第17卷 第2期 高 压 物 理 学 报 Vol. 17, No. 2
2003年6月 CHINESE JOURNAL OF HIGH PRESSURE PHYSICS June, 2003

文章编号：1000-5773(2003)02-0111-06

冲击相边界传播过程中梯度材料的形成*

戴翔宇，唐志平

（中国科学技术大学力学和机械工程系，中科院材料力学行为和设计开放实验室，安徽合肥 230027）

摘要：采用一种基于简单混合物模型的本构，研究了不可逆相变材料中一维的冲击相边界的传播规律，发现在突加载荷并连续卸载的应力边界条件下，样品内部有梯度材料形成。分析了边界条件对材料梯度变化的影响，并且用基于特征线的数值方法计算了不同的边界条件下材料的梯度分布，从而提出利用冲击相边界的传播制备梯度材料的可能性。最后对这种方法的利弊做了探讨。

关键词：相边界；相变；梯度材料

中图分类号：O347.1 **文献标识码**：A

1 引 言

梯度材料(Functionally Graded Materials，简称FGMs)通常指通过连续(或准连续)的改变两种材料的结构、组分等因素，使其内部界面减小乃至消失，从而得到的相应于其成分与结构的变化而性能渐变的新型非均质复合材料。梯度材料现已不局限于用作热应力缓和的结构材料，而是包括电、磁、声、光、核以及生物等多种功能在内的新型功能材料[1]。然而，常用的制备方法如叠层粉末冶金、共沉降法等难以消除内部界面和控制材料的梯度[2]。

相变材料受冲击载荷时，材料内部传播的相边界区分开相变区和未相变区。材料发生相变后，实际上已变为另一种材料，所以，也可以说相边界是一种材料界面。不可逆相变材料，当受一维冲击载荷并连续卸载时，材料中传播的相边界即相变冲击波后方的应力幅值随着传播距离的增加而衰减直至相边界消失。相边界后方的材料也逐渐由纯新相过渡为新相和母相的混合相。在混合相区，新相的成分逐渐减少，而母相的成分逐渐递增，从而构成梯度材料。因此，可以设想利用这种现象制备梯度材料。

采用Tang等[3]在研究CdS冲击相变时提出的一种基于简单混合物模型的本构，并应用王文强等[4]提出的基于特征线理论的数值方法，给出了在各种边界条件下，一维的相边界传播问题的解。研究了相边界传播过程中，组分连续变化的梯度材料生成的机理、过程及控制方式。

我们也注意到，Gray[5]等在纯铁的气炮实验中，在冲击诱发$\alpha-\varepsilon$相变的回收样品中观察到了梯度效应。与本研究不同的是，$\alpha-\varepsilon$相变是可逆相变，他们在实验中观察到的梯度效应是可逆相变过程中留下的一些不可逆痕迹，如损伤、位错等，并未得到组分连续变化的梯度材料。然而，他们的实验说明了利用冲击相变制备梯度材料是有可能的。

2 模 型

一般的相变本构都需要引入动力学关系[6]，Bruno等[7]指出：若假定马氏体相变无限快，则可用应

* **收稿日期**：2002-09-17；**修回日期**：2002-11-14
基金项目：国家自然科学基金(10072058，10176029)
作者简介：戴翔宇(1978—)，男，硕士研究生.

变准则来判断相变的开始与结束，无需引入动力学关系来描述相变过程，同样可以得到与实验相吻合的结果。通常马氏体相变过程非常迅速，因此本研究所用的模型(图 1)亦采用临界应变来判断相变的开始与结束(在本文中以拉为正，故图中纵向应力和应变 σ、ε 加负号表示受压)。此模型是 Tang 等[3]在研究 CdS 的冲击相变时提出的，对混合相有较好的描述，我们假定此模型也可推广应用于一般的广义马氏体相变。图中 OB 段为纯Ⅰ相(广义奥氏体)，BE 段为混合相，EF 为纯Ⅱ相(广义马氏体)；B 点为相变起始点，E 点为相变完成点，F 点为 OB 延长线与 EF 的交点。

