

2005年度LNM研究组研究进展情况

● 非线性力学课题组（负责人：白以龙）

执行973计划“非线性科学”中的子项“斑图动力学”，用实验和数值模拟方法研究关于斑图动力学的“临界敏感性”概念，揭示了非均匀介质在变形过程中的能量释放率的变化，突变破坏的幕律等现象。

执行自然科学基金重点项目“微-纳米尺度力学行为测量中的若干基本力学问题研究”（10342050）。建立分子表象的描述和分析。开展测针在接近液体表面过程中的受力过程的分析，阐明了液面突跳时的临界特征。发展了分子模型的快速收敛方法，并对原子力显微镜和纳米硬度的典型测量过程中针尖下样品的原子状态进行分子表象的描述和分析。

受自然科学基金项目“统计细观损伤力学中的封闭近似和微损伤耦合效应”的资助，开展了变荷载作用下材料内微损伤演化的实验及理论研究，发展了广义的驱动阈值模型，并将其用于层裂过程的分析。

● 细观力学和微尺度力学课题组（负责人：王自强）

陈少华小组：

对多种薄膜—基底系统进行了纳米压痕实验，并对实验结果进行了分析。给出了基底对系统硬度产生影响时，压入深度与薄膜厚度的比值约为0.75。

对多层包装材料中的界面裂纹进行了理论分析，得到了有限尺寸对裂纹应力强度因子的影响及T应力的影响。

考虑压头尖端曲率半径，利用经典理论，对微压痕实验进行了有限元数值模拟。计算结果表明压入深度较小时，材料硬度的提高并非由于压头曲率半径的影响，相反，曲率半径会使压痕硬度降低。

利用一个简单的模型，即含裂纹的有限宽带条，讨论缺陷不敏感性及相联系的一些概念，最终发现条带的宽度可能存在一个临界尺寸，当条带宽度小于该临界尺寸时，裂纹不可能发生扩展破坏，而是裂纹前方的应力均匀达到材料的理论强度而断开，此时材料有缺陷不敏感特性。

通过力学模型分析细胞重新排列方向的可能性，并解释实验中发现的两个临界值。

● 纳/微系统力学与物理力学课题组（负责人：赵亚溥）

成功地开展了基于BR蛋白光驱动质子泵可控纳米杂交器件的实验研究，论文被国际重要期刊《Nanotechnology》正式录用。

研究了纳米薄膜的弹性模量的尺度效应：建立了一个三维的纳米薄膜晶格模型，并计入了表面弛豫的影响。对得到的非零弹性常数尺寸效应的讨论证实了该模型更具一般性。该论文发表在重要国际期刊：“Journal of Applied Physics, 98: 074306 (2005).”

分析了两种重要的分子力（范德华和Casimir力）对NEMS致动器的失稳的影响。对其控制方程作定性分析可以得到其相应自治系统的中心点、焦点以及鞍点，在相平面上存在同（异）宿轨道和周期轨道，另外该系统还存在Hopf以及叉型分岔。相关结果发表后，被重要国际期刊Phys. Rev. B当年多次引用。

朱如曾小组的研究进展

1. 纳米铜团簇凝结规律的分子动力学研究

指导博士生杨全文采用分子动力学方法对包含147、309和561个原子数的液态纳米铜团簇凝结过程进行模拟研究，结果表明降温速率及团簇原子数对凝结得到常温下的固态团簇结构有重要影响：降温速度越慢，团簇原子数越少，凝结得到铜团簇越倾向生成二十面体结构，反之在模拟时

间内则倾向生成心立方结构，并探讨了该现象的原因。有关结果发表在《物理学报》，2005, 54(9):4245-4250。(SCI系数1.130)

2. 纳米尺度自由圆柱形液体及其与固体接触现象的理论分析与分子动力学模拟相结合研究
指导硕士生魏久安得到如下结果：

(1) 按照Gibbs毛细理论推导了圆柱形液体Gibbs张力表面的半径所满足的代数方程。提供了用切向压力表示Gibbs张力表面的曲率半径和对应的表面张力的公式。这些公式适用于圆柱形自由液体（下称模型I）和与固体接触的圆柱形液体（下称模型II）的圆柱部分。

(2) 对氩的模型（I）和模型（II），在温度90K和102K下，采用L-J势进行了若干种不同原子数的分子动力学模拟。通过模拟和计算相结合得到了Gibbs张力表面以及其表面张力。两种模型的模拟结果都表明Laplace附加压强公式在纳米尺度下仍然适用；并且Gibbs张力表面都落在液气过渡区里面；随着模拟体系的粒子数增多，液体内部均匀区域增大，Gibbs张力表面上Laplace公式的适用程度更加良好，这符合理论预期。

