

多层金属复合材料界面微观结构特征数值计算研究

梁汉良^{1,2,3}, 罗 宁^{2,3}, 周嘉楠³, 陈金华², 贾永胜¹, 陈 翔¹

(1. 江汉大学 爆破工程湖北省重点实验室, 湖北 武汉 430056)

(2. 中煤科工集团淮北爆破技术研究院有限公司, 安徽 淮北 235000)

(3. 中国矿业大学 力学与土木工程学院, 江苏 徐州 221116)

摘 要: 随着航空航天及兵器防护等领域技术与装备的快速进步与发展, 加快轻质高强新型金属复合材料的开发和研究具有十分重要的意义。本研究采用多尺度数值计算方法探究了多层金属爆炸焊接复合材料界面特征参数变化规律及界面原子尺度扩散行为及特征。结果表明: 随着时间的推移, 多层板材间动态碰撞角呈现初始阶段小幅升高, 并在中间阶段保持稳定的变化规律。结合界面呈现明显的波纹结构特征, 多层复合板结合界面处压力分布明显高于板材其他区域, 且结合界面压力呈现从上到下逐渐减小的变化规律, 最下侧结合界面处有效塑性应变略高于其他3个结合界面。在不同速度微观尺度碰撞下, 3个焊点处均发生了明显的原子扩散现象, 随着冲击速度的减小, 结合界面处原子扩散层厚度也随之减小, 3个扩散层厚度范围分别为1.12~1.58 μm , 1.8~2.55 μm 和1.22~1.73 μm 。

关键词: 多层金属复合材料; 爆炸焊接; 界面微观结构; 数值计算

中图分类号: TG456.6; TB331

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2025)01-0134-13

随着现代科学技术及高科技工业生产的迅猛发展, 对于材料的综合性能要求也不断提升, 单一组元的金属材料在许多工业领域及装备制造中已逐渐无法满足需求。加快轻质高强新型金属复合材料的开发和研究具有十分紧迫的现实意义, 已成为近年来国内外的热点研究课题。

轻质金属钛、铝、镁等及其合金, 基于其轻质高强和矿产资源储量丰富的优势, 是目前可应用、轻量化最有发展和应用前景的金属材料, 具有不可替代的优异性能, 如高比强度、高比弹性模量、高阻尼减震性、高导热性、高静电屏蔽性、高机械加工性和极低的密度, 以及易回收利用等一系列优点, 被称为“21世纪的绿色材料”^[1]。钛及钛合金材料作为一种轻质、高强、耐磨、耐蚀、耐高温的金属材料, 广泛应用于飞机发动机及火箭、导弹等飞行器结构件及国防武器装备制造领域, 被称为“太空金属”^[2-4]。然而, 由于钛及钛合金材料在生产过程中所需能耗较大, 经济成本较高, 且生产过程中伴随着污染物的排放, 致使钛及钛合金材料价格昂贵, 使得其应用受到了一定程度的限制^[5]。铝及铝合金材料因其质轻、比强度高、可塑性强及价格低廉等优点, 在航空航天、交通运输、建筑结构等领域有着广泛的应用, 特别是经过合金化的高强铝合金, 一直是航空航天飞行器的主体结构材料之一^[6-8]。镁及

镁合金材料具有密度小、强度高、弹性模量大、电磁防护性好、减震及抗冲击性能优异等特点, 在航空电磁屏蔽和冲击减震等领域具有广泛的应用^[9-11]。

近年来, 随着航空航天及兵器防护等领域技术与装备的快速进步与发展, 为了面对复杂的服役环境, 同时减轻整体装备质量, 多层轻质金属复合材料逐渐引起研究人员的广泛关注。金属层状复合材料是通过特殊的工艺方法将2种或2种以上具有不同性能的金属板材进行分层组合而获得的一类新型金属复合材料。它不仅可以选择种类较多的材料组合, 传承各自组元的优良性能, 而且可以弥补各组元之间的不足, 具有组成其单一金属材料所无法比拟的综合性能。由于金属材料间物理化学性质的差异, 多层金属的焊接既要保证材料的完美结合而不产生裂纹缺陷, 又要避免焊接界面产生过多金属间化合物。若能实现多层轻质金属的有效复合, 得到兼具多种优异的力学、物理及化学特性的新型轻质高强金属复合材料, 将为装备结构轻量化提供广阔的应用前景。

目前针对异质金属复合技术的研究有很多, 其中爆炸焊接技术作为一种特殊的固态焊接工艺, 主要是利用炸药爆轰产生的巨大能量, 驱动复层金属与基层金属发生高速斜碰撞, 在碰撞区域产生金属射流, 从而实现待焊接材料在界面处的冶金结合。其焊接过程涉及高速、高

收稿日期: 2024-08-20

基金项目: 爆破工程湖北省重点实验室开放基金(BL2021-03); 安徽省爆炸能利用与控制重点实验室开放基金(BP20240104); 中国矿业大学研究生创新计划(2024WLJCRCZL049); 江苏省研究生科研与实践创新计划(KYCX24_2701)

作者简介: 梁汉良, 男, 1996年生, 博士, 中国矿业大学力学与土木工程学院, 江苏 徐州 221116, E-mail: 646955177@qq.com

温、高压、高应变率等极端物理力学条件,因此对于爆炸焊接过程中的许多关键问题如金属射流形成、波形界面结构动态演化、界面温度场及压力场变化等,无法通过现有的实验技术方法直接获取,这极大程度上限制了爆炸焊接领域相关机理及理论等方面的探索与揭示。随着现代计算机技术及数值计算方法的不断发展,针对一些无法直接通过实验手段进行研究的领域,数值计算成为了一种不可或缺的研究方法。

本工作以多层金属板材爆炸焊接为基础,采用多尺度数值计算的研究方法,开展了宏观尺度下多层板材爆炸焊接和微观尺度下焊点区域冲击碰撞数值计算分析,澄清多层金属板材爆炸焊接界面特征参数变化规律及界面原子尺度扩散行为及特征。

1 数值计算

1.1 宏观尺度数值计算

为了研究炸药驱动条件下爆炸焊接界面波形结构特征及形成机制,开展了炸药驱动下多层轻质金属爆炸焊接二维数值计算研究。数值计算模型中所涉及的炸药模型,在模型建立时选用 Jones-Wilkins-Lee(JWL)状态方程对其进行描述:

$$p = A(1 - \frac{\omega \eta}{R_1})e^{-\frac{R_1}{\eta}} + B(1 - \frac{\omega \eta}{R_2})e^{-\frac{R_2}{\eta}} + \omega p e \tag{1}$$

式中, p 为压力, η 为相对比容, $\eta = \rho/\rho_0$, ρ 为爆轰产物密度, ρ_0 为炸药初始密度, e 为内能, A, B, R_1, R_2, ω 为实验拟合参数。表1给出了数值计算模型中所使用的炸药JWL状态方程相关参数,其中 D 为炸药爆速。

对于模型中所涉及的多种金属材料模型,由于炸药驱动下的爆炸焊接过程,金属板材发生大变形并处于高应变率等条件下,因此在模型建立过程中选用适用于高应变率下金属材料变形行为的 Steinberg-Guinan 和 Johnson-Cook 模型来描述几种金属板材在爆炸载荷及高速碰撞下的行为,其中过渡层 1060Al、中间板 AZ31B 和基板 2024Al 选用 Steinberg-Guinan 模型,飞板 TA2 选用 Johnson-Cook 模型。Steinberg-Guinan 本构模型的表达

式如下所示:

$$G = G_0 \left[1 + \frac{G'_p}{G_0} \cdot \frac{P}{\eta^{1/3}} + \frac{G'_T}{G_0} \cdot (T - 300) \right] \tag{2}$$

$$Y = Y_0 \left[1 + \frac{Y'_p}{Y_0} \cdot \frac{P}{\eta^{1/3}} + \frac{G'_T}{G_0} \cdot (T - 300) \right] (1 + \beta \varepsilon)^n \tag{3}$$

$$Y_0 (1 + \beta \varepsilon)^n \leq Y_{\max} \tag{4}$$

式中, G 为剪切模量, Y 为流变应力, β 为硬化参数, n 为硬化指数, ε 为塑性应变, η 为压缩比, G_0, Y_0 和 $Y_{\max}$ 为给定介质常数, G'_p 和 G'_T 分别为 G 在参考状态($T=300$ K, $P=0$, $\varepsilon=0$)下相对于压力 P 和温度 T 的导数, Y'_p 为 Y 在参考状态下相对于压力 P 的导数。表2给出了数值计算模型几种金属材料的 Steinberg-Guinan 模型参数, T_m 为材料熔化温度。