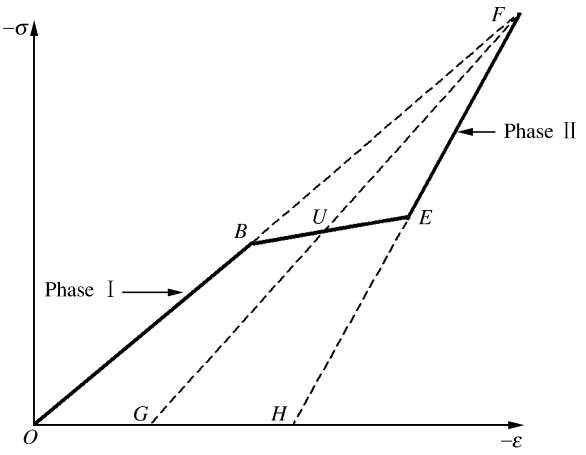


图 1 不可逆相变材料的加卸载曲线

Fig. 1 Loading and unloading curves of materials undergoing irreversible phase transition

当材料从纯Ⅰ相开始加载时，其加载曲线沿 $OBEF$。而从任一应力应变点卸载时，不发生逆相变，由简单混合物关系，其卸载路径沿该点与 F 点的连线(图 1 中 UG，EH 等)。该模型的数学表述为：

加载

$$\begin{cases}\sigma = E_1\varepsilon & (|\varepsilon| \leqslant |\varepsilon_B|)\\ \sigma = \sigma_B + E_{\mathrm{M}}(\varepsilon - \varepsilon_B) & (|\varepsilon_B| < |\varepsilon| \leqslant |\varepsilon_E|)\\ \sigma = \sigma_E + E_2(\varepsilon - \varepsilon_E) & (|\varepsilon| > |\varepsilon_E|)\end{cases} \tag{1}$$

卸载

$$\sigma = \sigma_{\max} + \frac{\sigma_F - \sigma_{\max}}{\varepsilon_F - \varepsilon_{\max}}(\varepsilon - \varepsilon_{\max}) \tag{2}$$

(1)式中：E_1、E_{M}、E_2 分别表示纯Ⅰ相、混合相和纯Ⅱ相的纵向模量；σ_B、ε_B 和 σ_E、ε_E 表示 B 点和 E 点的应力和应变。需要注意的是，(1)式表示的是从纯Ⅰ相开始加载的应力应变关系。如果是从混合相开始加载，如 G 点，则加载路径沿 $GUEF$，(1)式中 E_1 和 σ_B、ε_B 需作相应改动。(2)式中的 $\sigma_{\max}$、$\varepsilon_{\max}$ 表示该物质点加载历史上曾经达到的最大应力和应变。由于卸载时不发生逆相变，则材料中某点的物质成分由该点加载历史上所承受的最大应力 $\sigma_{\max}$ 所决定。由图 1 可知，混合相中新相(马氏体)体积分数 ξ 可由该点卸载到零后的残余应变占总的相变应变 ε_H 的比值来表述。例如 G 点处于混合相，其新相成分应为 $\varepsilon_G/\varepsilon_H$，而 ε_G 由 U 点应力所决定。由图 1 中几何关系并联立(1)、(2)式得

$$\xi = \begin{cases}100\% & (|\sigma_{\max}| \geqslant |\sigma_E|)\\ \dfrac{\sigma_{\max} - \sigma_B}{\sigma_F - \sigma_{\max}} \cdot \dfrac{E_2}{E_{\mathrm{M}}} \cdot \dfrac{E_1 - E_{\mathrm{M}}}{E_2 - E_1} \times 100\% & (|\sigma_B| < |\sigma_{\max}| \leqslant |\sigma_E|)\\ 0 & (|\sigma_{\max}| < |\sigma_B|)\end{cases} \tag{3}$$

