

高压物理学报

GAOYA WULI XUEBAO

1987 年 9 月创刊

2020 年虚拟主题专刊

• 高压物性的计算与模拟 •

目 次

一维黏弹性声子晶体的色散与耗散关系	王 航, 王文强
用于描述 W-Cu 粉末混合物冲击压缩行为的 p - α 与 p - λ 模型适用性	高明悦, 周 强
AlCrFeCuNi 高熵合金力学性能的分子动力学模拟	李 健, 郭晓璇, 马胜国, 李志强, 辛 浩
高压下 MgN_8 晶体结构理论模拟与物性研究	缪 宇, 刘思远, 马雪姣, 金哲学
高压下 HBT 晶体的弹性性质	李 佐, 张凤玲, 廖大麟
仿生 BCC 结构的准静态压缩数值模拟及吸能性	吴 伟, 张 辉, 曹美文, 张 霞, 陈 飞, 梁清香, 常 超
多晶体压剪试样静态加载有限元计算	赵伟业, 赵 聃, 吕 品, 金 涛, 马胜国
《高压物理学报》2020 年虚拟主题专刊名录	《高压物理学报》编辑部



官方网站: www.gywlxb.cn

官方邮箱: gaoya@caep.cn

联系电话: 0816-2490042



《高压物理学报》2020 年虚拟主题专刊名录

- ✧ 高压物性实验研究
- ✧ 高压物性的计算与模拟
- ✧ 高压地球科学
- ✧ 高压实验技术
- ✧ 高压下材料动态响应实验研究
- ✧ 高压下材料动态响应的计算与模拟
- ✧ 复合材料与结构的动态响应计算与模拟
- ✧ 高压科学应用——水下爆炸
- ✧ 高压科学应用——侵彻与防护
- ✧ 高压科学应用——气相爆炸

★ 获取地址: <http://www.gywlxb.cn/topics>

一维黏弹性声子晶体的色散与耗散关系

王 航, 王文强

(中国工程物理研究院流体物理研究所, 四川 绵阳 621999)

摘要: 基于运动方程和广义麦克斯韦本构, 推导了一维黏弹性局域共振型和布拉格散射型声子晶体的色散与耗散关系。结果表明: 对于时间谐波传播问题, 这两种声子晶体的色散关系中均不存在禁带, 波的衰减完全依赖于黏性耗散和周期性调制, 且周期性调制会增强这种耗散作用; 相反, 对于自由波传播问题, 两种声子晶体的色散关系中均存在禁带, 但在禁带之外, 波的衰减仍需借助于黏性耗散和周期性调制。研究结果对于由高分子材料构成的层状复合材料中的应力波传播研究具有一定的意义。

关键词: 声子晶体; 局域共振; 布拉格散射; 广义麦克斯韦黏弹性; 色散关系; 耗散关系

中图分类号: O347.4

文献标识码: A

层状复合材料具有诸多有趣和有用的波动特性, 因此在相关领域受到普遍重视。在冲击波物理领域, 对层状复合材料中的应力波传播特性研究至少有半个多世纪的历史, 人们发现通过改变各层材料的属性、厚度、界面结合强度和加载条件等, 可以在层状结构中产生十分丰富的应力波现象。例如: Lundergan 等^[1]研究了应力波在 10 层环氧树脂和 10 层不锈钢交替组成的结构中的色散现象; Oved 等^[2]研究了有机玻璃和钢交替组成的多层结构中的应力波共振现象; Benson 等^[3]研究了铜/铝、钛/铝多层结构中的应力波异常衰减现象; Zhuang 等^[4]研究了聚碳酸酯分别与铝、不锈钢及玻璃交替组成的多层结构中的应力波, 发现应力波速度低于其组成材料; Franco Navarro 等^[5]研究了铝/钨层状材料中的应力波传播, 发现通过改变加载脉冲的宽度与结构内在特征时间的比值, 可以产生 3 种不同类型的应力波, 即振荡型冲击波、一串孤立波、单一孤立波。由于具有对应力波的衰减作用及其他功能(如提升断裂韧性), 某些层状复合结构常用作冲击波衰减器和复合装甲^[6-8]。

在振动和声学领域, 声子晶体^[9-10]和声学超材料^[10-11]研究于 20 世纪末 21 世纪初陆续兴起, 层状复合材料属于其中的一维情形。狭义而言, 声子晶体和声学超材料有所不同, 前者的关键特性之一是由布拉格散射(Bragg scattering, BS)形成频率禁带从而禁止某频率范围的波通过, 后者的关键特性是由局域共振(Local resonance, LR)机制产生负密度、负模量、负折射等负参数效应^[12-13]。但在文献中, 两种名称常常混用, 即声子晶体也可以称为声学超材料, 而声学超材料如果具有周期性结构也可以称为声子晶体。声子晶体和声学超材料的波动特性使其在减振降噪中具有重要的应用价值。为方便起见, 本研究统一使用声子晶体的名称, 但区分 LR 和 BS 两种类型。

本研究将报道我们在一维黏弹性声子晶体色散与耗散关系研究中的初步进展。黏弹性是层状复合结构中常用的基础材料(即高分子材料)的基本力学属性, 但是从现有文献上看, 无论在冲击波物理相关领域还是在振动和声学领域, 黏弹性对层状复合结构波动特性的影响都没有得到充分的研究。在声子晶体研究中, 大多数都不考虑黏弹性, 或者仅用十分简化的黏弹性本构进行描述^[9-10]。直到近年来

* 收稿日期: 2020-06-21; 修回日期: 2020-07-15

基金项目: 中国工程物理研究院规划发展课题(TCGH0111)

作者简介: 王 航(1995—), 男, 硕士研究生, 主要从事材料与结构动态响应的数值模拟研究。

E-mail: dtwh1995@163.com

通信作者: 王文强(1968—), 男, 博士, 研究员, 主要从事冲击波物理与爆炸力学相关问题研究。

E-mail: wwq_mech@163.com

才可将真实反映高分子材料黏弹性的广义麦克斯韦本构^[14]逐渐应用于声子晶体的相关研究,如利用平面波展开法研究二维黏弹性声子晶体的禁带和耗散特性^[15-17]。

从高强度应力波防护到减振降噪,一维黏弹性声子晶体的色散与耗散关系都值得深入研究。正如本研究将展示的:一方面,黏弹性改变了纯弹性声子晶体的波动衰减特性,甚至改变了其禁带的存在性;另一方面,声子晶体的周期性结构也改变了无结构均质黏弹性材料的波动衰减特性(总的来看是促进了衰减)。

具体而言,本研究将首先建立离散形式的一维黏弹性 LR 和 BS 型声子晶体模型,其中离散形式作为连续介质的简化近似^[18-21],黏弹性由广义麦克斯韦本构模型表示,进而从运动方程出发,推导求解模型的色散与耗散关系。本研究结果有助于进一步推动基于高分子材料的声子晶体研究,也可冲击波物理相关领域层状复合结构中的应力波研究提供参考。

1 离散形式的一维黏弹性声子晶体模型

黏弹性材料在任意时刻的行为都与其经历的全部历史有关,其应力-应变关系由遗传积分表示^[14]

$$\sigma(t) = \int_{-\infty}^t E(t-s) \frac{\partial \varepsilon}{\partial s} ds \quad (1)$$

式中: σ 为应力, ε 为应变, $E(t)$ 为模量, s 为时间, t 为当前时刻。 $E(t)$ 的具体形式取决于本构模型,对于广义麦克斯韦本构模型^[14], $E(t)$ 可表示为

$$E(t) = \sum_{i=1}^N E_i \exp\left(\frac{-t}{\tau_i}\right) \quad (2)$$

式中: E_i 、 η_i 、 τ_i 分别表示第 i 个麦克斯韦单元的弹性模量、黏性系数和松弛时间, $\tau_i = \eta_i/E_i$; N 为麦克斯韦单元的数目。

离散形式的一维黏弹性 LR 模型和 BS 模型分别是由图 1(a)、图 1(b)所示的单元周期性重复连接而成的一维无限长链。在有的文献^[10]中,二者分别被称作 Mass in Mass Structure(LR 型)和 Mass and Mass Structure(BS 型),这是从它们各自的质量块与连接体的不同排列形式来作的形象区分。从原理上说,BS 结构是利用周期变化的材料特性与波的相互作用,而 LR 结构则是利用单个散射体(振子)与波的相互作用。设模型中单元的长度为 L ,质量块的质量为 m_a 和 m_b 。各质量块之间链接的模量由式(2)给出。设接触面积为1,则质量块的受力等于应力 σ ,由式(1)和式(2)联立确定。

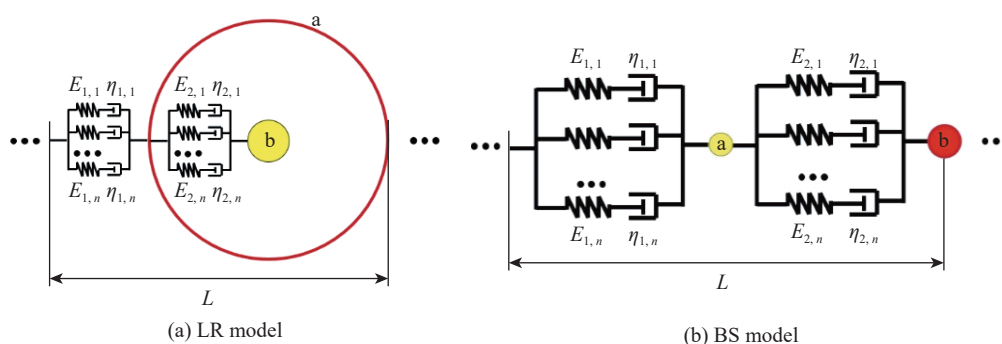


图1 离散形式的一维黏弹性声子晶体

Fig. 1 One dimensional viscoelastic phononic crystals in discrete form

2 复波数实频率假定下的色散与耗散关系

2.1 LR 模型的色散与耗散关系

考虑到模型的周期性,取第 n 个单元,对其中质量块 m_a 和 m_b 进行受力分析,得到如下两个方程

$$F_n^a(t) = \frac{2}{L} \int_{-\infty}^t E_1(t-s)(\dot{u}_{n+1}^a + \dot{u}_{n-1}^a - 2\dot{u}_n^a) ds + \frac{2}{L} \int_{-\infty}^t E_2(t-s)(\dot{u}_n^b - \dot{u}_n^a) ds \quad (3)$$

$$F_n^b(t) = \frac{2}{L} \int_{-\infty}^t E_2(t-s)(\dot{u}_n^a - \dot{u}_n^b) ds \quad (4)$$

式中: u 为相对位移, \dot{u} 为位移 u 对时间 s 的微分。

代入牛顿第二定律, 得到两个质量块的运动方程

$$\frac{L}{2} m_a \ddot{u}_n^a = \sum_{l=1}^N E_{1,l} \exp(-t/\tau_{1,l}) \int_{-\infty}^t \exp(s/\tau_{1,l})(\dot{u}_{n+1}^a + \dot{u}_{n-1}^a - 2\dot{u}_n^a) ds + \sum_{l=1}^N E_{2,l} \exp(-t/\tau_{2,l}) \int_{-\infty}^t \exp(s/\tau_{2,l})(\dot{u}_n^b - \dot{u}_n^a) ds \quad (5)$$

$$\frac{L}{2} m_b \ddot{u}_n^b = \sum_{l=1}^N E_{2,l} \exp(-t/\tau_{2,l}) \int_{-\infty}^t \exp(s/\tau_{2,l})(\dot{u}_n^a - \dot{u}_n^b) ds \quad (6)$$

式中: 上标 a、b 区分质量块, 下标区分单元。

为了得到色散与耗散关系, 选取简谐形式的试探解

$$u_n^a = U_a \exp[i(\omega t - knL)] \quad (7)$$

$$u_n^b = U_b \exp[i(\omega t - knL)] \quad (8)$$

式中: U 为振幅, ω 为频率, k 为波数, L 为单元长度。将式(7)、式(8)代入式(5)和式(6), 得到关于频率 ω 与波数 k 的方程

$$-\frac{L}{2} m_a U_a \omega^2 = i\omega U_a [\exp(-ikL) + \exp(ikL) - 2] \sum_{l=1}^N \frac{E_{1,l} \tau_{1,l}}{1 + i\omega \tau_{1,l}} + i\omega (U_b - U_a) \sum_{l=1}^N \frac{E_{2,l} \tau_{2,l}}{1 + i\omega \tau_{2,l}} \quad (9)$$

$$-\frac{L}{2} m_b U_b \omega^2 = i\omega (U_a - U_b) \sum_{l=1}^N \frac{E_{2,l} \tau_{2,l}}{1 + i\omega \tau_{2,l}} \quad (10)$$

消去 U_a 和 U_b , 最终得到方程

$$-\frac{L}{2} m_a \omega^2 = i\omega [\exp(-ikL) + \exp(ikL) - 2] \sum_{l=1}^N \frac{E_{1,l} \tau_{1,l}}{1 + i\omega \tau_{1,l}} + i\omega \frac{\frac{L}{2} m_b \omega^2 \sum_{l=1}^N \frac{E_{2,l} \tau_{2,l}}{1 + i\omega \tau_{2,l}}}{-\frac{L}{2} m_b \omega^2 + i\omega \sum_{l=1}^N \frac{E_{2,l} \tau_{2,l}}{1 + i\omega \tau_{2,l}}} \quad (11)$$

可以看出, 若使式(11)成立, 波数 k 和频率 ω 中需至少有一个为复数。若同为复数, 则方程数目(分离式(11)得到的实部和虚部, 2 个方程)与未知数数目(两个复数的实部和虚部, 4 个未知数)不匹配, 难以求解讨论。故以下仅将波数 k 视作复数, 频率 ω 视作实数, 或者反过来, 将频率 ω 视作复数, 波数 k 视作实数。这里先采取第一种假定。

令 $k = \alpha + i\beta$, 其中 α 称为真实波数, β 是与耗散有关的衰减系数。代入式(11)中, 利用欧拉公式, 分离方程两边的实部和虚部得到

$$\begin{cases} C_1(e^{\beta L} + e^{-\beta L})\cos(\alpha L) - D_1(e^{\beta L} - e^{-\beta L})\sin(\alpha L) = \xi \\ D_1(e^{\beta L} + e^{-\beta L})\cos(\alpha L) + C_1(e^{\beta L} - e^{-\beta L})\sin(\alpha L) = \psi \end{cases} \quad (12)$$

$$\text{式中: } A = \frac{L}{2} m_a \omega^2, B = \frac{L}{2} m_b \omega^2, C_{1(2)} = \sum_{l=1}^N \frac{E_{1(2),l} \tau_{1(2),l} \omega}{1 + \omega^2 \tau_{1(2),l}^2}, D_{1(2)} = \sum_{l=1}^N \frac{E_{1(2),l} \tau_{1(2),l}^2 \omega^2}{1 + \omega^2 \tau_{1(2),l}^2}, \xi = \frac{B^2 C_2}{(D_2 - B)^2 + C_2^2} + 2C_1, \psi =$$

$$2D_1 - A - \frac{B(D_2^2 + C_2^2 - BD_2)}{(D_2 - B)^2 + C_2^2}.$$

由方程组(12)可以得到

$$\begin{cases} \sin(\alpha L) = \frac{P}{R} \frac{x}{x^2 - 1} \\ \cos(\alpha L) = \frac{Q}{R} \frac{x}{x^2 + 1} \end{cases} \quad (13)$$

式中: $P = C_1\psi - D_1\xi$, $Q = C_1\xi + D_1\psi$, $R = C_1^2 + D_1^2$, $x = e^{\beta L}$ 。

由式(13)得到

$$x^2 = \frac{Q \tan(\alpha L) + P}{Q \tan(\alpha L) - P} \quad (14)$$

将式(14)代入式(13)中的第 1 个方程, 得到

$$4R^2 \sin^4(\alpha L) + (Q^2 + P^2 - 4R^2) \sin^2(\alpha L) - P^2 = 0 \quad (15)$$

求解这个关于 $\sin^2(\alpha L)$ 的一元二次方程, 得到

$$\sin^2(\alpha L) = \frac{-(Q^2 + P^2 - 4R^2) + \sqrt{(Q^2 + P^2 - 4R^2)^2 + 16R^2P^2}}{8R^2} \quad (16)$$

这里由于 $\sin^2(\alpha L)$ 的非负性, 舍去了负值解。将式(16)代入式(13)中的第 1 个方程, 得到

$$\sinh^2(\beta L) = \frac{P^2}{4R^2 \sin^2(\alpha L)} \quad (17)$$

至此, 就得到了在黏弹性 LR 模型中真实波数 α 与频率 ω 的关系, 即色散关系式(16), 以及衰减系数 β 与频率 ω 的关系, 即耗散关系式(17)。

2.2 BS 模型的色散与耗散关系

类似地, 考虑到模型的周期性, 选取第 n 个单元进行分析, 得到单元中质量块 m_a 和 m_b 的运动方程

$$\frac{L}{2} m_a \ddot{u}_n^a = \sum_{l=1}^N E_{2,l} \exp\left(-\frac{t}{\tau_{2,l}}\right) \int_{-\infty}^t \exp\left(\frac{s}{\tau_{2,l}}\right) (\dot{u}_n^b - \dot{u}_n^a) ds - \sum_{l=1}^N E_{1,l} \exp\left(-\frac{t}{\tau_{1,l}}\right) \int_{-\infty}^t \exp\left(\frac{s}{\tau_{1,l}}\right) (\dot{u}_n^a - \dot{u}_{n-1}^b) ds \quad (18)$$

$$\frac{L}{2} m_b \ddot{u}_n^b = \sum_{l=1}^N E_{2,l} \exp\left(-\frac{t}{\tau_{2,l}}\right) \int_{-\infty}^t \exp\left(\frac{s}{\tau_{2,l}}\right) (\dot{u}_n^a - \dot{u}_n^b) ds + \sum_{l=1}^N E_{1,l} \exp\left(-\frac{t}{\tau_{1,l}}\right) \int_{-\infty}^t \exp\left(\frac{s}{\tau_{1,l}}\right) (\dot{u}_{n+1}^a - \dot{u}_n^b) ds \quad (19)$$

将试探解式(7)和式(8)代入上述运动方程, 得到

$$-\frac{L}{2} m_a U_a \omega^2 = i\omega(U_b - U_a) \sum_{l=1}^N \frac{E_{2,l} \tau_{2,l}}{1 + i\omega \tau_{2,l}} - i\omega[U_a - U_b \exp(ikL)] \sum_{l=1}^N \frac{E_{1,l} \tau_{1,l}}{1 + i\omega \tau_{1,l}} \quad (20)$$

$$-\frac{L}{2} m_b U_b \omega^2 = i\omega(U_a - U_b) \sum_{l=1}^N \frac{E_{2,l} \tau_{2,l}}{1 + i\omega \tau_{2,l}} + i\omega[U_a \exp(-ikL) - U_b] \sum_{l=1}^N \frac{E_{1,l} \tau_{1,l}}{1 + i\omega \tau_{1,l}} \quad (21)$$

消去 U_a 和 U_b , 最终得到方程

$$\begin{aligned} & \sum_{l=1}^N \frac{i\omega E_{1,l} \tau_{1,l}}{1 + i\omega \tau_{1,l}} \sum_{l=1}^N \frac{i\omega E_{2,l} \tau_{2,l}}{1 + i\omega \tau_{2,l}} [\exp(ikL) + \exp(-ikL) - 2] + \frac{L}{2} m_b \omega^2 \left(\sum_{l=1}^N \frac{i\omega E_{1,l} \tau_{1,l}}{1 + i\omega \tau_{1,l}} + \sum_{l=1}^N \frac{i\omega E_{2,l} \tau_{2,l}}{1 + i\omega \tau_{2,l}} \right) = \\ & -\frac{L}{2} m_a \omega^2 \left(-\frac{L}{2} m_b \omega^2 + \sum_{l=1}^N \frac{i\omega E_{1,l} \tau_{1,l}}{1 + i\omega \tau_{1,l}} + \sum_{l=1}^N \frac{i\omega E_{2,l} \tau_{2,l}}{1 + i\omega \tau_{2,l}} \right) \end{aligned} \quad (22)$$

与式(11)类似, 若使式(22)成立, 可将波数 k 视作复数, 频率 ω 视作实数, 或者反过来, 将频率 ω 视作复数, 波数 k 视作实数。这里同样先采取第一种假定。

令 $k = \alpha + i\beta$, 代入式(22)并分离方程两边的实部和虚部, 得到方程组

$$\begin{cases} (C_1 D_2 + C_2 D_1)(e^{\beta L} + e^{-\beta L}) \cos(\alpha L) - (D_1 D_2 - C_1 C_2)(e^{\beta L} - e^{-\beta L}) \sin(\alpha L) = \xi \\ (D_1 D_2 - C_1 C_2)(e^{\beta L} + e^{-\beta L}) \cos(\alpha L) + (C_1 D_2 + C_2 D_1)(e^{\beta L} - e^{-\beta L}) \sin(\alpha L) = \psi \end{cases} \quad (23)$$

式中: $A = \frac{L}{2}m_a\omega^2$, $B = \frac{L}{2}m_b\omega^2$, $C_{1(2)} = \sum_{l=1}^N \frac{E_{1(2),l}\tau_{1(2),l}\omega}{1+\omega^2\tau_{1(2),l}^2}$, $D_{1(2)} = \sum_{l=1}^N \frac{E_{1(2),l}\tau_{1(2),l}^2\omega^2}{1+\omega^2\tau_{1(2),l}^2}$, $\xi = 2(C_1D_2 + C_2D_1) - (A+B)(C_1+C_2)$, $\psi = 2(D_1D_2 - C_1C_2) - (A+B)(D_1+D_2) + AB$ 。求解得到与式(13)形式相同的结果, 区别在于这里 $P = (C_1D_2 + C_2D_1)\psi - (D_1D_2 - C_1C_2)\xi$, $Q = (D_1D_2 - C_1C_2)\psi + (C_1D_2 + C_2D_1)\xi$, $R = (D_1D_2 - C_1C_2)^2 + (C_1D_2 + C_2D_1)^2$, $x = e^{\beta L}$ 。可以发现, 继续求解后, 最终得到形式上与式(16)和式(17)完全相同的色散与耗散关系式。

2.3 关于不存在禁带的判断

色散关系式(16)的右端显然非负, 令其大于 1, 即

$$\frac{-(Q^2 + P^2 - 4R^2) + \sqrt{(Q^2 + P^2 - 4R^2)^2 + 16R^2P^2}}{8R^2} > 1 \quad (24)$$

可推导得到 $R^2Q^2 < 0$, 这在 ω 为实数时显然不成立, 因此证得 $0 \leq \sin^2(\alpha L) \leq 1$ 。

于是可以发现, 无论频率 ω 为何值, 均满足 $\sin^2(\alpha L)$ 有解的条件, 换言之, 总有真实波数 α 与之对应。于是可以确定 LR 和 BS 两种模型的色散关系中均不存在禁带。

值得注意的是, 对于纯弹性 LR 与 BS 结构而言, 色散关系中是存在禁带的。为了探究上述色散关系在黏弹性退化至纯弹性(松弛时间 τ 趋于无穷大)时是否存在禁带, 绘制了如图 2 所示的不同松弛时间下的色散关系图, 其中: $N = 1$, $m_a = 1$, $m_b = 2$, $L = 2$, $E_1 = E_2 = 1$ 。

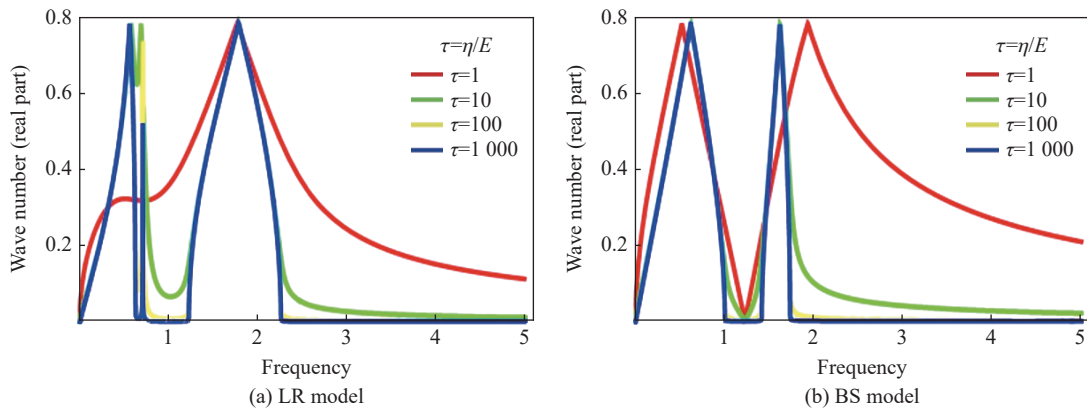


图 2 不同 τ 下 LR 和 BS 模型的色散关系

Fig. 2 Dispersion relation of LR and BS model with different τ

从图 2 可以看出, 对两种结构而言, 色散关系中确实不存在禁带, 即对每个频率取值都可以找到与之对应的非零真实波数 α , 色散关系难以退化至纯弹性情形下的“禁带”模型。将式(11)和式(22)与弹性情形下 LR、BS 结构的方程^[22-23]对比, 可以发现, 波数 k 仅出现在自然指数项中, 且形式与弹性情形下的方程一致, 而弹性情形下的弹性模量 E 与黏弹性情形下的“等效模量” E_{eff} 相对应。

$$E_{\text{eff}} = \sum_{l=1}^N \frac{i\omega E_l \tau_l}{1 + i\omega \tau_l} \quad (25)$$

当松弛时间 τ 趋于无穷大时, 有 $E_{\text{eff}} = E$, 意味着式(11)和式(22)在 τ 趋于无穷大时可以退化至纯弹性情形。但是, 若将 k 视作复数, 原先的方程被分离成实部和虚部两个方程进行后续的求解, 就破坏了方程的形式, 而造成复数波数假定下的色散关系无法退化至纯弹性情形。

2.4 周期性调制的衰减作用

由于在复数波数实数频率假定下, 上述 BS 和 LR 模型的色散关系中不存在禁带, 所以波的衰减将完全由黏性耗散和周期性调制引起。如果将单原子链视作均匀材料的离散化, 那么将质量块交替排列的 BS 模型与之对比, 可以看出由质量差异排列导致的周期性调制所带来的影响。

由耗散关系式(17)可以得到

$$e^{2\beta L} = \frac{2R^2 \sin^2(\alpha L) + P^2 - \sqrt{4R^2 P^2 \sin^2(\alpha L) + P^4}}{2R^2 \sin^2(\alpha L)} \quad (26)$$

将式(16)代入, 绘制出耗散曲线(β - ω 关系), 如图 3 所示。各项参数为: $E_1 = E_2 = 1$, $\tau_1 = \tau_2 = 1$, $L = 2$ 。可以看出, 质量比越大, 耗散系数(其绝对值)越大, 耗散越明显, 因此可以认为, 虽然此时周期性结构中没有禁带, 但周期性调制增强了对波的衰减作用。

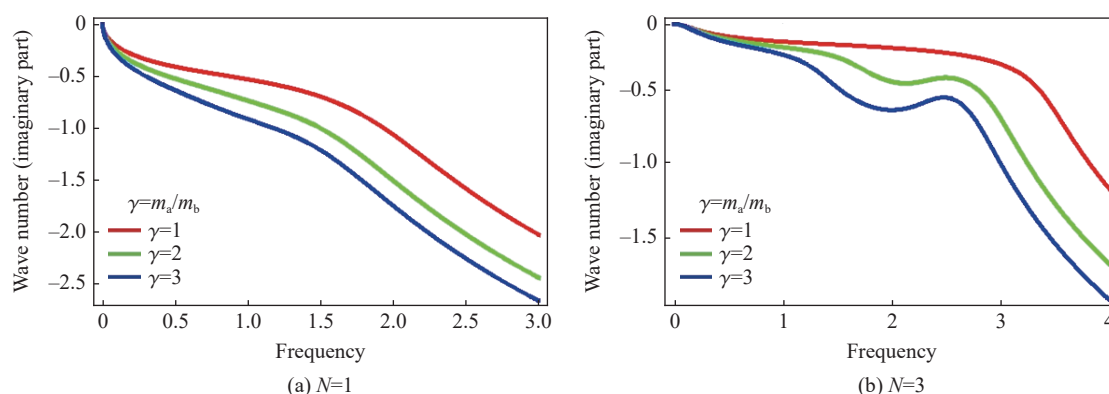


图 3 $N = 1$ 和 $N = 3$ 时 BS 模型的耗散关系

Fig. 3 Dissipation relation of BS model when $N = 1$ and $N = 3$

类似地, 可以得到 LR 结构的耗散曲线, 如图 4 所示。图 4 中也反映了与 BS 结构的对比情况。可以看出, LR 结构产生的耗散作用只在某一频率区间内大于 BS 结构。比较不同质量比下的耗散曲线, 可以看出, 质量比越大, 耗散作用越明显, 这一点与 BS 模型一致。

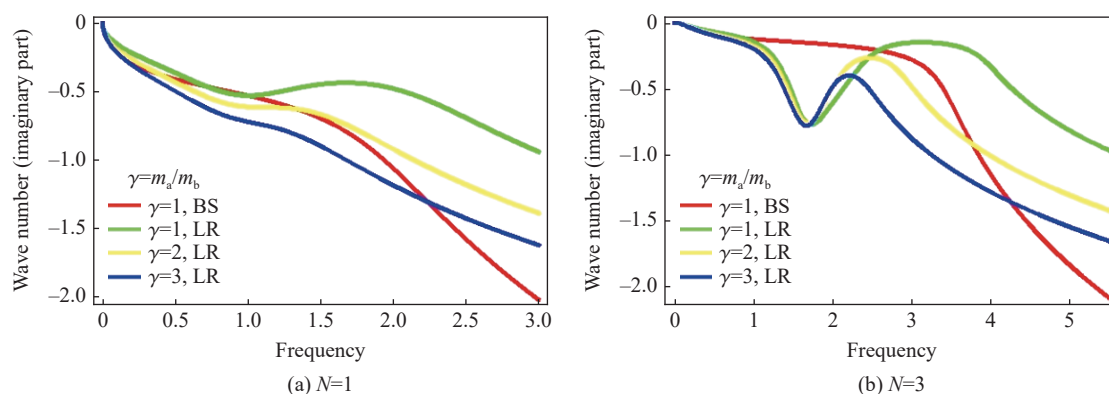


图 4 $N = 1$ 和 $N = 3$ 时 LR 模型的耗散关系

Fig. 4 Dissipation relation of LR model when $N = 1$ and $N = 3$

综上, 虽然不存在禁带, 但黏性产生的耗散作用仍会导致波的衰减, 且对于两种模型而言, 周期性质量差异的调制会增强这种耗散作用。

3 复频率实波数假定下的色散与耗散关系

下面采取复频率实波数假定。选取如下试探解形式

$$u_{a,b} = U_{a,b} \exp(\lambda t - i n k L) \quad (27)$$

式中: 波数 k 为实数; 令 $\lambda = \alpha + i\beta$, 其中 β 为真实频率, α 是与耗散有关的衰减系数。

3.1 LR 模型的色散与耗散关系

将式(27)代入运动方程式(5)和式(6)中, 得到

$$\frac{L}{2}m_a U_a \lambda^2 = \lambda U_a [\exp(-ikL) + \exp(ikL) - 2] \sum_{l=1}^N \frac{E_{1,l} \tau_{1,l}}{1 + \lambda \tau_{1,l}} + \lambda (U_b - U_a) \sum_{l=1}^N \frac{E_{2,l} \tau_{2,l}}{1 + \lambda \tau_{2,l}} \quad (28)$$

$$\frac{L}{2}m_b U_b \lambda^2 = \lambda (U_a - U_b) \sum_{l=1}^N \frac{E_{2,l} \tau_{2,l}}{1 + \lambda \tau_{2,l}} \quad (29)$$

消去 U_a 和 U_b , 得到

$$\frac{L}{2}m_a \lambda^2 = 2\lambda [\cos(kL) - 1] \sum_{l=1}^N \frac{E_{1,l} \tau_{1,l}}{1 + \lambda \tau_{1,l}} + \lambda \frac{-\frac{L}{2}m_b \lambda^2 \sum_{l=1}^N \frac{E_{2,l} \tau_{2,l}}{1 + \lambda \tau_{2,l}}}{\frac{L}{2}m_b \lambda^2 + \lambda \sum_{l=1}^N \frac{E_{2,l} \tau_{2,l}}{1 + \lambda \tau_{2,l}}} \quad (30)$$

求得 λ 后分离实部和虚部, 虚部 β 关于 k 的表达式便是色散关系式, 实部 α 关于 k 的表达式是耗散关系式。这是一个关于 λ 的高次方程。阿贝尔曾证明, 高于四次的一般方程没有求根公式, 因此只能得到 $N=1$ 时 λ 的解析解, 而对于 $N>1$ 的情形, 由于 λ 的次幂大于 4, 故无法得到解析解。但原则上可以通过数值计算方式得到给定 k 情形下 λ 的解, 从而绘制出色散图和耗散图。

3.2 BS 模型的色散与耗散关系

将试解式(27)代入运动方程式(18)和式(19)中, 得到

$$\frac{L}{2}m_a U_a \lambda^2 = \lambda (U_b - U_a) \sum_{l=1}^N \frac{E_{2,l} \tau_{2,l}}{1 + \lambda \tau_{2,l}} - \lambda [U_a - U_b \exp(ikL)] \sum_{l=1}^N \frac{E_{1,l} \tau_{1,l}}{1 + \lambda \tau_{1,l}} \quad (31)$$

$$\frac{L}{2}m_b U_b \lambda^2 = \lambda (U_a - U_b) \sum_{l=1}^N \frac{E_{2,l} \tau_{2,l}}{1 + \lambda \tau_{2,l}} + \lambda [U_a \exp(-ikL) - U_b] \sum_{l=1}^N \frac{E_{1,l} \tau_{1,l}}{1 + \lambda \tau_{1,l}} \quad (32)$$

消去 U_a 和 U_b , 得到

$$2 \sum_{l=1}^N \frac{\lambda E_{1,l} \tau_{1,l}}{1 + \lambda \tau_{1,l}} \sum_{l=1}^N \frac{\lambda E_{2,l} \tau_{2,l}}{1 + \lambda \tau_{2,l}} [\cos(kL) - 1] - \frac{L}{2}m_b \lambda^2 \left(\sum_{l=1}^N \frac{\lambda E_{1,l} \tau_{1,l}}{1 + \lambda \tau_{1,l}} + \sum_{l=1}^N \frac{\lambda E_{2,l} \tau_{2,l}}{1 + \lambda \tau_{2,l}} \right) = \frac{L}{2}m_a \lambda^2 \left(\frac{L}{2}m_b \lambda^2 + \sum_{l=1}^N \frac{\lambda E_{1,l} \tau_{1,l}}{1 + \lambda \tau_{1,l}} + \sum_{l=1}^N \frac{\lambda E_{2,l} \tau_{2,l}}{1 + \lambda \tau_{2,l}} \right) \quad (33)$$

求得 λ 后分离实部和虚部, 得到色散与耗散关系式。同样地, 这个关于 λ 的方程仅在 $N=1$ 时存在解析解, 当 $N>1$ 时由于 λ 的次幂大于 4 而无法得到解析解。但原则上依然可以通过数值计算方式求得某一给定 k 情形下的 λ , 即可画出色散图和耗散图。

