

# 分子动力学中应变分析的统计矩方法及应用\*

卢果 王帅创 张广财† 许爱国

(北京应用物理与计算数学研究所实验室, 北京 100088)

(2011年5月4日收到; 2011年8月4日收到修改稿)

分子动力学模拟研究金属的力学性质, 需要采用合适的应变分析方法研究金属的变形特征及其演化规律. 金属材料复杂变形的局部应变特征缺乏简便有效的分析手段, 整体变形也没有合适的描述方法. 本文提出分子动力学中应变分析的统计矩方法, 通过统计矩建立了微观量和宏观应变的关联. 在单晶单轴加载、纳米多晶剪切和冲击加载下的应用表明, 矩应变分析方法可以很好的描述和评估材料的局部变形和整体变形特征, 并通过应变不均匀度鉴别材料的局部塑性变形和弹性变形, 是深入研究复杂结构材料变形机理的一种有效的通用分析方法.

**关键词:** 分子动力学, 统计矩, 应变分析, 纳米多晶

**PACS:** 31.15.xv, 02.50.Cw, 81.40.Lm, 61.46.Hk

## 1 引言

纳米多晶金属材料具有高屈服强度和断裂强度、低延展性、优良的抗磨损性以及超塑性等独特的力学性质<sup>[1]</sup>. 建立合理描述纳米多晶力学性能的本构模型, 需要全面了解纳米多晶在变形过程中的变形状态特征以及微结构特征和演化规律. 目前, 实验和模拟研究中微结构分析有一些行之有效的方法. 例如, 实验中可以采用高分辨率透射电镜观测分析变形前后材料样本获得微结构(缺陷结构、团簇结构等)特征的部分信息<sup>[2]</sup>. 分子动力学模拟中可以采用 Ackland<sup>[3]</sup>, 键对分析<sup>[4]</sup>和对称参数<sup>[5]</sup>等方法有效鉴别位错、层错、晶界、空洞等缺陷结构, SHT方法能快速有效的分析复杂的团簇结构<sup>[6]</sup>. 纳米多晶中各晶粒取向不同, 晶界原子份额高, 整体结构不均匀, 加载下发生的变形为复杂的非均匀变形. 分子动力学模拟中, 一般采用等应变率加载控制样本的整体应变<sup>[7]</sup>, 单轴拉伸、压缩等简单加载下通过分析加载方向尺寸变化近似描述材料的变形状态<sup>[8,9]</sup>, 动态冲击加载变形中材料的变形特征缺乏相关分析<sup>[10-12]</sup>. 等应变率加载和整体尺寸变化分析不能准确描述晶体的整体变形, 也无法表征变形的非均匀特征. 如何有效分析晶体局部变形和整体变形特征是亟待解决的问题.

材料均匀变形状态可用一个应变张量完全表征, 非均匀变形应当采用局部应变描述. 计算材料的局部应变可以用来和连续介质描述相对照, 局部应变比较均匀(没有缺陷或缺陷分布比较均匀)时分子动力学和连续介质描述基本一致, 这也是界定两种描述方法的标准. 金属材料塑性变形是局部相对运动的整体表现, 材料的塑性变形计算需要给出局部运动及整体应变的关系. 如何从材料分子或原子的微观特征量(位置、位移)计算应变是材料应变分析的基本问题.

本文提出了材料应变分析的统计矩方法. 矩方法利用材料变形前后粒子微观位置和位移分布的统计矩计算应变分布, 把宏观应变和微观特征量联系起来, 不用考虑材料加载方式和整体均匀性. 文中首先具体介绍应变分析的统计矩方法, 然后用矩方法详细分析单晶单轴加载、纳米多晶铜剪切加载和冲击加载过程中的变形特征.

## 2 统计矩应变分析方法

由连续介质弹性力学可知, 材料小变形的应变张量是位移梯度张量  $\nabla U$  的对称部分, 即  $\epsilon = (\nabla U + U\nabla)/2$ , 因此, 已知材料变形前后粒子的空间位置和位移, 就能求出位移梯度和应变. 假设包含  $N$  个粒子的材料发生均匀小变形, 体系的位

\* 国家自然科学基金(批准号: 10102010, 10775018 和 11075021), 中国工程物理研究院发展基金和实验室基金资助的课题.