(3) 从对氩的具有不同参数的模型（II）的Gibbs张力表面图上观测了宏观接触角。将观察到的与Young公式的近似形式得到的进行对比，表明Young公式的近似形式在纳米尺度下的适用性不好，并分析了物理原因。

(4) 对于超出Gibbs毛细理论之外的纳观接触角问题，本课题从对氩的具有不同参数的模型（II）的Gibbs张力表面图上观测到纳观尺度上的角度形态，从而深化了对纳观接触角的认识。分析指出了以往文献中对纳观接触角的错误观点，并发现已知的纳观接触角的近似计算公式的结果与观测结果很不吻合，且理论近似值出现明显非物理的数值。这启示我们对近似理论进行修正，从而得到了较满意的新近似公式。

部分结果已被“中国数学力学物理学高新技术交叉研究会第11届学术年会”（2006）录用

3. 贝类粘着的分子动力学模拟研究

参加赵亚溥领导的“贝类粘着的分子动力学模拟研究”的部分理论分析工作。论文已发表在《Materials Science and Engineering A》上（2005, 409:160-166）(SCI系数1.445)

凌中小组的研究进展：

启动国家自然科学基金面上项目《微孔Al₂O₃陶瓷的纳微力学行为与实验表征》工作：

结合上一基金项目研究内容，在纳米压痕实验结果的基础上继续研究了Al₂O₃/SiC nano 陶瓷复合材料的微纳尺度力学行为与材料微结构尺度的相关性，着重探讨两相复合材料的非均匀性质对于压痕实验结果的影响；通过实验数据分析获得采用纳米压痕仪器量测的复合材料的弹性性质，结果与理论结果非常接近。该研究结果为进行新的基金项目中涉及到的微孔Al₂O₃陶瓷材料的微结构效应的研究打下基础；

对于三种晶粒尺寸的微孔Al₂O₃陶瓷材料进行初步的纳米压痕实验，探讨加卸载过程中非密实材料的力学响应；初步研究结果表明，微结构效应在加载过程中较明显，尤其是小尺寸晶粒的微孔材料；而在卸载时，响应总是弹性的，微孔的影响很难在宏观力一位移曲线上得到；选择一含有规则微孔（孔径为20nm）的氧化铝薄膜为研究材料，探讨在浅压痕实验中该材料的力学响应。

● 材料力学性能与内部结构课题组（负责人：洪友士）

利用表面机械研磨，即一种剧烈塑性变形方法，使高纯块体Co（晶粒尺度~30 μ m）的表层组织细化至纳米晶粒。利用TEM/HRTEM观察，揭示了低层错能HCP-Co和FCC-Co的塑性变形机制。

利用高分辨TEM研究了纳米镍(NC-Ni)在室温和液氮温度的拉伸变形机制，在实验中拉伸应力状态下观察到PDMPs(Partial Dislocation Mediated Processes)。表明NC-Ni流变应力具有温度及应变速率敏感性，局部应力控制晶界原子结构的松弛和点阵重排。

Al固溶体经历强烈塑性变形时，应变诱导晶粒细化至纳米尺度。高分辨TEM观察表明，晶界及其附近位错密度比晶内高1-2个量级，晶界处可形成复杂位错组态，高密度位错区可能形成局部非晶化。

设计并加工了在材料试验机上使用的高压扭转(一种剧烈塑性变形方法)夹持装置,并获得了不同变形量的试样。利用电子背散射衍射获得了处理后纯铜试样上晶粒尺寸沿径向的分布。表明晶粒细化程度随应变量的增大而增强,并和Stuwe等效应变之间存在幂函数关系。

在水中悬浮隧道(SFT)力学问题研究方面:给出了缆索系统及其与SFT管体耦合的涡激振动响应规律,和SFT重浮比变化相应的动力响应变化特征;表明了曲线形SFT结构几何参数对温度内力的影响规律,以及波浪场作用下曲线形SFT的动力响应程度。

武晓雷小组的研究进展

在纳米金属塑性变形机制方面,取得以下研究成果:

1. 研究了纳米金属Ni的塑性变形机制,阐明了三种孪生变形方式;
2. 对纳米金属Ni进行多种变形实验,研究了塑性变形机制的尺度效应,揭示了不全位错控制的塑性变形机制及其影响因素;
3. 研究了低层错能金属Co两种晶体结构(FCC与HCP)的塑性变形机制,在超细与纳米晶粒中均观察到层错,表明不全位错为媒介的变形过程可在跨尺度范围存在。

