

分子动力学模拟在金属材料方向“材料科学基础”课程教学中的应用

吕皓 王萌 王海滨 宋晓艳

北京工业大学 材料科学与工程学院, 北京 100124

[摘要] 材料科学基础是高等院校材料类专业本科生的专业核心基础课程, 存在课程知识体系面广、抽象概念多、理论联系实践少等教学难点, 传统的教学模式难以取得良好的效果。针对材料微观结构和演化过程在传统演示文稿教学中“看不见、摸不着”的痛点, 文中讨论将前沿研究融入本科课堂, 利用分子动力学模拟来辅助材料科学基础教学。分子动力学模拟可以动态可视化地展示材料微观组织结构演化, 从而增强基本概念的形象程度, 激发学生的学习兴趣, 提高基础理论课程的教学效果。引入模拟技术的教学方式也适用于其他理工科基础课程抽象概念的讲授, 提升教学质量。

[关键词] 材料科学基础; 分子动力学模拟; 可视化; 辅助教学

DOI: 10.33142/fme.v6i5.16585

中图分类号: TB115

文献标识码: A

Application of Molecular Dynamics Simulation in the Teaching of "Fundamentals of Materials Science" Course in the Field of Metal Materials

LU Hao, WANG Meng, WANG Haibin, SONG Xiaoyan

College of Materials Science and Engineering, Beijing University of Technology, Beijing, 100124, China

Abstract: Fundamentals of Materials Science is a core foundational course for undergraduate students majoring in materials science in higher education institutions. There are teaching difficulties such as a wide range of knowledge systems, many abstract concepts, and a lack of theoretical and practical connections. Traditional teaching models are difficult to achieve good results. In response to the pain point of "invisible and intangible" material microstructure and evolution process in traditional presentation teaching, this article discusses the integration of cutting-edge research into undergraduate classrooms and the use of molecular dynamics simulations to assist in the teaching of materials science fundamentals. The teaching method of introducing simulation technology is also applicable to the teaching of abstract concepts in other basic courses of science and engineering, improving the quality of teaching.

Keywords: fundamentals of materials science; molecular dynamics simulation; visualization; computer aided instruction

引言

材料科学基础课程是材料科学与工程专业本科生在完成公共基础课和部分技术基础课后, 于专业课开设前的第一门专业核心基础课程。以材料科学与工程专业最具代表性的金属材料方向的课程教学为例, 本课程阐述金属材料的共性基础知识, 从材料的组织结构出发, 研究材料的成分、结构与材料的制备方法、加工工艺以及材料性能之间的关系^[1]。课程的目标是通过集中和强化金属材料学科基础的理论知识学习, 使学生具备一定深度的金属材料专业理论基础。为进一步深入学习专业方向的其他课程做好准备, 达到认识金属材料基本属性和明确未来专业发展方向的目的, 激发学生从事专业学习以及今后开展材料研究、材料设计与制造的专业兴趣。从学生的角度来说, 学好材料科学基础课程对于打好专业基础起到至关重要的作用; 从教师的角度来说, 如何讲好这门课程也是我们长期以来的教学研究关键课题。能否在课程教学中有机融入新方法、新技术, 提高教学质量, 充分激发学生的学习兴趣 and 积极性, 始终是这门课程教学团队的关注重点。

1 材料科学基础课程的教学现状

材料科学基础课程作为材料学科的核心基础课, 虽然

在很多高校已经有多年的丰富教学经验, 但是传统的教学方式缺乏互动性, 课堂内容比较抽象和枯燥, 近年来在教学中暴露出多重结构性矛盾, 主要体现在以下几个方面:

1.1 课程基本概念多, 理论联系实际少

本课程是材料专业本科生接触到的第一门专业基础课, 涉及大量新概念、新知识, 且相互之间关联性强。学生在学习本课程前和学习过程中没有接触工程实践的机会, 对于具体的材料加工、组织结构和性能关系规律缺乏直观认识, 难以准确把握不同概念的内涵及其关联性。本课程存在内容多, 部分内容难度大, 学时相对不足的问题, 造成学生较难掌握所学知识核心。学生学习过程中容易陷入死记硬背的困境, 出现“工科课程文科化”的窘境。前置概念不理解又会进一步加深后续章节学习的囫圇吞枣, 导致学生学习兴趣严重不足。