3.3 $N=1$ 和 $N=3$ 时色散和耗散关系的进一步讨论

为了进一步探究色散与耗散关系, 本研究具体探讨 $N=1$ 和 $N=3$ 两种情形。前者对应方程有解析解, 即可以得到色散和耗散关系的解析表达式; 后者则需要通过数值求解得到散点图。以下情形均舍去了频率虚部为零的解, 即不考虑真实频率为零的情况。

在 $N=1$ 的情形下, 为了简化式(30)和式(33)且不失一般性, 可令 $m_a=1$, $m_b=2$, $E_1=1$, $E_2=2$, $\tau_1=\tau_2=1$, $L=2$ 。

对于 LR 模型, 代入式(30), 整理得到

$$\lambda^4 + 2\lambda^3 + [6 - 2\cos(2k)]\lambda^2 + [5 - 2\cos(2k)]\lambda - 2[\cos(2k) - 1] = 0 \quad (34)$$

求解这个四次方程, 得到 4 个解析解

$$\begin{cases} \lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left(-1 \pm \sqrt{-9 + 4\cos(2k) - 2\sqrt{19 - 10\cos(2k)}} \right) \\ \lambda_{3,4} = \frac{1}{2} \left(-1 \pm \sqrt{-9 + 4\cos(2k) + 2\sqrt{19 - 10\cos(2k)}} \right) \end{cases} \quad (35)$$

分离这4个解的虚部,在 $k \in [-\pi/L, \pi/L]$ 区间画出色散曲线,如图5(a)所示。

对于BS模型,式(33)可以化简为

$$2\lambda^4 + 4\lambda^3 + 11\lambda^2 + 9\lambda - 4[\cos(2k) - 1] = 0 \quad (36)$$

求解这个四次方程,得到4个解析解

$$\begin{cases} \lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \left(-1 \pm \sqrt{-8 - \sqrt{49 + 32\cos(2k)}} \right) \\ \lambda_{3,4} = \frac{1}{2} \left(-1 \pm \sqrt{-8 + \sqrt{49 + 32\cos(2k)}} \right) \end{cases} \quad (37)$$

分离这4个解的虚部,在 $k \in [-\pi/L, \pi/L]$ 区间画出色散曲线,如图5(b)所示。

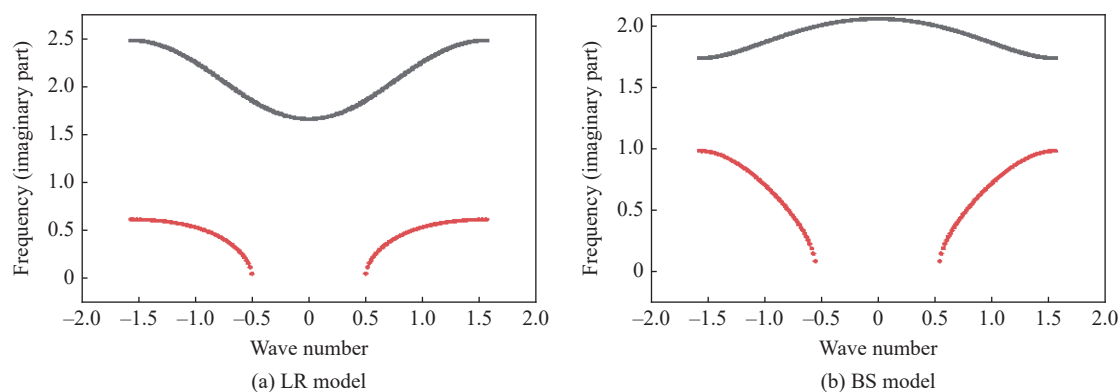


图5 $N=1$ 时 LR 和 BS 模型的色散关系

Fig. 5 Dispersion relation of LR and BS model when $N=1$

可以看出,这种耗散由时间的系数体现,即振幅随时间衰减的情形下,两种模型是存在禁带的,在禁带范围内,对真实频率 β 而言没有与之对应的波数 k 。

为了探究当 λ 的方程为更高次时是否依然存在禁带,研究 $N=3$ 的情形。如前所述,此时的方程由于幂次大于4而没有解析解,只能通过数值计算方式得到某一给定波数 k 对应方程的数值解,再分离出虚部 β 。当给定的 k 足够多时,可以得到足够多的数据组 (k, β) ,从而得到色散关系图。

对于LR模型,为了简化方程,不妨假定连接两质量块 m_a 和 m_b 的两个广义麦克斯韦模型相同,令 $m_a = 1, m_b = 2, E_{1,1} = E_{2,1} = 1, E_{1,2} = E_{2,2} = 1, E_{1,3} = E_{2,3} = 1, \tau_{1,1} = \tau_{2,1} \rightarrow \infty, \tau_{1,2} = \tau_{2,2} = 1, \tau_{1,3} = \tau_{2,3} = 2, L = 2$ 。此时的模量为

$$E_1(t) = E_2(t) = \sum_{l=1}^3 E_{1,l} \exp\left(-\frac{t}{\tau_{1,l}}\right) = 1 + \exp(-t) + \exp\left(-\frac{t}{2}\right) \quad (38)$$

将上述参数代入式(30)并化简,得到

$$(2\lambda^4 + 3\lambda^3 + \lambda^2)(4\lambda^4 + 6\lambda^3 + 20\lambda^2 + 18\lambda + 3) = 2[\cos(2k) - 1](6\lambda^2 + 6\lambda + 1)(4\lambda^4 + 6\lambda^3 + 8\lambda^2 + 6\lambda + 1) \quad (39)$$

这是关于 λ 的八次方程。首先在 $[-\pi/L, \pi/L]$ 区间内取多个实数 k ,数值求解得到各自对应的方程的解,分离出虚部 β ,得到的色散关系如图6(a)所示。

对BS模型作相同的假定,将参数代入式(33)并化简,得到

$$\lambda^4(1+\lambda)^2(1+2\lambda)^2 = [\cos(2k) - 1](6\lambda^2 + 6\lambda + 1)^2 - 3\lambda^2(1+\lambda)(1+2\lambda)(6\lambda^2 + 6\lambda + 1) \quad (40)$$

得到的色散关系如图 6(b) 所示。

从图 6 可以看到, 当 $N=3$ 时禁带依然存在。尽管无法穷举或严格证明, 我们似乎可以谨慎地推断 N 取任意值时都存在禁带(实际使用广义麦克斯韦模型时, N 一般不超过 20)。

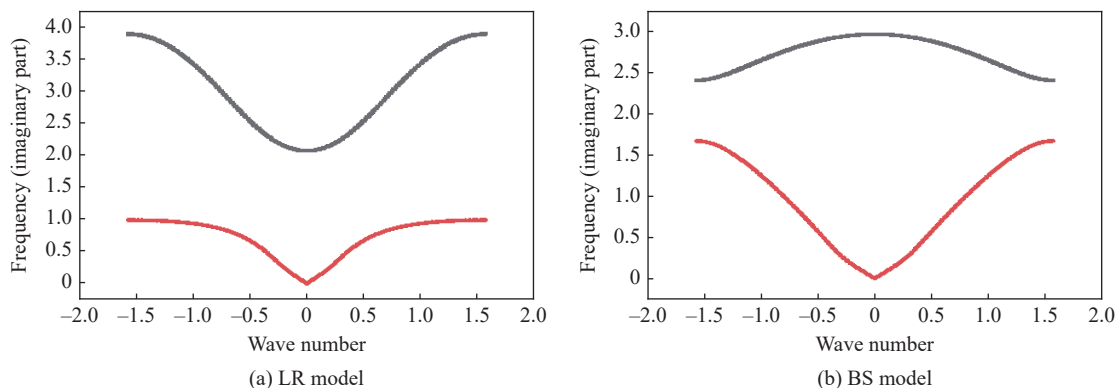


图 6 $N=3$ 时 LR 和 BS 模型的色散关系

Fig. 6 Dispersion relation of LR and BS model when $N=3$

值得注意的是, 这里的色散关系与纯弹性情形类似^[22-23], 这是因为将 $i\omega$ 视作一个复数 λ , 式(11)和式(22)成为关于 λ 的高次方程, 即式(30)和式(33)。与复数波数假定不同, 这里不需要分离实虚部求解, 原方程的形式得到了保留, 且这个高次方程在松弛时间趋于无穷大时会退化为关于 λ 的四次方程, 其形式与弹性情形下关于 ω 的四次方程一致。因此也可以预见, 复数频率假定下的色散关系可以退化至弹性情形。

对式(34)、式(36)、式(39)、式(40)分离出解的实部, 便得到耗散关系, 如图 7 和图 8 所示。可以看出, N 对耗散曲线形状的影响较大。当 N 相同时, LR 和 BS 两种结构的耗散曲线相似, 说明耗散作用受到结构的影响不大, 应主要由黏性引起。

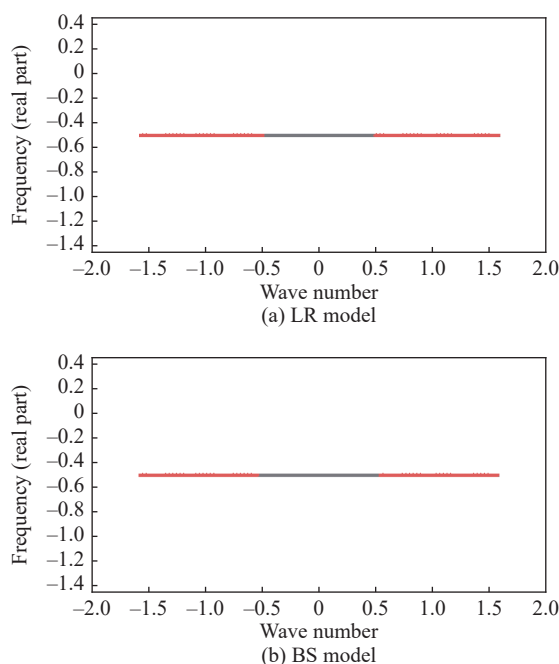


图 7 $N=1$ 时 LR 和 BS 模型的耗散关系

Fig. 7 Dissipation relation of LR and BS models when $N=1$

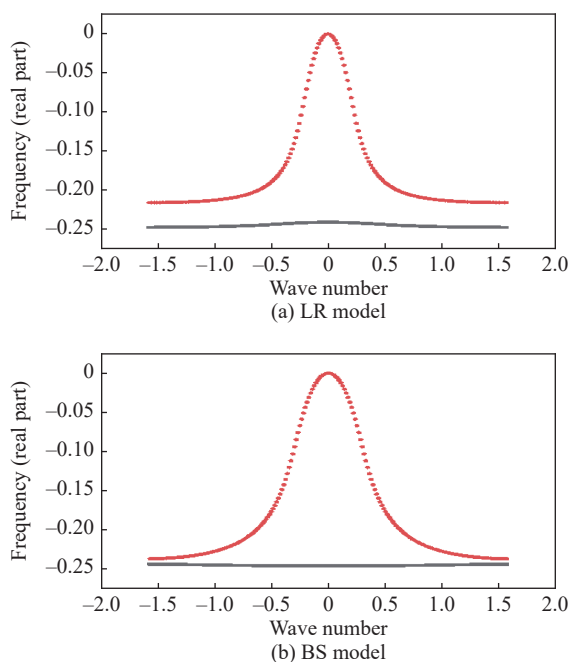


图 8 $N=3$ 时 LR 和 BS 模型的耗散关系

Fig. 8 Dissipation relation of LR and BS models when $N=3$

4 结 论

研究了一维广义麦克斯韦黏弹性情形下 LR 和 BS 型声子晶体的色散与耗散关系。在求解运动方程时,采用了波数为复数、频率为实数,以及频率为复数、波数为实数的两种不同假定,两种假定给出了禁带存在与否的相反结果。

对于复波数假定,推导所得的 LR 和 BS 型声子晶体的色散关系在形式上一致,都不存在禁带,两者的耗散关系在形式上也是一致的。对于复频率假定,LR 和 BS 型声子晶体均得到关于时间系数 λ 的一个高次方程,求解该方程并分离虚部和实部,得到色散和耗散关系,此时色散关系存在禁带,且二者的耗散关系类似。

鉴于复波数假定时黏性造成波幅随空间衰减,该假定适合于时间谐波传播问题^[24-25];复频率假定时,黏性造成波幅随时间衰减,该假定适合于自由波传播问题^[24-25]。因此可以确定:在广义麦克斯韦黏弹性情形下,对于 LR 和 BS 两种声子晶体中的时间谐波传播问题,禁带不能发挥作用,波的衰减完全依赖于黏性耗散和周期性调制,且周期性调制会增强耗散作用;相反,对于这两种声子晶体中的自由波传播问题,禁带能够发挥作用,但在禁带之外,波动的衰减仍需借助于黏性耗散和周期性调制。

本研究不失普遍性的定性认识对于减振降噪和冲击波防护研究具有一定的参考价值。在实际应用中,还需进一步研究连续介质形式的一维声子晶体(或层状复合结构),使用真实材料参数,针对波动或振动能谱中能量集中的频率范围,优化设计结构,以期最大程度地发挥禁带、黏性耗散和周期性调制对波动或振动衰减的作用。

参考文献:

- [1] LUNDERGAN C D, DRUMHELLER D S. Propagation of stress waves in a laminated plate composite [J]. *Journal of Applied Physics*, 1971, 42(2): 669-675.
- [2] OVED Y, LUTTWAK G E, ROSENBERG Z. Shock wave propagation in layered composites [J]. *Journal of Composite Materials*, 1978, 12(1): 84-96.
- [3] BENSON D J, NESTERENKO V F. Anomalous decay of shock impulses in laminated composites [J]. *Journal of Applied Physics*, 2001, 89(7): 3622-3626.
- [4] ZHUANG S M, RAVICHANDRAN G, GRADY D E. An experimental investigation of shock wave propagation in periodically layered composites [J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2003, 51(2): 245-265.
- [5] FRANCO NAVARRO P, BENSON D J, NESTERENKO V F. Nature of short, high-amplitude compressive stress pulses in a periodic dissipative laminate [J]. *Physical Review E*, 2015, 92(6): 062917.
- [6] YADAV S, RAVICHANDRAN G. Penetration resistance of laminated ceramic/polymer structures [J]. *International Journal of Impact Engineering*, 2003, 28(5): 557-574.
- [7] GRUJICIC M, BELL W C, PANDURANGAN B. Design and material selection guidelines and strategies for transparent armor systems [J]. *Materials & Design*, 2012, 34: 808-819.
- [8] MINES R A W. A one-dimensional stress wave analysis of a lightweight composite armour [J]. *Composite Structures*, 2004, 64(1): 55-62.
- [9] HUSSEIN M I, FRAZIER M J. Band structure of phononic crystals with general damping [J]. *Journal of Applied Physics*, 2010, 108(9): 093506.
- [10] HUSSEIN M I, FRAZIER M J. Metadamping: an emergent phenomenon in dissipative metamaterials [J]. *Journal of Sound and Vibration*, 2013, 332(20): 4767-4774.
- [11] LI J, CHAN C T. Double-negative acoustic metamaterial [J]. *Physical Review E*, 2004, 70(5): 055602.
- [12] LIU Z Y, ZHANG X X, MAO Y W, et al. Locally resonant sonic materials [J]. *Science*, 2000, 289(5485): 1734-1736.
- [13] DING Y Q, LIU Z Y, QIU C Y, et al. Metamaterial with simultaneously negative bulk modulus and mass density [J]. *Physical Review Letters*, 2007, 99(9): 093904.
- [14] 王礼立. 应力波基础 [M]. 2 版. 北京: 国防工业出版社, 2005.

- WANG L L. Foundation of stress waves [M]. 2nd ed. Beijing: National Defense Industry Press, 2005.
- [15] ZHU X Y, ZHONG S, ZHAO H D. Band gap structures for viscoelastic phononic crystals based on numerical and experimental investigation [J]. *Applied Acoustics*, 2016, 106: 93–104.
- [16] LEWIŃSKA M A, KOUZNETSOVA V G, VAN DOMMELEN J A W, et al. The attenuation performance of locally resonant acoustic metamaterials based on generalised viscoelastic modelling [J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2017, 126/127: 163–174.
- [17] GUO F X, GUO H, SUN P, et al. Study on band gap properties of two-dimensional phononic crystals based on generalized viscoelastic modeling [J]. *Modern Physics Letters B*, 2019, 33(32): 1950403.
- [18] YAO S S, ZHOU X M, HU G K. Experimental study on negative effective mass in a 1D mass-spring system [J]. *New Journal of Physics*, 2008, 10(4): 043020.
- [19] TAN K T, HUANG H H, SUN C T. Optimizing the band gap of effective mass negativity in acoustic metamaterials [J]. *Applied Physics Letters*, 2012, 101(24): 241902.
- [20] MEAD D J. A general theory of harmonic wave propagation in linear periodic systems with multiple coupling [J]. *Journal of Sound and Vibration*, 1973, 27(2): 235–260.
- [21] LAZAROV B S, THOMSEN J J. Using high-frequency vibrations and non-linear inclusions to create metamaterials with adjustable effective properties [J]. *International Journal of Non-Linear Mechanics*, 2009, 44(1): 90–97.
- [22] HUANG H H, SUN C T, HUANG G L. On the negative effective mass density in acoustic metamaterials [J]. *International Journal of Engineering Science*, 2009, 47(4): 610–617.
- [23] 阎守胜. 固体物理基础 [M]. 北京: 北京大学出版社, 2000.
- YAN S S. Fundamentals of solid state physics [M]. Beijing: Peking University Press, 2000.
- [24] HUSSEIN M I, LEAMY M J, RUZZENE M. Dynamics of phononic materials and structures: historical origins, recent progress, and future outlook [J]. *Applied Mechanics Reviews*, 2014, 66(4): 040802.
- [25] FRAZIER M J, HUSSEIN M I. Viscous-to-viscoelastic transition in phononic crystal and metamaterial band structures [J]. *The Journal of the Acoustical Society of America*, 2015, 138(5): 3169–3180.

Dispersion and Dissipation Relations of One-Dimensional Viscoelastic Phononic Crystals

WANG Hang, WANG Wenqiang

(*Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999, Sichuan, China*)

Abstract: Based on equations of motion and the generalized Maxwell constitutive model, this paper derives the dispersion and dissipation relations of one-dimensional viscoelastic local resonance and Bragg scattering type phononic crystals. The results show that, for the time-harmonic propagation, band gap does not exist in the dispersion relation and the attenuation of wave solely relies on viscous dissipation and periodic modulation, which will enhance the dissipation; on the contrary, for the free wave propagation, there is a band gap in the dispersion relation, but beyond the band gap, the attenuation of wave is still dependent on viscous dissipation and periodic modulation. These results are valuable for the study on stress wave propagation in layered composite materials made of polymers.

Keywords: phononic crystals; local resonance; bragg scattering; generalized Maxwell viscoelasticity; dispersion relation; dissipation relation

用于描述 W-Cu 粉末混合物冲击压缩行为的 $p-\alpha$ 与 $p-\lambda$ 模型适用性

高明悦, 周 强

(北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081)

摘要: 研究了3种 $p-\alpha$ 模型和 $p-\lambda$ 模型在预测非均质 W-Cu 混合粉末冲击压实响应的适用性。利用 Mie-Grüneisen 方法和 Barry 等压混合法, 基于单质 W、Cu 粉末的 Hugoniot 关系预测了同孔隙度的 W-Cu 混合粉末的 Hugoniot 线, 在高压段与实验结果符合较好, 但在低压段与实验偏差较大。分别应用3种 $p-\alpha$ 模型和 $p-\lambda$ 模型对实验结果进行拟合, 发现除 $p-\alpha$ PL 模型外, 其他模型均较好地描述 W-Cu 混合粉末的冲击压缩响应, 受经验参数选择的影响, 所有模型的压溃强度和压缩路径各不相同, 预测功能较差。

关键词: W-Cu 混合粉末; 冲击压缩; $p-\alpha$ 模型; Hugoniot 测量

中图分类号: O347.1; TG301

文献标识码: A

多孔材料和粉末材料的冲击压缩一直是重点研究方向。早期研究主要通过多孔或粉末材料的冲击压缩, 获得在固体材料中无法获得的热力学状态, 以研究完全物态方程, 此类研究关注高压区域, 忽略粉末材料的自身强度^[1-2]。粉末的冲击压实利用冲击波作用于非晶或纳米晶粉末, 在瞬态高温高压下得到近乎致密的块体, 且仍保持原始晶粒尺寸, 是制备亚稳态材料的一种非常有潜力和前景的方法。为了避免高压导致的高温 and 裂纹问题, 往往在 1~10 GPa 的低压范围内实现压实, 因此, 粉末在低压区的致密化行为对于粉末冲击压实研究非常重要。

粉末在低压区的冲击压实是一个复杂的过程, 受到多种因素的影响, 包括粉末材料的弹塑性、初始颗粒的大小和形状等^[3]。为了在较宽的压力范围内更好地描述粉末的压实过程, 一般将这一过程分解为弹性段和塑性段, 如图1所示, 其中: α_E 、 p_E 为弹性段结束时的孔隙度和压力, 由于在整个压缩过程中, 弹性段仅占很小部分, 一般都忽略不计, 多数模型取 $\alpha_E = \alpha_0$; 当压力超过 p_E 后, 进入塑性段, 随着颗粒形变和孔隙坍塌, 孔隙率逐渐降低, 压力达到 p_s 时, 粉末完全压实, p_s 也被称为压溃强度。目前已经有较多模型描述粉末压实响应, 但存在两个假设前提: (1) 忽略了剪切强度;

(2) 在同等压力、温度条件下, 粉末和固体材料的比内能是相等的。假设(1)使得模型只能描述由于孔隙闭合导致的不可逆压实; 假设(2)忽略了孔隙和颗粒的表面能, 更适合描述颗粒较大的粉末体系。

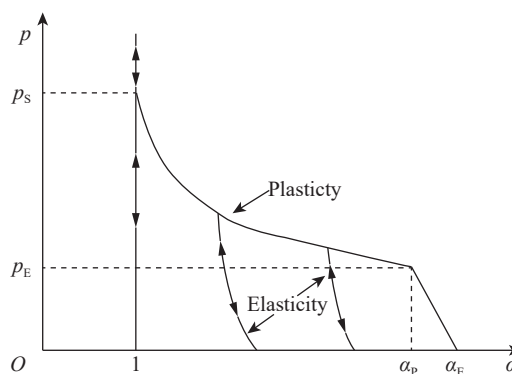


图1 粉末或多孔材料低压区域冲击压缩行为示意图

Fig. 1 Compressive behavior of powder or porous material

* 收稿日期: 2019-05-27; 修回日期: 2019-06-11

作者简介: 高明悦(1993—), 女, 硕士, 主要从事混合粉末冲击压缩行为研究. E-mail: 343702781@qq.com

通信作者: 周 强(1983—), 男, 博士, 特别副研究员, 主要从事材料冲击动力学、爆炸加工等方面研究.

E-mail: zqpcgm@gmail.com

在众多描述颗粒或粉末材料动态压实行行为的模型中,以 p - α 模型^[4-7] 和 p - λ 模型^[8] 应用最为广泛,是典型的描述型模型,这类模型结合了粉末材料本征特性,通过实验数据拟合获得模型的关键参数。尽管模型的具体形式不同,但都包含一个或者多个经验拟合参数。通常情况下这些参数与可测量的物理参数没有直接关系,只是为了使模型更好地与实验数据匹配,这种灵活性使模型可以很好地描述某种特定粉末系统的冲击压实过程。

对于由不同性质粉末组成的混合物,粉末冲击压实过程变得更加复杂。目前并没有有效的方法建立混合粉末冲击压缩方程,一般可通过 0 K 混合法则^[9-10] 或质量分数加权平均法则^[11-12] 先得到混合固体 Hugoniot 线,再经等容 Mie-Grüneisen 方法计算得到粉体的冲击压缩方程,但这种方法的计算过程繁琐,需要专门程序计算,而且其有效性缺乏实验验证。

本研究测量了 W-Cu 混合粉末的 Hugoniot 数据,系统分析了测量误差;然后分别应用 p - α 和 p - λ 等模型对测量数据进行拟合;利用 Mie-Grüneisen 方法^[13] 得到同孔隙度的 W、Cu 单质粉末的 Hugoniot 线,按照 Barry 等压混合法则^[14] 预测同孔隙度的 W-Cu 混合粉末的 Hugoniot 线,并与测量得到的数据进行对比,探讨 p - α 和 p - λ 等模型在描述混合粉末冲击压缩行为时的适用性和经单质粉末 Hugoniot 线预测混合粉末 Hugoniot 线的可行性。

1 实验测试

1.1 W-Cu 混合粉末 Hugoniot 测量实验装置

实验使用的 W 和 Cu 单质粉末均为市购,纯度均为 99.9%,粉末粒度均为 1 μm 。W、Cu 粉按照质量比 76 : 24 混合,经 V 型混料机混合均匀得到 W-Cu 混合粉末。图 2 为实验测量所用装置的结构示意图,将无氧铜基板和约束环依次安装于中空的 304 不锈钢套筒后,形成一个容器,再依次装入 W-Cu 混合粉末和蓝宝石窗口,并通过背板确保粉末后表面与窗口材料紧密接触。实验使用二级轻气炮进行加载,飞片使用与基板同材质的无氧铜,应用光纤位移干涉仪 (Displacement interferometer system for any reflector, DISAR)^[15],通过基板背面和窗口背面设置的 4 个光纤探头,分别记录冲击波抵达粉末样品上下表面的时间,探头布置的空间位置如图 3 所示。

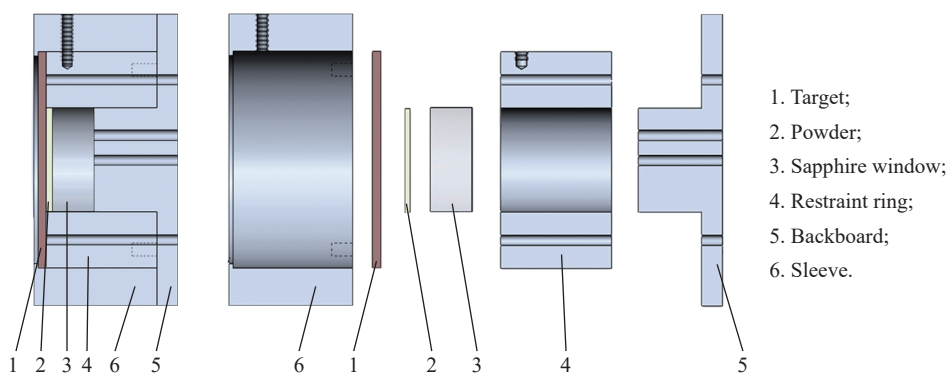


图 2 零件拆分及装配图

Fig. 2 Parts split diagram and assembly diagram

2 参数测量及误差分析

2.1 粉末初始密度

粉末初始密度 ρ_{00} 主要通过调整粉体厚度来控制,粉末厚度由组装件整体厚度减去基板中心、蓝宝石窗口及背板厚度计算得到。厚度测量精度为 10^{-4} mm,粉末质量称量精度为 10^{-3} g。每组取多次测量的平均值,并在初始密度的不确定度分析中加入了每个位置测量的方差。粉末中存在局部的不均匀

性, 但无法确定不均匀部位的位置和范围, 因此初始孔隙密度 ρ_{00} 的测量误差取最大值, 即直接取粉体厚度测量的最大值和最小值来确定。初始密度的测量误差会在阻抗匹配计算中传递, 对 Hugoniot 参数 (u_p , p 和 V) 的测量误差影响较大。

2.2 飞片速度

飞片速度 v_f 由炮口的电磁线圈测量得到, 该系统的测量误差为 0.5%。由于飞片在炮膛中会发生偏转, 形成的倾角可由图 3 中 1、2 号探针确定后扣除。

2.3 冲击波速度

冲击波速度 u_s 根据冲击波分别到达图 3 中 1、2 号探针和 3、4 号探针记录的时间和粉末厚度计算得出, 即 $u_s = \Delta x_i / \Delta t_i$, 其中 Δx_i 和 Δt_i 分别是粉末厚度和冲击波传播时间。粉末厚度的标准差为 $\delta(\Delta x_i) = (\delta x_B^2 + \delta x_W^2)^{1/2}$, 其中 x_B 表示基板位移, x_W 表示粉末厚度^[16]。 Δt_i 即冲击波分别抵达 1、2 号探针和 3、4 号探针的时间差, 其标准差为 $\delta(\Delta t_i)$ 。图 4 所示为粉体上下表面处探针的 DISAR 信号。由于飞片飞行过程中会发生偏转, 1、2 号探针信号存在时间差, 也会导致冲击波速度测量误差, 这一误差也体现在 $\delta(\Delta t_i)$ 中。在两个标准差范围内一个实验的平均冲击速度总误差为

$$\frac{\delta u_s}{u_s} = \left[\sum_i 2 \left[\frac{\delta(\Delta x_i)}{\Delta x_i} \right]^2 + \sum_i 2 \left(\frac{\delta(\Delta t_i)}{\Delta t_i} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (1)$$

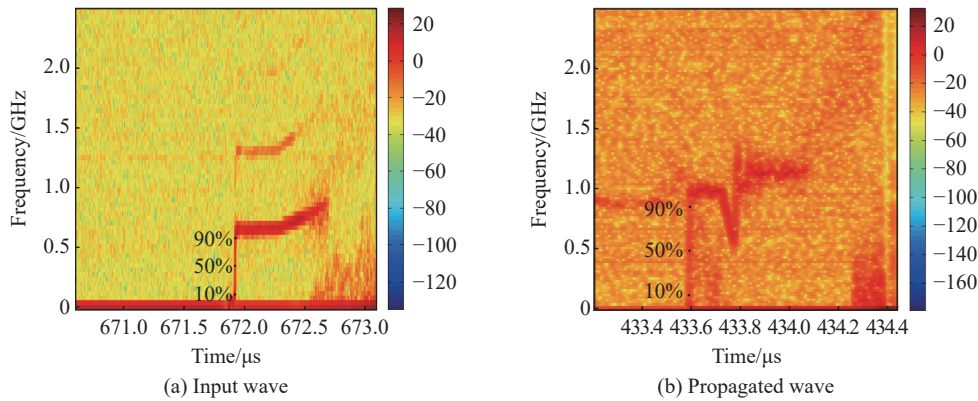


图 4 典型的入射波(a)和传播波(b)的 DISAR 轮廓曲线(显示了结构化波形, 以及 50% 的均衡到达时间和 10%、90% 的不确定到达时间, 用于计算冲击波速度)

Fig. 4 Typical extracted profile for input (a) and propagated waves (b) that illustrating structured waveforms (Locations of 50% equilibrium time of arrival and 10% and 90% uncertainty arrival times used for calculation of shock velocity are also marked.)

