

doi:10.11835/j.issn.1000-582X.2018.01.001

# 原子尺度上的波

孙晓强<sup>a</sup>, 刘瑶璐<sup>a</sup>, 胡宁<sup>a,b</sup>

(重庆大学 a. 航空航天学院; b. 机械传动国家重点实验室, 重庆 400044)

**摘要:**提出全同粒子以及虚粒子假设,并推导了二维速度控制条件,再结合原子势函数,在原子尺度上描述了线性波的传播。考虑晶格非谐性以及位错的影响,进一步探究了二阶非线性波的产生机理。理论分析表明,晶格非谐性和位错引起的晶格畸变会诱发生高阶虚粒子,高阶虚粒子是高阶非线性波产生的关键因素,位错等材料早期非线性或细微损伤导致高阶虚粒子增多而引发明显的高次谐波,因此,可以通过探测高次谐波诊断材料早期损伤。

**关键词:**弹性波;原子势函数;晶格非谐性;位错;二次非线性波;结构或材料的非线性评价

**中图分类号:**O343

**文献标志码:**A

**文章编号:**1000-582X(2018)01-001-08

## Wave at the atomic scale

SUN Xiaoqiang<sup>a</sup>, LIU Yaolu<sup>a</sup>, HU Ning<sup>a,b</sup>

(a.College of Aerospace Engineering;b. The State Key Laboratory of Mechanical Transmission, Chongqing University, Chongqing 400044, P.R.China)

**Abstract:** With proposing identical particle and virtual particle hypothesis, the control condition of two-dimensional velocity is derived, and the propagation of linear waves is described at the atomic scale with using interatomic potential functions. Furthermore, the generation mechanism of the second-order nonlinear waves is studied by considering the effects of lattice anharmonicity and dislocation. The study shows that the lattice distortion caused by lattice anharmonicity and dislocation induces high-order virtual particles, which are the key factor in generating the high-order nonlinear waves, and early-stage nonlinearities or micro-damages, e.g., dislocation, lead to the increase of the high-order virtual particles, which induces obvious high-order nonlinear waves. Therefore, the early-stage micro-damages can be identified by detecting the high-order nonlinear waves.

**Keywords:** elastic wave; interatomic potential function; lattice anharmonicity; dislocation; second-order nonlinear wave; evaluation of early-stage nonlinearities or micro-damages in structures and materials

**收稿日期:**2017-08-12

**基金项目:**国家自然科学基金资助项目(11372104, 11332013, 11372363);重庆市自然科学基金资助项目(CSTC2015-JCYJA50021)。

Supported by National Natural Science Foundation of China (11372104, 11332013, 11372363) and Natural Science Foundation of Chongqing (CSTC2015JCYJA50021).

**作者简介:**孙晓强(1988—),男,重庆大学硕士研究生,主要从事超声无损健康监测技术研究,(E-mail)20143102007@cqu.edu.cn。

胡宁(联系人),男,重庆大学教授,博士生导师,(E-mail)ninghu@cqu.edu.cn。

近年来,以线性弹性波理论为基础的超声无损检测技术得到了广泛的研究和应用<sup>[1-4]</sup>,比如,超声 C 扫描、各种 Lamb 波检测技术等。为提高上述技术的灵敏度,利用波在固体材料传播过程中产生的非线性二次谐波来评价材料的早期性能退化或检测疲劳等细微损伤成为研究的热点<sup>[5-12]</sup>。几乎已有的相关理论研究都是建立在经典位错理论和弹性力学基础之上的。例如,Cantrell 对体波非线性二次谐波做了相关理论研究<sup>[13]</sup>,并用  $\beta$  参数来表征非线性的强弱,在位错均匀分布的假设下从弹性力学出发推导出  $\beta$  的公式为

$$\beta = \frac{\beta^e + \beta^{mp} + \beta^{dp}}{[1 + \Gamma^{mp} + \Gamma^{dp}]^2}。$$

