

前沿领域综述

论 FeCr 合金辐照损伤的多尺度模拟^{*}

贺新福[†] 杨文 樊胜

(中国原子能科学研究院, 北京 102413)

(2009 年 1 月 7 日收到, 2009 年 3 月 18 日收到修改稿)

铁素体/马氏体钢具有优异的抗辐照肿胀和抗腐蚀能力, 是聚变堆、ADS 和四代堆结构材料重要候选者之一. 多尺度模拟在核武器自辐照损伤、压力容器辐照脆化、医学材料辐照损伤等方面有着广泛的应用. 国际上围绕 F/M FeCr 合金辐照损伤开展了大量的多尺度模拟工作. 论文概述了 F/M FeCr 合金辐照损伤多尺度模拟研究现状及进展, 并针对目前存在的某些问题提出了解决建议.

关键词: 铁素体/马氏体 FeCr 合金, 辐照损伤, 多尺度模拟

PACC: 2846, 6180, 8220W

1. 引言

核能是人类生存和发展不可或缺的主要能源之一. 未来聚变能的利用有可能彻底解决人类的能源问题. 我国《核电中长期发展规划(2005—2020 年)》中, 提出了核电由“适当发展”向“积极发展”的战略性转变, 自主发展先进核能技术并将其副作用降至最低限度, 是我国核科技工作者的使命和挑战. 随着核能系统经济性和安全性的提高, 其运行温度升高、中子通量增大等严酷的工况对结构材料提出了苛刻的要求. 研发新的堆内材料成为发展先进核能系统的一个技术关键, 也是材料科学范畴的一大科学挑战, 而辐照效应则是核材料研发过程中面临的最主要问题之一.

辐照对材料性能的影响跨越了很大时间、空间尺度(从原子碰撞(10^{-15} s, 10^{-9} m)到宏观力学性能(10^9 s, 10^{-3} m))^[1], 由于材料辐照实验的昂贵费用, 纯粹的辐照实验研究是不现实的. 虽然计算机模拟不能替代辐照实验, 但通过少量的辐照实验结合计算机模拟是研究材料辐照性能的有效途径.

计算机模拟材料辐照效应必须考虑上述时间、空

间尺度内的相关物理过程. 近年来科技界提出了材料辐照损伤的多尺度模拟(multi-scale modeling)^[2,3]. 图 1 为多尺度模拟材料辐照效应研究方法示意图. 多尺度模拟包含的方法按空间尺度由小到大分别为: 第一性原理计算材料的电子结构和缺陷特征能, 相应的实验技术主要是核磁共振、分子动力学、动力学 Monte Carlo(MC)、场方程及速率理论(rate theory)等研究溶质、杂质、缺陷等的演化过程, 以及预测显微结构的演化. 相应的实验方法为正电子湮没、TEM 等. 动力学 MC、3 维位错动力学、连续体力学等研究材料的宏观力学性能, 相应的实验技术为常规的材料力学性能测试技术. 值得指出的是, 由于原子间的相互作用势函数决定着材料的结构及其内禀力学和电磁特性, 且势函数是分子动力学和动力学 MC 模拟的基础, 因此势函数在多尺度模拟中扮演着重要的角色.

实验表明含 2%—6% Cr 的铁素体/马氏体(Ferritic/Martensitic F/M)钢具有优异的抗辐照肿胀和抗腐蚀性能, 是聚变堆、ADS、四代堆结构材料的重要候选者之一^[5], 因此人们围绕辐照对 F/M 钢微观结构和力学性能的影响开展了大量的实验和多尺度模拟研究. F/M 钢的主要成分为 Fe 和 Cr, 此外含有

^{*} 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2007CD209801)和国家自然科学基金(批准号: 10975194)资助的课题.

[†] E-mail: hexinfu@ciae.ac.cn

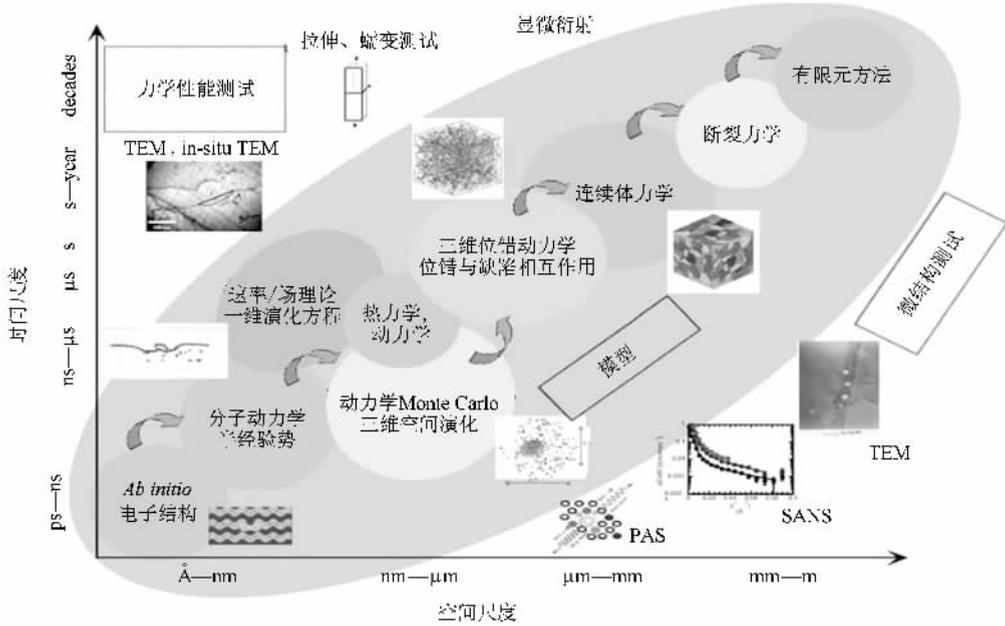


图1 材料辐照损伤不同空间-时间尺度下的理论和实验研究方法^[4]

少量的 C, Mn, Ni, N 等元素,在不影响计算准确性的前提下为简化起见,一般采用具有 bcc 结构的 FeCr 合金作为模型材料.2002 年欧洲的几个核实验室联合起来利用多尺度模拟来研究 FeCr 合金的辐照性能,他们开展了大量的研究工作并得出了许多有意义的结果^[6].此外,大量的实验研究表明:Cr 的加入对 FeCr 合金辐照性能产生了很大的影响,Cr 对于理解 FeCr 合金的辐照性能扮演着重要的角色^[7,8].因此本文主要按照空间尺度由小到大来论述 F/M FeCr 合金辐照损伤多尺度模拟,尤其是论述 Cr 的影响.

2. 基本原理

在原子尺度上关于辐照损伤/微结构的预测,需要求解大约 10^{23} 个原子核的 Schrödinger 方程以及它们的核外电子.假设被辐照材料中含有质量为 m_e 的 i 个电子,其空间坐标为 \mathbf{r}_{ei} 以及 j 个质量为 m_n 的原子核,其带正电荷 z_{ne} ,空间坐标为 \mathbf{r}_{nj} ,则这个系统的能量本征值方程为

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 \psi_k(\mathbf{r}_{e1}, \mathbf{r}_{e2}, \dots, \mathbf{r}_{ei}, \mathbf{r}_{n1}, \mathbf{r}_{n2}, \dots, \mathbf{r}_{nj}) \\
 & -\frac{\hbar^2}{2} \sum_j \frac{1}{m_{nj}} \nabla_j^2 \psi_k(\mathbf{r}_{e1}, \mathbf{r}_{e2}, \dots, \mathbf{r}_{ei}, \mathbf{r}_{n1}, \mathbf{r}_{n2}, \dots, \mathbf{r}_{nj}) \\
 & + \left(\sum_{\substack{i_1, i_2 \\ i_1 \neq i_2}} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_{e1} - \mathbf{r}_{e2}|} + \sum_{i,j} \frac{z_j e^2}{|\mathbf{r}_{ei} - \mathbf{r}_{nj}|} \right)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \sum_{\substack{j_1, j_2 \\ j_1 \neq j_2}} \frac{z_{j1} z_{j2} e^2}{|\mathbf{r}_{nj1} - \mathbf{r}_{nj2}|} \\
 & \times \psi_k(\mathbf{r}_{e1}, \mathbf{r}_{e2}, \dots, \mathbf{r}_{ei}, \mathbf{r}_{n1}, \mathbf{r}_{n2}, \dots, \mathbf{r}_{nj}) \\
 & = E_k \psi_k(\mathbf{r}_{e1}, \mathbf{r}_{e2}, \dots, \mathbf{r}_{ei}, \mathbf{r}_{n1}, \mathbf{r}_{n2}, \dots, \mathbf{r}_{nj}). \quad (1)
 \end{aligned}$$

