

CSTAM2012-D01-0050

## 纳米晶Ni的分子动力学模拟研究

宿昊, 汤奇恒<sup>1)</sup>

(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)

**摘要:** 本文对纳米晶材料进行分子动力学模拟, 揭示纳米晶材料在拉伸和剪切载荷作用下的孪晶结构的演化过程和力学性能的关系。结果发现孪晶结构的不稳定性与加载速率有关, 而且拉伸载荷和剪切载荷导致的孪晶结构的破坏的机理有很大的区别。孪晶结构的拉伸破坏与晶体取向和载荷方向有关; 孪晶结构的剪切破坏与剪切变形的大小有关系。

CSTAM2012-D01-0051

## 纳米结构涂层增加的界面结合强度<sup>2)</sup>

梁立红<sup>\*,3)</sup>, 韦华<sup>+</sup>, 魏悦广<sup>\*</sup><sup>\*</sup>(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)<sup>+</sup>(中国科学院金属研究所高温合金部, 沈阳 110016)

**摘要:** 界面结合强度表征着界面的结合质量及相应体系的稳定性, 尤其热障涂层体系中耐高温陶瓷涂层与金属基底之间的界面结合好坏直接影响到高温工作部件的寿命。常规的涂层微结构(晶粒)是微米尺度, 本文中研究了微结构是纳米尺度的陶瓷涂层与金属基底的界面结合强度, 发现界面强度比常规涂层明显提高。同时基于尺寸依赖的表面能, 发展了一个尺寸依赖的界面粘能模型, 结合界面粘聚力模型与纳米结构涂层减小的界面分离位移, 很好地解释了纳米结构涂层增加的界面结合强度, 为指导界面材料及结构的设计与应用提供了理论依据。

**关键词:** 纳米结构; 尺寸效应; 界面强度; 界面粘能; 表面能

1) Email: qhtang@lnm.imech.ac.cn

2) 国家重大科学研究计划(2012CB937500)及国家自然科学基金(10832008, 11023001)资助项目

3) Email: lianglh@lnm.imech.ac.cn