

Laves相 NbCr₂/Nb 两相合金的应变补偿物理本构关系研究

张开铭, 鲁世强, 江丰建聪, 王克鲁, 邓莉萍

(南昌航空大学 航空制造工程学院, 江西 南昌 330063)

摘要: Laves相 NbCr₂/Nb 两相合金因其优良的高温力学性能而具有作为新型高温结构材料应用的潜力; 流动应力本构关系反映了合金的热变形行为。本研究基于 Laves相 NbCr₂/Nb 两相合金在 1000~1200 °C、0.001~0.1 s⁻¹ 条件下的等温恒应变速率压缩实验数据, 首次探讨了该合金在考虑变形温度对合金杨氏模量和自扩散系数影响的应变补偿物理本构关系。结果表明, 基于蠕变指数 $n=5$ 的应变补偿物理本构关系的相关系数 R 和平均绝对相对误差 AARE 分别为 0.974 和 59.3%, 说明该物理本构模型不适于表征该合金的流动应力行为; 而基于蠕变指数 n 为变量的应变补偿物理本构关系的相关系数 R 和平均绝对相对误差 AARE 分别为 0.984 和 10.6%, 说明该物理本构模型能满意地表征该合金的流动应力行为, 且其对流动应力的预测能力优于传统的 Arrhenius 本构模型。

关键词: Laves相 NbCr₂/Nb 两相合金; 应变补偿物理本构模型; 蠕变指数; 自扩散系数; 杨氏模量

中图分类号: TG146.4⁺16

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2023)08-2835-09

Laves相 NbCr₂是合金元素 Cr 与难熔金属 Nb 形成的一种金属间化合物,它具有典型的拓扑密排结构。这种金属间化合物室温硬度非常高,可达 8~9 GPa^[1-2]; 在 1200 °C时的屈服强度仍高于 600 MPa^[3], 显示出非常好的高温强度。此外,这种金属间化合物因含有大量 Cr, 故其具有优良的热腐蚀抗力和高温抗氧化性^[4-5]。但具有拓扑密排结构的 Laves相 NbCr₂原子排列紧密,空间利用率和配位数都很高,位错在晶体内滑移相当困难,从而导致其变形能力差,脆性严重,这阻碍了 Laves相 NbCr₂作为新型高温结构材料应用的进程^[6-7]。为了克服单相 NbCr₂的高脆性,肖等人^[6,8]通过细晶增韧和软第二相 Nb 协同增韧,使 Nb 含量为 77.5at%的 Laves相 NbCr₂/Nb 两相合金的平均晶粒尺寸达到约 268 nm,室温抗压强度、屈服强度和塑性应变分别达到 3174 MPa、2790 MPa 和 5.44%,有效解决了单相 NbCr₂的高脆性问题。Laves相 NbCr₂/Nb 两相合金具有高的熔点和较低的密度,它既保留了 Laves相 NbCr₂的优异高温性能,同时又通过软第二相 Nb 增韧,有效地改善了单相 NbCr₂的室温脆性,使得 Laves相 NbCr₂/Nb 两相合金有望成为能够应用在航空发动机热端部件上的重要备选材料之一^[9-11]。薛云龙等人^[12]采用真空非自耗电弧熔炼法制备了成分为 Cr-57.5Nb 的 Laves相

NbCr₂/Nb 两相合金,合金化元素 Si 的添加,改变了 Laves相含量,该合金优异的室温力学性能源于第二相强化、固溶强化和第二相增韧。邓莉萍等人^[13]基于高温热暴露和热压缩实验研究了 Laves相 NbCr₂/Nb 两相合金的热稳定性和高温力学性能,并在此基础上探讨了合金元素 Mo 和 Si 对合金热稳定性和高温力学性能的影响。结果表明,1200 °C下长时间热暴露后,合金中 Nb 基体颗粒尺寸略有增加,而 Laves相 NbCr₂颗粒尺寸变化不大,但内部孪晶密度增加;合金的高温强度随变形温度的增加和应变速率的减小而下降,主要的变形机制为 Nb 基体中位错滑移、攀移和 NbCr₂中的孪生;由于 Mo 对 Nb 基体的固溶强化效果以及 Si 取代 Laves相中 Cr 点阵位置产生反位置缺陷,使得合金的热稳定性和高温强度有所提高。

锻造是多数承力构件常用的热加工成形方法,而流动应力行为反映了合金的锻造变形加工能力,因此,构建合金流动应力本构关系非常重要,它对合理制定合金材料的锻造工艺,充分挖掘合金材料的塑性加工能力具有重要意义。在锻造变形过程中,一般会发生复杂的加工硬化、动态回复以及动态再结晶或超塑性等硬化和软化物理冶金现象,从而导致锻造过程中的流动应力行为变得复杂^[14-16]。一般

收稿日期: 2022-09-28

基金项目: 国家自然科学基金(51964034); 江西省教育厅科技项目(DA202101164)

作者简介: 张开铭,男,1998年生,硕士生,南昌航空大学航空制造工程学院,江西 南昌 330063, E-mail: 1732066723@qq.com

来说, 锻造工艺(温度、变形速率和应变)对锻造过程中发生的物理冶金行为产生重要影响, 而不同的物理冶金行为又反过来影响流动应力行为, 因此, 在锻造工艺参数与流动应力行为之间存在着复杂的非线性关系, 这种非线性关系可以用流动应力本构关系来表征^[14-15]。