Johnson-Cook 模型主要适用于描述较宽应变率范围和塑性变形生热引起绝热温升导致材料软化的模型,该模型将材料的应变硬化、应变率硬化和热软化同时考虑,在金属材料数值计算中应用十分广泛。Johnson-Cook 模型实质上是 将应变、应变率和温度这 3 个变量进行了分离,通过数学乘积关系对 3 个变量进行计算,处理三者对动态屈服应力的影响,该模型具有形式简单、各项物理意义明确的优点,Johnson-Cook 模型表达式如下所示:

$$\sigma_y = (A + B \bar{\varepsilon}_p^n)(1 + C \ln \dot{\varepsilon}^*) [1 - (T^*)^m] \tag{5}$$

式中, σ_y 为流变应力, A, B 和 n 分别为参考应变率和参考温度下的材料初始屈服应力、材料应变硬化模量和硬化指数, C 为材料应变率强化参数, $\bar{\varepsilon}_p$ 为有效塑性应变, $\dot{\varepsilon}^*$ 为有效塑性应变率, m 为材料热软化参数, $T^*=(T-T_0)/(T_m-T_0)$, T_m 和 T_0 分别为材料熔化温度及室温。飞板 TA2 的 Johnson-Cook 模型相关参数如表 3 所示。

在爆炸焊接高温、高压状态下,针对几种金属材料的状态方程描述均采用 Shock 状态方程,该方程被广泛应用于爆炸物理学、高速流体动力学、激波物理学及强冲击波等相关理论研究中,方程表达式如下所示:

表2 2种铝材和AZ31B镁合金的Steinberg-Guinan模型参数
Table 2 Parameters of Steinberg-Guinan model of two types of aluminum sheets and AZ31B magnesium

Parameter	1060Al	AZ31B	2024Al
$\rho/\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	2.70	1.78	2.78
G_0/GPa	27.1	16.5	28.6
Y_0/MPa	40	190	260
$Y_{\max}/\text{MPa}$	480	480	760
β	400	1100	310
n	0.270	0.120	0.185
G'_p	1.767	1.700	1.865
$G'_T/\text{MPa}\cdot\text{K}^{-1}$	-16.69	-83.99	-176.20
Y'_p	0.0026	0.0196	0.0169
T_m/K	1220	1150	1220

表1 炸药的JWL状态方程参数
Table 1 Parameters of JWL state equation of explosive

Parameter	Value
$\rho_0/\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	0.8
$D/\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$	2100
A/GPa	12.46
B/GPa	0.922
R_1	4.41
R_2	1.117
ω	0.22

表3 TA2的Johnson-Cook模型参数
Table 3 Parameters of Johnson-Cook model of TA2

Parameter	Value
$\rho/\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}$	4.51
G/GPa	45.0
A/MPa	384
B/MPa	755
C	0.79
m	1.394
n	0.03
T_m/K	2260

$$P = \frac{\rho_0 c_0^2 \mu (1 + \mu)}{[1 - (s - 1) \mu]^2} + \Gamma \rho \left\{ e - \frac{c_0^2 \mu^2}{2 [1 - (s - 1) \mu]^2} \right\} \quad (6)$$

$$U_s = c_0 + S_1 u_p + S_2 u_p \quad (7)$$

式中, U_s 代表冲击波速度, μ 为压缩比, ρ 和 ρ_0 分别为材料密度和初始密度, s 、 S_1 和 S_2 为常数, u_p 为质点速度, Γ 为 Gruneisen 系数, c_0 为材料声速, P 和 e 分别为压力和内能, 表4给出了几种金属材料的 Shock 状态方程参数。

基于 ANSYS/AUTODYN 数值计算软件, 采用 Euler-ALE-SPH 耦合计算方法, 建立了 TA2/AZ31B/2024Al 多层轻质金属炸药驱动下爆炸焊接宏观尺度二维数值计算模型, 数值计算模型及模型参数设置如图1和表5所示^[12]。对于炸药驱动下的爆炸焊接数值计算, 由于板材在爆炸焊接初始阶段加速需要一定的距离和时间, 因此在初始阶段结合界面处通常不会产生规律的波形结构特征, 因此需要在建模时将数值计算模型横向长度进行适

表4 4种金属材料的Shock状态方程参数
Table 4 Parameters of Shock state equation of four metal materials

Material	Γ	$c_0/\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$	S_1
TA2	1.23	5020	1.536
AZ31B	1.54	4520	1.242
1060Al	1.97	5386	1.339
2024Al	2.00	5328	1.338

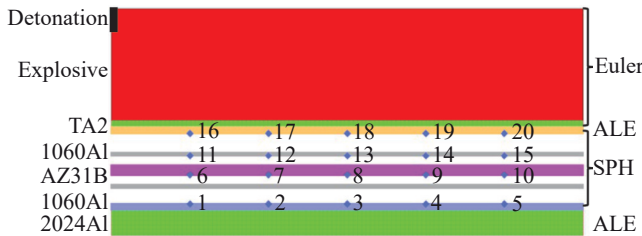


图1 多层轻质金属爆炸焊接数值计算模型

Fig.1 Numerical calculation model of explosive welding of multilayer lightweight metal

表5 多层轻质金属爆炸焊接数值计算模型参数
Table 5 Numerical calculation model parameters of explosive welding of multilayer lightweight metal

Material	Model size	Method	Element size
Explosive	150 mm×37 mm	Euler	0.2 mm×0.2 mm
TA2	150 mm×2 mm	ALE	0.2 mm×0.2 mm
	150 mm×2 mm	SPH	0.05 mm×0.05 mm
1060Al	150 mm×1 mm	SPH	0.05 mm×0.05 mm
AZ31B	150 mm×3 mm	SPH	0.05 mm×0.05 mm
2024Al	150 mm×2 mm	SPH	0.05 mm×0.05 mm
	150 mm×8 mm	ALE	0.2 mm×0.2 mm

当的增加, 本工作的多层轻质金属板材炸药驱动爆炸焊接数值计算模型横向长度设置为 150 mm。此外, 在爆炸焊接界面波形结构特征形成及演化机制数值计算研究中, 往往通过 SPH 无网格算法对待焊接板材进行建模分析, 然而, SPH 无网格算法数值模型中粒子尺寸对于爆炸焊接模拟的过程有着很大的影响, 特别是在计算时间和稳定性方面。同时, 粒子尺寸对界面碰撞点处金属射流的产生以及焊接界面的波形结构尺寸及细观形貌特征也有重要的影响。然而, 如果将整体爆炸焊接数值计算模型均采用 SPH 算法进行建模, 往往会造成计算耗时增高的问题。因此, 本章节的多层轻质金属爆炸焊接宏观尺度模型采用 Euler 和 ALE-SPH 耦合算法, 将厚度为 10 mm 的 2024Al 基板进行分段建模, 其中铝板下端采用 ALE 网格算法建立 150 mm×8 mm 的模型, 网格尺寸设置为 0.2 mm×0.2 mm, 铝板上端采用 SPH 无网格算法建立 150 mm×2 mm 的模型, 粒子尺寸设置为 0.05 mm×0.05 mm。1060Al 过渡层及 AZ31B 镁合金中间板均采用 SPH 无网格算法进行建模, 粒子尺寸同样设置为 0.05 mm×0.05 mm, 最上层 TA2 飞板采用与最下层基板相同的 ALE-SPH 耦合算法建模, 耦合模型单个网格尺寸与单个粒子尺寸采用同样参数设置。对于飞板上部炸药模型的建立, 本模型采用 Euler 算法对 35 mm 厚的炸药进行建模, 炸药 Euler 网格模型尺寸为 150 mm×37 mm, 网格尺寸设置为 0.2 mm×0.2 mm。为了记录和分析爆炸焊接过程中结合界面处相关特征参数如压力、速度、温度、应变等变化规律及特征, 在 TA2 飞板下表面、上侧 1060Al 过渡层下表面、中间 AZ31B 镁合金板下表面及 2024Al 基板上表面分别设置了等间距的 5 个 Gauge 测点, 共计 20 个 Gauge 测点。最后, 在炸药左上角端部设置长度 10 mm 的线起爆, 通过起爆炸药实现多层轻质金属板材宏观尺度爆炸焊接过程数值再现。

1.2 微观尺度数值计算

基于 Linux 系统下的 LAMMPS 数值计算程序, 对多层金属材料爆炸焊接过程中 3 个焊点区域开展微观尺度数值计算, 数值计算模型如图2所示。其中 Ti/Al 模型横

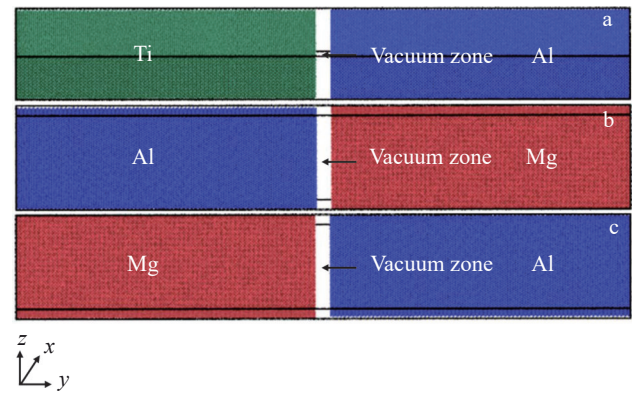


图2 爆炸焊接焊点区域微观尺度数值计算模型

Fig.2 Microscale numerical calculation model of explosive welding solder joint region: (a) Ti/Al, (b) Al/Mg, and (c) Mg/Al

