

DOI: 10.11883/bzycj-2019-0057

纳米 W 粉冲击烧结的分子动力学模拟*

刘晓雯, 冯建锐, 周 强, 陈鹏万

(北京理工大学爆炸科学与技术国家重点实验室, 北京 100081)

摘要: 粉末冲击烧结是制备高品质 W 的一种有效方法, 而分子动力学方法在尺度极小、过程迅速的数值模拟上有着独特的优势。因此运用分子动力学方法, 结合 W 的嵌入原子势, 对常温下的纳米 W 粉末的冲击烧结过程进行模拟, 得到颗粒微观压实过程图、体系速度分布云图、 $p-U_p$ 、 $T-U_p$ 、 $T-p$ 曲线以及径向分布函数。研究了不同颗粒速度及产生的射流对纳米 W 粉末冲击烧结影响, 分析了微观冲击烧结机理。结果表明, 低速冲击条件下 (500 m/s 以下), 纳米颗粒无法压实。高速条件下 (1 000 m/s 及以上), 颗粒能获得致密化很高的压实。颗粒间的相互挤压造成的高应力使颗粒表面的原子发生流动变形, 原子向颗粒间空隙流动, 形成压实。颗粒间产生的射流以及高速冲击导致的颗粒熔化, 均促进烧结获得致密度更高的烧结体。

关键词: 冲击烧结; 纳米 W 粉; 分子动力学; 压实机理

中图分类号: O383

国标学科代码: 13035

文献标志码: A

Molecular dynamics simulation of shock consolidation of nano tungsten powder

LIU Xiaowen, FENG Jianrui, ZHOU Qiang, CHEN Pengwan

(State Key Laboratory of Explosion Science and Technology, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

Abstract: Shock consolidation of powders is an effective method for fabrication of the high quality tungsten, and molecular dynamics simulation has unique advantages in modelling the rapid process at atomic-scale. In this work, the shock consolidation of nano tungsten powders at room temperature was studied by molecular dynamics using the embedded atomic potential of tungsten. The morphology of the compressed particles, distribution of particle velocity, $p-U_p$, $T-U_p$, $T-p$ curves and radial distribution function were investigated to analyze the effects of particle velocity and jets on the shock consolidation. The mechanism of consolidation was also proposed at micro-scale. The results showed that the nanoparticles could not be compacted to full density at a relatively low impact velocity (<500 m/s), while a good densification could be achieved at high impact velocity ($>1\ 000$ m/s); the high pressure due to the extrusion between particles leads to flow and deformation on the surface of the particle. The voids among the particles were filled by the flowing atoms, leading to densification. Particles were melted during the impacts by adjacent particle and jet, which promotes the sintering between particles.

Keywords: shock consolidation; nano tungsten powder; molecular dynamics; consolidation mechanism

W 具有高熔点 (3 410 °C)、高温下的高强度、良好的热导率、抗电腐蚀性以及低热膨胀系数等特点。W 适用于高温极端环境, 如纯 W 是热核反应堆中面向等离子体防护墙的理想材料, 在航空航天、国防工业和民用工业中都得到广泛的应用^[1]。

但是, 由于 W 具有硬度高、熔点高的特性, 用传统方法制备的纯 W 及其合金材料存在脆性大、致密度低、导电性差、生产成本高等问题, 所以 W 及其合金作为结构材料的应用受到了限制^[2]。研究者发

* 收稿日期: 2019-02-27; 修回日期: 2019-04-04

第一作者: 刘晓雯 (1993—), 女, 硕士研究生, m13419519852@163.com

通信作者: 陈鹏万 (1971—), 男, 博士, 教授, pwchen@bit.edu.cn

现,单晶 W 的延展性很好,而导致其脆性的主要原因是晶界存在杂质,如 Fe、Ni 等共溶度较高的元素。通过塑性挤压得到的具有纳米晶结构的纯 W 材料,由于晶粒细化,杂质浓度大为降低,表现出较好的塑性,证明通过晶粒细化来获得高强度纯 W 及 W 合金结构材料是一条有效途径。

细晶材料的塑性挤压制备方法受限于设备能力,难以获得大尺寸样品。而传统的粉末冶金法,由于需要长时间高温,存在晶粒易粗化的问题。冲击粉末烧结技术是利用冲击波对粉末绝热压缩瞬间所产生的高温、高压使粉末材料致密并烧结的工艺方法。使用超细或纳米粉末作为原材料,利用冲击波加载的高温高压特性,可以制备出近乎密实的材料,且冲击波瞬态、快熔快冷特性,可以避免晶粒长大,通过强塑性变形还可以进一步细化晶粒。因此,粉末冲击烧结在块体纳米金属制备领域颇具潜力^[3-6]。

