

爆炸焊接记忆合金 $\text{Ni}_{50}\text{Ti}_{50}$ 与 Cu 界面的扩散机理

罗 宁, 申 涛, 向俊庠

(中国矿业大学 深部岩土力学与地下工程国家重点实验室, 江苏 徐州 221116)

摘 要: 为了揭示焊接界面微观尺度扩散特征, 采用内嵌入势函数 (EAM 势) 对形状记忆合金 $\text{Ni}_{50}\text{Ti}_{50}$ 和 Cu 的爆炸焊接界面进行分子动力学数值模拟, 同时结合 SEM、EDS 测试方法对爆炸焊接界面微观形貌及物理特征作实验分析。结果表明, 记忆合金 $\text{Ni}_{50}\text{Ti}_{50}$ 与 Cu 在采用 $u_z = -1500$ m/s, $u_x = 700$ m/s 冲击碰撞工况下, 体系的压强震荡逐渐变小, 120 ps 以后趋于平衡, 体系的温度稳定在 1350 K 左右, 而压强稳定在 28 GPa 左右; 在扩散层两侧 Cu 的原子浓度一直维持在 5% 左右, Ni 和 Ti 的原子浓度在 47% 上下波动, 界面扩散层厚度在 1.03~1.45 μm 的范围内; 采用 SEM、EDS 微观分析验证了焊接界面扩散层厚度约为 1.56 μm , 基本与计算结果相一致。

关键词: 爆炸焊接; 记忆合金; 界面原子扩散; 分子动力学计算; 内嵌入势

中图分类号: TG456.6

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2018)10-3238-05

从 1944 年 Carl 提出爆炸焊接, 1959 年美国人 Philipchuk 首次成功地实现钢-铝焊接之后, 爆炸焊接技术的工业应用以及理论、实验研究便在前苏联、英国、联邦德国、捷克、日本等国迅速展开。20 世纪 60 年代, 中国也开始了爆炸焊接技术与理论的研究。1968 年, 大连造船厂陈火金等成功试制了中国第一块爆炸复合板。20 世纪 80 年代以来, 爆炸焊接技术的理论研究和应用得到了长足的发展, 其应用领域不断地拓宽, 在化工、石油、制药、造船、军事甚至核工业、航空航天等领域都有了广泛应用。据不完全统计, 超过 260 种金属和合金组合可以通过爆炸焊接技术焊接到一起^[1]。爆炸焊接最主要特点就是能够将两种或多种不同熔点、不同强度、不同厚度、不同热膨胀系数以及硬度差别很大的金属焊接在一起, 甚至能够对金属与非金属(如陶瓷等)材料实施焊接。从爆炸焊接发明至今, 世界各国在爆炸焊接领域尤其是双金属爆炸焊接领域都进行了大量的理论和实践探讨工作, 对处于爆炸载荷下的复板的运动状态的描述, 射流的形成, 碰撞点近区速度场、应力场和应变场的计算, 爆炸焊接的可焊参数的确定等都已经得出了很好的结果^[2-12]。2008 年, Tanaka^[13]根据 SPH 方法的纯拉格朗日粒子性特别适合高速碰撞动态大变形问题的特点, 用 SPH 模拟进行了爆炸焊接波纹形成的研究; 2008 年, Akbari Mousavi^[14]根据拉格朗日网格计算大变形问题时具有不可替代的优点而采用 FEM 针对爆炸焊接界面处的

射流现象进行模拟; 2011 年, Wang^[15]利用 MPM 方法的粒子特点适合炸药爆炸、爆轰产物飞散等模拟的特性, 对爆炸焊接的炸药爆炸过程进行了研究。2013 年, Liu 等^[16]利用分子动力学方法模拟了 Al-Cu 爆炸焊接过程中分子扩散的特征并且与实验结果做比较, 获得了较好的结果。目前, 各种流行的力学模拟软件也都有各自的长处和针对性, 所以针对爆炸焊接复杂过程中某一项具体问题, 最好根据问题的具体特点采用合适的算法和软件, 进行不同的有针对性的模拟。然而爆炸焊接界面处的结构, 尤其是微观结构的形成机理及其对焊接产品质量的影响机理等仍未能得到令人满意的解释。近些年, 数值模拟特别是分子动力学方法和电镜等技术的广泛应用为上述问题的解决提供了新的途径。本研究通过对记忆合金 $\text{Ni}_{50}\text{Ti}_{50}$ 和金属铜进行爆炸焊接, 采用分子动力学方法并结合微观表征手段分析原子扩散对焊接件界面结构的影响; 从微观尺度对爆炸焊接过程和焊接界面扩散机理进行初步探索。