向冲击速度为 125 m/s,纵向冲击速度为 825 m/s,Ti/Al 模型尺寸(xyz)为 11.77 nm×78.32 nm×6.07 nm,Ti 侧原子数目为 156 000,Al 侧原子数目为 163 560,整个模拟体系共包含 319 560 个原子。Al/Mg 模型横向冲击速度为 99 m/s,纵向冲击速度为 767 m/s,Mg/Al 模型横向冲击速度为 168 m/s,纵向冲击速度为 695 m/s。Al/Mg 模型和 Mg/Al 模型尺寸(xyz)均为 12.96 nm×85.41 nm×5.26 nm,Al/Mg 模型和 Mg/Al 模型中 Al 侧原子数目为 171 392,Mg 侧原子数目为 120 000,整个模拟体系共包含 291 392 个原子。模型之间的空白区域为真空区,用于在碰撞模拟开始前对 2 种体系原子进行间隔,真空区间隔设置为 2.5 nm。

2 结果与分析

2.1 宏观尺度数值计算

多层金属板材爆炸焊接数值计算结果如图 3 所示,从图 3a 中可以发现,在 $t=36.28\ \mu\text{s}$ 时,最上层 TA2 板与上侧 1060Al 过渡层之间的动态碰撞角约为 11.2° ,上侧 1060Al 过渡层与中间板 AZ31B 间的碰撞角约为 10.2° ,中间板 AZ31B 与下侧 1060Al 过渡层间的碰撞角约为 8.8° ,下侧 1060Al 过渡层与最下层 2024Al 基板间的碰撞角约为 6.8° 。从图 3b 中可以发现,随着时间的推移,下侧 1060Al 过渡层与下板 2024Al 及中间板 AZ31B 间的 2 个动态碰撞角呈现明显增大的趋势。从 5 层板间的 4 个动态碰撞角大小可以发现,碰撞角随着板材层数的增加不断减小,且随着滑移爆轰的不断推进,动态碰撞角较初始阶段有小幅升高并在中间阶段保持稳定。

图 3c 给出了 $t=58.63\ \mu\text{s}$ 时刻多层爆炸焊接复合板宏观尺度数值计算结合界面形貌图,从图中可以看出,TA2/1060Al 和 AZ31B/1060Al 这 2 个界面呈现出近似直线的平纹结构特征,1060Al/AZ31B 结合界面则呈现出规则的小波纹形貌。与其他 3 个结合界面不同,最下层 1060Al/2024Al 结合界面处出现明显大波纹结构特征,并

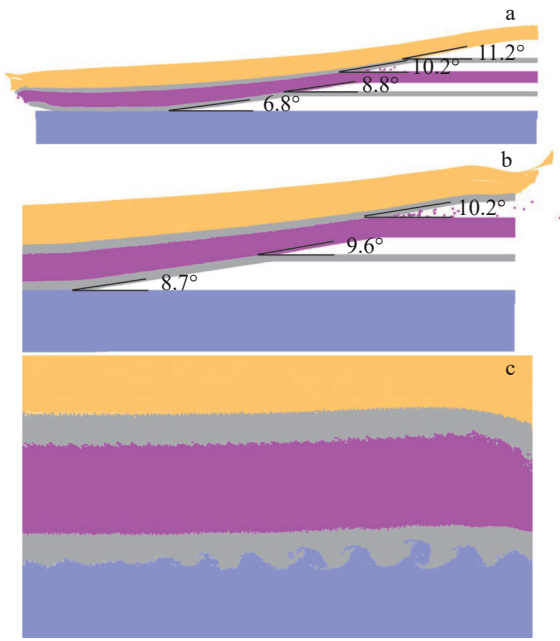


图3 多层金属板材爆炸焊接不同时刻数值计算结果

Fig.3 Numerical calculation results of explosive welding of multilayer metal sheet at different time: (a) $t=36.28\ \mu\text{s}$, (b) $t=43.75\ \mu\text{s}$, and (c) $t=58.63\ \mu\text{s}$

伴有涡旋结构生成。涡旋结构作为爆炸焊接结合界面中典型特征之一,在许多不同的爆炸焊接复合材料界面形貌研究中均有报道^[13-17]。在爆炸焊接过程中,由于爆炸载荷具有波动特征,而引起碰撞点处金属射流的周期性摆动,随后射流金属被飞板和基板周期性捕获,从而形成了界面处的涡旋结构^[18]。

为了研究爆炸焊接过程中,结合界面处基体金属材料在强爆轰载荷作用下的各项参数变化特征,通过数值计算方法对爆炸焊接结合界面处压力、有效塑性应变及温度变化规律开展了研究。图 4 为多层复合板爆炸焊接结合界面处压力分布及变化规律,从图 4a 的压力云图中可以看出,随着炸药滑移爆轰的不断推进,结合界面处的高压区也随之不断向前移动。在板材与板材碰撞点区域,压力值明显高于板材其他区域。根据图 4b₁~4b₄ 的 4 个结合界面处 20 个 Gauge 测点压力变化规律可以发现,在 TA2/1060Al 结合界面处,压力最大值出现在 1 号 Gauge 测点,大小约 40 GPa。在 1060Al/AZ31B 结合界面处,压力最大值出现在 7 号 Gauge 测点,大小约 39 GPa,与 TA2/1060Al 结合界面处压力最大值相近。而在 AZ31B/1060Al 结合界面处,随着板材不断增多,压力出现明显降低,在 12 号 Gauge 测点处压力出现峰值,约 18 GPa。在最下侧 1060Al/2024Al 结合界面处,压力最大值出现在 20 号 Gauge 测点,大小约 19 GPa,与 AZ31B/1060Al 结合界面处压力最大值相近。结合界面压力呈

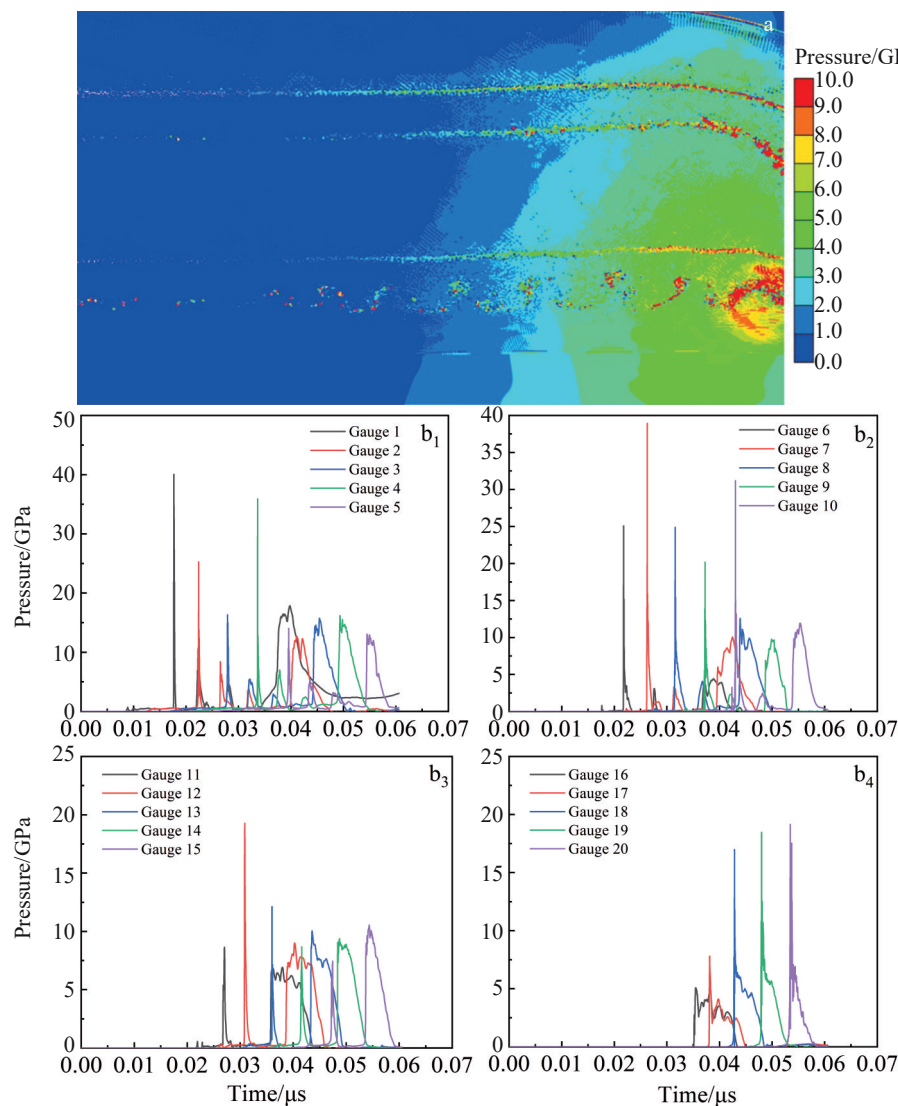


图4 $t=58.63\ \mu\text{s}$ 时刻多层金属板材爆炸焊接界面压力分布云图和结合界面20个Gauge测点压力分布曲线

Fig.4 Pressure distribution nephogram of explosive welding interface (a) and pressure distribution curves of 20 gauge points at the joining interfaces (b_1 – b_4) of multilayer metal sheet at $t=58.63\ \mu\text{s}$: (b_1) 1060Al/2024Al; (b_2) AZ31B/1060Al; (b_3) 1060Al/AZ31B; (b_4) TA2/1060Al

