國統領

引用格式:曹蓓,白文秀,姚欢,等. 基于分子动力学模拟研究 FeCrAl 合金高温-辐照蠕变行为 [J]. 南方能源建设, 2025, 12(4): 1-10. CAO Bei, BAI Wenxiu, YAO Huan, et al. Thermal and irradiation creep behavior of fecral alloy based on molecular dynamics simulation [J]. Southern energy construction, 2025, 12(4): 1-10. DOI: 10.16516/j.ceec.2024-398.

基于分子动力学模拟研究 FeCrAl 合金 高温-辐照蠕变行为

曹蓓1, 白文秀2, 姚欢3,4,∞, 武俊梅4, 尹春雨5, 陈平5

(1. 鄂尔多斯职业学院, 内蒙古 鄂尔多斯 017000;

2. 汇能控股集团有限公司, 内蒙古鄂尔多斯 017000;

3. 鄂尔多斯应用技术学院, 内蒙古 鄂尔多斯 017000;

4. 西安交通大学 机械结构强度与振动国家重点实验室 航天航空学院, 陕西 西安 710049;

5. 中国核动力研究设计院核反应堆系统设计技术重点实验室,四川成都 610041)

摘要:[目的]FeCrAl合金以其优良的高温力学性能、抗辐照损伤能力与较高的制备技术成熟度成为耐事故核燃料包 壳的候选材料。由于中子辐照代价高、周期长、测试难,该合金的高温-辐照蠕变的相关研究较少。文章研究该合金 的高温蠕变和辐照蠕变行为,讨论辐照剂量率、温度及应力等参数对蠕变速率及蠕变本构参数的影响。[方法]通过 建立不同晶粒尺寸 FeCrAl合金晶体计算模型,采用分子动力学模拟软件 LAMMPS,开展了较宽温度、应力和辐照剂 量率范围内该合金的蠕变行为模拟。[结果]相比于高温蠕变速率,辐照蠕变速率明显较低。随着蠕变应力升高,高 温蠕变速率随应力增长速度逐渐加快,蠕变应力因子由0.9 增至2.0 左右,其中应力转折点为0.8 GPa。辐照蠕变速率 随应力和辐照剂量率的增加呈线性增长趋势,即辐照蠕变应力因子与剂量率因子都接近1.0。随着温度的上升,辐照 蠕变速率随剂量率的线性增长速度逐渐增大,辐照蠕变常数随之增加。[结论]高温-辐照条件下 FeCrAl 合金的蠕变性 能主要取决于热蠕变行为,且温度与应力升高加快了该合金的辐照蠕变过程。

关键词: 辐照蠕变; 高温蠕变; 燃料包壳; 分子动力学

| DOI: | 10.16516/j.ceec.2024-398 | 文章编号: 2095-8676(2025)04-0001-10 | |
|------|----------------------------|---------------------------------|----------------|
| CSTR | : 32391.14.j.ceec.2024-398 | 中图分类号: TL341 | 回己的神经 论立二维码 |

Thermal and Irradiation Creep Behavior of FeCrAl Alloy

Based on Molecular Dynamics Simulation

CAO Bei¹, BAI Wenxiu², YAO Huan^{3,4, ∞}, WU Junmei⁴, YIN Chunyu⁵, CHEN Ping⁵

(1. Ordos Vocational College, Ordos 017000, Inner Mongolia, China;

2. Huineng Coal Power Group Co., Ltd., Ordos 017000, Inner Mongolia, China;

3. Ordos Institute of Technology, Ordos 017000, Inner Mongolia, China;

4. School of Aerospace, State Key Laboratory for Strength and Vibration of Mechanical Structures,

Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, Shaanxi, China;

5. Science Technology on Reactor System Design Technology Laboratory, Nuclear Power Institute of China,

Chengdu 610041, Sichuan, China)

Abstract: [Objective] FeCrAl alloys have shown promise as candidate materials for accident tolerance fuel cladding because of their excellent high-temperature strength, irradiation resistance, and mature fabrication technology. There are fewer studies related to the

收稿日期: 2024-11-25 修回日期: 2024-12-11

基金项目: 国家重点研发计划项目(2019YFB1901003)

thermal and irradiation creep of FeCrAl alloys due to the high cost, long cycle time and difficult testing of neutron irradiation. The thermal and irradiation creep behavior of FeCrAl alloys were examined. And, the effects of irradiation dose rate, temperature and stress on the creep rate and parameters of the creep constitutive equations were analyzed. [Method] The creep simulations were performed on several FeCrAl samples with different grain sizes over a wide range of temperature, stress, and irradiation dose rates, using LAMMPS molecular dynamics simulator. [Result] The results show that the irradiation creep rate is significantly lower, compared to the thermal creep rate. As stress rises, the thermal creep rate increases exponentially, and the stress exponent increases roughly from 0.9 to 2.0 at the turning point of 0.8 GPa. The irradiation creep rate increases linearly with stress and dose rate, that is, the exponents of both dose rate and stress for irradiation creep are very close to 1.0. Besides, higher temperatures accelerates the linear increase of irradiation creep rate with dose rate, and the irradiation creep pre-factor becomes larger. [Conclusion] The creep of FeCrAl alloys under conditions of high temperature and irradiation is mainly attributed to the thermal creep behavior. Higher temperatures and stresses accelerate the irradiation creep process.

Key words: irradiation creep; high-temperature creep; fuel cladding; molecular dynamic

2095-8676 © 2025 Energy China GEDI. Publishing services by Energy Observer Magazine Co., Ltd. on behalf of Energy China GEDI. This is an open access article under the CC BY-NC license (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/).

