

УДК 539.3

DOI 10.17223/19988621/65/10

Н.В. Скрипняк, К.В. Иохим

**ВЛИЯНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЗЕРЕН ПО РАЗМЕРАМ
НА ПРОЧНОСТНЫЕ И ДЕФОРМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА
СПЛАВОВ Zr–Nb ПРИ ВЫСОКОСКОРОСТНОМ РАСТЯЖЕНИИ¹**

Методом многоуровневого компьютерного моделирования исследовано влияние распределения зерен по размерам на механическое поведение сплавов Zr–Nb при высокоскоростном растяжении. Исследовано влияние объемной концентрации крупных зерен на зарождение и рост повреждений. Показано, что сплавы Zr–Nb с зеренными структурами, характеризующимися бимодальным распределением размеров, обладают повышенными прочностными и деформационными характеристиками.

Ключевые слова: эволюция повреждений; распределение зерен по размерам; цирконий-ниобиевые сплавы; высокоскоростная деформации

Сплавы Zr–Nb представляют интерес для инженерного и медицинского применения благодаря уникальному сочетанию низкой магнитной восприимчивости, хорошей биосовместимости, высокой пластичности, коррозионной и радиационной стойкости [1, 2]. Сплавы Zr–1 %Nb и Zr–2.5 %Nb применяются в качестве конструкционных материалов для оболочек современных тепловыделяющих элементов ядерных реакторов, напорных труб и другого оборудования [3]. В процессе эксплуатации конструкций в ядерных реакторах происходит поглощение водорода и дейтерия сплавами Zr–Nb, что приводит к образованию дисперсных частиц фаз гидридов циркония (Zr_2H), (ZrH), ($ZrH_{1.5+x}$) и (ZrH_2). Образование гидридов приводит к охрупчиванию сплавов, замедленному гидридному растрескиванию, что является одним из основных факторов, сокращающих срок службы напорных труб в реакторах [2]. Для повышения прочностных характеристик сплавов Zr–Nb, их коррозионной стойкости и сопротивления водородному охрупчиванию было предложено использовать сплавы с ультрамелкозернистой структурой [4–6]. Было показано, что ультрамелкозернистые циркониевые сплавы с концентрацией Nb ниже 2.5 мас.% обладают существенно меньшими деформациями до разрушения по сравнению с крупнозернистыми аналогами [7]. При получении сплавов с ультрамелкозернистой структурой методами интенсивной пластической деформации могут формироваться структуры с бимодальным распределением зерен по размерам. Сплавы с подобной зеренной структурой обладают сочетанием повышенных прочностных характеристик и достаточно высокой пластичностью в квазистатических условиях [7–10]. Механическое поведение сплавов Zr–Nb с бимодальными зеренными структурами при деформации с высокими скоростями деформации исследовано слабо.

В данной работе для исследования свойств сплавов Zr–Nb с ультрамелкозернистыми и бимодальными зеренными структурами в условиях высокоскоростного

¹ Работа поддержана Российским научным фондом (РНФ), грант № 18-71-00117. Авторы благодарят Фонд за поддержку этой работы.

растяжения использован подход многоуровневого компьютерного моделирования.

Цель работы состояла в исследовании влияния параметров зеренной структуры на зарождение и развитие повреждений в сплавах Zr–Nb при высоких скоростях деформации. Методом компьютерного моделирования определены предельные деформации до макроскопического разрушения и макроскопические прочностные характеристики (пределы текучести и прочности) при скоростях деформации от 100 и 1000 с⁻¹ при изменении объемной концентрации крупных зерен от 0 до 100 %. Исследовано влияние дисперсных частиц гидридов циркония на развитие разрушения в сплавах с бимодальными зеренными структурами.

1. Постановка задачи

Двухуровневая модель механического отклика структурированной среды с бимодальным распределением размеров зерен была использована для исследования механического поведения сплава Zr–1 %Nb. В нормальных условиях сплав состоит из зерен альфа-фазы Zr с ~0.5 % Nb, имеющей гексагональную плотноупакованную (ГПУ) решетку, и дисперсных частиц Nb с объемно центрированной кубической решеткой [3–5, 7, 9–12]. При поглощении сплавом водорода могут образовываться наночастицы гидридов циркония, преимущественно в границах зерен или близи них [2, 13]. Поэтому модельные 3D-объемы сплава были представлены зернами альфа-фазы циркония, размеры которых имеют распределение, а также объемами агломератов субмикронных зерен и слоями интерфейсных и зеренных границ. Поскольку дисперсные частицы Nb и частицы гидридов имеют размеры от 20 до 40 нм, их содержание в сплаве было предложено учитывать неявно, с помощью модификации определяющих уравнений, разработанных в рамках микродинамического подхода и с учетом термически активированных дислокационных механизмов [14]. Объемы материала, соответствующие агломератам ультрамелких или наноразмерных зерен, объемам зернограницных областей, в модели характеризуются соответствующими эффективными физико-механическими характеристиками. Размеры зерен и фазовая структура на границе зерен влияют на скольжение дислокаций и образование дислокационных субструктур во время пластического течения [14]. Механический отклик поликристаллических сплавов может быть описан параметрами усреднения состояний по типичному элементу представительного объема. Распределения зерен по размерам в сплавах Zr–1 %Nb (Э110) были заданы в соответствии с экспериментальными данными, полученными методом дифракции вторичных отраженных электронов (EBSD) на приставке электронного сканирующего микроскопа [8].

При генерации модельных объемов учитывалось вероятное бимодальное или одномодальное распределение зерен по размерам. В случае бимодального распределения рассматривались субмикронные зерна, образующие ультрамелкозернистые объемы материала, а также крупные зерна, размеры которых могут варьироваться в диапазоне от 1 до 100 мкм. Распределение зерен по размерам описывалось функциями плотности вероятности $g_k(d_g)$ [7, 15]:

$$g(d_g) = \sum_{k=1}^m \lambda_k g_k(d_g); \quad (1)$$

$$g_k(d_g) = (1/\sqrt{2\pi} \sigma_{dk} d_g) \exp [-(\ln d_g - \bar{d}_{gk})^2 / 2\sigma_{dk}^2], \quad (2)$$

где d_g – размер зерна, λ_k – весовые коэффициенты, $\lambda_k > 0$, $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$, σ_{dk} , \bar{d}_{gk} – средноквадратичное отклонение $\ln(d_g)$, среднее значение $\ln(d_g)$, соответственно.