现从上到下逐渐减小的变化规律。

图5给出了 $t=58.63\ \mu\text{s}$ 时刻多层复合板4个结合界面处有效塑性应变分布及变化规律,从图5a的有效塑性应变云图中可以看出,4个结合界面处的塑性应变明显高于板材其他区域,这主要是由于爆炸焊接过程中,在炸药爆轰驱动作用下,上侧板材发生高速运动并不断与下侧板材发生高速斜碰撞,在板材与板材碰撞区域,基体金属材料发生大变形,从而在碰撞点区域形成强塑性变形区。此外,从塑性变形云图中可以发现,最下侧1060Al/2024Al结合界面处波形结构边界处材料塑性变形程度明显高于其他区域,这在一定程度上证实了爆炸焊接波形界面的产生与结合界面材料塑性变形程度相关。图5b₁~5b₄给出了4个结合界面20个Gauge测点的有效塑性应变变化规律,从图中可以发现,在最上层TA2/1060Al结合界面

处,有效塑性应变最大值出现在2号Gauge测点,大小约1.5。在1060Al/AZ31B结合界面处,有效塑性应变峰值位于6号Gauge测点,大小约2.5。在AZ31B/1060Al结合界面处,有效塑性应变最大值出现在15号Gauge测点,大小约1.5,与TA2/1060Al结合界面处相近。在最下侧1060Al/2024Al结合界面处,有效塑性应变峰值出现在20号测点,大小约1.6。

图6给出了 $t=58.63\ \mu\text{s}$ 时刻多层复合板4个结合界面处温度分布及变化规律,从图6a的温度云图中可以看出,4个结合界面处的温度明显高于板材其他区域,这主要是由于爆炸焊接过程中,板材在强爆轰载荷作用下发生高速运动,并与下侧板材发生高速斜碰撞,在碰撞点区域产生高温区。此外,从温度云图中可以发现,1060Al/AZ31B和1060Al/2024Al结合界面处波形结构区域材料

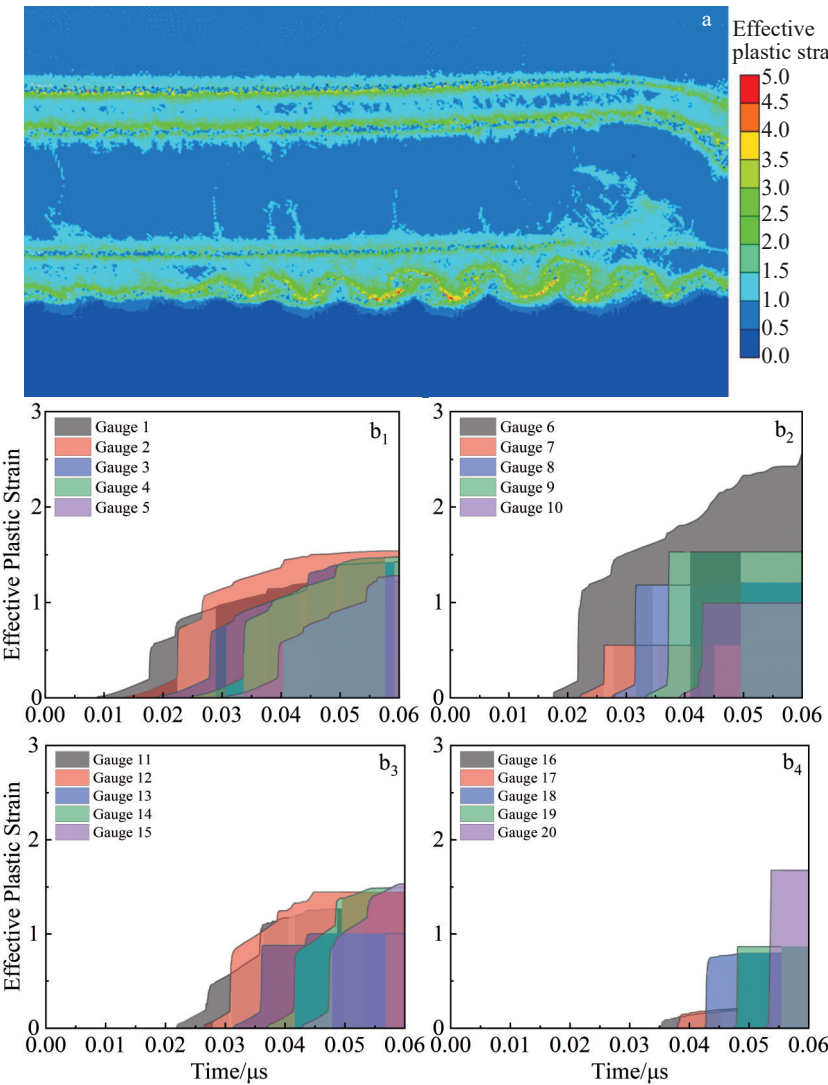


图5 $t=58.63\ \mu\text{s}$ 时刻多层金属板材爆炸焊接界面有效塑性应变分布云图和结合界面20个Gauge测点有效塑性应变分布曲线
Fig.5 Effective plastic strain distribution nephogram of explosive welding interface (a) and effective plastic strain distribution curves of 20 gauge points at the joining interfaces ($b_1 - b_4$) of multilayer metal sheet at $t=58.63\ \mu\text{s}$: (b_1) 1060Al/2024Al; (b_2) AZ31B/1060Al; (b_3) 1060Al/AZ31B; (b_4) TA2/1060Al

温度较其他区域略高。与此同时,在最下侧 1060Al/2024Al 波形结合界面处,涡旋结构内部的温度也明显高于涡旋结构外侧区域。图 6 $b_1 \sim b_4$ 给出了 4 个结合界面 20 个 Gauge 测点的温度变化规律,从图中可以发现,在最上层 TA2/1060Al 结合界面处,温度最高值出现在 4 号 Gauge 测点,大小约 1850 K。在 1060Al/AZ31B 结合界面处,温度峰值位于 7 号 Gauge 测点,大小约 2500 K。在 AZ31B/1060Al 结合界面处,温度最高值出现在 13 号 Gauge 测点,大小约 1500 K。在最下侧 1060Al/2024Al 结合界面处,温度峰值出现在 20 号 Gauge 测点,大小约 1750 K。

2.2 微观尺度数值计算

图 7 给出了 Ti/Al 界面在加载和卸载 2 个阶段的均方

位移(MSD)随时间变化曲线,其中绿色曲线代表 Ti 原子,蓝色曲线代表 Al 原子。从图中可以发现,在加载阶段前期,Ti-Al 体系发生了剧烈的震荡,随着时间的推移,最终 2 条曲线与时间轴近似平行。在 1000 ps 时刻下,Ti 的 MSD 值稳定在 $21\ \text{nm}^2$ 左右,Al 的 MSD 值稳定在 $28\ \text{nm}^2$ 左右。从加载阶段 2 种原子的 MSD 曲线分布特征可以看出,整个 Ti-Al 体系在只经过加载阶段后,系统仍处于固体状态。图 7b 为卸载阶段 2 种原子的 MSD 随时间变化曲线,从图中可以看出,Ti 和 Al 原子的 MSD 值呈现出随时间推移不断线性增大的趋势,在将近 900 ps 的模拟之后,Ti 原子的 MSD 值达到 $5\ \text{nm}^2$ 左右,Al 原子的 MSD 值达到 $28\ \text{nm}^2$ 左右。从加载阶段和卸载阶段的 MSD 曲线可以发现,只通过降压操作就使卸载阶段的

