 3Mk_B T. \quad (14)$$

由此可知代表体积元的内能为

$$e^{\text{RVE}} = \sum_{\alpha \in \Lambda_r} \eta'_\alpha \left\{ e_I \left(\sum_{\substack{\gamma \neq \alpha \\ \gamma \in \Lambda_N^x}} \rho_J(r_{\alpha\gamma}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\beta \neq \alpha \\ \beta \in \Lambda_N^x}} \phi_{IJ}(r_{\alpha\beta}) \right\} + 3Mk_B T. \quad (15)$$

等容比热容表示代表体积元的体积不发生变化时,单位质量的物质升高(降低)单位温度时吸收(放出)的热量,可定义等容比热容为

$$c_V = \frac{\partial(e/(Mm_{\text{Cu}}))}{\partial T} = \frac{3Mk_B}{Mm_{\text{Cu}}} = 3k_B \frac{1}{m_{\text{Cu}}}, \quad (16)$$

Debye(德拜)温度为

$$\Theta_D = \frac{\hbar v_{\text{max}}}{k_B}, \quad (17)$$

其中, $k_B = 1.380\ 650\ 5 \times 10^{-23}$ J/K, $\hbar = 6.626\ 068\ 96 \times 10^{-34}$ J·s.

2 TMCACC 模型的计算框架

当金属材料发生变形,计算它内部代表体积元的动力学量、热力学量的具体步骤如下:

1) 构造单晶/多晶的材料微结构的初始构型(亦称为参考构型),用分子动力学(MD)方法模拟微观系统的变形过程,得到当前构型。

2) 选取参考构型中要研究原子点的位置 $\mathbf{X} \in \Omega_0$ 处的代表体积元与扩展代表体积元,并记录 \mathbf{X} 变形到当前构型下的位置 $\mathbf{x} \in \Omega$ 。

3) 计算 \mathbf{X} 点处的变形梯度张量,进而算出该点处的应变。

4) 计算 \mathbf{X} 所属的代表体积元中所有原子点 α 的占有系数 η'_α 。

5) 计算出代表体积元所构成系统的动力学矩阵、本征值、热振动向量,由此计算出代表体积元的自由能密度。

6) 代入 TMCACC 应力-应变关系,算出 \mathbf{X} 点处的第一 Piola-Kirchhoff 应力及 Cauchy 应力。

7) 代入等容比热容、Debye 温度的表达式中,可计算出相应的等容比热容、Debye 温度。

3 数值模拟

在 1 个标准大气压,300 K 温度下,针对尺寸为 $108.45 \times 289.2 \times 108.45$,以 $\{100\} \langle 001 \rangle$ 为晶面的单晶 Cu 纳米线,进行了拉伸的数值模拟。

首先构造初始的晶格,利用 LAMMPS 软件^[24]在恒温的条件下弛豫 80 ps,达到初始的平衡状态。在此基础上,将 Cu 纳米线拉伸 60 步(3.6 ns),得到变形后的平衡状态,记为当前构型。

Debye 温度

利用数值模拟结果,可得 Cu 纳米线的 Debye 温度为

$$\Theta_D = \frac{\hbar v_{\text{max}}}{k_B} = 339.81 \text{ K},$$

和实验^[26]得到的 Cu 原子的 Debye 温度 343 K 相差不大。其中, $k_B = 1.380\ 650\ 5 \times 10^{-23}$ J/K, $\hbar = 6.626\ 068\ 96 \times 10^{-34}$ J·s。

等容比热容

将代表体积元内的所有原子振动频率,代入到式(15),可以求出等容比热容 c_V 为

$$c_V = 3k_B \frac{1}{m_{Cu}} = 388.280 \text{ 3 J/(kg}\cdot\text{K)}.$$

结论 由上面数据可以看出,由量子力学求出的 Cu 等容比热容,和由实验^[9]测得的铜常温下比热容 $386 \text{ J/(kg}\cdot\text{K)}$ 非常接近.

