文章编号:1000-5773(2013)03-0461-07

铜在强冲击载荷下的细观力学行为数值模拟*

杨　瑞,王金相,周　楠,彭楚才,谢　君

(南京理工大学瞬态物理重点实验室,江苏南京　210094)

摘要:利用 Voronoi 方法建立了多晶铜的细观几何模型,能够反映晶粒几何形状和晶界的不规则性,基于晶界固连-失效模型反映晶界结合特征,借助 LS-DYNA 非线性有限元程序,从细观角度对爆炸冲击载荷作用下铜的晶粒变形、热沉积行为进行了数值模拟。配合高压熔点理论和晶粒生长理论,从热力学角度分析了晶粒细化的可行性,结合实验结果对晶粒细化进行了定性验证。研究结果表明,通过构建的数值模拟方法,对多晶铜冲击压缩下的晶粒与晶界的变形机制、热沉积进行研究是可行的;晶界处易于形成应力集中现象,塑性变形和由此引起的温升大于晶粒内部;由宏观绝热压缩和由细观畸变引起的整体温升不会引起晶粒的长大。

关键词:冲击动力学;晶粒细化;热力学行为;Voronio

中图分类号:O347.3　　**文献标识码**:A

1　引　言

纳米晶金属块体材料主要指晶粒特征尺寸在 1～100 nm 的三维固体金属材料。与传统粗晶材料相比,纳米晶体材料具备许多优异的性能,如高的屈服和断裂强度、室温超塑性、高延展性、以及优异的疲劳和摩擦磨损特性等[1-5],在很多领域具有广泛的应用前景[6],如在医学领域,纳米晶钛接近于钛合金的强度和疲劳性能,使其可作为关节假体、口腔和牙齿植入物、固定骨伤部位的工具等;在飞机和汽车制造业中,高强度的纳米晶金属丝扣零件可有效解决应力集中对零件的机械、力学性能要求较高的问题;在军事领域,纳米晶金属材料在高温和稳定的细晶组织条件下将产生超塑性现象,故纳米晶铜、钨、钽、钼等重金属及其合金是理想的破甲药型罩的材料,具有较高的军事应用价值。对纳米晶体材料的力、热、光、电、磁等方面的研究成为各学科领域的热点问题[7-9]。

采用爆炸加载的方法使粗晶铜发生高应变率塑性大变形,可使其晶粒细化至纳米量级[10-11],然而在爆炸加载的过程中,材料的整体绝热压缩、冲击载荷下冲击波的耗散都将引起物体的整体绝热温升,细观上,晶粒的变形、晶格的畸变也会引起局部的温度变化,这些因素都对晶粒细化有不可忽略的影响。本研究主要对爆炸加载条件下晶粒尺度的热、力学行为进行研究。采用 Voronoi 程序生成二维微尺度晶粒分布模型,然后以有限元法动态模拟在高载荷和高应变率下粗晶铜颗粒的力学行为和热沉积现象,并且在综合考虑热效应的基础上探讨高应变率大载荷作用下晶粒细化的可行性,最后配合实验的晶粒细化结果对上述分析进行初步验证。

* **收稿日期**:2011-09-14;**修回日期**:2012-01-08

基金项目:国家自然科学基金(10902054,11272158);中国博士后基金(2011M500929);江苏省博士后基金(1101003B);部委技术基础项目(C1820130005)

作者简介:杨　瑞(1988－),男,硕士研究生,主要从事热力学与冲击动力学研究. E-mail:njlg2012@163.com

通讯作者:王金相(1978－),男,博士,副研究员,主要从事爆炸与冲击动力学研究. E-mail:wjx@njust.edu.cn

2 计 算

2.1 多晶材料有限元计算几何模型

采用二维随机 Voronoi 技术生成二维 Voronoi 随机模型[12]：(1) 首先在平面上布下 n 个随机的原始点 $P_1, P_2, \cdots, P_n$，其坐标由均匀分布的随机序列得到，这 n 个点便是 Voronoi 多边形的中心；(2) 选定某一个原始点作为参考点，以该点为起点做与其它 $n-1$ 个原始点的连线，再做这 $n-1$ 根连线的垂直平分线，这些垂直平分线必然相交，构成一些多边形，但是只有那些离参考点最近的垂直平分线围成的多边形才是所需要的，这个多边形内只有一个原始参考点，它不包含任何其它的原始点。重复以上过程，依次用其它 $n-1$ 个原始点作参考点，形成 $n-1$ 个多边形，从而构成一个二维随机结构 Voronoi 网络模型。设在二维 Voronoi 多晶铜材料晶粒中心间的距离为 d_s，形核点是在如下的约束下植入的：相邻任何两形核点间的距离必须永远保持相等，那么存在一个由下式给出的限制值(最大值)