3 梯度材料的形成

考虑具有上述本构关系的材料半无限空间(一维应变)，初始时刻是纯Ⅰ相，应力为 0，位于坐标轴上$[0,+\infty)$区间。$t=0$ 时刻，左端受突加冲击载荷。若载荷保持恒值，持续一段时间后突然卸载至零(矩形脉冲)，则该问题可由应力波理论求得解析解[4]。卸载后，材料中将留下一连串新相含量不同的宏观区域，每一区域内部组分相同，区域之间由宏观相界面(同时也是应变间断面)分割。如果是连续卸载，则不能得到解析解，出现的将是一个连续转变区。在转变区内，材料处于混合相，随着距离的增加，新相的成分连续从 100%变为 0，从而在该转变区内形成梯度材料。

图 2 给出了连续卸载条件下冲击相边界传播的示意图。图中 x 为拉格朗日坐标(下同),是各物质点在 $t=0$ 时刻所处的空间位置。当加载应力 σ^* 满足 $|\sigma_E|<|\sigma^*|<|\sigma_F|$ 时,材料中传播着一道前驱弹性波,然后是相变波(同时也是相边界)。卸载波追赶相边界,使相边界上应力 σ_b 逐渐减小,在 d_1 处 $\sigma_b(d_1)=\sigma_E$,进入混合相区;d_2 处 $\sigma_b(d_2)=\sigma_B$,相边界消失。在材料中$[0,d_1]$段,材料为纯Ⅱ相;(d_1,d_2)段为转变区,Ⅱ相成分从 1 连续地变为 0,从而形成梯度材料;在 $x>d_2$ 时,材料不发生相变,仍为纯Ⅰ相。从图 2 可看出,任一物质点所受加载历史上最大应力 σ_{max} 为相边界后方应力 σ_b。卸载区右行特征线是一族彼此平行的曲线,在$[0,d_1]$段,为纯Ⅱ相,特征线为直线;在(d_1,d_2)段,Ⅱ相成分逐渐减少而Ⅰ相成分逐渐增加,特征线变为上凹的曲线。由(2)式可得任意点 x 处右行特征线斜率,即当地拉格朗日弹性波速

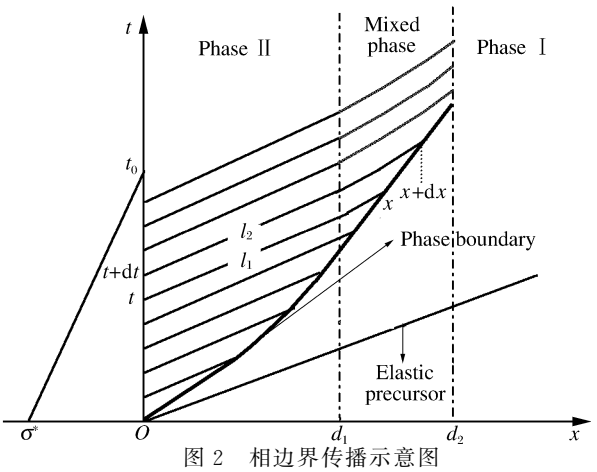


图 2　相边界传播示意图

Fig. 2　Sketch map of phase boundary propagation

$$c(x)=\begin{cases}\sqrt{E_2/\rho_0} & (0<x\leqslant d_1)\\ \sqrt{\dfrac{\sigma_F-\sigma_b(x)}{\rho_0[\varepsilon_F-\varepsilon_b(x)]}} & (d_1<x\leqslant d_2)\end{cases} \tag{4}$$

相边界上任一点与左边界上的点通过右行特征线相连接,并有相容关系

$$\sigma_b(x)=\sigma_0(t)+\int_{v_0(t)}^{v_b(x)}\rho_0 C(\varepsilon)\mathrm{d}v \tag{5}$$

(4)、(5)式中:C 表示特征线的斜率,v 表示质点速度。混合相段相边界传播速度为 $D=\sqrt{E_M/\rho_0}$,且右行特征线彼此平行,于是可得相边界上 $\mathrm{d}x$ 与左边界上 $\mathrm{d}t$ 的关系为

$$\mathrm{d}x=\mathrm{d}t/\{1/D-\sqrt{\rho_0[\varepsilon_F-\varepsilon_b(x)]/[\sigma_F-\sigma_b(x)]}\}\equiv \mathrm{d}t/f(\sigma_b) \tag{6}$$

