DOI：10.11858/gywlxb.20251200

高应变率作用下 Nb_3Sn 复合超导体临界性能退化响应机理分析*

菅长旭[1]，杜桥依[1]，丁贺[2]，肖革胜[1]，刘志芳[1]，乔力[1]

（1. 太原理工大学航空航天学院应用力学研究所，山西 太原 030024；
2. 中北大学航空宇航学院，山西 太原 030051）

摘要：Nb_3Sn 超导材料因其优异的超导性能，被广泛应用于粒子加速器的超导谐振腔、核聚变与高能物理领域的超导磁体装置中。在失超和快速励磁等极端工况下，超导材料常承受高应变率的动态载荷，进而引发复杂的电磁-热-力多场耦合效应，最终导致其超导临界性能发生不可逆退化。为此，基于分子动力学模拟结果，以连续介质力学和超导物理理论为框架，研究了高应变率拉伸条件下 Nb_3Sn 复合超导体的弹塑性力学行为、塑性功热耗散引起的绝热温升以及损伤演化对超导临界性能的影响。基于弹塑性变形解耦理论，将变形分解为弹性和塑性两部分，定量分析了 Nb 基体塑性功热耗散引起的温升演变规律，并基于密度泛函理论，分析了绝热温升与变形损伤对 Nb_3Sn 复合超导体临界性能的影响。研究结果表明：低温高应变率拉伸条件下，铌基体的塑性变形主要由全位错滑移主导，而 Nb_3Sn 涂层由于其 A15 晶体结构的本征脆性，发生脆性断裂。温升主要源于塑性功的热转化，随着塑性应变的累积，温度随之升高。力-热耦合效应显著加剧超导临界性能退化；变形损伤主要表现为非晶化和裂纹扩展，引发电子结构的不可逆转变，进而导致超导临界性能的退化。研究结果有助于理解高应变率作用下 Nb_3Sn 复合超导体的变形-温升-性能退化关联机制，对超导腔与磁体的优化设计具有理论指导意义。

关键词：Nb_3Sn/Nb 复合超导体；高应变率；分子动力学；弹塑性变形解耦；温升；临界性能退化

中图分类号：O521.2　　**文献标识码：**A

最新录用，非最终出版稿

Nb_3Sn 超导材料凭借其在极低温区下较高的临界温度、能隙和过热场[1]，以及能够实现更高品质因子和加速梯度，成为下一代超导谐振腔的理想材料[2]，且已在国际热核实验反应堆、核磁共振光谱仪和高能物理等领域广泛应用[3]。然而，在实际应用（谐振腔运行、磁体励磁或失超）中，材料常承受电磁应力和热应力的作用，导致 Nb_3Sn 复合超导体发生弹塑性损伤变形，诱导其超导临界性能弱化，进而影响装置的性能和稳定性[4]-[7]。尤其需要注意的是失超过程（超导态转变为正常态）：在失超诱发的超导磁体“爆炸”过程中，Nb_3Sn 超导材料承受剧烈的冲击载荷作用[8]。因此，分析高应变率下 Nb_3Sn 复合超导体的弹塑性损伤变形及临界性能退化响应，对理解其变形与超导性能的关联机制、提高材料的应用寿命、优化制造工艺和改进超导腔以及超导磁体设计提供了理论指导。

Takao 等[9]、Kitaguchi 等[10]对 Nb_3Sn 超导体进行的横向应力循环实验表明，在低应力条件下，超导临界性能的衰退与应力状态之间存在可逆关系。然而，当应力超过特定应力

* 收稿日期：2025-09-15；修回日期：2025-12-12
基金项目：山西省基础研究计划项目(202303021211070，202203021212226)；国家自然科学基金(12502248，12272249，11772212)
作者简介：菅长旭（2000－），男，硕士研究生，主要从事电磁固体力学研究. E-mail：jiancx19@163.com
通讯作者：乔　力（1984－），男，博士，教授，主要从事极端环境下超导材料力电耦合响应研究. E-mail：qiaoli@tyut.edu.cn

阈值后，超导体会因塑性变形而导致临界性能退化。随后 Cheggour 等[11]进一步研究发现：临界电流的最大值出现在压缩预应变为 0.19%时；不可逆应变极限为 0.8%；在 0.95%的应变下，导线发生物理断裂；此外，应变诱导的超导临界性能退化程度与外加磁场有关。Jiang[12]使用 Pacman 和 SULTAN 装置实验证实：Nb_3Sn 股线的临界性能在循环加载过程中逐渐退化。Sugimoto 等[13]研究了 Nb_3Sn 线材在纯弯曲状态下的超导临界性能，他们的研究证实了预弯曲处理（即反复施加弯曲载荷）能增强 Nb_3Sn 线材在纯弯曲载荷下的超导临界性能。Ren 等[14]对单晶和多晶的 Nb_3Sn 样品施加了高达 9.3GPa 的压力后发现：两者的超导临界性能均随压力增加而退化，但单晶样品表现出更高的稳定性。Zhou 等[15]的实验研究发现：Nb_3Sn 超导股线在穿管过程中会发生轴向伸长和退扭变形，导致其节距增大，从而影响导体的整体性能；此外，在电磁载荷作用下，股线会出现弯曲、接触状态松动以及应变累积等现象，进而引起临界温度退化与超导性能的衰减。在工程应用（如超导射频腔）中，随着腔体在高强度电磁场下运行[16]，电磁场与腔体结构的作用会导致洛伦兹力和麦克斯韦应力的产生[5]，导致其发生形变或振动；此外，腔体内的电磁场会增强诸如电子倍增效应[17]、场致发射和氢中毒[18]等现象，从而增加了腔体的表面损耗，导致腔体局部温度上升。这种热积累会诱发材料的晶体结构变化，导致材料的超导临界性能弱化。随着腔体的振动和变形，这些热效应会更加显著，这些变化都可归因于局部失超[19]。Imbasciati 等[20]的实验研究表明：Nb_3Sn 磁体的失超过程伴随着超导体的动态变形，当 Nb_3Sn 磁体因失超导致峰值温度在 60ms 内从 4.2K 升到 400K 时，材料内部的三个正交方向产生的热应力分别为-206MPa（X 方向）、-111MPa（Y 方向）、-169MPa（Z 方向）。另一项针对高磁场 Nb_3Sn 磁体失超过程的研究表明，在初始电流为 11.85kA 的条件下，热点温度可在不到 200ms 的时间内从 4.2K 骤升至近 300K[21]。Bermudez 等[22]研究发现，Nb_3Sn 磁体因失超而遭受热冲击时，其约束部分的应力会增加 46.45MPa。在 11.85kA 额定电流条件下，测得的热点温度可达 320K。综上所述，现有实验研究主要聚焦于 Nb_3Sn 材料在循环加载和准静态加载条件下的临界性能响应，揭示了应力/应变对其超导临界性能的影响及其不可逆退化机制。然而在实际失超或快速励磁等瞬态过程中，Nb_3Sn 磁体承受高应变率载荷的作用，现有的实验研究尚未对此类动态加载条件下临界性能的演化规律进行考察，尤其是外部载荷作用下临界性能退化的应变率效应。为此，本文设计了不同应变率下的拉伸载荷模拟，旨在研究其对临界性能退化的影响。

实际应用的 Nb_3Sn 超导材料通常表现为复杂的多级结构，其临界性能对外部载荷极为敏感[23]。施加载荷的作用会导致 Nb_3Sn 晶体结构改变并在晶界处产生应力集中，诱发电子能带结构改变，导致费米面上的电子态密度(DOS,densityofstates)发生变化，进而影响超导临界温度、上临界磁场和临界电流密度等关键物理参数[24]-[25]。为了建立一种参数化方法来表征这些物理量，并能够在多物理场条件下描述其超导临界行为，Bottura 等[26]研究了超导材料临界行为经验模型描述中的内在一致性，提出了一个通用的临界电流密度函数表达式。同时，Markiewicz 等[27]针对 Nb_3Sn 复合超导体临界性能的应变依赖性进行了深入分析，提出了一种普适的应变不变量的函数。他们的研究表明，由应变引起的 Nb_3Sn 声子频率分布的变化是其临界温度随应变变化的根本原因。Qiao 和 Zheng[28]提出了一个研究三维应变下 Nb_3Sn 超导体的临界性能退化的半经验本构模型，重点关注应变引起的电子能带结构变化。该模型表明，临界性能的退化源于应变导致的 Nb_3Sn 费米面电子态密度变化。此外，Yang 等[29]的研究综合考虑了变形诱导的非晶化、裂纹尖端的晶格畸变、裂纹表面效应等因素，分析了这些因素对 Nb_3Sn 单晶裂纹扩展及力电耦合行为的影响。Dong 等[30]结合弹性薄杆理论和赫兹接触理论，建立了分析轴向应变下 Nb_3Sn 超导线内部接触力与临界电流关系的力学模型。Jing 等[31]基于增量微观力学方法，通过三维平均场均质化模型揭示了 Nb_3Sn 超导股线的弹塑性损伤与临界电流不可逆退化机制。他们的研究结果表明：变形诱导的微观

最新录用，非最终出版稿

缺陷（非晶态区域和裂纹）破坏了 Nb_3Sn 晶格中特定方向的原子键合，改变其电子结构，最终导致临界性能退化。已有研究通过实验观测与理论模型揭示了 Nb_3Sn 复合超导体在不同载荷作用下临界性能退化机制，并建立了临界性能退化的相关经验与半经验模型，定量描述了应变与临界性能关系，微观力学分析也进一步指出了变形诱导的微观缺陷对原子键合与电子结构的影响。然而，现有模型与研究方法多建立在准静态加载条件之上，尚未系统考虑其在高应变率作用下弹塑性变形区内发生的复杂力学行为，需要进一步的研究来阐明超导复合材料在高速变形下弹塑性行为中塑性功热耗散引发的绝热温升效应，以及高应变率下复合超导体内部的裂纹萌生和损伤演化对临界性能退化行为的影响。

针对上述问题，本研究从微观层面探讨了高应变率作用下 Nb_3Sn 复合超导体的弹塑性变形、塑性功热耗散引发的绝热温升效应、损伤演化及其对超导临界性能不可逆退化的影响，深入分析了高应变率作用下材料临界性能退化的内在机制。基于 Nb_3Sn 在极端服役环境中面临的复杂工况，本文采用分子动力学(MD,moleculardynamics)方法，揭示了 Nb_3Sn 复合超导体在低温和高应变率条件下的力学行为、塑性功热耗散引发的绝热温升以及裂纹萌生扩展规律，阐明了微观变形机制、热积累过程与电子结构演变共同促使临界性能退化的关联机制。

