

MS23**CCTAM2009-003389**

原子力显微镜 (AFM) 接触模式中非局域效应的分析及处理

舒靖^{*,+}, 汪海英^{*}

* 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, ushujing@gmail.com

+ 中国科学院研究生院, 北京 100039

原子力显微镜 (AFM) 接触模式是让探针按设定的扫描力扫过试样表面, 通过记录悬臂梁的变形来获得表面形貌的工作模式, 其中占主导的是原子间的斥力。AFM 接触模式测量中的非局域效应, 是指试样表面距探针最近点附近有限区域内的形貌对测量结果都有贡献, 导致测量结果是这些区域贡献的加权平均, 而并不仅仅代表针尖正下方试样的局部信息。它包括有限分子力程导致的固有非局域效应和探针有限尺度的几何因素导致的非局域效应两部分。为了考察非局域效应, 我们忽略由于分子间相互作用引起的针尖和物体的变形, 并假设物体内分子均匀分布, 及分子间相互作用势可叠加, 建立了分析模型, 并对多种尺寸下 AFM 测量复杂表面形貌试样的情形做了模拟计算, 考察了其中非局域效应带来的误差。为了降低非局域效应的误差, 我们进一步发展了多点二次逼近的方法: 一次逼近是在斥力范围内对作用力一针尖高度的对应关系用幂函数进行拟合, 从而削弱由有限分子力程导致的误差; 更进一步, 通过考虑针尖的尺寸以及和试样之间的几何位置关系, 多个一次逼近点的坐标拟合曲线来逼近试样真实表面形貌, 对一次逼近后的结果进行处理。结果表明, 与原来的二次逼近方法相比, 多点二次逼近可以得到误差更小的测量结果。国家自然科学基金 (10772181) 资助项目。

关键词: 原子力显微镜, 非局域效应, 多点逼近

MS23**CCTAM2009-003390**

重力对 DNA- 微悬臂梁纳米挠度响应的影响

孟伟烈⁺, 陈建中^{*,+}, 陈皓^{*}, 张能辉^{*,+}

* 上海大学理学院力学系, 上海 200444

nhzhang@shu.edu.cn

+ 上海大学上海市应用数学和力学研究所, 上海 200072

致力于建立考虑重力因素的微悬臂梁的数学模型, 研究了重力对微梁纳米挠度响应的影响。首先, 利用 Zhang 的两变量层合梁模型, 求解出梁的正应力、切应力和层间挤压应力; 其次, 在薄膜层对基底挤压应力、切应力以及自重因素作用下, 给出了微悬臂梁挠度的解析表达。最后, 预测了 Wu 和 McKendry 实验中微梁在重力因素下的纳米挠度响应。数值计算结果与实验数据比较表明, 生物层自重对微梁纳米挠度的影响可以忽略, 非生物层自重对微梁纳米挠度的影响不可忽略。国家自然科学基金 (10872121), 上海市自然科学基金 (07ZR14037), 上海市教育委员会科研创新项目 (09YZ07), Multiscale Material Mechanics Fellowship, 上海大学大学生创新活动项目 (CXSJ07-096) 资助。

关键词: 微悬臂梁, 纳米挠度, 重力, 两变量模型

MS23**CCTAM2009-003391**

单晶、多晶及层状金属纳米线的物理力学行为模拟

田霞, 崔俊芝, 向美珍

中国科学院计算数学所, 北京 100190

利用原子模拟方法, 着重对单晶、多晶及层状金属纳米线在拉伸、弯曲和扭转载荷作用下的塑性变形机制进行研究。采用 MD 模拟方法, 我们在受纯弯载荷作用下的 $\langle 001 \rangle / \{100\}$ 单晶铜纳米线中发现了五重变形孪晶, 其正是基于 fcc 晶格的孪生机制形成。值得说明的是, 我们所观察到的五重变形孪晶的形成过程与 Zhu, Cao 分别通过实验和原子模拟在纳米晶铜中观测到的五重变形孪晶的形成过程不同。此外, 我们对 $\langle 001 \rangle / \{100\}$ 和 $\langle 110 \rangle / \{111\}$ 单晶铜纳米线的扭转塑性变形机制亦作了研究。

然而, 实验观察表明, 利用电化学沉积方法, 在合适的温度和电压下可制备出多晶金属纳米线, 即其内部含有会显著影响纳米线力学性质的晶界结构。一个有趣的话题是, 当晶界结构和自由表面共存时, 哪种效应在纳米线的塑性变形中起着主导作用? 也就是说, 塑性变形仅是由晶界结构引起的还是同时伴随着像单晶纳米线一样由自由表面引起的变形? 基于这个问题, 在本文中, 我们利用 MD 模拟方法, 对这两种效应给出了具体的描述。我们所进行的多晶铜纳米线在扭转载荷作用下的原子模拟, 其结果与 Liao 等针对纳米晶铜在室温及低应变率下所做的高压扭转实验中的观察完全一致。

除了上述两类普遍存在的纳米线外, 近几年来还出现了大量具有异质结构的材料, 例如层状金属纳米线。测量及研究这种纳米层状复合材料的力学性质成为近年来的热点话题。与相应的块体复合材料相比, 这种层状纳米线具有较高的硬度、拉伸强度及很好的耐磨性, 因此它们被广泛用于工业技术中。简单起见, 在本文中, 我们研究一类特殊的层状结构—双层铜-铝纳米线在上述 3 种外载作用下的力学行为。模拟中发现, 与晶界结构一样, 复合层状纳米线中的界面结构亦可以作为位错的发源地。

关键词: 单晶, 多晶, 层状, 金属纳米线, 拉伸, 弯曲, 扭转, 塑性变形机制, 变形孪晶, 位错

MS23**CCTAM2009-003392**

基于 DSP 控制器的微型万能材料试验机

陈刚, 王磊, 陈旭

天津大学化工学院过程装备与控制工程系, 天津 300072

xchen@tju.edu.cn

采用 DSP (数字信号处理器) 作为控制器的微型万能材料试验机由电磁力电机、载荷传感器和高分辨率直线光栅尺等组成。试验系统可进行拉伸、压缩、弯曲、剪切和剥离试验等常规试验, 还可进行宽频动态加载疲劳试验, 通过对直径为 0.1mm 的 X13CrMnMoN18-14-3 不锈钢细丝进行试验表明, 基于 DSP 控制器的微型万能材料试验系统具有精度高、响应快、扩展性好、可靠性高、