DOI:10.26974/j.cnki.XBGC.2026.02.001

原子尺度下FeCrAl合金辐照损伤效应

崔 健[1], 姚 欢[2,3*], 吴常威[3], 武俊梅[3], 王朋飞[4], 陈 平[4]
(1.汇能控股集团有限公司,内蒙古 鄂尔多斯 017000;2.鄂尔多斯应用技术学院,内蒙古 鄂尔多斯 017000;
3.西安交通大学 航天航空学院,陕西 西安 710049;4.中国核动力研究设计院,四川 成都 610041)

摘 要: FeCrAl合金作为重要的核反应堆燃料包壳候选材料,需深入掌握其在辐照条件下的损伤特征。利用分子动力学方法模拟了不同损伤剂量下该合金的级联碰撞过程,分析晶界与非晶结构演化特征,比较辐照前后的点缺陷、位错缺陷空间分布,揭示辐照损伤缺陷的产生及演化机制。结果表明:辐照过程产生大量点缺陷及缺陷团簇,且辐照损伤剂量越高,点缺陷团簇数量越多,缺陷成团率也越高;辐照引入的点缺陷聚集于晶界的两侧,使晶界与非晶结构原子增多,低剂量条件下晶界厚度加宽但未发生明显非晶化,而高剂量条件下晶体内以晶界为核心出现非晶相,且损伤剂量越高,非晶化程度越高;辐照还会导致晶体位错空间分布和总体密度变化,低剂量辐照后位错密度略高于辐照前,但高剂量下位错密度明显降低。

关键词: FeCrAl合金;辐照损伤;微观机制;分子动力学
中图分类号:TL341 **文献标志码:**A

FeCrAl作为一种高温耐腐蚀合金,是新型核反应堆燃料包壳的重要候选材料[1-3]。国外对该合金的研发已发展至第二代。与传统的锆合金相比,第一代及第二代FeCrAl合金在高温强度与耐腐蚀性方面均表现出更优异的性能,其抗辐照性能还可通过成分与组织调控进一步优化。中国核动力研究设计院已完成FeCrAl管材拉伸、微观组织、均匀腐蚀及爆破等关键性能的测试,结果显示,其性能较锆合金显著提升,并于2019年4月完成了FeCrAl包壳第二次入堆辐照试验[4-6]。

燃料包壳在长期服役过程中处于高温和强辐照环境,掌握包壳材料在高温下的辐照损伤性能是堆芯设计和性能分析的前提。在中子辐照条件下,FeCrAl合金微观结构的变化主要包括位错环、位错线、缺陷团簇和富Cr析出相等。对于FeCr合金体系,有研究发现[7-10]:当Cr质量分数由10%增至12%时,辐照产生的位错环尺寸急剧减小、位错环数量迅速增加;当Cr质量分数高于12%时,继续增加Cr质量分数对位错环尺寸和数量的影响不明显。由于FeCrAl合金中Cr质量分数较高,其在高温高剂量辐照条件下表现出优异的抗辐照肿胀能力[11]。然而,高Cr质量分数会显著增加富Cr析出相的密度,并加剧辐照造成的硬化和脆化效应[1]。Field等[12]对Cr质量分数为10%~18%、Al质量分数为2.9%~4.9%的4种FeCrAl合金进行了中子辐照试验,研究了辐照对合金微观组织和力学性能的影响。结果表明,Cr质量分数越低,辐照后合金的屈服强度下降越显著,但低Cr质量分数的FeCrAl合金仍具有优于Zr合金的抗辐照性能。此外,辐照前晶粒中预先存在的位错环被消除,辐照后出现新的位错环且位错线密度增加。Zhang等[13]也发现,辐照后合金样品中位错线、位错环和缺陷团簇增多,且晶界附近的位错密度明显高于晶内。Yamamoto等[1]发现,Cr和Al质量分数的变化对析出相产生一定影响。在高温未辐照条件下,当Cr质量分数低于13%时,因析出相导致的硬化效果减弱,FeCrAl合金的硬度因高温下的位错回复而下降;而高Cr质量分数的FeCrAl合金会在位错周围

收稿日期:2024-12-17
基金项目:内蒙古自治区自然科学基金项目(2025QN05085)
作者简介:崔健(1994—),男,工程师,主要从事能源系统安全生产与管理(cuijian001@foxmail.com)。
* **通信作者:**姚欢(1994—),女,讲师,博士,主要从事新型核燃料包壳辐照性能及机理研究(yaohuan@oit.edu.cn)。
引用格式:崔健,姚欢,吴常威,等.原子尺度下FeCrAl合金辐照损伤效应[J].西北工程技术学报(中英文),2026,25(2):97-109.