根据 Born-Oppenheimer 近似可将(1)式分解为关于核外电子和原子核运动的两部分,如(2)和(3)式所示,其本征能量分别为 E_{ke} 和 E_{kn} .

$$\begin{aligned}
 & \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \nabla_i^2 + \sum_{\substack{i_1, i_2 \\ i_1 \neq i_2}} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_{ei1} - \mathbf{r}_{ei2}|} \right. \\
 & \left. + \sum_{i,j} \frac{z_j e^2}{|\mathbf{r}_{ei} - \mathbf{r}_{nj}|} \right) \phi_{ke}(\mathbf{r}_{e1}, \mathbf{r}_{e2}, \dots, \mathbf{r}_{ei}) \\
 & = E_{ke}^e \phi_{ke}(\mathbf{r}_{e1}, \mathbf{r}_{e2}, \dots, \mathbf{r}_{ei}), \quad (2)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \left(-\frac{\hbar^2}{2} \sum_j \frac{1}{m_n} \nabla_j^2 + \sum_{\substack{j_1, j_2 \\ j_1 \neq j_2}} \frac{z_{j1} z_{j2} e^2}{|\mathbf{r}_{nj1} - \mathbf{r}_{nj2}|} \right. \\
 & \left. + \sum_{i,j} \frac{z_j e^2}{|\mathbf{r}_{ei} - \mathbf{r}_{nj}|} \right) \phi_{kn}(\mathbf{r}_{n1}, \mathbf{r}_{n2}, \dots, \mathbf{r}_{nj}) \\
 & = E_{kn}^n \phi_{kn}(\mathbf{r}_{n1}, \mathbf{r}_{n2}, \dots, \mathbf{r}_{nj}). \quad (3)
 \end{aligned}$$

(2)式是关于核外电子运动的 Schrödinger 方程,根据此方程采用适当的近似方法可对电子基态进行计算.对电子基态的计算大致上可分为两类:Hartree-Fock 近似和密度泛函理论(Density Functional Theory, DFT).对电子基态的准确计算是研究材料电磁性

质、辐照导致缺陷形态及其稳定性的重要基础。(3) 式是关于原子核运动的 Schrödinger 方程,是研究处理原子尺度上的结构与分布函数的理论基础。对(3)式的解法可分为随机性方法(MC)和确定性方法(分子动力学)两大类。

3. 第一性原理计算

电子基态的计算对于研究 F/M FeCr 合金的热力学性质、磁性能、晶格结构、析出相/沉淀相的形核、缺陷形态及其稳定性具有非常重要的意义。目前可用于计算系统总能量的方法有局域密度近似(local density approximation, LDA)和广义梯度近似(generalized gradient approximation, GGA),但由于 LDA 不能准确计算 Fe 的基态,因此目前主要采用基于 GGA 的 DFT 计算 FeCr 合金某些难以由实验获得的性能:1)铁磁态 FeCr 合金的体性能,如晶格常数、结构能、体模量等;2)铁磁/顺磁态 FeCr 合金的混合焓等热力学性质;3)点缺陷的特征能/形成能等。

3.1. FeCr 合金的体性能

Cr 具有反铁磁性和负的 Cauchy 压^[9],且 FeCr 合金存在着铁磁-顺磁转变,而 FeCr 合金的体性能及其缺陷的特征能强烈地依赖于合金的磁性^[10]。由于相干势近似方法(coherent potential approximation, CPA)能对完全随机取代合金的电子结构和总能量进行准确的计算,因此一般采用 CPA 结合电子基态基矢来计算 FeCr 合金的电子结构和总能量。

Turchi 等^[11]计算了随机取代非磁性 FeCr 合金(Fe 和 Cr 的磁性被人为消除)的结构稳定性,研究表明 Cr 原子的加入导致 Fe 晶格弛豫对于理解 FeCr 合金中 σ 相形核具有非常重要的意义。随后 Akai 等^[12]研究发现铁磁性 FeCr 合金的系统总能量和不考虑磁性时 FeCr 合金的总能量存在差异,并且这种差异当 Cr 含量较低时尤为明显。Moroni 和 Jarlborg^[13]利用结构反演方法(structural inversion method)和四面体群展开(tetrahedron cluster expansion)研究了磁性对 FeCr 合金结构稳定性的影响,并计算了随机铁磁性和无磁性 FeCr 合金的混合焓,发现 Cr 的磁性对 FeCr 合金的结构稳定性有非常重要的影响。

Olsson 等^[14]以精确 muffin-tin 轨道组(exact muffin-tin orbitals, EMTO)为基展开波函数并结合

CPA 计算了 FeCr 合金的晶格常数、磁矩、体模量、混合焓并与实验结果进行了对比。他们的研究发现 Cr 含量为 6% 左右时体模量出现了奇异点,且 Cr 含量低于 6% 时混合焓为负值,认为出现这些奇异现象的原因是在此 Cr 含量情形下系统出现了电子拓扑跃迁。在后续的研究中,Olsson 等采用 EMTO + CPA 对 FeCr 合金的各种性能重新进行了计算,所得结果表明奇异点出现在 Cr 含量约为 10%^[6]。

3.2. F/M FeCr 合金的混合焓

第一性原理计算表明铁磁性 FeCr 合金的混合焓具有非常奇特的性质。Olsson 等利用 EMTO 为基展开波函数并结合 CPA 计算了随机取代铁磁/顺磁 FeCr 合金的混合焓,计算表明顺磁性 FeCr 合金混合焓的计算结果与实验结果符合得很好,而对于铁磁性 FeCr 合金当 Cr 含量低于 10% 时混合焓为负值,且在约 10% 时出现反号,最小混合焓约为 -8 meV/atom 。但这种方法不允许离子弛豫^[14,15]。

为解决上述问题 Olsson 等采用 VASP 并结合投影放大波(projector augmented wave, PAW)方法展开波函数重新计算了 FeCr 合金的混合焓,由于 Cr 的 Néel 温度为 311 K,远低于材料的使役温度,因此 Olsson 等在计算中将 Cr 原子处理为无磁性原子。计算表明最小混合焓约为 -0.8 meV/atom 且 Cr 含量约为 4%—5% 时出现反号。图 2 为采用不同方法计算得到的 FeCr 合金的混合焓(铁磁态和顺磁态)^[6,13]。对于是何原因导致两种方法计算结果的上述差异目前还没有解释,本文笔者认为可能是由于在计算过程中将 Cr 处理为无磁性原子所导致,原因是对于纯 Cr 而言,是否考虑其磁性将导致系统能量变化 7—46 meV,虽然 Cr 的 Néel 温度较低,但其磁效应不能完全忽略。

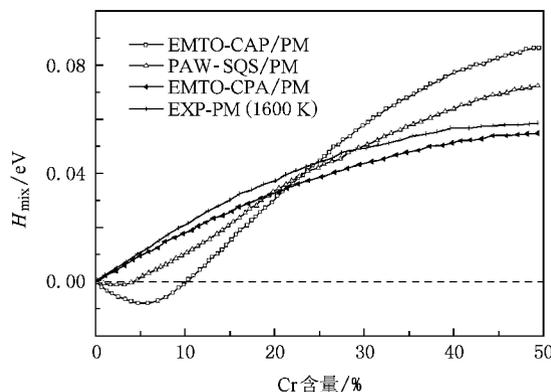


图 2 不同 Cr 含量铁磁/顺磁态 FeCr 合金混合焓计算结果^[6,16]

3.3. 反铁磁性 Cr 的影响

由图 2 可知顺磁态 FeCr 合金混合焓随 Cr 含量的变化没有出现反号, 计算结果与实验结果符合得很好. 铁磁态和顺磁态 FeCr 合金混合焓的差异表明磁性对 FeCr 合金的电子结构有很强的影响, 从而会影响到其各缺陷的特征能. 科学家们对此开展了大量研究, 结果表明 Cr 含量对 FeCr 合金铁磁微观结构和 Fe 的磁矩有很强的影响^[14]且 Cr 含量与 F/M FeCr 合金的诸多辐照性能(如辐照肿胀、DBTT 的漂移、辐照后材料的屈服强度变化、辐照硬化等)之间存在着高度非线性关系.

Froideval 等^[17]利用实验结合 DFT 研究了 Cr 含量对 FeCr 合金微观结构的影响. 研究表明, Fe-

6.2at% Cr 合金表面轨道磁矩 m_L 与自旋磁矩 m_S 之比 m_L/m_S 为 0.029, 而 Fe-12.7at% Cr 的 m_L/m_S 为 0.037, 纯 Fe 的 m_L/m_S 为 0.060; 且 Fe-12.7at% Cr 出现了明显的 Cr 的偏析. 这说明 Cr 含量的变化只影响 FeCr 合金表面的磁性. 此外他们还通过实验研究了不同 Cr 含量 FeCr 合金中 Cr 原子的局域结构. 结果表明随着 Cr 含量的增加 Cr 原子与第一近邻和第二近邻之间的距离发生了变化, 具体数值见表 1.

