

相场法研究位错环与时效温度协同 调控富 Cu 相析出*

孙文静¹⁾ 杨文奎¹⁾ 侯华¹⁾³⁾ 赵宇宏^{1)2)†}

1) (中北大学材料科学与工程学院, 新材料智能铸造先进成型山西重点实验室, 高性能
铝/镁合金材料开发及应用省部共建协同创新中心, 太原 030051)

2) (北京科技大学, 北京材料基因工程高精尖创新中心, 北京 100083)

3) (太原科技大学材料科学与工程学院, 太原 030025)

(2026 年 1 月 23 日收到; 2026 年 2 月 15 日收到修改稿)

富 Cu 相析出是反应堆压力容器 (RPV) 钢辐照致脆的关键微观机制, 其演化过程与温度及位错缺陷密切相关. 本文基于 EPhase 三维时效相场模型, 研究了位错环存在条件下, Fe-15%Cu-3%Mn-1.5%Ni-1.5%Al (原子百分比, 后同) 合金在 523—923 K 温度范围内富 Cu 相的析出行为及其析出强化效应. 结果表明, 温度对位错调控富 Cu 相析出行为的影响规律具有显著的调控作用, 析出机制随温度区间发生显著转变: 低温条件下 (523—623 K), 析出过程以化学驱动为主导, 对位错结构的依赖性较弱; 中等温度下 (723 K), 位错应力场与热激活扩散协同, 导致富 Cu 相呈明显的空间非均匀析出特征; 高温条件下 (823—923 K), 富 Cu 相析出整体受到抑制, 仅能在位错应力场提供额外驱动力的局部区域发生有限析出. 能量分析结果表明, 随温度升高, 化学能与界面能对析出过程的驱动作用显著衰减, 弹性能的影响逐渐占据主导地位, 进而抑制富 Cu 相的形核与长大. 相应地, 合金析出强化效应随温度升高呈显著弱化趋势, 高温条件下富 Cu 相难以形成有效强化作用, 导致合金屈服强度随富 Cu 相生长无明显提升. 本研究明确了温度-位错耦合作用下富 Cu 相析出的物理本质, 为 RPV 钢服役过程中的组织演化预测及长期性能稳定性评估提供了重要理论依据.

关键词: 相场法, 富 Cu 相, 时效温度, 位错环

DOI: 10.7498/aps.75.20260121

CSTR: 32037.14.aps.75.20260121

1 引言

反应堆压力容器 (reactor pressure vessel, RPV) 钢作为一类 Fe-Cu 基多元合金, 其富 Cu 相的析出可显著提升合金的强度与韧性. 然而, 在长期热时效或辐照环境下, 富 Cu 相易发生粗化, 进而诱发 RPV 钢的脆化效应, 对反应堆压力容器的长期服役安全性与使用寿命构成严重威胁. 因此, 为实现

对富 Cu 相析出行为的精准调控并抑制其有害粗化, 亟需深入阐明影响富 Cu 相析出过程与微观组织演化的关键因素.

在 Fe-Cu 基合金中, 富 Cu 相的析出会引发基体晶格畸变, 通过阻碍位错运动实现材料的强化. 与此同时, 富 Cu 相的尺寸、形貌及分布特征对材料韧性具有显著调控作用: 当富 Cu 相尺寸细小且分布均匀时, 材料可保持优异韧性; 而一旦富 Cu 相发生粗化或分布不均, 则会导致韧性劣化. 位

* 国家自然科学基金 (批准号: U23A20628, U25A20286) 和山西省重大科技项目 (批准号: 202301050201004, 20250105020101) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhaoyuhong@nuc.edu.cn

错作为金属材料中普遍存在的晶体缺陷,对富 Cu 相的析出行为具有关键调控作用^[1].原位中子散射研究表明,预变形可加速球状纳米富 Cu 析出相的形成,并促进 Cu 原子在位错处的优先析出,证实了位错为 Cu 原子的富集与析出提供了异质形核位点^[2].冷变形同样能够加速富 Cu 相析出并提升其体积分数,且该过程中富 Cu 过渡相(GP 区)会优先形成并逐渐转变为 ϵ -Cu 相,揭示了位错密度的提升可显著促进富 Cu 相的析出强化进程^[3].

针对变形 Fe-Cu 合金时效过程中 Cu 颗粒在位错与基体中的析出竞争行为的模拟研究发现,位错处的异质析出会诱导溶质贫化区的形成,进而对 Cu 颗粒的粗化行为产生显著影响^[4].相场模拟进一步探究了位错环存在下 Fe-Cu-Mn-Ni-Al 合金中富 Cu 相的析出规律,结果表明位错环可大幅缩短富 Cu 相的形核孕育期,并促进其早期生长^[5].原子尺度模拟对刃型位错与 Cu 团簇/析出相之间相互作用的研究则显示,位错不仅可调控 Cu 原子的俘获与扩散行为,还能作为异质形核核心促进早期 Cu 团簇的稳定化,表明位错在富 Cu 相形核初期即发挥关键调控作用^[6,7].在材料性能层面,位错环及环状缺陷尽管数量占比不高,却能显著改变 Cu 颗粒的空间分布与尺寸演化规律,进而对材料的宏观硬化与脆化行为产生非线性影响^[8].此外,位错与点缺陷的存在可改变 Cu 团簇的形成路径,并显著影响其阻碍位错运动的作用效果^[9];而富 Cu 颗粒往往优先在这些缺陷位点形核,最终对材料的辐照硬化与脆化行为产生重要调控作用^[10].

时效温度同样是调控富 Cu 相析出行为的关键因素,这一结论已得到模拟与实验研究的双重验证.相场模拟对 Fe-Cu 低碳钢中 Cu 析出行为的研究表明,富 Cu 相的析出动力学过程及析出相的初始 Cu 浓度均与时效温度和合金成分密切相关,由此揭示了较高时效温度下 Cu 析出速率与浓度分布的演变规律^[11].相场方法源于经典热力学与动力学理论^[12],可在连续场框架下自洽描述析出相的形核、生长与粗化过程^[13-15].通过构建热动力学-动力学耦合模型,对 Fe-1.2%Cu (原子百分比,下同)合金在不同温度下的析出行为进行模拟,成功预测并再现了该体系的时温析出(TTP)曲线;该研究证实,温度是决定 Cu 析出时序与析出强化效应的核心因素^[16].同时随着计算材料学的发展,相场模拟与机器学习和 EBSD 等方法的结合也为复杂合

金体系中工艺参数与组织演化的高效优化提供了新思路^[17,18].进一步耦合 CALPHAD 与相场方法对 Fe-Cu-Mn-Ni 合金的模拟发现,时效温度越高,富 Cu 相的形核孕育期越短,析出相的体积分数与粒径同步增大,表明高温时效可显著促进富 Cu 相的析出与粗化进程^[19].高温时效处理则会加速富 Cu 相的生长并改变材料力学性能,凸显了温度对富 Cu 相稳定性及材料性能的关键调控作用^[20].

早期针对 Fe-Cu 合金时效行为的研究指出^[21],在约 600 °C 等温时效过程中,富 Cu 相先以 B2 结构形核,后发生相结构转变,且析出动力学特性随温度变化,表明温度对相结构转变及析出动力学具有显著影响.温度与时效参数对含 Cu 合金析出相演变及力学性能的调控作用,已被大量研究证实.针对纳米 Cu 颗粒的低温相变行为研究发现,温度可直接调控析出相尺寸、相稳定性及材料硬度^[22].利用透射电子显微镜观测与显微硬度测试,系统探究了 923 K, 973 K 及 1023 K 时效温度下富 Cu 相的粗化规律与硬化特性,结果表明,富 Cu 相粗化过程的活化能为 (212 ± 3) kJ/mol;不同时时效温度下,沉淀强化对合金峰值显微硬度的贡献率为 17%—25%,且富 Cu 相对合金的强化机制以共格强化为主,同时伴随部分层错强化效应^[23].结合电阻率测试、三维原子探针及透射电子显微镜技术,研究了含铜奥氏体不锈钢在 700 °C 时效不同时长后富 Cu 相的粗化行为与力学性能响应,发现富 Cu 相平均半径的缓慢增长,与材料硬度、屈服强度随时效时间延长的变化趋势高度一致^[24].

模拟研究还发现,时效温度可驱动富 Cu 相由体心立方(BCC)球状向面心立方(FCC)棒状转变,且转变过程中会形成外层富 Mn 环;富 Mn 环的存在及 Mn 含量的提升,均能有效抑制富 Cu 相的粗化^[25,26].在 600 °C 时效处理的钢中,可观察到平均半径 6.3 nm 且分布均匀的富 Cu 相,此类析出相与位错发生强烈交互作用,使材料获得 1005 MPa 的超高屈服强度,同时兼具优异的综合力学性能^[27].另有模拟结果显示,富 Cu 团簇的形成会降低 Fe-Cu-Ni 合金的室温屈服强度并增大脆性倾向;时效初期的 Cu 团簇可产生强化效应,但随着时效时间延长,材料强度呈持续下降趋势^[28].