1 实 验

本实验采用的是平行焊接工艺。如图 1 所示, 先将一块 5 cm 厚的钢板放置在最底部作为钢基板。然后在钢基板上放置记忆合金 $\text{Ni}_{50}\text{Ti}_{50}$ 作为基板, 在基板四角处用支柱临时支撑起上面的材料为 Cu 的复板, 最后将一种专用硝铵混合炸药均匀散布在复板上。点燃炸药, 实现 $\text{Ni}_{50}\text{Ti}_{50}$ 基板与 Cu 复板的爆炸焊接。

收稿日期: 2017-10-23

基金项目: 国家自然科学基金 (11502282, 51734009); 中央高校基本科研业务费专项资金 (2015XKZD02)

作者简介: 罗 宁, 男, 1980 年生, 博士, 副教授, 中国矿业大学力学与土木工程学院, 深部岩土力学与地下工程国家重点实验室, 江苏 徐州 221116, 电话: 0516-83590666, E-mail: nluo@cumt.edu.cn

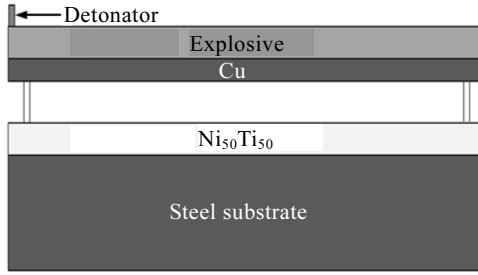


图 1 爆炸焊接实验示意图

Fig.1 Sketch of the explosive welding

2 计算模型建立

记忆合金 Ni₅₀Ti₅₀ 是一种广为应用的合金，在不同温度下可能会处于马氏体和奥氏体这两种状态之一。爆炸焊接一般都是在室温下进行。室温下，Ni₅₀Ti₅₀ 呈现的是马氏体的状态，该结构空间群为 P112₁/m（见图 2），晶胞属于单斜晶胞。图 2a 展示的是其原子结构示意图，图 2b 展示的是其俯视图。该晶胞的三边长度分别为 $a=0.20885\text{ nm}$ ， $b=0.4622\text{ nm}$ ， $c=0.4120(5)\text{ nm}$ ； a 与 b 之间的夹角 $\beta=96.8^\circ$ 。数值模拟 Box 的尺寸是 $2.88(x)\text{ nm}\times 8.28(y)\text{ nm}\times 82.2(z)\text{ nm}$ 。Cu 块和 Ni₅₀Ti₅₀ 合金块被分别放入 Box 的两端。Cu 块长度为 36 nm ，共含有 $75\ 600$ 个原子，Ni₅₀Ti₅₀ 合金块长度为 44 nm ，一共含有 $75\ 000$ 个原子。放置的时候使 Ni₅₀Ti₅₀ 晶体的 a 边和 c 边分别与体系坐标轴的 x 方向和 z 方向重合。根据 Cu 的 fcc 晶胞结构和 Ni₅₀Ti₅₀ 马氏体晶胞的尺寸，Cu 块正好包含 $9(x)\times 24(y)\times 100(z)$ 个晶胞，Ni₅₀Ti₅₀ 块正好包含 $10(x)\times 20(y)\times 100(z)$ 个晶胞。Cu 原子在图 3 中用红色表示，Ni 原子用蓝色表示，Ti 原子用淡黄色表示。因为 Ni₅₀Ti₅₀ 的单斜结构和上述放置方式，所以在 y 方向上会呈现出间隔分布的状态。在 Cu 块和 Ni₅₀Ti₅₀ 中间是一个长度为 5 nm 的真空区域，在撞击模拟开始前起到分割作用，以免两个块体相隔太近，原子间发生相互作用。在 Box 的两端，各设有 3 层原子厚度的 1 个过渡区，用来消除高速冲击波对模拟的不利影响。

在模拟体系的 x 方向和 y 方向采用周期性边界条件，所有原子的初始热速度服从 Maxwellian 分布。在模型几何条件和参数设置好之后，模拟阶段采用 Nose-Hoover 热浴，采用的时间步长都是 1 fs 。材料块的非长轴的 2 个方向上设定图 3 所示周期性边界条件，而长轴方向上的边界条件随着模拟的进程做相应的调整。将整个模拟系统放置在室温和零外压的条件

