

应力诱导中子辐照奥氏体钢空洞的相场模拟

张伟¹, 程大钊², 刘彩艳³, 马聪¹, 吴璐¹, 张静²

(1. 中国核动力研究设计院 第一研究所, 四川 成都 610005)

(2. 西北工业大学 凝固技术国家重点实验室, 陕西 西安 710072)

(3. 西安理工大学 材料学院, 陕西 西安 710048)

摘要: 辐照空洞导致的辐照肿胀是堆芯长时服役奥氏体钢失效的重要原因。本工作采用介观尺度的相场模型耦合辐照速率理论和微弹性理论, 研究外加全局应力和局域位错应力场对奥氏体 Fe-Cr 合金辐照空洞组织的影响。外加应力作用下空洞形核的孕育期缩短, 空洞长大加速, 沿着外加应力方向空洞形貌被拉长为纺锤形; 相比无外加应力下, 外加应力作用使空洞平均半径更大, 空洞数量减少。外加应力越大, 空洞平均半径越大、数量越少、体积分数越大, 形貌改变越显著。位错偶极子和位错阵列的弹性应力场吸引空位在其位错核周围择优形核长大, 且与无位错作用相比, 位错应力作用下空洞数量增多、平均半径减小, 最终体积分数基本不受位错影响。对比外加应力和位错应力场作用, 全局应力引起的肿胀较位错更为显著。本研究结果可启发堆芯奥氏体钢组织老化和性能衰退评估。

关键词: 速率理论; 相场模拟; 弹性应力; 应力诱导空洞; 空洞形貌

中图分类号: TL341

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2024)10-2926-08

Fe-Cr 基奥氏体钢具有较高的强度、塑性和热强性以及优良的耐蚀性和抗氧化能力, 因此被广泛地用于包壳材料和堆芯关键材料^[1]。但是核电材料长期处于高温高压和强辐照的环境下, 受到强烈的中子辐照, 在级联碰撞的作用下会产生大量的点缺陷, 即空位和间隙原子^[2-3]。间隙原子扩散快, 易于被缺陷阱吸收, 晶内残留大量空位。空位的迁移、聚集以及形核长大导致材料内部出现空洞等缺陷组织, 空洞会进一步导致材料出现体积膨胀、蠕变不稳定性及硬化, 并在长时间的堆内辐照中失去延展性, 严重影响反应堆的服役安全^[4]。

材料加工及服役过程引入的外加应力通常对材料内部的缺陷演化产生深刻的影响。姜彦博等^[5]使用相场法研究了 UO₂ 中外加应力对空洞演化的影响, 外加应力会促使 UO₂ 中空洞长大, 同时空洞会对晶界起到钉扎作用, 减缓晶界迁移。Zarnas 等^[6]通过空间分辨速率理论方法将点缺陷的扩散、复合与 I 型裂纹尖端附近集中的应力场耦合在一起, 应力强度因子较小时, 微裂纹应力场促使点缺陷向微裂纹处迁移并复合湮灭; 而应力强度因子较大时, 微裂纹应力场促进空位在微裂纹附近聚集, 有可能形成空洞并引发裂纹扩展。

包括位错以及辐照级联碰撞产生的缺陷团簇、嬗

变杂质等在晶内的晶体缺陷, 产生局域弹性畸变, 该弹性应力场对扩散与相变有着重要影响, 导致新相易于在缺陷处形核。这些缺陷对于空洞的演化也有着重要的影响, Cui 等人^[7]采用透射电镜对离子辐照下纯 Cr 的空洞和位错环进行了表征, 结果显示, 亚晶界处的空洞密度是晶粒内部观测到的空洞密度的一半, 表明晶界具有巨大的缺陷阱效应。空洞也会影响位错的形成和演化。Deng 等人^[8]采用晶体相场的方法研究发现, 在变形过程中, 随着应变的增加, 空洞的左右两侧产生一对位错, 并从两侧向外迁移, 以攀移的方式离开空洞, 最后分解成 2 个独立的位错。因此研究外加应力和位错对空洞演化的影响对探究 Fe-Cr 合金服役过程中的组织演变行为以及降低材料肿胀、提高其抗辐照性能具有重要意义。

介观尺度的相场 (phase field) 法模拟计算方法, 不仅可以耦合温度、辐照、应力等物理场, 而且能够包容更多微观的晶体缺陷信息, 更可靠地模拟辐照过程中材料微观组织的动力学演变和形貌演变。该方法成功应用于辐照下气泡或空洞的形核和长大^[9-10], 辐照诱导位错和晶界处溶质偏析^[11-12]等。相场模型基于扩散界面假设^[13], 不需要时时追踪界面位置。在相场模型中, 通过一系列保守场变量和

收稿日期: 2023-10-24

基金项目: 国家自然科学基金 (U2267253, 51704243); 陕西省自然科学基金基础研究计划 (2022JM-238)

作者简介: 张伟, 男, 1988 年生, 博士生, 中国核动力研究设计院第一研究所, 四川 成都 610005, E-mail: 413230333@qq.com

非保守场变量来描述体系微观结构，保守场变量由 Cahn-Hilliard 方程控制，非保守场变量由 Allen-Cahn 方程控制^[14]。

本工作建立了应力作用下 Fe-Cr 合金中空洞形核长大的相场模型。首先，研究了不同大小和方向外加应力作用下空洞的形核长大过程，并与无应力作用下空洞的演化进行对比，获得了外加应力对空洞演化规律的影响。再引入位错和位错阵列，研究位错应力场下空位聚集、空洞形核和长大的演化过程，阐明了位错应力场对空洞演化的影响。针对外加应力场和位错应力场的演化结果，对空洞的平均半径、数量和体积分数进行统计分析，得到了更为直观的不同应力场对空洞演化的影响。

