

钨铜均质复合材料高压扭转变形的离散元模拟和实验研究

王雪, 朱亚辉, 杨岑, 甘国强, 李萍, 薛克敏*

(合肥工业大学 材料科学与工程学院 高性能铜合金材料及成形加工教育部工程研究中心, 安徽 合肥 230009)

摘要: 采用 PFC-3D 软件对钨铜均质粉末材料高压扭转 (High-pressure torsion, HPT) 变形进行离散元模拟, 分析了压缩与扭转变形过程中的颗粒力链与位移分布规律, 及其对不同区域的孔隙率、配位数、等效应力等的影响规律。模拟结果表明, 颗粒位移沿压缩方向和半径方向呈梯度分布, 模型边缘处和上表面的颗粒位移量最大; 压缩阶段的颗粒重排导致孔隙率快速降低, 剪切变形促使颗粒二次重排和转动, 孔隙率继续缓慢下降, 边缘处的致密度和配位数高于中心处, 表明大扭转半径下的剪切变形有利于粉体致密。在 400 °C、1.5 GPa 条件下对冷压粉坯进行不同圈数高压扭转变形, 实验结果表明, 随着扭转半径和扭转圈数的增大, 颗粒破碎程度和钨铜组织细化程度和分布均匀性得到显著提升, 孔隙在高静水压力与剪切力作用下被拉长和闭合, 材料致密度由 10 圈的 $95.44 \pm 0.87\%$ 上升到 20 圈的 $96.03 \pm 0.54\%$ 。钨基体的微晶尺寸在 15 圈 HPT 变形后被显著细化至 20.8 nm, 位错密度也快速提升至 $2.35 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$, 晶粒细化和位错累积在 15 圈变形后处于动态平衡; 20 圈 HPT 变形后, 在粉体致密、组织细化和位错累积的共同作用下, 试样边缘处的显微硬度达到 $334.8 \pm 4.2 \text{ HV}$, 较 10 圈中心处提升了约 78.7%。

关键词: 钨铜复合材料; 高压扭转; 离散元模拟; 粉体致密; 显微硬度

中图分类号: TG376; TG331

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2017)0?-0???-0?

钨铜复合材料是由钨和铜两相单体均匀混合而成的复合材料, 既不互溶又不形成金属间化合物, 是一种典型的假合金。该材料结合了两种组分金属各自的优异性能, 具有高硬度和高强度、低热膨胀系数、钨的良好抗电弧性和铜的高导电性和导热性等综合性能, 具有优异的热、电、机械性能^[1-3]。然而, 由于钨铜两种材料的化学性质和晶体结构不同, 使得它们的界面结合能力较弱, 在承受大的热负荷时, 会出现热疲劳失效和热应力开裂引发材料失效。因此, 选择合适的工艺方法, 制备出高致密度、综合性能优异的钨铜均质复合材料, 已成为电子工业、电气工业和军工业领域的重要研究方向^[4-5]。

目前制备钨铜均质复合材料的方法主要是以熔渗法、热压烧结、活化烧结等为代表的粉末冶金技术, 随着新技术新工艺的开发和研究, 相继出现的现代制备方法, 如放电等离子体烧结、金属注射成形技术、机械合金化等^[6-10], 虽然可以提高材料致密度和抑制晶粒长大, 但在粉末冶金过程中可能引入其他杂质, 且设备昂贵和工艺复杂, 后续为进一步提升材料强韧性等力学性能需要进行塑性变形。近年来, 高压扭转 (High-pressure torsion, HPT)^[11-12] 作为典型的大塑性变形工艺, 因其在粉末材料固结和晶粒组织细化的优势而备受关注。室温高压扭转变形可将纯铝的晶粒尺寸细化至 250~1200 nm, 获得纳米晶

占比高达 76% 的超细晶组织, 而对于 304 不锈钢, 甚至可将其局部平均晶粒尺寸细化至 8 nm, 显著提升其平均硬度至 $10.1 \pm 0.47 \text{ GPa}$ ^[13-14]。针对粉末材料的固结成形和组织细化研究, 薛克敏、李萍等^[15-16] 在 440-550 °C 下对纯钨粉末进行 10 圈高压扭转变形, 制备获得高致密、高硬度块体钨, 大变形后晶粒得到显著细化, 大角度晶界比例上升, 同时晶内位错逐渐向晶界处移动并产生有序化排列。研究表明^[17], 大变形引入的高密度位错和大角度晶界能够有效提升元素互扩散系数, 提升界面结合强度, 变形能对粉体固结也有积极作用, 因此本文采用高压扭转技术, 借助高静水压力和大扭转圈数下的剪切变形促进钨相和铜相的扩散固结和晶粒细化, 在较低温度下制备获得具有高致密度的细晶钨铜复合材料。

