



# 非线性力学国家重点实验室

<2012> 第2期(总第203期)

# 简讯

State Key Laboratory of Nonlinear Mechanics, Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences

## 科研进展方法论

### 分子统计热力学方法(MST)：高效计算纳米材料 等温准静态力学行为

国际复合材料期刊 (Composites: Part B), 2012 年 B 卷上发表了中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室肖攀博士等介绍分子统计热力学方法(MST)的论文, 该方法可在几类纳米材料力学中应用, 突显出它的可靠性和高效性。

纳米固体力学中常用的计算方法是分子动力学(MD)。MD 能有效表征原子的动力学过程, 但在时间尺度上受原子振动特征时间尺度(约  $10^{-12}$  s)制约, 难以模拟准静态的实际过程; 在空间尺度上, 难以应用到百纳米以上体系。分子/集团统计热力学(简称 MST/CST)多尺度计算方法, 适用于有限温度下微/纳米材料的准静态行为分析。这一计算框架包含: 采用分子表象的 MST 方法、采用准连续表象的 CST 方法以及采用分子/准连续联合表象的 MST/CST 耦合方法。发表在 Composites: Part B 上的论

文主要讨论该框架的核心：MST。

论文综述性地介绍了 MST 方法在几类纳米材料的力学性能研究中的应用：面心立方晶体纳米材料的单轴加载及纳米压入过程；半导体纳米材料的结构相变及力学性能尺寸效应。计算结果表明，MST 方法能有效刻画材料在力学加载中的微结构变化过程，如位错、相变等行为，并具有相比 MD 方法更高的计算效率(如图 1(a))。在 ZnO 纳米线力学性能计算中，MST 方法成功刻画了拉伸过程中纳米线由纤锌矿向四角结构的转变，其结果与 MD 及第一原理结果一致。更重要的是，MST 表现出比 MD 高约 60 倍的计算效率，因而能计算更大尺寸的体系。例如，采用 MST 计算到了目前实验所能测量的 ZnO 纳米线尺寸，其计算结果与实验结果一致性地揭示了弹性常数的尺寸效应（如图 1(b)所示，实验结果由共同合作的清华大学朱静院士课题组完成）。