综上所述,现有研究多聚焦于单一因素(如溶质浓度、时效温度或位错密度)对 Fe-Cu 基合金富 Cu 相析出行为的调控作用.然而在辐照服役环

境中, 温度与位错密度呈现协同调控效应, 共同主导富 Cu 相的形核、长大及粗化全过程: 其中温度通过改变原子扩散动力学与相平衡热力学条件, 直接影响析出相的演变速率与热力学稳定性^[29]; 而位错网络则可通过提供异质形核位点、加速溶质原子扩散通道以及缺陷-溶质交互作用, 显著改变析出相的时空演化规律. 因此, 开展温度-位错协同作用下富 Cu 相的析出机制研究, 有望填补当前单一因素调控研究的局限, 为反应堆压力容器钢的长期服役性能优化提供理论支撑.

2 相场模型

本文基于 EPhase 三维时效相场模型^[30], 微观结构演化通过求解 Cahn-Hilliard 非线性扩散方程来描述守恒成分场随时间的演化 (描述相变过程中的成分演变), 具体表达式如下^[31,32]:

$$\frac{\partial c_i(r,t)}{\partial t} = \nabla \cdot \sum_j M_j \cdot \nabla \frac{\delta F}{\delta c_i(r,t)} + \xi_{c_i}(r,t), \quad (1)$$

$$F(c_i, T) = \int_V (f_{\text{ch}}(c_i, T) + f_{\text{in}}(c_i) + f_{\text{elas}}(c_i)) dV = \int_V \left\{ \sum_i G_i^0 c_i + RT \sum_i (c_i \ln c_i) + \sum_i \sum_{j>i} L_{i,j} c_i c_j \right. \\ \left. + \sum_i \sum_{j>i} \sum_{k>j} L_{i,j,k} c_i c_j c_k + \frac{1}{2} \sum \kappa_{c_i} (\nabla c_i)^2 + \frac{1}{2} \sigma_{ij}^{\text{el}}(r) \varepsilon_{kl}^{\text{el}}(r) + B \sin^2(\pi \eta \alpha) \right\} dV, \quad (4)$$

式中 G_i^0 是纯组元 i 的吉布斯自由能, $L_{i,j}$ 和 $L_{i,j,k}$ 分别是二元和三元相互作用参数, 具体参数见附录. κ_{c_i} 是元素 i 的梯度能系数. $\sigma_{ij}^{\text{el}}(r)$ 和 $\varepsilon_{kl}^{\text{el}}(r)$ 分别对应空间位置 r 处的弹性应力和弹性应变. B 是位错滑移的核心能量系数 (取值范围为 0.31—2.52^[33]). $\sigma_{ij}^{\text{el}}(r)$ 可以写成:

$$\sigma_{ij}^{\text{el}}(r) = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^{\text{el}}(r) \\ = (C_{ijkl}^0 + \Delta C_{ijkl} \Delta c) (\delta \varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^0 - \varepsilon_{ij}^{\text{d}}), \quad (5)$$

式中 C_{ijkl} 是对应的弹性模张量, C_{ijkl}^0 是析出相与基体之间的平均弹性模量. ΔC_{ijkl} 是沉淀物与基体弹性模量的差. $\Delta c = c_i - c_i^0$. $\delta \varepsilon_{ij}$ 是与位移场 $u(r)$ 相关的非均匀应变, 其表达式为

$$\delta \varepsilon_{ij}(r) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j} + \frac{\partial u_j}{\partial r_i} \right). \quad (6)$$

本征应变 ε_{ij}^0 可以表示为

式中, $c_i(r,t)$ ($i = 1, 2, 3, 4, 5$) 分别是 Fe, Cu, Mn, Ni 和 Al 元素在时间 t 和空间位置 r 处的瞬时浓度, 合金初始成分为 Fe-15%Cu-3%Mn-1.5%Ni-1.5%Al, 选用较高的初始 Cu 浓度可在不改变析出相演化的核心物理规律前提下, 加速富 Cu 相的析出动力学过程, 以便高效地统计析出规律; $\xi_{c_i}(r,t)$ 为热涨落噪声项, 用于表征原子随机运动对成分场演化的影响; M_i 是元素的扩散迁移率, 其表达式可写为

$$M_i(T) = c_i^0 (1 - c_i^0) \times \left\{ \frac{D_i(T)}{RT} \right\}, \quad (2)$$

式中, R 是气体常数, T 是温度, c_i^0 是合金中元素 i 的初始浓度. $D_i(T)$ 是扩散系数:

$$D_i(T) = D_i^0 \exp\left(\frac{-Q_i^0}{RT}\right), \quad (3)$$

其中, D_i^0 是频率因子, Q_i^0 是元素 i 的扩散激活能.

Fe-Cu-Mn-Ni-Al 合金的总自由能包括化学自由能密度 f_{ch} 、界面能密度 f_{in} 和弹性能密度 f_{elas} , 可表示为

$$\varepsilon_{ij}^0 = \varepsilon_i^0 \delta_{ij} \beta(c_i) = \varepsilon_i^0 \delta_{ij} c_i^3 (10 - 15c_i + 6c_i^3). \quad (7)$$

位错应变表示为^[34]

$$\varepsilon_{ij}^{\text{d}} = \mathbf{b} \otimes \mathbf{n} = \frac{(b_i n_j + b_j n_i)}{2d}, \quad (8)$$

式中, \mathbf{b} 和 \mathbf{n} 分别是 Burgers 矢量和滑动平面的法向量, d 是滑动平面两平面之间的距离. 位错环的设置

$$\varepsilon_{ij}^{\text{d}}(x, y) = \varepsilon_{ij}^{\text{d}} \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2} \\ = r_0, \quad (9)$$

式中 (x, y) 是位错环上的坐标, (x_0, y_0) 是位错环的中心坐标, r_0 是位错环的半径.

模拟采用三维网格进行离散化求解, 网格尺寸设置为 $128 \times 128 \times 32$, 对应物理空间尺度为 $128 \text{ nm} \times 128 \text{ nm} \times 32 \text{ nm}$, 网格间距 $dx = dy = dz = 1.0$.

3 结果与分析

为了直观地展示位错环对材料内部应力场的影响, 模拟体系的应力分布图如图 1 所示, 分别表示不同方向的正应力与切应力作用下的高、低应力区域分布特征, 其中红色区域为高应力区, 蓝色区域为低应力区. 可以清晰看到位错环形成的环状高应力带, 其应力幅值在位错节点处达到最大. 远离位错区域的基体应力接近均匀且幅值显著降低, 表明位错环的影响范围具有明确的空间衰减特征. 局部放大图进一步显示, 应力集中区呈现尖峰状分布, 反映出位错核心区域弹性畸变的强烈局域化.

总体而言, 位错环在体系中构建了一个具有环状对称结构的初始三维弹性应力场. 该非均匀应力场不仅为空间上不同区域提供差异化的热力学驱动力, 还将在后续析出过程中通过改变溶质原子的局部化学势分布, 对富 Cu 相的形核位置、空间分布及长大行为产生选择性调控作用, 使得富 Cu 相会优先在位错环附近析出.

图 2 给出了在 623 K 时效条件下, Fe-15%Cu-3%Mn-1.5%Ni-1.5%Al 合金三维相场模拟区域中间切面的元素分布演化特征. 图中从左至右依次对

应不同时效阶段, 系统呈现了 Fe, Cu 及合金化元素 Mn, Ni 和 Al 的空间分布规律, 直观揭示了位错结构与热激活扩散协同作用下富 Cu 相的析出行为及微观演化机制.

时效初期, Cu 元素在基体中整体呈现近似均匀分布, 仅在位错环区域出现微弱的环状富集特征. 此阶段尚未形成稳定的富 Cu 析出相, Cu 原子的偏聚行为主要受位错弹性应力场的驱动, 形成类“溶质气氛”的前驱结构. 位错引入的局部应力场改变了 Cu 原子的化学势空间分布, 使其沿位错环优先聚集, 进而显著降低了富 Cu 相后续形核所需的能垒. 该现象与已有研究报道的位错诱导溶质偏聚及管道扩散机制的结论一致, 表明位错在析出初期主要通过调控局部热力学驱动力来影响富 Cu 相的形核过程.