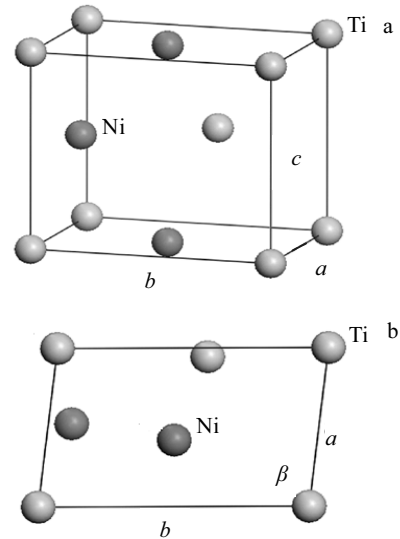


图 2 单斜的 Ni₅₀Ti₅₀ 马氏体晶胞

Fig.2 Monoclinic martensite cell of Ni₅₀Ti₅₀: (a) alloy structure diagram and (b) structure top view

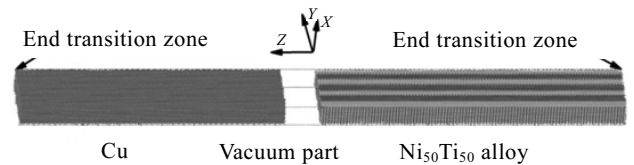


图 3 记忆合金 Ni₅₀Ti₅₀ 和 Cu 焊接初始几何构型

Fig.3 Analogue initial geometry of memory alloy Ni₅₀Ti₅₀ and Cu welding

下，应用 NPT 系综处理进行弛豫，弛豫时间为 100 万个时间步长，即 1 ns 。

本实验选用的炸药是 AN 炸药与黑索金（5%~8%）的混合物，经测定其实际爆速在 $3800\sim 4100\text{ m/s}$ ，所以根据下列公式，计算复板速度：

$$V_p = 2V_d \sin \frac{\beta}{2} \tag{1}$$

其中， V_p 表示复板速度， V_d 表示炸药爆速， β 表示复板的动态弯折角。

对 Ni₅₀Ti₅₀-Cu 爆炸焊接模拟的复板撞击速度分别采用 $u_z = -1500\text{ m/s}$ ， $u_x = 700\text{ m/s}$ 来描述。采用的势函数依然是 EAM 势，本研究用到的关于 Cu、Ni 和 Ti 的 EAM 势函数来自 Zhou 等人的研究^[17]，可以描述包括 Cu、Ni 和 Ti 在内的 16 种金属元素的势函数。该 EAM 势在基本的材料性质方面与实际符合得很好，例如晶格常数、弹性模量、体积模量、空穴形成能和生化能等。其具体描述如下：

$$\phi(r) = \frac{A \exp[-\alpha(\frac{r}{r_e} - 1)]}{1 + (\frac{r}{r_e} - \kappa)^{20}} - \frac{B \exp[-\beta(\frac{r}{r_e} - 1)]}{1 + (\frac{r}{r_e} - \lambda)^{20}} \quad (2)$$

其中, r_e 表示最近邻之间的平衡距离, A, B, α 和 β 是 4 个可调参数, λ 和 κ 是关于截断半径的两个额外参数。电子密度函数采用对势中引力项的相同形式, 并采用 β 和 λ 的数值, 即:

$$f(r) = \frac{f_e \exp[-\beta(\frac{r}{r_e} - 1)]}{1 + (\frac{r}{r_e} - \lambda)^{20}} \quad (3)$$

然后可以推出不同种类原子 a 和 b 之间的对势形式:

$$\phi^{ab}(r) = \frac{1}{2} \left[\frac{f^b(r)}{f^a(r)} \phi^{aa}(r) + \frac{f^a(r)}{f^b(r)} \phi^{bb}(r) \right] \quad (4)$$

要想使能量函数在一个非常广泛的电子密度范围内都能很好的使用, 需要额外增加 3 个方程使之适用于不同的电子密度范围。对嵌入能平滑变化的情况来说, 这 3 个方程在彼此交点处的函数值和斜率必须相同。根据上述原则, 选用如下 3 个方程:

$$F(\rho) = \sum_{i=0}^3 F_w (\frac{\rho}{\rho_n} - 1)^i, \quad \rho < \rho_n, \quad \rho_n = 0.85 \rho_e \quad (5)$$

$$F(\rho) = \sum_{i=0}^3 F_i (\frac{\rho}{\rho_e} - 1)^i, \quad \rho_n \leq \rho < \rho_0, \quad \rho_0 = 1.15 \rho_e \quad (6)$$

$$F(\rho) = F_e [1 - \ln(\frac{\rho}{\rho_s})^\eta] \left(\frac{\rho}{\rho_s} \right)^\eta, \quad \rho_0 < \rho \quad (7)$$

