第21卷 第2期 高 压 物 理 学 报 Vol. 21, No. 2
2007年6月 CHINESE JOURNAL OF HIGH PRESSURE PHYSICS June, 2007

文章编号：1000-5773(2007)02-0188-05

α-锆低压动态力学特性研究*

李英华，蔡灵仓，张 林，李英雷

（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实验室，四川绵阳 621900）

摘要：在 $3.3\times10^{-4}\sim1.5\times10^{3}\ s^{-1}$ 应变率范围内获得了α-锆的应力-应变曲线，给出了 Johnson-Cook 本构拟合参数。利用含动态损伤与断裂的一维程序，较好复显了在峰值应力 4.3～5.1 GPa 范围测量的α-锆自由面速度剖面，验证了确定的α-锆低压动态力学参数的合理性。

关键词：α-锆；Johnson-Cook 本构参数；自由面速度剖面

中图分类号：O341 **文献标识码**：A

1 引 言

锆在常态为六角密堆（Hexagonal Close-Packed，hcp）结构（α 相），在高压下转变成六方结构（ω 相），温度升高时（1 136 K 以上）转变为体心立方（Body-Centered-Cubic，bcc）结构（β 相），在更高温度下熔化（2 123 K）[1]。锆存在于 30 多种已辨明的矿物质及化合物中，如氧化锆、磷酸锆等，由于具有良好的抗冲击性能以及具有极低的热导率，常被用作耐熔材料、炮膛的润滑剂等。

对于锆的研究目前已经开展了很多，如晶体结构、相变结晶学[2-3]，状态方程、相稳定性[4-5]等。在静压[6-7]和动压[1,8-9]实验条件下，都观察到了锆 α→ω 相变，但不同实验测量到的相变压力相差较大。例如，静压条件下 α→ω 相变压力在 2.0～6.0 GPa 范围内变化[6-7]，动载条件下相变压力在 6.2～10.0 GPa 范围内变化[1,8-9]，这种分散性的原因猜测可能是由非流体静压的影响以及试样加工工艺、所含杂质的不同引起的。锆在较低压力下发生 α→ω 相变，材料强度影响不可忽略，研究表明[10]材料在屈服后发生相变，会对已有的塑性流动起增强作用。本构关系对于研究锆在冲击加载下相变前后、相变期间的物理和力学性质的变化，理解锆的基本动力学特性是必不可少的，这方面的研究工作目前还未见相关报导。

本工作开展了一维应力下准静态 MTS 及动态压缩 SHPB 实验，测量了常态下锆的应力-应变曲线，应变率范围为 $3.3\times10^{-4}\sim1.5\times10^{3}\ s^{-1}$，给出了 Johnson-Cook（JC）本构拟合参数。在一级轻气炮加载下，用 VISAR 技术测量了 α-锆峰值应力在 4.3～7.6 GPa 范围内的自由面速度剖面，并结合数值模拟，对 α-锆的层裂特性和低压动力学参数的取值进行了讨论。

2 实验技术

研究使用的高纯 α-锆（纯度 99.9%）由西北有色金属研究院提供，牌号为 Zr-4N，测量密度 6.484 g/cm³，主要化学成分见表 1。全部试样均进行研磨处理，平面度 0.01 mm。

表 1 锆的化学成分

Table 1 Chemisteries for the zirconium (%)

Material	Hf	V	C	N	O
Zr	0.028	<0.002	0.005 8	0.002 6	0.052

* 收稿日期：2006-02-24；修回日期：2006-04-10

作者简介：李英华（1976—），女，硕士研究生，助理研究员，主要从事材料动态力学性能研究. E-mail：li_yinghua@126.com

准静态压缩实验在材料实验机(MTS810)上完成，压缩应变率 $3.3\times10^{-4}\ s^{-1}$、$3.3\times10^{-2}\ s^{-1}$，试样的应变由 MTS 横梁位移减掉横梁变形后得出。动态压缩实验采用 SHPB 实验技术，试样的尺寸为 $\varnothing$7.5 mm×7.5 m，应变率为 $9\times10^{-2}\ s^{-1}$、$1.5\times10^{-3}\ s^{-1}$。冲击实验在中国工程物理研究院流体物理研究所一级轻气炮上完成，气炮口径 100 mm，用任意反射面激光干涉测速系统(VISAR)进行样品自由面速度测量，实验装置如图 1 所示，加载条件和样品尺寸见表 2。