该公式中每一项的表达式都十分复杂,尤其是当位错不是均匀分布时,其表达式和参数将更加复杂,难于应用。Christian 在一维情况下利用 Cantrell 的结论并略去高阶项得出  $\beta$  参数的近似表达式为<sup>[14]</sup>

$$\beta = \frac{8c^2}{\omega^2 x} \left( \frac{A_2}{A_1^2} \right)。$$

该  $\beta$  表达式比 Cantrell 的  $\beta$  表达式简单清晰了很多,却无法反映位错等非线性贡献。众所周知,经典弹性理论在原子尺度上不能很好地解释某些物理现象<sup>[14-16]</sup>,而从弹性力学出发解释二次谐波非线性相关问题时,要么理论极其复杂,要么不能正确反映微观物理实质,且无法统一晶格非谐性和位错等非线性贡献。

固体物理在原子尺度研究了晶格振动,建立了晶格动力学,引入了声子以及格波概念,虽然可以证明在长波极限下格波和弹性波相同<sup>[17-18]</sup>,但是格波和弹性波是有区别的<sup>[18]</sup>。格波主要取决于固体本身性质,其频率取值通常是不连续的,理论上无法取频率从零到无穷大之间的任意值;而从弹性力学出发,理论上弹性波的频率主要取决于外界驱动频率,其频率取值通常是连续的,可以取频率从零到无穷大之间的任意值。所以这两种理论在原子尺度上,对解释波的产生和传播都有所欠缺,有必要尝试建立新的微观理论模型解释波的产生和传播现象。

笔者在全同粒子和虚粒子假设的基础上尝试建立微观理论模型,解释波的产生和传播的微观机理。为了简单,不考虑边界条件的线性波,对晶格非谐性以及位错引起的非线性进行讨论,指出非线性现象与高阶虚粒子密切相关。文中得出的理论结果与对应的建立在弹性力学基础之上的相关理论结果基本吻合。

## 1 假设

### 1.1 全同粒子假设

在不考虑边界的单一元素组成的固态晶体中,每个原子粒子及其周围电磁环境都是相同而无法区分的,文中将这些粒子称为全同粒子。

### 1.2 虚粒子假设

如图 1 所示,设初始时刻实粒子 A 受到外界激励,获得的振动频率为  $\omega$ 。假设在  $\tau$  时刻,与 A 相距为  $L'$  的实粒子 B 刚好接收到 A 粒子的全部振动信息,则该全部信息传递的速度应该对应群速度  $v_g$ ,且有:

$$v_g = L' / \tau, \quad (1)$$

设对应的波矢为  $k_g$ ,则:

$$k_g = \omega / v_g, \quad (2)$$

在  $\tau$  时刻,与 A 相距为  $L$  的虚粒子 C 刚好接收到 A 粒子的部分振动信息,则该部分信息传递的速度应该对应相速度  $v_p$ ,且有:

$$v_p = L / \tau, \quad (3)$$

设对应的波矢为  $k_p$ ,则:

$$k_p = \omega / v_p, \quad (4)$$

设  $t$  时刻,与 A 相距为  $L$  的虚粒子 C 刚好接收到 A 粒子的全部振动信息, $v_{(BC)}$  为全部振动信息从粒子 B 到虚粒子 C 的传递速度,则:

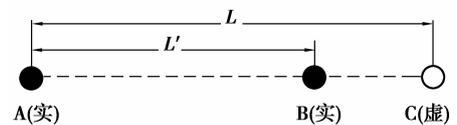


图 1 虚粒子假设示意图

Fig.1 Virtual atom hypothesis.

$$v_{(BC)} = \frac{L - L'}{t - \tau} = (L - L') / \tau(L/L' - 1) = \frac{L'}{\tau} = v_g, \quad (5)$$

当考虑方向时,以上各标量将转换为相应的矢量,定义虚波矢为  $\mathbf{k}_v$ ,

$$\mathbf{k}_v = \mathbf{k}_g - \mathbf{k}_p, \quad (6)$$

$$\mathbf{k}_g = \mathbf{k}_p + \mathbf{k}_v. \quad (7)$$

方程(5)表明文中相关定义是自洽的,值得注意的是涉及到的速度均应理解为平均速度,和经典弹性力学中的速度一致。方程(7)的含义是,虚粒子 C 在  $\tau = (L'/L)t$  时刻通过  $\mathbf{k}_p$  获得部分信息,再经过  $(1 - L'/L)t$  时间后,通过  $\mathbf{k}_v$  在  $t$  时刻获得了全部信息。虚粒子 C 不是真实的原子粒子,而是类光速运动的能够传递信息的具有粒子性的虚粒子,文中将这样的信使粒子称为虚粒子。

