

## 非线性力学国家重点实验室 2007 年科研进展

何国威

中国科学院力学研究所, 非线性力学国家重点研究室, 北京 100190

近年来, 非线性力学国家重点实验室 (LNM) 在坚持固体与流体的非线性力学行为和规律的学术方向下, 突出了多尺度力学和跨尺度关联的研究. 这既与国际上近年来出现的对多时空尺度演化和斑图的非线性科学问题的重视相互呼应, 又反映了 LNM 在科学前沿和重大需求的交叉点上长期探索所形成的发展特点. 实际上, 多个时间/空间尺度非线性耦合的行为, 是非线性复杂系统中至今尚未阐明的一个关键科学问题. 深入探索这一关键问题的科学内涵和规律, 对于许多重大应用具有根本性的意义, 特别是对于正在兴起的微流控和微/纳米技术及其相关体系行为的表征和测量; 航空和过程工程中复杂湍流的多过程耦合机理和模拟; 重大工程和自然环境的突发灾害的多尺度串级规律和预测, 等等. 认真加强在这个领域的学术交流和与相关应用部门的互动, 将促进 LNM 把非线性力学的研究提高到一个新的高度, 形成具有国际先进水平的研究成果, 和对重大应用产生创新性的推动作用.

在 2007 年度, LNM 的“材料强度及灾变的跨尺度力学研究”创新群体获国家自然科学基金委员会的正式批准, “块体金属玻璃剪切带形成与演化动力学”项目获国家杰出青年基金, 整个实验室的科研经费创历史最高. 白以龙院士获得 2007 年国际 TMS 会议的 John Rinehart 奖. 该奖项表彰的是在材料动态行为领域做出杰出贡献的学者, 今年是第 4 次颁奖, 白以龙院士是第一位获得此奖项的中国科学家.

2007 年, LNM 围绕着“多尺度力学”的主要科研成果如下:

### 1 跨尺度统计的非线性力学

(1) 深入研究了非均匀脆性材料灾变前兆的普适性和特异性. 利用平均场模型, 分析了灾变的敏感性前兆, 发现在灾变前, 材料的响应具有  $-1/2$  阶的奇异性, 相应的敏感性具有  $-3/2$  阶的敏感性, 并在实验中得到了初步验证.

(2) 针对石油部门的爆炸采油问题, 利用前期所发展的驱动非线性阈值模型, 分析了水泥、岩石等脆性非均匀材料在爆炸载荷作用下的损伤演化和破坏行为, 得到了刻画这些材料损伤演化行为的参数. 对相关材料的实验表明, 这些模型和参数可以恰当地刻画水泥等非均匀脆性材料的动态破坏过程.

(3) 进一步考察了样品表面有限深度液膜的存在对原子力显微镜 (atomic force microscopy, AFM) 测量的影响, 着重分析了液桥形成和断裂的临界高度、针尖受力等与液膜厚度之间的关系, 修正和完善了对前期的部分结果.

(4) 进一步深入研究了前期所提出的分子统计热力学 (molecular statistical thermodynamic, MST), 由于该方法中用到了局部简谐近似和经典近似, 因此重点考察不同

温度和变形状态下的这些近似的适用性. 进一步研究了前期所发展的集团统计热力学 (cluster statistical thermodynamic, CST) 方法, 重点考察了其中的虚拟力 (ghost force), 发现与准连续 (quasi-continuum, QC) 方法以及其它多尺度方法相比, CST 方法可以避免虚拟力的产生. 因此, 我们所发展的 CST 方法可以建立一个较准确的系统的自由能函数, 避免不同区域界面上虚拟力的产生.

### 2 冲击动力学与新型材料力学性能

(1) 对块体金属玻璃剪切带形成与演化行为进行进一步研究. 结合实验和理论分析, 研究应变率对块体金属玻璃剪切带形成的影响, 发现高应变率促进剪切带的形成. 针对金属玻璃在纳米压痕中的堆积 (pile-up) 现象, 提出了一种新模型来表征材料硬度、杨氏模量和应力-应变等力学性质, 模型计算结果与数值模拟值相吻合.