Filippova 等^[18]采用 Mössbauer 谱及 X 射线研究 Cr 原子对 FeCr 合金局域原子结构的影响, 研究证实 Cr 含量为 4%、9%、16% 的 FeCr 合金中, 作为溶质的 Cr 原子表现出不同的性质: Cr 含量为 4% 时 Cr 优先与 Fe 原子形成第一近邻; 9% 时可与任意原子形成第一近邻; 16% 时则优先与 Cr 原子形成第一近邻.

表 1 不同 Cr 含量下 Cr 原子与第一近邻、第二近邻之间的距离^[17]

	纯 Cr		Fe-6.2at% Cr	Fe-12.5at% Cr	Fe-12.7at% Cr
	理论值	EXAFS 结果	EXAFS 结果	理论值	EXAFS 结果
与第一近邻距离/nm	0.2495	0.249	0.248	0.2464	0.246
与第二近邻距离/nm	0.2881	0.288	0.288	0.2845	0.282

综上所述, 铁磁性 FeCr 合金即使在未辐照时当 Cr 含量高于 10% 时有 Cr 原子的聚集现象, 而辐照将使这种现象加速出现. Cr 原子的聚集对于研究 FeCr 合金的抗应力腐蚀、抗化学腐蚀具有非常重要的意义.

3.4. F/M FeCr 合金缺陷特征能

对于 F/M FeCr 合金人们开展了大量的辐照模拟实验, 并得到了很多有意义的结果, 但也出现了相互矛盾的现象. 如 Ohnuki 等的 HVEM 辐照实验表明晶界上贫 Cr, 说明 Cr 的迁移遵循空位迁移机制^[19]; 但 Yoshitake 等用 Ni⁺ 在 500℃ 辐照 F/M 合金 HCM12A 到 5 dpa, 结果表明晶界上出现了 Cr 和 Si 的偏析^[20]; Maury 等^[21]用电子在低温下辐照 FeCr 合金和纯 Fe 并测定其电阻率回复, 实验结果表明在第 1 阶段 FeCr 合金的电阻回复率快于纯 Fe, 表明 Fe-Cr 挤塞子的移动能力强于纯 Fe 中的自间隙原子 (self-interstitial atoms, SIA).

上述实验结果表明辐照所形成的缺陷及其迁移机制是非常复杂的, 因此计算 FeCr 合金中点缺陷的特征能对于理解 FeCr 合金的辐照性能是非常必要的. Olsson 等利用 DFT 计算了各种缺陷的形成能和结合能 (见表 2)^[22], 从表 2 可得出以下结论: 1) Cr 与第一近邻空位的结合能很低 (约 60 meV), 随着距离的

表 2 各种缺陷的形成能和结合能^[22]

构形	结合能/eV		形成能/eV	
	54 at.	128 at.	54 at.	128 at.
V-Cr 1 nn	0.057	0.057	1.95	1.98
V-Cr 2 nn	0.007	0.014	2.00	2.02
Cr + Cr 1 nn	-0.233	-0.242	0.01	0.02
Cr + Cr 2 nn	-0.148	-0.123	-0.08	-0.10
Cr + Cr + Cr (三角)	-0.496	-0.477	0.15	0.15
Cr + Cr + Cr + Cr (四角形)	-0.728	-0.710	0.26	0.27
100 Fe-Cr	0.153	0.097	5.10	4.93
110 Fe-Cr	0.059	0.080	3.96	3.83
111 Fe-Cr	0.385	0.373	4.39	4.24
八面体-Cr	0.297	0.298	5.10	4.88
四面体-Cr	0.020	0.074	4.43	4.26
110 Fe-Fe \perp Cr _{subs}	-0.080	-0.065	4.10	3.98
110 Fe-Fe-Cr _{subs}	0.051	0.050	3.97	3.86
100 Cr-Cr	0.294	-0.356	5.43	5.27
110 Cr-Cr	-0.442	-0.425	4.35	4.23
111 Cr-Cr	0.247	0.223	4.42	4.28
110 Fe-Cr \perp Cr _{subs}	-0.057	-0.023	3.96	3.82
110 Fe-Cr-Cr _{subs}	-0.230	-0.209	4.14	4.01
110 Cr-Fe-Cr _{subs}	0.131	0.154	3.78	3.65
Cr _{subs} -110 Fe-Fe \perp Cr _{subs}	-0.072	-0.041	3.98	3.84
110 Fe-Fe-Cr _{subs} ² _{subs}	0.061	0.094	3.84	3.71
110 Fe-Fe-Cr _{subs} ³ _{subs}	0.146	0.154	3.76	3.65
110 Fe-Fe-Cr _{subs} ⁵ _{subs}	0.112	0.118	3.79	3.68
110 Fe-Fe \perp Cr _{subs} ² _{subs} -Cr _{subs}	-0.258	-0.195	4.16	4.00
110 Fe-Fe \perp Cr _{subs} ³ _{subs} -Cr _{subs}	-0.157	-0.121	4.06	3.92
110 Fe-Fe \perp Cr _{subs} ⁵ _{subs} -Cr _{subs}	-0.172	-0.123	4.08	3.92
111 Cr-Fe-Cr	0.549	0.544	4.12	3.95

增大结合能迅速降低,其相互作用可忽略不计;2)在小团簇中 Cr 原子之间相互排斥(结合能为负值);3)自间隙挤塞子中 111 Fe-Cr 具有最高的结合能,最稳定;4)磁相互作用对缺陷的结合能有很大的影响;5)级联碰撞产生的离位原子在退火时将被 Cr 原子俘获,形成 Fe-Cr, Cr-Cr 挤塞子,即 Cr 限制了缺陷的复合,其形成的缺陷将强化小的间隙位错环形核。

对于辐照损伤的研究还需考虑方程(3)的求解,实际的辐照过程单个入射粒子将引起大量原子的运动甚至移位,但由于现有计算能力的限制,第一性原理所能考虑的系统很小(约 10^2 原子),因此第一性原理甚至第一性原理分子动力学方法(CP 方法)还不能完全描述辐照损伤的级联碰撞过程。

4. 原子间相互作用势 对泛函势

由于第一性原理和 CP 方法不能完全描述级联碰撞过程,而利用分子动力学或 MC 方法模拟级联碰撞、缺陷演化时找到合适的势函数成为问题的关键。

对于具有 d 电子的过渡金属而言,传统的对势不能计算如 Cauchy 关系、空位形成能与凝聚能之间的关系、金属的表面性质等。1980 年代初提出了可弥补上述缺点且考虑多体相互作用的对泛函势:

$$E_{\text{tot}} = \sum_{i=1}^N E_i = \sum_{i=1}^{N-1} \left(\sum_{j=i+1}^N V(r_{ij}) + F(\rho_i) \right), \quad (4)$$

其中 i, j 标记各个原子, N 是系统的总原子数, r_{ij} 是原子 i 和原子 j 之间的距离, ρ_i 为电子密度且 $\rho_i = \sum_j \rho(r_{ij})$ 。

4.1. 嵌入原子势法 (embedded-atom method, EAM)

EAM^[23]是一种基于 DFT 来描述原子间相互作用势的半经验方法。每对原子间的作用势可以写为原子对之间的斥力势和镶嵌能两项。对于同类原子,原子对之间的斥力势可以写为

$$V(r) = \frac{Z^2 e^2}{r} \chi\left(\frac{r}{a}\right) \quad (r < r_1), \quad (5)$$

$$V(r) = \exp(B_0 + B_1 r + B_2 r^2 + B_3 r^3) \quad (r_1 < r < r_2), \quad (6)$$

$$V(r) = \sum_{k=1}^{n\phi} a_k^\phi (r_k^\phi - r)^\phi \theta(r_k^\phi - r) \quad (r > r_2), \quad (7)$$

式中 Z 是原子序数; e 为电子电量; a 是屏蔽半径; B_0, B_1, B_2, B_3 和 a_k^ϕ 是拟合常数; $\theta(r)$ 是 Heaviside 阶梯函数, Fe 的屏蔽函数 $\chi(x)$ 为

$$\begin{aligned} \chi(x) = & 0.1818 \exp(-3.2x) + 0.5099 \exp(-0.9423x) \\ & + 0.2802 \exp(-0.4029x) \\ & + 0.0282 \exp(-0.2016x). \end{aligned} \quad (8)$$

