

## 重力对功能陶瓷材料压制过程影响的离散元模拟

邹霞<sup>1,2</sup>, 李国荣<sup>1</sup>, 谭援强<sup>2</sup>, 姜胜强<sup>2</sup>, 郑嘹赢<sup>1</sup>, 曾江涛<sup>1</sup>

(1. 中国科学院 上海硅酸盐研究所, 上海 200050; 2. 湘潭大学 机械工程学院, 湘潭 411105)

**摘要:** 采用离散元法动态模拟了功能陶瓷材料的压制过程, 分别分析了重力与微重力情况下, 成型后素坯的颗粒分布、应力以及孔隙率等情况。结果显示: 在重力情况下, 不同粒径的颗粒分布不均匀, 小粒径颗粒很大一部分集中在上冲附近, 而微重力情况下, 颗粒不均匀性明显减小; 与此同时, 与微重力情况相比, 重力情况下坯体的应力分布梯度较大, 靠近上冲模及下冲模处应力比中间部位应力大, 而孔隙率分布梯度也较大。

**关键词:** 离散元法; 功能陶瓷; 梯度; 颗粒分布

中图分类号: TB24

文献标识码: A

## Discrete Element Method Modeling of the Influence of Gravity During Functional Ceramics Material Compaction Process

ZOU Xia<sup>1,2</sup>, LI Guo-Rong<sup>1</sup>, TAN Yuan-Qiang<sup>2</sup>, JIANG Sheng-Qiang<sup>2</sup>, ZHENG Liao-Ying<sup>2</sup>, ZENG Jiang-Tao<sup>2</sup>

(1. Shanghai Institute of Ceramics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 200050, China; 2. School of Mechanical Engineering, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China)

**Abstract:** Compaction process of the functional ceramic materials were dynamically simulated by discrete element method (DEM), and the particles distribution, stress and porosity of the green compact under the actions of gravity and microgravity were also analyzed. The results showed that under the action of gravity, the distribution of different size particles was inhomogeneous, a substantial part of small size particles were found concentrated near the upper punch, while under the action of microgravity, the heterogeneity of particles was significantly reduced. Compared with microgravity condition, the distribution of stress gradients was larger under the gravity condition, and the stress near the upper and low punches was larger than that at the middle region, and the distribution gradient of the porosity was also larger.

**Key words:** DEM; functional ceramics; gradient; particles distribution

粉末材料的压制涉及制药学<sup>[1]</sup>、陶瓷工业<sup>[2-3]</sup>、粉末冶金<sup>[4]</sup>等诸多领域。压制的目的是制取具有一定尺寸、密度和强度的压坯。在功能陶瓷的成型制备过程中, 得到的素坯质量会直接影响后续烧结过程, 从而影响陶瓷性能。为了得到高质量的素坯, 往往需要进行反复试验。

目前, 国内外很多学者对粉体压制成型的过程进行了广泛的研究。主要以有限元法模拟为主, 通过建立新的数学、力学模型<sup>[5-6]</sup>和分析材料在压制过

程中的力学性能<sup>[7-8]</sup>等来研究粉末材料的压制过程。离散元法(Discrete Element Method, DEM)现今也被广泛应用于粉末压制领域, 通过模拟的方法来进行优化陶瓷压制过程的工艺条件<sup>[9-11]</sup>等方面的研究。

离散元法以离散颗粒为单元模型, 在模拟粉末颗粒物质压制过程中, 有其突出的特点。它将材料视为分离的散体单元, 基于分子动力学思想, 可以模拟离散单元之间的相互作用, 允许单元间的相对运动, 不一定需要满足位移连续和变形协调条件,

收稿日期: 2010-01-25; 收到修改稿日期: 2010-04-08

基金项目: 国家自然科学基金(50875224); 上海市科委重点基金(09JC1414802); 教育部新世纪优秀人才支持计划(NCET06-0708)  
National Nature Science Foundation of China (50875224); Key Project of Science and Technology Commission of Shanghai Municipality (09JC1414802); New Century Excellent Talents in University (NCET06-0708)

作者简介: 邹霞(1984-), 女, 硕士研究生. E-mail: xzou2009@yahoo.cn

通讯联系人: 谭援强, 教授. E-mail: tanyq@xtu.edu.cn

可以观察颗粒物质的微观力学行为。

在实验中发现陶瓷材料压制成型,特别是流延成型过程中,陶瓷的颗粒度分布对上下面的影响很大。本论文对比微重力的情况,分析了重力对材料压制成型的影响,发现在成型过程中,重力虽然很小,但对压制成型过程中颗粒在模具中的分布情况影响较大,同时对应力以及相对密度梯度等方面也进行了研究。