1 相场模型

基于金兹堡-朗道相变理论^[15]和线弹性假设^[16]，本工作建立了应力场作用下空洞演化的相场模型。采用 2 个保守场序参量 C_v 和 C_i 分别描述空位和间隙原子的浓度。空洞中空位浓度 C_v 为 1，间隙原子浓度 C_i 为 0，基体中空位和间隙原子浓度均为平衡浓度，并通过随机起伏项模拟材料中的热起伏。外加应力场以及位错等微观缺陷引起的局域不均匀应变应力场的弹性相互作用会影响辐照空位和间隙原子的分布。考虑外加应力与弹性非均匀应变对空洞演化的影响，在自由能方程中加入弹性能密度对空洞演化的影响^[17]。因此，系统的总自由能包括化学自由能^[18]、梯度能^[19]和弹性能。

$$F = \int_V [f(C_v, C_i, T) + f^{\text{elast}} + \frac{\kappa_v}{2} |\nabla C_v|^2 + \frac{\kappa_i}{2} |\nabla C_i|^2] dV \quad (1)$$

式中， V 代表体积， $f(C_v, C_i, T)$ 表示化学自由能， T 为绝对温度， f^{elast} 表示弹性能密度， κ_v 和 κ_i 分别表示空位和间隙原子的梯度项系数。 $f(C_v, C_i, T)$ 可以由空位化学自由能项 $f_1(C_v, T)$ 和间隙原子化学自由能项 $f_2(C_i, T)$ 加和得到，其具体表达式如下：

$$f(C_v, C_i, T) = f_1(C_v, T) + f_2(C_i, T) \quad (2)$$

$$f_1(C_v, T) = k_B T \left[(1 - C_v) \ln(1 - C_v) + C_v \ln C_v \right] + b_0 C_v^4 + b_1 C_v^3 + b_2 C_v^2 + b_3 C_v + b_4 \quad (3)$$

$$f_2(C_i, T) = k_B T \left[(1 - C_i) \ln(1 - C_i) + C_i \ln C_i \right] + a C_i \quad (4)$$

式中， k_B 为玻尔兹曼常数； $a, b_0 \sim b_4$ 为常数，取决于温度 T ，并且可以由材料平衡特性决定。

f^{elast} 可通过式 (5) 表示：

$$f^{\text{elast}} = \frac{1}{2} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^{\text{el}} \varepsilon_{kl}^{\text{el}}, \quad (i=1, 2; j=1, 2) \quad (5)$$

其中， C_{ijkl} 为刚度矩阵， $\varepsilon_{ij}^{\text{el}}$ 和 $\varepsilon_{kl}^{\text{el}}$ 表示弹性位移引起的应变，表述为总应变 ε_{ij} 和本征应变 ε_{ij}^* 之差^[20]：

$$\varepsilon_{ij}^{\text{el}} = \varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^* \quad (6)$$

$$\varepsilon_{ij}^* = \delta_{ij} (\varepsilon_i^0 C_i + \varepsilon_v^0 C_v) + \varepsilon_{ij}^{\text{dis}} \quad (7)$$

其中， ε_i^0 和 ε_v^0 分别表示空位和间隙原子引起晶格常数改变的膨胀系数， δ_{ij} 为 Kronecker-Delta 函数。 $\varepsilon_{ij}^{\text{dis}}$ 为位错引起的本征应变，可表示为：

$$\varepsilon_{ij}^{\text{dis}} = \frac{1}{2d} (b_i n_j + b_j n_i), \quad (i=1, 2; j=1, 2) \quad (8)$$

式中， d 为滑移面面间距， b_i 为位错柏氏矢量分量， n_i 为滑移面法向量分量。

空位和间隙原子的动力学演化由 Cahn-Hilliard 方程描述^[14]，

$$\frac{\partial C_v}{\partial t} = \nabla \cdot \left(M_v \nabla \frac{\delta F}{\delta C_v} \right) + \xi_v(r, t) + \dot{g}_v(r, t) + \dot{\gamma}(r, t) \quad (9)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \nabla \cdot \left(M_i \nabla \frac{\delta F}{\delta C_i} \right) + \xi_i(r, t) + \dot{g}_i(r, t) + \dot{\gamma}(r, t) \quad (10)$$

式中， M_v, M_i 为空位和间隙原子的迁移率； ξ_v, ξ_i 为热起伏引起的空位和间隙原子的浓度变化； $r = (x, y, z)$ 为空间坐标； t 为时间； \dot{g}_v, \dot{g}_i 为空位和间隙原子的净生成率； $\dot{\gamma}$ 为空位与间隙原子的复合率。

$M_k (k=v, i)$ 计算公式如下：

$$M_k = \frac{D_k}{k_B T}, \quad (k=v, i) \quad (11)$$

$$D_k = D_0 \exp \left(-\frac{E_k^m}{k_B T} \right), \quad (k=v, i) \quad (12)$$

式中， D_k 为扩散系数， D_0 为扩散因子， v 代表空位， i 代表间隙原子， E_k^m 为空位和间隙原子的迁移能， E_k^m 可通过以下经验公式计算得出^[21]：

$$E_k^m = \frac{15 C_{11} C_{44} (C_{11} - C_{12}) a_0^3 \chi}{2 [C_{11} (C_{11} - C_{12}) + C_{44} (5 C_{11} - 3 C_{12})]}, \quad (k=v, i) \quad (13)$$

