

500 °C 过热蒸汽中锆合金不同取向晶粒表面氧化膜应力状态的模拟研究

周志浩, 胡丽娟, 李晓健, 姚美意, 谢耀平, 周邦新

(上海大学 材料研究所, 上海 200072)

摘要: 腐蚀各向异性是锆合金腐蚀过程中需要重点关注的一个问题, 对于研究锆合金腐蚀机理有着重要的意义。基于有限元方法模拟了 500 °C/10.3 MPa 过热蒸汽中锆合金(11 $\bar{2}$ 0)取向晶粒及(0001)取向晶粒表面氧化膜的应力状态。模拟结果表明: 锆合金 2 种取向晶粒表面氧化膜的应力分布规律一致, 呈梯度分布, 在氧化膜厚度方向上, 应力自氧化膜内表面向氧化膜外表面递减; 氧化膜内应力随氧化膜厚度的增加均呈先减小再增加再减小的趋势, 在氧化膜达到 10 μ m 后, 应力不再有明显的变化; 尽管 2 种取向的晶粒表面氧化膜应力变化规律一致, 但(11 $\bar{2}$ 0)取向晶粒及(0001)取向晶粒表面氧化膜应力大小及应力梯度存在明显的差异, 这也是其耐腐蚀性能不同的原因之一。

关键词: 有限元; 锆合金; 各向异性; 应力

中图分类号: TL341

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2021)01-0179-08

锆的热中子吸收截面小, 具有很好的耐腐蚀和高温力学性能, 这使得锆合金在核工业领域具有极广泛的应用。目前, 锆合金可以作为核燃料的包壳材料, 也可以作为反应堆堆芯中的某些结构材料^[1]。

由于锆的晶体结构为密排六方结构, 所以不同的加工工艺会产生不同的织构, 晶体取向对锆合金的耐蚀性影响明显^[2], 导致锆合金在氧化过程中会产生明显的氧化各向异性。

Charquet 等^[3]用不同织构的 Zr-4 样品在 500 °C/10.3 MPa 过热蒸汽中腐蚀 24 h, 结果显示样品的腐蚀增重存在显著差异, (0001)织构更强的样品腐蚀增重明显要小。Zhou 等^[4]用 Zr-4 合金大晶粒样品(晶粒尺寸在 0.2~0.8 mm 之间)研究了氧化膜厚度与晶粒取向之间的关系, 发现 Zr-4 合金在 500 °C/10.3 MPa 过热蒸汽中腐蚀时, 氧化膜生长的各向异性非常显著, (11 $\bar{2}$ 0)取向晶粒及(0001)取向晶粒表面生成的氧化膜厚度存在明显差异。

为了进一步研究锆合金腐蚀各向异性, 孙国成等^[5-7]做了相关的实验, 发现经过热处理后的 Zr-4 样品, 在(0001)织构因子最大的面上未观察到蚀状腐蚀; 在(0001)织构因子较小的面上易发生蚀状腐蚀。实验结果表明, 锆合金的腐蚀与其晶体取向有着重要的关系。

研究腐蚀各向异性对于探究锆合金腐蚀机理有着重要意义, 且研究腐蚀过程中由于各向异性所引起的锆合金应力场的变化显得尤为重要。

随着有限元技术的不断发展, 有限元方法已成为

一种重要的研究方法^[8], 王瑞红等^[9]基于有限元方法研究了渗氢前后国产 Zr-4 合金板轧制平面内不同取向的基本力学性能及其断裂性质。结果表明: 渗氢前后国产 Zr-4 合金板均为面内各向同性、厚向各向异性的材料, 氢化物的出现对其各向异性行为无显著影响, 仅稍微提高了材料的强度, 如弹性模量、屈服强度及断裂强度等, 但却大大降低了材料的塑性。Vermaak 等^[10]使用有限元方法研究了腐蚀锆基金属氧化物体系中裂纹的形成, 研究发现在蠕变条件下, 界面起伏尖锐度和氧化物形成应变各向异性被认为是裂纹促进拉伸应力发展的主导因素。Platt 等^[11]利用 Abaqus 研究了锆合金氧化过程中四方相向单斜相变的过程, 研究发现氧化引起的平面内双轴压缩应力的松弛以及与前进裂纹尖端相关的三轴拉伸应力的应用均降低了与相变相关的应变能, 因此这应该会导致四方相的不稳定。

尽管有很多基于有限元方法对锆合金的仿真模拟, 但很少有对锆合金不同取向晶粒表面氧化膜应力场的仿真模拟。所以构建了锆合金(11 $\bar{2}$ 0)取向晶粒及(0001)取向晶粒表面氧化膜的仿真模型, 得到了其在 500 °C/10.3 MPa 过热蒸汽中腐蚀时锆合金不同取向晶粒表面氧化膜的应力状态, 并与实验结果相对比, 为研究锆合金腐蚀各向异性机理提供有效模型。

1 仿真模型构建

1.1 物理参数

收稿日期: 2020-03-05

基金项目: 国家自然科学基金(51871141)