## 1 模拟及实验分析过程

本文模拟粉体材料单向模压过程,模具为圆柱形,压制后的成型样品为圆形、片状,由于模型具有对称性,所以选取模具的一个轴截面作为二维离散元模型。

### 1.1 模型的建立

所建立的离散元模型采用球作为基本单元,选用线性接触模型。图 1 为球与球以及球与墙的接触受力模型示意图。弹簧和阻尼器为受力元件,弹簧代表了弹性变形,阻尼器用于动能的耗散,耦合器用来确定发生接触的颗粒配对关系。图 1 中(a)、(b)分别表示法向和切向接触受力模型。

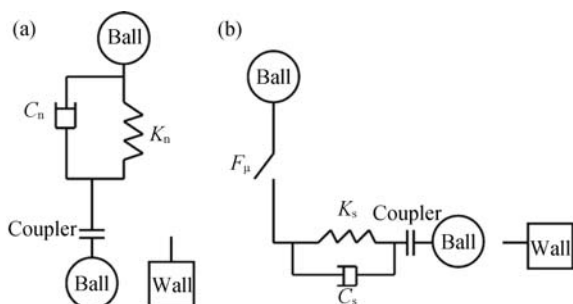


图 1 接触受力模型

Fig. 1 Contact mechanical model

(a) Normal direction; (b) Tangential direction

图 2 为压制前的离散元模型,其中,上下墙分别代表上冲和下冲,侧墙代表中模。通过对上冲施以速度使其向下运动,模拟动态压制过程。

模型的整体尺寸长度 $\times$ 高度:  $2\text{mm} \times 5\text{mm}$ , 颗粒粒径为  $4\sim 15\mu\text{m}$ , 遵循正态分布。重力情况下,颗粒先采用“落雨法”<sup>[12]</sup>使其沉降,当达到稳定状态后再使上冲向下运动进行压制。

