

文章编号:1006-9941(2020)10-0984-11

Al/Ni类含能结构材料冲击压缩特性细观模拟

熊 玮,张先锋,陈海华,杜 宁,包 阔,谈梦婷

(南京理工大学 机械工程学院, 江苏 南京 210094)

摘 要: 为了研究含能结构材料冲击响应特性,开展了以Al/Ni为代表的含能结构材料冲击压缩细观模拟研究。结合扫描电子显微镜照片分析了三种典型Al/Ni类含能结构材料的细观结构特性,研究了材料配比、制备工艺对材料细观结构的影响规律。从细观结构照片和细观颗粒初始形态入手,分别建立了Al/Ni类含能结构材料冲击压缩细观模型,计算并比较了该类材料在冲击压缩过程中的颗粒变形、压力响应、冲击温度分布及冲击波传播特性。结果表明:Al/Ni粉末复合材料的细观颗粒主要以Ni为基体,且Al颗粒随着其含量的上升而发生团聚;而Al/Ni多层复合材料主要以Al为基体,Ni近似于平行分布其中。Al/Ni类含能结构材料细观结构存在不均匀特性,导致其在冲击压缩过程中产生局部高压和热点,而这一特性无法由基于材料初始颗粒形态建立的均匀化细观模型得到。

关键词: 含能结构材料;冲击压缩;局部热点;细观模拟

中图分类号: TJ55; O382

文献标志码: A

DOI: 10.11943/CJEM2020171

1 引言

Al/Ni材料是典型的含能结构材料(Energetic structural materials),同时具备结构特性和化学反应释能特性。该类材料在一般情况下保持惰性且不相互反应,当给予足够的机械、电或激光等刺激后会迅速释放大量的化学能,发生快速燃烧或爆炸^[1]。由于兼具含能和强度特性,含能结构材料在军事领域和民用领域均具有十分广阔的应用前景^[2-6],如制作含能破片、含能药型罩、基于含能结构材料的侵彻体及空间碎片防护结构等。在材料制备方面,由于Al/Ni类含能结构材料在温度达到铝的熔点(660 °C)时即会发生化学反应,一般不采用烧结^[7-8]和高温熔融的方法制备该种材料,因此最常用的制备方法有准静态压制^[9-10]、爆炸合成^[11]和冷轧^[12]等。

相关研究表明^[13],Al/Ni类含能结构材料的细观结构(颗粒尺寸、形状以及颗粒分布等)对其力学行为及冲击反应特性的影响十分显著。在细观尺度上建立含能结构材料的冲击响应模型,研究其在冲击压缩下的金属颗粒材料间的碰撞、孔隙压垮、接触面变化及温度分布等规律,能更直接分析含能结构材料的冲击动态力学响应特性,进而有利于阐明其冲击反应机制。含能结构材料细观模型的生成方法主要有两种:(1)满足分布统计规律的细观数值仿真模型。Williamson^[14]将不锈钢材料简化为在细观尺度上由均匀、等粒径颗粒构成,生成了相应细观数值仿真模型。为了更接近真实细观分布情况,Benson^[15-16]、Austin等^[17-19]和乔良^[20-21]随后改进了该类细观模型建立方法,结合材料中颗粒细观分布特性(材料配比、尺寸、几何形态)建立相应的数学描述,并利用随机数生成方法、模拟退火算法等方法生成满足细观分布统计规律的模型。(2)基于细观照片生成细观尺度数值仿真模型。Eakins^[22-23]通过(Scanning Electron Microscope, SEM)设备得到了Al/Ni含能结构材料的细观照片,并以此建立了细观尺度数值仿真模型,研究了材料颗粒形状和密实度等细观特性对Al/Ni类含能结构材料冲击响应行为的影响规律,同时确定了其状态方程参数,其建模过程主要有三步^[23]:区分相、矢量化、导入仿真

收稿日期:2020-07-06;修回日期:2020-08-20

网络出版日期:2020-09-02

基金项目:中国空气动力研究与发展中心超高速碰撞研究中心开放基金(20200106);国家自然科学基金项目(11772159);中央高校基本科研业务费专项资金(30920021108)

作者简介:熊玮(1991-),女,讲师,主要从事爆炸与冲击动力学、高效毁伤与防护技术研究。e-mail:wei.xiong@njust.edu.cn

通信联系人:张先锋(1978-),男,教授,主要从事爆炸与冲击动力学、高效毁伤与防护技术研究。e-mail:lynx@njust.edu.cn

引用本文:熊玮,张先锋,陈海华,等. Al/Ni类含能结构材料冲击压缩特性细观模拟[J]. 含能材料,2020,28(10):984-994.

XIONG Wei, ZHANG Xian-feng, CHEN Hai-hua, et al. Mesoscale Modeling on Dynamic Behavior of Al/Ni Energetic Structural Materials Under Shock Compression[J]. Chinese Journal of Energetic Materials (Hanneng Cailiao), 2020, 28(10):984-994.

软件。相比而言,满足分布统计规律的细观数值仿真模型的建立更加方便快捷,而基于细观照片生成细观尺度数值仿真模型更能体现材料细观尺度上的实际分布特点,而两种建模方法对含能结构材料冲击响应细观模拟结果的影响机制仍有待探索。

基于以上研究背景,本研究选取三种典型的Al/Ni类含能结构材料为研究对象,结合细观结构照片和细观颗粒初始形态建立该类材料的冲击压缩细观模型,重点关注冲击压缩过程中的材料颗粒变形、压力响应及热点分布、冲击波传播特性等问题,分析两种建模方法对材料冲击压缩响应特性的影响机制,为含能结构材料冲击反应特性的研究奠定基础。

2 细观模拟方法

2.1 典型Al/Ni类含能结构材料的细观结构特性

对不同Al/Ni类含能结构材料的细观结构观测有助于确定材料细观结构参数,研究细观结构参数对材料力学行为及冲击反应特性的影响规律,同时也可为后续细观仿真建模提供参考。三种典型Al/Ni类含能

结构材料SEM照片如图1所示。前两种材料为Al/Ni粉末复合材料,由初始粒径分别小于 $23\ \mu\text{m}$ 和 $75\ \mu\text{m}$ 的Al粉和Ni粉按一定比例混合后,通过粉末压制制备得到,尺寸为 $\Phi 10\ \text{mm} \times 10\ \text{mm}$ 。其中,1#材料体积配比为50/50,记为Al/Ni($V_{\text{Al}}/V_{\text{Ni}}=50/50$)粉末复合材料;2#材料化学计量比为50/50,记为Al/Ni($n_{\text{Al}}/n_{\text{Ni}}=50/50$)粉末复合材料。3#材料为Al/Ni($n_{\text{Al}}/n_{\text{Ni}}=50/50$)多层复合材料,由初始厚度分别为 $0.8\ \text{mm}$ 和 $0.5\ \text{mm}$ 的Al板和Ni板交叠后轧制而成,随后切割为 $\Phi 11.8\ \text{mm} \times 5.5\ \text{mm}$ 圆柱型试样。

对于1#材料,在SEM照片(图1a)中Al球形颗粒均匀分布在Ni基质中,其Al-Al晶界较为清晰。而2#材料SEM照片中,Al颗粒相互结合,Al-Al晶界不够分明。这是由于随着Al含量增加,Al-Al颗粒间发生相互接触,在准静态压制过程中发生变形并结合在一起,形成如图1b所示的团聚现象。另一方面,图1c所示基于冷轧技术制备的3#材料的细观结构主要以Al为基体,而Ni平行散布其中。同时,由于Al和Ni的可压缩性不同,两者在轧制过程中的厚度比发生了改变。