镶嵌能 $F(\rho)$ 可表示为

$$F(\rho) = A_0 \sqrt{\rho} + A_1 \rho + A_2 \rho^2. \quad (9)$$

因此对于同种原子之间的相互作用势为

$$E(r) = V(r) + F(\rho). \quad (10)$$

对于 FeCr 合金, Konishi 等给出了异种原子 Fe 与 Cr 原子之间的相互作用势^[19]

$$\phi_{\text{FeCr}} = \alpha \sqrt{\phi_{\text{FeFe}} \phi_{\text{CrCr}}}, \quad (11)$$

$$V_{\text{FeCr}} = \frac{\beta}{2} \left(\frac{\phi_{\text{FeCr}}}{\phi_{\text{FeFe}}} V_{\text{FeFe}} + \frac{\phi_{\text{FeCr}}}{\phi_{\text{CrCr}}} V_{\text{CrCr}} \right), \quad (12)$$

其中 α 和 β 需与实验数据拟合。

研究表明 EAM 势能很好地描述 F/M Fe-10% Cr 中 Cr 与挤塞子的相互作用,但上述 EAM 势是径向对称多体势,因此无法确切描述过渡金属键中的共价键贡献(d 轨道),对负 Cauchy 压和非简单晶格结构的稳定性都不能给出正确的预测。为了准确计算 FeCr 合金中的原子间相互作用势, Pasianot 等^[24]把 EAM 方法推广到了有键角依赖性的情况,解决了上述问题。

此外后续研究发现 EAM 势不能正确描述纯 Fe 中单个 SIA 的行为, EAM 计算表明 SIA 在挤子构型(crowdion)中比哑铃型(dumbbell)更稳定,而这与实验结果和 DFT 计算结果(表 2)相矛盾。为此 Mendeleev 于 2003 年改进了 Fe-Fe 作用势使其能很好描述纯 Fe 中单个 SIA 的行为且与 DFT 计算结果符合得很好^[25]。Mendeleev 认为 9 式的镶嵌能应表示为

$$F(\rho) = -\sqrt{\rho} + a^\phi \rho^2, \quad (13)$$

$$\rho = \rho(r) = \sum a_k^\phi (r_k^\phi - r)^\phi \theta(r_k^\phi - r) \quad (14)$$

其中 a_k^ϕ 和 r_k^ϕ 是拟合参数,其数值见文献[26]。

另 EAM 无法考虑 Cr 含量的变化,因此无法计算 Cr 含量对 FeCr 合金混合焓的影响,为此 Caro 等^[27]依据相图与热力学的计算机结合(computer coupling of phase diagrams and thermochemistry, CALPHAD)的思想对 Fe-Cr 之间的相互作用势进行了改进,人为地引入 Cr 的浓度项,其 FeCr 混合焓计算结果与 DFT 计算结果一致。

4.2. 二次矩近似(second moment approximation)

二次矩近似^[28]与 EAM 有相似之处,但前者基于紧束缚理论,根据电子态密度的紧束缚简化模型可推导出镶嵌能 $F(\rho)$ 是一平方根,即

$$F(\bar{\rho}) = -A(\bar{\rho})^2. \quad (15)$$

从形式上来说二次矩近似与 EAM 势是类似的, 只是改进了镶嵌能. Terentyev 通过结合二次矩近似、Cr 的电子密度和成对准则计算了 Fe-Cr 的多体势, 在此基础上计算 Cr 与空位的相互作用能为 $26 \text{ meV}^{[19]}$ 与 Möslang 等通过 μ 介子谱测定空位与 Cr 的相互作用能小于 150 meV 的实验结果相一致^[29] 约为 DFT 计算结果 60 meV 的一半(表 2).

4.3. 双带模型(two-band-model, 2BM)

一般认为对于过渡金属而言, 其结合能主要来自于 d 电子的贡献, 但 Pettifor 等指出对体弹性模量贡献最大的是 s 电子, 而在 EAM 和二次矩近似中忽略了 s 电子的作用. 因此在考虑过渡金属的结合能时必须考虑 s 电子的贡献, 即双带模型^[30].

双带模型在镶嵌能 $F(\rho)$ 中引入了 s 电子和 d 电子对多体势的贡献, 且 $\rho_b = \sum \phi_b(r_{ij})$, b 分别代表 s 电子和 d 电子. s 电子和 d 电子的贡献可表示为

$$F_b(\rho_b) = A_1^b \sqrt{\rho_b} + A_2^b \rho_b^2 + A_3^b \rho_b^4. \quad (16)$$

Olsson 等^[31]认为 s 电子和 d 电子对结合能的贡献与 Cr 的浓度相关, 即在(16)式中引入了浓度项, 从而使得采用 2 BM 计算 FeCr 合金混合焓随 Cr 含量变化的结果与 DFT 所预测的一致.

上述三种势函数的主要优点表现在包含了与原子配位数相关的键合强度的近似变化. 科学家们基于这

些势函数开展了大量的模拟工作并取得了很多有意义的结果(见本文第 5 部分)这些结论对于开展辐照缺陷的产生、演化过程的模拟研究具有重要的意义.

5. 初始损伤及缺陷移动

上述势函数的建立为后续分子动力学、动力学 MC 模拟奠定了基础. 通过这些势函数我们可以从一个原子环境变换到另一个原子环境, 利用这些势函数结合分子动力学、MC 方法、团簇变分法等可实现对方程(3)的数值模拟. 科学家们基于分子动力学方法、MC 方法、速率理论等对 FeCr 合金的初始损伤过程和缺陷演化过程开展了大量的模拟工作. 总体来说包括以下几个方面:

5.1. 级联碰撞

研究级联碰撞过程的目的在于获得关于缺陷的信息(如存活缺陷数、间隙原子和空位的分布、缺陷的扩散和迁移等等)及其影响因素. 目前针对 F/M FeCr 合金级联碰撞过程的研究主要集中于存活缺陷数、级联密度、间隙原子和空位的比例、缺陷的扩散和迁移等.

Malerba 等^[32]的研究表明在级联碰撞阶段, Cr 对离位原子数基本上没影响(图 3), 但随着离位峰的开始, 间隙 Cr 原子与 Fe 形成稳定的 Fe-Cr 挤塞子

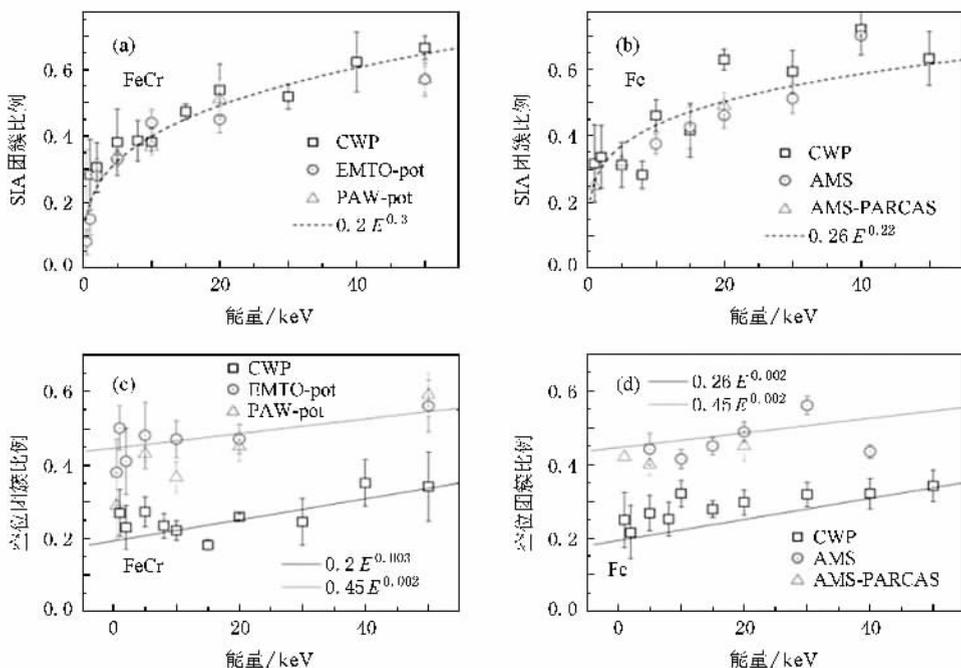


图 3 碰撞级联阶段 FeCr 合金与纯 Fe 中形成的 SIA 和空位的比较^[32] (a) FeCr, (b) Fe, (c) FeCr, (d) Fe

和混合间隙团簇,阻碍了缺陷的复合,最终导致 FeCr 中产生的缺陷数多于纯 Fe. 此外他们的研究还发现级联碰撞过程产生的 Frenkel 缺陷对与势函数的阈能没有关系,而是势的硬度(高硬度,意味着高的间隙形成能)与最终的缺陷数相关联^[28].