2.4 粒子速度

粉末的粒子速度 u_p 使用阻抗匹配法计算, 计算原理和误差分布如图 5 所示。根据文献 [17], 粒子速度的总误差是系统误差和实验误差之和, 即 $\delta u_p = \delta u_p^E + \delta u_p^S$ 。粉末粒子速度的系统误差是

$$\delta u_p = \left[(\delta u_{p,I-B}^S)^2 + (\delta u_p^S)^2 \right]^{1/2} \quad (2)$$

式中: $u_{p,I-B}^S$ 表示靶板 Hugoniot 误差, u_p^S 表示靶板等熵线上的误差。实验误差为

$$\delta u_p^E = \left\{ [\delta u_p(u_s)]^2 + [\delta u_p(v_f)]^2 + [\delta u_p(\rho_{00})]^2 + [\delta u_p(\rho_{0I})]^2 [\delta u_p(\rho_{0B})]^2 \right\}^{1/2} \quad (3)$$

式中: ρ_{0I} 和 ρ_{0B} 分别是飞片和基板的初始密度。

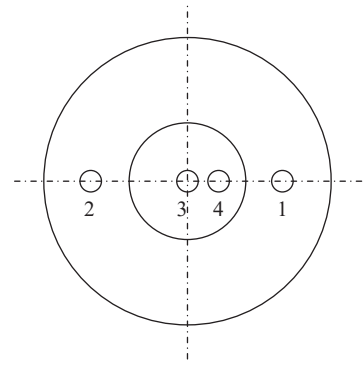


图 3 探针位置

Fig. 3 Probe location

2.5 压 力

压力的初始值 p_0 和粉末初始速度 u_0 等于零, 则粉末中的压力 p 可直接由下式计算

$$p = \rho_0 (u_s - u_0) u_p \quad (4)$$

压力的误差 $\delta p/p$ 也包括系统误差和实验误差。由于 p 是 ρ_{00} 、 u_s 、 u_p 的函数, 因此, 压力 p 的系统误差为

$$\frac{\delta \sigma}{\sigma} = \frac{\delta \rho_{00}}{\rho_{00}} + \frac{\delta u_s}{u_s} + \frac{\delta u_p}{u_p} \quad (5)$$

实验误差为^[17]

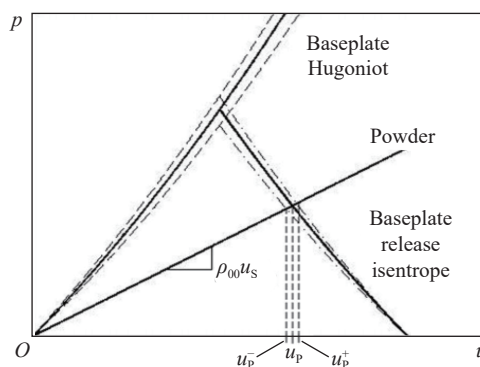


图 5 计算原理和误差分布

Fig. 5 Calculation principle and error distribution

$$\left(\frac{\delta \sigma}{\sigma} \right)_E = \left\{ \left(1 + \frac{u_s}{u_p} \frac{\partial u_p}{\partial u_s} \right)^2 \left(\frac{\partial u_s}{u_s} \right)^2 + \left(1 + \frac{\rho_{00}}{u_p} \frac{\partial u_p}{\partial \rho_{00}} \right)^2 \left(\frac{\partial \rho_{00}}{\rho_{00}} \right)^2 + \left[\frac{\partial u_p (v_1)}{u_p} \right]^2 + \left(\frac{\partial u_p (\rho_{0I})}{u_p} \right)^2 \left[\frac{\partial u_p (\rho_{0I})}{u_p} \right]^2 + \left(\frac{\partial u_p (\rho_{0B})}{u_p} \right)^2 \left[\frac{\partial u_p (\rho_{0B})}{u_p} \right]^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (6)$$

2.6 冲击压缩比容

粉末中的冲击压缩比容 V 由 $V = V_0 [1 - (u_p - u_0) / (u_s - u_0)]$ 计算得到, 其中 $V = 1/\rho$ 。 V 的系统误差为 $(\delta V/V)_s = (\eta - 1) |\delta u_p^s| / u_p$, 其中 η 是粉末压缩度, $\eta = \rho / \rho_{00}$ 。实验误差是

$$\left(\frac{\delta V}{V} \right)_E = \left\{ (\eta - 1)^2 \left(1 - \frac{u_s}{u_p} \frac{\partial u_p}{\partial u_s} \right)^2 \left(\frac{\partial u_s}{u_s} \right)^2 + \left[1 + (\eta - 1) \frac{\rho_{00}}{u_p} \frac{\partial u_p}{\partial \rho_{00}} \right]^2 \left(\frac{\partial \rho_{00}}{\rho_{00}} \right)^2 + (\eta - 1)^2 F^2 \right\} \quad (7)$$

式中: $F^2 = \left[\frac{\partial u_p (V_1)}{u_p} \right]^2 + \left[\frac{\partial u_p (\rho_{0I})}{u_p} \right]^2 + \left[\frac{\partial u_p (\rho_{0B})}{u_p} \right]^2$

2.7 测量结果分析

实验测量的所有 Hugoniot 参数及其误差范围如表 1 所示。可以看到 u_s 的误差较大, 主要是粉体厚度测量误差较大所致, 也导致粉末初始密度和压缩密度误差均接近 10%。压力超过 4 GPa 后, 粉体已接近致密。

表 1 实验相关参数计算结果及误差范围

Table 1 Calculated results and errors of the related experimental parameters

No.	$\rho_{00}/(\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$	$v_l/(\text{km} \cdot \text{s}^{-1})$	$u_s/(\text{km} \cdot \text{s}^{-1})$	$u_p/(\text{km} \cdot \text{s}^{-1})$	p/GPa	$\rho/(\text{g} \cdot \text{cm}^{-3})$
1	10.696±0.910	0.622±0.003	1.254±0.041	0.457±0.019	6.126±0.434	16.826±1.122
2	10.484±0.731	0.270±0.001	0.913±0.055	0.213±0.013	2.038±0.223	13.668±0.536
3	10.707±1.229	0.784±0.004	1.549±0.089	0.546±0.028	9.056±0.913	16.639±1.324
4	10.237±1.370	0.508±0.003	1.107±0.030	0.388±0.016	4.392±0.211	15.752±1.370

3 模型拟合

3.1 p - α 模型

p - α 模型被广泛用于描述均质和非均质粉末的弹塑性压实响应^[18]。其中 $\alpha = V/V_s$ 是一个描述粉末膨胀程度的参数, V 是粉末的比容, V_s 是相应固体材料在相同温度 T 和压力 p 下的比容。 p - α 模型具有不同的表达形式, 本研究仅关注其中最常见 3 种。

3.1.1 二次改进模型 (Modified quadratic, MQ)

p - α 模型常用于描述动态冲击加载下塑性多孔材料的冲击特性。当应力范围较大时, 要分解为弹性和塑性两部分。此模型中忽略了剪切强度的存在, 并且假设在等温等压下, 多孔材料和固体材料的内能相等。在低压力段, 弹性压实响应决定压实行为和从部分压实状态下的释放过程。通常初始的弹性状态 α_E 很小, 在计算中经常会忽略, 或设为 $\alpha_E = \alpha_0$ 直到达到阈值压力。

塑性变形中的 α 是对 Butcher 和 Karnes 方法^[6] 的二次改进。一般公式如下

$$\alpha = 1 + (\alpha_E - 1) \left(\frac{p_s - p}{p_s - p_E} \right)^N \quad (8)$$

式中: N 是经验拟合参数, 可以视实验具体情况改变。

3.1.2 静态球面公式 (Static spherical, SS)

Carroll 和 Holt^[7] 通过将多孔材料中孔洞的坍塌用一个由相同密度的空心球的压实相平衡来补充 p - α 模型。假设应力张量为球形, 只考虑压力 p 。静态球形公式可对压实响应进行预测, 因此压实响应由材料性质和孔洞的几何形状决定。假设固体材料不可压缩, 将孔洞坍塌分为 3 个区域。在最初的弹塑性区, 观察到在压力达到临界值前孔隙度基本没有发生变化。这使压实过程可以得到简化: 在压实过程的前两个区域, 压力小于 p_E 时孔隙率的变化可以忽略不计。 p_E 的大小使用下式计算

$$p_E = \frac{2}{3} Y \ln \frac{\alpha_0}{\alpha_0 - 1} \quad (9)$$

式中: Y 是固体材料的屈服强度, α_0 是初始孔隙度。压力大于 p_E 时为第 3 个阶段, 材料塑性变形, 压实由孔洞坍塌造成, 此时的孔洞坍塌关系可以用下式简化

$$\alpha = (1 - e^{-3p/2Y})^{-1} \quad (10)$$

静态球面的 p - α 模型只考虑了与速率无关的屈服特性, 因此可能不适用于高速率敏感粉体材料的压实响应, 而且此模型忽略了颗粒形态可能造成的影响。

3.1.3 幂律公式 (Power law, PL)

Brown 等^[19] 的 p - α 模型与前两种不同, 他们用同一种机制描述弹塑性压实, 直接描述了脆性微粒系统的动态压实, 并没有将弹塑性机制分开研究。幂律公式的表达式如下

$$\alpha = (P_s/p)^{\frac{1}{n}} \quad (11)$$

式中: P_s 是压碎强度, n 是经验参数。

3.2 p - λ 模型

p - λ 模型明确地将单个成分的物质属性包含在一个非均匀混合物中^[20]。与 p - α 模型类似, 该模型使用单内部状态变量 λ 描述压实过程并忽略粉末混合物的剪切强度, 只考察了一般的 p - V 响应。该模型分为 3 个不同的区域: 一端为不平衡的弹性响应, 另一端为单个分量的压力平衡状态, 两者之间为过渡区。假设压力较小时变形是弹性的。使用两种不同的附加模型定义混合物的体积弹性模量 K 和弹性响应: 等压和等应变。等压响应是混合模量的下限, 等应变响应是上限。在选择合适的混合模量后, 通过应变的定义确定了非平衡弹性区混合物的 p - V 响应; 在原方程的基础上, 提出了一个简单的质量分数加性方程。在过渡区, 假定材料以非平衡弹性状态和压力平衡状态的某种组合形式存在。材料在给定压力值下的相对量通过变量 k 来分配, k 定义为完全压实状态下的物质质量分数。 λ 取值 0~1。当材料完全处于不平衡的弹性状态下 $\lambda=0$; 当材料处在压力平衡状态时, $\lambda=1$ 。 λ 的具体函数关系为

$$\lambda = 1 - e^{-(p/Y)^n} \quad (12)$$

式中: p 是组件的局部压力差异; Y 是固体的屈服强度, 当混合物屈服时, 会同时在混合物中引发屈服和压实; n 无法从单个组件属性中进行定义。

3.3 拟合结果

为了检验测量数据与模型拟合的精度,必须给出混合粉末的 Hugoniot 线,当压力超过粉体的致密压力后,测量数据点应该落在计算的粉末 Hugoniot 线上。本研究粉末的 Hugoniot 线使用等容 Mie-Grüneisen 方法计算得到。首先,基于 W、Cu 固体 Hugoniot 数据计算得到相同孔隙度的 W、Cu 粉体 Hugoniot 线,再经由 Barry 提出的两相混合 Hugoniot 原理计算得到 W-Cu 混合粉末的 Hugoniot 线。该原理主要存在两个基本假设:

(1)各组分压力相等;

(2) $V(p) = \sum_{i=1}^n m_i V_i(p)$, $E_C(V) = \sum_{i=1}^n m_i E_{Ci}(V)$, $\sum_{i=1}^n m_i = 1$, E_C 是材料比内能。

对于 p - α 模型,孔隙度 α 可由 N 和 n 的值经拟合得到, p_E 是从弹性压缩转为塑性压缩的临界值, α_E 是相应的孔隙度, p_s 由实验数据和 Mie-Grüneisen 粉末状态方程的交点确定。 p - λ 模型中的曲线拟合与上述方法类似。混合物的屈服强度 Y 采用体积分数平均法计算。压力计算基于飞片和靶板材料的状态方程(EOS)。所用参数在表 2 中给出,其中 C_0 和 S 是线性冲击状态方程 $u_s = C_0 + Su_p$ 参数, γ_0 是 Grüneisen 常数。符合最佳拟合结果的数据在表 3 中给出。

表 2 组分和混合物的相关冲击和材料特性

Table 2 Relevant shock and material properties of constituents and mixtures

Material	$\rho_0/(\text{g}\cdot\text{cm}^{-3})$	$C_0/(\text{km}\cdot\text{s}^{-1})$	S	γ_0	$V_0/(\text{cm}^3\cdot\text{g}^{-1})$	Y/GPa
W	19.35	4.064	1.204	1.78	0.052 0	1.700
Cu	8.93	3.910	1.510	1.97	0.112 1	0.065
W-Cu	15.117	4.027	1.277	1.83	0.066 4	1.030

表 3 模型拟合参数

Table 3 Model fitting parameters

Model	Parameters			
	p_s/GPa	p_E/GPa	α_E	N
p - α (MQ)	4.60	0.057 7	1.359	1.952
p - α (PL)	p_s/GPa	n		
	4.60	7.80		
p - α (SS)	Y/GPa			
	1.273 4			
p - λ	n			
	1.51			

图 6 为多个模型的拟合结果。可以看到粉末在 4~5 GPa 压力下达到致密,压力继续升高后,数据点落到计算得到的粉体 Hugoniot 线上。除 p - α PL 模型外,其他模型均较好地描述了 W-Cu 混合粉末的冲击压缩响应。但在孔隙度接近零时,预测结果均与计算的粉末 Hugoniot 线有一定偏差,这是由于 Mie-Grüneisen 方法忽略了材料强度和实验初始孔隙度测量误差所致。 p - α MQ 和 p - α PL 模型中都存在压溃强度 p_s ,经拟合得到 $p_s = 4.6$ GPa; 参数 N 影响曲线的曲率, N 取值大则曲率增加, p - α PL 模型受 N 取值影响较大,拟合效果较

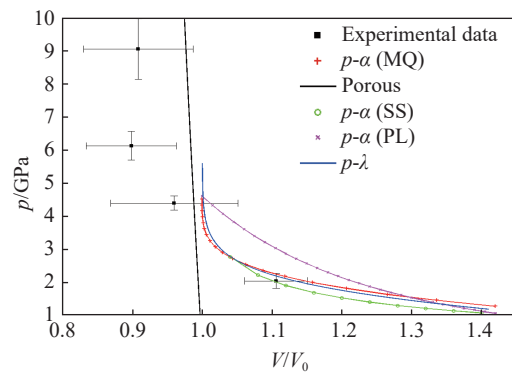


图 6 4 种模型拟合结果

Fig. 6 Fitting results of four models

差。 p - α SS 模型仅受粉末的屈服强度 Y 的影响, 完全忽略了粉末的微观尺度效应(颗粒形状和大小), 但得到了较好的拟合结果, 预测的压溃强度 p_s 为 4~5 GPa, 与 p - α MQ 和 p - α PL 模型一致。 p - λ 模型也可以较好地描述低压段的冲击压实响应, 但孔隙度无限接近于零时, 在屈服强度 Y 一定的前提下, 参数 n 的取值决定了曲线的曲率, 当 n 减小时, 曲率减小, p_s 急剧增大, 而 Y 的取值影响 p_E 的值。由于低于 4 GPa 的数据点仅有一个, 所以很难确定其余模型哪个更适合描述 W-Cu 混合粉末的冲击压缩响应。拟合过程中发现, 所有模型通过参数调整都可以获得较好的拟合效果, 是典型的描述型模型, 预测性较差。如 p - α MQ 和 p - α PL 模型中的参数 p_s 无法通过实验测量, p - α SS 和 p - λ 模型中的 Y 受混合颗粒特性(如颗粒的尺寸、颗粒级配和颗粒形状等)的影响显著, 无法准确预测。此外, 除 p - α PL 模型外, 其余模型均能很好地描述粉末压缩中由弹性转塑性的行为, 而 p - α PL 模型经参数调整后也可以描述这一转变, 但其曲线曲率变小, 如图 6 所示, 与实验数据差别较大。

4 结 论

测量了 W-Cu 混合粉末的 Hugoniot 数据, 系统分析了测量误差, 发现粉末致密度测量精度对结果影响较大。利用 Mie-Grüneisen 方法和 Barry 等压混合法, 可以利用单质 W、Cu 粉末的 Hugoniot 关系很好地预测同孔隙度 W-Cu 混合粉末的 Hugoniot 线, 但由于忽略了粉体强度和粉体初始密度测量误差较大的原因, 预测结果在低压段与实验偏差较大。分别应用 3 种 p - α 模型和 p - λ 模型对实验结果进行拟合, 发现除 p - α PL 模型外, 其他模型均能较好地描述 W-Cu 混合粉末的冲击压缩响应, 表明这些原本用于描述单质粉末的冲击压实响应的模型对于更为复杂的混合粉末也是适用的, 但所有模型的拟合精度均受经验参数选择的影响, 预测能力较差。

参考文献:

- [1] ALTSHULER L V, KRUPNIKOV K K, LEDENEV B N, et al. Dynamic compressibility and equation of state for iron under high pressure [J]. Soviet Physics-JETP, 1958: 34.
- [2] MCQUEEN R G, MARSH S P, TAYLOR J W, et al. The equation of state of solids from shock wave studies [M]. Los Alamos, New Mexico: University of California, 1970: 293–417.
- [3] FREDENBURG D A. Shock compaction and impact response of thermit powder mixtures [D]. Georgia: Georgia Institute of Technology, 2010.
- [4] HERRMANN W. Constitutive equation for the dynamic compaction of ductile porous materials [J]. *Journal of Applied Physics*, 1969, 40(6): 2490–2499.
- [5] DAI C D, EAKINS D E, THADHANI N N. Dynamic densification behavior of nanoiron powders under shock compression [J]. *Journal of Applied Physics*, 2008, 103(9): 093503.
- [6] BUTCHER B M, KARNES C H. Dynamic compaction of porous iron [J]. *Journal of Applied Physics*, 1969, 40(7): 2967–2976.
- [7] CARROLL M M, HOLT A C. Static and dynamic pore - collapse relations for ductile porous materials [J]. *Journal of Applied Physics*, 1972, 43(4): 1626–1636.
- [8] GRADY D, KERLEY E G I, KUHNS L D, et al. Computational modeling and wave propagation in media with inelastic deforming microstructure [J]. *Journal de Physique, IV: Proceedings of International Conference*, 2000, 10(9): 15–20.
- [9] MEYERS M A. Shock waves: equations of state [M]. John Wiley & Sons, Inc., 2007.
- [10] MCQUEEN R G, MARSH S P. Equation of state for nineteen metallic elements from shock - wave measurements to two megabars [J]. *Journal of Applied Physics*, 1960, 31(7): 1253–1269.
- [11] ALEKSEEV Y F, AL'TSHULER L V, KRUPNIKOVA V P. Shock compression of two-component paraffin-tungsten mixtures [J]. *Journal of Applied Mechanics Technical Physics*, 1971, 12(4): 624–627.
- [12] BATSANOV S S. Effects of explosions on materials [M]. New York: Springer, 1994.
- [13] MEYERS M A. Dynamic Behavior of Materials [M]. San Diego: University of California, 1994.
- [14] KRUEGER B R, MUTZ A H, VREELAND T. Correlation of shock initiated and thermally initiated chemical reactions in a

- 1 : 1 atomic ratio nickel - silicon mixture [J]. *Journal of Applied Physics*, 1991, 70(10): 5362–5368.
- [15] WENG J, TAN H, WANG X, et al. Optical-fiber interferometer for velocity measurements with picosecond resolution [J]. *Applied Physics Letters*, 2006, 89(11): 111101.
- [16] FREDENBURG D A, KOLLER D D, RIGG P A, et al. High-fidelity Hugoniot analysis of porous materials [J]. *Review of Scientific Instruments*, 2013, 84(1): 013903.
- [17] MITCHELL A C, NELLIS W J. Shock compression of aluminum, copper, and tantalum [J]. *Journal of Applied Physics*, 1981, 52(5): 3363–3374.
- [18] FREDENBURG D A, THADHANI N N. On the applicability of the P - α and P - λ models to describe the dynamic compaction response of highly heterogeneous powder mixtures [J]. *Journal of Applied Physics*, 2013, 113(4): 043507.
- [19] BROWN J L, VOGLER T J, GRADY D E, et al. Dynamic compaction of sand [C]//Shock Compression of Condensed Matter-2007, 2007: 1363–1366.
- [20] NEEL C H. Shock compression of a heterogeneous, porous polymer composite [J]. *Dissertations & Theses-Gradworks*, 2010.

p - α and p - λ Model for Describing Shock Compressive Behavior of W-Cu Powder Mixture

GAO Mingyue, ZHOU Qiang

(State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

Abstract: This study investigated the applicability of three p - α models and p - λ model for predicting shock compaction response of heterogeneous W-Cu powder mixture. Mie-Grüneisen method and Barry isobaric mixing method were employed to predict the Hugoniot of W-Cu powder mixture with the same porosity based on the Hugoniot relationships. At high pressure section, the results were in good agreement with the experimental results, but it deviated greatly at the low pressure section. The p - α models and p - λ model were applied to fit the experimental results, and it was found that all the other models were able to describe the shock compression response of W-Cu powder mixture except p - α PL model. The crush strength and compression path of all models are different due to selection of empirical parameters, and they are with poor prediction function.

Keywords: W-Cu powder mixture; shock compressive; p - α model; Hugoniot measurement

AlCrFeCuNi 高熵合金力学性能的分子动力学模拟

李健^{1,2}, 郭晓璇^{1,2}, 马胜国^{1,2}, 李志强^{1,2}, 辛浩^{1,2}

(1. 太原理工大学应用力学研究所, 山西 太原 030024;

2. 山西省结构冲击与材料强度重点实验室, 山西 太原 030024)

摘要: 高熵合金具有传统合金无法比拟的高强度、高硬度和高耐磨耐腐蚀性, 具有广阔的应用前景。为研究 AlCrFeCuNi 高熵合金 (High entropy alloy, HEA) 在轴向载荷作用下的力学性能, 采用分子动力学方法, 模拟高熵合金的实验制备过程并建立原子模型, 研究温度和 Al 的含量对 AlCrFeCuNi 高熵合金力学性能的影响, 从材料学角度分析了变形过程及其具有高塑性的原因。模拟结果表明, AlCrFeCuNi 高熵合金在拉伸载荷作用下依次经历弹性、屈服、塑性 3 个变形阶段。在屈服阶段, 开始出现孪晶和层错, 孪晶和层错的产生和生长是合金产生不均匀塑性变形的主要原因之一。高熵合金的杨氏模量和屈服应力随着 Al 含量的增加近似线性降低, 同时具有很强的温度效应, 温度越低, Al 含量越小, 其杨氏模量和屈服应力的下降幅度越大。

关键词: 高熵合金; 分子动力学; 拉伸力学性能; 温度效应; 铝含量

中图分类号: O344.3; O521.2

文献标识码: A

高熵合金 (High entropy alloy, HEA) 于 2004 年首先由 Yeh 等^[1] 提出并命名, 一般可以定义为由 5 种或 5 种以上元素组元按等原子比或近似等原子比合金化形成的新材料, 每种元素占总原子数的 5%~35% 之间。随着人们对高熵合金的不断研究, 其组成元素的数量由开始的 5 种及 5 种以上放宽到 4 种及以上金属元素。高熵合金具有高强度^[1]、高硬度^[2]、耐腐蚀^[3] 和耐摩擦^[4] 等优异的力学、化学和热学性能, 在航空航天、船舶制造等工业材料上有较好的应用前景。传统的合金会由于金属种类的增加而导致其材料脆化^[5], 但高熵合金和以往的传统金属不同, 虽然是多种金属元素的杂乱混合, 却在物理、化学、力学等方面具有传统合金无法比拟的优异性能。

高熵合金在各方面的优异性能激发了广大学者的研究兴趣, 从理论到实验再到数值模拟的研究层出不穷。数值模拟计算是对传统理论和实验方法的有效补充, 分子模拟技术在原子尺度揭示和预测材料的各项性能具有重要意义。Ko 等^[6] 研究了碳含量对 CoCrFeMnNi 高熵合金微观组织的影响, 发现铸态的 CoCrFeMnNi 和 CoCrFeMnNiC_{0.1} 合金均具有树枝状微结构, 晶粒尺寸随着碳含量的增加而减小。Xie 等^[7] 采用分子动力学 (MD) 模拟方法研究在硅基上的 AlCoCrCuFeNi 高熵合金薄膜的生长, 研究了不同原子含量对生长的薄膜及其原子结构的影响, 从模拟结果可以观察到 HEA 的不同原子结构由原子数量、原子尺寸差异决定。Afkhama 等^[8] 通过分子动力学模拟了 Al_xCrCoFeCuNi 高熵合金在不同温度下的拉伸行为, 研究了该合金在室温、高温和各种应变速率下的变形行为和机理, 其拉伸试验结果表明: 随着温度的升高, 屈服应力显著下降; 该合金在所有测试条件下都表现出超塑性行为; 更重要的是, 铝含量的增加会导致屈服应力和弹性模量显著降低。Choi 等^[9] 基于 Monte Carlo、分子动力学和分子静力学等原子模拟方法研究了单个元素对等原子 CoCrFeMnNi 高熵合金固溶硬化的影响, 预测了在 0 K 时密排六方 (HCP) 结构比面心立方 (FCC) 结构更稳定。Zhang 等^[10] 使用熔化和快速淬火的方法构

* 收稿日期: 2019-04-18; 修回日期: 2019-05-09

基金项目: 国家自然科学基金 (51501123, 11672199)

作者简介: 李健 (1994—), 男, 硕士研究生, 主要从事分子动力学研究. E-mail: lijian0980@link.tyut.edu.cn

通信作者: 辛浩 (1985—), 男, 副教授, 主要从事分子动力学研究. E-mail: xinhao@tyut.edu.cn

建 AlCrFeCuNi 原子模型,通过原子模拟方法从微观角度解释了 AlCrFeCuNi 系高熵合金在拉伸载荷作用下的力学性质及原子结构变化,结果表明 AlCrFeCuNi 系高熵合金不仅有很高的强度,还具有良好的可塑性。

目前已经研制出的 AlCrFeCuNi 系高熵合金在力学性能方面尤为突出,表现出高强度、高硬度、耐磨和抗高温等一系列独特性能;然而在制备过程和实际应用中,过高或过低的外界温度^[11]、合金中某一元素含量的变化都可能导致其原子晶格结构和力学性能发生改变。本研究采用分子动力学方法,模拟轴向拉伸载荷作用下 AlCrFeCuNi 高熵合金的力学性能,并分析在拉伸载荷作用过程中的微观原子晶格结构变化,同时着重研究温度和 Al 含量对 AlCrFeCuNi 高熵合金力学性能的影响。

1 模型与势函数

目前常用的高熵合金实验制备方法一般为真空电弧熔铸法:在电弧炉内加入配比好的物料,然后经高温熔化浇铸到高温的铸型中,再经冷却、退火,最后切割成制品^[12]。因此在本研究中,采用分子动力学方法模拟高熵合金的实验制备过程,进而建立模型,具体做法如下^[13]:(1) AlCrFeCuNi 高熵合金中 5 种原子按所要求的比例随机分布在 FCC 晶体结构上,选取 Al、Cr、Fe、Cu 和 Ni 5 种单晶中晶格常数最大的一个作为 AlCrFeCuNi 高熵合金晶格常数,进行能量最小化和弛豫,采用共轭梯度算法进行几何结构优化,且使原子结构达到平衡;(2)模拟熔化阶段,体系中所有原子都以 0.04 K/fs 的速率加热到 1 500 K 并在该温度下进行一段时间的弛豫,以达到平衡;(3)模拟淬火阶段,同样以 0.04 K/fs 的速率降低体系温度,直到 300 K,并进行一段时间的弛豫以达到平衡。通过高温熔化再到冷却退火,用分子动力学方法模拟实验制备过程,从而建立 AlCrFeCuNi 高熵合金的分子动力学模型,如图 1 所示。

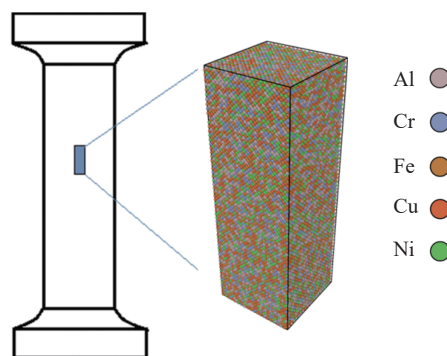


图 1 AlCrFeCuNi 高熵合金模型及原子示意图

Fig. 1 Model and atomic diagram of AlCrFeCuNi HEA

分子动力学方法使用的势函数是经验势,而经验势是否能准确描述原子间的相互作用决定了模拟结果的正确性。目前金属元素的势函数中,使用较为成熟的原子势是嵌入原子势(Embedded atom method, EAM),在 AlCrFeCuNi 高熵合金分子动力学模型的构建过程及之后的模拟计算中,采用嵌入原子势^[14]描述 Cr-Fe-Ni 和 Al-Cu 之间的相互作用,形式如下

$$E_i = F_\alpha \sum_{j \neq i} \rho_j(r_{i,j}) + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\alpha,\beta}(r_{i,j}) \quad (1)$$

式中: E_i 是原子 i 的总能量; F 表示嵌入能函数,是原子的电子密度 ρ 的函数; ϕ 表示对势相互作用; α 和 β 表示原子 i 和原子 j 的元素类型; r_{ij} 表示原子 i 和原子 j 之间的距离。

对于还没有描述的剩余原子间相互作用的势函数,包括 Cr-Cu、Fe-Cu、Ni-Cu、Cr-Al、Fe-Al、Ni-Al 之间的势函数,在本研究中,采用 Morse 对势函数描述^[10]。在已知 A、B 两类原子自身相互作用的内聚能 D 、逆长度标度因子 α 和平衡距离 r_0 的情况下,采用 Lorentz-Berthelot (L-B)^[15]混合律估算 A 类原子与 B 类原子相互作用时的 Morse 参数。L-B 混合律如下

$$\begin{cases} D_{A-B} = \sqrt{D_A D_B} \\ \alpha_{A-B} = (\alpha_A + \alpha_B) / 2 \\ r_{0A-B} = \sqrt{\sigma_A \sigma_B} + \ln 2 / \alpha_{A-B} \\ \sigma_{A-B} = r_{0A-B} - \ln 2 / \alpha_{A-B} \end{cases} \quad (2)$$

式中: D_{A-B} 表示 A、B 两类原子间的混合内聚能; α_{A-B} 表示混合后的晶格常数, r_{0A-B} 表示原子 A 与原子

B 之间的平衡距离。表 1 列出了使用 L-B 混合律计算出的 Morse 势参数。

2 数值模拟

采用分子动力学方法,使用 LAMMPS 软件实现分子动力学模拟计算,计算流程大概分为 4 步:系统初始化;创建原子晶胞,建立模型;能量最小化和弛豫;模拟加载过程。模拟过程中采用周期性边界条件,用 EAM 和 Morse 对势描述模型中各类原子间的相互作用。创建的模型大小为 $20a \times$

$20a \times 60a$ (a 为晶格常数),整个模型共有 9.6×10^4 个原子。选取合适的时间步长既可以节省计算时间,又可以保证模拟的准确度,为了充分利用 CPU 工作效率,整个模拟过程的时间步长选取 1 fs。在模拟加载前,对整个体系进行能量最小化和系综弛豫,使整个模拟体系达到平衡状态。采用共轭梯度算法 (Conjugate gradient methods, CG) 进行能量最小化可以更精确地找到势能最低点,选择在等温等压系综 (NPT) 下进行充分弛豫。采用 Verlet 积分法求解分子动力学积分方程,使用 Nose-Hoover 热浴法控制体系温度。

加载过程中,除施加变形的 z 方向外,其他两个方向压力始终控制为零,通过 Nose-Hoover 热浴法进行温度控制,在 NPT 系综下,通过给模拟盒子施加一定的变形速率来实现模型加载过程。本研究中,应变率取为 0.001 ps^{-1} (10^9 s^{-1}),每隔一定的时间步施加应变,体系按设置条件弛豫放松,重新定位每个原子的位置,如此循环实现模型的准静态加载。

3 结果与分析

3.1 拉伸力学性能

AlCrFeCuNi_{1.4} 高熵合金在常温 (300 K)、拉伸载荷作用下的应力-应变曲线如图 2 所示。从图中可以明显地观察到整个体系在拉伸载荷作用下经历了 3 个阶段的变形,分别为弹性变形阶段、屈服阶段和塑性变形阶段。在拉伸开始时,应力-应变呈直线关系,服从胡克定律,应力随应变线性变化,对应图 2 曲线中的线性部分,而变形表现为弹性变形,该阶段中若停止加载则变形随之消失,与单晶金属拉伸过程中的弹性变形一致。通过拟合应力-应变曲线中 0~0.05 应变段的斜率,可以得到该拉伸方向的杨氏模量 E ,为 108.77 GPa,与其他学者的实验和模拟结果 118 GPa^[8] 非常接近。

Afkhami 等^[8] 研究得到 AlCrCoFeCuNi 高熵合金的屈服强度约为 3.5 GPa,明显低于本研究的 AlCrFeCuNi_{1.4} 高熵合金屈服强度 10.3 GPa,可以证明 Co 元素的加入会明显降低该系高熵合金的强度。弹性阶段结束后,应力-应变曲线呈现非线性变化,曲线出现了断崖式的下降,对应出现应力峰值,材料开始进入屈服阶段。继续加载,曲线出现屈服平台,该阶段应力不增加或只小幅度上下波动,模型继续伸长变形,属于不均匀塑性变形阶段。

为了研究在拉伸载荷作用下 AlCrFeCuNi 高熵合金的微观结构变化,截取了在常温加载到不同拉伸应变时的原子结构图,如图 3 所示。通过共同近邻分析 (Common neighbor analysis, CNA) 能够观察到

表 1 Morse 势参数^[10]

Table 1 Parameters of Morse potential^[10]

Atom pair	D/eV	$\alpha/\text{\AA}^{-1}$	$r_0/\text{\AA}$
Cr-Cu	0.389 04	1.465 4	2.628 9
Fe-Cu	0.378 32	1.373 6	2.645 4
Ni-Cu	0.379 72	1.389 3	2.618 2
Cr-Al	0.345 41	1.368 5	2.819 9
Fe-Al	0.335 89	1.276 7	2.837 6
Ni-Al	0.337 13	1.292 4	2.808 3

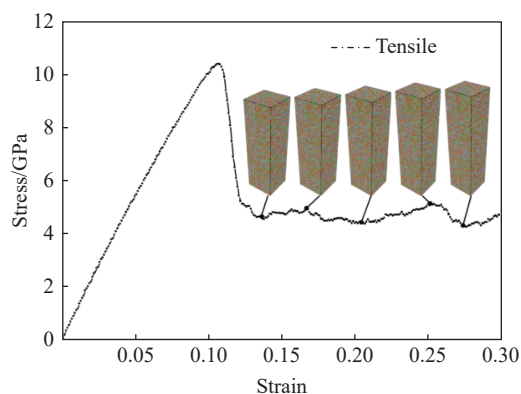


图 2 拉伸应力-应变曲线

Fig. 2 Stress-strain relations under uniaxial tensile loading

不同拉伸应变下的微观原子结构, 图中以不同颜色区分不同的原子结构: 绿色代表 FCC 原子, 红色代表 HCP 原子, 蓝色代表 BCC 原子, 而白色代表不满足任何基本原子结构的无序原子。

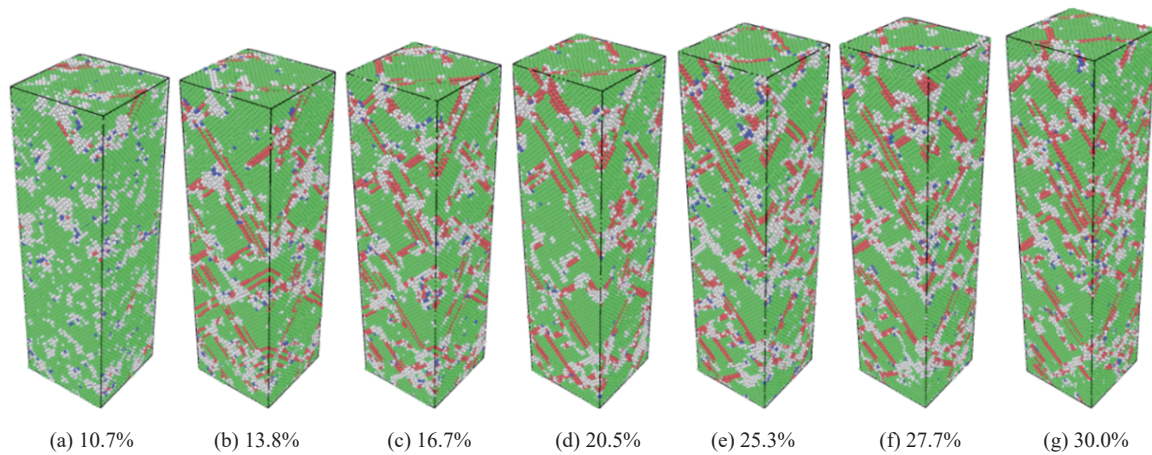


图 3 不同拉伸应变下的微观结构

Fig. 3 Micro-structure of HEA under different strains

图 3(a) 为 10.7% 应变下的原子状态, 对应弹性阶段结束开始进入屈服阶段, 此时 AlCrFeCuNi 高熵合金的原子晶体结构大部分为 FCC 结构, 有少量 BCC 和 HCP 结构原子, 同时出现无规则排列的无序原子。图 3(b) 对应于 13.8% 拉伸应变下的原子结构图, 可以明显看到层状的 HCP 结构原子, 且以 45° 和 135° 方向排列。在材料学中, 一般认为 FCC 密排面原子错排层大于两层是孪晶结构, 小于或等于两层的认为是堆垛层错, 孪晶和层错的形成会加强材料的塑性性能。从图 3(a) 到图 3(b), 孪晶和层错的形成导致模型出现应力松弛, 对应应力-应变曲线在该阶段出现应力骤降, 且下降速率与体系孪晶和层错的形成速度有关。图 3(c)~图 3(g) 对应应力-应变曲线出现屈服平台、材料出现不均匀塑性变形阶段。该阶段内, 孪晶和层错不断产生、生长、消失, 如此循环导致了屈服平台的出现, 应力小幅度上下波动, AlCrFeCuNi 高熵合金产生不均匀的塑性变形。

3.2 温度对力学性能的影响

在加载过程中, 通过改变模拟温度得到 AlCrFeCuNi 高熵合金在不同温度下的应力-应变曲线和拉伸力学性能。从图 4 可以看出, 体系温度从 100 K 上升到 1 000 K 的过程中, 模型都经历了同样的弹性—屈服—不均匀塑性变形过程, 应力-应变曲线的总体趋势一致。随着温度的不断升高, 弹性模量、屈服应力和对应的屈服应变都呈减小趋势, 且温度越高, 屈服阶段应力从峰值处下降到屈服平台的速率越慢。与 AlCrCoFeCuNi 高熵合金的应力-应变曲线^[8]不同的是, 该曲线在屈服阶段有明显的下降过程, 从原子尺度可以解释为孪晶和层错的出现比较突然, 当达到上屈服点时会出现明显的应力下降, 说明 Co 元素对合金在拉伸过程中出现的孪晶和层错有较大影响。从能量角度来讲, 温度越高, 原子热运动增加, 导致结构不稳定, 强度降低。

为了量化结果, 表 2 给出了不同温度下 AlCrFeCuNi_{1.4} 高熵合金的杨氏模量、屈服应力和对应的屈服应变。由表 2 可知: 随着温度的增加, AlCrFeCuNi_{1.4} 高熵合金的杨氏模量从 100 K 的 115.273 GPa 下

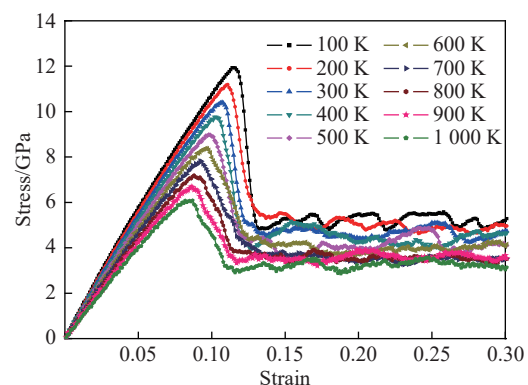


图 4 不同温度下的拉伸应力-应变曲线

Fig. 4 Stress-strain relations under uniaxial tensile loading at different temperatures