1 方法

1.1 高应变率作用下Nb_3Sn 复合超导体的弹塑性力学响应

理解 Nb_3Sn 复合超导体临界性能退化机制的关键在于揭示其微观变形、裂纹萌生演化与宏观临界性能参数之间的关联机制。为此，本文根据 Nb_3Sn 晶体结构模型（如图 1a 所示），利用 ATOMSK(AVersatileToolForAtomicSimulations)，基于 Voronoi 算法进行扩胞，建立了 Nb_3Sn 单晶体复合膜基结构模型（如图 1b 所示），模拟单元共包含 3.66×10^6 个原子，尺寸(X×Y×Z)为 407Å×407Å×396Å[32]。其中，上半层为 Nb_3Sn 涂层，下半层为铌(Nb)基体，晶体取向沿 X、Y、Z 轴分别为[100]、[010]、[001]。

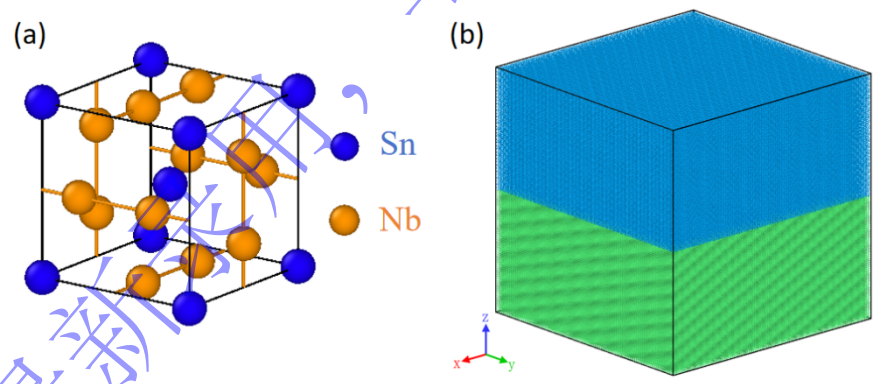


图 1 (a) Nb_3Sn 晶体结构；(b)Nb_3Sn-Nb 单晶复合膜基结构模型

Fig.1 (a) Crystal structure of Nb_3Sn; (b) Nb_3Sn-Nb single-crystal composite film/substrate model

为了研究高应变率作用下 Nb_3Sn 复合超导体的弹塑性力学响应，本文基于分子动力学模拟方法，借助 LAMMPS 软件[33]对 Nb_3Sn 复合超导体进行单轴拉伸模拟。X、Y、Z 三个方向应用周期性边界条件，以此降低边界效应和尺寸效应的影响。为了消除初始配置中可能存在的预应力，优化初始构型达到热平衡，在拉伸之前，采用共轭梯度法使系统能量最小化。初始弛豫采用等温等压系综（NPT），体系温度设定为环境温度 4.2K，使用 Nose-Hoover 恒温器和 Hoover 恒压器进行温度和压强的控制，阻尼系数分别设置为时间步长(1fs)的 100 倍和 1000 倍。随后设置恒定应变率对 Nb_3Sn 复合超导体沿 X 方向进行拉伸模拟。拉伸变形过程中使用微正则系综(NVE)来保持系统的能量守恒，加载应变率分别为 $5\times10^8 s^{-1}$、$5\times10^9 s^{-1}$。在分子动力学模拟中，势函数是计算原子间相互作用力的关键，决定

最新录用，非最终出版稿

了系统的动力学行为和热力学性质。在本研究中，为了精确描述原子之间的相互作用力，采用了组合势函数。对于铌基体，Nb 的势函数采用由 Zhang 等[34]开发的嵌入原子势(EAM,EmbeddedAtomMethod)，该势函数通过量子力学计算和实验数据拟合得到，能够较好地描述 Nb 原子之间的相互作用。EAM 势函数将体系总势能分解为两个相互耦合的能量项：

$$U=\sum_{i=1}^{N-1}\sum_{j=i+1}^{N}\varphi_{\alpha_i\alpha_j}(r_{ij})+\sum_{i=1}^{N}\Phi_{\alpha_i}(\rho_i) \tag{1}$$

$$\rho_i=\sum_{j}\psi_{\alpha_i\alpha_j}(r_{ij}) \tag{2}$$

式中 N 为原子数量，r_{ij} 表示原子 i 和原子 j 之间的距离，并对原子 i 在截止距离内的所有相邻原子 j 的相互作用求和，$\varphi_{\alpha_i\alpha_j}$ 表示短程对势，$\Phi_{\alpha_i}(\rho_i)$ 表示原子嵌入能，$\psi_{\alpha_i\alpha_j}(r_{ij})$ 表示电子密度。对于 Nb_3Sn 层，Nb_3Sn 的势函数采用修正的多体经验势函数(MEAM,ModifiedEmbeddedAtomMethod)[29]，MEAM 势函数在传统 EAM 的基础上引入了多体相互作用修正项，能够更准确地描述 Nb_3Sn 中复杂的化学键合和晶体结构特性。

$$E_{ij}^{u}(R)=\frac{1}{2}\left[F_i(\bar{\rho}_i)+F_j(\bar{\rho}_j)+Z_1\varphi_{ij}(R)+\frac{Z_2}{2}\left(S_i\varphi_{ii}(aR)+S_j\varphi_{jj}(aR)\right)\right] \tag{3}$$

式中 Z_i 为第 i 近邻原子个数。对于第二近邻原子的描述是通过参数 $C_{\min}$ 和 $C_{\max}$ 来确定的，它们决定了近邻原子间的屏蔽程度。S_{ij} 为两个原子间的筛选因子，在 Nb-Nb_3Sn 界面处，设置一个过渡区域，原子之间的相互作用通过 L-J(Lennard-Jones)势函数[35]进行描述，对系统势能的描述为：

$$U^{LJ}(r_{ij})=4\varepsilon\left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12}-\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{6}\right] \tag{4}$$

其中 $U^{LJ}(r_{ij})$ 表示势能，ε 表示原子间相互作用的内聚强度，σ 表示原子尺寸，$\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{12}$ 与 $\left(\frac{\sigma}{r_{ij}}\right)^{6}$ 分别代表了原子间势能中随距离变化的短程排斥项和长程吸引项。模拟结果通过 OVITO(OpenVisualizationTool)[36]中进行可视化和变形分析，分别基于连续介质力学理论和超导物理理论进行弹塑性变形分解和超导临界性能的计算。

1.2 高应变率作用下Nb_3Sn 复合超导体力热耦合响应分析

在高应变率拉伸变形过程中，材料内部微观结构会发生变化。当应力超过材料的弹性极限时，微小尺寸缺陷开始成核与增殖，即错位开始出现，也就发生了塑性变形。这些微小缺陷的运动、相互作用和动态演化造成了原子杂乱的振动，产生热量。而对于低温 Nb_3Sn 复合超导体而言，虽其临界温度高于工作温度，但局部热点的温升仍可能引发超导态到正常态的相变（失超），且失超区域电阻骤增，进一步使热温升加剧。另一方面，由于

最新录用，非最终出版稿

Nb_3Sn 作为 A15 型金属间化合物，其高度有序的晶体结构和强共价键主导的键合形式，在施加应变的情况下，铌链会出现机械不稳定性，晶格会因铌原子的突发周期性位移而发生扭曲，致使原子局部应变分布不均[32]，进而降低其超导性能。

为了更好地理解 Nb_3Sn 复合超导体在弹塑性变形过程中的力-热耦合行为。本文采用微观结构理论构型进行分析，通过建立局部原子变形梯度，计算应变张量，从而解释分子动力学模拟产生的原子位置时间历程，此方式类似于并符合通常的连续介质力学框架。如图 2 所示，该图包含了初始构型、无缺陷构型、中间构型和最终构型。初始构型为经过充分弛豫的未拉伸模型，其内部存在的初始缺陷构成了自平衡的应力场[37]。无缺陷构型则是一种理想的完美晶格结构，处于无应力、未变形的状态。中间构型代表了材料变形过程中经历的瞬态，其特点是发生了晶格的局部重组或新缺陷的形成。最终，经过一系列复杂的变形过程，系统演化至最终构型。在实际变形过程中，只存在初始构型和最终构型，通过引入无缺陷构型和中间构型将总变形梯度分解为：

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_1^e \mathbf{F}^p \mathbf{F}_0^{e-1} \tag{5}$$

式中 $\mathbf{F}^p$ 为从无缺陷构型到中间构型的塑性变形梯度，$\mathbf{F}_1^e$ 为从中间构型到最终构型的弹性变形梯度。根据 Horstemeyer[38]、Stukowski 等[39]提出的理论，基于连续变形梯度的离散等效定义，以非局部方式考虑原子及其邻近原子的相对运动，原子的总变形梯度 $\mathbf{F}$ 可以通过考虑中心原子与周围相邻原子之间的相对位移计算得到[40]-[41][42]。弹性变形梯度 $\mathbf{F}^e$ 与弹性位移的梯度有关，即：

$$\mathbf{F}^e = \nabla \mathbf{u}^e + \mathbf{I} \tag{6}$$

可以通过理想晶格中的微线元矢量到发生弹性应变的晶体中相应的矢量计算得到[39]：

$$\Delta \mathbf{x} = \mathbf{F}^e \cdot \Delta \mathbf{X} \tag{7}$$

式中 $\Delta \mathbf{X}$ 是理想晶格中的微线元矢量，$\Delta \mathbf{x}$ 是处于弹性应变状态的晶体中对应的矢量，进而得到塑性变形梯度 $\mathbf{F}^p$：

$$\mathbf{F}^p = \mathbf{F}_1^{e-1} \mathbf{F} \mathbf{F}_0^e \tag{8}$$

随后可通过格林—拉格朗日应变张量公式得到弹性应变分量 ε_{ij}^e 和塑性应变分量 ε_{ij}^p：

$$\varepsilon_{ij}^e = \frac{1}{2}\left(F_{ki}^e F_{kj}^e - \delta_{ij}\right) \tag{9}$$

$$\varepsilon_{ij}^p = \frac{1}{2}\left(F_{ki}^p F_{kj}^p - \delta_{ij}\right) \tag{10}$$