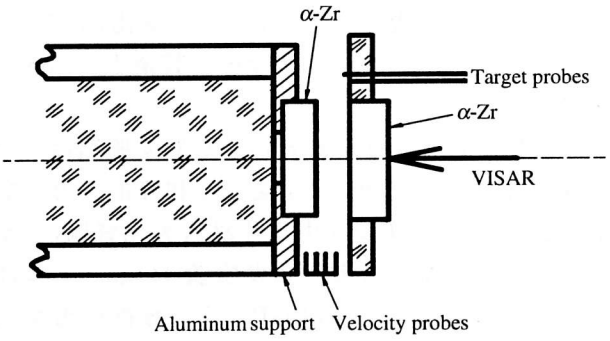


图 1　气炮装置简图

Fig. 1　Gas gun equipments

3　实验结果

α-锆的杨氏模量和泊松比测试实验按照GB 8653—1988标准执行。实验测量的压缩杨氏模量 $E=94.5$ GPa，泊松比 $\nu=0.31$，计算体积模量 $K=83.9$ GPa、剪切模量 $G=36.1$ GPa。MTS 和 SHPB 实验测量的 4 个应变率下 α-锆的应力-应变曲线见图 2。从实验结果可以看出，α-锆强度随应变率的增加有明显提高，当应变率从 $3.3\times10^{-4}\ s^{-1}$(准静态实验)上升到 $1.5\times10^{3}\ s^{-1}$(SHPB 实验)，材料的屈服应力(Yield Stress)增加了 40%，流动应力(Flow Stress)也随应变率的增加而提高。同时，α-锆表现出明显的应变硬化行为，尤其在动态实验曲线上表现显著。到目前为止，已经有许多种函数形式被提出并且成功地描述了不同材料的塑性行为。

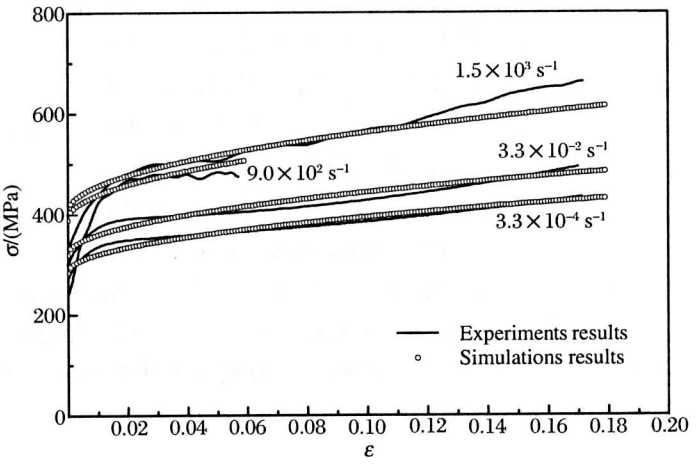


图 2　α-锆常温应力-应变验曲线与 JC 模型拟合结果

Fig. 2　Stress-strain curves of Zr under room temperature and simulation results of JC model

金属具有熟知的加工硬化行为，可以用下式描述

$$\sigma=\sigma_0+k\varepsilon^n \tag{1}$$

式中：σ_0 为屈服应力，n 为应变硬化指数，k 为应变硬化系数。

温度对流动应力的效应可以表述成

$$\sigma=\sigma_r\left[1-\left(\frac{T-T_r}{T_m-T_r}\right)^m\right] \tag{2}$$

式中：T 为环境温度，T_m 为材料熔点，T_r 为室温。

屈服应力随应变率增加，其关系可以简单的表述为

$$\sigma=\sigma_0+C\ln\dot{\varepsilon} \tag{3}$$

Johnson-Cook 模型综合了以上三种因素，形式简单、使用方便，且对相当多材料都能进行拟合[11]，因而在工程中得到了广泛应用。其一般形式如下

$$\sigma=(A+B\varepsilon^n)(1+C\ln\dot{\varepsilon}^*)(1-T^{*m}) \tag{4}$$

式中：σ 为流动应力；ε 为塑性应变，$\dot{\varepsilon}^*=\dot{\varepsilon}/\dot{\varepsilon}_0$($\dot{\varepsilon}$ 为应变率，参考应变率 $\dot{\varepsilon}_0$ 取为 $3.3\times10^{-4}\ s^{-1}$)；$T^*=(T-T_r)/(T_m-T_r)$(其中 T 为环境温度，T_m 为熔点，T_r 取为室温)；其余各参数 A、B、C、n 和 m 为待定系数。