联立(3)~(6)式,可解得混合相段内,马氏体含量的梯度为

$$\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}x}=\frac{a}{[\sigma_F-\sigma_b(x)]^2}\{f[\sigma_b(x)]\frac{\mathrm{d}\sigma_0(t)}{\mathrm{d}t}+\lim_{\mathrm{d}x\to 0}[(\int_{l_2}\rho_0 C_{l_2}(v)\mathrm{d}v-\int_{l_1}\rho_0 C_{l_1}(v)\mathrm{d}v]/\mathrm{d}x]\} \tag{7}$$

式中:a 为常数,$a\equiv E_2(\sigma_F-\sigma_B)(E_1-E_M)/[E_M(E_2-E_1)]$,而 l_1、l_2 是相隔 $\mathrm{d}t$ 的两条右行特征线。(7)式中沿特征线 l_1、l_2 的函数 $C_{l_1}(v)$ 和 $C_{l_2}(v)$ 必须通过数值方法求得,所以不能直接由此式解析得到转变区内的梯度分布函数,但此式表明,边界条件可以直接影响材料的梯度。

4　具体算例

采用文献[3]中的材料常数,$\rho_0=4830\ \mathrm{kg/m^3}$,$E_1=50.79\ \mathrm{GPa}$,$E_M=4.623\ \mathrm{GPa}$,$E_2=96.39\ \mathrm{GPa}$,$\sigma_B=-2.333\ \mathrm{GPa}$,$\varepsilon_B=-0.046$,$\sigma_E=-3.303\ \mathrm{GPa}$,$\varepsilon_E=-0.256$,$\sigma_F=-23.79\ \mathrm{GPa}$,$\varepsilon_F=-0.468$,我们用一维波传播有限差分法计算了 A、B 两类边界条件下材料中的相边界传播和马氏体体积分数分布。两类边界条件如下

$$\mathrm{A}:\begin{cases}\sigma_0(t)=\sigma^*(1-t/t_0) & (t<t_0)\\ \sigma_0(t)=0 & (t\geqslant t_0)\end{cases}\qquad \mathrm{B}:\begin{cases}\sigma_0(t)=\sigma^*(1-t/t_0)^2 & (t<t_0)\\ \sigma_0(t)=0 & (t\geqslant t_0)\end{cases} \tag{8}$$

式中:σ^* 为峰值压力,t_0 为脉冲持续时间。图 3 给出了 A 类边界条件下,取 $\sigma^*=-20\ \mathrm{GPa}$,$t_0=10\ \mu\mathrm{s}$ 时,相边界上应力随传播距离的分布。图 4 为相应的马氏体(即Ⅱ相)含量的分布。图中同时给出了采

用文献[4]中特征线插值方法(实线)和本研究有限差分法(虚线)两种方法的计算结果。

从图中可看出两种计算方法的结果吻合较好。特别有意思的是,在 $x=5.40$ cm 处,材料的梯度发生间断(图 4)。分析表明,这种间断实际上是由边界条件所引起的。由(8)式和图 2 可看出,在 $t=t_0$,即应力脉冲结束时,其 $\mathrm{d}\sigma_0/\mathrm{d}t$ 发生间断。而从该点出发的右行特征线刚好在 $x=5.40$ cm 处与相边界相交,从而由(7)式知,$\mathrm{d}\xi/\mathrm{d}x$ 也必将发生间断。于是在混合相区[5.3 cm,8.2 cm]范围内形成了以两种梯度分布的梯度材料。

由于文献[4]中数值方法基于特征线理论,具有较高的精度,我们采用这种方法计算了 A、B 两类边界条件下当 $t_0=10$ μs,σ^* 为不同值时的马氏体分布情况,结果见图 5、图 6。

