冲击-斜波加载下锆的动力学特性

种涛^{1*}, 莫建军¹, 唐志平², 赵剑衡³

1. 中国工程物理研究院流体物理研究所, 绵阳 621900;

2. 中国科学技术大学近代力学系, 合肥 260023;

3. 中国工程物理研究院应用电子学研究所, 绵阳 621900

*联系人, E-mail: chongtao@mail.ustc.edu.cn

收稿日期: 2020-02-28; 接受日期: 2020-06-03; 网络出版日期: 2020-12-31

国家自然科学基金(编号: 11702276)和冲击波物理与爆轰物理国防科技重点实验室基金(编号: 6142A03192007)资助项目

摘要 本文基于磁驱动装置CQ-4完成了冲击-斜波加载实验设计, 开展了金属锆在不同加载条件下先冲击再斜波压缩新热力学路径下的动力学特性研究. 实验结果显示, 加载压力峰值约为25 GPa, 三个样品的波剖面结构依次为弹塑性转变、冲击波和斜波压缩, 当冲击加载压力在相变压力附近约10 GPa时可以获取含有明显相变特征的速度波剖面, 而冲击压力在20 GPa时冲击波覆盖相变波, 速度波剖面无法观测到10 GPa附近的双波结构. 加载压力峰值约为44 GPa, 速度波剖面无弹塑性转变和相变特征为单波结构. 结合多相状态方程和非平衡相变速率方程对锆的冲击-斜波压缩过程进行了数值模拟, 计算与实验结果吻合良好, 可以较好地模拟锆的冲击-斜波压缩实验过程.

关键词 冲击-斜波加载, 多相状态方程, 相变, 锆

PACS: 02.60.Cb, 02.70.Bf, 61.50.Ks

1 引言

现阶段材料动力学特性研究的实验技术主要有静高压、冲击和斜波加载, 由其加载特征可知三种实验技术得到的数据依次对应热力学平面中的等温线、冲击Hugoniot线和(准)等熵线. 为了深入、全面地开展材料动力学特性的研究, 还需要获取更多热力学状态的实验数据对各种物态方程理论进行鉴别, 进而探索更广泛的物态方程区域. 另外, 实际的碰撞、爆炸等动力学过程一般都不是单一的静高压、冲击或斜波压缩

过程, 而是包含两种或多种加载及卸载过程. 因此, 发展复杂加载路径的动高压实验技术, 对材料动力学特性研究具有重要的科学和工程意义.

锆金属同时具有良好的导热性、机械性能、耐腐蚀性、抗辐射能力以及吸氢能力等特征, 因此锆金属被广泛地应用于工业、医学等领域. 研究人员从实验^[1-16]和数值模拟^[17-25]两方面对锆的动力学特性开展了广泛的研究. Bridgman^[1], Jameison^[2], Zilbershtein等人^[3,4]和Xia等人^[5,6]通过静高压及X射线衍射技术发现锆在常态下为六角密堆(Hexagonal-close-packed, hcp)

引用格式: 种涛, 莫建军, 唐志平, 等. 冲击-斜波加载下锆的动力学特性. 中国科学: 物理学 力学 天文学, 2021, 51: 024601

Chong T, Mo J J, Tang Z P, et al. Kinetics of Zr under shock-ramp compression (in Chinese). Sci Sin-Phys Mech Astron, 2021, 51: 024601, doi: [10.1360/SSPMA-2020-0054](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2020-0054)

结构(α 相), 在高压下转变成六方结构(ω 相), 温度升高时(1136 K以上)转变为体心立方(Body-centered-cubic, bcc)结构(β 相). Al'tshuler等人^[7,8]、McQueen等人^[9]和Kutsar等人^[10]基于冲击加载实验开展了锆的相变动力学研究, 并得到了多波结构波剖面, 理论分析了锆的 α - ω 相变. Greeff等人^[11,12]结合冲击和斜波加载实验技术对不同纯度的锆进行了相变研究, 斜波压缩实验同时观测到了两次相变, 实验结果显示锆的氧含量对其 α - ω 相变压力有影响, 而对于 ω - β 相变压力无影响. 肖大武^[13]、李英华^[14]和种涛等人^[15,16]分别利用SHPB、轻气炮和磁驱动斜波加载装置对锆的本构和 α - ω 相变开展了相关研究.

