第21卷 第2期
2007年6月

高 压 物 理 学 报
CHINESE JOURNAL OF HIGH PRESSURE PHYSICS

Vol. 21, No. 2
June, 2007

文章编号：1000-5773(2007)02-0136-09

纳米陶瓷粉末在爆炸压实过程中的破碎行为研究*

张越举，李晓杰，闫鸿浩，曲艳东，陶玉雄

（大连理工大学工程力学系，工业装备结构分析国家重点实验室，辽宁大连 116024）

摘要：在爆炸压实过程中，纳米颗粒所受冲击载荷发生显著变化的时间远远大于应力波传过颗粒特征长度所用时间；同时，陶瓷颗粒在爆炸冲击过程中主要表现为脆性。基于以上两个事实提出了弹性假设，推导了颗粒在压实过程中的受力状态。回顾了判断脆性材料破坏的三个准则，即 Hugonoit 弹性极限、动态屈服强度和理论剪切强度，并从这三种判据的交集值出发来判断爆炸压实过程中陶瓷颗粒是否有发生破碎的可能。通过具体计算得出颗粒内存在两个最大剪应力的位置：一个位置发生在距颗粒接触面 0.5 nm 范围以内，此处剪应力最大；另一个位置发生在距接触面较远处。这一结果为解释陶瓷粉末颗粒在爆炸压实过程中存在塑性行为和破碎行为提供了理论依据。

关键词：纳米陶瓷粉末；爆炸压实；破碎判据；脆性破坏

中图分类号：O346.1　　**文献标识码**：A

1 引 言

陶瓷粉末的爆炸压实一直被认为是获得特殊性能陶瓷块体的理想工艺途径，尽管很多研究者在实验中得到了性能比较满意的结果[1-5]，并且都指出在压实过程中陶瓷颗粒存在着破碎行为，但是破碎的机理却很少有人进行过专门研究。Prummer[6]在研究爆炸压实纳米三氧化二铝陶瓷粉末时指出，爆炸压实压力为 8 GPa 时，三氧化二铝能被压实到 100％的密度，但是并没有进行理论方面的阐述。关于陶瓷粉末材料的爆炸压实的理论研究一直以来都是一个难点，这主要是因为粉末材料在爆炸压实过程中的行为是非连续的，颗粒间存在着复杂的相互作用，同时因为过程的瞬时性而使得问题的求解更加困难。Zhang 等[7]应用微观力学(Micromechanics)研究了多晶陶瓷在经受高局部应力作用下以微塑性为变形机理的可能性。研究中涉及到由 2-D Voronoi 多晶建立的陶瓷微观模型和用 Eshelby 方法归纳的平面应变和对依赖压缩的非线弹性及不依赖于应变率的塑性晶体构成模型。假定微塑性来源于基面滑移和基面与棱面的共同滑移。并通过数值计算从理论上证明了爆炸压实过程中陶瓷颗粒存在微观塑性行为。尽管 Zhang 等[7]提出：冲击压实陶瓷变形是由微塑性或者微塑性和微断裂形成的，但在其研究的过程中还是避开了陶瓷颗粒的微观破碎行为。

陶瓷在高加载率条件下的破坏行为很早就引起了人们研究的兴趣[8-10]，但是大多数的研究都集中在研究陶瓷材料的宏观尺度上的破坏行为，或者说主要集中在裂纹的形成、扩展以及并发导致的过程上[11-12]。最近 Mamalis[13]和 Meyers[14]等对粉末爆炸压实的微观机理进行了归纳总结，但都没有给出陶瓷颗粒在压实过程中破碎的力学机理。随着粉末材料制备技术的发展，纳米级的陶瓷粉末作为生产高技术陶瓷材料的原料已经成为现实，但是制备具有一定的微观结构和尺度水平的陶瓷块体却非常困

* 收稿日期：2006-07-16；修回日期：2006-10-13
基金项目：国家自然科学基金(10572034)；辽宁省自然科学基金(20042161)
作者简介：张越举(1974—)，男，博士，主要从事纳米陶瓷粉末的爆炸压实与烧结研究. E-mail：zhangyueju2002@sina.com

难。因此,研究纳米陶瓷粉末颗粒在爆炸压实过程中是否存在破碎和微观塑性行为成为解决爆炸压实制备纳米陶瓷块体的理论需求。本研究的目的是为爆炸压实条件下的纳米陶瓷粉末颗粒存在破碎和塑性行为找到理论依据,为此本文第 2 部分通过研究爆炸压实条件下陶瓷粉末颗粒的受力环境,提出颗粒之间相互作用的力学模型,推导出颗粒内部的受力状态;第 3 部分提出判断高压条件下的纳米陶瓷颗粒破碎的判据;第 4 部分进行分析与讨论,并对纳米陶瓷颗粒在爆炸压实过程中的塑性行为给出理论解释。