随着时效过程的推进, Cu 元素在位错环附近发生不连续分解, 原先连续环状偏聚结构演化为沿位错环周期性分布的离散富 Cu 析出体. 这一演化特征表明, 位错的作用具有双重性: 一方面为 Cu 原子提供快速扩散通道, 加速溶质原子的迁移与富集; 另一方面通过其弹性应力场对析出相的空间分布起到了“引导”作用, 促使富 Cu 相优先在位

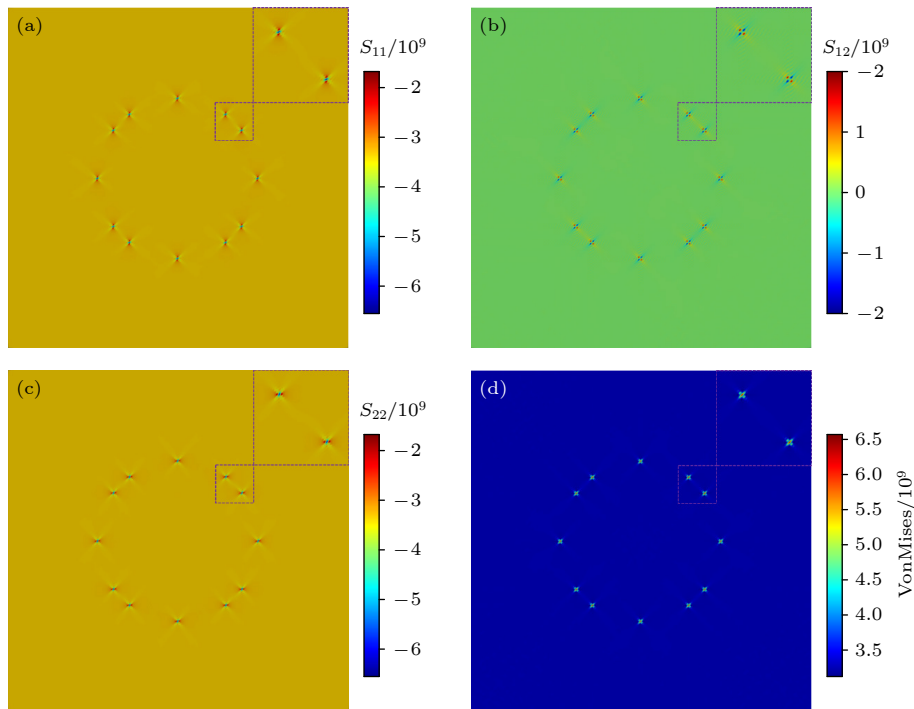


图 1 初始应力分布图 (a) x 轴向正应力; (b) xy 方向切应力; (c) y 轴向正应力; (d) 总应力, 右上角为局部放大图

Fig. 1. Initial stress distribution diagram: (a) x -axis normal stress; (b) xy direction shear stress; (c) y -axis normal stress; (d) total stress, the upper right corner is a zoomed in view of a specific area.

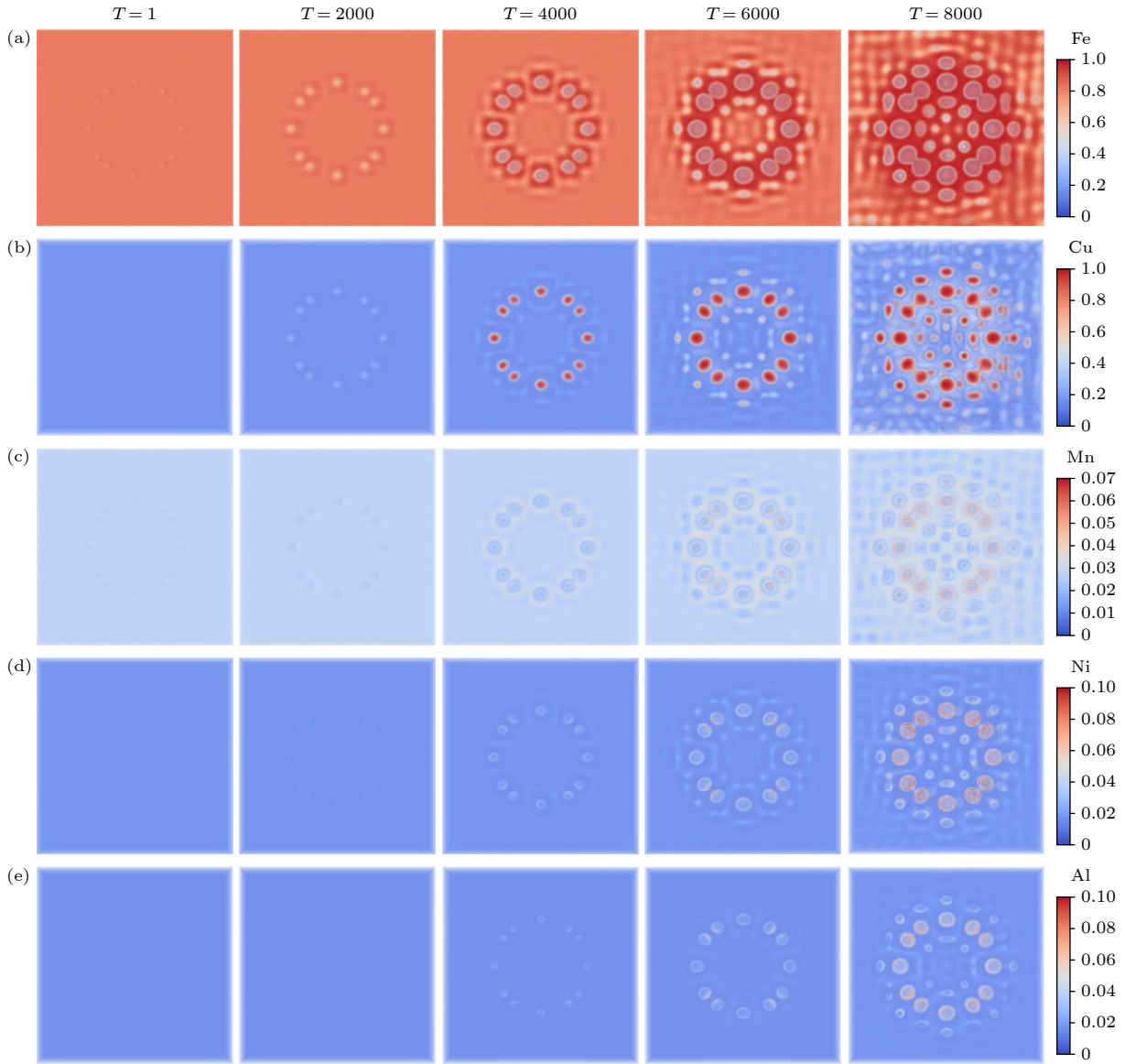


图 2 623 K 温度下 Fe-15%Cu-3%Mn-1.5%Ni-1.5%Al 合金三维模拟网格中间切面元素分布图 (a) Fe 元素; (b) Cu 元素; (c) Mn 元素; (d) Ni 元素; (e) Al 元素

Fig. 2. Element distribution map of Fe-15%Cu-3%Mn-1.5%Ni-1.5%Al alloy in the middle section of three-dimensional simulation grid at 623 K temperature: (a) Fe element; (b) Cu element; (c) Mn element; (d) Ni element; (e) Al element.

错环附近形核并长大. 然而, 受界面能和弹性能的协同制约, 析出相并未形成连续环状结构, 而是以离散颗粒形态稳定存在, 这一现象凸显了位错辅助析出过程与传统体扩散形核机制的显著差异.

时效后期, 除位错环附近的富 Cu 相继续粗长大外, 位错环内部区域逐渐析出大量细小且弥散分布的富 Cu 相颗粒. 这一现象表明, 在 623 K 的时效温度下, 体扩散机制被充分激活, 即便在位错缺失的基体区域, 热驱动的析出过程也可自发进行. 由此可见, 该阶段的微观组织演化呈现出位错辅助析出与热时效析出两种机制的共存与叠加: 前者通过提供异质形核位点与快速扩散通道, 主导析

出相的空间分布模式与初始形核行为; 后者则依托高温下的体扩散作用, 显著提升整体析出相的体积分数, 并驱动基体内部的弥散析出. 这种多机制耦合的析出行为, 是反应堆压力容器钢在实际服役温度区间内微观组织演化的核心特征, 对材料的长期强韧性匹配及服役安全性具有关键调控作用.

对多溶质元素分布行为的进一步分析表明, Mn 元素在富 Cu 相析出体周围的界面偏聚特征最为显著. 随着富 Cu 相的形核与长大, Mn 原子逐渐在富 Cu 相与 α -Fe 基体界面处富集, 形成清晰的环状分布. 这种界面偏聚效应可有效降低富 Cu 基体之间的界面能, 同时缓解因 Cu-Fe 晶格失

配引起的弹性畸变能积累,从而提高析出相的热力学稳定性,并显著延缓其粗化进程.相比之下,Ni元素同样倾向于在富Cu相界面附近富集,但其偏聚程度相对较弱,主要起到协同调控界面结构、辅助稳定析出相的作用.Al元素在整个析出过程中表现出最弱的偏聚特性,仅在析出相充分粗化后,在其周围形成轻微富集区,这表明Al元素并非富Cu相形成初期的主导影响因素,而更可能参与后期界面结构的精细调控.