目前, 钨基粉末材料变形过程的粉体致密机理研究尚不明确, 本研究将离散元软件 PFC-3D 应用到高压扭转工艺中, 模拟分析 HPT 变形过程中颗粒流动、孔隙率、配位数、等效应力等变化规律, 揭示静水压力和剪切变形对粉体致密的作用机理。为提升钨变形能力、促进粉体固结细化, 同时避免铜组织异常长大和粉体氧化, 根据本课题组现有研究基础^[18-19], 在 400 °C 和 1.5 GPa 下对钨铜粉末冷压坯进行不同扭转圈数的高压扭转工装实验, 获得致密度高、性能优良的钨铜均质复合材料, 研

收到初稿日期:

基金项目: 中央高校基本科研业务费专项资金 (JZ2023HGTD0240, PA2024GDGP0042)

作者简介: 王雪, 女, 1988 年生, 博士, 副教授, 合肥工业大学材料科学与工程学院, 安徽 合肥 230009, 电话: 0551-62901368, E-mail: wangxue@hfut.edu.cn

究分析了大剪切应变下的颗粒变形与破碎机制以及材料性能的主要强化机制,为大塑性变形技术制备高性能钨铜复合材料提供了重要的仿真基础和实验依据。

1 离散元模拟

1.1 离散元模型建立

根据准限制型 HPT 模具工装,在 PFC-3D 软件中采用 FISH 语言编程构建圆柱体曲面墙体作为预应力圈内表面,并将上下冲头和试样的接触面简化为片状平面墙体进行建模。试样的几何模型颗粒体与包套颗粒采取“ball distribute”孔隙率生成法,如图 1 所示,即在 $\Phi 12 \text{ mm} \times H3 \text{ mm}$ 的圆柱体区域内分别生成不同数量和粒径的钨铜混合颗粒作为初始坯料,并使钨铜颗粒质量比近似为 7:3、孔隙率近似为 0.4,在 $\Phi 12 \text{ mm} - 14 \text{ mm} \times H3 \text{ mm}$ 的外围环形空间内生成 304L 包套颗粒,以模拟包套对

粉末压坯的约束作用。

由图 1 可看出经过弛豫后的钨铜颗粒在包套内分布较为均匀。高压扭转变形过程模拟分为压缩和扭转两个阶段,首先对上冲头表面设置匀速下压,当下压量达到约 20%时,上冲头保压同时对其设置匀速旋转。具体模拟参数通过查阅文献^[20-21]计算获得,如下表 1 所示。

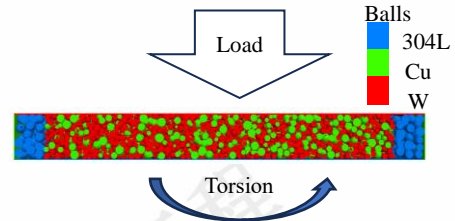


图 1 离散元模型剖面

Fig.1 Discrete element model profile

表 1 不同材料间的接触属性

Table 1 Contact properties between different materials

	Density/ ($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)	Particle diameter/ μm	Contact model	Kn/(N/m)	Kratio	Friction coefficient	Damping coefficient/ ($\text{Ns} \cdot \text{m}^{-1}$)
Face	---	---	Linear	1.5×10^{14}			
304L	7930	160	Linearbond	0.8×10^{10}	1	0.5	0.5
W	19320	30-110	Linearbond	3.29×10^{11}		0.1	
Cu	8960	80-160		1.51×10^{10}			

1.2 模拟结果分析

1.2.1 变形过程中的力链与位移分析

图 2 为模型压缩 20%并连续扭转 1/8 圈与 1/4 圈的力链与颗粒位移分布图,为更好地分析 HPT 变形过程中各区域颗粒孔隙度、配位数和等效应力的变化趋势,在模型正中心(区域 1)、距中心 2 mm(区域 2)和 5 mm 处(区域 3)设置三个半径为 0.5 mm 的球形观测区域,如图 2(b)所示。在颗粒压缩阶段,随着冲头的下移,颗粒之间的接触力迅速增大,由于颗粒之间摩擦导致力的传递逐步递减,颗粒的位移量由上表面向下表面呈减小趋势;钨铜颗粒之间较大的孔隙在颗粒重排和平动的作用下迅速被压缩减小,部分小孔隙闭合,导致颗粒间