В этой статье рассмотрено влияние одномодального и бимодального распределений размеров зерен на пластическое течение и разрушение сплавов Zr–Nb при скоростях деформации от 100 до 1000 с⁻¹. Для калибровки вычислительной модели были использованы экспериментальные данные [4].

Удельный объем ультрадисперсных зерен (с размером зерен 100 нм < d_g < 1 мкм) и крупных зерен (1 мкм < d_g < $d_{g \max}$) оценивали с использованием функции плотности вероятности $g_k(d_g)$:

$$C_{UFG} = \int_{d_g^{\min}}^{1\mu\text{m}} g_1(x) dx, \quad C_{CG} = \int_{10\mu\text{m}}^{d_g^{\max}} g_2(x) dx, \quad (3)$$

где C_{UFG} , C_{CG} – удельные объемы ультрамелких зерен (C_{UFG}) и крупных зерен (C_{CG}); g_1 , g_2 – функции плотности вероятности логнормального распределения размеров субмикронных и крупных зерен соответственно.

На рис. 1 показан пример 3D-модельного объема сплава Zr–1%Nb с бимодальным распределением зерен по размерам (85 % объемной концентрацией субмикронных зерен). Размеры модельного объема – 14×8×1 мкм.

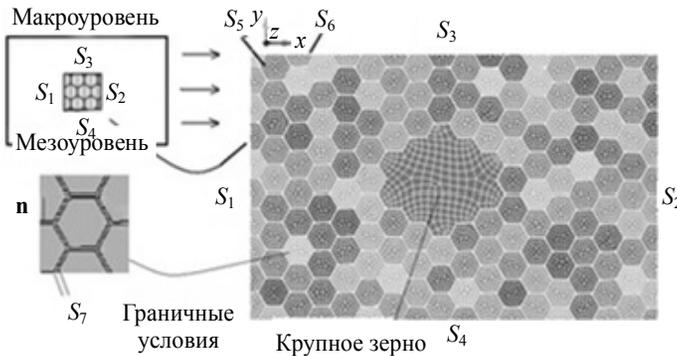


Рис. 1. Схема граничных условий
Fig. 1. Scheme of boundary conditions

Начальные условия соответствуют свободному напряженному состоянию материала в однородном температурном поле. Граничные условия (4) соответствуют растяжению вдоль оси OX с постоянной скоростью V_x :

$$\begin{aligned} u_x(x_k, t) &= 0, \quad x_k \in S_1, \\ u_x(x_k, t) &= v_x, \quad x_k \in S_2, \\ \sigma_{22} &= 0, \quad x_k \in S_3, x_k \in S_4, \\ u_z &= 0, \quad x_k \in S_5, x_k \in S_6, \\ u_k^A - u_k^B &= 0, \sigma_n^A = -\sigma_n^B, \quad k = 1, 2, 3, \quad x_k \in S_7. \end{aligned} \quad (4)$$

Механический отклик зерен и зернограницной фазы описывался в рамках механики повреждаемых сред:

$$\frac{d\rho}{dt} = \rho \frac{\partial u_i}{\partial x_i}, \quad \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \rho \frac{du_i}{dt}, \quad \rho \frac{dE}{dt} = \sigma_{ij} \dot{\epsilon}_{ij}; \quad (5)$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = (1/2)[\partial u_i / \partial x_j + \partial u_j / \partial x_i], \quad \dot{\omega}_{ij} = (1/2)[\partial u_i / \partial x_j - \partial u_j / \partial x_i]; \quad (6)$$

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{(m)} \varphi(f), \quad \sigma_{ij}^{(m)} = -p^{(m)} \delta_{ij} + S_{ij}^{(m)}; \quad (7)$$

$$p^{(m)} = p_x^{(m)}(\rho) + \Gamma(\rho)\rho E_T, \quad E_T = C_p T, \\ p_x^{(m)} = \frac{3}{2} B_0 \cdot ((\rho_0 / \rho)^{-7/3} - (\rho_0 / \rho)^{-5/3}) [1 - \frac{3}{4}(4 - B_1) \cdot ((\rho_0 / \rho)^{-2/3} - 1)]; \quad (8)$$

$$DS_{ij}^{(m)} / Dt = 2\mu(\dot{\varepsilon}_{ij}^e - \delta_{ij} \dot{\varepsilon}_{kk}^e / 3),$$

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \dot{\varepsilon}_{ij}^e + \dot{\varepsilon}_{ij}^p, \quad \dot{\varepsilon}_{ij}^p = \dot{\varepsilon}_{ij}^p + \delta_{ij} \dot{\varepsilon}_{kk}^p / 3, \quad \dot{\varepsilon}_{ij}^p = \lambda \partial \Phi / \partial \sigma_{ij}, \quad \dot{\varepsilon}_{kk}^p = \dot{f}_{growth} / (1 - f), \quad (9)$$

где ρ – массовая плотность; u_i – компоненты вектора скорости частицы; x_i – декартовы координаты, $i = 1, 2, 3$; E – удельная внутренняя энергия; $\dot{\varepsilon}_{ij}, \dot{\omega}_{ij}$ – компоненты тензора скорости деформации и тензора изгибания-кручения; функция $\varphi(f)$ устанавливает связь между эффективными напряжениями поврежденной среды и напряжениями в конденсированной фазе; Γ – коэффициент Грюнайзена; ρ_0 – начальная массовая плотность конденсированной фазы сплава; B_0, B_1 – постоянные материала; C_p – удельная теплоемкость; D/Dt – производная Яуманна; μ – модуль сдвига; \dot{f}_{growth} – скорость роста пустот; f – объемная доля пустот в поврежденной среде; $\dot{\lambda}$ – параметр, полученный из условия пластического течения $\dot{\Phi} = 0$, а Φ – пластический потенциал, определяемый уравнением (10).

