

要闻

您现在的位置： 首页 >> 要闻 >> 正文

我校机械学院赵军华教授团队在固体力学权威期刊JMPS发表论文

发布日期：2019-06-04 来源：机械工程学院 文：纪加超；图：纪加超；审核：赵军华、方俊

近日，我校机械学院赵军华教授团队在国际公认的固体力学权威期刊Journal of the Mechanics and Physics of Solids (JMPS)上发表了题为“Novel nonlinear coarse-grained potentials of carbon nanotubes”的科研论文，这是赵军华教授团队首次在2014年发表JMPS基础上的又一次突破。论文建立了一种完整的碳纳米管非线性粗粒化势函数，利用该势函数可以有效地描述碳纳米管管束和碳纳米管网络的非线性力学行为，同时采用该粗粒化势函数的计算时间比采用全原子模拟的时间减少了2-5个量级，从而为设计和组装基于碳纳米管的柔性微纳器件提供必要的理论支持。

从低维到多维碳纳米管宏观结构(如：碳管阵列、碳管巴基纸、碳管薄膜、碳管海绵等)在微纳器件等领域有着非常好的应用前景，定量得到其力学性能对精确设计和组装微纳器件是至关重要的，而采用全原子分子动力学方法预测其力学性能在计算尺度上面临极大的挑战。2014年，我院赵军华教授等根据粗粒化等效和能量相等原理，利用连续力学方法建立了碳纳米管线性粗粒化势函数(J. Mech. Phys. Solids, 2014, 71: 197-218.)。

在以上研究成果基础上，赵军华教授团队对碳纳米管非线性粗粒化模型进一步开展了深入研究。基于准确描述碳材料原子间相互作用的REBO势(ReactiveEmpiricalBond-Orderinteratomicpotentialofsecondgeneration)函数，利用连续力学理论建立了手性依赖的高阶(非线性)拉伸及弯曲粗粒化势函数解析表达式。此外，采用Lennard-Jones 24-18势函数优化了粗粒间的非键相互作用。通过与现有实验及全原子分子动力学模拟结果进行对比，验证了本文提出的非线性粗粒化势函数具有较好的准确性。

论文第一作者是我校机械学院2017级博士生纪加超，通信作者为赵军华教授，南京航空航天大学纳米科学研究所的郭万林院士为论文的共同作者。该研究得到了国家自然科学基金面上项目(No. 11572140)，江苏省杰出青年基金(No. BK20180031)和111引智计划(No. 18027)的支持。

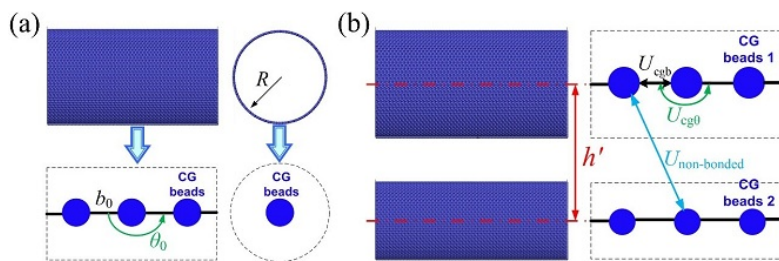


图1全原子碳纳米管及其粗粒化模型示意图

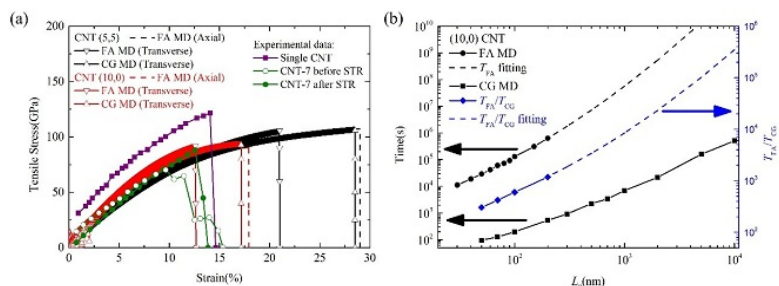


图2 (a)粗粒化模型、全原子模型以及实验结果对比图；(b)计算时间对比图

点击排行 | 精华推荐

- 江南大讲堂2019年教育专场之“新时…
- 江苏省委宣讲团来校宣讲党的十九届…
- 我校大学生记者团在江苏省首届大学…
- 江南大学艺术课堂之“情满江南”音…
- 学校党委中心组举行“不忘初心、…
- 党委宣传部、党委教师工作部开展“…
- 江南大学“艺术课堂”之经典乐堂《…
- 我校唐忠宝教授受邀参加党的十九届…
- 我校召开2019年度党的建设与思想政…
- 我校参加中国高等教育学会宣传工…

视点

更多>>

- 【江南讲堂】《百家讲坛》国庆特别节目…
- 【江南视点】全面落实党代会精神 加速…
- 【江南视点】【学习进行时】学生工作部…
- 【江南视点】【学习进行时】化工学院做…
- 【江南视点】【学习进行时】江南大学多…
- 【江南时评】校党委理论学习中心组举行…
- 【江南视点】守望育人质量生命线 书写…

校报

更多>>

江南大学报
JIANGNAN DAXUE BAO

“致敬70年·祖国颂”
——我校举行庆祝中华人民共和国成立七十周年系列活动

校党委理论学习中心组举行“不忘初心、牢记使命”主题教育第二次专题学习



官方微信二维码

新浪微博二维码

分享:

0

上一篇: “立德树人、打造金课” 2019教学创新发展论坛在我校召开

下一篇: 我校在2019全国高校科技创新指数排名中位列20



地址: 江苏省无锡市蠡湖大道1800号

邮编: 214122

联系电话: 0510-85326517

服务邮箱: xck@jiangnan.edu.cn

技术支持: 信息化建设与管理中心

校内备案号: JW备170083



微信服务号



微信订阅号



e江南APP