1.2 部分概念抽象不直观、学生理解困难

本课程涉及很多抽象的材料科学基本概念, 例如晶体结构、晶体缺陷、晶体缺陷的运动和交互作用、扩散的微观机制等。这些材料的微观结构及其演化过程对于材料的宏观性能起着至关重要的作用, 只有理解其内在联系, 才能真正掌握材料科学的本质, 成为合格的材料专业本科毕

业生和材料工程师或研发人员。这些材料的微观组织结构对于未接触工程实践和前沿科学研究的初学者来说,存在着“看不见、摸不着”的问题,而且学习这些抽象概念需要较强的空间想象能力。目前这部分内容的课堂教学大部分依赖于传统的 PPT 演示,二维图片不直观、不易理解。部分科研条件优异的高校和科研素养较高的教师可以利用科学研究中得到的透射电子显微镜 (TEM) 的照片辅助讲解,但是依然存在二维图片不直观的问题。随着多媒体技术的进步,三维模型和动画已经逐步引入了这部分概念的教学,也在一定程度上缓解了抽象概念的教学难题。

1.3 课堂教学内容和前沿研究联系不紧密

虽然材料科学基础课程为本专业的理论基础课,应以打好理论基础为教学第一目标。但是材料学作为一门应用性学科,新材料的发展日新月异,因此材料科学基础课程的教学应兼顾基础理论的传授和新材料的发展介绍。这样不仅能激发学生提高学习本课程和本专业的兴趣,也能引导加深学生对本课程基本概念知识的理解。同时,介绍国内外的前沿研究进展也是一种很好的课程思政方式,培养学生的理想信念、家国情怀、民族自信,激发学生的进取精神及责任担当。

2 材料模拟计算在材料科学基础课程教学中的作用

根据上述分析,材料科学基础课程的传统教学以“填鸭式”讲授为主,大量抽象性概念导致学生难以构建基本认知,造成学习兴趣不足。对于晶体缺陷等材料微观结构的抽象概念主要依赖于二维示意图讲解,缺乏动态演化过程的可视化,造成学生较难理解材料微观组织演化和材料性能关联关系等材料科学的核心概念。

传统的材料研究以实验为主要手段,是一门实验科学。但是随着对材料性能的要求不断提高,材料应用环境的日益复杂,仅仅依靠实验来进行研究已难以满足新材料设计和发展的要求。计算机计算和模拟技术可以根据有关的基本理论,从微观、介观、宏观尺度对材料进行多层次研究,研究手段包括第一性原理计算、分子动力学模拟、有限元模拟等^[2]。综合运用这些计算模拟技术,可以研究材料在服役条件下的性能演变规律、揭示其失效机理,进而实现对材料组织和成分的设计及性能的改善。在现代材料学领域中,多尺度计算模拟与实验已成为同等重要的研究手段。

虽然以上计算模拟手段已经大量运用于材料科学的研究中,但是在材料科学基础的本科生课程教学中较少涉及。利用不同尺度的计算模拟方法,可以直观展示材料的晶体结构、成键特征、微观结构及其演化,建立材料成分-微观组织结构-性能的关联规律。这一优势为解决材料科学基础课程教学长期存在的抽象概念不易展示、缺乏微观结构动态演化过程可视化提供了很好的技术手段和方案。利用计算模拟方法来展示材料微观组织结构的演化不仅

可以提高学生的学习兴趣、改善教学效果,也是一种在课程教学中引入前沿研究进展、开展课程思政的很好方式。

3 分子动力学模拟在材料科学基础课程教学中的应用

金属材料方向的材料科学基础课程教学包括晶体缺陷、材料的变形和再结晶、晶态固体中的扩散、固态相变等核心内容。这些教学内容都涉及到材料的微观结构及其演化过程,需要从原子尺度上理解这些概念的内涵。分子动力学模拟是一种微观尺度的模拟方法,可以模拟原子或分子的运动和排列方式,为这部分抽象概念的教学提供可视化的工具。下面简要介绍分子动力学模拟的概念,并讨论其在材料科学基础课程教学中的应用。