应力及应变

从纳米线的初始平衡构型出发,将系统中的原子进行一定步数的移动.在每一步的拉伸过程中,固定系统 y 轴负向末端的两层原子,将其余原子沿 y 轴正向进行移动:每个原子的移动距离由其所在位置到纳米线固定端长度的比例决定,且 y 轴正向最末端原子移动距离为最大(本模拟中固定为 $2 \times 10^{-11} \text{ m}$),在每一步的拉伸过程加载完成后,将整个系统在室温(300 K)下弛豫 60 ps,记录下最后 2 ps 中,每个原子的平均位置.

图 1 为拉伸 60 步时纳米线构型示意.图 2 为中截面原子的应变分布图.图 3 为中截面原子的 Cauchy 应力分布图.

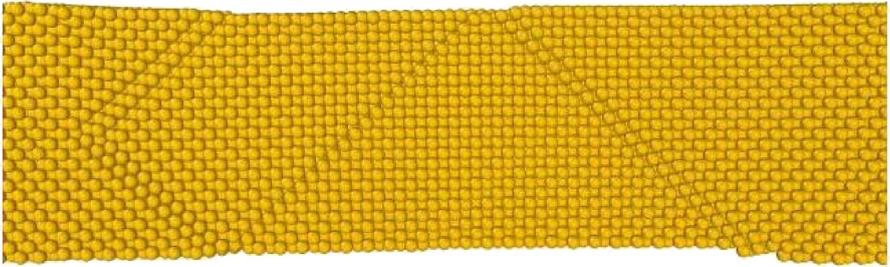


图 1 拉伸 60 步时 Cu 纳米线构型图

Fig. 1 Configuration diagram of the Cu nanowire after tensiing for 60 steps

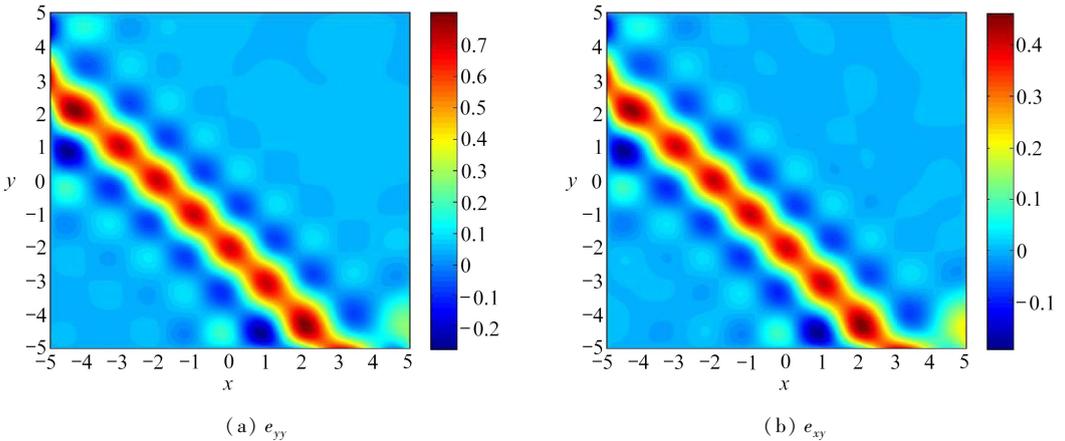


图 2 中截面原子应变分布图(单位: GPa)

Fig. 2 The atomic strain distribution on the middle section(unit: GPa)

从图 1 和图 2 中可以看出,当 Cu 纳米线拉伸 60 步时,系统中出现了明显的位错.图 2、图 3 出现位错的位置和图 1 展示的当前构型的中截面原子图出现的位错一致.此外,由图 2 和图 3 可知,应力、应变场皆呈现出越趋于边界越强烈的特征.而随着拉伸程度的不断变大,系统中出现的位错处的应力、应变表现出明显的奇性.应力沿着 y 轴方向要比其他方向的分量大,验