如果用  $\mathbf{k}_r$  代替  $\mathbf{k}_g$ , 方程(7)可以推广为

$$\mathbf{k}_r = \mathbf{k}_p + \mathbf{k}_v, \quad (8)$$

式(8)具有更为广泛的含义:例如一个微观量子力学系统,可以有无穷多的相态,在实验探测后,一个真实的状态确定了下来。

## 2 原子尺度上的波

### 2.1 速度定义

在三维笛卡尔坐标中,定义与振动相关的信息传递速度为

$$v_{\alpha\beta\gamma\delta\epsilon\zeta}, \quad (9)$$

其中:下标  $\alpha, \beta, \gamma$  表示粒子振动方向的方向余弦; $\delta, \epsilon, \zeta$  表示信息传递方向的方向余弦,即波速方向的方向余弦。信息传递的群速度、相速度、瞬时速度以及平均速度均可用式(9)表示,例如,若速度为平均群速度,  $v_{100100}$  代表  $x$  方向传播的纵波平均群速度,  $v_{010100}$  和  $v_{001100}$  则代表  $x$  方向传播的  $y$  偏振以及  $z$  偏振横波平均群速度。

### 2.2 速度条件

为了简便,在文中假设前提下,考虑无边界无阻力二维情况。如图 2 所示,分别设粒子 A、B、C 所在的位置为  $a, b, c$ , 粒子 A 受到外界激励成为振动信息源,振动沿着  $y$  方向传递,该信息通过虚粒子向四处扩散。粒子 C 获得信息的途径有 3 条,图 2 中分别表示为红色、蓝色和黑色路径,由于对称性,只需要研究红色和黑色路径,即  $abc$  路径和  $ac$  路径。

振动信息通过  $ac$  路径从粒子 A 传到粒子 C, 设对应的传播时间为  $t_{AC}$ ; 通过  $abc$  路径从粒子 A 传到粒子 C, 设对应的时间为  $t_{ABC}$ 。显然,这 2 种路径的传递作用是相当的,不能忽略任何一种,振动信息要能协调传播下去,必然有:

$$t_{ABC} = t_{AC} \pm \frac{2\pi n}{\omega}, \quad (10)$$

其中,  $n$  为整数。

设  $ab$  长为  $L$ ,  $\angle cab = \theta$  用距离和速度表示时间,代入式(10)得

$$\frac{L}{v_{010 \cos \theta \sin \theta} \cos \theta} = \frac{L}{v_{010100}} + \frac{L \tan \theta}{v_{010010}} \pm \frac{2\pi n}{\omega}, \quad (11)$$

考虑到  $k = \frac{\omega}{v}$ , 在式(11)两端同时乘以  $\frac{\omega \cos \theta}{L}$  得到

$$k_{010 \cos \theta \sin \theta} = k_{010100} \cos \theta + k_{010010} \sin \theta + (2\pi n \cos \theta)/L, \quad (12)$$

考虑其他 2 种振动模式有

$$k_{\alpha\beta\gamma \cos \theta \sin \theta} = k_{\alpha\beta\gamma100} \cos \theta + k_{\alpha\beta\gamma010} \sin \theta + (2\pi n \cos \theta)/L, \quad (13)$$

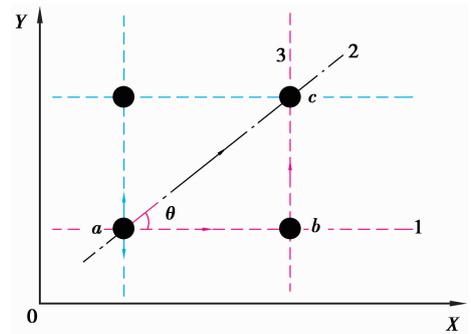


图 2 二维点源振动信息传播示意图  
Fig.2 Vibration information propagation of point source in 2D.