### 1.2 模拟结果

利用程序将重力与微重力情况下压制成型后,模型中粒径为  $4\sim 8\mu\text{m}$  的小颗粒的位置分别标识出来,如图 3 所示。

从图 3 中可以看出,有重力时,颗粒分布不均匀,小颗粒较大一部分集中在上冲附近,而微重力下,小颗粒的分布相对比较均匀。在程序运行的过

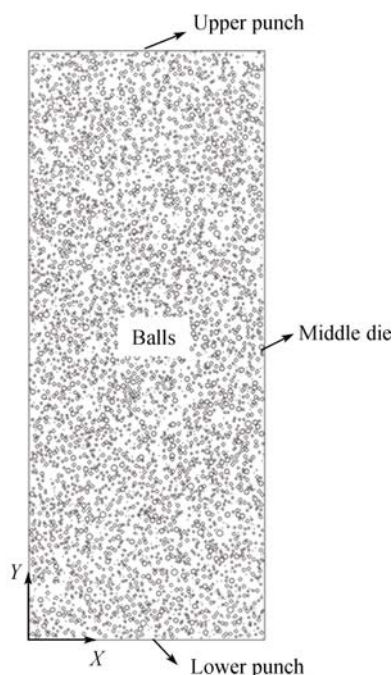


图 2 离散元模型

Fig. 2 DEM model

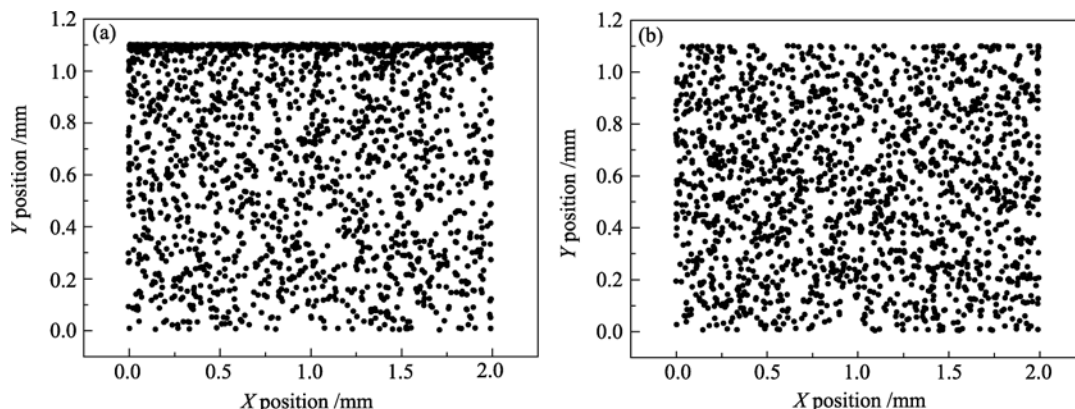


图 3 离散元模型中小颗粒分布情况

Fig. 3 Distribution of small range particle in DEM models

(a) Under gravity condition; (b) Under microgravity condition

程中观察到, 重力情况下, 在颗粒沉降的过程中, 不同粒径的颗粒已经体现出不同的运动速度, 部分小颗粒在达到最后的稳定状态时, 出现上浮, 而部分小颗粒甚至出现悬浮的现象, 上冲向下进行压制的过程中, 上部分较为集中的小颗粒簇并没有因为压制而改变这种分布情况, 最终出现了图 3(a)中的情况.

在成型后模型的不同位置处取 9 个测量圆面, 分别测得重力和微重力情况下孔隙率的数值, 如表 1 和表 2 所示. 由表 1 可以看出, 有重力时, 垂直方

表 1 重力情况下模型的孔隙率

Porosity	X=0.3mm	X=1.0mm	X=1.7mm
Y=0.20mm	0.1316	0.1264	0.1355
Y=0.56mm	0.1218	0.1212	0.1238
Y=0.92mm	0.1184	0.1146	0.1190

表 2 微重力情况下模型的孔隙率

Porosity	X=0.3mm	X=1.0mm	X=1.7mm
Y=0.20mm	0.1263	0.1212	0.1232
Y=0.56mm	0.1254	0.1193	0.1211
Y=0.92mm	0.1222	0.1204	0.1219

向上的孔隙率分布梯度较大, 同时, 越靠近下冲, 孔隙率越大; 而表 2 显示, 微重力情况下, 垂直方向上的孔隙率分布梯度较小. 孔隙率直接反应了坯体的相对密度, 孔隙率越大, 相对密度就越小. 故微重力下, 坯体的相对密度梯度较小.

测量成型后坯体在  $X=1\text{mm}$  处, 沿  $Y$  轴不同位置处的垂直方向与水平方向的应力值, 如图 4 所示, 可以看到, 重力情况下, 应力分布的梯度大, 而且靠近冲模处的应力较大, 中间部位应力较小. 而在微重力情况下, 应力分布梯度明显减小.

1.3 对比实验结果

进行了重力情况下的粉末干压实验. 实验材料选用氧化铌, 球磨后干压成型, 使用 QLB350×350 型硫化机进行压制.

将压制好的素坯样品用 SEM 观察其沿轴向的断面形貌, 在靠近上冲和下冲处分别取两个位置进行观察, 如图 5 所示.

由图 5 可以看到, 在靠近上冲处, 粒度小的颗粒较多, 而靠近下冲处粒度大的颗粒较多. 这与模拟的结果吻合, 证明了重力情况下, 压制方向上颗

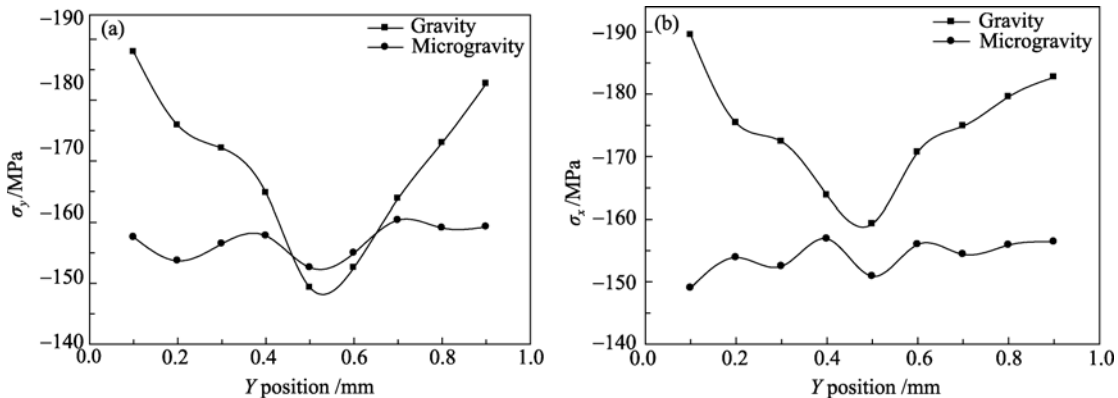


图 4 成型后模型应力分布  
Fig. 4 Stress distribution of forming model  
(a) Vertical direction; (b) Horizontal direction