В расчетах были использованы значения $\rho_0 = 6505 \text{ кг/м}^3$, $B_0 = 89 \text{ ГПа}$, $B_1 = 3.8$, $\Gamma = 1.09$.

Функция $\varphi(f)$ в уравнении (7) принимает вид $\varphi(f) = (1 - f)$ для давления и неявно определяется для тензора девиаторных напряжений.

Система уравнений включает в себя: уравнения сохранения (5), кинематические отношения (6), определяющее уравнение (7), уравнение состояния (8), уравнение релаксации для девиатора тензора напряжений (9).

Влияние повреждения на напряжение течения определялось потенциалом [16, 17]:

$$(\sigma_{eq}^2 / \sigma_s^2) + 2q_1 f^* \cosh(-q_2 p / 2\sigma_s) - 1 - q_3 (f^*)^2 = 0, \quad (10)$$

где σ_s – предел текучести, а q_1, q_2 и q_3 – параметры модели, p – давление, f^* – параметр поврежденности.

Скорость роста повреждений связана с выполнением уравнения сохранения массы и зависит от изменения объемной пластической деформации. Предполагается, что при сдвиговой пластической деформации роста повреждений не происходит. Зарождение пустот зависит от эквивалентной пластической деформации ε_{eq}^p [16, 17].

$$\dot{f} = \dot{f}_{nucl} + \dot{f}_{growth}, \\ \dot{f}_{nucl} = \varepsilon_{eq}^p (f_N / s_N) \exp\{-0.5[(\varepsilon_{eq}^p - \varepsilon_N) / s_N]^2\}, \quad (11) \\ \dot{f}_{growth} = (1 - f) \dot{\varepsilon}_{kk}^p,$$

где ε_N и s_N – средняя деформация зародышеобразования и стандартное отклонение соответственно. Количество зародышей пустот контролируется параметром f_N .

$$f^* = f \text{ if } f \leq f_c; \\ f^* = f_c + (\bar{f}_F - f_c)/(f_F - f_c) \text{ if } f > f_c, \quad (12)$$

где $\bar{f}_F = (q_1 + \sqrt{q_1^2 - q_3})/q_3$.

На стадии формирования трещины происходит слияние зародившихся пустот. Это вызывает размягчение материала и увеличение скорости роста относительно объема повреждений f^* .

Параметры модели для сплава Zr-1 % Nb были определены для согласования результатов моделирования с экспериментальными диаграммами деформирования. Для описания эволюции повреждений сплавов Zr-Nb использованы значения параметров: $q_1 = 1.3$, $q_2 = 1$, $q_3 = 1.69$, $f_0 = 0$, $f_N = 0.2$, $f_c = 0.035$, $f_F = 0.4$, $\varepsilon_N = 0.28$, $s_N = 0.1$

Повышение температуры, связанное с диссипацией энергии при пластическом течении, рассчитывалось с помощью соотношения

$$T = T_0 + \int_0^{\varepsilon_{eq}^p} (\beta / \rho C_p) \sigma_{eq} d\varepsilon_{eq}^p, \quad (13)$$

где T_0 – начальная температура, а $\beta \sim 0.9$ – параметр, представляющий долю пластической работы, преобразованной в тепло.

Удельная теплоемкость для Zr-1 %Nb рассчитывалась по феноменологическим соотношениям в интервале температур от 293 до 1155 К [18].

$$C_p = 251.382 + 0.10487T + 0.0000159T^2 \text{ [Дж/кг} \cdot \text{К]} \text{ at } 0 < T < T_{\alpha\beta} = 1155 \text{ К.} \quad (14)$$

Напряжение пластического течения альфа-фазы циркония, имеющей гексагональную плотноупакованную кристаллическую решетку, было описано уравнением [14]

$$\sigma_s = (\sigma_{s0} + k_{hp} d_g^{-1/2}) \times \\ \times \exp\{C_1 \sqrt{(1 - T/T_m)}\} + C_2 \sqrt{1 - \exp\{-k_0 \varepsilon_{eq}^p\}} \exp\{-C_3 T\} \exp\{C_4 T \ln(\dot{\varepsilon}_{eq} / \dot{\varepsilon}_{eq0})\}; \quad (15)$$

$$\sigma_{s0} = \sigma_0 + \frac{\mu b}{2\pi\sqrt{1-\nu}} \frac{1}{L_{inc}} \lg\left(\frac{d_{inc}}{b}\right), \quad (16)$$

где σ_s – напряжение течения; σ_{s0} , k_{hp} , k_0 , C_1 , C_2 , C_3 , C_4 – параметры материала; d_g – средний размер зерна; $\dot{\varepsilon}_{eq} = [(2/3)\dot{\varepsilon}_{ij}\dot{\varepsilon}_{ij}]^{1/2}$, $\dot{\varepsilon}_{ij}$ – компоненты тензора скорости деформации; $\dot{\varepsilon}_{ij}^p$ – компоненты тензора скорости пластической деформации;

$\varepsilon_{eq}^p = \int_0^t \dot{\varepsilon}_{eq}^p dt$ – интенсивность пластической деформации; $\dot{\varepsilon}_{eq0} = \gamma_1 \exp\{-T/\gamma_2\} + \gamma_3$;

$\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ – постоянные материала; ν – коэффициент Пуассона; σ_0 – параметр, зависящий от предыстории воздействий на материал; b – модуль вектора Бюргера; d_{inc} – средний размер дисперсных частиц Nb; L_{inc} – среднее расстояние между дисперсными частицами; T – температура в К; T_m – температура плавления; $\mu(T)$ – модуль сдвига.