● 微米/纳米尺度及复杂固体力学课题组(负责人:魏悦广)

1、实现了微米厚度薄膜及界面性能的直接实验测量

文献中报道的已有的薄膜撕裂实验主要是针对百微米至毫米厚度薄膜而进行的,并在薄膜与基体之间有一胶层。为了将撕裂试验方法应用到微/纳米厚度薄膜的测量上,基于一种微型拉、压、弯多功能试验机,通过设计加工配制了万向夹头,同时购制了一微型传感器,实现了微/纳米尺度测量的目标。

2、实现了无胶层微米厚镀膜/基体界面性能的直接实验测量

以往针对薄膜/基体体系的撕裂实验,在薄膜和基体之间存在一胶层,这在一定程度上限制了该实验对微/纳米厚度或更小厚度薄膜的应用。我们成功地实现了对陶瓷基上铜镀膜的直接实验测量。

3、薄膜/基体界面行为的分子动力学模拟

当薄膜厚度为纳米尺度时,采用分子动力学方法模拟了薄膜撕裂实验过程,所模拟出的能量释放率随加载位移的变化特征与微米膜厚的实验测量结果非常相似。撕裂实验的分子动力学模拟结果展现了一个重要的结论:界面稳态断裂时,能量释放率远大于形成界面的断裂能,剩余能量被原子运动所耗散。

● 材料力学性能优化设计课题组(负责人:梁乃刚)

1. 基本完成了自然科学基金委重点基金《损伤积累统计和地震预测》2005年的计划。在地震预测方面有重要进展。由于长期的基础研究(包括统计细观损伤力学、实验研究及数值模拟),超级计算的支持以及在加卸载响应比理论方面的不懈努力(程序的改进、参数的调整、经验的积累等),用加卸载响应比对未来一年左右时间尺度(中期预测)强震发生地点上,有很大的提高。例如2005年1月1日至12月5日,在中国大陆发生了13个 $M_s \geq 5.0$ 地震,其中12个落在我们于2004年底的加卸载响应比预测区内。

2005年10月8日,南亚历史上二十年来最大的一次地震(Lat= 34.37; Lon= 73.47; Depth= 12. km, M7.6)袭击了巴基斯坦北部地区,造成了8万多人死亡,震惊了全世界。对这次巴基斯坦地震,我们用加卸载响应比理论作出了明确的中期预测。早在2003年底,我们就开始着手进行欧亚地震带(30° -50° N, 30° -90° E)的加卸载响应比地震趋势的研究,目标是预测该地区的大地震。2004年3月,利用欧亚地震带地区2001 -2003年的地震数据资料,在中国科学院计算机网络信息中心超级计算中心的联想深腾6800超级计算机上,进行了加卸载响应比空间扫描计算。扫描结果发现一个很大的加卸载响应比异常区。根据扫描结果,我们预测:“阿富汗及其邻国的加卸载响应比持续为高值,所以该地区未来1-2年内发生大地震的可能性很大”。2004年4月6日发生在

阿富汗东北部的6.8级强烈地震 (Hindu Kush Region, Afghanistan, Lat=36.59°, Lon=70.85°)。2005年10月8日,在上述异常区内发生了这次巴基斯坦M7.6地震。

最后,2005年在非均匀脆性介质的灾变破坏问题认识上有进步的深化通过统计细观损伤力学、实验研究及数值模拟研究,初步汇集到一个结论:即本构曲线、时程曲线的峰值点的一致性。它与地震的成核也是一致的。这点可能是未来提高地震预测精度的重要方向。

2. 国家重点基础研究发展规划项目《灾害环境下重大工程安全性的基础研究》分项的进展顺利。提出了模拟岩石堆积结构变形损伤破坏的新模型与新方法,旨在发展模拟地震形成发生条件的系统软件。提出了模拟颗粒介质的微观力学模型——广义链网模型。导出了颗粒刚体转角和微观转角的微观表达式。研究了分别由宏观试件特征尺寸和颗粒尺寸导致的尺度效应与局部损伤破坏的全局效应,编制数值计算程序,并与离散元和实验结果进行了对比。

申请并获得国家自然科学基金面上基金《基于材料微结构及其演化的弹塑性损伤本构理论》。在预研中,基于“对泛函势”理论,提出了一种新的材料模型——“取向元组集模型”,该模型能模拟材料从弹性变形,塑性变形直至损伤破坏全过程的力学行为。对变形损伤所诱导材料各向异性的描述是传统连续介质力学的一个难点,而本模型对各向异性的描述具有物理概念清楚