作者简介: 周志浩, 男, 1996 年生, 硕士, 上海大学材料研究所, 上海 200072, E-mail: 761153155@qq.com

构建不同厚度的锆合金晶粒表面氧化膜模型，所需物理参数^[12-14]如表 1 和表 2 所示。

1.2 本构模型

有限元仿真材料强度变化一般以位错演变为主，模拟材料强度变化有 2 个主要因素需考虑，一是动态硬化，即位错的演化，可以表述为内部应力 σ_i ；二是沉淀硬化，即析出相应力 σ_p ^[15]。材料的流动响应主要取决于材料微观结构内部变化的发展。因此变形过程的应变速率可以假设由两部分组成：一部分为基体内部，另一部分则为析出相，虽然还有很多微观结构参数，诸如晶粒尺寸、晶粒形状及形貌的因素影响材料的性能，但为了简化本构模型，模型中的流动应变速率则只分为外部因素与材料内部因素两部分，即

$$\dot{\epsilon} = \dot{\epsilon}(\sigma, I) \tag{1}$$

式中， σ 为外部因素， I 为内部因素。

运用 Arrhenius 方程建立本构方程^[16]：

$$F(\sigma) = A_0 \bar{\epsilon} \exp(-Q/RT) \tag{2}$$

上述方程常见的 3 个形式：

$$\bar{\epsilon} = A_1 \exp(\beta\alpha) \exp\left(\frac{-Q}{RT}\right), \alpha\sigma > 1.2 \tag{3}$$

$$\bar{\epsilon} = A_2 \sigma^{n_1} \exp\left(\frac{-Q}{RT}\right), \alpha\sigma < 0.8 \tag{4}$$

$$\bar{\epsilon} = A[\sinh(\alpha\sigma)]^n \exp\left(\frac{-Q}{RT}\right), \alpha\sigma \text{ 为任意数}, \alpha = \beta/n_1 \tag{5}$$

式中， Q 为变形激活能，它是表征一种原子尺度的能量“障碍”，代表了热变形速率控制机制中原子重新排列

的难易程度，单位为 mol/kJ， T 为绝对温度，单位为 K， R 为气体常数，为 8.314 J/(mol·K)， A_0 、 A_1 、 A_2 、 A 、 n 、 α 、 β 为材料常数。可以通过计算^[17]，得到 α 、 n 、 Q 、 A 分别为 0.018、3.68、543.6、 $e^{52.1}$ 。

1.3 几何模型

为了与实际板材样品进行对比，建立的模型为长方体模型。在 Abaqus/CAE 中建立尺寸为 0.5 mm×0.4 mm×0.1 mm 的几何模型，表示未被氧化的锆合金基体，在此基础上建立具有不同氧化膜厚度的几何模型。在建立含有氧化膜的晶粒模型时设定(0001)取向晶粒氧化膜生长在模型中的 XY 面；(11 $\bar{2}$ 0)取向晶粒氧化膜生长在模型中的 YZ 面，假设氧化膜在其表面均匀分布且不考虑氧化膜晶体结构。基于实验结果^[18]，所建氧化膜厚度分别为 1.5, 2, 3.5, 5, 7.5, 10, 12.5 及 15 μm 。此外，模型中未考虑腐蚀时 Zr 生成 ZrO₂ 体积膨胀引起的应力，仅研究晶粒表面氧化膜的应力随氧化膜厚度和晶粒取向的变化关系。

以温度 500 °C 及压强 10.3 MPa 为载荷条件对模型加载，几何模型构建及其载荷分布条件如图 1 所示，其中压强均匀分布在模型各个面上，无固定位移约束。

由于构建的几何模型形状规则，故使用中性轴算法绘制网格，种子近似全局尺寸为 9×10⁻⁶，默认最大偏离因子 h/L 为 0.1，网格单位类型为 C3D8R，网格均匀划分，共 27 104 个单元，如图 2 所示。

表 1 锆的物理常量

Table 1 Physical constants of Zr^[12]

Zr	Average	(11 $\bar{2}$ 0) orientation	(0001) orientation
Density/ $\times 10^5 \text{ g}\cdot\text{m}^{-3}$	6.5	-	-
Expansion coefficient/ $\times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	6.7	5.2	10.4
Young's modulus/GPa	-	99	125
Lattice constant/nm	-	$a=0.323$	$c=0.515$
Thermal conductivity/ $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	22	-	-
Specific heat/ $\text{J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	276	-	-
Poisson's ratio	0.34	-	-

表 2 氧化锆的物理常量

Table 2 Physical constants of ZrO₂^[13,14]

ZrO ₂	Average value
Density/ $\times 10^5 \text{ g}\cdot\text{m}^{-3}$	5.85
Expansion coefficient/ $\times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	9.6
Young's modulus/GPa	210
Thermal conductivity/ $\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$	2.1
Poisson's ratio	0.3

2 结果与讨论

2.1 (0001)取向晶粒表面氧化膜的应力仿真结果

图 3 为(0001)取向晶粒表面氧化膜厚度较薄时的应力场分布图。图 3a~3d 是不同氧化膜厚度下的 Mises 应力分布图， a_1 、 b_1 、 c_1 、 d_1 分别为其 O/M (Oxide/Metal) 界面处应力场的局部放大图。Mises 应力为模型的等