Модуль сдвига сплава Zr-1 %Nb в зависимости от температуры рассчитывался с помощью феноменологического соотношения:

$$\mu(T) = \mu_0(1 - k_\mu T) \quad , (273K < T < T_{\alpha\beta}) \quad , \quad (17)$$

где μ_0 , k_μ – постоянные материала, $T_{\alpha\beta}$ – температура фазового перехода $\alpha \rightarrow \beta$ для сплава.

Величина σ_{s0} для зернограницной фазы альфа циркония с выделениями наночастиц стабильных гидридов $\delta(\text{ZrH}_{1.5+x})$ и $\epsilon(\text{ZrH}_2)$ рассчитывалась по формуле (16) с использованием экспериментальных значений $d_{\text{inc}} = 36$ нм, $L_{\text{inc}} = 250$ нм, $d_{\text{inc}} = 25$ нм, $L_{\text{inc}} = 200$ нм, соответственно [19].

При моделировании деформации образцов сплава Zr–1 %Nb были использованы параметры материала: $\sigma_{s0} = 0.02$ ГПа, $\gamma_1 = 2115 \text{ c}^{-1}$, $\gamma_2 = 38.2 \text{ K}$, $\gamma_3 = 9.8 \cdot 10^{-5} \text{ c}^{-1}$, $\nu = 0.33$, $\mu_0 = 38.7$ ГПа, $k_\mu = 5.45 \cdot 10^{-4} \text{ K}^{-1}$, $T_{\alpha\beta} = 1155 \text{ K}$, $d_g = 40$ мкм, $b = 0.323$ нм. Параметры материала, входящие в определяющее уравнение (15), для сплава Zr–1 %Nb, приведены в таблице.

Параметры сплава Zr–1 %Nb

Материал	σ_0 , ГПа	C_1	C_2 , ГПа	C_3 , K^{-1}	C_4 , K^{-1}	k_0	T_m , К
Zr–1 %Nb	0.02	3.85	0.56	0.0016	0.00009	8.5	1875

Компьютерное моделирование проводилось с использованием LS DYNA (ANSYS WB 15.2, ANSYS, Inc., Canonsburg, PA, USA).

Расчеты проводились с использованием конечно-разностной схемы второго порядка точности. Поскольку плотность сетки может влиять на процесс повреждения, в объемах зернограницной фазы применена мелкая сетка, а в объеме зерен более крупная. Размер шага сетки был подобран, чтобы обеспечить сходимость полученных численных результатов. Шаг по времени определяли для каждой ячейки с использованием условия Куранта – Фридрихса – Леви. Фрагментация образцов моделировалась методом эрозии при достижении параметром поврежденности порогового значения. Во всех выполненных вариантах численного моделирования внутренняя энергия разрушенных сеточных элементов не превышала 5 % внутренней энергии расчетной области.

2. Результаты численного моделирования и их обсуждение

На рис. 2 показаны расчетные поля эквивалентных пластических деформаций на последовательных стадиях зарождения повреждений и их роста при растяжении модельного объема Zr–1 %Nb со скоростью деформации 100 c^{-1} . Уравнение (15) описывает деформационное упрочнение, чувствительность к скорости деформации и температурную чувствительность зерен сплава. Пространственное расположение зоны зарождения и роста повреждений (рис. 2) указывает сильную корреляцию между образованием полос локализованной пластической деформации и последующим формированием макротрещины. Полученные результаты также согласуются с данными [20], которые указывают на определяющую роль явления локализации деформации в процессе разрушения титановых сплавов, относящихся к одной изомеханической группе с цирконий-ниобиевыми сплавами [21]. На рис. 2, *a* показано, что зарождение повреждений происходит в зоне пересечения полос локализации пластической деформации с границами крупных зерен. На рис. 2, *b* и *c* показано, что с ростом деформации формируются стационарные полосы локализованного сдвига, вдоль которых происходит рост мезоскопических трещин.

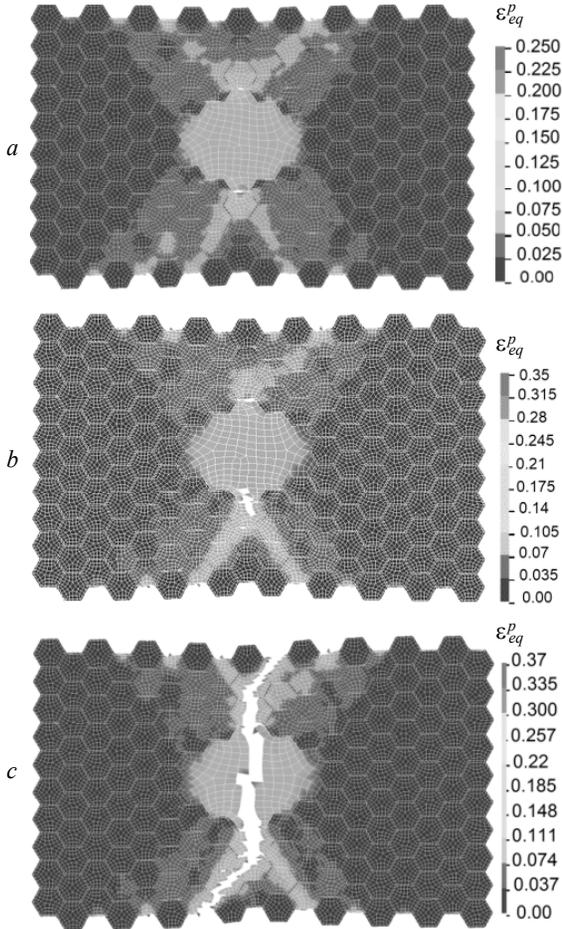


Рис. 2. Расчетная эквивалентная пластическая деформация на стадиях зарождения повреждений (*a*), их роста (*b*) и коалесценции (*c*) при растяжении представительного объема $Zr - 1\%Nb$ при скорости деформации 100 c^{-1}