目前研究人员已分别从等温、绝热和(准)等熵三个热力学路径对锆的相变动力学开展了实验研究, 而复杂加载路径下的实验研究还未公开报道. 本文基于磁驱动装置CQ-4完成了冲击-斜波加载实验设计, 开展了金属锆复杂热力学路径下的动力学特性研究. 利用考虑相变的多相本构关系及非平衡相变速率模型对实验过程进行了数值模拟, 计算结果与冲击-斜波加载实验结果吻合良好.

2 实验负载区设计

本文实验在磁驱动加载装置CQ-4上开展, CQ-4加载原理见文献^[16,26]. 装置回路放电后, 作用于极板上的磁压力驱动极板加速运动, 加速一段距离后以实验设计的速度(u_0)撞击样品, 对样品进行冲击压缩, 使得样品热力学状态从初始态(T_0, V_0)“跳跃”到新的状态(T_1, V_1); 样品与极板接触后, 后续的磁压力 P 通过极板

传入样品内部, 此时样品进入斜波加载阶段, 样品热力学状态从“初态”(T_1, V_1)开始连续变化, 加载到压力峰值后卸载.

实验设计时, 有以下几个问题: 首先是极板构型及尺寸和样品尺寸, 既要满足实验峰值压力, 又要避免样品在第二次斜波加载过程中形成冲击波, 还要样品中心有一定的一维区域, 这里的设计与斜波压缩实验类似, 可参考文献^[15]; 其次, 撞击速度的控制, 当样品和极板材料确定后, 冲击压缩后的状态由撞击速度决定; 当极板构型及尺寸, 加载电流确定后, 极板后表面速度波形基本确定, 这时撞击速度主要由撞击位置决定, 即极板飞行的距离; 最后, 撞击时刻的设计, 本实验中极板与样品撞击时刻必须在加载段, 这样冲击加载之后才可能有后续的斜波加载, 若在飞片达到速度峰值之后撞击, 将不会有后续的斜波压缩段, 成为单一的冲击加载过程.

本文设计的冲击-斜波加载实验负载区见图1(a), 样品不再像斜波压缩实验直接粘贴于极板外表面, 而是平行地放置于距离极板 H_0 处, 极板飞行距离 H_0 的设计方法见图1(b), 确定实验加载压力峰值和撞击速度 u_0 后, 首先做一发预实验(与真实实验极板构型、加载条件完全相同, 无样品和窗口), 获取极板自由面速度历史波剖面 u_t (红线), 对 u_t 时间积分, 获取每时刻自由面飞行距离曲线(黑线), 在 u_t 上找到 u_0 点 A_1 , 然后找到同一时刻飞行距离曲线上的 A_2 点, 对应的飞行距离 H_0 即为实验设计值. 在与样品对应的位置放置窗口材料, 窗口与极板距离也是 H_0 . 样品和窗口中心位置放置测速探头. 需要指出, 样品后表面为自由面或加窗口的界面, 若加窗口, 窗口与样品接触面镀反射膜、另一

图1 (网络版彩图)冲击-斜波加载实验设计示意图. (a) 负载区; (b) 飞行距离设计

Figure 1 (Color online) Schematic diagram of shock-ramp wave loading experiment design. (a) Loading area; (b) design of flight distance.

面则镀增透膜; 与样品对应位置的窗口两面均镀增透膜, 极板内外两面精加工使其都达到镜面, 下方测速探头将记录撞击前极板自由面速度和撞击后极板/窗口的界面速度.

锆的冲击-斜波加载实验, 一方面探索一种新的实验加载技术, 在新的热力学路径下研究材料的动力学特性, 另一方面研究不同的冲击-斜波波形对样品后表面速度波剖面的影响. 较低加载压力、三样品shot642实验极板宽度为10 mm, 上极板和两个锆样品距离为0.3 mm, 下极板与窗口和样品距离为0.1 mm, 不同的撞击位置导致不同的撞击速度. 较高加载压力、单样品shot643实验极板宽度为8 mm, 极板和锆样品距离为0.5 mm. 四个样品直径均为8 mm. 具体实验条件见表1.