3.1 分子动力学模拟介绍

分子动力学模拟 (Molecular Dynamics Simulation, MD) 是一种基于经典牛顿力学的计算方法,通过求解原子或分子体系的运动方程,模拟其动态行为,从而揭示材料微观结构与宏观性能之间的关联。其核心在于通过势函数描述粒子间相互作用,利用数值积分算法迭代计算粒子轨迹,最终通过统计力学分析获得体系的宏观性质。该方法突破了实验手段在时空尺度上的限制,能够动态展示材料的相变、位错运动、界面反应等原子尺度过程^[3]。LAMMPS (Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) 是材料科学研究领域最常用的分子动力学模拟软件之一,它由美国 Sandia 国家实验室开发,开放源代码且可以免费获取使用^[4]。LAMMPS 模拟得到的结果可以利用可视化软件 OVITO 进行分析,该软件能够利用原子的 dump 格式坐标观测材料的模拟过程^[5]。OVITO 软件提供了公共近邻分析 (Common neighbor analysis, CNA)^[6]、位错提取算法 (Dislocation Extraction Algorithm, DXA)^[7] 等功能,能准确定位位错、堆垛层错等的分布及其演化,可以用于材料微观变形过程和机制的研究。

3.2 分子动力学模拟在材料科学基础课程教学中的应用案例

材料的变形是材料科学基础课程中最重要的章节之一,涉及材料弹性变形和塑性变形的区别、塑性变形的机制等大量知识点。特别是材料塑性变形的概念既与前置学习的晶体缺陷相关,又是材料强韧化理论的基础,在本课程中起到承上启下的作用,是课程教学的重点。晶体材料发生塑性变形的微观机制主要包括滑移和孪生两种,大部分条件下又以滑移为主。晶体的滑移本质上是借助位错在滑移面上的运动来逐步实现的。目前本课程的教学对于位错运动和晶体塑性变形的教学多采用示意图来进行讲解,缺乏直观动态的展示。

本教学团队探索了利用分子动力学模拟技术来辅助讲解晶体变形过程以及位错运动对于塑性变形的贡献。下面以教学团队长期研究的 WC-Co 硬质合金材料为例来讨

论分子动力学模拟在晶体塑性变形章节讲解中的应用,模拟结果来自于教学团队的日常科研工作^[8-10]。图 1a 为 WC-Co 硬质合金微观组织的扫描电子显微镜 (SEM) 照片,硬质合金为一种金属-陶瓷复合材料,照片中暗色衬度为塑性较好的金属 Co 相,较亮衬度为硬脆的 WC 陶瓷相。这种材料结合了金属较好的塑韧性和陶瓷的高硬度特点,在课程讲解中可以很好地展示金属和陶瓷两类材料不同的变形特征。图 1b 是 WC-Co 材料的分子动力学模拟模型,其中绿色为 Co 相,红色为 WC 相。图 1c 为模拟得到的 WC-Co 硬质合金的应力应变曲线,可以明显观察到材料存在弹性变形和塑性变形两个阶段。根据应力应变曲线的特征,可以将变形分为三个主要阶段:第一阶段:当应变小于 0.02 时,应力随应变增加而线性增加,为弹性变形阶段;第二阶段:应变在 0.02 和最大压缩强度(黑色箭头所示)所对应的应变之间时,应力应变曲线的斜率逐渐减小,表明材料发生了塑性变形;第三阶段:硬质合金达到其最大压缩强度后,应力逐渐降低。通过应力应变曲线的模拟结果,可以很好地向学生展示复合材料结合两种物相力学性能的特点:提高塑韧性金属相的比例,复合材料的强度下降,但是可变形量会提高。图 1d 展示了模拟的硬质合金变形过程中 WC 和 Co 两种物相中位错密度的演化,位错密度演化与图 1c 分析的应力应变曲线三个阶段存在着一定的对应关系。可以看到 Co 相的位错密度显著高于 WC 相的位错密度,而且 Co 相中的位错在更低的应变下即开始增殖。这说明了 Co 相比 WC 相更容易发生塑性变形,WC-Co 硬质合金复合材料发生塑性变形的原因是 Co 相和 WC 相中位错的运动。利用图 1c 和图 1d 的对比分析,可以直观地展示材料变形的不同阶段以及位错对于晶体材料塑性变形的贡献。