$$d_{s,\max} = \left(2A/N\sqrt{3}\right)^{1/2} \tag{1}$$

式中：N 是形核点的个数，A 是平面面积。定义一个无量纲的量

$$k_1 = 1 - d_s/d_{s,\max}, \quad 0 \leqslant k_1 \leqslant 1 \tag{2}$$

式中：k_1 用于评价具有相同形核点数 N 的二维 Voronoi 多晶材料的不规则性。

本研究在平面区域内均匀布置了 25 个原始形核点，根据上述理论方法生成 25 个微观尺度下具有随机晶粒几何形状的晶粒模型，可较好地反映晶粒的几何形状与晶界的不规则性。

2.2 有限元计算方案

建立的有限元模型如图 1 所示，上部分为打击飞板，下部分为采用 Voronoi 方法生成的多晶铜，晶粒度基本保持在 50～60 μm。由于晶粒形状的不规则性，单元类型采用三维六面体 8 节点 Solid 164 单元进行扫略网格划分，以保证计算的稳定性，单元算法采用 Lagrange 算法。飞板包含 840 个单元，晶粒模型总共包含 3966 个单元。飞板与晶粒模型之间的接触类型选择自动面面接触。在对晶粒模型施加约束时，粗晶铜晶粒模型底端施加固定端约束，并且施加非反射边界条件以消除应力波反射的影响。

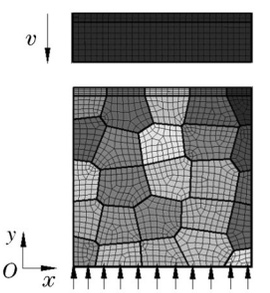


图 1 有限元模型

Fig. 1 The finite element model

在有限元建模过程中，为了简化模型，直接对刚性板施加初始速度，钢板的初始速度可以根据板型装药的格尼方程[13]直接求出，作为计算的初始条件

$$V = \sqrt{2E}\left[\frac{3}{1+5(M/C)+4\ (M/C)^2}\right]^{1/2} \tag{3}$$

$$\frac{M}{C} = \frac{\rho_m}{\rho_e} \cdot \frac{t_m}{t_e} \tag{4}$$

式中：E 为单位炸药质量所产生的动能，M/C 为飞板质量与炸药质量的比值，ρ_m、ρ_e 分别为飞板和炸药层的密度，t_m、t_e 分别为飞板和炸药层的厚度。

通过不同的装药厚度可以计算出炸药爆炸驱动刚性板的不同初始速度，当装药厚度分别为 15、20、25 mm，刚性板厚度为 10 mm 时，钢板的初速度分别为 0.540、0.684、0.820 km/s。以上数据是在宏观爆炸加载制备纳米晶铜实验研究中的实际应用数据。

2.3 材料模型及参数

通过对爆炸加载制备纳米晶铜前期实验数据分析，钢板塑性变形量非常小，可以忽略不计，因此钢板采用刚性体材料模型(Rigid Material)。密度为 7.83 g/cm^3，弹性模量为 207 GPa，泊松比为 0.30。

纳米晶体的微观结构主要由晶粒和晶界组成，界面体积分数可以用 $3\delta/d$ 来计算[14]，δ 为界面厚度(约为 1 nm)，对于晶粒尺寸为 50～60 μm 的粗晶铜来说，可以忽略界面体积分数的影响，因此通过相邻

晶粒间的边界面来描述晶界的作用,晶界面具有一定的界面结合强度。采用 Johnson-Cook 材料模型描述细观结构下塑性变形的热力耦合问题,界面结合强度通过固连失效模型进行描述,如图 2 所示,则晶粒和晶界的统一本构关系可表示为

$$\sigma=\begin{cases}[A+B\varepsilon^{n}]\times\left[1+C\ln\dfrac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_0}\right]\times\left[1-\left(\dfrac{T-T_{\mathrm{r}}}{T_{\mathrm{m}}-T_{\mathrm{r}}}\right)^{m}\right] & \Delta<1\\ 0 & \Delta\geqslant 1\end{cases}\tag{5}$$