式中 i、j 和 k 表示 X、Y 和 Z 坐标轴，F_{ijk}^e 和 F_{ijk}^p 分别为弹性和塑性变形梯度分量，δ_{ij} 为克罗内克函数。

最新录用，非最终出版稿

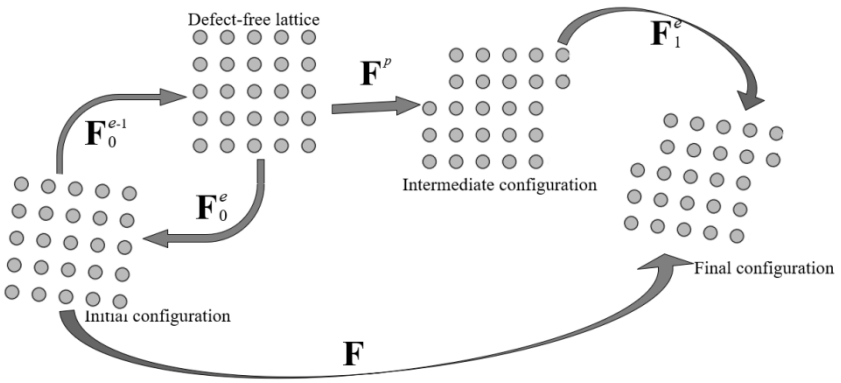


图 2 构型示意图

Fig.2Schematic diagram of theconfiguration

在获得塑性应变函数后，可以建立塑性功与温升之间的联系。通过应力与塑性应变增量的积分，计算每个原子的塑性功[43]-[44]：

$$\mathrm{w_p} = \int \boldsymbol{\sigma} \mathrm{d}\varepsilon^{\mathrm{p}} = \sum_{\mathrm{i,j=1}}^{3} \left| \boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{ij}} \varepsilon_{\mathrm{ij}}^{\mathrm{p}} \right| \tag{11}$$

式中，$\boldsymbol{\sigma}_{\mathrm{ij}}$ 为应力张量分量，可以直接从分子动力学模拟计算过程中提取。根据热力学第一定律可知，并不是所有的塑性功都以缺陷能的形式储存，而是大部分通过热耗散导致材料在塑性变形过程中温度升高。为了建立塑性功与温升之间的理论关系，需从热力学基本定律出发。具体而言，即基于热力学第一定律（表述为能量平衡方程）和热力学第二定律（表述为克劳修斯-迪昂不等式）进行推导：

$$\rho T \dot{\phi} = \rho r - \nabla q + \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \rho \dot{\psi} - \rho \phi \dot{T} \tag{12}$$

$$\rho T \dot{\phi} - \rho r + \nabla q - \frac{q}{T} \dot{T} \geq 0 \tag{13}$$

式中 ρ 为质量密度，ϕ 为熵密度，r 为单位质量介质的外部热供给率，q 为热通量矢量，ψ 为亥姆霍兹自由能。基于连续介质力学中关于自由能的定义（$\psi = \psi(\varepsilon, T)$），得到自由能与应变和温度之间的函数关系，整理后可以得到能量平衡方程：

$$\rho c \dot{T} = \boldsymbol{\sigma} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^p - T \boldsymbol{\alpha} : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^e \tag{14}$$

式中 c 为比热容。在整个拉伸变形阶段，本文模拟采用的是 NVE 系综，保证在拉伸过程中材料体积不发生变化，因此避免了在弹性变形阶段中热弹性效应引发的可逆温升物理过程，即弹性阶段温度保持恒定不变状态，等式右侧第二项几乎为零。根据塑性功与热能之间的转化关系，由塑性功引起的温升可以表示为[45]：

$$\Delta T' = \frac{\beta}{\rho c} \int \boldsymbol{\sigma} \mathrm{d}\boldsymbol{\varepsilon}^p \tag{15}$$

式中 β 为 Taylor-Quinney 系数(Taylor-Quinneycoefficient,TQC)[46]。虽然轴向拉伸是一种单

最新录用，非最终出版稿

轴加载模式，但轴向拉伸引起的应力状态是三维的，因此，在分析时，同时使用等效 vonMises 应力和应变，等效应力和应变的定义分别为：

$$\sigma_{\text{von}}=\sqrt{\left(\sigma_{\text{xx}}-\sigma_{\text{yy}}\right)^2+\left(\sigma_{\text{xx}}-\sigma_{\text{zz}}\right)^2+\left(\sigma_{\text{zz}}-\sigma_{\text{yy}}\right)^2+6\left(\sigma_{\text{xy}}^2+\sigma_{\text{xz}}^2+\sigma_{\text{yz}}^2\right)}\Big/2 \tag{16}$$

$$\varepsilon_{\text{von}}=\sqrt{\varepsilon_{\text{xx}}^2+\varepsilon_{\text{xy}}^2+\varepsilon_{\text{xz}}^2+\left[\left(\varepsilon_{\text{xx}}-\varepsilon_{\text{yy}}\right)^2+\left(\varepsilon_{\text{xx}}-\varepsilon_{\text{zz}}\right)^2+\left(\varepsilon_{\text{zz}}-\varepsilon_{\text{yy}}\right)^2\right]\Big/6} \tag{17}$$

在单轴拉伸载荷作用下，Nb 基体的塑性变形将部分变形功以热量形式耗散，导致局部瞬时温升。在高应变率作用下，材料内部塑性变形产生的热与变形损伤形成复杂的耦合效应，这种力-热耦合作用将诱发局部非均匀应力场分布，进一步加剧铌基体的位错滑移与晶格畸变。当局部温度升高时，正常态区域会因电阻率骤升，产生大量焦耳热，进一步导致临界电流密度降低，载流能力下降。根据 Maki[47]和 Gennes[48]-[49]的分析，温升会导致上临界磁场参数发生非线性衰减，破坏原有的磁通钉扎势阱。在此过程中，Nb_3Sn 涂层较低的热导率和随温度升高的比热容共同调控热量扩散与温升速率，并通过热传导与对温度依赖的电阻率形成动态耦合，进一步影响超导临界性能。

1.3 高应变率作用下Nb_3Sn 复合超导体的损伤演化及其临界性能响应分析

图 3 给出了通过分子动力学方法获得的高应变率拉伸载荷作用下 Nb_3Sn 复合超导体内的损伤演化。图中清晰地标出了弹性变形区域和非晶区域。在弹性变形区内，材料仍较好地维持着初始的晶格结构；而在非晶区域，局部变形区域的原子排列则呈无序状态。弹性变形会导致 Nb_3Sn 超导体晶体结构的对称性发生变化，诱导其电子结构和费米面电子态密度发生改变，导致超导临界性能发生可逆退化；相比之下，在非晶区域，由于位错滑移促使晶体向非晶态转变，原本具有规则晶体结构的原子发生重排，失去长程有序性，形成一个不断扩大的非晶区。非晶区域内的原子无序结构会削弱原子间的结合力。随着应变的进一步增加，导致微孔洞在此处形核，最终导致超导临界性能发生不可逆退化[50]。

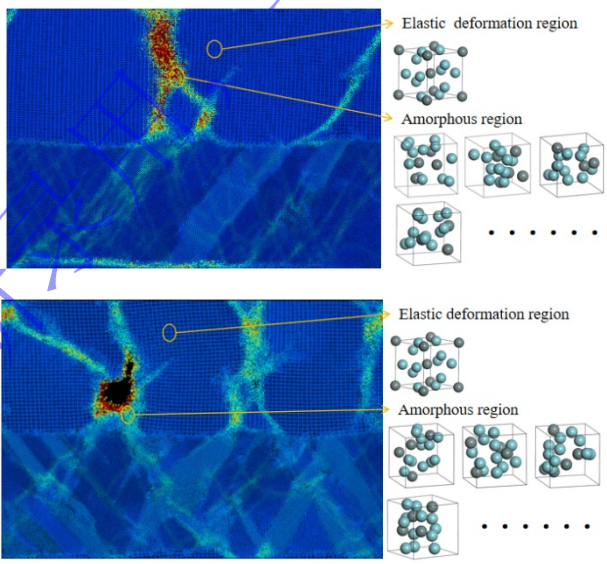


图 3 高应变率作用下 Nb_3Sn 复合超导中的损伤与裂纹

Fig.3Damage and cracking in Nb_3Sn composite superconductors under high-strain-rate Deformation

对于 Nb_3Sn 超导材料而言，其临界性能的多场耦合效应（涵盖应变作用）反映了材料的内在特性；在复杂应变条件下，其临界性能的力、电、磁、热耦合效应可以表示为[23][26]：

$$J_c(H,T,\boldsymbol{\varepsilon})=\sqrt{2}C\mu_0H_c(t)h^{p-1}(1-h)^q \tag{18a}$$

$$T_c(H,\boldsymbol{\varepsilon}) = T_{cm}(0)s(\boldsymbol{\varepsilon})^{1/3}\left(1 - H/H_{c2}(0,\boldsymbol{\varepsilon})\right)^{1/1.52} \tag{18b}$$

$$H_{c2}(T,\boldsymbol{\varepsilon}) = H_{c2m}(0)MDG(t)s(\boldsymbol{\varepsilon}) \tag{18c}$$

式中，J_c 表示临界电流密度，C 为比例常数，μ_0 为真空磁导率，$H_c(t) \cong H_c(0)(1-t^2)$，其中 $H_c(0)$ 为 0K 时的热力学临界磁场，h 为无量纲磁场，p 表示磁通钉扎力的低场指数，q 表示磁通钉扎力的高场指数；T_c 表示临界温度，$T_{cm}(0)$ 表示无环境磁场(0T)和无应变作用下的最大临界温度，$s(\boldsymbol{\varepsilon})$ 为描述应变效应的应变函数，H 表示施加的磁场，$H_{c2}(0,\boldsymbol{\varepsilon})$ 表示 0K 时上临界磁场随应变变化的函数；$H_{c2m}(0)$ 表示环境温度为 0K 和零应变作用下的最大上临界磁场，根据 Parks[51]、Maki[47]和 Gennes[48]-[49]给出的定义形式，$MDG(t)$ 近似满足 $MDG(t) \cong 1 - t^{1.52}$，其中 $t \equiv T/T_c(0,\boldsymbol{\varepsilon})$ 为无量纲温度（T 表示环境温度，$T_c(0,\boldsymbol{\varepsilon})$ 表示无环境磁场(0T)时的临界温度随应变 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 变化的函数）。在弹性变形区内，通过应变诱导的费米面电子态密度和正常态电阻率变化的推导计算，可以得到用于描述 Nb_3Sn 单晶临界性能变化的应变函数为[52]：

$$s(\boldsymbol{\varepsilon}) = \left(\frac{\rho_0}{A^0\left[T_c^0\right]^2}\right)^{3/2}\left(\left(1+\frac{\rho_0}{A^0\left[T_c^0\right]^2}\right)f(\boldsymbol{\varepsilon})^{-1} - \left(f(\boldsymbol{\varepsilon})^2 + \frac{B}{K\left[N^0\left(E_F^0\right)^2\right]}\right)\Big/\left(1+\frac{B}{K\left[N^0\left(E_F^0\right)^2\right]}\right)\right)^{-3/2} \tag{19}$$