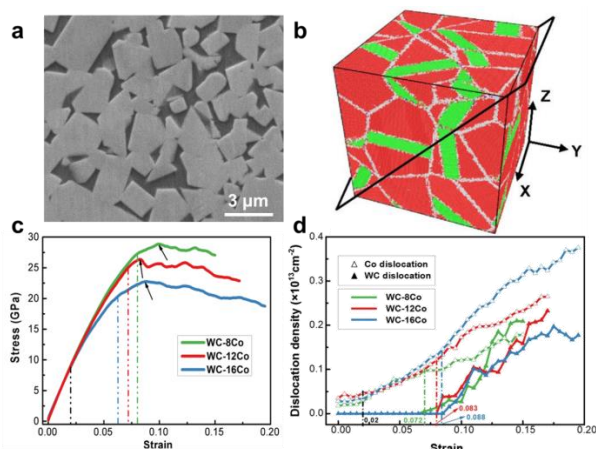


图 1 WC-Co 硬质合金的微观组织、模拟模型和模拟的应变过程及位错密度演化: (a) WC-Co 硬质合金微观组织的扫描电子显微镜照片; (b) WC-Co 的分子动力学模拟模型; (c) 模拟的应力应变曲线; (d) 模拟的位错密度演化

接下来利用分子动力学模拟的优势,可以对材料变形

过程中的位错类型进行可视化展示,形象地讲解晶体材料塑性变形过程中位错的增殖和反应。图 2a 展示了对应不同变形阶段 Co 相中可动位错和不可动位错的密度演化。可以看到随着材料变形量增加到一定程度,Co 相中可动位错密度降低,不可动位错密度升高,说明硬质合金材料塑性变形过程中位错发生了相互作用。位错钉扎主导位错的相互作用,导致可动位错的比例降低,而不可动位错的比例增加。图 2b 展示了 Co 相中的位错分布,以不同颜色代表不同伯氏矢量的位错。图 2c 为图 2b 的局部放大,可以看到高密度位错缠结和复杂的位错网络。图 2d 给出了一个位错反应的例子,肖克莱不全位错通过以下位错反应而被锁住: $1/6[11\bar{2}] + 1/6[\bar{1}12] = 1/3[010]$ 。因此,在材料变形中后期会发生可动位错密度下降,不可动位错密度上升的现象,最终导致材料不能继续发生塑性变形而发生断裂。

以上通过图片的形式展示了不同类型的位错分布以及交互作用,这些位错的交互和演化可以通过模拟的系列变形量的图片连接成为视频,非常直观地展示晶体材料塑性变形过程中伴随的晶体缺陷演化。利用分子动力学模拟的手段有效改善了这部分内容传统教学中存在的抽象难懂问题,让学生可以通过可视化的、动态的演示直观感受材料微观结构的演化过程。结合教学团队科研中的模拟实例,不仅可以让学生对课堂内容有更深入的理解,也通过前沿研究和课堂教学的有机融合提高了学生的学习兴趣和未来从事相关工作的动力。

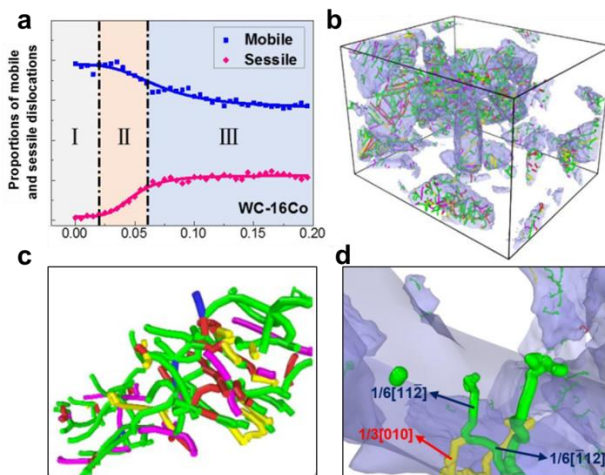


图 2 分子动力学模拟的 WC-Co 硬质合金变形过程中 Co 相中的位错密度演化及位错分布: (a) 位错密度演化; (b) 位错分布; (c) 局部位错形态; (d) 位错反应

3.3 大语言模型人工智能和分子动力学模拟在教学中的结合应用

以上案例概述了分子动力学模拟在材料科学基础本科课程教学中的作用,借助模拟手段可以直观、动态、可视化地展示本课程中讲解的微观尺度的材料基本概念,有效解决这些概念在传统教学中“看不到、摸不着”的痛点。