3 结果与分析

三样品实验shot642测得的锆样品和极板后表面速度如图2(a)所示, 分两组分析. 铝极板外表面和1.142 mm锆样品自由面速度为一组, 极板外表面速度波剖面在约864.8 m/s处出现拐折, 速度下降约50%, 这是由于在拐折点与LiF窗口发生撞击, 之后极板和窗口未分离一起运动, 撞击之前实验测量速度为极板自由面速度, 撞击之后为铝/窗口界面速度, 而LiF和铝声阻抗近似相等, 所以在撞击点附近界面速度约为自由面速度的50%. 由冲击动力学关系、铝和LiF的动力学模

型及参数, 撞击速度 u_0 约864.8 m/s时撞击压力约为9.0 GPa, 由图2(b)得撞击位置约为0.09 mm, 与设计基本一致. 之后进入斜波加载, 时间约为230 ns. 对于1.142 mm锆样品, 加载段分为先冲击后斜波加载两段, 两段拐点的特征速度 u_{SR} 约为731.5 m/s, 对应的压力约为10.2 GPa. 由于冲击压力较低, 加载起始有明显的弹塑性转变, 斜波加载开始时锆的相变还未完成, 斜波加载段有明显的双波结构. 锆自由面峰值速度约为1462.0 m/s, 对应压力约为22.7 GPa. 对于上面两个锆样品, 由于撞击位置靠后, 冲击加载段之后斜波加载时间很短, 约60 ns, 冲击-斜波拐点的特征速度 u_{SR} 约为1333.7 m/s, 对应压力约为20.5 GPa, 由于冲击压力大于锆两相混合区压力, 故波剖面无含有相变特征的双波结构. 锆自由面速度峰值约为1607.0 m/s, 对应压力约为25.5 GPa, 比下方锆极板的峰值压力高出约3 GPa, 这是由于上下锆样品经历的热力学路径不同, 虽然上下极板内表面加载相同, 但是上极板和锆样品撞击速度较大, 冲击加载过程带来的热效应更大, 两种情况冲击压力相差1倍, 斜波加载过程热效应很小, 因此最终状态压力的差异是温升差异造成的. 在卸载段三个锆样品都观测到了明显的层裂现象, 层裂强度 $\sigma_s = \rho_0 C_0 \Delta u / (1 + C_b / C_0)$ ^[27], 其中 Δu 为回拉速度, 计算可得锆的层裂强度约为2.7 GPa.

单样品实验shot643测得的锆样品和极板后表面速度如图3(a)所示, 由铝极板速度波形可得实验撞击

表1 实验条件

Table 1 Experimental condition

实验编号	位置	材料	尺寸 (mm)	飞行距离 H_0 (mm)
Shot642	极板_左上	纯铝	1.008×10.0 (厚×宽)	0.3
	样品_左上	锆	Φ8.0×1.408	
	极板_右上	纯铝	1.009×10.0 (厚×宽)	
	样品_右上	锆	Φ8.0×1.743	
	极板_左下	纯铝	1.006×10.0 (厚×宽)	0.1
	样品_左下	锆	Φ8.0×1.142	
	极板_右下	纯铝	1.005×10.0 (厚×宽)	
	窗口_右下	LiF	Φ8.0×4.0	
Shot643	极板_上	纯铝	1.015×8.0 (厚×宽)	0.5
	样品_上	锆	Φ8.0×1.773	
	极板_下	纯铝	0.997×8.0 (厚×宽)	
	窗口_下	LiF	Φ8.0×4.0

图2 (网络版彩图) shot642铅冲击-斜波加载实验结果. (a) 实验测量速度剖面; (b) 撞击位置

Figure 2 (Color online) Shock-ramp wave compression experimental data of shot642. (a) Experimental measured velocities of Zr; (b) location of impact.

速度约为2656.4 m/s, 撞击压力约为34.2 GPa, 之后有约80 ns斜波加载. 锆的速度波剖面为典型的冲击加载波形, 自由面速度峰值约为2481.6 m/s, 对应压力约为44.2 GPa, 由于冲击压力较高, 冲击波直接覆盖弹性波、塑性波和相变波, 成为单波结构. 卸载段也有明显的层裂特征波形, 层裂强度约为2.87 GPa. 速度波剖面上的特征拐点及压力等见表2.

4 数值模拟与分析

本实验中锆样品在冲击-斜波压缩过程中依次经历了弹塑性转变和相变, 要数值模拟这一系列动力学过程, 需要三个守恒方程和材料的状态方程及本构关系, 外加初始条件和边界条件. 由于实验过程中发生

了相变, 数值模拟中需要描述相变过程的相变动力学方程(相变速率方程), 材料状态方程和本构关系应该是考虑相变的多相状态方程和多相本构. 程序输入边界为由电极板外表面速度计算的内表面压力历史.