式中， C_{11}, C_{44}, C_{12} 为基体的弹性模量； a_0 为基体的晶格常数； χ 为经验常数，在 bcc 结构中， $\chi=0.020$ ；在 fcc 结构中， $\chi=0.022$ 。

$$\dot{g}_k(r, t) = [1 - C_v(r, t)] \dot{g}_k^0, \quad (k=v, i) \quad (14)$$

式中， $\dot{g}_k^0 = 0.01, (k=v, i)$ 。由于辐照环境下，空洞内部没有原子存在，无法发生级联碰撞，自然也无法产生新的空位与间隙原子，因此需要在 \dot{g}_k^0 前乘以 $1 - C_v(r, t)$ ，使 $C_v(r, t) = 1$ （即空洞）处点缺陷产生速率为 0。

$$\dot{\gamma}(r, t) = K_{iv} C_v(r, t) C_i(r, t) \quad (15)$$

式中， K_{iv} 为空位与间隙原子的复合率。 K_{iv} 主要与间隙原子扩散系数 D_i ，空位扩散系数 D_v 有关，公式如下：

$$K_{iv} = \frac{-4\pi r_{iv}^3 (D_v + D_i)}{\Omega} \quad (16)$$

式中 $r_{iv}=2.5a_0$ 为作用半径, Ω 为铁原子体积。

在求解之前, 需要先对模型中的各个参数进行无量纲化处理, 具体如下:

$$\Delta x^* = \Delta x / l_0; \Delta y^* = \Delta y / l_0; t^* = t / t_0; M_v^* = M_v k_B T t_0 / l_0^2; f^* = f / k_B T; \kappa_v^* = \kappa_v / (l_0^2 k_B T); \kappa_i^* = \kappa_i / (l_0^2 k_B T); \dot{g}_k^* = \dot{g}_k t_0; \xi_k^* = \xi_k t_0; \dot{\gamma}^* = \dot{\gamma} t_0.$$

式中带*的为各参数无量纲之后的量, l_0 为特征长度, t_0 为特征时间, 取 $l_0 = \sqrt{\kappa_i / k_B T}$, $t_0 = l_0^2 / D_v$ 。

2 结果与讨论

2.1 外加应力场对于空洞的影响

空位和空洞都属于晶体缺陷, 其浓度越高、体积越大, 造成的晶格畸变越严重, 晶格畸变引起弹性位移及弹性应力场, 体系的弹性应变能增加。为降低体系的弹性应变能, 空位会自发地沿弹性软取向方向扩散, 即通过改变局部的化学能大小来降低弹性应变能。空位在外加应力作用下的取向扩散具体表现为外加应力会导致空洞形貌的变化。图 1 所示分别为单个空洞在 σ_{11} 、 σ_{12} 、 σ_{22} 方向施加 50 MPa 应力作用下的形貌演化, 可以观察到, 随着时间的演化, 空洞沿着外加应力方向逐渐从圆形被拉长为纺锤形。为进一步研究不

同应力大小下单空洞形貌的变化, 分别在 σ_{11} 、 σ_{12} 、 σ_{22} 方向施加 100 MPa 应力, 图 2 所示为演化结果, 与图 1 对比可得, 外加应力越大, 其形貌变化越大。

进一步研究 Fe-Cr 合金体系中外加应力对空位簇聚, 空洞形核长大过程的影响。图 3 为辐照条件下 Fe-Cr 合金体系中无外加应力作用和 σ_{11} 、 σ_{12} 、 σ_{22} 方向施加 50 MPa 外加应力的多空洞演化结果。对比有无外加应力作用下的空洞演化结果, 3050 t_0 时, 无外加应力的体系未出现空洞形核现象, 仍处于孕育期, 而有外加应力的体系此时已出现空洞形核现象。直到 5150 t_0 , 无应力体系才出现空洞形核, 此时有外加应力作用的 Fe-Cr 合金体系中空洞已处于长大阶段。第 8000 t_0 时, 空洞基本稳定, 不再继续长大和粗化, 外加应力体系下, 大空洞更容易吞噬小空洞而长大, 因此空洞尺寸大于无应力时的空洞, 而空洞的数量远远少于无应力作用下的空洞数量。同时, 由于外加应力的作用, 形核长大的空洞也沿着外加应力的方向生长为纺锤形。图 4 为 σ_{11} 、 σ_{12} 、 σ_{22} 方向施加 100 MPa 应力的多空洞演化结果, 与图 3 对比, 可以更明显地看到外加应力对其生长方向和形貌的影响。图 5 为无外加应力及 σ_{11} 、 σ_{12} 、 σ_{22} 方向分别施加 50、100 MPa 外加应力条件下空洞的体积分数以及空洞数量和平均半径随时间的变化, 可以看到, 外加应力可以加速点缺陷的扩散,

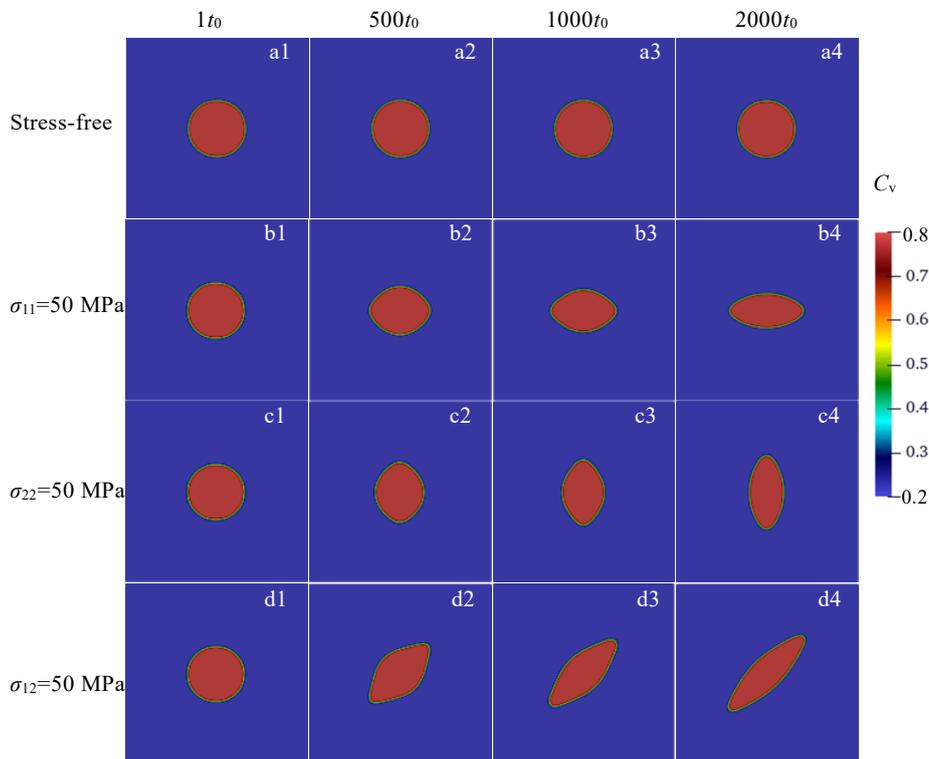


图 1 单个空洞在无应力场和 50 MPa 外加应力作用下的形貌演化

Fig.1 Morphological evolution of single void under 0 MPa (a1-a4) and applied 50 MPa (b1-d4) external stress