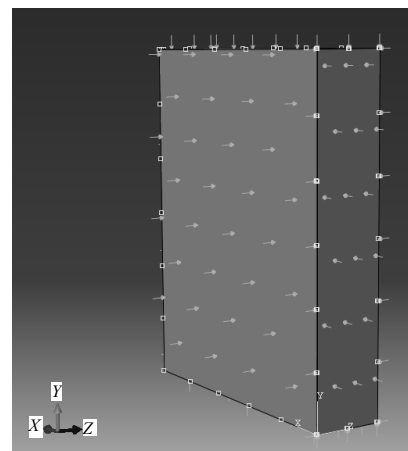


图 1 几何模型图

Fig.1 Geometric model diagram

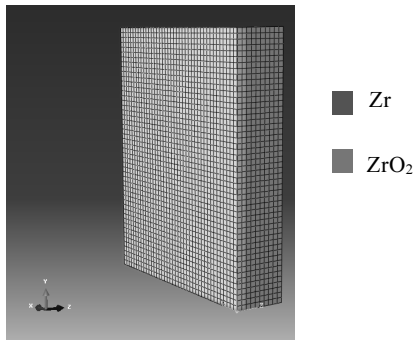


图 2 有限元网格图

Fig.2 Finite element mesh diagram

效应力，用来快速确定模型中等效力最大区域，应力类型及应力最大值会在本节末讨论。

图 3a、3b、3c、3d 分别为(0001)取向晶粒在氧化膜厚度为 1、1.5、2 及 3.5 μm 时的应力分布图，其应力场分布规律一致，外表面氧化膜的应力存在明显的应力梯度(由于模拟过程中未对其施加固定位移约束，所以其梯度更加明显且在结果中呈环状分布)。尽管 4 种不同氧化膜厚度的应力分布规律相似，但其最大 Mises 应力值有所改变，其数值大小规律为：S_a>S_b>S_c>S_d，其中，S 为氧化膜中应力。在氧化膜厚度为 1~3.5 μm 范围内，随着氧化膜厚度的增加，氧化膜内应力呈减小的趋势，与刘文庆^[19]和耿建桥^[20]所发现的规律一致。

氧化膜超过一定厚度后无法仅用实验方法确定其内部应力的分布，故为了进一步探究氧化膜厚度对氧化膜中压应力的影响，对氧化膜厚度增加后的模型进行了相关计算，结果如图 4 所示。

图 4 分别是氧化膜厚度为 5，7.5，10，12.5 以及 15 μm 时(0001)取向晶粒表面氧化膜的应力分布图。从图 4a 中发现氧化膜厚度为 5 μm 时其氧化膜最大 Mises 应力为 2.855 MPa，对比氧化膜为 3.5 μm 时的 1.637 MPa，其应力最大值增加了 74%左右，即在氧化到一定程度时，氧化膜内应力会有突增的现象。

从图 4 可以发现随着氧化膜厚度进一步增加，氧化膜中等效内应力会再次减小，这与氧化膜厚度较薄时的应力变化规律一致^[21]。另外，从图中可以很明显的看出，氧化膜外表面内应力同样存在明显的应力梯度：从氧化膜局部放大图(图 4a₁、4b₁、4c₁、4d₁、4e₁)中可以清晰看出，随着氧化膜厚度的增加，虽然氧化膜应力整体呈减小的趋势，但 5 种模型在其氧化膜厚度方向上，O/M 界面处均为应力最大处，而在其外表面处应力值最小，即在氧化膜厚度方向上应力分布为自氧化膜内表面向氧化膜外表面递减的趋势。

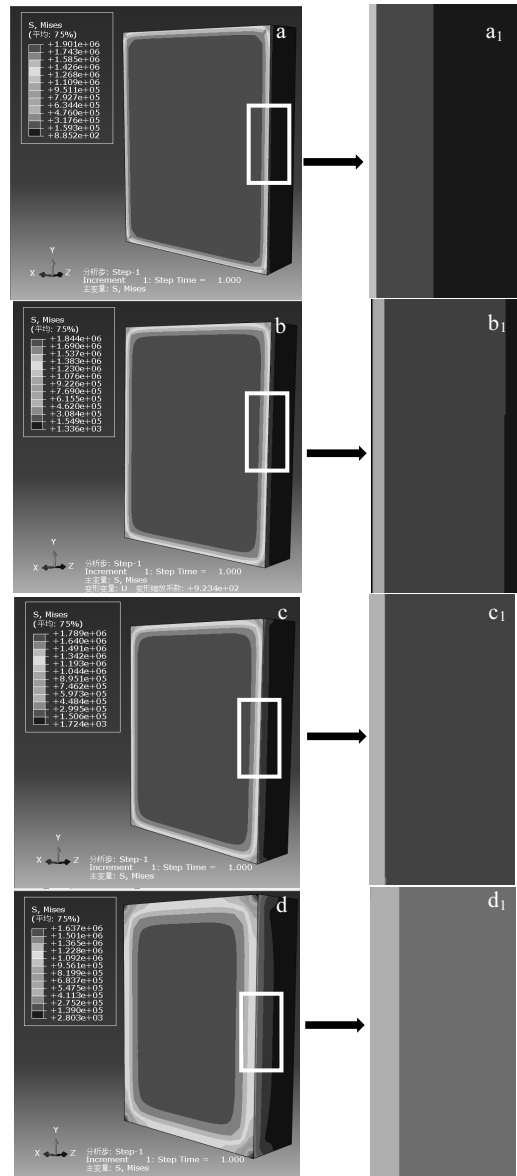


图 3 (0001)取向晶粒表面不同厚度氧化膜应力分布图

Fig.3 Stress distribution of oxide film with different thickness on the surface of (0001) oriented grain: (a) 1 μm, (b) 1.5 μm, (c) 2 μm, and (d) 3.5 μm

O/M 界面处应力最大，是应力加载方式和材料本身属性共同作用的结果。锆合金基体与氧化膜的物理属性不同，其热膨胀系数和弹性模量等均存在差异，而载荷均匀加载在模型各个面上，在外加载荷的作用下应力会向模型内部传递，由于 2 种材料性能存在差异，所以在氧化膜和锆合金基体界面处，即 O/M 处产生应力集中，从而出现晶粒表面氧化膜 O/M 界面处应力最大的现象。