Fig. 2. Calculated equivalent plastic strain at the stages of (*a*) nucleation, (*b*) growth, and (*c*) coalescence of damages under tension of $Zr - 1\%Nb$ representative volume element at a strain rate of 100 s^{-1}

В случае бимодальной зеренной структуры у материала полосы локализованного сдвига и трещины развиваются как в объеме субмикронных зерен, так и в крупных зернах. Учет изменения прочностных и деформационных свойств в объеме зернограничной фазы, обусловленного сегрегацией дисперсных частиц гидридов $ZrH_{1.5}$, не оказал значимого влияния на закономерности развития макроскопических трещин. Вместе с тем, снижение пороговой деформации зарождения повреждений в зернограничной фазе оказывает влияние на траекторию роста трещин в объеме мелкозернистого материала, как видно из рис. 2, *b*. Полученные результаты объясняют факт снижения параметра трещиностойкости K_{IC} при слабом

изменении эффективных значений предела текучести и предела прочности сплава Zr-1 %Nb с ростом концентрации дисперсных частиц гидридов. Объемная концентрация субмикронных зерен существенно влияет на прочностные свойства сплава Zr-1 %Nb при высоких скоростях деформации. На рис. 3, *a* показано, что с уменьшением концентрации субмикронных зерен и ростом крупных зерен в модельном объеме сплава Zr-1 %Nb возрастает эффективная макроскопическая деформация до разрушения при скоростях деформации 100 и 1000 с⁻¹. Результаты, показанные на рис. 3, *b*, свидетельствуют о снижении эффективных значений предела текучести и максимального растягивающего напряжения (предела прочности) с ростом относительного объема крупных зерен в модельном объеме материала.

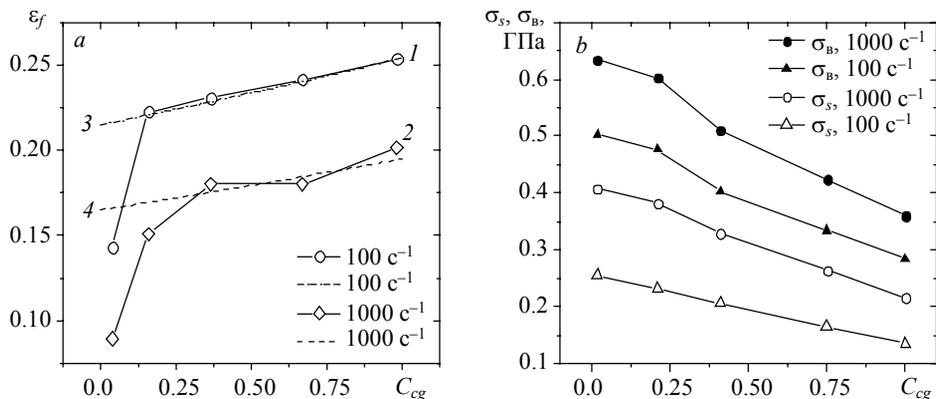


Рис. 3. Расчетная деформация до разрушения в зависимости от объемного содержания крупных зерен в объеме сплава Zr-1 %Nb с бимодальным распределением зерен по размерам (кр. 1 – скорость деформации 100 с⁻¹, кр. 2 – 1000 с⁻¹, кр. 3 – аналитическая зависимость (19)) (*a*); расчетные значения предела текучести и предела прочности при скорости деформации 100 с⁻¹ и 1000 с⁻¹ от объемного содержания крупных зерен (*b*)

Fig. 3. (*a*) Calculated strain to fracture versus the specific volume of large grains in the volume of the Zr-1Nb alloy with a bimodal grain size distribution (curve 1, the strain rate is equal to 100 s⁻¹; curve 2, the strain rate is equal to 1000 s⁻¹; and curve 3, an analytical prediction according to (19)); (*b*) calculated yield strength and ultimate tensile strength at a strain rate of 100 s⁻¹ and 1000 s⁻¹ versus the volume concentration of coarse grains

Влияние дисперсных частиц гидридов, сегрегированных в зернограничной фазе, на пластичность исследуемого сплава, оказалось незначительным. Это объясняется не только малым относительным объемом зернограничной фазы, но и несущественной ролью зернограничного проскальзывания в исследуемом диапазоне скоростей деформации при температуре, близкой к комнатной, в Zr-1 %Nb сплавах с бимодальной зеренной структурой.

Пределы деформации до разрушения возрастают нелинейно с ростом относительного объема крупных зерен и уменьшаются с ростом скорости деформации в диапазоне от 100 до 1000 с⁻¹, как показано на рис. 3, *a* (кривые 1 и 2). С ростом концентрации крупных зерен от 0 до 30 % объема сплава наблюдается резкий рост величины деформации до разрушения, что обусловлено уменьшением относительной длины полос локализованного сдвига в объеме ультрамелкозернистого материала. Полученные результаты для высоких скоростей деформации качественно подобны зависимостям прочностных характеристик от концентрации крупных зерен в условиях квазистатического нагружения [22]. Рациональное сочета-

ние повышенных прочностных характеристик с пластичностью при растяжении со скоростями деформации до 1000 с^{-1} может быть достигнуто в сплаве Zr–1 %Nb при отношении суммарных объемов субмикронных и крупных зерен в пропорции ~ 3:7. При достижении порогового значения формируется пространственная каркасно-подобная структура, элементами которой выступают объемы с субмикронными зернами.

Пластичность ГПУ-сплавов с бимодальным распределением зерен в зависимости от удельного объема крупных зерен может быть описана соотношением [15]

$$\varepsilon_{f\ st} = C_{stf} \exp(C_{cg} / C_{cgn}) / (1 - \frac{T - T_r}{T_{\alpha\beta} - T_r}), \quad (18)$$

где $\varepsilon_{f\ st}$ – деформация разрушения при квазистатическом растяжении; C_{cg} – удельный объем крупных зерен; C_{stf} , C_{cgn} – безразмерные постоянные материала; T – температура; T_r – комнатная температура; $T_{\alpha\beta}$ – температура фазового перехода $\alpha \rightarrow \beta$ в Zr–Nb-сплаве с определенной концентрацией Nb.

