

W骨架/Zr基非晶合金复合材料细观损伤模拟研究

魏 壮¹, 高 敏¹, 段静波², 施冬梅¹, 李 琛², 张玉令¹, 李文钊¹

(1. 陆军工程大学, 河北 石家庄 050003)

(2. 石家庄铁道大学, 河北 石家庄 050043)

摘要: 为研究W骨架/Zr基非晶合金复合材料的细观结构损伤, 基于W骨架/Zr基非晶合金复合材料的扫描电子显微镜图像建立了复合材料的细观尺度有限元模型, 并结合内聚力模型对复合材料的准静态压缩过程进行了数值模拟, 研究了界面刚度、界面强度和断裂能等参数对复合材料力学性能的影响。通过与准静态压缩试验数据对比, 确定了内聚力模型参数的取值。结果表明, W骨架/Zr基非晶合金复合材料在压缩过程中出现了3种破坏模式, 分别是W颗粒的解理断裂、Zr基非晶合金内部的剪切带扩展断裂及两相间的界面开裂; 内聚力模型参数对仿真曲线有很大影响, 加大界面刚度会使仿真曲线弹性阶段的斜率升高, 增加界面强度会使曲线的屈服点上升, 提高断裂能会使曲线塑性阶段缩短。当界面刚度、界面强度、断裂能分别取10 000 GPa/ μm^3 、500 MPa、0.055 J/m²时, 仿真结果与试验结果吻合较好, 仿真模型能够准确地描述W骨架/Zr基非晶合金复合材料的力学行为。

关键词: W骨架/Zr基非晶合金复合材料; 内聚力模型; 数值模拟; 细观结构损伤

中图分类号: TB34; TB331

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2025)04-1026-08

1 引言

Zr基非晶合金是一种多功能含能结构材料^[1], 与传统晶态金属不同, 内部原子排列具有长程无序、短程有序的特点^[2-3], 在物理化学性能上表现出独特的优势。其具有高强度、高硬度、高弹性极限等优异的力学性能^[4], 还能在高速冲击条件下引发剧烈的释能反应, 释放出大量的能量^[5-8]。然而, Zr基非晶合金的密度较小^[9-11], 限制了其作为战斗部材料的应用。为了克服这一缺点, 研究者们将W骨架作为连续相与Zr基非晶合金复合制备成双连续相三维连通复合材料。W骨架/Zr基非晶合金复合材料不仅具有理想的能量释放特性, 且强度远高于其他传统多功能含能结构材料, 是一种有价值的新型多功能含能结构材料^[12]。这种复合材料的制备工艺及力学性能引起了国内外学者的广泛研究。通过液压工艺和渗流铸造等方法制备的复合材料在力学性能上表现出卓越的强度和塑性^[13-14]。W骨架/Zr基非晶合金复合材料的压缩试验表明, 相对于纯Zr基非晶合金, 复合材料的断裂应力和断裂应变有显著增加, 并表现出一定的加工硬化。扫描电子显微镜技术的应用揭示了复合材料的断裂模式, 包括W颗粒的解理断裂与沿晶断裂、非晶的撕裂及两相间界面的脱离等^[15-17]。

细观力学作为一门研究材料微观结构与宏观性能关

系的学科, 提供了一个理想的框架, 用于深入理解和预测材料的行为。从细观力学角度出发, 可以揭示材料内部的力学行为和变形机制, 对于优化材料设计和预测其在实际应用中的性能至关重要。细观力学仿真作为材料变形及损伤动态过程的重要研究手段, 在固体火箭推进剂、岩石混凝土、纤维增强复合材料等领域应用较为广泛, 针对W骨架/Zr基非晶合金复合材料的研究还相对较少。Zhang等^[18-19]首次采用该方法研究了W骨架/Zr基非晶复合材料在压缩条件下的微观力学行为及W相体积分数对复合材料力学性能的影响, 仿真结果与试验结果一致性较好。张云峰等^[20]基于两点概率函数重构了W骨架/Zr基非晶合金复合材料的代表体积单元, 有效地提高了数值仿真的效率。但是, 在上述仿真研究过程中, 仅建立了W相与Zr基非晶合金相的有限元模型, 并未考虑两相间界面的存在, 而界面开裂也是导致复合材料宏观破坏的一个重要因素。因此, 关于该复合材料的细观结构变形及损伤的研究还有待进一步完善。

本研究基于细观力学仿真的方法对W骨架/Zr基非晶合金复合材料细观结构变形及损伤进行研究。首先开展W骨架/Zr基非晶合金复合材料室温下准静态压缩试验, 对复合材料力学性能及破损形貌进行研究。其次, 基于扫描电子显微镜(SEM)图像, 建立W骨架/Zr基非晶

收稿日期: 2024-04-29

基金项目: 冲击与安全工程教育部重点实验室开放基金(CJ202311); 河北省军民融合科技创新项目(SJMYF2022Y22)

作者简介: 魏 壮, 男, 1997年生, 博士生, 陆军工程大学, 河北 石家庄 050003, E-mail: w740646390@163.com

合金复合材料细观尺度有限元模型,采用商业有限元分析软件ABAQUS在复合材料两相之间插入内聚力模型,并根据压缩试验结果对内聚力模型参数进行标定。最后,利用标定好的参数,对W骨架/Zr基非晶合金复合材料进行压缩载荷作用下的细观损伤仿真分析,并与试验结果进行对比,以验证仿真方法的正确性。

2 准静态压缩实验

2.1 试件制备

在电弧炉中将高纯金属Zr、Cu、Ni、Al熔炼成纯度为99.8%或更高的非晶合金锭。采用粉末冶金法在氢气气氛中制备了体积分数为50%的三维连通W骨架作为基体。最后利用真空浸渗法制备了W骨架/Zr基非晶合金复合材料。为了进行准静态压缩试验,利用线切割将复合材料棒加工成 $\Phi 5\text{ mm} \times 5\text{ mm}$ 的圆柱试样,为了保证试样两端完全平行和光滑,使用砂纸对试样的上下端面进行打磨,并将凡士林涂抹在试件的端面。

