文章编号：1000-5773(2009)01-0046-05

高温高应变率下纯锆的本构模型研究*

肖大武[1,2]，李英雷[1]，胡时胜[2]

(1. 中国工程物理研究院流体物理研究所，冲击波物理与爆轰物理
国防科技重点实验室，四川绵阳 621900；
2. 中国科学技术大学中国科学院材料力学行为和设计重点实验室，安徽合肥 230027)

摘要：研究了常温至 1073 K、不同应变率下(4.1×10^{-4} s^{-1}～2.8×10^{3} s^{-1})锆的压缩力学性能。结果表明，锆的流动应力对温度和应变率的变化比较敏感，随应变率的提高而增大，随温度的升高而降低。基于位错动力学理论，建立了锆的本构模型，并考虑塑性变形过程中孪晶演化的影响，对模型进行了修正。修正后的本构模型预测结果与实验结果吻合较好，可描述很宽应变率和温度范围内锆的塑性变形行为。

关键词：锆；流动应力；高温；高应变率；本构模型
中图分类号：O347.3 **文献标识码**：A

1 引 言

锆及其合金具有高比强、高熔点，在很宽的温度范围内具有良好的延展性和热传导特性，同时还具有突出的核性能和耐腐蚀性等优点，因此被广泛用于原子能、航空航天、冶金、化工等领域[1]。在原子能工业中的应用占其总量的 90%以上，常被用作反应堆堆芯结构材料，其工作环境通常为高温，因此锆在高温下的力学性能是人们非常关心的问题。目前国内外关于锆的研究已经开展了很多，主要集中在热力学性质[1-2]和相变动力学[3]等领域，而对其动态力学特性的报道较少。本工作研究了较宽温度和应变率范围内温度和应变率对锆流动应力的影响。通过对实验结果的分析，基于位错动力学理论，建立了锆的本构模型。并考虑塑性变形过程中孪晶演化的影响，对本构模型进行了修正。最后给出了本构模型预测结果与实验结果的比较。

2 材料和实验

实验中使用的纯度接近 99.99%的高纯锆由西北有色金属研究院提供，主要化学成份如表 1 所示。

表 1 锆中杂质的化学成分含量(质量分数)

Table 1 Zirconium compositions (mass fraction) (%)

Hf	Fe	Al	V	C	N	O
0.028	0.0029	<0.0001	<0.0020	0.0058	0.0026	0.0520

准静态压缩实验在 MTS 材料试验机上完成，应变率为 4.1×10^{-4} s^{-1} 和 4.1×10^{-3} s^{-1}，在常温下进行。动态压缩实验是在∅14.5 mm 分离式霍普金森压杆(SHPB)装置上进行的。试样为∅7.5 mm×7.5 mm的圆柱体，温度范围从常温到 1073 K。

* **收稿日期**：2008-03-24；**修回日期**：2008-07-18
作者简介：肖大武(1983－)，男，博士研究生，主要从事材料动力学方面的研究. E-mail：xidd@ustc.edu.cn
通讯作者：胡时胜(1945－)，男，教授，主要从事材料动力学方面的研究. E-mail：sshu@ustc.edu.cn

3　实验结果

图 1 为常温时不同应变率下锆的压缩真应力-真应变曲线,图 2 为不同温度下锆的动态压缩真应力-真应变曲线。流动应力和加工硬化随应变率的提高而增加,随温度的升高而降低。许多研究者[4-8]的研究结果均表明,孪晶会使低温或高应变率下应力-应变曲线的加工硬化现象显著增强。由于密排六方结构金属材料的对称性较低,其塑性变形通常要通过孪晶来促进。在形变过程中,新孪晶的生成使孪晶核形成能增加。当孪晶增厚时,位错与孪晶界之间的相互作用能及原子协同运动的摩擦阻力增加,滑移和孪晶生长受阻,从而使材料得到强化。因此,孪晶的不断生成导致了持续的加工硬化现象。

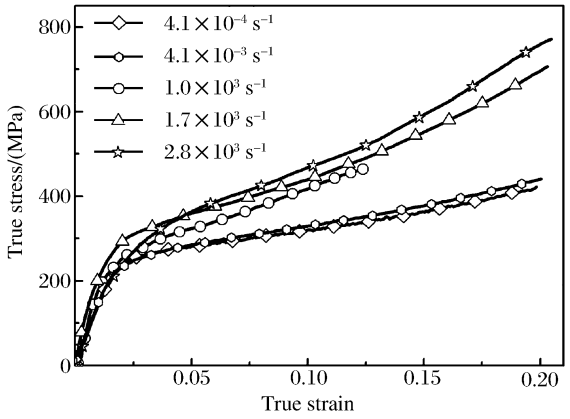


图 1　常温时不同应变率下锆的真应力-真应变曲线

Fig. 1　True stress-true strain curves of zirconium at normal temperature and different strain rate