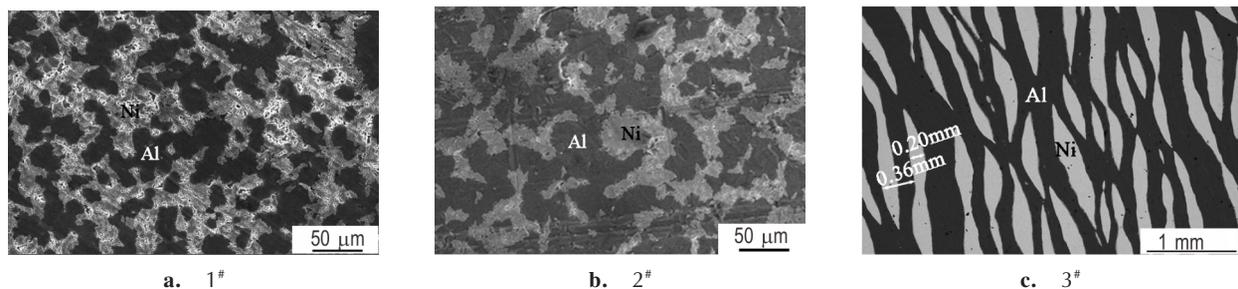


图1 三种典型Al/Ni类含能结构材料细观结构

Fig.1 The microstructures of three typical Al/Ni composites

2.2 细观几何模型的建立方法

2.2.1 基于SEM照片的细观几何模型生成方法

为了反映Al/Ni类含能结构材料真实的细观结构特性,利用SEM照片建立了细观几何模型^[24],截面如图2所示。通常,SEM拍摄的区域有限,代表性体积单元(Representative volume element, RVE)的尺寸过小,不足以模拟整个冲击压缩过程中材料细观尺度上的变形行为及冲击波传播规律,因此需要采用适当的方法获取尺寸更大的细观模型。对于Al/Ni粉末复合材料(1#、2#),由图1可知,其颗粒分布具有随机性,即该材料的细观结构具有各向同性的特性。将基于SEM得到的矢量图沿 x 、 y 两个方向分别进行镜像处理,最终得到细观几何模型的截面尺寸为 $1\ \text{mm} \times 1\ \text{mm}$ 。

对于Al/Ni多层复合材料(3#),Al、Ni两相的细观结构均为细长型,近似于平行分布。在相关试验中^[25],受力方向通常与轴线方向平行(即与细观尺度Al-Ni界面垂直)。由于拍摄角度问题,SEM照片与试件轴线呈一定的夹角。因此,需将所得到的RVE进行旋转,使之与实际受力情况相符合。同时,由于Al/Ni多层复合材料的颗粒较大,所建立的细观几何模型尺寸需要大于粉末复合材料的尺寸,以消除边界效应的影响。将所得到的矢量图进行镜像或平移,得到截面尺寸为 $5\ \text{mm} \times 5\ \text{mm}$ 的细观几何模型。将基于SEM得到的模型截面沿其垂直方向拉伸,最终得到具有真实细观结构特性的Al/Ni类含能结构材料切片,用于模拟Al/Ni类含能结构材料中任一横截面切片中的冲击

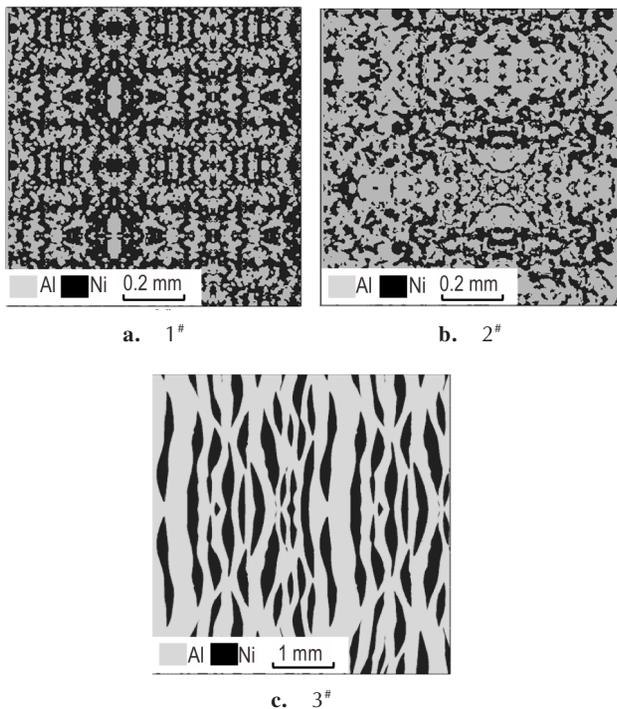


图2 基于SEM照片建立的三种典型Al/Ni类含能结构材料细观仿真模型

Fig.2 The mesoscale model established based on SEM images for three typical Al/Ni composites

波传播过程。

为了验证上述建模方法得到的Al/Ni类含能结构材料细观模型材料配比与真实材料的一致性,通过提取细观模型中各细观相的体积,从而获取细观模型中Al的体积百分数,如表1所示。将细观模型中Al的体积分数与材料制备时的体积分数进行对比可以发现,两者误差不超过10%,说明本研究所选取的几种Al/Ni类含能结构材料RVE均能够反映材料内部的真实情况。

表1 三种Al/Ni材料细观模型与真实材料中Al的含量对比

Table 1 Comparison of the volume fraction of Al in meso-scale model and real material %

materials No.	volume fraction of Al and the modelling error		
	real material	mesoscale model	modelling error
1#	50	48.6	2.8
2#	59.5	63.6	6.9
3#	61.5	65.6	6.7

2.2.2 基于颗粒初始形态的Al/Ni类含能结构材料均匀化细观几何模型

在含能结构材料冲击响应特性细观模拟中,最常用的方法是结合材料中初始颗粒细观分布特性(材料配比、尺寸、几何形态)建立满足分布统计规律的细观

数值仿真模型。因此,本研究按照材料颗粒的初始形态特征对几种典型的Al/Ni类含能结构材料进行了均匀化细观建模,用于与基于SEM照片生成的细观模型的对比研究。

基于1#和2#材料的细观结构特征(图1),在均匀化细观几何模型中,将Ni设置为基体材料,而Al按照其颗粒初始形态建立为等粒径($R=11.5 \mu\text{m}$)的圆形颗粒。Al颗粒的位置(x_i, y_i)按照随机分布方法进行分配^[21],在此过程中需保证颗粒间互不重叠:

$$x_i = u_i X_L + Rv_i \tag{1}$$

$$y_i = u_i Y_L + Rv_i \tag{2}$$

$$\sqrt{(x_i + x_j)^2 + (y_i + y_j)^2} \geq 2R \tag{3}$$

其中, X_L 和 Y_L 仿真模型的尺寸, $m; i, j$ 为颗粒序号; u_i, v_i 分别为(0,1)和(-1,1)之间的随机数。

通过控制Al颗粒的投放数量 N ,可以严格控制其体积分数:

$$\text{Vol}_{\text{Al}}\% = N\pi R^2 / X_L / Y_L \tag{4}$$

对于3#材料,由SEM照片(图1)可知,其细观层近似于平行分布。保持Al、Ni细观层厚度比为原始材料层厚度比(1.6:1),取Ni的厚度为0.2 mm,可建立Al/Ni多层复合材料细观模型。三种典型Al/Ni类含能结构材料的均匀化细观模型截面如图3所示。