表 2 不同温度下的拉伸力学性能

Table 2 Mechanical properties under uniaxial tensile loading at different temperatures

Temperature/ K	Young's modulus/ GPa	Yield stress/ GPa	Yield strain	Temperature/ K	Young's modulus/ GPa	Yield stress/ GPa	Yield strain
100	115.273	11.954	0.115	600	96.507	8.383	0.097
200	112.251	11.197	0.111	700	92.532	7.838	0.092
300	108.768	10.390	0.107	800	88.503	7.147	0.088
400	103.950	9.765	0.103	900	84.382	6.652	0.087
500	101.228	8.975	0.099	1 000	80.808	6.060	0.086

降到 1 000 K 的 80.808 GPa, 减小了 29.899%; 此外屈服应力也从 11.954 GPa 下降到 6.060 GPa, 减小了 49.306%。这表明体系温度从 100 K 升高到 1 000 K 对材料的拉伸力学性能影响较大。为了更明显地观察材料的拉伸力学性能随温度的变化趋势, 选取不同温度下的杨氏模量和拉伸强度, 如图 5 所示。可见 AlCrFeCuNi_{1.4} 高熵合金的杨氏模量和拉伸强度随温度的升高近似呈线性降低。

3.3 Al 含量对力学性能的影响

采用同样的方法构造 Al_xCrFeCuNi 高熵合金分子动力学模型, 其中各元素的原子比为 $x:1:1:1:1$, x 分别取为 0.2、0.5、1.0、2.0、4.0, Al_xCrFeCuNi 高熵合金中 Al 原子的摩尔分数 η_{Al} 和各元素的原子数 n 如表 3 所示。

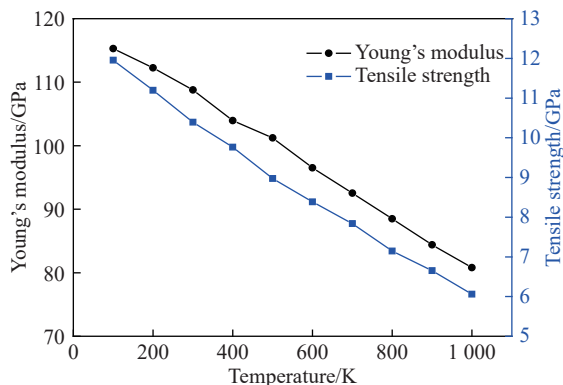


图 5 不同温度下杨氏模量和拉伸强度的变化趋势

Fig. 5 Young's modulus and tensile strength at different temperatures

表 3 Al_xCrFeCuNi 高熵合金中 Al 百分含量和各元素原子个数Table 3 The number of different kinds of atoms of Al_xCrFeCuNi

x	$\eta_{\text{Al}}/\%$	$n(\text{Al})$	$n(\text{Cr})$	$n(\text{Fe})$	$n(\text{Cu})$	$n(\text{Ni})$
0.2	4.76	4 515	23 151	22 920	22 980	22 434
0.5	11.11	10 929	21 528	21 423	21 165	20 955
1.0	20.00	19 428	19 338	19 419	18 870	18 945
2.0	33.33	32 238	16 071	16 284	15 666	15 741
4.0	50.00	47 988	12 000	12 336	12 078	11 598

由于高熵合金在性能上的鸡尾酒效应, 不同 Al 含量的 Al_xCrFeCuNi 高熵合金的力学性能差异较大。在不同温度下, 对不同 Al 含量的 Al_xCrFeCuNi 高熵合金进行分子动力学拉伸模拟, 图 6 给出了在温度 $T=100, 300, 600, 800, 1\,000$ K, Al 含量 $x=0.2, 0.4, 1.0, 2.0, 4.0$ 条件下的应力-应变曲线。从图 6 中可知: 在每个温度下, Al_xCrFeCuNi 高熵合金都经历了弹性变形阶段、屈服阶段和塑性变形阶段, 杨氏模量和屈服应力随着 Al 含量的增加而降低; 不论在高温还是低温下, 每条曲线从弹性阶段结束到塑性阶段开始都经历了一个明显的下降过程, 且下降速率和下降的高度随着材料中 Al 含量的增加而降低; 同时, 随着 Al 含量的增加, 峰值应力对应的应变也在降低, 表明拉伸载荷作用下材料会在更小的应变处开始屈服, 更早地进入塑性阶段。Al 含量的增加会导致合金从 FCC 相向 BCC 相转变, 这一转变增加了合金的自由体积含量, 活化剪切带, 使其更容易产生变形, 进而导致合金的相关力学性能降低。

随着温度的提高, Al_xCrFeCuNi 高熵合金的杨氏模量和屈服应力显著下降。表 4 详细给出了在不

同温度下 5 种 Al 含量的 $\text{Al}_x\text{CrFeCuNi}$ 高熵合金在拉伸载荷作用下的杨氏模量和屈服应力, 为了更为直观地研究其变化规律, 依据表中数据作图 7 和图 8。

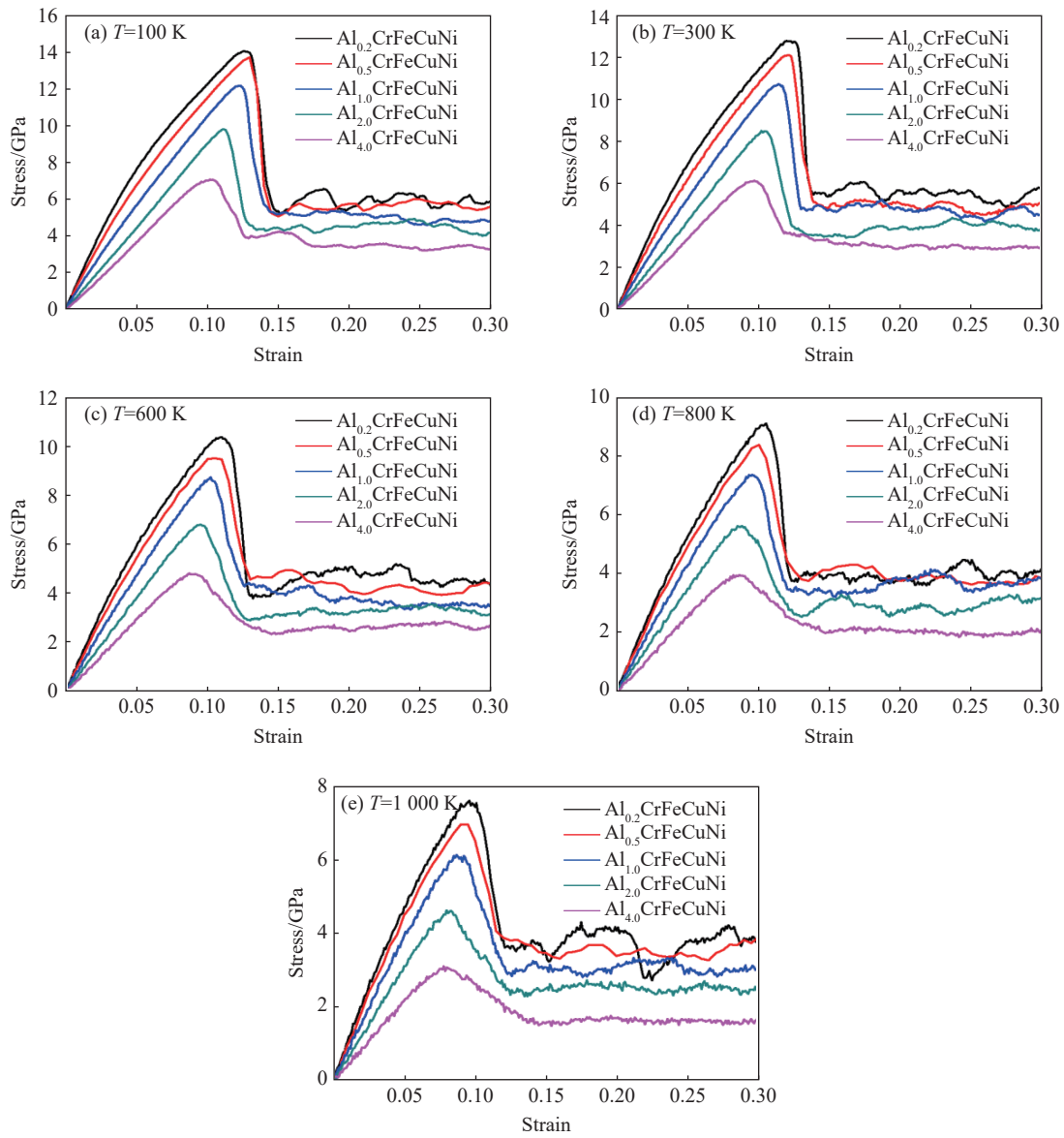


图 6 不同温度下 $\text{Al}_x\text{CrFeCuNi}$ 高熵合金的拉伸应力-应变曲线

Fig. 6 Stress-strain relations of $\text{Al}_x\text{CrFeCuNi}$ under uniaxial tension loading at different temperatures

表 4 $\text{Al}_x\text{CrFeCuNi}$ 高熵合金在不同温度下的杨氏模量和屈服应力

Table 4 Young's modulus and yield stress of $\text{Al}_x\text{CrFeCuNi}$ at different temperatures and different Al concentrations

T/K	Young's modulus/GPa					Yield stress/GPa				
	$x=0.2$	$x=0.5$	$x=1.0$	$x=2.0$	$x=4.0$	$x=0.2$	$x=0.5$	$x=1.0$	$x=2.0$	$x=4.0$
100	165.61	141.06	116.39	87.83	70.94	14.05	13.68	12.19	9.82	7.08
300	150.16	132.42	110.13	83.28	65.87	12.83	12.15	10.70	8.51	6.16
600	126.82	112.77	97.55	74.98	58.55	10.36	9.52	8.68	6.78	4.81
800	112.70	104.47	89.96	70.05	51.08	9.08	8.37	7.32	5.61	3.94
1 000	99.06	93.09	77.37	60.94	43.13	7.57	6.96	6.16	4.61	3.10

从图 7 中可以得到, 随着温度的升高, $\text{Al}_x\text{CrFeCuNi}$ 高熵合金的拉伸杨氏模量和屈服应力都近似呈线性下降趋势, 与前述研究结果以及 Afkhami 等^[8]研究的 AlCrCoFeCuNi 高熵合金基本吻合。这证明 AlCrFeCuNi 高熵合金具有强烈的温度效应, 其力学性能会随着温度的升高而产生近似线性下降的变化; Al 含量越少, 随着温度的升高, 杨氏模量和屈服应力的下降幅度越大。

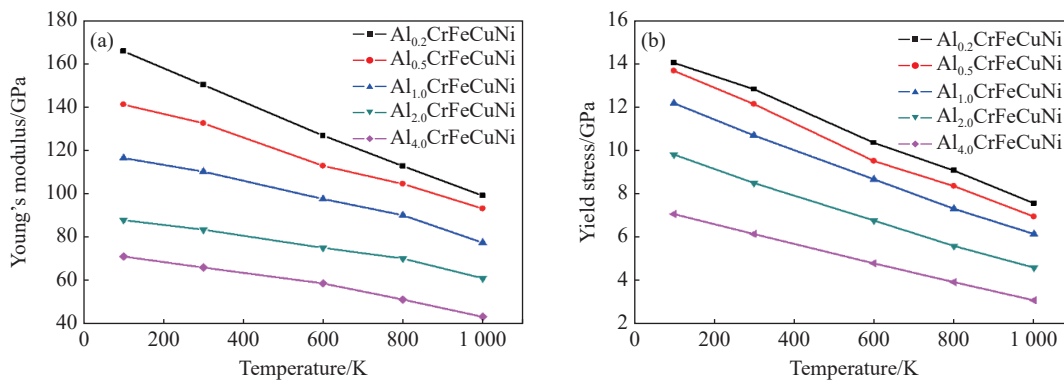


图 7 不同温度下的杨氏模量 (a) 和屈服应力 (b)

Fig. 7 Young's modulus (a) and yield stress (b) at different temperatures

从图 8 可以看出, AlCrFeCuNi 高熵合金的杨氏模量和屈服应力都随着 Al 含量的增加而降低, 且温度越低, 下降幅度越大。

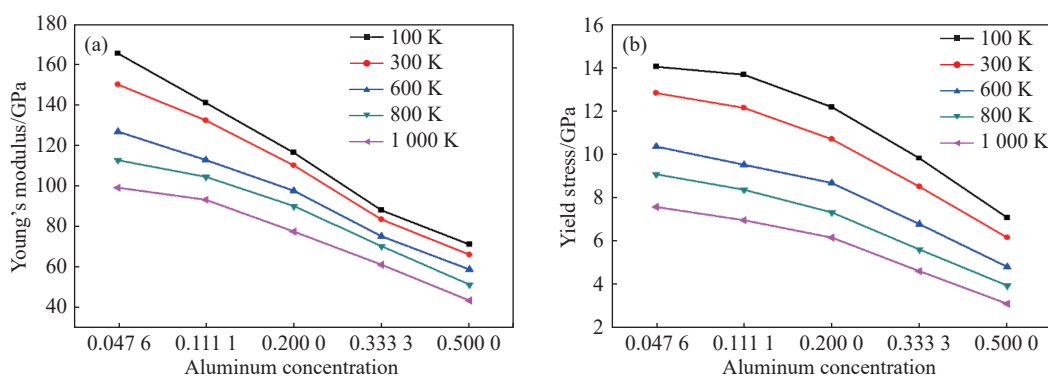


图 8 不同 Al 含量下的杨氏模量 (a) 和屈服应力 (b)

Fig. 8 Young's modulus (a) and yield stress (b) at different Al concentrations

4 结 论

通过模拟高熵合金的实验制备过程构造了 AlCrFeCuNi 高熵合金的分子动力学模型, 使用 EAM 嵌入势和 Morse 势描述原子间相互作用, 采用分子动力学模拟方法, 通过改变模拟盒子大小实现对模型的拉伸加载, 研究了 AlCrFeCuNi 高熵合金的力学性能, 得到以下结论。

(1) $\text{AlCrFeCuNi}_{1.4}$ 高熵合金在拉伸载荷作用下均经历 3 个变形过程, 分别为弹性变形阶段、屈服阶段和不均匀塑性变形阶段。 $\text{AlCrFeCuNi}_{1.4}$ 高熵合金在拉伸过程中表现出超高塑性, 从原子结构的变化来看, 孪晶和层错的产生和生长是其高塑性的主要原因之一。

(2) 分析了温度对 $\text{AlCrFeCuNi}_{1.4}$ 高熵合金拉伸力学性能和变形行为的影响。随着模拟温度的不断升高, $\text{AlCrFeCuNi}_{1.4}$ 高熵合金的弹性模量、抗拉强度等力学性能均显著减小。这是由于体系温度升高会加剧原子的热运动, 更容易造成结构失稳。

(3) 在不同温度下研究不同 Al 含量的 $\text{Al}_x\text{CrFeCuNi}$ 高熵合金在拉伸载荷作用下的力学性能, 发现杨氏模量和屈服应力随着 Al 含量的增加而降低。 $\text{Al}_x\text{CrFeCuNi}$ 高熵合金具有很强的温度效应, 其杨氏

模量和屈服应力随着温度的升高而降低,且下降趋势接近线性。温度越低,Al 含量越小,杨氏模量和屈服应力的下降幅度越大。

参考文献:

- [1] YE H J W, CHEN S K, LIN S J, et al. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: novel alloy design concepts and outcomes [J]. *Advanced Engineering Materials*, 2004, 6(5): 299–303.
- [2] CHEN W, FU Z, FANG S, et al. Alloying behavior, microstructure and mechanical properties in a FeNiCrCo_{0.3}Al_{0.7} high entropy alloy [J]. *Materials & Design*, 2013, 51(5): 854–860.
- [3] CHUANG M H, TSAI M H, WANG W R, et al. Microstructure and wear behavior of Al_xCo_{1.5}CrFeNi_{1.5}Ti high-entropy alloys [J]. *Acta Materialia*, 2011, 59(16): 6308–6317.
- [4] LEE C P, CHEN Y Y, HSU C Y, et al. Enhancing pitting corrosion resistance of Al_xCrFe_{1.5}MnNi_{0.5} high-entropy alloys by anodic treatment in sulfuric acid [J]. *Thin Solid Films*, 2008, 517(3): 1301–1305.
- [5] GREER A L. Confusion by design [J]. *Nature*, 1993, 366(6453): 303–304.
- [6] KO J Y, SONG J S, HONG S I. Effect of carbon addition and recrystallization on the microstructure and mechanical properties of CoCrFeMnNi high entropy alloys [J]. *Korean Journal of Metals and Materials*, 2018, 56(1): 26–33.
- [7] XIE L, BRAULT P, THOMANN A L, et al. Molecular dynamics simulation of Al-Co-Cr-Cu-Fe-Ni high entropy alloy thin film growth [J]. *Intermetallics*, 2016, 68: 78–86.
- [8] AFKHAMA Y, BAHRAMYANA M, MOUSAVIANA R T, et al. Tensile properties of AlCrCoFeCuNi glassy alloys: a molecular dynamics simulation study [J]. *Materials Science & Engineering*, 2017, 698: 143–151.
- [9] CHOI W M, JO Y H, SOHN S S, et al. Understanding the physical metallurgy of the CoCrFeMnNi high-entropy alloy: an atomistic simulation study [J/OL]. *NPJ Computational Materials*, 2018. [2019–04–18]. <https://www.nature.xilesou.top/articles/s41524-017-0060-9>
- [10] ZHANG Y, WANG X, LI J, et al. Deformation mechanism during high-temperature tensile test in an eutectic high-entropy alloy AlCoCrFeNi_{2.1} [J]. *Materials Science & Engineering A*, 2018, 724: 148–155.
- [11] 吴树森, 柳玉起. 材料成型原理 [M]. 北京: 机械工业出版社, 2008.
- [12] PI J H, PAN Y, ZHANG H, et al. Microstructure and properties of AlCrFeCuNi_x (0.6≤x≤1.4) high-entropy alloys [J]. *Materials Science & Engineering A*, 2012, 534: 228–233.
- [13] HU W Y, ZHANG B W, HUANG B Y, et al. Analytic modified embedded atom potentials for HCP metals [J]. *Journal of Physics Condensed Matter*, 2001, 13(6): 1193.
- [14] JIA L, FANG Q H, LIU B. Mechanical behaviors of AlCrFeCuNi high-entropy alloys under uniaxial tensile via molecular dynamics simulation [J]. *Rsc Advances*, 2016, 6(80): 76409–76419.
- [15] IMAFUKU M, SASAJIMA Y, YAMAMOTO R, et al. Computer simulations of the structures of the metallic superlattices Au/Ni and Cu/Ni and their elastic moduli [J]. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 1986, 16(7): 823–829.

Mechanical Properties of AlCrFeCuNi High Entropy Alloy: A Molecular Dynamics Study

LI Jian^{1,2}, GUO Xiaoxuan^{1,2}, MA Shengguo^{1,2}, LI Zhiqiang^{1,2}, XIN Hao^{1,2}

(1. *Institute of Applied Mechanics, Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, Shanxi, China;*

2. *Shanxi Key Laboratory of Material Strength and Structural Impact, College of Mechanics,
Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, Shanxi, China*)

Abstract: High entropy alloy (HEA) has high strength, high hardness, high wear resistance and corrosion resistance which traditional alloys do not have, and has broad application prospects. The mechanical properties of AlCrFeCuNi high Entropy Alloy (HEA) under axial loading were also studied in this paper. Molecular dynamics method was used to simulate the experimental preparation process of HEA and establish an atomic model. The mechanical properties of AlCrFeCuNi HEA at different temperatures and Al concentrations were studied. The deformation process and the reasons for its high plasticity were analyzed from the point of view of material science. The simulation results show that the AlCrFeCuNi HEA undergoes elastic deformation, yield and plastic deformation stages under tension loads. In the yield stage, the appearance and growth of twins and stacking faults are one of the main reasons for the uneven plastic deformation of the alloy. The analysis shows that the Young's modulus and yield stress of the HEA decrease linearly with the increase of Al concentration. The HEA have strong temperature effect. The lower the temperature, the smaller the Al concentration, and the greater the decrease in Young's modulus and yield stress.

Keywords: high entropy alloy (HEA); molecular dynamics; tensile mechanical property; temperature effect; aluminum concentration

高压下 MgN_8 晶体结构理论模拟与物性研究

缪宇¹, 刘思远¹, 马雪姣¹, 金哲学²

(1. 延边大学理学院, 吉林 延吉 133000;

2. 延边大学工学院, 吉林 延吉 133000)

摘要: 基于密度泛函理论第一性原理的方法, 使用 CALYPSO 结构搜索技术结合 VASP 软件, 在 0~100 GPa 压强范围内对 MgN_8 的晶体结构进行预测, 并对预测的结构进行系统研究。结果表明: 在常压下, 空间群为 $P4/mbm$ 的 $\alpha\text{-MgN}_8$ 晶体结构的焓值最低; 当压强达到 24.3 GPa 和 68.3 GPa 时发生相变, 分别相变成空间群为 $P4/mnc$ 的 $\beta\text{-MgN}_8$ 相和空间群为 $Cmcm$ 的 $\gamma\text{-MgN}_8$ 相, 两次相变均为对应体积坍塌的一级相变。电子性质计算结果表明, $\alpha\text{-MgN}_8$ 相的导带与价带之间具有 3.09 eV 的带隙, 表明该结构具有非金属性; β 相和 γ 相具有明显的金属特征。Bader 电荷转移计算表明, 随着压力的增加, Mg 原子向 N 原子转移的电荷逐渐增多。

关键词: 高压; 第一性原理; 晶体结构预测; MgN_8 ; 电荷转移; 相变

中图分类号: O521.2

文献标识码: A

随着材料科学研究的深入, 研究者们对材料的研究不再局限于常压范围, 开始更多地关注高压下材料的结构和物理性质。在高压作用下, 晶体的体积被压缩, 原子间的间距变小, 电子轨道发生变化, 甚至原子的周期性排列也会改变, 使晶体结构发生相变^[1-3]。晶体结构在高压环境下具有较为丰富的相变序列, 许多常压下无法合成的材料可在高压环境下合成, 因此利用高压技术, 可以丰富人们对物质世界的认识^[4-5]。

高压下聚合氮以及氮化物的物理、化学性质受到较多关注。将氮作为媒介来合成不同结构的含氮材料是研究聚合氮及氮化物的基础^[6-8], 如利用氮单质在高温高压环境下合成立方氮^[9], 利用氮元素和其他元素合成具有超硬性质的化合物等^[10]。在氮的化合物中, 金属氮化物的潜在应用价值巨大, 如超导材料^[11]、特殊化学制品^[12]、热稳材料、高能量密度材料和超硬材料等^[13-14]。针对金属氮化物的研究也愈发广泛。

对于碱土金属氮化物的理论研究较多。 Be_3N_2 的晶体结构研究结果表明, $R3m$ 和 $P\bar{3}m1$ 两个晶体结构的维氏硬度分别为 51 GPa 和 54 GPa, 说明两种结构的 Be_3N_2 是潜在的超硬材料^[15]。在高压下发现 Ca 与 N 的多个配比结构, 得出 CaN_3 的 C_2/c 结构中 N 原子形成孤立的六环; 进一步对键长和键级进行计算, 发现该结构的 CaN_3 是潜在的高能量密度材料^[16]。 Mg_3N_2 在高压下具有丰富的物理性质。研究发现, H_2 分子很容易在 $\tau\text{-Mg}_3\text{N}_2$ 、 $\alpha\text{-Mg}_3\text{N}_2$ 和 $\alpha'\text{-Mg}_3\text{N}_2$ 相的表面分解为 H 原子并进入材料内部, 说明 Mg_3N_2 是潜在的储氢材料^[17]。

由上述研究可知, 碱土金属氮化物的物理性质丰富, 潜在应用价值巨大。为此, 对高压下 Mg 的多氮化合物的晶体结构和物理性质进行研究具有十分重要的意义。本研究结合晶体结构预测技术和基于密度泛函理论的第一性原理方法, 在 0~100 GPa 的压强范围内, 对 MgN_8 的晶体结构进行预测, 并系

* 收稿日期: 2019-08-06; 修回日期: 2019-09-25

基金项目: 国家自然科学基金(11764043); 吉林省科技厅发展计划项目(20180101226JC)

作者简介: 缪宇(1999—), 男, 本科, 主要从事高压结构计算研究. E-mail: 15053219411@163.com

通信作者: 金哲学(1971—), 男, 讲师, 主要从事计算机网络通信技术与研发研究。

E-mail: jinzhexue@ybu.edu.cn

统分析预测得到的 α -MgN₈、 β -MgN₈ 和 γ -MgN₈ 相, 所得结论对进一步研究碱土金属氮化物具有一定的参考价值。

1 计算细节

采用基于粒子群优化算法的 CALYPSO 软件, 对 MgN₈ 进行结构搜索^[18], 压强范围为 0~100 GPa, 模拟晶胞采用 2 倍胞和 4 倍胞。对于搜索出的结构, 使用 VASP 软件包进行结构优化^[19], 其中描述电子间的交换关联势能采用广义梯度近似(GGA)下的 Perdew-Burke-Ernzerh(PBE)交换关联泛函^[19], 赝势采用全电子投影缀加平面波方法^[20], Mg 原子的价电子为 $2p^63s^2$, N 原子的价电子为 $2s^22p^3$ 。为了保证计算精确, 使能量收敛精度小于 1 meV/atom, 经过能量收敛测试, 得到平面波的截断能为 600 eV; 第一布里渊区积分采用 Monkhorst-Pack 网格方法, 网格的间距为 0.2 nm^{-1} ; 优化过程中, 在确保空间群不改变的情况下, 选用 10^{-5} eV 为自洽能量收敛的最小值, 优化应力收敛设置为 0.001 eV/\AA 。对于优化后的结构, 使用超晶胞的方法, 利用 PHONOPY 软件计算声子色散关系和声子态密度, 选取不同的扩胞数和 k 点网格: α -MgN₈ 相为 $1 \times 1 \times 1$ 和 $7 \times 7 \times 6$; β -MgN₈ 相为 $2 \times 2 \times 4$ 和 $6 \times 6 \times 9$; γ -MgN₈ 相为 $3 \times 1 \times 1$ 和 $9 \times 5 \times 4$ 。使用 VASP 软件包计算电子局域函数。

2 结果与讨论

2.1 晶体结构预测

运用 CALYPSO 软件搜索, 在 0~100 GPa 压强范围内, 对预测出的 MgN₈ 晶体结构进行晶格常数和原子位置的优化, 计算时设定的温度为 0 K, 根据 $G = H - TS$ (G 为吉布斯自由能, H 为焓, T 为温度, S 为熵), 可以用焓代替系统的自由能。通过计算优化后结构的焓值随压强的变化关系, 可以得到晶体结构的热力学稳定区间。绘制出的焓差随压强变化的曲线如图 1 所示。由图 1(a)可知: 在常压下, 空间群为 $P4/mbm$ 的 MgN₈ 晶体结构的焓值最低, 记为 α -MgN₈ 相; 当压强达到 24.3 GPa 时, 空间群为 $P4/mnc$ 的晶体结构具有更低的焓值, 记为 β -MgN₈ 相; 当压强达到 68.3 GPa 时, 空间群为 $Cmcm$ 的晶体结构能量更低, 记为 γ -MgN₈ 相。图 1(b)给出了 α -MgN₈、 β -MgN₈ 和 γ -MgN₈ 相的晶胞体积随压强的变化。分析可知: α -MgN₈ 相的晶胞体积随着压强的增大而减小, 晶胞体积随压强连续变化; 当压强达到 24.3 GPa 时, MgN₈ 发生体积坍塌, 坍塌率为 18.87%; 在 68.3 GPa 时, 发生结构相变, 体积坍塌率为 2.62%; 两次相变均属于一级相变。

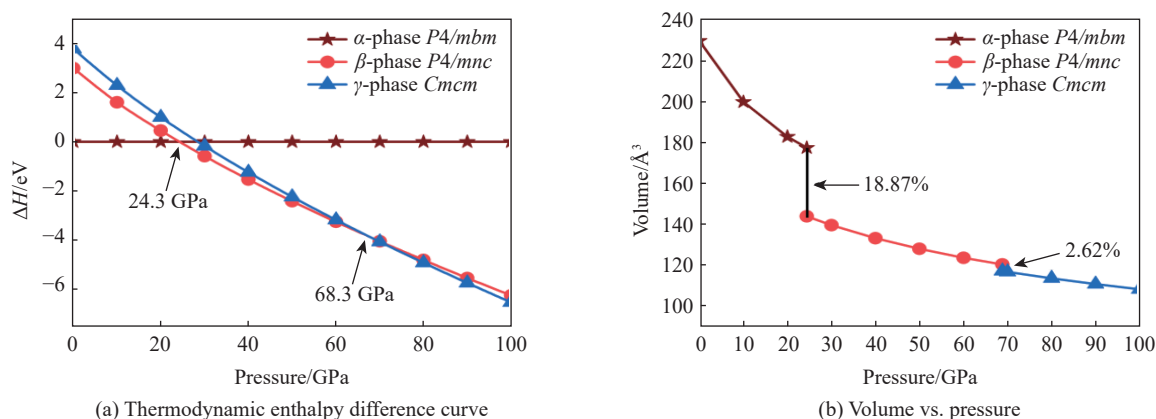
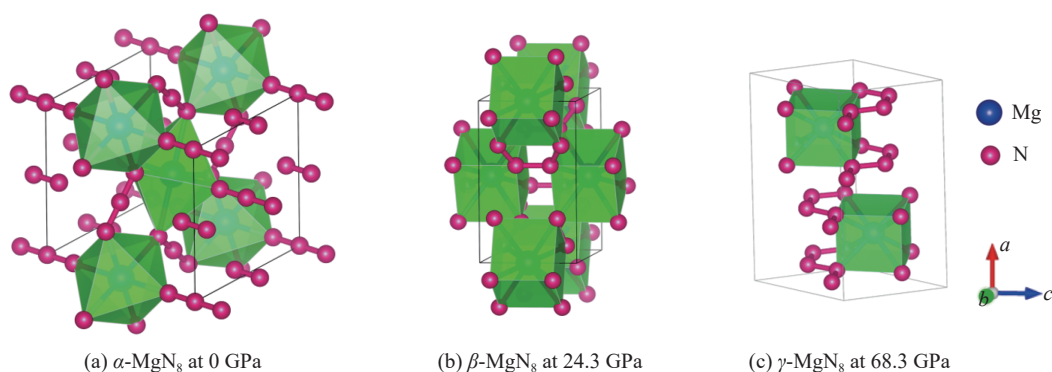


图1 MgN₈ 的焓差曲线以及 α -MgN₈、 β -MgN₈、 γ -MgN₈ 相体积随压强的变化关系

Fig. 1 Calculated enthalpies per formula unit of pressure of MgN₈ and the calculated volume versus pressure of α -MgN₈, β -MgN₈ and γ -MgN₈

α -MgN₈、 β -MgN₈ 和 γ -MgN₈ 相的晶体结构见图 2, 其平衡态晶格常数以及原子位置信息列于表 1 和表 2。

图 2 $\alpha\text{-MgN}_8$ 、 $\beta\text{-MgN}_8$ 和 $\gamma\text{-MgN}_8$ 相的晶体结构Fig. 2 Crystal structures of $\alpha\text{-MgN}_8$, $\beta\text{-MgN}_8$ and $\gamma\text{-MgN}_8$ 表 1 $\alpha\text{-MgN}_8$ 、 $\beta\text{-MgN}_8$ 和 $\gamma\text{-MgN}_8$ 相的平衡态晶格常数Table 1 Lattice parameters of $\alpha\text{-MgN}_8$, $\beta\text{-MgN}_8$ and $\gamma\text{-MgN}_8$ in the equilibrium state

Phase	Pressure/GPa	$a/\text{\AA}$	$b/\text{\AA}$	$c/\text{\AA}$	$\alpha/(\text{^\circ})$	$\beta/(\text{^\circ})$	$\gamma/(\text{^\circ})$
$\alpha\text{-MgN}_8$ ($P4/mbm$)	0	5.913	5.913	6.572	90.0	90.0	90.0
$\beta\text{-MgN}_8$ ($P4/mnc$)	24.3	6.219	6.219	3.724	90.0	90.0	90.0
$\gamma\text{-MgN}_8$ ($Cmcm$)	68.3	4.167	4.167	8.680	90.0	90.0	51.1

表 2 $\alpha\text{-MgN}_8$ 、 $\beta\text{-MgN}_8$ 和 $\gamma\text{-MgN}_8$ 相的平衡态晶格常数和原子位置Table 2 Lattice parameters and atomic coordinate of $\alpha\text{-MgN}_8$, $\beta\text{-MgN}_8$ and $\gamma\text{-MgN}_8$ in the equilibrium state

Phase	Pressure/GPa	Atoms	Wyckoff position	x	y	z
$\alpha\text{-MgN}_8$ ($P4/mbm$)	0	Mg	2b	0.000	0.000	0.500
		N1	2a	0.000	0.000	0.000
		N2	2c	0.000	0.500	0.500
		N3	4e	0.000	0.000	0.821
		N4	4f	0.000	0.500	0.915
		N5	4h	0.859	0.359	0.500
$\beta\text{-MgN}_8$ ($P4/mnc$)	24.3	Mg	2a	0.000	0.000	1.000
		N	16i	0.416	0.219	0.823
$\gamma\text{-MgN}_8$ ($Cmcm$)	68.3	Mg	8g	0.624	-0.376	1.250
		N1	16h	0.226	-0.135	0.617
		N2	16h	1.115	0.471	1.386

图 2(a) 所示的结构为 0 GPa 下优化后的 $\alpha\text{-MgN}_8$ 相结构。在 $\alpha\text{-MgN}_8$ 相结构中, 每个 Mg 原子被 6 个 N 原子包围, 构成八面体结构。其中, Mg-N 的键长有 2 类: 一类是中心 Mg 原子与八面体上下顶点的两个 N 相连, 键长为 2.280 \AA ; 另一类为中心的 Mg 原子与八面体中其余 4 个 N 相连, 键长为 2.109 \AA 。 $\alpha\text{-MgN}_8$ 相的晶格结构常数: $a = b = 5.913 \text{ \AA}$, $c = 6.572 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90.0^\circ$ 。其中, Mg 原子的 Wyckoff 占位为 2b (0.000, 0.000, 0.500), N 原子的 Wyckoff 占位分别为 2a (0.000, 0.000, 0.000)、2c (0.000, 0.500, 0.500)、4e (0.000, 0.000, 0.821)、4f (0.000, 0.500, 0.915) 和 4h (0.859, 0.359, 0.500)。图 2(b) 所示的结构为 24.3 GPa 下优化后的 $\beta\text{-MgN}_8$ 相结构。在该结构中, 每个 Mg 原子被 8 个 N 原子包围, 8 支 Mg—N 键的键长相同, 为 2.184 \AA , 构成正六面体。该结构的晶体结构常数: $a = b = 6.219 \text{ \AA}$, $c = 3.724 \text{ \AA}$, $\alpha = \beta = \gamma = 90.0^\circ$ 。其中, Mg 原子的 Wyckoff 占位为 2a (0.000, 0.000, 1.000), N 原子 Wyckoff 占位为 16i (0.416, 0.219, 0.823)。图 2(c) 所示的结构为 68.3 GPa 下优化后的 $\gamma\text{-MgN}_8$ 相结构。在该结构中, 每个 Mg 原子与 8 个