† E-mail: zhang\_guangcai@iapcm.ac.cn

移场  $\mathbf{U}(\mathbf{X})$ 、位移梯度张量  $\boldsymbol{\beta}$  和平移矢量  $\mathbf{t}$  满足关系

$$\mathbf{U}(\mathbf{X}) = \mathbf{X} \cdot \boldsymbol{\beta} + \mathbf{t}, \quad (1)$$

可用最小二乘法拟合计算  $\boldsymbol{\beta}$  和  $\mathbf{t}$ . 构造目标函数  $\Phi(\boldsymbol{\beta}, \mathbf{t}) = \sum_i^N (\mathbf{U}_i - \mathbf{X}_i \cdot \boldsymbol{\beta} - \mathbf{t})^2$ , 分别对  $\boldsymbol{\beta}$  和  $\mathbf{t}$  求偏导, 令  $\frac{\partial \Phi}{\partial \boldsymbol{\beta}} = 0$ ,  $\frac{\partial \Phi}{\partial \mathbf{t}} = 0$ , 并解方程组可得

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\beta} &= (\overline{\mathbf{X}\mathbf{X}} - \overline{\mathbf{X}}\overline{\mathbf{X}})^{-1} \cdot (\overline{\mathbf{X}\mathbf{U}} - \overline{\mathbf{X}}\overline{\mathbf{U}}) \\ &= \left( \overline{(\mathbf{X} - \overline{\mathbf{X}})(\mathbf{X} - \overline{\mathbf{X}})} \right)^{-1} \\ &\quad \cdot \left( \overline{(\mathbf{X} - \overline{\mathbf{X}})(\mathbf{U} - \overline{\mathbf{U}})} \right), \end{aligned} \quad (2)$$

其中  $\overline{\mathbf{X}} = \sum_i^N \mathbf{X}_i / N$ ,  $\overline{\mathbf{U}} = \sum_i^N \mathbf{U}_i / N$ ,  $\overline{\mathbf{X}\mathbf{U}} = \sum_i^N \mathbf{X}_i \mathbf{U}_i / N$ ,  $\overline{\mathbf{X}\mathbf{X}} = \sum_i^N \mathbf{X}_i \mathbf{X}_i / N$ . 定义体系的两个二阶矩  $\mathbf{M}_s$ ,  $\mathbf{M}_b$ , 即

$$\mathbf{M}_s = \frac{1}{N} \sum_i^N (\mathbf{X}_i - \overline{\mathbf{X}})(\mathbf{X}_i - \overline{\mathbf{X}}), \quad (3)$$

$$\mathbf{M}_b = \frac{1}{N} \sum_i^N (\mathbf{X}_i - \overline{\mathbf{X}})(\mathbf{U}_i - \overline{\mathbf{U}}), \quad (4)$$

$\mathbf{M}_s$  为初始位置中心二阶矩,  $\mathbf{M}_b$  为坐标位移混合中心二阶矩. 由 (2), (3), (4) 式可得

$$\boldsymbol{\beta} = \mathbf{M}_s^{-1} \cdot \mathbf{M}_b. \quad (5)$$

应变张量和旋转张量分别为

$$\boldsymbol{\varepsilon} = (\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\beta}^T) / 2, \quad (6)$$

$$\boldsymbol{\Omega} = (\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^T) / 2. \quad (7)$$

拟合相关系数为

$$\mathbf{R} = \mathbf{I} - \mathbf{S}_T^{-1} \cdot \mathbf{S}_R, \quad (8)$$

其中  $\mathbf{S}_R = \sum_i^N (\mathbf{U}_i - \mathbf{X}_i \cdot \boldsymbol{\beta} - \mathbf{t})(\mathbf{U}_i - \mathbf{X}_i \cdot \boldsymbol{\beta} - \mathbf{t})$

为残方差,  $\mathbf{S}_T = \sum_i^N (\mathbf{U}_i - \overline{\mathbf{U}})(\mathbf{U}_i - \overline{\mathbf{U}})$  为总方差.

拟合相关系数  $\mathbf{R}$  实质上反应了位移  $\mathbf{U}$  和坐标  $\mathbf{X}$  的线性相关程度, 可以证明  $\mathbf{R} = \overline{\mathbf{U}\mathbf{U}}^{-1} \cdot \overline{\mathbf{U}\mathbf{X}} \cdot \overline{\mathbf{X}\mathbf{X}}^{-1} \cdot \overline{\mathbf{X}\mathbf{U}}$ . 在整体线性变形过程中如果  $\mathbf{U}$  和  $\mathbf{X}$  满足线性关系, 则  $\mathbf{R} = \mathbf{I}$ , 因此可以用  $\mathbf{R}$  来度量体

系变形的均匀性和分析体系变形性质 (弹性或塑性变形). 由此定义体系不均匀度系数为

$$C_M = |1 / \log_{10} \|\mathbf{R} - \mathbf{I}\| |, \quad (9)$$

其中  $\|\cdot\|$  为矩阵范数, 对矩阵  $\mathbf{M} = (m_{ij})$ ,  $i, j =$

$1, \dots, n$ , 范数  $\|\mathbf{M}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n m_{ij}^2} / n$ . 不均匀度

系数  $C_M$  的值越大, 体系非均匀程度越高.  $C_M = 0$  时, 体系发生均匀线性变形,  $C_M$  大于 0 时, 体系发生非均匀变形. 塑性变形过程中原子之间拓扑关系发生改变, 位移量和原子位置不再有线性关系, 表现为  $C_M$  偏离零值. 金属材料中弹性变形都处于整体线性变形阶段, 因此  $C_M$  的值反映了塑性变形相对大小. 实际应变分析中, 常需要分析局部弹性变形. 弹性变形区的变形比较均匀, 一般而言是金属中远离晶界和微结构的区域.