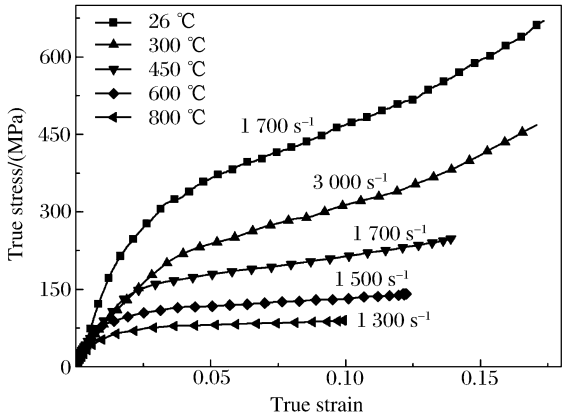


图 2　不同温度和应变率下锆的真应力-真应变曲线

Fig. 2　True stress-true strain curves of zirconium at different temperatures and different strain rate

4　本构模型

不同温度或应变率下锆的应力-应变曲线呈发散趋势,Johnson-Cook 本构模型已不适用。为此,本研究基于位错动力学理论,对不同温度和应变率下锆的应力-应变曲线进行拟合。对大部分金属材料来说,塑性流动基本上是由位错越过各种障碍的热激活滑移运动引起的,位错和晶格以及各种障碍之间的相互作用决定了材料塑性流动的阻力。按照相互作用范围的大小,这些障碍可以分为短程障碍和长程障碍。短程障碍对应空位、Peierls 应力、杂质原子、滑动位错与林位错交截作用等。长程障碍则对应晶界、林位错和其它有影响的远场结构元素等[9]。其中短程障碍可以通过热激活来克服,它随温度升高而降低,但随应变率升高而增大。对于密排六方结构金属,与滑移面相交的林位错是位错运动的主要障碍[9]。在高温下,因热激活使运动位错与林位错交截过程易于进行,对流变不再起阻碍作用,故可以认为塑性流动主要由位错的长程阻力决定。

热激活部分流动应力 τ^* 是应变率、温度和表征材料微观结构的一些内参量的函数。当 ΔG 是位错必须克服的激活自由能时,Kocks[10]等提出了如下的双参数一般形式

$$\Delta G = G_0 \left\{ 1 - \left[\frac{\tau^* (\gamma, \dot{\gamma}, T)}{\tau^0} \right]^p \right\}^q \tag{1}$$

式中:G_0 是位错依靠自身的热能克服障碍的激活自由能,γ 为塑性应变,$\dot{\gamma}$ 为塑性应变率,T 为实验环境温度。参量 p 和 q 取不同值代表了障碍的不同形状,且有 $0<p\leqslant 1$,$1\leqslant q\leqslant 2$。当外加应力大于阈值应力 τ^0 时,位错不需要热激活的帮助就能越过障碍。而塑性应变率 $\dot{\gamma}$ 和 ΔG 的关系可以表达为[10]

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_r \exp\left(-\frac{\Delta G}{kT} \right) \tag{2}$$

式中:参考应变率 $\dot{\gamma}_r = b\lambda\rho_m\omega_0$,$b$ 为 Burgers 矢量数值,λ 为障碍的有效宽度,ρ_m 为可动位错密度,ω_0 为

位错跨过障碍的频率，k 为 Boltzmann 常数。由(1)式和(2)式可得

$$\tau^* = \tau^0 \left\{ 1 - \left[-\frac{kT}{G_0} \left(\ln \frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_r} \right) \right]^{1/q} \right\}^{1/p} \tag{3}$$

Nemat-Nasser[9]等针对应变和温度对位错密度的影响提出了(3)式的修正公式

$$\tau^* = \tau^0 \left\{ 1 - \left[-\frac{kT}{G_0} \left(\ln \frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_r} + \ln f(\gamma, T) \right) \right]^{1/q} \right\}^{1/p} f(\gamma, T) \tag{4}$$

式中：$f(\gamma, T) = 1 + a_0 [1 - (T/T_m)^2] \gamma^{1/2}$；$a_0$ 取决于材料初始的微观结构；T_m 为材料的熔点，为 2 125 K。

热激活无关部分流动应力 τ_a 不依赖于温度，通常表现为幂次强化特性，因此 τ_a 可以表达为

$$\tau_a = \tau_0 \gamma^n \tag{5}$$

式中：τ_0 为常数，指数 n 代表材料在高温时应变硬化的能力。

结合(4)式和(5)式，可以得到锆的本构模型

$$\begin{aligned} \tau(\gamma, \dot{\gamma}, T) &= \tau^* (\gamma, \dot{\gamma}, T) + \tau_a(\gamma) \\ &= \tau^0 \left\{ 1 - \left[-\frac{kT}{G_0} \left(\ln \frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_r} + \ln f(\gamma, T) \right) \right]^{1/q} \right\}^{1/p} f(\gamma, T) + \tau_0 \gamma^n \end{aligned} \tag{6}$$

