● 今日铸造 Today Foundry ●

DOI:10.16410/j.issn1000-8365.2019.10.028

基于 3D 打印的晶体结构仿真与模拟研究

刘翠霞,鲁小青,雷娜青,张 曼,王 硕,吕姝玥

(西安工业大学 材料与化工学院,陕西 西安 710021)

摘 要:为了激发大学生学习材料科学与工程专业的热情,掌握固态金属及合金的基本晶体结构,巩固材料学科研究的基础以及材料学科教学大纲中的重点,鼓励学生掌握计算机模拟做图技术,进一步理解三维晶体结构这一难点。借助 3Dmax 打印技术对三维晶体结构进行仿真模拟,利用 3D 打印机打印成型,打印 14 种布拉菲晶格的晶体结构,这不仅可以让学生了解金属晶体结构的多样性,而且让学生掌握了这些复杂性、抽象性和逻辑性等特点的知识,提高学生空间想象能力,以及结合计算机进行构思、设计和解决实际问题的能力。同时,这种创新型的三维教学模式提高了学生的创新思维能力、提高教师的授课质量。

关键词:3D 打印技术;晶体结构;晶体仿真;创新教学

中图分类号:G655; TP391.9 **文献标识码**:A **文章编号**:1000-8365(2019)10-1130-05

Simulation of Crystal Structure Based on 3D Printing

LIU Cuixia, LU Xiaoqing, LEI Naqing, ZHANG Man, WANG Shuo, LV Shuyue

(School of Materials and Chemical Engineering, Xi'an Technological University, Xi'an 710021, China)

Abstract: In order to stimulate the enthusiasm of students to study materials science and engineering, master the basic crystal structure of solid metal and alloy, consolidate the foundation of materials research and the key points in the teaching syllabus of materials science, encourage students to master computer simulation drawing technology, and further understand the difficulty of three-dimensional crystal structure. With production softwares 3Dmax printing technology to simulate the three-dimensional crystal structure simulation, using 3D printers, print 14 kinds of Bravais lattices of the crystal structure, which not only can let students understand the diversity of metal crystal structure, and make students master the characteristics of the complexity, abstract and logical knowledge, improve students' ability of space imagination, and combining with computer to conceive, design and ability to solve practical problems. At the same time, this innovative three-dimensional teaching mode improves students' innovative thinking ability and teaching quality of teachers.

Key words: three-dimensional printing; crystal structure; crystal simulation; innovative teaching

金属材料工程是材料科学与工程专业非常重要的专业,了解金属晶体的组织结构是掌握金属材料的成分、生产工艺(包括铸造、锻造、热处理和焊接)、性能的基础,为进一步设计和发展新材料提供了思路。因此,如何让学生全面掌握金属晶体结构成为材料科学与工程专业的重点教学内容。由于需要借助显微镜才能观察到晶体的显微结构,而且其显微结构随着生产工艺而变化无穷,金属晶体结构成为学生学习的难点。为了让学生快速准确掌握晶体结构,采用计算机模拟制作模型可以对学生有非常大的帮助。近年来,3D 打印技术的迅速发展,已成为重要的新兴领域之一,并且在多个领域中进行应用[1,2]。3D 打印技术不仅可以实现在三维基础上对实体进行模拟仿真,而且还可以融入更多创新型的新技术,使打印出的实物具有多元化并且具备现代新型产品的特征,将 3D 打印技术和建模运用于金属晶体结构仿真与模拟是最为先进的方法,通过本次研究,不仅可以让学生精确了解金属晶体结构,还可以锻炼学生的实际操作能力、结合计算机进行构思、以及分析设计和解决实际问题的能力,以顺应当代创新教育趋势,培养学生的创新思维能力和模拟操作能力[3]。同时,将 3D 打印和实验教学有机结合成为目前继续解决的问题,也解决了材料学科教学的一大难点。

1 晶体结构仿真与实施方案

为了研究微观金属晶体结构,将金属原子简化成阵点,阵点可以表征原子的位置,但不表示原子的体积,按照“每个阵点周围环境相同”的要求,布拉菲[4]

收稿日期:2019-05-04

基金项目:西安工业大学 2018 年国家级大创项目(1070214005)

作者简介:刘翠霞(1977-),女,河北石家庄人,博士,副教授.研究方向:晶体生长及高熵合金的计算机模拟.