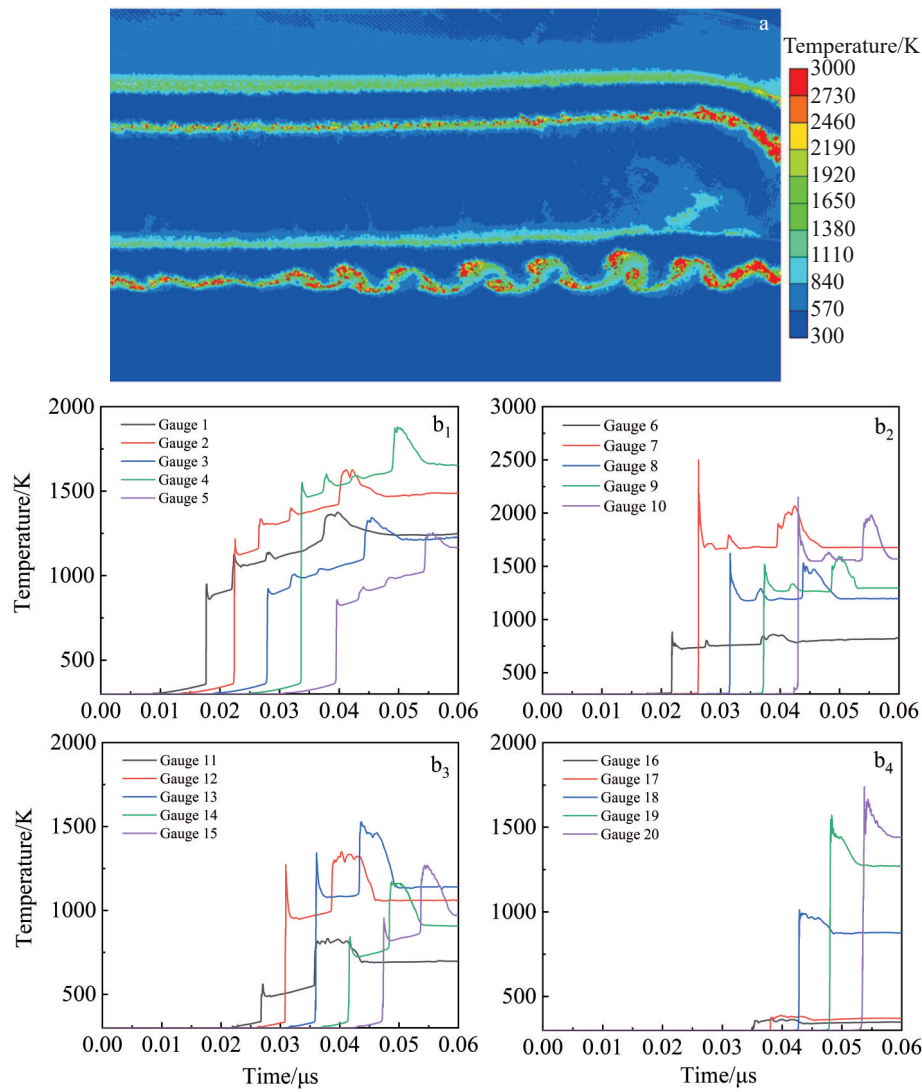


图6 $t=58.63 \mu\text{s}$ 时刻多层金属板材爆炸焊接界面温度分布云图和结合界面20个Gauge测点温度分布曲线

Fig.6 Temperature distribution nephogram of explosive welding interface (a) and temperature distribution curves of 20 gauge points at the joining interfaces (b₁–b₄) of multilayer metal sheet at $t=58.63 \mu\text{s}$: (b₁) 1060Al/2024Al; (b₂) AZ31B/1060Al; (b₃) 1060Al/AZ31B; (b₄) TA2/1060Al

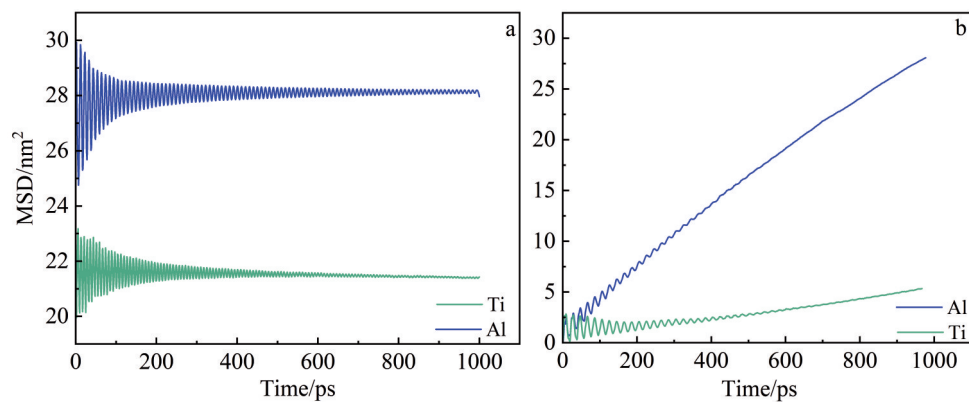


图7 Ti/Al界面在加载和卸载阶段的MSD随时间变化曲线

Fig.7 Variation curves of MSD with time at the Ti/Al interface during loading (a) and unloading (b) stages

MSD 曲线变成了斜线。这说明在卸载阶段开始后,体系的压强一经卸除,熔化就迅速开始了。在熔化发生的同时,Ti 原子和 Al 原子开始各自由 Ti 侧和 Al 侧朝着焊接界面对面方向进行扩散。由卸载阶段的 MSD 曲线的斜率可以看出,在该模拟的条件下,Al 的扩散速率要比 Ti 整体的扩散速率更快。

图 8 和图 9 给出了 Ti/Al 界面在卸载阶段不同时刻的原子扩散情况和原子浓度分布图,从图中可以发现,在初始阶段 100 ps 时刻,界面处 Ti 和 Al 原子整体互相扩散程

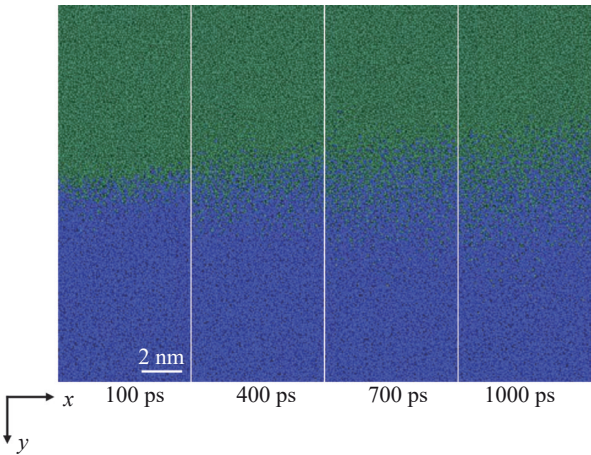


图 8 Ti/Al 界面卸载阶段不同时刻原子扩散情况图
Fig.8 Atomic diffusion diagrams of Ti/Al interface at different moments of unloading stage

度较轻,原子扩散层厚度约 4.91 nm。在 400 ps 时刻,界面处原子扩散程度较之前开始有所加剧,此时原子扩散层厚度约为 9.82 nm。随着时间的不断推移,界面处 Ti 和 Al 原子间互扩散程度愈发剧烈,原子扩散层厚度也随之不断增加,在 700 和 1000 ps 时刻,Ti/Al 界面处原子扩散层厚度分别为 12.95 和 16.08 nm。

根据早前相关研究结论,爆炸焊接扩散过程的时间尺度通常为 $10^{-6}\sim 10^{-5}$ s,而现有的分子动力学模拟的时间尺度一般为 $10^{-9}\sim 10^{-8}$ s。因此,本工作将分子动力学模拟与经典扩散方程相结合,推导出爆炸焊接结合界面处原子扩散层厚度^[19]。在卸载过程中,系统的温度达到平衡状态,当系统达到动态热力学平衡时,Ti 和 Al 的扩散过程符合菲克第二定律:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \nabla^2 n \tag{8}$$