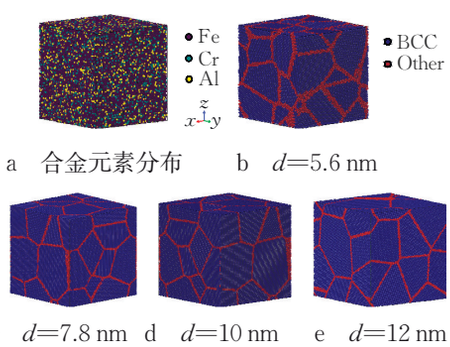
分布 5～30 nm 的析出相而硬化。在高温、中子辐照下,当 Cr 质量分数高于 10% 时,因析出相导致的硬化效果非常显著,且 Cr 质量分数的增加会急剧提高析出相密度,从而更容易导致硬化。Briggs 等[14]指出,Cr 质量分数低于 15% 的 FeCrAl 合金中析出相密度很低,辐照硬化和辐照脆化现象不明显。此外,析出相的形成受 Al 质量分数影响,Al 质量分数高能抑制其析出,且析出相中 Al 的质量分数明显低于基体。Kobayashi 等[15]也指出,Al 抑制了析出相的形成,从而抑制了辐照脆化效应。综上所述,材料的辐照脆化和辐照肿胀效应均由辐照引起材料内部缺陷所致,这些缺陷同样会影响长期服役中材料的力学性能。

中子辐照试验经济代价高、周期长且放射性强,使得核燃料包壳辐照性能研究面临诸多挑战。相较于费时费力且成本较高的辐照试验,分子动力学(molecular dynamic,MD)方法可快速获得 FeCrAl 合金在辐照条件下的微观组织演化特征和力学性能,掌握辐照损伤效应及其对力学性能的影响,进而揭示 FeCrAl 合金辐照损伤的微观机制。MD 模拟已被广泛用于研究材料的辐照级联碰撞行为。早期研究集中于 α-Fe 单晶[16]、α-Fe 纳米线结构[17]中缺陷的演化规律及其在晶界的聚集行为[18],发现缺陷易在晶界处聚集并可能诱发晶界滑移变形。随后,Igor 等[19]和 Wong 等[20]模拟了 FeCr 合金体系的辐照损伤行为,结果表明,FeCr 合金因 Cr 的加入而展现出优于纯 α-Fe 的抗辐照性能,其机理被揭示为 Cr 会阻碍间隙型位错环的运动[21-22]。在 FeCrAl 合金体系中[23],Cr 和 Al 共同影响了辐照引入点缺陷的演化过程,使得退火阶段残存的点缺陷数量增加,同时有效抑制了点缺陷团簇的形成。

目前,针对高温-辐照条件下 FeCrAl 合金的级联碰撞及其诱发缺陷演化行为的模拟研究仍然相对匮乏。基于此,本文利用 MD 方法开展了辐照作用下该合金的损伤行为研究,通过分析辐照缺陷的产生、聚集和迁移,以及其与位错、晶界等结构的相互作用,揭示该合金在辐照条件下的微观结构演化机理。

1 MD 建模与方法

本文采用 Atomsk 晶体建模软件[24],基于泰森多边形法构建了晶粒尺寸为 5.6～12 nm 的 FeCrAl 合金晶体模型。模型为晶粒取向随机分布的正方体盒子(图 1),其中蓝色与红色原子分别代表体心立方(body-centered cubic,BCC)结构与非晶结构(Other)原子,以清晰区分晶界与晶内区域。由于 Cr、Al 原子空位形成能较低[25-26],依据 Yamamoto 等[1]确定的最佳成分配比,通过在 α-Fe 基体中随机掺入质量分数为 13% 的 Cr 和 5% 的 Al,建立了 Fe13Cr5Al 合金晶体模型(图 1)。表 1 列出了不同晶粒尺寸 FeCrAl 合金 MD 模型的参数。MD 模拟的计算效率受时间步长制约,计算成本与模拟步数成正比。辐照级联碰撞模拟的时间步长非常短,且模拟体系越大所需时间越长。当纳米晶体的晶粒尺寸达到 10 nm 时,模拟体系的原子数量高达上百万。为了节省计算成本,本文辐照损伤模拟的晶粒尺寸取 5.6～12 nm。