Применение указанного соотношения позволило обобщить полученные результаты компьютерного моделирования растяжения образцов сплава Zr–1 %Nb при температуре 295 К со скоростью деформации 100 с^{-1} при $C_{stf} = 0.215$, $C_{cgn} = 6$, а кривая 4 при $C_{stf} = 0.165$, $C_{cgn} = 6$ (кривая 3 на рис. 3, а).

$$\varepsilon_{f\ st} / \varepsilon_{f\ dyn} = [1 + C_{ef} \lg(\dot{\varepsilon}_{eq} / \dot{\varepsilon}_{eq0}) H(\dot{\varepsilon}_{eq} / \dot{\varepsilon}_{eq0} - 1)], \quad (19)$$

где C_{ef} – параметр материала; $\varepsilon_{f\ dyn}$ – деформация разрушения при растяжении со скоростью деформации; $H(\cdot)$ – функция Хевисайда.

Соотношение (19) применимо для описания пластичности ГПУ-сплавов Zr–1 %Nb с бимодальными зеренными структурами только при концентрации крупных зерен, превышающих ~30 % в диапазоне скоростей деформации до 1000 с^{-1} и диапазоне температур $T \leq T_{\alpha\beta}$ существования альфа-фазы Zr.

Выводы

Методом двухуровневого компьютерного моделирования исследовано влияние бимодального распределения зерен по размерам на развитие пластической деформации и разрушение сплава Zr–1 %Nb при растяжении со скоростями деформации 100 и 1000 с^{-1} .

Показано, что разработанная вычислительная модель позволяет описывать процессы деформации и разрушения сплава Zr–1 %Nb с бимодальными зеренными структурами при растяжении с макроскопическими скоростями деформации до 1000 с^{-1} .

Полученные результаты свидетельствуют о том, что повреждения, приводящие к разрушению сплава Zr–1 %Nb с бимодальными зеренными структурами при высоких скоростях растяжения, зарождаются на границе между крупными зернами и объемами с ультрамелкозернистой структурой.

Показано, что предельные деформации до разрушения возрастают нелинейно с ростом относительного объема крупных зерен и уменьшаются с ростом скорости деформации. С ростом концентрации крупных зерен от 0 до 30 % объема сплава наблюдается резкий рост величины деформации до разрушения.

Рациональное сочетание повышенных прочностных характеристик с пластичностью при растяжении со скоростями деформации до 1000 с^{-1} может быть дос-

тигнуто в сплаве Zr–1 %Nb при отношении суммарных объемов субмикронных и купных зерен в пропорции ~ 3:7.

Обнаружено, что влияние на пластичность сплава Zr–1 %Nb частиц гидридов с размерами 25–40 нм, сегрегированных в зернограничной фазе, оказалась незначительным.

Полученные результаты могут быть использованы при разработке ответственных конструкций ядерного энергетического оборудования из сплавов Zr–1 %Nb, модифицированных методами интенсивной пластической деформации.

ЛИТЕРАТУРА

1. Guo D., Zhang Z., Zhang G., Li M., Shi Y., Ma T., Zhang X. An extraordinary enhancement of strain hardening in fine-grained zirconium // *Materials Science and Engineering: A*. 2014. V. 591. P. 167–172. DOI: 10.1016/j.msea.2013.10.086.
2. Vazquez C.A., Fortis A.M. Mechanical Tests and Microstructural Characterization of Hydrided Zr-1 wt% Nb // *Procedia Materials Science*. 2012. V. 1. P. 520–527. DOI: 10.1016/j.mspro.2012.06.070.
3. Kim H.G., Park S.Y., Lee M.H., Jeong Y.H., Kim S.D. Corrosion and microstructural characteristics of Zr–Nb alloys with different Nb contents // *Journal of Nuclear Materials*. 2008. V. 373(1-3). P. 429–432. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2007.05.035.
4. Sharkeev Y.P., Vavilov V.P., Skripnyak V.A., Legostaeva E.V., Eroshenko A.Y., Belyavskaya O.A., Ustinov A.M., Klopotov A.A., Chulkov A.O., Kozulin A.A., Skrypnyak V.V., Zhilyakov A. Yu., Kouznetsov V.P., Kuimova M.V. Research on the processes of deformation and failure in coarse- and ultrafine-grain states of Zr–Nb alloys by digital image correlation and infrared thermography // *Materials Science and Engineering: A*. 2020. V. 784. Art. 139203. DOI: 10.1016/j.msea.2020.139203.
5. Chen Y., Hjelen J., Roven H.J. Application of EBSD technique to ultrafine grained and nanostructured materials processed by severe plastic deformation: Sample preparation, parameters optimization and analysis // *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*. 2012. V. 22(8). P. 1801–1809. DOI: 10.1016/s1003-6326(11)61390-3.
6. Behera A.N., Chaudhuri A., Kapoor R., Chakravarty J.K., Suwas S. High temperature deformation behavior of Nb–1 wt. % Zr alloy // *Materials and Design*. 2016. V. 92. P.750–759. DOI: 10.1016/j.matdes.2015.12.077.
7. Raesinia B., Sinclair C.W., Poole W.J., and Tome C.N. On the impact of grain size distribution on the plastic behaviour of polycrystalline metals // *Materials Science and Engineering: A*. 2008. V. 16. 025001. DOI: 10.1088/0965-0393/16/2/025001.
8. Kumar K., Szpunar J.A. EBSD studies on microstructure and crystallographic orientation of δ -hydrides in Zircaloy-4, Zr–1% Nb and Zr–2.5% Nb // *Materials Science and Engineering: A*. 2011. V. 528(21). P. 6366–6374. DOI:10.1016/j.msea.2011.05.022.
9. Yang H., Kano S., Shen J., McGrady J., Zhao Z., Duan Z., Abe H. On the strength-hardness relationships in a Zr–Nb alloy plate with bimodal basal texture microstructure // *Materials Science and Engineering: A*. 2018. V. 732. P. 333–340. DOI: 10.1016/j.msea.2018.07.028.
10. Wang Y.M., Chen M.W., Zhou F.H., Ma E. High tensile ductility in a nanostructured metal // *Nature*. 2002. V. 419. P. 912–5. DOI: 10.1038/nature01133.
11. Yang H.L., Matsukawa Y., Kano S., Duan Z.G., Murakami K., Abe H. Investigation on microstructural evolution and hardening mechanism in dilute Zr–Nb binary alloys // *Journal of Nuclear Materials*. 2016. V. 481. P. 117–124. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2016.09.016.
12. Kapoor R., Sarkar A., Singh J., Samajdar I., Raabe D. Effect of strain rate on twinning in a Zr alloy // *Scripta Materialia*. 2014. V. 74. P. 72–75. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2013.10.025.
13. Puls M.P. Properties of Bulk Zirconium Hydrides // *Engineering Materials*. 2012. P. 7–52. DOI: 10.1007/978-1-4471-4195-2_2.
14. Skripnyak V.A., Skripnyak V.V., Skripnyak E.G., Skripnyak N.V. Modelling of the mechanical response of Zr–Nb and Ti–Nb alloys in a wide temperature range // *International Journal of Mechanics and Materials in Design*. 2019. DOI: 10.1007/s10999-019-09447-z.