0 引言

近年来,我国核电技术实现重大突破,自主创新 和国产化水平显著提升,为全球核电安全与发展贡 献了中国智慧[1-3]。堆芯安全是研发先进反应堆物理 系统的首要出发点,燃料包壳则是堆芯安全的重要 一环。核燃料包壳长时间工作在高温高压及强中子 辐照环境中,保持包壳的结构完整性对于反应堆的 安全运行非常重要^[4]。FeCrAl 合金以其优异的高温 力学性能与抗辐照损伤能力成为耐事故核燃料包壳 的候选替代材料^[5-7]。核燃料包壳作为反应堆的核心 结构材料,在长期服役过程中会发生高温蠕变、辐照 蠕变现象,导致材料机械性能降低,严重影响核能安 全。因此, 耐事故燃料包壳用 FeCrAl 合金的蠕变性 能对评价该材料性能至关重要。近年来,国内外学 者对 FeCrAl 合金的热蠕变性能进行了一些试验和 模拟研究。在试验研究方面,研究学者主要针对中 高温和低应力条件下 FeCrAl 合金的热蠕变性能和 变形机理进行了深入探讨。E. Arzt 等^[8]对 FeCrAl 合金的热蠕变性能进行了系统深入的研究,讨论了 蠕变速率随应力的变化规律。J. Bessona 等^[9] 研究发 现,温度在1073~1173 K之间,应力低于25 MPa, FeCrAl 合金的热蠕变速率更适合用 Sellars-Tegart 定 律表示, 而不是 Norton 定律。Kamikawa 等^[10] 研究 了在 1 273 K 时不同应力条件下 FeCrAl 合金的蠕变 速率,进一步提出蠕变应力对应力因子的影响规律。 应力区间 20~160 MPa, 高应力条件下应力因子 n 大致为 20, 中应力条件下减小到 2 左右。Yano 等^[11] 研究发现在 1273 K 以上的超高温下,添加 Zr 的 FeCrAl 合金薄壁管的抗拉强度和延伸率均高于未添 加 Zr 的薄壁管。Gussev 等^[12] 开展的原位爆管试验 表明,在失水事故工况下几种核级 FeCrAl 合金应力 因子 n 的变化区间为 2.9~4.5。

随着计算机模拟技术的发展,国内外学者利用 分子动力学(Molecular Dynamics, MD)模拟研究了 纳米晶体 Cu^[13], Ni^[14], MgY 合金^[15], NiZr 合金^[16] 和 FeNiCr 合金^[17] 的高温蠕变行为,并得出蠕变本构参 数随温度与应力的变化规律。Meraj 等^[18] 模拟了具 有双峰晶粒结构的纳米晶 Ni 的蠕变行为,并对不同 蠕变阶段的微观结构演变进行了分析。结果表 明,在细晶粒尺寸和分布相同的情况下,增大粗晶尺 寸有利于提高双峰纳米晶 Ni 的高温抗蠕变性能。 Pal^[16]等人研究发现相比于纳米晶 Ni 和 Zr 随机分布 的 NiZr 合金, 晶界局部弥散 Zr 的纳米晶 NiZr 合金 表现出更优异的抗蠕变性能,且抗蠕变性能随 Zr 原 子体积分数的增加而逐渐增强。Zhao 等人^[19]研究 了温度、应力和晶粒尺寸对纳米晶 TiAl 合金高温蠕 变性能及机制的影响。研究发现,温度与应力越高 或者晶粒尺寸越小,稳态阶段蠕变速率越大,蠕变过 程进入第三阶段越迅速。此外, MD 方法已成功地 应用于纳米晶体 Cu, Pd^[20] 和 Si^[21] 的晶界扩散蠕变以 及多种纳米级金属的塑性变形研究[22-23]。本文作者 在前期开展了不同蠕变条件下 FeCrAl 合金热蠕变 性能的模拟研究^[24],揭示了该合金高温蠕变速率 及变形机理随温度、应力和晶粒尺寸等参数的演化 规律。

中子辐照经济代价高昂、时间周期长且强活化, 使得核能结构材料的辐照性能试验研究面临众多挑 战。目前对核能材料辐照损伤行为的研究主要集中 在微观尺度上。研究表明[25],核能材料的中子辐照 损伤主要起源于晶格原子的移位级联。载能中子将 其绝大部分能量传递给晶格原子以激发碰撞级联, 产生大量自间隙子和空位,这些点缺陷复合、聚集及 与晶界等缺陷陷阱相互作用,最终演化造成材料微 观结构变化与宏观力学性能退化。近年来,众多学 者运用 MD 方法对材料辐照级联碰撞行为开展了系 列研究,取得了一定进展。Zhang 等人^[26]和 Sahi 等 人^[27] 分别模拟计算了 α-Fe 纳米线和 α-Fe 单晶的级 联碰撞过程,分析了不同温度和中子辐照条件下点 缺陷的空间分布及随时间的演化规律。Carlos 等^[28] 研究了辐照级联过程对 α-Fe 晶界结构的影响。Igor 等人^[29] 和 Wong 等人^[30] 研究指出,相比于纯 α-Fe 体 系,由于Cr的加入FeCr合金表现出更高的抗辐照 性能。随后, Malerba 和 Terentyevd 等人^[31-32] 研究了 FeCr 合金体系的辐照损伤行为,结果表明,间隙原子 团簇中存在的 Cr 会对由间隙原子组成的位错环的 运动造成阻碍。FeCrAl合金是近年来提出的一种新 型核燃料包壳材料,与 FeCr 合金体系相比, Al 的加 入使其具有更高的力学性能^[33]。Ye等人^[34]利用 LAMMPS 软件对 FeCrAl 合金体系的辐照级联过程 进行了模拟分析,研究发现,与α-Fe相比,FeCrAl合 金中 Cr 和 Al 的存在会导致稳定阶段残存的点缺陷 数量增多,但降低了缺陷演化过程中形成的点缺陷 团簇数。目前,针对高温-辐照条件下 FeCrAl 合金蠕 变性能的研究仍然相对匮乏。基于此,本文对 FeCrAl合金的热蠕变和辐照蠕变微观变形行为进行 了模拟研究,探讨了温度、应力和辐照剂量率等参数 对稳态蠕变速率的影响,进一步对蠕变本构方程的 关键参数进行了深入的分析。