目前,对纯 W 及 W 合金粉末冲击烧结已有一些研究。Peikrishvili 等^[3]通过热爆炸烧结法制备了不同组分的纳米 W-Ag 复合材料,讨论了相含量和冲击条件与结构/性能的关系。Zhou 等^[4]通过自蔓延燃烧预热辅助的爆炸烧结制造出无裂纹的纯 W 块体,证明爆炸烧结是一种很有前途的细晶高熔点材料制备方法。Zohoor 等^[7-8]采用烧结方法来压实硬质粉末(如 W 粉),获得无裂纹、相对硬度和密度较高的 W 合金零件,并用 LS-DYNA 对烧结过程进行了模拟。Dai 等^[9]采用数值模拟方法研究了冲击加载下 W/Cu 粉末颗粒的变形和温度分布,讨论了压实速度、粒径和摩擦力对颗粒变形和温度分布的影响。在纳米粉末冲击烧结方面,Emelchenko 等^[10]利用柱面装置在约 4 GPa 压力下制备出致密度 100% 的纳米 Ni 块体,研究了冲击压缩和热处理对所得块状 Ni 纳米晶力学性能的影响,分析了 Ni 纳米颗粒的烧结机制。Godibadze 等^[11]在预热后采用冲击烧结技术在 800 °C 获得接近理论密度的 W-Cu 和 W-Y 圆柱形纳米块体,其具有良好的力学性能和导电特性。粉末冲击烧结过程速度很快(微量量级),无法通过常规观察分析烧结机理。而分子动力学模拟可有效地研究纳米尺度的物理现象,且对微观机理方面的研究有着独特优势,所以不少研究者已经开展纳米颗粒烧结的分子动力学模拟研究^[12-18]。Arcidiacono 等^[19]用分子动力学模拟了两个 Au 纳米粒子在真空中的烧结,研究了初始温度和颗粒半径对烧结的影响,证明了分子动力学模拟的有效性。Henz 等^[20-21]用分子动力学方法研究了初始粒径对纳米粒子 Al 包覆的 Ni 和 Ni 包覆的 Al 颗粒烧结时间和温度的影响,并对 Ni-Al 间的反应过程进行了模拟分析。结果表明,包覆纳米颗粒的烧结时间取决于烧结纳米颗粒的原子数量或体积,纳米粒子尺寸和表面能是确定绝热反应温度的重要因素。Gunkelmann 等^[22]用分子动力学模拟了纳米泡沫材料在冲击波诱导下的压实和塑性变形,证明了泡沫中的位错形成,并将其与冲击波中的速度和应力分布相联系。Cheng 等^[23]模拟了不同温度压力下的铜纳米粒子的烧结过程,比较了不同的温度、压力、晶粒大小以及初始晶粒间隙对烧结质量和过程的影响。Kart 等^[24]用分子动力学模拟两个相同尺寸的 Cu 纳米粒子的烧结过程。研究了不同的初始晶粒取向对烧结试样物理性质的影响以及烧结温度对烧结过程的影响,发现铜纳米颗粒的熔化温度随晶粒尺寸减小而降低。Chen 等^[25]利用分子动力学方法系统地研究了纳米粒子的尺寸和形状对 W 纳米材料的相变和力学性能的影响。Yousefi 等^[26]利用分子动力学方法研究了 Ni/Cu-Ni 纳米颗粒的烧结过程,讨论了晶体取向、温度和不同元素对两种纳米粒子的最终烧结形貌和机理的影响。结果表明,尽管表面扩散和共晶取向能减小塑性变形,但是高烧结温度会增大塑性变形,且占主导地位。

由于以上研究对金属 W 纳米粉末冲击烧结机理和冲击速度对烧结过程影响的探究尚有欠缺,所以本文中针对纳米 W 粉的冲击烧结,利用分子动力学模拟,采用嵌入势能 (embedded atom method, EAM) 对常温下 W 纳米颗粒的冲击烧结过程进行微观模拟。构建两个模型,主要研究 W 纳米颗粒冲击烧结机理,并探究不同的颗粒速度以及烧结过程中产生的射流对烧结过程的影响。

1 方法与建模

利用 LAMMPS 软件建模计算,模拟体系的温度控制使用 Nose-Hoover 方法,原子之间的势函数采用 Zhou 等^[13]的 EAM 势函数,它能较好地模拟纯 W 的动力学特性。

EAM 势函数的表达式为:

$$E_i = F_i \left[\sum_{j \neq i}^N \rho_j(r_{ij}) \right] + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i}^N \phi_{ij}(r_{ij}) \quad (1)$$

式中: E_i 为原子 i 的嵌入能, F_i 为电子密度的嵌入能函数, ρ_j 为原子 j 在原子 i 处的电子密度, r_{ij} 为原子 i 与原子 j 之间的距离, ϕ_{ij} 为短程对势函数, N 为原子总数。