级联碰撞过程产生大量的离位原子,这些离位原子在退火过程中将配对出现挤塞子如 Fe-Fe、Cr-Cr、Fe-Cr 及更复杂的构型(见表 2). 图 4 给出了不同能量入射粒子所产生的挤塞子的个数及其随时间的演化. 由图可知 Fe-Cr 挤塞子是最稳定的,其结合能约为 0.1 eV ^[32],与表 2 中 DFT 结果相一致.

研究表明,Fe-Cr 挤塞子最有可能的空间取向为 111, 110 和 100 方向^[33](如图 5 所示)且具有不同的迁移能力. 文献^[34]的结果表明 100 取向 Fe-Cr 挤塞子基本上不存在,110 挤塞子比 111 更稳

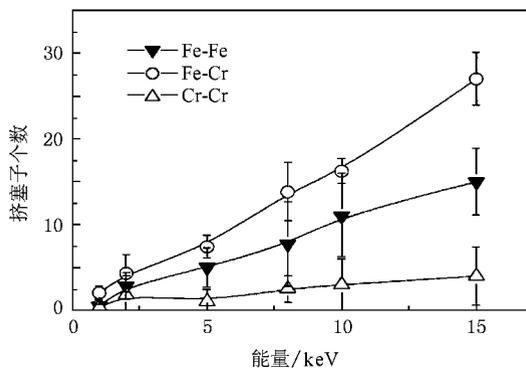


图 4 辐照后形成的挤塞子个数及其随时间的演化^[32]

定,110 挤塞子所占比例高出 111 至少 15%(如图 6 所示)这是由于 110 挤塞子具有更低的形成能,约比 111 挤塞子形成能低 0.2 eV ^[32].

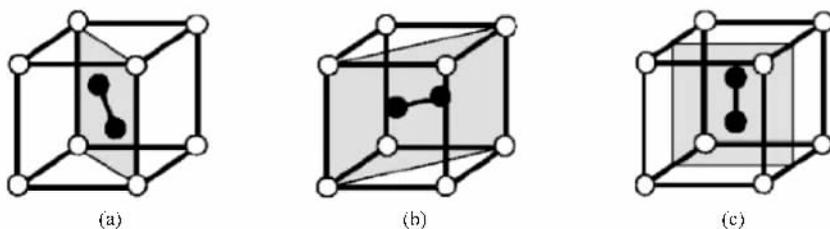


图 5 Fe-Cr 挤塞子空间取向示意图 (a) 111, (b) 110, (c) 100

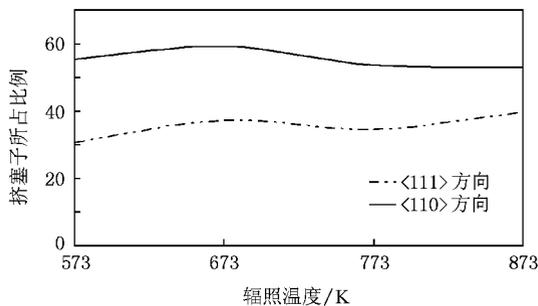


图 6 不同辐照温度下 Fe-Cr 挤塞子的空间取向^[34]

5.2. FeCr 合金的热老化及 Cr 的偏析

如 3.4 所述,对于 F/M 钢辐照过程中是否出现 Cr 的偏析有不同的结论. 并且由于 Cr 的偏析以及界面区域纳米级富 Cr 沉淀相(Cr 的硫化物、磷化物和 α' Cr)的出现导致了富 Cr 的 FeCr 合金的脆化^[33]. 此外晶界上是否会出现 Cr 的偏析对于 FeCr 合金在超临界水中的化学腐蚀研究也是非常必要的. 因此研究 F/M 钢辐照过程中 Cr 的行为具有非常重要的

意义.

文献^[34]计算了不同温度辐照时所产生的间隙 Fe、Cr 原子的空间分布. 图 7 中的结果表明,不同辐照温度下级联区 Cr 含量高于基体 Cr 含量,说明在级联区域出现了 Cr 的偏析. 可以设想当级联区域靠近或位于晶界时,由于形成的稳定 Fe-Cr 挤塞子具有较强的移动能力且晶界上原子间的结合力更弱,因此 Fe-Cr 挤塞子将会在晶界上聚集从而导致

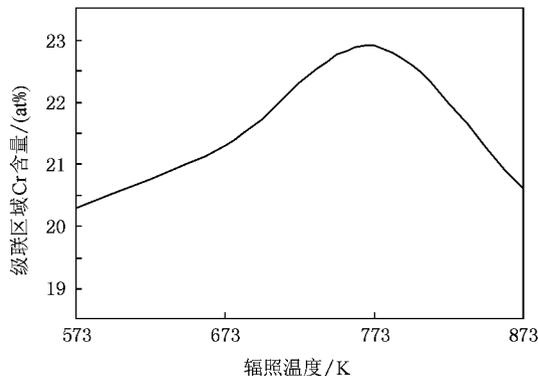


图 7 不同辐照温度下级联区域 Cr 的浓度^[34]

晶界处 Cr 含量的增加,即出现 Cr 的偏析,这是从微观上解释 F/M FeCr 合金抗应力腐蚀和辐照脆化的可能途径。

Watanabe 等^[35]对 Fe-Cr-Ni 合金电子辐照引起的元素偏析和晶界移动进行了实验和理论研究,研究发现只在辐照区域出现了晶界移动,且在晶界某些区域出现了富 Ni 贫 Cr 和富 Cr 贫 Ni 现象。

此外关于其他 F/M 合金的辐照实验都表明晶界/界面上存在 Cr 的偏析现象,这给我们指出了为何高 Cr 的 F/M 合金具有好的抗化学腐蚀的原因。但是 Cr 以何种方式析出以及析出相的空间和尺寸分布如何则是定量解释 F/M 合金在使役情形下力学性能衰减的前提,因此有必要对析出条件以及析出相的空间、尺寸分布进行详细的研究。

Wallenius 等^[36]利用 MC 方法研究了 FeCr 合金的热老化现象。模拟结果表明,Cr 含量低于 9% 的 FeCr 合金热老化模拟实验过程中(740 K,110000 h)Cr 原子始终均匀随机分布;而当 Cr 含量高于 10% 时出现了明显的 Cr 的沉淀相。Fe-32% Cr 的热老化实验则验证了上述模拟结果的准确性。

Bonny^[37]则利用分子动力学方法模拟了 FeCr 合金的热老化现象以及 Cr 的析出过程,模拟发现 Cr 的析出过程可明显地分为形核、长大、聚集三个阶段。同时他们也指出析出相的密度/尺寸与短程序(short range order, SRO)之间没有直接的关联。Erhart 等^[38]基于 MC 方法研究了 SRO 与析出相之间的关系,其中考虑了 α 相和 α' 相对 SRO 的贡献,并尝试建立了 SRO 与 Cr 含量之间的关系,但最终也没有给出 SRO 与析出相密度/尺寸之间的关系。

F/M 合金析出的富 Cr 相引起材料性能变化已经引起了人们的关注,且析出相密度/尺寸分布是进一步开展位错动力学模拟的基础,同时也是分析材料宏观力学性能变化的重要参考依据(如辐照硬化导致的屈服强度升高),弄清析出相密度/尺寸的影响因素是非常必要的,这一部分工作还有待进一步的开展。

5.3. 间隙位错环及其与缺陷的相互作用

辐照导致的位错环与障碍物(包括固有的和辐照产生的障碍物)相互作用将直接导致材料力学性能的衰减,因此 F/M FeCr 合金辐照导致位错环的形成及其与缺陷的相互作用一直都是研究热点。

实验及模拟研究证实 F/M FeCr 合金辐照后会

产生 a_0 100 {100} 和 $1/2 a_0$ 111 {110} 间隙位错环^[39-41] 并且高温辐照时(大于 250 °C) a_0 100 型位错环份额很大。但 Chen 等^[39]的研究表明,F/M FeCr 合金 PM2000 辐照后(110)面上的间隙原子在 0 K 时也是不稳定的,通过弛豫发现其将向 {111} 面倾斜,即不存在 $1/2 a_0$ 111 (110) 间隙位错环。

文献[34]计算结果表明 F/M FeCr 合金辐照后形成的间隙 Cr 原子 60% 以上都位于 {111} 和 {110} 面上($\pm 0.1 a_0$),Cr 原子聚集在这两个晶面上导致 Fe 的晶格弛豫,使第一近邻的晶格常数变化 0.2% 左右,因此 Cr 原子的聚集导致原子面的塌陷并将在 {111} 和 {110} 面上形成间隙位错环,这与实验观测到的现象是一致的^[39-41]。