1 计算模型与方法

1.1 模型构建

本文采用 Atomsk^[35] 晶体建模软件, 基于泰森多 边形镶嵌法建立了晶粒尺寸区间为 7.8~20 nm 的 FeCrAl 合金纳米晶体模型, 如图 1 所示。为了更好 地展示计算模型的晶界和晶内区域, 体心立方(Body-Centered Cubic, BCC)结构的原子以蓝色表示, 其他 结构(other)原子则以红色表示。所构建的模拟体系 为正方体盒子,晶粒取向随机分布。表1列出了不 同晶粒尺寸的 FeCrAl 合金纳米晶体计算模型参数。 Yamamoto 等人^[5] 基于对轻水堆燃料包壳用 FeCrAl 基合金材料的综合性能评估,确定出质量分数为 13%的 Cr和5%的 Al 为最佳成分配比。本文中所 有样品的合金组分均设定为 Fe-13Cr-5Al(wt%)。由 于 Cr和 Al 溶质原子均具有较低的空位形成能, FeCrAl 合金通常以 Fe 基体心立方(bcc)置换固溶体 的形式存在^[36-37]。基于此,本文利用 Python 语言编 程,通过在 bcc 结构的 α-Fe 基体中随机掺杂一定质 量分数的 Cr和 Al,建立了 Fe13Cr5Al 合金样品的计 算模型。



表 1 FeCrAl 合金晶体模型参数 Tab. 1 Model parameters of FeCrAl samples.

| 晶粒尺寸d /nm | 7.8 | 10 | 16 | 20 |
|-----------|------|------|------|------|
| 晶粒数目/个 | 12 | 12 | 8 | 8 |
| 原子数目/105 | 4.8 | 10.1 | 27.8 | 54.3 |
| 模拟盒子尺寸/nm | 17.9 | 22.9 | 32.0 | 40.0 |

1.2 模拟方法

本文采用 MD 模拟软件 LAMMPS^[38], 基于 Liao 等人^[39] 开发的 FeCrAl 合金原子间相互作用 EAM/ FS 势函数, 对上述构建的 FeCrAl 合金纳米晶进行热 蠕变与辐照蠕变微观模拟计算。在蠕变模拟计算前, 采用共轭梯度法对晶体模型进行能量最小化计算, 得到稳定初始构型。随后, 相继采用 NVT 系综和 NPT 系综对模拟体系进行弛豫, 弛豫时间为 600~3500 ps, 时间步长 0.001 ps。弛豫结束后, 在 NPT 系 综下对晶体模型进行蠕变变形模拟, 以负压代替拉 应力的方式在 y 轴施加 0.1~2.0 GPa 的蠕变应力, 蠕变温度区间 600~1 200 K。表 2 详细地列出了本 文中使用的蠕变模拟参数。

表 2 蠕变模拟参数 Tab. 2 Creep simulation parameters

| 晶粒尺寸d/nm | 7.8 | 10 | 16 | 20 |
|--------------------|---|-------|-------|-------|
| NVT/NPT弛豫时间/ps | 600 | 1 000 | 2 500 | 3 500 |
| 蠕变温度T/K | 600, 800, 1 000, 1 200 | | | |
| 蠕变应力 σ /GPa | 0.1, 0.3, 0.5, 0.8, 1.0, 1.2, 1.5, 1.8, 2.0 | | | |
| 辐照剂量率 /dpa/s | 0, 1E6, 2E6, 3E6, 4E6, 5E6, 6E6 | | | |

辐照对蠕变过程的影响,主要表现为晶格原子 的级联碰撞导致晶体内部产生高浓度的点缺陷及缺 陷团簇,这些缺陷在高温蠕变过程扩散、复合和演化, 对材料蠕变行为产生重要影响^[34]。在辐照、热、外 应力等作用下,点缺陷随时间演化造成材料力学性 能退化。本文为了实现辐照蠕变过程模拟,在蠕变 计算期间每间隔 30 ps,依据辐照剂量率参数,在模 型中随机引入相同数量的空位和自间隙原子。其中, 剂量率区间 0~6E6 dpa/s,蠕变模拟时间 350 ps。模 拟体系在 3 个方向均采用周期性边界条件。

1.3 蠕变本构模型的参数确定方法

鉴于稳态蠕变阶段持续时间较长,在总蠕变寿命中占比相对较高,通常采用稳态阶段的蠕变变形规律描述材料的蠕变特性。高温-辐照条件下 FeCrAl合金的总蠕变速率为热蠕变速率与辐照蠕变 速率的总和:

 $\dot{\varepsilon} = \dot{\varepsilon}_{\rm th} + \dot{\varepsilon}_{\rm ir} \tag{1}$

式中:

 $\dot{\varepsilon}_{\text{th}}$ ——热蠕变速率(s⁻¹);

 $\dot{\varepsilon}_{ir}$ ——辐照蠕变速率 (s^{-1}) 。

Mukherjee 和 Bird 等人^[40] 提出了热蠕变稳态阶段的蠕变本构方程,定义了热蠕变速率与温度、应力、晶粒尺寸以及材料本身性质之间的关系式^[41]:

$$\dot{\varepsilon}_{\rm th} = \frac{A_{\rm th} D_0 G b}{k_{\rm B} T} \left(\frac{b}{d}\right)^p \left(\frac{\sigma}{G}\right)^{n_{\rm th}} exp\left(-\frac{Q_{\rm c}}{k_{\rm B} T}\right) \qquad (2)$$

式中:

 D_0 ——扩散系数(m²/s); G——剪切模量(MPa); b——柏氏矢量(m); k_B ——玻尔兹曼常数 8.62×10⁻⁵(eV/K); T——温度(K); Σ ——应力(MPa); d——晶粒直径(m); Q_c ——热蠕变激活能(eV); P——热蠕变晶粒因子;

n_{th}——热蠕变应力因子。

辐照蠕变稳态阶段的蠕变速率与辐照剂量率 φ 和应力 σ之间的关系遵循下式:

$$\dot{\varepsilon}_{\rm ir} = A_{\rm ir} \phi^m \sigma^{n_{\rm ir}} \tag{3}$$

式中:

φ ——辐照剂量率(dpa/s);

*A*_{ir}——辐照蠕变常数(MPa⁻¹·dpa⁻¹);

*n*_{ir} ——辐照蠕变应力因子。

此外, n_{th}和 n_{ir}分别根据式(4)和式(5)计算得出:

$$n_{\rm th} = \frac{\partial \log \dot{\varepsilon}_{\rm th}}{\partial \log \sigma} \tag{4}$$

$$n_{\rm ir} = \frac{\partial \log \dot{\varepsilon}_{\rm ir}}{\partial \log \sigma} \tag{5}$$

2 蠕变性能分析

通过比对不同蠕变条件下 FeCrAl 合金的蠕变 变形曲线,探讨了温度、应力、辐照剂量率和晶粒尺 寸等参数对蠕变速率的影响规律。不同温度条件下, 辐照剂量率对蠕变曲线的影响规律如图 2 所示。图 中可以看出,0~50 ps,蠕变速率随时间不断减少,即 减速蠕变阶段或称蠕变第一阶段,之后蠕变速率保 持不变,蠕变进入稳态蠕变阶段或称蠕变第二阶段。 随着温度和辐照剂量率升高,FeCrAl 合金的稳态蠕 变速率不断增加。此外,随着温度的上升,蠕变速率 随剂量率的增长速度逐渐加快。这可以解释如下: 温度上升加快了晶格原子、空位及间隙原子扩散过 程,使得晶界扩散和晶格扩散速率增加。另一方面, 高温环境下提供了克服位错运动障碍的能量,最终 导致蠕变变形量和变形速率增加。

图 3 是不同蠕变应力条件下, 辐照剂量率对蠕 变曲线的影响规律。图中可知, 蠕变速率随着应力





与剂量率升高而显著增加。随着蠕变应力的提高, 蠕变速率随剂量率的增长速度逐渐加快。分析原因 如下:在恒定的应力作用下,沿特定位错方向(相当 于应力施加方向)辐照点缺陷产生不对等吸收,造成 晶粒沿某个方向的生长即晶格膨胀,且晶界上会产 生应力,导致材料强度下降和晶界断裂。随着蠕变 应力的升高,辐照点缺陷非均匀吸收所引起的晶粒 各向异性生长与晶界应力不断增加,蠕变变形量随 之增加。





图 4 给出的不同蠕变时刻位错缺陷空间分布结 果显示,晶体模型的刃位错密度明显高于螺位错,且 随着蠕变过程的进行,刃位错数量不断减少。在蠕 变外应力作用下,较大塑性变形下材料内部的空位 浓度增加,刃位错攀移过程加快,柏氏矢量方向相反 的刃型位错相遇会抵消,导致刃位错密度降低。 图 4 还显示,随着蠕变过程的进行,位错总体密度也 呈现不断下降的趋势。这是因为,在较高的外应力 作用下,位错能够克服周围晶格阻力,位错会发生滑 移和攀移运动,且位错运动速度随应力的增大而增 大。此外,晶体模型的位错主要位于晶界区域,运动 的位错更容易被晶界吸收而发生湮灭,使其密度不 断降低。值得一提,晶界区域作为辐照产生点缺陷 重要的源和阱,在高温和外应力作用下既可以释放 大量的点缺陷,还有效吸收、捕获和湮灭辐照产生的 点缺陷,以降低其能量。这说明外应力条件下,位错 运动加快且位错密度有所降低。应力加载方向的位 错运动速度与位错密度差异均会影响晶界和位错对 辐照引入点缺陷的吸收效率,进而导致蠕变变形量 发生改变。



图 4 温度 800 K 应力 1.0 GPa 蠕变经历不同时长后 晶体位错缺陷空间分布



图 5 展示了不同晶粒尺寸条件下, 辐照剂量率 对蠕变曲线的影响规律。从图中可知, 随着晶粒尺 寸的增加, FeCrAl 合金的稳态蠕变速率明显降低。 对于纳米晶体材料而言, 晶界作为重要的组元占有 很大的体积分数, 这使得空位、空位团和自间隙原子 等点缺陷明显增多。随着晶粒尺寸的增加, 晶界体 积分数大幅度减少, 晶体缺陷密度随之降低, 使得材 料的力学性能得到提高。这也能够从某种程度上解 释 FeCrAl 合金纳米晶的蠕变速率随晶粒尺寸增加 逐渐降低的原因。图 5 中还可以看出, 随着晶粒尺 寸的增加, 蠕变速率随剂量率的增长速度明显加快。 分析其原因如下:材料受中子辐照后产生了大量的 自间隙子与空位,这些点缺陷在扩散、迁移过程中, 通过与位错、晶界、空洞等相互作用发生复合、聚集 和湮灭^[42]。Zinkle等人^[43]研究指出,晶界作为缺陷 势阱能够显著地捕获、消除和吸收点缺陷,又称缺陷 耗尽区。这表明辐照点缺陷从其产生处开始扩散, 终止于缺陷势阱。随着晶粒尺寸的增加,晶界体积 分数大幅度减少,使得点缺陷迁移过程中被晶界捕 获、吸收的几率明显降低,辐照剂量率对蠕变速率的 影响随之增加。



图 5 不同晶粒尺寸条件下辐照剂量率对蠕变曲线的影响 Fig. 5 Creep curves under different grain sizes and irradiation dose rates