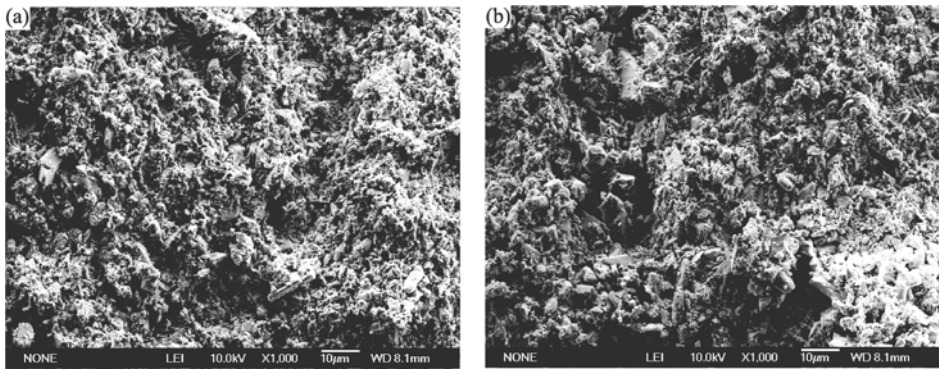


图 5 素坯样品轴向断面 SEM 照片  
Fig. 5 SEM images of the green compact  
Near (a) the upper punch and (b) the lower punch

粒的粒度分布确实存在不均匀现象.

取 3 个压制成型的样品, 将其沿径向切开分为上下两个部分, 用压汞法测量两部分的气孔率, 测得的结果如表 3 所示. 可以看到, 样品上部分的气孔率比下部分小, 说明上部分的相对密度较大.

在压制的过程中, 部分样品出现层裂, 如图 6 所示. 由图中可以看到裂纹均靠近冲模位置, 这说明样品在此位置处受到的应力较大.

## 2 结果分析

单向模压时, 由于粉末颗粒之间相互的摩擦力以及颗粒与模壁之间的摩擦力阻碍了压制力的传递<sup>[13]</sup>. 如图 7 所示, 当有重力时, 颗粒所受到的摩擦力部分是由于重力而产生, 所以在有重力的情况下, 摩擦力较大, 从而导致压制力传递的受阻程度较大. 而微重力条件下, 重力( $mg$ )很小或不存在, 导致摩擦力的减小, 虽然  $mg$  值较小, 但是在力传递的过程中, 摩擦力减小的值是可观的, 所以在微重力条件下压制力受阻的程度减小.

表 3 样品气孔率  
Table 3 Porosity of the samples

Porosity	Top portion	Low portion
Sample 1	0.2701	0.2735
Sample 2	0.2731	0.2745
Sample 3	0.2620	0.2743



图 6 素坯样品层裂图

Fig. 6 Spallation image of the green compact

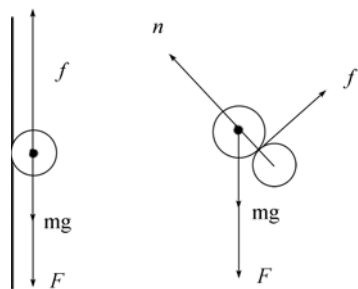


图 7 重力情况下颗粒模型受力示意图

Fig. 7 Mechanical diagram of the particles

$F$ —Equivalent force;  $mg$ —Gravity;  $f$ —Friction force;  $n$ —Force between the particles

由图 4 可以看到, 在重力情况下, 压制成型后, 坯体的应力在垂直方向上的分布是两端大, 中间小. 这是由于在压制之前, 靠近下冲的颗粒要承受上部颗粒的重力, 所以越到下面, 颗粒所受的应力就越大, 这个现象便是著名的“粮仓效应”<sup>[12]</sup>. 而压制后, 这种“粮仓效应”没有完全消除而被部分“继承”下来, 使得靠近下冲处颗粒的应力较大; 同时, 越靠近上冲处, 较大的压力直接作用在颗粒上, 导致靠近上冲处的应力较大, 中间位置由于压制力传递受阻而逐渐减小. 微重力下, 这种“粮仓效应”基本不存在, 所以没有出现中间部分颗粒应力较小的现象, 摩擦力小, 压制力的传递受阻程度小, 所以应力梯度也比较小.

应力梯度过大, 会使坯体容易发生断裂破坏以及分层现象; 也会影响压坯在后续的烧结过程中晶粒的生长. 受应力大的位置, 晶粒生长受阻程度较大, 最后会影响功能陶瓷的性能.

