

数学与系统科学研究院

计算数学所学术报告

报告人: 宋海峰 研究员

(北京应用物理与计算数学研究所)

报告题目:

极端条件下材料物性的模拟与
预测

邀请人: 周爱辉 研究员

报告时间: 2013年10月15日(周二)

上午 10:00-11:00

报告地点: 科技综合楼三层 311

计算数学所报告厅

摘要:

未来科技要求材料能处于极端条件：应力、应变、温度、压力、光/辐照通量、电场或磁场。本团队面向国家重大应用需求、国防建设与国家安全，结合理论、实验和大规模数值模拟，研究极端条件下材料的“微观—介观—宏观”结构、物性及其演化规律，从微介观尺度上加深对材料演化过程及变化机理的全新理解，加深对理论和实验数据的自洽性认识，为进一步设计研发极端条件下高性能材料奠定基础。

在微观层次，开展第一性原理计算模拟和预测了体材料的常态物性、结构参数随温度/压力变化规律（图 1）、晶格动力学、相变、等温线（图 2）、冲击绝热线等，再现了实验数据，解释了冲击绝热线拐折等现象；还模拟和预测了材料表面结构、气体小分子与表面作用的演化过程，水分子的催化作用（图 3），加深了对材料表面腐蚀的机理性认识。