3 蠕变本构参数分析

本文根据 FeCrAl 合金的蠕变速率随温度、应力 和辐照剂量率等参数的变化规律,总结得出不同高 温-中子辐照条件下的热蠕变应力因子 nth, 辐照蠕变 应力因子 n_{ir}、剂量率因子 m 和辐照蠕变常数 A_{ir}。 图 6 是晶粒尺寸为 10 nm,不同温度条件下 FeCrAl 合金的稳态蠕变速率与应力的双对数关系曲线。从 图中可以看出,随着蠕变应力升高,热蠕变速率随应 力增长速度逐渐加快。应力区间在 0.1~2.0 GPa, 热 蠕变应力因子 n_t 随应力增加由 0.9 增至 2.0 左右, 其中应力转折点为 0.8 GPa。此外,在 600~1200 K 的温度区间内,相比于应力,温度对热蠕变应力因子 的影响相对较小。在不同的温度与应力条件下,辐 照蠕变应力因子的变化幅度较小, n_a 基本在 1.0 附近 波动。这表明, FeCrAl 合金的辐照蠕变速率随应力 增加呈线性增长趋势。通过比较不同蠕变条件下的 热蠕变速率与辐照蠕变速率,容易得出热蠕变速率 明显高于辐照蠕变速率。另一方面,蠕变应力因子 n 随应力的变化规律与热蠕变应力因子 n_{th} 基本一致。 以上分析可知,高温-辐照条件下 FeCrAl 合金的蠕变 性能主要取决于热蠕变行为,而受辐照蠕变行为的 影响相对较小。值得指出,热蠕变速率高于辐照蠕 变速率,这一现象与文献报道的模拟结果一致^[41]。

由图 6 可见,纳米晶 FeCrAl 样品的热蠕变应力 因子 n_{th} 与通过 MD 方法获得的纳米晶 Ni^[14]、Cu^[44] 和 Ti-Al 合金^[19] 的模拟结果相近。国内外针对常见 晶体材料的研究表明,应力因子的不同标志着蠕变 机制的重要转变^[45-49]。因此,通过 n_{th} 的值可以推断 蠕变变形的内在机制:当 n_{th}=2 时,蠕变主要由晶界 滑动引起, n_{th}=1 则意味着晶格扩散和晶界扩散成为 蠕变变形的主要机制。结合图 6 可知,在低应力条 件下,纳米晶 FeCrAl 的热蠕变机制主要由扩散蠕变 控制。当应力增加到 0.8 至 2.0 GPa 时,蠕变机制转 变为晶界滑动。这一发现与商用 FeCrAl 合金的最 新实验结果相吻合,该研究指出,随着应力的降低, 蠕变机制从传统的位错运动转变为伴随扩散蠕变的 晶界滑动^[10]。

目前, MD 模拟结果与实际商用 FeCrAl 合金的 实验数据相比,呈现出更高的蠕变速率和较低的应 力因子。以下是对此现象的阐释:首先, MD 模拟的 时间步长极为精细,导致其时间尺度通常限于皮秒 至纳秒级别。为了加速蠕变过程的早期阶段,模拟 中施加了极高的应力,从而导致观测到的高蠕变速 率。这一现象在相关文献的模拟研究中也得到了体 现和证实[15,17,19,50]。此外, MD 模拟的模型尺寸相较 于实验样品小了5个数量级,这表明计算模型实际 上代表了实验样品的基本单元。因此,模拟中观察 到的较高蠕变速率和较低应力因子,从理论模型与 实际样品尺寸差异的角度来看,是合理且符合预期 的。尽管 MD 模拟所获得的高蠕变速率不能直接应 用于 FeCrAl 包壳材料在实际工况下的设计, 但是纳 米晶材料在高温及辐照环境中的蠕变本构参数,可 以通过分析稳态蠕变速率与应力、辐照剂量率之间 的变化关系来确立。近年来,众多研究者采用 MD 方法对纳米晶材料在高温条件下的蠕变行为和机理 进行了深入研究。基于模拟结果,一些研究者已 成功构建了适用于纳米晶金属和合金的蠕变本构模 刑^[15, 17, 19, 50]





本文进一步研究了不同温度条件下, FeCrAl 合 金的辐照蠕变速率随剂量率参数的变化规律,如 图 7 所示。从图中可以看出, 当蠕变温度和应力保 持恒定,随着辐照剂量率的增加,FeCrAl合金的辐照 蠕变速率呈线性增长趋势。不同蠕变温度条件下, 辐照蠕变速率随剂量率增加呈线性增长这一变化特 征,也表明了辐照蠕变本构方程的剂量率因子 m 大 致为1。根据辐照蠕变速率与剂量率的线性拟合斜 率值 k,本文进一步推断得出辐照蠕变常数 A_{ir},见 图 7。从图中可知,随着蠕变温度的升高,辐照蠕变 常数 A_i 逐渐增加。当温度从 600 K 上升至 1200 K, A_{ir}由 2.77×10⁻⁴ 增加至 4.76×10⁻⁴。这表明, 随着温度 的上升,辐照蠕变速率随剂量率的增长速度明显加 快,即辐照蠕变速率对中子辐照剂量的敏感性逐渐 增强。基于以上,温度与应力升高加快了该合金的 辐照蠕变过程。综合图 6 与图 7 可以得出,高温-中 子辐照条件下 FeCrAl 合金的热蠕变速率明显高于 辐照蠕变速率,蠕变性能主要取决于热蠕变行为,受 辐照蠕变行为的影响相对较小。随着蠕变应力升高, 热蠕变应力因子由 0.9 增至 2.0 左右,其中应力转折 点为 0.8 GPa。相比于应力,蠕变温度对热蠕变应力 因子的影响相对较小。在不同的温度与应力条件下, 辐照蠕变应力因子的变化幅度较小, n_i 基本在 1.0 附



图 7 不同温度条件下辐照蠕变速率与剂量率的关系曲线 Fig. 7 Plots of the irradiation creep rate vs dose rate at different temperatures

近波动。当蠕变温度和应力保持恒定,辐照蠕变速 率随着剂量率增加呈线性增长规律,即剂量率因子 m大致为1.0。随着温度的上升,辐照蠕变速率随剂 量率的线性增长速度逐渐增大,辐照蠕变常数*A*_a随 之增加。这意味着热蠕变与辐照蠕变之间存在显著 的相互作用,两者相互增强,大幅提升了材料蠕变损 伤的严重程度。