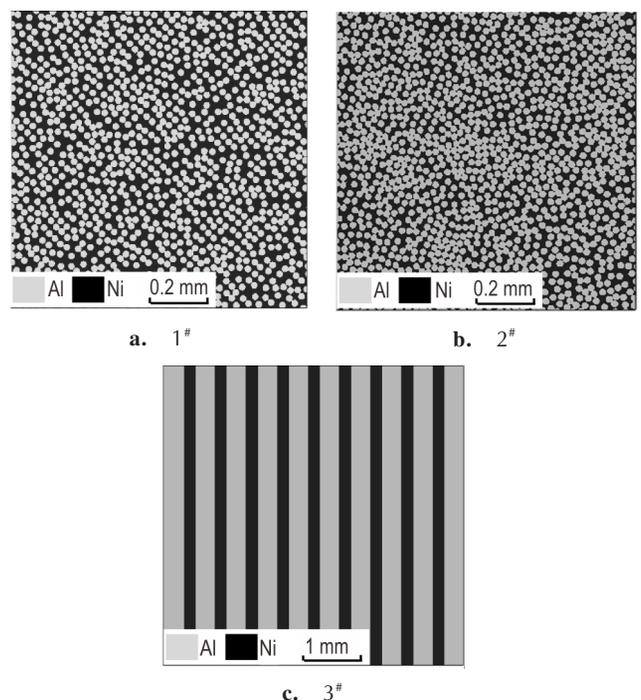


图3 Al/Ni类含能结构材料均匀化细观仿真模型

Fig.3 The mesoscale model established with homogenization method for three typical Al/Ni composites

虽然此方法建立的Al/Ni类含能结构材料细观模型材料配比与其真实材料配比完全一致,但是,通过与细观结构照片对比可以发现,基于材料初始颗粒形态的均匀化细观几何模型既无法体现Al/Ni粉末复合材料(1#、2#)在制备过程中发生的变形和团聚现象,也无法体现Al/Ni多层复合材料(3#)在轧制过程中两相厚度比的改变及Ni相的断裂,与材料真实细观结构存在较大差异。

2.3 材料模型

Johnson-Cook (J-C)模型^[26]是常见的用于描述金属材料在大变形、高应变率和高温情况下热力学行为的材料模型。该模型具有形式简单、准确性好且相关材料参数容易从单项试验中获得等优点。本研究选取Johnson-Cook (J-C)模型描述高应变率下Al、Ni材料的力学行为,其表达式为:

$$\sigma_e = (Y + B\varepsilon_e^{n'}) (1 + c \ln \dot{\varepsilon}^*) (1 - T^{*m'}) \quad (5)$$

式中, σ_e 为等效应力,Pa; ε_e 为等效应变;为无量纲塑性应变率; $\dot{\varepsilon}_0$ 为参考应变率, s^{-1} ; $T^* = (T - T_{room}) / (T_{melt} - T_{room})$ 为无量纲温度; Y 是参考应变率下的屈服强度,由准静态拉伸试验确定,Pa; B, n', c 和 m' 是材料常数。定义 G 为材料的剪切模量,Pa; λ_T 为导热系数, $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$ 。材料参数^[27-33]列于表2。

表2 Al、Ni材料的参数

Table 2 Material parameters for the constitutive model

materials	Al	Ni
$\rho / kg \cdot m^{-3}$	2784	8875
G / GPa	26.2	74.46
Y / MPa	63	136
B / MPa	200	648
n'	0.3	0.33
m'	0.5	1.44
c	0.01	0.006
T_{melt} / K	933	1713
$C_p / J \cdot kg^{-1} \cdot K^{-1}$	903	444
$\lambda_T / W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$	237	90
$C_0 / m \cdot s^{-1}$	5370	4590
S	1.29	1.44
γ	2.18	2.00

Al、Ni的冲击响应行为由Mie-Grüneisen状态 $\dot{\varepsilon}^* = \dot{\varepsilon}_e / \dot{\varepsilon}_0$ 方程^[34]描述,该方程是常用的一种描述固体在冲击波高压条件下行为的物态方程,被广泛地用来描述材料冲击压缩后的状态。其表达式为:

$$p - p_H = \gamma \rho (E - E_H) \quad (6)$$

式中, p_H 为Hugoniot压力,Pa; E_H 是Hugoniot比内能, $J \cdot kg^{-1}$; γ 是Grüneisen参数, ρ 为材料密度, $kg \cdot m^{-3}$ 。

材料的冲击波速度(U_s)与粒子速度间(U_p)的关系采用线性形式表示^[35]:

$$U_s = C_0 + S U_p \quad (7)$$

式中, C_0 是声速, $m \cdot s^{-1}$; S 为材料常数。

2.4 求解器及算法选择

本研究主要采用ABAQUS/EXPLICIT求解器模块对Al/Ni类含能结构材料细观尺度下冲击响应特性进行仿真模拟。该求解器适用于求解非线性动力学问题和准静态问题,特别在模拟短暂、瞬时的动态事件(如冲击和爆炸问题等)具有一定的优势。同时,考虑到材料在高速冲击的高应变率条件下将发生剧烈变形,本研究采用欧拉算法对Al/Ni类含能结构材料在冲击压缩条件下的动态响应行为进行仿真模拟。为了对冲击引起的温升进行准确计算,选取温度-位移耦合算法,网格形状为八节点正六面体(EC3D8RT),各材料初始温度为300 K。对于1#和2#材料,为了保证计算精度将欧拉域网格尺寸取为2 μm 。另一方面,对于3#材料,由于其颗粒尺寸约为1#和2#材料的10倍,为了提高计算效率,将其细观模型的欧拉域网格尺寸取为10 μm 。此外,为了模拟冲击波的一维传播过程并减少计算时间,欧拉域的厚度方向尺寸取为一个网格大小。对欧拉域的材料属性进行定义,并基于前述得到的细观尺度几何模型,对每个网格进行物质分配。

2.5 边界条件

在细观模型的左侧建立刚性板,取其网格大小与欧拉域一致。刚性板以300~1500 $m \cdot s^{-1}$ 恒定速度对Al/Ni材料的细观模型进行压缩,则材料中的粒子速度 U_p 即为刚性板的压缩速度。由于细观模型尺寸小于实际试样尺寸,为了模拟理想周期性材料细观结构和一维压缩条件,在除加载面以外的各个面均施加对称边界条件。

3 结果与讨论

为了研究典型Al/Ni类含能结构材料细观热力学响应结果,对2#和3#两种具有典型细观结构的Al/Ni材料在冲击压缩过程中的颗粒变形、压力分布及温度分布情况进行分析。为了保证对比的有效性,本研究所示均为冲击波传播至细观模型相同位置(冲击压缩方向中点附近)的计算结果。同时,对三种典型Al/Ni复合材料冲击Hugoniot参数进行计算。

3.1 典型 Al/Ni 粉末复合材料冲击压缩细观模拟计算结果

3.1.1 细观颗粒变形情况

在三个典型冲击压缩速度下,基于 SEM 照片建立的 2#材料细观模型中颗粒变形情况如图 4 所示。由于 Al/Ni 粉末颗粒尺寸太小,此处对局部区域进行放大处理,并保证图片具有相同放大比。从计算结果可以看出, $U_p=300\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时,材料内部的细观颗粒无明显变形。随着 U_p 上升至 $1200\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$,颗粒变形逐渐剧烈。同时,在冲击加载条件下,材料体积发生了压缩。 U_p 从 $300\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 上升至 $1200\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 的过程中,原始横向(冲击压缩方向)尺寸为 0.45 mm 的区域压缩为 0.35 mm ,相对压缩率为 22.2% 。因此,冲击压缩下的