2　高压条件下纳米陶瓷颗粒的破碎

2.1　应力波传播与问题的定性

一切固体材料都是具有惯性和可变形性,当受到随时间变化着的外载荷的作用时,它的运动过程总是一个应力波传播、反射和相互作用的过程。在忽略了介质惯性的可变形固体的静力学问题中,只是允许忽略或没有必要去研究这一在达到静力平衡前的应力波的传播和相互作用的过程,而着眼于研究达到静力平衡后的结果而已。在忽略了介质可变形性的刚体力学问题中,则相当于应力波传播速度趋于无限大,因而不必再予考虑。对于冲击载荷条件下的可变形固体,载荷已经发生了显著变化,甚至与作用完毕所用时间相比应力波传过物体特征长度所需时间是同量级或更低量级的时间尺度,在这种条件下,可变形固体的运动过程常常正是需要关心的,因此就必须考虑应力波的传播过程[15]。

根据以上观点来考察爆炸压实条件下接触颗粒之间的相互作用,以及其对颗粒应力分布及其破碎行为的影响。在爆炸压实陶瓷粉末过程中,冲击波压力在粉末体中存在一个上升过程,其达到最大值的时间大概需要 0.1 μs[10,16],而冲击波在颗粒中的传播速度大于密实材料的理论声速。在没有实验数据的条件下,密实材料的理论声速可以通过几个材料参数近似按照以下方式进行估算。

按照汤文辉等[17]给出的比热表达式

$$c_V = \frac{a_V c^2}{\gamma(1 + a_V \gamma T)} \tag{1}$$

式中:c_V 为比热,a_V 为线膨胀系数,γ 为 Grüneisen 系数,c 为声速,T 为温度。

一般陶瓷材料的热膨胀系数的量级为 10^{-6},另外,一般的固体材料的 γ 值在 1.5～2.0 之间。可以看出,在一定温度范围内,$a_V \gamma T$ 项对声速的影响不大,可以忽略。这样,声速可以近似表示为

$$c = \sqrt{\gamma c_V / a_V} \tag{2}$$

由实验测得 ITO 烧结靶材的线膨胀系数为 7.18×10^{-6}/K,c_V=330 J/(kg·K)[18],取 ITO 的 γ=1.5。则由(2)式计算得:c=8 300 m/s。

因此,对于颗粒直径尺寸为 d=100 nm 的 ITO 球形颗粒,冲击波穿过颗粒所需要的时间大概在 10 ps量级。假设冲击波在颗粒边界上反射的过程所需时间可以忽略不计,则在冲击压力上升的过程中,冲击波将在颗粒内反射达到 10^4 次。极短的时间内冲击波在颗粒内部的多次反射使得其内部应力场处于均布状态。因此,可以将接触颗粒间的相互作用视为准静力状态。

2.2　力学模型

将陶瓷颗粒看作大小相同的球体,以密排堆积方式简化为二维模型如图 1 所示。并作如下假设:

(1) 假设陶瓷颗粒在爆炸冲击过程中塑性变形可以忽略,在发生破碎之前可以看作完全弹性球粒,并且颗粒内部为理想均匀材料。

(2) 假设冲击波的压力作用首先到达颗粒 A,在 A 的上表面均匀分布着冲击压力 p,此时冲击波压力作用对于下面的两个颗粒还没有作用,由于惯性作用,B、C 两个颗粒没有发生位移并承受着来自颗粒 A 的压力作用。在这种时刻,可以将颗粒间的作用简化为两个球体之间的接触压力的问题进行分析。

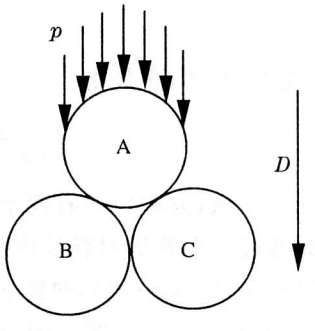


图 1　颗粒间的相互作用示意图

Fig. 1　Schematic of interaction between particles

(3) 由于考虑到颗粒间摩擦力对颗粒内部应力分布的影响比较复杂,这里假设颗粒间只有挤压没有相互摩擦作用。

(4) 考虑到冲击波特征长度(微米量级)范围内包含的粉末颗粒数量极大,以及冲击波在粉末坯体中的速度远大于应力波在陶瓷颗粒中的传播速度,因此忽略侧向约束对颗粒受力状态的影响。

按照弹性力学解[19],两个弹性球体相互作用时,其接触点将由于受到压力而变形,从而点接触变为面接触。接触面为一个圆形面,其半径 a 为

$$a = d[3\pi p(1-\nu^2)/32E]^{1/3} \tag{3}$$

式中:d 为颗粒的直径;p 为作用在颗粒表面的冲击压力;ν 为泊松比,E 为弹性模量。

两颗粒间的最大接触压力 N_0 发生在接触面的圆心,其值为

$$N_0 = \frac{3(d/2)^2 p}{2a^2} = \frac{3p}{8}\left[\frac{3\pi p(1-\nu^2)}{32E}\right]^{-2/3} \tag{4}$$