本文中构建了两个模型, 如图 1 所示。模型 1: 建立 19 个直径为 20 nm 的 W 纳米颗粒体系, 以 BCC 结构形式排列, 孔隙率为 46.4%, 在颗粒体系上下分别加上材料为 W 无限厚的刚性板, 上刚性板可上下运动作活塞, 下刚性板固定不动。模型横方向采用周期性边界条件, 模型中虽相当于只存在 6 颗完整的颗粒, 但实际可认为颗粒布满空间。通过该方法可以有效地降低计算过程中原子的数量, 从而在不影响模拟效果的前提下降低工作量。此模型用来究研纳米 W 粉末的冲击压实机理和冲击条件对压实过程和压实效果的影响。模型 2: 建立 36 个直径为 20 nm 的 W 纳米颗粒, (模型中相当于有 24 颗完整颗粒) 改变颗粒排列方式, 使相邻的 4 个颗粒球心构成正四面体。此颗粒排列方式可使得在压实过程中产生的射流更易于观察, 主要用于研究模型 1 中出现的射流对烧结过程的影响。两个模型在 x 和 y 方向均为周期性边界条件, z 方向为自由边界条件, 时间步长为 1 fs。

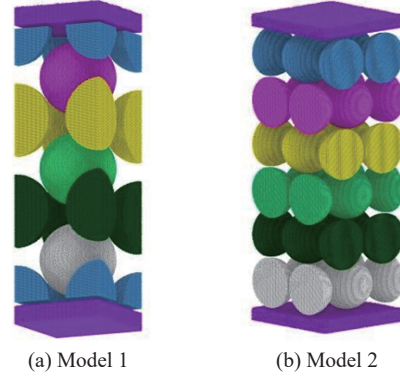


图 1 图名模型示意图

Fig. 1 Model illustration

在冲击加载前先将颗粒体系在 300 K 温度下预热并弛豫 100 ps, 然后在 z 方向上向下分别对活塞施加 250、500、750、1 000、1 250、1 500、1 750、2 000 m/s 速度, 活塞向下运动对纳米颗粒进行挤压来模拟冲击压实过程。

在分析计算时, 体系的压力可通过 x 、 y 和 z 等 3 个方向的应力值来推导冲击波所产生的压力值。6 个方向的应力求取公式如下:

$$\begin{aligned} \sigma_{ab} = & - \left[mv_a v_b + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N_p} (r_{1a} F_{1b} + r_{2a} F_{2b}) + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N_b} (r_{1a} F_{1b} + r_{2a} F_{2b}) + \frac{1}{3} \sum_{n=1}^{N_a} (r_{1a} F_{1b} + r_{2a} F_{2b} + r_{3a} F_{3b}) + \right. \\ & \left. \frac{1}{4} \sum_{n=1}^{N_a} (r_{1a} F_{1b} + r_{2a} F_{2b} + r_{3a} F_{3b} + r_{4a} F_{4b}) + \frac{1}{4} \sum_{n=1}^{N_i} (r_{1a} F_{1b} + r_{2a} F_{2b} + r_{3a} F_{3b} + r_{4a} F_{4b}) + \right. \\ & \left. K_{\text{space}}(r_{ia}, F_{ib}) + \sum_{n=1}^{N_f} r_{ia} F_{ib} \right] \quad (2) \end{aligned}$$

式中: σ_{ab} 表示体系 6 个方向的应力, a 、 b 分别取 x 、 y 和 z ; m 为原子质量; v 为体系原子速度; r 为两个原子间的距离; F 为两个原子间的作用力, K_{space} 为长程库仑力相互作用贡献量。通过 LAMMPS 软件输出各方向的应力值后, 可以由下式求出 W 纳米颗粒体系的压力:

$$p = \frac{1}{3}(\sigma_x + \sigma_y + \sigma_z) \quad (3)$$

式中: p 为体系压力, σ_x 、 σ_y 、 σ_z 分别为 x 、 y 和 z 方向的应力。

体系的温度可通过原子的动能来求取。温度计算公式如下:

$$E = d/2NkT \quad (4)$$

式中: E 为系统原子总的动能, 由 LAMMPS 可求得; d 为系统模型的维度, 所建立的模型为三维模型, 因此 $d=3$; N 为系统总原子的个数, k 为玻尔兹曼常数, T 为要求取的温度。

2 计算及结果分析

2.1 压实形貌

通过分子动力学模拟,获得了W颗粒在不同颗粒速度下的压实过程。以下各图中冲击方向为箭头指示方向,图2为模型1在刚性活塞分别以500、1000、1500和2000 m/s速度冲击W颗粒后的压实形貌图。由图可看出,不同的颗粒速度下,体系压实的最终形貌有明显差异。颗粒速度在500 m/s以下,颗粒本身形变较小,颗粒交界处无原子的扩散,W颗粒之间存在一定的空隙。这是由于低速冲击未能使得W颗粒获得紧密压实。颗粒速度在1000 m/s以上,颗粒变形较大,交界处有原子扩散。撞击速度为1000 m/s时,颗粒受力一部分被用于压缩,一部分用于塑性变形填充孔隙。撞击速度高于1500 m/s时,受力使大部分原子流向孔隙填充。颗粒速度越大,原子扩散程度越深,变形越严重,颗粒之间几乎不存在空隙,W颗粒之间获得了紧密的压实。因此,在实验中采用高速冲击波将有助于W颗粒紧密压实在一起。