### 3 应用与分析

#### 3.1 均匀变形分析

对单晶单轴拉伸及压缩加载下的整体均匀变形过程进行应变分析. 选择晶格常数  $a = 3.615 \text{ \AA}$  的单晶铜为模拟介质,  $x, y, z$  方向分别取为 [100], [010], [001] 晶向, 对应的尺寸均为  $40a$ , 共 256000 个原子, 选用 Mishin 嵌入原子势<sup>[13]</sup>. 体系在零温常压下采用 NPT 系综弛豫, 时间步长为 0.1fs, 弛豫时间 10ps. 由于模拟时间限制, 分子动力学模拟中一般采用高应变率加载, 为直接检验矩方法的计算结果, 采用恒应变率加载, 加载应变率为  $2 \times 10^8/\text{s}$ . 将弛豫后构型沿  $x$  方向拉伸 (或压缩), 采用 NVE 系综演化, 时间步长为 1 fs, 模拟 200000 步, 共 200 ps, 每隔 200 步输出一次原子坐标, 体系总应变 4%. 图 1 是体系沿  $x$  轴拉伸和压缩加载示意图.

矩方法计算的应变张量除分量  $\varepsilon_{xx}$  外, 其余都为零, 说明体系的应变仅存在  $x$  方向单轴拉伸 (或压缩). 应变分量  $\varepsilon_{xx}$  随时间变化关系见图 2, 其中图 2(a) 是单轴拉伸情形, 图 2(b) 是单轴压缩情形. 对单轴拉伸, 假设  $\varepsilon_{xx}$  与  $t$  满足  $\varepsilon_{xx} = a + b \cdot t$  关系, 采用最小二乘法拟合得  $a = 5.7846 \times 10^{-9}$ ,  $b = 2 \times 10^8/\text{s}$  (压缩情形  $a = -6.9389 \times 10^{-18}$ ,  $b = -2 \times 10^8/\text{s}$ ), 计算值与给定加载值一致, 拟合相关系数  $R = 1$ , 说明整个加载过程中应变率恒定. 变形过程中的不均匀度系数  $C_M$  始终为零, 表明晶体在 4% 的应变下体系一直是均匀线性变形.