流动应力本构模型主要有唯象本构模型、人工神经网络本构模型和物理本构模型^[15]。唯象本构模型主要是基于大量实验数据, 通过拟合方法来得到流动应力与宏观变形参数(变形温度、应变速率和真应变)之间的函数关系。常见的唯象本构模型主要有 Arrhenius 本构模型、Johnson-Cook 本构模型等, 其中应用最为广泛的是 Arrhenius 本构模型^[14]。国内外学者在研究钢铁^[17]、钛合金^[18]、镁合金^[19]等众多材料的本构关系时, 多基于传统的 Arrhenius 本构模型来构建合金材料的本构关系。高军等人^[20]研究了 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金在小应变(真应变 $\varepsilon \leq 0.223$)下的热变形行为, 并基于 Arrhenius 本构模型和 BP 神经网络本构模型分别建立了该合金流动应力本构关系, 结果表明, BP 神经网络本构关系具有比 Arrhenius 本构关系更好的预测能力; 吴俊慷等人^[21]基于 Arrhenius 本构模型和多元线性回归模型分别建立了 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金在大应变条件(真应变 $\varepsilon \leq 0.7$)下的流动应力本构关系, 结果表明, 多元线性回归本构关系比 Arrhenius 本构关系具有更高的预测精度。基于唯象本构模型所建立的本构关系虽然可以获得工程应用可接受的预测精度, 但这类本构模型不考虑物理冶金行为, 缺少物理冶金学上的意义^[14,22-23]; 人工神经网络作为一种机器学习算法, 具有较好的自适应性和学习能力, 可以用来建立多因素、非线性的复杂模型, 从而实现对未知数据的预测。通过人工神经网络模型建立的本构关系虽然可以获得非常高的预测精度, 但这类本构模型的流动应力与工艺参数之间的关系是隐式关系, 使用起来不方便^[24]; 而物理本构模型具有一定的物理意义, 它考虑了位错^[25]、动态回复和动态再结晶^[26]、蠕变扩散^[22,27]等物理冶金行为, 弥补了唯象本构模型的不足, 同时有效地建立了热变形过程中宏观流动应力行为与微观组织演变之间的联系。Cabrera 等人^[28]在研究中碳微合金钢热变形行为时, 考虑了变形温度对杨氏模量和自扩散系数的影响, 并在蠕变理论的基础上建立了该钢的物理本构关系, 结果表明, 建立的本构关系对预测该钢的流动应力行为具有较好的适用性。Wang 等人^[22]提出了考虑晶格扩散和晶界扩散耦合的物理本构模型, 并基于热压缩实验数据构建了 AA7050 铝合金的物理本构关

系, 结果表明, 该本构关系不仅能够表征该合金的流动应力行为, 还能反映在不同变形温度下的扩散机制。Lu 等人^[14]基于 Ti17 合金的热压缩实验数据, 构建并比较了 3 种不同的物理本构关系, 结果表明, 考虑晶格和晶界扩散耦合的修正物理本构关系对 Ti17 合金流动应力具有较好的预测能力。目前, 对 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金物理本构关系的研究鲜见到报道。

本研究基于 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金等温恒应变速率压缩实验数据, 在考虑变形温度对材料自扩散系数和杨氏模量影响的基础上, 分别建立了蠕变指数 $n=5$ 的应变补偿物理本构关系和蠕变指数 n 为变量的应变补偿物理本构关系; 对所建立的 2 个应变补偿物理本构关系进行误差分析。研究结果可为 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金锻造变形抗力计算、锻造工艺设计提供理论依据, 也可为该合金锻造变形过程有限元模拟提供基础数据。

1 实验

实验材料为 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金, 成分为 77.5Nb-22.5Cr(at%)。以 Nb 粉和 Cr 粉为原料, 通过机械合金化+热压工艺制备获得。其中, 机械合金化工艺为 400 r/min, 20 h, 热压工艺为 1250 °C, 30 min, 45 MPa。将试样加工成 $\Phi 4 \text{ mm} \times 6 \text{ mm}$ 的圆柱体试样, 在 Gleeble-3500 热模拟试验机上进行等温恒应变速率压缩实验。热压缩工艺流程如图 1 所示。变形温度分别为 1000、1050、1100、1150 和 1200 °C; 应变速率分别为 0.001、0.01 和 0.1 s⁻¹; 高度压率为 50%, 对应的真应变为 0.7。图 2 为热压缩前后试样的宏观照片。通过热模拟试验机配置的专用数据采集软件, 获得不同热压缩工艺参数下的流动应力数据。