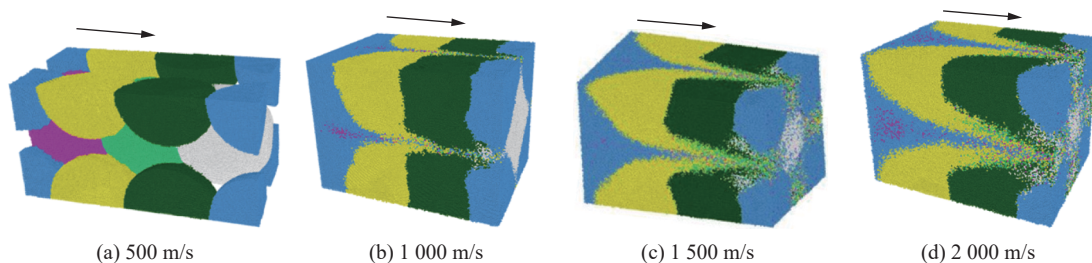


图2 压实形貌图

Fig. 2 Compacted topography

2.2 颗粒压实过程

图3所示为模型1在颗粒速度为1000 m/s时孔隙附近形貌随时间的变化。图3(a)~(d)分别为不同时刻部分颗粒局部放大图,用来观察孔隙附近的颗粒变形以及孔隙填充过程。由图可以看出,在压实过程中颗粒界面无原子扩散,颗粒内部原子仍处于BCC结构。冲击波在颗粒间传播会产生高压,高压造成颗粒之间相互挤压(摩擦),使得接触表面处产生较高的应力,应力使得颗粒表面原子由BCC结构转变为无序的非晶(塑性变形)。另外,在冲击波作用下,体系的温度会升高,较高的温度也会使颗粒更易发生变形,原子更易发生流动,随着压缩程度的进一步加深,无序结构原子向颗粒间空隙流动来填充空隙,从而逐渐形成压实。观察图中孔隙附近的颗粒可以发现,在填充孔隙过程中,冲击波后颗粒由于受到挤压摩擦产生的剪切作用而变形填充孔隙。如图3(b)所示,区域②会逐渐变形,原子流向颗粒间隙中进行填充,而区域①、③变形量很小。由此可知,颗粒间隙的填充主要是由冲击波后颗粒变形完成。

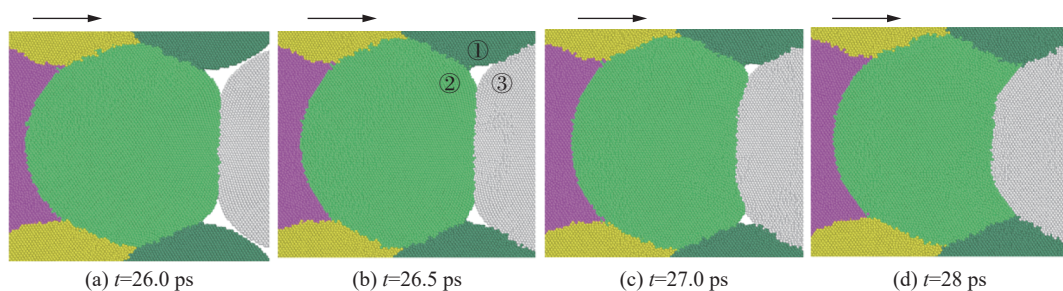


图3 1000 m/s颗粒速度下的冲击压实过程

Fig. 3 Impact compaction process at 1000 m/s particle velocity

其他颗粒速度下的压实过程与此过程类似,但高速颗粒速度下产生的射流、局部高温以及冲击熔化会促使颗粒更快发生更大变形,加快烧结过程,并且致密化程度更高。

由此可以发现冲击烧结的机理是:冲击波在颗粒间传播产生高温和高压,高压造成颗粒之间相互挤压(摩擦),使得接触表面处产生较高的应力。应力使得颗粒表面原子由 BCC 结构转变为无序的非晶(塑性变形),颗粒表面处进一步发生流动变形,使得原子向颗粒间空隙流动,从而逐渐填充空隙形成压实。颗粒间隙的填充主要是由冲击波后颗粒变形完成。

2.3 颗粒速度对压实过程的影响

图 4~7 分别为模型 1 在不同颗粒速度下原子径向分布函数、温度-粒子速度关系、压力-粒子速度关系以及温度-压力关系。原子径向分布函数 $g(r)$ 指的是距离参考原子 r 处原子的密度,用来研究体系的有序性。由图可知,颗粒温度随颗粒速度增大而升高。当颗粒速度达到一定值时,甚至会使得颗粒发生熔化^[27]。