材料内部主要发生了颗粒变形和体积压缩两个过程。

另一方面,基于材料颗粒初始形态的 2#材料均匀化细观模型冲击压缩颗粒变形情况如图 5 所示。计算结果表明,在冲击加载条件下,初始颗粒形状规则且尺寸均匀的 Al 颗粒发生了变形。当冲击速度达到 $800\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 以上时,能够明显观测到 Al 颗粒的大变形及颗粒间的融合现象。由于 2#材料的真实细观结构中,Al 颗粒间存在团聚现象,因此通过粉末压制法制备的材料实际颗粒尺寸大于材料粉末的初始尺寸。而图 5 所示细观模型的初始状态中,Al 颗粒间相互间隔且保持初始颗粒尺寸,在冲击压缩过程中的变形相比于基于 SEM 照片建立的细观模型计算结果更加剧烈。

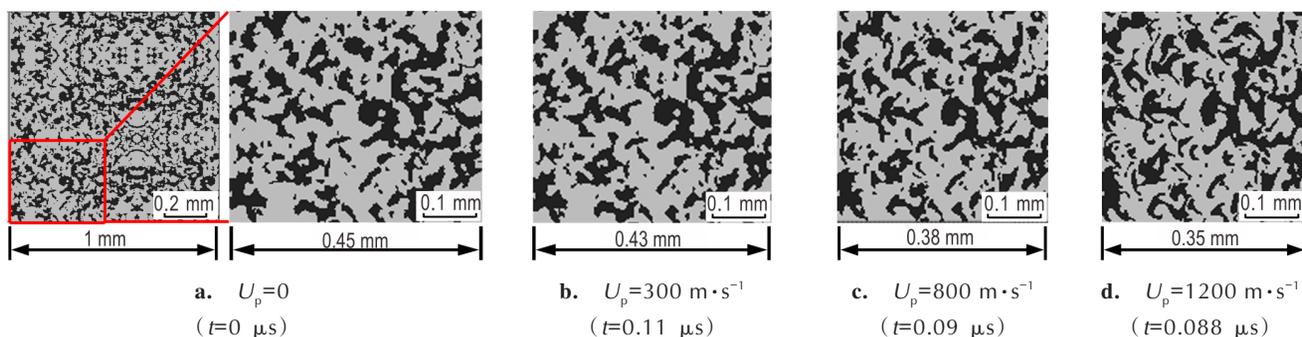


图 4 2#材料在不同冲击压缩速度下的颗粒变形情况

Fig.4 The deformation of particles in material 2# at different particle velocities based on the mesoscale model

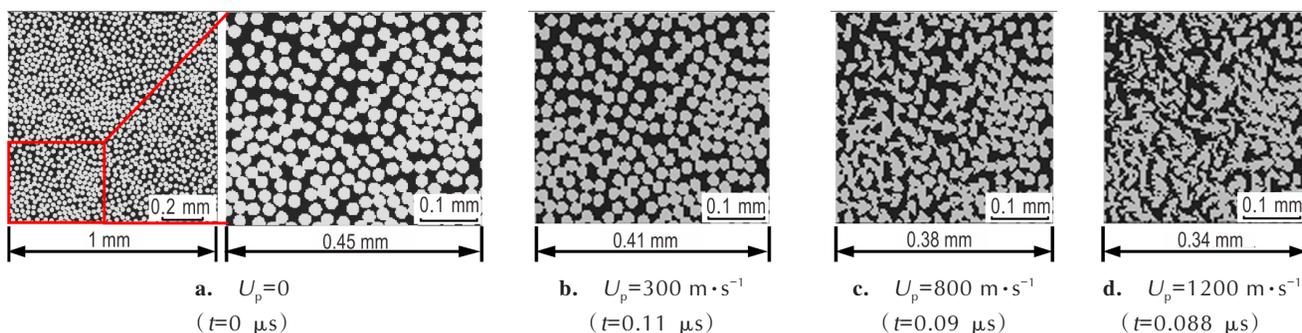


图 5 2#材料均匀化细观模型在不同冲击压缩速度下的颗粒变形情况

Fig.5 The deformation of particles in material 2# at different particle velocities based on the mesoscale model with uniform particles

3.1.2 冲击压力及温度计算结果

图 6 为不同冲击条件下基于 SEM 照片建立的 2#材料中压力和温度分布情况。从图 6 可以看出,材料内部压力和温度分布不均匀。随着 U_p 从 $300\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 提高至 $1200\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$,冲击压力最高值从 8.8 GPa 上升至 52.5 GPa ,同时冲击温度最大值从 452 K 升高至 2118 K 。冲击压缩过程中,材料温升的主要来源是颗粒变形产生的塑性功和冲击压缩引起的体积压缩功。因此,冲

击压缩速度越高,颗粒变形和体积压缩越显著,材料内部的冲击温度越高。假设 Al/Ni 类含能结构材料的冲击反应过程主要是由温度控制的。当冲击温度超过反应阈值时,该材料发生部分化学反应,反应速率随温度的升高而增高,直至达到最大值,实现完全化学反应^[27, 36]。从细观仿真的角度进行分析,可以推论:冲击速度的增加可以促使冲击温度升高,从而加快化学反应速率,最终释放出更多的能量。这一推论与相关

试验的结果吻合^[25, 37]。

2#材料均匀化细观模型在不同冲击压缩速度下的压力和温度分布情况如图7所示。当 U_p 从 $300\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 升高至 $1200\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时,最大冲击压力从 8.5 GPa 升高至 54.7 GPa ,相应的最大冲击温度从 447 K 升高至 2265 K 。与由SEM照片建立的细观模型计算结果相

比,该模型计算的2#材料中细观尺度压力和温度峰值差异不大,但分布压力场和温度场的分布更加均匀。当 U_p 达到 $800\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ 时,冲击波波阵面后局部温度超过Al的熔点(933 K),Al颗粒发生了局部变形,并与相邻颗粒产生融合。随着冲击速度的增大,材料内部温度更高,因此Al颗粒的变形和融合现象更加明显。

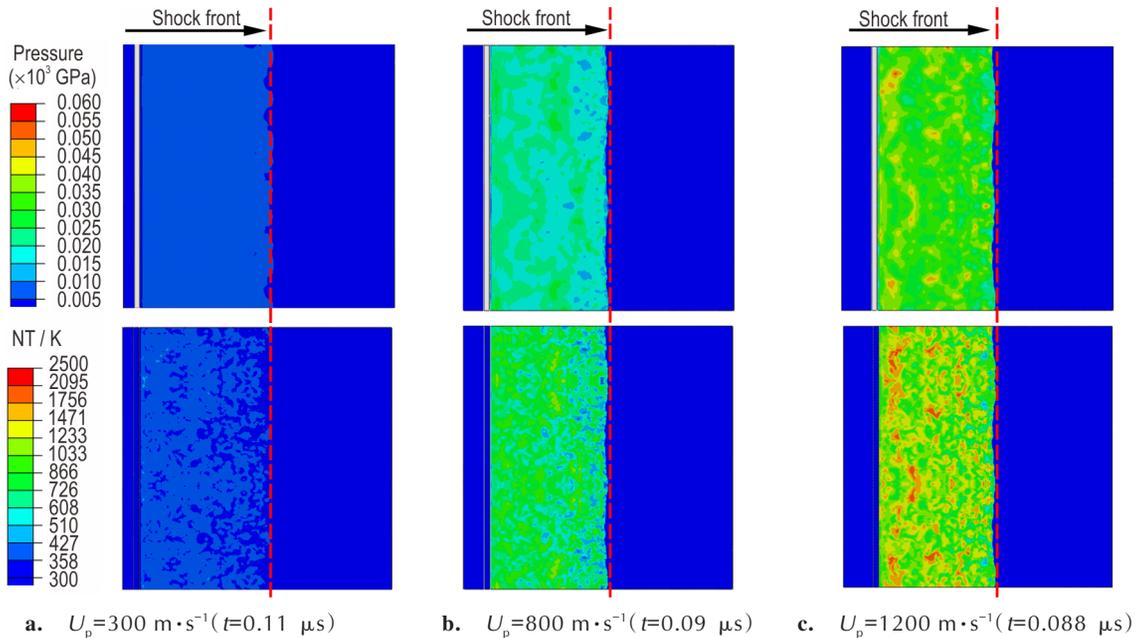


图6 2#材料细观模型在不同冲击速度下的压力及温度分布

Fig.6 The pressure and temperature response in material 2# at different particle velocities based on the mesoscale model