2.2 准静态压缩试验

采用电子万能试验机对W骨架/Zr基非晶合金复合材料进行准静态压缩试验。通过改变压缩速度,获得了不同应变速率下的准静态压缩试验数据。试验结果如图1所示,在0.09~3 mm/min范围内的压缩速度下,复合材料的压缩强度随着应变速率的升高有增大的趋势,这是由于复合材料内部自由体积的跃迁与重排的时间会随着应变速率的增大而变长,使得同等变形所需要的应力水平提高。复合材料的压缩强度变化范围为1.52~1.67 GPa,平均压缩强度为1.59 GPa。在压缩过程中,复合材料首先经历弹性变形阶段,其弹性模量约为167 GPa,介于Zr基非晶合金和金属钨之间。随着应力的逐渐增加,曲线达到屈服点,开始进入塑性阶段,应力随应变的升高不断攀升,呈现出加工硬化现象,这表明与W颗粒或W纤维增强方式相比,W骨架的三维连通结构使得微剪切带和微裂纹在两相中传播及在界面处发散变得更加困难。当应力达到最大值后,材料发生断裂,最大断裂应变为4.2%,相对于纯Zr基非晶合金表现出一定的塑性变形能力,表明W相与非晶合金相组成的双连续三维连通结构能够在一定程度上弥补彼此的缺陷,使得复合材料的变形更加均匀,有利于提高整体的塑性。

2.3 细观特征

采用SEM对压缩前的W骨架/Zr基非晶合金复合材料的微观结构进行表征,从图2中可以观察到,W相与非晶相分布均匀,内部孔隙填充完全,不存在空洞缺陷,两相界面结合良好,界面清晰,并未发生反应产生第三相。

为深化对W骨架/Zr基非晶合金复合材料断裂机理的理解,对准静态压缩后的试样断裂面进行了微观形貌观察。通过对图3a的分析发现,复合材料侧表面的W相与

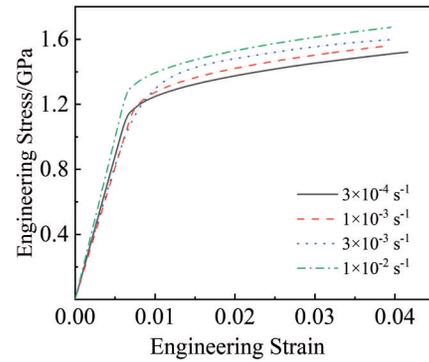


图1 不同应变速率的试件在准静态压缩下的工程应力-应变曲线
Fig.1 Engineering stress-engineering strain curves of specimens at different strain rates under quasi-static compression

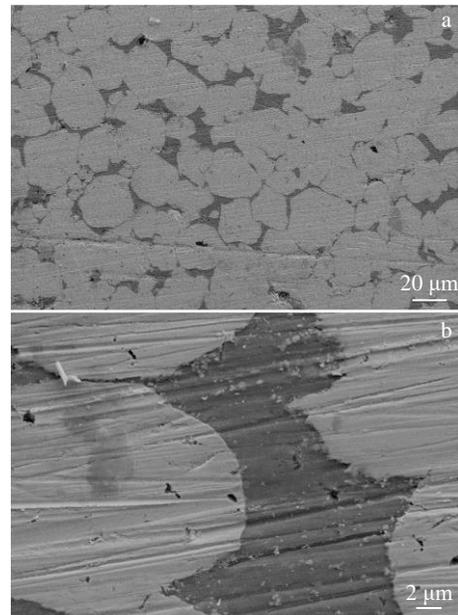


图2 W骨架/Zr基非晶合金复合材料SEM照片
Fig.2 SEM images of porous W/Zr-based metallic glass composite: (a) two-phase distribution and (b) interface condition

非晶相分布均匀。其中,颜色较暗的区域为非晶相,颜色较亮的区域为W相。此外,可以清楚看到非晶相内部在与两相界面垂直方向上分布着多条裂纹。在W相的断裂区域,有一些非晶相残留。这可能是由于非晶相在断裂时,其裂纹沿着与界面垂直的方向传播到W相中,引发了W相的断裂。但是,由于W相与非晶相间的界面阻碍了非晶相裂纹的扩展,因此W相中出现的裂纹相对较少,并且在扩展几十个微米后就消失。当应力达到界面强度后,W相与非晶相之间的界面因应力集中而开裂。

通过图3b的观察,能够看到非晶合金相中分布着2颗W颗粒,W颗粒的大小相对均匀,粒径大约为数百微米。据此,能够推测W相中发生了W颗粒的脱落。图3c

揭示了W相的断裂面呈明显的台阶形态,这表明W颗粒的解理断裂也是导致复合材料失效破坏的一个主要因素。从图3d中发现非晶相的断口处分布着一些脉状纹样,这是由于非晶合金相在压缩过程中局部温度升高过快,导致出现热软化现象。

综上所述,W骨架/Zr基非晶合金复合材料表现出了3种不同的断裂模式,包括W相的解理断裂、Zr基非晶合金内部的剪切带扩展断裂以及W相和非晶相之间的界面断裂。在准静态压缩过程中,由于W相和非晶合金的弹性模量差异较大,导致两相界面的应力-应变不协调,出现应力集中的现象,引发了界面开裂。随着压缩载荷的增加,非晶合金相开始形成剪切带,并向两相界面扩展。然而,由于界面和W相的阻碍作用,剪切带在非晶合金相中的传播受到限制,导致形成了多条细小的剪切带,从而避免了复合材料因主要剪切带快速扩展导致的脆性断裂。同时,非晶合金相对于W相中的裂纹扩展也起到一定的抑制作用。综合而言,两相材料之间的相互制约作用增强了W骨架/Zr基非晶合金复合材料的整体强度与塑性变形能力。

