

## 集成计算微纳米力学

**MS8102** **CSTAM2015-A21-E2674**  
**Molecular dynamics simulation-based cohesive zone representation of fatigue crack growth in a single crystal**

吴文平, 李楠林

武汉大学土木建筑工程学院工程力学系, 武汉 430072

In present study, Nanoscale fatigue crack growth was investigated by introducing a cohesive zone model based on molecular dynamics simulations. The evolutions of the microstructure and stress in fatigue crack growth over two different cyclic loading regimes were investigated using pre-existing centre crack specimens.

wpwu@whu.edu.cn

**MS8103** **CSTAM2015-A21-E2675**

纯镁中滑移与孪晶变形的位错动力学模拟

范海冬<sup>1,2</sup>, Aubry Sylvie<sup>3</sup>, Arsenlis Athanasios<sup>3</sup>, El-Awady Jaafar A.<sup>2</sup><sup>1</sup> 四川大学建筑与环境学院, 成都 610065<sup>2</sup> Department of Mechanical Engineering, Johns Hopkins University, Baltimore, MD 21218, USA<sup>3</sup> Materials Science Division, Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA 94551-0808, USA

针对纯镁中位错与拉伸孪晶界提出了一个全面的相互作用准则, 并且引入到了三维位错动力学方法中。此外, 针对多晶体, 作者也引入了一个与实验结果相吻合的晶界模型来模拟晶界的强化效果。

haidongfan8@foxmail.com

**MS8104** **CSTAM2015-A21-E2676**

比金刚石更硬的合成材料: 设计、合成、测量与应用

田永君

燕山大学亚稳材料制备技术与科学国家重点实验室, 秦皇岛 066004

估计了纳米晶和纳米孪晶两种组织情况下多晶金刚石和 cBN 所能达到的最小组织尺寸及相对应的硬度, 采用洋葱结构前驱体, 成功地合成出极硬的纳米孪晶结构 cBN 和金刚石块材, 平均孪晶厚度分别小到 3.8 nm 和 5 nm。材料的硬度、韧性和热稳定性均得到明显提高。

fhcl@ysu.edu.cn

**MS8105** **CSTAM2015-A21-E2677**

固体电极/电解质溶液系统的跨尺度计算模拟研究

孙升, 张统一

上海大学材料基因组工程研究院, 上海 200444

利用新发展的第一性原理/连续介质耦合的算法, 对带有净电荷的二硫化钼和石墨烯两种材料在电解质溶液中的力学和电学性质进行了计算。使用第一性原理/连续介质耦合的方法计算了石墨烯量子电容器和系统经典电容器的大小, 给出了极其简单的经验公式。

sunsh@alumni.ust.hk

**MS8106** **CSTAM2015-A21-E2678**

多级纳米孪晶多晶金属材料力学性能的理论研究

朱林利<sup>1</sup>, 曲绍兴<sup>1</sup>, 郭翔<sup>2</sup>, 吕坚<sup>3</sup><sup>1</sup> 浙江大学航空航天学院工程力学系, 杭州 310027<sup>2</sup> 天津大学工程力学系, 天津 300072<sup>3</sup> 香港城市大学机械与生物工程系, 中国香港

针对该纳米孪晶金属材料的力学性能, 将已建立的单级纳米孪晶金属材料塑性力学模型拓展至多级孪晶片层结构情形, 给出多级孪晶片层结构金属材料的应力应变关系。

llzhu@zju.edu.cn

**MS8107** **CSTAM2015-A21-E2679**

单层石墨烯各向异性屈曲特性研究

刘晓毅, 吴恒安

中国科学技术大学近代力学系, 合肥 230027

研究了手性和屈曲尺寸对于石墨烯的屈曲的影响。

xyliucd@mail.ustc.edu.cn

**MS8108** **CSTAM2015-A21-E2680**

含涂层亚微米单晶柱的约束塑性行为研究

柳占立, 崔一南, 庄茁

清华大学航天航空学院工程力学系, 北京 100084

首先利用离散-连续晶体塑性计算方法模拟含涂层镍柱的压缩响应, 接着, 通过应变梯度理论验证模拟得到的结论, 并利用模拟结果理解和确定连续背应力模型中的特征长度参数, 最后, 建立一个理论模型预测涂层微柱中的流动应力演化, 通过分析涂层的应力分布和位错穿透过程, 研究涂层失效机制。

liuzhanli@tsinghua.edu.cn

**MS8109** **CSTAM2015-A21-E2681**

手性及缺陷可控纳米碳管的自组装制备

陈少华, 张存

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

应用分子动力学方法, 分析了石墨烯条带与单壁辅助纳米碳管的相互作用。考虑不同缺陷分布的石墨烯条带与辅助纳米碳管的相互作用, 应用低温形成疏松螺旋结构, 再逐渐升温形成纳米碳管的思想, 发现缺陷可控纳米碳管能否成功自组装与石墨烯表面缺陷含量密切相关, 分析了不同缺陷含量、缺陷分布方式等对缺陷可控纳米碳管形成的影响。

shchen@lnm.imech.ac.cn

**MS8110** **CSTAM2015-A21-E2682**

基于第一性原理的二维石墨烯和氮化硼弯曲刚度计算

匡友弟<sup>1</sup>, Lindsay Lucas<sup>2</sup><sup>1</sup> 上海第二工业大学, 上海 201209<sup>2</sup> 美国橡树岭国家实验室材料科学与技术部, 田纳西州, 美国 37830

基于密度泛函摄动理论, 采用 Quantum Espresso 软件, 计算了不同张应变幅度 (0~0.2) 下的石墨烯的声子色散关系, 计算的无应变色散关系与实验吻合。

kuangzhang88@gmail.com