由(4)式可以看出,颗粒上受到的最大接触压力与颗粒的大小无关。

2.3 最大剪应力位置

由于两球体相同,可取上面一个球体作为研究对象。将 z 轴放在两球体中心的连线上,将坐标原点取在接触面的中心,且方向指向球心(图 2 所示)。由文献[19]可知,球体内的应力状态为

$$\begin{cases}\sigma_z = -\dfrac{3z^3}{2\pi}\displaystyle\int_0^a \frac{2\pi r\mathrm{d}rN}{(r^2+z^2)^{5/2}} \\ \sigma_r = \sigma_\theta = \dfrac{1}{2}\displaystyle\int_0^a\left[\frac{(1-2\nu)z}{(r^2+z^2)^{3/2}} - \frac{3r^2 z}{(r^2+z^2)^{5/2}}\right]Nr\,\mathrm{d}r\end{cases} \tag{5}$$

式中:N 为接触面内的接触压力载荷。根据赫兹假设,其为接触面半径的函数

$$N = N_0(1-r/a) \qquad 0 \leqslant r \leqslant 1 \tag{6}$$

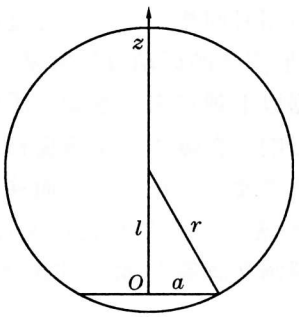


图 2 颗粒受力分析坐标示意图

Fig. 2 Schematic of coordinate in particle

将(6)式代入(5)式积分得到

$$\begin{cases}\sigma_z = N_0\left(\dfrac{z}{\sqrt{a^2+z^2}} - 1\right) \\ \sigma_r = \sigma_\theta = \dfrac{(1+\nu)zN_0}{a}\left[\ln\left(a+\sqrt{a^2+z^2}\right) - \ln z\right] - \dfrac{N_0}{2}\left(1+2\nu+z/\sqrt{a^2+z^2}\right)\end{cases} \tag{7}$$

由第三强度理论,剪应力表示为

$$\tau = \frac{1}{2}(\sigma_\theta - \sigma_z) = \frac{1}{4}N_0\left[1-2\nu-\frac{3z}{\sqrt{a^2+z^2}} + \frac{2z(1+\nu)}{a}\ln\left(1+\frac{\sqrt{a^2+z^2}}{z}\right)\right] \tag{8}$$

最大压应力发生在接触面的中心,其值为 N_0;最大剪应力发生在两球体中心的连线上。求最大剪应力大小的问题,归结为求

$$\frac{\partial \tau}{\partial z} = 0 \tag{9}$$

将(8)式代入(9)式,化简得

$$\frac{z^3 + a^2 z - 3a^3}{(a^2+z^2)^{3/2}} - \left(1 + \ln\frac{z}{z+\sqrt{a^2+z^2}}\right) = 0 \tag{10}$$

对于不同的 a 值,方程(10)有两个不同的实数解。将所求解带入(8)式得到两个不同的剪应力。

下面通过一个算例对颗粒内应力分布进行分析:对于 Al_2O_3,弹性常数 $E=402$ GPa,$\nu=0.233$[20],取 $c_V=708.64$ J/(kg·K),热膨胀系数取 8.8×10^{-6}/K[21],Grüneisen 系数 γ 取 1.5[21],并取纳米粉末颗粒 $d=100$ nm。由(2)式得到 Al_2O_3 的声速为 $c=10\,991$ m/s。这个声速的量级与 Grady [16]所采用的值基本一致。按照不同的冲击压力,利用(3)式求得最大接触面半径,然后利用(10)式求得最大剪切应力出现的坐标 z 值,再代入(8)式求得最大剪切应力。所得结果如图 3、图 4 所示。由图 3 和图 4 可以

看出，100 nm 三氧化二铝粉末颗粒在爆炸冲击压实中由于颗粒间挤压，在颗粒内部出现了两个最大剪应力：一个较小剪应力出现在相互挤压接触面不到 1 nm 的深度范围，而另一个则随着冲击压力的增大迅速向颗粒内部更深处发展。两个剪应力的值都随着冲击压力的增大而增大。

研究表明，纳米颗粒随着尺寸的减小，表面原子的比率迅速增大，表面原子数目的变化必然会影响到颗粒整体的力学性能，但力学性能仍然服从 Hall-Patch 规则[22]，即强度、韧性和塑性等性能会有所变化。这种变化可能会导致力学参数如 E、ν 之间的耦合关系，但这种复杂的情况目前还没有人进行研究，在此无法涉及颗粒尺寸变化引起的性能变化方面的内容。从以上建立的力学模型看，只要确定了 E、ν 与 d 的关系，就能通过所推导的公式确定最大剪应力发生的位置，进而预报破坏发生的可能。