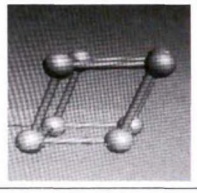
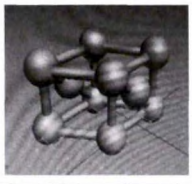
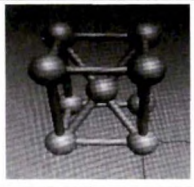
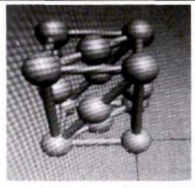
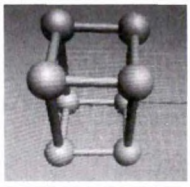
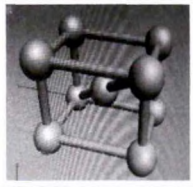
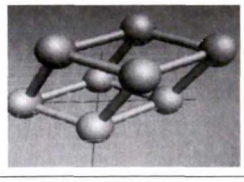
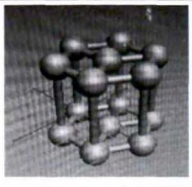
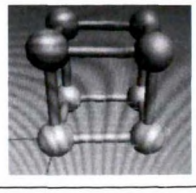
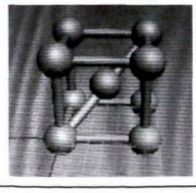
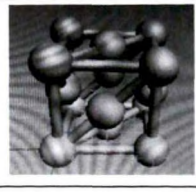
电话:15291457085,E-mail:cuixialiu2016@sina.com

(Bravais, A)用数学的方法推导了能够反映空间点阵全部特征的14种平行六面体，这就是布拉菲点阵,包括三斜、单斜、正交、六方、菱方、四方和立方，采用3D打印技术将布拉菲点阵模拟并打印出来，可以让学生形象观察和触摸到金属材料原子的位置。如表1所示为14种布拉菲晶格,模拟出的三维立体结构形象表征了原子的位置。

3D打印技术是在1986年由查克赫尔发明出来的,它的打印原理与一般打印机的工作原理相似。其打印过程是首先在3D打印机中装入原料，然后将

表1 14种布拉菲晶格

Tab.1 The fourteen types of Bravais lattices

晶系	布拉菲晶格			
三斜晶系	简单三斜			
				
单斜晶系	简单单斜	底心单斜		
				
正交晶系	简单正交	底心正交	体心正交	面心正交
				
四方晶系	简单四方	体心四方		
				
菱方晶系	简单菱方			
				
六方晶系	简单六方			
				
立方晶系	简单立方	体心立方	面心立方	
				

模型结构转成 3D 打印可以接受的格式，之后导入打印系统,打印机系统会读取有效信息进行操作,实现模型的模拟与仿真[5,6]。

本文采用 auto 3DMax[7,8]制图软件绘制布拉菲金属晶体结构的三维立体模型，将设计出的金属晶体立体模型转换为 3D 打印文件格式(STL)并进行切片处理。将做好的文件经过切片后保存成 gcode 文件格式导出到 SD 卡中。由 3D 打印机读取文件中的切片信息后,使用粉状材料或者丝状材料,通过加热融化由喷头喷出,打印机系统会读取并将这些切片信息按照文件中的形式逐层的打印出来后,再按照文件中的形式逐层的连接起来后形成一个整体及所打印的整体，调整 3D 打印机的相关参数和配料,进行打印,最终完成打印。