其中,  $n$  为整数。

当  $n=0, \theta=(1/4)\pi, k_{\alpha\beta\gamma 100}=k_{\alpha\beta\gamma 010}$  时, 方程(13)表示的波前为一个圆; 当  $k_{\alpha\beta\gamma 100} \neq k_{\alpha\beta\gamma 010}$  时, 方程(13)表示的波前为一个椭圆; 在三维情况下, 对应的波前为球面和椭球面; 如果  $\theta=0$ , 该问题退化为一维问题, 波前为平面波。可见方程(13)反应了各种各样的波前形状, 文中称其为速度控制条件或波矢条件。

### 2.3 原子势函数

微观原子之间的相互作用可以归结为原子势函数, 结合研究对象, 可以忽略多体作用, 于是选择如下势函数<sup>[19]</sup>:

$$\varphi(r) = \sum_{l=-1}^4 k_l \left(\frac{r}{r_0}\right)^l, \quad (14)$$

其中:  $k_l$  是模型参数, 以 Fe 晶体为例有:  $k_{-1}=199.603$  eV,  $k_0=-855.74$  eV,  $k_1=1478.54$  eV,  $k_2=-1287.3$  eV,  $k_3=563.579$  eV,  $k_4=-98.957$  eV;  $r_0$  表示纯元素理想晶体平衡状态下的最近邻距离;  $r$  为近邻 2 个原子的距离;  $\varphi(r)$  为近邻 2 个原子之间的势函数。

由  $F(r)=-\partial\varphi(r)/\partial r$  得到原子力函数为

$$F(r) = -\frac{\partial\varphi(r)}{\partial r} = -\sum_{l=-1}^4 \frac{lk_l}{r_0^l} r^{l-1} = -\sum_{l=-1}^4 lk_l (r/r_0)^{l-2} \frac{r}{r_0^2}. \quad (15)$$

### 2.4 线性波

在信息传递过程中, 若  $r \cong r_0$ , 则式(15)可化为  $F(r) = \sum_{l=-1}^4 lk_l \frac{r}{r_0^2} = Ar$ , 即只含有  $r$  的线性项。设驱动交变电场为  $E(t)$ , 以铝原子为例, 每一个原子提供 3 个电子, 可取驱动力为  $-3eE(t)$ 。若驱动频率为  $\omega$ , 则:

$$E(t) = Ee^{-i\omega t} + c.c., \quad (16)$$

不考虑阻力, 根据牛顿第二定律有:

$$-3eE(t) - Ar = m\ddot{r} \quad (17)$$

即:

$$\ddot{r} + Ar = -3eE(t)/m \quad (18)$$

解得:

$$\begin{aligned} r &= \xi(\omega)e^{-i\omega t} + c.c., \\ \xi(\omega) &= -\frac{3e}{m} \frac{E}{D(\omega)}, \\ D(\omega) &= A - \omega^2. \end{aligned} \quad (19)$$

值得注意的是, 借用经典的受迫振动谐振子模型进行数学求解, 是为了说明在信息传播过程中, 频率信息确实没有发生变化, 不必深究具体的参数取值。实原子获得的频率未发生变化, 那么传递信息的虚粒子传递的频率信息必定也没有发生变化。下面讨论非线性波时, 借用非线性谐振子模型进行数学求解, 是为了说明信息频率确实发生了变化, 具体的参数取值不予深究, 建议通过实验数据来确定这些参数。

式(19)表明在信息传递过程中, 只存在基频项, 没有出现高频项, 即只存在一阶线性虚粒子  $C_{FVP}$ , 频率信息在传播过程中不发生变化, 这样的信息传播过程形成的波就是线性波。

### 2.5 非线性波

频率为  $\omega$  的振动信息在粒子之间传递时, 若有  $\frac{n}{m}\omega$  ( $m, n$  为正整数且  $m \neq n$ ) 的频率信息产生, 这样的信息传播过程形成的波就是非线性波。

### 3 高次谐波

#### 3.1 晶格非谐性导致的二次谐波

在不考虑边界和缺陷的完美晶体中,晶格非谐性被认为是非线性的主要来源,晶格非谐性指晶格振动偏离简谐运动<sup>[20]</sup>。晶体热膨胀被认为是晶格非谐性引起的,此时,需要考虑原子势函数的高阶项,即原子力函数中将出现非线性高阶项,特别是二次高阶项<sup>[18]</sup>。室温下,在大多数固体中忽略晶格非谐性对三次高阶谐波的贡献是合理的<sup>[21]</sup>。