综上,图2所示结果清晰阐述了623 K时效条件下位错结构与热激活扩散对富Cu相析出行为的耦合调控机制.一方面,位错环通过应力场与管道扩散效应,显著降低富Cu相的形核能垒,并主导析出相的空间分布特征;另一方面,较高的时

效温度充分激活体扩散机制,促使析出行为从位错附近的局域化析出,逐渐演化为位错区与位错自由区并存的多尺度析出模式.同时,Mn, Ni, Al等合金元素在富Cu相界面的协同偏聚效应,进一步优化了析出相的界面结构与热力学稳定性,为核-壳型富Cu析出相的形成与热稳定存在提供了关键的热力学支撑.

图3展示了523 K, 623 K, 723 K, 823 K及923 K五种时效温度下,位错环调控作用下Fe-15%Cu-3%Mn-1.5%Ni-1.5%Al合金中富Cu相的三维演化过程.图中给出了不同时效时间对应的微观组织形貌,旨在系统对比温度参数对位错辅助析出行为、析出相动力学演变路径及最终析出形貌的调控规律.本研究中“时效时间”代表无量纲数值演

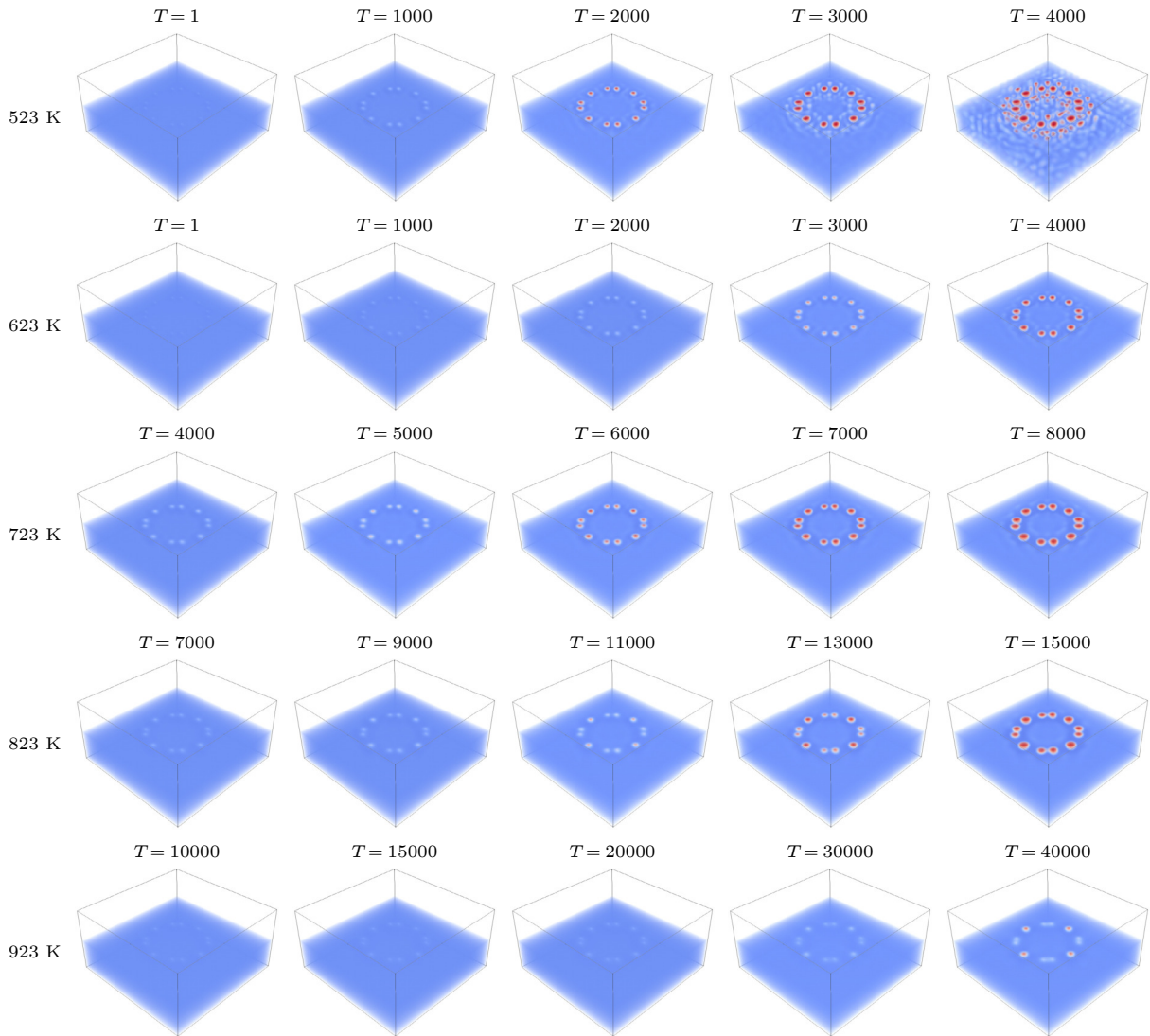


图3 不同温度(523 K, 623 K, 723 K, 823 K, 923 K)位错环作用下Fe-15%Cu-3%Mn-1.5%Ni-1.5%Al合金中富Cu相的三维演化结果
Fig. 3. Three dimensional evolution results of Cu rich phase in Fe-15% Cu-3%Mn-1.5%Ni-1.5%Al alloy under dislocation loops at different temperatures (523 K, 623 K, 723 K, 823 K, 923 K).

化步. 不同温度下无法简单用相同步数进行横向比较, 因此我们采用“相同演化阶段对比”策略, 以确保不同温度下析出状态具有可比性.

根据图 3 所示不同温度下富 Cu 相析出过程的模拟演化结果进行对比归纳可以划分为 523—623 K, 723 K 及 823—923 K 三个温度区间. 通过系统比较各温度条件下析出相的形核方式、空间分布特征、长大行为及其与位错环弹性应力场的耦合程度, 发现 523—623 K 范围内的组织演化模式高度相似, 均以较强化学驱动力主导的弥散析出为特征; 823—923 K 范围内则表现出一致的应力诱导选择性析出特征; 而 723 K 处于两种机制的过渡状态, 呈现明显不同的竞争行为.

在较低温度条件下 (523 K 和 623 K), 富 Cu 相的析出行为表现出显著的温度主导调控特征. 尽管位错环的存在为溶质原子提供了潜在的异质偏聚位点, 但在此温度范围内, 析出行为对位错结构的依赖程度较弱. 受限于较低的热激活能, 富 Cu 相主要以局部化析出的形式出现, 其空间分布并未严格受限于位错环位置, 呈现出一定的随机性和弥散性特征.

当温度升高至 723 K 时, 富 Cu 相的析出行为呈现显著的位错分布特征, 析出相明显倾向于沿位错环及其应力影响区域形核生长, 而远离位错的基体区域析出过程则受到显著抑制. 这一现象表明, 该温度下基体的热力学过饱和度不足, 富 Cu 相的析出难以自发进行, 只有在位错应力场所提供的额外热力学驱动力作用下, 才能在局部区域建立足够的过饱和状态, 从而支撑富 Cu 相的形核与生长.

在更高温度区间 (823 K, 923 K), 富 Cu 相的析出行为发生进一步转变, 呈现出典型的位错应力主导特征. 模拟结果显示, 析出行为对位错结构的依赖程度显著增强, 位错成为调控富 Cu 相析出位置与形貌的核心因素. 当温度升高至 923 K 时, 这一趋势表现得尤为突出: 富 Cu 相的形核与生长几乎完全依附于位错环及其应力场作用区域, 远离位错的基体区域几乎无明显析出相形成. 这是由于高温条件下基体的平衡固溶度显著提升, 热力学过饱和度大幅降低, 自发析出的能垒显著增高; 而位错应力场通过降低形核能垒、提供快速扩散通道的双重作用, 成为富 Cu 相析出的必要条件.

综合不同温度下的三维演化结果可知, 温度是调控位错环对富 Cu 相析出行为影响程度的核心

参数. 在低温区间, 析出行为对位错结构的依赖性较弱, 表现为温度主导的局域析出特征; 在中等温度区间, 位错诱导效应与热激活扩散机制协同作用, 促使体系形成具有显著空间非均匀性的多尺度析出结构; 而在高温区间, 位错应力成为析出行为的主导机制, 其对富 Cu 相析出行为的调控作用显著增强. 这种温度依赖性的机制转变, 揭示了位错与温度在调控富 Cu 相析出动力学路径及空间分布方面的本质耦合关系.

上述结果表明, 在 RPV 钢实际服役或热处理条件下, 富 Cu 相的析出行为不仅取决于位错等微观缺陷的存在形式与分布特征, 还强烈受服役温度的调控. 理解位错-温度耦合作用对富 Cu 相析出的调控机制, 对于预测材料在不同温度条件下的微观组织演化规律、保障其长期服役性能稳定性具有重要意义.