(2) 纳米压入下金属玻璃锯齿状不稳定塑性流动行为的分子动力学 (molecular dynamic, MD) 模拟研究. 大量的实验研究发现, 金属玻璃在纳米压入的载荷-位移呈现出明显的锯齿状特征. 而且, 这种锯齿状流动具有明显的应变率依赖性, 表现为随着应变率的提高锯齿状流动逐渐减弱. 一般认为这种锯齿状流动与材料内部形成的剪切带密切相关, 但由于金属玻璃的剪切带宽度一般在纳米尺度, 而这些纳米尺度剪切带的形成起源于更小尺度的原子团簇的运动. 因此, 常规的实验手段难以进行研究, MD 可以进行探索研究. 在形成金属玻璃模拟样品的基础上, 利用 MD 对二元金属玻璃体系的纳米压入过程进行研究, 重点考察应变率对锯齿状流动的影响. 模拟结果证实高应变率下锯齿状流动更为明显, 与实验观察定性相符.

(3) 研究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. 基于压痕实验方法对于材料微尺度非均匀敏感性, 探讨微米量级的氧化铝晶粒内含有 SiC 纳米颗粒这类结构陶瓷材料的非均匀性对于实验结果的影响. 采用量纲分析对不同晶粒尺寸的微孔  $Al_2O_3$  陶瓷材料的纳米压痕实验结果进行研究, 探讨研究材料的力学响应与微结构尺寸效应的相关性. 实验研究一种 Zr 基金属玻璃在高速冲击压缩下的变形与断裂特征, 分析了该材料在冲击压缩时裂纹形成与发展的宏观力学条件.

### 3 金属材料微结构与力学性能

(1) 关于材料微结构及其演化的弹塑性损伤本构理论的研究: (i) 基于材料微结构及其演化的弹塑性损伤本构理论——构元组集模型, 取得下面的阶段性成果: 准脆性材料裂纹扩展路径预测; 多晶体材料的弹塑性本构关系和塑性屈服面的演化; 编制完成弹塑性损伤构元组集模型的 ABAQUS 用户材料子程序 UMAT; (ii) 研究颗粒聚合物和颗粒复合材料的力学特征——广义链网模型: 把广

义梁链网模型作为颗粒复合材料的细观模型,使用基于应力重分配的新算法,研究了断裂与材料结构的关联.通过与大量文献结果的比较,验证了程序的有效性;建立了三维广义梁链网模型.使用该三维模型研究了颗粒体积含量对最大载荷、延展性和裂纹模式的影响,并展示断裂过程的三维效应.

(2) 关于轻质高强复合材料结构设计 with 高设计许用值应用技术:建立细观固体力学复合材料弹塑性损伤破坏一体化新型本构理论,发展新型的数值模拟方法,对复合材料层压板的非线性力学性能与强度进行精确预测,并发展损伤诊断方法与剩余寿命评估方法,服务于新型战机高性能复合材料的发展需求.对在研型号与下一代机型研制提供技术支撑.目前,已经对细观固体力学纤维复合材料的基本力学性质进行理论分析,初步提出了各向异性复合材料力学性能与强度预测的基本原则.

(3) 加卸载响应比理论:进一步扩展加卸载响应比理论的应用领域,目前正在将其与损伤力学相结合,发展一种基于加卸载响应比理论,包含愈合机制的新型本构理论,以期不仅用于对地震的预测预报,而且将用于对工程建筑物的失效预测,并已取得初步成果.

(4) 一方面对波浪载荷作用下水中悬浮隧道的动力响应做了比较详细的计算模拟,编写了任意形状物体波浪载荷的计算程序,结合已有的结构有限元计算方法,可以对水中悬浮隧道在不同波浪条件下的波浪载荷及动力响应进行数值模拟.另一方面,在已有工作的基础上,进一步深入研究了水中悬浮隧道的涡激振动问题,特别是锚索的涡激振动.现有商业软件(如 SHEAR7 等)只能计算锚索在垂直于水流方向的涡激振动,针对这一不足,考虑到水中悬浮隧道锚索涡激振动的特点,建立了锚索在顺流向和横流向(即垂直于水流方向)耦合的涡激振动模型,该模型的计算结果与已有实验结果吻合较好,进一步完善了水中悬浮隧道涡激振动的计算方法,同时也为进一步开展疲劳寿命的计算打下了基础.