基于式(15),考虑原子力函数二次高阶项,设:

$$F = -m\omega_0^2 r - m\alpha_2 r^2, \quad (20)$$

其中: $m$  是原子质量; $\omega_0$  和  $\alpha_2$  是线性和二阶非线性响应参数。

设驱动交变电场为  $E(t)$ ,以铝原子为例,每 1 个原子提供 3 个电子,易知驱动力为  $-3e(E)t$ 。若驱动频率为  $\omega$ ,则:

$$E(t) = Ee^{-i\omega t} + c.c., \quad (21)$$

忽略阻力,由牛顿第二定律可知:

$$-3eE(t) - \omega_0^2 r - \alpha_2 r^2 = m\ddot{r}, \quad (22)$$

$$\ddot{r} + \omega_0^2 r + \alpha_2 r^2 = -3eE(t)/m. \quad (23)$$

通常二阶项比线性项要弱很多<sup>[14]</sup>,那么对任意的  $r$  都可以认为  $\alpha_2 r^2$  比  $\omega_0^2 r$  小很多。于是可以利用经典的微扰摄动展开法来解式(23),用  $\epsilon E(t)$  代替  $E(t)$ , $\epsilon$  为  $0 \sim 1$  之间的 1 个小参数且在计算结束时设置为 1,于是有:

$$\ddot{r} + \omega_0^2 r + \alpha_2 r^2 = -3\epsilon E(t)/m, \quad (24)$$

设:

$$r = \epsilon^1 r_1 + \epsilon^2 r_2 + \epsilon^3 r_3 + \dots, \quad (25)$$

将式(25)代入式(24)整理,并令与  $\epsilon^1, \epsilon^2, \epsilon^3$  对应的系数相等,得到:

$$\epsilon^1: \ddot{r}_1 + \omega_0^2 r_1 = -3eE(t)/m, \quad (26)$$

$$\epsilon^2: \ddot{r}_2 + \omega_0^2 r_2 = -\alpha_2 r_1^2, \quad (27)$$

$$\epsilon^3: \ddot{r}_3 + \omega_0^2 r_3 = -2\alpha_2 r_1 r_2, \quad (28)$$

式(22)的解为

$$r_1 = \xi^{(1)}(\omega) e^{-i\omega t} + c.c.,$$

$$\xi^{(1)}(\omega) = -\frac{3e}{m} \frac{E}{D(\omega)},$$

$$D(\omega) = \omega_0^2 - \omega^2. \quad (29)$$

将式(29)代入式(27)得:

$$r_2 = \xi^{(2)}(2\omega) e^{-2i\omega t} + c.c.,$$

$$\xi^{(2)}(2\omega) = -\frac{\alpha_2}{D(2\omega)} \left[ \frac{3e}{m} \frac{E}{D(\omega)} \right]^2,$$

$$D(2\omega) = \omega_0^2 - (2\omega)^2. \quad (30)$$

由式(30)产生了二次非线性项,其振幅为  $\xi^{(2)}(2\omega)$ ,说明有二阶虚粒子  $C_{SVP}$  产生。将式(29)和式(30)代入式(28)继续求解,会得到三次非线性项及其振幅,这里只计算到二次非线性项。令  $\epsilon=1$ ,得到近似解为

$$r = \xi^{(1)}(\omega) e^{-i\omega t} + \xi^{(2)}(2\omega) e^{-2i\omega t} + c.c., \quad (31)$$

结合式(27)和式(28)可知:

$$\xi^{(2)}(2\omega) = \frac{\alpha_2}{D(2\omega)} [\xi^{(1)}(\omega)]^2. \quad (32)$$