3 结果与讨论

3.1 加载阶段体系的热力学状态

在本模拟中 Cu 块的加载速度为 $u_z = -1500$ m/s, $u_x = 700$ m/s, 对模拟过程中加载阶段的状态参量进行分析。该情况下的温度与压强随时间变化的曲线整理在图 4 中。如图所示, 蓝色的曲线表示的是压强的时间历程, 红色的曲线表示的是温度的时间历程。从图中可以明显地看出, 随着体系的动能不断转化为内能, 体系的温度在大约 90 ps 内剧烈增加到 1160 K 左右。与此同时, 体系的压强剧烈震荡。在大约前 120 ps 的模拟中, 体系的压强震荡逐渐变小, 120 ps 以后趋于平衡。最后体系的温度稳定在 1350 K 左右, 而压强稳定在 28 GPa 左右。

3.2 均方位移和扩散系数

图 5 中所展示的是 $Ni_{50}Ti_{50}$ -Cu 体系在加载和卸载 2 个阶段的均方位移(MSD)-时间曲线。由于 LAMMPS 是对整体内的原子一起进行 MSD 的统计, 所以 $Ni_{50}Ti_{50}$ 的 MSD 数值被统计在了一起。根据后文中对

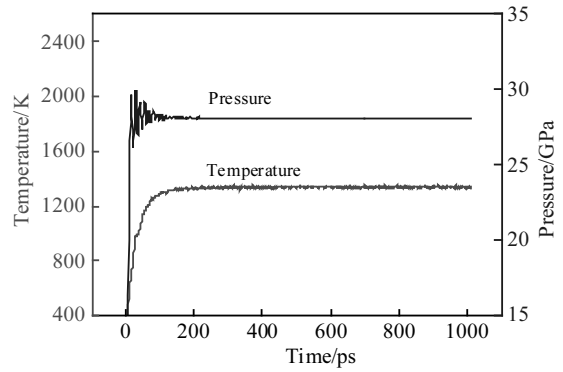


图 4 加载阶段 $Ni_{50}Ti_{50}$ -Cu 体系的压强和温度

Fig.4 Pressure and temperature of $Ni_{50}Ti_{50}$ -Cu system during loading

实际 Ni 和 Ti 原子扩散位置的分析, 目前这种统计和处理方式不会对扩散性质的分析造成影响。如图 5a 所示, 在经过一些比较剧烈的震荡之后, 加载阶段的 2 条 MSD 曲线最终近似与时间轴平行。在 1000 ps 时, Cu 的 MSD 值稳定在大约 1.8 nm^2 , $Ni_{50}Ti_{50}$ 的 MSD 值稳定在 3.4 nm^2 。图中曲线形状和走势说明, 整个体系在只经过加载之后, 仍旧处于固体状态。如图 5b 所示, 在卸载阶段中, Cu 和 $Ni_{50}Ti_{50}$ 的 MSD 值基本随着时间的增加而不断线性地变大, 在经过 1000 ps 的模拟之后, 分别达到了大约 6.1 和 5.07 nm^2 。加载阶段的 MSD 曲线平行于时间轴, 只通过降压操作就使卸载阶段的 MSD 曲线变成斜线。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, Cu 原子和 $Ni_{50}Ti_{50}$ 原子开始分别由 Cu 块和 $Ni_{50}Ti_{50}$ 块一侧朝着焊接界面对侧扩散。由 MSD 曲线的斜率可以看出, 在该模拟的条件下, Cu 的扩散速度要比 $Ni_{50}Ti_{50}$ 整体的扩散速度快。

综上所述, $Ni_{50}Ti_{50}$ -Cu 模拟中的原子扩散行为具有相同的边界条件, 类似的扩散过程和性质, 因此可以尝试用相同的混合方法来计算 $Ni_{50}Ti_{50}$ -Cu 的界面扩散层厚度。计算方程如下所示:

$$L = \sum_{i=Cu, Ni_{50}Ti_{50}} 3\sqrt{2D_i t} \quad (8)$$

其中, L 表示扩散层厚度, D_i 表示扩散系数, 这里可以通过将图 5b 中的数据做线性拟合, 然后将斜率除以 2 得到。再次假设扩散时间在 $5 \sim 10 \mu\text{s}$ 的范围内, 那么可以通过计算得到 $Ni_{50}Ti_{50}$ -Cu 的界面扩散层厚度在 $1.03 \mu\text{m}$ ($5 \mu\text{s}$) 到 $1.45 \mu\text{m}$ ($10 \mu\text{s}$) 的范围内。