本文拟合得到的 FeCrAl 合金高温-辐照蠕变本 构方程中的 n_u和 m 值与美国橡树岭国家实验室 (Oak Ridge National Laboratory, ORNL)的堆内实验 结果相一致^[7,41]。基于他们的堆内实验数据, FeCrAl 包壳的辐照蠕变剂量率因子 m 和应力因子 n, 均等 于1.0。值得一提,在纳米晶Cu样品的MD模拟中 也得到了类似的结果^[51]。研究发现,辐照剂量率在 5×10⁵~6×10⁶ dpa/s 范围内, 辐照蠕变速率随剂量率 增加呈线性增加趋势。在较宽的应力范围内,辐照 蠕变速率与所施加的应力也呈线性关系。此外,本 文拟合得到的辐照蠕变常数 A_{ii} 与文献中纳米晶 Cu 样品的模拟结果也非常吻合[51]。研究发现,平均晶粒 尺寸为6nm的纳米晶Cu样品,当温度为300K,辐照 剂量率为 3×10⁶ dpa/s, A_{ir} 约为 4.8×10⁻⁴ MPa⁻¹dpa^{-1[51]}。 如图 6 所示,对于晶粒尺寸 10 nm 的纳米晶 FeCrAl 样品,温度 600~1200 K 范围内, Air 大致由 2.77× 10⁻⁴ MPa⁻¹dpa⁻¹ 增至 4.76×10⁻⁴ MPa⁻¹dpa⁻¹。基于上述 结果与讨论,本研究小组将进一步探讨 FeCrAl 合金 的高温-辐照蠕变机制,以为 FeCrA 包壳的设计和服 役期内辐照的影响分析提供支持。

4 结论

本文利用 MD 方法模拟研究了高温-中子辐照 条件下 FeCrAl 合金的蠕变性能, 探讨了温度、应力 和辐照剂量率等参数对蠕变速率的影响规律, 进一 步对蠕变本构方程的关键参数进行了深入的分析。 主要得出以下结论:

1)高温-中子辐照条件下 FeCrAl 合金的热蠕变 速率明显高于辐照蠕变速率,蠕变性能主要取决于 热蠕变变形行为,受辐照蠕变行为的影响相对较小。 随着蠕变温度、应力的升高,或晶粒尺寸的降低,蠕 变速率明显增加,且蠕变速率随辐照剂量率的增长 速度逐渐加快。

2)随着蠕变应力升高,热蠕变速率随应力增长

速度逐渐加快。应力区间在 0.1~2.0 GPa, 热蠕变应 力因子 n_{th} 随应力增加由 0.9 增至 2.0 左右, 应力转 折点为 0.8 GPa。相比于应力, 蠕变温度对热蠕变应 力因子的影响相对较小。

3) 辐照蠕变速率随着剂量率的增加呈线性增长 趋势, 即剂量率因子 m 为 1.0。在不同的温度与应力 条件下, 辐照蠕变应力因子的变化幅度较小, n_i 基本 在 1.1 附近波动。随着温度的上升, 辐照蠕变速率随 剂量率的线性增长速度逐渐增大, 辐照蠕变常数随 之增加。

参考文献:

- [1] 高鹏. 华龙一号安全重要压力变送器设备鉴定研究 [J]. 南方 能源建设, 2022, 9(2): 107-112. DOI: 10.16516/j.gedi.issn 2095-8676.2022.02.015.
 GAO P. Research on equipment qualification for pressure transmitter important to safety of HPR1000 [J]. Southern energy construction, 2022, 9(2): 107-112. DOI: 10.16516/j.gedi.issn 2095-8676.2022.02.015.
- [2] 雷川,程鹏,张智军.高温气冷堆示范工程反应堆保护系统调试工具研发与应用[J].南方能源建设,2023,10(6):153-159. DOI: 10.16516/j.gedi.issn2095-8676.2023.06.018.
 LEI C, CHENG P, ZHANG Z J. R&D and application of commissioning tools for reactor protection system of high-temperature gas-cooled reactor-pebble-bed module [J]. Southern energy construction, 2023, 10(6): 153-159. DOI: 10.16516/j.gedi. issn2095-8676.2023.06.018.
- [3] 张玉祯,廖佰凤,汪静,等. 压水堆核电站工业供汽系统技术可行性研究[J].南方能源建设, 2022, 9(2): 120-124. DOI: 10. 16516/j.gedi.issn2095-8676.2022.02.017.
 ZHANG Y Z, LIAO B F, WANG J, et al. Feasibility research in the technology for industrial steam supply by PWR nuclear power plant [J]. Southern energy construction, 2022, 9(2): 120-124. DOI: 10.16516/j.gedi.issn2095-8676.2022.02.017.
- [4] 孙婧, 马秀歌, 陈巧艳. 事故后安全壳内环境条件计算分析 [J]. 南方能源建设, 2015, 2(4): 53-56. DOI: 10.16516/j.gedi.issn2095-8676.2015.04.008.

SUN J, MA X G, CHEN Q Y. Computational analysis of environment condition inside containment after accident [J]. Southern energy construction, 2015, 2(4): 53-56. DOI: 10.16516/ j.gedi.issn2095-8676.2015.04.008.

- [5] YAMAMOTO Y, PINT B A, TERRANI K A, et al. Development and property evaluation of nuclear grade wrought FeCrAl fuel cladding for light water reactors [J]. Journal of nuclear materials, 2015, 467: 703-716. DOI: 10.1016/j.jnucmat. 2015.10.019.
- [6] DRYEPONDT S, UNOCIC K A, HOELZER D T, et al. Development of low-Cr ODS FeCrAl alloys for accident-tolerant fuel cladding [J]. Journal of nuclear materials, 2018, 501: 59-71.

9

DOI: 10.1016/j.jnucmat.2017.12.035.