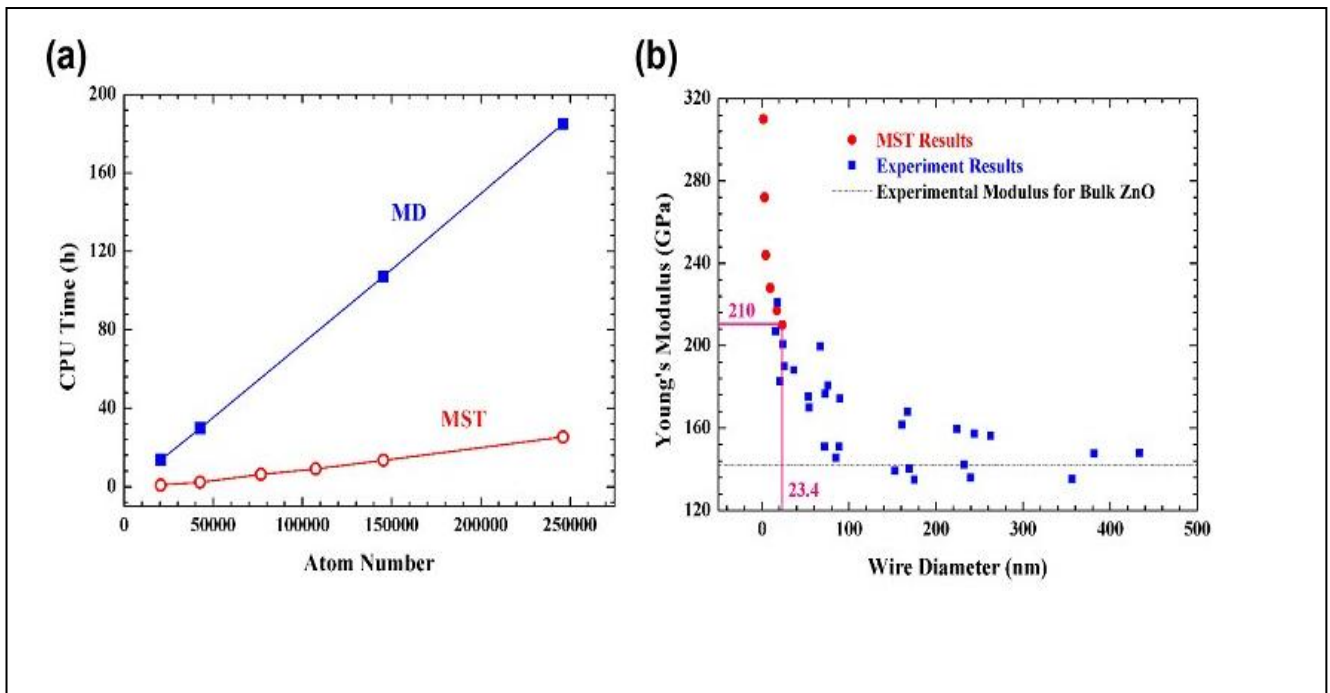


图 1. (a) MST 计算纳米杆压缩过程的耗时随原子总数的变化以及与 MD 方法的对比；

(b) ZnO 纳米杨氏模量尺寸效应计算值与实验结果的对比。

该研究成果将为微/纳米材料力学性能研究提供高效可靠的计算工具，便于模拟

与实验结果的直接对比。

论文中所提及的 MST 计算软件已进行软件著作权登记(登记号: 2011SR003778)。MST 软件并行版本采用 C++面向对象程序开发, 近 2 万行代码, 具有良好的通用性和扩展性。软件可以免费下载使用。

该研究得到科技部 973 计划(2007CB814803)、国家自然科学基金(10932011、10772181、10732090 和 10721202)和中国科学院创新基金(KJCX2-YW-M04)的资助。

论文信息:

Pan Xiao, Jun Wang, Fujiu Ke and Yilong Bai, “Molecular statistical thermodynamics - A distinct and efficient numerical approach to quasi-static analysis of nanomaterials at finite temperature”, *Composites: Part B*, 43 (2012), 57-63.

## 实验研究进展

### 力学所在“电弹性毛细”实验研究中取得进展

2012 年 4 月 25 日, 美国《科学》杂志网站主页以“液滴容器将使血液检测不再痛苦”为题, 报道了中科院力学所赵亚溥研究员“纳微系统力学与物理力学”课题组关于“电弹性毛细”的实验研究结果(图 2)。该报道指出: 电弹性毛细(Electro-Elasto-Capillarity, EEC)将有效地避免待检测血样的样本液滴在传送的过程中的蒸发与污染, 使“需要一滴血样的全面血液检验”成为可能, 从而可以极大地减小患者的痛苦与检测所需的时间。报道还指出: 液滴容器同样可以被应用于癌症的治疗中, 当被包覆的微量药物输运到癌细胞附近时将药物释放, 这样可以避

免药物对于患者身体的危害。英国《新科学家》杂志网站主页将上述工作形象表述为“欢快的液滴随着节奏跳踢踏舞”，同步报道了该工作，并专门为实验视频配上踢踏舞曲（图 3）。

该工作利用力学所自主开发建设的“跨尺度界面物理力学实验研究平台”，首次通过电场力、毛细力与弹性力的共同作用，从实验上实现了可控、可逆地包覆与释放微小液滴的过程，并称之为“电弹性毛细 (EEC)”。在交流电场下，通过高速摄像机观测到这一过程中液滴与薄膜发生周期性振动，就像液滴正在轻盈地舞动，因此也将这一过程叫做“液滴的踢踏舞”。而对于液滴的“舞动旋律”进行研究时发现液滴与薄膜的摆动“旋律”比驱动电场的“旋律”刚好“高一个八度”（振动频率是输入频率的 2 倍）。而在不同的驱动频率下，液滴的振动幅度也会发生变化，在多个频率处出现谐振峰。上述实验研究的全文于 4 月 25 日在《英国皇家学会会刊 A》在线发表(Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical & Engineering Sciences, DOI:10.1098/rspa.2011.0679 (2012))。实验的视频录像由英国皇家学会同步公开于 YouTube 视频网站，网站网址为(<http://www.youtube.com/watch?v=ax45CG63Bqc>)。

先前，该课题组在 EEC 方面的分子动力学模拟的相关研究成果作为封面论文发表在美国《物理评论快报》上(Physical Review Letters, 104 (24): 268101 (2010))。