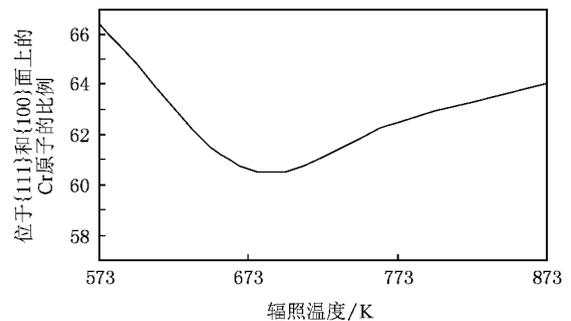


图8 不同辐照温度下间隙 Cr 原子的空间取向^[34]

Fe-(13%,15%)Cr 合金的辐照实验表明,辐照硬化主要来源于刃型位错剪切富 Cr 析出相(平均尺寸约 3 nm)^[42]。因此 Terentyev 等^[43]研究了 0 K 时纯 Fe 和 Fe-10Cr 中纯 Cr 析出相与位错之间的相互作用。他们采用 MD(2BM 势)模拟了 $1/2 a_0$ 111 {110} 刃型位错剪切不同尺寸纯 Cr 析出相所需的临界应力(如图 9 所示),发现在相同的析出相尺寸下,Fe-10Cr 与 Fe 中临界应力的差 $\Delta\tau_{FeCr}$ 基本上为常数,这说明析出相对 FeCr 合金的硬化与析出相含量之间呈近似线形关系。这就提示我们可将 FeCr 合金辐照硬化分为两部分来处理:基体本身由于辐照导致的硬化和析出相导致的硬化。

一般情况下,位错环与点缺陷之间的相互作用强度以及位错环周围位移场的边界由 Burgers 矢量长度来表征,据此 100 位错环与 $1/2$ 111 位错环相比应具有更大的点缺陷俘获半径,且与点缺陷之间具有更强的相互作用。但 Terentyev 等利用分子动力学研究铁素体钢中 a_0 100 和 $1/2 a_0$ 111 间隙位错环与点缺陷之间的静态相互作用^[44]时却发现了与

之相反的情况.他们认为这是由于 100 团簇所在晶面不只有简单一层间隙原子而是由多层组成,从而使得位移场的各向异性程度降低了.同时他们指出选择恰当的势函数正确模拟位错环周围的位移场和应力场是准确模拟位错环行为的基础.

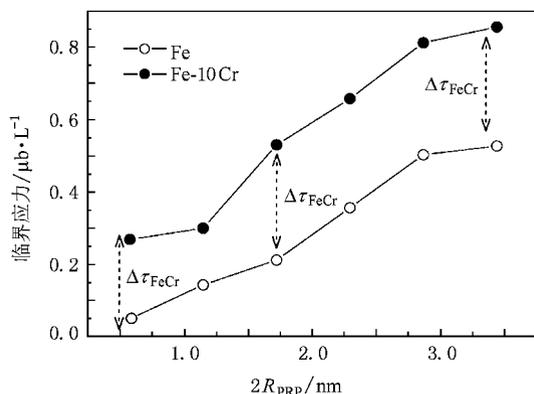


图9 析出相尺寸与临界应力之间的关系^[43]

Terentyev 等^[45]模拟了温度为300 K、应变速率为 $10^7/s$ 时 α Fe 中 a_0 100 间隙位错环与刃型位错之间的相互作用,系统地讨论了位错环处于不同位置及 Burgers 矢量不同取向时的位错反应.研究发现位错之间的反应都遵守 Burgers 矢量守恒这一原则.

此外 Domain 等^[46]利用分子动力学研究了 Fe 中螺型位错在纯剪切应力作用下的行为,Osetsyky 等研究了原子尺度下 Cu 中位错与层错四面体(stacking fault tetrahedral)之间的相互作用^[47]以及 FeCu 合金^[48]中位错与障碍物之间的相互作用,这些对于研究 FeCr 合金中位错的行为都具有指导意义.

总的来说,关于 F/M FeCr 合金辐照过程中位错环的形成以及位错环与其他缺陷之间的相互作用的模拟还处于起步阶段,目前都将其分为静态特征和动力学过程分别进行模拟,而实际的辐照过程是必须同时考虑上述两个过程的.此外位错环附近位移场和应力场的准确计算还依赖于能确切描述 FeCr 合金的势函数,因此这一部分工作还有待进一步开展深入、细致的研究.

5.4. 相分离

实验表明,当温度低于 400 °C 且 Cr 含量低于 10% 时,FeCr 合金为稳定的 α 相,具有 bcc 结构,但当 Cr 含量为 10%—90% 时 FeCr 合金出现相分离:富 Fe 的 α 相和纳米尺度的富 Cr- α' 相,这与标准 FeCr 相图是不符的. Mirebeau 等^[49]测量了 Fe_xCr_{1-x}

的长程序,结果表明当 Cr 含量为 5% 时 FeCr 合金长程有序,当 Cr 含量为 10% 时出现转变,某些区域出现了短程序,即出现了新相.同时大量研究结果表明纳米尺度富 Cr- α' 相的出现将导致材料脆化、耐应力腐蚀和化学腐蚀性能变化^[37,38],且利用富 Cr- α' 相的形成机理定量地解释了 Cr 含量高于 9% 的 FeCr 合金的辐照硬化和脆化现象.

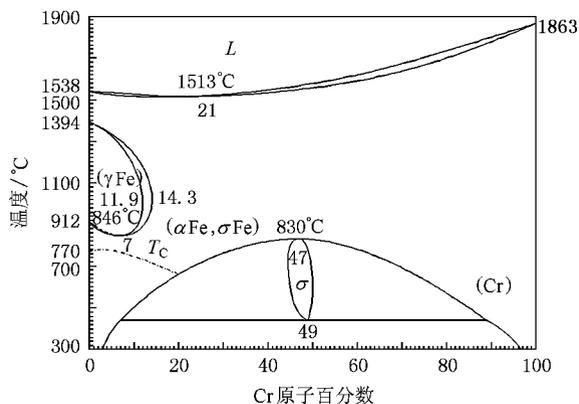


图10 标准 Fe-Cr 相图

Ackland 等^[49]指出应引入 Ising 模型来研究反铁磁性 Cr 的影响;Wallenius 等^[36]提出是 Cr 的自旋淬灭导致了 α' 相的出现,他们提出从 Cr 含量对长程序向短程序转变的影响入手来解决这一问题,并尝试在分子动力学模拟中加入 Ising 模型,同时他们也认为这是个巨大的挑战.

虽然 Ising 模型适宜于研究具有周期结构的二元合金的原子组态,但由于 Froideval 等^[17]的研究表明 Cr 只影响 FeCr 合金表面的磁性且随着 Cr 含量的变化 FeCr 合金局域原子结构也会发生变化,最终导致自旋取向与磁场引起的量子化方向可能不再是平行/反平行情况.而采用广义自旋变量的 q 态 Potts 自旋模型(q -state potts spin model)在介观尺度关于相变问题的预测研究方面具有特别的意义和作用,且只计及不同近邻情况下的相互作用.因此笔者认为采用 q 态 Potts 自旋模型可能取得比 Ising 模型更好的效果.

FeCr 合金的富 Cr 析出相引起材料性能变化已引起人们的广泛关注.析出相密度/尺寸分布是进一步开展位错动力学模拟和分析材料宏观力学性能变化的基础,弄清影响析出相密度/尺寸分布的因素是非常必要的,但这工作还有待进一步的开展.

6. 辐照对 FeCr 合金宏观性能的影响

辐照对材料宏观力学性能的影响是辐照损伤多尺度模拟的最高层次. 科学家们针对辐照引起的微结构变化及其对力学性能的影响也开展了相当多的工作, 研究方向主要包括辐照硬化、脆化和断裂、辐照生长、蠕变和疲劳等. 就 F/M FeCr 合金而言, 目前对其力学性能的模拟主要集中于材料的塑性(位错的移动以及位错与其他缺陷之间的相互作用)和断裂行为(结合 DBTT 漂移与辐照硬化来研究断裂判据)模拟.