式中:A、B、c、n、m 是用户定义输入的材料常数,ε 为等效塑性应变,$\dot{\varepsilon}/\dot{\varepsilon}_0$ 为等效塑性应变率,T_{r}、T_{m} 分别为室温和材料的熔化温度。Δ 是晶粒之间界面初始分离的判据,如图 2 所示,其表达式为 $\Delta=\left(\dfrac{\sigma_{\mathrm{n}}}{\sigma_{\mathrm{cn}}}\right)^2+\left(\dfrac{\sigma_{\mathrm{t}}}{\sigma_{\mathrm{ct}}}\right)^2+\left(\dfrac{\sigma_{\mathrm{s}}}{\sigma_{\mathrm{cs}}}\right)^2$,其中 σ_{cn}、σ_{ct} 和 σ_{cs} 分别为法向和正交切向失效应力。当 $\Delta<1$ 时,晶粒间存在界面结合力作用,晶粒之间不会产生界面的分离。当 $\Delta\geqslant 1$ 时,表示晶界面所受应力大于法向初始分离刚度或切向初始分离刚度的值,晶粒间界面结合力消失,界面开始分离。在本研究中,假定晶界的法向初始分离刚度 σ_{n} 与晶粒内部的最大弹性模量相同,切向初始分离刚度 σ_{s} 与晶粒内部最大的剪切屈服强度一致。相关参数见表 1。

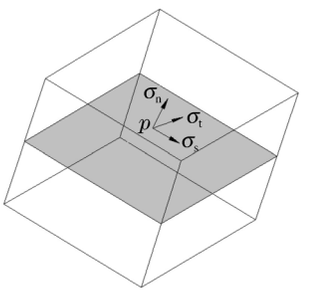


图 2 晶界模型示意图

Fig. 2 Grain boundary model

表 1 材料参数[15]

Table 1 Material parameters[15]

ρ/(g/cm^3)	Elastic modulus/(GPa)	Shear modulus/(GPa)	Poisson's ratio	A/(GPa)
8.93	125	46.4	0.35	0.09
B/(GPa)	N	C	M	C/(km/s)
0.292	0.31	0.025	1.09	3.94
S_1	c_p/(J·kg^{-1}·K^{-1})	T_{m}/(K)	T_{r}/(K)	γ_0
1.49	383	1 356	300	1.96

3 分析及讨论

3.1 细观晶粒变形和热沉积现象

通过钢板以 0.540 km/s 的初始速度对粗晶铜晶粒进行冲击压缩的数值模拟,可以很清楚地观察到晶粒变形的动态过程,分别以时刻 $t_1=0.175$ μs、$t_2=0.210$ μs、$t_3=0.320$ μs 的等效应力、剪切应力以及应变的结果数据对晶粒变形机制进行分析,如图 3 所示。通过图 3(a)等效应力分布可见,随着刚性板的不断冲击压缩,应力波逐渐向晶粒内部传播,晶粒之间受到相互挤压应力导致塑性变形。晶界处形成应力集中现象,明显大于晶粒内部,特别是在三叉晶交界处应力值最大而且出现晶粒畸变。

通过图 3(c)应变情况分析得出,随着逐渐压缩晶粒塑性应变不断增加,由于晶界面处首先受到挤压应力的作用,晶界处的塑性应变要大于晶粒内部,应力与应变不断由晶界面向晶粒内部延伸。根据图 3(b)剪切应力云图观察得出,随着应力波的传播,晶粒之间不仅存在相互挤压,而且晶粒与晶粒之间具有相对滑移现象。通过剪切应力分析,晶界上剪切应力比较集中,晶界产生相对滑移。由于晶界的滑移,晶粒塑性变形不断增加。当剪切应力和剪切变形积累到一定程度时,有可能引起穿晶断裂和多密度位错的形成。