首先由高温下的实验数据拟合热激活无关的阻力项 τ_a，通过曲线拟合可以得到 $\tau_a = 30\gamma^{0.37}$。热激活相关的应力 τ^* 表达式中共有 6 个参数。取 $p=0.5$，$q=1$，结合实验数据，调节 $\dot{\gamma}_r = 8\times10^{10}\ \mathrm{s}^{-1}$，$k/G_0 = 3.5\times 10^{-5}\ \mathrm{s}^{-1}$。通过非线性拟合，可确定各参数的值。拟合得到本构模型的参数，如表 2 所示。

表 2 本构模型中各参数的值

Table 2 Parameters for constitutive model

p	q	a_0	τ^0/(MPa)	τ_0/(MPa)	n
0.5	1	5.1	245	30	0.37

图 3 给出了不同温度和应变率下本构方程预测结果与实验结果，实线为本构模型预测结果。可以看出，在温度为 298 K 和 573 K 时，高应变率下真应力-真应变曲线中当应变大于 0.1 时，模型预测结果与实验结果之间的误差较大，这是由于本构模型中未考虑塑性变形过程中孪晶演化带来的影响所致[11]。因此，应考虑孪晶的影响，对模型进行修正。研究结果表明：孪晶界和晶界一样，给位错滑移增加了阻力[11]，可以认为变形过程中孪晶的硬化作用主要通过细化晶粒来实现。依照描述晶界提高滑移阻力的 Hall-petch 关系，将孪晶变形硬化作用的影响写为 $\tau_{twin} = \eta d^{-1/2}$，其中 η 为常数，d 为晶粒的平均直径。假设孪晶的密度为 ρ_T，则晶粒被孪晶细分后的个数 N 与孪晶的密度 ρ_T 成正比，由此可以得到 $d \propto \rho_T^{-1/2}$。Chichili[12]等的实验结果显示孪晶密度随变形增大呈幂指数关系，即 $\rho_T \propto \gamma^m$，因此孪晶硬化效应可以写为 $\tau_{twin} = \eta\gamma^m$。而应变率提高和温度降低对孪晶的发展有促进作用，可分别采用 $\dot{\gamma}/\dot{\gamma}_0$ 和 $\ln(T_m/T)$ 唯象地描述孪晶影响的应变率和温度相关性。结合本研究的实验结果，孪晶硬化效应可表达为

$$\tau_{twin} = 27.3\dot{\gamma}\gamma^4 \ln(T_m/T) \tag{7}$$

最终得到的本构方程为(6)式加(7)式，即

$$\tau(\gamma, \dot{\gamma}, T) = \tau^* (\gamma, \dot{\gamma}, T) + \tau_a(\gamma) + \tau_{twin}(\gamma, \dot{\gamma}, T) \tag{8}$$

修正后本构方程的拟合结果如图 4 所示，实线为本构模型预测结果。可以看出修正后的本构模型预测结果与实验结果符合较好，能够较好地描述不同温度和应变率下锆的塑性变形行为。

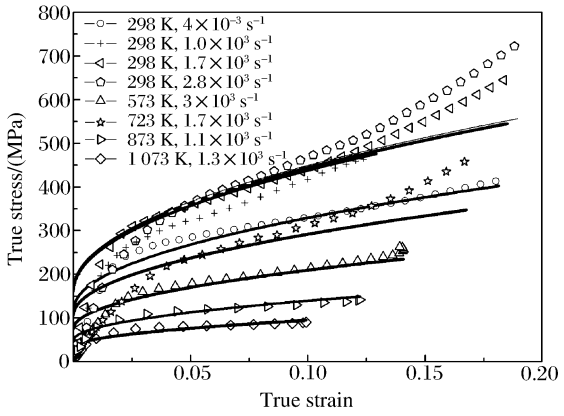


图 3　本构模型方程(6)拟合结果与实验结果的比较

Fig. 3　Comparison of the constitutive model Eq. (6) predictions and the experimental results

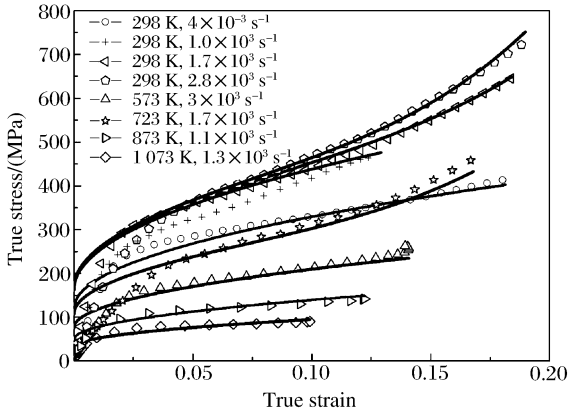


图 4　修正后的本构模型方程(8)拟合结果与实验结果的比较

Fig. 4　Comparison of the modified constitutive model Eq. (8) predictions and the experimental results

