

# 加载条件下材料微缺陷动力学行为的多尺度方法

## 模拟研究

陈军，徐云，陈栋泉

(计算物理实验室，北京应用物理与计算数学研究所，

8009 信箱 26 分箱，北京 100088)

### 摘要：

在高应变率加载条件下，延性金属材料的损伤行为是工程物理、材料物理中非常关心的一个热点问题。宏观的实验已经发现材料内部存在的各种微观缺陷，如：微孔洞和裂纹等，在冲击作用下将不断地成核长大、产生位错、形成材料局部热点，导致材料的宏观失效等。在冲击条件下微观缺陷正是材料的各种宏观损伤效应的起源点。因此，对于材料损伤机制的研究需要结合宏观和微观，考虑缺陷从微观发展到宏观在时间和空间的多尺度过程。

我们利用多尺度方法研究了包含微孔洞和微裂纹的金属材料在加载条件下的动力学行为。该多尺度方法结合了分子动力学和自适应有限元方法，分子动力学方法运用于局部缺陷区域，而有限元方法运用于整个模型区域，两种方法之间使用桥尺度函数进行连接。计算结果既包括了系统宏观的物理信息如：应变场、应力场等，也包括了微观原子的物理信息，如：原子能量和位置坐标等。运用以上方法结合相关的材料损伤模型，我们对空洞、裂尖等缺陷导致的各种位错发射、热点形成、激波传播等效应进行了仔细分析研究，对材料的损伤动力学行为得到了一些新的认识。