#### 4 生物及仿生材料力学

(1) 提出基于表面微结构,用纳米压痕仪精确测量昆虫翼材料力学性能的实验方法,并使用该方法对昆虫翼的材料力学性能进行了测量.与传统方法的结论相比,所得结果更为合理精确.例如:所测得的较为精确的蜻蜓翼翅膜杨氏模量接近传统测量结果的两倍,成功地解决了目前扑翼飞行机制研究中所遇问题.进一步研究发现:(i) 昆虫翼翅膜的表面微结构能够减少运动中翼的表面阻力;(ii) 蜻蜓翼翅膜的表面微结构不仅具有优异的自清洁性和超疏水性,而且具有良好的光透性.这种特殊的表面微结构如应用于自清洁的汽车挡风玻璃、建筑采光玻璃等的仿生设计上,具有十分广泛的应用前景;(iii) 死与活的昆虫翼力学性能的主要差异源于翅脉中的淋巴液供给.

(2) 仿生动物及昆虫黏附系统共同具有的各向异性特性,研究了各向异性材料的黏附强度及黏附力,发现黏附强度及黏附力与外力拉伸角度及材料内纤维排列角度密切相关.当外力拉伸方向与材料刚性最大方向(平行排列纤维的轴向)一致时,黏附强度与黏附力最大;当方向互相垂直时(外力方向与材料刚度最小方向一致),黏附强度与黏附力最小.随着各向异性程度的增大,最大黏附强度能够超过最小黏附强度一个数量级,从而揭示了各向异性在动物及昆虫黏附系统中的作用,产生方向控制的黏附强度,使得动物及昆虫很容易实现黏附与脱黏的机制.该研究为

设计生物传感器、新型的强黏附材料及适用于任何表面行走的微型机器人提供理论指导;

(3) 利用二维黏附模型,分析了黏附生物分子感应环境力及变形的过程.随着环境力或变形的变化增大,黏附面积减小,当环境力或变形达到某个临界值时,黏附分子将突然分离.该工作进一步证实了三维模型结论的可靠性.也为医学上治疗由于细胞黏附引起的病变提供了理论指导.分析了横观各向同性材料的黏附接触问题,给出了横观各向同性材料接触的理论解,并为研制黏附感应器提供了借鉴.

(4) 仿生生物黏附系统的多纤维结构,假设单根纤维缺陷不敏感,每根纤维承受相同的载荷(equal loading sharing, ELS),分析了纤维几何结构对黏附力的影响,发现可以通过调整纤维的几何结构优化结构的黏附力,并从理论上约束了文献中 ELS 的适用假设.分析了不同压头与基底之间毛细力的影响,考虑了压头与基底之间的距离,环境湿度,接触角等因素,最终发现,毛细力将增大压痕的接触面积,从而导致测量硬度值偏低的现象.

#### 5 材料介观力学性能表征及其尺度效应

(1) 通过实验观察纳米晶粒的塑性变形方式,揭示了纳米金属非均匀塑性变形机理,从原子尺度阐明了位错、孪晶和层错的形成过程,以及对宏观力学性能的影响.(i) 纳米晶粒变形时,形成“晶界变形区”,与晶粒内部具有不同的塑性变形特征,晶界变形区是形成位错的“源”和吸收位错的“阱”,存在高密度的几何必需位错,协调晶界变形.(ii) 在一个纳米晶粒内部,可以同时进行孪生、位错滑移和层错形成.(iii) 纳米晶粒仍可变形诱导细化,提高强度.(iv) 纳米金属塑性变形具有应变率敏感性.

(2) 金属内部可因剧烈塑性变形而形成高密度空位,通过实验证实纳米金属中高密度空位是以 Frank 位错环的形式存在,与位错强烈交互作用,提高强度;纳米晶粒具有显著的快速扩散特征,三晶交、晶界、位错、层错等以及应变梯度协同诱发快速扩散;利用纳米尺度快速扩散效应,提出原位制备体纳米结构材料的思路,并获得纳米金属材料.

(3) MD 模拟纳米硅在金刚石原子力针尖加载下位错的可动性.在硅晶体结构引入二个不全位错,应用 MD 模拟金刚石原子力针尖加载,发现针尖加载后刃性位错没有运动.应用 Peierls-Nabarro 模型分析得到硅晶体位错运动需要 6.8 GPa 剪切应力;MD 模拟结果表明原子力针尖加载对位错的作用的剪切应力仅为 0.35 GPa,远小于位错运动所需要的值.解释了原子力针尖加载的模拟位错没有运动的现象.