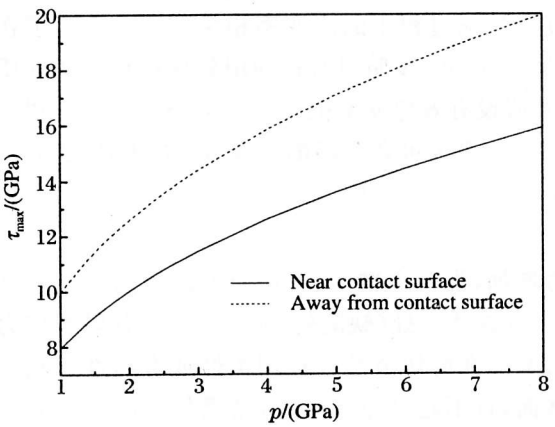


图 3　冲击压力与颗粒内最大剪应力关系

Fig. 3　The relation between shock pressure and the maximal shear stress in particles

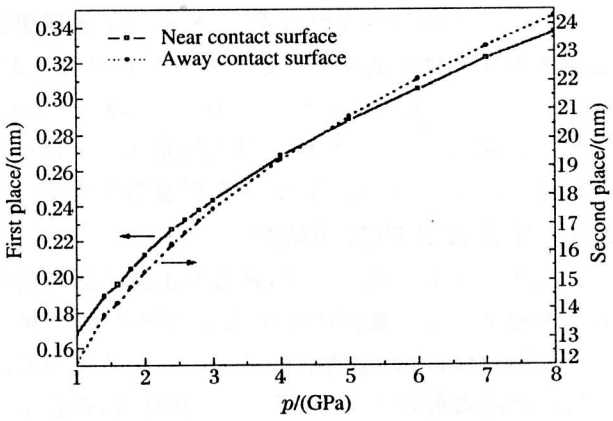


图 4　冲击压力与最大剪应力位置关系

Fig. 4　The position relation between shock pressure and the maximal shear stress in particles

3　纳米陶瓷颗粒的剪切破坏

陶瓷的破坏强烈地依赖于其受力状态，并且横向限制在破坏的发展中起着重要的作用。事实上，宏观尺度上的陶瓷能够承受很高的压力而在很低的拉应力条件下就发生了断裂破坏。究其原因，主要是宏观尺度的陶瓷材料内包含着宏观裂纹，在外力作用下裂纹受到激发启动，裂纹扩展、并发展到穿透整个试件而导致材料破坏[11-12]。根据断裂力学的能量理论，由于陶瓷材料的脆性性质，在裂纹尖端很难形成塑性区域，因此在裂纹发展过程中消耗在塑性变形上的功相对于金属等塑性材料来说要少的多，且塑性功远远大于裂纹扩展形成新表面的表面能，即 $\gamma_p \gg \gamma_s$。因此，对于宏观的陶瓷来说，很难经受大的拉伸应力而不破坏。陶瓷表现为脆性的根本原因是陶瓷的化学键组成性质，即陶瓷材料是由离子键和共价键组成，这两种化学键都表现出强烈的方向性。这种化学性质使得陶瓷材料很难在某个方向产生滑移，因此陶瓷具有很高的弹性模量，比较低的泊松比。关于陶瓷材料的破坏研究，在宏观上主要集中在已存在裂纹失稳扩展而导致的破坏上。而在陶瓷颗粒小到纳米量级时，由于颗粒本身尺寸很小，内部容纳微裂纹的可能性减小。但是颗粒内部晶粒之间的结合并不是完美的，必然存在着诸如位错、堆垛层错、孪晶、三角晶界等微观缺陷。这些缺陷在应力达到临界破坏状态时，必然引起颗粒发生破碎。

在冲击压缩条件下，Hugoniot 弹性极限(Hugonoit Elastic Limit)一般在 10～25 GPa 范围内。关于 Hugoniot 弹性极限有两种值得注意的争论，一种认为它是断裂(粉碎)的起始点，另一种认为它是塑性变形的起始点[23]。研究爆炸冲击条件下颗粒的破碎行为，不能直接套用研究宏观材料在爆炸冲击条件下的行为特性，这是因为宏观材料的行为是大量微观结构行为的统计体现。宏观行为掩盖了微观行为的特点和与之不同的发展过程，因此必然会引起很大的误差。

3.1 脆性材料的动态强度

Rosenberg 将 HEL 应力 σ_{HEL} 与动态屈服 Y_d 联系起来，给出如下关系式[16]

$$Y_d = \frac{(1-2\nu)^2}{1-\nu}\sigma_{HEL} \tag{11}$$

Hugoniot 弹性极限 σ_{HEL} 可以通过材料基本性质参数并假设在冲击压实过程中达到脆性破碎，其表达式为

$$\sigma_{HEL} = 12\frac{1-\nu^2}{(1-2\nu)^2}(6\rho^2 c^3 \gamma_s \dot{\varepsilon})^{1/3} \tag{12}$$