利用本工作测量的常态 α-锆应力-应变结果对 Johnson-Cook 模型进行了拟合(拟合曲线见图 2)。

多数材料 m 值一般在 0.5～1.5 之间变化，本工作在数值计算中分别取其中几个值进行比较，结果差别不大，因此确定 $m=1.0$。实验确定其余 Johnson-Cook 本构参数为：$A=283$ MPa、$B=338.2$ MPa、$C=0.027$、$n=0.48439$。

3 发 α-锆自由面速度剖面见图 3，实验测得所用 α-锆 Hugoniot 弹性极限、层裂强度和峰值应力等实验数据列于表 2，实验 3 中飞片材料为无氧铜，实验中其余材料全部为 α-锆。3 发实验 Hugoniot 弹性极限平均值为 $\sigma_{HEL}=0.49$ GPa，这一数据约为文献报道的(1.4 GPa)四分之一[8]，估计文献中使用的锆纯度较低。

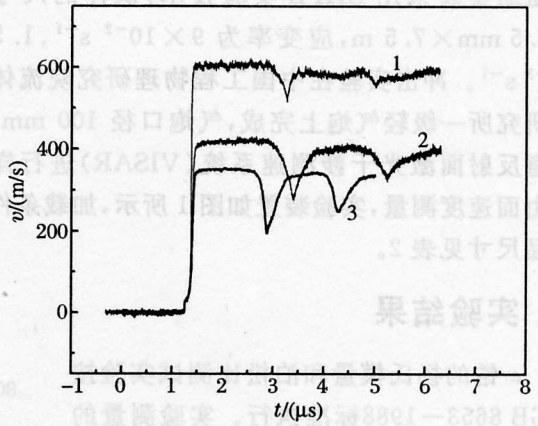


图 3 锆的自由面速度波剖面

Fig. 3 Free surface velocity profiles of Zr sample

实验 1 是等厚碰撞(试样厚度略小)，未发生拉伸断裂，峰值应力为 7.6 GPa，在上升沿没有观察到 $\alpha\rightarrow\omega$ 相变信息，自由面速度出现下降，可能是反射稀疏波相交时部分弹性波透过拉伸区引起的。实验 2、实验 3 的自由面速度剖面是典型的层裂信号，利用 $\sigma_f=(1/2)\rho_0 c_b \Delta u$(其中 c_b 是常态下材料体波声速，Δu 是自由面速度剖面的最大值与层裂反弹信号极小值之间的差值)公式，计算得到层裂强度的平均值为 1.64 GPa。

Kutsar[8]实验测得的动载下锆 $\alpha\rightarrow\omega$ 相变压力在 6.2～6.7 GPa 之间，但未报道锆的杂质含量。后来美国 Los Alamos 实验室[9]对杂质含量不同的锆在动载下的 $\alpha\rightarrow\omega$ 相变压力进行了深入研究，发现锆的这一相变压力对杂质含量(尤其是氧的含量)相当敏感，当杂质含量超过某一值(氧超过 0.12%)后，在动载下就观察不到 $\alpha\rightarrow\omega$ 的相变。我们实验中所用 α-锆氧杂质含量为 0.052%，在 7.6 GPa 峰值压力下还未发生 $\alpha\rightarrow\omega$ 的相变。

表 2 纯锆的冲击实验数据

Table 2 Experimental parameters for shots on the pure zirconium

Shot No.	Impactor thickness /(mm)	Specimen thickness /(mm)	Impact velocity /(m/s)	σ_{HEL} /(GPa)	Peak stress /(GPa)	Spallation /(GPa)
1	3.995	3.945	594	0.50	7.6	—
2	3.998	4.939	429	0.48	5.1	1.63
3	3.455*	3.975	300	0.48	4.3	1.64

4 数值模拟

利用含动态损伤与断裂的一维有限差分程序对发生层裂的两发气炮实验结果进行了数值模拟，其中，α-锆 Johnson-Cook 本构参数用本工作的拟合结果，无氧铜的本构参数取自文献[11]。

状态方程采用含损伤的 Grüneisen 状态方程

$$p=\left\{p_c(v_m)+\frac{\gamma}{v_m}[E-E_c(v_m)]\right\}(1-D) \tag{5}$$

式中：D 是损伤变量，定义为空隙比；$v_m=v(1-D)$。

$\gamma(v)$采用近似公式

$$\gamma/v=\gamma_0/v_0 \tag{6}$$

$p_c(v)$、$E_c(v)$选冷压、冷能作参考线，考虑体模量随压力的一阶偏导，有

$$\begin{aligned} -v\frac{\mathrm{d}p_c}{\mathrm{d}v}&=K_0+K'_0 p_c \\ \mathrm{d}E_c&=-p_c\mathrm{d}v \end{aligned} \tag{7}$$