图 5 为模型中提取的最小主应力。图中应力值均为负值，即可以判断应力类型为压应力，因为负号的影响，

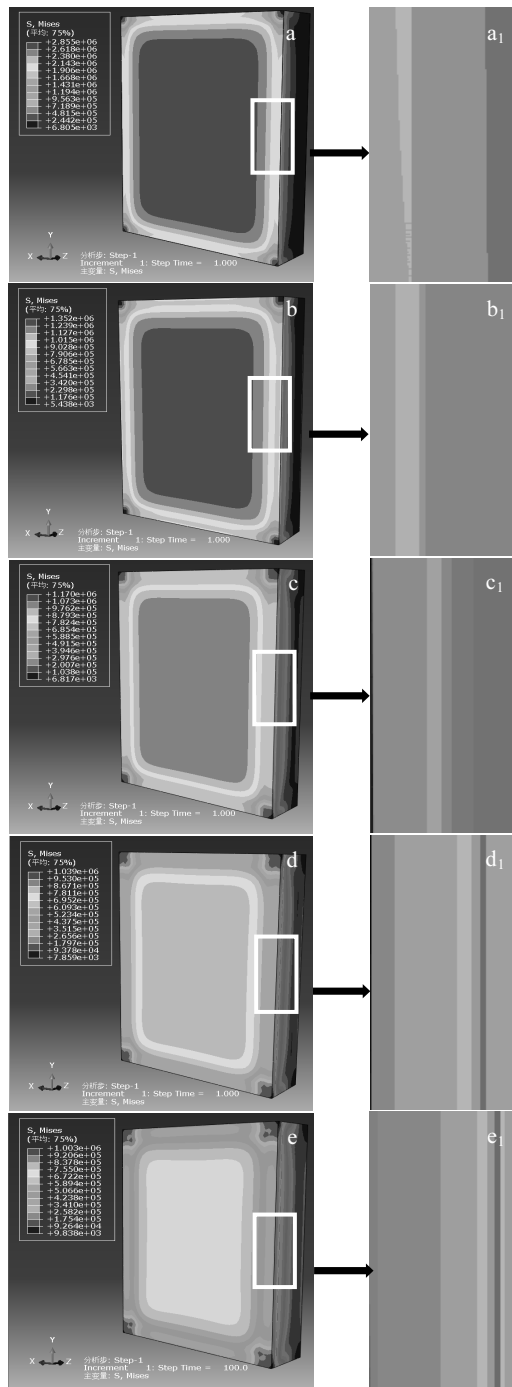


图 4 (0001)取向晶粒表面不同厚度氧化膜应力分布图

Fig.4 Stress distribution of oxide film with different thicknesses on the surface of (0001) oriented grain: (a) 5 μm , (b) 7.5 μm , (c) 10 μm , (d) 12.5 μm , and (e) 15 μm

故云图中最小主应力就是其最大压应力。可以看出最大压应力的分布规律与 Mises 等效应力的规律一致，氧化膜外表面内应力皆存在应力梯度，其最大压应力的节点和单元类型已在图中标注，取其绝对值作图如图 6 所示。

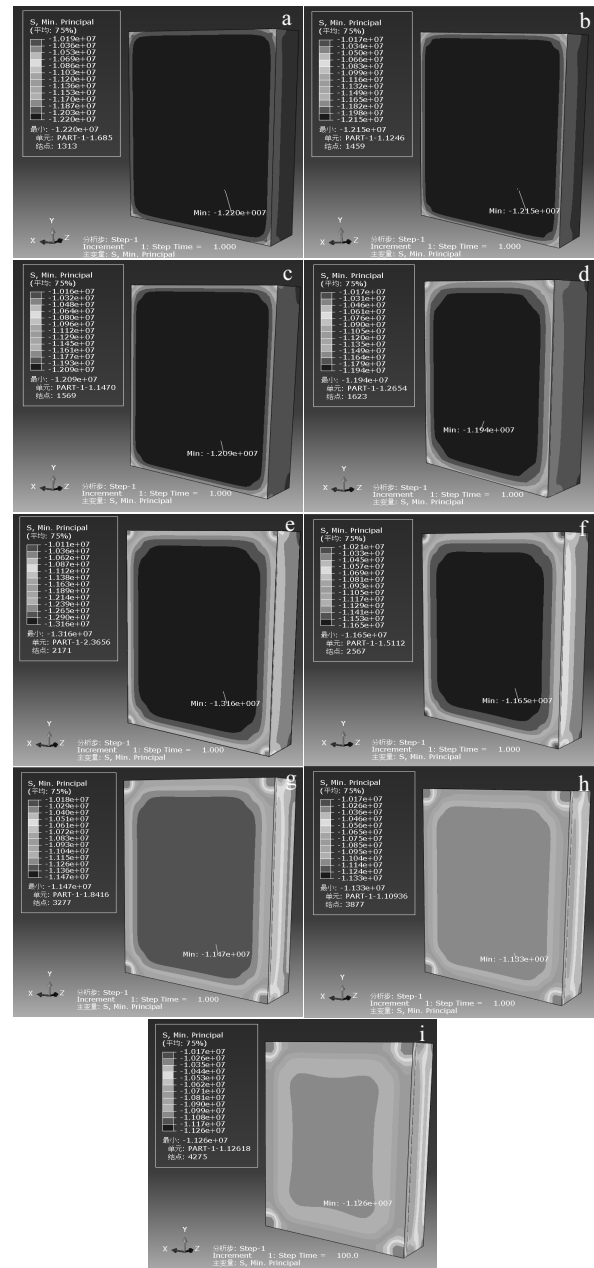


图 5 (0001)取向晶粒表面不同厚度氧化膜的最小主应力图

Fig.5 Minimum principal stress of oxide film with different thicknesses on the surface of (0001) oriented grain: (a) 1 μm , (b) 1.5 μm , (c) 2 μm , (d) 3.5 μm , (e) 5 μm , (f) 7.5 μm , (g) 10 μm , (h) 12.5 μm , and (i) 15 μm