由于在 523 K 下富 Cu 相的析出速率显著高于其他温度条件, 为更清晰地分析出过程中的演变规律, 本研究选取 623, 723, 823 和 923 K 四种温度进行统计, 所得能量演化曲线如图 4 所示, 包括总自由能、界面能、化学能以及弹性能. 通过对比不同温度下各能量分量的演化特征, 可从能量驱动机制的角度, 深入阐述温度对富 Cu 相析出动力学及位错调控作用的影响规律. 如图 4(a) 所示, 不同温度条件下体系总自由能均随演化时间呈下降趋势, 表明富 Cu 相的析出过程整体上由体系能量的降低所驱动. 然而, 不同温度下总自由能的下降速率与幅度存在显著差异: 在 623 K 条件下, 总自由能迅速下降, 并在演化后期达到较低水平, 说明该温度下体系可通过富 Cu 相的析出有效降低整体自由能, 析出过程较为充分. 723 K 条件下, 总自由能同样表现出明显的下降趋势, 但下降速率与最终降幅均低于 623 K. 随着温度进一步升高至 823 K 和 923 K, 总自由能的下降趋势显著变缓, 尤其在 923 K 条件下, 总自由能几乎维持在较高水平, 仅发生微弱变化. 这一能量演化特征表明, 温度升高会显著削弱富 Cu 相析出的热力学驱动力, 导致析出过程对体系自由能下降的贡献度下降, 从能量角度印证了前述三维形貌分析中“高温条件下析出受抑制”的结论.

图 4(b) 展示了不同温度下体系界面能的演化行为. 由图 4 可知, 623 K 条件下, 界面能在演化初期迅速上升, 随后逐渐趋于稳定, 这一特征反映出

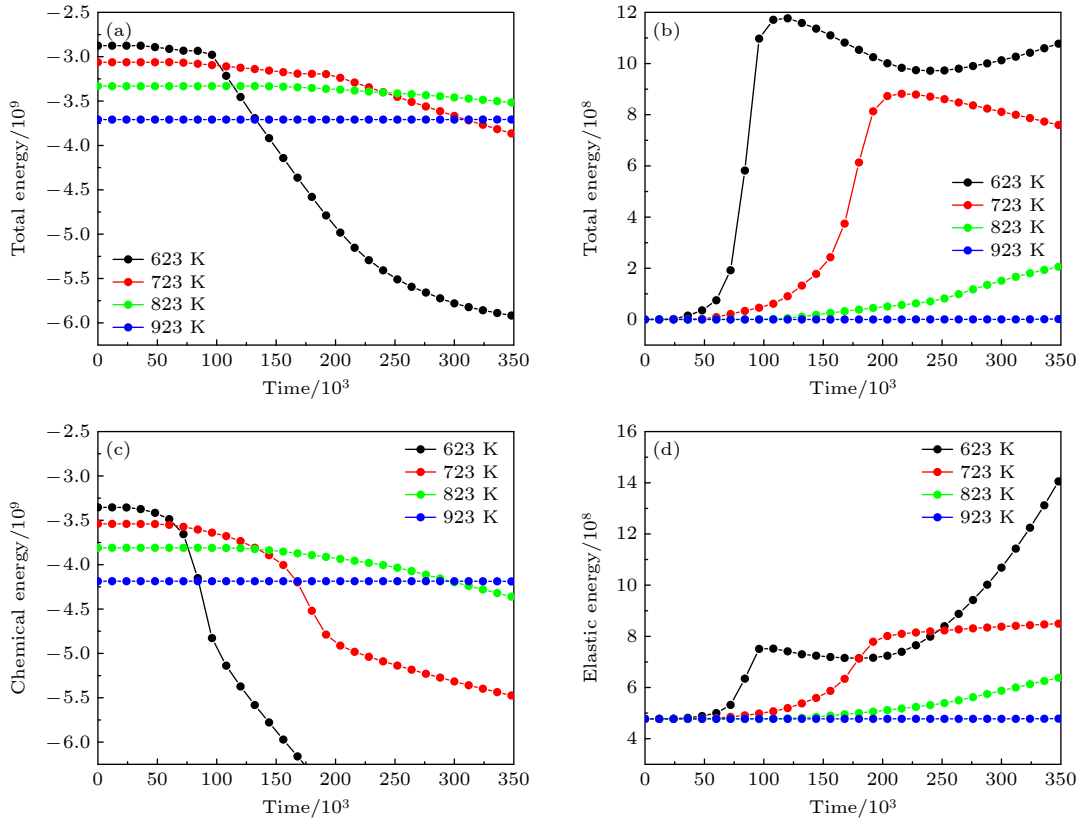


图 4 能量曲线 (a) 总自由能; (b) 界面能; (c) 化学能; (d) 弹性能

Fig. 4. Energy curve: (a) Total free energy; (b) interfacial energy; (c) chemical energy; (d) elastic energy.

大量富 Cu 相界面快速形成并逐步稳定. 723 K 条件下, 界面能同样呈现明显上升趋势, 但其峰值和增长速率均低于 623 K. 相比之下, 823 K 和 923 K 条件下界面能的增幅明显受限, 尤其是在 923 K 条件下, 界面能几乎维持在较低水平, 且变化速率极为缓慢. 由于界面能的增大与析出相数量及界面面积呈正相关, 上述结果表明, 温度升高会显著抑制富 Cu 相的形核与长大进程, 从界面能演变角度进一步证实了高温条件下析出动力学的迟滞行为.

图 4(c) 呈现了体系化学能随演化时间的变化情况. 可以看出, 623 K 条件下, 化学能迅速下降, 且降幅最大, 这一特征表明 Cu 原子通过析出富 Cu 相实现了体系化学自由能的有效降低, 化学能差是驱动析出过程的核心动力. 723 K 条件下, 化学能的下降趋势依然存在, 但降幅明显减小, 说明随着温度升高, 溶质偏聚带来的化学能降低. 当温度进一步升高至 823 K 和 923 K 时, 化学能的变化趋于平缓, 尤其在 923 K 条件下, 化学能几乎维持恒定水平. 这一现象表明, 在高温条件下, 溶质原子更倾向于维持弥散固溶状态, 局域成分起伏难以突破热力学能垒形成稳定的富 Cu 相, 从而显著

削弱了富 Cu 相析出的化学驱动力.

图 4(d) 呈现了不同温度条件下弹性能的演化规律, 其变化与化学能和界面能表现出显著差异. 在 623 K 和 723 K 条件下, 弹性能在析出初期呈现一定幅度的上升, 随后趋于平稳, 表明位错引入的弹性应变在析出过程中得到了部分释放或重新分配. 而在 823 K 时, 弹性能的上升趋势明显减缓; 至 923 K 时, 弹性能甚至随演化时间几乎不发生改变. 这一变化说明, 在高温条件下, 位错所引入的弹性应变难以通过析出过程实现有效松弛. 进一步分析表明, 高温对富 Cu 相析出的抑制作用主要源于形核驱动力的减弱. 具体而言, 随着温度升高, 系统的化学自由能降低, 导致形核的化学驱动力下降; 与此同时, 位错引起的弹性应变能并未同步降低, 使得析出相在形核阶段需要克服的有效能量势垒相对增大. 因此, 在高温条件下, 形核过程受到显著抑制, 析出速率减缓. 这一结果进一步表明, 高温条件下位错应力而非化学驱动力, 成为影响体系能量演化的主导因素, 与前述三维演化结果中观察到的“析出高度集中于位错区域”的结论相一致.

综合图 4 中各能量分量的演化行为可以得出明确结论: 随着温度升高, 富 Cu 相析出对体系能量降低的贡献逐渐减弱, 化学能和界面能变化幅度显著下降, 而弹性能在高温条件下占据主导地位. 这一能量分配特征清晰揭示了富 Cu 相析出机制随温度升高发生的根本性转变: 在低温区间, 化学能差是驱动析出的核心动力, 界面能的演变则对应析出相的形核与稳定化过程, 二者共同主导了析出行为的发生与发展; 在中等温度区间, 化学驱动力与位错应力场发生协同耦合, 能量的释放与分配呈现出多因素调控的特征; 而在高温区间, 化学驱动力已不足以支撑体系发生广泛析出, 位错应力场成为影响能量演化的主导因素, 体系更倾向于通过弹性能积累而非析出相形成来响应应力作用, 最终导致富 Cu 相的析出行为受到显著抑制.

4 讨论

图 5 给出了位错环作用下, 不同温度条件 (623, 723, 823 和 923 K) 中富 Cu 相析出过程的统计演化规律, 包括析出相体积分数、析出相数量密度, 以及析出相平均半径. 通过对比不同温度下各统计量的变化规律, 可对温度调控富 Cu 相析出动力学的作用机制进行更为定量和系统的分析.