可以推得

$$p_c = \frac{K_0}{K'_0}\left[\left(\frac{v_0}{v}\right)^{K'_0} - 1\right] \tag{8}$$

$$E_c = \frac{K_0 v_0}{K'_0(K'_0 - 1)}\left[\left(\frac{v_0}{v}\right)^{K'_0 - 1} - 1\right] - \frac{K_0 v_0}{K'_0}\left(1 - \frac{v}{v_0}\right) \tag{9}$$

式中:K_0、K'_0 分别为冷体模量和它对压强的一阶偏导数,v_0 为材料初始比容,v 为比容。

基体塑性加载面方程[12]

$$J_2 = (1-D)^2\left[\frac{1}{3}Y^2 - \frac{3}{2}h^2(\varepsilon_m)\right] \tag{10}$$

式中:$h(\varepsilon_m)$是塑性应变硬化函数,J_2 是应力偏量第二不变量,Y 由本构方程给出。

损伤演化方程[12]

$$\dot{D} = \begin{cases} \dfrac{4\pi}{3}R_N^3\rho N_0 \exp\left(\dfrac{p_m - p_0}{p_1}\right) + \dfrac{3c_b}{4B_m\lambda}(p_m^2 - \sigma_0^2)D(1-D) - D\dot{\varepsilon}_b & -p_m \geqslant p_0 \text{ 和 } D < D_0, -p_m \geqslant \sigma_0 \\ \dfrac{4\pi}{3}R_N^3\rho N_0 \exp\left(\dfrac{p_m - p_0}{p_1}\right) - D\dot{\varepsilon}_b & -p_m \geqslant p_0 \text{ 和 } D < D_0, -p_m < \sigma_0 \\ \dfrac{3c_b}{4B_m\lambda}(p_m^2 - \sigma_0^2)D(1-D) - D\dot{\varepsilon}_b & -p_m < p_0 \text{ 或 } D \geqslant D_0, -p_m \geqslant \sigma_0 \\ -D\dot{\varepsilon}_b & -p_m < p_0 \text{ 或 } D \geqslant D_0, -p_m < \sigma_0 \end{cases} \tag{11}$$

式中:σ 是孔洞长大的阈值,是一个材料常数,c_b^m 和 B_m 是基体材料的体波声速和体积模量,D_0 是特征损伤值,$\dot{\varepsilon}_b$ 是复合体总的体积应变率,p_0 是孔洞成核阈值,p_1 是具有压强量纲的特征参量,孔洞成核的平均尺寸也是一个材料常数,设其半径为 R_N,N_0 是材料常数。关于塑性加载面方程的推导,损伤演化的发展等内容详见文献[12]。

数值模拟结果和实验自由面速度剖面的对比见图 4。从数值模拟与实验结果对比看,两者总体上符合得较好,表明本工作确定的本构参数和断裂、损伤参数(见表 3)是合理的。

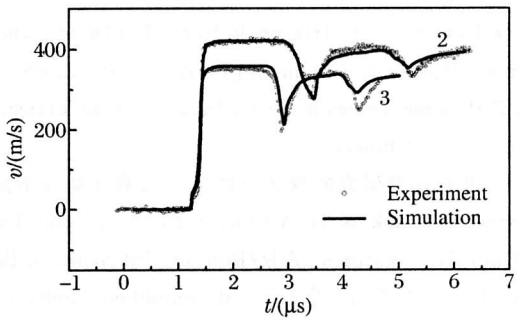


图 4　数值模拟与实验结果(自由面粒子速度剖面)的比较

Fig. 4　Comparisons between simulation results and experiment results of free-surfaces velocity histories

表 3　关键计算参数

Table 3　The key parameters of numerical simulations

Material	ρ/(g/cm³)	K_0/(GPa)	K'_0	γ	c_V/[J/(g·K)]	σ_0/(GPa)	Ref.
α-Zr	6.484	82.9	4.08	0.82	0.27	0.06	[13-14], this work
OFHC	8.939	133.3	5.0	1.96	0.386	—	[15]
Material	N_0/(ns^{-1}·g^{-1})	R_N/(μm)	p_0/(GPa)	p_1/(GPa)	D_0	λ/(J/mm²)	Ref.
α-Zr	0.001	0.02	0.8	0.085	0.08	0.0012	This work