3 微观数值模拟

3.1 几何模型

基于W骨架/Zr基非晶合金复合材料SEM图像,利用图像数据分析软件与商业有限元分析软件建立了复合材料的细观几何模型,如图4所示。为了准确地描述复合材料的力学响应,细观模型必须满足周期性边界条件,以保证变形场的均匀性^[21]。这就要求几何模型具有周期性结构,即当非晶相与模型边界相交时,将该非晶相切割

成两部分,位于边界外面的部分会被移动到对侧的边界中^[22]。通过堆叠可以创建一个在宏观上近似实际材料的几何模型,如图5所示。同时,还需对边界节点施加位移连续条件和应力连续条件。相对边界上($L_1 \leftrightarrow L_2, L_3 \leftrightarrow L_4$)的顶点(A_0, A_1, A_2)满足位移连续条件如下:

$$\begin{cases} \vec{U}_{L_1} - \vec{U}_{L_2} = \vec{U}_{A_2} - \vec{U}_{A_0} \\ \vec{U}_{L_4} - \vec{U}_{L_3} = \vec{U}_{A_1} - \vec{U}_{A_0} \end{cases} \quad (1)$$

应力连续条件:

$$\begin{cases} \sigma_{L_1} \cdot n_{L_1} = -\sigma_{L_2} \cdot n_{L_2} \\ \sigma_{L_3} \cdot n_{L_3} = -\sigma_{L_4} \cdot n_{L_4} \end{cases} \quad (2)$$

式中, U_{L_i} 代表边界 L_i 上的点的位移矢量, $i=1, 2, 3, 4$; U_{A_j} 代表顶点 A_j 的位移矢量, $j=0, 1, 2$; σ_{L_i} 代表边界 L_i 的柯西应力张量; n_{L_i} 代表边界 L_i 的外法线单位向量。

3.2 本构模型

3.2.1 非晶合金相

非晶合金又被称为金属玻璃。与传统的金属晶体材料原子排列的周期性不同,非晶合金的原子排列具有长程无序和短程有序的特点。因此,其塑性流动机制与晶态金属完全不同。非晶合金在压缩载荷下普遍呈脆性断裂,原因是其塑性变形高度集中,微观结构极易萌生一条或者少数几条剪切带,剪切带的快速扩展导致了非晶合金宏观上的脆性破坏。因此剪切带的形成和演化对非晶合金的屈服强度及塑性应变有着显著的影响。虽然目前关于非晶合金内部原子运动的具体图像还没有被完全揭示,但其塑性变形是由一种能够容纳剪切变形的原子局部重排导致的这一观点已经得到领域内的认可^[23-25]。自

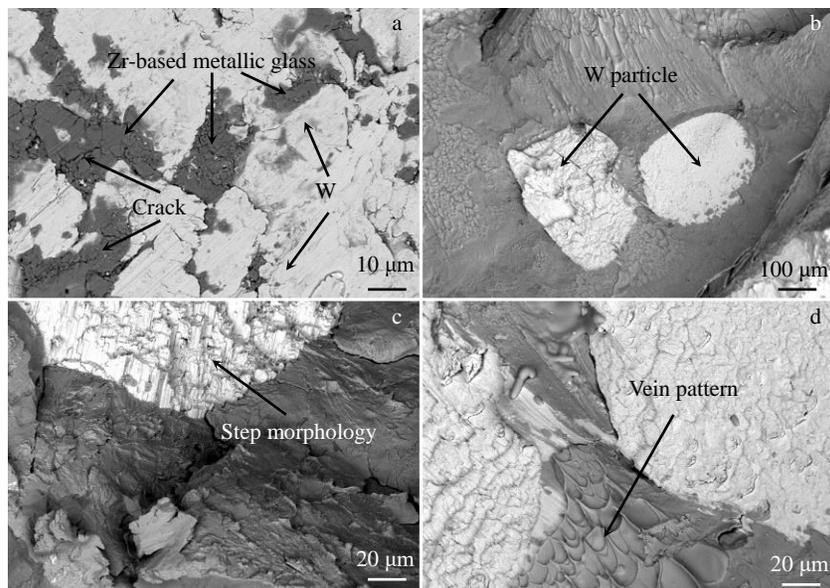


图3 W骨架/Zr基非晶合金复合材料试样断口形貌

Fig.3 Fracture morphology of the porous W/Zr-based metallic glass composite specimen: (a) crack propagation, (b) W particle abscission, (c) step morphology, and (d) vein pattern

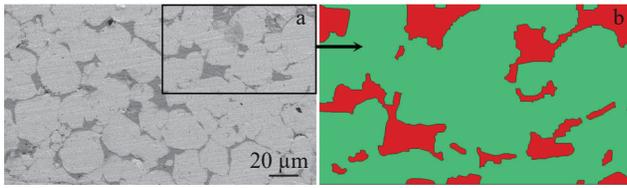


图4 W骨架/Zr基非晶合金复合材料代表体积单元(RVE)模型
Fig.4 Representative volume element (RVE) model of porous W/Zr-based metallic glass composite: (a) microstructure of the composite and (b) geometric model based on the microstructure