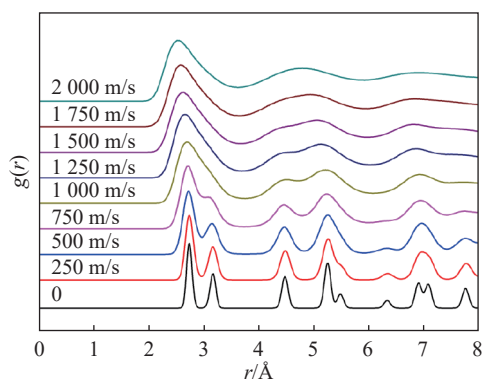


图 4 不同的速度下的原子径向分布函数

Fig. 4 Radial distribution functions at different velocities

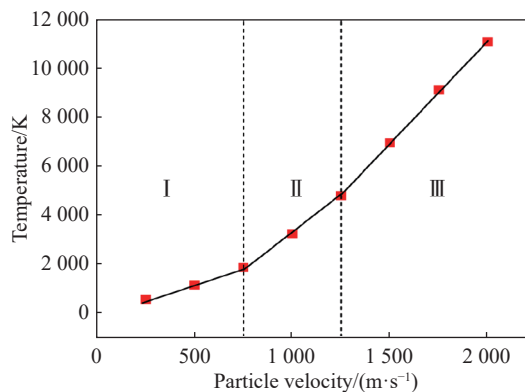


图 5 温度-速度关系

Fig. 5 Relationship between temperature and particle velocity

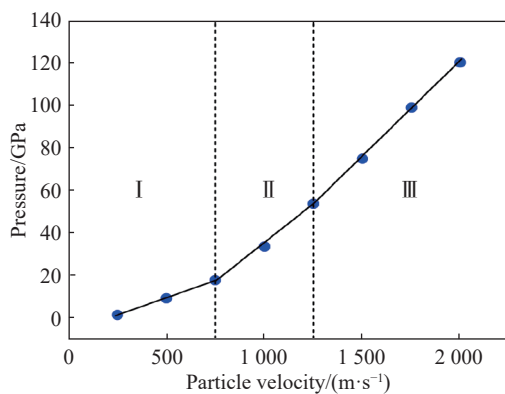


图 6 压力-速度关系

Fig. 6 Relationship between pressure and particle velocity

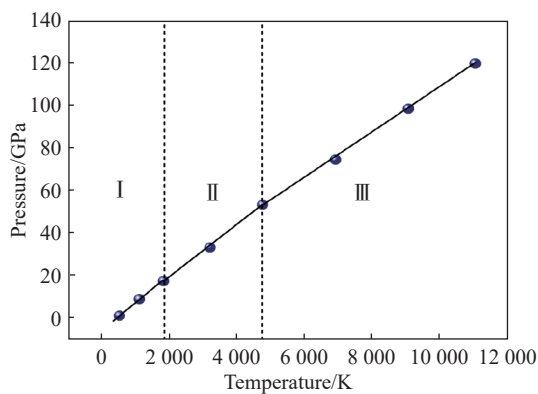


图 7 温度-压力关系

Fig. 7 Relationship between temperature and pressure

根据径向分布函数可以看出,当颗粒速度在 0~750 m/s 时,颗粒的径向分布函数形貌没有明显的变化;当颗粒速度在 1000~1500 m/s 时,颗粒的径向分布函数逐渐转化为固体的非晶形貌,这说明颗粒发生塑性变形使得内部逐渐生成一些无序的非晶颗粒;而当颗粒速度高于 1500 m/s 时,颗粒的径向分布函数又转化为无序的液态形貌,这说明高速冲击使得颗粒内部发生了熔化。而 $p-U_p$ 和

$T-U_p$ 曲线均呈线性关系,且都是在 750 m/s 和 1 250 m/s 处存在 2 个拐点。根据径向分布函数,我们可以认为,撞击速度在 0~750 m/s 为第 1 阶段,颗粒在该阶段发生弹性变形,冲击未能使得颗粒间获得压实;750~1 250 m/s 为第 2 个阶段,该阶段为塑性变形阶段,冲击波的传播使得颗粒之间发生塑性变形,并生成一定数量的非晶原子,这使得颗粒之间获得压实。高于 1 500 m/s 为第 3 阶段,该阶段为熔化阶段,高速冲击使颗粒发生了熔化。当颗粒速度达到 2 000 m/s 时,由模拟计算冲击温度将达到 11 000 K。在于超等^[28-29]对 W 合金冲击力学行为的模拟研究中,在相同条件下,计算的的温度接近 10 000 K。而本文中研究的是纳米颗粒体系颗粒间受冲击后会产生高速的相对摩擦和剪切应力以及高速射流,使得体系的温度会更高。