式中：ν、ρ、c、γ_s 和 $\dot{\varepsilon}$ 分别为材料的泊松比、密度、声速、自由表面能和应变率。

由(11)式和(12)式可以看出，材料的动态屈服强度与压缩过程中的应变率相关。这也体现了在高加载率条件下材料的应力状态与材料的惯性相关的事实。Grady 按照(12)式利用氧化铝材料的性质参数：$\nu=0.23$，$\rho=4000\ \mathrm{kg/m^3}$，$c=10^4\ \mathrm{m/s}$，$\gamma_s=5\ \mathrm{J/m^2}$，并假设有效应变率范围在 $10^5\sim10^6\ \mathrm{s^{-1}}$ 内，得到三氧化二铝的 Hugoniot 弹性极限大约是 $\sigma_{HEL}=14\sim30$ GPa。更为可靠合理的值在 6～12 GPa 之间。因此按照(11)式，三氧化二铝的动态屈服强度为 $Y_d=5.2\sim11.0$ GPa 范围内。

3.2 冲击波头的剪切破坏

压坯在冲击加载过程中，随着冲击波头区域的压力增加，强度也增加，剪切应力最后达到超过材料的临界强度。应力被固体中微观缺陷增强(加工硬化)。在这些点处(缺陷处)非弹性变形伴随着应力松弛，将导致材料内大量的剪切破坏。冲击波头内缺陷的非弹性剪切滑移过程用柔性或者脆性识别。柔性滑移便随着剪切运动，在这个运动中位错垂直于滑移面，且不超过原子尺度，结果材料的内聚力被保留了下来。相比而言，脆性滑移(或者剪切破坏)包含了材料点在数个原子尺度上的垂直分离。材料的内聚力丧失，引入了无应力自由表面。在宏观尺度上，冲击波头区域内剪切破坏过程的一个合理的物理模型如图 5 所示。图 5 表明，应力波在固体中向左传播。在弹性波左边的材料没有被干扰。而右边的材料由于冲击波的作用被压实了。剪切裂纹孕育和形成发生在破坏蔓延阶段(应力上升阶段)，剪切断裂和非弹性破碎在应力达到 Hugoniot 应力状态后完成。

以上的宏观物理模型提供了一个研究颗粒在爆炸压实过程中产生破碎密实过程的基本依托，即爆炸压实过程中存在着剪切破坏过程，且发生在应力上升阶段，完成于应力达到 Hugonoit 应力状态。很显然，在由大量陶瓷粉末颗粒组成的压坯中存在着很多孔隙，压实的过程中不仅仅包含着颗粒整体的“流动”过程，即整体发生平移和旋转过程，而且在相互挤压和极高加载率引起的惯性效应作用下，陶瓷颗粒内部的应力将达到很高水平。根据前面按照弹性球体挤压模型计算结果可以看出，颗粒内部存在着两个相对最大剪应力。虽然大量的研究认为，任何材料无论尺度多小都存在着裂纹或者更准确地说存在着缺陷，这些缺陷的存在极大地降低材料抵抗破坏的能力，但是当尺度小到纳米尺度时，材料内包含的缺陷(降低强度意义上的)概率必将显著减少，但内部引起裂纹产生的缺陷概率到底会有多大还没有人专门进行过研究。考虑到这种研究在目前实验和认识水平上的限制，以及我们所关心的是纳米陶瓷颗粒发生破碎的应力水平量级

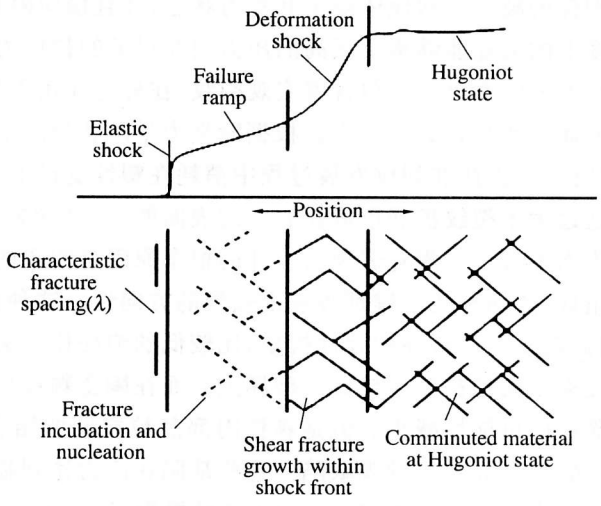


图 5 冲击波头区域内典型的陶瓷(氧化铝)冲击压实剖面图和脆性剪切过程示意图[14]

Fig. 5 Represntative shock compression profile in ceramic (aluminum oxide) and schematic of brittle shear fracture process within the shock-wave front[14]

而非精确数值,因此选择避开探讨纳米陶瓷颗粒内部缺陷(裂纹)的数量、形态以及分布研究,而直接认为纳米陶瓷颗粒为均匀的理想材料。颗粒是否发生破碎破坏的标志为颗粒内部最大剪应力水平是否达到材料的理论剪切强度。

3.3　陶瓷的理论剪切强度

尽管在爆炸压实条件下陶瓷材料的破坏是由多种原因造成的,材料破坏的根本原因却只有一种情况,那就是构成材料的原子之间的强烈结合被破坏,相互以化学键结合的原子分离,最终形成了自由面上的原子。基于这样的认识,文献[16]给出了估算理论剪切应力的一个简便推导过程。具体思路如下。