- QIU B W, WANG J, DENG Y B, et al. A review on thermohydraulic and mechanical-physical properties of SiC, FeCrAl and Ti₃SiC₂ for ATF cladding [J]. Nuclear engineering and technology, 2020, 52(1): 1-13. DOI: 10.1016/j.net.2019.07. 030.
- [8] ARTZ E. Creep of dispersion strengthened materials: a critical assessment [J]. Res mechanica, 1991, 31: 399-453. DOI: 10. 22028/D291-23975.
- [9] BÉRARD P, BARTOUT J D, REYTIER M, et al. Viscoplastic behavior of a FeCrAl alloy for high temperature steam electrolysis (HTSE) sealing applications between 700°C and 900°C [J]. Materials science and engineering A, 2011, 528(12): 4092-4097. DOI: 10.1016/j.msea.2011.01.050.
- [10] KAMIKAWA R, UKAI S, KASAI S, et al. Cooperative grain boundary sliding in creep deformation of FeCrAI-ODS steels at high temperature and low strain rate [J]. Journal of nuclear materials, 2018, 511: 591-597. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2018.04. 050.
- [11] YANO Y, TANNO T, OKA H, et al. Ultra-high temperature tensile properties of ODS steel claddings under severe accident conditions [J]. Journal of nuclear materials, 2017, 487: 229-237. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2017.02.021.
- [12] GUSSEV M N, BYUN T S, YAMAMOTO Y, et al. In-situ tube burst testing and high-temperature deformation behavior of candidate materials for accident tolerant fuel cladding [J]. Journal of nuclear materials, 2015, 466: 417-425. DOI: 10.1016/j. jnucmat.2015.08.030.
- WANG Y J, ISHII A, OGATA S. Grain size dependence of creep in nanocrystalline copper by molecular dynamics [J]. Materials transactions, 2012, 53(1): 156-160. DOI: 10.2320/matertrans. MD201122.
- [14] NIE K, WU W P, ZHANG X L, et al. Molecular dynamics study on the grain size, temperature, and stress dependence of creep behavior in nanocrystalline nickel [J]. Journal of materials science, 2017, 52(4): 2180-2191. DOI: 10.1007/s10853-016-0506-3.
- [15] BHATIA M A, MATHAUDHU S N, SOLANKI K N. Atomicscale investigation of creep behavior in nanocrystalline Mg and Mg-Y alloys [J]. Acta materialia, 2015, 99: 382-391. DOI: 10. 1016/j.actamat.2015.07.068.
- [16] PAL S, MERAJ M, DENG C. Effect of Zr addition on creep properties of ultra-fine grained nanocrystalline Ni studied by molecular dynamics simulations [J]. Computational materials science, 2017, 126: 382-392. DOI: 10.1016/j.commatsci.2016.10. 013.
- [17] PAL S, MERAJ M. Structural evaluation and deformation features of interface of joint between nano-crystalline Fe-Ni-Cr alloy and nano-crystalline Ni during creep process [J]. Materials & design, 2016, 108: 168-182. DOI: 10.1016/j.matdes.2016.06.086.
- [18] MERAJ M, PAL S. Nano-scale simulation based study of creep behavior of bimodal nanocrystalline face centered cubic metal [J].

Journal of molecular modeling, 2017, 23(11): 309. DOI: 10.1007/ s00894-017-3481-y.

- [19] ZHAO F, ZHANG J, HE C W, et al. Molecular dynamics simulation on creep behavior of nanocrystalline TiAl alloy [J]. Nanomaterials, 2020, 10(9): 1693. DOI: 10.3390/nano10091693.
- [20] YAMAKOV V, WOLF D, PHILLPOT S R, et al. Grainboundary diffusion creep in nanocrystalline palladium by molecular-dynamics simulation [J]. Acta materialia, 2002, 50(1): 61-73. DOI: 10.1016/S1359-6454(01)00329-9.
- [21] KEBLINSKI P, WOLF D, GLEITER H. Molecular-dynamics simulation of grain-boundary diffusion creep [J]. Interface science, 1998, 6(3): 205-212. DOI: 10.1023/A:1008664218857.
- [22] YAMAKOV V, WOLF D, PHILLPOT S R, et al. Deformationmechanism map for nanocrystalline metals by moleculardynamics simulation [J]. Nature materials, 2004, 3(1): 43-47. DOI: 10.1038/nmat1035.
- [23] ZHANG F, LIU Z, ZHOU J Q. Molecular dynamics simulation of micro-mechanical deformations in polycrystalline copper with bimodal structures [J]. Materials letters, 2016, 183: 261-264. DOI: 10.1016/j.matlet.2016.07.122.
- [24] YAO H, YE T Z, YU W S, et al. Atomic-scale investigation of creep behavior and deformation mechanism in nanocrystalline FeCrAl alloys [J]. Materials & design, 2021, 206: 109766. DOI: 10.1016/j.matdes.2021.109766.
- [25] 郁金南. 材料辐照效应 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2007: 32-137.

YU J N. Radiation effects of materials [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2007: 132-137.

- [26] ZHANG M, PENG W X, ZHANG H L, et al. The effect of PKA directions on the primary radiation damage in the alpha iron nanowires [J]. Materials chemistry and physics, 2019, 232: 16-22. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2019.04.038.
- [27] SAHI Q U A, KIM Y S. Primary radiation damage characterization of α-iron under irradiation temperature for various PKA energies [J]. Materials research express, 2018, 5(4): 046518. DOI: 10.1088/2053-1591/aabb6f.
- [28] CAMPAÑÁ C, BOYLE K P, MILLER R E. Grain boundary motion assisted via radiation cascades in bcc Fe [J]. Physical review B, 2008, 78(13): 134114. DOI: 10.1103/PhysRevB.78. 134114.
- [29] ABRIKOSOV I A, PONOMAREVA A V, BARANNIKOVA S A, et al. Multiscale approach to theoretical simulations of materials for nuclear energy applications: Fe-Cr and Zr-based alloys [J]. MRS online proceedings library, 2013, 1514(1): 3-14. DOI: 10.1557/opl.2013.43.
- [30] WONG K L, LEE H J, SHIM J H, et al. Multiscale modeling of point defect interactions in Fe–Cr alloys [J]. Journal of nuclear materials, 2009, 386-388: 227-230. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2008. 12.092.
- [31] MALERBA L, TERENTYEV D, OLSSON P, et al. Molecular dynamics simulation of displacement cascades in Fe-Cr alloys [J]. Journal of nuclear materials, 2004, 329-333: 1156-1160. DOI: 10.