的接触压力增大,整个模型中的力链分布较为均匀。

在扭转变形阶段,力链逐渐向材料内部扩展,包套区的接触力有所降低,钨铜颗粒间的接触力进一步增加,表明材料整体承受了较大的应力,颗粒系统趋向于稳定;在转动过程中,颗粒沿切向进行扭转运动,由 PFC 的原理^[22-23]可知,颗粒的位移主要依靠平移和转动实现,而平移和转动可以在刚性颗粒之间传递,但由于颗粒间摩擦力导致上冲头施加扭矩的传递效果逐渐减弱,同时由于冲头边缘具有较大的线速度,在相同时间内旋转位移最大,最终呈现自上表面至下表面、自中心向边缘的位移量递增趋势,这与 HPT 变形过程中应变累积分布规律一致^[24]。

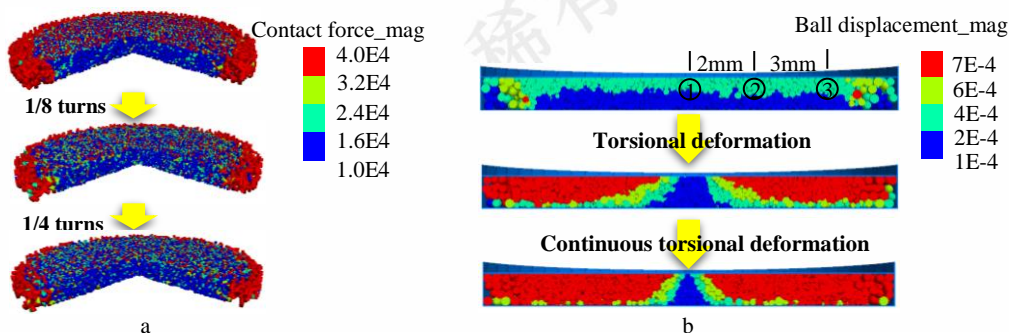


图 2 高压扭转变形过程中的 (a) 力链分布和 (b) 颗粒位移分布

Fig.2 Distribution of (a) force chain and (b) particle displacement during HPT processing

1.2.2 变形过程中的孔隙率与配位数分析

图 3 所示为变形过程中的孔隙率与配位数变化，横坐标 Cycle 用来衡量离散元数值模拟中粒子之间相互作用计算的迭代次数。在压缩变形阶段，区域 1、区域 2 和区域 3 的孔隙率快速下降，从初始的 0.40 左右下降到 0.19-0.23 左右，减少约 50%，材料致密度在压缩过程中快速增加，配位数也随之迅速上升 8 左右，表明颗粒之间的接触点增多，颗粒间的相互作用增强，其中区域 3 的配位数略大于区域 1 和 2，这是由于包套颗粒向内部挤压对边缘处颗粒产生的压应力大于中心处。

扭转变形阶段，试样各处的孔隙率均呈波动下降趋势，区域 1、2 和 3 的孔隙率分别由 0.226、0.212 和 0.191 降低至约 0.188、0.174 和 0.162，减小约 16.8%、17.9% 和 15.2%。在扭转前期 (1/8 圈)，由于上冲头扭转作用由顶层颗粒逐渐向下传递，颗粒随之发生平移和转动，颗粒的排布逐渐紧凑，使各区域的颗粒孔隙率明显下降；随着冲头的继续扭转，孔隙率仅略微下降，此时颗粒的重排基本达到平衡状态，在冲头旋转约 1/4 圈时，模型中心区域 1 的颗粒孔隙率基本保持不变，区域 2 和区域 3 的孔隙率仍有降低且配位数也升高，表明大扭转半径下的剪切作用有利于材料致密度的提升。

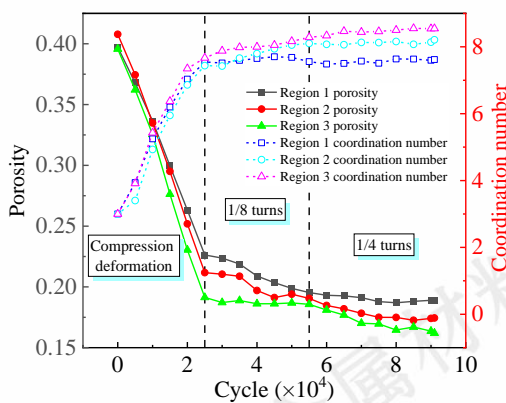


图 3 变形过程中的颗粒孔隙率与配位数

Fig.3 Particle porosity and coordination number during deformation

1.2.3 变形过程中的冲头载荷和颗粒等效应力分析

图 4 所示为变形过程中的载荷和等效应力变化。在压缩变形阶段，随着冲头下行，载荷迅速增加至 2.8×10^8 N，表明材料在压缩过程中，颗粒间的相互作用力显著增加，导致冲头受力急剧上升；区域 1、区域 2 和区域 3 的等效应力在压缩变形阶段也迅速增加，达到各自的峰值，且区域 2 和 3 的等效应力最高，达到约 1.9×10^5 MPa，区域 1 的等效应力相对较低。由粉末压制理论可知，粉末与模具之间以及粉末颗粒之间的摩擦力会导致压力分布不均匀，模壁对粉末压坯的侧压力导致试样中心区域压