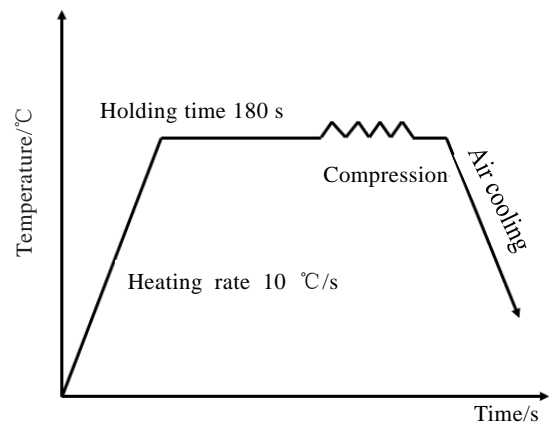


图 1 热压缩工艺流程

Fig.1 Thermal compression process

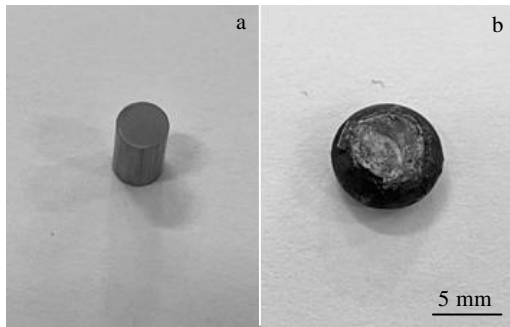


图 2 热压缩前后试样宏观照片

Fig.2 Macrophotos of specimens before (a) and after (b) thermal compression

2 结果与分析

2.1 变形微观组织观察

图 3 为 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金未变形的微观组织。从图 3 可以看出, Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金由 Nb 基体相和 NbCr₂ 颗粒相组成。NbCr₂ 颗粒相尺寸较小且大致呈等轴状, 同时, 在 NbCr₂ 颗粒相中可以观察到具有一定密度的孪晶。这是由于 NbCr₂ 颗粒相具有典型的拓扑密排结构, 其基本的堆垛单元由 2 层大原子 Nb 原子面和 2 层小原子 Cr 原子面组成, 使得合金在制备冷却过程中内应力的作用下产生原子面的错排, 从而形成了孪晶^[11]。图 4 为 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金在 1200 °C、0.001 s⁻¹ 条件下变形的微观组织。从图 4a 中可以看出, 相较于热压缩之前, Nb 基体发生了明显的塑性变形, 有些 Nb 基体晶粒因压缩变形而变成压扁的形貌; 另外, 有些 Nb 基体中的位错密度明显增加, 并且许多位错被充分激活, 形成了亚晶和位错壁, 这说明 Nb 基体在压缩变形过程中发生了动态回复。从图 4b 可以看出, NbCr₂ 颗粒相中出现了大量的孪晶。以上结果表明, Nb 基体中的变形主要是受位错滑移控制, 而 NbCr₂ 颗粒相的变形主要受孪生控制。众所周知, 具有拓扑密排结构的 NbCr₂ 原子排列紧密, 空间利用率和配位数都很高, 位错在晶体内滑移相当困难, 这就导致了孪生成为 NbCr₂ 颗粒相的主要变形机制^[13]。由此可见, Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金主要是通过 Nb 基体的位错滑移和 NbCr₂ 相的孪生两种变形机制的共同作用而获得大的塑性变形能力^[13,21]。

2.2 蠕变指数 $n=5$ 的应变补偿物理本构关系

考虑到热变形过程中变形温度对合金自扩散系数 D 和杨氏模量 E 的影响, Cabrera 等^[23,28-29]提出了蠕变指数 $n=5$ 的物理本构模型来描述热变形过程中的流动应力行为, 其表达式为式 (1) 所示。



图 3 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金未变形的微观组织

Fig.3 Microstructure of undeformed Laves phase NbCr₂/Nb dual-phase alloy



图 4 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金在 1200 °C、0.001 s⁻¹ 条件下变形的微观组织

Fig.4 Microstructure at different positions of Laves phase NbCr₂/Nb dual-phase alloy deformed at 1200 °C and 0.001 s⁻¹: (a) subgrains and dislocation wall; (b) twin in NbCr₂

$$\frac{\dot{\epsilon}}{D(T)} = B \left[\sinh(\alpha\sigma / E(T)) \right]^5 \quad (1)$$

式中： $\dot{\epsilon}$ 为应变速率(s^{-1})； σ 为流动应力(MPa)； T 为变形温度(K)， α 和 B 为与材料有关的常数； $E(T)$ 和 $D(T)$ 分别为杨氏模量和自扩散系数与变形温度 T 的函数，其表达式分别为式 (2) 和式 (3) 所示。

$$E(T) = E_0 \left[1 + \frac{T_m}{G_0} \frac{dG}{dT} \frac{(T - 300)}{T_m} \right] \quad (2)$$

$$D(T) = D_0 \exp\left(\frac{-Q_{sd}}{RT}\right) \quad (3)$$

式中， E_0 和 G_0 分别表示材料在 300 K 时的杨氏模量 (MPa) 和剪切模量 (MPa)； G 是剪切模量 (MPa)， T_m 为材料的熔点； D_0 为扩散常数 (m^2/s)； Q_{sd} 为自扩散激活能(J/mol)； R 为气体常数，其值为 8.314 J/(mol K)。

Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金的相关材料参数如表 1 所示。将表 1 中的相关参数代入式 (2)、(3)，可确定出合金的杨氏模量 E 和自扩散系数 D 与变形温度之间的关系如式 (4) 和式 (5) 所示。

$$E(T) = 4.43 \times 10^4 \quad (4)$$

$$D(T) = 1.1 \times 10^{-4} \exp\left(\frac{-401000}{RT}\right) \quad (5)$$

Mirzadeh 等人^[27]根据式 (6) 和式 (7)，提出了一种求解材料参数 α 和 B 的方法。式中， B_1 、 B_2 、 β 和 n_1 为与材料相关的常数，而 $\alpha = \beta/n_1$ 。

$$\frac{\dot{\epsilon}}{D(T)} = B_1 \exp\left(\beta \frac{\sigma}{E(T)}\right) \quad (6)$$

$$\frac{\dot{\epsilon}}{D(T)} = B_2 (\sigma/E(T))^{n_1} \quad (7)$$

现以真应变 0.7 为例，来介绍求解材料参数 α 和 B 的过程。分别对式 (6) 和式 (7) 两边同时取对数，可得：

$$\ln\left(\frac{\dot{\epsilon}}{D(T)}\right) = \beta \frac{\sigma}{E(T)} + \ln B_1 \quad (8)$$

$$\ln\left(\frac{\dot{\epsilon}}{D(T)}\right) = n_1 \ln\left(\frac{\sigma}{E(T)}\right) + \ln B_2 \quad (9)$$

根据式 (8)、(9) 可知， β 和 n_1 的值分别为 $\ln(\dot{\epsilon}/E(T)) - \sigma/E(T)$ 和 $\ln(\dot{\epsilon}/D(T)) - \ln(\sigma/E(T))$ 线性拟

表 1 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金相关材料参数

| $D_0/m^2 s^{-1}$ | $Q_{sd}/J mol^{-1}$ | E_0/MPa | T_m/K | $\frac{T_m}{G_0} \frac{dG}{dT}$ |
|----------------------|---------------------|-----------|---------|---------------------------------|
| 1.1×10^{-4} | 401000 | 44300 | 2043 | 0 |

合线的斜率。由 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金压缩实验数据，可绘制出 $\ln(\dot{\epsilon}/D(T)) - \sigma/E(T)$ 和 $\ln(\dot{\epsilon}/D(T)) - \ln(\sigma/E(T))$ 之间的散点图，其结果如图 5a 和 5b 所示；对此散点进行线性拟合可获得拟合线的斜率，由此可确定出 $\beta = 761.577$ ， $n_1 = 2.998$ 。因此可求出在真应变为 0.7 时的 $\alpha = \beta/n_1 = 254.028$ 。