式中 $N^0\left(E_F^0\right)$ 和 ρ_0 分别表示无应变时费米面 DOS 和正常态电阻率的变化，K、B 为描述电阻率随温度变化的相关常数，不随温度和应变的不同而变化。

对于裂纹附近的非晶区以及裂纹表面区域，本文引入中心对称参数(CSP,CentralSymmetryParameter)来量化原子尺度缺陷。CSP 通常用于评估晶格中每个原子所处环境的对称性水平[53]-[54]，它表征了原子周围晶格反转对称性的破坏程度，可表示为

$$CSP_{atom} = \sum_{i=1}^{N/2}\left|\vec{r}_i + \vec{r}_{i+N/2}\right|^2 \tag{20}$$

式中 $\vec{r}_i$ 和 $\vec{r}_{i+N/2}$ 是中心原子指向一对相邻原子的矢量，N 是原子的近邻数。原子排列的对称性越低，其数值越高。结合第一性原理模拟，本节计算了 Nb_3Sn 在拉伸载荷作用下不同区域费米面电子态密度演化。在孔洞萌生阶段，近邻原子间距较小，其原子排列呈现非晶态结构。当孔洞尺寸足够大或形成裂纹后，裂纹两侧原子集团因键断裂发生分离，间隙宽度超过平衡间距，此时裂纹表面原子的费米面电子态密度不再受裂纹另一侧原子的影响，因此可将其视为自由表面进行计算。在第一性原理模拟中，电子和离子之间的相互作用采用投影缀加平面波(PAW,ProjectorAugmentedWave)法描述[55]，交换关联泛函则通过广义梯

最新录用，非最终出版稿

度近似(GGA,generalized-gradientapproximation)表示[56]。收敛标准为每个原子的能量变化值小于 10^{-6}eV，并且在每个原子上的最大作用力不得超过 0.02eV[57]。平面波截断能设定为 500eV，K 点网格采用 7×7×7 设置。

2 计算结果与讨论

本节中，首先分析了不同拉伸应变率条件下，Nb_3Sn 复合超导体的弹塑性变形及变形引起的温升；接着，在变形和温升分析的基础上，讨论了高应变率作用下 Nb_3Sn 复合超导体的临界温度、上临界磁场和临界电流的弱化行为。

2.1 高应变率作用下Nb_3Sn 复合超导体力热耦合响应

图 4 给出了基于分子动力学方法得到的不同应变率拉伸载荷作用下，Nb_3Sn 复合超导体沿拉伸方向的应力-应变曲线（(a)图）和等效应力-应变曲线（(b)图）。Nb_3Sn 复合材料界面处的失配应变已被证明主导其宏观力学性能及损伤行为的演变过程[58]，在拉伸载荷施加之前，本文对模拟体系进行结构能量最小化和恒温恒压弛豫。经过此处理后，Nb_3Sn 层和 Nb 层界面处的晶格失配诱发的初始应变通过弹性弛豫机制有效缓解，最终收敛至低应变平衡态，从而提升模拟的可靠性。在弹性变形阶段（图 4 中 AB 段），复合超导体的应力与应变呈现线性关系。通过原子尺度应变分析（图 5(a)、(g)）可知，此阶段应变分布比较均匀，材料内部变形相对协调，晶体结构呈现完美的长程有序。随着施加应变持续增加，等效应力-应变曲线出现了一个突变点（B 点），即铌基体的屈服点, 对应图 4(a)中应力最高点。在该点处，施加应变导致铌基体中原子排列偏离理想晶格位置，表现为局部位错的形成和移动（如图 5(b)、(h)所示）。在 BC 段变形过程中，铌基体经历局部原子无序（位错形成）-滑移线（单个滑移系激活）-滑移带（多滑移系协同作用），从材料内部向外延伸，从局部变形演化至整体变形。随着滑移带的演化，铌基体中滑移位错逐步堆积到界面处，当堆积量超过临界值时，位错被迫从界面的错配位错网格中成核并发射[32]，进入 Nb_3Sn 涂层，导致涂层局部原子混乱（图 4(a)C 点）（如图 5(c)、(i)）。当拉伸进行至 CD 段（图 4(a)），原子无序性显著增加，致使涂层中萌生源于孔洞的微裂纹，应力随之下降（图 5(e)、(k)）。此阶段后，微裂纹进入扩展与交汇阶段（图 5(f)、(l)），标志着材料最终损伤累积与断裂失效的开始。

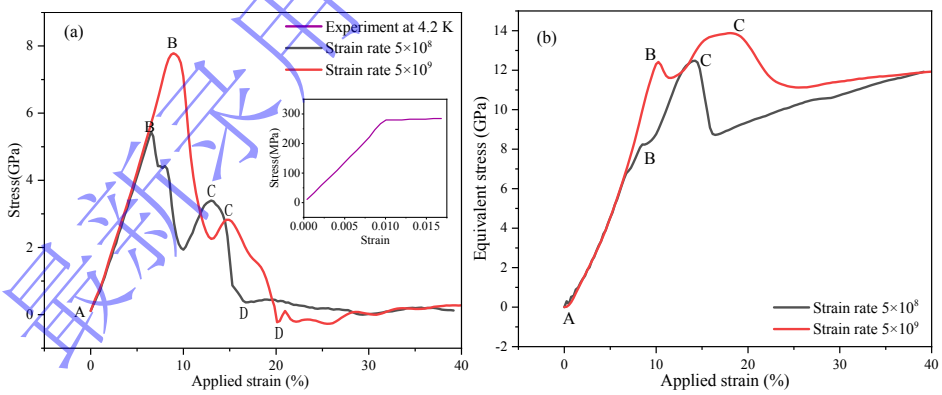


图 4 (a)沿拉伸方向的应力-应变曲线；(b)等效应力-应变曲线

Fig.4 (a) Stress-strain curve under uniaxial tension; (b) Equivalent stress-strain curve

最新录用，非最终出版稿

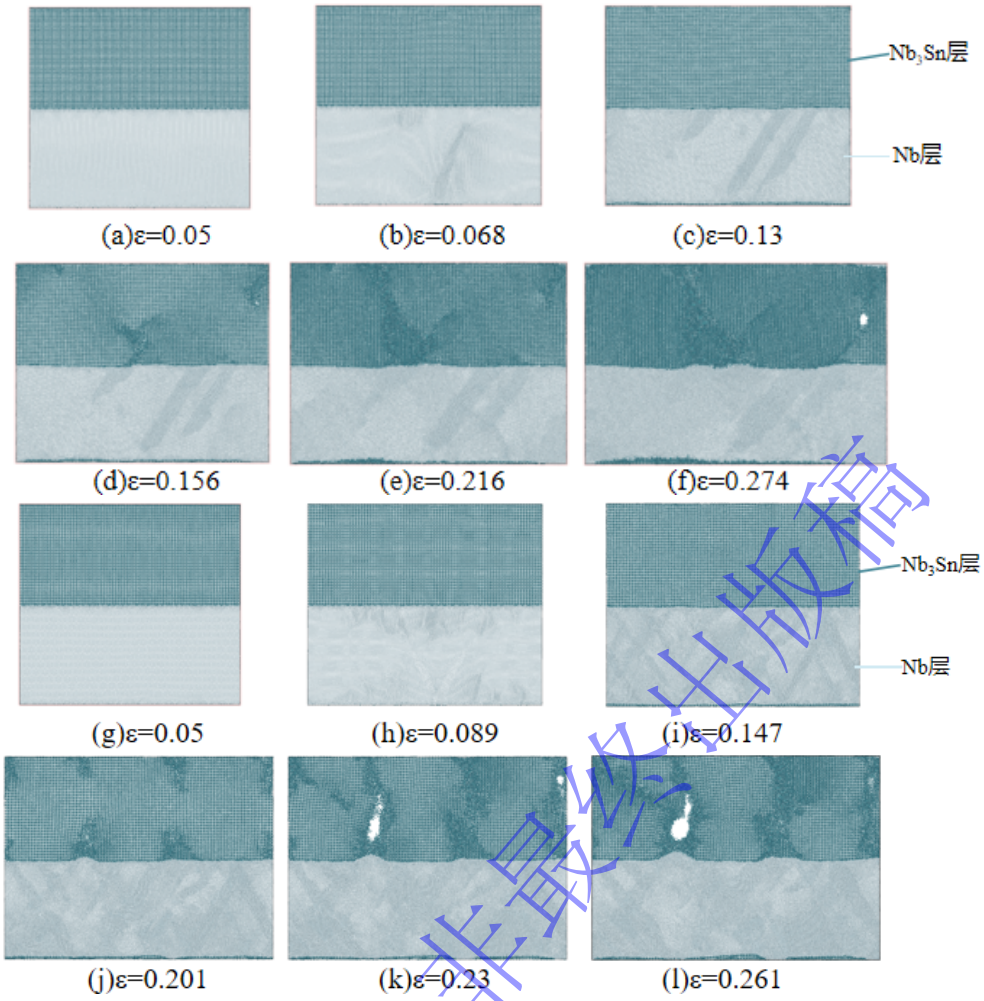


图 5　Nb_3Sn 复合超导体原子尺度应变分布图：(a)-(f)是在应变率为 $5\times10^8\ s^{-1}$ 条件下的变形演化；(g)-(l)是在应变率为 $5\times10^9\ s^{-1}$ 条件下的变形演化

Fig.5　Atomic-scale strain distribution in Nb_3Sn composite superconductors:(a)-(f) Deformation evolution at a strain rate of $5\times10^8\ s^{-1}$; (g)-(l) Deformation evolution at a strain rate of$5\times10^9\ s^{-1}$.