5　结　论

研究了较宽温度范围和应变率范围内锆的压缩力学性能。锆的流动应力和加工硬化随应变率的提高而增大,随温度的升高而降低。尤其在常温至 573 K 范围,高应变率下得到的应力-应变曲线在应变大于 0.1 时硬化效应陡增,这是变形过程中孪晶演化造成的。基于位错动力学理论,导出了一个基于物理概念的本构模型,并考虑塑性变形过程中孪晶演化的影响,对模型进行了修正。修正后的本构模型预测结果与实验结果吻合较好,可描述较宽温度和应变率范围内锆的塑性变形行为。

References:

[1] Olinger B, Jamieson J C. Zirconium: Phase and Compressibility to 120 Kilobars [J]. High Temperatures-High Pressures, 1973, 5: 123-131.

[2] Zhang Y S, Zhang J Z, Pantea C, et al. Thermal Equations of State of the α, β and ω Phases of Zirconium [J]. Phys Rev B, 2005, 71: 184119.

[3] Cerreta E, Gray G T, Hixson R S, et al. The Influence of Interstitial Oxygen and Peak Pressure on the Shock Loading Behavior of Zirconium [J]. Acta Materialia, 2005, 53: 1751-1758.

[4] Xiao D W, Li Y L, Hu S S, et al. Compression Mechanical Properties of Pure Zirconium [J]. Rare Metal Materials and Engineering. (in Chinese, to be published)
肖大武,李英雷,胡时胜,等. 纯锆的压缩力学行为研究 [J]. 稀有金属材料与工程. (待发表)

[5] Laura B A, Ellen K C, Gray G T. Mechanical Behavior of Zirconium and Hafnium in Tension and Compression [J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 2005, 36A: 2893-2903.

[6] Kaschner G C, Gray G T, Chen S R. The Influence of Texture and Impurities on the Mechanical Behavior of Zirconium [J]. AIP Conference Proceedings, 1998, 429: 435-438.

[7] Song S G, Gray G T. Influence of Temperature and Strain Rate on Slip and Twinning Behavior of Zr [J]. Metallurgical and Materials Transactions A, 1995, 26A: 2665-2675.

[8] Song S G, Gray G T. Structural Interpretation of the Nucleation and Growth of Deformation Twins in Zr and Ti-Ⅱ. TEM Study of Twin Morphology and Defect Reactions During Twinning [J]. Acta Metall Mater, 1995, 43: 2339-2350.

[9] Nemat-Naser S, Li Y Y. Flow Stress of FCC Polycrystals with Application to OFHC Cu [J]. Acta Materialia,

1998,46(2):565-577.

[10] Kocks U F, Argon A S, Ashby M F. Thermodynamics and Kinetics of Slip [M]. England: Oxford, 1975: 1-271.

[11] Christian J W, Mahajan S. Deformation Twinning [J]. Progress in Materials Science, 1995, 39: 1-157.

[12] Chichili D R, Ramesh K T, Hemker K J. The High-Strain-Rate Response of Alpha-Titanium: Experiments Deformation Mechanisms and Modeling [J]. Acta Mater, 1998, 46(3): 1025-1043.

Constitutive Model of Pure Zirconium under High Temperature and High Strain Rate

XIAO Da-Wu[1,2], LI Ying-Lei[1], HU Shi-Sheng[2]

(1. *National Key Laboratory of Shock Wave and Detonation Physics, Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang* 621900, *China*;
2. *Key Laboratory of Mechanical Behavior and Design of Materials, University of Science and Technology of China, Hefei* 230027, *China*)

Abstract: The thermo-mechanical response of zirconium has been investigated under temperature ranging from normal temperature to 1 073 K and strain rate from 4.1×10^{-4} s^{-1} to 2.8×10^{3} s^{-1}. Results show that the flow stress and strain hardening rate of zirconium are very sensitive to the changes of temperature and strain rate. The flow stress and strain hardening rate increase with the increase of strain rate, and decrease with the increase of temperature. Based on the concept of dislocation kinematics, a physically based constitutive model is developed, and the model is modified by taking into account of the effect of developing twins during deformation. The modified model could be used to predict the flow stress of zirconium over a wide range of temperature and strain rates. The experimental results are in good agreement with the predictions.

Key words: zirconium; plastic flow stress; high temperature; high strain rate; constitutive model