首先按照晶体发生滑移时的一种可能方式,提出原子之间的排列方式,如图 6(a)所示,当受到的剪应力达到一定水平时,其中一个原子面沿着另一个相邻的原子面被剪切。对于理想晶体,假定原子直接位于另一个原子的上面,原子面间的距离为 d。显然,如果原子被移动,应力将形成并具有一个最大值。当位移 u 值达到 $b/2$,也就是在中剪切位置(图 6(b)),原子完成全部位移($u=b$)和返回到其初始位置的能力相同。在这一平衡点处,应力回复为零。当位移大于 $b/2$ 时,原子将在原子间势能的作用下被"吸引"到新的位置,相应地,应力变为负值。这里的最大应力 τ_{th} 称为理论剪切强度。对应力-位移函数具体细节的描述需要了解原子间的相互作用势能,但是为了简便起见,假设势能可以近似地用一个正弦函数来描述,如图 7,即

$$\tau = \tau_{th}\sin\left(\frac{2\pi u}{b}\right) \tag{13}$$

在这种情况下,理论剪切强度对应的位移为 $u=b/4$。在位移值较小的情况下材料是弹性的,因此胡克定律可以用来描述这一区域的应力-位移关系。考虑到在小角度条件下 $\sin x \approx x$,而剪应变等于 u/d,可以得到

$$\tau = \tau_{th}\left(\frac{2\pi u}{b}\right) = \frac{Gu}{d} \tag{14}$$

式中:G 为剪切模量。对(14)式进行整理得到

$$\tau_{th} = \frac{Gb}{2\pi d} \tag{15}$$

在上面的推导过程中没有考虑剪切模量的各向异性。对于由多晶组成的陶瓷纳米颗粒来说,剪切模量的各向异性并不明显。当材料的 $b \approx d$ 时,可以得到 $\tau_{th} \approx G/6$。应当指出,采用正弦函数仅仅是一个近似。更复杂的计算得到的理论剪切强度值在 $G/10$ 和 $G/30$ 之间。对于三氧化二铝陶瓷材料来说,α-Al_2O_3 的剪切模量为 $G=163$ GPa[20]。因此对于 α-Al_2O_3 来说,理论剪切强度 τ_{th} 应处在 5.4～16.3 GPa之间。

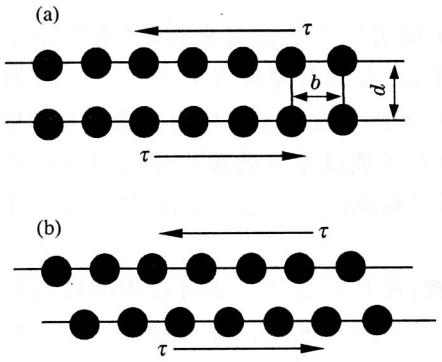


图 6　理想晶体中两个原子面的剪切变形
((a) 原子的初始(平衡)位置;(b) 剪切位置)

Fig. 6　The shear deformation of the two atomic surfaces in perfect crystal
((a) Original (balance) position of atomics; (b) Mid position in shear condition)

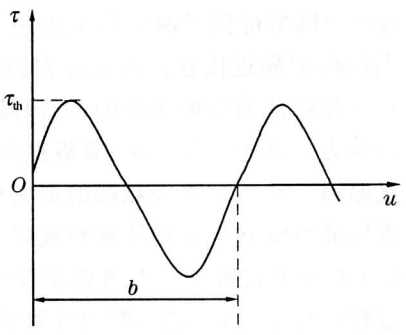


图 7　理想晶体剪切过程中应力变化的正弦假设示意图
(最大值为理论剪切应力)

Fig. 7　The schematic of sine fuction hypothesis for shear stress variation during shear deformation in perfect crystal

4 结果分析

由以上分析可以看出，不管是从冲击 Hugonoit 数据、动态屈服强度出发，还是从更为本质的理论剪切极限应力出发，只要陶瓷颗粒内部的剪切应力达到某一应力水平时，必然要发生破坏，导致冲击压缩过程中存在剪切破碎现象。按照对冲击波头区域内颗粒的受力状态和冲击波头区域宽度特征简化的静态弹性力学模型所计算的结果，对于颗粒尺度为 100 nm 的三氧化二铝陶瓷颗粒，冲击压力为 1 GPa 时，接触面附近和远离接触面的剪应力都已经处在 Hugonoit 弹性极限、超过动态屈服强度以及处在理论剪切应力范围内；当冲击压力上升到 8 GPa 强度时，两个最大剪应力都已经超过了理论剪切应力和 Hugonoit 弹性极限。从图 4 可以发现，靠近接触面的最大剪应力位置一直处在 0.5 nm 尺度以下，而远离接触面的最大剪应力位置则随着冲击压力的增加迅速向颗粒内部发展。由于晶界的厚度在 0.5～1.5 nm[25-27]范围，且晶界的结构不像晶体内部那样严格，所以在这个区域内的最大剪应力有可能就是导致陶瓷粉末颗粒在爆炸压实过程中产生塑性行为的直接原因，它将导致颗粒间相对滑动，伴随着颗粒的破碎，使得破碎后的颗粒进入孔隙之中。对于远离接触面的最大剪应力，当剪切应力达到了颗粒破碎的临界条件，将大大增加在发生最大剪应力的位置形成裂纹并扩展导致颗粒破碎的可能。很显然，冲击压力越大，远离接触面的剪应力的位置越深入颗粒内部，颗粒破碎后的平均尺寸将越均匀，破碎的效果越明显。当大量的颗粒发生破碎后，碎块随着冲击波引起的质点惯性作用流进孔隙，将使得压坯更容易达到较高的压实密度。