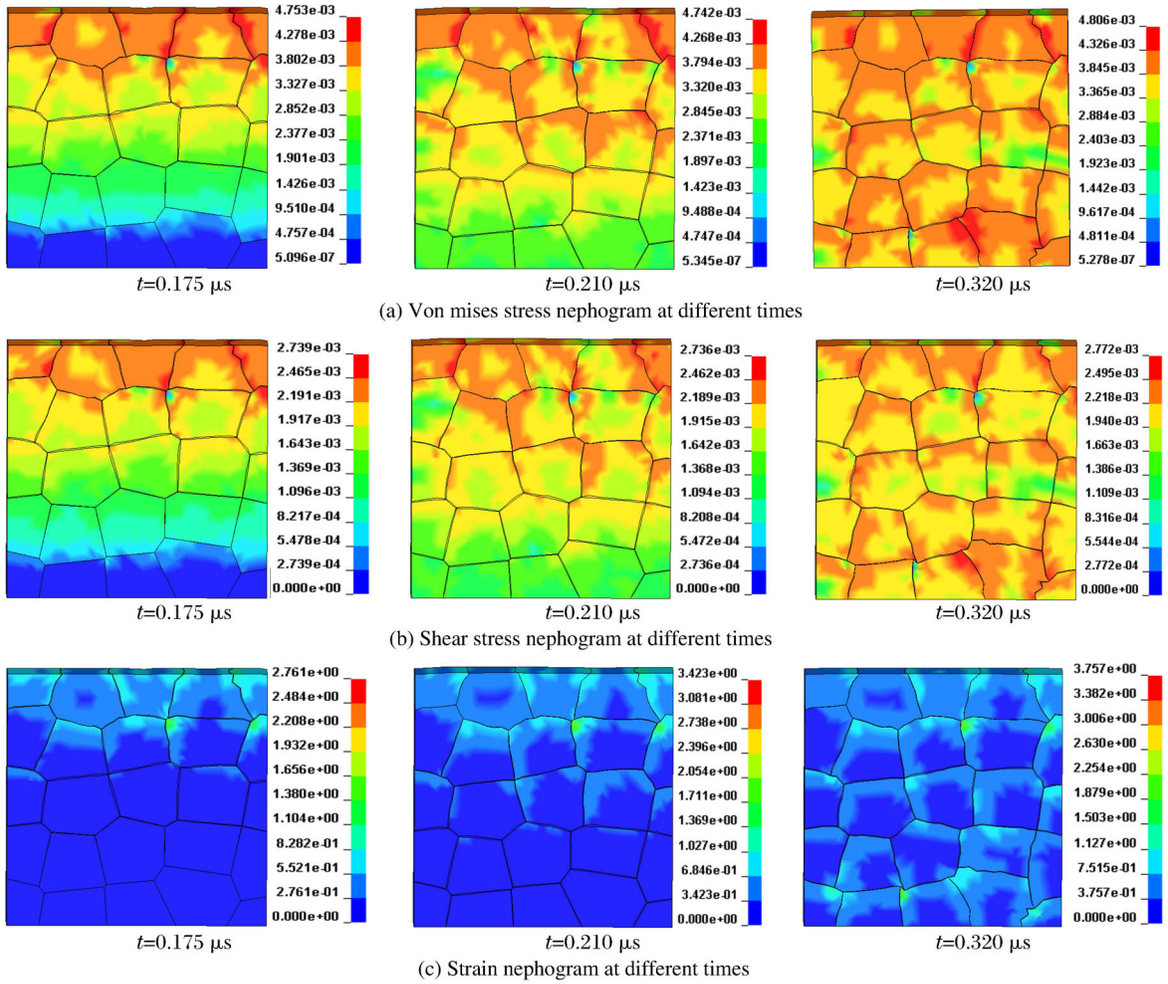


图 3 等效应力、剪切应力及应变云图

Fig. 3 Von mises stress, shear stress and strain nephogram

冲击加载下金属发生塑性变形时伴随有温度上升，这种在高应变率下塑性变形的温升应归结为金属塑性变形引起的绝热温升。由于爆炸加载时塑性变形持续的时间很短，因此热损失很少，会造成晶粒内部的热沉积行为。晶粒模型各点应力与应变已知，根据公式[13]

$$\Delta T = \frac{\beta}{\rho c_V}\int_0^{\varepsilon_f}\sigma \mathrm{d}\varepsilon \tag{6}$$

式中：β 为功热速率转换系数，假设有 10% 的变形功作为缺陷储存在材料中，则 $\beta=0.9$；c_V 为材料定容比热。通过上式可以求出由于晶粒塑性变形引起的绝热温升。$t=0.320$ μs 时刻的温升二维等高线效果图见图 4。由于晶界面处首先受到挤压，受应力影响导致塑性变形增加，因此由晶界能量沉积比较集中而引起的温升大于晶粒内部。从图 4 中可以看出，晶界处温升最大可达 126.3 K，晶粒三叉晶处由于晶粒畸变现象严重，温升可达 163.1 K。