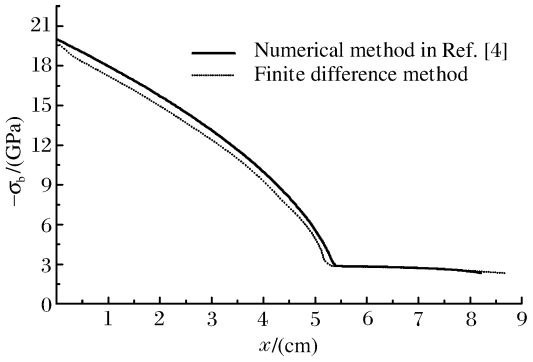


图 3 相边界上的应力分布(A 类边界)

Fig. 3 Stress along phase boundary

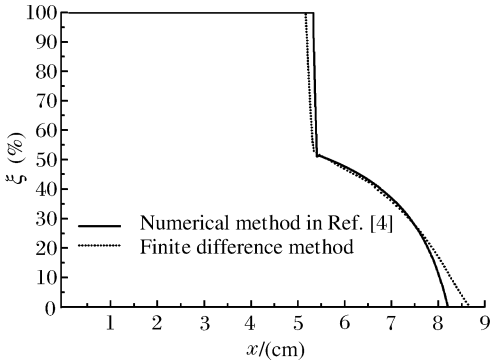


图 4 马氏体含量分布(A 类边界)

Fig. 4 Martensite fraction along x

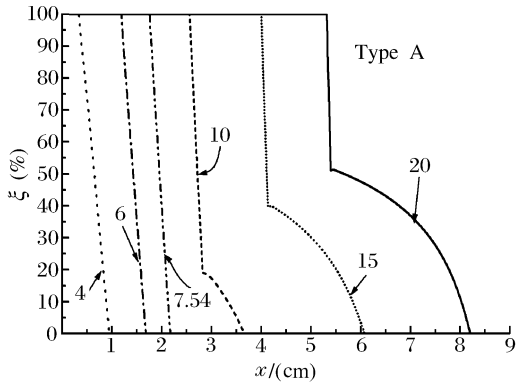


图 5 A 类边界条件下,不同 σ^* 时 ξx 曲线

Fig. 5 ξx curves under different σ^* of boundary condition A

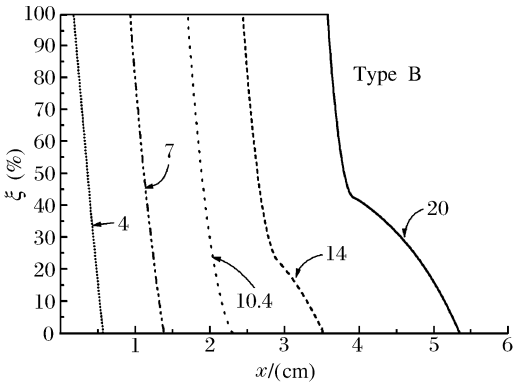


图 6 B 类边界条件下,不同 σ^* 时 ξx 曲线

Fig. 6 ξx curves under different σ^* of boundary condition B

图中曲线旁边的数字对应 σ^* 的幅值,单位为 GPa。由于是压应力,其符号应为负。从图 5、图 6 中可看出,当 σ^* 的幅值较小时,相边界传入材料中的深度也较小,而在相同的 σ^* 值下,B 类边界条件的相边界传播深度较小,梯度材料出现的区域也比较靠前。更值得注意的是,对于 A 类边界条件,当 $|\sigma^*|<7.54$ GPa 时,材料的梯度间断不再出现,转变区内,ξ 近似为线性递减。这是因为,当 σ^* 的幅值较小时,相边界在与从 t_0 开始的左行特征线相交之前就消失了,从而 $\mathrm{d}\sigma_0/\mathrm{d}t$ 的不连续不在材料梯度上反映出