5 结 论

(1) 在爆炸压实条件下，陶瓷粉末颗粒经受着一个复杂的受力过程。由于载荷发生显著变化的时间远远大于应力波传过纳米颗粒特征长度所用时间，因此纳米陶瓷粉末爆炸压实的微观破碎行为和微观塑性行为可以利用弹性力学的假设来进行研究。本研究主要集中在陶瓷粉末在经受第一道冲击波的情况下，研究颗粒间相互作用引起的颗粒内部的应力状态。根据陶瓷材料的脆性特点，利用弹性力学推导得出了最大剪应力及其发生的位置关系。

(2) 纳米陶瓷粉末的破碎条件与宏观陶瓷材料的破碎有着本质的区别。宏观陶瓷材料的破碎研究主要集中在材料内裂纹的失稳、扩展到裂纹合并所导致的破坏，而纳米陶瓷粉末由于尺寸太小，内部容纳的裂纹数量有限，所以判断纳米陶瓷粉末在冲击压缩过程中是否发生剪切破碎不能简单地根据宏观材料的冲击特性来判断。本研究在破碎判据上回顾了判断脆性材料的三个判断准则，即 Hugonoit 极限、动态屈服强度和理论剪切强度，并从这三种判据的交集值出发来判断爆炸压实过程中陶瓷颗粒是否有发生破碎的可能。

(3) 由所建模型得到了两个最大剪应力，并且从这两个应力发生的位置来看，尽管冲击压力达到 8 GPa高的强度，但靠近接触面的剪应力仍处在 0.5 nm 以下，而晶界的厚度在 0.5～1.5 nm 范围。由于晶界结构往往被认为是玻璃态的，不像晶体内部那样严格，所以处在这个区域内的原子具有发生大的塑性变形的能力。因此可以推断，靠近接触面的最大剪应力有可能就是导致爆炸压实过程中产生塑性行为的直接原因。对于远离接触面的最大剪应力，如果达到了颗粒破碎的临界条件，则会在发生最大剪应力的位置形成裂纹并扩展导致颗粒破碎。

(4) 由于在研究过程中没有考虑颗粒间的相对滑动摩擦，而且对爆炸压实过程中的颗粒复杂的受力及运动过程进行了简化，这必然会导致结果存在误差。但是推导出的结论能对爆炸压实过程中颗粒的破碎和塑性行为给出一种可能的解释。更为精确的理论还需要通过考虑更多的复杂条件进行研究。

References:

[1] Djurado E, Boulc'h F, Pivkina A, et al. Cold Isostatic and Explosiveisodynamic Compaction of Y-TZP Nanoparticles [J]. Solid State Ionics, 2002, (154-155): 375-380.

[2] Mamalis A G. Manufacturing of Bulk High-T_c Superconductors [J]. Int J Inorg Mater,2000,2:623-633.

[3] Counihan P J, Crawford A, Thadhani N N. Influence of Dynamic Densification on Nanostructure Formation in Ti_5Si_3 Intermetallic Alloy and Its Bulk Properties [J]. Mater Sci Eng,1999,A267:26-35.

[4] Shang S S, Hokamoto K, Meyers M. A. Hot Dynamic Consolidation of Hard Ceramics [J]. J Mater Sci,1992,27, 5470-5476.

[5] Hokamoto K, Tanaka S, Fujita M, et al. High Temperature Shock Consolidation of Hard Ceramic Powders [J]. Physica,1997,B239:1-5.

[6] Prummer R, Weinor P. Explosive Consolidation of Nanopowders [J]. Interceram,2002,51(6):394-398.

[7] Zhang D, Wu M S, Feng R. Micromechanical Investigation of Heterogeneous Microplasticity in Ceramics Deformed under High Confining Stresses [J]. Mech Mater,2005,37:95-112.

[8] Grady D E. Local Inertia Effects Indynamic Fragmentation [J]. J Appl Phys,1982,68:322-325.

[9] Kipp M E, Grady D E. Dynamic Fracture Growth and Interaction in One Dimension [J]. Phys Mech Solids,1985, 33:399-415.

[10] Schwarz R B, Kasiraj P, Vreeland T, et al. A Theory for the Shock-Wave Consolidation of Powders [J]. Acta Metal,1984,32(8):1243-1252.