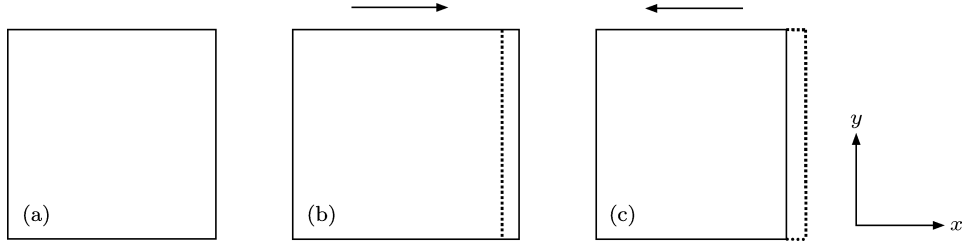


图1 单轴拉伸及压缩加载示意图 (a) 初始构型; (b) 拉伸4%; (c) 压缩4%

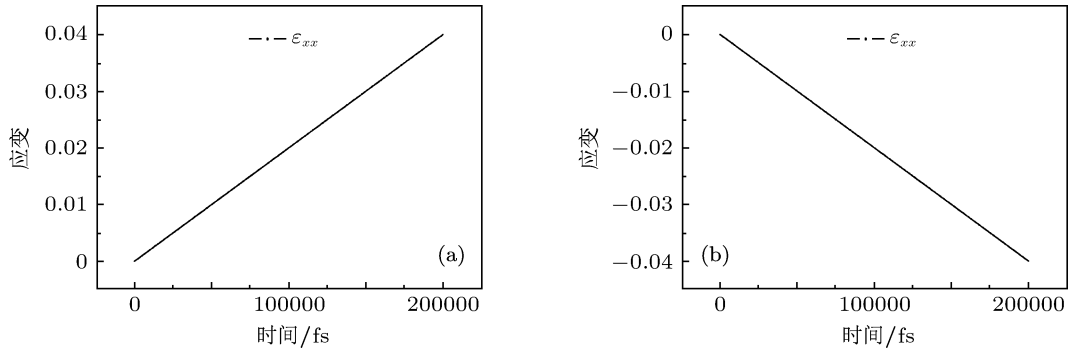


图2  $\epsilon_{xx}$  随时间演化图 (a) 单轴拉伸; (b) 单轴压缩

### 3.2 非均匀变形分析与应用

#### 3.2.1 整体等效应变

塑性变形是非线性变形, 位错是粗粒多晶金属塑性变形的载体. 当 Burgers 矢量为  $\mathbf{b}$  的位错滑移到晶体表面后, 滑移面上下部分晶体将发生相对位移  $\mathbf{b}$ . 这种典型的塑性变形体系称为简单滑移体系, 其整体应变没有定义. 应用统计矩方法计算的应变可以用来表征体系的总体等效变形, 其中  $C_M$  可以刻画体系变形的均匀程度. 图3是简单滑移体系示意图, 图3(a)的完整晶体为简单立方结构,  $x$  和  $y$  方向长  $30a$ ,  $z$  方向长  $20a$ , 共 18000 个原子. 一条 Burgers 矢量为  $\mathbf{b} = [010]a$  的刃型位错 (滑移面为  $z = 10a$ ) 从左至右滑移到晶体表面后的晶体构型如图3(b).

根据矩方法应用 (3)—(6) 式可得体系的总体等效应变  $\epsilon = (\epsilon_{ij})$  为

$$\epsilon = \begin{pmatrix} 0.00000000 & 0.00000000 & 0.00000000 \\ 0.00000000 & 0.00000000 & 0.037218045 \\ 0.00000000 & 0.037218045 & 0.00000000 \end{pmatrix}.$$

由 (8) 式是可得体系的相关系数矩阵  $\mathbf{R} = (r_{ij})$ ,

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 1.00000000 & 0.00000000 & 0.00000000 \\ 0.00000000 & 0.999156118 & 0.00000000 \\ 0.00000000 & 0.000062815 & 1.00000000 \end{pmatrix}.$$

由不均匀度系数定义可得  $C_M = 0.281719$ , 说明体系变形非均匀. 其中  $r_{22} \neq 1$  且  $r_{23} \neq 0$ , 说明变形的不均匀主要源于应变分量  $\epsilon_{yy}$  和  $\epsilon_{yz}(\epsilon_{zy})$  的不均匀.

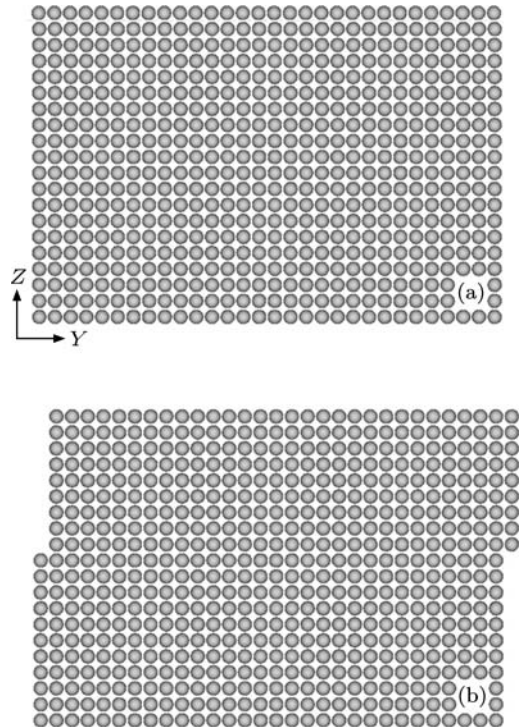


图3 简单滑移体系 (a) 完整晶体; (b) 滑移后晶体

### 3.2.2 纳米多晶的非均匀变形

纳米多晶在拉伸、剪切和冲击加卸载作用下,晶界和位错等微结构的运动决定了变形的非均匀性,但文献中对非均匀变形的特征缺乏细致的定量描述和分析.本文以剪切加载和冲击加载下的多晶变形过程为例,采用矩方法详细分析了晶体的整体变形和每个晶粒变形的特征及其相互关系.

根据实验分析中获得的纳米多晶结构的认识<sup>[14,15]</sup>,模拟中选用随机分布模型(晶粒取向和晶粒中心随机分布).选用铜为模拟介质,多晶铜样本含 27 个晶粒,晶粒平均尺寸 5 nm,共有 273798 个原子.采用 Voronoi 几何方法构造初始样本<sup>[16]</sup>.为使原子充分运动以便尽可能达到平衡构型,首先采用共轭梯度法使模型达到最小势能状态,然后控制温度为 300 K,时间步长取为 0.2 fs,在 NPT 系综下弛豫 200 ps.原子的类型采用键对分析方法鉴别,图 4 是弛豫后样本构型,其中浅色代表晶界原子,深色原子为规则排列的 fcc 结构.