(4) 应用 MD 模拟了纳米材料二氧化硅的脆性断裂行为. SiO<sub>2</sub> 是微电子机械系统的结构材料,对其进行力学性能的研究对提高微电子器件的使用寿命有重要的意义.应用 MD 模拟得到材料断裂的临界值  $K_{md}$ . 并应用 MD 计算了材料的表面能和材料的剪切模量.应用 Griffith 弹性断裂理论得到材料断裂韧性的理论值  $K_{Griffith}$ . 模拟结果和理论分析比较符合.

#### 6 新型材料及结构的多尺度力学

(1) 实现了微米厚度薄膜界面性能的直接实验测量和开展了系统的实验研究.基于自行改进的微型撕裂实验装置,开展了系统的微米厚度镀膜/基体界面力学性能的实验和反问题研究.以往针对薄膜/基体体系的撕裂实验,仅

能获得撕裂力随薄膜厚度的变化,或者给出界面能的粗略估计.采用人工神经网络方法,结合有限元模拟和实验测量,成功地获得了对薄膜/基体界面能和界面强度的测量.

(2) 开展了系统的纳米结构材料力学行为的有限元和分子动力学模拟研究,揭示了若干重要新现象.当试样尺寸小到纳米量级,由于比表面积的增大,表面效应相对于材料的变形不可忽略.作为上述跨尺度力学特征的一个应用,采用有限元和分子动力学方法研究了纳米单晶结构试样的受力和变形、韧脆转变以及应力应变曲线等特征.在研究结果中清楚地展现了表面/界面效应和尺度效应.

(3) 用解析函数方法确定半平面裂纹构型中,集中点力作用下的基本解.利用这个基本解,初步完成用数值方法求解畸变区的程序编制和程序调试;获得力场加载时,含裂纹体裂尖附近一个经过初次驰豫的、铁弹畸变区几何和畸变百分比的定量信息.

### 7 纳/微系统力学与物理力学

在纳米材料弹性模量的尺度效应方面,针对纳米线/管/带等的弯曲情况,研究了同时考虑表面迟滞和表面张力的影响,研究结果发表在 *Nanotechnology* (2007, 18(29): 295701) 上.采用量子力学/分子力学 (quantum mechanism, QM/molecular mechanism, MM) 多尺度模拟方法研究了分子马达中的螯合作用,从电子层次认识了连接机制,通过分子动力学模拟比较了标记组氨酸的肽链在不同表面上的吸附特性,并分析了旋转分子马达的稳定性.在纳电子机械系统 (nano electro-mechanic system, NEMS) 中的分子间力的影响方面,继续研究了毛细力和 Casimir 力的影响;在电润湿方面的实验研究方面,得到了液滴在电场下的新的失稳模式和电击穿过程.

与北京大学微电子所和天津大学精密仪器系开展了电驱拱形微制动器的研制.该制动器利用了电驱装置简单和快速响应的特点.拱形的结构受力到临界时会发生突跳失稳,整个系统刚度降为零.所以该结构作为阀门装置,有极快的响应,适合于对流量的精确控制.但静电驱动装置会有一个吸合的失稳,一旦该失稳发生,微结构将黏附在电极上,系统报废.在实验和计算上给出了结构发生突跳但不发生吸合的区间.同时在微/纳米力学中的界面/表面的研究也取得一些进展.主要是将微力学里作为基石的 Stoney 公式做了系统的拓展.薄膜/衬底的几何尺度,边界条件,薄膜里存在残余应力/应力梯度的情形和界面受损状况都包含在新的模型里.而且系统地展示了研究工作是针对更一般的情形,模型在特定条件下能够回复到原先一些学者的模型.对在 MEMS 加工领域广泛使用的晶圆键合工艺对界面的破坏 (特别是位错产生的破坏) 引发的微复合结构内应力/应变的改变也做了较为全面的研究,该研究揭示了微结构在界面受损的情形下,其应力/应变会有很强的尺度效应.