[11] Nemat-Nasser S, Deng H. Strain-Rate Effect on Brittle Failure in Compression [J]. Acta Metall Mater,1994,42 (3):1013-1024.

[12] Ravichandran G, Subhash G. A Micromechanical Model for High Strain Rate Behavior of Ceramics [J]. Int J Solids Struct,1995,32(17/18):2627-2646.

[13] Mamais A G, Vottea I N, Manolakos D E. On the Modeling of the Compaction Mechanism of Shock Compacted Powder [J]. J Mater Process Tech,2001,108:165-178.

[14] Meyers M A, Bendon D J, Olevsky E A. Shock Consolidation: Microstructurally-Based Analysis and Computational Modeling [J]. Acta Mater,1999,47(7):2089-2108.

[15] Wang L L. Foundation of Stress Wave [M]. Beijing: National Defence Industry Press,1985:1-2. (in Chinese)
王礼立. 应力波基础 [M]. 北京:国防工业出版社,1985:1-2.

[16] Grady D E. Shock-Wave Compression of Brittle Solids [J]. Mech Mater,1998,29:181-203.

[17] Tang W H, Zhang R Q, Hu J B, et al. Approximation Calculation Methods of Shock Temperature [J]. Advances in Mechanics,1998,28(4):479-487. (in Chinese)
汤文辉,张若棋,胡金彪,等. 冲击温度的近似计算 [J]. 力学进展,1998,28(4):479-487.

[18] Kim B C, Lee J H, Kim J J, et al. Densification of Nanocrystalline ITO Powders in Fast Firing: Effect of Specimen Mass and Sintering Atmosphere [J]. Mater Res Bull,2005,40:395-404.

[19] Xu Z L. Elastic Mechanics(3rd ed) [M]. Beijing: Higher Education Press,1990:283-309. (in Chinese)
徐芝纶. 弹性力学(上)(第 3 版) [M]. 北京:高等教育出版社,1990:283-309.

[20] Geen D J. Introduction of Mechanic Property of Ceramic Material [M]. Translated by Gong J H. Beijing: Qinghua University Press,2003:21. (in Chinese)
Geen D J. 陶瓷材料力学性能导论 [M]. 龚江宏,译. 北京:清华大学出版社,2003:21.

[21] Xi T G. Thermo-Physics Character of Inorganic Materia [M]. Shanghai: Shanghai Science Technology Press,1981: 33-34,214. (in Chinese)
奚同庚. 无机材料热物性学 [M]. 上海:上海科学技术出版社,1981:33-34,214.

[22] Wang L S. Special Ceramic(2nd ed) [M]. Changsha: Centrol South University Press,2005:72-74. (in Chinese)
王零森. 特种陶瓷(第 2 版) [M]. 长沙:中南大学出版社,2005:72-74.

[23] Li D H, Wang W. A Study of the Equation of State of Alumina Ceramics [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics,1993,7(3):226-231. (in Chinese)
李大红,王　悟. 陶瓷物态方程实验研究 [J]. 高压物理学报,1993,7(3):226-231.

[24] Shih C J, Meyers M A, Nesterenko V F, et al. Damage Evolution in Dynamic Deformation of Silican Carbide [J]. Acta Mater,2000,48:2399-2420.

[25] Jiang B, Weng G J. A Theory of Compressive Yield Strength of Nano-Grained Ceramics [J]. Int J Plasticy,2004, 20:2007-2026.

[26] Karch J, Birringer R, Gleiter H. Ceramics Ductile at Low Temperature [J]. Nature, 1987, 330: 556-558.

[27] Kirchheim R, Mutschele T, Kieninger W. Hydrogen in Amorphous and Nanocrystalline Metals [J]. Mater Sci Eng, 1988, 99: 457-462.

Research of Fragmentation of Nano-Ceramic Powders during Explosive Consolidation Process

ZHANG Yue-Ju, LI Xiao-Jie, YAN Hong-Hao, QU Yan-Dong, TAO Yu-Xiong

(*State Key Laboratory of Structural Analysis for Industrial Equipment, Department of Engineering Mechanics, Dalian University of Technology, Dalian* 116024, *China*)

Abstract: In explosive consolidation of nano-powders, the duration in which the loading changed markedly on nano-particles by shock wave is far longer than the time of stress wave propagating through the character length of the particles; and the ceramic powders behave brittleness during explosive shock consolidation. The elastic hypothesis is put forward based on the two facts mentioned above, and the hypothesis is used to deduce the stress status in particles during the process of consolidation. The three criteria of brittleness fracture of damage (Hugonoit elastic limit, dynamic yield strength and theoretical shear strength) are reviewed. The probability of fracture of ceramic particles is estimated by the intersection value of the three criteria. Based on the calculation, it is concluded that there are two maximal shear positions: one is located in the depth of 0.5 nm in particle from the contact surface, where the shear stress is maximum; the other is located further from the surface. This result offers a reference for interpreting the plasticity and fracture during the process of explosive consolidation.

Key words: nanometer ceramic powders; explosive consolidation; fracture criticism; brittle failure