从表 1 可以看出, 有重力时, 沿垂直方向由上到下, 坯体的孔隙率逐渐增大, 所以相对密度逐渐减小. 在重力作用下颗粒之间摩擦力较大, 压制力传递受阻, 所以越到下面, 相对密度越小; 同时, 由于有较大的摩擦力, 颗粒在沉降过程中, 容易出现“架拱现象”<sup>[13]</sup>, 而导致坯体内各部分密度分布不均匀. 而在微重力条件下, 颗粒所受的摩擦力较小, 压制力传递受阻的程度较小, 所以坯体内相对密度梯度减小, 如表 2 所示.

有重力时, 微小颗粒物质可能发生对流、沉降, 在发生碰撞时, 较重的粒子更容易沉淀到底部, 而较轻的粒子由于受到的重力小而上浮<sup>[14]</sup>, 所以压制之前便已经出现了颗粒分布不均匀的现象, 部分小颗粒出现上浮、甚至悬浮的现象, 而压制力并不能改变这种现象, 从而导致了坯体内颗粒的分布不均匀如图 4 中 (a)所示. 颗粒分布的不均匀性又是应力以及相对密度梯度较大的一个重要原因.

## 3 结论

1)微重力条件下, 对材料制备影响较大的对流、沉降、浮力等因素基本上消失, 所以颗粒分布不均匀的现象得到明显改善.

2)有重力时, 由于“粮仓效应”和上冲压力的作用, 使得坯体应力梯度较大.

3)有重力时, 颗粒之间的摩擦力大, 阻碍了压制过程中力的传递, 使得素坯在垂直方向上的相对密度梯度较大.

4)二维离散元模型中,所测得的孔隙率与实际材料的孔隙率相差较大。这是由于真实材料是很难达到最紧密的状态,三维情况下“锁合”的几率比二维要多得多,因此三维情况下,孔隙率会更大。所以,在孔隙率的计算方面,二维模型作为定性分析。

### 参考文献:

- [1] Haware Rahul V, Tho Ingunn, Bauer-Brandl A, *et al.* Application of multivariate methods to compression behavior evaluation of directly compressible materials. *Journal of Pharmaceutics and Biopharmaceutics*, 2009, **72(1)**: 148–155.
- [2] 孟正华, 黄尚宇. 压制方式对锆钛酸铅压电陶瓷密度及性能影响的研究. *粉末冶金技术*, 2008, **26(1)**: 49–53.
- [3] 赵然, 周静, 魏长松, 等. 成型工艺对  $x\text{PMS}-2(1-x)\text{PZN}$  陶瓷性能的影响. *四川大学学报*, 2005, **42(S1)**: 410–414.
- [4] 董林峰, 李从心. 金属粉末成形过程的裂纹预测. *上海交通大学学报*, 2001, **35(1)**: 90–93.
- [5] Park H, Kim K T. Consolidation behavior of SiC powder under cold compaction. *Materials Science and Engineering*, 2001, **299(1/2)**: 116–124.
- [6] Sonnergaard J M. Investigation of a new mathematical model for compression of pharmaceutical powders. *European Journal of Pharmaceutical Sciences*, 2001, **14(2)**: 149–157.
- [7] Wu C Y, Hancock B C, Mills A, *et al.* Numerical and experimental investigation of capping mechanisms during pharmaceutical tablet compaction. *Powder Technology*, 2008, **181(2)**: 121–129.
- [8] Henderson R J, Chandler H W, Akisanya A R, *et al.* Finite element modeling of cold isostatic pressing. *Journal of European Ceramic Society*, 2000, **20(8)**: 1121–1128.
- [9] Foo Y Y, Sheng Y, Briscoe B J, *et al.* An experimental and numerical study of the compaction of alumina agglomerates. *International Journal of Solids and Structures*, 2004, **41(21)**: 5929–5943.
- [10] Martin C L, Bouvard D, Shima S, *et al.* Study of particle rearrangement during powder compaction by the discrete element method. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2003, **51(4)**: 667–693.
- [11] Frenning Göran. An efficient finite/discrete element procedure for simulating compression of 3D particle assemblies. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2008, **197(49/50)**: 4266–4272.
- [12] 孙其诚, 王光谦. 颗粒物质力学导论. 北京: 科学出版社, 2009: 3–6.
- [13] 李标荣. 电子陶瓷工艺原理. 武昌: 华中工学院出版社, 1986: 39–41.
- [14] 陈诺夫. 微重力环境材料科学实验. *自然杂志*, 2007, **29(6)**: 335–337.