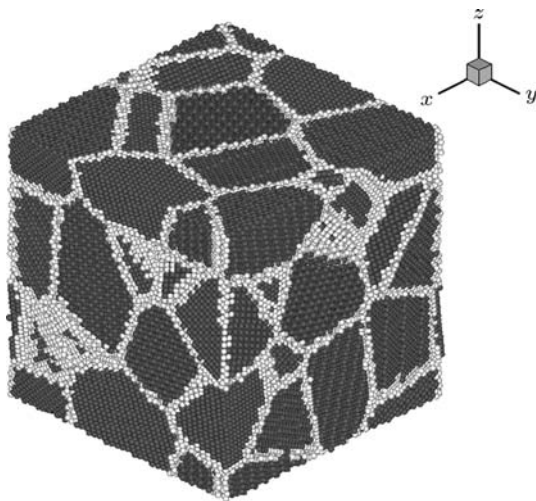


图 4 纳米多晶铜弛豫后的原子空间分布

剪切加载是对弛豫后样本施加恒定剪切应变率  $2 \times 10^8/s$ ,温度为 300 K,时间步长 1 fs,采用 NVT 系综演化 400 ps,使样本总应变达到 8%.从 27 个晶粒中选出代表性晶粒分析应变状态随时间演化规律.图 5(a) 是纳米多晶总体和选定晶粒(晶粒 1, 5, 6 和 13)的应变分量  $\varepsilon_{xy}$  随时间演化关系图,从中可以看出各晶粒  $\varepsilon_{xy}$  应变并不相同,且都小于总体等效应变,这是由于晶粒的平动和转动承载了部分应变,随着应变增加,平动和转动的贡献更大.图 5(b) 是总体和特征晶粒(晶粒 1, 5, 11 和 18)的应变分量  $\varepsilon_{xx}$  随时间演化曲线.曲线中可以看出,总体应变分量  $\varepsilon_{xx}$  接近于 0,但是局部应变分量  $\varepsilon_{xx}$  不为 0.对比图 5(a) 和 (b) 可知应变分量  $\varepsilon_{xy}$  比  $\varepsilon_{xx}$  大一个

量级,这表明在外加剪切作用下纳米多晶铜的总体变形以各晶粒的剪切变形为主,晶粒的局部拉伸或压缩起辅助调整作用.

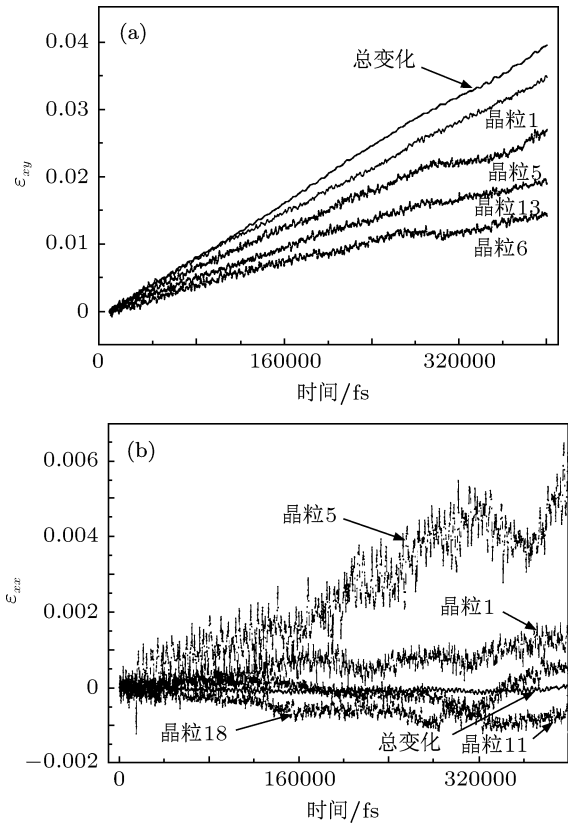


图 5 应变分量随时间演化图 (a)  $\varepsilon_{xy}$  随时间演化图; (b)  $\varepsilon_{xx}$  随时间演化图

纳米多晶应变达到 2% 时晶粒 1, 5, 6, 13 和多晶总体的应变不均匀度系数  $C_M$  值分别为 0.227531, 0.223041, 0.243390, 0.232349 和 0.201376,可见每个晶粒和整体的变形都是非均匀变形,其中晶粒 6 的非均匀度最高.利用矩方法对体系的旋转张量进行分析表明晶粒存在微小的整体转动但对晶体的整体塑性没有贡献(文献观察中没有发现晶粒的明显转动,从而假定小纳米多晶的晶粒转动不承担塑性变形<sup>[8]</sup>).缺陷结构分析表明,应变小于 4% 的过程中除初始少量位错外没有新的位错产生,因此可以认为该阶段小纳米尺度多晶铜的塑性变形由晶界的滑移主导.