基于 Nb_3Sn 复合材料的高应变率变形分析，本文进一步给出了 Nb_3Sn 复合超导体在拉伸过程中的弹塑性变形以及塑性变形引起的温升。在 Nb_3Sn 复合超导体中，铌基体因其体心立方结构及金属键特性表现出优异的塑性，能够通过位错滑移耗散能量；而 Nb_3Sn 由于其独特的 A15 晶体结构，表现出固有的脆性。因此，本文关于 Nb_3Sn 复合超导体的弹塑性变形及温升效应分析主要对铌基体展开。如图 6(a)所示，在铌基体的变形过程中，其弹性应变随施加应变的变化呈现明显的线性阶段，相应地，其塑性应变在达到屈服点之前一直保持为零。基体变形达到弹性极限后，其塑性应变开始从零增加。这一结果从侧面验证了本文使用的解耦弹性变形和塑性变形的算法的准确性，它能够较为准确地区分基体变形过程中弹性应变和塑性应变。在此基础上，通过公式(11)-(15)可进一步给出高应变率条件下塑性变形导致的绝热温升（如图 6(b)所示）。在塑性变形过程中，随着应变量的增加，基体温度表现出准线性增长，无突变现象，温度转折对应塑性应变的显著上升。

在应力-应变曲线中（如图 4 所示），弹性变形阶段与温度-应变曲线中（如图 6(b)所示）的平台段相对应，表明弹性变形过程中，外力功完全转化为弹性势能储存，在绝热条件下不引起温升。应力达到屈服点之后下降，材料发生塑性变形，位错和孪晶等微结构缺陷已经成核和演化，与此同时材料内温度上升。另一方面，功的累积过程由应力与应变的协同作用决定。如图 6(c)所示，在动态拉伸过程中，塑性功随应变的演化曲线与温度-应变曲线

最新录用，非最终出版稿

类似，在初始的纯弹性变形阶段，材料不会产生塑性变形，因此塑性功为零，试样的温度也几乎保持不变。进入屈服阶段后，塑性应变的发展导致塑性功累积速率显著提升。两条曲线均出现拐点，表示着能量转化机制的转变。通过 DXA(DislocationExtractionAlgorithm)[37]分析，得到位错密度随应变的变化关系（如图 6(d)所示）。从图中可以看出，当材料达到屈服点时，其位错密度因位错源的激活和滑移增殖而显著增加。

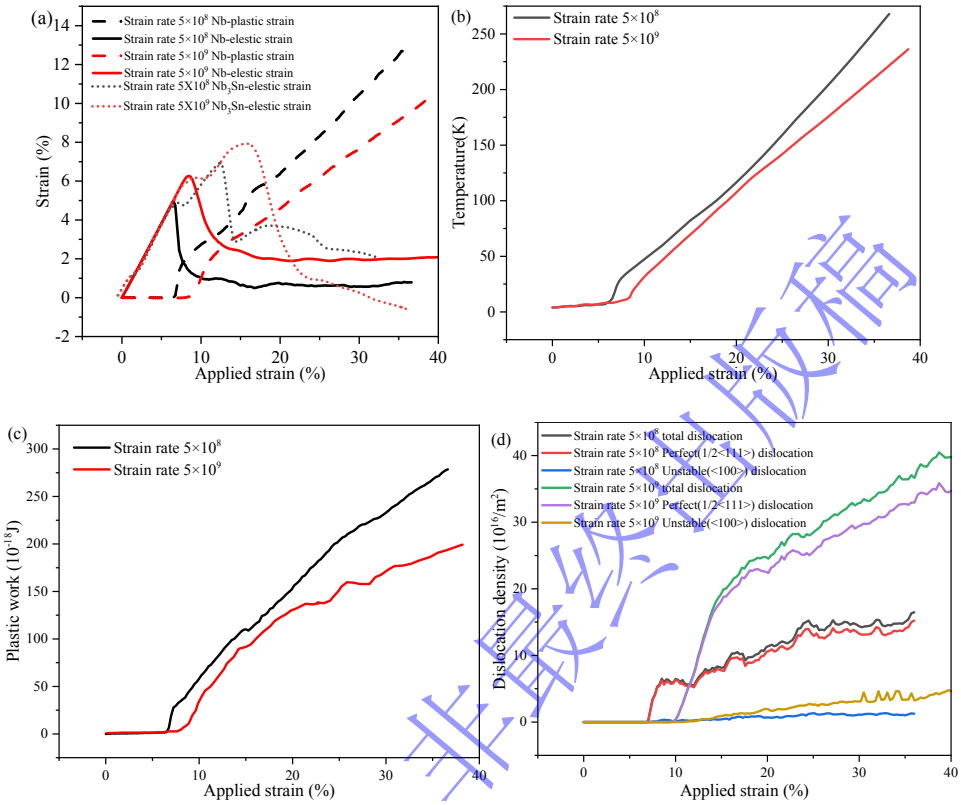


图 6 (a)铌基体弹塑性变形与涂层弹性变形的演化；(b)温度随施加应变的演化；(c)塑性功随施加应变的累积；(d)位错密度随施加应变的演化

Fig.6 (a) Evolution of elastic-plastic deformation in the niobium substrate and evolution of elastic deformation in the coating; (b) Temperature response to applied strain; (c) Accumulation of plastic work with applied strain; (d) Evolution of dislocation density as a function of applied strain

在 4.2K 的极低温环境下，基体温升随应变速率的增加而显著降低，这一趋势与典型材料的响应相反，作为补充，本文进一步开展了室温环境中的动态拉伸模拟，结果如图 7 所示。在室温环境下，应变率越大，基体温升越高，此结果与 Jasiak[59]、Tang[60]等对不同类型钢材在不同拉伸速率下温度测定研究结果一致。在室温环境中，基体温升约 150K, 比在 4.2K 的极低温环境中基体温升（约 250K）小，符合 Chen 等[61]的理论预测：初始温度越低，相同塑性应变下温升幅度越大；初始环境温度对材料内部塑性功导致的温升影响较大。随着环境温度的变化，室温下塑性变形由位错滑移主导，而在低温下，高位错密度的积累和位错迁移率的降低会促进位错塞积，导致局部应力集中[62]。如图 6(d)所示，高应变率拉伸条件下铌基体的位错密度显著高于低应变率拉伸条件下的位错密度（接近三倍），即在低温高应变率拉伸条件下较多的塑性功以缺陷的形式储存在材料内部。此外，在高应变率拉伸过程中，材料内部会发生可逆的相变（BCC 相到 FCC 相再到 BCC 相）[63]，这种相变过程需消耗部分塑性功以克服晶格重构能。同时，新生成的 FCC 相对热激活有抑制作用。这种吸热效应与相变抑制效应的协同作用，降低了塑性功向热能转化的比例，从而导致在低温环境中，高应变率载荷作用下的宏观温升反而较低。

最新录用，非最终出版稿

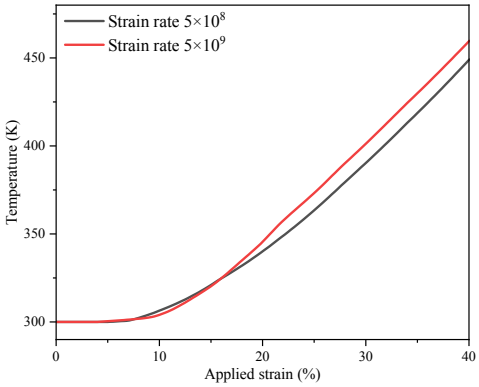


图 7 室温环境中温度随施加应变的演化

Fig.7Temperature evolution as a function of applied strain at room temperature

2.2 高应变率作用下Nb_3Sn 复合超导体临界性能的退化效应

在前文高应变率条件下塑性功导致的温升和变形损伤分析的基础上，本节对 Nb_3Sn 复合超导体临界性能的退化响应进行了分析。从图 5 的微观结构演化图中可见，在 $5\times10^8 s^{-1}$ 应变率条件下，当施加应变为 16%时，Nb_3Sn 涂层中已经形成非晶区域，由于 Nb_3Sn 层的非晶区含有大量无序排列原子，若直接基于密度泛函理论(DFT,DensityFunctionalTheory)计算该区域的电子性质，以此来研究非晶态 Nb_3Sn 的临界性能，将耗费大量计算资源。为此，本文采用一种简化的计算方法，通过构建一系列非晶态 Nb_3Sn 的短程结构，随机生成原子的初始位置，并借助第一性原理进行计算，在此基础上研究其电子结构性质。同时，基于分子动力学模拟，获得动态载荷作用下 Nb_3Sn 层非晶区的中心对称参数分布。通过变形和损伤分析表明，在损伤导致的不可逆变形区中，大部分原子的中心对称参数分布在 CSP=7.64 到 10.89 之间。通过研究非晶态 Nb_3Sn 模型电子结构性质的变化，可以有效地分析损伤导致的不可逆变形区域的临界性能退化响应。

对非晶态 Nb_3Sn 进行电子态密度计算，结果如图 8(b)所示。结果表明，在变形导致的局部非晶化区域内，Nb_3Sn 的 DOS 曲线不再具有立方相晶体 DOS 中观察到的费米面附近的特征峰，对变形损伤区域非晶态 Nb_3Sn 的多组局域原子构型分析表明，其 DOS 曲线在费米能级附近呈现平缓特征，且不同构型的 $N(E_F)$ 值差异小于 7.5%，说明非晶化导致电子态分布对局部结构涨落不敏感。因此，在本节的临界性能参数计算中，采用不同原子位型的非晶态 Nb_3Sn $N(E_F)$ 的平均值，作为整个变形损伤区域 $N(E_F)$ 的近似值，以此来计算 Nb_3Sn 层非晶区域的临界性能退化情况。

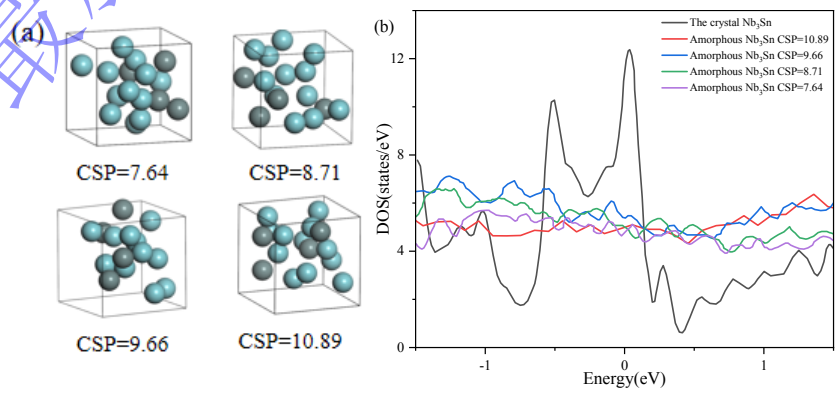


图 8(a)变形损伤区域不同原子位型的非晶态 Nb_3Sn；(b)非晶态 Nb_3Sn 的电子态密度曲线

最新录用，非最终出版稿

Fig.8 (a) Amorphous Nb_3Sn atomic configurations within the deformation-induced damage zone; (b) Density of states of amorphous Nb_3Sn.