如图 5(a) 所示, 在所有温度条件下, 富 Cu 相体积分数均随演化时间延长而上升, 表明析出过程整体持续推进. 但不同温度下, 体积分数的增长速率与最终达到的饱和水平存在显著差异: 低温条件下的增长趋势更为显著, 而高温条件下的增长则趋于迟缓.

在 623 K 条件下, 富 Cu 相体积分数在演化初期迅速攀升, 且在后期保持持续增长态势, 最终达

到全温度区间的最高水平, 直观反映出该低温条件下富 Cu 相的析出过程最为充分. 723 K 条件下, 体积分数同样呈现出明显的增长趋势, 但其增长速率与最终饱和体积分数均显著低于 623 K 水平. 随着温度进一步升高至 823 K, 体积分数的增长趋势显著放缓, 仅在经历较长演化时间后才出现有限幅度的提升; 而在 923 K 条件下, 富 Cu 相体积分数几乎维持在极低水平, 随演化时间的变化微乎其微, 表明高温环境下富 Cu 相的整体析出行为受到强烈抑制. 这一定量统计结果清晰表明, 温度升高对富 Cu 相的析出过程并非起到促进作用, 反而会显著降低析出相的总体积分数, 与三维形貌结果中观察到的析出稀疏化趋势完全一致.

图 5(b) 展示了不同温度下富 Cu 相数量密度的演化规律. 可以看到, 在 623 K 条件下, 数量密度在演化初期迅速达到峰值, 随后逐渐下降. 这一特征表明低温条件下发生了大量富 Cu 相形核事件, 而后期数量密度的降低主要与析出相合并及粗化过程有关, 即小颗粒溶解、大颗粒长大的 Ostwald 熟化机制. 723 K 条件下, 数量密度同样表现出先快速增加后缓慢下降的趋势, 但其峰值显著低于 623 K, 且峰值出现时间相对滞后, 说明温度升高在一定程度上抑制了形核速率和形核数量. 对于 823 K 条件, 数量密度整体处于较低水平, 仅在后期出现轻微上升, 表明形核行为显著受限. 而在 923 K 条件下, 数量密度几乎始终维持在极低水平, 说明在高温条件下, 稳定富 Cu 相形核事件极为有限. 上述定量统计结果表明, 温度升高主要通过抑制富 Cu 相的形核行为来削弱整体析出过程, 而非单纯影响后期长大或粗化阶段.

如图 5(c) 所示, 不同温度条件下富 Cu 相平均半径随演化时间总体呈上升趋势, 但增长特征在不

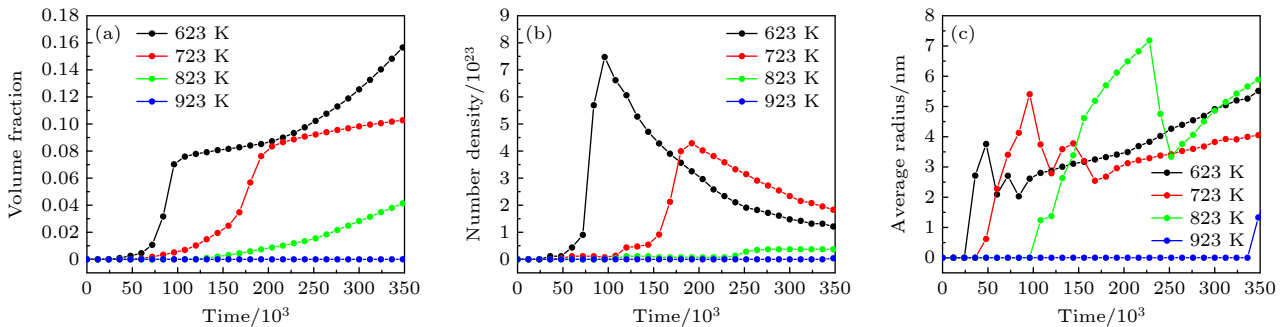


图 5 统计曲线 (a) 体积分数; (b) 数量密度; (c) 平均半径

Fig. 5. Statistical curves: (a) Volume fraction; (b) quantity density; (c) average radius.

同温度区间存在明显差异. 在 623 K 条件下, 平均半径于演化初期经历快速增长, 随后进入相对平缓阶段, 这一特征表明低温条件下富 Cu 相不仅形核数量充足, 且能够通过溶质原子的持续扩散实现稳定长大, 最终形成尺寸较为均一的析出颗粒. 723 K 条件下, 平均半径同样呈现明显的增长趋势, 但其最终达到的尺寸显著小于 623 K 条件, 反映出温度升高对析出相的长大过程已产生一定程度的限制作用. 在 823 K 条件下, 平均半径的增长速率明显放缓, 需经过较长时间的演化, 才会出现有限提升; 而在 923 K 条件下, 平均半径几乎维持恒定, 说明高温环境下即便有少量富 Cu 相形核, 也难以通过溶质原子的迁移实现持续长大. 值得注意的是, 823 K 与 923 K 条件下平均半径的缓慢增长, 与前述体积分数、数量密度的低水平特征形成对应, 这一量化关联进一步表明, 高温条件下富 Cu 相的形核与长大过程均受到显著抑制, 析出动力学的两个核心阶段均因热力学驱动力不足而受阻.

综合体积分数、数量密度及平均半径 3 项核心统计参数的演化规律可以明确看出, 随着温度升高, 富 Cu 相的析出过程在形核、长大及总体析出程度等多个关键环节均受到系统性抑制. 低温条件下, 析出过程以“大量形核+充分长大”为典型特征, 最终形成高体积分数、尺寸均匀的富 Cu 相颗粒; 中等温度区间内, 形核速率与长大动力同步减弱, 析出相的数量与尺寸均出现明显下降; 而在高温条件下, 富 Cu 相的形核与长大过程几乎陷入停滞, 仅能在位错应力场的局部驱动下发生微量析出. 这一量化统计规律与三维形貌演化特征 (图 3)、体系能量演化机制 (图 4) 形成了高度的逻辑自洽, 三者相互印证揭示了高温抑制析出的本质: 高温条件下, 化学驱动力的衰减幅度远超溶质扩散速率的提升幅度, 难以克服热激活导致的成分均匀化效应, 局域过饱和度无法维持稳定水平, 从而显著抑制富 Cu 相的形核与长大. 在此过程中, 位错应力场的作用发生根本性转变, 即从低温下的“辅助调控”转变为高温下的“必要条件”, 成为决定析出行为能否发生的核心因素, 最终使高温下的析出行为表现出极强的位错依赖性.

由富 Cu 相引起的沉淀硬化可以表示为

$$\sigma_{SC} = \alpha M G b / L, \quad (10)$$

其中, M 为 Taylor 系数 (3.06), G 为基体的剪切

模量 (83 GPa), b 为位错的 Burgers 矢量大小, $L = 1.77r/f_V^{1/2}$, 是 (001) 滑移面上富铜相的平均间距, r 是半径, f_V 是体积分数. 阻碍强度 α 可以与位错滑过富 Cu 相时的断裂角度 φ 相关, 如下所示:

$$\alpha = 0.8 \cos \varphi / 2. \quad (11)$$

断裂角度的计算如下:

$$\varphi = 2 \sin^{-1} \left(\frac{E_1^\infty \log \frac{r}{r_0}}{E_2^\infty \log \frac{R}{r_0}} + \frac{\log \frac{R}{r}}{\log \frac{R}{r_0}} \right), \quad (12)$$

其中, E_1^∞ 和 E_2^∞ 分别表示位错在富 Cu 相和基体中的单位长度能量, E_1^∞ 和 E_2^∞ 等于 $G_1/G = 0.6$; G 是析出相的剪切模量, r_0 是内部切割半径 ($2.5b$), R 是外部切割半径 ($2500b$).

所以结合上式析出强化项 σ_{SC} 为

$$\sigma_{SC} = 0.8 M G b \frac{\sqrt{f_V}}{1.77r} \sqrt{1 - \left(\frac{E_1^\infty \log \frac{r}{r_0}}{E_2^\infty \log \frac{R}{r_0}} + \frac{\log \frac{R}{r}}{\log \frac{R}{r_0}} \right)^2}. \quad (13)$$

如图 6 所示, 不同温度条件下合金屈服强度 (硬度) 随演化时间的变化呈现出显著的温度依赖性差异. 在 623 K 条件下, 屈服强度于演化初期迅速攀升并达到全温度区的最高水平, 这一特征与低温下富 Cu 相“大量形核 + 充分弥散分布”的析出规律直接对应, 即高数量密度、细小尺寸的富 Cu 相颗粒可通过阻碍位错运动产生显著的析出强化效应. 当温度提升至 723 K 时, 屈服强度的提升不仅出现明显滞后, 其峰值也显著降低, 反映出析出强化机制的建立过程已受到抑制. 随着温度升高

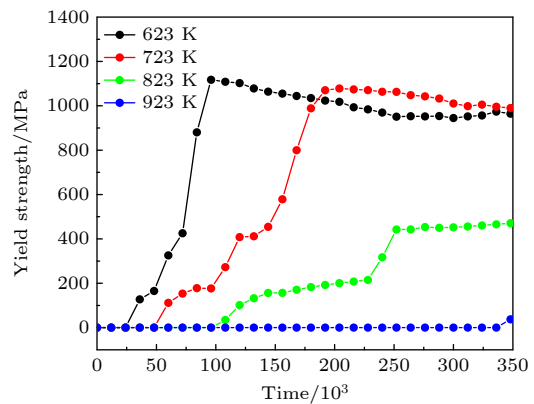


图 6 不同温度下屈服强度与模拟时间的关系曲线

Fig. 6. The relationship curve between yield strength and simulation time at different temperatures.