相变速率模型采用唐志平^[28]在Hayes^[29]模型基础上提出的改进模型, 其物理意义是相变速率与相变驱动力、可供其生长的空间成正比, 1相向2相转变的演化方程为

$$\dot{\xi} = H \frac{1}{rkT} \frac{G_1 - G_2}{\tau},$$

$$H = \begin{cases} 1 - \xi, & G_1 - G_2 \geq D_{12}, \\ 0, & -D_{21} < G_1 - G_2 < D_{12}, \\ \xi, & G_1 - G_2 \leq -D_{21}, \end{cases} \quad (1)$$

式中, ξ 为新相的质量分数, H 为可供初始相相变的生

图3 (网络版彩图) shot643铅冲击-斜波加载实验速度波剖面. (a) 实验测量速度剖面; (b) 撞击位置

Figure 3 (Color online) Shock-ramp wave compression experimental data of shot643. (a) Experimental measured velocities of Zr; (b) location of impact.

表2 速度波剖面上的特征值

Table 2 Characteristic values on velocity profiles

特征值	Zr_1.142 mm	Zr_1.408 mm	Zr_1.743 mm	Zr_1.773 mm
u_0 (m/s)	864.8	1750.0	1750.0	2656.0
u_{SR} (m/s)	731.5	1333.7	1333.7	—
P_{SR} (GPa)	10.2	20.5	20.5	—
u_M (m/s)	1462.0	1607.0	1607.0	2481.6
P_M (GPa)	22.7	25.5	25.5	44.2
Δu (m/s)	212.8	211.0	212.3	232.2
σ_s (GPa)	2.71	2.69	2.71	2.96

长空间, G_1-G_2 为相变驱动力, r 为单位体积中的原子数, τ 是相变弛豫时间(它决定相变建立平衡需要的时间), k 为Boltzmann常数, T 为当前温度, G 为Gibbs自由能, D_{12} 为初始相向新相转变的能障, D_{21} 为新相向初始相转变的能障.

式(1)相变速率方程是材料各相Gibbs自由能的函数, 由热力学理论可知Gibbs自由能也可以由Helmholtz自由能得到. 铅在给定比容 V 和温度 T 时的Helmholtz自由能^[16,30]为

$$F(V, T) = \phi_0(V) + F_{\text{ion}}(V, T) + F_{\text{el}}(V, T), \quad (2)$$

其中右边三项依次为冷能、离子热振动自由能和电子热激发自由能. 各相具体表达式见文献[16,30]. 铅的Helmholtz自由能参数见表3.

Chong等人^[31]对Hayes多相状态方程在冲击和斜波压缩实验中的适用性进行了分析和讨论, 指出斜波压缩是一连续过程, 体模量随着材料的压力和温度状

态连续变化, 体模量不再是常数而是当时热力学状态的函数, 并借鉴Murnaghan状态方程对Hayes模型中的体模量进行了压力项一阶修正. 利用相变动力学标准材料铁的冲击和斜波压缩相变实验对修正的Hayes多相模型进行了验证, 计算与实验结果显示修正后的模型同时适用于冲击和斜波加载动力学过程. 本文实验过程同时包含冲击和斜波压缩热力学过程, 故多相状态方程采用修正后的Hayes多相模型, 其压力和温度具体计算形式^[31]为

$$\begin{cases} \dot{p} = (K_{\xi 0} + K'_{\xi 0} P)(\dot{\epsilon}^V - \Delta \epsilon^V \cdot \dot{\xi} - \alpha_{\xi} \dot{T}), \\ \dot{T} = -\frac{T \Delta \eta \cdot \dot{\xi} + A_T s_{ij} \dot{\gamma}_{ij}^C}{C_{p, \xi}}, \end{cases} \quad (3)$$

式中, $K_{\xi 0}$ 和 $K'_{\xi 0}$ 分别为某时刻(新相质量分数为 ξ)的初始等熵体模量、初始等熵体模量对压力的一阶导数, $\Delta \epsilon^V$ 为相变引起的体应变间断, $\dot{\epsilon}^V$ 为体积应变率, $\dot{\xi}$ 为新相质量分数变化率, $C_{p, \xi}$ 和 α_{ξ} 分别为定压比热容和体膨胀系数, A_T 为材料的塑性应变能转变为热的系数, 对于等温过程 $A_T=0$, 对于绝热过程 $A_T=0.9$.