### 8 纳微米尺度流体动力学

(1) 微尺度近壁流动研究:利用 LNM 实验室 MicroPIV 系统,对微流道近壁 (250 nm~2 μm) 进行流场测试.将实验测量的速度剖面与三维 White 理论解及二维 Poiseuille 速度剖面进行比较,发现微尺度矩形管道的高宽比  $\alpha=0.35$  时,实验速度测量值与二维速度剖面的差别达到 5%,与三维理论值相差小于 3.6%.说明微管道高宽比  $\alpha$  对速度型的影响;利用 200 nm 示踪粒子进行流场显

示,发现近壁区速度测量值明显增大现象.用 50 nm 粒子进行验证,发现近壁粒子分布和显微显示对速度测量的影响,对分析近壁流动实验结果有重要意义;利用流体力学速度场测量方法,对不同材料壁面的微管道内电渗流速度剖面进行测量,采用 20 μm 高、50 μm 宽的管道测量 10 个速度值.测量出玻璃与聚二甲基硅氧烷 PDMS 壁面材料引起近壁速度值不同,可用于对壁面  $\zeta$  电势的估计.

(2) 纳米粒子布朗运动研究:利用 LNM 实验室 MicroPIV 系统,分别对 200 nm、50 nm 示踪粒子的布朗运动进行观测.实验结果证明 200 nm 粒子扩散系数实验值仍符合 Einstein-Stokes 公式的理论预测值.50 nm 粒子的测量结果出现偏差,正在进行分析.

(3) 液滴热毛细迁移:液滴热毛细迁移是神州四号飞船搭载的科学实验,具有重要的微重力流体物理理论与实际应用意义.但过去所建立的理论实验结果明显不符.针对实验所对应的大  $Ma$  数液滴定态热毛细迁移,发现过去所建立的理论存在物理上的不一致性,即病态热流边界条件,可以导致迁移过程的非定态.为了验证满足热流边界条件下的准定态假设,通过引入热源以保证一致的热流边界条件,并获得理论分析解.结果表明,液滴的热毛细迁移速度随着  $Ma$  数的增加而减少.

(4) 圆柱尾流:圆柱尾流作为流体力学富含旋涡和剪切层的复杂流动典型例子,理论、数值和实验研究很充分,近年来为了研究粒子与旋涡作用中轨道的分岔和混沌行为及混合机理而引进新的理论模型,即 JTZ (Jung-Tél-Ziemniak) 模型.我们推广了 JTZ 模型,使之成为可以覆盖整个尾流区的非定常 Karman 涡街模型,在此基础上模拟的粒子与旋涡相互作用分布与实验符合的很好.广义 JTZ 模型有助于进一步研究粒子轨迹的分叉及混沌特性.

### 9 湍流的理论与数值模拟

(1) 复杂流动的多尺度模型与数值模拟:主要研究方向是以湍流为中心的复杂流动的统计理论,计算模型和大涡模拟方法.这里的复杂流动是指湍流与其它物理因素的耦合,本年度的工作重点是具有复杂边界湍流的大涡模拟方法.主要科研成果为:(i) 发展了大涡模拟和进入边界混合法,模拟了 SDF003 机翼运动时的边界层转捩现象;(ii) 发展了非结构重叠网格方法,处理复杂和运动边界的流动问题;(iii) 用大涡模拟方法模拟了湍流中的粒子碰撞,并论证了滤波对粒子碰撞行为的影响;(iv) 发展了湍流中压力时空关联模型,并用直接数值模拟计算了湍流噪声的功率谱.

(2) 开展了高超音速球钝锥转捩的直接数值模拟研究.球钝锥是高速飞行器的典型头部外形,其边界层的转捩预测及转捩机理是航空航天领域非常关注的热点问题.开展了来流马赫数 6,头半径 Reynolds 数 10000,攻角 1° 球钝锥边界层转捩的直接数值模拟,并通过多种计算网格、多种扰动形式的比较对计算结果进行了校验,得到了较为可靠的转捩位置.同时,将直接数值模拟数据与线性稳定性理论分析相结合,对转捩机理进行了分析.探讨了钝锥背风面转捩提前与迎风面转捩推迟的机理,发现迎风面转捩推迟并非是由于扰动振幅增长率低,而是由于背风面早期扰动发展受阻.同时也探讨了 25° 子午面附近转捩位置大幅推迟的机理,认为该子午面处较低的扰动增长率导致了该子午面转捩的大幅推迟.