从图 6 中可以看出，在(0001)取向晶粒表面氧化膜较薄 ($< 3.5 \mu\text{m}$) 的情况下，氧化膜应力随其厚度的增大而减小；而氧化膜生长的过程中(3.5~5 μm)，氧化膜应力随其厚度的增大而增大；随着氧化膜厚度进一步增加(5~8 μm)，氧化膜应力又出现随其厚度增加再次减小的情况。但在氧化膜厚度达到一定阶段时(10~15 μm)，氧化膜应力基本保持不变，应力大小变化趋

于平稳。(0001)取向晶粒表面氧化膜的应力分布随其厚度的增加呈先减小再增加再减小的规律。这说明铝合金在腐蚀初期，由于腐蚀氧化形成的氧化膜厚度较薄，氧化膜在压力作用下，内部应力较小，随着氧化膜厚度增加，氧化膜内应力增加，并在厚度达到一定值时，氧化膜内应力保持稳定。即氧化膜较薄时，应力随氧化膜厚度的增加而减小，随着腐蚀进一步进行，氧化膜内应力随着厚度的增加呈现先增加后减小的趋势，与实验中所发现的现象一致^[22]。

2.2 (1120)取向晶粒表面氧化膜的应力仿真结果

图 7 是氧化膜厚度为 1、1.5、2 以及 3.5 μm 时 (1120)取向晶粒表面氧化膜的应力分布图，与图 3 中(0001)取向晶粒表面氧化膜的应力分布规律相似，在氧化膜厚度小于 2 μm 时，氧化膜内应力大小规律为 $S_a > S_b > S_c$ ，但其应力值却远大于(0001)取向晶粒表面氧化膜的应力值，这也是产生腐蚀各向异性的原因之一^[23]。另外，对比图 7c 和 7d 发现应力大小 $S_d > S_c$ ，即氧化膜厚度在 2 ~ 3.5 μm 时，(1120)取向晶粒表面氧化膜的应力已经有了增大的情况，比(0001)取向晶粒表面氧化膜的应力增大区间有所提前。2 种晶粒表面氧化膜应力发生转折的区间不同，同样可能是 2 种不同取向晶粒耐腐蚀性能存在差异的原因之一。

图 8 分别是氧化膜厚度为 5、7.5、10、12.5 以及 15 μm 时 (1120)取向晶粒表面氧化膜的应力分布图。与图 4 中(0001)取向晶粒表面氧化膜的应力分布规律一致，氧化膜外表面有明显的应力梯度。但对比图 4 中(0001)取向晶粒表面氧化膜的应力值，(1120)取向晶粒表面氧化膜的应力值较大且应力梯度更加明显。除此之外，在图中可以看出，其应力最大值出现在 O/M 界面处，并且随着氧化膜厚度的增大，氧化膜最大 Mises

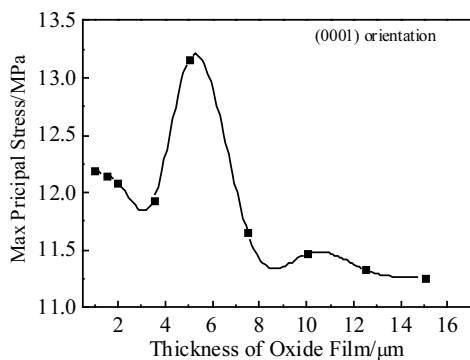


图 6 (0001)取向晶粒表面氧化膜最大主应力值随厚度变化的曲线

Fig.6 Max principal stress of oxide film with different thicknesses on the surface of (0001) oriented grain

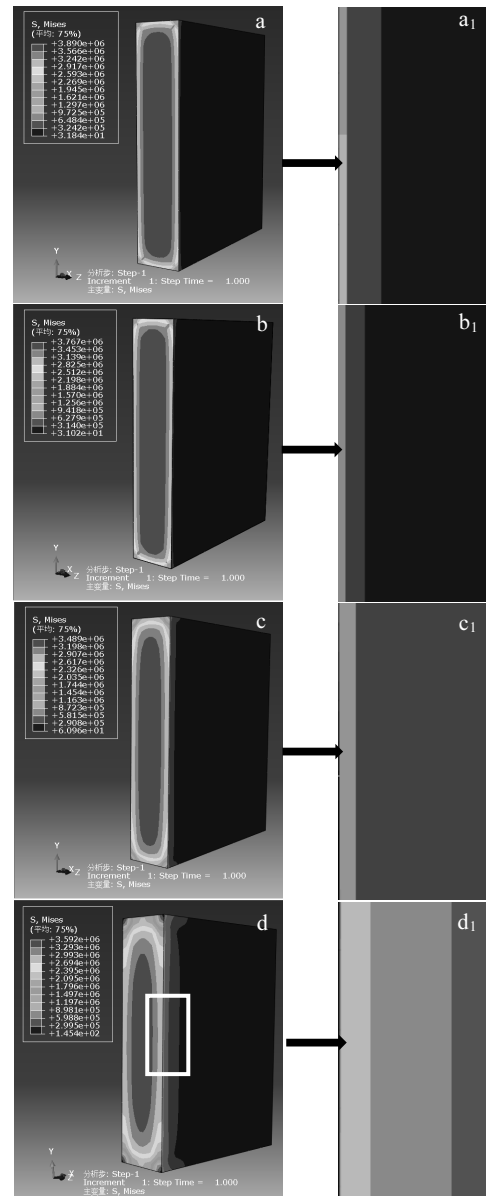


图 7 (1120)取向晶粒表面不同厚度氧化膜应力分布图

Fig.7 Stress distribution of oxide film with different thicknesses on the surface of (1120) oriented grain: (a) 1 μm, (b) 1.5 μm, (c) 2 μm, and (d) 3.5 μm