864.8 m/s撞击实验和计算结果见图4(a), 计算结果可以很好地描述实验加载段包含的物理过程: 铅样品首先受到冲击加载, 弹塑性转变后波剖面快速上升, 达到相变条件后出现速度拐折, 电极板内表面的应力波到达铅样品后进入斜波压缩阶段, 相变继续完成, 速度开始平滑上升.

为了获取撞击速度对样品后表面速度波剖面的影响, 开展了数值模拟研究: 加载条件、极板和样品等条件都不变的情况下, 仅改变极板和样品的撞击速度, 计算的样品自由面速度波剖面见图4(b). 其中初始撞击

表3 铅的两相Helmholtz自由能参数^[16,30]

Table 3 Helmholtz free energy parameters of Zr [16,30]

参数	α 相	ω 相
V_0 (m ³ /kg)	153.7×10^{-6}	151.7×10^{-6}
θ_0 (K)	245.6	248.4
σ	0.0	0.8
γ_0	1.1	1.6
Γ (J/kg K ²)	32.1×10^{-3}	29.8×10^{-3}
κ	0.0	0.0
V^* (m ³ /kg)	152.7×10^{-6}	150.7×10^{-6}
B^* (GPa)	97.2	98.6
B_1^*	4.0	3.2
Φ_0^* (J/kg)	0	8.5925×10^3

图4 (网络版彩图)数值模拟结果. (a) 界面速度; (b) 不同撞击速度下计算得到的界面速度

Figure 4 (Color online) Numerical simulation results. (a) Calculated and experimental data; (b) calculated interface velocities with different impact velocity.

速度 $u_0=0$ m/s对应斜波压缩过程, 由图可得, 其他的速度波剖面都有速度急速上升和平滑上升两个阶段, 分别对应冲击和斜波压缩. 冲击压缩对应的波剖面都有弹塑性特征, 随着撞击速度的增加, 冲击波剖面的速度峰值逐渐提高, 但是都落到了 $u_0=0$ m/s的速度波剖面上; 进入斜波加载段后速度平滑上升, 相变完成后速度上升斜率基本一致, 但是速度峰值随着撞击速度的增加而增加.

以上的实验和计算结果可以从材料经历的热力学过程进行分析. 相变前冲击Hugoniot线和等熵线基本重合, 相变点以后冲击Hugoniot线在等熵线以上. 两个过程都是绝热的, 但是冲击时除相变潜热外还有耗散功产生的热量, 所以温度和熵增比斜波加载过程大,

相同的压缩量时, 冲击压缩获得的压力更高, 因此最终的速度峰值随着冲击速度的增加而增加. 在压力-比容平面(图5(a)), 蓝色实线为冲击-斜波压缩过程对应的热力学路径(忽略弹性段), T点对应相变起始, A点对应冲击-斜波加载的分界点. 若A点在相变混合区, 冲击部分会形成双波结构, OT为塑性波、TA为相变波, A点之后开始斜波加载继续相变, 沿有相变潜热的准等熵线上升, 准等熵线在Hugoniot线下方. 在压力-粒子速度平面, 冲击-斜波压缩过程对应的热力学路径为蓝色实线, 斜波段对应的准等熵线介于冲击Hugoniot线和等熵线之间, 相同的压力下斜波压缩对应的速度比冲击压缩大, 对应图4(a)中, 计算的冲击-斜波速度波剖面分界点都在斜波加载波剖面下方.

图5 (网络版彩图)两种平面的热力学过程. (a) 压力-比容; (b) 压力-粒子速度

Figure 5 (Color online) Thermodynamic processes in two thermodynamic planes. (a) Pressure-specific volume; (b) pressure-particle velocity.

5 结论

通过不同加载条件下锆的冲击-斜波压缩相变实验和数值模拟分析, 得到以下几点结论.

(1) 完成了磁驱动冲击-斜波加载实验设计, 开展了金属锆在不同加载条件下锆的冲击-斜波压缩相变实验, 得到了不同冲击速度下含有相变信息的自由面速度波剖面; 实验结果显示随着撞击速度的增加, 冲击波剖面的速度峰值逐渐提高, 但是都落到了 $u_0=0$ m/s 的速度波剖面上; 进入斜波加载段后速度平滑上升, 相变完成后速度上升斜率基本一致, 但是速

度峰值随着撞击速度的增加而增加.

