

华中科技大学力学系, 武汉 430074

工程结构分析与安全评估湖北省重点实验室, 武汉 430074

建立了氧化锆四方相单晶中马氏体相变的相场法模型, 模拟了氧化锆单晶中椭圆裂纹周围应力诱导相变产生和扩展的微观过程, 探讨了相变对椭圆裂纹端部位移和应力场的影响。

769651136@qq.com

MS8120

CSTAM2015-A21-E2692

两种分子模拟方法 (MD 和 MST) 优缺点和应用的讨论

白以龙

中国科学院力学研究所, 非线性力学国家重点实验室, 北京 100190

为了揭示纳-微米系统的特殊的力学行为, 分子模拟计算在发现新现象和阐明新机理方面, 具有和实验观测相互补充的不可替代的作用。MD 是最简单和最常用的方法, 但是计算耗时长, 与有限元法结合时, 又往往出现鬼力; MST 基于统计热力学, 与 CST 结合可扩展到较大的纳-微米系统, 但是, 这种方法的一个基本假设是准静态。因此, 深入分析两种分子模拟方法的特点, 扬长避短, 对实际应用和发展新的分子模拟方法, 是十分重要的。本报告介绍了我们课题组近年来在这方面的相关进展。

baiyl@lnm.imech.ac.cn

MS8121

CSTAM2015-A21-E2693

金属材料力学性能辐照硬化效应的多尺度研究

段慧玲<sup>1</sup>, 肖厦子<sup>1</sup>, 楚海建<sup>2</sup>, 薛建明<sup>3</sup>

<sup>1</sup> 北京大学工学院, 北京 100871

<sup>2</sup> 上海大学理学院, 上海 200444

<sup>3</sup> 北京大学物理学院, 北京 100871

分析了辐照缺陷对晶体塑性变形的影响, 建立了细观尺度上缺陷与位错空间相互作用的辐照晶体张量塑性模型, 同时包含了温度效应、微纳结构以及尺度效应的影响; 基于弹黏塑性自洽理论有效地考虑了晶粒之间相互作用, 能够有效地预测多晶材料的辐照硬化行为。

hlduan@pku.edu.cn

MS8122

CSTAM2015-A21-E2694

微纳尺度热弹耦合理论及其在考虑界面条件的双层结构中的应用

尉亚军, 田晓耕

西安交通大学机械结构与振动国家重点实验室, 西安 710049

通过综合考虑 GK 热传导理论和非局部弹性理论, 构建了非局部热弹耦合理论。作为应用, 将其用于考虑界面条件

的双层结构中。采用拉普拉斯变换方法求解了这一问题, 研究了热传导非局部参数、弹性理论非局部参数以及其他各个材料参数对响应的影响。

yuyj\_xjtu@163.com

MS8123

CSTAM2015-A21-E2695

过渡金属化合物高硬度的微观设计

梁拥成<sup>1</sup>, 张文清<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 上海海洋大学工程学院, 上海 201306

<sup>2</sup> 上海大学材料基因研究院, 上海 200444

基于具有代表性过渡金属钷、镱和钨的高硬度硼化物体系的系统研究提出新型超硬材料的热力学准则: 寻找在热力学上最稳定的高硼含量的过渡金属硼化物。采用铬的硼化物体系作为实例, 预测了 CrB<sub>4</sub> 是潜在超硬材料, 在目前已知过渡金属硼化物中, 它具有最低形成能和最小泊松比。

ycliang@shou.edu.cn

MS8124

CSTAM2015-A21-E2696

应变和氧空位导致铁电材料磁性的第一性原理计算

王杰<sup>1</sup>, 张亚君<sup>1</sup>, 岛田隆広<sup>2</sup>, 北村隆行<sup>2</sup>

<sup>1</sup> 浙江大学航空航天学院, 杭州 310027

<sup>2</sup> 京都大学工学院, 日本京都, 615-8540

采用第一性原理计算预测了在不同应变作用下, 铁电材料中氧空位在晶界、材料表面等不同位置所诱导的磁性; 基于电子态密度的分布, 分析了铁电材料中磁性产生的物理机理; 发现晶界、表面和应变导致氧空位附近电子结构的对称性破缺, 使自旋电子轨道发生劈裂, 从而在材料内部产生非零的磁矩。

jw@zju.edu.cn

MS8126

CSTAM2015-A21-E2697

浓度及应变作用下锂在石墨中的输运特性研究

姬祥<sup>1</sup>, 张俊乾<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup> 上海市应用数学和力学研究所, 上海 200072

<sup>2</sup> 上海大学力学系, 上海 200444

<sup>3</sup> 上海市力学在能源工程中的应用重点实验室, 上海 200072

采用第一性原理方法, 研究了不同浓度及应变下锂离子在石墨中的输运行为。通过 CNEB 过渡态方法得到了不同扩散路径下的能量势垒, 分析计算了浓度对锂离子扩散的影响。同时在施加不同应变的条件下, 研究了 300K 温度下锂在石墨中的输运特性, 揭示了应变对锂离子在石墨中扩散的显著影响。

linus.1@126.com