来。对于 B 类边界条件，这个临界应力值是 10.4 GPa。而且，对于 B 类边界条件，梯度间断的点相当于数学上的拐点，它与边界上 $t=t_0$ 处应力对时间的二阶导数 $\mathrm{d}^2\sigma_0/\mathrm{d}t^2$ 的间断相对应。

梯度材料的应用主要是基于材料性质呈梯度分布。由本文所给出的数据可求得材料密度和材料的弹性模量沿 x 的分布。对于 CdS 材料，相变将产生约 21%的比容突变。因此在应力卸载到零后，Ⅰ相的密度 $\rho_1=\rho_0=4830\ \mathrm{kg/m^3}$，而Ⅱ相的密度为 $\rho_2=\rho_0/(1+\varepsilon_H)=6206\ \mathrm{kg/m^3}$，则可得混合相密度为

$$\rho=(1-\xi)\rho_1+\xi\rho_2 \tag{9}$$

由(9)式和(2)式可分别求出 A、B 类边界条件下，$\sigma^*=-20$ GPa，$t_0=10\ \mu$s 时所形成的梯度材料中密度和弹性模量的分布，分别示于图 7、图 8 中。

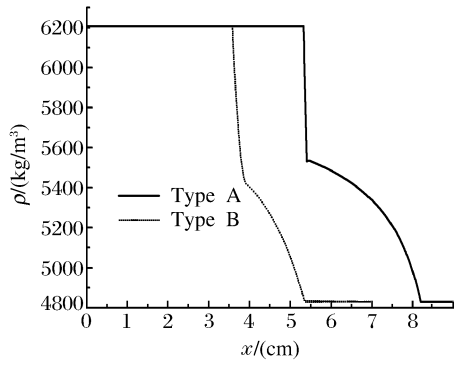


图 7　密度沿 x 的分布

Fig. 7　Material density along x

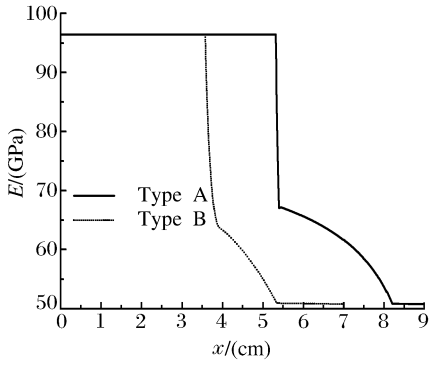


图 8　弹性模量沿 x 的分布

Fig. 8　Elastic modulus along x

如果给定Ⅰ相和Ⅱ相的其他材料常数如比热、导热率、电阻率等，则可类似求得其他材料常数的分布。也可以反过来根据实际应用所需要的材料性质梯度，来选择合适的边界条件，以达到设计要求。

强冲击加载的特点是载荷强，脉冲持续时间短，如气炮平板撞击加载的典型上升沿在 10 ns 左右，脉宽为数微秒；幅值可达 $1\sim10^2$ GPa。在这样的加载条件下，相变驱动力很大，从而相变速率很高。在母相样品中首先形成大量体积很小的纳米级晶核，由于晶核长大的时间受限，从而使得混合物中新相颗粒很小，通常容易达到微米甚至几十纳米的尺寸。例如 Meyers 等[8]的实验中，临界晶核体积为 65 个原子。可以设想，这样得到的梯度材料不但成分连续变化，而且内部无明显的宏观界面。本文中的基于连续介质理论的计算不至于由于比较大的新相颗粒的存在受到影响。关于冲击相变动力学过程的具体分析可参考文献[9]。

5　讨论与结论

本研究通过数值计算得到在不可逆相变材料中，随冲击相边界的传播能够形成梯度材料，从而提出利用相变材料的冲击响应得到梯度材料的可能性。文中的材料为半无限板，实际上只需板足够厚，使得在与右端面反射的卸载波作用之前，相边界就已经终止，那么文中的计算则仍然成立。文中的计算亦可推广到其他一维加载条件。