在 3D 打印过程的主要参数有：层高 0.2 mm，壁厚 1.2 mm,打印速度 50 mm/s(根据实际情况调整)，喷头温度 210 ℃(温度变化在 10 ℃左右),热床温度 50 ℃,打印材料的直径 1.75 mm,回丝最小移动距离 1.5 mm,回退速度 50 mm/s,初始层厚 0.3 mm,支撑类型为线性支撑,支撑角度 30 ℃,等等。根据打印模型的实际情况和模型的质量要求，可适当调整 cura 切片软件中的个别参数。参数的设置对打印模型的质量起着决定性的作用,所以在打印过程中要仔细观察、积极思考并结合实际不断修改,以求得完美的模型质量。另外,本实验在 cura 切片后主要使用极光尔沃 3D 打印机进行打印。其中基本参数有：成型平台尺寸 350 mm×250 mm×300 mm，喷嘴直径 0.4 mm,打印速度 10~150 mm/s(可调节)，打印精度 0.05~0.30 mm，定位精度 XY 轴。其原理在于将特定塑料制品打印丝线通过加热融化由喷头喷出，将已设定好的模型分层打印，打印材料会堆积黏结，之后最终成型，从而得到晶体结构模型。

3D 打印晶体结构的技术路线如图 1 所示。

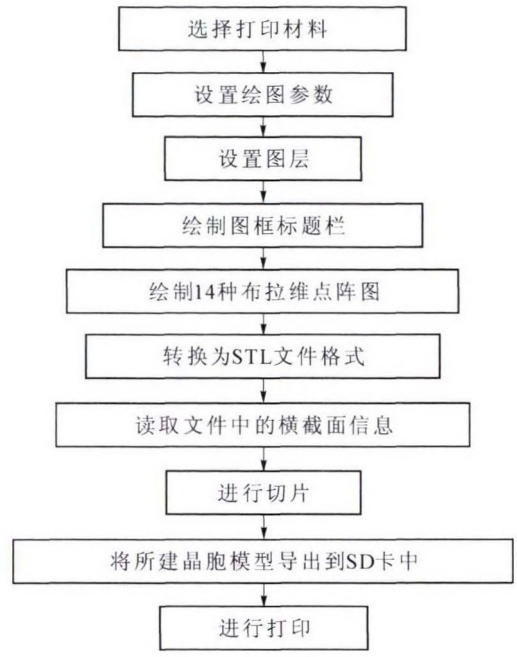


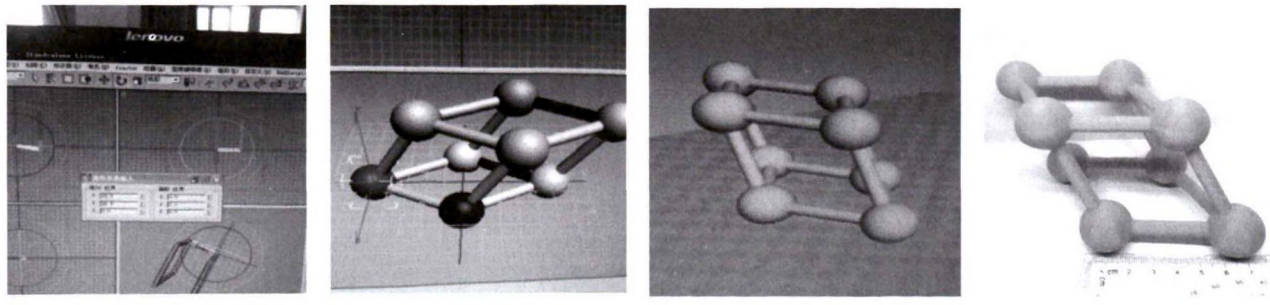
图 1 技术路线
Fig.1 Technical route

2 打印结果与分析

采用 auto 3DMax 软件建立建模过程如图 2 (a),(b)所示,建立模型之后对其切片,输入到 3D 打印机中进行打印,如图 2 (c),(d)所示,最后打印出的七大晶系的晶体结构如图 3(a)-(g)所示。