在极低温区环境中的准静态等温加载条件下（常规实验条件），热激活机制被抑制，材料系统每一步都处于力学平衡状态，且系统与外界充分热交换，材料稳态温度与环境温度一致。在准静态绝热加载条件下，铌基体塑性变形产生的热量会通过热传导机制向涂层传递。整体最终达到稳定的热平衡状态。达到平衡态时的温度 T_f 为：

$T_f = (m_1c_1T_1 + m_2c_2T_2)/(m_1c_1 + m_2c_2)$，其中 m_1、c_1、T_1 和 m_2、c_2、T_2 分别为铌基体和 Nb_3Sn 涂层的质量、比热容和温度。对于 Nb-Nb_3Sn 复合材料在高应变率下的绝热温升，各层通常是不一样的，这主要由 Nb 基体和 Nb_3Sn 层的材料特性、变形行为和界面作用共同决定的。在高应变率拉伸条件下，在铌基体发生塑性变形时，Nb_3Sn 还处于弹性变形阶段，且 Nb_3Sn 作为脆性材料，其断裂过程以弹性储能释放和表面能为主，塑性功及相关的功-热转化效应可忽略；与 Nb_3Sn 涂层相比，Nb 基体中位错运动受阻程度更高，塑性功转化为热的效率更高，导致热量快速累积，温升速率显著大于 Nb_3Sn 涂层。在较高应变率加载条件下，Nb 基体因塑性变形产生的热量无法通过热传导及时传递至热导率较低的 Nb_3Sn 涂层（初始时，涂层与基体温度相同），导致拉伸过程中 Nb 基体温度始终高于涂层。由于实际工况下复合材料各层的变形、温升与临界性能耦合响应难以通过实验直接测试，而分子动力学模拟又受限于计算成本难以适用于准静态加载条件，因此，在本节讨论时，分别计算了准静态等温加载条件、准静态绝热加载条件和高应变率加载条件下 Nb_3Sn 复合超导体的临界性能退化响应。

图 9 给出了 Nb_3Sn 涂层在准静态等温加载条件下，通过模拟计算得到的临界性能(临界温度、上临界磁场、临界电流)退化曲线，为验证模拟结果的可靠性，将其与两组实验研究进行比对。其中，临界温度和上临界磁场的退化趋势（图 9(a)、(b)）与 Taylor 等[64]实验数据进行对比，该实验系统测量了 Nb_3Sn 复合超导体在宽范围磁场、温度及轴向应变下的临界性能。而临界电流的退化行为则与 Mondonico 等[65]的实验数据进行对比，该实验测量了由内锡法制备的 Nb_3Sn 复合超导体在轴向应变下的临界性能退化。从图中可见，本文模拟得到的退化曲线与两组实验数据在各自对应的性能参数退化趋势上均表现出良好的一致性，特别是在临界电流方面，模型准确地再现了实验观测到的随拉伸应变增加而非线性减小的规律，以及在较高磁场下退化更为显著的趋势：在应变为零时，各超导临界性能参数值最大；随着拉伸应变的施加，各参数非线性减小。在弹性变形阶段，变形较为均匀，超导临界性能退化曲线变化缓慢。随着拉伸应变的持续增大，Nb_3Sn 先经历非晶化，后发生不可逆损伤，使得临界性能下降幅度变大。此外，在外加磁场的作用下，临界电流退化更为明显。外加磁场越大，退化幅度就越大，退化趋势比预期的要明显。这一系列的对比结果充分表明，本文建立的计算模型能够有效反映 Nb_3Sn 复合超导体在准静态力学变形作用下的临界性能退化趋势。

最新录用，非最终出版稿

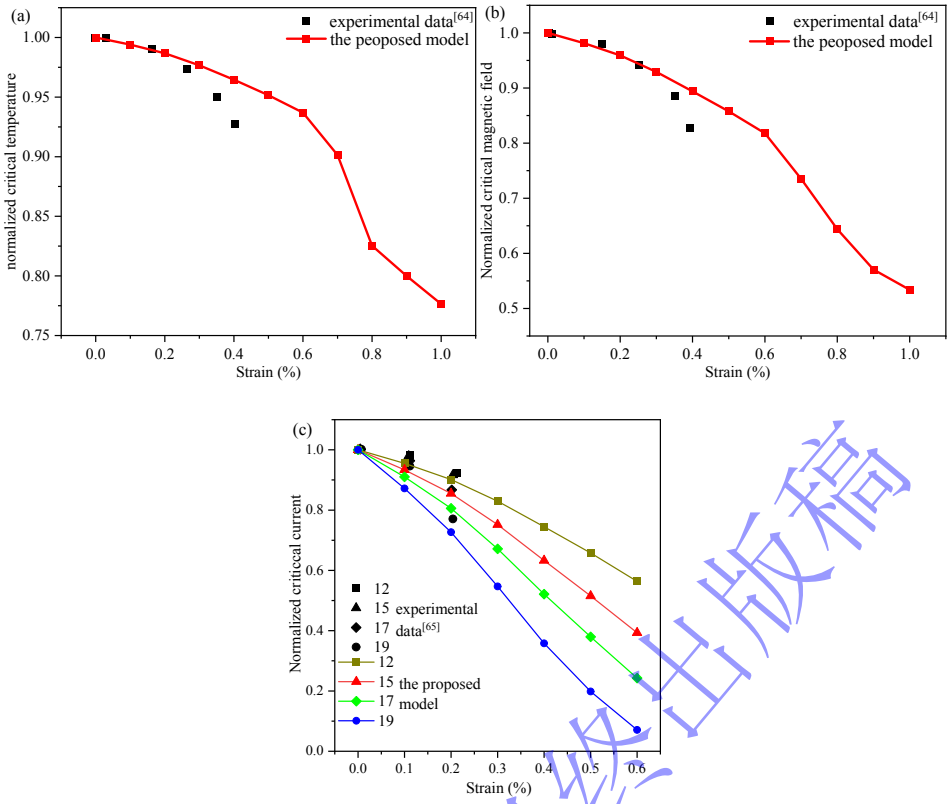
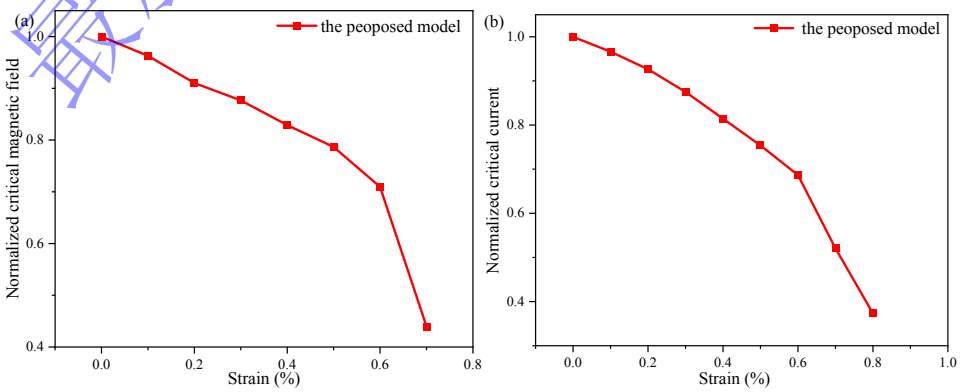


图 9 准静态等温加载条件下 Nb_3Sn 复合超导体临界性能变化：(a)临界温度退化分析；(b)上临界磁场退化分析；(c)临界电流退化分析

Fig.9Evolution of the critical properties in Nb_3Sn composite superconductors under quasi-static isothermal loading: (a) Analysis of the critical temperature degradation; (b) Analysis of the upper critical field degradation; (c) Analysis of the critical current degradation

以准静态等温条件（图 9）为基准，在排除温升干扰后，揭示了纯机械应变所导致的临界性能退化规律；该规律与实验数据吻合，验证了结果的准确性。在此基础上，通过引入准静态绝热条件，分析了由塑性功转化的温升与应变共同作用对超导临界性能的影响。图 10(a)、(b)给出了 Nb_3Sn 涂层在准静态绝热加载下的临界性能退化曲线，(c)、(d)给出了加载过程中温度分布图。与准静态等温加载条件下的临界性能弱化曲线（图 9(b)）相比，绝热条件下由塑性变形引起的温升进一步加剧了超导上临界磁场的退化；图 10(b)为无外磁场环境中准静态绝热加载条件下温度-应变耦合作用导致的临界电流随应变的弱化曲线。与准静态等温加载结果（图 9(c)）相比，外加磁场对临界性能的影响比温度的影响更为显著。



最新录用，非最终出版稿

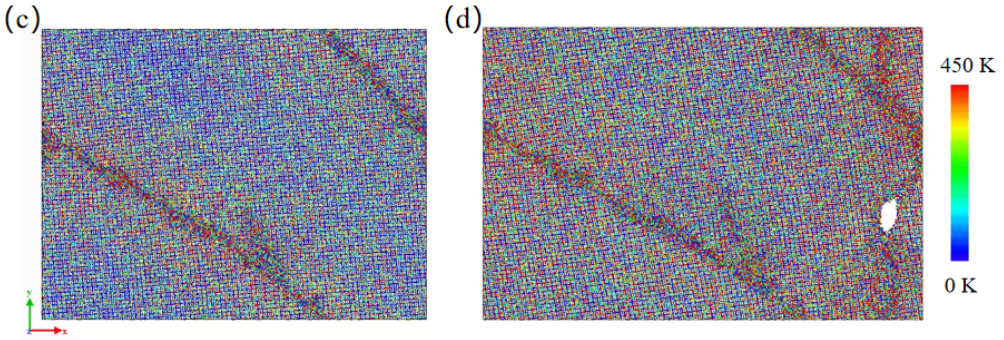


图 10 准静态绝热加载条件下 Nb_3Sn 复合超导体临界性能变化：(a)上临界磁场退化分析；(b)临界电流退化分析；(c)(d) Nb_3Sn 层温度分布图

Fig.10Evolution of the critical properties in Nb_3Sn composite superconductors under quasi-static adiabatic loading: (a) Analysis of the critical temperature degradation; (b) Analysis of the upper critical field degradation;(c)(d) Temperature distribution in the Nb_3Sn layer.