要研究结构材料在服役过程中的辐照损伤过程以及宏观力学性能的变化是非常复杂和困难的, 因为这将牵涉到各种效应之间的协同作用以及材料与外界环境之间的相互作用(如材料的环境化学腐蚀、热工水力条件的影响等). 各种效应之间的协同作用以及材料与外界环境之间的相互作用是一个多物理-多尺度的问题(multi-physics and multi-scale), 要对此过程进行物理建模并求解在现有技术以及计算能力下是无法解决的. 比利时 SCK·CEN 实验室尝试建立了一个结构材料服役过程中辐照损伤的多物理-多尺度模型, 借此研究材料在服役过程中的失效行为, 其中包括中子辐照导致的辐照损伤、环境化学腐蚀、应力腐蚀等过程, 但此项目正在进行中, 并未见相关结果报导^[50].

6.1. 脆韧转变

铁素体钢经中子辐照后, 韧脆转变温度向高温方向移动, 出现了脆化, 即辐照脆化. 因此研究 F/M FeCr 合金的脆韧转变过程具有非常重要的意义.

20 世纪 60 年代 Rice 和 Thomson 引入裂纹尖端塑性模型来研究脆韧转变过程, 基于这个模型针对裂纹尖端塑性和解理裂纹增殖开展了大量的研究. 针对铁素体钢, Noronha 等^[51]利用 3D Volterra 位错分布并结合 2D 位错动力学模拟研究了其脆韧转变过程以及屈服应力、温度的关系. 在他们的模型中裂纹尖端塑性区由一组裂纹尖端源发射的离散位错表征. 裂纹系统导致铁素体钢材断裂过程由一宏观裂纹(macrocrack)和一微裂纹(microcrack)模拟代替.

图 11 为其断裂韧度与屈服应力和温度关系的模拟结果以及实验结果的对比. 当温度较低时($< -150^{\circ}\text{C}$)模拟结果与实验结果有较好的一致性, 但

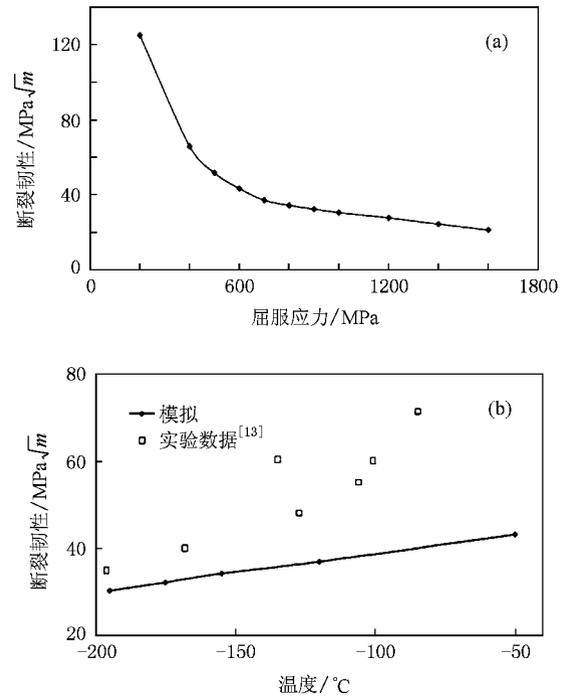


图 11 断裂韧度与屈服应力和温度的关系(模拟与实验的对比)^[51] (a)断裂韧度与屈服应力的关系 (b)断裂韧度与温度的关系

当温度升高时出现了较大的偏差, 这主要是因为 Noronha 等的模型中没有考虑位错的增殖过程, 而位错增殖效应在转变温度附近将非常明显.

6.2. 辐照硬化

辐照将导致材料屈服应力升高、韧性降低, 即辐照硬化. 材料的辐照过程中产生的各种缺陷(如点缺陷、杂质原子、空位团、位错环、层错四面体、位错线、沉淀相等)是导致材料辐照硬化的根本原因.

为了定量解释上述诸多因素对材料辐照硬化的影响, Lucas 等^[52]提出了标准弥散障碍物硬化模型(standard dispersed barrier hardening model)

$$\Delta\sigma_y = M\alpha Gb(\rho d)^{1/2}, \quad (17)$$

其中 $\Delta\sigma_y$ 为屈服应力增大值, G 为剪切模量, b 为 Burgers 矢量, α 为小缺陷团簇的障碍强度, M 为 bcc 多晶拉伸情形下的平均 Taylor 因子($M \approx 13$), ρ 为障碍物分布密度, d 为障碍物平均尺寸.

根据 5.3 中 Terentyev 等的结论, Malerba 等^[53]认为辐照导致 FeCr 合金的硬化可以分解为以下几项:

$$\Delta\sigma_y(\text{FeCr}) = \Delta\sigma_y(\text{Fe}) + \Delta\sigma_y^{\text{SRO}} + \Delta\sigma_y^{\text{invisible}} + \Delta\sigma_y^{111/100}, \quad (18)$$

其中 $\Delta\sigma_y(\text{Fe})$ 为纯 Fe 受辐照所导致的屈服应力升

高,并且其在较低的剂量时就能达到饱和,达到饱和后当剂量再增大时基本保持不变; $\Delta\sigma_y^{SRO}$ 为短程序所导致的屈服应力升高,如富 Cr- α 相; $\Delta\sigma_y^{invisible}$ 为在 TEM 下观测不到的缺陷或缺陷团簇引起的屈服应力升高,如小的间隙团簇等;最后一项为 100 与 $1/2$ 111 位错环的不同比重导致的屈服应力升高。后三种情形只有在含 Cr 且剂量较高时才对辐照硬化有贡献。

若假定辐照导致 F/M FeCr 合金(Cr 含量高于 9%—12%)中产生的障碍物主要为富 Cr- α 析出相,基于上述模型尝试解释 Cr 含量高于 9%—12% 时 F/M FeCr 合金的硬化现象,取得了与实验较为一致的结果^[53]。

我们认为上述硬化模型不能完备描述不同 Cr 含量下 FeCr 合金的辐照硬化,主要表现在(1)任意 Cr 含量下 FeCr 合金都出现了辐照硬化现象,但研究表明当 Cr 含量低于 9% 时基本上观测不到富 Cr- α 相的析出,基于上述硬化模型将无法解释低 Cr 含量的 FeCr 合金的辐照硬化,此时应着重考虑间隙位错环/位错线对辐照硬化的影响,这是因为 Okada 等的实验研究表明在高纯 Fe 中加入极少量的 Cr 都将强化小的间隙位错环的形核;(2)上述硬化模型无法解释为何在 Cr 含量为 9% 时出现 DBTT 变化量的极小值;(3)某些情形下基于上述模型和观测到的缺陷分布密度预测得到的屈服应力变化与实验观测结果不一致^[54,55]。

7. 结 论

对 FeCr 合金的辐照损伤开展了大量的研究取得了很多成果:

(1) 利用 DFT 计算发现当 Cr 含量低于 10% 时 FeCr 混合焓为负值,而高于 10% 时混合焓为正值;

(2) 建立了 FeCr 合金的三种类型势函数: EAM、二次矩近似、2BM;

(3) Cr 含量对级联碰撞过程产生的间隙原子总数和空位数基本上没有影响,但影响其复合过程;间

隙 Cr 原子优先与 Fe 形成具有较强迁移能力的稳定 Fe-Cr 挤塞子,从而阻碍了离位原子的复合;

(4) 辐照导致形成 a_0 100 $\{100\}$ 和 $1/2$ a_0 111 $\{110\}$ 间隙位错环间隙;间隙位错环与析出相等之间的相互作用模拟结果对辐照硬化的研究具有重要意义;

(5) 随着 Cr 含量的增加 FeCr 合金将出现析出相或相分离:富 Fe 的 α 相和纳米尺度的富 Cr- α 相,而富 Cr- α 相的出现将导致 FeCr 合金的脆化、耐化学腐蚀和应力腐蚀性能的变化;

(6) 对辐照情形下材料的宏观力学性能进行了初步的探索、模拟,如韧脆转变、辐照硬化、局域塑性流动等。

虽然在 FeCr 合金辐照损伤多尺度模拟方面取得了上述成果,但人们也必须意识到目前的水平离实现从碰撞过程开始到预测材料力学性能的变化这一多尺度模拟目标还有很大的差距,有很多问题需要解决,例如:①到目前为止还没有一个准确的势函数描述 FeCr 合金的磁性能及铁磁-顺磁转变;②析出的富 Cr- α 相的析出条件、析出相的尺寸及分布;③对 FeCr 合金辐照后力学性能的模拟还处于起步阶段;④位错环与点缺陷、析出相相互作用的静态特征和动力学过程的统一;⑤ FeCr 合金辐照性能为何与 Cr 含量之间存在着高度的非线性关系等。