证了模型的正确性。

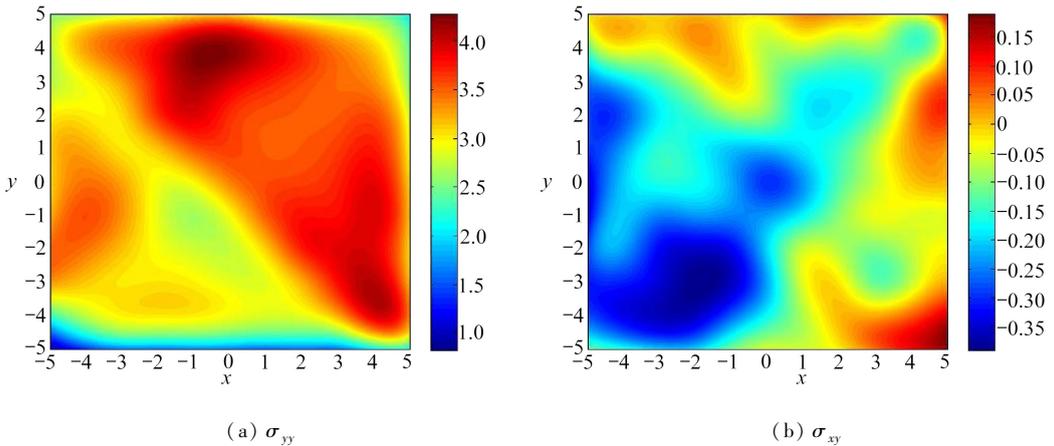


图3 中截面原子 Cauchy 应力分布图(单位: GPa)

Fig. 3 The atomic stress distribution on the middle section(unit: GPa)

4 总 结

本文研究了微-纳米构件热-力耦合行为的原子-连续关联模型及其算法,提出了 TMCACC 模型,并通过准简谐近似模型,将离散的代表体积元的变形与连续体的变形关联起来,推导了依赖于变形环境的自由能密度、熵密度、内能密度表达式,并求得了热-力学参数、等容比热容、Piola-Kirchhoff 应力等。

致谢 作者衷心感谢科学与工程计算国家重点实验室对本文的资助。

参考文献 (References):

- [1] Tadmor E B, Ortiz M, Phillips R. Quasicontinuum analysis of defects in solids[J]. *Philosophical Magazine A*, 1996, **73**(6): 1529-1563.
- [2] Miller R E, Tadmor E B. The quasicontinuum method: overview, applications and current directions[J]. *Journal of Computer-Aided Materials Design*, 2002, **9**(3): 203-239.
- [3] Knap J, Ortiz M. An analysis of the quasicontinuum method[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2001, **49**(9): 1899-1923.
- [4] Kohlhoff S, Gumbsch P, Fishmeister H F. Crack propagation in bcc crystals studied with a combined finite-element and atomistic model[J]. *Philosophical Magazine A*, 1991, **64**(4): 851-878.
- [5] Liu B, Huang Y, Jiang H, Qu S, Hwang K C. The atomic-scale finite element method[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2004, **193**(17/20): 1849-1864.
- [6] Liu B, Jiang H, Huang Y, Qu S, Yu M F, Hwang K C. Atomic-scale finite element method in multiscale computation with applications to carbon nanotubes[J]. *Physical Review B*, 2005, **72**(3): 035435.
- [7] Rudd R E, Broughton J Q. Coarse-grained molecular dynamics and the atomic limit of finite elements[J]. *Physical Review B*, 1998, **58**(10): 5893-5896.
- [8] Rudd R E, Broughton J Q. Coarse-grained molecular dynamics: nonlinear finite elements and finite temperature[J]. *Physical Review B*, 2005, **72**(14): 144104.