利用边界条件可控制材料的梯度，并且可得到梯度间断的梯度材料，两种组分所占比例连续变化，无宏观内部界面出现。

在本文中所讨论的问题，仅限于理论和数值计算，尚需实验验证。并且利用相变得到的梯度材料，成分仅限于母相和新相，尚不能按使用要求任意配比。另外，本研究所得到的梯度材料，其使用条件将受到限制，在一定的温度和应力条件下，逆相变可能发生，使得梯度消失。

References:

[1] Yang Y Z, Chen Z Q, Ran J G, et al. Study Progress and Prospect on Design for Functional Gradient Materials [J]. Ordnance Materials Science and Engineering, 1998, 21(6): 49－53. (in Chinese)
杨云志，陈治清，冉均国，等. 梯度材料设计的现状与展望 [J]. 兵器材料科学与工程，1998，21(6)：49－53.

[2] Shen Q, Dou J F, Zhang L M, et al. Preparation of W-Mo Composites and Their Characteristic Wave Impedance [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2002, 16 (2): 125－130. (in Chinese)
沈 强，窦金锋，张联盟，等. W-Mo 系复合材料的制备及其特性波阻抗 [J]. 高压物理学报，2002，16(2)：125－130.

[3] Tang Z P, Gupta Y M. Shock Induced Phase Transition in Cadmium Sulphide Dispersed in an Elastomer [J]. J Appl Phys, 1988, 64 (4): 1827－1837.

[4] Wang W Q, Tang Z P. Propagation of Macroscopic Phase Boundary under Shock Loading [J]. Explosion and Shock Waves, 2000, 20(1): 25－31. (in Chinese)
王文强，唐志平. 冲击下宏观相边界的传播 [J]. 爆炸与冲击，2000，20(1)：25－31.

[5] Gray G T Ⅲ, Hayes D B. Influence of the Shock-Induced $\alpha-\varepsilon$ Transition in Fe on Its Post-Shock Substructure Evolution and Mechanical Behavior [J]. Journal de Physique, Ⅳ, 2000, 10: 755－760.

[6] Wang W Q, Tang Z P. An One-Dimensional Phase Transition Constitutive Model [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 1999, 13(4): 272－277. (in Chinese)
王文强，唐志平. 关于相变本构关系的一个一维模型 [J]. 高压物理学报，1999，13(4)：272－277.

[7] Bruno O, Vaynblat D. Two-Wave Structures in Shock-Induced Martensitic Phase Transitions [J]. Mathematical and Computer Modelling, 2001, 34(12-13): 1261－1271.

[8] Chang S N, Meyers M A. Martensitic Transformation Induced by Tensile Stress Pulse in an Fe-Ni-Mn Alloy [A]. Schmidt S C, Holmes N C. Shock Waves in Condensed Matter-1987 [C]. Netherlands: Elsevier, 1988. 143－146.

[9] Tang Z P. The Foundation of Impact-Induced Phase Transition [M]. Hefei: Teaching Materials of Graduate Students of University of Science and Technology, 1992. 92－110. (in Chinese)
唐志平. 冲击相变基础 [M]. 合肥：中国科技大学研究生讲义，1992. 92－110.

Formation of Functionally Graded Material during the Propagation of Phase Boundary under Shock Loading

DAI Xiang-Yu, TANG Zhi-Ping

(*The Key Laboratory for Mechanical Behavior and Design of Materials of CAS, Department of Mechanics and Mechanical Engineering, University of Science and Technology of China, Hefei* 230027, *China*)

Abstract: The propagation of shock-induced phase boundary in a material undergoing irreversible phase transition was studied theoretically using a model based on simple-mixture rule. It was found that along with the decay of the phase boundary, the functionally graded material (FGM) formed in the mixed-phase region. Such FGMs are composed of original phase and product phase, and the composition and physical properties are changing continuously with the coordinate without apparent macro-interfaces between two phases. The effect of stress boundary conditions of impact loading on the grade and range of the FGM region was investigated in detail with a numerical method. Finally, the possibility of producing FGMs with impact method was proposed and the limit of this method has been discussed.

Key words: phase boundary; phase transition; functionally graded material