1016/j.jnucmat.2004.04.270.

- [32] TERENTYEV D, MALERBA L, BARASHEV A V. On the correlation between self-interstitial cluster diffusivity and irradiation-induced swelling in Fe-Cr alloys [J]. Philosophical magazine letters, 2005, 85(11): 587-594. DOI: 10.1080/09500 830500383563.
- [33] EDMONDSON P D, BRIGGS S A, Y. YAMAMOTO N, et al. Irradiation-enhanced α' precipitation in model FeCrAl alloys [J]. Scripta materialia, 2016, 116: 112-116. DOI: 10.1016/j.scriptamat. 2016.02.002.
- [34] YE T Z, YAO H, WU Y W, et al. Primary radiation damage characteristics in displacement cascades of FeCrAl alloys [J]. Journal of nuclear materials, 2021, 549: 152909. DOI: 10.1016/j. jnucmat.2021.152909.
- [35] HIREL P. Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files [J]. Computer physics communications, 2015, 197: 212-219. DOI: 10.1016/j.cpc.2015.07.012.
- [36] AGHAMIRI S M S, SOWA T, UKAI S, et al. Microstructure and texture evolution and ring-tensile properties of recrystallized FeCrAl ODS cladding tubes [J]. Materials science and engineering: A, 2020, 771: 138636. DOI: 10.1016/j.msea.2019. 138636.
- [37] AMARA H, FU C C, SOISSON R, et al. Aluminum and vacancies in α-iron: Dissolution, diffusion, and clustering [J]. Physical review B, 2010, 81(17) : 174101. DOI: 10.1103/ PhysRevB.81.174101.
- [38] PLIMPTON, STEVE, THOMPSON, et al. Molecular dynamics simulations from SNL's large-scale atomic/molecular massively parallel simulator (LAMMPS) [J]. 2011. (查阅网上资料,未找 到本条文献信息, 请确认)
- [39] LIAO X C, GONG H F, CHEN Y C, et al. Interatomic potentials and defect properties of Fe–Cr–Al alloys [J]. Journal of nuclear materials, 2020, 541: 152421. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2020. 152421.
- [40] MUKHERJEE A K, BIRD J E, DORN J E. Experimental correlations for high-temperature creep [J]. ASM transactions quarterly, 1969, 62(1): 155.
- [41] SWEET R T, GEORGE N M, MALDONADO G I, et al. Fuel performance simulation of iron-chrome-aluminum (FeCrAl) cladding during steady-state LWR operation [J]. Nuclear engineering and design, 2018, 328: 10-26. DOI: 10.1016/j. nucengdes.2017.11.043.
- [42] KWON J, KIM W, HONG J H. Comparison of the primary damage states in iron and nickel by molecular dynamics simulations [J]. Radiation Effects and Defects in Solids, 2006, 161(4): 207-218. DOI: 10.1080/10420150600704013.
- [43] ZINKLE S J. Microstructure of ion irradiated ceramic insulators

[J]. Nuclear instruments and methods in physics research section B: beam interactions with materials and atoms, 1994, 91(1/4): 234-246. DOI: 10.1016/0168-583X(94)96224-3.

- [44] WANG Y J, ISHII A, OGATA S. Transition of creep mechanism in nanocrystalline metals [J]. Physical review B, 2011, 84(22): 224102. DOI: 10.1103/PhysRevB.84.224102.
- [45] NABBARRO F R N. Deformation of crystals by motion of single ions [R]. London: Physical Society, 1948: 1-19.
- [46] HERRING C. Diffusional viscosity of a polycrystalline solid [J]. Journal of applied physics, 1950, 21(5): 437-445. DOI: 10.1063/ 1.1699681.
- [47] COBLE R L. A model for boundary diffusion controlled creep in polycrystalline materials [J]. Journal of applied physics, 1963, 34(6): 1679-1682. DOI: 10.1063/1.1702656.
- [48] GIFKINS R C. Diffusional creep mechanisms [J]. Journal of the American ceramic society, 1968, 51(2): 69-72. DOI: 10.1111/j. 1151-2916.1968.tb11838.x.
- [49] LÜTHY H, WHITE R A, SHERBY O D. Grain boundary sliding and deformation mechanism maps [J]. Materials science and engineering, 1979, 39(2): 211-216. DOI: 10.1016/0025-5416(79) 90060-0.
- [50] PAL S, REDDY K V, SPEAROT D E. Zr segregation in Ni-Zr alloy: implication on deformation mechanism during shear loading and bending creep [J]. Journal of materials science, 2020, 55(14): 6172-6186. DOI: 10.1007/s10853-020-04411-1.
- [51] ASHKENAZY Y, AVERBACK R S. Irradiation induced grain boundary flow-a new creep mechanism at the nanoscale [J]. Nano letters, 2012, 12(8): 4084-4089. DOI: 10.1021/nl301554k.

作者简介:



曹蓓(第一作者)

1989-, 女, 讲师, 中级工程师, 北京科技大学 安全科学与工程硕士, 主要从事煤矿安全管 理工作(e-mail)825146028@qq.com。

姚欢(通信作者)



1994-, 女, 讲师, 西安交通大学航空宇航科 学与技术博士, 主要从事核燃料包壳蠕变性 能分析工作(e-mail)yaohuan@oit.edu.cn。

(编辑 叶筠英)