- [9] Abraham F F, Broughton J Q, Bernstein N, Kaxiras E. Spanning the length scales in dynamic simulation[J]. *Computers in Physics*, 1998, **12**(6): 538-546.
- [10] Wagner G J, Liu W K. Coupling of atomistic and continuum simulations using a bridging scale decomposition[J]. *Journal of Computational Physics*, 2003, **190**(1): 249-274.
- [11] Park H S, Liu W K. An introduction and tutorial on multiple-scale analysis in solids[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2004, **193**(17/20): 1733-1772.
- [12] Liu W K, Park H S, Qian D, Karpov E G, Kadowaki H, Wagner G J. Bridging scale methods for nanomechanics and materials[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2006, **195**(13/16): 1407-1421.
- [13] Zhang X, Liu Y, Wang H. Smoothed molecular dynamics[CP]. US-China NSF Workshop and Summer Institute of Bio- and Nano-Mechanics and Applications(UCWSI2007), 2007.
- [14] Liu Y, Zhang X, Sze K Y, Wang M. Smoothed molecular dynamics for large step time integration[J]. *CMES: Computer Modeling in Engineering and Sciences*, 2007, **20**(3): 177-192.
- [15] LI Xian-tao, Weinan E. Multiscale modeling of the dynamics of solids at finite temperature [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2005, **53**(7): 1650-1685.
- [16] Eringen A C. Continuum mechanics at atomistic scale[J]. *Crystal Lattice Defects*, 1972, **75**: 109-130.
- [17] Eringen A C. Theory of nonlocal thermoelasticity[J]. *International Journal of Engineering Science*, 1974, **12**(12): 1063-1077.
- [18] XIANG Mei-zhen, CUI Jun-zhi, LI Bo-wen, TIAN Xia. Atomi-continuum coupled model for thermo-mechanical behavior of materials in micro-nano scales[J]. *Science China Physics, Mechanics and Astronomy*, 2012, **55**(5): 1125-1137.
- [19] LI Bo-wen, CUI Jun-zhi, TIAN Xia, YU Xin-gang, XIANG Mei-zhen. The calculation of mechanical behavior for metallic devices at nano-scale based on atomic-continuum coupled model[J]. *Computational Material Science*, 2014, **94**: 73-84.
- [20] XIAO Shao-ping, YANG Wei-xuan. Temperature-related Cauchy-Born rule for multiscale modeling of crystalline solids[J]. *Computational Materials Science*, 2006, **37**(3): 374-379.
- [21] Jiang H, Zhang P, Liu B, Huang Y, Geubelle P H, Gao H, Hwang K C. The effect of nanotube radius on the constitutive model for carbon nanotubes[J]. *Computational Materials Science*, 2003, **28**(3): 429-442.
- [22] Griffiths D J. *Introduction to Quantum Mechanics*[M]. New Jersey: Pearson Prentice Hall, 2004.
- [23] Greiner W, Neise L, Stöcker H. *Thermodynamics and Statistical Mechanics*[M]. Springer, 2012.
- [24] Plimpton S, Crozier P, Thompson A. LAMMPS-large-scale atomic/molecular massively parallel simulaton[CP]. Sandia National Laboratories, 2007.
- [25] Gurtin M E, Fried E, Anand L. *The Mechanics and Thermodynamics of Continua*[M]. Cambridge University Press, 2010.
- [26] Kittel C. *Introduction to Solid State Physics*[M]. Wiley, 2005.

A Thermo-Mechanical Coupling Atom-Continuum Coupled Model and Its Algorithm

LI Hui, CUI Jun-zhi, LI Bo-wen

(*State Key Laboratory of Scientific and Engineering Computing
(Chinese Academy of Sciences); Institute of Computational
Mathematics and Scientific/Engineering Computing,
Academy of Mathematics and System Science,
Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, P.R.China*)
(Contributed by CUI Jun-zhi, M. AMM Editorial Board)

Abstract: A thermo-mechanical coupling atom-continuum coupled model and its efficient algorithm were studied systematically, and the formulae for calculation of thermodynamic and mechanical parameters of metallic materials in micro/nano-scale were obtained. The heterogeneous structure and deformation of polycrystalline clusters in micro- and nano-scale were studied by means of the ‘structural deformation’ part of the atomic motion. Then the lattice structural transformation of atomic clusters was related with the continuum deformation, and the expressions of free energy density, entropy density and internal energy density, which were dependent on the micro-structural deformation and thermal vibration, were derived under the quasi-harmonic approximation assumptions, with some transient thermodynamic and mechanical parameters given. The numerical simulation of a tensioning test on a Cu nanowire proves correctness of the proposed model and validity of the algorithm.

Key words: atom-continuum coupled (ACC) model; quasi-harmonic approximation assumption; free energy density; specific heat capacity

Foundation item: The National Basic Research Program of China (973 Program) (2012CB025904)