此外，根据式 (1)，由 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金压缩实验数据可绘制出 $(\dot{\epsilon}/D(T))^{1/5} - \sinh(\alpha\sigma/E(T))$ 之间的散点图，并对散点进行截距为 0 的线性($y=kx+0$)拟合，结果如图 6 所示，拟合直线的斜率即为 $B^{1/5}$ 。因此，可确定出 $B^{1/5} = 705.786$ ，即， $B = 1.751 \times 10^{14}$ 。

将参数 α 和 B 的值代入式 (1)，可确定出在蠕变指数 $n=5$ 的情况下，Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金在真应变 0.7 时的物理本构关系为：

$$\sigma_{0.7} = \frac{E(T)}{254.028} \operatorname{arcsinh}\left\{\exp\left[\frac{\ln(\dot{\epsilon}/D(T)) - 32.797}{5}\right]\right\} \quad (10)$$

式 (10) 仅用于预测真应变为 0.7 时的流动应力。为了进一步预测不同变形温度、应变速率、真应变下的流动应力，采用上述真应变为 0.7 条件下各参数计算方法，可求解出不同真应变下的材料参数 α 和 $\ln B$ ，其结果如表 2 所示。对表 2 中的各材料参数分别与真应变进行 2~10 次多项式拟合，结果发现 6 次多项式拟合回归精度最佳，其拟合曲线如图 7 所示，相应的拟

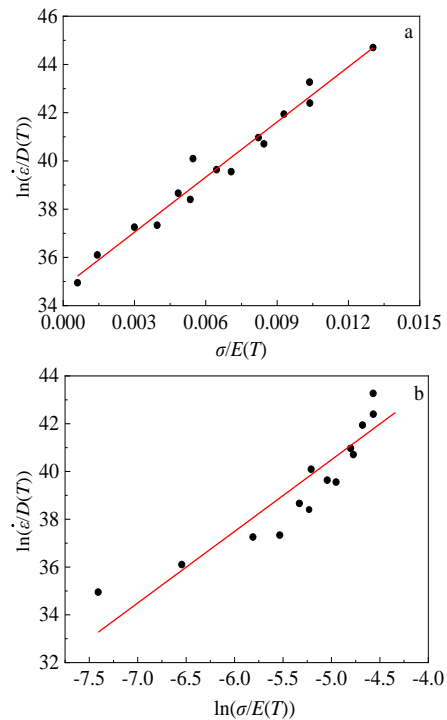


图 5 不同变量之间的线性拟合关系

Fig.5 Linear fitting relationship between different variables: (a) $\ln(\dot{\epsilon}/D(T)) - \sigma/E(T)$ and (b) $\ln(\dot{\epsilon}/D(T)) - \ln(\sigma/E(T))$

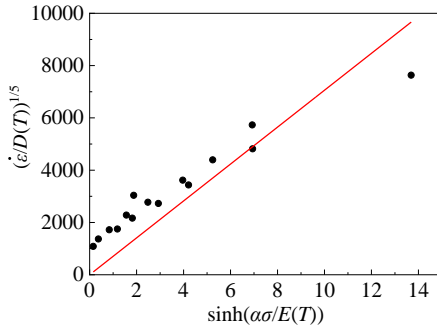


图 6 $(\dot{\epsilon}/D(T))^{1/5}$ 和 $\sinh(\alpha\sigma/E(T))$ 之间的线性拟合关系

Fig.6 Linear fitting relationship between $(\dot{\epsilon}/D(T))^{1/5}$ and $\sinh(\alpha\sigma/E(T))$

表 2 不同真应变下的参数 α 和 $\ln B$

Table 2 Parameters α and $\ln B$ under different true strains

| ϵ | α | $\ln B$ |
|------------|----------|---------|
| 0.05 | 126.278 | 35.620 |
| 0.1 | 114.849 | 35.569 |
| 0.15 | 118.920 | 35.653 |
| 0.2 | 126.396 | 35.634 |
| 0.25 | 134.851 | 35.524 |
| 0.3 | 143.320 | 35.367 |
| 0.35 | 152.792 | 35.187 |
| 0.4 | 163.193 | 34.989 |
| 0.45 | 174.621 | 34.766 |
| 0.5 | 187.103 | 34.515 |
| 0.55 | 200.769 | 34.222 |
| 0.6 | 216.068 | 33.865 |
| 0.65 | 234.065 | 33.391 |
| 0.7 | 254.028 | 32.797 |

合函数如式 (11) 和式 (12) 所示, 式中各系数对应的值如表 3 所示。

$$\alpha(\epsilon) = \alpha_0 + \alpha_1\epsilon + \alpha_2\epsilon^2 + \alpha_3\epsilon^3 + \alpha_4\epsilon^4 + \alpha_5\epsilon^5 + \alpha_6\epsilon^6 \quad (11)$$

$$\ln B(\epsilon) = b_0 + b_1\epsilon + b_2\epsilon^2 + b_3\epsilon^3 + b_4\epsilon^4 + b_5\epsilon^5 + b_6\epsilon^6 \quad (12)$$

将式 (11) 和式 (12) 代入式 (1), 可得到 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金在蠕变指数 $n=5$ 时的应变补偿物理本构关系为:

$$\sigma = \frac{E(T)}{\alpha(\epsilon)} \operatorname{arcsinh} \left\{ \exp \left[\frac{\ln(\dot{\epsilon}/D(T)) - \ln B(\epsilon)}{5} \right] \right\} \quad (13)$$

2.3 蠕变指数 n 为变量的应变补偿物理本构关系

目前, 已有研究表明杨氏模量随温度的变化以及在热变形过程中微观组织演变都可能会导致蠕变指数 n 偏离理论值 5^[27,29,33]。因此, Mirzadeh 等人^[27,34-35]将蠕变指数 n 设为变量, 提出了修正的物理本构模型, 其表达式如下:

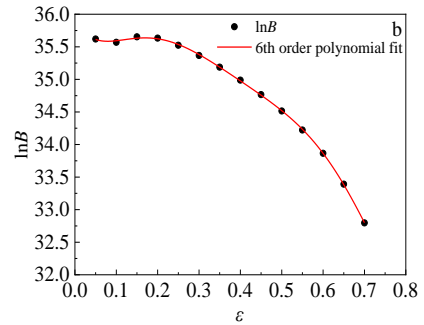
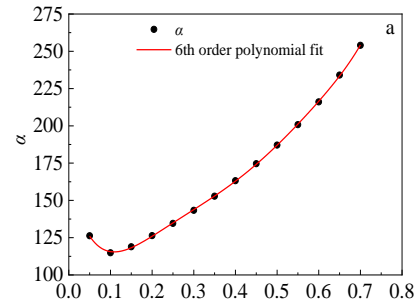


图 7 材料参数 α 和 $\ln B$ 与真应变之间关系的 6 次多项式拟合曲线

Fig.7 The 6th order polynomial fitting curves for the relationship between material parameters α , $\ln B$ and true strain ϵ : (a) α - ϵ and (b) $\ln B$ - ϵ

表 3 式 (11) 和式 (12) 中的系数

Table 3 Coefficients in Eq.(11) and Eq.(12)

| α | | $\ln B$ | |
|------------|-----------|---------|-----------|
| α_0 | 163.364 | b_0 | 35.915 |
| α_1 | -1146.610 | b_1 | -11.097 |
| α_2 | 9617.605 | b_2 | 129.904 |
| α_3 | -35577.9 | b_3 | -641.618 |
| α_4 | 70287.87 | b_4 | 1451.997 |
| α_5 | -70040.7 | b_5 | -1563.780 |
| α_6 | 27876.73 | b_6 | 639.816 |

$$\frac{\dot{\epsilon}}{D(T)} = B' [\sinh(\alpha\sigma/E(T))]^n \quad (14)$$

式中, n 为蠕变指数; B' 为与材料有关的常数。对式 (14) 两边同时取对数, 可得:

$$\ln \left[\frac{\dot{\epsilon}}{D(T)} \right] = n \ln [\sinh(\alpha\sigma/E(T))] + \ln B' \quad (15)$$

根据式 (15) 以及不同温度和应变速率条件下真应变为 0.7 时的流动应力, 可以得到

$\ln(\dot{\epsilon}/D(T)) - \ln[\sinh(\alpha\sigma)/E(T)]$ 之间的散点图如图 8 所示; 对散点进行线性拟合, 则拟合直线的斜率和截距分别为 n 和 $\ln B'$ 。由此可确定出, 在真应变为 0.7

时的 $n=2.229$, $\ln B'=37.985$ 。

将参数 n 和 $\ln B'$ 的代入式 (14), 可得到 Laves 相 NbCr_2/Nb 两相合金在蠕变指数 n 为变量情况下, 真应变为 0.7 时的物理本构关系为:

$$\sigma_{0.7} = \frac{E(T)}{254.028} \operatorname{arcsinh} \left\{ \exp \left[\frac{\ln(\dot{\epsilon}/D(T)) - 37.985}{2.229} \right] \right\} \quad (16)$$

同理, 为了能够预测出不同变形温度、应变速率、真应变下的流动应力, 采用上述方法可求解出不同真应变下的参数 n 和 $\ln B'$, 其结果如表 4 所示。对表 4 中的材料参数 n 和 $\ln B'$ 分别与真应变进行 6 次多项式拟合, 拟合曲线如图 9 所示; 相应的拟合函数如式 (17) 和式 (18) 所示, 式中各系数对应的值如表 5 所示。

$$n(\epsilon) = c_0 + c_1\epsilon + c_2\epsilon^2 + c_3\epsilon^3 + c_4\epsilon^4 + c_5\epsilon^5 + c_6\epsilon^6 \quad (17)$$

$$\ln B'(\epsilon) = d_0 + d_1\epsilon + d_2\epsilon^2 + d_3\epsilon^3 + d_4\epsilon^4 + d_5\epsilon^5 + d_6\epsilon^6 \quad (18)$$

将式 (17) 和式 (18) 代入式 (14), 可得到 Laves 相 NbCr_2/Nb 两相合金在蠕变指数 n 为变量情况下的应变补偿物理本构关系为:

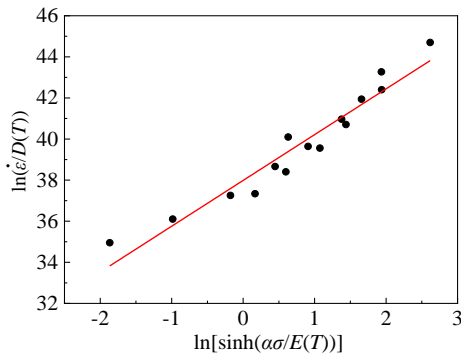


图 8 $\ln(\dot{\epsilon}/D(T))$ 和 $\ln[\sinh(\alpha\sigma/E(T))]$ 之间的线性拟合关系
Fig.8 Linear fitting relationship between $\ln(\dot{\epsilon}/D(T))$ and $\ln[\sinh(\alpha\sigma/E(T))]$

表 4 不同真应变下的参数 n 和 $\ln B'$

Table 4 Parameters n and $\ln B'$ at different true strains

| ϵ | n | $\ln B'$ |
|------------|-------|----------|
| 0.05 | 2.800 | 38.164 |
| 0.1 | 2.773 | 38.459 |
| 0.15 | 2.801 | 38.543 |
| 0.2 | 2.793 | 38.525 |
| 0.25 | 2.755 | 38.484 |
| 0.3 | 2.709 | 38.438 |
| 0.35 | 2.664 | 38.392 |
| 0.4 | 2.621 | 38.344 |
| 0.45 | 2.576 | 38.293 |
| 0.5 | 2.527 | 38.239 |
| 0.55 | 2.470 | 38.183 |
| 0.6 | 2.404 | 38.123 |
| 0.65 | 2.323 | 38.055 |
| 0.7 | 2.229 | 37.985 |