图5 具有周期性边界条件的RVE几何模型
Fig.5 RVE geometric model with periodic boundary conditions

由体积模型则是基于这一观点提出的能够描述非晶合金塑性流动机理的理论模型。根据该模型,材料内部高自由体积区域附近的原子跳跃会引起剪切应变。同时,该过程中自由体积的产生与湮灭之间存在竞争。在持续受力的情况下,自由体积的产生和聚集将导致材料的软化并形成剪切带。Spaepen^[23]考虑了在应力持续作用时自由体积产生和湮灭的竞争过程,提出了自由体积的演化方程:

$$\frac{\partial \bar{v}_f}{\partial t} = v^* f \exp\left(-\frac{\alpha v^*}{\bar{v}_f}\right) \exp\left(-\frac{\Delta G^m}{k_B T}\right) \times \left\{ \frac{2\alpha k_B T}{\bar{v}_f C_{\text{eff}}} \left[\cosh\left(\frac{\tau \Omega}{2k_B T}\right) - 1 \right] - \frac{1}{n_D} \right\} \quad (3)$$

式中, t 代表时间, f 代表原子振动频率; v^* 代表临界体积; α 代表考虑了原子叠加因素的几何因子; \bar{v}_f 代表原子平均自由体积; ΔG^m 代表原子跳跃的能垒; k_B 代表玻尔兹曼常数; Ω 为原子体积; n_D 代表湮灭自由体积数值为 v^* 时所需要的原子跳跃次数; τ 代表切应力; T 代表温度; $C_{\text{eff}} = E/3(1-\nu)$,代表Eshelby模量; E 代表弹性模量。

Huang^[26]和Gao^[27]等在Spaepen提出自由体积模型的基础上,将第二应力不变量 J_2 添加到该模型中,建立了适用于多轴应力状态的自由体积模型。首先将整体应变

率 $\dot{\epsilon}_{ij}$ 分解为弹性应变率 $\dot{\epsilon}_{ij}^e$ 与塑性应变率 $\dot{\epsilon}_{ij}^p$:

$$\dot{\epsilon}_{ij} = \dot{\epsilon}_{ij}^e + \dot{\epsilon}_{ij}^p \quad (4)$$

弹性分量表达式为:

$$\dot{\epsilon}_{ij}^e = \frac{1+\nu}{E} \left(\dot{\sigma}_{ij} - \frac{\nu}{1+\nu} \dot{\sigma}_{kk} \delta_{ij} \right) \quad (5)$$

塑性分量表达式为:

$$\dot{\epsilon}_{ij}^p = 2 \exp\left(-\frac{1}{v_f}\right) \sinh\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right) \cdot \frac{S_{ij}}{\sigma_e} \quad (6)$$

式中, ν 代表泊松比, δ_{ij} 代表克罗内克函数; $v_f = \bar{v}_f / (av^*)$,代表初始自由体积浓度; $\sigma_e = (3S_{ij}S_{ij}/2)^{1/2}$,代表Mises等效应力; $\sigma_0 = 2k_B T / \Omega$,代表参考应力; $S_{ij} = \sigma_{ij} - \sigma_{kk} \delta_{ij} / 3$,代表偏应力张量, σ_{ij} 、 σ_{kk} 代表应力张量; (\cdot) 代表某一物理量对时间的导数。

多轴应力状态下的自由体积演化方程为:

$$\dot{v}_f = \frac{1}{\alpha} \exp\left(-\frac{1}{v_f}\right) \times \left\{ \frac{3(1-\nu)}{E} \cdot \frac{\sigma_0}{\beta v_f} \left[\cosh\left(\frac{\sigma_e}{\sigma_0}\right) - 1 \right] - \frac{1}{n_D} \right\} \quad (7)$$

式中, $\beta = v^* / \Omega$ 。式(4)~式(7)共同构成了非晶合金的本构方程。该自由体积模型为描述非晶合金塑性流动机理提供了一种简单实用的理论模型,并为后续相关方面的理论研究奠定了基础。本构方程的相关参数见表1^[28]。

3.2.2 钨相

金属钨属于传统的晶态金属,其力学行为可以使用JOHNSON-COOK本构模型来描述^[29]。该模型通过应变、应变速率和温度等参数的乘积关系来描述各种因素对材料变形的影响,能够较好地表征金属在准静态到高速冲击状态下较宽应变速率范围内的力学行为。该模型的屈服应力表达式如下:

$$\sigma = \left(A + B \epsilon_p^n \right) \left(1 + C \ln \dot{\epsilon}^* \right) \left[1 - \left(\frac{T - T_r}{T_m - T_r} \right)^m \right] \quad (8)$$

式中,等号右侧第1项代表材料的应变硬化效应,第2项代表应变率强化作用,第3项代表温度软化效应。 A 为参考应变率和参考温度下的屈服强度; B 、 n 分别为材料硬化模量和硬化指数; C 为材料应变率敏感系数; m 为材料温度软化指数, ϵ_p 为等效塑性应变; $\dot{\epsilon}^* = \dot{\epsilon} / \dot{\epsilon}_0$ 为无量纲等效应变速率; T_m 为熔点温度; T_r 为室温; T 与材料的比热容有关。本构方程参数见表2^[30]。

3.3 内聚力模型

内聚力模型利用损伤变量描述材料损伤起始、损伤演化及完全损伤的过程,是模拟界面损伤断裂最有效的

表1 Zr基非晶合金相材料模型参数

Table 1 Parameters of the Zr-based metallic glass phase^[28]

E/GPa	ν	v_f	n_D	α	β	σ_0/GPa
96	0.36	0.05	3	0.15	1	0.1

表2 钨相材料模型参数

Table 2 Parameters of the tungsten phase^[30]