N 原子相连, 构成六面体结构。六面体中的 8 支 Mg-N 键有 2 种键长: 4 支 2.081 Å 和 4 支 2.069 Å。该结构的晶体结构常数: $a = 4.167$ Å, $b = 4.167$ Å, $c = 8.680$ Å, $\alpha = \beta = 90.0^\circ$, $\gamma = 51.1^\circ$ 。其中, Mg 原子的 Wyckoff 占位为 8g (0.624, -0.376, 1.250), N 原子 Wyckoff 占位分别为 16h (0.226, -0.135, 0.617) 和 16h (1.115, 0.471, 1.386)。

2.2 预测的 MgN_8 晶体结构的稳定性

通过计算声子色散关系, 可以判断晶格结构是否具有动力学稳定性。晶格结构具有动力学稳定性的判断条件是, 所有简正声子频率都为有限的实值^[21], 如果是虚值, 就可以判断此结构出现了声子软化现象, 晶格结构不稳定。计算了预测结构的声子谱和声子态密度, 如图 3 所示。

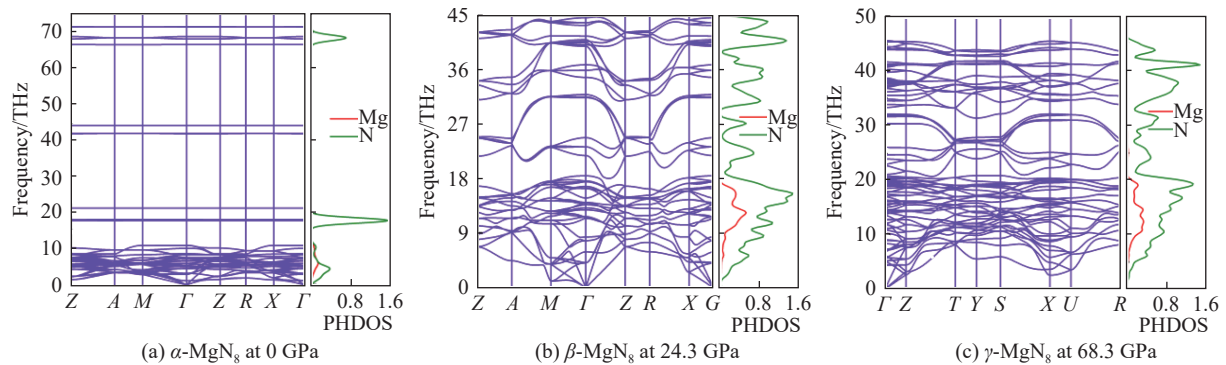


图 3 $\alpha\text{-MgN}_8$ 、 $\beta\text{-MgN}_8$ 、 $\gamma\text{-MgN}_8$ 相声子色散关系和声子态密度

Fig. 3 Phonon-dispersion curves and the phonon density of states of $\alpha\text{-MgN}_8$, $\beta\text{-MgN}_8$ and $\gamma\text{-MgN}_8$

由图 3(a) 可知, 0 GPa 时 $\alpha\text{-MgN}_8$ 相在整个布里渊区未出现声子软化现象, 说明该相具有动力学稳定性, 最大光学支的频率为 71.35 THz。由图 3(b) 和图 3(c) 可知, 24.3 GPa 和 68.3 GPa 时, $\beta\text{-MgN}_8$ 和 $\gamma\text{-MgN}_8$ 相具有动力学稳定性, 最大光学支频率分别为 44.64 THz 和 45.63 THz。

2.3 预测的 MgN_8 晶体结构的电子性质

为了探究预测得到的 MgN_8 晶体结构的电子性质, 分别研究了 $\alpha\text{-MgN}_8$ 相在 0 GPa、 $\beta\text{-MgN}_8$ 相在 24.3 GPa 和 $\gamma\text{-MgN}_8$ 相在 68.3 GPa 时的能带结构和电子态密度, 如图 4 所示。

由能带图可知, 压强为 0 GPa 时, $\alpha\text{-MgN}_8$ 相的导带与价带之间有 3.093 eV 的带隙, 表明该相结构具有非金属性; 当压强为 24.3 GPa 和 68.3 GPa 时, $\beta\text{-MgN}_8$ 和 $\gamma\text{-MgN}_8$ 相的导带与价带跨越费米面发生交叠, 表明这两相结构具有金属性。

由电子态密度的计算结果可知, $\alpha\text{-MgN}_8$ 、 $\beta\text{-MgN}_8$ 和 $\gamma\text{-MgN}_8$ 相费米能级处的电子态密度均主要由 N 原子的 p 轨道贡献, 而 N 原子的 s 轨道和 Mg 原子的 s 、 p 轨道对电子态密度的贡献相对较少。N 原子的 p 轨道与 s 轨道之间存在杂化, 形成了 N—N 共价键。

为了研究 $\alpha\text{-MgN}_8$ 、 $\beta\text{-MgN}_8$ 和 $\gamma\text{-MgN}_8$ 相晶体结构的化学键, 计算了这 3 个相的电子局域函数 (Electron localization function, ELF)^[22], 如图 5 所示。

图 5(a) 显示了 $\alpha\text{-MgN}_8$ 结构的三维电子局域函数。 $\alpha\text{-MgN}_8$ 相的 N 原子之间形成 N2 和 N3, 其中: N2 的两个 N 原子之间存在电子局域, 形成了共价键, 键长为 1.116 Å, 两个 N 原子外围存在孤对电子; N3 中间的 N 原子与相邻的两个 N 原子之间存在电子局域, 形成两种 N3 共价键, 其键长分别为 1.178 Å 和 1.182 Å, N3 两侧的 N 原子周围也存在孤对电子。这 3 种 N-N 键的键长介于 N≡N 三键 (1.10 Å) 和 N=N 双键 (1.25 Å) 之间。图 5(b) 显示了压强为 24.3 GPa 时 $\beta\text{-MgN}_8$ 结构的三维电子局域函数。该相 N 原子之间形成链状结构, 每个 N 原子与相邻的两个 N 原子之间均有电子局域, 形成共价键, 键长为 1.308 Å 和 1.316 Å, 这两种 N-N 键的键长介于 N=N 双键 (1.25 Å) 和 N—N 单键 (1.45 Å) 之间。图 5(c) 显示 68.3 GPa 下 $\gamma\text{-MgN}_8$ 结构的三维电子局域函数。由图 5(c) 可知, N 原子之间形成链状结构, 每个

N 原子与相邻的两个 N 原子之间均有电子局域, 形成共价键, 键长为 1.282、1.297 和 1.319 Å, 3 种 N-N 键的键长介于 N=N 双键(1.25 Å)和 N—N 单键(1.45 Å)之间。比较上述 3 相的 N 原子键长数据可以发现, β 相和 γ 相的 N-N 键更容易断裂, 释放出大量的能量, 从而成为潜在的高能量密度材料。

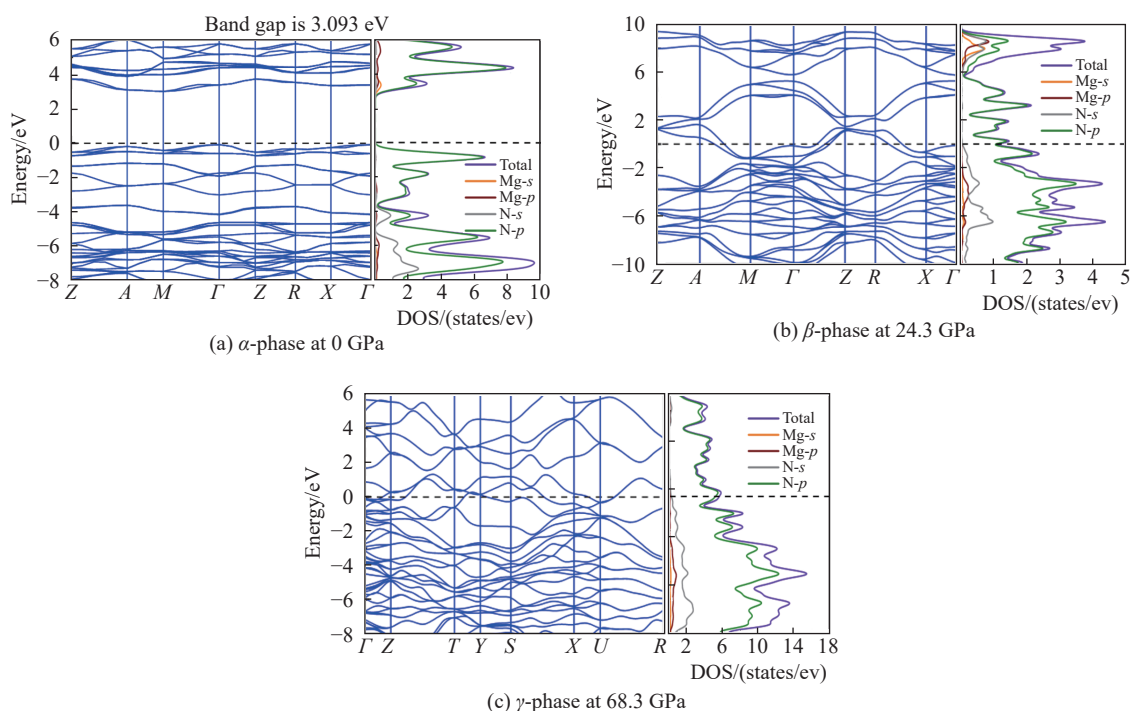


图 4 α - MgN_8 、 β - MgN_8 、 γ - MgN_8 相的能带结构和电子态密度

Fig. 4 Band structure and partial density of states of α - MgN_8 , β - MgN_8 and γ - MgN_8

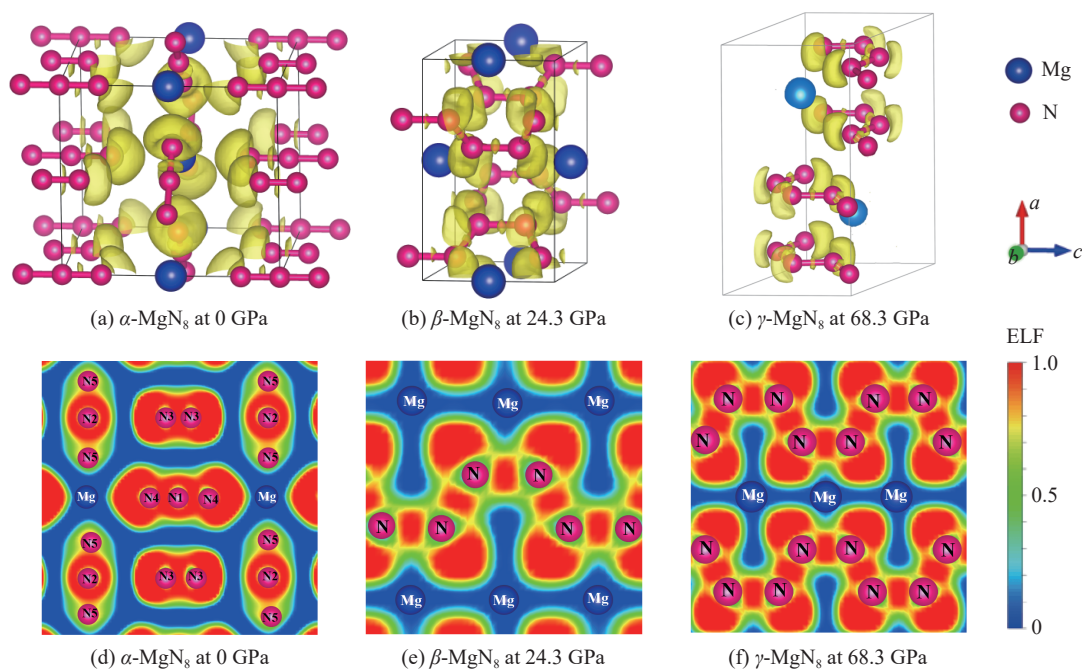


图 5 α - MgN_8 、 β - MgN_8 、 γ - MgN_8 相的电子局域函数

Fig. 5 Electron localization function of α - MgN_8 , β - MgN_8 and γ - MgN_8

图 5(d)、图 5(e)、图 5(f) 为 MgN_8 晶体 3 种相 ELF 的二维切面图, 晶格切面分别选取 (010)、(110) 和 (010), ELF 的数值范围为 0~1。ELF = 1 表示电子完全局域化, ELF = 0 表示电子完全离域化或该处没有电子。从图 5(d)、图 5(e)、图 5(f) 中可以看出: 在 Mg 原子与 N 原子之间存在电子局域, 并且 N 原子附近对应的 ELF 值接近 1, 为高度局域的电子分布, 说明 Mg 原子与 N 原子之间存在极性共价键; N 原子与 N 原子之间对应的 ELF 值接近 1, 表明 N 原子与 N 原子之间存在共价键。

为了清晰地描述 N 原子与 Mg 原子之间的电子转移情况, 计算了 Bader 电荷转移^[23-24], 计算结果见表 3。N 原子的电负性强于 Mg 原子, 故 N 原子吸引电子的能力更强, Mg 原子与 N 原子之间电荷转移的施主为 Mg 原子, 受主为 N 原子。当压强为 0 GPa 时, $\alpha\text{-MgN}_8$ 相每个 Mg 原子向周围 N 原子的电荷转移为 $1.74e$ 。由于该结构中的 N 原子不仅与 Mg 原子相连, 还形成了 N2 和 N3 结构, N2 与 N3 结构的存在导致 N 原子既可以作为受主, 接收来自 Mg 原子和其他 N 原子的电荷, 又可以作为施主, 将电荷转移给其他 N 原子; 当压强为 24.3 GPa 时, $\beta\text{-MgN}_8$ 相中每个 Mg 原子向周围 N 原子的电荷转移为 $1.94e$; 当压强为 68.3 GPa 时, $\gamma\text{-MgN}_8$ 相中每个 Mg 原子向周围 N 原子的电荷转移为 $2.20e$ 。由此可见, 随着压强的增加, 电荷转移逐渐增多。

表 3 $\alpha\text{-MgN}_8$ 、 $\beta\text{-MgN}_8$ 、 $\gamma\text{-MgN}_8$ 相电荷转移
Table 3 Calculated Bader charges of $\alpha\text{-MgN}_8$, $\beta\text{-MgN}_8$ and $\gamma\text{-MgN}_8$

Phase	Pressure/GPa	Atoms	Number	Charge value/e	Charge transfer/e
$\alpha\text{-MgN}_8$ (<i>P4/mbm</i>)	0	Mg	1	6.26	1.74
		N1	1	4.84	0.16
		N2	1	4.86	0.13
		N3	2	5.04	-0.04
		N4	2	5.46	-0.46
		N5	2	5.52	-0.52
$\beta\text{-MgN}_8$ (<i>P4/mnc</i>)	24.3	Mg	1	6.06	1.94
		N	8	5.24	-0.24
$\gamma\text{-MgN}_8$ (<i>Cmcm</i>)	68.3	Mg	1	5.80	2.20
		N1	4	5.28	-0.28
		N2	4	5.27	-0.27

3 结 论

运用 CALYPASO 软件并结合密度泛函理论第一性原理计算方法, 对 MgN_8 的晶体结构进行预测, 同时对预测得出的晶体结构进行了结构优化。研究表明: 在 0~100 GPa 范围内, 3 个相的相变序列为 $P4/mbm \rightarrow P4/mnc \rightarrow Cmcm$; 两次相变过程中, 体积均发生坍塌, 坍塌率分别为 18.87% 和 2.62%。电子性质研究表明: $\alpha\text{-MgN}_8$ 相结构具有非金属性, 带隙为 3.093 eV; $\beta\text{-MgN}_8$ 和 $\gamma\text{-MgN}_8$ 相结构具有明显的金属性。电子局域函数显示, Mg 原子与 N 原子之间形成极性共价键, N 原子与 N 原子之间形成共价键。高压 $\beta\text{-MgN}_8$ 和 $\gamma\text{-MgN}_8$ 相更适合用作储能材料, 有望成为高能量密度材料的候选。Bader 电荷转移计算结果表明, N 原子具有更强的电负性, Mg 原子与 N 原子之间电荷转移的施主为 Mg 原子, 受主为 N 原子。在 $\alpha\text{-MgN}_8$ 、 $\beta\text{-MgN}_8$ 、 $\gamma\text{-MgN}_8$ 相结构中, 每个 Mg 原子向周围 N 原子的电荷转移分别为 $1.74e$ 、 $1.94e$ 和 $2.20e$, 即随着压强的增加, 电荷转移增多。研究结果可以为碱土金属氮化物的进一步研究提供参考。

参考文献:

- [1] GROCHALA W, HOFFMANN R, FENG J, et al. The chemical imagination at work in very tight places [J]. *Angewandte*

- [Chemie International Edition](#), 2007, 46(20): 3620–3642.
- [2] HEMLEY R J. Effects of high pressure on molecules [J]. [Annual Review of Physical Chemistry](#), 2000, 51(1): 763–800.
- [3] SCHETTINO V, BINI R. Molecules under extreme conditions: chemical reactions at high pressure [J]. [Physical Chemistry Chemical Physics](#), 2003, 5(10): 1951–1965.
- [4] 李鑫, 马雪姣, 高文泉, 等. 高压下 Ir_2P 晶体结构预测与物理性质 [J]. [高压物理学报](#), 2019, 33(1): 011103.
LI X, MA X J, GAO W Q, et al. Evolution of crystal structures and electronic properties for Ir_2P under high pressure [J]. [Chinese Journal of High Pressure Physics](#), 2019, 33(1): 011103.
- [5] MA X J, LI X, ZHOU D, et al. Phase diagram and bonding states of Ir-P binary compounds at high pressures [J]. [Journal of Alloys and Compounds](#), 2019, 791: 1257–1262.
- [6] BRULS R J, HINTZEN H T, METSELAAR R. Preparation and characterisation of MgSiN_2 powders [J]. [Journal of Materials Science](#), 1999, 34(18): 4519–4531.
- [7] PARKIN I P, NARTOWSKI A M. Solid state metathesis routes to Group IIIa nitrides: comparison of Li_3N , NaN_3 , Ca_3N_2 and Mg_3N_2 as nitriding agents [J]. [Polyhedron](#), 1998, 17(16): 2617–2622.
- [8] KOBASHI M, OKAYAMA N, CHOH T. Synthesis of AlN/Al alloy composites by *in situ* reaction between Mg_3N_2 and aluminum [J]. [Materials Transactions, JIM](#), 1997, 38(3): 260–265.
- [9] EREMETS M I, GAVRILIUK A G, TROJAN I A, et al. Single-bonded cubic form of nitrogen [J]. [Nature Materials](#), 2004, 3(8): 558–563.
- [10] LORENZ H, KÜHNE U, HOHLFELD C, et al. Influence of MgO on the growth of cubic boron nitride using the catalyst Mg_3N_2 [J]. [Journal of Materials Science Letters](#), 1988, 7(1): 23–24.
- [11] PAPACONSTANTOPOULOS D A, PICKETT W E, KLEIN B M, et al. Electronic properties of transition-metal nitrides: the group-V and group-VI nitrides VN , NbN , TaN , CrN , MoN , and WN [J]. [Physical Review B](#), 1985, 31(2): 752–761.
- [12] MENG Y, MAO H K, ENG P J, et al. The formation of sp^3 bonding in compressed BN [J]. [Nature Materials](#), 2004, 3(2): 111–114.
- [13] RAZA Z, PICKARD C J, PINILLA C, et al. High energy density mixed polymeric phase from carbon monoxide and nitrogen [J]. [Physical Review Letters](#), 2013, 111(23): 235501.
- [14] KNITTLE E, WENTZCOVITCH R M, JEANLOZ R, et al. Experimental and theoretical equation of state of cubic boron nitride [J]. [Nature](#), 1989, 337(6205): 349–352.
- [15] XIA Y, LI Q, MA Y M. Novel superhard polymorphs of Be_3N_2 predicted by first-principles [J]. [Computational Materials Science](#), 2010, 49(1): S76–S79.
- [16] ZHU S S, PENG F, LIU H Y, et al. Stable calcium nitrides at ambient and high pressures [J]. [Inorganic Chemistry](#), 2016, 55(15): 7550–7555.
- [17] JI D P, CHONG X Y, FENG J. Electronic, mechanical and hydrogen storage properties of novel Mg_3N_2 [J]. [Journal of Alloys and Compounds](#), 2019, 800: 8–15.
- [18] WANG Y C, LV J, ZHU L, et al. Crystal structure prediction via particle-swarm optimization [J]. [Physical Review B](#), 2010, 82(9): 094116.
- [19] MONKHORST H J, PACK J D. Special points for Brillouin-zone integrations [J]. [Physical Review B](#), 1976, 13(12): 5188.
- [20] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple [J]. [Physical Review Letters](#), 1996, 77(18): 3865–3868.
- [21] BORN M, HUANG K. Dynamical theory of crystal lattices [J]. [American Journal of Physics](#), 1954, 39(2): 113–127.
- [22] BECKE A D, EDGECOMBE K E. A simple measure of electron localization in atomic and molecular systems [J]. [The Journal of Chemical Physics](#), 1990, 92(9): 5397–5403.
- [23] BADER R F W. Atoms in molecules [J]. [Accounts of Chemical Research](#), 1985, 18(1): 9–15.
- [24] OGANOV A R, CHEN J H, GATTI C, et al. Ionic high-pressure form of elemental boron [J]. [Nature](#), 2009, 457(7231): 863–867.

Theoretical Simulation and Physical Properties of MgN_8 Crystal Structure under High Pressure

MIAO Yu¹, LIU Siyuan¹, MA Xuejiao¹, JIN Zhexue²

(1. Department of Physics, Yanbian University, Yanji 133000, Jilin, China;

2. Department of Engineering, Yanbian University, Yanji 133000, Jilin, China)

Abstract: Based on the first principle of density functional theory, the crystal structure of MgN_8 was predicted in the pressure range of 0–100 GPa by using CALYPSO structure search technique and VASP software. After systematically studying the predicted structure, it was found that the enthalpy of $\alpha\text{-MgN}_8$ crystal with space group $P4/mbm$ was the lowest at ambient pressure. The phase was changed to $\beta\text{-MgN}_8$ phase of $P4/mnc$ and $\gamma\text{-MgN}_8$ phase of $Cmcm$ when the pressure reached 24.3 GPa and 68.3 GPa, respectively. And both of the phase transitions were the first order phase transition of corresponding volume collapse. The calculated results of electronic properties suggested that the existence of a band gap of 3.09 eV between the conduction band and valence band of $\alpha\text{-MgN}_8$ phase revealed the non-gold properties of the structure, whereas the obvious metal characteristics appeared in the $\beta\text{-MgN}_8$ phase and $\gamma\text{-MgN}_8$ phase. Bader charge transfer calculation showed that the charge which transferred from Mg atom to N atom, increased gradually with the increase of pressure.

Keywords: high pressure; first-principles; crystal structure prediction; MgN_8 ; charge transfer; phase transition

高压下 HBT 晶体的弹性性质

李 佐, 张凤玲, 廖大麟

(贵州工程应用技术学院理学院, 贵州 毕节 551700)

摘要: 采用基于密度泛函理论的第一性原理方法, 研究了 HBT 晶体在常压和高压下的晶格常数和弹性性质及各向异性, 利用 3 种不同理论模型研究了高压下 HBT 晶体的各向异性性质。研究表明: 高压下 HBT 晶体的弹性常数和弹性模量显著增加, 晶体表现出高压韧性; 同时, 高压下 HBT 晶体具有较大的弹性模量和力学各向异性, 随着压强的增大, HBT 晶体的各向异性程度减弱。此外, 热力学性质计算结果表明, HBT 晶体具有较高的德拜温度, 并且德拜温度随着压强的增大而升高。

关键词: HBT 晶体; 高压; 弹性性质; 各向异性

中图分类号: O521.21

文献标识码: A

含能材料的弹性性质包括弹性常数、体弹模量、杨氏模量和剪切模量等。它反映材料在常温、静荷载作用下的宏观力学性能, 不但决定材料对施加应力的响应方式, 还能反映含能材料的稳定性等^[1]。目前, 含能材料的弹性性质得到了人们的广泛关注, 并对 RDX^[2]、TATB^[3]、HMX^[4]、FOX-7^[5]、CL-20^[6] 等含能材料开展了研究。5, 5'-双四唑肼 (5, 5'-Hydrazinebistetrazole, HBT) 晶体是一种著名的单质富氮、高能、钝感含能材料^[7]。HBT 含有 83.7% 的氮元素, 爆炸燃烧后释放的气体主要为氮气、二氧化碳和水, 因此被称为“绿色”含能材料^[8-11]。本研究采用基于第一性原理的准谐振近似方法, 计算固态 HBT 晶体在 0~120 GPa 高压下的弹性性质, 同时分析其弹性的各向异性特征。

1 理论与计算方法

1.1 HBT 晶体结构优化方法

采用基于第一性原理的 Quantum ESPRESSO 软件包中的 PWSCF 模块^[12] 计算电子结构的总能量。广义梯度近似 (GGA) 下交换相关势采用 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 形式^[13-14], 原子赝势平面波基组采用超软赝势加核修正的 C.pbe_v1.2.uspp.F.UPF, N.pbe_v1.2.uspp.F.UPF, H.pbe_v1.2.uspp.F.UPF 形式^[15], 几何优化采用 BFGS 算法^[16]。为增加计算精度, 平面波基函数的截断能取为 544 eV, 布里渊空间采用 Monkhorst-Pack 方法^[17], k 点方案为 $6 \times 6 \times 3$, 总能自洽, 离子位移最大值和应力最大值都能达到设置的收敛精度。在高压下几何结构优化的基础上, 利用准谐振近似方法计算 HBT 晶体的弹性性质, 详细的计算过程在软件 Thermo_pw 中体现^[18]。

1.2 弹性常数

固态物质弹性理论计算中引入应变 $\varepsilon_j (j = 1, 2, \dots, 6)$, 晶体的一个应力用 σ_i 表示。当应力较小时, σ_i 和 ε_j 满足^[19]

* 收稿日期: 2019-08-19; 修回日期: 2019-09-20

基金项目: 贵州省科技厅、毕节市、贵州工程应用技术学院联合基金 (LH[2014]7525); 贵州省教育厅青年科技人才成长项目 (KY[2018]398)

作者简介: 李 佐 (1983—), 男, 硕士, 讲师, 主要从事高压下含能材料物性研究. E-mail: lizuo212@163.com

$$\sigma_i = \sum_{j=1}^6 C_{ij} \varepsilon_j \quad (1)$$

$$\varepsilon_i = \sum_{j=1}^6 S_{ij} \sigma_j \quad (2)$$

式中: 系数 C_{ij} 为弹性常数(或者弹性劲度), 矩阵 S 为矩阵 C 的逆矩阵, S_{ij} 为弹性柔顺系数。初始构型采用 Klapötke 等^[7] 获得的 HBT 晶体的实验结构, 它属于单斜结构的分子晶体, 点群为 $C2/c$ 空间群, 其原胞晶系属于三斜晶系, 对称性最低, 包含最多的矩阵元。弹性常数矩阵 C 是一个对称矩阵, 共有 21 个独立矩阵元。计算中采用原胞结构, 弹性常数矩阵表达式为

$$C = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{pmatrix} \quad (3)$$

考虑到二阶弹性常数与能量满足如下关系^[20]

$$C_{ij} = \frac{1}{V_0} \left(\frac{\partial^2 E_c}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j} \right) \quad (4)$$

因此, 只要知道稳定构型下的晶体体积 V_0 和能量 E_c , 就可以获得弹性常数。

2 结果与讨论

2.1 晶体结构参数

基于密度泛函理论的第一性原理, 得到零温零压下 HBT 晶体的晶格参数, 如表 1 所示, 晶体几何结构如图 1 所示。从表 1 可以看出, 晶格参数 b 、 c 和 V 的计算值均高于实验结果, 而 a 和 β 却低于实验结果。在目前的第一性原理方法中, 晶格参数的计算精度取决于原子赝势和计算方法的选择, 因此, 无法做到与实验结果完全符合。此外, 采用 5 GPa 间隔优化 HBT 晶体在 0~120 GPa 压强范围内的晶体结构。优化后获得了稳定的晶体构型, 压强-体积比(p - V/V_0)曲线与实验结果的比较如图 2 所示。从图 2 可以看出, 在 0~26 GPa 压强范围内, 理论计算结果与 Ciezak-Jenkins 等^[21] 的实验

表 1 HBT 晶体晶格参数的计算值和实验值

Table 1 Calculated lattice parameters of HBT crystal along with experimental data

Method	a/nm	b/nm	c/nm	$\beta/(\circ)$	V/nm^3
Exp. [7]	1.240 1	0.551 3	0.983 5	115.57	0.606 69
Exp. [21]	1.241 5	0.551 7	0.984 2	115.63	0.607 79
This work	1.211 2	0.697 0	1.038 8	113.65	0.634 54

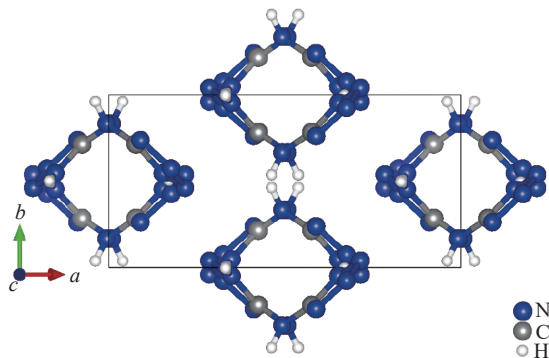


图 1 优化后的 HBT 晶体几何结构

Fig. 1 Geometric structure of optimized HBT crystal

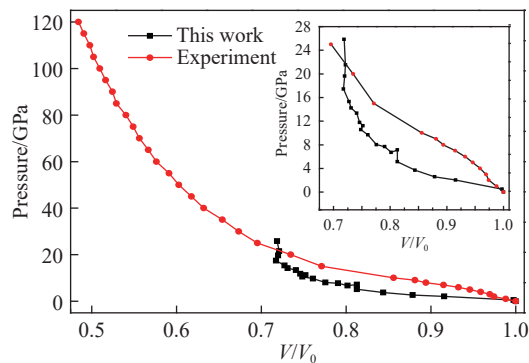


图 2 理论和实验得到的压强-体积比关系

Fig. 2 Pressure as a function of volume ratio V/V_0 from theoretical and experimental data

结果具有相同的变化趋势, 并且在 1 和 22 GPa 处曲线相交, 说明本理论计算结果与实验结果有一定的可比性。同时, 给出了 HBT 晶体在压强高于 25 GPa 时的体积变化情况。理论计算显示, 随着压强的增大, 晶体体积变化受压强的影响越来越明显, 60 GPa 以上时压强与体积比呈线性关系。

2.2 高压弹性

通过高压下结构优化, 得到不同压力下稳定的 HBT 晶体结构, 在此基础上计算弹性系数和弹性模量。三斜结构的弹性常数矩阵包含 21 个独立矩阵元。Born^[22] 给出了晶体材料力学稳定性的充分必要条件为弹性常数矩阵 \mathbf{C} 正定。按照线性代数知识可知, 对称矩阵 \mathbf{C} 正定的充要条件为 \mathbf{C} 的各阶顺序主子式都为正, 即

$$C_{11} > 0, \quad \begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{12} & C_{22} \end{vmatrix} = C_{11}C_{22} - C_{12}^2 > 0 \quad (5)$$

$$\begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} \end{vmatrix} = (C_{11}C_{22}C_{33} - C_{11}C_{23}^2 - C_{12}^2C_{33} - C_{13}^2C_{22} + 2C_{12}C_{13}C_{23}) > 0 \quad (6)$$

$$\begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} \end{vmatrix} > 0, \quad \begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} \end{vmatrix} > 0 \quad (7)$$

$$\begin{vmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{vmatrix} > 0 \quad (8)$$

式 (5)~式 (8) 给出了三斜晶体稳定性的充要条件。四阶以上行列式的表达式比较复杂, 一般采用直接带入行列式元素来计算验证。图 3(a)、图 3(b)、图 3(c)、图 3(d) 给出了 21 个弹性常数随压强的变化关系。从图 3 可以看出, C_{15} 、 C_{56} 、 C_{24} 、 C_{46} 随压强的变化比较剧烈, 其中 C_{15} 、 C_{56} 和 C_{24} 先减小后增大, 而 C_{46} 则先增大后减小随后又增大。将零温零压下晶体的弹性常数代入式 (5)~式 (8), 验证后发现符合稳定性条件。对高压下晶体进行验证, 发现也符合稳定性条件, 说明高压下 HBT 晶体是稳定的。

计算体弹模量、剪切模量的普适公式为^[23]

$$\begin{cases} 9B^V = C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2C_{12} + 2C_{13} + 2C_{23} \\ 1/B^R = S_{11} + S_{22} + S_{33} + 2S_{12} + 2S_{13} + 2S_{23} \\ 15G^V = C_{11} + C_{22} + C_{33} - C_{12} - C_{13} - C_{23} + 3C_{44} + 3C_{55} + 3C_{66} \\ 15/G^R = 4(S_{11} + S_{22} + S_{33} - S_{12} - S_{13} - S_{23} + 3S_{44} + 3S_{55} + 3S_{66}) \end{cases} \quad (9)$$

根据 Voigt-Reuss-Hill 均值方法, 有

$$B = \frac{B^V + B^R}{2}, \quad G = \frac{G^V + G^R}{2} \quad (10)$$

再根据 B 、 G 可以获得体弹模量 E 和泊松比 μ

$$E = \frac{9BG}{3B+G}, \quad \mu = \frac{3\frac{B}{G} - 2}{6\frac{B}{G} + 2} \quad (11)$$

依据式 (9)~式 (11), 可以获得体弹模量、剪切模量和杨氏模量随压强的变化关系, 如图 4 所示。从图 4 可以看出, 随着压强的增大, 3 种模量的数值也增大, 其中体弹模量在 15 GPa 以上时表现出与压强

的线性关系。而 3 种模量中, 杨氏模量的变化最显著, 高压下的数值也最大。此外, 根据 Pugh^[24] 的理论, B/G 可作为鉴别晶体韧脆性的标准, 即当 $B/G < 1.74$ 时, 晶体材料表现为脆性; 反之, 晶体材料表现为韧性。因此, 根据式 (11) 中泊松比 μ 与 B/G 的关系来计算 B/G 的数值, 并作出 B/G 与压强的关系曲线, 如图 5 所示。随着压强增大, B/G 逐渐增大, 与图 4 的变化趋势一致。当压强低于 85 GPa 时, $B/G < 1.74$, 材料表现出脆性; 而当压强高于 85 GPa 时, HBT 晶体表现出韧性。类似的层状分子晶体 TATB 在 0~50 GPa 时表现为韧性^[25], 而同为层状分子晶体的 HBT 在 0~85 GPa 下却表现为脆性, 说明 HBT 晶体对压力的响应较为敏感。