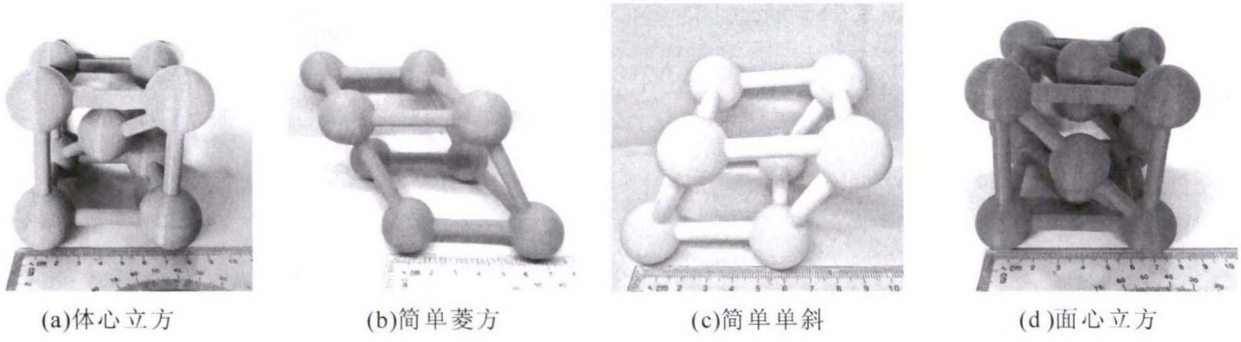
在模型打印过程中,会出现斑点疤痕、错层、拉丝垂料、过热、打印耗材无法粘贴在工作台上等问题,在摸索过程中找到如下解决方案。

错层:多数 3D 打印机使用开环控制系统,因此不能实时反馈喷头实际位置。采用步进式电机控制打印机的喷头进行移动到固定位置，如果出现了问题,打印机无法及时发现错误,因此有可能造成喷头移动太快或机械或电子问题,出现明显错层,如图 4 (a)所示,这一类缺陷可以通过操作人员多观察,及时发现问题,及时解决问题。