A/GPa	B/GPa	C	n	m	T _i /K	T _m /K
1.506	0.177	0.016	0.12	1.0	3400	293

方法之一^[31],对数值模拟结果有很大的影响。双线性内聚力模型被广泛用于复杂结构的损伤分析和破坏模拟,其优点在于简单易用,可以通过合适的参数来适应不同的材料和加载条件。该模型描述的是界面牵引力 σ 与位移 δ 之间的关系,并将从位移加载开始到单元完全损伤断裂的过程分为3个阶段^[32],如图6所示。其中 δ^0 为损伤起始的位移,当位移 $\delta < \delta^0$ 时,界面未出现损伤,此时为弹性阶段;当位移 $\delta = \delta^0$ 时,界面牵引力达到界面强度 σ_0 ,界面开始损伤,刚度 k 开始下降,此时界面进入损伤阶段;当位移 $\delta = \delta^f$ 时,界面完全损伤并发生断裂,界面失去承载能力,其中 G^C 为断裂能,可以解释为界面完全开裂所需的单位表面功。本构方程如下^[33]:

$$\sigma = \begin{cases} k\delta & \delta \leq \delta^0 \\ \sigma_0 \frac{\delta^f - \delta}{\delta^f - \delta^0} & \delta > \delta^0 \end{cases} \quad (9)$$

断裂能表达式为:

$$G^C = \frac{1}{2} \sigma_0 \delta^f \quad (10)$$

利用ABAQUS有限元分析软件在非晶基体与增强相之间插入四节点二维内聚力模型。图7展示了嵌入了内聚力模型的W骨架/Zr基非晶合金复合材料RVE有限元模型。

4 内聚力模型参数确定

在ABAQUS中,内聚力模型的本构关系主要由3个参数定义:界面刚度 k 、界面强度 σ_0 、断裂能 G^C 。由于通过试验直接测定内聚力模型参数较为困难,因此本工作采用文献[34]中提出的参数确定方法,对W骨架/Zr基非晶合金复合材料进行准静态压缩数值模拟,通过控制变量法不断调整内聚力模型参数,并与试验数据进行对比,

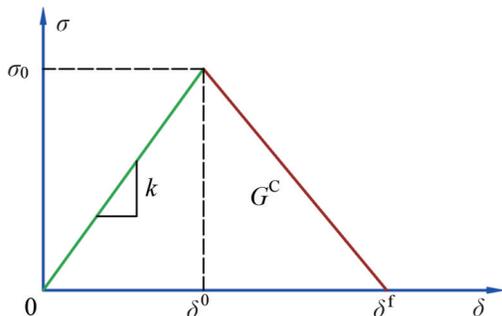


图6 双线性内聚力模型

Fig.6 Bilinear cohesive zone model

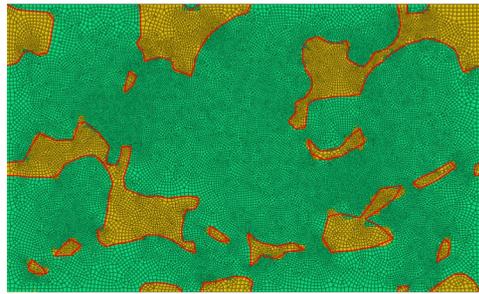


图7 W骨架/Zr基非晶合金复合材料RVE有限元模型

Fig.7 RVE finite element model of porous W/Zr-based metallic glass composite

直至仿真应力-应变曲线与试验应力-应变曲线吻合。

4.1 界面刚度的影响

在界面刚度参数的选择方面,国外学者提出了一些观点。Daudeville等^[35]根据弹性模量和界面厚度确定了界面刚度。Zou等^[36]提出界面刚度应为界面强度的 $10^4 \sim 10^7$ 倍。Turon等^[37]研究指出,当界面刚度大于材料弹性模量的50倍时,可以保证大多数界面开裂数值模拟结果的精度。界面刚度既需要足够大以确保数值模拟结果的准确性,同时也需要足够小以提高计算效率。为研究界面刚度对W骨架/Zr基非晶合金复合材料应变率增强效应的影响,在准静态压缩仿真中设置4个应变速率,并将界面刚度从 $1000 \text{ GPa}/\mu\text{m}^3$ 增加到 $10\,000 \text{ GPa}/\mu\text{m}^3$,同时保持其他内聚力模型参数不变。

通过观察图8a和8b可以发现,在界面刚度较小时,随着压缩应变速率的增加,W骨架/Zr基非晶合金复合材料的弹性模量和屈服强度呈现下降的趋势,与准静态压缩试验结果相反。这是因为加快压缩速率会导致内聚力模型的损伤和断裂提前发生。较小的界面刚度会使得界面损伤始于材料的弹性阶段,导致仿真应力-应变曲线弹性阶段的斜率和屈服点会随着应变速率的升高而下降。当界面刚度超过 $7500 \text{ GPa}/\mu\text{m}^3$ 时,内聚力模型能够为整体模型提供足够大的刚度,材料在不同压缩速率下的弹性模量基本保持一致,屈服强度随应变速率的升高而增加,表现出应变率强化效应,与准静态压缩试验结果变化趋势一致。

计算了W骨架/Zr基非晶合金复合材料在相同压缩应变速率下不同内聚界面刚度下的应力-应变,并与试验结果进行对比,见图9a。材料应力-应变曲线弹性阶段的斜率随着界面刚度的增加有上升的趋势。当界面刚度为 $7500 \text{ GPa}/\mu\text{m}^3$ 时,虽然为模型提供了足够的刚度,但其弹性阶段的斜率略小于试验曲线。当内聚界面刚度为 $15\,000 \text{ GPa}/\mu\text{m}^3$ 时,此时内聚界面刚度过大,使得仿真应力-应变曲线的弹性、屈服和塑性阶段均明显高于试验结

果。当内聚界面刚度取为 $10\ 000\ \text{GPa}/\mu\text{m}^3$ 时,数值模拟得到的应力-应变曲线与准静态压缩试验曲线基本重合。因此,将内聚界面刚度设置为 $10\ 000\ \text{GPa}/\mu\text{m}^3$ 是相对合理的选择,并且该值大于复合材料弹性模量的50倍,符合 Turon 等人提出的界面刚度确定方法^[37]。