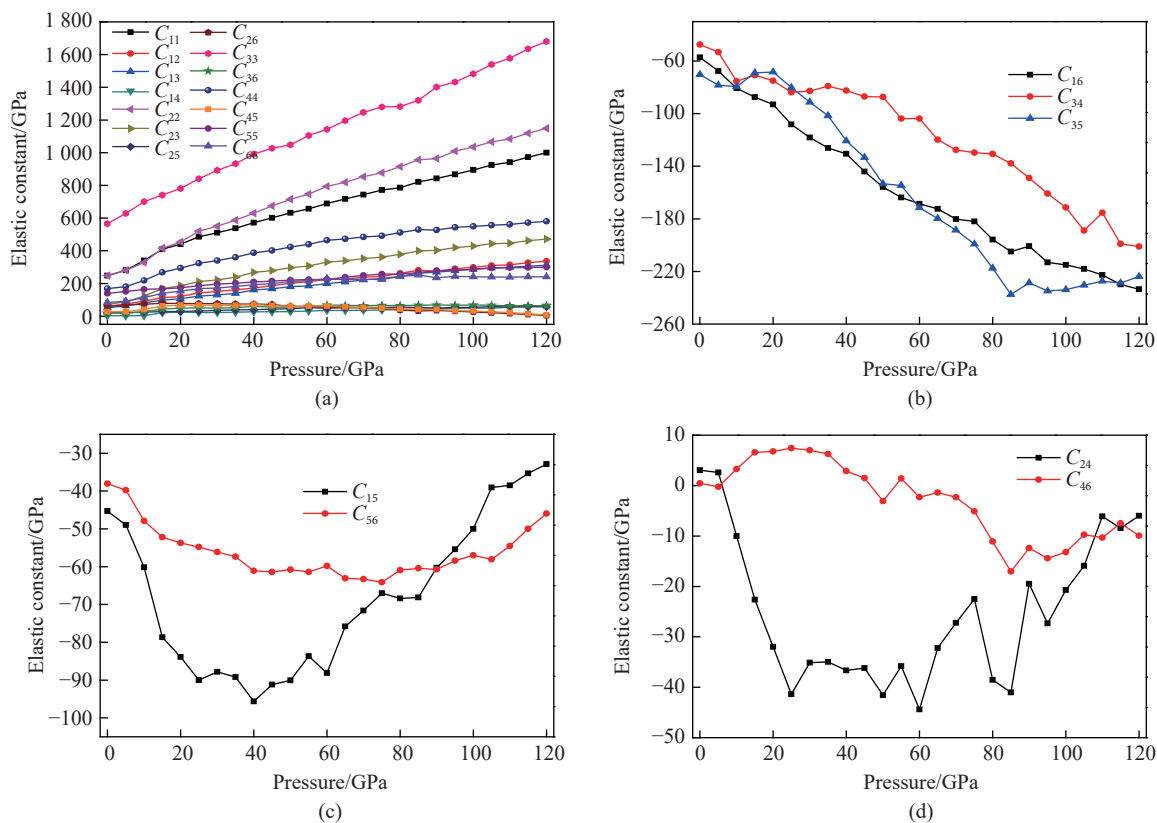


图 3 弹性常数随压强的变化

Fig. 3 Variations of elastic constant with pressure

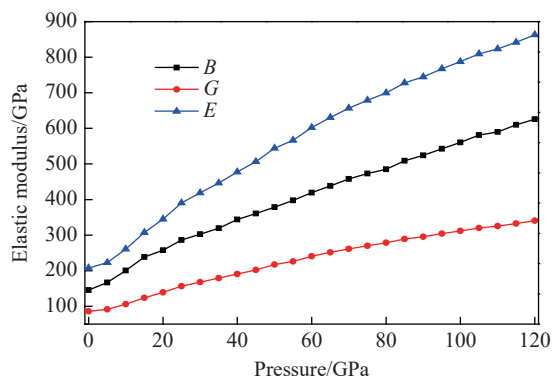


图 4 体弹、剪切和杨氏模量随压强的变化关系

Fig. 4 Variations of bulk modulus B , shear modulus G and Young's modulus E with pressure

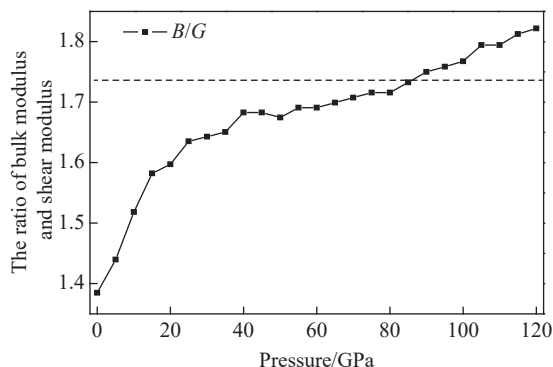


图 5 体弹模量和剪切模量之比与压强的关系

Fig. 5 Pressure dependence of the ratio of bulk modulus and shear modulus

同时, 根据以下公式可以得到 HBT 晶体材料的压缩波声速 v_p 、剪切波声速 v_s 及平均声速 v_m

$$v_p = \sqrt{\frac{3B + 4G}{3\rho}} \quad (12)$$

$$v_s = \sqrt{G/\rho} \quad (13)$$

$$v_m = \left[\frac{1}{3} \left(\frac{1}{v_p^3} + \frac{2}{v_s^3} \right) \right]^{-1/3} \quad (14)$$

式中: ρ 为 HBT 晶体密度。平均声速 v_m 与德拜温度 Θ 满足如下关系^[26]

$$\Theta = \frac{h}{k_B} \left[\frac{3n}{4\pi} \left(\frac{N_A \rho}{M} \right) \right]^{1/3} v_m \quad (15)$$

式中: h 为普朗克常数, k_B 为玻尔兹曼常数, n 为原子数, N_A 为阿伏加德罗常数, M 为相对分子质量。图 6 给出了压缩波声速 v_p 、剪切波声速 v_s 、平均声速 v_m 和德拜温度 Θ 随压强的变化关系。可见, 声速随压强的增大而增大, 其中压缩波声速 v_p 最大, 且随压强变化最明显。在 0 GPa 下得到的德拜温度为 975 K, 而 120 GPa 时则为 1 820 K, 压强对德拜温度的影响明显。

2.3 高压弹性各向异性

弹性性质的各向异性是材料力学性能通常受微裂纹和晶格畸变影响的重要条件, 因此, 研究弹性性质的各向异性对于提高材料的力学性能有着重要的意义^[27]。目前有 3 种处理方案。第 1 种方案是 Chung 等^[28]提出的体弹模量、杨氏模量和剪切模量分数比各向异性的概念, 定义为

$$A_B = \frac{B^V - B^R}{B^V + B^R} \quad (16)$$

$$A_E = \frac{E^V - E^R}{E^V + E^R} \quad (17)$$

$$A_G = \frac{G^V - G^R}{G^V + G^R} \quad (18)$$

式 (16)~式 (18) 分别用于表征材料的体弹模量、杨氏模量和剪切模量的各向异性程度。据此可以计算出模量各向异性分数比与压强的关系, 如图 7 所示。对于弹性各向同性材料, A_B 、 A_E 和 A_G 都为零, 而 A_B 、 A_G 为 1 表示最大可能的弹性各向异性。从图 7 可以看出, A_B 、 A_E 和 A_G 均大于零而小于 1, 说明在 0~120 GPa 的压强范围内 HBT 晶体的弹性模量表现出各向异性。此外, 体弹模量分数比只有很小的波动, 杨氏模量和剪切模量则表现出相同的变化趋势, 即先增大后逐渐减小, 说明 HBT 晶体在高压下的各向异性程度减弱。

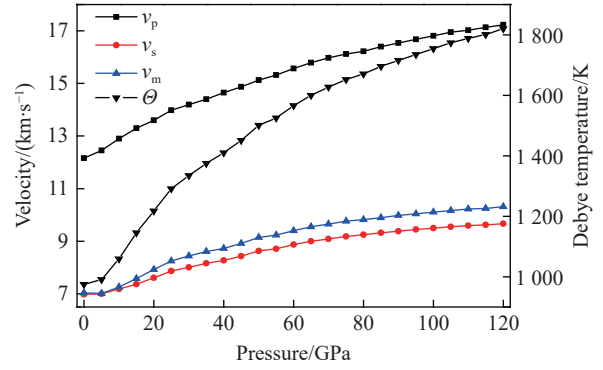


图 6 不同压强下 HBT 晶体的声速和德拜温度

Fig. 6 Compressional wave velocity, shear wave velocity and averaged wave velocity of HBT crystal under different pressures

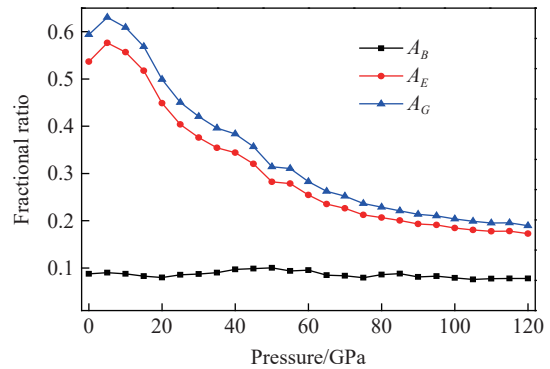


图 7 模量分数比与压强的关系

Fig. 7 Pressure dependence of the fractional ratio of modulus

第 2 种方案是 Ranganathan 等^[29]提出的全局弹性各向异性系数(A^U)的概念,用来描述材料弹性模量的各向异性,具体表达式如下

$$A^U = 5 \frac{G^V}{G^R} + \frac{B^V}{B^R} - 6 \quad (19)$$

$$A^C = \frac{G^V - G^R}{2G} \quad (20)$$

图 8 的纵轴表示 0~120 GPa 压强范围内的全局弹性各向异性系数 A^U 的数值,其中,最高点表示 0 GPa 下的数值。从结果看都大于零,因此, HBT 晶体在高压下表现出各向异性。

此外,式 (20) 的 A^C 与式 (18) 的 A_G 是相等的,都是由 Chung 等于 1967 年提出,均用于表征剪切模量的各向异性。为了比较两种方案的关系,作 A^U - A^C 曲线。可见,两种方法都很好地描述了 HBT 晶体在 0~120 GPa 压强范围弹性模量的各向异性特征。随着压强的增大, A^U 、 A^C 和 A^U/A^C 的数值都在减少,说明弹性模量的各向异性程度在减弱,两种方案得到的结论一致。

第 3 种方案是 Toher 总结和发展的 Ranganathan 关于材料弹性各向异性的理论表述^[30]

$$A^L = \sqrt{5} \ln \left(1 + \frac{A^U}{5} \right) \quad (21)$$

A^L 随压强的变化关系如图 9 所示。可以发现,曲线的变化趋势与第 1 种方案(弹性模量分数比理论)得到的结果类似,即 A^L 先增大后减小, 5 GPa 处出现转折。整体上看,高压下 HBT 晶体弹性模量的各向异性程度减弱。由此可知, A^C 、 A^U 和 A^L 三者 in 描述 HBT 晶体各向异性程度上是等价的。

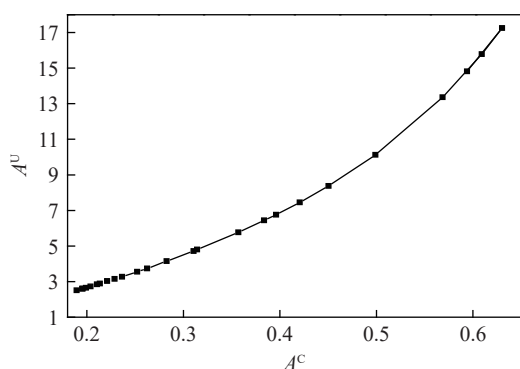


图 8 A^U 和 A^C 的各向异性关系

Fig. 8 Anisotropy diagram of the A^U and A^C

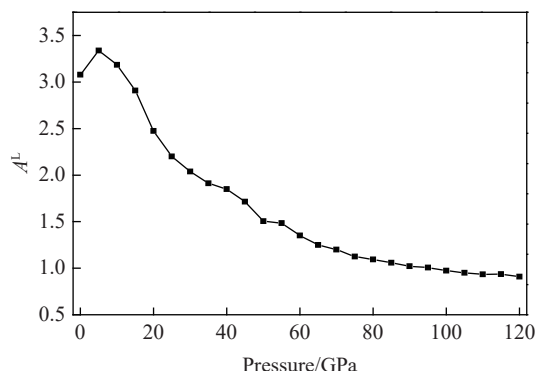


图 9 A^L 随压强的变化关系

Fig. 9 Pressure as a function of anisotropy index A^L

从图 7、图 9 可以明显看出, 5、25 和 55 GPa 下曲线有较为明显的变化。为了进一步考察这 3 个压强下 HBT 晶体模量的各向异性程度, 利用 ELATE 开源软件^[31], 将这 3 个压强下的弹性系数 6×6 矩阵元 36 个数值全部代入, 绘制出剪切模量的二维分布, 如图 10 所示。因单位换算, 图 10 中坐标轴均被放大了 10 倍。图 10(a)、图 10(b)、图 10(c) 分别显示了 5、25 和 55 GPa 下剪切模量的二维分布。每个压强下的 3 幅图分别代表剪切模量三维分布在 xy 、 xz 、 yz 3 个面上的投影。蓝线和绿线分别代表 \vec{a} 、 \vec{b} 两个方向剪切模量的矢量投影。从图 10 可以看出: 压强越大, 每个面上投影矢量的各向异性越强; 在确定的压强下, 每个面上的投影也表现出差异性。综上所述, HBT 晶体剪切模量的各向异性受压强的影响显著。

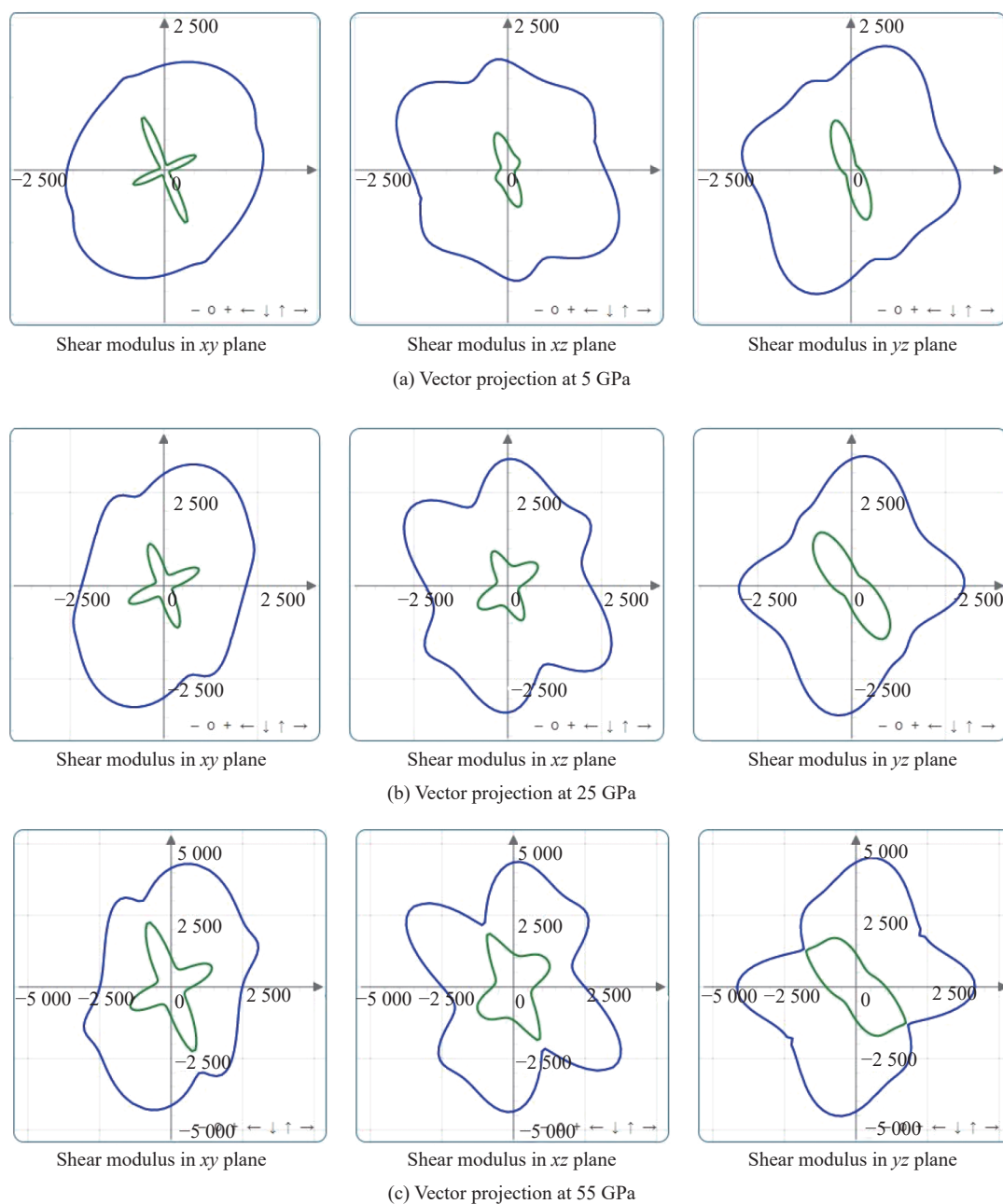


图 10 不同压强下剪切模量各向异性的二维投影

Fig. 10 Anisotropic two-dimensional projection of shear modulus at different pressures

3 结 论

采用基于密度泛函理论的第一性原理方法计算了 HBT 晶体在零温零压及高压下的结构, 研究了高压下 HBT 的力学稳定性和弹性性质, 具体分析了 HBT 晶体的弹性常数 C_{ij} 、弹性模量 (B 、 G 、 E)、声速 (v_p 、 v_s 、 v_m) 和德拜温度 θ 随压强的变化关系。在此基础上, 基于 3 种不同理论研究了弹性模量的各向异性。结果表明, 弹性常数和模量都随压强的增加而增加。根据 B/G 估测了 HBT 晶体在高压下的韧脆性。弹性模量各向异性参量随压强表现出不同的变化规律, 总体而言, 高压下 HBT 晶体的弹性模量各向异性程度减弱。

参考文献:

- [1] 范开敏, 杨莉, 孙庆强, 等. 六角相 ErA_x ($A = \text{H}, \text{He}$) 体系弹性性质的第一性原理研究 [J]. *物理学报*, 2013, 62(11): 116201.
FAN K M, YANG L, SUN Q Q, et al. First-principles study on elastic properties of hexagonal phase ErA_x ($A = \text{H}, \text{He}$) [J]. *Acta Physica Sinica*, 2013, 62(11): 116201.
- [2] ANIRBAN P, CATALIN R P. Contribution of molecular flexibility to the elastic-plastic properties of molecular crystal α -RDX [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2017, 25(1): 015006.
- [3] RYKOUNOV A A. Investigation of the pressure dependent thermodynamic and elastic properties of 1,3,5-triamino-2,4,6-trinitrobenzene using dispersion corrected density functional theory [J]. *Journal of Applied Physics*, 2015, 117(21): 215901.
- [4] LIAN D, LU L Y, WEI D Q. High-pressure behavior of β -HMX crystal studied by DFT-LDA [J]. *Chinese Physics Letters*, 2008, 25(3): 899–902.
- [5] WU Q, ZHU W H, XIAO H M. DFT study on crystalline 1,1-diamino-2,2-dinitroethylene under high pressures [J]. *Journal of Molecule Modeling*, 2013, 19(9): 4039–4047.
- [6] XU X J, ZHU W H, XIAO H M. DFT studies on the four polymorphs of crystalline CL-20 and the influences of hydrostatic pressure on epsilon-CL-20 crystal [J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2007, 111(8): 2090–2097.
- [7] KLAPÖTKE T M, SABATE C M. Bistetrazoles: nitrogen-rich, high-performing, insensitive energetic compounds [J]. *Chemistry of Materials*, 2008, 20(11): 3629–3637.
- [8] KLAPÖTKE T M, SABATE C M. 5, 5'-Hydrazinebistetrazole: an oxidation-stable nitrogen-rich compound and starting material for the synthesis of 5, 5'-Azobistetrazolates [J]. *Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie*, 2007, 633(15): 2671–2677.
- [9] KARAGHISOFF K, KLAPÖTKE T M, SABATE C M. Nitrogen-rich compounds in pyrotechnics: alkaline earth metal salts of 5, 5'-Hydrazine-1, 2-diylbis(1H-tetrazole) [J]. *European Journal of Inorganic Chemistry*, 2009, 2: 238–250.
- [10] EBESPACHER M, KLAPÖTKE T M, SABATE C M. Nitrogen-rich alkali metal 5, 5'-Hydrazinebistetrazolate salts: environmentally friendly compounds in pyrotechnic mixtures [J]. *New Journal of Chemistry*, 2009, 33: 517–527.
- [11] DE LUCIA F C, GOTTFRIED J L. Characterization of a series of nitrogen-rich molecules using laser induced breakdown spectroscopy [J]. *Propellants Explosives Pyrotechnics*, 2010, 35(3): 268–277.
- [12] GIANNOZZI P, ANDREUSSI O, BRUMME T, et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2017, 29(46): 465901.
- [13] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple [J]. *Physical Review Letter*, 1996, 77(18): 3865–3868.
- [14] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Errata: generalized gradient approximation made simple [J]. *Physical Review Letter*, 1997, 78(7): 1396.
- [15] HAMANN D R. Optimized norm-conserving vanderbilt pseudopotentials [J]. *Physical Review B*, 2013, 88(8): 085117.
- [16] FLETCHER R. Practical methods of optimization [M]. New York: Wiley, 1980: 126–127.
- [17] MONKHORST H J, PACK J D. Special points for brillouin-zone integrations [J]. *Physical Review B*, 1976, 13(12): 5188–5192.
- [18] CORSO D A. Pseudopotentials periodic table: from H to Pu [J]. *Computational Materials Science*, 2014, 95: 337–350.
- [19] CORSO D A. Elastic constants of beryllium: a first-principles investigation [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2016, 28(7): 075401.
- [20] MOUHAT F, COUDERT F X. Necessary and sufficient elastic stability conditions in various crystal systems [J]. *Physical Review B*, 2014, 90(22): 224104.
- [21] CIEZAK-JENKINS J A, JENKINS T A. Shear induced weakening of the hydrogen bonding lattice of the energetic material 5,5'-Hydrazinebistetrazole at high-pressure [J]. *Journal of Molecular Structure*, 2017, 1129: 313–318.
- [22] BORN M. On the stability of crystal lattices. I [J]. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 1940, 36(2): 160–172.
- [23] HILL R. The elastic behaviour of a crystalline aggregate [J]. *Proceedings of the Physical Society (Section A)*, 1952, 65(5): 349–354.
- [24] PUGH S F. XCII Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals [J]. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 1954, 45(367): 823–843.

- [25] 范航, 聂福德, 龙瑶, 等. 钝感高能炸药三氨基三硝基苯高温高压下热力学性质的分子动力学模拟研究 [J]. *物理学报*, 2016, 65(6): 066201.
- FAN H, NIE F D, LONG Y, et al. A molecular dynamics simulation of thermodynamic properties of 1, 3, 5-triamino-2, 4, 6-trinitrobenzene under high pressure and high temperature [J]. *Acta Physica Sinica*, 2016, 65(6): 066201.
- [26] ANDERSON O L. A simplified method for calculating the Debye temperature from elastic constants [J]. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1963, 24(7): 909–917.
- [27] 陈志谦, 林兴香, 李春梅. 硅化锆 (ZrSi) 弹性及其各向异性研究 [J]. *西南大学学报(自然科学版)*, 2016, 38(3): 1–8.
- CHEN Z Q, LIN X X, LI C M. Investigations of elasticity anisotropy of ZrSi [J]. *Journal of Southwest University (Natural Science Edition)*, 2016, 38(3): 1–8.
- [28] CHUNG D H, BUESSEM W R. The elastic anisotropy of crystals [J]. *Journal of Applied Physics*, 1967, 38(5): 2010–2012.
- [29] RANGANATHAN S I, OSTOJA-STARZEWSKI M. Universal elastic anisotropy index [J]. *Physical Review Letter*, 2008, 101(5): 055504.
- [30] TOHER C, PLATA J J, LEVY O, et al. High-throughput computational screening of thermal conductivity, Debye temperature, and Grüneisen parameter using a quasiharmonic Debye model [J]. *Physical Review B*, 2014, 90(17): 174107.
- [31] GAILLAC R, PULLUMBI P, COUDERT F X. ELATE: an open-source online application for analysis and visualization of elastic tensors [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2016, 28(27): 275201.

Elastic Properties of HBT Crystal under High Pressure

LI Zuo, ZHANG Fengling, LIAO Dalin

(*School of Science, Guizhou University of Engineering Science, Bijie 551700, Guizhou, China*)

Abstract: The lattice constants, elastic and anisotropy properties of HBT crystals at normal and high pressure were investigated by using the first-principle method based on density functional theory. The anisotropic properties of HBT crystal under high pressure were studied by using three different theoretical models. The results show that the elastic constant and elastic modulus of HBT crystal increase significantly under high pressure, and HBT crystal shows high-pressure toughness. Simultaneously, HBT crystal has large elastic modulus and mechanical anisotropy under high pressure. With increasing pressure, the extent of anisotropy of HBT crystal decreases. In addition, the thermodynamic properties show that HBT crystal has a higher Debye temperature, which increases with increasing pressure.

Keywords: HBT crystal; high pressure; elastic properties; anisotropic

仿生 BCC 结构的准静态压缩数值模拟及吸能性

吴伟¹, 张辉¹, 曹美文², 张霞², 陈飞², 梁清香¹, 常超¹

(1. 太原科技大学应用科学学院力学系, 山西 太原 030008;

2. 山西柴油机工业有限责任公司, 山西 大同 037036)

摘要: 晶格点阵结构因具有质量轻、吸能性好等优点, 被广泛应用于航空、航天、军工等领域。研究了仿生体心立方(BCC)结构的吸能性, 并探讨了截面形貌对BCC晶格结构吸能性的影响。基于毛竹的宏观结构和细观结构, 设计了3种不同的BCC仿竹晶格点阵结构, 对3种结构及原始BCC晶格结构进行了轴向准静态压缩数值模拟。结果表明: 静载下仿竹BCC结构的吸能性和比吸能均比原始BCC结构提高了25%以上, 但3种仿竹BCC结构的吸能性、比吸能相差不大; 仿竹BCC结构的相对密度对其吸能性和比吸能的影响较大; 在压缩过程中, 仿生结构的韧性截面有效保证了塌陷稳定性, 这是该结构吸能稳定的重要原因。

关键词: 仿竹结构; 体心立方晶格结构; 能量吸收; 数值模拟

中图分类号: O341

文献标识码: A

晶格结构因具有轻量化、高强度、高刚度以及出色的吸能性等特点, 广泛应用于航空航天、汽车制造、军工等领域。近年来, 国内外学者对体心立方(BCC)晶格结构开展研究并取得了一定成果。如Cao等^[1]和Bai等^[2]提出了变截面BCC晶格结构, 发现与原结构相比, 变截面晶格结构具有更好的力学性能和吸能性; Li^[3]对商用3D打印的316L不锈钢微晶格结构进行了准静态压缩实验研究和数值模拟, 发现塑性应变发生在铰结点附近; Tsopanos等^[4]研究了微米级3D打印不锈钢材料的BCC晶格结构, 指出激光曝光时间和激光功率将影响晶格结构的力学性能; Jin等^[5]通过实验和数值计算, 发现不同相对密度的BCC晶格结构在支柱连接处先破坏, 揭示了可用幂函数描述具有不同相对密度晶格结构的力学性能。

近年来, 采用仿生元素进行结构设计被广泛应用。如郝美荣^[6]从菠萝纤维获得灵感, 设计了点阵圆筒结构, 并测试其平压性能; Tsang等^[7]研究了仿生管结构的吸能性; Zou等^[8]研究了管内具有多个仿生元素仿生管的仿生结构; Liu等^[9]设计了碳纤维增强塑料(CFRP)和Al方管, 并进行了准静态压缩试验, 研究其破坏过程、耐撞性能及相应的能量吸收机制; Tao等^[10]进行了准静态压缩方形分层蜂窝(SHHs)和常规方形蜂窝(RSH)结构的平面准静态压缩试验, 探讨子结构数目对变形模式、力学性能和能量吸收的影响; 魏灿刚^[11]对仿竹结构薄壁管进行了耐撞性设计和能量吸收研究。

本研究将通过仿竹元素与拓扑结构相结合的方法改进BCC结构, 数值模拟其轴向准静态压缩过程, 研究仿竹结构与原始BCC结构的吸能性和比吸能, 以及分析仿生结构在准静态压缩过程中的变形模式。

* 收稿日期: 2020-06-28; 修回日期: 2020-07-22

基金项目: 山西省高等学校科技创新项目(2019L0624)

作者简介: 吴伟(1995—), 男, 硕士研究生, 主要从事金属材料的力学行为研究。

E-mail: 2451422393@qq.com

通信作者: 常超(1986—), 男, 博士研究生, 副教授, 主要从事金属材料的力学行为研究。

E-mail: cc@tyust.edu.cn

1 仿生结构的设计方法

如图 1(a) 所示, 宏观下毛竹具有中空结构, 其竹壁由维管束和竹体组织构成, 维管束从外侧向内侧逐渐增多, 竹体组织密度逐渐降低。由图 1(b) 的组织细观结构可见, 其内部包裹的维管束对结构起到缓冲和提高韧性的作用, 主要表现在: (1) 组织变形、挤压或塌陷过程中能够吸收外界能量; (2) 在横向载荷作用下, 竹体组织可以保护维管束, 防止其拉伸、弯曲和扭转。根据宏观环形截面和细观组织分布的孔隙结构特征, 设计了图 1(c) 所示的 3 种截面形貌。

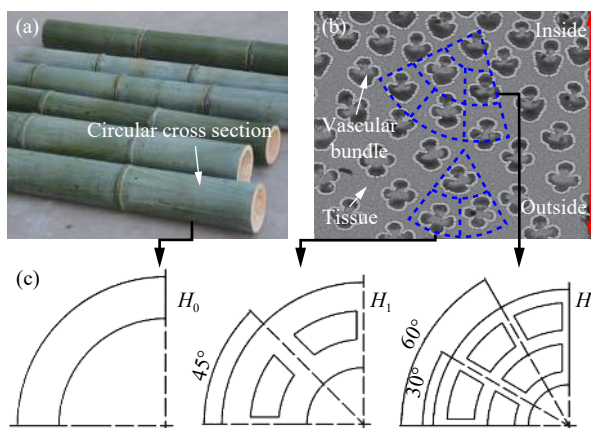


图 1 成年毛竹的宏观结构 (a) 和竹壁截面的细观结构 (b) 以及 1/4 部分的 3 种截面 (c)

Fig. 1 Macro structure of adult phyllostachys pubescens (a) and mesoscopic structure of bamboo wall section (b), three cross sections representing 1/4 part (c)

图 2(a) 为原始 BCC 实心结构。图 2(b)、图 2(c) 和图 2(d) 分别为图 1(c) 中 H_0 、 H_1 和 H_2 支杆截面对应的仿竹 BCC 结构, 为便于命名, 简称空心、I 型和 II 型结构, 具有仿竹截面的这 3 种 BCC 结构统称为仿生晶格。晶格边长为 10 mm, 截面最大直径不超过 3 mm, 如图 1(c) 所示, 厚度 $H_i (i = 1, 2, 3)$ 是 3 个独立的尺寸参数, 结构设计过程中, 始终保持晶胞内部结构厚度一致, 并由单胞以 $2 \times 2 \times 2$ 方正形式堆叠而成, 结构的相对密度为

$$\bar{\rho} = V^*/V \quad (1)$$

式中: V 为方块块体体积, V^* 为单胞体积。原始 BCC 晶胞单胞体积为

$$V^* = \pi l d^2 / 4 \quad (2)$$

式中: l 为支柱长度, d 为 BCC 晶胞支柱截面直径。BCC 单胞的支柱长度

$$l = \sqrt{3}a^2 / 2 \quad (3)$$

式中: a 为晶格边长。

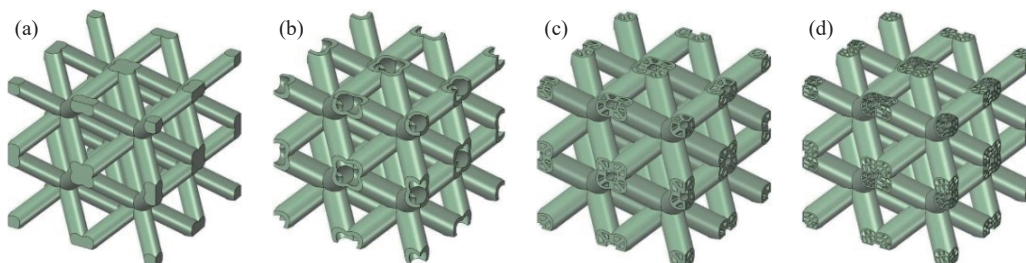


图 2 晶格结构示意图: (a) 原始 BCC 晶格结构, (b) 空心结构, (c) I 型结构, (d) II 型结构

Fig. 2 Schematic of the lattice structure: (a) original BCC structure, (b) hollow structure, (c) type I structure, (d) type II structure

对原始 BCC 结构、仿竹空心结构、仿竹 I 型结构和仿竹 II 型结构分别设定 13%、15%、19% 和 22% 4 种相对密度, 仿生晶格结构单个晶胞体积

$$V_i^* = l S_i \quad (4)$$

式中: S_i 为接触净面积; $i=1, 2, 3$ 。使用 ANSYS-spaceclaim(SCDM)建模软件计算结构的接触净面积 S_i , 误差在 0.1% 以内, 详细描述晶格结构的物理特性参数, 见表 1。

表 1 晶格结构的物理参数

Table 1 Physical parameters of the lattice structure

Lattice structure	Relative density/%	Diameter/mm	Cross-sectional area/mm ²	Thickness/mm	Minimum thickness/mm
Original structure	13	1.66			
	15	1.81			
	19	2.08			
	22	2.25			
Hollow structure	13		26.56	0.35	
	15		30.88	0.41	
	19		38.56	0.54	
	22		43.58	0.64	
Type I structure	13		24.07		0.06
	15		27.80		0.07
	19		36.64		0.10
	22		41.92		0.12
Type II structure	13		23.84		0.10
	15		28.22		0.13
	19		36.13		0.17
	22		41.41		0.20

2 建立有限元模型

2.1 准静态压缩分析

如图 3 所示, 使用 Abaqus-6.14-4 版商用软件建立有限元模型, 模拟晶格结构的准静态轴向压缩试验。晶格结构放置于移动和固定刚板之间, 移动刚板以速度 v 向固定刚板移动。固定刚板设置为完全固定, 这里 U_x 、 U_y 、 U_z 为固定刚板在 x 、 y 、 z 3 个方向的位移, n_{xy} 、 n_{yz} 、 n_{zx} 为 3 个旋转自由度, 并且刚板在运动和受力过程中保持形状和大小不变。刚板速度满足

$$v = \dot{\varepsilon} L \quad (5)$$

式中: L 为结构压缩前的初始高度, $\dot{\varepsilon}$ 为结构压缩应变率。压缩应变 e 满足

$$e = \Delta h / L \quad (6)$$

式中: Δh 为结构被压缩的距离。分别对 4 种相对密度的 4 种结构进行相同条件的压缩模拟, 最终获取轴向压缩状态下的力-位移响应结果。

晶格结构为选区激光熔化制造 (SLM) 的不锈钢 316L, 其密度为 7980 kg/m^3 , 弹性模量为 80.78 GPa ,

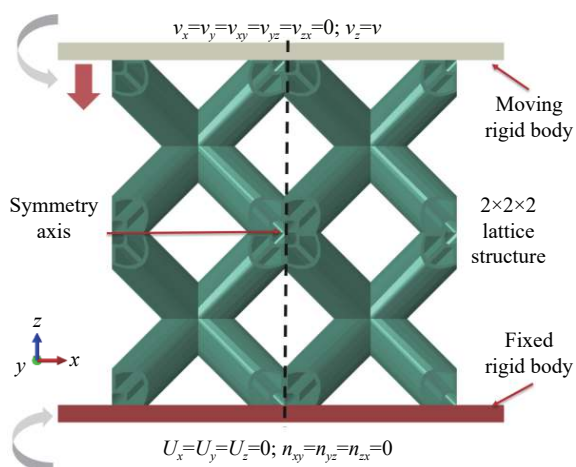


图 3 晶格结构准静态压缩有限元模型

Fig. 3 Quasi-static compression finite element model of lattice structure

屈服应力为 636.57 MPa, 泊松比为 0.3。刚体与晶格结构的接触面设置为通用接触方式, 假设接触切线方向无摩擦, 接触法线方向设置为硬接触, 由于结构压缩过程为非线性过程, 考虑结构受压时的大变形行为。