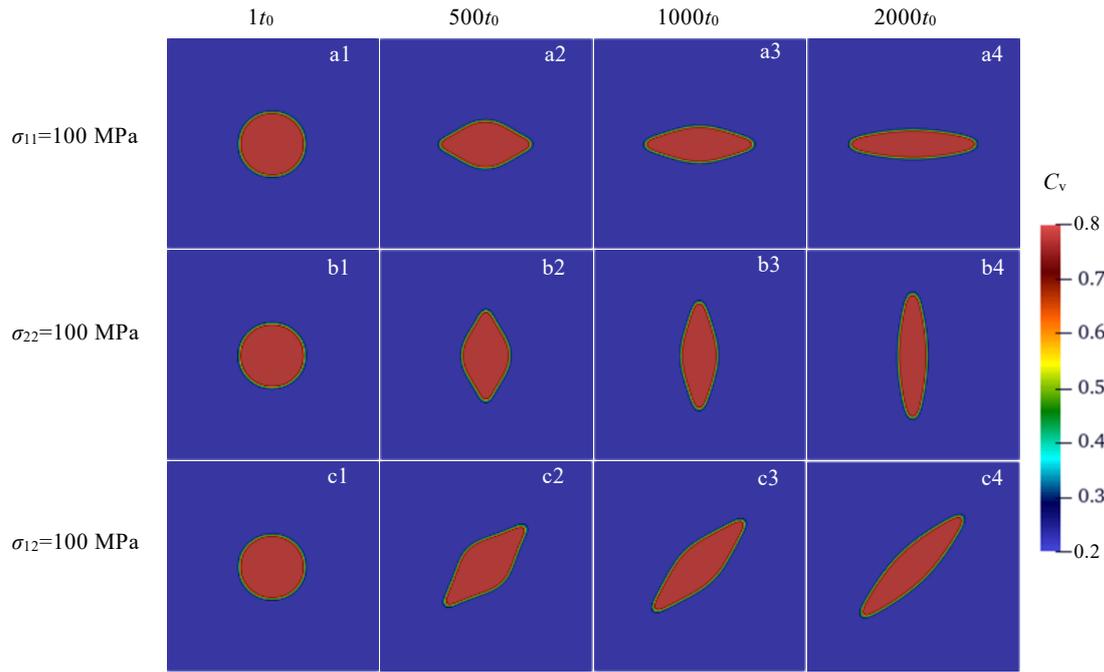


图 2 单个空洞在 100 MPa 外加应力作用下的形貌演化

Fig.2 Morphological evolution of single void under 100 MPa external stress

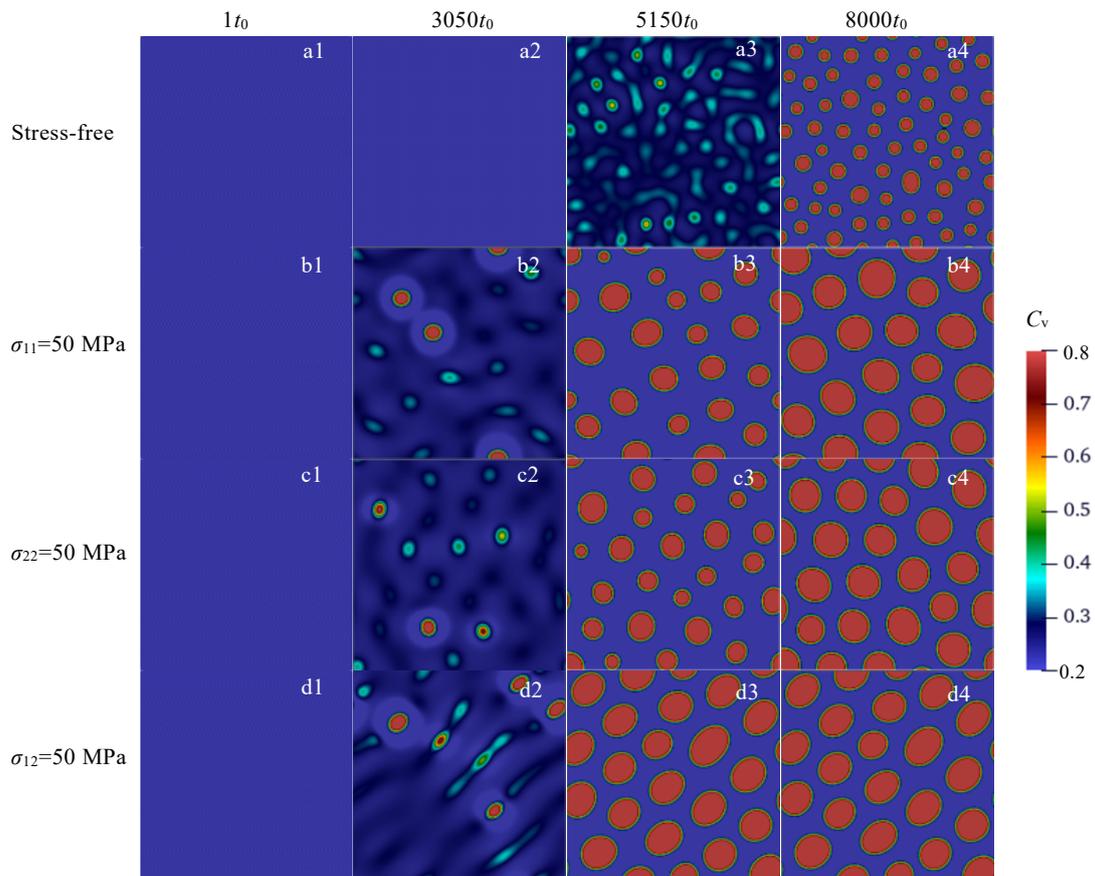


图 3 无应力场作用与 50 MPa 外加应力场下多空洞的形貌演化

Fig.3 Morphological evolution of voids under 0 MPa (a1-a4) and 50 MPa (b1-d4) external stress