图 11(a)、(b)给出了高应变率加载条件下 Nb_3Sn 复合超导体的临界性能退化响应曲线，(c)、(d)给出了加载过程中温度分布图，模拟过程中未施加环境磁场。与准静态等温及准静态绝热两种加载条件下的结果相比，高应变率加载由于变形过程极快，Nb 基体产生的热量来不及向涂层扩散，使得涂层温升低于准静态绝热加载条件，其临界性能退化程度介于准静态绝热与准静态等温加载结果之间；准静态绝热加载因塑性变形产生的热量有充分时间在材料内部传导和积累，导致 Nb_3Sn 涂层温升最高，其上临界磁场与临界电流的退化最为显著；准静态等温加载因系统与环境温度相同，无温升效应，仅由应变导致的损伤引起性能退化，其退化幅度最小。

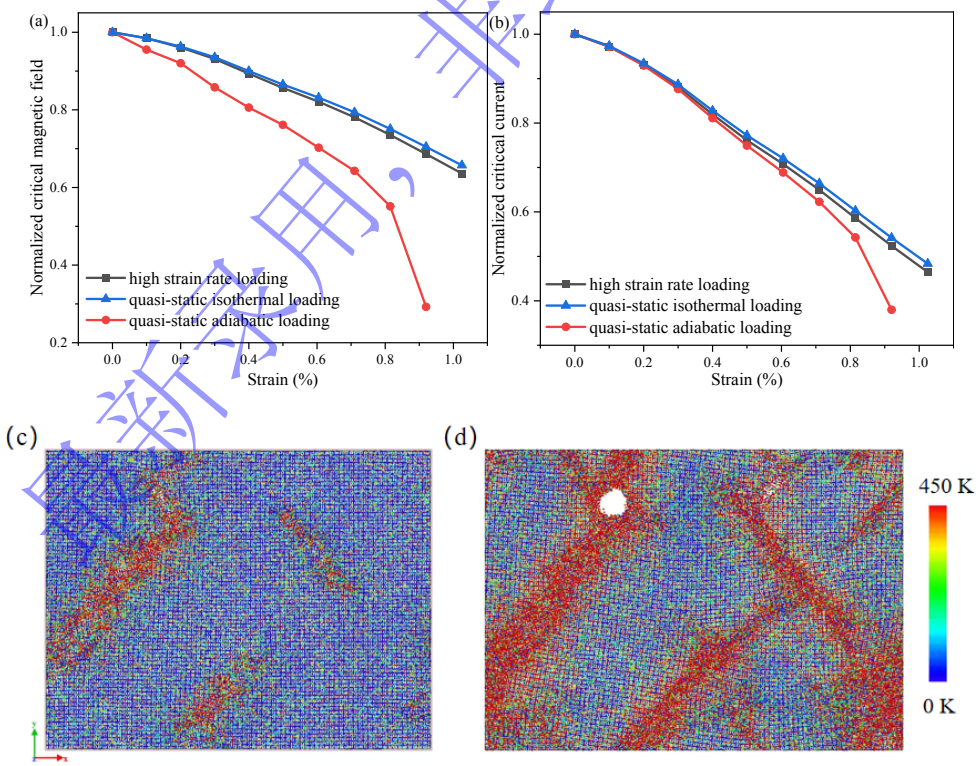


图 11 高应变率加载条件下 Nb_3Sn 复合超导体临界性能变化：(a)上临界磁场退化分析；(b)临界电流退化分析；(c)(d) Nb_3Sn 层温度分布图

Fig.11Evolution of critical properties in Nb_3Sn composite superconductors under high-strain-rate loading:(a)

最新录用，非最终出版稿

Analysis of the critical temperature degradation; (b) Analysis of the upper critical field degradation;(c)(d) Temperature distribution in the Nb_3Sn layer.

3 结 论

本文对高应变率作用下 Nb_3Sn 复合超导体的临界性能退化响应进行了研究：基于连续介质力学理论框架将 Nb_3Sn/Nb 复合超导体弹塑性变形解耦；从能量守恒的观点出发，计算得到了铌基体塑性功热耗散引发的绝热温升；在 Nb_3Sn 层损伤区域电子态密度变化分析的基础上，借助于多场耦合电磁本构关系，揭示了绝热温升和变形损伤对 Nb_3Sn 复合超导体临界性能的影响。主要结果总结如下：

(1) 在低温环境中，高应变率作用下铌基体进入屈服阶段后，全位错开始形成并以滑移形式主导塑性变形，随着应变增加，滑移带逐渐扩展，位错在界面处堆积并最终穿透进入 Nb_3Sn 涂层，导致涂层局部发生晶格畸变乃至非晶化，而 Nb_3Sn 涂层由于其 A15 晶体结构的本征脆性，发生脆性断裂，造成应力急剧下降。温升主要源于塑性功的热转化，在高应变率作用下，随着塑性应变的累积，温度随之升高，但由于变形过程中基体发生可逆相变及新相抑制热激活等耗能机制，导致塑性功向热能的转化效率降低，最终温升约达 250K。

(2) 应变、温升加剧了 Nb_3Sn 上临界磁场和临界电流的衰减。相较于应变、温度的单独作用，两者协同作用会使 Nb_3Sn 的超导临界性能弱化更为显著；在拉伸过程中，高变形区的裂纹扩展会导致材料发生不可逆损伤，加剧了超导临界性能退化。

参考文献

[1] PosenS,HallDL.Nb_3Snsuperconductingradiofrequencycavities:fabrication,results,properties,andprospects [J].SuperconductorScienceandTechnology,2017,30(3):033004.

[2] ScanlanRM.ConductordevelopmentforhighenergyphysicsplansandstatusoftheUSprogram [J].IEEETransactions on Applied Superconductivity,2002,11(1):2150-2155.

[3] SteinSR.Spaceapplicationsofsuperconductivity:resonatorsforhighstabilityoscillatorsandotherapplications [J].Cryogenics,1980,20(7):363-371.

[4] ArtoosK,Verdu-AndresS.StatusoftheHL-LHCcrabcavitytuner[C]//PeterM,AndréA,VolkerRS.19thInternationalConferenceonRFSuperconductivity.Dresden,Germany.JACoWPublishing,Geneva,Switzerland.2019:646-651.

[5] RathoreM,JainVK,SinghKK,etal.EstimationofLorentzforcedetuninganditscompensationon650MHzβ_g=0.92singlecellSCRFcavity [J].EngineeringResearchExpress,2021,3(2):025025.

[6] QiuF,ZhuZ,MaJ,etal.AnapproachtocharacterizeLorentzforcetransferfunctionforsuperconductingcavities [J].NuclearInstrumentsandMethodsinPhysicsResearchSectionA:Accelerators,Spectrometers,DetectorsandAssociatedEquipment,2021,1012:165633.

[7] PosenS,LiepeM.Mechanicaloptimizationofsuperconductingcavitiesincontinuouswaveoperation [J].PhysicalReviewSpecialTopics—AcceleratorsandBeams,2012,15(2):022002.

[8] 郑晓静.关于极端力学 [J].力学学报,2019,51(04):1266-1272.
ZhengXJ. Extreme Mechanics [J].Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2019,51(04):1266-1272. (in Chinese)

[9] TakaoT,ItoT,UmekawaK,etal.Degradationandreversibilityofcriticalcurrentduetotransversecompressivestressin Ta-reinforcedNb_3Snsuperconductingstrand [J].IEEETransactionsonAppliedSuperconductivity,2005,15(2):3446-3449.

[10] KitaguchiH,KimuraS,ShimonosonoT,etal.CriticalcurrentsofNb_3Snwiresubjecttoappliedtransv

最新录用，非最终出版稿

ersestress [J].IEEETransactions on Applied Superconductivity,2005,15(2):3454-3457.

[11] CheggourN,EkinJW,GoodrichLF.Critical-currentmeasurementsonanITERNb_3Snstrand: effectofaxialtensilestrain [J].IEEETransactions on Applied Superconductivity,2007,17(2):1366-1369.

[12] 蒋华伟.应变对 Nb_3Sn 股线临界特性退化影响 [J].稀有金属材料与工程,2015,44(6):4.
JiangHW.Effect of strain on critical properties degradation of Nb_3Sn strand [J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2015, 44(6):4. (in Chinese)

[13] SugimotoM,TsubouchiH,EndohS,etal.Criticalcurrentcharacterizationunderpurebendingstrains ofpre-bentCu-Nb/Nb_3Snstrandsforpracticalreact-and-windprocess [J].IEEETransactionsonAppliedSuperconductivity,2016,26(3):1-5.

[14] RenZ,GamperleL,FeteA,etal.EvolutionofT^2resistivityandsuperconductivityinNb_3Snunderpressure [J].Physical Review B,2017,95(18):184503

[15] 岳动华,张兴义,周又和.国际热核聚变实验堆用管内电缆导体力学行为研究进展 [J].科学通报,2018,63(4):19.
YueDH,ZhangXY,ZhouYH.Research progress on the mechanical behavior of cable conductors in the international thermonuclear experimental reactor [J]. Chinese Science Bulletin, 2018, 63(4):19. (in Chinese)

[16] Guillén-HernándezT,ArtoosK,CalagaR,etal.NumericalcalculationoftheLorentzforcedetuningandthepressuresensitivityfortheHL-LHCcrabcavity[C]//JournalofPhysics:ConferenceSeries.IOPPublishing,2024,2687(8):082005.

[17] 张猛.高频腔中二次电子倍增效应的研究[D].上海：中国科学院上海应用物理研究所,2009.
ZhangM.Study of the secondary electron multiplicationeffect in high-frequencycavities[D]. Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, 2009. (in Chinese)

[18] Padamsee,H.50yearsofsuccessforSRFaccelerators—areview [J].SuperconductorScienceandTechnology,2017,30(5):053003.

[19] MiyazakiA,BasicsofRFsuperconductivityandNbmaterial [J].SRF2021Tutorial,EastLansing,Michigan,2021:23-25.

[20] ImbasciatiL,BauerP,AmbrosioG.StudyoftheeffectsofhightemperaturesduringquenchesontheperformanceofasmallNb_3Snracetrackmagnet [J].SuperconductorScienceandTechnology,2004,17(5):S389-S393.

[21] BermudezSI,AuchmannB,BajasH,etal.Quenchprotectionstudiesofthe11TNb_3SndipolefortheLHCupgrade [J].IEEETransactionsonAppliedSuperconductivity,2016,26(4):1-5.

[22] BermudezSI,MangiarottiF,WilleringG,etal.Quenchprotectionstudyofa11TNb_3SnmodeldipoleforthehighluminosityLHC [J].IEEETransactionsonAppliedSuperconductivity,2019,29(5):1-5.

[23] 杨绪佳,何宇新,张鑫等.Nb_3Sn 高场复合超导体临界性能力学变形效应的多尺度模拟[J].力学学报,2022,54(3):719-731
YangXJ,HeYX,ZhangX, et al. Multi-scale simulation of mechanical deformation effect of critical properties of Nb_3Sn high-field composite superconductors [J]. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2022, 54(03):719-731. (in Chinese)

[24] CiovatiG,AnlageSM,GurevichAV.ImagingofthesurfaceresistanceofanSRFcavitybylow-temperaturelaserscanningmicroscopy [J].IEEETransactionsonAppliedSuperconductivity,2013,23(3):3500506-3500506.