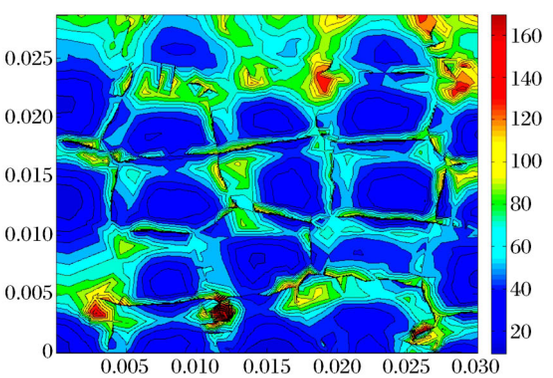


图 4 节点温升

Fig. 4 Nodes temperature rise

3.2 晶粒细化的可行性分析

本工作研究的是钢板对粗晶铜的高速碰撞所产生的材料动态响应与物理性能，通过碰撞产生冲击

波,当爆炸冲击波在晶粒中传播时,冲击波的能量会发生耗散,沉积在晶粒内部。粗晶铜材料通过吸收耗散能而发生一系列的物理变化,其中熔点温度随压力的变化至关重要,根据钢板的初始速度可以求解出粗晶铜所受的冲击载荷,即采用公式(7)计算

$$\begin{aligned} p_1 &= \rho_{01} c_1 u_{\mathrm{p1}} + \rho_{01} s_1 {u_{\mathrm{p1}}}^2 \\ p_2 &= \rho_{02} c_2 u_{\mathrm{p2}} + \rho_{02} s_2 {u_{\mathrm{p2}}}^2 \end{aligned} \tag{7}$$

式中:ρ_{01}、ρ_{02}分别是钢板、粗晶铜的密度;$c_1=3.57$ km/s、$c_2=3.94$ km/s 是压力为零时材料中的声速;$s_1=1.92$、$s_2=1.49$ 是材料的经验参数;u_{p1}、u_{p2}是材料内的粒子速度,粒子速度必须比碰撞速度小,通过最终计算,u_{p} 分别为 0.251、0.322、0.380 km/s。在钢板初始速度分别为 0.540、0.684、0.820 km/s 时,粗晶铜晶粒所受冲击载荷为 9.58、12.70、15.30 GPa。

通过上述计算晶粒所受冲击载荷已知,根据西蒙融化方程[16]可以得出在冲击载荷下的熔化温度 T_{m} 为

$$\frac{p_{\mathrm{m}} + a}{a} = \left(\frac{T_{\mathrm{m}}}{T_{\mathrm{m0}}}\right)^{c} \tag{8}$$

式中:$c=(6\gamma+1)/(6\gamma-2)$,$\gamma=1.96$ 为格林爱森系数,a 为材料常量,T_{m0}为零压下的熔化温度(1 356K)。通过计算可得在 9.58、12.70、15.30 GPa 的冲击载荷作用下的熔化温度为 2 464、2 495、2 561 K。

晶粒的温升 T 是由宏观绝热压缩温升 T_{H} 与微观塑性变形的局域化温升 ΔT 两部分组成的。宏观冲击温度 T_{H} 可以利用热力学关系和冲击绝热线计算,即公式[16]

$$T_{\mathrm{H}} = T_0 \exp(\gamma_0 \eta) + \left(\frac{c_0^2}{c_V}\right) \exp(\gamma_0 \eta) \int_0^{\eta} \frac{s x^2}{(1-sx)^3} \exp(-\gamma_0 x)\,\mathrm{d}x \tag{9}$$

式中:$\eta=\rho/\rho_0$ 为压缩比,c_0 为零压下的声速,s 为材料常数。通过理论计算,在 9.58、12.70、15.30 GPa 的冲击载荷作用下的冲击温升分别为为 324.0、346.5、367.3 K。