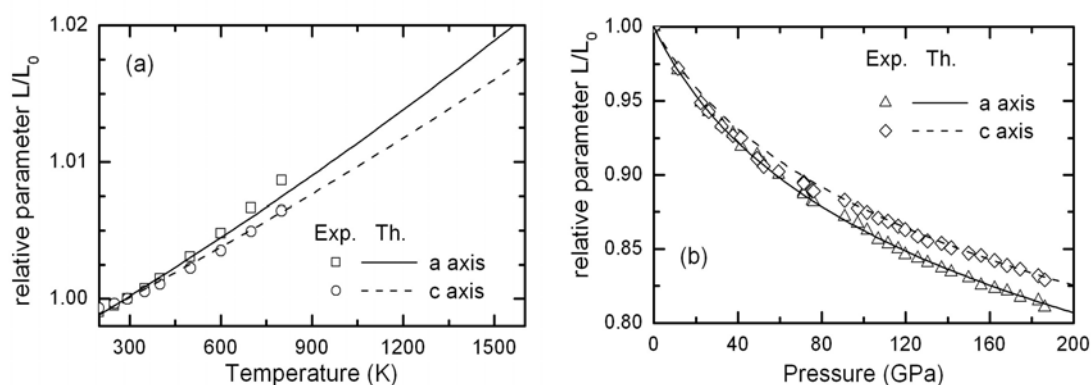


图 1 金属 Be 结构参数随温度和压力的变化关系

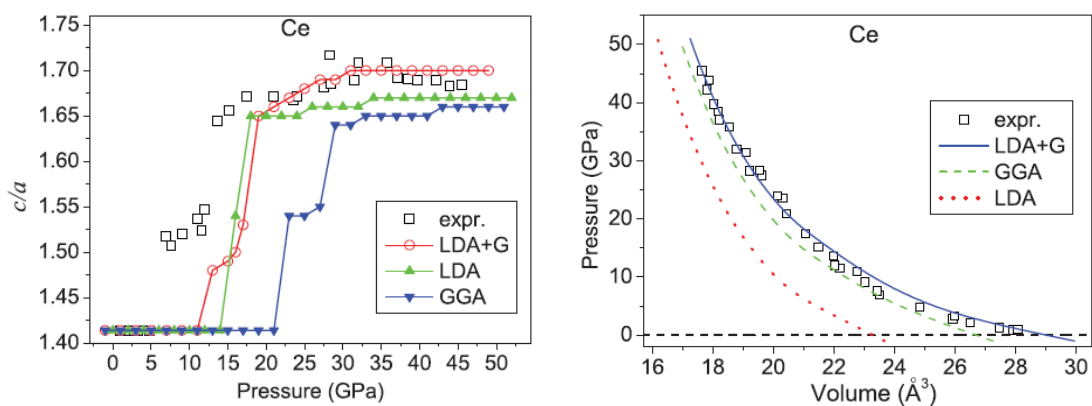


图 2 金属 Ce 的相变和静高压等温线

$$E_{ad} = -1.36 \text{ eV}$$

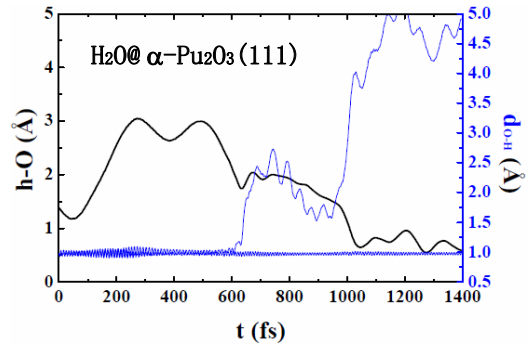
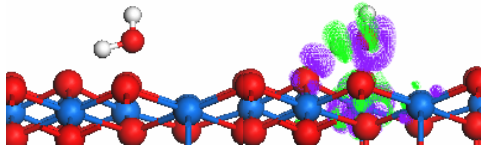


图 3 H₂O 在缺陷态 PuO₂(111) 及 α-Pu₂O₃(111) 表面的解离行为

在微细观尺度，采用经典分子动力学方法模拟了材料的剪切形变、位错的产生与滑移、空洞成核机制（图 4）、材料固液相变等，加深了材料动力学演化过程的理解和认识。

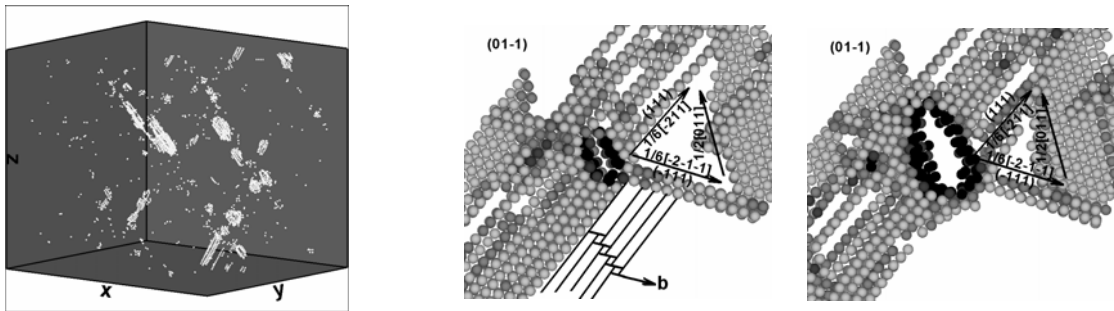


图 4 拉伸单晶铜产生空洞的成核机制

在介观尺度，采用位错动力学模拟了位错的相互作用，软化和硬化过程等，为认识位错及其对材料力学性能的影响提供了参考。

在宏观尺度，采用理论和模型方法，计算了材料宽区物性，多相物态方程，炸药爆轰参数等，再现了实验数据；还结合弹塑性流体力学程序，模拟了材料冲击卸载过程（图 5），解释了卸载速度剖面突变的实验现象，从而指导和优化了材料的尺寸设计及数据分析等。

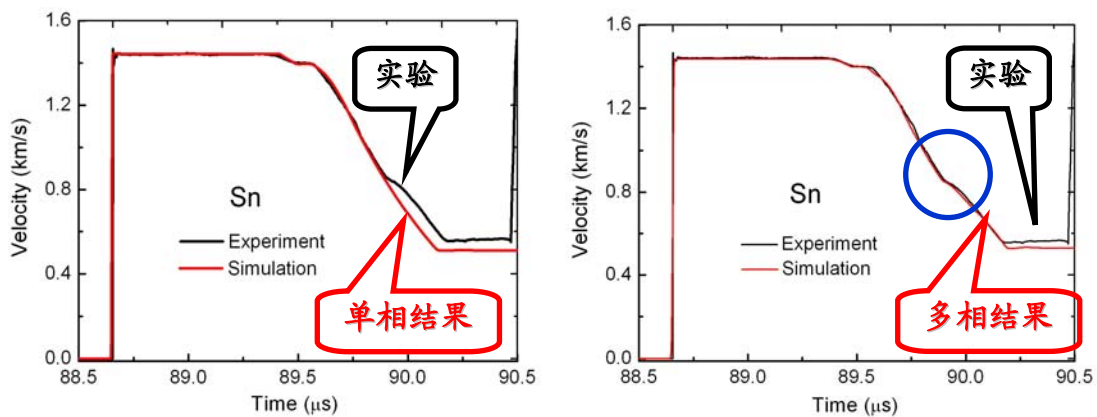


图 5 相变模型解释了卸载速度剖面突变的现象

欢迎大家参加!