其中, n 为原子浓度, t 为扩散时间, D 代表扩散系数。

对式(8)进行求解,其中方程 1 个经典解可以表示为:

$$n(x,t) = \frac{N}{2\sqrt{\pi Dt}} \exp(-x^2/4Dt) \tag{9}$$

其中, N 代表扩散物质的数量, x 代表扩散距离。

根据上述 2 个公式,可以得到扩散层厚度 y 的计算公式:

$$y = \sum_{i=Ti,Al} k \sqrt{D_i t} \tag{10}$$

其中, k 为与扩散体系相关的常数, D_i 表示 Ti-Al 体系的扩散系数,为卸载阶段 MSD 斜率的一半。

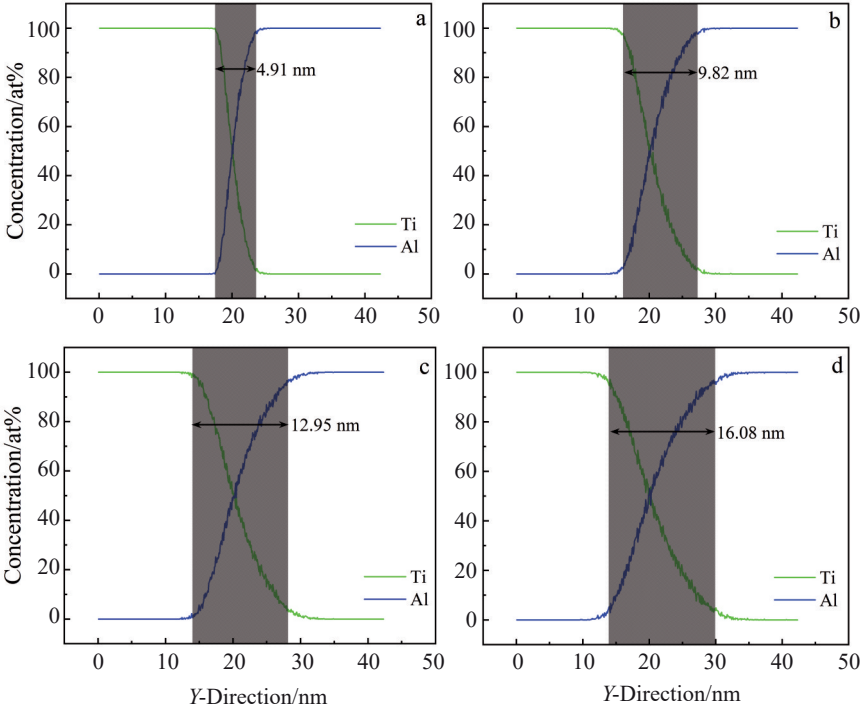


图 9 Ti/Al 界面卸载阶段不同时刻原子浓度分布曲线
Fig.9 Atomic concentration distribution curves of Ti/Al interface at different moments of unloading stage: (a) 100 ps, (b) 400 ps, (c) 700 ps, and (d) 1000 ps

根据 Ti/Al 界面微观尺度分子动力学数值计算结果, 获取了卸载阶段不同时刻原子的坐标, 并提取了系统中每种类型原子在特定时刻的坐标信息, 使用 C++ 软件编程将其沿冲击方向划分为 500 个区间, 并统计每个区间中每种类型原子的含量, 以确定原子浓度在冲击方向上的分布, 然后进一步确定每个时刻的扩散层厚度。将获得的数据与扩散层厚度随时间变化关系的理论方程进行拟合, 从而获得原子扩散层厚度随时间变化的函数, 如图 10 所示。根据早前相关研究人员的研究结果表明, 爆炸焊接卸载阶段的时间一般保持在 5~10 μs 之间, 因此根据图 10 拟合所得的 Ti/Al 扩散层厚度随时间变化的函数, 可以对 Ti/Al 界面处原子扩散层厚度进行外推计算, 分子动力学数值模拟外推所得到的 Ti/Al 爆炸焊接界面扩散层厚度为 1.12~1.58 μm 。

图 11 给出了 Al/Mg 界面在加载和卸载 2 个阶段的 MSD 随时间变化曲线, 其中蓝色曲线代表 Al 原子, 红色曲线代表 Mg 原子。从图中可以发现, 在加载阶段前期, Al-Mg 体系发生了剧烈的震荡, 随着时间的推移, 最终 2 条曲线与时间轴近似平行。在 1000 ps 时刻下, Al 的 MSD 值稳定在 14 nm^2 左右, Mg 的 MSD 值稳定在 31 nm^2

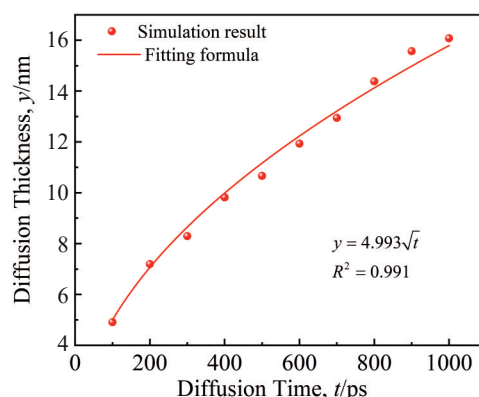


图 10 Ti/Al 界面卸载阶段扩散层厚度随时间变化曲线

Fig.10 Variation curve of diffusion layer thickness with time at Ti/Al interface during the unloading stage

左右。从加载阶段 2 种原子的 MSD 曲线分布特征可以看出, 整个 Al-Mg 体系在只经过加载阶段后, 系统仍处于固体状态。图 11b 为卸载阶段 2 种原子的 MSD 随时间变化曲线, 从图中可以看出, Al 和 Mg 原子的 MSD 值呈现出随时间推移不断线性增大的趋势, 在将近 900 ps 的

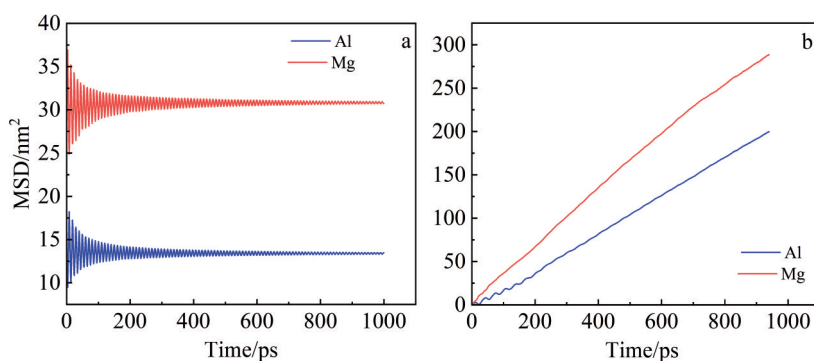


图 11 Al/Mg 界面在加载和卸载阶段的 MSD 随时间变化曲线

Fig.11 Variation curves of MSD with time at the Al/Mg interface during loading (a) and unloading (b) stages

模拟之后, Al 原子的 MSD 值达到 200 nm^2 左右, Mg 原子的 MSD 值达到 288 nm^2 左右。从加载阶段和卸载阶段的 MSD 曲线可以发现, 整体系统经过降压操作后, Al-Mg 卸载阶段的 MSD 曲线由原先加载阶段的振动曲线变成了斜线。MSD 曲线的变化表明在卸载阶段开始后, 当碰撞体系的压强被去除后, 体系内部开始出现熔化现象。在熔化发生的同时, Al 原子和 Mg 原子开始各自由 Al 侧和 Mg 侧朝着焊接界面对面方向进行扩散。由卸载阶段的 MSD 曲线的斜率可以看出, 在该模拟的条件下, Mg 的扩散速率要比 Al 整体的扩散速率更快。

图 12 和图 13 给出了 Al/Mg 界面在卸载阶段不同时刻的原子扩散情况和原子浓度分布图, 从图中可以发现, 在初始阶段 100 ps 时刻, 界面处 Al 和 Mg 原子整体互相

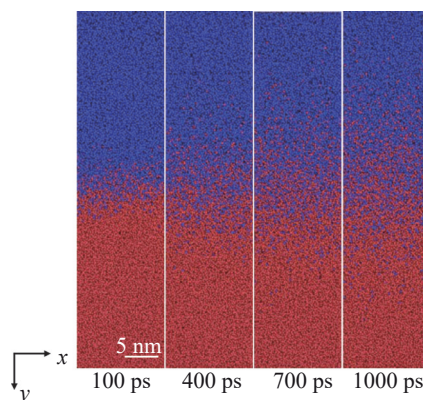


图 12 Al/Mg 界面卸载阶段不同时刻原子扩散情况图

Fig. 12 Atomic diffusion diagrams of Al/Mg interface at different moments of unloading stage

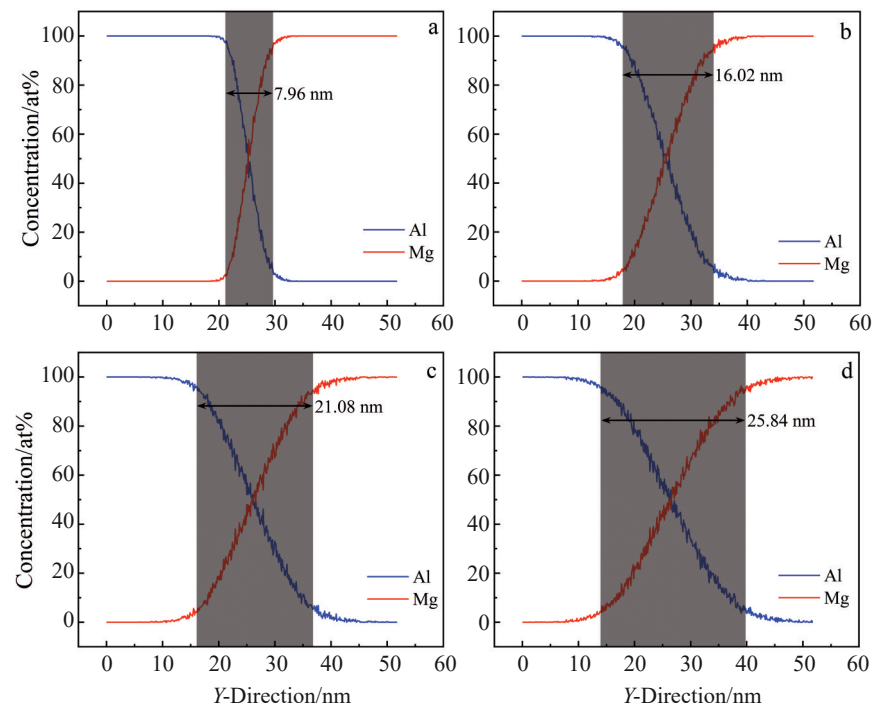


图13 Al/Mg界面卸载阶段不同时刻原子浓度分布曲线

Fig.13 Atomic concentration distribution curves of Al/Mg interface at different moments of unloading stage: (a) 100 ps, (b) 400 ps, (c) 700 ps, and (d) 1000 ps