与计算简明高效的特点。目前,“取向元组集模型”的基本理论框架已基本完成,并开发出了弹脆性损伤破坏和弹塑性损伤破坏程序,与典型实验初步比较结果符合较好。

开发了“取向元组集模型”的三维数值软件,并着手模型模块与商业软件的集成工作,为今后的推广与应用创造条件。

完成了院知识创新工程二期重大创新方-‘工艺与力学’课题的研究任务,通过激光热场变化过程中材料相组织与微结构演化规律的研究,引入了连续多重相变模型;系统分析了脉冲激光作用下球墨铸铁模具的微结构演化,得到了激光时空特性、材料非均匀性等因素对激光致材料表面强化及终态组织分布的影响规律,提出了模具激光表面硬化工艺图。

● 材料冲击动力学与新型材料力学性能研究组 (兼LNM公共实验组)

(负责人:戴兰宏)

一、实验室工作方面

主持负责05年LNM装备项目“原位纳米尺度力学测试分析系统”的项目装备商家调研、谈判、合同签订(扫描探针显微镜部分);

主持负责LNM实验系统技术岗位人员的招聘工作;

起草力学所冲击动力学实验研究平台十一五装备发展规划报告;

LNM公共实验组日常运行管理。

二、科研工作与人才培养

联合主持国家自然科学基金重点项目“强动载荷下金属的流体弹塑性响应研究”、主持国家自然科学基金面上项目“探索大块金属玻璃剪切带形成机制”。在国防科工委空间碎片十一五专题研究计划中,争取到一项目“新型梯度复合Whipple空间防护结构的研究”的立项,目前该项目已通过可行性论证。

● 微尺度流动研究及复杂流动实验课题组 (负责人:李战华)

李战华小组

1. 准备中科院知识创新工程重要方向项目“微系统力学”(KJCX2-SW-L2)和国家基金(10272107)结题,开展以下工作:微尺度管流的粘性热耗散研究;纳米流体扩散特性的研究等。

2. 开展MicroPIV的实验装备研制,目前部件已定购,正在调试阶段。

施红辉小组

在国内首次实现了气/液界面上的Richtmyer-Meshkov不稳定性的实验，获得了不同马赫数下尖钉和气泡增长的定量实验数据，整理的论文正在向相关杂志投稿。中科院力学所LNM提出的流体界面上RM不稳定性的研究思路，被中国工程物理研究院列为2005年度中物院与国家自然科学基金联合申请项目；

1. 水下超声速气体射流的研究，在去年的研究结果的基础上，今年实现了流场可视化与脉动压力的同步测量，进一步确认了流体振荡的机理及其频率，这在国际上还是第一次；

2. 研究了超声速液体射流的气动特性，分析了激波脱体距离与射流马赫数的关系。研究了非牛顿流体在超声速气流中雾化过程，分析了伸长粘度在具体实验条件下所起的作用。

● 复杂流动的多尺度模型与数值模拟课题组（负责人：何国威）

(1) 映射封闭逼近（MCA）：MCA是一个演绎性的解析理论，我们发展的映射封闭逼近方法正确地描述扩散过程中概率密度函数形状和速率的演化，由此得到了化学反应流的分子扩散模型。在此基础上，我们发展完全封闭的湍流混合和反应的方程组。

(2) 大涡模拟的时间关联：在均匀各向同性湍流的基础上，我们发展了剪切湍流的时间关联模型，数值模拟初步验证了该模型。

(3) 纳微流动的混合算法：以朗之万方程为基础，发展了适合滑移边界库爱特流的混合算法。

● 凌国灿研究组(学术顾问)

用DNS研究并获得了展向不同扰动对尾迹型剪切流中涡量分布的影响。从涡量场从展向向流向及垂向的重要显著转变阐明了旋涡位错的实质及动力学。刻画了扭曲链式及由旋涡撕裂/再联组成的周期性大尺度图斑状位错两类不同的位错结构，用子波分析及POD分解分析了流动演化的非线性及转捩性态。研究成果应邀在2005年6月第3届MIT计算流体与固体力学大会“Vortex Dominated Flow” Mini-symposium 上作Key Note Lecture，获得好评和对报告的感谢。报告题为：“具有不同展向不均匀性的尾迹型流动中的二类旋涡位错数值分析”。

应邀在2005年英文专著“Vortex Dominated Flows” (editors: Denis Blackmore, Egon Krause, Chee Tung, published by World Scientific)撰写第九章“A Numerical Analysis of Vortex Dislocation in Wake-type Flow with Different Spanwise Nonuniformity” (此卷为“A Volume Celebrating Lu Ting’s 80th Birthday”), 阐述了我们最新关于旋涡位错的主要结果。