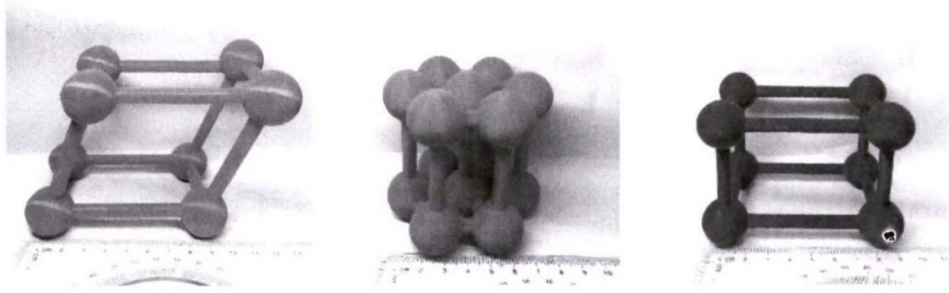


(a)3DMax “STL” 模型建模　(b) 3DMax “STL” 模型建模　(c)切片　(d)完成模型

图 2 3DMax “STL” 模型建模切片完成模型
Fig.2 3DMax “STL” modeling Slicing Completing model



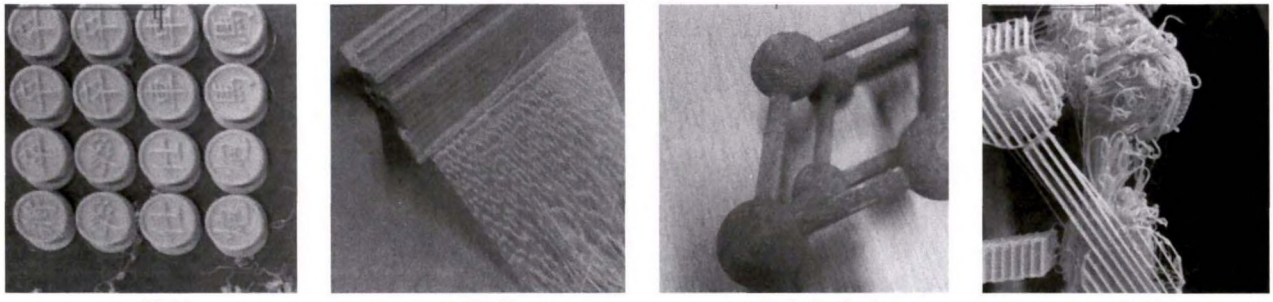
(a)体心立方　(b)简单菱方　(c)简单单斜　(d)面心立方



(e)简单三斜　(f)简单六方　(g)简单四方

图 3 3D 打印的模型

Fig.3 Models for 3D printing



(a)错层　(b)拉丝　(c)斑点和疤痕　(d)拉丝

图 4 打印过程中模型中出现缺陷

Fig.4 Defects in 3D printing models

拉丝或垂料：一个模型通过 3D 打印机打印，打印件的表面残留细小的细丝线，这种情况就是拉丝现象，如图 4(b)、(d)所示。解决这个问题通常的方法是在切片软件上调整“回抽”参数，要确认回抽已经开启了，可以点击“修改切片设置(Edit Process Settings)”，打开“挤出机(Extruder)标签页”，确认你的每个挤出机，都开启了回抽选项。

斑点和疤痕：3D 打印过程中，当挤出机移动到不同位置时，首先停止然后开始挤出，因此挤出机在运行时，能产生一致的挤出线，每次挤出机停止直至挤出结束，下一个挤出点再次开始，两个动作之间会出现微小的差异。因此，在 3D 打印件外壳上，经常发现一些细小的痕迹，如图 4(c)所示这些痕迹就是挤出开始的区域。这一类缺陷可以通过增加模型表面密度的参数得到改善。

诸如此类的模型质量[9]问题还有许多，需要我们在打印过程中仔细观察、查阅资料找出解决办法。

3 结论

本项目的重点是采用 3D 打印技术模拟和仿真金属的晶体结构，打印出能够表征晶体结构特征的小型、直观、经济的金属晶体结构模型。本项目中最关键的是掌握 3D 打印技术，并且将其应用到教学和学习当中势在必行，在整个策划、实施、建模、完成晶体打印模型的过程中，时刻都要积极思考，将理论完美的运用于实际，善于观察，发现问题、解决问题、反思问题并且从中获取经验。真正意义上将理论运用于实践，将 3D 打印出来的小型金属晶体模型应用到教学中，充分实现教学与实际相结合，促进金属材料工程的教学，进一步推进了材料科学与工程专业的发展。同时，学生学习了计算机建模技术，掌握了 3D 打印技术的操作技巧，确定合理的加工工艺流程，制备出能够精确表征微观结构的金属晶体结

构模型。此项目不仅充分锻炼了学生的动手能力，也激发了学生学习专业基础课的热情，真正实现三维教学，实现现代化创新模式的教学。

参考文献：

[1] 刘嘉和，徐铭作，何懿琳，等. 3D 打印技术的研究现状及发展趋势[J]. 科技传播，2018，10(3):104-107.

[2] 张雨明，吴锐. 我国 3D 打印技术研究及产业化发展现状[J]. 中国材料进展，2018，37(3):237-240.

[3] 谭琛，宋伟奇，谢帮灵. 高校基于 3D 打印技术的模具课程教学策略研究[J]. 模具工业，2018，44(7):65-68.

[4] 伏欣. 国内增材制造(3D 打印)技术发展现状与研究趋势[J]. 中国高新技术企业，2016，24:27-28.