应力会随之减小，这说明当氧化膜较薄的时候应力分布比较均匀，在氧化膜厚度方向上应力差异并不明显；但随着氧化膜厚度的增加，氧化膜厚度方向随之产生了应力梯度，应力呈自 O/M 界面向氧化膜外表面递减的规律。

图 9 是 (1120)取向晶粒表面氧化膜模型中的最小主应力，也就是其最大压应力的分布图，可以看出最大压应力的应力梯度更加明显。其最小主应力的节点和单元信息已在图中标出，取绝对值与图 7 对比做图，应力分布结果如图 10 所示。

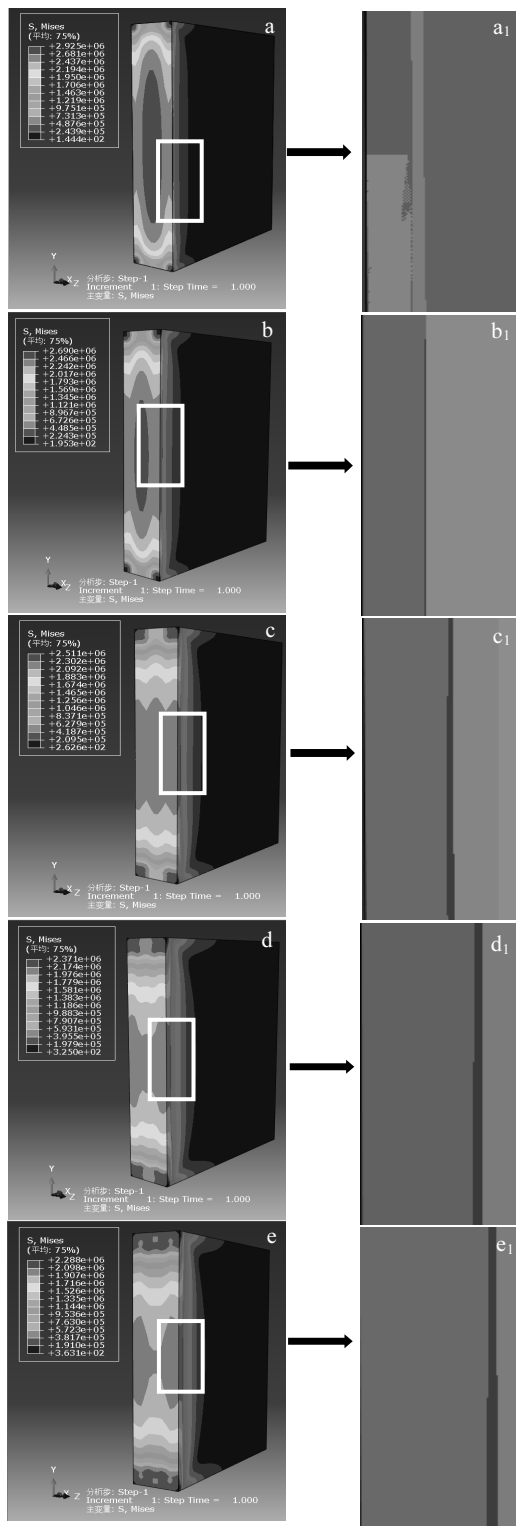


图 8 (1120)取向晶粒表面不同厚度氧化膜应力分布图

Fig.8 Stress distribution of oxide film with different thicknesses on the surface of (1120) oriented grain: (a) 5 μm, (b) 7.5 μm, (c) 10 μm, (d) 12.5 μm, and (e) 15 μm