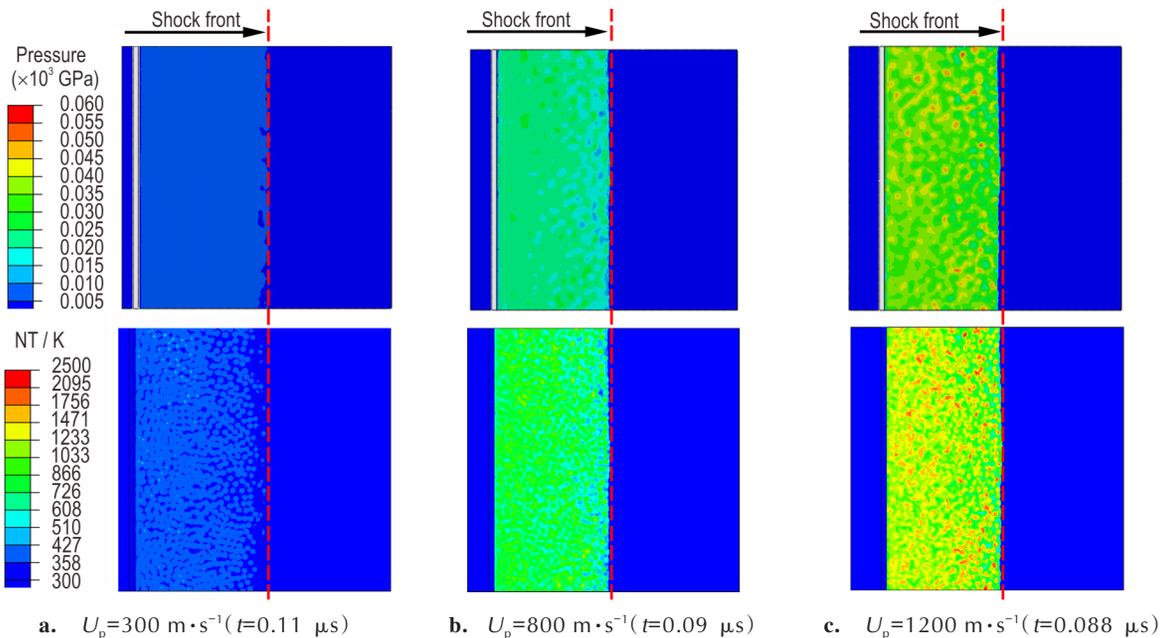


图7 2#材料均匀化细观模型在不同冲击速度下的压力及温度分布

Fig.7 The pressure and temperature response in material 2# at different particle velocities based on the mesoscale model with uniform particles

3.2 典型 Al/Ni 多层复合材料冲击压缩细观模型计算结果

3.2.1 细观颗粒变形情况

Al/Ni 多层复合材料与 Al/Ni 粉末复合材料具有完全不同的细观结构和细观尺寸,相关试验也表明两者的宏观力学行为和冲击释能特性具有较大差异^[24]。基于 SEM 照片建立的 3# 材料细观模型在典型冲击速度下的颗粒变形情况,如图 8 所示。同前述计算结果,冲击压缩速度越高,细观颗粒变形越剧烈,冲击压力和温度也相应增加。其中,颗粒变形情况主要表现为两

个方面:(1) Al、Ni 材料细观层在压缩加载下发生体积压缩而变薄;(2) Ni 颗粒的两端及中间初始厚度较薄区域比其他区域变形更快,从而出现类似于流体的流动现象,使其细观颗粒更加弯曲甚至断裂。

图 9 为厚度比为 0.32/0.2 且各细观层保持轧制之前初始形态的 3# 材料均匀化细观模型计算结果,该结果与基于真实细观结构的细观模型计算结果存在较大差异。对于 Al、Ni 细观层,在冲击压缩过程中主要发生了体积压缩,而无明显变形现象。

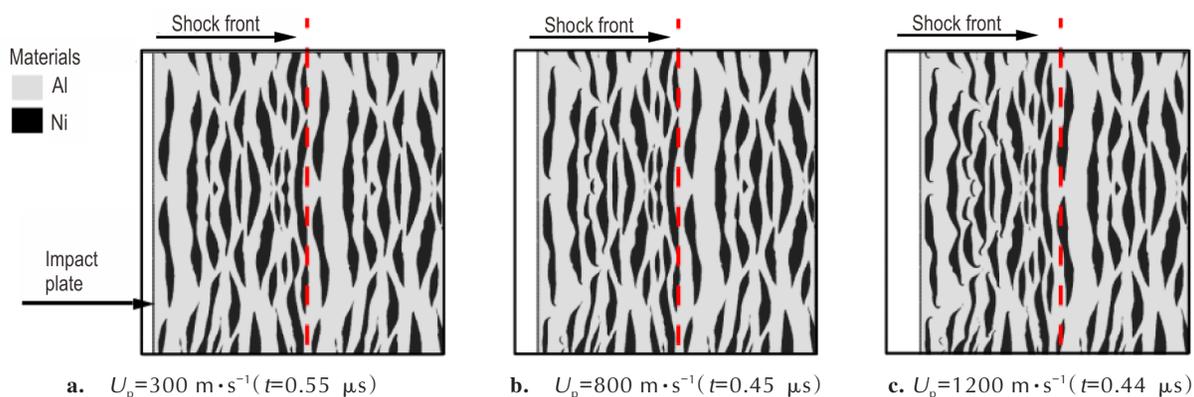


图 8 基于 SEM 的 3# 材料在不同冲击压缩速度下的变形情况

Fig.8 The deformation of layers in material 3# at different particle velocities based on the mesoscale model with SEM images

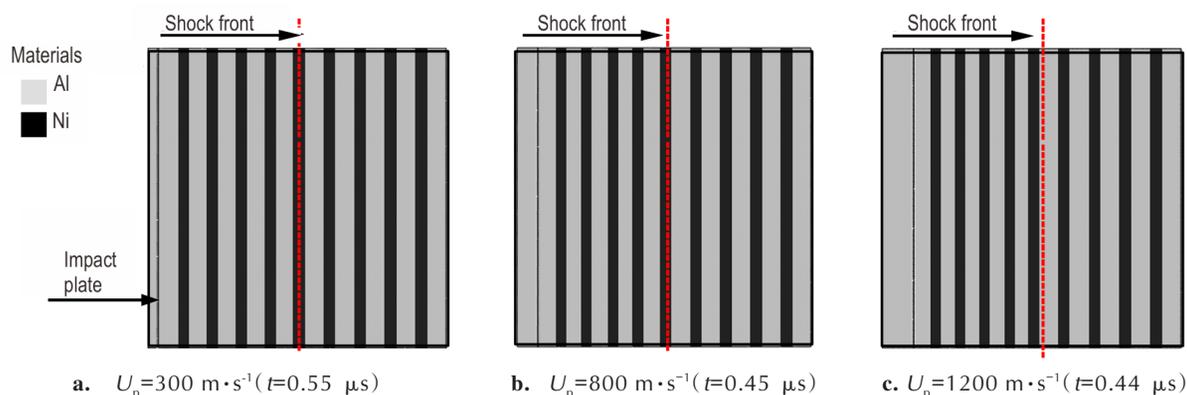


图 9 3# 材料均匀化细观模型在不同冲击压缩速度下的变形情况

Fig.9 The deformation of layers in material 3# at different particle velocities based on the mesoscale model with uniform layers