4.2 界面强度的影响

界面强度对复合材料压缩力学性能有着重要的影响。较低的界面强度会导致材料在压缩过程中容易发生界面开裂,进而使得屈服强度和压缩强度降低^[38]。为了研究界面强度对仿真应力-应变曲线的影响,将界面刚度和断裂能保持不变,将界面强度从 $300\ \text{MPa}$ 增加到 $700\ \text{MPa}$,并观察应力-应变曲线的变化。图9b展示了W骨架/Zr基非晶合金复合材料在相同压缩应变速率下不同界面强度下的应力-应变曲线,并与试验曲线进行对比。结果表明,较小的界面强度会增强材料的界面损伤效应,而增加界面强度可以提高材料的屈服强度和压缩强度。当界面强度为 $500\ \text{MPa}$ 时,仿真应力-应变曲线弹性阶段的斜率及屈服点与试验曲线一致性较好。

4.3 断裂能的影响

为了研究内聚力模型断裂能对仿真应力-应变曲线的影响,将界面刚度和界面强度固定为 $10\ 000\ \text{GPa}/\mu\text{m}^3$ 和 $500\ \text{MPa}$,将断裂能从 $0.01\ \text{J}/\text{m}^2$ 增加到 $0.5\ \text{J}/\text{m}^2$,并将数值模拟得到的应力-应变曲线与试验曲线的对比,如图9c所示。从图中可以观察到,断裂能对曲线弹性阶段的上升斜率和屈服点影响较小,但对曲线的塑性阶段影响较为明显。较小的断裂能会导致塑性阶段缩短,界面开裂更快,材料破坏也更快。

5 模型验证

根据内聚力模型参数对W骨架/Zr基非晶合金复合材料压缩仿真曲线的影响,并通过与试验数据对比,将界面刚度、界面强度、断裂能的值分别取为 $10\ 000\ \text{GPa}/\mu\text{m}^3$ 、 $500\ \text{MPa}$ 、 $0.055\ \text{J}/\text{m}^2$ 。此时仿真结果的弹性模量、屈服强度、压缩强度与试验结果的误差分别为 5.1% 、 1.6% 、 0.5% ,仿真曲线与试验曲线一致性较好,如图9所示。图10展示了W骨架/Zr基非晶合金复合材料在准静态压缩过程中4个典型时刻的应力云图。在时间 $t=4.2\ \text{s}$ 时刻,材料中的应力出现最大值为 $1.76\ \text{GPa}$,W相和非晶相开

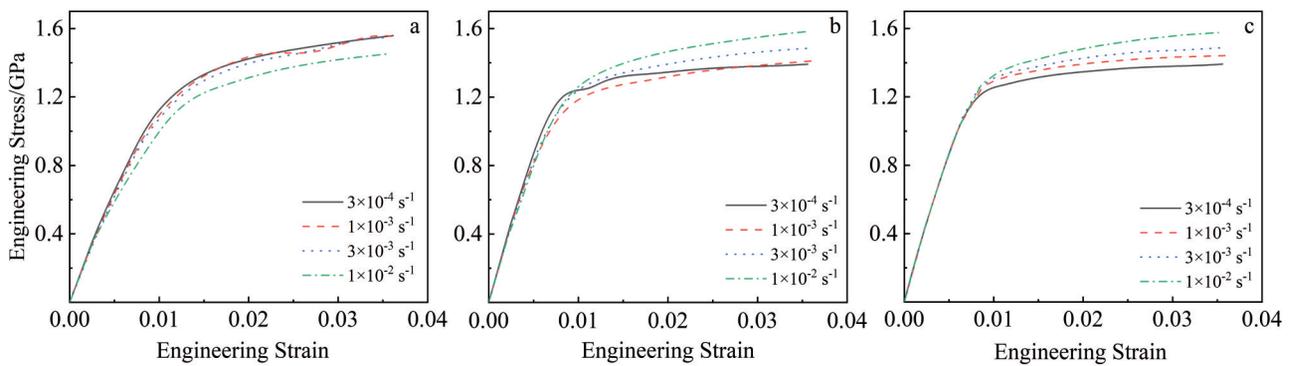


图8 不同界面刚度及不同应变速率下的工程应力-应变曲线

Fig.8 Engineering stress-engineering strain curves under different interface stiffness and different strain rates: (a) $k=1000\ \text{GPa}/\mu\text{m}^3$, (b) $k=5000\ \text{GPa}/\mu\text{m}^3$, and (c) $k=7500\ \text{GPa}/\mu\text{m}^3$

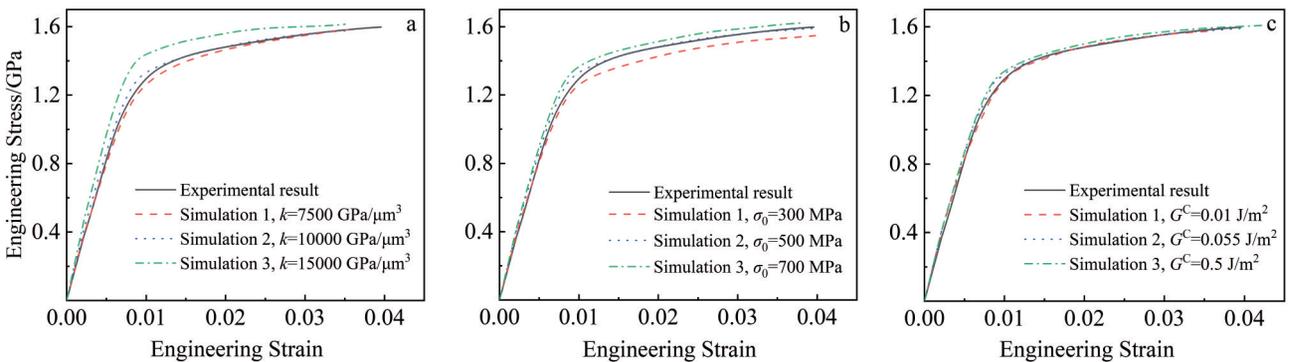


图9 不同内聚力模型参数下的仿真结果与试验结果对比

Fig.9 Comparison of simulation results and experimental results under different cohesive zone model parameters: (a) interface stiffness, (b) interface strength, and (c) fracture energy