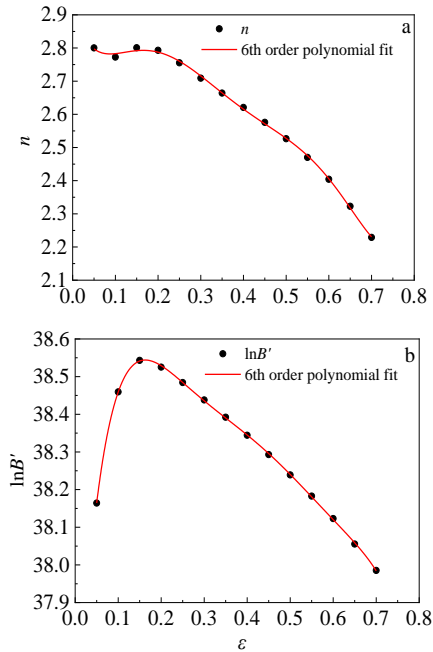


图 9 材料参数 n 和 $\ln B'$ 与真应变之间关系的 6 次多项式拟合曲线

Fig.9 The 6th order polynomial fitting curves for the relationship between material parameters n , $\ln B'$ and true strains: (a) $n-\epsilon$ and (b) $\ln B'-\epsilon$

表 5 式 (17) 和式 (18) 中的系数

Table 5 Coefficients in Eq.(17) and Eq.(18)

| n | | $\ln B'$ | |
|-------|----------|----------|----------|
| c_0 | 2.916 | d_0 | 37.470 |
| c_1 | -4.238 | d_1 | 19.629 |
| c_2 | 48.019 | d_2 | -135.548 |
| c_3 | -239.163 | d_3 | 457.021 |
| c_4 | 558.688 | d_4 | -831.524 |
| c_5 | -622.045 | d_5 | 775.578 |
| c_6 | 265.123 | d_6 | -291.272 |

$$\sigma = \frac{E(T)}{\alpha(\epsilon)} \operatorname{arcsinh} \left\{ \exp \left[\frac{\ln(\dot{\epsilon}/D(T)) - \ln B'(\epsilon)}{n(\epsilon)} \right] \right\} \quad (19)$$

2.4 应变补偿物理本构关系的验证

上述分别建立了 Laves 相 NbCr_2/Nb 两相合金在蠕变指数 $n=5$ 和蠕变指数 n 为变量情况下的两种应变补偿物理本构关系。为了检验所建立的物理本构关系对流动应力预测的精度, 现引入统计学概念的相关系数 R 和平均绝对相对误差 AARE 来评估其对流动应力的预测精度。 R 和 AARE 的计算表达式如下^[36-37]:

$$R = \frac{\sum_{i=1}^N (C_i - \bar{C})(P_i - \bar{P})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (C_i - \bar{C})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^N (P_i - \bar{P})^2}} \quad (20)$$

$$AARE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{C_i - P_i}{C_i} \right| \times 100\% \quad (21)$$

式中, N 为数据总数; C_i 和 P_i 分别为第 i 个实验值和第 i 个模型预测值; \bar{C} 和 \bar{P} 分别为实验值的平均值和模型预测值的平均值。 R 越大, 表示实验值和预测值之间的线性相关性越好^[14,38]; AARE 越小, 表示模型的预测精度越高^[14,39]。

将 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金在不同变形条件下的流动应力实验值和 2 个应变补偿物理本构关系式 (13) 和式 (19) 的预测值, 分别代入式 (20) 和式 (21), 可确定出蠕变指数 $n=5$ 的应变补偿物理本构关系 (式 (13)) 的相关系数 R 和平均绝对相对误差 AARE 分别为 0.974 和 59.3%; 蠕变指数 n 为变量的应变补偿物理本构关系 (式 (19)) 的相关系数 R 和平均绝对相对误差 AARE 分别为 0.984 和 10.6%。从冶金学角度来看, 如果热变形过程中的变形机制是由位错滑移控制的话, 则蠕变指数 $n=5$ 的应变补偿物理本构关系是可行的, 此时动态回复是唯一的变形机制^[27,40-41]。本文所建立的蠕变指数 $n=5$ 的应变补偿物理本构关系虽然具有较高的 R 值, 但其平均绝对相对误差 AARE 很大, 远高于工程应用所需的 15% 的预测精度要求^[21], 这说明 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金除了位错滑移控制的变形机制之外, 还有其它变形机制的存在, 这与图 4 的观察结果是吻合的, 即除了 Nb 基体的位错滑移控制的变形机制之外, 还存在着 NbCr₂ 相的孪生变形机制。这可能是蠕变指数 $n=5$ 的应变补偿物理本构关系的平均绝对相对误差 AARE 高达 59.3% 的原因。另外, 如前所述, Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金在变形过程中, Nb 基体发生了少许动态回复现象, 而 NbCr₂ 相出现了高密度的孪晶 (见图 4), 这种多种变形机制引起的微观组织变化会使得蠕变指数 n 偏离理论值, 即 $n \neq 5$, 此时采用蠕变指数 n 为变量的应变补偿物理本构模型是必要的^[14,27,35]。由上面的预测精度计算可知, 蠕变指数 n 为变量的应变补偿物理本构关系的平均绝对相对误差 AARE 仅为 10.6%, 显示出满意的预测精度, 这就证实了采用蠕变指数 n 为变量的应变补偿物理本构模型来构建 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金流动应力本构关系是合理的, 它能够较好地表征该合金的流动应力行为。

图 10 为蠕变指数 n 为变量的应变补偿物理本构关系对流动应力的预测值与实验值的图形化比较结果。从图 10 可以看出, 除 1000 °C 时的 0.001 和 0.1 s⁻¹ 工艺条件下的预测精度稍差外, 其余工艺条件下的流动

应力预测值与实验值吻合较好, 这进一步说明了所建立的应变补偿物理本构关系式 (19) 对 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金流动应力具有较好的预测能力。