最新录用，非最终出版稿

[25] HallD,CuevaP,LiarteD,etal.CavityquenchstudiesinNb$_3$Snusingtemperaturemappingandsurfaceanalysisofcavitycut-outs [J].Proc.SRF'17,2017.

[26] BotturaL,BordiniB.J$_C$(B,T,ε)parameterizationfortheITERNb$_3$Snproduction [J].IEEETransactions on Applied Superconductivity,2009,19(3):1521-1524.

[27] MarkiewiczWD.InvarianttemperatureandfieldstrainfunctionsforNb$_3$Sncompositesuperconductors [J].Cryogenics,2006,46(12):846-863.

[28] QiaoL,ZhangX,DingH,etal.AnintrinsicmodelforstraintensoreffectsonthedensityofstatesinA15 Nb$_3$Sn [J].Cryogenics2019;97:50-54.

[29] YangX,XiaoG,ZhangS,etal.CrackpropagationeffectsonthecriticaltemperaturedegradationofsuperconductingNb$_3$Snsinglecrystal [J].EngineeringFractureMechanics,2024,305(000):17.

[30] DongS,JingZ,YongH,etal.AtheoreticalmodelforcharacterizingtheinternalcontactoftheCICCstrandsunderaxialstrain [J].ActaMechanicaSolidaSinica,2016,29(5):455-467.

[31] JingZ,ZhangY.Micromechanicalmodellingontheelastoplasticdamageandirreversiblecriticalcurrentdegradationofthetwistedmulti-filamentaryNb$_3$Snsuperconductingstrand [J].ActaMechanicaSinica,2024,40(4):723661.

[32] ZhuB,XiaoG,YangL,etal.Insightsongrainboundaryeffectsoncrackformationandpropagationin Nb$_3$Sncoatingsatlowtemperatureandhighstrainrates:amoleculardynamicssimulationstudy [J].SuperconductorScienceandTechnology,2023,36(12):125012.

[33] ThompsonAP,AktulgaHM,BergerR,etal.LAMMPS-aflexiblesimulationtoolforparticle-basedmaterialsmodelingattheatomic,meso,andcontinuumscales [J].ComputerPhysicsCommunications,2022,271:108171.

[34] ZhangY,AshcraftR,MendelevMI,etal.ExperimentalandmoleculardynamicssimulationstudyofstructureofliquidandamorphousNi$_{62}$Nb$_{38}$alloy [J].TheJournalofChemicalPhysics,2016,145(20):204505.

[35] ChudinovVG,GogolinVP,GoshchitskiiBN,etal.SimulationofcollisioncascadesinintermetallicNb$_3$Sncompounds [J].PhysicaStatusSolidi(a),1981,67(1):61–67.

[36] StukowskiA.VisualizationandanalysisofatomisticsimulationdatawithOVITO–theOpenVisualizationTool [J].ModellingandSimulationinMaterialsScienceandEngineering,2010,18(1):015012.

[37] StukowskiA,BulatovVV,ArsenlisA.Automatedidentificationandindexingofdislocationsincrystalinterfaces [J].ModellingandSimulationinMaterialsScienceandEngineering,2012,20(8):085007.

[38] GullettPM,HorstemeyerMF,BaskesMI,etal.Adeformationgradienttensorandstraintensorsforatomisticsimulations [J].ModellingandSimulationinMaterialsScienceandEngineering,2007,16(1):599-621.

[39] StukowskiA,ArsenlisA.Ontheelastic-plasticdecompositionofcrystaldeformationattheatomicscale [J].ModellingandSimulationinMaterialsScienceandEngineering,2012,20(3):035012.

[40] ShimizuF,OgataS,LiJ.Theoryofshearbandinginmetallicglassesandmoleculardynamicscalculations[J].MaterialsTransactions,2007,48(11):2923-2927.

[41] LiJ,ShimizuF.Least-squareatomicstrain [J].Report,http://164.107,2005.79:612.

[42] FalkML,LangerJS.Dynamicsofviscoplasticdeformationinamorphoussolids [J].PhysicalReviewE,1998,57(6):7192-7205.

[43] Lee,E.H.Elastic-PlasticDeformationatFiniteStrains

最新录用，非最终出版稿

[J].JournalofAppliedMechanics,1969,36(1):27.

[44] XiongQ,LiZ,ShimadaT,etal.Atomisticinvestigationontheconversionofplasticworktoheatinhigh-rateshearedeformation [J].InternationalJournalofPlasticity,2022,149:103158

[45] PanZ,XuF,MathaudhuSN,etal.Microstructuralevolutionandmechanicalpropertiesofniobiumprocessedbyequalchannelangularextrusionupto24passes [J].ActaMaterialia,2012,60(5):2310-2323.

[46] TaylorGI,QuinneyH.Thelatentenergyremaininginametalaftercoldworking [J].ProceedingsofRoyalSocietyofLondonA,ContainingPapersofaMathematicalandPhysicalCharacter,1934,143(849):307-326.

[47] MakiK.Themagneticpropertiesofsuperconductingalloys [J].JournalofPhysicsandChemistryofSolids,1964,1(2):127-143

[48] DeGennesPG.Superconductivityofmetalsandalloys [J].W.A.Benjamin,1966

[49] DeGennesPG.Behaviorofdirtysuperconductorsinhighmagneticfields [J].PhysikderKondensiertenMaterie,1964,3(2):79-90

[50] NölscherC,Saemann-IschenkoG.Superconductivityandcrystalandelectronicstructuresinhydrogenatedanddisordered Nb_3GeandNb$_3$SnlayerswithA15structure [J].PhysicalReviewB1985,32(3):1519.

[51] Parks,R.D.Superconductivity[M].NewYork:Dekker.1969.

[52] 何宇新,乔力,石震天,等.静水压作用下 Nb_3Sn 多晶体超导临界温度退化的耦合模型 [J].固体力学学报,2020,41(04):334-342.
HeYX,QiaoL,Shi,ZT,etal.A coupling model for hydrostatic pressure-induced critical temperature degradation of Nb_3Sn polycrystalline superconductors [J]. Chinese Journal of Solid Mechanics,2020,41(04):334-342. (in Chinese)

[53] KelchnerCL,PlimptonSJ,HamiltonJC.Dislocationnucleationanddefectstructureduringsurfaceindentation [J].Physical Review B,1998,58(17):11085.

[54] LiuZR,ZhangRF.AACSD:Anatomisticanalyzerforcrystalstructureanddefects [J].ComputerPhysicsCommunications,2018,222:229–39.

[55] BlochlPE.Projectoraugmented-wavemethod [J].Physical Review B,1994,50(24):17953-17979.

[56] PerdewJP,BurkeK,WangY.Generalizedgradientapproximationfortheexchange-correlationholeofamany-electronsystem [J].Physical Review B,1996,54(23):16533.

[57] SunH,XuZ,ZhangD.First-principlescalculationstoinvestigatedopingeffectsonelectricalconductivityandinterfacialcontactresistanceofTiO_2 [J].AppliedSurfaceScience,2023,614:156202.

[58] LeeJ,PosenS,MaoZ,etal.Atomic-scaleanalysesofNb$_3$SnonNbpreparedbyvapordiffusionforsuperconductingradiofrequencycavityapplications:acorrelativestudy [J].SuperconductorScienceandTechnology,2019,32(2):024001.

[59] JasiakK,GronostajskiZ,JablońskaMB.Experimentalandnumericaldeterminationofthetemperatureof TWIPsteelduringdynamictensiletesting [J].MaterialsResearchandTechnology,2024,28:856-864.

[60] TangJ,HeM,QiaoY,etal.Dynamictensilebehaviorandconstitutivemodelofanovelhigh-strengthandhigh-toughnessplatesteel [J].EngineeringFailureAnalysis,2024,163:108449.

[61] ChenS,LiWB,WangXM,etal.Comparativestudyofthedynamicdeformationofpuremolybdenum

最新录用，非最终出版稿

athighstrainratesandhightemperatures [J].Materials,2021,14(17):4847.
[62] WeiZ.AtomisticmodelingofplasticdeformationinBCCniobiumnanowireunderbending [J].MaterialsTodayCommunications,2024,38:108366.
[63] WangQ,WangJ,LiJ,etal.Consecutivecrystallographicreorientationsandsuperplasticityinbody-centeredcubicniobiumnanowires [J].ScienceAdvances,2018,4(7):eaas8850.
[64] TaylorDMJ,HampshireDP.Thescalinglawforthestraindependenceofthecriticalcurrentdensityin Nb_3Snsuperconductingwires [J].SuperconductorScienceandTechnology,2005,18(12):S241-S252.
[65] MondonicoG,SeeberB,SenatoreC,etal.ImprovementofelectromechanicalpropertiesofanITERinternaltinNb_3Snwire [J].AppliedPhysics,2010,108(9):093906.

Analysis of High-Strain-Rate Deformation Induced Degradation of Critical Properties in Nb_3Sn Superconductors

JIAN Changxu[1], DU Qiaoyi[1], DING He[2], XIAO Gesheng[1], LIU Zhifang[1], QIAO Li[1]
（1. Institute of Applied Mechanics, College of Aerospace Engineering, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, Shanxi, China;
2. School of Aerospace Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, Shanxi, China）

Abstract:Nb_3Sn superconductors are vital for advanced applications like particle accelerators and fusion devices, yet their performance degrades irreversibly under the high-strain-rate dynamic loads encountered during quench or fast excitation. This study integrates molecular dynamics simulations, continuum mechanics, and density functional theory to unravel the underlying multiphysics coupling mechanisms. We probe the elastoplastic response, adiabatic heating from plastic work, and damage evolution in Nb_3Sn composites under high-strain-rate tension. Our analysis reveals that at cryogenic temperatures, the niobium matrix deforms via full-dislocation slip, whereas the brittle Nb_3Sn coating fractures. The associated temperature rise, driven by plastic work dissipation and accumulating with strain, synergizes with deformation-induced damage (amorphization and cracking) to severely degrade superconducting properties. These damage mechanisms cause irreversible electronic structure changes, directly impairing superconductivity. These findings establish a deformation-thermal-damage correlation mechanism, providing a theoretical foundation for the design of resilient superconducting devices.

Keywords: Nb_3Sn composite superconductors; high strain rate; molecular dynamics; decoupling of elastic-plastic deformation; temperature rise; critical properties degradation

最新录用，非最终出版稿