材料的冲击加载模拟常用飞片法和活塞法,本文选用活塞法.选择弛豫后多晶铜样本  $x$  方向一侧厚度为 7.23 Å 的原子层作为活塞,沿  $x$  方向以 600 m/s 的恒定速度推动活塞在样品中产生冲击波.一般而言,波后区域的材料受到剧烈压缩,冲击波强度越大压缩程度越高,波前区域的材料仅发生微小的弹性变形,冲击波阵面是局域应变的阶跃面.图 6

是样本整体等效应变随时间演化图. 对比图 6(a), (b) 可知, 应变分量  $\varepsilon_{xx}$  比其余分量高两个量级, 因此单轴冲击作用下样本总体的应变表现为单轴冲击压缩和稀疏卸载过程, 大约到 2.72 ps 时样本达到最大压缩  $\varepsilon_{xx} = -10.95\%$ . 图 7 是晶粒 17 的应力分量随时间演化图, 可以看出应力分量  $\varepsilon_{xx}$  仅比其余分量高一个量级, 其余晶粒的应变状态也满足这个关系. 由于各晶粒应力分量不存在明显相关 ( $\varepsilon_{xx}$  分量除外), 因此相应的总体等效应变分量比各晶粒的小一个量级. 比较分析晶粒应变和总体等效应变的  $\varepsilon_{xx}$  分量可知 (图 8), 总体应变和晶粒应变一个量级, 所有晶粒中晶粒 3 的应变峰值最小 ( $-13.60\%$ ),

晶粒 12 的峰值最大 ( $-7.57\%$ ), 总体等效应变的峰值处于晶粒 3 和 12 的峰值之间. 从晶粒 3, 8 和 12 的应变曲线中可以看出, 每个晶粒都首先经历一段相对平滑的直线段, 然后陡然下降, 下降的时间点对应冲击波达到时刻. 选择冲击波到来之前的 250 fs 时刻和冲击波过后的 2500fs 时刻计算晶粒 3, 8 和 12 的应变不均匀度系数可得, 250 fs 时刻的  $C_M$  值分别为 0.240013, 0.233976 和 0.218679, 2500fs 时刻为 0.330398, 0.321852 和 0.255289, 由此可见晶粒的冲击压缩过程是剧烈的非均匀变形过程 (250 fs 时刻的  $C_M$  不为零源于每个晶粒包含的晶界原子的非整体运动).