为了观察和测量扩散层, 将该焊接件加工成试件后, 用扫描电镜 (SEM, HITACHI S-4800) 和 EDS 线扫描进行观察研究, 可以获得爆炸焊接界面形貌和

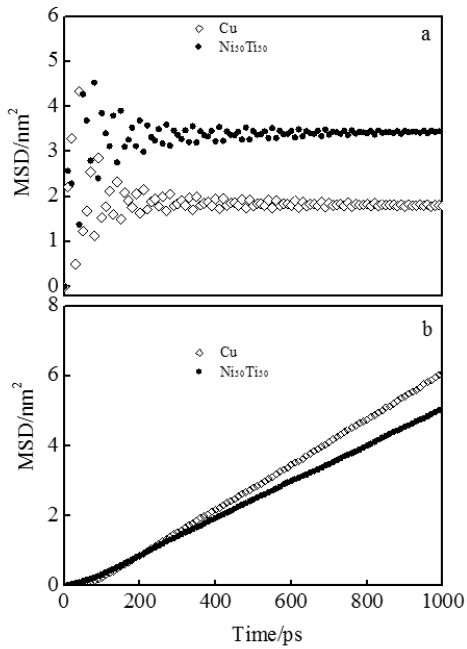


图 5 Ni₅₀Ti₅₀-Cu 体系在加载和卸载 2 个阶段的 MSD-时间曲线
Fig.5 MSD-time curves of Ni₅₀Ti₅₀-Cu system under different processes: (a) loading stage and (b) unloading stage

沿着横穿界面方向的原子浓度分布。图 6a 展示的是 Ni₅₀Ti₅₀-Cu 的 SEM 图像，焊接界面属于平纹，可以看出焊接质量相当好。用其做 EDS 试验，然后和模拟结果进行验证对比，图 6b 是 EDS 扫描线上的原子浓度分布。

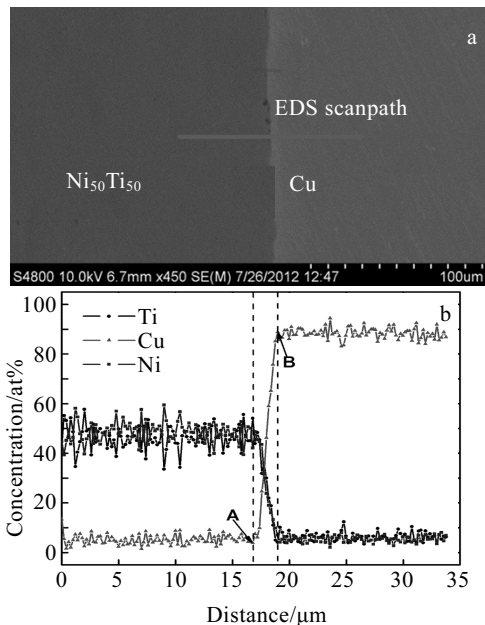


图 6 Ni₅₀Ti₅₀-Cu 爆炸焊接界面 SEM 形貌和 EDS 线扫描
Fig.6 SEM image (a) and EDS line scan (b) of Ni₅₀Ti₅₀-Cu explosion welding interface

图中 2 条虚线之间表示的是扩散层边界。在扩散层左侧，Cu 的原子浓度一直维持在 5%左右，Ni 和 Ti 的原子浓度在 47%上下波动；在扩散层右侧，Cu 原子浓度最高值维持在 90%左右，Ni 和 Ti 的原子浓度都维持在 5%左右。A、B 两点是虚线与 Cu 原子浓度曲线的交点。A 点处的浓度大约是 5%，B 点处的浓度大约是 90%。选取扩散层边界位置的具体方法是：沿着 Cu 的浓度分布曲线，从扩散层中间开始向两侧遍历，左侧将碰到的第 1 个浓度值为 5%的点取为 A 点，右侧将碰到的第 1 个浓度值为 90%的点取为 B 点。然后经过 A、B 两点分别做 2 条虚线，虚线中间的部分就认为是扩散层。B 点和 A 点的横坐标之差就是扩散层厚度。据此求出此 EDS 扫描线经过的扩散层厚度约为 1.56 μm。而上述分子动力学的模拟结果是 1.03~1.45 μm，实验和模拟的 2 种结果的差距在可以接受的分子动力学计算误差之内。