5　结　论

利用一维应力准静态(MTS)和动态(SHPB)实验应力-应变曲线结果,拟合得到 α-锆 Johnson-Cook 本构参数。数值模拟结果能够对峰值应力 4.3 GPa 和 5.1 GPa 的两发含损伤与断裂信息的实验剖面复显,验证了本研究的 Johnson-Cook 本构拟合参数和动态损伤与断裂参数取值是合理的。

给出了国产 Zr-4N 牌号的 α-锆 Hugoniot 弹性极限 σ_{HEL}=0.49 GPa,层裂强度 σ_f=1.64 GPa。实验显示,在动载峰值应力 7.6 GPa 范围内,国产锆仍处于 α 相。

References:

[1] Greeff C W, Rigg P A, Knudson M D, et al. Modeling Dynamic Phase Transition in Ti and Zr [A]//Furnish M D, Gupta Y M, Forbes J W. Shock Compression of Condensed Matter [C]. Portland: AIP, 2003: 209-212.

[2] Vohra Y K, Sikka S K, Baram R C. Electronic Structure of Omega Phase of Titanium and Zirconium [J]. J Phys F: Metal Phys, 1979, 9: 1771-1782.

[3] Jyoti G, Joshi K D, Gupta S C, et al. Crystallography of Transition in Shock-Loaded Zirconium [J]. Philosophical Magazine Letters, 1997, 75: 291-300.

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

[5] Zhang Y S, Zhang J Z, Pantea C, et al. Thermal Equations of State of the, and Phases of Zirconium [J]. Phys Rev B, 2005, 71: 184119(1)-184119(6).

[6] Zhang J Z, Zhang Y S, Pantea C, et al. Experimental Constraints on the Phase Diagram of Element Zirconium [J]. J Phys Chem Solid, 2005: 1213-1219.

[7] Xia H, Arthur L R, Vohra Y K. Temperature Dependence of the Transition in Zirconium Meta [J]. Phys Rev B, 1991, 44: 10374-10376.

[8] Kutsar A R, Pavlovskп M N, Kamissarov V V. Observation of a Two-Wave Shock Configuration in Zirconium [J]. JETP Lett, 1994, 39: 480-483.

[9] 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 Mater, 2005, 53: 1751-1758.

[10] Tang Z P. Some Topics in Shock-Induced Phase Transitions [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 1994, 8 (1): 14-22. (in Chinese)
唐志平. 冲击相变研究的现状与趋势 [J]. 高压物理学报, 1994, 8(1): 14-22.

[11] Johnson G R, Cook W H. A Constitutive Model and Data for Metals Subjected to large Strain, High Strain Rates and High Temperatures [A]//Proc 7th Int Symp on Ballistics [C]. Hague, Holland, 1983: 541-547.

[12] Zhang L, Cai L C, Li Y L, et al. Simplified Model for Prediction of Dynamic Damage and Fracture of Ductile Materials [J]. Int J Solids Struct, 2004, 41: 7063-7074.

[13] Fisher E S. Hydrostatic Pressure Derivatives of the Single-Crystal Elastic Moduli of Zirconium [J]. J Appl Phys, 1970, 41: 2991-2998.

[14] Tang W H, Zhang R Q. Introduction to Equation of State and Its Calculation [M]. Changsha: Press of NUDT, 1999: 322-325. (in Chinese)
汤文辉, 张若棋. 物态方程理论及计算概论 [M]. 长沙: 国防科技大学出版社, 1999: 322-325.

[15] Song P, Cai L C, Zhou X M, et al. Experimental Investigation of the Release Isentropes for OFHC Copper [J]. Chinese Journal of High Pressure Physics, 2005, 19(2): 174-178. (in Chinese)
宋 萍, 蔡灵仓, 周显明, 等. 无氧铜等熵卸载路径实验研究 [J]. 高压物理学报, 2005, 19(2): 174-178.

Dynamic Behavior of α-Zirconium at Low Pressure

LI Ying-Hua, CAI Ling-Cang, ZHANG Lin, LI Ying-Lei

(*Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics Research, Institute of Fluid Physics, CAEP, Mianyang* 621900, *China*)

Abstract: The stress-strain curves of the α-zirconium which strain rate ranges from 3.3×10^{-4} s^{-1} to 1.5×10^{3} s^{-1} under room temperature were obtained, and the parameters of Johnson-Cook model were determined through these experiments. The computed free-surface velocity profiles using dynamic damage and fracture model consist with the experimental measurements at 4.3 GPa and 5.1 GPa peak pressure. The comparison indicates that the determined dynamic parameters of α-zirconium are valid.

Key words: α-zirconium; Johnson-Cook constitutive parameter; free surface velocity profiles