[5] 王玮. 3D 打印技术在艺术设计专业教学的应用与创新——以山东工艺美术学院 3D 打印技术中心为例 [J]. 山东工艺美术学院学报，2018(3):97-99.

[6] 黄心渊. 虚拟现实技术与应用[M]. 北京:科学出版社，2009.

[7] 张昀，徐自亮. 3D Studio MAX R3(上册)[M]. 北京:清华大学出版社，2009.

[8] 赵相伟，靳奉祥. 城市三维建模方法与应用研究[J]. 测绘信息与工程，2009，34(4):11-12.

[9] 杨平华，高祥熙，梁菁，等. 金属增材制造技术发展动向及无损检测研究进展[J]. 材料工程，2017，45(9):13-21.

河北省冀州市华北铸钉铸造工具总厂

冀州市华北铸钉铸造工具总厂座落于河北省冀州市城南白庄工业区，紧靠全国大动脉京九、石梅铁路，交通十分便利。我厂是生产铸顶（泥芯撑）、羊毛掸笔、硬扫笔、圆水笔的专业厂家。建厂36多年来,技术设备先进，产品销往全国各地,深受用户欢迎。本厂始终承诺：诚信至上，守信誉,质高价低，实行三包，交货及时，代办发运，可供图订做。热情欢迎国内外来人来电选购。

四同

同类产品比质量　同等质量比价格
同样价格比服务　同等服务比速度

两免

免费为客户提供产品技术咨询
免费为客户提供初期试用产品

一、常用修造工具规格（材质为不锈钢或弹簧钢）

/mm

名称	型号	规格	名称	型号	规格	名称	型号	规格	名称	型号	规格
刮刀	2#	160×45	秋叶	1#	180×30	三角光子	2#	50×30	东北压钩	1#	270×50
尖刮刀	3#	140×35	单头钢批	2#	240×22	蛋圆光子	1#	75×50	圆型钩	2#	200×30
提钩	2#	350×15	单头钢批	3#	210×20	压钩	1#	270×50	长把压钩	1#	220×30
提钩	4#	300×10	法兰钩	1#	270×14	压钩	2#	240×45	柳叶钩	1#	240×40
钢批钩	1#	280×16	榔头铲	1#	240×24	单齐压钩	2#	240×45	单开提钩	2#	320×12

二、掸笔、硬扫笔：20～120 mm 10个品种；圆水笔：12～17 mm 3个品种；
三、铸顶（芯撑）有圆、方、长方形，单、双、多柱、异形铸顶等各种铸铁、铸钢用铸顶材质为A3或A3F，表面镀锌、镀锡等；
四、过滤网、木型工具、皮风箱、铸尺、百叶轮、角磨片、树脂油、固化剂、粘结剂、木型锤等。

图中从左至右依次为：1.刮刀 2.尖刮刀 3.压勺 4.单齐压勺 5.提钩 6.单头钢批 7.秋叶 8.单开提钩 9.法兰钩 10.钢批钩 11.掸笔、扫笔 12.圆水笔 13.铸顶

诚征各地代理商

厂址：河北省冀州市城南白庄工业区（053200） 联系人：白英韩 13831863803 白其水 13582484193（中国农行金穗卡，户名：白英韩 卡号：9559982130332490310）
电话/传真：0318-8682135 网址：www.hbzhz.com E-mail:hbbyh@hbzhz.com 银行汇款：冀州市华北铸钉铸造工具总厂 开户行：市中行 帐号：100148643069

经销处
哈尔滨市铸材门市部 13831863803　包头市铸材经销处 13633184318
杭州市中亚铸材有限公司 13932860882　贵阳市忠信铸材公司 13831888322
长沙市铸材办事处 13831823340　西宁市铸材办事处 13931810511
上海市铸材办事处 13932894585　南宁市铸材办事处 0771-8994686

本单位为一般纳税人，增值发票税率17%。