缩短空洞的孕育期, 促进其形核长大, 导致空洞数量减少, 平均半径增大, 体积分数增大。应力越大, 空洞平均半径越大, 数量越少, 体积分数越大, 形貌改变越显著。

2.2 位错应力场对空洞演化的影响

fcc 晶体中, 滑移面为(111)晶面, (111)晶面上位错的柏氏矢量方向一般为 $[1\bar{1}0]$ 方向。为了便于后续计算, 分别取 fcc 晶体的 $[1\bar{1}0]$ 、 $[111]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}2]$ 方向为体

系的 x 、 y 、 z 轴, 如图 6a 所示, 滑移面(111)在新坐标系下为(010), 在(111)平面上插入柏氏矢量为 $\mathbf{b}=a_0/2[1\bar{1}0]$ 的刃位错, 新坐标系下柏氏矢量方向变为 $[100]$, 如图 6b 所示。

由 2 个刃位错组成的位错偶极子构型稳定, 是金属材料中常见的组织缺陷^[22]。为了研究位错偶极子对 Fe-Cr 合金中空洞演化的影响, 在 fcc 模型中引入如图

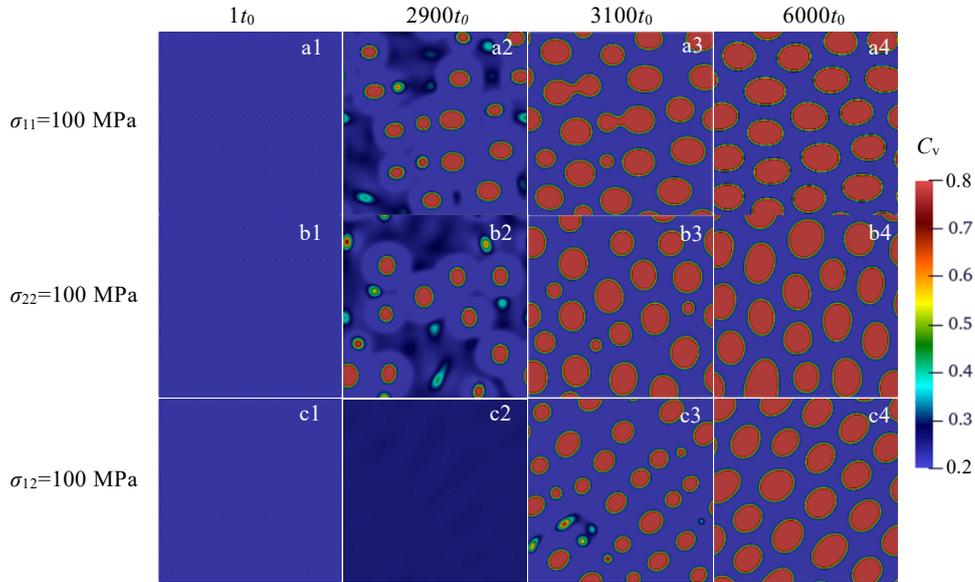


图 4 100 MPa 外加应力场作用下多空洞的演化

Fig.4 Morphological evolution of voids under 100 MPa external stress

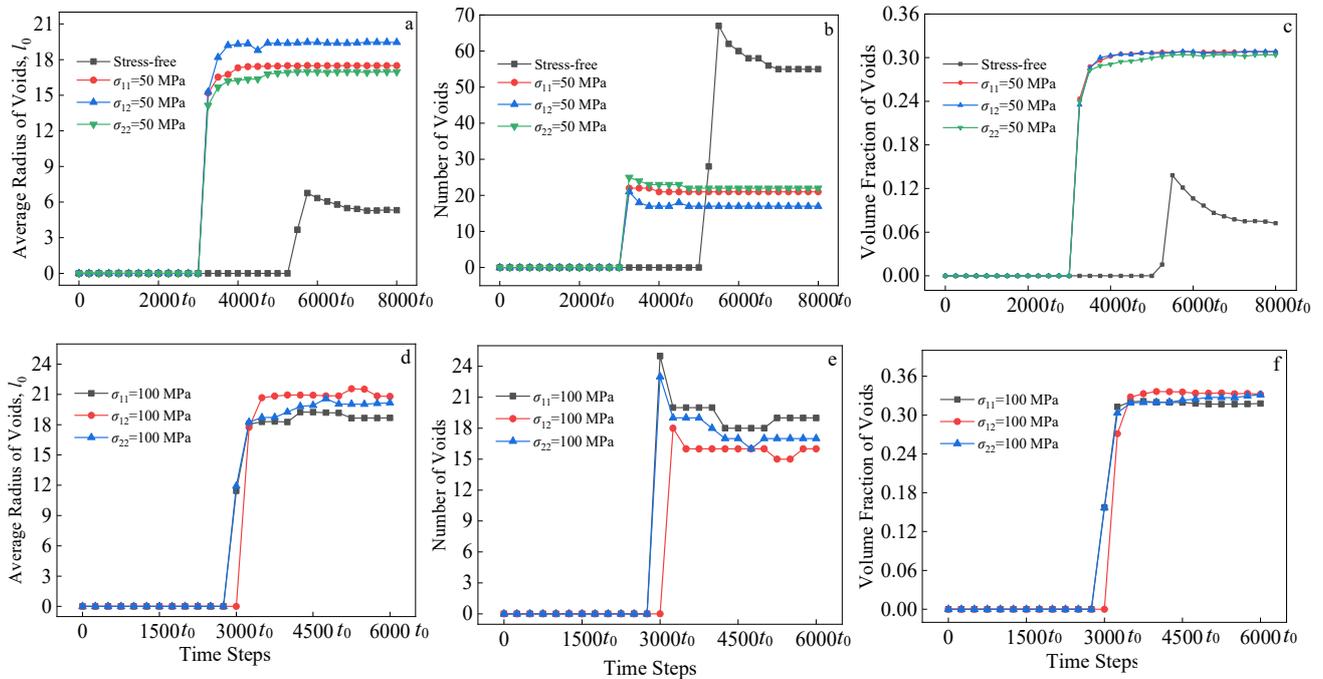


图 5 50 和 100 MPa 外加应力作用下空洞的平均半径、数量和体积分数

Fig.5 Average radius (a, d), number (b, e), and volume fraction (c, f) of voids with 50 MPa (a-c) and 100 MPa (d-f) applied stress

6c1 所示的位错偶极子，其应力状态分别如图 6c2~6c4 所示。图 7a1~7a6 为无位错作用下空洞的演化结果，图 7b1~7b6 为位错偶极子应力场作用下空洞的演化结果，位错偶极子倾向于吸收周围空位松弛位错应力场以降低位错产生的弹性应变能，在其位错核周围择优形核长大，3050 t_0 时，位错偶极子周围区域形成空位浓度比基体中空位浓度更低的“空位剥蚀区”（B 区域），和稍远位置的空位浓度显著高于基体中空位浓度“空位富集区”（A 区域）。无位错作用体系中空位浓度起伏均匀遍