同时本文笔者针对目前存在的某些问题提出了建议及解决方案:①尝试解释了采用不同模型导致铁磁性 FeCr 合金混合焓计算结果差异的现象,指出即使在高温时铁磁态 FeCr 合金中 Cr 的反铁磁性也不能忽略;②提出采用 q 态 Potts 自旋模型研究辐照过程中 FeCr 合金的析出相,借此研究 Cr 含量与 SRO 之间的关系,并对于不同 Cr 含量势函数的建立具有重要的意义;③指出应着重考虑间隙位错环/位错线对辐照硬化的影响。

总的来说结构材料辐照损伤的多尺度模拟还是一个长期的目标,还需要通过学科交叉,共同努力,才有可能实现材料辐照损伤多尺度模拟这一目标。

[1] Bacon D J, Osetsy Y N 2004 *Mater. Sci. Eng. A* **365** 46

[2] 2005-Advanced Fuel Cycle Initiative (AFCI) Program Plan http://afci.sandia.gov/downloads/2005_AFCI_Program_Plan.pdf [1 May 2005]

[3] Vincent E, Becquart C S, Domain C 2007 *Nucl. Instrum. Meth. B* **255** 78

[4] Wirth B D, Odette G R, Marian J 2004 *J. Nucl. Mater.* **329—333** 103

- [5] Buongiorno J , Swindeman R , Corwin W , Rowchitte A , McDonald P , Was G , Mansur L , Wikon D , Nanstad R , Wright I 2003 *Supercritical Water Reactor (SCWR) : Survey of Materials Experience and R&D Needs to Assess Viability* Idaho National Engineering and Environmental Laboratory Idaho Falls , Idaho September 2003
- [6] Malerba L 2007 *J. ASTM Int.* **4** 1
- [7] Miller M , Hyde J , Cerezo A , Smith G 1995 *Appl. Surf. Sci.* **87/88** 323
- [8] Mathon M , Carlan Y , Geoffrey G 2003 *J. Nucl. Mater.* **312** 236
- [9] Katahara K W , Nimalendran N , Manghni M H , Fisher E S 1979 *J. Phys. F* **9** 2167
- [10] Finnis M 2008 *International Workshop on Ab initio Description of Iron and Steel (ADIS2008). Magnetism and Phase diagrams* . Ringberg Castle , Germany June 15—20 2008
- [11] Turchi P E A , Reinhard L , Stocks G M 1994 *Phys. Rev. B* **50** 15542
- [12] Akai H , Dederichs P H 1993 *Phys. Rev. B* **47** 8739
- [13] Moroni E G , Jarlborg T 1993 *Phys. Rev. B* **47** 3255
- [14] Olsson P , Abrikosov I A , Wallenius J 2006 *Phys. Rev. B* **73** 104416
- [15] Olsson P , Abrikosov I A , Vitos L 2003 *J. Nucl. Mater.* **321** 84
- [16] Chakarova R , Pontikis V , Wallenius J *Development of FeCr many body potential and cohesion model* . <http://www.neutron.kth.se/publications/library/DR-6.pdf> [16 Mar 2005]
- [17] Froidval A , Iglesias R , Samaras M 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 237201
- [18] Filippova N P , Shabashov V A , Nikolaev A L 2000 *Phys. Met. Metall.* **90** 145
- [19] Konishi T , Ohsawa K , Abe H 1999 *Comp. Mater. Sci.* **14** 108
- [20] Yoshitake T , Yamagata I , Akasaka N , Nakamura Y , Tsai H , Cole J , Allen T 2005 *J. ASTM Int.* **2** 162
- [21] Maury F , Lucasson P , Lucasson A 1987 *J. Phys. F* **17** 1143
- [22] Olsson P , Domain C , Wallenius J 2007 *Phys. Rev. B* **75** 014110
- [23] Zhang W Y , Hu W Y , Shu X L 2002 *Theory of Embedded Atom Method and Its Application to Materials Science* (Changsha : Hunan University Press) P75 (in Chinese) 张邦维、胡望宇、舒小林 2002 嵌入原子方法理论及其在材料科学中的应用 (长沙 : 湖南大学出版社) 第 75 页]
- [24] Pasianot R , Farkas D , Savino E J 1991 *Phys. Rev. B* **43** 6952
- [25] Mendeleev M I , Han S , Srolovitz D J 2003 *Phillos. Mag.* **83** 3977
- [26] Yu J N 2007 *Irradiation Effects of Materials* (Chemical Industry Press : Beijing) P28 (in Chinese) 郁金南 2007 材料辐照效应 (北京 : 化学工业出版社) 第 28 页]
- [27] Caro A , Crowson D A , Caro M 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 075702
- [28] Lagerstedt C 2005 *Licentiate Thesis* (Stockholm : Sweden)
- [29] Oslang A M , Graf H , Balzer G 1983 *Phys. Rev. B* **27** 2674
- [30] Ackland G J , Reed S K 2003 *Phys. Rev. B* **67** 174108
- [31] Olsson P , Wallenius J , Domain C 2005 *Phys. Rev. B* **72** 214119
- [32] Malerba L 2004 *J. Nucl. Mater.* **329—333** 1156
- [33] Wallenius J , Abrikosov I A , Chakarova R 2004 *J. Nucl. Mater.* **329—333** 1175
- [34] He X F , Yang W , Qu Z H , Fan S 2009 *Front En. Power Eng. China* **3** 181
- [35] Watanabe S 1995 *J. Nucl. Mater.* **224** 158
- [36] Wallenius J , Olsson P , Malerba L 2007 *Nucl. Instrum. Meth. B* **255** 68
- [37] Bonny G , Terentyev D , Malerba L 2008 *Comp. Mater. Sci.* **42** 107
- [38] Erhart P , Caro A , Caro M S 2008 *Phys. Rev. B* **77** 134206
- [39] Chen J C , Yu G 2008 *9th International Conference on Computer Simulation of Radiation Effects in Solids* . Oct 2008 Beijing p42
- [40] Gupta G , Gary S W 2005 *International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems : Water Reactors* . Salt Lake City , US August 14—18 2005 1359
- [41] Eyre B L , Bullough R 1965 *Phillos. Mag.* **12** 31
- [42] Suganuma K , Kayano H 1983 *J. Nucl. Mater.* **118** 234
- [43] Terentyev D A , Bonny G , Malerba L 2008 *Acta Mater.* **56** 3229
- [44] Terentyev D , Malerba L 2008 *J. Nucl. Mater.* **377** 141
- [45] Terentyev D , Grammatikopoulos P , Bacon D J , Osetsyky Yu N 2008 *Acta Mater.* **56** 5034—5046
- [46] Domain C , Monnet G 2005 *Phys. Rev. Lett.* **95** 215506
- [47] Osetsyky Yu N , Stoller R E , Rodney D et al 2005 *Mater. Sci. Eng. A* **400—401** 370
- [48] Mirebeau I , Hennion M , Parette G 1984 *Phys. Rev. Lett.* **53** 687
- [49] Ackland G J 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 015502
- [50] Steven V D 2009 *EU-China Cooperation in Nuclear Fission Research Workshop-2009* . Beijing
- [51] Noronha S J , Huang J , Ghoniem N M 2004 *J. Nucl. Mater.* **329—333** 1180
- [52] Lucas G E 1993 *J. Nucl. Mater.* **206** 287
- [53] Malerba L , Caro A , Wallenius J 2008 *J. Nucl. Mater.* **382** 112
- [54] Matijasevic M , Almazouzi A 2008 *J. Nucl. Mater.* **377** 147
- [55] Matijasevic M , Almazouzi A 2008 *J. Nucl. Mater.* **377** 101

Comprehensive Survey for the Frontier Disciplines

Multi-scale modeling of radiation damage in FeCr alloy^{*}

He Xin-Fu[†] Yang Wen Fan Sheng

(*China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, China*)

(Received 7 January 2009 ; revised manuscript received 18 March 2009)

Abstract

Since irradiation experiments of ferritic/martensitic (F/M) FeCr alloys show that F/M steels undergo much less swelling than austenitic steels during neutron or charged particle irradiation , in addition , it is well-known that high chromium content of F/M alloys provide good resistance against corrosion , they are considered as one of the most attractive candidate materials for future nuclear facilities , such as Fusion Reactor , ADS and generation IV reactors . Although irradiation experiments can not be replaced by modeling , a purely experimental approach to understanding the effects of irradiation is also not practicable , so in recent years substantial progress has been made in the field of multi-scale modeling of radiation damage in F/M FeCr alloys . The present paper is a review of methods used and results achieved within the last couple of years , and some suggestions are put forward for the further improvements .

Keywords : ferritic/martensitic FeCr alloy , radiation damage , multi-scale modeling

PACC : 2846 , 6180 , 8220W

^{*} Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2007CD209801) and the National Natural Science Foundation (Grant No. 10975194) .

[†] E-mail : hexinfu@ciae.ac.cn