大量实验研究表明[17-18],通过各种方法制备的纳米晶体材料,无论是金属、合金还是化合物,在一定程度上都具有很高的晶粒生长稳定性,表现为晶粒长大时的初始温度高达 $0.6T_{\mathrm{m}}$(T_{m} 为材料熔点)。对于纳米晶熔点愈高的金属晶粒长大的起始温度愈高,晶粒长大温度约为 $0.2\sim0.4T_{\mathrm{m}}$,如纳米晶 Cu 的晶粒长大温度约为 $0.28T_{\mathrm{m}}$。通过上述温升的理论运算可得出,晶粒在 9.58、12.70、15.30 GPa 冲击载荷作用下的长大温度分别为 690.2、698.6、717.1 K。通过图 5(其中 T_{L} 和 T_{W} 分别表示细观畸变和宏观压缩引起的温升,T 为整体温度,T_{G} 为晶粒长大温度)可以观察出,由宏观绝热压缩和细观畸变共同引起的温升小于晶粒长大温度,不会引起晶粒的长大,说明通过爆炸加载法使晶粒细化制备纳米晶铜的途径是可行的。

3.3　晶粒细化的实验验证

为验证上述分析的合理性,进行了上述计算条件下铜柱的爆炸加载实验,并采用日本理学公司的 D/Max2500VL/PC 型阳极转靶 X 射线衍射仪分别对试件进行了 X 射线衍射分析,用 X 射线衍射线宽法测量晶粒的平均尺寸[10]。图 6 给出了试样应变同平均晶粒度的关系。可见,试样应变的增大有利于提高晶粒细化程度,晶粒可细化至纳米量级。同时,晶粒细化结果表明,动态加载过程中的材料温升不能造成晶粒长大。

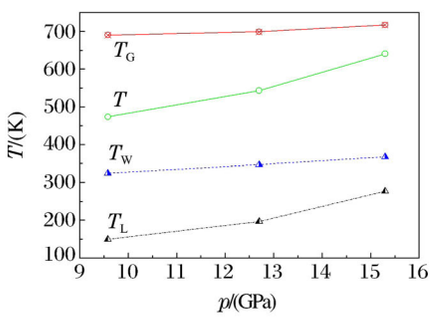


图 5　不同冲击压力下的温升和晶粒长大温度

Fig. 5　Temperature for grain growth and temperature rise

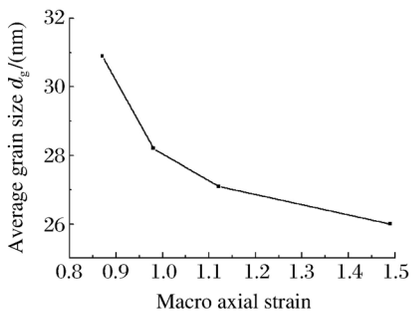


图 6　试样应变同平均晶粒度关系

Fig. 6　Relation of the deformation strain and the mean grain size of the sample

4 结 论

利用 Voronoi 方法成功建立了多晶铜晶粒尺度的细观几何模型，能够反映晶粒几何形状的不规则性。基于晶界固连-失效模型反映晶界结合特征，通过有限元数值模拟，得出了晶粒模型的等效应力、剪切应力以及应变的结果分布云图，分析可知晶界处的等效应力与塑性应变明显大于晶粒内部，晶界处由细观塑性变形引起的温升基本在 80～130 K 范围内，特别是在三叉晶处，应力、应变与细观塑性变形引起的温升表现得更加突出。计算了由宏观冲击绝热压缩引起的温升，配合高压熔点理论，综合分析由宏观冲击绝热压缩引起的温升和由塑性变形引起的局部细观温升不会引起晶粒的长大。通过实验对上述分析进行了初步验证。

References:

[1] Li J, Weng G J. A secant-viscosity composite model for the strain-rate sensitivity of nanocrystalline materials [J]. Int J Plastic, 2007, 23(12): 2115-2133.

[2] Xiao G H, Tao N R, Lu K. Effects of strain, strain rate and temperature on deformation twinning in a Cu-Zn alloy [J]. Scripta Mater, 2008, 59(9): 975-978.

[3] Wang H T, Yang W. Mechanical behavior of nanocrystalline metals [J]. Advances in Mechanics, 2004, 34(3): 314-326. (in Chinese)
王宏涛，杨 卫. 纳米晶金属的力学行为 [J]. 力学进展，2004，34(3)：314-326.

[4] Benkasse S, Capolungo L. Mechanical properties and multi-scale modeling of nanocrystalline materials [J]. Acta Mater, 2007(55): 3563-3572.

[5] Wang Y M, Wang K, Pan D, et al. Microsample tensile testing of nanocrystallinne cooper [J]. Scripta Mater, 2003, 48(12): 1581-1586.