2.4 射流的形成及其对烧结过程的影响

图 8 为模型 1 在压实进行到某一时刻不同颗粒速度下体系的速度分布。从图 8 中可以看出:颗粒速度为 500 m/s 时, W 颗粒间不会产生明显的射流。颗粒速度达到 1 000 m/s 时,颗粒间将会开始产生射流。颗粒速度越大,产生的射流将越明显。颗粒速度达到 1 500 m/s 以上时,射流已经十分明显。射流快速向前喷出,其速度能达到颗粒速度的两倍以上,产生的局部高温使颗粒表面熔化形成微爆炸焊接,射流的液态化和其很高的颗粒速度加快加深颗粒的塑性变形,均能促进颗粒的烧结。此外,在颗粒速度较高时能明显观察到较为稳定的冲击波向前传播,波阵面清晰平整,而低速条件下虽可看出冲击波,但是波阵面位置紧贴颗粒表面,这是颗粒速度较慢且颗粒间有间隙不连续所致。

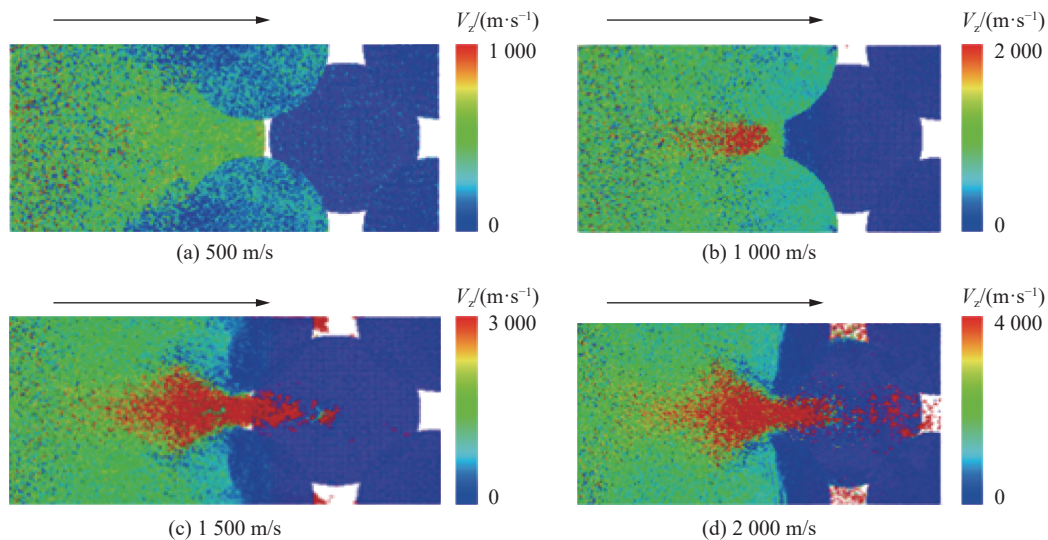


图 8 不同颗粒速度下体系的速度分布

Fig. 8 Velocity distribution of the system at different particle velocities

图 9 为模型 2 在不同颗粒速度下的压实形貌图。此模型可以清晰观察到冲击烧结时产生的射流情况。且若出现射流,均能从颗粒顶部进行侵彻。图中可以看出,颗粒速度在 500 m/s 时体系不会产生射流,颗粒间挤压变形也较少;颗粒速度在 1 000 m/s 时,依然未出现明显射流,但是颗粒已经有较大形变。颗粒速度达到 1 500 m/s 时,在高速碰撞和较大剪切作用下,颗粒间产生“杵形”射流,原子发生明显的扩散和相对流动。射流对颗粒表面有侵彻作用,速度越快,侵彻效果越强烈;颗粒速度达到 2 000 m/s 时,射流的侵彻现象已经非常明显,几乎扰乱了整个颗粒的结构。在射流的影响下,颗粒发生很大变形,原子更容易发生流动,压实速度加快,使得颗粒间孔隙收缩显著,致密化程度高,烧结后可以得到密度接近理论密度的烧结体。局部产生的高应力也会促使颗粒发生进一步塑性流动,加速孔隙的填充,有助于烧结的完成。

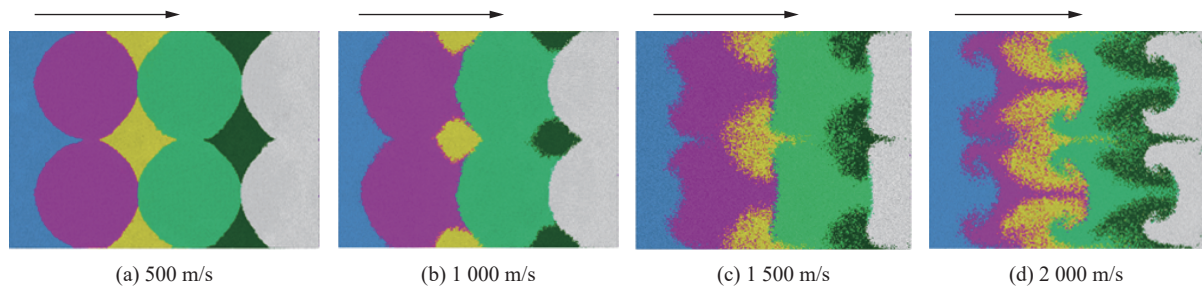


图 9 模型 2 压实形貌图

Fig. 9 Compaction topograph of model 2

3 结 论

运用分子动力学方法,对常温下的纳米 W 粉末的冲击烧结过程进行模拟,得出以下结论:

(1) 纳米 W 粉末冲击压实机理是:冲击波在颗粒间传播将会产生高温和高压,高压造成颗粒之间相互挤压(摩擦),使得接触表面处产生较高的应力。应力使得颗粒表面原子由 BCC 结构转变为无序的非晶(塑性变形),颗粒表面处进一步发生流动变形,使得原子向颗粒间空隙流动,从而逐渐填充空隙形成压实。孔隙填充主要由冲击波后颗粒变形完成。

(2) 不同的颗粒速度对 W 纳米粉末烧结过程有较影响。 $0\sim 750$ m/s 颗粒速度下,冲击压力小,粉末致密化程度不高,体系仍会有明显孔隙,W 颗粒表面几乎不发生原子扩散,且颗粒的原子结构几乎没有发生变化; $750\sim 1\ 250$ m/s 颗粒速度下,颗粒表面原子发生少量扩散,部分 W 颗粒由 BCC 结构开始转化为无序的非晶。颗粒速度越高,非晶转化程度越高; $1\ 500$ m/s 以上颗粒速度下,冲击压力更高,颗粒表面原子的扩散程度加深,塑性功沉积和相对摩擦使颗粒表面形成高温区,颗粒出现熔化;随着颗粒速度升高到 $2\ 000$ m/s,颗粒几乎完全熔化为液态。较高的颗粒速度有助于烧结速度和烧结质量的提高。

(3) 冲击烧结过程中会产生高速射流,射流对颗粒有强烈的侵彻作用,使原子更容易发生流动,烧结速度更快,孔隙收缩显著,有助于烧结的完成。

参考文献:

- [1] 韩勇, 范景莲, 刘涛, 等. 高密度纯钨的低温活化烧结工艺及其致密化行为 [J]. *稀有金属材料与工程*, 2012, 41(7): 1273–1278. DOI: 10.3969/j.issn.1002-185X.2012.07.032.
HAN Y, FAN J L, LIU T, et al. Low-temperature activated sintering technology of high-density pure tungsten and its densification behavior [J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2012, 41(7): 1273–1278. DOI: 10.3969/j.issn.1002-185X.2012.07.032.
- [2] MARQUIS F D S, MAHAJAN A, MAMALIIS A G. Shock synthesis and densification of tungsten based heavy alloys [J]. *Journal of Materials Processing Tech*, 2005, 161(1–2): 113–120. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2004.07.060.
- [3] PEIKRISHVILI A, GODIBADZE B, CHAGELISHIVILI E, et al. Hot explosive consolidation of nanostructured tungsten-silver precursors [J]. *European Chemical Bulletin*, 2015, 4(1–3): 37–42. DOI: <http://dx.doi.org/10.17628/ecb.2015.4.37-42>.
- [4] ZHOU Q, CHEN P. Fabrication and characterization of pure tungsten using the hot-shock consolidation [J]. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 2014, 42(1): 215–220. DOI: 10.1016/j.ijrmhm.2013.09.008.
- [5] DAI C, EAKINS D, THADHANI N, et al. Shock compression response of nanoiron powder compact [J]. *Applied Physics Letters*, 2007, 90(7): 39. DOI: 10.1063/1.2695522.
- [6] XU J, SAKANAI R, HIGUCHI Y, et al. Molecular dynamics simulation of Ni nanoparticles sintering process in Ni/YSZ multi-nanoparticle system [J]. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2013, 117(19): 9663–9672. DOI: 10.1021/jp310920d.
- [7] ZOHOOR M, MEHDIPOOR A. Numerical simulation of under water explosive compaction process for compaction of tungsten powder [J]. *Materials Science Forum*, 2008, 566(49): 77–82. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.566.77.
- [8] ZOHOOR M, MEHDIPOOR A. Explosive compaction of tungsten powder using a converging under water shock wave [J].