力较小，而边缘区域的压力较大。

扭转变形时，剪切力的引入使得颗粒发生切向位移，受力状态的变化导致冲头载荷出现快速下降，这与力链变化规律一致；但随着模型内部孔隙数量和尺寸逐渐减小，材料致密度的提升导致冲头载荷趋于稳定。另外，区域 3 在稳定状态下的等效应力最大，这是因为环形包套在变形过程中发生墩粗，对此处颗粒产生径向压应力，在冲头轴向压应力和剪切力的协同作用下，区域 3 颗粒的变形致密效果最明显；随着扭转角度的增大，材料各处的应力分布逐渐均匀。

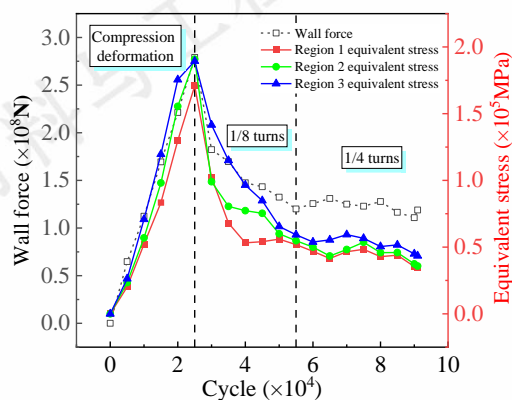


图 4 变形过程中的冲头载荷和颗粒等效应力

Fig.4 Punch load and particle equivalent stress during deformation

2 实验材料及方法

实验采用近球形的 W 粉与 Cu 粉作为原始粉末，二者平均粒径分别为 $7.1 \mu\text{m}$ 和 $12.6 \mu\text{m}$ ，其颗粒形貌如图 5 所示。在粉球比 3:1、转速 500 rpm 下，球磨混粉制得质量比为 7:3 的钨铜混合粉末，借助 SYP-30TS 型号粉末压片机在室温下加压至 20 t、保压 30 min 获得直径为 $\Phi 12 \text{ mm}$ 、厚度约为 3 mm、初始致密度约为 85% 的冷压坯料。将冷压坯料与 304L 不锈钢包套结合，在温度 $400 \text{ }^\circ\text{C}$ 、压力 1.5 GPa、扭转速度 0.45 r/min 条件下，进行扭转圈数为 10、15、20 圈的高压扭转实验，如下图 6 所示。借助扫描电子显微镜对变形试样中心处和半径 5 mm 处的显微组织进行表征，并借助 X 射线衍射仪对边缘处试样进行物相组成表征和位错密度计算；另外，沿半径方向进行显微硬度测试，压力 300 g，保压 15 s。