类似案例均来源于教学团队的日常科研,案例的实现需要具有一定的计算材料学基础,对于本科学生来说实际操作存在着很大的难点。受制于课时限制,课堂上仅能以图片和动画的形式来形象化解释基本概念,激发学生兴趣,没有机会充分展开讨论分子动力学模拟的原理和实现过程。这种只展示结果而不讨论原理和过程的讲授方式对于一些求知欲望强烈的学生来讲会有一种“意犹未尽”的感觉。

随着 DeepSeek 等基于大语言模型的人工智能应用的发展,给克服课时不足造成的前沿研究难以在课堂上展开讨论的问题带来了解决方案。以分子动力学模拟在材料科学基础课程教学中的应用为例,我们可以向学生展示利用 DeepSeek 等大语言模型进行问答,让学生认识到充分利用网络资源通过自主学习的途径,即可了解课堂上展示的模拟手段的原理和实现过程。图 3 为通过 DeepSeek 生成利用分子动力学模拟软件 LAMMPS 模拟 3.2 节中应用案例代码的问答截图,通过人工智能模型即可生成课程案例的模拟代码。借助人工智能的帮助,我们可以大幅度延展课堂的宽度,更容易地实现课堂教学和前沿研究的紧密结合。但是需要注意的是,人工智能只是辅助我们教学的有益工具,并不能取代教师的作用。人工智能基于大量数据进行训练,只能给出训练数据范围内的答案,且不能保证解答的正确性,这是需要教师的专业知识来做出判断的。教师也需要根据课堂的实际情况,合理地利用人工智能,培养学生的学习能力,而不是使学生养成依赖人工智能而放弃自主思考的惰性思维。



图 3 利用 DeepSeek 生成分子动力学模拟材料塑性变形过程的代码

4 结语

为了解决材料科学基础课程教学中抽象概念不易展示的难题,提高专业核心基础课程的教学质量,本文讨论了计算材料学在该课程教学中的应用。结合教学团队的科研方向,利用分子动力学模拟动态可视化地呈现材料微观组织结构及其演化,直观地展示材料性能的微观机制,激发学生的学习兴趣,帮助学生建立材料科学中成分-微观组织结构-性能关联关系的核心研究思路。结合教学团队的科研进展,不仅可以加深学生对课堂知识的理解,也提

高了学生未来从事专业工作的动力。模拟计算融入材料科学基础基本概念教学的探索也可与其他理工科基础理论课程的教学提供借鉴和参考。

【参考文献】

- [1]徐恒钧,刘国勋.材料科学基础[M].北京:北京工业大学出版社,2001.
 - [2]周健,陆海鸣,杨玉荣,等.计算材料学[M].北京:化学工业出版社,2023.
 - [3]单斌,陈征征,陈蓉.材料学的纳米尺度计算模拟从基本原理到算法实现[M].湖北:华中科技大学出版社,2015.
 - [4]A P Thompson, H M Aktulga, R Berger, D S Bolintineanu, W M Brown, P S Crozier, P J in't Veld, A Kohlmeyer, S G Moore, T D Nguyen, R Shan, M J Stevens, J Tranchida, C Trott, S J Plimpton. LAMMPS – a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales [J].Computer Physics Communications,2022(271):10817.
 - [5]A Stukowski. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool [J].Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering,2009,18(1):15012.
 - [6]D Faken, H Jonsson. Systematic analysis of local atomic structure combined with 3D computer graphics [J].Computational Materials Science,1994(2):279.
 - [7]A Stukowski, V V Bulatov, A Arsenlis. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces [J].Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering,2012(20):85007.
 - [8]X Ge, X Liu, C. Hou, et al. Distinguishing contributions of ceramic matrix and binder metal to the plasticity of nanocrystalline cermets [J]. IUCrJ,2020,7(1):42–48.
 - [9]J Fang, X Liu, H Lu, X. Song. Crystal defects responsible for mechanical behaviors of a WC–Co composite at room and high temperatures—a simulation study [J].Acta Crystallographica Section B,2019,75(2):134–142.
 - [10]J Chen, Y Yang, H Lu, X Liu, et al. Mechanical behavior of cermets with different morphology of ceramic grains [J].Acta Materialia,2024(66):119649.
- 作者简介:吕皓(1990—),男,天津人,北京工业大学副教授,主要从事基于多尺度高通量计算的多相合金新材料设计、超细/纳米硬质合金等研发工作。