该系列研究工作得到了国家 973 计划、中国科学院重大科研装备研制项目、中国科学院重点部署项目和国家自然科学基金的大力支持。



图 2. 美国《科学》(Science)杂志网站报道了本工作和实验视频

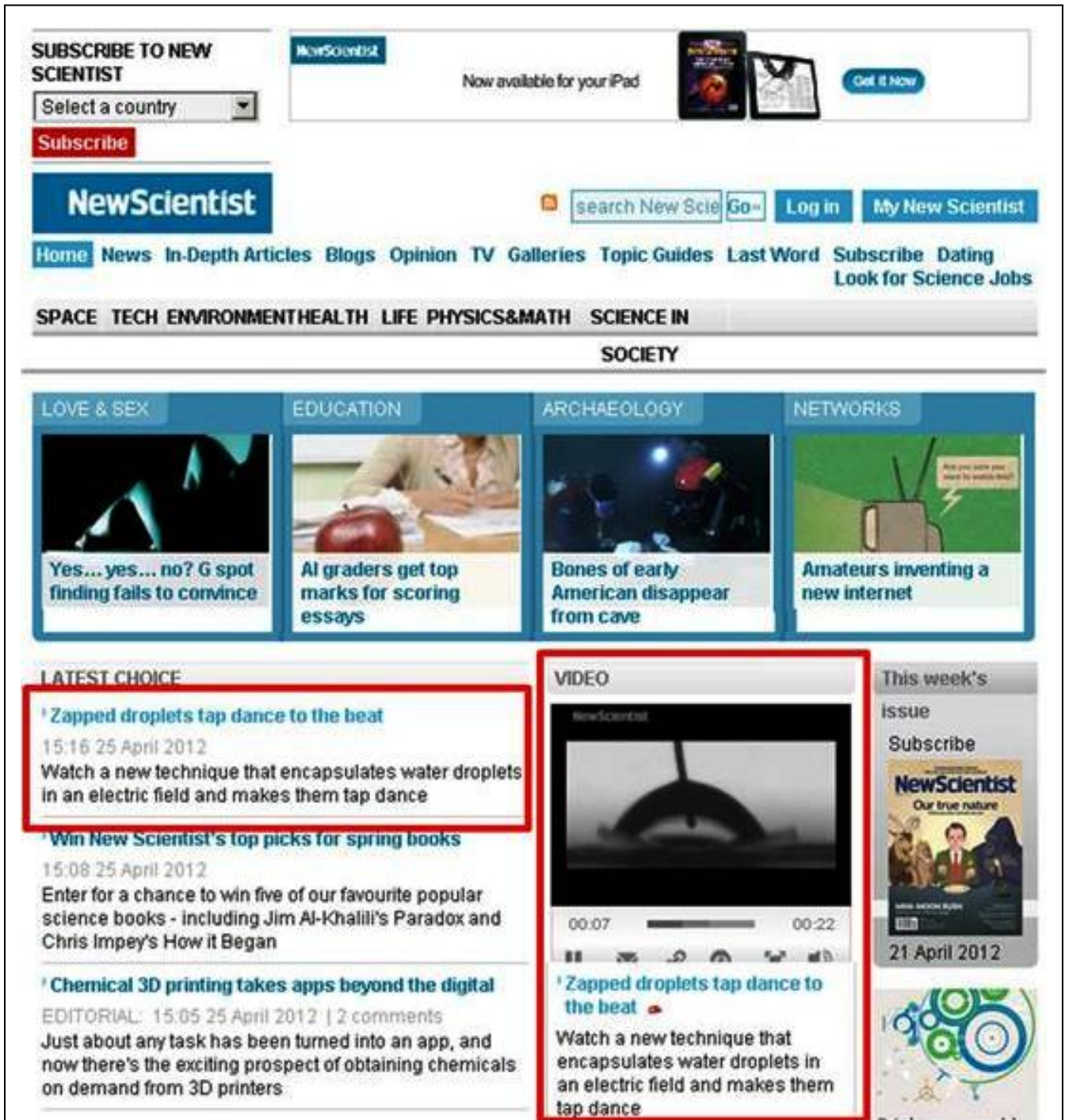


图 3. 英国《新科学家》(New Scientist)杂志网站首页报道了本工作和实验视频

<http://www.newscientist.com/blogs/nstv/2012/04/zapped-droplets-tap-dance-to-the-beat.html>