[6] Zhang L D. Nanomaterials and nanotechnology in China: Current status of applicationand opportunities for commercialization [J]. Materials Review, 2001, 15(7): 2-5. (in Chinese)
张立德. 我国纳米材料技术应用的现状和产业化的机遇 [J]. 材料导报，2001，15(7)：2-5.

[7] Cai B, Kong Q P, Lu L, et al. Low temperature creep of nanocrystalline pure copper [J]. Mater Sci Eng A, 2000, 286(1): 188-192.

[8] Guduru R K, Murty K L, Youssef K M, et al. Mechanical behavior of nanocrystalline copper [J]. Mater Sci Eng A, 2007, 463(1-2): 14-21.

[9] Zheng C, Zhang Y W. Atomistic simulations of mechanical deformation of high-angle and low-angle nanocrystalline copper at room temperature [J]. Mater Sci Eng A, 2007, 423(1-2): 97-101.

[10] Wang J X, Zhou N, Li B M, et al. Fabrication of nanocrystalline copper by explosive loading and its dynamic mechanics properties [J]. Combustion, Explosion and Shock Waves, 2011, 47(3): 369-373.

[11] Wang J X, Zhou N. Study on the grain size distribution rule and influence factors of nanocrystalline copper fabricated under explosive loading [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2011, 25(6): 501-507. (in Chinese)
王金相，周 楠. 爆炸载荷下纳米晶铜晶粒度分布及影响因素研究 [J]. 高压物理学报，2011，25(6)：501-507.

[12] Kang J X, Wang Z H, Zhao L M. Studay on the quasi-static mechanical proerties of cellular metal using voronoi tessellation [J]. Engineering Mechanics, 2011, 28(7): 203-209. (in Chinese)
康锦霞，王志华，赵隆茂. 采用 Voronoi 模型研究多孔金属材料准静态力学特性 [J]. 工程力学，2011，28(7)：203-209.

[13] Zhang Q M, Liu Y, Huang F L. Dynamic Behavior of Materials [M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2006: 165-170. (in Chinese)
张庆明，刘 彦，黄风雷. 材料的动力学行为 [M]. 北京：国防工业出版社，2006：165-170.

[14] Wang H T, Yang W, Ngan A H W. Enhanced diffusivity by triple junction networks [J]. Scripta Mater, 2004, 52(1): 69-73.

[15] Johnson G R, Cook W H. Fracture characteristics of three metals subjected to various strains, strain rates, temperatures and pressures [J]. Eng Fract Mech, 1985, 21(1): 31-48.

[16] Tang W H, Zhang R Q. Introduction to Theory and Computation of Equations of State [M]. 2nd ed. Beijing: Higher Education Press, 2008: 134-136. (in Chinese)
汤文辉,张若棋. 物态方程理论及计算概论 [M]. 第 2 版. 北京:高等教育出版社, 2008: 134-136.

[17] Andrievski R A. Review stability of nanostructured materials [J]. J Mater Sci, 2003, 38(7): 1367-1375.

[18] Murty B S, Datta M K, Pabi S K. Structure and thermal stability of nanocrystalline materials [J]. Sadhana, 2003, 28(1-2): 23-45.

Numerical Simulation of Microscopic Dynamic Behavior in the Copper under Explosively Dynamic Loading

YANG Rui, WANG Jin-Xiang, ZHOU Nan, PENG Chu-Cai, XIE Jun

(*Science and Technology on Transient Physics Laboratory, NUST, Nanjing* 210094, *China*)

Abstract: Voronoi method was adopted to establish the micro-geometry model of polycrystalline copper which can reflect the irregularities of grain geometric shape and grain boundaries. The Tie-Break model was used to reflect the binding characteristics of grain boundary. Then the grains deformation and thermal deposition behavior under explosive dynamic loading were studied from the microscopic view recur to LS-DYNA nonlinear finite element program. Finally, the possibility of grain refining was anslyzed by high pressure melting point theory and grain growth theory, and the analysis was proved qualitatively by experimental results. The results show that it is feasible to research grain and grain boundary deformation mechanisms as well as the heat deposition for the shock compressed polycrystalline copper by the numerical simulation method built in this work. Stress concentration is easy to form on the grain boundaries, plastic deformation and temperature rise on the grain boundaries are greater than those of the grain interior. The temperature rise caused by the macro-adiabatic compression and the micro-plastic deformation does not cause grain growth.

Key words: impact dynamics; grain refining; thermo-dynamic behavior; Voronoi