考虑到晶格结构具有对称性, 取 1/4 晶格结构, 采用六面体单元 (C3D8R 和 C3D6) 进行数值模拟, 有限元网格如图 4 所示。在两个对称面上设置对称约束, 假定材料对速率不敏感, 对仿生空心结构进行网格灵敏度分析, 将晶格结构分别划分为 0.2、0.3 和 0.4 mm 的网格单元, 如图 5 所示。数值模拟结果表明, 相对密度为 15% 的结构在模拟压缩时的力-位移响应结果一致。考虑模型的计算效率, 选取最经济的网格尺寸 0.4 mm。

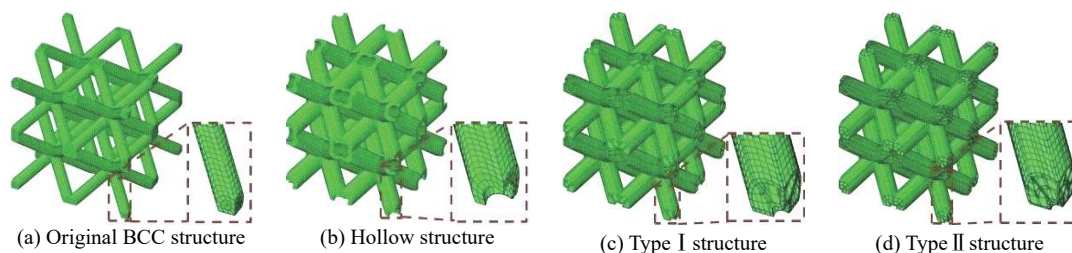


图 4 4 种结构的网格模型

Fig. 4 Grid models of four structures

2.2 模拟结果有效性验证

为了验证仿生结构准静态压缩数值模拟结果的有效性和正确性, 以 BCC 和面心立方 (Face center cube, FCC) 为基础晶胞, 如图 6(a) 所示, 叠加设计了 BF 叠加晶胞结构, 使用 SLM 制造了两种支杆直径 ($d = 0.8$ mm 和 $d = 1.0$ mm) 的叠加结构, 在常温下, 使用万能材料试验机对两种尺寸的试样进行准静态压缩实验, 同时对整个压缩过程进行数值模拟。如图 6(b) 所示, 准静态压缩实验获得的力-位移曲线与数值模拟结果高度一致, 验证了本研究有限元模型的可靠性。

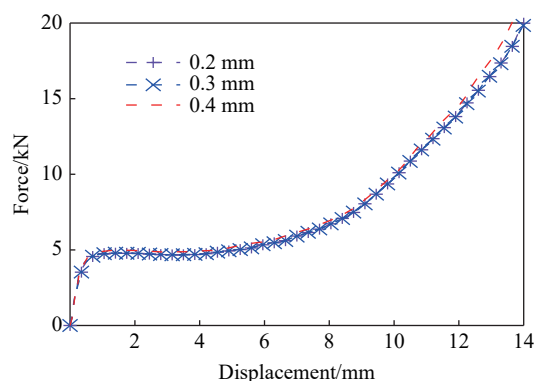
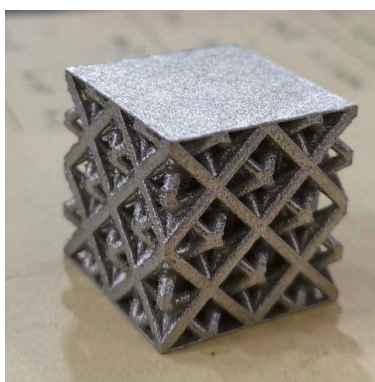
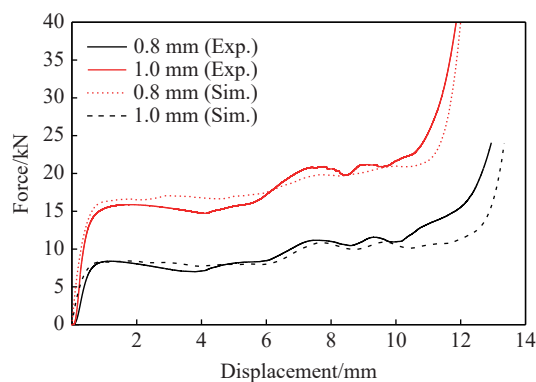


图 5 网格尺寸敏感性分析

Fig. 5 Sensitivity analysis of grid size



(a) BF superimposed structure made by SLM



(b) Comparison of quasi-static compression test and numerical simulation results

图 6 验证试样及其实验和数值模拟对比

Fig. 6 Validated samples and comparison of the experiments and numerical simulations

3 结果和讨论

3.1 能量吸收评估

以恒定速度加载得到反作用力和压缩位移的响应结果, 根据式(6)和式(7)将实验获得的力-位移曲线转换为应力-应变曲线

$$\sigma = F/A_i \quad (7)$$

式中: σ 为应力, A_i 为晶格结构与移动刚体初始接触面积, F 为结构被压缩过程中的反作用力。结构吸收能量 E_A 为压缩过程中结构在应力-应变曲线下的积分^[12]

$$E_A = \int_0^{e_0} \sigma de \quad (8)$$

式中: e_0 为能量吸收截止应变 0.4。单位质量结构吸收能量 E_{SA} 表示能量的吸收效率^[13]

$$E_{SA} = E_A/m \quad (9)$$

式中: m 为结构的总质量。

晶格结构的变形曲线可以划分为 3 个阶段: 小应变范围的弹性变形阶段、塑性屈服平台阶段和压缩致密阶段。如图 7(a) 所示, 原始 BCC 结构在塑性屈服平台阶段出现了 4 段压缩不稳定波动, M_1 、 M_2 、 M_3 和 M_4 表示在不同应变下的层压现象点, 几乎不随相对密度(ρ)增大而改变, 但处于该阶段时, 屈服应力不断增加。仿生结构在屈服阶段较为稳定, 屈服平台持续稳定在屈服应力值。空心结构中屈服应力随着相对密度增加达到最大值, 屈服区间出现了轻微波动。I 型和 II 型结构在压缩过程中均保持塑性屈服趋势, 即满足吸能稳定性要求, 随着相对密度增大, I 型结构的屈服应力略高于 II 型结构。

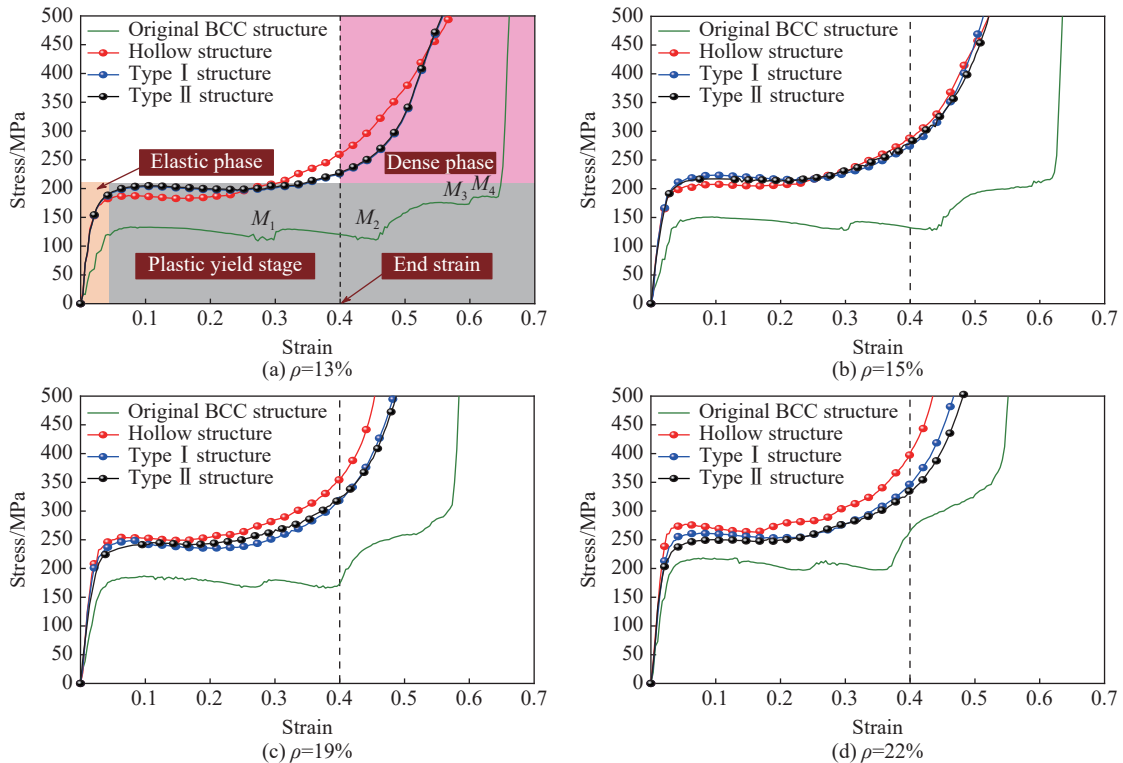


图 7 4 种相对密度下晶格结构的应力-应变曲线

Fig. 7 Stress-strain curves of lattice structure under four relative densities

如图 8 所示, 使用梯形求积公式计算晶格结构在相对密度为 22% 时应力-应变曲线累积面积, 即能量吸收。晶格结构的吸能曲线呈单调递增趋势。在吸能阶段, 空心结构的吸能效果最好, 其次为 I 型、II 型晶格结构。在致密阶段, 吸能曲线的斜率增大, 当结构不断被压缩致密时, 各层晶格逐渐压实, 此

时的结构已由基体材料决定,不再属于晶格结构的稳定吸能范围。

4 种结构的能量吸收及比吸能数据见表 2。与原始 BCC 结构相比,由于仿生晶格结构在结构刚度和屈服强度等方面得到提升,当应变 ε 在 0~0.4 范围内时,仿生晶格结构的能量吸收增加了 26.23%~62.33%;相对密度为 13% 时,仿生晶格的吸能性相差不大;相对密度增加到 22% 时,空心结构的能量吸收达到最大值 114.65 MJ。如图 9 所示,随着相对密度增大,4 种结构的能量吸收均得到提高,空心结构增幅最大,达到 36.52 MJ。如图 10 所示,在该应变范围内,仿生晶格结构的比

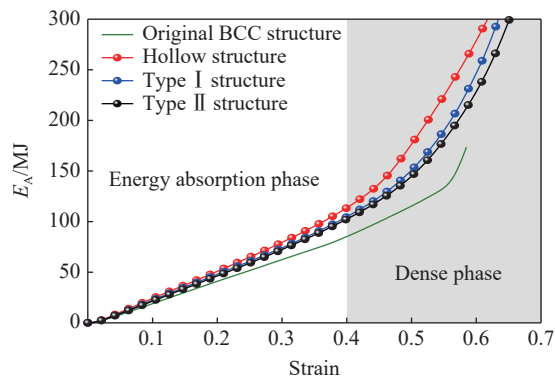


图 8 相对密度为 22% 的 4 种结构的能量吸收曲线

Fig. 8 Energy absorption curves of four structures with a relative density of 22%

表 2 晶格结构在 $0 < \varepsilon < 0.4$ 范围内的能量吸收和比吸能

Table 2 Energy absorption and specific energy absorption of lattice structure at $0 < \varepsilon < 0.4$

Lattice structure	Mass/g	E_A/MJ	$E_{SA}/(\text{MJ} \cdot \text{g}^{-1})$
Original structure	7.98	48.13	6.03
	9.53	54.39	5.71
	12.21	68.51	5.62
	13.98	81.72	5.85
Hollow structure	8.14	78.13	9.60
	9.55	86.58	9.07
	12.23	105.68	8.64
	14.04	114.65	8.17
Type I structure	8.14	78.62	9.66
	9.40	88.14	9.38
Type I structure	12.39	97.83	7.90
	14.16	105.64	7.46
Type II structure	8.04	79.21	9.85
	9.58	87.29	9.11
	12.26	99.52	8.12
	14.04	103.16	7.35

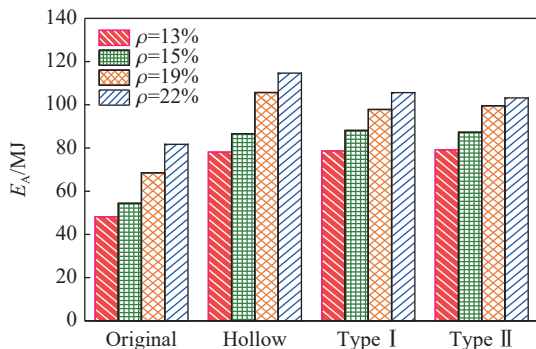


图 9 4 种晶格结构的能量吸收

Fig. 9 Energy absorption of four lattice structures

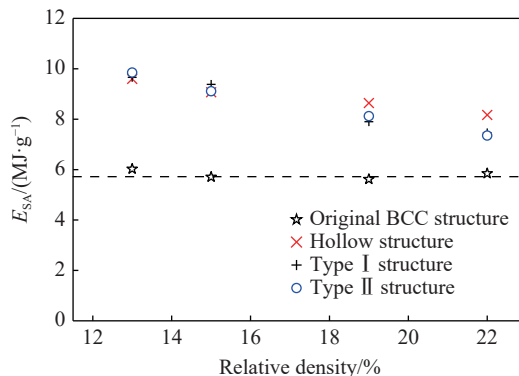


图 10 4 种晶格结构的比吸能

Fig. 10 Specific energy absorption of the four lattice structures

吸能增加了 25.64%~59.20%, 随着相对密度增大, 原始 BCC 结构的比吸能恒定在平均值 5.8, 而仿生晶格结构的比吸能呈现下降趋势, 这是由于仿生晶格结构的相对密度增加, 虽然初始屈服应力继续增长, 但是塑性屈服平台范围逐渐缩小, 并迅速向致密化过渡。

3.2 变形模式评估

图 11(a) 展示了 I 型晶格结构在俯视和正视角度下的 Mises 等效应力云图, S 为应力分量。准静态压缩下的仿生晶格结构与原始 BCC 的变形具有共同的特点, 都存在以拉伸和弯曲为主导的两种变形形式, 不同的是, 仿生晶格结构的支柱铰接处与支柱内部还发生皱折和塌陷现象。从图 11(b) 所示的等效塑性应变(PEEQ)云图中可以看到, 塑性屈服主要集中在支柱的铰接处, 压缩过程中支柱的铰接处首先发生屈服, 当压缩位移继续增大, 为 I 型晶格的变形过程提供了塌陷空间, 仿生晶格结构的韧性截面有效地保持了吸能稳定性。

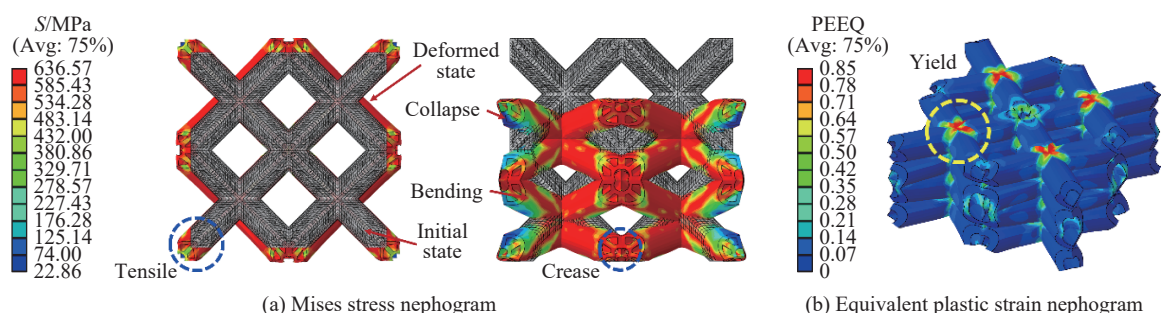


图 11 I 型晶格结构变形模式和应力云图

Fig. 11 The deformation mode and strain nephogram of the type I lattice structure

4 结 论

对仿生晶格结构的轴向准静态压缩进行了数值模拟, 给出了 4 种相对密度下结构的应力-应变曲线, 并用 E_A 和 E_{SA} 等指标对其进行评估, 与原始 BCC 结构进行对比, 得到如下结论。

(1) 与原始 BCC 结构相比, 仿竹 BCC 结构的吸能性、比吸能明显提高, 且随着相对密度的增加, 吸能性的提高值从 62.33% 下降至 26.23%, 比吸能提高值从 25.64% 升至 59.20%。

(2) 3 种仿竹 BCC 结构的吸能性、比吸能相差不大。相对密度低时 II 型结构略好, 相对密度高时空心结构略好。

(3) 原始 BCC 结构的比吸能随相对密度的变化略有波动, 而仿生晶格结构的比吸能随着相对密度的增加逐渐减少。

(4) 在准静态压缩下, 原始 BCC 结构出现了屈服波动, 而仿生晶格结构中主要是以弯曲和拉伸为主导的变形形式, 其内部有折皱和塌陷现象, 这是仿生结构吸能稳定的重要原因。

参考文献:

- [1] CAO X F, DUAN S Y, LIANG J, et al. Mechanical properties of an improved 3D-printed rhombic dodecahedron stainless steel lattice structure of variable cross section [J]. *International Journal of Mechanical Sciences*, 2018, 145: 53–63.
- [2] BAI L, YI C Y, CHEN X H, et al. Effective design of the graded strut of BCC lattice structure for improving mechanical properties [J]. *Materials*, 2019, 12: 2192.
- [3] LI P F. Simulating the dynamic deformation behaviour of selective laser melted stainless steel microlattice structures [J]. 2016.
- [4] TSOPANOS S, MINES R A W, MCKOWN S, et al. The influence of processing parameters on the mechanical properties of selectively laser melted stainless steel microlattice structures [J]. *Journal of Manufacturing Science and Engineering*, 2010,

- 132(4): 041011.
- [5] JIN N, WANG F C, WANG Y W, et al. Failure and energy absorption characteristics of four lattice structures under dynamic loading [J]. *Materials & Design*, 2019, 169: 107655.
- [6] 郝美荣. 菠萝叶纤维增强点阵圆筒结构的平压性能研究 [D]. 哈尔滨: 东北林业大学, 2017.
HAO M R. Compression performance of pineapple leaf fiber reinforced lattice cylinder [D]. Harbin: Northeast Forestry University, 2017.
- [7] TSANG H H, RAZA S. Impact energy absorption of bio-inspired tubular sections with structural hierarchy [J]. *Composite Structures*, 2018, 195: 199–210.
- [8] ZOU M, XU S C, WEI C G, et al. A bionic method for the crashworthiness design of thin-walled structures inspired by bamboo [J]. *Thin-Walled Structures*, 2016, 101: 222–230.
- [9] LIU Q, MA J B, HE Z H, et al. Energy absorption of bio-inspired multi-cell CFRP and aluminum square tubes [J]. *Composites Part B: Engineering*, 2017, 121: 134–144.
- [10] TAO Y, LI W G, WEI K, et al. Mechanical properties and energy absorption of 3D printed square hierarchical honeycombs under in-plane axial compression [J]. *Composites Part B: Engineering*, 2019, 176: 107219.
- [11] 魏灿刚. 仿竹结构薄壁管的耐撞性设计和分析 [D]. 长春: 吉林大学, 2014.
WEI C G. Crashworthiness bionic design and analysis of thin-walled tube inspired by bamboo structure [D]. Changchun: Jilin University, 2014.
- [12] HABIB F N, IOVENITTI P, MASOOD S H, et al. Fabrication of polymeric lattice structures for optimum energy absorption using Multi Jet Fusion technology [J]. *Materials & Design*, 2018, 155: 86–98.
- [13] MUELLER J, SHEA K. Stepwise graded struts for maximizing energy absorption in lattices [J]. *Extreme Mechanics Letters*, 2018, 25: 7–15.

Numerical Simulation of Quasi-Static Compression and Energy Absorption of Bionic BCC Structure

WU Wei¹, ZHANG Hui¹, CAO Meiwen², ZHANG Xia², CHEN Fei², LIANG Qingxiang¹, CHANG Chao¹

(1. Department of Mechanics, College of Applied Science, Taiyuan University of Science and Technology,
Taiyuan 030008, Shanxi, China;

2. Shanxi Diesel Engine Industry Co., Ltd., Datong 037036, Shanxi, China)

Abstract: The lattice structure is widely used in aerospace, military, and other fields due to its lightweight and excellent energy absorption. This article mainly studies the energy absorption of the bionic BCC (body-centered cubic) structure and discusses its influence by the cross-sectional morphology. In this paper, three different BCC bionic bamboo lattice structures are designed based on the macro-structure and meso-structure of *Phyllostachys pubescens*. Additionally, the axial compression numerical simulation is carried out on the bionic bamboo lattice structures and original BCC lattice structure, respectively. The results show that both the energy absorption and specific energy absorption of the bionic bamboo lattice structures under quasi-static load are improved by more than 25% compared with the original BCC structure. However, the energy absorption and specific energy absorption of the three bionic bamboo lattice structures are similar. It is also indicated that the relative density of the structure has great influence on its energy absorption and specific energy absorption. During the compression process of the bionic BCC structure, there are wrinkles and collapses inside, which might be an important reason for the stable energy absorption of the bionic structure.

Keywords: bionic bamboo structure; body centered cubic lattice structure; energy absorption; numerical simulation

多晶体压剪试样静态加载有限元计算

赵伟业^{1,2,3}, 赵 聃^{1,2,3}, 吕 品^{1,2,3}, 金 涛^{1,2,3}, 马胜国^{1,2,3}

(1. 太原理工大学机械与运载工程学院应用力学研究所, 山西 太原 030024;

2. 材料强度与结构冲击山西省重点实验室, 山西 太原 030024;

3. 太原理工大学力学国家级实验教学示范中心, 山西 太原 030024)

摘要: 基于晶体塑性理论研究了晶体织构对数值计算结果的影响, 建立了带有织构的多晶体压剪试样 (SCS) 模型。从材料和试样结构两方面研究了静态加载条件下微观晶粒在有限变形过程中对试样宏观力学性能的影响。由于模型几何结构的特殊性, 重点对模型斜槽部分的应力、应变及变形特点进行了分析。考虑到试样在压缩过程中受摩擦的影响, 数值分析了不同摩擦系数对变形过程的影响, 在此基础上计算了相同摩擦系数下不同晶粒数目、不同单元数目以及单元类型对多晶体压剪模型力学性能的影响, 并对试件关键部位不同取向晶粒的应力状态进行了分析。

关键词: 多晶体; 晶体织构; 晶体塑性; 压剪; 摩擦系数

中图分类号: O344.1

文献标识码: A

多晶体是由许多不同取向的单晶体构成, 晶粒的取向对金属材料的塑性变形特征以及损伤、断裂等都有很大影响^[1]。从微观机制上看, 晶体塑性变形方式有位错滑移、孪生、相变等多种方式, 晶体塑性理论主要分析上述机制影响下材料的变形规律^[2]。由于各晶粒的取向不同, 塑性变形首先发生在位错滑移容易开动的晶粒上, 且晶粒间的相互作用协调各自的变形, 导致多晶体内部的应变场和应力场具有强烈的不均匀性。晶体塑性有限元法是一种重要的分析晶粒间相互作用的方法^[3]。国内一些学者基于多晶体材料的特点建立了 Voronoi 有限元模型, 针对不同工况并结合材料自身性质, 对多晶体模型进行了数值分析^[4-6]。

在材料成型过程中, 经常出现复杂的受力状态, 须明晰复杂应力状态下材料的强度和变形特性, 其中压剪复合加载导致的复合应力状态是国内外学者的关注点。郑文等^[7]通过添加具有不同角度倾斜端面的垫块, 研究了静态和动态压剪复合加载下材料的力学响应, 给出了相应的数据处理方法, 并利用有限元模拟验证了实验的可行性。章超等^[8]基于郑文的实验设计方法, 利用材料试验系统 (MTS) 静态实验装置和分离式霍普金森压杆 (SHPB) 动态实验装置, 分别进行了不同角度斜端面垫块下花岗岩的准静态与动态加载试验, 分析了不同加载路径下岩石的力学性能以及破坏情况。李雪艳等^[9]通过添加单斜端面垫块和长方体套筒, 利用材料试验机对闭孔泡沫铝进行准静态条件下的压剪复合加载实验, 并通过改变垫块的角度得到泡沫铝在不同加载路径下的力学性能。国外 Rittel 等^[10-11]提出带有两个与竖直方向呈 45° 的对称矩形斜槽的圆柱体压剪试样, 用于研究较宽应变率及应变范围内试样的力学响

* 收稿日期: 2019-09-19; 修回日期: 2019-10-25

基金项目: 国家自然科学基金 (11602158, 11802199, 11572214); 山西省自然科学基金 (201601D021026); 山西省“1331 工程”重点创新团队

作者简介: 赵伟业 (1992—), 男, 硕士研究生, 主要从事多晶体有限变形数值计算研究。

E-mail: 939029385@qq.com

通信作者: 赵 聃 (1985—), 男, 博士, 讲师, 主要从事多晶体有限变形算法及多尺度本构理论研究。

E-mail: zhaodan@tyut.edu.cn

应。Dorogoy 等^[12-15]利用准静态和动态两种加载方式,结合有限元模拟探究了压剪试样在较宽应变率范围内发生塑性应变时的力学性能,测试了不同应变率下材料的剪切力学响应,并将压剪试样的矩形斜槽变为半圆形斜槽,改善了压剪试样矩形斜槽边角的应力集中现象。Vural 等^[16]对压剪试样进行了数值分析和实验测试,建立了外部施加载荷、位移与斜截面内的等效应力、等效塑性应变等之间的关系式,在此基础上,为了增强斜截面应力场的均匀性,改变斜槽的角度并进行分析。Zhao 等^[17]将金属压剪试样改变为斜槽部分由聚合物代替的全新压剪试样,通过动态及准静态实验结合数值模拟,进行应力、应变分析,并将这种新试样与原来的全金属压剪试样进行全面对比。

上述研究大都假设材料为各向同性,未能体现出微观晶粒对宏观各向异性行为的影响。本研究引入晶体塑性理论,试图揭示多晶体材料的微观变形机理,以期提高材料加工成型产品的质量。将多晶体材料属性赋予压剪试样,结合材料的宏、微观特性进行有限元分析,并对压剪复合应力状态下微观晶粒的变形演化进行分析。

1 晶体塑性理论

1.1 运动学

晶体塑性理论的基本框架基于 Perice、Asaro 和 Needleman^[18-19]的研究工作。材料有限变形过程中,总体变形梯度 \mathbf{F} 可分解为

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^* \mathbf{F}^p \quad (1)$$

式中: \mathbf{F}^* 为弹性变形梯度,包含弹性变形和刚性转动; \mathbf{F}^p 是体现晶体滑移的塑性变形梯度。速度梯度的表达式为

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} = \mathbf{L}^* + \mathbf{L}^p = \dot{\mathbf{F}}^* \cdot \mathbf{F}^{*-1} + \mathbf{F}^* \cdot \dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1} \cdot \mathbf{F}^{*-1} \quad (2)$$

式中: \mathbf{L}^* 为速度梯度的弹性部分, \mathbf{L}^p 为速度梯度的塑性部分。

$$\dot{\mathbf{F}}^p \cdot \mathbf{F}^{p-1} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(\alpha)} \quad (3)$$

式中: $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 为第 α 个滑移系上的剪切应变率, $\mathbf{s}_{(\alpha)}$ 为初始构型下第 α 个滑移系滑移方向上的单位向量, $\mathbf{m}_{(\alpha)}$ 为初始构型下第 α 个滑移系滑移面法线方向的单位向量。晶格畸变后,滑移面的法向量与滑移方向上的向量可以表示为

$$\mathbf{s}_{(\alpha)}^* = \mathbf{F}^* \cdot \mathbf{s}_{(\alpha)}, \quad \mathbf{m}_{(\alpha)}^* = \mathbf{m}_{(\alpha)} \cdot \mathbf{F}^{*-1} \quad (4)$$

式中: $\mathbf{s}_{(\alpha)}^*$ 和 $\mathbf{m}_{(\alpha)}^*$ 为相互正交的非单位向量。在当前构型下,速度梯度可表达成其对称部分 \mathbf{D} (变形率张量) 和反对称部分 $\mathbf{\Omega}$ (旋率张量) 之和的形式

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}} \cdot \mathbf{F}^{-1} = \mathbf{D} + \mathbf{\Omega} \quad (5)$$

其中张量 \mathbf{D} 和 $\mathbf{\Omega}$ 也可以分解为弹性变形部分和塑性变形部分 (上标 * 和 p 分别表示弹性和塑性), 即

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T) = \mathbf{D}^* + \mathbf{D}^p, \quad \mathbf{\Omega} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T) = \mathbf{\Omega}^* + \mathbf{\Omega}^p \quad (6)$$

并且满足

$$\mathbf{D}^* + \mathbf{\Omega}^* = \dot{\mathbf{F}}^* \cdot \mathbf{F}^{*-1}, \quad \mathbf{D}^p + \mathbf{\Omega}^p = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(\alpha)}^* \otimes \mathbf{m}_{(\alpha)}^* \quad (7)$$

1.2 本构模型

在晶体变形过程中,弹性变形率 \mathbf{D}^* 和 Cauchy 应力张量的 Jaumann 率 $\overset{\nabla}{\sigma}^*$ ^[20] 表示为

$$\overset{\nabla}{\sigma}^* + \sigma(\mathbf{I} : \mathbf{D}^*) = \mathbf{C} : \mathbf{D}^* \quad (8)$$

式中: σ 为 Cauchy 应力, \mathbf{I} 为二阶单位张量, \mathbf{C} 为四阶对称弹性模量张量。

根据 Cauchy 应力的本构方程, $\dot{\sigma}^*$ 可以表示为

$$\dot{\sigma}^* = \dot{\sigma} + (\mathbf{\Omega} - \mathbf{\Omega}^*) \cdot \sigma - \sigma \cdot (\mathbf{\Omega} - \mathbf{\Omega}^*) \quad (9)$$

式中: $\dot{\sigma}$ 为共旋应力率, $\mathbf{\Omega}^*$ 对应于旋率张量的弹性部分, 其中

$$\dot{\sigma} = \dot{\sigma} - \mathbf{\Omega} \cdot \sigma + \sigma \cdot \mathbf{\Omega} \quad (10)$$

分切应力 $\tau^{(\alpha)}$ 与 Cauchy 应力之间有如下关系

$$\tau^{(\alpha)} = \sigma : (s_{(\alpha)}^* \otimes m_{(\alpha)}^*) \quad (11)$$

本研究以面心立方(FCC)晶体为研究对象。面心立方晶体包含 4 个滑移面, 每个滑移面包含 3 个滑移方向, 因此 FCC 晶体共有 $\{111\} \langle 110 \rangle$ 12 个滑移系。

1.3 率相关硬化模型

由 Pierce 等^[18]提出的以 Schmid 准则为基础的率相关剪切应变率模型为

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0 \operatorname{sgn} \tau^{(\alpha)} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{1/m} \quad (12)$$

式中: $\dot{\gamma}_0$ 为参考切应变率, $\tau^{(\alpha)}$ 为第 α 滑移系上的分解切应力, m 为率敏感系数, $g^{(\alpha)}$ 为临界分切应力。当 $m=0$ 时, 式(12)对应于黏弹性材料; 当 $m \rightarrow \infty$ 时, 式(12)对应于率无关材料。

应变硬化通过临界分切应力的增量关系演化表示为

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \quad (13)$$

式中: $h_{\alpha\beta}$ 为硬化矩阵。 $h_{\alpha\alpha}$ ($\alpha = \beta$) 表示自硬化模量, $h_{\alpha\beta}$ ($\alpha \neq \beta$) 表示潜硬化模量。

晶体变形时, 不同硬化阶段的硬化矩阵不同, 准确表达的难度很大, 所以通常需要对硬化矩阵进行简化。对自硬化模量可做简单假设^[20]

$$h_{\alpha\alpha} = h(\gamma) = h_0 \sec h^2 \left| \frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right| \quad (14)$$

式中: h_0 为初始硬化模量; τ_0 为临界切应力; τ_s 为饱和切应力; γ 为所有滑移系上切应变的 Taylor 累积积分, 即总切应变, 表示为

$$\gamma = \sum_{\alpha} \int_0^t |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| dt \quad (15)$$

潜硬化模量表示为

$$h_{\alpha\beta} = qh(\gamma) \quad (\alpha \neq \beta) \quad (16)$$

式中: q 为硬化矩阵系数。

2 有限元数值模拟

2.1 材料初始织构对数值计算的影响

以 6061 铝合金棒材为研究对象进行数值计算。考虑到棒材轴向拉拔后会带有丝织构^[21], 将对数值结果产生影响, 为此使用 Abaqus 有限元软件和 Python 语言建立了包含 54 个晶粒的 Voronoi 代表性体积单元 (Representative volume element, RVE) 模型进行压缩计算, 模型分别包含了初始随机织构和初始丝织构, 其他条件完全相同。

图 1 给出了多晶体的两种初始取向, 即随机织构和丝织构在 (111) 面上的极图^[22], 利用表 1 所示的 6061 铝合金的材料参数^[23]进行数值计算, 单向压缩时的应力-应变 (σ_{33} - ε_{33}) 曲线计算结果如图 2 所示。表 1 中, C_{11} 、 C_{12} 、 C_{44} 为弹性模量分量, m 为率敏感指数, q 为硬化矩阵系数。

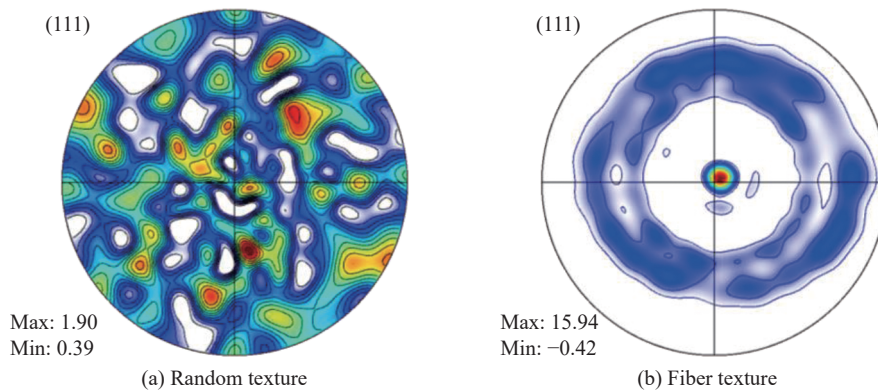


图 1 多晶体随机组织和丝织构的极图

Fig. 1 Polar graphs of polycrystalline with random texture and fiber texture

表 1 6061 铝合金材料参数^[23]Table 1 Material parameters of 6061 aluminum alloy^[23]

C_{11}/GPa	C_{12}/GPa	C_{44}/GPa	m	q	$\dot{\gamma}_0/\text{s}^{-1}$	h_0/MPa	τ_0/MPa	τ_s/MPa
108.200	61.300	28.500	20	1.1	1	96	23.5	54