式(32)意味着二次谐波振幅与基波振幅的平方成正比。

显然,对于大多数固体材料,热膨胀意味着微观粒子之间的距离增加。设热膨胀后有  $r = \chi r_0$ , 参数  $\chi$  必须大于 1, 若  $\chi = 2$ , 热膨胀后的晶体体积将为原来晶体体积的 8 倍, 这与实际不符, 故  $\chi$  必须小于 2。引入 1 个二阶非线性参数  $\eta (1 < \eta < 2)$ , 使得:

$$r = \chi r_0 (1 < \eta < \chi), \text{线性}, \quad (33)$$

$$r = \chi r_0 (\eta \leq \chi < 2), \text{非线性}, \quad (34)$$

$$r = \chi r_0 (0 < \chi \leq 1 \cup \chi \geq 2), \text{(不讨论)}. \quad (35)$$

$r$  增大,  $1 < \chi < \eta$  时, 不出现非线性效应, 定义对应的虚粒子为一阶线性虚粒子, 记为  $C_{FVP}$ ;  $\eta \leq \chi < 2$  时, 将出现明显的非线性效应, 此时, 会产生高阶虚粒子, 高阶虚粒子会将频率为  $\omega$  的信息转换为  $2\omega$  和  $3\omega$  的信息并传递下去, 定义对应的高阶虚粒子为二阶虚粒子和三阶虚粒子, 分别记为  $C_{SVP}$  和  $C_{TVP}$ 。文中主要讨论二阶虚粒子, 最多讨论到三阶虚粒子, 对于更高阶的虚粒子不做讨论, 另外对  $0 < \chi \leq 1 \cup \chi \geq 2$  的情况, 也不做讨论。当然, 不同的晶体势函数不同, 相应的虚粒子情况会有所不同, 对应参数的具体取值应该有所不同。

### 3.2 位错导致的二次谐波

在大多数金属中, 应力-应变之间的非线性关系主要由晶格非谐性和位错引起<sup>[21]</sup>。考虑缺陷引起的非线性时, 主要考虑位错缺陷。

根据位错理论易知, 位错芯处晶格将发生明显的畸变, 部分晶格平衡距离将增大, 但畸变不会超过伯格矢量的大小, 这使  $\chi$  得参数满足  $1 < \chi < 2$ 。

位错引起非线性需要的应力比晶格非谐性引起非线性需要的应力低<sup>[22]</sup>。如果位错密度足够大, 位错引起的非线性将比晶格非谐性引起的非线性强<sup>[23]</sup>。故位错越多, 位错密度越大,  $C_{SVP}$  越多; 晶格非谐性越强,  $C_{SVP}$  越多, 二次谐波非线性越强。设位错密度为  $\rho_d$ , 晶格非谐性对二次谐波非线性的贡献(产生  $C_{SVP}$  的贡献)等效密度为  $\lambda \rho_d$ , 其中,  $\lambda$  为参数, 信息传递路径, 即波传播路径长度为  $x$ , 信息传递路径的平均横截面积为  $\bar{S}$ , 则信息传递经过的体积为  $\bar{S}x$ , 结合式(29), 可以得到:

$$\frac{\xi^{(2)}(2\omega)}{[\xi^{(1)}(\omega)]^2} = \frac{\alpha_2 k \bar{S}}{D(2\omega)} (\rho_d + \lambda \rho_d) x, \quad (36)$$

其中,  $k$  为比列系数。

当晶体晶格非谐性非常微弱时,  $\lambda \approx 0$ , 则:

$$\frac{\xi^{(2)}(2\omega)}{[\xi^{(1)}(\omega)]^2} = \frac{\alpha_2 k \bar{S}}{D(2\omega)} \rho_d x. \quad (37)$$

式(36)和式(37)表示二次谐波振幅与基波振幅的平方成正比, 与波经过的体积成正比, 与位错密度成正比, 即二次谐波与  $C_{SVP}$  数目成正比。该结论与建立在弹性力学基础之上的相关理论结果基本相似<sup>[14]</sup>。

材料疲劳损伤初期, 出现非线性或微观缺陷, 比如位错。在周期载荷下, 材料的位错开始集聚并在晶界形成驻留滑移带, 形成集结的微观裂纹, 然后, 微观裂纹生长为使材料失效的宏观裂纹。由于产生宏观裂纹需要的循环加载次数远远大于产生微观裂纹需要的循环加载次数, 所以, 在微观裂纹形成之前检测材料疲劳损伤缺陷显得极其重要<sup>[20]</sup>。

从上面的分析得知, 疲劳损伤会增加  $C_{SVP}$  数目, 从而增强二次谐波, 在微观裂纹形成之前, 可以通过检测二次谐波来检测材料早期非线性或疲劳损伤缺陷, 这与经典理论结论一致。