- Journal of Materials Processing Technology*, 2009, 209(8): 4201–4206. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2008.11.031.
- [9] DAI K D, CHEN P W. Numerical simulation of the shock compaction of W/Cu powders [J]. *Materials Science Forum*, 2011, 673: 113–118. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.673.113.
- [10] EMELCHENKO G A, NAUMENKO I G, VERETENNIKOV V A, et al. Shock consolidation of nanopowdered Ni [J]. *Materials Science and Engineering A*, 2009, 503(1–2): 55–57. DOI: 10.1016/j.msea.2008.01.097.
- [11] GODIBADZE B, DGEBUADZE A, CHAGELISHVILI E, et al. Dynamic consolidation and investigation of nanostructural W-Cu/W-Y cylindrical billets [J]. *Journal of Physics: Conference Series*, 2018, 987(1). DOI: 10.1088/1742-6596/987/1/012027.
- [12] DING L, DAVIDCHACK R L, PAN J. A molecular dynamics study of sintering between nanoparticles [J]. *Computational Materials Science*, 2009, 45(2): 247–256. DOI: 10.1016/j.commatsci.2008.09.021.
- [13] ZHOU X W, JOHNSON R A, WADLEY H N G. Misfit-energy-increasing dislocations in vapor-deposited CoFe/NiFe multilayers [J]. *Physical Review B*, 2004, 69(14): 1124–1133. DOI: 10.1103/PhysRevB.69.144113.
- [14] ZHAO X, WANG S Q, ZHANG C B. Kinetics investigation of sintering of nanometer size metal clusters: a molecular dynamics study [J]. *Journal of Materials Science and Technology*, 2006, 22(1): 123–126. DOI: 10.3321/j.issn:1005-0302.2006.01.020.
- [15] SONG P, WEN D. Molecular dynamics simulation of the sintering of metallic nanoparticles [J]. *Journal of Nanoparticle Research*, 2010, 12(3): 823–829. DOI: 10.1007/s11051-009-9718-7.
- [16] KADAU K, ENTEL P, LOMDAHL P S. Molecular-dynamics study of martensitic transformations in sintered Fe-Ni nanoparticles [J]. *Computer Physics Communications*, 2002, 147(1–2): 126–129. DOI: 10.1016/S0010-4655(02)00230-8.
- [17] ZHU H L. Sintering processes of two nanoparticles: a study by molecular dynamics simulations [J]. *Philosophical Magazine Letters*, 1996, 73(1): 27–33. DOI: 10.1080/095008396181073.
- [18] TAVAKOL M, MAHNAMA M, NAGHDABADI R. Shock wave sintering of Al/SiC metal matrix nano-composites: a molecular dynamics study [J]. *Computational Materials Science*, 2016, 125: 255–262. DOI: 10.1016/j.commatsci.2016.08.032.
- [19] ARCIDIACONO S, BIERI N R, POULIKAKOS D, et al. On the coalescence of gold nanoparticles [J]. *International Journal of Multiphase Flow*, 2004, 30(7): 979–994.
- [20] HENZ B J, HAWA T, ZACHARIAH M. Molecular dynamics simulation of the energetic reaction between Ni and Al nanoparticles [J]. *Journal of Applied Physics*, 2009, 105(12): 124310. DOI: 10.1063/1.3073988.
- [21] HENZ B J, HAWA T, ZACHARIAH M. Molecular dynamics simulation of the kinetic sintering of Ni and Al nanoparticles [J]. *Molecular Simulation*, 2009, 35(10-11): 804–811. DOI: 10.1080/08927020902818021.
- [22] GUNKELMANN N, ROSANDI Y, RUESTES C J, et al. Compaction and plasticity in nanofoams induced by shock waves: a molecular dynamics study [J]. *Computational Materials Science*, 2016, 119: 27–32. DOI: 10.1016/j.commatsci.2016.03.035.
- [23] CHENG B, NGAN A H W. The sintering and densification behaviour of many copper nanoparticles: a molecular dynamics study [J]. *Computational Materials Science*, 2013, 74(74): 1–11. DOI: 10.1016/j.commatsci.2013.03.014.
- [24] KART H H, WANG G, KARAMAN I. Molecular dynamics study of the coalescence of equal and unequal sized Cu nanoparticles [J]. *International Journal of Modern Physics C*, 2009, 20(2): 179–196. DOI: 10.1142/S0129183109013534.
- [25] CHEN L, FAN J L, GONG H R. Phase transition and mechanical properties of tungsten nanomaterials from molecular dynamic simulation [J]. *Journal of Nanoparticle Research*, 2017, 19(3): 118. DOI: 10.1007/s11051-017-3812-z.
- [26] YOUSEFI M, KHOIE M M. Molecular dynamics simulation of Ni/Cu-Ni nanoparticles sintering under various crystallographic, thermodynamic and multi-nanoparticles conditions [J]. *European Physical Journal D*, 2015, 69(3): 71. DOI: 10.1140/epjd/e2015-50830-4.
- [27] 何安民. 金属铜冲击熔化机制与动力学特性微观模拟研究 [D]. 四川绵阳: 中国工程物理研究院, 2014.
- [28] 于超, 任会兰, 宁建国. 钨合金冲击塑性行为的分子动力学模拟 [J]. *高压物理学报*, 2013, 27(2): 211–215. DOI: 10.11858/gywlxb.2013.02.007.
- YU C, REN H L, NING J G. Molecular dynamics simulation on shock plasticity behavior of tungsten alloy [J]. *Chinese Journal of High Pressure Physics*, 2013, 27(2): 211–215. DOI: 10.11858/gywlxb.2013.02.007.
- [29] 于超. 穿甲弹用钨合金的冲击实验与纳观力学机理模拟研究 [D]. 北京: 北京理工大学, 2015.

(责任编辑 王易难)