布体系。3250 t_0 时，“空位富集区”出现空洞形核，由于空洞形核吸收了大量的空位，导致“空位剥蚀区”的空位浓度更低，而无位错偶极子作用的体系仍处于孕育期；3450 t_0 时，无位错偶极子作用的体系也出现了空洞形核现象，此时位错偶极子作用的体系中已有大量空洞形核，并不断长大。随着演化不断进行，到 8000 t_0 时，2 个体系的演化结果已基本一致。

位错阵列^[23]是金属在弹塑性应变过程常见的位错组态，同时在晶界处，位错也倾向于以位错阵列形式

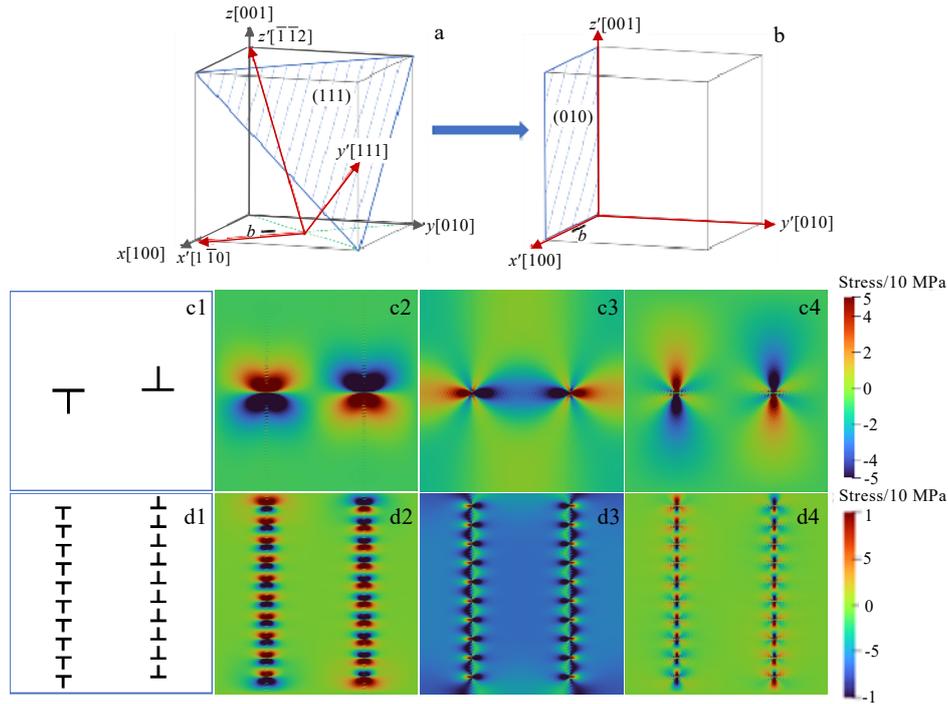


图 6 坐标系变换及位错组态示意图及位错应力场分布

Fig.6 Crystal coordination of fcc (the black coordination is the original coordination, the red is the new coordination, and the blue plane is the plane where the dislocation is located) (a); redefined coordination for convenience (b); schematic diagrams of dislocation dipole (c1) and dislocation array (d1); stress field distribution of σ_{11} , σ_{22} , and σ_{12} of dislocation dipoles (c2–c4) and dislocation arrays (d2–d4)

排列^[24]，因此有必要在位错偶极子的基础上进一步研究位错阵列应力场对空洞演化的影响。根据 Hull 等^[25]的研究以及 Moladje 等^[26]采用的位错阵列模型，图 6d1 给出了位错阵列的分布，图 6d2~6d4 给出了位错阵列的应力场，图 7c1~c6 为位错阵列应力场作用下 Fe-Cr 合金中的空洞演化。3050 t_0 时，紧邻位错应力场两侧处出现空洞形核现象，同时由于空洞形核吸收大量空位，导致空洞周围“空位剥蚀区”中空位浓度更低；3250 t_0 时，空洞沿着垂直于位错阵列的方向逐层形核，形成与位错阵列平行的阵列；3450 t_0 时，空洞形核基本完成，空洞开始不断粗化，