15. Skripnyak V.A., Skripnyak N.V., Skripnyak E.G., Skripnyak V.V. (2017). Influence of grain size distribution on the mechanical behavior of light alloys in wide range of strain rates // Proceedings of the 7th International Conference on Mechanics and Materials in Design, Albufeira/Portugal 11–15 June 2017. DOI: 10.1063/1.4971664.
16. Neilsen K.L., Tvergaard V. Ductile shear failure or plug failure of spot welds modelled by modified Gurson model // Eng. Fract. Mech. 2010. V. 77. P. 1031–1047. DOI: 10.1016/j.engfracmech.2010.02.031.
17. Tvergaard V. Study of localization in a void-sheet under stress states near pure shear // Int. J. Solids Struct. 2015. V. 75–76. P. 134–142. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2015.08.008.
18. Souza A.C., Rossi J.L., Tsakirooulos P., Martinez L.G., Grandini C.R., Ceoni F.C., Mucsi C.S., Correa H.P.S. Preparation and Melting of Zr-1.0Nb Alloy // Materials Science Forum. 2016. V. 869. P. 578–584. DOI: 10.4028/www.scientific.net/msf.869.578.
19. Harte A., Griffiths M., Preuss M. The characterisation of second phases in the Zr–Nb and Zr–Nb–Sn–Fe alloys: A critical review. *Journal of Nuclear Materials*. 2018. V. 505. P. 227–239. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2018.03.030.
20. Verleysen P., Peirs J. Quasi-static and high strain rate fracture behaviour of Ti6Al4V // Int. J. Impact Eng. 2017. V. 108. P. 370–388. DOI: 10.1016/j.ijimpeng.2017.03.001.
21. Frost H.J., Ashby M.F. Deformation-Mechanism Maps. Oxford, UK: Pergamon Press, 1982.
22. Shi Y., Li M., Guo D., Ma T., Zhang Z., Zhang G., Zhang X. Tailoring grain size distribution for optimizing strength and ductility of multi-modal Zr // Materials Letters. 2013. V. 108. P. 228–230. DOI: 10.1016/j.matlet.2013.07.001.

Статья поступила 02.05.2020 г.

Skripnyak N.V., Iokhim K.V. (2020) EFFECT OF GRAIN SIZE DISTRIBUTION ON THE STRENGTH AND STRAIN PROPERTIES OF Zr-Nb ALLOYS UNDER TENSION AT HIGH STRAIN RATES *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 65. pp. 124–136

DOI 10.17223/19988621/65/10

Keywords: evolution of damages, grain size distribution, zirconium-niobium alloys, high strain rate.

Two-level computer simulation is used to study the effect of bimodal grain size distribution on the plastic flow, damage evolution, and fracture of Zr-Nb alloys with a hexagonal close-packed crystal lattice under tension at strain rates of 100 and 1000 s⁻¹. The developed computational model allows one to describe the strain and fracture of the Zr-1 % Nb alloy with unimodal and bimodal grain structures under tension at high macroscopic strain rates. It is shown that the damages that cause the fracture of the Zr-1 % Nb alloy arise at the boundaries between coarse grains and volumes with an ultrafine-grained structure at high tensile strain rates.

A sharp increase in the strain to fracture and a smooth decrease of the yield strength and tensile strength of the Zr-1 % Nb alloy are observed at increasing volume concentration of large grains from 0 to 30 %. A rational combination of the increased yield strength and tensile strength with satisfactory ductility for strain rates ranging from 100 to 1000 s⁻¹ can be achieved in the Zr-1 % Nb alloy when the ratio of the volume of submicron grains to the volume of coarse grains is about 3:7. Numerical simulation results show an insignificant impact of the concentration of dispersed particles of zirconium hydrides with sizes varying from 25 to 40 nm segregated in a grain boundary phase on the tensile strength of the Zr-1 % Nb alloys and on the strain to failure in the studied range of strain rates and temperature.

Financial support. This work was supported by the Russian Science Foundation (RSF) (project No. 18-71-00117). The authors are grateful for the support of this research.