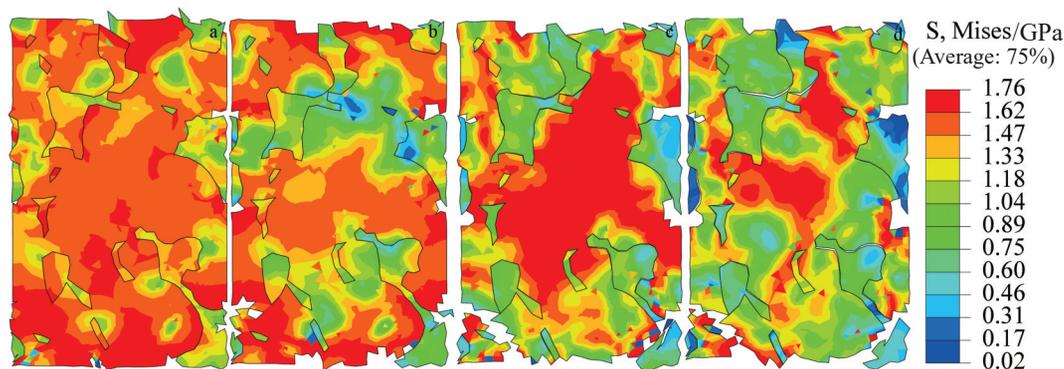


图 10 W 骨架/Zr 基非晶合金复合材料在准静态压缩下不同时刻的应力分布

Fig.10 Stress distributions of porous W/Zr-based metallic glass composite at different moments under quasi-static compression: (a) $t=4.2$ s, (b) $t=5.2$ s, (c) $t=6.8$ s, and (d) $t=8.0$ s

始出现裂纹。在 $t=5.2$ s 时刻,材料的应力开始下降,裂纹开始扩展,两相间的一些界面发生开裂。在 $t=6.8$ s 时刻,非晶相和 W 相发生大面积的断裂,裂纹附近的 W 相单元受到界面开裂的影响被删除。与此同时,材料中间部位的界面也开始出现损伤,直到 8.0 s 时发生开裂。材料破坏过程中主要发生了 W 相、非晶合金相的断裂以及两相界面的开裂,与扫描电镜试验中观察到的现象一致。该数值模拟方法能够准确地描述该复合材料的力学行为,为进一步研究该复合材料的性能和应用提供了基础。

6 结论

1) W 骨架/Zr 基非晶合金复合材料在压缩过程中表现出了加工硬化现象,在准静态压缩条件下平均压缩强度达到 1.59 GPa。材料的断裂存在 3 种破坏模式,分别是 W 颗粒的解理断裂、Zr 基非晶合金内部的剪切带扩展断裂、W 相与非晶相之间的界面开裂。

2) 内聚力模型参数对数值模拟结果有很大的影响,加大界面刚度会使材料应力-应变曲线弹性阶段的斜率升高,增加界面强度会使曲线的屈服点上升,提高断裂能则是会使曲线塑性阶段缩短。通过与试验结果对比,将界面刚度、界面强度、断裂能的值分别取为 $10\ 000\ \text{GPa}/\mu\text{m}^3$ 、 $500\ \text{MPa}$ 、 $0.055\ \text{J}/\text{m}^2$ 。

3) W 骨架/Zr 基非晶合金复合材料细观结构压缩数值模拟结果与试验结果吻合良好,该数值模拟方法能够准确地描述该复合材料的力学行为,为进一步研究该复合材料的性能和应用提供了基础。

参考文献 References

[1] Zhang Xianfeng(张先锋), Zhao Xiaoning(赵晓宁). *Chinese Journal of Energetic Materials*(含能材料)[J], 2009, 17(6): 731
 [2] Zhang Z F, He G, Eckert J et al. *Physical Review Letters*[J], 2003, 91(4): 045505
 [3] Zhang Z F, Eckert J. *Physical Review Letters*[J], 2005, 94(9):

094301

[4] Wang Weihua(汪卫华). *Progress in Physics*(物理学进展)[J], 2013, 33(5): 177
 [5] Zhang Yunfeng(张云峰), Luo Xingbai(罗兴柏), Shi Dongmei(施冬梅) et al. *Explosion and Shock Waves*(爆炸与冲击)[J], 2019, 39(6): 063101
 [6] Chen Xi(陈曦), Du Chengxin(杜成鑫), Cheng Chun(程春) et al. *Ordnance Material Science and Engineering*(兵器材料科学与工程)[J], 2018, 41(6): 44
 [7] Zhang Yunfeng(张云峰), Luo Xingbai(罗兴柏). *Journal of Ordnance Equipment Engineering*(兵器装备工程学报)[J], 2021, 42(6): 133
 [8] Shang Chunming(尚春明), Shi Dongmei(施冬梅), Zhang Yunfeng(张云峰) et al. *Chinese Journal of Energetic Materials*(含能材料)[J], 2020, 28(6): 565
 [9] Shi Yongxiang(石永相), Shi Dongmei(施冬梅), Li Wenzhao(李文钊) et al. *Explosion and Shock Waves*(爆炸与冲击)[J], 2019, 39(9): 093104
 [10] Zhang Yunfeng(张云峰), Luo Xingbai(罗兴柏), Liu Guoqing(刘国庆) et al. *Explosion and Shock Waves*(爆炸与冲击)[J], 2020, 40(7): 073101
 [11] Wang W H, Dong C, Shek C H. *Materials Science and Engineering R: Reports*[J], 2004, 44(2-3): 45
 [12] Zhang Yunfeng, Luo Xingbai, Liu Guoqing et al. *Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2020, 49(8): 2549
 [13] Son C Y, Lee S B, Lee S K et al. *Intermetallics*[J], 2010, 18(10): 1880
 [14] Xue Y F, Cai H N, Wang L et al. *Applied Physics Letters*[J], 2007, 90(8): 081901
 [15] Xue Y F, Cai H N, Wang L et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2007, 445-446: 275
 [16] Pan Nianqiao(潘念侨), Du Zhonghua(杜忠华), Xu Lu(徐璐). *Nonferrous Metals Science and Engineering*(有色金属科学与工程)[J], 2016, 7(1): 48
 [17] Shao Changxing(邵长星), Cai Hongnian(才鸿年), Wang Lu(王