## 研究项目启动会

### 国家重大科学研究计划“纳米材料及结构的力学新原理及精细表征技术研究”召开项目启动会

国家重大科学研究计划“纳米材料及结构的力学新原理及精细表征技术研究”项目于 2012 年 5 月 25 日在北京正式启动。科技部基础司重大科学研究计划处处长傅小锋，科技部基础研究管理中心副处长闫金定，力学所副所长黄晨光，项目责任专家朱星教授、沈健教授，项目专家和特邀专家伍小平院士、白以龙院士、王自强院士、张统一院士以及来自科技部、科学院的相关领导、其他项目专家、课题骨干等 70 余人出席了会议。

“纳米材料及结构的力学新原理及精细表征技术研究”项目以纳米材料及结构的应用需求为研究背景，旨在建立可靠的纳米力学表征理论及相应的实验测量方法；通过研究，建立有效的表征纳米材料及结构力学性能的新原理，确定新原理下力学参量的普适性和可测性；建立测量原理，解决纳米材料及结构新参量测量方法中的关键问题；实现有效高精度的纳米力学行为测量，用以指导对纳米材料及结构力学性能的评判以及纳米器件的设计和应用。

启动会上，首席科学家魏悦广研究员重点介绍了项目背景、关键科学问题、预期目标、课题设置及相互关联性、合作研究团队等。四个课题组长围绕项目总体目标，分别介绍了课题的研究内容、研究方案以及课题对项目整体目标的支撑情况。

与会专家和领导充分肯定了本项目立项的重要科学意义，并高度认同纳米材料和结构力学性能研究对于推动纳米科技发展的关键作用，希望项目在五年的研究中继续紧密联系科学前沿和国家重大战略需求，加强项目内部间的沟通交流，做好项

目研究任务之间的衔接，通过该项目的研究，建立纳米材料力学行为的新理论体系，发展有效的高精度测量原理、方法和技术。该项目由中科院力学所、中国科学技术大学、北京科技大学、国家纳米科学中心以及天津大学等五个单位承担。



图 4. 国家重大科学研究计划“纳米材料及结构的力学新原理及精细表征技术研究”项目启动会



## 战略发展研讨会

### 非线性力学国家重点实验室召开 2012 年战略发展研讨会

非线性力学国家重点实验室 (LNM) 于 2012 年 6 月 5 至 7 日召开了战略发展研讨会。LNM 全室工作人员、力学所副所长戴兰宏研究员、科技财务处副处长苏建宇等共 80 余人参加了会议。

研讨会第一阶段的主要内容为传达上级文件精神 and LNM 学术委员会决议，部署实验室战略方向，督促指导如何有效的提高科研经费预算执行率。

室主任何国威研究员代表室务会作了工作报告，内容包括：上级主管部门对重点实验室发展的要求，通报了 LNM2011 年学术委员会会议的主要内容，同时提出三项具体工作：预算执行的节点、跨课题组创新课题的设置和怀柔实验基地的申请。与会人员针对报告的几项内容进行了讨论，并提出了建议。苏建宇作了预算执行和设备采购要求的报告。他详细说明了力学所为加强预算执行拟采取的措施和科研设备采购的流程，并回答了实验室人员关心的问题。

研讨会第二阶段的主要内容是针对仪器设备建设购置问题的分项报告和讨论。首先由李战华、武晓雷研究员和张泰华正高级工程师作了关于科研与设备建设相结合的报告。随后，LNM 副主任宋凡研究员对仪器设备购置的总体安排进行了说明。最后，各项仪器设备的执行负责人从三个方面进行了具体介绍，包括预购置仪器设备情况，设备用途及采购时间节点。全室人员针对每台(套)设备的用途、功能及性能，提出相关问题并进行讨论，对设备建设工作起了积极的推动作用。

本次会议充分研讨了实验室发展战略、科研环境、设备建设等问题，推动了近期科研工作和预算执行工作的进行。



图 5 . 非线性力学国家重点实验室召开 2012 年战略发展研讨会现场

## 学术交流

### Western Michigan University 学生团体参观实验室

2012 年 5 月 7 日，由 Dewei Qi 教授带队，Western Michigan University 的学生团体（共 13 名工程系的本科生和研究生）参观了非线性力学国家重点实验室。