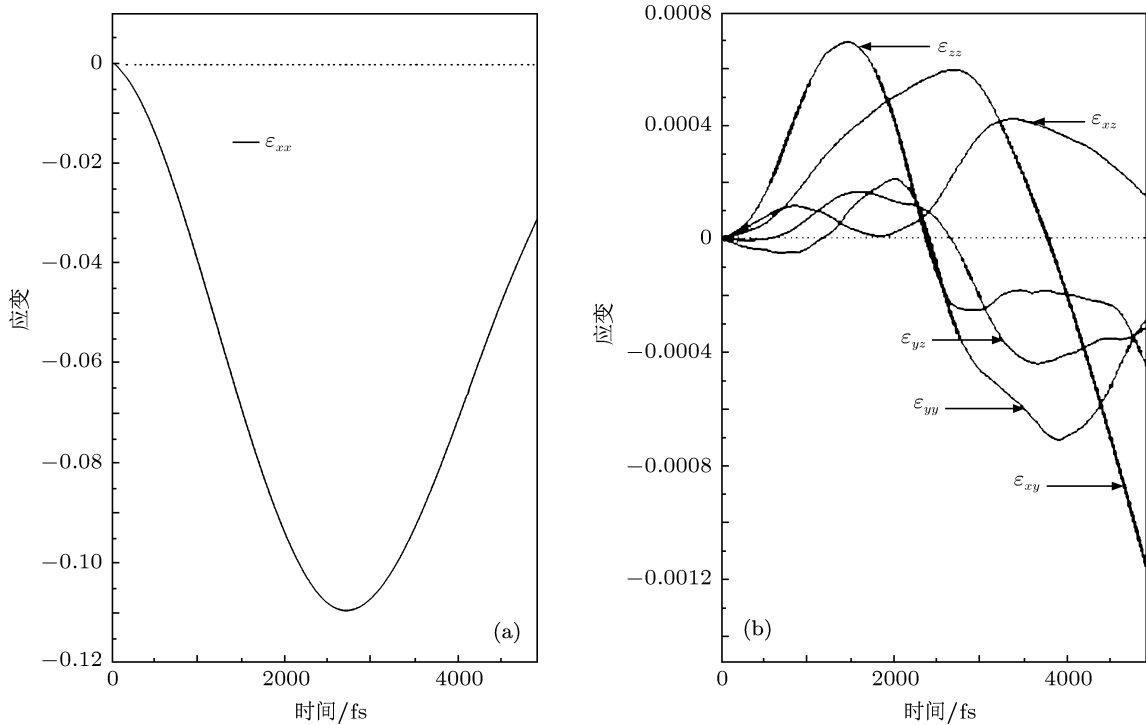


图 6 样本整体等效应变的时间演化图 (a)  $\varepsilon_{xx}$  分量; (b) 其余 5 个分量

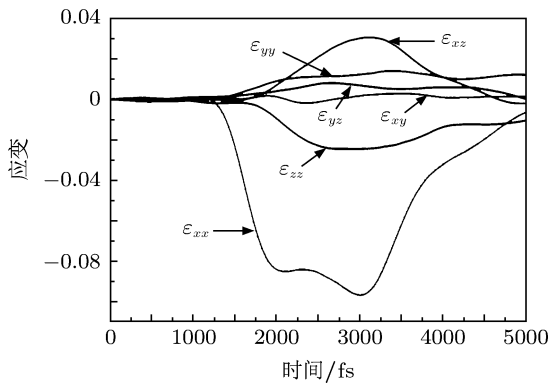


图 7 晶粒 17 的应变分量的时间演化图

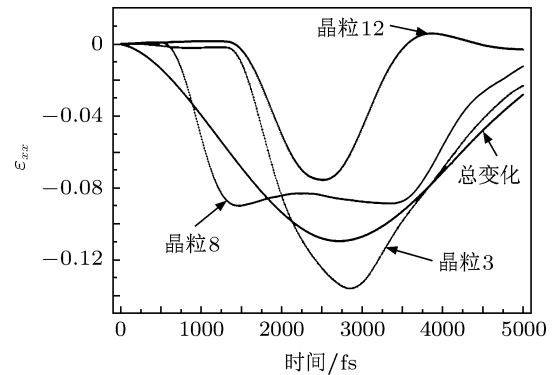


图 8 应变分量的时间演化图

冲击波扫过区域前后时刻的应变状态有陡然的变化, 根据这一特征可以计算出样本中的冲击波速度. 在冲击模拟中, 选取样本中  $[40,46] \times [35,115] \times [35,115]$ ,  $[60,66] \times [35,115] \times [35,115]$ ,  $[80,86] \times [35,115] \times [35,115]$ ,  $[100,106] \times [35,115] \times [35,115]$  和  $[120,126] \times [35,115] \times [35,115]$  (单位为Å) 等 5 个平行等间距排列厚度为 6 Å 的薄板区域 (分别记为  $P_1, P_2, P_3, P_4$  和  $P_5$ ), 图 9 为  $P_1$ — $P_5$  薄板的应变分量  $\varepsilon_{xx}$  随时间演化图. 取薄板应变约为 0.45% 的时刻为应变转折时间点, 计算可得相邻两个薄板之间的冲击波速度分别为 5405 m/s, 5714 m/s, 5263 m/s 和 5263 m/s, 平均值为 5411 m/s.