## 4 讨 论

波速反应了材料性质, 是比较重要的物理量, 通常测得的波速应当理解为平均速度。微观状态发生变化时, 波速应发生相关变化。理论上疲劳早期损伤也会对波速产生影响, 至于速度变化和疲劳早期损伤的关系能否应用于实际无损健康监测, 需要进一步研究。速度控制条件中, 速度是作为未知量引入的, 信息传递由虚粒子与虚粒子之间信息传递以及虚粒子与实粒子之间信息传递共同决定。接下来的工作将从第一性原理

出发推导信息传递的瞬时波速和平均波速,波速与速度控制条件共同决定波前。

不同材料具体的  $\eta$  应当有所不同,从第一性原理出发推导参数  $\eta$  的表达式应该是可行的,考虑到势函数的复杂性,通过实验来测定  $\eta$  会比较实用和直接,这也是未来将要进行的工作。需要注意的是,若材料的势函数为中心对称,那么势函数将主要包含距离的偶次高阶项,此时微观畸变更容易引发  $C_{\text{TVP}}$  而非  $C_{\text{SVP}}$ 。

对在薄板中传播的 Lamb 波而言,还需考虑边界条件的影响。距离边界较远的虚粒子主要反映材料内部性质,而靠近边界的虚粒子还可以反映边界的性质,故虚粒子可以反映边界条件。为了简单,以折射为例进行粗略讨论。2 种材料共享界面,共有界面极其附近的虚粒子,在沿界面方向上的性质相同,而沿垂直界面方向上的性质不相同,导致信息沿界面方向传递速度相同,沿垂直界面方向传递的速度不相同,从而导致路径偏折,如此便可导出折射定律。考虑边界条件后信息的传播规律(瑞利波、斯通利波和兰姆波等的传播规律),将在后续工作中展开。

理想晶格热膨胀时,晶体  $r$  畸变发生于整个晶体;当  $r$  畸变发生于局部时,对应各种各样的晶格缺陷。畸变超过临界值即可产生高阶虚粒子,要在宏观上观测到不可忽略的高次谐波,需要晶体发生大量的能够产生高阶虚粒子的晶格畸变,毕竟晶体中存在大量的线性虚粒子。材料疲劳损伤早期会引发大量位错,引起大量的晶格畸变,其引起的高阶虚粒子十分可观,不可忽略。文中主要讨论了晶体位错缺陷引起的非线性,对于其他缺陷类型未做讨论。实际上其他缺陷类型也很容易纳入该理论框架,例如,空位缺陷或者杂质缺陷等缺陷会引起晶格畸变,若产生了  $C_{\text{SVP}}$  和  $C_{\text{TVP}}$ ,可以直接将其对非线性的贡献加入式(36)中。不考虑这些缺陷,可以认为总量上由这些缺陷产生的高阶虚粒子数目远远少于由位错引起的高阶虚粒子数目,从而缺陷被忽略了。

## 5 结 论

在全同粒子和虚粒子假设基础上,推导了速度条件,建立了普遍的振动信息传递波动理论;在此基础上,定义了  $C_{\text{FVP}}$ 、 $C_{\text{SVP}}$  和  $C_{\text{TVP}}$ ,并指出这 3 种虚粒子分别与线性波、二次谐波和三次谐波直接相关;早期疲劳损伤引起一定程度的晶格畸变,破坏全同粒子全同性,通过增加  $C_{\text{SVP}}$  等高阶虚粒子来增强材料的非线性响应,可以通过检测二次谐波来检测材料早期疲劳损伤缺陷。