(2) 利用修正的Hayes多相物态方程和非平衡相变速率模型对锆的冲击-斜波压缩实验进行了模拟, 数值计算可以较好地模拟锆在加载阶段的弹塑性转变、相变等物理过程.

(3) 在压力-比容平面, 锆的冲击绝热线与等熵线在相变前基本重合, 从相变起始点分离, 进入新相后等熵线在冲击绝热线下方; 当冲击压力在相变混合区时, 冲击-斜波压缩过程对应的热力学路径为两条直线和一段准等熵线, 准等熵线介于等熵线和冲击绝热线之间.

致谢 感谢中国工程物理研究院流体物理研究所吴刚、邓顺益、税荣杰、胥超和马骁在实验运行、维护和测速方面提供的巨大帮助.

参考文献

- 1 Bridgman P W. The resistance of 72 elements, alloys and compounds to 100000 kg/cm². *Proc Am Acad Arts Sci*, 1952, 81: 165
- 2 Jamieson J C. Crystal structures of titanium, zirconium, and hafnium at high pressures. *Science*, 1963, 140: 72–73
- 3 Zilbershtein V A, Nosova G I, Estrin E I. Alpha-omega transformation in titanium and zirconium. *Phys Met Metall*, 1973, 35: 128–133
- 4 Zilbershtein V A, Chistotina N P, Zharov A A, et al. Alpha-omega conversion in titanium and zirconium during shear deformation under pressure. *Fiz Met Metall*, 1975, 39: 208–217
- 5 Xia H, Parthasarathy G, Luo H, et al. Crystal structures of group IVa metals at ultrahigh pressures. *Phys Rev B*, 1990, 42: 6736–6738
- 6 Xia H, Duclos S J, Ruoff A L, et al. New high-pressure phase transition in zirconium metal. *Phys Rev Lett*, 1990, 64: 204–207
- 7 Al'tshuler L V, Bakanova A A, Dudoladov I P. Effect of electron structure on the compressibility of metals at high pressure. *Z Eksp Teor Fiz*, 1968, 53: 196
- 8 Al'tshuler L V, Bakanova A A, Dudoladov I P, et al. Shock adiabatic curves of metals. *J Appl Mech Tech Phys*, 1981, 22: 145–169
- 9 McQueen R G, Marsh S P, Taylor J W, et al. The equation of state of solids from shock wave studies. In: *High Velocity Impact Phenomena*. New York: Academic Press, 1970. 293–417
- 10 Kutsar A R, Pavlovskii M N, Kamissarov V V. Observation of a two-wave shock configuration in zirconium. *JETP Lett*, 1982, 39: 399–401
- 11 Greeff C W. Phase changes and the equation of state of Zr. *Model Simul Mater Sci Eng*, 2005, 13: 1015–1027
- 12 Rigg P A, Greeff C W, Knudson M D, et al. Influence of impurities on the α to ω phase transition in zirconium under dynamic loading conditions. *J Appl Phys*, 2010, 106: 123532
- 13 Xiao D W. Study of Dynamic Mechanical Properties and Constitutive Equation of Zirconium (in Chinese). Dissertation for Doctoral Degree. Hefei: University of Science and Technology of China, 2008 [肖大武. 锆金属动态力学性能及其本构关系研究. 博士学位论文. 合肥: 中国科学技术大学, 2008]
- 14 Li Y H. Study on Phase Transition of Zirconium under Shock Loading (in Chinese). Dissertation for Master's Degree. Mianyang: China Academy of Engineering Physics, 2006 [李英华. 锆的低压冲击相变特性研究. 硕士学位论文. 绵阳: 中国工程物理研究院, 2006]
- 15 Chong T. Preliminary Investigation on Phase Transition of Zirconium under Magnetically Driven Quasi-isentropic Compression and Electromagnetic Expansion Ring Simulation (in Chinese). Dissertation for Master's Degree. Mianyang: China Academy of Engineering Physics, 2012 [种涛. 磁驱动准等熵压缩下锆的相变特性初步研究及电磁膨胀环模拟. 硕士学位论文. 绵阳: 中国工程物理研究院, 2012]
- 16 Chong T, Wang G J, Tan F L, et al. Phase transformation kinetics of zirconium under ramp wave loading with different windows (in Chinese).