小空洞消失，大空洞不断长大；8000 t_0 时，整个体系已经趋于平衡。

为进一步对位错应力场对空洞演化影响进行研究，在图 8 中分别给出存在位错应力场与无位错应力场情况下空洞的平均半径、数量和体积分数，位错应力场均促进空洞优先在位错应力场附近形核。而无位错应力场的存在时，3450 t_0 时才会形成空洞。当体系趋于平衡时，相比于无位错应力场作用，位错应力场作用下，空洞数量增多、平均半径减小，体积分数基本不变。对比外加应力和位错应力场作用，全局应力引起的肿胀较位错更为显著。

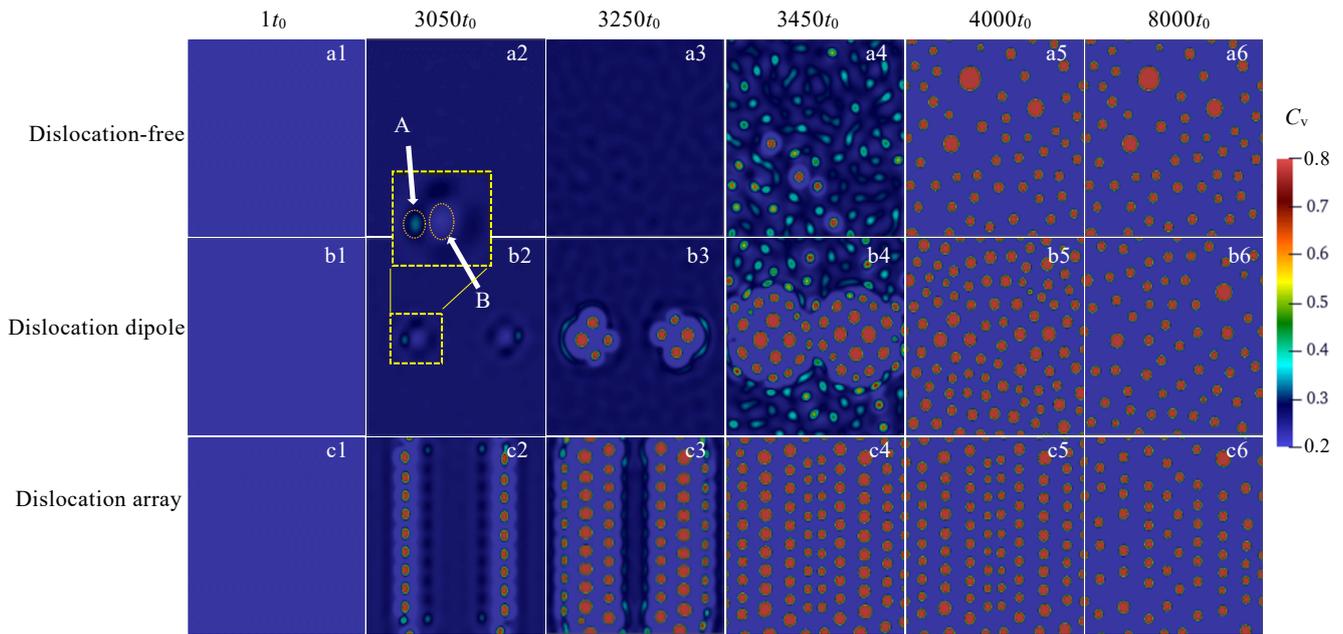


图 7 无位错作用和加入位错偶极子和位错阵列后空洞的演化

Fig.7 Evolution of voids without dislocation (a1–a6) and with the addition of dislocation dipoles (b1–b6) and arrays (c1–c6)

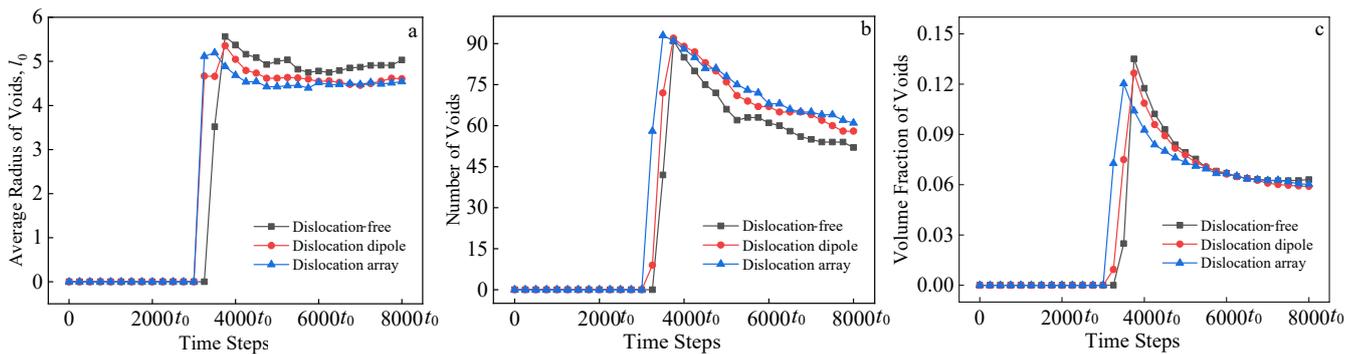


图 8 无位错应力状态、位错偶极子、位错阵列应力场下空洞的平均半径、数量和体积分数

Fig.8 Average radius (a), number (b), and volume fraction (c) of voids in dislocation-free, dislocation dipole stress field, and dislocation array stress field

3 结 论

1) 在外加应力作用下空位取向扩散, 改变空洞形貌和形核长大进程。空洞形貌发生改变, 外加应力迫使空洞沿着外加应力方向被拉长为纺锤形; 外加应力可以加速点缺陷的扩散, 缩短空洞的孕育期, 即加速空洞的形核与长大; 外加应力还会影响空洞最终的演化结果, 外加应力作用下, 大空洞更容易吞噬小空洞而长大, 导致空洞最终的尺寸比无应力作用下更大, 数量更少。外加应力进一步增大, 空洞平均尺寸增大、数量减少、体积分数增加, 形貌变化更加显著。