3.2.2 冲击压力及温度计算结果

图 10 为不同冲击条件下基于 SEM 照片建立的 3# 材料中压力和温度响应计算结果。与 2# 材料相比,3# 材料在冲击压缩过程中的压力和温度分布更加不均匀,且其分布情况均与材料的颗粒分布情况相关。从图 10 中压力云图可以看出,3# 材料的冲击波波阵面形状为与波阵面处颗粒形状相似的曲面。此外,从温度分布云图可以看出,Al 相的冲击温度显著高于 Ni 相,

这是由于 Al 的可压缩性比 Ni 好。当冲击速度 $U_p = 300 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ 时,该材料内最高冲击压力为 8.8 GPa,最高冲击温度为 472 K。随着 U_p 提高至 $1200 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$,冲击压力和冲击温度最大值分别升高至 72 GPa 和 2856 K。由此看出,3# 材料内的冲击温度和冲击压力高于 2# 材料。

图 11 为 3# 材料均匀化细观模型冲击压力和温度计算结果。计算结果表明,基于该细观模型得到的材

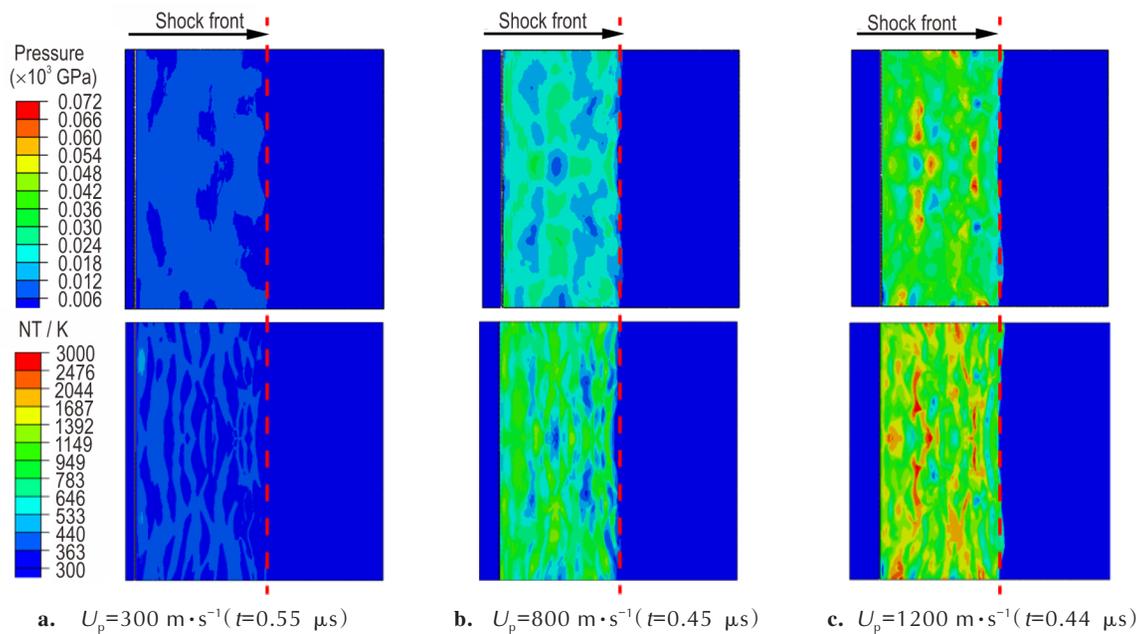


图 10 基于 SEM 的 3# 材料细观模型在不同冲击速度下的压力及温度分布

Fig.10 The pressure and temperature response in material 3# at different particle velocities based on the mesoscale model with SEM images

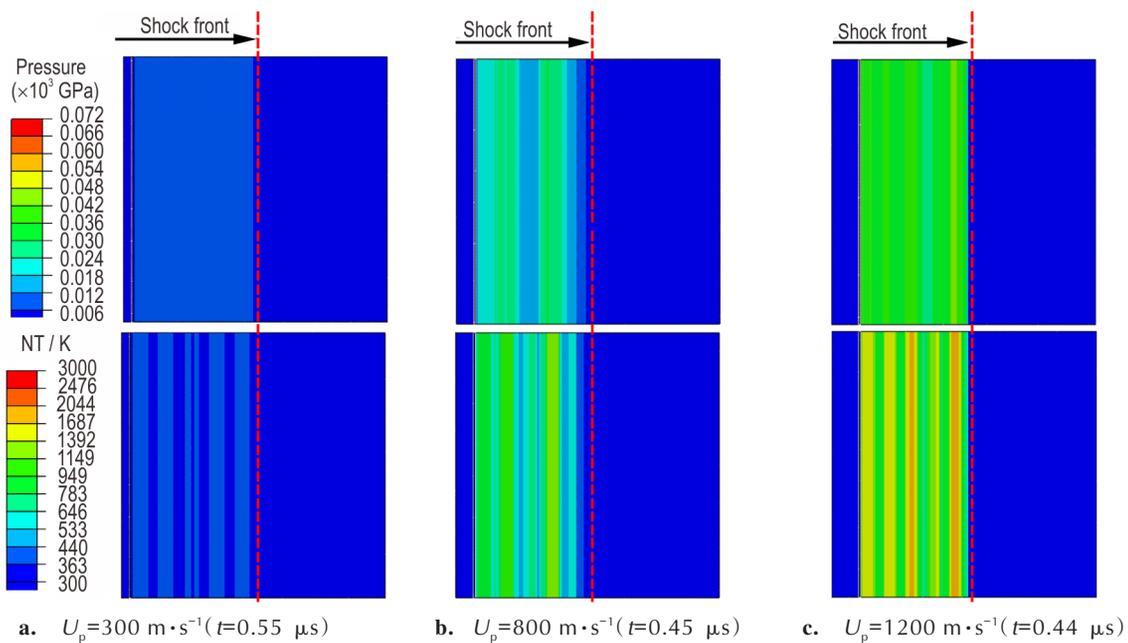


图 11 3# 材料均匀化细观模型在不同冲击压缩速度下的变形情况

Fig.11 The pressure and temperature response in material 3# at different particle velocities based on the mesoscale model with uniform layers

料内冲击波波阵面为与材料细观层完全平行的平面,温度分布云图为与 Al、Ni 材料位置相关的高、低温间隔且平行分布的结构。此外,由于细观层结构规则且均匀分布,该细观模型的计算结果中无局部高温、高压点。因此,基于初始细观形态建立的 3# 材料细观模型无法预测冲击压缩局部高压和热点结果。

3.3 Al/Ni类含能结构材料的冲击 Hugoniot 参数计算

根据前述冲击波参数的计算方法,得到了三种 Al/Ni 类含能结构材料在不同冲击压缩速度 U_p 下产生的冲击波速度 U_s 。对离散的 U_s-U_p 数据点进行线性拟合得到了 Hugoniot 参数,结果如图 12 和表 3 所示。对于 1# 材料,两种建模方法得到的计算结果无明显差异。