- Acta Phys Sin, 2018, 67: 070204 [种涛, 王桂吉, 谭福利, 等. 窗口声阻抗对铅相变动力学的影响. 物理学报, 2018, 67: 070204]
- 17 Cerreta E, Gray III G T, Hixson R S, et al. The influence of interstitial oxygen and peak pressure on the shock loading behavior of zirconium. [Acta Mater](#), 2005, 53: 1751–1758
- 18 Vohra Y K, Sikka S K, Chidambaram R. Electronic structure of omega phase of titanium and zirconium. [J Phys F-Met Phys](#), 1979, 9: 1771–1782
- 19 Sikka S K, Vohra Y K, Chidambaram R. Omega phase in materials. [Prog Mater Sci](#), 1982, 27: 245–310
- 20 Bakonyi I, Ebert H, Liechtenstein A I. Electronic structure and magnetic susceptibility of the different structural modifications of Ti, Zr, and Hf metals. [Phys Rev B](#), 1993, 48: 7841–7849
- 21 Ostanin S A, Trubitsin V Y. Calculation of the phase diagram of Zr in a simple model. [Phys Stat Sol B](#), 1997, 201: R9–R10
- 22 Ostanin S A, Trubitsin V Y. Calculation of the P - T phase diagram of Zr in different approximations for the exchange-correlation energy. [Phys Rev B](#), 1998, 57: 13485–13490
- 23 Jomard G, Magaud L, Pasturel A. Full-potential calculations using the generalized-gradient corrections: Structural properties of Ti, Zr and Hf under compression. [Philos Mag B](#), 1998, 77: 67–74
- 24 Jyoti G, Gupta S C. Theoretical analysis of the isostructural transition in Zr at 53 GPa. [J Phys-Condens Matter](#), 1994, 6: 10273–10278
- 25 Pinsook U, Ackland G J. Calculation of anomalous phonons and the hcp-bcc phase transition in zirconium. [Phys Rev B](#), 1999, 59: 13642–13649
- 26 Wang W, Zhang H, Yang M, et al. Shock and spall behaviors of a high specific strength steel: Effects of impact stress and microstructure. [J Appl Phys](#), 2017, 121: 135901
- 27 Wang G J, Luo B Q, Zhang X P, et al. A 4 MA, 500 ns pulsed power generator CQ-4 for characterization of material behaviors under ramp wave loading. [Rev Sci Instrum](#), 2013, 84: 015117
- 28 Tang Z P. Shock-Induced Phase Transition (in Chinese). Beijing: Science Press, 2008 [唐志平. 冲击相变. 北京: 科学出版社, 2008]
- 29 Hayes D B. Wave propagation in a condensed medium with N transforming phases: Application to solid-I-solid-II-liquid bismuth. [J Appl Phys](#), 1975, 46: 3438–3443
- 30 Zuo Q H, Harstad E N, Addessio F L, et al. A model for plastic deformation and phase transformations of zirconium under high-rate loading. [Model Simul Mater Sci Eng](#), 2006, 14: 1465–1484
- 31 Chong T, Tang Z P, Tan F L, et al. Phase transition and dynamics of iron under ramp wave compression. [Acta Mech Sin](#), 2018, 34: 902–909

Kinetics of Zr under shock-ramp compression

CHONG Tao^{1*}, MO JianJun¹, TANG ZhiPing² & ZHAO JianHeng³

¹ *Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China;*

² *Department of Modern Mechanics, University of Science and Technology of China, Hefei 260023, China;*

³ *Institute of Applied Electronics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China*

The dynamics of Zr under shock-ramp wave loading was studied with experiments and simulations. The shock-ramp wave compression experiments of Zr with different loading thermodynamics path were carried out with photonic Doppler velocimetry (PDV) and compact pulsed power generator CQ-4. The velocity wave profiles show that Zr undergoes shock and then ramp wave compression in the loading section. When the shock pressure reaches about 10 GPa, the velocity profile contains phase transition information. However, the phase transition information could not be observed when the shock pressure is up to 25 GPa. It is a single shock wave when the shock pressure is at 44 GPa. The experimental results are simulated with the Hayes multi-phase equation of state and the non-equilibrium phase transition kinetic model, which can well describe the physical processes of the elastoplastic transition and the phase transition in the loading section.

shock-ramp wave loading, multiphase equation of state, phase transition, zirconium

PACS: 02.60.Cb, 02.70.Bf, 61.50.Ks

doi: [10.1360/SSPMA-2020-0054](https://doi.org/10.1360/SSPMA-2020-0054)