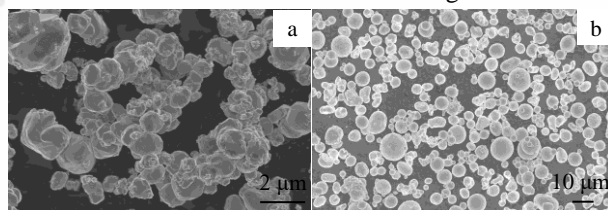


图 5 颗粒形貌图：(a) W 粉、(b) Cu 粉

Fig.5 Particle morphology of (a) W powder and (b) Cu powder

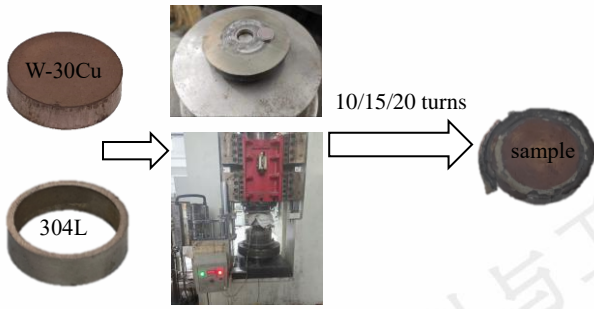


图 6 实验工装与 HPT 试样图

Fig.6 Experimental equipment and HPT samples

2.1 微观组织与性能分析

2.2.1 组织分析

图 7 为不同扭转圈数下 HPT 试样的组织形貌图，在电子背散射模式下灰色为铜基底、白色为钨相、黑色为孔隙，下图 a、c、e 为试样中心区域，b、d、f 为边缘区域。变形后钨铜试样的中心区域还存在着明显孔隙，这些孔隙大多分布在钨相和铜相的交界处，并且基本成细小条带状；随着扭转圈数的增加，孔隙数量有所减少，试样结构变得更加致密。试样边缘区域的孔隙数量和尺寸较中心区域均明显减少，颗粒破碎程度显著增加、颗粒尺寸明显减小，组织分布均匀性也显著提升，表明边缘区域试样在扭转过程中受到更大的剪切应变，导致组织细化、孔隙减小和闭合。

根据阿基米德排水法计算得出试样中心、边缘和整体的相对密度，如图 8 所示。随着扭转圈数的增加，材料整体的相对密度逐渐提高，由 10 圈的 $95.44 \pm 0.87\%$ 上升到 20 圈的 $96.03 \pm 0.54\%$ ；中心和边缘的相对密度均呈现不同程度的升高，并且边缘处的相对密度始终高于中心处，这与离散元模拟结果基本保持一致。在高压扭转过程中，材料受到巨大的剪切应力和压缩应力，颗粒和孔隙沿扭转方向拉长，一方面破碎细化的颗粒填充到孔隙中，另一方面被拉长的孔隙尺寸在复压状态下逐渐较小，随着剪切变形的继续，孔隙闭合。SEM 图像中的孔隙减少与相对密度的增加趋势一致，说明材料的致密化效果随着 HPT 扭转圈数和扭转半径的增加而显著增强。

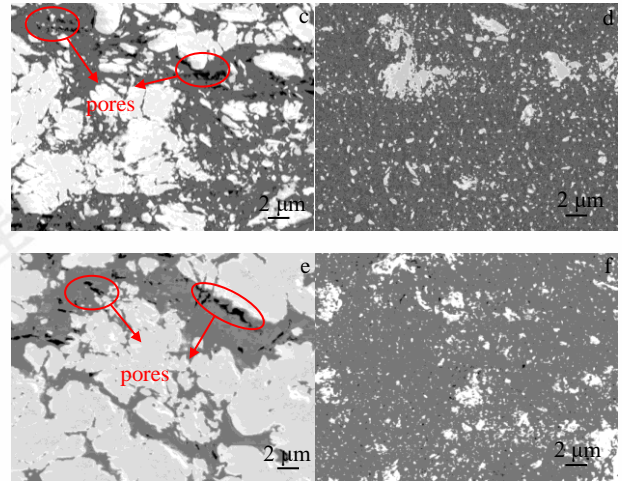
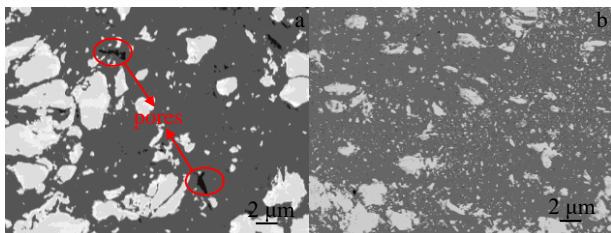


图 7 HPT 试样组织形貌图：(a) (b) 10 圈、(c) (d) 15 圈、(e) (f) 20 圈

Fig.7 Microstructure morphology of HPT samples after (a) (b) 10 turns, (c) (d) 15 turns and (e) (f) 20 turns

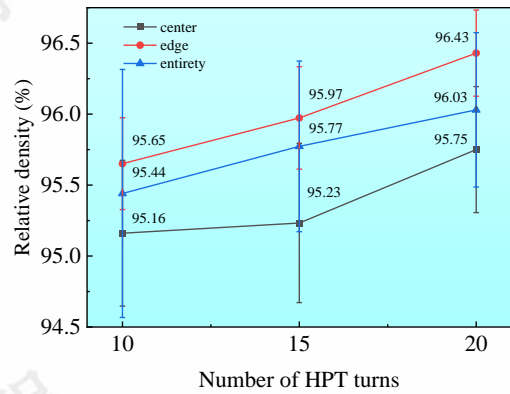


图 8 HPT 试样相对密度图

Fig.8 Relative density diagram of HPT samples

2.2.2 位错密度分析

图 9 为不同圈数高压扭转变形试样的 XRD 衍射图谱，可以看出高压扭转变形后，尽管衍射峰宽度和强度发生了变化，但各个特征衍射峰的位置没有显著变化，这表明在 HPT 变形过程中，材料的相结构保持稳定，没有发生相变。钨和铜的各衍射峰均出现不同程度的偏移，表明高压扭转变形可能导致钨和铜原子部分溶解到对方晶格中，导致晶格常数发生变化。同时，衍射峰的偏移和宽化还表明材料内部出现显著的晶格畸变、晶粒细化和位错累积。