吴俊慷等人^[21]基于 Arrhenius 本构模型和多元线性回归本构模型, 分别建立了 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金的两种唯象本构关系, 现将这 2 种唯象本构关系与本研究所建立的蠕变指数 n 为变量的应变补偿物理本构关系的预测精度 (R 和 AARE) 做进一步比较, 结果如图 11 所示。从图 11 可以看出, 物理本构关系的相关系数 R 要远高于 Arrhenius 本构关系和多元线性回归本构关系; 物理本构关系的平均绝对相对误差 AARE 介于 Arrhenius 本构关系和多元线性回归本构关系之间。这说明, 与唯象本构关系相比, 蠕变指数 n 为变量的应变补偿物理本构关系完全具有可媲美的预测能力, 并且明显优于传统的 Arrhenius 本构关系。由

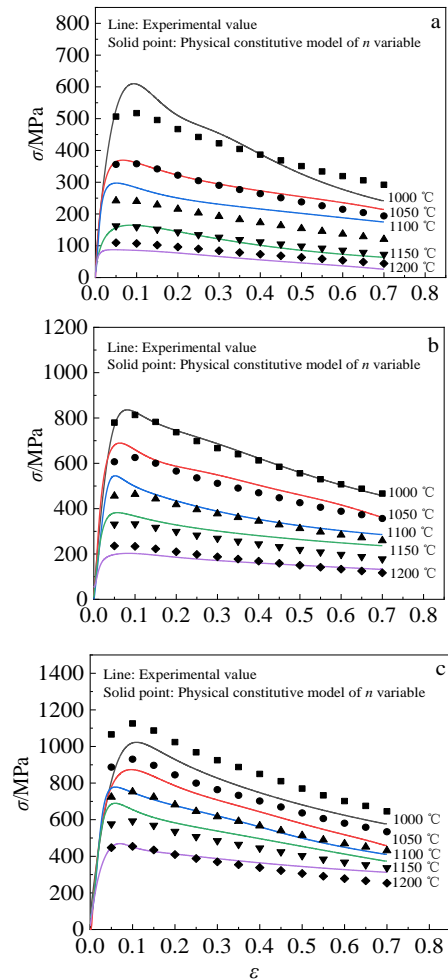


图 10 流动应力实验值与应变补偿物理本构关系预测值比较

Fig.10 Comparison of experimental values of flow stress and predicted values from strain-compensated physical constitutive model: (a) 0.001 s⁻¹, (b) 0.01 s⁻¹, and (c) 0.1 s⁻¹

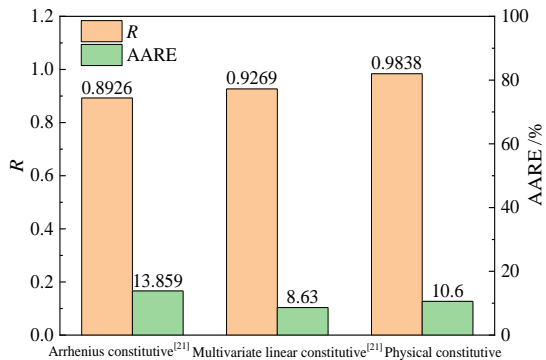


图 11 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金 3 种本构关系的精度评估对比

Fig.11 Comparison of the accuracy assessment of three constitutive models for Laves phase NbCr₂/Nb dual-phase alloy

于蠕变指数 n 为变量的物理本构关系考虑了在热变形过程中变形温度对材料物理参数的影响, 弥补了唯象本构关系的不足, 因此, 在工程应用中, 可以优先选用。

3 结 论

1) 基于蠕变指数 $n=5$ 的应变补偿物理本构关系对 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金流动应力的预测误差较大, 其相关系数 R 和平均绝对相对误差 AARE 分别为 0.974 和 59.3%。这说明, 该物理本构模型不适于表征 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金的流动应力行为。

2) 基于蠕变指数 n 为变量的应变补偿物理本构关系对 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金流动应力具有较强的预测能力, 其相关系数 R 和平均绝对相对误差 AARE 分别为 0.984 和 10.6%。这说明, 该物理本构模型能较好地表征 Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金的流动应力行为。

3) 蠕变指数 n 为变量的应变补偿物理本构模型对流动应力的预测能力可以媲美于常用的唯象本构模型, 且优于传统的 Arrhenius 本构模型, 这可为其它材料流动应力本构关系建模提供一种新方法。

4) 由于物理本构模型考虑了热变形过程中的一些物理冶金行为, 具有一定的物理意义, 因此, 在满足预测精度的前提下, 实际应用时应优先选用物理本构关系。

参考文献 References

[1] Lu Shiqiang(鲁世强), Huang Boyun(黄伯云), He Yuehui(贺跃辉) et al. *Acta Aeronautica et Astronautica Sinica*(航空学报)[J], 2003, 24(6): 565
 [2] Takeyama M, Liu C T. *Materials Science and Engineering*