4 结 论

- 1) 通过分子动力学模拟爆炸焊接 Ni₅₀Ti₅₀-Cu 界面微观结构得出，在扩散时间 5~10 μs 的范围内，Ni₅₀Ti₅₀-Cu 的界面扩散层厚度在 1.03~1.45 μm 的范围内。
- 2) 实验验证获得焊接界面扩散层厚度约为 1.56 μm，基本与计算结果相一致。从而充分验证了计算模型及方法的有效性和可靠性。

参考文献 References

[1] Kacar R, Acarer M. *Journal of Materials Processing Technology*[J], 2004, 152: 91

[2] Acarer M, Demir B. *Materials Letters*[J], 2008, 62: 4158

[3] Findik F. *Materials & Design*[J], 2011, 32: 1081

[4] Liu K X, Liu W D, Wang J T et al. *Applied physics letters*[J], 2008, 93: 81 918

[5] Yan Honghao(闫鸿浩), Li Xiaojie(李晓杰). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2003, 32(3): 176

[6] Chen Yong(陈 勇), Wu Yucheng(吴玉程), Yu Fuwen(于福文) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2007, 36(5): 822

[7] Zheng Yuanmou(郑远谋). *Explosive Welding and Metallic Composite and Their Engineering Application*(爆炸焊接和金属复合材料及其工程应用)[M]. Changsha: Central South University Press, 2002:21

[8] Mousavi A A, Burley S J, Hassani S T S. *International Journal of Impact Engineering*[J], 2005, 31(6): 719

- [9] Kahraman N, Gulenc B, Findik F. *Journal of Materials Processing Technology*[J], 2007, 34(8): 1423
- [10] Guo Xunzhong(郭训忠), Tao Jie(陶杰), Yuan Zheng(袁正) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(1): 139
- [11] Wronka B. *Journal of Materials Science*[J], 2010, 45(15): 4078
- [12] Bataev I A, Bataev A A, Mali V I *et al. Materials & Design*[J], 2012, 35: 225
- [13] Tanaka K. *Materials Science Forum*[J], 2008, 566: 61
- [14] Akbari Mousavi S A A, Al-Hassani S T S. *Materials Design*[J], 2008, 29(1): 1
- [15] Wang Yuxin, Beom H G, Sun Ming *et al. International Journal of Impact Engineering*[J], 2011, 38(1): 51
- [16] Chen S Y, Wu Z W, Liu K X *et al. Journal of Applied Physics*[J], 2013, 113: 44 901
- [17] Zhou X W, Johnson R A, Wadley H N G. *Physical Review B*[J], 2004, 69(14): 144 113

Diffusion Mechanism of Explosive Welding Interface Between Memory Alloy Ni₅₀Ti₅₀ and Cu

Luo Ning, Shen Tao, Xiang Junxiang

(State Key Laboratory for Geo-mechanics and Deep Underground Engineering,
China University of Mining and Technology, Xuzhou 221116, China)

Abstract: In order to reveal the micro-scale diffusion mechanism of the welding interface, the molecular dynamics simulation of the explosive welding interface between shape memory alloy Ni₅₀Ti₅₀ and Cu was carried out by using the embedded potential function (EAM potential). The micro-morphology and physical characteristics of the explosive welding interface were analyzed by SEM and EDS. The results show that the pressure oscillation of the Ni₅₀Ti₅₀-Cu alloy system becomes smaller and smaller under the impact conditions of $u_z=-1500$ m/s and $u_x=700$ m/s. The temperature of the system is about 1350 K, and the pressure after 120 ps is about 28 GPa. The concentration of Cu atoms on both sides of the diffusion layer is about 5%, and that of Ni and Ti is about 47%. The interfacial diffusion layer thickness ranges from 1.03 to 1.45 μm . SEM and EDS analyses confirm that the thickness of the diffusion layer at the welding interface is about 1.56 μm , which is basically consistent with the simulation results.

Key words: explosive welding; shape memory alloy (SMA); welding interface atom diffusion; molecular dynamics; EAM function

Corresponding author: Luo Ning, Ph. D., Associate Professor, Department of Mechanics and Engineering Science, China University of Mining and Technology, Xuzhou 221116, P. R. China, Tel: 0086-516-83590666, E-mail: nluo@cumt.edu.cn