- 鲁) *et al. Ordnance Material Science and Engineering*(兵器材料科学与工程)[J], 2006, 29(3): 1
- [18] Zhang X Q, Wang L, Fan Q B *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2014, 598: 407
- [19] Zhang X Q, Xue Y F, Wang L *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2015, 643: 55
- [20] Zhang Yunfeng(张云峰), Luo Xingbai(罗兴柏), Shi Dongmei(施冬梅) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2019, 48(1): 137
- [21] Zhang Yihao(张益豪), Yan Yi(严毅), Wang Zhenjun(王振军) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2022, 51(2): 661
- [22] Li Qing(李庆), Yang Xiaoxiang(杨晓翔). *Chinese Journal of Solid Mechanics*(固体力学学报)[J], 2013, 34(6): 541
- [23] Spaepen F. *Acta Metallurgica*[J], 1977, 25(4): 407
- [24] Emmerich F G. *Journal of Applied Physics*[J], 2007, 102(7): 073504
- [25] Dong C, Wang Q, Qiang J B *et al. Journal of Physics D: Applied Physics*[J], 2007, 40(15): R273
- [26] Huang R, Suo Z, Prevost J H *et al. Journal of the Mechanics and Physics of Solids*[J], 2002, 50(5): 1011
- [27] Gao Y F. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2006, 14(8): 1329
- [28] Li J C, Chen X W, Huang F L. *Materials Science and Engineering A*[J], 2016, 652: 145
- [29] Li J C, Chen X W, Huang F L. *International Journal of Impact Engineering*[J], 2015, 86: 67
- [30] Qiu Qunxian(邱群先), Liu Keke(刘可可), Gao Bo(高博). *Machinery Design and Manufacture*(机械设计与制造)[J], 2021(7): 259
- [31] Xie Hao(谢浩), Sun Xiaotong(孙晓彤), Men Yanqing(门燕青) *et al. Journal of Northwestern Polytechnical University*(西北工业大学学报)[J], 2022, 40(1): 175
- [32] Li Jianhua, Zhang Cheng, Feng Ruicheng *et al. Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2021, 50(5): 1617
- [33] Long H, Liu Y W, Wei Y G. *Engineering Fracture Mechanics*[J], 2022, 265: 108363
- [34] Yang Ziqing(杨梓清). *Henan Science and Technology*(河南科技)[J], 2021, 40(15): 14
- [35] Daudeville L, Allix O, Ladevèze P. *Composites Engineering*[J], 1995, 5(1): 17
- [36] Zou Z, Reid S R, Li S *et al. Journal of Composite Materials*[J], 2002, 36(4): 477
- [37] Turon A, Dávila C G, Camanho P P *et al. Engineering Fracture Mechanics*[J], 2007, 74(10): 1665
- [38] Senthilnathan N, Annamalai A R, Venkatachalam G. *Materials Science and Engineering A*[J], 2018, 710: 66

Microscopic Damage Simulation of Porous W/Zr-Based Metallic Glass Composite

Wei Zhuang¹, Gao Min¹, Duan Jingbo², Shi Dongmei¹, Li Chen², Zhang Yuling¹, Li Wenzhao¹

(1. Army Engineering University of PLA, Shijiazhuang 050003, China)

(2. Shijiazhuang Tiedao University, Shijiazhuang 050043, China)

Abstract: To investigate microscopic microstructural damage of porous W/Zr-based metallic glass composite, the microscopic-scale finite element model of the composite was established based on their scanning electron microscope images, and the quasi-static compression process of the composite was numerically simulated in conjunction with the cohesive zone model. The effects of interface stiffness, interface strength and fracture energy on the mechanical properties of the composite were investigated, and the values of cohesive zone model parameters were determined by comparing them with quasi-static compression experimental data. Results show that there are three damage modes of porous W/Zr-based metallic glass composite during compression process, which are cleavage fracture of the W particle, shear band fracture within the Zr-based metallic glass and interfacial crack between the two phases. The cohesive zone model parameters have a great influence on the simulation curve: the greater the interface stiffness, the higher the slope of the simulation curve; the greater the interface strength, the higher the yield point of the simulation curve; the larger the fracture energy, the shorter the plastic stage of the simulation curve. As the interface stiffness, interface strength and fracture energy are taken as 10 000 GPa/ μm^3 , 500 MPa and 0.055 J/ m^2 , respectively, the simulation results are well consistent with the experimental results, and the simulation model is able to accurately describe the mechanical behavior of porous W/Zr-based metallic glass composite.

Key words: porous W/Zr-based metallic glass composite; cohesive zone model; numerical simulation; microscopic microstructural damage

Corresponding author: Duan Jingbo, Ph. D., Associate Professor, Shijiazhuang Tiedao University, Shijiazhuang 050043, P. R. China, Tel: 0086-311-87936096, E-mail: duanjingbo@stdu.edu.cn