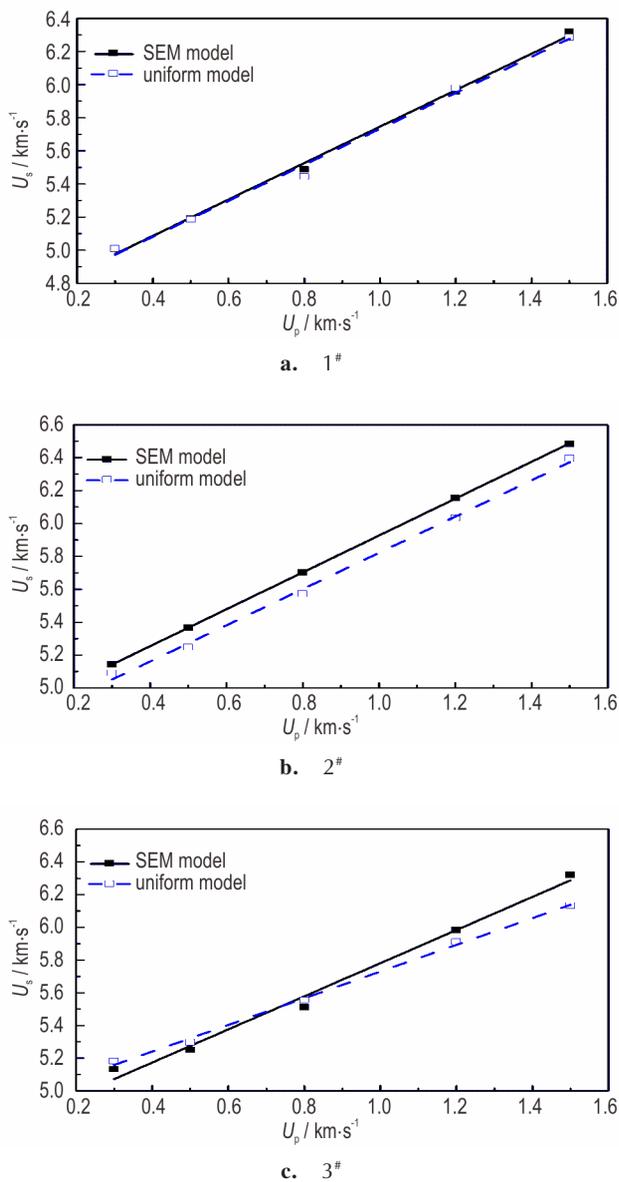


图12 基于两种细观建模方法的Al/Ni类含能结构材料 U_s-U_p 关系计算结果对比

Fig.12 Comparison of the U_s-U_p relationship of Al/Ni materials calculated from two modelling methods

表3 三种Al/Ni类含能结构材料状态方程参数计算结果

Table 3 The calculated Hugoniot parameters of three Al/Ni composites

Material No.	mesoscale model	$C_0^{(1)}/\text{km}\cdot\text{s}^{-1}$	$S^{(2)}$
1#	based on SEM	4.65	1.10
	with uniform particles	4.64	1.09
2#	based on SEM	4.81	1.12
	with uniform particles	4.72	1.10
3#	based on SEM	4.77	1.01
	with uniform layers	4.91	0.82

Note: 1) C_0 is sound velocity. 2) S is a constant in shock equation of states.

而对比2#材料两种细观模型计算结果可以发现,基于SEM照片建立的细观模型计算得到声速和冲击波速度均高于细观颗粒形状均匀的细观模型计算结果。这主要是由于2#材料中的Al颗粒含量高于1#材料,同时SEM照片也表明2#材料细观结构中的Al颗粒团聚现象相比于1#材料更为显著,因此采用均匀化建模方法得到的细观模型不能准确体现材料颗粒的分布情况。该结果表明,在材料细观结构中,若颗粒分布较为离散,两种建模方法计算的宏观状态方程参数结果相近;若某一颗粒含量较高而在细观结构中出现大面积的团聚现象,应优先采用SEM照片生成的细观模型。另外,对于3#材料,基于SEM照片建立的细观模型计算得到的材料声速低于细观层均匀化的模型计算结果,而基于SEM照片建立的细观模型得到的材料参数 S 高于细观层均匀化的模型计算结果。结合前述分析可知,细观结构均匀化建模方法不适用于描述Al/Ni多层复合材料的冲击响应行为。

4 结论

以三种典型的Al/Ni类含能结构材料为研究对象,分析了材料配比、制备工艺对其细观结构特性的影响机制,同时结合细观结构照片和细观颗粒初始形态建立了该类材料的冲击压缩细观模型。基于两种细观模拟方法的冲击压缩响应特性计算结果得到如下规律:

(1) Al/Ni粉末复合材料的细观颗粒主要以Ni为基体,且Al颗粒随着其含量的上升而发生团聚;而Al/Ni多层复合材料主要以Al为基体,Ni近似于平行分布其中。

(2) Al/Ni类含能结构材料细观结构存在不均匀特性,导致材料在冲击压缩过程中产生局部高压和局部热点,而这一特性无法由材料初始颗粒形态建立的均匀化细观模型得到。

(3) 在冲击Hugoniot参数计算方面,两种建模方法对细观颗粒分布较为离散的Al/Ni粉末复合材料的计算结果相近,但对于Al/Ni多层复合材料及细观结构中存在颗粒大量团聚的Al/Ni粉末复合材料计算结果存在显著差异。

参考文献:

- [1] 刘晓俊,任会兰.一种反应材料制备及准静态力学特性研究[J].北京理工大学学报,2016,36(4):365-369.
LIU Xiao-Jun, REN Hui-lan. Preparation and quasi-static me-