Nataliya V. SKRIPNYAK (Candidate of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: natali.skrp@mail.ru

Kristina V. IOKHIM (Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: iokhim.k@mail.ru

REFERENCE

1. Guo D., Zhang Z., Zhang G., Li M., Shi Y., Ma T., Zhang X. (2014) An extraordinary enhancement of strain hardening in fine-grained zirconium. *Materials Science and Engineering: A*. 591. pp. 167–172. DOI: 10.1016/j.msea.2013.10.086.
2. Vazquez C.A., Fortis A.M. (2012) Mechanical tests and microstructural characterization of hydrided Zr-1 wt% Nb. *Procedia Materials Science*. 1. pp. 520–527. DOI: 10.1016/j.mspro.2012.06.070.
3. Kim H.G., Park S.Y., Lee M.H., Jeong Y.H., Kim S.D. (2008) Corrosion and microstructural characteristics of Zr–Nb alloys with different Nb contents. *Journal of Nuclear Materials*. 373(1-3). pp. 429–432. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2007.05.035.
4. Sharkeev Y.P., Vavilov V.P., Skripnyak V.A., Legostaeva E.V., Eroshenko A.Y., Belyavskaya O.A., Ustinov A.M., Klopotov A.A., Chulkov A.O., Kozulin A.A., Skripnyak V.V., Zhilyakov A.Yu., Kouznetsov V.P., Kuimova M.V. (2020) Research on the processes of deformation and failure in coarse- and ultrafine-grain states of Zr–Nb alloys by digital image correlation and infrared thermography. *Materials Science and Engineering: A*. 139203. DOI: 10.1016/j.msea.2020.139203.
5. Chen Y., Hjelen J., Roven H.J. (2012) Application of EBSD technique to ultrafine grained and nanostructured materials processed by severe plastic deformation: Sample preparation, parameters optimization and analysis. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*. 22(8). pp. 1801–1809. DOI: 10.1016/s1003-6326(11)61390-3.
6. Behera A.N., Chaudhuri A., Kapoor R., Chakravarty J.K., Suwas S. (2016) High temperature deformation behavior of Nb–1 wt. % Zr alloy. *Materials and Design*. 92. pp. 750–759. DOI: 10.1016/j.matdes.2015.12.077.
7. Raesinia B., Sinclair C.W., Poole W.J., Tome C.N. (2008) On the impact of grain size distribution on the plastic behaviour of polycrystalline metals. *Materials Science and Engineering: A*. 16. 025001. DOI: 10.1088/0965-0393/16/2/025001.
8. Kumar K., Szpunar J.A. (2011) EBSD studies on microstructure and crystallographic orientation of δ -hydrides in Zircaloy-4, Zr–1% Nb and Zr–2.5% Nb. *Materials Science and Engineering: A*. 528(21). pp. 6366–6374. DOI: 10.1016/j.msea.2011.05.022.
9. Yang H., Kano S., Shen J., McGrady J., Zhao Z., Duan Z., Abe H. (2018) On the strength-hardness relationships in a Zr–Nb alloy plate with bimodal basal texture microstructure. *Materials Science and Engineering: A*. 732. pp. 333–340. DOI: 10.1016/j.msea.2018.07.028.
10. Wang Y.M., Chen M.W., Zhou F.H., Ma E. (2002) High tensile ductility in a nanostructured metal. *Nature*. 419. pp. 912–915. DOI: 10.1038/nature01133.
11. Yang H.L., Matsukawa Y., Kano S., Duan Z.G., Murakami K., Abe H. (2016) Investigation on microstructural evolution and hardening mechanism in dilute Zr–Nb binary alloys. *Journal of Nuclear Materials*. 481. pp. 117–124. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2016.09.016.
12. Kapoor R., Sarkar A., Singh J., Samajdar I., Raabe D. (2014) Effect of strain rate on twinning in a Zr alloy. *Scripta Materialia*. 74. pp. 72–75. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2013.10.025.
13. Puls M.P. (2012) Properties of bulk zirconium hydrides. *Engineering Materials*. pp. 7–52. DOI: 10.1007/978-1-4471-4195-2_2.
14. Skripnyak V.A., Skripnyak V.V., Skripnyak E.G., Skripnyak N.V. (2019) Modelling of the mechanical response of Zr–Nb and Ti–Nb alloys in a wide temperature range. *International Journal of Mechanics and Materials in Design*. 16. pp. 215–224. DOI: 10.1007/s10999-019-09447-z.
15. Skripnyak V.A., Skripnyak N.V., Skripnyak E.G., Skripnyak V.V. (2017) Influence of grain size distribution on the mechanical behavior of light alloys in wide range of strain rates. *Proceedings of the 7th International Conference on Mechanics and Materials in Design*. DOI: 10.1063/1.4971664.
16. Neilsen K.L., Tvergaard V. (2010) Ductile shear failure or plug failure of spot welds modelled by modified Gurson model. *Engineering Fracture Mechanics*. 77. pp. 1031–1047. DOI: 10.1016/j.engfracmech.2010.02.031.
17. Tvergaard V. (2015) Study of localization in a void-sheet under stress states near pure shear. *International Journal of Solids and Structures*. 75-76. pp. 134–142. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2015.08.008.

18. Souza A.C., Rossi J.L., Tsakiroopoulos P., Martinez L.G., Grandini C.R., Ceoni F.C., Mucsi C.S., Correa H.P.S. (2016) Preparation and melting of Zr-1.0Nb alloy. *Materials Science Forum*. 869. pp. 578–584. DOI: 10.4028/www.scientific.net/msf.869.578.
19. Harte A., Griffiths M., Preuss M. (2018) The characterisation of second phases in the Zr-Nb and Zr-Nb-Sn-Fe alloys: A critical review. *Journal of Nuclear Materials*. 505. pp. 227–239. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2018.03.030.
20. Verleysen P., Peirs J. (2017) Quasi-static and high strain rate fracture behaviour of Ti6Al4V. *International Journal of Impact Engineering*. 108. pp. 370–388. DOI: 10.1016/j.ijimpeng.2017.03.001.
21. Frost H.J., Ashby M.F. (1982) *Deformation-Mechanism Maps*. Oxford, UK: Pergamon Press.
22. Shi Y., Li M., Guo D., Ma T., Zhang Z., Zhang G., Zhang, X. (2013) Tailoring grain size distribution for optimizing strength and ductility of multi-modal Zr. *Materials Letters*. 108. pp. 228–230. DOI: 10.1016/j.matlet.2013.07.001.

Received: May 2, 2020