至 823 K, 屈服强度仅表现出缓慢增长, 析出强化效应大幅减弱; 而在 923 K 条件下, 屈服强度几乎维持恒定, 表明此高温环境下富 Cu 相的析出行为已近乎停滞, 其对应的析出强化机制基本失效. 这主要是因为高温下形成的析出相尺寸相对较大、数量少且分布高度局域化, 未形成弥散分布的三维强化网络, 使其难以对宏观塑性变形形成有效钉扎作用. 因此, 尽管局部区域存在少量析出, 但其对整体屈服强度的贡献接近于零. 这一强度演化规律与前述不同温度下富 Cu 相的体积分数、数量密度及尺寸变化趋势高度吻合, 从力学性能的角度进一步证实: 温度升高通过系统性抑制富 Cu 相的形核与长大过程, 最终显著削弱了合金的析出强化效果.

5 结 论

本文基于三维相场模型, 系统研究了位错环存在条件下, 温度对 Fe-Cu 基合金中富 Cu 相析出行为及析出强化效应的影响, 揭示了温度-位错耦合作用下富 Cu 相析出机制的转变规律.

1) 温度是调控位错环对富 Cu 相析出行为影响程度的核心参数, 且驱动析出主导机制随温度区间发生显著转变. 在低温区间 (523—623 K), 富 Cu 相析出以化学驱动为主导, 对位错诱导析出的依赖性较弱, 呈现相对均匀的局域析出特征; 在中等温度 (723 K) 下, 位错应力场与热激活扩散发生协同耦合, 促使富 Cu 相沿位错环及其应力影响区形成明显的空间非均匀析出; 在高温区间 (823—923 K), 富 Cu 相析出整体受到强烈抑制, 只有在位错应力场所提供额外驱动力的局部区域, 才会发生有限程度的析出, 析出行为呈现极强的位错依赖性.

2) 体系能量分析明确了富 Cu 相析出驱动力随温度升高的根本性转变规律. 低温条件下, 析出过程主要依靠化学能的显著降低与界面能的合理调控驱动; 随着温度升高, 化学能与界面能对析出过程的贡献大幅衰减, 弹性能逐渐占据能量演化的主导地位, 这一能量分配变化显著削弱了局域成分起伏的稳定性, 进而抑制了富 Cu 相的形核与长大进程.

3) 合金析出强化效应随温度升高呈显著弱化趋势, 高温条件下析出强化机制近乎失效. 低温环境中, 大量细小弥散的富 Cu 相通过阻碍位错运动产生显著的析出强化作用, 使合金屈服强度达到峰

值; 而在高温条件下, 受富 Cu 相析出抑制效应影响, 其体积分数与数量密度显著降低, 析出相难以形成有效强化作用, 导致合金屈服强度随演化时间几乎无提升, 力学性能的演化规律与析出相的统计特征 (体积分数、数量密度、平均尺寸) 高度符合.

附录 A

1) 纯组元吉布斯自由能^[35]

$$G_{\text{Fe}}^{\text{a}} = 0,$$

$$G_{\text{Cu}}^{\text{a}} = 4017 - 1.255T,$$

$$G_{\text{Mn}}^{\text{a}} = -3235.3 + 127.85T - 23.7T \ln T - 0.0074271T^2 + 60000/T,$$