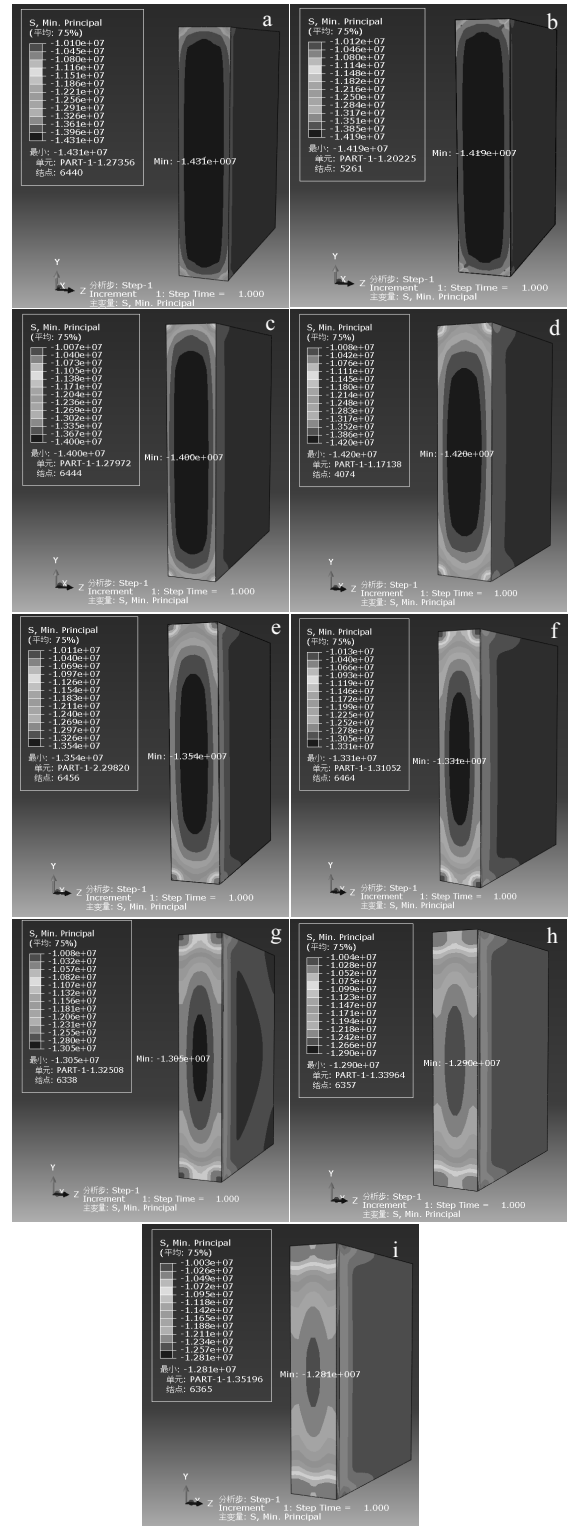


图 9 (1120)取向晶粒表面氧化膜随厚度变化的最小主应力图

Fig.9 Minimum principal stress of oxide film with different thicknesses on the surface of (1120) oriented grain: (a) 1 μm, (b) 1.5 μm, (c) 2 μm, (d) 3.5 μm, (e) 5 μm, (f) 7.5 μm, (g) 10 μm, (h) 12.5 μm, and (i) 15 μm

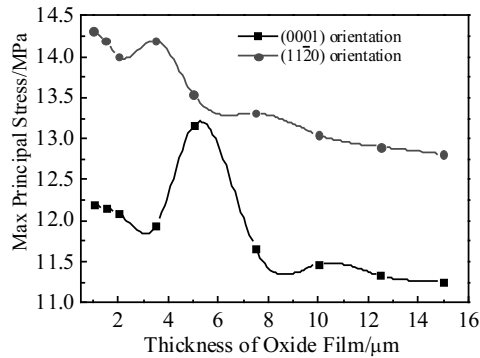


图10 不同取向晶粒表面氧化膜最大主应力值随厚度变化的曲线
Fig.10 Max principal stress of oxide film with different thicknesses on the surface of different oriented grains

从图10中可以看出,2种不同取向的晶粒表面氧化膜应力变化规律一样,都是在氧化膜较薄的时候应力减小,然后随氧化膜厚度的增加呈先增加再减小的趋势,氧化膜增加至一定厚度后,应力大小基本维持平稳状态,不再有明显的变化趋势。尽管2种取向的晶粒表面氧化膜应力变化规律一致,但是应力大小差异明显,(11 $\bar{2}$ 0)取向晶粒表面氧化膜的压应力大于(0001)取向晶粒表面氧化膜的压应力,且在氧化膜厚度更薄时就出现应力增加的现象。同时2种取向晶粒表面氧化膜的应力梯度同样存在差异,氧化膜厚度在3.5~7.5 μm之间时,2种晶粒表面氧化膜的应力变化最为明显,(0001)取向晶粒表面氧化膜的应力梯度较大,平均约为1 MPa/1 μm,(11 $\bar{2}$ 0)取向晶粒表面氧化膜的应力梯度平均约为0.3 MPa/1 μm,这可能也是2种晶粒取向对锆合金耐蚀性能存在差异的原因之一。模拟结果说明晶体取向对氧化膜应力大小和应力梯度有很大的影响,而应力的变化必定会对锆合金的耐腐蚀性能产生影响,所以在实际加工过程中,可以通过改进加工工艺控制其晶体取向从而提高锆合金的耐腐蚀性能。

3 结论

1) 锆合金不同取向晶粒表面氧化膜应力均为压应力且均存在应力梯度,在氧化膜厚度方向上,氧化膜O/M界面处应力最大,外表面处应力值最小,呈自氧化膜内表面向氧化膜外表面递减的趋势。

2) 不同取向晶粒表面氧化膜内应力随氧化膜厚度增加呈先减小再增加再减小的趋势,在氧化膜达到一定厚度后,内应力不再有明显的变化趋势。

3) 氧化膜内应力变化尽管趋势一致,但其应力大

小却有明显差异,(11 $\bar{2}$ 0)取向晶粒表面氧化膜的应力大于(0001)取向晶粒表面氧化膜的应力且氧化膜厚度更薄时就出现应力增大现象,氧化膜厚度在3.5~7.5 μm时,(0001)取向晶粒表面氧化膜的应力变化梯度较大,平均约为1 MPa/1 μm,(11 $\bar{2}$ 0)取向晶粒表面氧化膜的应力变化梯度平均约为0.3 MPa/1 μm,2种取向晶粒表面的氧化膜应力梯度存在差异,这也是2种不同取向晶粒耐蚀性不同的原因之一。