扩散程度较轻,原子扩散层厚度约7.96 nm。在400 ps时刻,界面处原子扩散程度较之前开始有所加剧,此时原子扩散层厚度约为16.02 nm。随着时间的不断推移,界面处Mg和Al原子间互扩散程度愈发剧烈,原子扩散层厚度也随之不断增加,在700和1000 ps时刻,Mg/Al界面处原子扩散层厚度分别为21.08和25.84 nm。

图14为Al/Mg界面卸载阶段原子扩散层厚度随时间的变化曲线,图中红色圆点代表不同时刻数值模拟所得的原子扩散层厚度数据,红色曲线代表扩散层厚度随时间变化关系的理论方程拟合曲线,爆炸焊接卸载阶段的时间一般保持在5~10 μs之间,因此根据图14拟合所

得的Al/Mg扩散层厚度随时间变化的函数,可以外推算出Al/Mg爆炸焊接界面扩散层厚度为1.8~2.55 μm。

图15给出了Mg/Al界面在加载和卸载2个阶段的

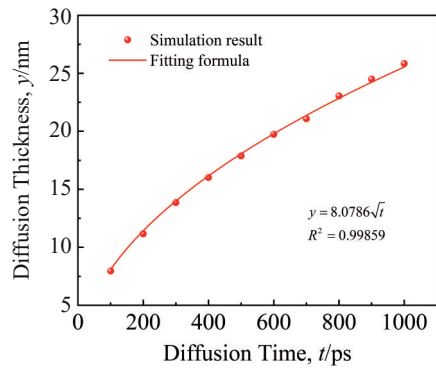


图14 Al/Mg界面卸载阶段扩散层厚度随时间变化曲线

Fig.14 Variation curve of diffusion layer thickness with time at Al/Mg interface during unloading stage

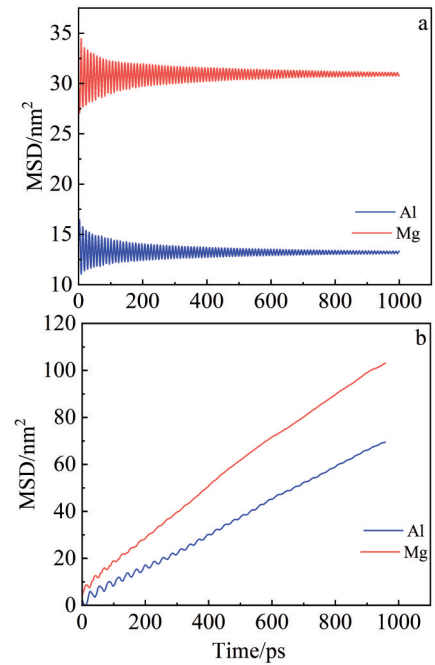


图15 Mg/Al界面在加载和卸载阶段的MSD随时间变化曲线

Fig.15 Variation curves of MSD with time at the Mg/Al interface during loading (a) and unloading (b) stages

MSD随时间变化曲线图,其中红色曲线代表Mg原子,蓝色曲线代表Al原子。从图中可以看出,在加载阶段前期,Mg-Al体系出现了较大的震荡,然后随着时间的推移,最终Mg和Al这2条MSD曲线与时间轴近似平行。在1000 ps时刻下,Al的MSD值稳定在 13.3 nm^2 左右,Mg的MSD值稳定在 31 nm^2 左右。从加载阶段2种原子的MSD曲线分布特征可以看出,整个Mg-Al体系在只经过加载阶段后,系统仍处于固体状态。图15b为卸载阶段2种原子的MSD随时间变化曲线,从图中可以看出,Al和Mg原子的MSD值呈现出随时间推移不断线性增大的趋势,在将近900 ps的模拟之后,Al原子的MSD值达到 69 nm^2 左右,Mg原子的MSD值达到 102 nm^2 左右。与Al/Mg界面微观尺度分子动力学数值计算结果相比,Mg/Al界面由于冲击速度的减小,卸载阶段Mg和Al原子的MSD均明显小于Al/Mg界面。此外,由Mg/Al界面卸载阶段的MSD曲线的斜率可以看出,在该模拟的条件下,Mg的扩散速率同样要比Al整体的扩散速率更快,与Al/Mg界面数值计算结果相一致。

图16和图17给出了Mg/Al界面在卸载阶段不同时刻的原子扩散情况和原子浓度分布图,从图中可以发现,在初始阶段100 ps时刻,界面处Al和Mg原子整体互相扩散程度较轻,原子扩散层厚度约5.18 nm。在400 ps时刻,界面处原子扩散程度较之前开始有所加剧,此时原子扩散层厚度约为10.47 nm。随着时间的不断推移,界面处Mg和Al原子间互相扩散程度愈发剧烈,原子扩散层厚度也随之不断增加,在700和1000 ps时刻,Mg/Al界面处

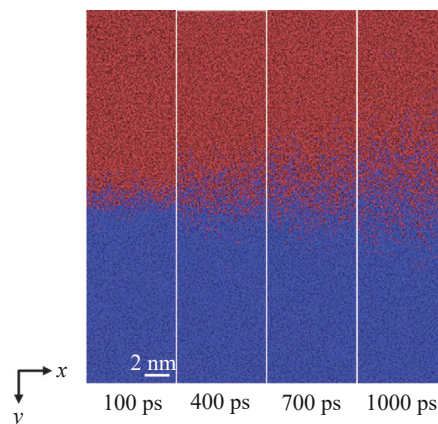


图16 Mg/Al界面卸载阶段不同时刻原子扩散情况图

Fig.16 Atomic diffusion of Mg/Al interface at different moments of unloading stage

原子扩散层厚度分别为14.71和18.13 nm。与Al/Mg界面数值计算结果相比,由于冲击速度的减小,Mg/Al结合界面原子扩散层厚度也随之减小,扩散层厚度明显小于Al/Mg界面。结合前文计算结果,Ti/Al焊点处原子扩散速率及扩散层厚度明显小于2个Al-Mg焊点。

图18为Al/Mg界面卸载阶段原子扩散层厚度随时间的变化曲线,图中红色圆点代表不同时刻数值模拟所得的原子扩散层厚度数据,红色曲线代表扩散层厚度随时间变化关系的理论方程拟合曲线,爆炸焊接卸载阶段的时间一般保持在5~10 μs 之间,因此根据图18拟合所得的Mg/Al扩散层厚度随时间变化的函数,可以外推计算

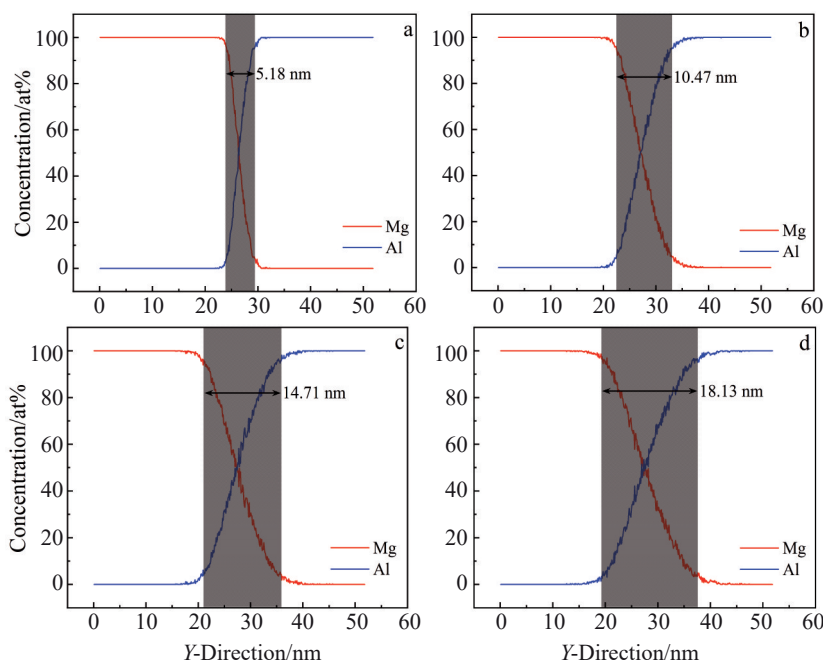


图17 Mg/Al界面卸载阶段不同时刻原子浓度分布曲线

Fig.17 Atomic concentration distribution curves of Mg/Al interface at different moments of unloading stage: (a) 100 ps, (b) 400 ps, (c) 700 ps, and (d) 1000 ps