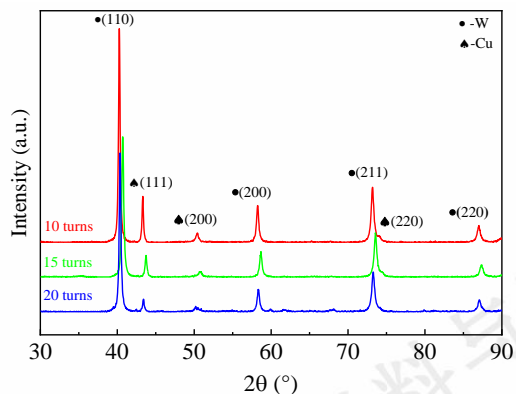


图 9 不同圈数变形试样的 XRD 衍射图谱

Fig.9 XRD patterns of HPT processed samples with different turns

图 10 为根据 XRD 衍射图谱计算获得的不同圈数 HPT 变形后钨的微晶尺寸、微观应变和位错密度。由图 10 (a) 可知, 钨基体在 HPT 过程中发生了显著的晶粒细化, 初始钨粉的微晶尺寸为 46.6 nm^[16], 15 圈变形后迅速减小至 20.8 nm, 扭转圈数增加 20 圈时, 微晶尺寸略微增加至 21.3 nm。HPT 变形后钨基体的微观应变也较初始态显著增加了 8.1 倍, 但随着圈数增加, 其数值基本不变。变形导致的晶粒细化和晶格畸变, 使得钨基体的位错密度显著提升, 但随着扭转圈数增加, 其位错密度呈先增加后下降趋势。这是由于高压扭转过程中, 累积的剪切变形导致材料内部产生了大量的位错, 不同位错相互作用缠结, 从而导致位错密度显著增加。在 15 圈 HPT 处理后, 位错密度达到最大值 2.35×10¹⁴ m⁻², 随着扭转圈数继续增加到 20 圈, 材料在大应变下发生动态回复和再结晶, 在高应变条件下, 部分位错被亚晶界吸收形成新的稳定细小晶粒, 导致位错增殖和湮灭处于动态平衡。

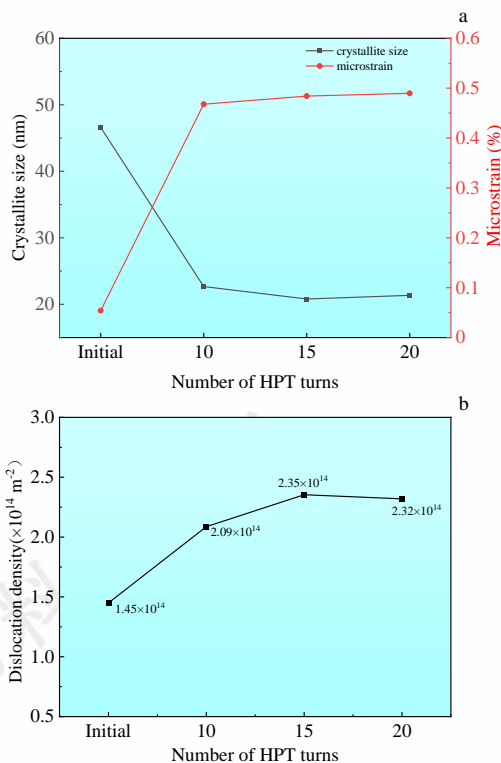


图 10 不同圈数变形试样中钨基体的 (a) 微晶尺寸与微观应变、(b) 位错密度

Fig.10 Variation of (a) crystallite size and microstrain as well as (b) dislocation density of W deformed by HPT with different turns

2.2.3 显微硬度分析

图 11 为不同扭转圈数下 HPT 试样的显微硬度分布图。可以看出, 钨铜试样的显微硬度沿半径方向逐渐升高, 且随着扭转圈数的增加, 各处的硬度值均呈现不同幅度的上升。试样中心与半径 6 mm 处的显微硬度分别从 10 圈的 187.4±4.8 HV 和 301.0±8.3 HV 提升至 20 圈的 235.4±5.0 HV 和 334.8±4.2 HV, 增幅分别约为 25.6%和 11.2%。试样中心区域的变形主要受到压缩应力的影响, 而剪切变形导致材料致密、位错累积和晶粒细化, 这一效应随着扭转半径增加而增强, 边缘区域呈现最高的显微硬度。以上可知, 高压扭转变形导致的粉体致密、引入的高密度缺陷与晶粒细化为制备高性能钨铜复合材料提供了有效手段。