$$G_{\text{Ni}}^{\text{a}} = 8715.084 - 3.556T,$$

$$G_{\text{Al}}^{\text{a}} = -1193.24 + 218.235446T - 38.5844296T \ln T$$

$$+ 18.5319823E - 3T^2 - 5.764227E - 6T^3 + 74092T^{-1}.$$

2) 相互作用参数

$$L_{\text{Fe,Cu}} = 41033 - 6.022T,$$

$$L_{\text{Fe,Mn}} = -2759 + 1.237T,$$

$$L_{\text{Fe,Ni}} = -956.63 - 1.28726T + (1789.03 - 1.92912T)(c_1 - c_4),$$

$$L_{\text{Fe,Al}} = -122960 + 31.989T - (2945.2)(c_1 - c_5),$$

$$L_{\text{Cu,Mn}} = 11190 - 6T - 9865(c_2 - c_3),$$

$$L_{\text{Cu,Ni}} = 8366 + 2.8T,$$

$$L_{\text{Cu,Al}} = -104600 + 27.5T - (9800 + 20T)(c_2 - c_5),$$

$$L_{\text{Cu,Al}} = -51638.31 + 3.64T + 6276(c_3 - c_4),$$

$$L_{\text{Mn,Al}} = -120077 + 52.851T - (-40652 + 29.276T)(c_3 - c_5),$$

$$L_{\text{Ni,Al}} = -264500 - 119T + 23T \ln T$$

$$- (-107000 + 559T - 67T \ln T)(c_4 - c_5)$$

$$+ (414000 - 800T + 95T \ln T)(c_4 - c_5)^2$$

$$- (-118000 + 970T - 99T \ln T)(c_4 - c_5)^3,$$

$$L_{\text{Fe,Cu,Mn}} = 30000,$$

$$L_{\text{Fe,Cu,Al}} = -15000c_1 + 35000c_2 - 160000c_5,$$

$$L_{\text{Fe,Cu,Ni}} = L_{\text{Cu,Mn,Ni}} = L_{\text{Fe,Mn,Ni}} = 0,$$

$$L_{\text{Fe,Mn,Al}} = 4184,$$

$$L_{\text{Fe,Ni,Al}} = (-27000 + 1.1T)c_1 + (-204500 + 107T)c_4$$

$$+ (-110700 + 34T)c_5,$$

$$L_{\text{Cu,Mn,Al}} = 36000,$$

$$L_{\text{Cu,Ni,Al}} = (-28000 + 40T)c_4 + (-133000 + 40T)c_2$$

$$+ (-200000 - 100T)c_5,$$

$$L_{\text{Mn,Ni,Al}} = (45897.48 - 81.07T)c_3 + (110124.13 - 163.65T)c_4$$

$$+ (187015.11 - 106.26T)c_5.$$

参考文献

- [1] Yang W K, Guo Q W, Wang K L, Lei P Y, Hou H, Zhao Y H 2024 *Sci. Rep.* **14** 12767
- [2] He S M, Van Dijk N H, Paladugu M, Schut H, Kohlbrecher J, Tichelaar F D, van der Z S 2010 *Phys. Rev. B* **82** 174111
- [3] Li C, Wang X M, Shang C J, Zheng C A, Liu X Y, He X L 2008 *J. Eng. Sci.* **30** 1353 (in Chinese) [李闯, 王学敏, 尚成嘉, 郑长安, 刘学一, 贺信莱 2008 *工程科学学报* **30** 1353]
- [4] Yang J, Enomoto M 2005 *ISIJ Int.* **45** 1335
- [5] Yang W K, Wang K L, Pei J Q, Shi X C, Hou H, Zhao Y H 2023 *Comput. Mater. Sci.* **228** 112338
- [6] Jian Y, Wang Y, Hou H Y, Wang J T, Liu X B, Xue F 2019 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. B* **458** 39
- [7] Zhao Y H 2023 *npj Comput. Mater.* **9** 94
- [8] Bai X M, Ke H B, Zhang Y F, Spencer B W 2017 *J. Nucl. Mater.* **495** 442
- [9] Barashev A V, Golubov S I, Bacon D J, Flewitt P E J, Lewis T A 2004 *Acta Mater.* **52** 877
- [10] Odette G R, Almirall N, Wells P B, Yamamoto T 2021 *Acta Mater.* **212** 116922
- [11] Zhu J M, Zhang T L, Yang Y, Liu C T 2019 *Acta Materialia.* **166** 560
- [12] Chen L Q, Zhao Y H 2024 *Modern Materials Thermo dynamics: Equilibrium and Stability* (Beijing: Science Press) pp1-383 [陈龙庆, 赵宇宏 2024 *现代材料热力学——平衡与稳定性* (北京: 科学出版社) 第1—383页]
- [13] Chen L Q, Zhao Y H 2022 *Prog. Mater. Sci.* **124** 100868
- [14] Zhao Y H, Xin T Z, Tang S, Wang H F, Fang X D, Hou H 2024 *MRS Bull.* **49** 613
- [15] Xin T Z, Zhao Y H, Mahjoub R, Jiang J X, Yadav A, Nomoto K, Niu R M, Tang S, Ji F, Quadir Z, Miskovic D, Daniels J, Xu W Q, Liao X Z, Chen L Q, Hagihara K, Li X Y, Ringer S, Ferry M 2021 *Sci. Adv.* **7** eabf3039
- [16] Stechauner G, Kozeschnik E 2015 *Acta Mater.* **100** 135
- [17] Li H Q, Zhao Y H, Song Z, Tian X L, Dong R F, Zhang Y T, Hou H 2025 *Acta Mater.* **301** 121573
- [18] Pei X L, Pei J Q, Hou H, Zhao Y H 2025 *npj Comput. Mater.* **11** 27
- [19] Wang K H, Xu Y Y 2023 *J. Mater. Heat Treat.* **48** 265 (in Chinese) [王康红, 许洋洋 2023 *金属热处理* **48** 265]
- [20] Xia S J, Yang T H, Gao M L, Hu X, Li Q L 2024 *Materials.* **17** 1287
- [21] Ren H P, Wang H Y, Liu Z C 2008 *J. Phys. Conf. Ser.* **96** 012206
- [22] Konstantinović M J, Minov B, Kutnjak Z, Jagodić M 2010 *Phys. Rev. B.* **81** 140203
- [23] Ou P, Xing H, Wang X L, Sun J, Cui Z Q, Yang C S 2015 *Metall. Mater. Trans. A.* **46** 3909
- [24] Xi T, Shahzad M B, Xu D K, Zhao J L, Zhang Y, Yang C G, Qi M, Yang K 2016 *Mater. Sci. Eng. A.* **675** 243
- [25] Zhao B J, Zhao Y H, Sun Y Y, Yang W K, Hou H 2019 *Acta Metall. Sin.* **55** 593 (in Chinese) [赵宝军, 赵宇宏, 孙远洋, 杨文奎, 侯华 2019 *金属学报* **55** 593]
- [26] Zhao B J 2020 *M. S. Thesis* (Taiyuan: University North China) (in Chinese) [赵宝军 2020 硕士学位论文 (太原: 中北大学)]
- [27] Zou Y, Xu Y B, Han D T, Hu Z P, Misra R D K, Cao L F, Song H 2019 *J. Mater. Sci.* **54** 3438
- [28] You L J, Hu L J, Xie X P, Wang J, Zhao S J 2016 *Comput. Mater. Sci.* **118** 236
- [29] Xin T Z, Tang S, Ji F, Cui L Q, He B B, Lin X, Tian X L, Hou H, Zhao Y H, Ferry M 2022 *Acta Mater.* **239** 118248
- [30] Zhao Y H 2025 *Simulation of Solidification and Aging Microstructure by Phase Field Method: Phase Field Simulation of Alloys from Mater. to Castings and Des. of EPhase Software* (Beijing: Science Press) pp1-356 (in Chinese) [赵宇宏 2025 *凝固时效组织相场法研究: 合金从材料到铸件相场模拟及 EPhase 软件设计* (北京: 科学出版社) pp1-356]
- [31] Zhao Y H 2024 *MGE Adv.* **2** e44
- [32] Zhao Y H, Xing H, Zhang L J, Huang H B, Sun D K, Dong X L, Shen Y X, Wang J C 2023 *Acta Metall. Sin.* **36** 1749
- [33] Varma A, Pant P, Gururajan M P 2023 *Acta Mater.* **244** 118529
- [34] Yang W, Jiang X, Tian X, et al. 2023 *J. Mater. Res. Technol.* **22** 1307
- [35] Dinsdale A T 1991 *Calphad* **15** 317

Synergistic regulation of Cu rich phase precipitation by dislocation loops and aging temperature using phase field method*

SUN Wenjing¹⁾ YANG Wenkui¹⁾ HOU Hua¹⁾³⁾ ZHAO Yuhong^{1)2)†}

1) (*MOE Jointly Collaborative Innovation Center for High-performance Al/Mg Based Materials, Shanxi Key Laboratory of Intelligent Casting and Advanced Forming for New Materials, School of Materials Science and Engineering,*

North University of China, Taiyuan 030051, China)

2) (*Beijing Advanced Innovation Center for Materials Genome Engineering,*

University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

3) (*School of Materials Science and Engineering, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030025, China*)

(Received 23 January 2026; revised manuscript received 15 February 2026)

Abstract

The precipitation behavior of Cu-rich phases in reactor pressure vessel (RPV) steels under irradiation is a critical factor influencing mechanical property degradation. Understanding the coupled effects of temperature and dislocation defects on phase evolution is essential for predicting long-term material performance. This work employs a three-dimensional aging phase-field model (EPhase) to systematically investigate the nucleation, growth, and spatial distribution of Cu-rich phases in an Fe-15%Cu-3%Mn-1.5%Ni-1.5%Al alloy within the temperature range of 523–923 K, with particular attention to the role of dislocation loops. The results reveal that temperature plays a decisive role in modulating the interaction between dislocations and precipitation, leading to a clear transition in the dominant precipitation mechanism with increasing temperature. At low temperatures (523–623 K), precipitation is primarily driven by chemical free energy reduction, with limited sensitivity to the dislocation field. At an intermediate temperature of 723 K, the elastic stress field around dislocations synergizes with thermally activated diffusion, resulting in pronounced spatially heterogeneous precipitation along the dislocation loop. At high temperatures (823–923 K), the thermodynamic driving force for precipitation is substantially weakened; Cu-rich phases form only in localized regions where dislocation stress fields provide additional nucleation energy, while precipitation in the dislocation-free matrix is almost entirely suppressed. Energy decomposition analysis further shows that as temperature increases, the contributions of chemical and interfacial energies to the total free energy reduction diminish, whereas elastic energy becomes increasingly dominant, ultimately inhibiting both nucleation and growth of Cu-rich phases. Correspondingly, the precipitation strengthening effect degrades significantly with increasing temperature. At low temperatures, a high number density of finely dispersed Cu-rich precipitates leads to a substantial increase in yield strength. At elevated temperatures, however, precipitates are coarser, fewer in number, and spatially localized, offering little resistance to dislocation motion and resulting in negligible strengthening. These findings elucidate the coupled role of temperature and dislocation loops in governing the precipitation behavior of Cu-rich phases and provide a theoretical basis for predicting microstructural evolution and mechanical performance in RPV steels under long-term service conditions.

Keywords: phase-field simulation, Cu-rich phase, aging temperature, dislocation loop

DOI: [10.7498/aps.75.20260121](https://doi.org/10.7498/aps.75.20260121)

CSTR: [32037.14.aps.75.20260121](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20260121)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. U23A20628, U25A20286) and the Major Project of Science and Technology in Shanxi Province, China (Grant Nos. 202301050201004, 20250105020101).

† Corresponding author. E-mail: zhaoyuhong@nuc.edu.cn

相场法研究位错环与时效温度协同调控富Cu相析出

孙文静 杨文奎 侯华 赵宇宏

Synergistic regulation of Cu rich phase precipitation by dislocation loops and aging temperature using phase field method

SUN Wenjing YANG Wenkui HOU Hua ZHAO Yuhong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 080811 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20260121

CSTR: 32037.14.aps.75.20260121

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20260121>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

相场法研究 $\text{Al}_x\text{CuMnNiFe}$ 高熵合金富Cu相析出机理

Phase-field-method-studied mechanism of Cu-rich phase precipitation in $\text{Al}_x\text{CuMnNiFe}$ high-entropy alloy

物理学报. 2023, 72(7): 076102 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222439>

相场法研究 $\text{Fe}_{84}\text{Cu}_{15}\text{Mn}_1$ 合金富Cu相析出的内磁能作用机理

Mechanism of internal magnetic energy of Cu-rich phase precipitation in $\text{Fe}_{84}\text{Cu}_{15}\text{Mn}_1$ alloy by phase field method

物理学报. 2022, 71(8): 080201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212087>

纯V和TiVTa合金中刃位错运动及其与位错环之间相互作用的模拟研究

Simulation study on edge dislocation motion and its interaction with dislocation loop in pure V and TiVTa alloy

物理学报. 2025, 74(7): 078101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241757>

间隙型位错环在纯钨及含氦杂质钨(010)表面下运动行为的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of dynamic migration of interstitial dislocation loops under (010) surfaces of pure W and W containing helium impurity

物理学报. 2023, 72(24): 245204 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230651>

三模晶体相场法研究应变诱导石墨烯晶界位错演化

Strain induced dislocation evolution at graphene grain boundary by three-mode phase-field crystal method

物理学报. 2024, 73(24): 248101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241368>

应变诱发四方相小角度对称倾侧晶界位错反应的晶体相场模拟

Phase field crystal simulation of strain-induced square phase low-angle symmetric tilt grain boundary dislocation reaction

物理学报. 2022, 71(9): 096102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212278>