参考文献 References

- [1] Yang Wendou(杨文斗). *Materials for Nuclear Application(反应堆材料学)*[M]. Beijing: Atomic Energy Press, 2006: 126
- [2] Kim H G, Kim T H, Jeong Y H. *Journal of Nuclear Materials*[J], 2002, 306(1): 44
- [3] Charquet D, Tricot R, Wadier J F. *Zirconium in the Nuclear Industry: Eighth International Symposium*[C]. Philadelphia, ASTM STP, 1989: 374
- [4] Zhou B X, Pen J C, Yao M Y et al. *Zirconium in the Nuclear Industry: 16th International Symposium*[C]. Philadelphia, ASTM STP 1529, 2011: 620
- [5] Sun Guocheng(孙国成), Zhou Bangxin(周邦新), Yao Meiyi(姚美意) et al. *Acta Metallurgica Sinica(金属学报)*[J], 2012, 48(9): 1103
- [6] Xie S J, Zhou B X, Chen C M et al. *Applied Surface Science*[J], 2016, 363: 225
- [7] Chen Chuanming(陈传明), Zhou Bangxin(周邦新), Xu Long(徐龙) et al. *Rare Metal Materials and Engineering(稀有金属材料与工程)*[J], 2016, 45(12): 3213
- [8] Zumpicchiati G, Pascal S, Tupin M et al. *Corrosion Science*[J], 2015, 100(2): 3483
- [9] Wang Ruihong(王瑞红), Ding Xiangdong(丁向东), Xiao Lin(肖林) et al. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals(中国有色金属学报)*[J], 2002, 12(3): 544
- [10] Vermaak N, Parry G, Estevez R et al. *Acta Materialia*[J], 2013, 61(12): 4374
- [11] Platt P, Frankel P, Gass M et al. *Journal of Nuclear Materials*[J], 2014, 454(1-3): 290
- [12] Huang Jiao(黄娇). *Thesis for Doctorate(博士论文)*[D]. Shanghai: Shanghai University, 2017
- [13] Li Peng(李鹏), Luo Fa(罗发), Xu Jie(徐洁) et al. *Journal of the Chinese Ceramic Society(硅酸盐学报)*[J], 2008, 36(3): 306
- [14] Wang Wei(王伟). *Thesis for Doctorate(博士论文)*[D]. Beijing: Beijing University of Chemical Technology, 2015
- [15] Hu L J, Zhao S J, Liu Q D. *Materials Science and*

- Engineering*[J], 2012, 556: 140
- [16] Wang Xiaojun(王晓军), Luo Haodong(骆浩东), Miao Chengpeng(苗承鹏). *Journal of Lanzhou University of Technology* (兰州理工大学学报)[J], 2017, 43(6): 6
- [17] Gao Xiayun(高夏云). *Thesis of Master's Degree*(硕士论文)[D]. Nanchang: Nanchang Hangkong University, 2018
- [18] Zhou Bangxin(周邦新), Li Qiang(李 强), Liu Wenqing(刘文庆) *et al. Corrosion & Protection*(腐蚀与防护)[J], 2009, 30(9): 589
- [19] Liu Wenqing(刘文庆), Li Qiang(李 强), Zhou Bangxin(周邦新) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2004, 33(10): 106
- [20] Geng Jianqiao(耿建桥), Zhou Bangxin(周邦新), Yao Meiyi(姚美意) *et al. Journal of Shanghai University, Natural Science Edition*(上海大学学报, 自然科学版)[J], 2011, 17(3): 293
- [21] Zhou Bangxin(周邦新), Li Qiang(李 强), Yao Meiyi(姚美意) *et al. Nuclear Power Engineering*(核动力工程)[J], 2005, 26(4): 364
- [22] Zhou Bangxin(周邦新), Li Qiang(李 强), Huang Qiang(黄强) *et al. Nuclear Power Engineering*(核动力工程)[J], 2000, 21(5): 439
- [23] Zhou Bangxin(周邦新), Jiang Yourong(蒋有荣). *Nuclear Power Engineering*(核动力工程)[J], 1990, 11(3): 233

Simulation Study of the Stress State of Oxide Film of Zirconium Alloy on Grains Surface with Different Orientations at 500 °C Superheated Steam

Zhou Zhihao, Hu Lijuan, Li Xiaojian, Yao Meiyi, Xie Yaoping, Zhou Bangxin
(Institute of Materials, Shanghai University, Shanghai 200072, China)

Abstract: The anisotropic oxidation characteristic is an important issue that needs to be focused on during the corrosion process of zirconium alloys, and it is of great significance for studying the corrosion mechanism of zirconium alloy. Based on the finite element method, the stress state of the oxide film of zirconium alloy with $(11\bar{2}0)$ oriented grain and (0001) oriented grains in superheated steam at 500 °C/10.3 MPa was simulated in the research. The simulation results show that the change of stress distributions of the oxide films on zirconium alloy with $(11\bar{2}0)$ and (0001) oriented grains has the same trend with the increase of the oxide film thickness. The stress of the oxide film is distributed in a gradient. Along the thickness direction of oxide film, the stress decreases from the inner surface to the outer surface of the oxide film. The compressive stress in the oxide film decreases first, then increases and finally decreases with increasing the oxide film thickness, and after the oxide film thickness reaches 10 μm , the stress no longer has a significant change. There are obvious differences in the stress magnitude and stress gradient of the oxide films on the surface of $(11\bar{2}0)$ and (0001) oriented grains, which is one of the reasons for their different corrosion resistance.

Key words: FEM; zirconium alloys; anisotropic; stress

Corresponding author: Hu Lijuan, Associate Professor, Institute of Materials, Shanghai University, Shanghai 200072, P. R. China, Tel: 0086-21-56337032, E-mail: lijuanhu@shu.edu.cn