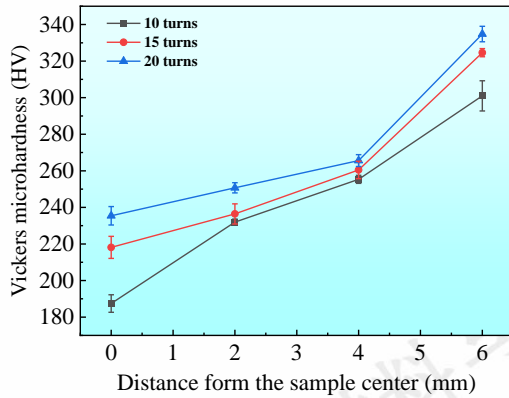


图 11 HPT 试样的显微硬度分布图

Fig.11 Microhardness distribution of HPT samples

3 结论

1) 模拟结果显示,在压缩阶段颗粒发生逐层重排,压应力导致配位数升高、孔隙率降低和等效应力升高;在扭转阶段,由于受到剪切力的作用,颗粒沿径向发生平动和转动,材料内部力链趋于均匀,载荷和等效应力降低后趋于稳定,并且由于试样边缘处的颗粒位移量大于中心处,导致其致密度上升,表明剪切变形和高静水压力有利于孔隙闭合和粉体致密。

2) 在 400 °C、1.5 GPa、20 圈条件下,采用高压扭转工艺,成功制得致密度较高、晶粒尺寸细化的钨铜复合材料,压缩剪切变形导致颗粒和孔隙沿扭转方向拉长,破碎细化的颗粒填充和拉长孔隙的尺寸减小,导致试样相对密度随扭转圈数的增加不断提升至 $96.03 \pm 0.54\%$ 。

3) HPT 变形后试样钨的位错密度和显微硬度均显著提升,其晶粒细化和位错累积在 15 圈变形后处于动态平衡,微晶尺寸减小至 20.8 nm,位错密度达到 $2.35 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$,20 圈变形后,试样边缘处的剪切变形效果最显著,粉体致密、位错累积和组织细化共同提升其显微硬度至 $334.8 \pm 4.2 \text{ HV}$ 。

参考文献 References

[1] Zang R, Xie Y, Liu J, *et al.* *Metallurgical and Materials Transactions A*[J]. 2022, 53(9): 3210-3215.

[2] Wang K, Guo Y, Lv M, *et al.* *Journal of Alloys and Compounds*[J]. 2024: 176758.

[3] Chao Hou, Xiaoyan Song, Fawei Tang, *et al.* *NPG Asia Materials*[J]. 2019, 11(1): 74.

[4] Luo Laima(罗来马), Tan Xiaoyue(谭晓月), Luo Guangnan(罗广南), *et al.* *Nuclear Fusion and Plasma Physics*(核聚变与等离子体物理)[J]. 2014, 34(04): 340-347.

[5] Xu Xian(徐仙), Cheng Pengqi(陈鹏起), Tai Yunxiao(台云霄), *et al.* *Acta Materialia Sinica*(复合材料学报)[J]. 2021, 38(12): 4205-4211.

[6] Dong Guolin, Jun Sae Han, Young Sam Kwon, *et al.* *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*[J]. 2015, 53: 87-91.

[7] Chunlan Luo, Yan Wang, Juexin Xu, *et al.* *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*[J]. 2019, 81: 27-35.

[8] Fu Yiyi(傅义毅), Luo Laima(罗来马), Wu Yucheng(吴玉程). *Metallic Functional Materials*(金属功能材料)[J]. 2022, 29(05): 18-27.

[9] Yang Xin(杨鑫), Wang Ben(王犇), Gu Wenping(谷文萍), *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J]. 2021, 50(08): 2913-2920.

[10] Yan Xin, Wang Ben, Gu Wenping, *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*[J]. 2021, 50(8): 2913-2920.

[11] M.M. Castro, W. Wolf, A. Isaac, *et al.* *Letters on Materials*[J]. 2019, 9(4s): 546-550.

[12] Ping Li(李萍), Yaling Hua(华雅玲), Quan Lin(林泉), *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J]. 2019, 48(07): 2220-2224.

[13] Jiang Y, Zhou X, Li X Y, *et al.* *Acta Materialia*[J]. 2023, 256: 119134.