张星副研究员介绍了湍流课题组的基本情况，着重讲解了课题组在计算流体力学与并行计算方面的工作。郑旭博士则介绍了微流动课题组开展的一些实验工作并带领学生参观了水洞。

## 人才奖评选获奖

### LNM 蒋敏强获 2012 年度中国科学院王宽诚人才奖

近日，中国科学院公布了“2012 年度中国科学院王宽诚人才奖”获奖名单，力学所蒋敏强博士获其中的“中国科学院卢嘉锡青年人才奖”。

蒋敏强博士于 2009 年毕业于中国科学院力学研究所，主要从事固体力学中针对非晶合金剪切带与断裂机制的研究，相应研究成果以第一作者发表在 Jmps, Acta Mater, Philos Mag 和 PRB 等重要刊物上。他曾获得中国科学院院长优秀奖等多个奖项。2008 年获得英国《哲学杂志》(Philosophical Magazine)和麦克斯韦(J. C. Maxwell)基金会联合颁发的首届“麦克斯韦青年作者奖”。

中国科学院王宽诚教育基金项目是为积极推进中国科学院人才培养引进系统工程实施，凝聚、培养和激励我院科技创新人才，由香港王宽诚教育基金会和中国科学院联合资助。

## 实验评选获奖

### 我室方新和邵颖峰在 2012 年度所最佳实验评选活动中获奖

近日，力学所组织开展了的 2012 年度最佳实验评选活动中，我室方新副研究员的作品《细长体出水过程的空泡发展与溃灭现象研究》在全所 6 个实验室的 28 件参赛作品中脱颖而出，获得一等奖。邵颖峰助理研究员的作品《牙齿断裂模式观察》

获得三等奖。

年度最佳实验评选旨在深化扩大实验技术交流，展示实验技术实力和鼓励实验新方法、新技术的发展。共设一等奖作品 1 件，二等奖作品 2 件，三等奖作品 3 件。参选实验的水平反映了我所科学研究的水平；两位同志的获奖也反映了我室在科学实验研究方面不断创新、发展的面貌。

## 学术报告

形式	日期	报告人	单位	报告题目
学术报告	4 月 6 日	Prof. Er-Ping Chen	Danville, California, USA	Predictive fracture/failure modeling and simulation
	4 月 10 日	Federico Toschi	Eindhoven University of Technology, The Netherlands and CNR-IAC, Roma, Italy	Particles in turbulence
	4 月 11 日	Prof. Emmanuel Villermaux	Aix-Marseille Université, France	Three little stories on Fragmentation and Mixing
	4 月 12 日	袁荒	中国航空研究院上海分院 中国商用航空发动机有限责任公司	航空发动机的结构完整性问题研究
	4 月 13 日	Prof. Jeremie Bec	Observatoire de la Côte d'Azur, Nice, France	Direct numerical simulations of particles suspended in a turbulent flow
	4 月 18 日	Prof. Haitao Xu	德国马克普朗特非线性动力学研究所	Lagrangian aspects of fluid turbulence: results from particle tracking experiments

	4 月 19 日	Prof. Guocai Chai	Sandvik Materials Technology, Sweden Linköping University, Sweden	Cyclic micro heterogeneous damage during cyclic loading
	4 月 20 日	田煜 研究员	清华大学摩擦学国家重点实验室	电/磁流变液中的剪切增稠现象
	5 月 28 日	Dr. Rui Qiao	Associate Professor, Department of Mechanical Engineering Clemson University, SC, United States	Micro/Nan fluidic Physics in Bio- and Energy-Systems
	5 月 31 日	Prof. Javier Llorca	IMDEA Materials Institute & Department of Materials Science, Polytechnic University of Madrid 28040-Madrid. Spain	Multiscale Modeling of Composites: A roadmap towards virtual testing
	6 月 7 日	Prof. Hui Hu	Department of Aerospace Engineering Iowa State University, Ames, Iowa 50014	Wind Turbine Aeromechanics and Wind Turbine Icing Physics
	6 月 7 日	Dr. Pascal Kleimann and Dr. Louis Renaud	University Lyon 1	Micro/nano fluidics in Institute of Nanotechnology Lyon——Overview, outlooks and discussions
	6 月 14 日	Dr. CQ Sun	新加坡南洋理工大学	在受压、受冷、和受限条件下氢键的非对称弛豫和水的反常物性
	6 月 14 日	Dr. CQ Sun	新加坡南洋理工大学	Mesoscopic superelasticity, superplasticity, and superrigidity