A[J], 1991, 132: 61
 [3] Takasugi T, Hanada S, Yoshida M. *Materials Science and Engineering A*[J], 1995, 192-193: 805
 [4] Zhu J H, Pike L M, Liu C T et al. *Acta Materialia*[J], 1999, 47(7): 2003
 [5] Kumar K S, Liu C T. *Acta Materialia*[J], 1997, 45(9): 3671
 [6] Xiao Xuan(肖 璇). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Nanjing: Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2008
 [7] Chan K S. *Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 1996, 27(9): 2518
 [8] Xiao X, Lu S Q, Hu P et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2008, 485(1-2): 80
 [9] Zheng Haizhong(郑海忠), Lu Shiqiang(鲁世强), Xiao Xuan(肖 璇) et al. *Rare Metal Materials and Engineering* (稀有金属材料与工程)[J], 2007, 36(1): 178
 [10] Xiao Xuan(肖 璇), Lu Shiqiang(鲁世强), Ma Yanqing(马燕青) et al. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 2007, 17(11): 1761
 [11] Deng Liping(邓莉萍), Lu Shiqiang(鲁世强), Tang Binbing(汤斌兵) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2019, 48(5): 1534
 [12] Xue Yunlong(薛云龙), Wang Yuxuan(王玉轩), Sun Haohua(孙浩华) et al. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 2022, 32(10): 2999
 [13] Deng Liping(邓莉萍). *Study on Thermal Stability and High Temperature Mechanical Properties of Two-Phase NbCr₂/Nb and NbCr₂/Cr Alloy*(两相合金的热稳定性和高温力学性能研究)[D]. Nanjing: Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2018
 [14] Lu C Y, Shi J, Wang J. *Materials Characterization*[J], 2021, 181: 111 455
 [15] Lin Y C, Chen X M. *Materials and Design*[J], 2011, 32: 1733
 [16] Lu C Y, Wang J, Zhang P Z. *Journal of Materials Engineering and Performance*[J], 2021, 30: 7668
 [17] Ding Haochen(丁浩晨), Zhao Yanjun(赵艳君), Hu Zhiliu(胡治流) et al. *Journal of Netshape Forming Engineering* (精密成形工程)[J], 2021, 13(3): 97
 [18] Li C M, Huang L, Zhao M J et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2021, 814: 141 231
 [19] Wang D X, Zhu Q Q, Wei Z X et al. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2022, 908: 164 580
 [20] Gao Jun(高 军). *Hot Deformation Behaviors and Processing Parameters Optimizing of Laves Phase NbCr₂/Nb Two-phase Alloy* (Laves 相 NbCr₂/Nb 两相合金

- 的热变形行为及其工艺优化)[D]. Nanchang: Nanchang Hangkong University, 2017
- [21] Wu Junkang(吴俊慷), Lu Shiqiang(鲁世强), Deng Liping(邓莉萍) *et al. Rare Metal Materials and Engineering* (稀有金属材料与工程)[J], 2021, 50(7): 2541
- [22] Wang S, Luo J R, Hou L G *et al. Materials and Design*[J], 2016, 107: 277
- [23] Cabrera J M, Ponce J, Prado J M. *Journal of Materials Processing Technology*[J], 2003, 143-144: 403
- [24] Lu C Y, Shi J, Maitra V. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*[J], 2022, 121: 1973
- [25] Dini H, Svoboda A, Andersson N E *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2018, 710: 17
- [26] Lin Y C, Chen X M, Wen D X *et al. Computational Materials Science*[J], 2014, 83: 282
- [27] Mirzadeh H, Cabrera J M, Najafizadeh A. *Acta Materialia*[J], 2011, 59(16): 6441
- [28] Cabrera J M, Omar A A, Prado J M *et al. Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 1997, 28(11): 2233
- [29] Cabrera J M, Jonas J J, Prado J M. *Materials Science and Technology*[J], 1996, 12(7): 579
- [30] Frost H J, Ashby M F. *Deformation-Mechanism Maps: The Plasticity and Creep of Metals and Ceramics*[M]. Oxford: Pergamon Press, 1982
- [31] Pelleg J. *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics*[J], 1969, 19(157): 25
- [32] Bolef D I. *Journal of Applied Physics*[J], 1961, 32(1): 100
- [33] Ruano O A, Wadsworth J, Sherby O D. *Acta Materialia*[J], 2003, 51(12): 3617
- [34] Mirzadeh H. *Journal of Magnesium and Alloys*[J], 2014, 2(3): 225
- [35] Mirzadeh H. *Journal of Materials Engineering and Performance*[J], 2015, 24(3): 1095
- [36] Nayan N, Singh G, Murty S V S N *et al. Intermetallics*[J], 2021, 131: 107 084
- [37] Kumar S, Karmakar A, Nath S K. *Materials Today Communications*[J], 2021, 26: 101 903
- [38] Phaniraj M P, Lahiri A K. *Journal of Materials Processing Technology*[J], 2003, 141(2): 219
- [39] Samantaray D, Mandal S, Bhaduri A K. *Materials Science and Engineering A*[J], 2011, 528(15): 5204
- [40] Wei H L, Liu G Q, Zhang M H. *Materials Science and Engineering A*[J], 2014, 602: 127
- [41] Harnish S F, Padilla H A, Dantzig J A *et al. Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 2005, 36: 357

Strain-Compensated Physical Constitutive Relation of Laves Phase NbCr₂/Nb Dual-phase Alloy

Zhang Kaiming, Lu Shiqiang, Jiangfeng Jiancong, Wang Kelu, Deng Liping

(School of Aeronautical Manufacturing Engineering, Nanchang Hangkong University, Nanchang 330063, China)

Abstract: The Laves phase NbCr₂/Nb dual-phase alloy has the potential of a new high-temperature structural material due to its excellent high-temperature mechanical properties. It is known that the flow stress constitutive relationship reveals the hot deformation behavior of an alloy. In this research, the strain-compensated physical constitutive relationship of Laves phase NbCr₂/Nb dual-phase alloy with consideration of the effect of deformation temperature on the Young's modulus and self-diffusion coefficient of the alloy was explored for the first time based on its isothermal constant strain rate compression experiment data at temperature of 1000-1200 °C and strain rate of 0.001-0.1 s⁻¹. The results show that the correlation coefficient (*R*) and the average absolute relative error (AARE) of the strain-compensated physical constitutive relationship based on the creep index *n*=5 are 0.974 and 59.3%, respectively, indicating that this physical constitutive model is not accurate in characterizing the flow stress behavior of the alloy. Whereas the *R* and the AARE of the strain-compensated physical constitutive relationship based on the variable of creep index *n* are 0.984 and 10.6%, respectively, showing that this physical constitutive model can satisfactorily characterize the flow stress behavior of the alloy and the flow stress prediction accuracy of the physical constitutive model is higher than the traditional Arrhenius constitutive model.

Key words: Laves phase NbCr₂/Nb dual-phase alloy; strain compensation physical constitutive model; creep index; self-diffusion coefficient; Young's modulus