2) 位错偶极子会吸收位错周围的空位松弛位错应力场, 导致位错周围区域形成“空位剥蚀区”和稍远

位置的“空位富集区”, 空洞优先在“空位富集区”形核。空洞在位错线处形核长大将使位错线产生的弹性能降低, 这也促进了位错线处空洞的形核与长大。对比存在位错应力场与无位错应力场的演化结果, 发现位错应力场可以缩短空洞的孕育期, 促进空洞形核, 最终导致空洞数量增多、平均半径减小, 体积分数基本不变。

参考文献 References

[1] Yang Wendou(杨文斗). *Reactor Materials Science*(反应堆材料科学)[M]. Beijing: Atomic Energy Press, 2000: 18
 [2] Zhou Mingjin, Fu Baoqin, Hou Qing *et al.* *Journal of Nuclear Materials*[J], 2022, 566: 153772

- [3] Martínez Enrique, Soisson Frédéric, Nastar Maylise. *Journal of Nuclear Materials*[J], 2020, 539: 152233
- [4] Rokkam Srujan, El-Azab Anter, Millett Paul *et al. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2009, 17(6): 064002
- [5] Jiang Yanbo(姜彦博), Liu Wenbo(柳文波), Sun Zhipeng(孙志鹏) *et al. Acta Physica Sinica*(物理学报)[J], 2022, 71(2): 026103
- [6] Zarnas P D, Boyce B L, Qu J M *et al. International Journal of Solids and Structures*[J], 2021, 213: 103
- [7] Cui L J, Yang H L, Du Y F *et al. Journal of Nuclear Materials*[J], 2022, 569: 153920
- [8] Deng Qianqian, Gao Yingjun, Liu Zheyuan *et al. Physica B: Condensed Matter*[J], 2020, 578: 411767
- [9] Wang Yuanyuan, Ding Jianhua, Liu Wenbo *et al. Chinese Physics B*[J], 2017, 26(2): 026102
- [10] Xiao Zhihua, Wang Yafeng, Hu Shenyang *et al. Computational Materials Science*[J], 2020, 184: 109867
- [11] Moladje G F B, Thuinet L, Becquart C S *et al. Acta Materialia*[J], 2022, 225: 117523
- [12] Moladje G F B, Thuinet L, Becquart C S *et al. International Journal of Plasticity*[J], 2020, 134: 102810
- [13] Cahn J W, Hilliard J E. *The Journal of Chemical Physics*[J], 1958, 28(2): 258
- [14] Xia Lidong(夏礼栋), Huo Xiaojie(霍晓杰), Chen Hao(陈浩) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2021, 50(4): 1139
- [15] Sun Zhengyang(孙正阳), Wang Yutian(王昱天), Liu Wenbo(柳文波). *Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2020, 56(12): 1643
- [16] Liu Caiyan(刘彩艳), Feng Zehua(冯泽华), Zhang Yunpeng(张云鹏) *et al. Acta Metallurgica Sinica*(金属学报)[J], 2024, 60(9): 1279
- [17] Biner S B. *Programming Phase-Field Modeling*[M]. Berlin: Springer, 2017: 137
- [18] Hu S Y, Henager C H, Heinisch H L *et al. Journal of Nuclear Materials*[J], 2009, 392(2): 292
- [19] Hu S Y, Henager C H. *Acta Materialia*[J], 2010, 58(9): 3230
- [20] Chen Weijin, Peng Yuyi, Li Xu'an *et al. Journal of Applied Physics*[J], 2017, 122(15): 154102
- [21] Sprouster D J, Sun C, Zhang Y *et al. Scientific Reports*[J], 2019, 9(1): 2277
- [22] Haghghat S M H, Schäublin R. *Journal of Nuclear Materials*[J], 2015, 465: 648
- [23] Wang Bizheng, Tang Bei, You Chao *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2020, 775: 138789
- [24] Grekov M A, Sergeeva T S. *International Journal of Engineering Science*[J], 2020, 149: 103233
- [25] Hull D, Bacon D J. *Dislocation Arrays and Crystal Boundaries, 5th Ed*[M]. Oxford: Elsevier Butterworth Heinemann, 2011: 171
- [26] Moladje G F B, Thuinet L, Domain C *et al. Computational Materials Science*[J], 2020, 183: 109905

Stress-Induced Neutron Irradiation Voids of Austenite Steel Using Phase Field Method

Zhang Wei¹, Cheng Dazhao², Liu Caiyan³, Ma Cong¹, Wu Lu¹, Zhang Jing²

(1. The First Sub-Institute, Nuclear Power Institute of China, Chengdu 610005, China)

(2. State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

(3. School of Material Science and Engineering, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China)

Abstract: Irradiation swelling caused by irradiation voids is responsible for the failure of long-term serving austenite steel in the reactor core. A mesoscale phase field model coupled with rate theory and micro-elastic theory was used to investigate the stress effects on void microstructure of Fe-Cr austenite steel, when the applied global stress and local dislocation stress field were considered. Results show that the applied stress shortens the incubation period of nucleation of voids and accelerates the growth of voids, and the voids evolve into fusiform eventually. Voids in the stressed state have a larger radius and lower density compared with that in the stress-free state. The larger the applied stress, the larger the average radius and volume fraction, the smaller the number, and the more significant the morphology reconstruction. The local elastic stress field of dislocation dipole and dislocation array attracts vacancies to preferentially nucleate and grow around the dislocation nucleus. Compared with the dislocation-free system, the voids are denser and finer when dislocations exist, but the volume fraction of voids persists. In contrast, the applied stress should probably cause server swelling than dislocations in Fe-Cr alloys. The results of this study is conducive to the evaluation of microstructure aging and property decline of in-core austenitic steel.

Key words: rate theory; phase field; elastic stress; stress-induced void; void morphology

Corresponding author: Zhang Jing, Ph. D., Professor, State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, P. R. China, E-mail: jingzhang@nwpu.edu.cn