[14] Qin Xi(秦希), Liu Manping(刘满平), Zhang Yong(章勇), *et al.* *TRANSACTIONS OF MATERIALS AND HEAT TREATMENT*(材料热处理学报)[J]. 2019, 40(09): 14-20.

[15] Xue Kemin(薛克敏), Zhou Yufeng(周玉峰), Wang Xue(王雪), *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J]. 2022, 51(07): 2545-2551.

[16] Li P, Wang X, Xue K M, *et al.* *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*[J]. 2016, 54: 439-444.

[17] Wang X, Chen G, Wang M, *et al.* *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*[J]. 2022, 106: 105842.

[18] Wang Xue(王雪), Wang Mingming(王明明), Jiao Aofei(焦奥飞), *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J]. 2022, 51(11): 4123-4129.

[19] Wang Xue(王雪), Jiao Aofei(焦奥飞), Zhu Yahui(朱亚辉), *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J]. 2023, 52(12): 4220-4226.

[20] Hu Fei(胡飞). Numerical Simulation on Deformation of Ag-Cu Solder Made by Electromagnetic Compaction and Experimental Verification (电磁压制 Ag-Cu 钎料成形数值模拟及实验验证)[D]. Wuhan: Wuhan University of Technology, 2017.

[21] Liu Xiaohan(刘晓涵). Numerical Simulation and Experimental Study on the Packing Densification of Ti-6Al-4V Powder (Ti-6Al-4V 粉体堆积致密化的数值仿真与实验研究)[D]. Shenyang: Northeastern University, 2021.

[22] Jin Bo(金博), Zhao Honghua(赵红华), Wang Yangfei(王延飞).

- Applied Mathematics and Mechanics*(应用数学和力学)[J]. 2015, 36(S1): 173-182.
- [23] Zhang Wei(张炜), Xiao Weijian(萧伟健), Yuan Chuanniu(袁传牛), et al. *JOURNAL OF MECHANICAL ENGINEERING*(机械工
程学报)[J]. 2024,60(02): 168-177.
- [24] Tian Ye(田野), Li Ping(李萍), Ma Junlin(马俊林), et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J]. 2017, 46(10): 2987-2992.

Discrete element simulation and experimental study on the W-Cu homogeneous composites processed by high-pressure torsion

Wang Xue, Zhu Yahui, Yang Cen, Gan Guoqiang, Li Ping, Xue Kemin*

(Engineering Research Center of High Performance Copper Alloy Materials and Forming Processing, Ministry of Education, School of Materials Science and Engineering, Hefei University of Technology, Hefei 230009, China)

Abstract: The discrete element simulation of high-pressure torsion (HPT) deformation of W-Cu homogeneous powder material was carried out by PFC-3D software. The force chain and displacement distribution of particles during compression and torsion deformation were analyzed, and their effects on porosity, coordination number and equivalent stress in different regions were discussed. The simulation results indicate that the particle displacement exhibits a gradient distribution along both the compression direction and radial direction, with the maximum displacement located at the sample edge and on the upper surface. During the compression stage, particle rearrangement reduces the porosity rapidly, while shear deformation further promotes secondary particle rearrangement and rotation, which leads to a gradual decrease of porosity. The relative density and coordination number at the sample edge are higher than at the center, indicating that shear deformation with large torsional radius favors powder densification. Under the conditions of 400 °C and 1.5 GPa, HPT deformation was applied to the cold-pressed W-30Cu powder compacts with different turns. The experimental results show that with the increase of torsional radius and HPT turns, the degree of particle breakage, microstructure refinement and homogeneity are improved significantly. Under the combined effect of high hydrostatic pressure and shear force, the pores were elongated and enclosed, which results in the relative density increasing from $95.44 \pm 0.87\%$ after 10 turns to $96.03 \pm 0.54\%$ after 20 turns. The crystallite size of tungsten significantly reduces to 20.8 nm and the dislocation density rapidly increases to $2.35 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$ after 15 turns and then the grain refinement and dislocation accumulation achieve the dynamic equilibrium. After 20 turns, due to the combined effects of powder densification, microstructure refinement and dislocation accumulation, the microhardness at the samples edge reaches $334.8 \pm 4.2 \text{ HV}$, which represents an increase of approximately 78.7% compared to the sample center after 10 turns.

Key words: W-Cu composites; High-pressure torsion; Discrete element simulation; Powder densification; Microhardness

Corresponding author: Xue Kemin, Ph. D., Professor, School of Materials Science and Engineering, Hefei University of Technology, Hefei 230009, P. R. China, E-mail: xuekm@hfut.edu.cn