由图 2 可知:当塑性变形较小时,初始织构为丝织构的模型在压缩方向上的应力绝对值高于随机取向对应模型,最大相对偏差约为 7%;当塑性变形增加到一定程度时,两种模型对应的曲线基本重合。这表明当塑性变形较小时,初始织构为丝织构的模型受影响较为明显;随着塑性变形的增大,多晶体的晶体取向发生了一定程度的旋转,使得塑性变形较大时两种模型的应力比较接近。在后续的有限元计算中,均以具有初始丝织构的材料为研究对象。

2.2 创建多晶体压剪模型

使用 Abaqus 有限元软件和 Python 语言建立多晶体模型,其中 1 个单元代表 1 个晶粒,创建两个平板刚体模型,平板刚体与多晶体模型上下底面进行接触设置,多晶体压剪试样几何尺寸及模型如图 3 和图 4 所示。接触属性为面面硬接触,并且设置相应的摩擦系数。给予下板参考点全约束边界条件;上板参考点处设置一个 2.5 mm 的压缩位移载荷,其他边界条件全约束。

2.3 摩擦力对数值模拟结果的影响

考虑到压剪模型与刚体接触板之间摩擦的影响,首先对摩擦系数 μ 进行分析。根据齐康等^[24]的总结,铝合金在良好润滑情况下摩擦系数可达到 0.02 左右。于是设置 3 组摩擦系数进行数值模拟,分别为 0.025、0.050、0.100。每组摩擦系数对应的 Mises 应力分布如图 5 所示,可以看到试件内

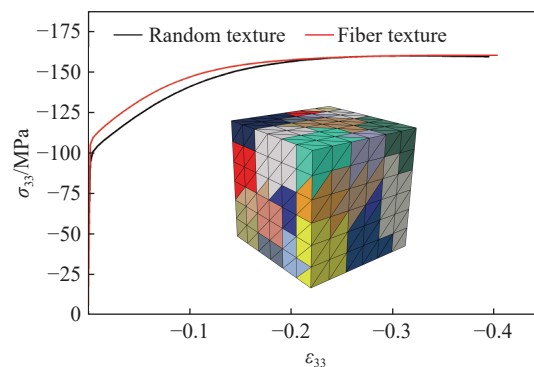


图 2 具有不同初始织构的单向压缩应力-应变曲线

Fig. 2 Unidirectional compression stress-strain curves with different initial textures

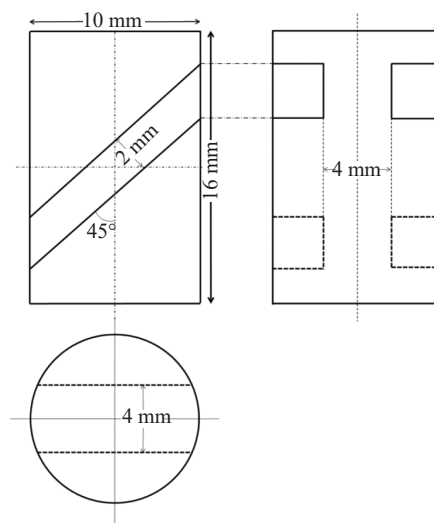


图 3 多晶体压剪试样几何尺寸

Fig. 3 Geometrical dimension of polycrystal shear-compression specimen

应力分布不均匀,随着摩擦系数的增加,斜槽以外部分的应力明显增加,且整个模型中间向外膨胀的变形更明显。每组模型变形后上板都会与压剪模型发生相对滑动,如黑色箭头所示。相对滑动距离分别为 1.282、0.688、0.214 mm,其中摩擦系数最小组的相对滑动距离几乎是摩擦系数最大组的 6 倍,对斜槽及斜槽以外部分的交界面的变形产生了明显影响。

图 6 和图 7 分别为模型斜槽部分单元的平均切应力-平均切应变曲线和平均正应力-平均正应变曲线。由两图可知,摩擦系数对切应变和正应变有明显影响,且最大切应变(见图 6 插图)和最大正应变(见图 7 插图)都与摩擦系数呈负相关。切应变的最大相对偏差为 13.7%,正应变的最大相对偏差为 56.1%。图 8 为模型斜槽部分对应单元的平均 Mises 应力-平均等效应变曲线,其最大等效应变随摩擦系数的变化规律与图 6、图 7 相似,由插图知不同摩擦系数下等效应变的最大相对偏差为 34.5%。图 9 为模型顶面的位移-载荷曲线,当模型压缩 2.5 mm 时,不同摩擦系数下所需载荷的最大相对偏差为 12.4%,即摩擦系数越大,压缩模型时需要的载荷越大。对不同摩擦系数情况下开槽部位的最大剪切应变、最大正应变以及等效应变进行总结。结果列于表 2。

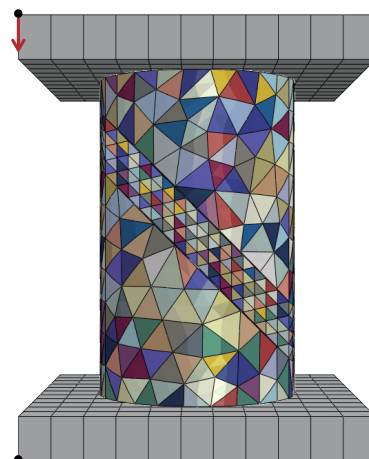


图 4 多晶体压剪模型

Fig. 4 Polycrystal shear-compression model

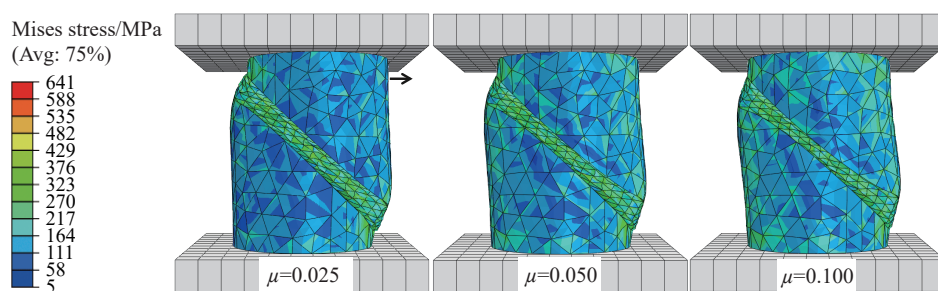


图 5 不同摩擦系数情况下的应力云图

Fig. 5 Stress nephogram with different friction coefficients

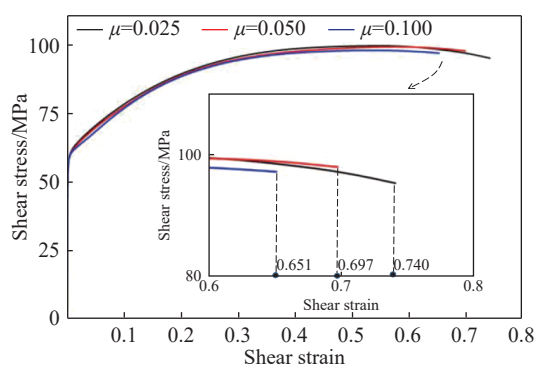


图 6 不同摩擦系数情况下模型斜槽单元的平均切应力-平均切应变曲线

Fig. 6 Average shear stress-average shear strain curve of the model's chute element corresponding to different friction coefficients

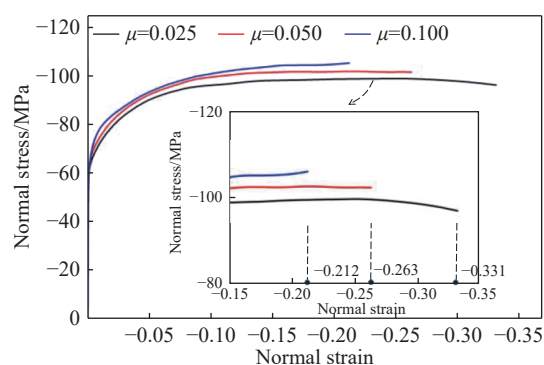


图 7 不同摩擦系数情况下模型斜槽单元的平均正应力-平均正应变曲线

Fig. 7 Average normal stress-average normal strain curve of the model's chute element corresponding to different friction coefficients

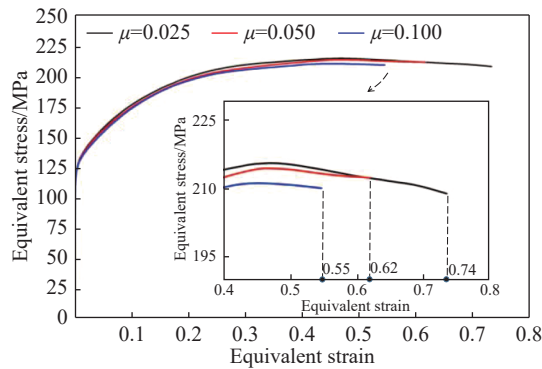


图 8 摩擦系数不同时模型斜槽单元的平均 Mises 应力-平均等效应变曲线

Fig. 8 Average Mises stress-average equivalent strain curve of the model's chute element corresponding to different friction coefficients

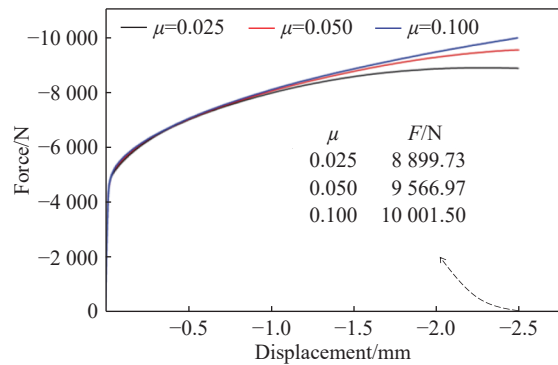


图 9 摩擦系数不同时模型顶面的力-位移曲线

Fig. 9 Force-displacement curve of the top surface of the model corresponding to different friction coefficients

表 2 不同摩擦系数对应模型的数值结果比较

Table 2 Numerical results of models corresponding to different friction coefficients

Friction coefficient	Maximum shear strain	Maximum normal strain	Maximum equivalent strain	Maximum force/N
0.025	0.740	-0.331	0.741	8 899.73
0.050	0.697	-0.263	0.625	9 566.97
0.100	0.651	-0.212	0.553	10 001.50
Relative maximum difference	13.7%	56.1%	34.0%	12.4%

以上结果表明:随着摩擦系数的增加,模型与刚体接触板之间的滑动阻力增大;当 3 组模型都压缩 2.5 mm 时,摩擦系数的增加使模型与刚体接触板的相对滑动减小,斜槽部分沿切向和正向的变形都减小。因此,斜槽部分沿切向和正向的变形在竖直方向的分量之和减小,而斜槽以外部分在竖直方向上的压缩量增加。此分析结果与 Dorogoy 等^[13]关于摩擦力的分析相吻合。因此,在模型压缩 2.5 mm 时,为了减少所需压力,增加斜槽的压剪变形程度,应当尽可能地减小摩擦系数。

为了进一步分析压剪模型关键区域的微观变形特征,在斜槽部分按照图 10 箭头所示方向选取了 16 个单元作为特征晶粒。各晶粒的初始欧拉角(ϕ_1, ψ, ϕ_2)如表 3 所示。

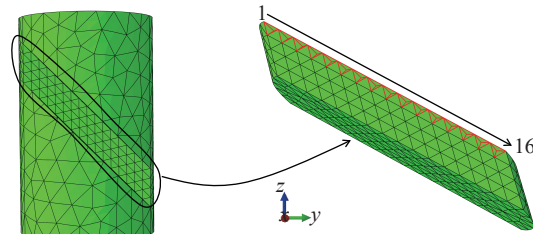


图 10 模型斜槽部分一条棱上所选取的 16 个单元

Fig. 10 16 selected elements on an edge of the chute part of the model

表 3 特征晶粒欧拉角

Table 3 Euler angle of characteristic grains

Grain number	$\phi_1/(^\circ)$	$\psi/(^\circ)$	$\phi_2/(^\circ)$	Grain number	$\phi_1/(^\circ)$	$\psi/(^\circ)$	$\phi_2/(^\circ)$
1	69.24	167.34	8.61	9	334.93	38.19	29.33
2	44.05	92.39	45.56	10	30.45	127.11	356.19
3	356.63	154.92	76.61	11	59.93	105.73	313.11
4	305.74	23.07	333.37	12	88.45	166.05	33.32
5	45.14	101.42	64.90	13	74.86	154.71	302.25
6	282.88	86.40	282.11	14	76.35	51.48	307.37
7	350.37	146.78	286.51	15	79.65	77.10	351.57
8	49.77	3.76	329.80	16	357.28	56.00	72.22

图 11 显示了不同摩擦系数下 16 个晶粒在 z 方向上的应变变化。可以看出, 大多数晶粒即使位置接近, 但其应变值差异也较为明显, 这是因为初始晶粒取向差较明显。图 11 中不同摩擦系数下晶粒 1 和晶粒 16 的应变绝对值较其他晶粒偏小, 而且随着摩擦系数的增加而减小, 原因是摩擦系数增加使模型中间部分产生更明显的胀型, 斜槽两端在 z 方向上的变形减小, 1 号和 16 号晶粒位于斜槽端部, 变形过程中会受到端末效应的影响, 影响其变形。

2.4 晶粒尺寸对数值结果的影响

多晶体有限元计算时, 为了考虑晶粒尺寸对数值结果造成的影响, 在单元数目不变的情况下建立了如图 12 所示的包含不同晶粒数目的多晶体计算模型, 通过晶粒数目的差异体现晶粒尺寸的影响, 模型上下刚体接触板与模型之间的摩擦系数设置为 0.025, 其他条件不变。

图 13 为不同晶粒数目模型的位移-载荷曲线, 同时与 1 个单元表示 1 个晶粒的模型计算结果 (Number of grains 20 000) 进行对比。由图 13 可知, 虽然晶粒数目不同, 但其体现的初始拉伸织构基本一致, 且几种模型计算的载荷结果在变化趋势上基本一致, 各曲线间相差不足 1%。

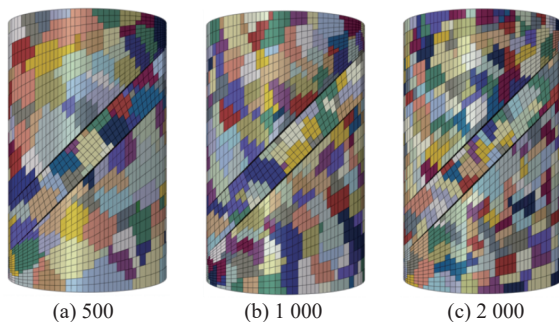


图 12 包含不同晶粒数目的压剪有限元模型

Fig. 12 Finite element models of compression shear with different grain numbers

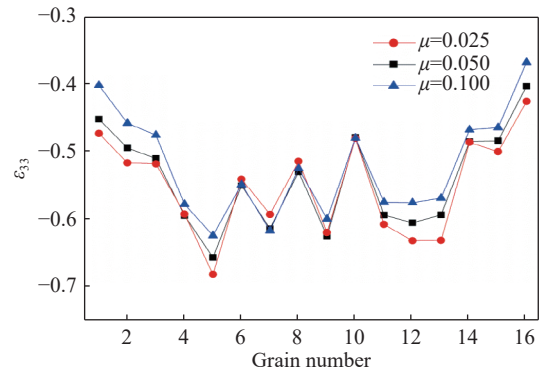


图 11 不同摩擦系数下特征晶粒在压缩方向的应变

Fig. 11 Strain of characteristic grain in compression direction under different friction coefficients

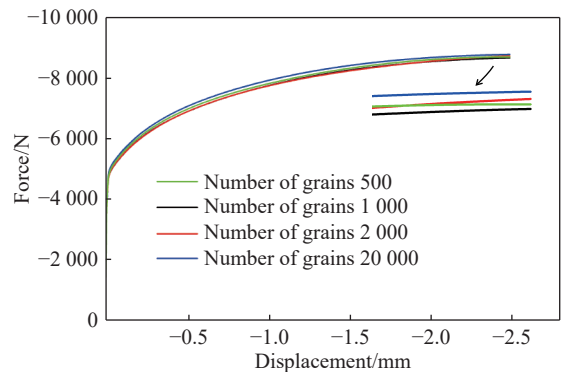


图 13 不同晶粒数目对应模型的载荷-位移曲线

Fig. 13 Force-displacement curves of models corresponding to different numbers of grains

2.5 单元数目对数值结果的影响

为了探究单元数对多晶体压剪模型斜槽区域力学性能的影响, 控制模型的晶粒数不变 (固定为 500), 建立了 3 组单元数分别为 8 026、14 604、23 835 的模型进行数值分析, 摩擦系数设置为 0.025, 单元类型为 C3D8, 其他条件不变, 见图 14。

图 15 为不同单元数目的 3 组模型的变形 Mises 应力云图, 3 组模型的变形情况基本一致。由于单元数目的变化, 单元尺寸也随之改变, 导致建模过程中, 3 组模型处于同一位置上的晶粒根据临近原则所包含的单元数目存在一定的差异,

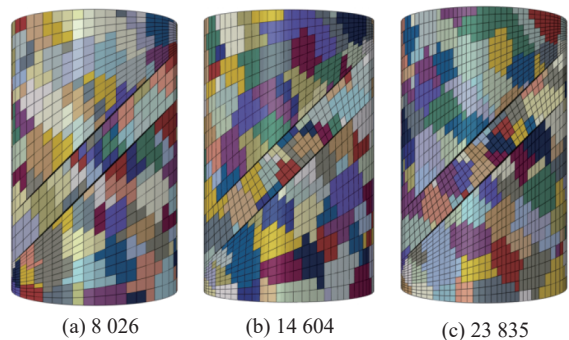


图 14 单元数目不同的模型

Fig. 14 Models with different number of elements

所以变形云图也产生了轻微的差异。

图 16 为 3 组模型同时压缩 2.5 mm 时刚体接触板上参考点的位移-载荷曲线。可见, 3 组曲线轨迹基本相似, 但是在相同位移下, 载荷大小关于单元数目没有明显的规律, 当模型压缩至 2.5 mm 时, 3 组模型载荷的最大相对偏差约 6.97%, 如表 4 所示。图 17 为 3 组模型斜槽部分相同位置处晶粒的 Mises 应力-等效应变曲线。由图 17 插图可见, 单元尺寸及数目的变化导致 3 个模型的晶粒形状有一定差异, Mises 应力云图的差异比较明显; 3 条曲线的弹性部分基本一致, 塑性部分的差异较明显。以上表明, 当单元数目或尺寸发生变化时, 3 组模型相同位置处晶粒的形状受到一定程度的影响, 原因是指定位置的晶粒与周围晶粒间的相互作用发生了改变, 周围晶粒的取向和形貌发生变化, 进而影响该位置晶粒的应力和应变。

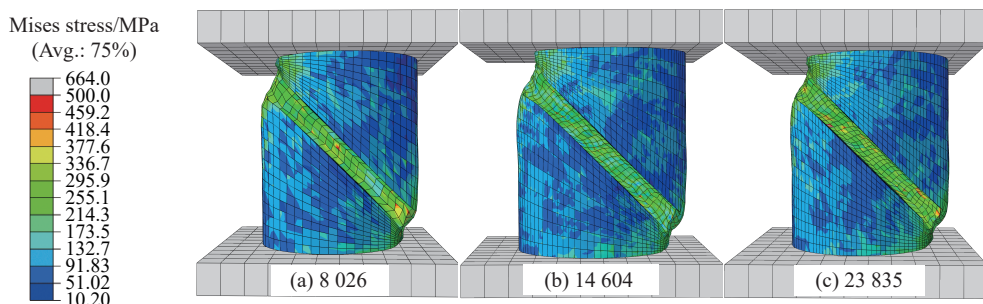


图 15 单元数目不同时模型的 Mises 变形云图

Fig. 15 Mises deformation nephograms of models with different numbers of elements

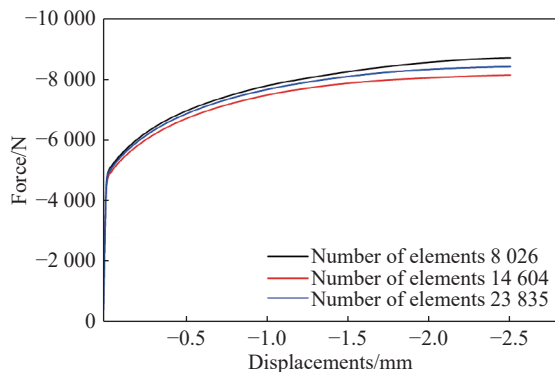


图 16 单元数目不同时模型的载荷-位移曲线

Fig. 16 Force-displacement curves of models with different numbers of elements

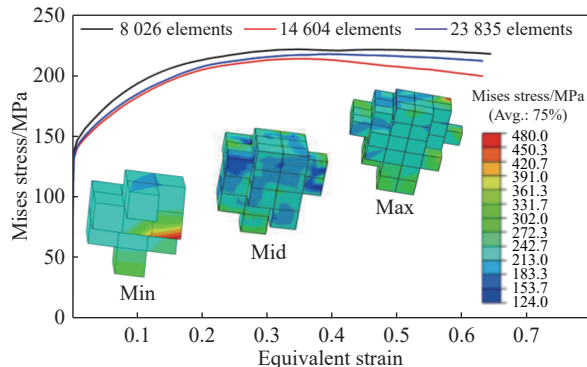


图 17 斜槽相同位置处晶粒的 Mises 应力-等效应变曲线

Fig. 17 Mises stress-equivalent strain curve of grains at the same position in the chute

表 4 单元数目不同时模型在不同压缩距离下的载荷及其最大相对偏差

Table 4 Loads of the model with different numbers of elements at different compression distance and their maximum relative differences

Number of elements	Load/N			
	1.0 mm	1.4 mm	1.8 mm	2.5 mm
8 026	-7 790.82	-8 180.42	-8 469.96	-8 726.07
14 604	-7 487.38	-7 824.37	-8 008.19	-8 157.61
23 835	-7 669.64	-8 038.55	-8 270.62	-8 436.06
Maximum relative difference	4.05%	4.55%	5.77%	6.97%

2.6 单元类型对模拟结果的影响

为了探究单元类型的影响并提高模型计算效率, 将斜槽区域单元数为 2 093 的四面体单元模型与

斜槽区域单元数为 2 040 的六面体单元模型进行对比分析, 两种模型除了单元类型外其他条件与前述相同。斜槽局部变形如图 18 所示, 两种网格模型的斜槽整体变形相似, 应力分布都不均匀, 从微观的角度看六面体单元变形程度更大, 且由云图颜色分布可知六面体单元的计算精度更高, 表明六面体单元比四面体单元的刚度更小, 更适合分析模型局部变形情况。

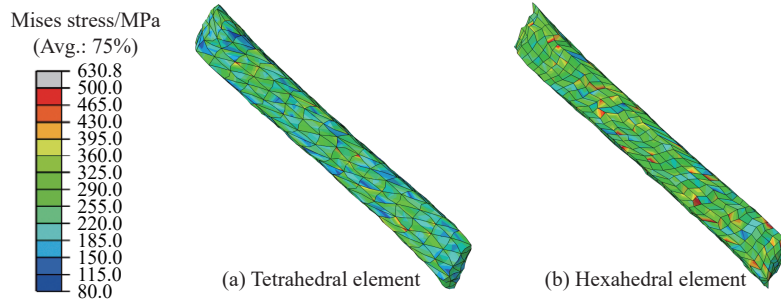


图 18 两种单元类型对应的模型斜槽部分 Mises 变形云图

Fig. 18 Mises deformation nephogram of the model with two element types

图 19、图 20 分别是两种不同类型单元的斜槽的位移-载荷曲线和 Mises 应力-平均等效应变曲线。可见, 当模型被压缩到一定程度时, 四面体单元的应力更大, 位移为 2.5 mm 时, 两条曲线的应力偏差为 3.4%。六面体单元模型的最大平均等效应变比四面体单元模型大 4.2%。这表明当整个压剪模型压缩 2.5 mm 时, 六面体单元模型在承受更小压力的同时, 模型斜槽部分单元发生了更大的变形。

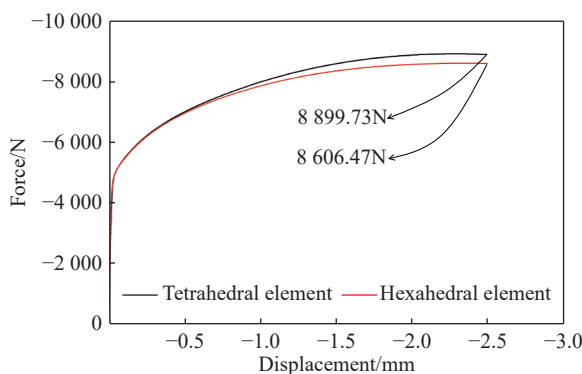


图 19 两种单元类型对应的模型顶面力-位移曲线

Fig. 19 Top surface force-displacement curve of model with two element types

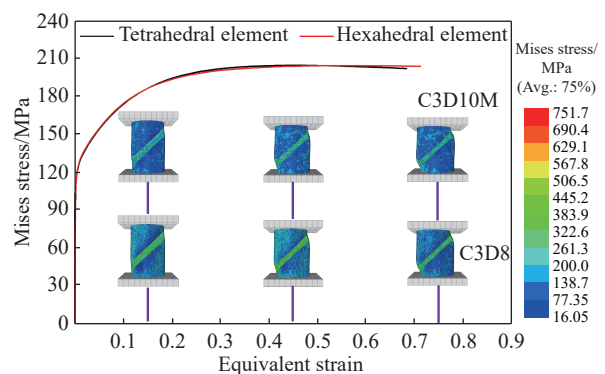


图 20 两种单元类型对应的模型斜槽部分单元的平均 Mises 应力-平均等效应变曲线

Fig. 20 Average Mises stress-strain curves of the sloped part of the model with two element types

3 结 论

(1) 塑性变形较小时, 初始织构为丝织构的 RVE 单向压缩模型相对于晶粒为随机取向的 RVE 单向压缩模型的应力值更高, 当塑性变形增加到一定程度时, 两种模型的应力值接近。这表明模型变形时晶粒取向会发生一定程度的转动, 从而对数值结果造成影响。

(2) 数值计算了 3 种不同摩擦系数对多晶压剪模型变形的影响。结果表明, 随着摩擦系数的增加, 模型与刚体接触板相对滑动减小, 模型中间部分发生明显涨型, 模型斜槽部分的压缩与剪切变形都减小, 使得在压缩相同高度时, 摩擦系数大的模型的斜槽部分沿竖直方向的压缩量减小, 而斜槽以外部分沿竖直方向的压缩量增加, 同时压缩模型所需要的力也增加。数值模拟结果显示, 选取摩擦系数为 0.025 进行计算能够得到较好的压剪应力状态。从微观角度分析, 由于晶粒初始取向不同导致 Mises 应力分布不均匀, 且对于位置接近的晶粒, 晶粒初始取向差的存在会导致其应变值差异明显。

(3) 在相同摩擦条件下, 分析固定单元数目而改变晶粒数目(尺寸)、固定晶粒数目而改变单元数目两种情况, 并讨论了单元类型对数值结果的影响。结果表明: 在单元数目确定的情况下, 晶粒数目增加

到一定程度时(1个单元代表1个晶粒),数值结果并未出现明显差异;而固定晶粒数目、改变单元数目时,由于单元尺寸的变化导致不同组模型、相同位置的晶粒形状有所差异,晶粒间的相互作用出现差异,从而对数值结果产生了一些影响。不同单元类型的计算结果表明,六面体单元的变形程度大于四面体单元,计算精度更高。在相同压缩量下六面体单元模型所需压力比四面体单元小,但计算时间较长。若考虑计算成本,可选择单元数目相对较少的四面体单元对多晶体宏观力学响应进行预估。

参考文献:

- [1] 董湘怀,仲町英治. 晶体塑性模型在板材成形计算机模拟中的应用 [J]. 中国机械工程, 1997, 8(4): 27–30, 118.
DONG X H, NAKAMACHI E. Application of crystal plastic model in computer simulation of sheet metal forming [J]. China Mechanical Engineering, 1997, 8(4): 27–30, 118.
- [2] 刘海军,方刚,曾攀. 基于晶体塑性理论的大变形数值模拟技术 [J]. 塑性工程学报, 2006, 13(2): 1–8, 28.
LIU H J, FANG G, ZENG P. Numerical simulation of large deformation based on the theory of crystal plasticity [J]. Journal of Plastic Engineering, 2006, 13(2): 1–8, 28.
- [3] 皮华春,韩静涛,薛永栋. 金属塑性成形的晶体塑性学有限元模拟研究进展 [J]. 机械工程学报, 2006, 42(3): 15–21.
PI H C, HAN J T, XUE Y D. Progress in finite element simulation of metal plasticity forming with crystal plasticity [J]. Journal of Mechanical Engineering, 2006, 42(3): 15–21.
- [4] 司良英. FCC 金属冷加工织构演变的晶体塑性有限元模拟 [D]. 沈阳: 东北大学, 2009.
SI L Y. Finite element simulation of crystal plasticity in FCC metal cold working texture evolution [D]. Shenyang: Northeastern University, 2009.
- [5] 司良英,邓关宇,吕程. 基于 Voronoi 图的晶体塑性有限元多晶几何建模 [J]. 材料与冶金学报, 2009, 8(3): 193–197, 216.
SI L Y, DENG G Y, LÜ C. Crystal plastic finite element polycrystalline geometry modeling based on Voronoi diagram [J]. Journal of Materials and Metallurgy, 2009, 8(3): 193–197, 216.
- [6] 张丰果,董湘怀. 微塑性成形模拟材料细观建模 [J]. 模具技术, 2011(3): 16–19.
ZHANG F G, DONG X H. Microplastic forming simulates material microscopic modeling [J]. Mould Technology, 2011(3): 16–19.
- [7] 郑文,徐松林,蔡超. 基于 Hopkinson 压杆的动态压剪复合加载实验研究 [J]. 力学学报, 2012, 44(1): 124–131.
ZHENG W, XU S L, CAI C. Experimental study on dynamic compression shear composite loading based on Hopkinson compression bar [J]. Journal of Mechanics, 2012, 44(1): 124–131.
- [8] 章超,徐松林,王道荣. 花岗岩动静态压剪复合加载实验研究 [J]. 固体力学学报, 2014, 35(2): 115–123.
ZHANG C, XU S L, WANG D R. Experimental study on dynamic and static compressor-shear composite loading of granite [J]. Journal of Solid Mechanics, 2014, 35(2): 115–123.
- [9] 李雪艳,李志斌,张舵. 闭孔泡沫铝准静态压剪性能研究 [J]. 高压物理学报, 2018, 32(3): 52–59.
LI X Y, LI Z B, ZHANG D. Study on quasi-static compressive shear properties of aluminum foam with closed-cell [J]. Journal of High Pressure Physics, 2018, 32(3): 52–59.
- [10] RITTEL D, LEE S, RAVICHANDRAN G. A Shear-compression specimen for large strain testing [J]. Experimental Mechanics, 2002, 42(1): 58–64.
- [11] RITTEL D, RAVICHANDRAN G, LEE S. Large strain constitutive behavior of OFHC copper over a wide range of strain rates using the shear compression specimen [J]. Mechanics of Materials, 2002, 34(10): 627–642.
- [12] DOROGOY A, RITTEL D. A numerical study of the applicability of the shear compression specimen to parabolic hardening materials [J]. Experimental Mechanics, 2006, 46(3): 355–366.
- [13] DOROGOY A, RITTEL D. Numerical validation of the shear compression specimen. Part II: dynamic large strain testing [J]. Experimental Mechanics, 2005, 45(2): 178–185.
- [14] DOROGOY A, RITTEL D. Numerical validation of the shear compression specimen. Part I: quasi-static large strain testing [J]. Experimental Mechanics, 2005, 45(2): 167–177.
- [15] DOROGOY A, RITTEL D, GODINGER A. Modification of the shear-compression specimen for large strain testing [J]. Experimental Mechanics, 2015, 55(9): 1627–1639.

- [16] VURAL M, MOLINARI A, BHATTACHARYYA N. Analysis of slot orientation in shear-compression specimen (SCS) [J]. *Experimental Mechanics*, 2010, 51(3): 263–273.
- [17] ZHAO J, KNAUSS W G, RAVICHANDRAN G. A new shear-compression-specimen for determining quasistatic and dynamic polymer properties [J]. *Experimental Mechanics*, 2008, 49(3): 427–436.
- [18] PIERCE D, ASARO R J, NEEDLEMAN A. Material rate sensitivity and localized deformation in crystalline solids [J]. *Acta Metall*, 1983, 31(12): 1951–1976.
- [19] ASARO R J, NEEDLEMAN A. Overview No. 42 texture development and strain hardening in rate dependent polycrystals [J]. *Acta Metallurgica*, 1985, 33(6): 923–953.
- [20] HUANG Y. A user-material subroutine incorporating single crystal plasticity in the ABAQUS finite element program: MECH 178 [R]. Harvard University, 1991.
- [21] 王国军, 孙强. 4032 合金热挤压棒材变形行为及变形织构 [J]. *黑龙江冶金*, 2013, 33(2): 1–5, 8.
WANG G J, SUN Q. Deformation behavior and deformation texture of hot extruded 4032 alloy bar [J]. *Heilongjiang Metallurgy*, 2013, 33(2): 1–5, 8.
- [22] HUANG S Y, ZHANG S R, LI D Y. Simulation of texture evolution during plastic deformation of FCC, BCC and HCP structured crystals with crystal plasticity based finite element method [J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2011, 21(8): 1817–1825.
- [23] 幸存, 赵聃, 闫晓鹏. 材料三维微结构表征及其晶体塑性有限元模拟 [J]. *计算力学学报*, 2018, 36(2): 233–239.
XIN C, ZHAO D, YAN X P. 3D modeling microstructure and crystal plasticity finite element simulation [J]. *Journal of Computational Mechanics*, 2018, 36(2): 233–239.
- [24] 齐康, 闫昊, 陈祥瑞. 利用 ABAQUS 模拟不同模态下的金属切削过程 [J]. *机械工程与自动化*, 2018(2): 93–94.
QI K, YAN H, CHEN X Y. Metal cutting processes in different modes are simulated by ABAQUS [J]. *Mechanical Engineering and Automation*, 2018(2): 93–94.

Finite Element Calculation of Polycrystalline Shear-Compression Specimens with Static Loading

ZHAO Weiye^{1,2,3}, ZHAO Dan^{1,2,3}, LÜ Pin^{1,2,3}, JIN Tao^{1,2,3}, MA Shengguo^{1,2,3}

(1. *Institute of Applied Mechanics, School of Mechanical and Vehicle Engineering,*

Taiyuan University of Technology, Taiyuan 030024, Shanxi, China;

2. *Shanxi Key Laboratory of Material Strength & Structural Impact, Taiyuan 030024, Shanxi, China;*

3. *Taiyuan University of Technology Mechanics National Experimental Teaching Demonstration Center,*

Taiyuan 030024, Shanxi, China)

Abstract: The effect of crystal texture on the numerical results was studied based on the theory of crystal plasticity, and the polycrystalline compression shear sample (SCS) model with texture was established. The influence of micro-grain on the macroscopic mechanical properties in the process of finite deformation under static loading condition was studied in terms of material and sample structure. Because of the particularity of model geometry, the stress, strain and deformation characteristics of skewed slot were computed. Considering the effect of friction on the specimen during compression, the influence of friction coefficients on the deformation process was analyzed numerically. The influences of grain number, element number and element type on the mechanical properties of polycrystalline compression shear model under the same friction coefficient were calculated. The stress states of grain with different orientations in key parts of the specimen were also studied.

Keywords: polycrystalline; crystal texture; crystal plasticity; shear-compression; friction coefficient