- chanical properties of a reactive material [J]. *Transaction of Beijing Institute of Technology*, 2016, 36(4): 365-369.
- [2] Wu Q, Zhang Q, Long R, et al. Potential space debris shield structure using impact-initiated energetic materials composed of polytetrafluoroethylene and aluminum [J]. *Applied Physics Letters*, 2016, 108(10): 101903.
- [3] 肖艳文, 徐峰悦, 郑元枫, 等. 活性材料弹丸碰撞油箱引燃效应实验研究[J]. 北京理工大学学报, 2017, 37(6): 557-561.
XIAO Yan-wen, XU Feng-yue, ZHENG Yuan-feng, et al. Experimental study on ignition effects of fuel-filled tank impacted by reactive material projectile [J]. *Transaction of Beijing Institute of Technology*, 2017, 37(6): 557-561.
- [4] 肖艳文, 徐峰悦, 余庆波, 等. 高密度活性破片碰撞双层靶毁伤效应[J]. 科技导报, 2017, 35(10): 99-103.
XIAO Yan-wen, XU Feng-yue, YU Qing-bo, et al. Damage of double-spaced plates by reactive material fragment impact [J]. *Science & Technology Review*, 2017, 35(10): 99-103.
- [5] 张雪朋, 肖建光, 余庆波, 等. 活性射流作用钢靶侵蚀爆炸联合毁伤效应[J]. 北京理工大学学报, 2017, 37(8): 789-800.
ZHANG Xue-peng, XIAO Jian-guang, Yu Qing-bo, et al. Penetration and blast combined damage effects of reactive material jet against steel target [J]. *Transaction of Beijing Institute of Technology*, 2017, 37(8): 789-800.
- [6] 潘文强, 付代轩, 赖康华, 等. 含能射孔弹双层药型罩穿孔性能研究[J]. 爆破器材, 2017, 46(2): 31-34.
PAN Wen-qiang, FU Dai-xuan, LAI Kang-hua, et al. Study on Penetration Performance of Bi-layer Liner in Energetic Penetrating Charge [J]. *Explosive Materials*, 2017, 46(2): 31-34.
- [7] 叶文君, 汪涛, 鱼银虎. 氟聚合物基含能反应材料研究进展[J]. 宇航材料工艺, 2013, 42(6): 19-23.
YE Wen-jun, WANG Tao, YU Yin-hu. Research Progress of Fluoropolymer-Matrix Energetic Reactive Materials [J]. *Aerospace Materials and Technology*, 2013, 42(6): 19-23.
- [8] Numula A K. Reactive current activated tip-based sintering of nickel aluminides [D]. Faculty of San Diego State University.
- [9] Martin M. Processing and characterization of energetic and structural behavior of nickel aluminum with polymer binders [D]. Georgia Institute of Technology, 2005.
- [10] Zhang X F, Zhang J, Qiao L, et al. Experimental study of the compression properties of Al/W/PTFE granular composites under elevated strain rates [J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2013, 581: 48-55.
- [11] Wei C T, Vitali E, Jiang F, et al. Quasi-static and dynamic response of explosively consolidated metal-aluminum powder mixtures [J]. *Acta Materialia*, 2012, 60(3): 1418-1432.
- [12] Specht P E, Weihs T P, Thadhani N N. Interfacial Effects on the Dispersion and Dissipation of Shock Waves in Ni/Al Multi-layer Composites [J]. *Journal of Dynamic Behavior of Materials*, 2016, 2(4): 500-510.
- [13] Reeves R V, Mukasyan A S, Son S F. Thermal and impact reaction initiation in Ni/Al heterogeneous reactive systems [J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2010, 114(35): 14772-14780.
- [14] Williamson R L. Parametric studies of dynamic powder consolidation using a particle-level numerical model [J]. *Journal of Applied Physics*, 1990, 68(3): 1287-1296.
- [15] Benson D J. The calculation of the shock velocity—particle velocity relationship for a copper powder by direct numerical simulation [J]. *Wave Motion*, 1995, 21(1): 85-99.
- [16] Benson D J, Conley P. Eulerian finite-element simulations of experimentally acquired HMX microstructures [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 1999, 7(3): 333-354.
- [17] Austin R A. Modeling shock wave propagation in discrete Ni/Al powder mixtures [D]. Georgia Institute of Technology, 2010.
- [18] Austin R A, McDowell D L, Benson D J. Numerical simulation of shock wave propagation in spatially-resolved particle systems [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2006, 14(4): 537-561.
- [19] Austin R A, McDowell D L, Benson D J. Mesoscale simulation of shock wave propagation in discrete Ni/Al powder mixtures [J]. *Journal of Applied Physics*, 2012, 111(12): 123511.
- [20] 乔良, 张先锋, 何勇, 等. 颗粒金属材料冲击压缩细观力学仿真模型生成方法[J]. 南京理工大学学报, 2013, 37(2): 219-225.
QIAO Liang, ZHANG Xian-feng, HE Yong, et al. Study on generation of shock compression meso-mechanic simulation model for particle metal materials [J]. *Journal of Nanjing University of Science and Technology*, 2013, 37(2): 219-225.
- [21] Qiao L, Zhang X F, He Y, et al. Mesoscale simulation on the shock compression behaviour of Al-W-Binder granular metal mixtures [J]. *Materials & Design*, 2013, 47: 341-349.
- [22] Eakins D E, Thadhani N N. Mesoscale simulation of the configuration-dependent shock-compression response of Ni+ Al powder mixtures [J]. *Acta Materialia*, 2008, 56(7): 1496-1510.
- [23] Eakins D E, Thadhani N N. Discrete particle simulation of shock wave propagation in a binary Ni+ Al powder mixture [J]. *Journal of Applied Physics*, 2007, 101(4): 043508.
- [24] Xiong W, Zhang X, Zheng L, et al. The shock-induced chemical reaction behaviour of Al/Ni composites by cold rolling and powder compaction [J]. *Journal of Materials Science*, 2019, 54(8): 6651-6667.
- [25] Johnson G R, Cook W H. A constitutive model and data for metals subjected to large strains, high strain rates and high temperatures [C]// Proceedings of the 7th International Symposium on Ballistics, 1983.
- [26] Xiong W, Zhang X, Tan M, et al. The Energy Release Characteristics of Shock-Induced Chemical Reaction of Al/Ni Composites [J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2016, 120(43): 24551-24559.
- [27] 汤文辉, 张若棋. 物态方程理论及计算概论 [M]. 高等教育出版社, 2008.
TANG Wen-hui, ZHANG Ruo-qi. Introduction to Theory and Computation of Equation of State [M]. Beijing: Higher Education Press, 2008.
- [28] Vitali E, Wei C-T, Benson D J, et al. Effects of geometry and intermetallic bonding on the mechanical response, spalling and fragmentation of Ni-Al laminates [J]. *Acta Materialia*, 2011, 59(15): 5869-5880.
- [29] Peyre P, Chaieb I, Braham C. FEM calculation of residual stresses induced by laser shock processing in stainless steels [J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2007, 15(3): 205-221.
- [30] Zhang X F, Qiao L, Shi A S, et al. A cold energy mixture theory for the equation of state in solid and porous metal mixtures [J]. *Journal of Applied Physics*, 2011, 110(1): 013506.

- [31] Jordan J L, Herbold E B, Sutherland G, et al. Shock equation of state of multi-constituent epoxy-metal particulate composites [J]. *Journal of Applied Physics*, 2011, 109(1): 013531.
- [32] Reding D J. Multiscale chemical reactions in reactive powder metal mixtures during shock compression [J]. *Journal of Applied Physics*, 2010, 108(2): 024905.
- [33] Lemons D S, Lund C M. Thermodynamics of high temperature, Mie - Gruneisen solids[J]. *American Journal of Physics*, 1999, 67(12): 1105-1108.
- [34] Meyers M A. Dynamic behavior of materials[M]. *John Wiley & Sons*, 1994.
- [35] Boslough M B. A thermochemical model for shock-induced reactions (heat detonations) in solids[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1990, 92(3): 1839-1848.
- [36] 熊玮,张先锋,陈亚旭,等.冷轧成型Al/Ni多层复合材料力学行为与冲击释能特性研究[J].*爆炸与冲击*, 2019, 39(5): 055301.
- XIONG Wei, ZHANG Xian-feng, CHEN Ya-xu, et al. Mechanical properties and shock-induced chemical reaction behaviors of cold-rolled Al/Ni multi-layered composites [J]. *Explosion and Shock Waves*, 2019, 39(5): 055301.
- [37] Xiong W, Zhang X, Wu Y, et al. Influence of additives on microstructures, mechanical properties and shock-induced reaction characteristics of Al/Ni composites [J]. *Journal of Alloys And Compounds*, 2015, 648: 540-549.

Mesoscale Modeling on Dynamic Behavior of Al/Ni Energetic Structural Materials Under Shock Compression

XIONG Wei, ZHANG Xian-feng, CHEN Hai-hua, DU Ning, BAO Kuo, TAN Meng-ting

(School of Mechanical Engineering, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China)

Abstract: The dynamic behavior of Al/Ni energetic structural materials under shock compression loading was investigated by mesoscale simulation. The influence of material composition and manufacturing technique on microstructures were analyzed against the scanning electron micrographs (SEMs) of three typical Al/Ni materials. Two types of mesoscale models were established based on the SEMs and the uniform particle morphologies of Al/Ni material, respectively. The shock responses of Al/Ni material, including particle deformation, pressure, temperature, and propagation of shock waves, were analyzed. The results show that, as for Al/Ni powder composites, Ni particles are the main components of the matrix, and the embedded Al particles gradually reunite with its volume fraction increasing. In contrast, Al layers are the main components of the matrix of Al/Ni multi-layered composites, and Ni particles parallelly distributed in the material. The mesoscale model with the uniform particles could not be used to predict the formations of local high pressure and hot spots, since that such processes are related to the heterogeneous microstructure of Al/Ni materials.

Key words: energetic structural materials; shock compression; hot spots; mesoscale simulation

CLC number: TJ55; O382

Document code: A

DOI: 10.11943/CJEM2020171

(责编:高毅)