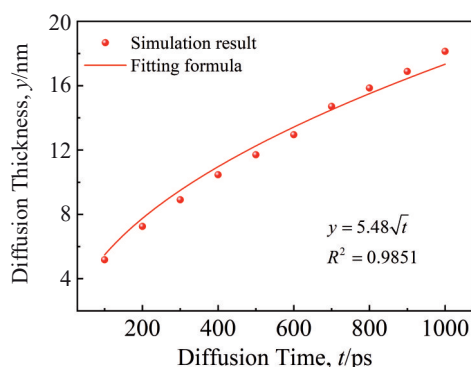


图18 Mg/Al界面卸载阶段扩散层厚度随时间变化曲线

Fig.18 Variation curve of diffusion layer thickness with time at Mg/Al interface during unloading stage

出Al/Mg爆炸焊接界面扩散层厚度为1.22~1.73 μm。

3 结论

1)随着时间的推移,多层金属板材间动态碰撞角呈现初始阶段小幅升高,并在中间阶段趋于稳定的变化规律,在中间稳定阶段,4个动态碰撞角随着板材层数的增加逐渐减小。TA2/1060Al和AZ31B/1060Al这2个界面呈现出近似直线的平纹结构特征,1060Al/AZ31B结合界面则呈现出不规则的小波纹形貌。与其他3个结合界面不同,最下层1060Al/2024Al结合界面处出现明显大波纹结构特征,并伴有涡旋结构生成。

2)多层复合板结合界面处压力分布明显高于板材其他区域,且4个结合界面压力呈现从上到下逐渐减小的变化规律。最下侧结合界面处有效塑性应变略高于其他3个结合界面,此外,1060Al/AZ31B和1060Al/2024Al结合界面处波形结构区域材料温度较其他区域略高。

3)在不同速度微观尺度碰撞下,Ti/Al、Al/Mg及Mg/Al这3个焊点处均发生了明显的原子扩散现象,Ti/Al焊点处原子扩散速率及扩散层厚度明显小于2个Al-Mg焊点,在1000 ps时刻,3个焊点扩散层厚度分别为16.08、25.84和18.13 nm。

4)通过对不同时刻原子扩散层厚度随时间变化关系进行数值拟合,并基于爆炸焊接理论外推计算出3个结合界面原子扩散层厚度范围分别为1.12~1.58 μm,1.8~2.55 μm和1.22~1.73 μm,此外,根据2个Al-Mg焊点处微尺度碰撞数值计算结果及原子扩散层外推结果可以得到,随着冲击速度的减小,结合界面处原子扩散层厚度也随之减小。

参考文献 References

[1] Wang Qun(王群), Wang Jingchao(王靖超), Li Xiongkui(李雄魁) et al. *Aerospace Materials and Technology*(宇航材料工艺)[J],

2017, 47(1): 1

- [2] Zheng Chao(郑超), Zhu Xiurong(朱秀荣), Wang Jun(王军) et al. *Titanium Industry Progress*(钛工业进展)[J], 2020, 37(4): 41
- [3] Xiao Wenlong(肖文龙), Fu Yu(付雨), Wang Junshuai(王俊帅) et al. *Journal of Aeronautical Materials*(航空材料学报)[J], 2020, 40(3): 11
- [4] Wang Qi(王琪), Li Zhi(李智), Zhang Haijun(张海军) et al. *Materials China*(中国材料进展)[J], 2023, 42(5): 375
- [5] Qi Zichen(祁梓宸). *Study on Process Method and Microstructure Properties of Ti/Al/Mg Laminated Composites Prepared by Differential Temperature Rolling*(异温轧制制备钛/铝/镁复合板工艺方法和组织性能研究)[D]. Qinhuangdao: Yanshan University, 2021
- [6] Liu Zixuan(刘子轩), Zhang Peng(张鹏), Liu Gang(刘刚) et al. *Materials China*(中国材料进展)[J], 2023, 42(10): 787
- [7] Xiong Baiqing(熊柏青), Yan Hongwei(闫宏伟), Zhang Yongan(张永安) et al. *Strategic Study of CAE*(中国工程科学)[J], 2023, 25(1): 88
- [8] Guan Renguo(管仁国), Lou Huafen(娄花芬), Huang Hui(黄晖) et al. *Strategic Study of CAE*(中国工程科学)[J], 2020, 22(5): 68
- [9] Li Yang(李杨), Hu Hongjun(胡红军), Zhong Tao(钟韬) et al. *Transactions of Materials and Heat Treatment*(材料热处理学报)[J], 2022, 43(12): 1
- [10] Wu Guohua(吴国华), Chen Yushi(陈玉狮), Ding Wenjiang(丁文江). *Manned Spaceflight*(载人航天)[J], 2016, 22(3): 281
- [11] Xue Zhiyong(薛志勇), Mu Minghao(母明浩), Han Xiuzhu(韩修柱) et al. *Hot Working Technology*(热加工工艺)[J], 2022, 51(3): 1
- [12] Liang Hanliang(梁汉良), Luo Ning(罗宁), Chen Yanlong(陈彦龙) et al. *Explosion and Shock Waves*(爆炸与冲击)[J], 2024, 44(4): 045301
- [13] Zheng Yuanmou(郑远谋). *The Principle and Application of Explosive Welding and Metallic Composite*(爆炸焊接和爆炸复合材料的原理及应用)[M]. Changsha: Central South University Press, 2007
- [14] Liang Hanliang, Luo Ning, Chen Yanlong et al. *Journal of Materials Research and Technology*[J], 2022, 18: 564
- [15] Ning Jie, Zhang Linjie, Xie Miaoxia et al. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2017, 698: 835
- [16] Liang Hanliang, Luo Ning, Chen Yanlong et al. *Composite Interfaces*[J], 2022, 29(5): 465
- [17] Yang Ming, Xu Junfeng, Chen Daiguo et al. *Applied Surface and Science*[J], 2021, 566: 150703
- [18] Han Shunchang(韩顺昌). *Phase Transformation and Fractography of Interface of Explosive Welding*(爆炸焊接界面相变与断口组织)[M]. Beijing: National Defense Industry Press, 2011
- [19] Chen Shiyang(陈仕洋). *Mechanism of Diffusion Behavior in Explosive Welding*(爆炸焊接扩散过程的力学机理研究)[D]. Beijing: Peking University, 2013

Numerical Calculation Study on Interfacial Microstructure Characteristics of Multilayer Metal Composite Materials

Liang Hanliang^{1,2,3}, Luo Ning^{2,3}, Zhou Jianan³, Chen Jinhua², Jia Yongsheng¹, Chen Xiang¹

(1. Hubei Key Laboratory of Blasting Engineering, Jiangnan University, Wuhan 430056, China)

(2. China Coal Technology Engineering Group Huaibei Blasting Technology Research Institute Limited Company, Huaibei 235000, China)

(3. School of Mechanics and Civil Engineering, China University of Mining and Technology, Xuzhou 221116, China)

Abstract: With the rapid progress and development of technique and equipment in the field of aerospace and weapon protection, it is of great significance to accelerate the development and research of new metal composite materials with lightweight and high-strength properties. In this research, the multiscale numerical calculation method was used to explore the variation law of interface characteristic parameters as well as atomic-scale diffusion behavior and characteristics of the interface of explosive welded multilayer metal composite materials. The results show that with the passage of time, the dynamic collision angle increases slightly in the initial stage and remains stable in the middle stage. The joining interface shows obvious waveform structure characteristics. The pressure distributed at the joining interface of the multilayer composite sheet is significantly higher than that in other regions of the sheet, and the pressure of the bonding interfaces decreases gradually from top to bottom. The effective plastic strain at the bottom interface is slightly higher than that at the other three interfaces. Under microscale collisions at different speeds, obvious atomic diffusion occurs at all three solder joints. As the impact speed decreases, the thickness of the atomic diffusion layer at the interface also decreases. The thickness of the three diffusion layers ranges from 1.12 μm to 1.58 μm , 1.8 μm to 2.55 μm and 1.22 μm to 1.73 μm .

Key words: multilayer metal composite material; explosive welding; interface microstructure; numerical calculation

Corresponding author: Jia Yongsheng, Ph. D., Professor, Hubei Key Laboratory of Blasting Engineering, Jiangnan University, Wuhan 430056, P. R. China, E-mail: jason03566@163.com