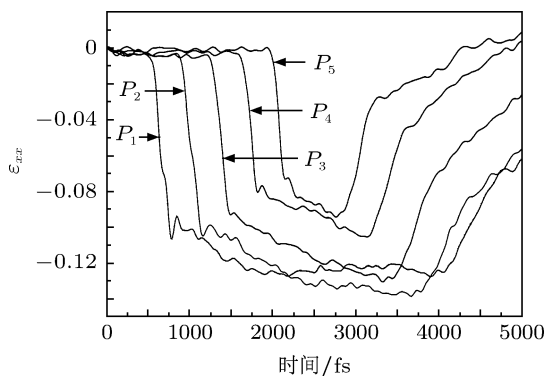


图 9  $P_1$ — $P_5$  薄板的应变分量  $\varepsilon_{xx}$  随时间演化图

## 4 结论

单轴和纳米多晶应变特征分析中的应用表明统计矩方法是分析非均匀材料应变分布的有效途径. 矩方法把微量特征量和宏观应变通过统计矩有机连接起来, 合理定义了非均匀材料的总体等效应变, 使复杂加载条件下非均匀材料的应变分析成为可能, 并为材料其他特征量 (如冲击波速) 的分析提供基础. 基于统计矩方法计算的应变分布结合分子动力学计算的应力分布可以更全面的定量描述复杂材料演化过程中的力学过程, 有利于全面深入挖掘材料的力学性质及其微观机理. 非均匀应变材料的局域应变分析中区域划分方式以及每个区域应该包含的粒子数目具有一定任意性, 一般根据研究的具体问题划分. 例如, 纳米多晶研究晶粒应变特征时局部区域取为每个晶粒. 材料局域弹性应变区内应变梯度很小, 给定一个初始划分后根据每个区域的拟合相关系数矩阵  $\mathbf{R}$  动态调整区域范围, 使  $\mathbf{R}$  值尽量趋近单位矩阵可以有效区分弹性应变区域. 对于大变形过程, 可以选择变形的中间构型作为初始参考构型, 较短时间内相对参考构型的变形仍然可以采用小变形处理, 整体描述可以用变形矩阵乘积给出.

在文章撰写过程中, 孙博博士提出了许多启发性的建议, 在此表示感谢.

- [1] Kumar K S, Swygenhoven H V, Suresh S 2003 *Acta. Mater* **51** 5743
- [2] Shan Z, Stach E A, Wiezorek J M K, Knapp J A, Follstaedt D M, Mao S X 2004 *Science* **304** 654
- [3] Ackland G J, Jones A P 2000 *Phys. Rev. B* **73** 054104
- [4] Honeycutt D J, Andersen H C 1987 *J. Phys. Chem.* **91** 4950
- [5] Kelchner C L, Plimpton S J, Hamilton J C 1998 *Phys. Rev. B* **58** 11085
- [6] Zhang G C, Xu A G, Lu G, Mo Z Y 2010 *Sci. China. Phys. Mech. Astron* **53** 1610
- [7] Schiøtz J, Jacobsen K W 2003 *Science* **301** 1357
- [8] Swygenhoven H V, Derlet P M 2001 *Phys. Rev. B* **64** 224105
- [9] Hasnaoui A, Swygenhoven H V, Derlet P M 2002 *Phys. Rev. B* **66** 184112
- [10] Yang Q L, Zhang G C, Xu A G, Zhao Y H, Li Y J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 0940 (in Chinese) [杨其利, 张广财, 许爱国, 赵艳红, 李英骏 2008 物理学报 **57** 0940]
- [11] Chen K G, Zhu W J, Ma W, Deng X L, He H L, Jing F Q 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 1125 (in Chinese) [陈开果, 祝文军, 马文, 邓小良, 贺红亮, 经福谦 2010 物理学报 **59** 1125]
- [12] Ma W, Zhu W J, Chen K G, Jing F Q 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 016107 (in Chinese) [马文, 祝文军, 陈开果, 经福谦 2011 物理学报 **60** 016107]
- [13] Mishin Y, Mehl M J, Papaconstantopoulos D A, Voter A F, Kress J D 2001 *Phys. Rev. B* **63** 224016
- [14] Siegel R W 1994 *J. Phys. Chem. Solids* **55** 1097
- [15] Natter H, Schmelzer M, Hempelmann R 1998 *J. Mater. Res* **13** 1186
- [16] Voronoi G Z, Angew R 1908 *Math.* **134** 199

# Moment method for strain analysis and its application in molecular dynamics\*

Lu Guo Wang Shuai-Chuang Zhang Guang-Cai<sup>†</sup> Xu Ai-Guo

(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)

(Received 4 May 2011; revised manuscript received 4 August 2011, China)

## Abstract

It is necessary to investigate the characteristics and the evolution law of metal deformation by using the appropriate strain analysis method. The deformation of metal is complex, so there exists no useful method to analyze the local deformation characteristics and to describe the global equivalent deformation of deformed metal. In this paper, we propose a statistical moment method of strain analysis. Statistical moment method builds up the relationship between micro quantities and macro strain. For instance, it is used to study the deformations of monocrystal under uniaxial load and the nanocrystalline under shear and shock, showing that moment method can not only describe and evaluate the local and the global deformation of metal but also distinguish elastic and plastic deformation by nonuniform coefficient. Moment method is a general and effective way to investigate the deformation mechanism of complex structure material.

**Keywords:** molecular dynamics, statistical moment, strain analysis, nanocrystalline

**PACS:** 31.15.xv, 02.50.Cw, 81.40.Lm, 61.46.Hk

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10102010, 10775018, 11075021), and the Science Foundations of the Laboratory of Computational Physics and China Academy of Engineering Physics.

<sup>†</sup> E-mail: zhang-guangcai@iapcm.ac.cn