### 参考文献:

- [1] Hu B, Hu N, Li L, et al. Tomographic reconstruction of damage images in hollow cylinders using Lamb waves[J]. Ultrasonics, 2014,54:2015-23.
- [2] Liu Y, Hu N, Xu H, et al. Damage evaluation based on a wave energy flow map using multiple PZT sensors[J]. Sensors, 2014,14:1902-17.
- [3] Liu Y, Li Y, Liu F, et al. Monitoring of local plasticity using Lamb waves[J]. Advances in Structural Engineering, 2015, 18:339-52.
- [4] Rose J L. A baseline and vision of ultrasonic guided wave inspection potential[J]. The Shock and Vibration Digest, 2002; 124:273-82.
- [5] Cantrell J h, Yost W T. Nonlinear ultrasonic characterization of fatigue microstructures[J]. International Journal of Fatigue, 2001,23:487-90.
- [6] Kim J Y, Jacobs L J, Qu J. Experimental characterization of fatigue damage in a nickel-base superalloy using nonlinear ultrasonic waves[J]. Journal of the Acoustical Society of America, 2006,120:1266-73.
- [7] Nagy P B. Fatigue damage assessment by nonlinear ultrasonic materials characterization[J]. Ultrasonics, 1998, 36: 375-381.
- [8] Ostrovsky L A, Gurbatov S N, Didenkulov J N. Nonlinear acoustics in Nizhni Novgorod (A review)[J]. Acoustical Physics, 2005,51:114-27.
- [9] Pruell C, Qu J, Jacobs L J. Evaluation of fatigued damage using nonlinear guided waves[J]. Smart Materials & Structures,

- 2009,18:2202-21.
- [10] Ryles M, Ngau F H, McDonald I, et al. Comparative study of nonlinear acoustic and Lamb wave techniques for fatigue crack detection in metallic structures[J]. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 2008,31:674-83.
- [11] Sagar S P, Das S, Parid A N, et al. Non-linear ultrasonic technique to assess fatigue damage in structural steel[J]. *Scripta Materialia*, 2006,55:199-202.
- [12] Shui G S, Wang Y S. Nondestructive evaluation of material damage using nonlinear Rayleigh waves approach[J]. *Advanced Materials Research*, 2012,463-464:1522-1526.
- [13] Cantrell J H. Substructural organization, dislocation plasticity and harmonic generation in cyclically stressed wavy slip metals[J]. *Proceedings of the Royal Society A*, 2004,460:757-80.
- [14] Bermes C. Generation and detection of nonlinear Lamb waves for the characterization of material nonlinearities[D]. Georgia: School of Civil and Environmental Engineering, Georgia Institute of Technology, 2006.
- [15] Broda D, Staszewski W J, Martowicz A, et al. Modelling of nonlinear crack-wave interactions for damage detection based on ultrasound—A review[J]. *Journal of Sound & Vibration*, 2014,333:1097-1118.
- [16] 吴家龙. 弹性力学[M].北京: 高等教育出版社, 2011.  
WU Jialong. *Elastic Mechanics*[M]. Beijing: Higher Education Press, 2011.(in Chinese)
- [17] M.玻恩, 黄昆, 葛惟锜, 等. 晶格动力学理论—北京大学物理学丛书[M].北京: 北京大学出版社, 1989.  
Born M, HUANG Kun, GE Weikun, et al. *Dynamical Theory of Crystal Lattices—Peking University Physics Series* [M]. Beijing: Peking University Press, 1989.(in Chinese)
- [18] 黄坤. 固体物理学[M].北京: 高等教育出版社; 1988.  
HUANG Kun. *Solid State Physics*[M]. Beijing: Higher Education Press, 1988.(in Chinese)
- [19] 张邦维. 嵌入原子方法理论及其在材料科学中的应用: 原子尺度材料设计理论[M].长沙: 湖南大学出版社, 2003.  
ZHANG Bangwei. *Theory of embedded atom method and its application to materials science: theory of material design at the atomic scale*[M]. Changsha: Hunan University Press, 2003.(in Chinese)
- [20] Ming H, Su Z, Qiang W, et al. Modeling nonlinearities of ultrasonic waves for fatigue damage characterization: Theory, simulation, and experimental validation[J]. *Ultrasonics*, 2013, 54:770-778.
- [21] Hikata A, Sewell J, Elbaum C. Generation of ultrasonic second and third harmonics due to dislocations[J]. *Phys Rev*, 1966,144:469-77.
- [22] Hikata A, Chick B B, Elbaum C. Dislocation contribution to the second harmonic generation of ultrasonic waves[J]. *Journal of Applied Physics*, 1965,36:229-36.
- [23] Cantrell J H, Yost W T. Acoustic harmonic generation from fatigue-induced dislocation dipoles[J]. *Philosophical Magazine A*, 1994,69:315-26.

(编辑 陈移峰)