a 合金元素分布 b d=5.6 nm

c d=7.8 nm d d=10 nm e d=12 nm

图 1 不同晶粒尺寸 FeCrAl 合金 MD 模型

Fig. 1 MD models of FeCrAl alloys with different grain sizes

表 1 不同晶粒尺寸 FeCrAl 合金 MD 模型参数

Tab. 1 Model parameters of FeCrAl alloys with different grain sizes

晶粒尺寸(d)/nm	晶粒数目/个	原子数目/10^5个	晶界原子占比/%	模拟盒子尺寸/nm
5.6	16	2.4	24.2	14.1
7.8	12	4.8	17.4	17.9
10.0	12	10.1	13.7	22.9
12.0	8	12.2	12.0	24.4

在真实的物理系统中,晶体受到载能中子轰击诱发级联碰撞过程,级联区域原子的动能不断转化为势能,使得该区域温度显著升高;能量以热传导方式持续向周围原子传递,表明级联区域并非孤立系统,不满足能量守恒条件。分子动力学模拟通常选取边长为 10～100 nm 的立方体作为级联模拟区域,包含原子数为 10^5～10^7;相比之下,边长为 10 cm 的 FeCrAl 合金立方块的原子数高达 10^{26}。原子数小于 10^7 的立方体(级联模拟区域)实际上无法改变一个原子数为 10^{26} 量级大立方体的温度,大立方体原

子可视为小立方体的物理恒温器,持续与一个小立方体交换能量,并将模拟系统的温度恢复至初始温度。因此,级联区域的热冷却相当快,几乎达到级联开始之前系统中的初始温度。由于空间尺度局限,MD 方法难以构建一个原子数为 10^{26} 或更多原子的物理恒温器。为了解决这一问题,本文采用周期性边界条件消除盒子边界对原子运动和相互作用的限制,使模拟结果更接近真实无限系统的物理行为。在 LAMMPS 软件的输入文件(in 文件)中,通过 boundary 命令将 x、y、z 方向均设为周期性边界条件。纳米晶 FeCrAl 合金晶体模型(图 1)的级联碰撞模拟在等温等压系综(NPT 系综)零压条件下进行,系统总原子数量保持不变,体积可变,同时与恒温器交换能量。以往研究多在微正则系综(NVE 系综)下进行级联碰撞模拟,为避免级联碰撞中心区域的温度上升对计算过程的影响,所施加的入射中子能量较低且数量很少,辐照损伤剂量非常低。相比之下,采用 NPT 系综进行辐照损伤模拟,可施加更高能量和更多数量的入射中子,从而实现高辐照损伤剂量下的级联碰撞过程模拟。

本文利用分子动力学开源软件 LAMMPS[27],基于 Liao 等[28]开发的 EAM-FS 势函数,对上述构建的 FeCrAl 合金晶体模型进行辐照损伤模拟。在辐照过程模拟之前,采用共轭梯度法进行能量最小化,以获得合理的初始构型。为了保证体系原子达到热力学平衡,首先在正则系综(NVT 系综)下进行恒温恒容弛豫,然后采用 NPT 系综在给定温度条件下进行恒温零压弛豫,弛豫时间为 500～2 000 ps,时间步长 0.001 ps。弛豫结束后,采用 NPT 系综在零压条件下进行级联碰撞过程的模拟,模拟时间为 50～200 ps。在辐照模拟过程中,采用自动调节时间步长方法,设置时间步长取值范围为 1×10^{-5}～1×10^{-4}ps,每个步长重置 1 次,确保每个时间步内体系原子的最大运动距离小于盒子的 1/3。

在辐照条件下,载能中子轰击晶体材料,通过与晶体空间点阵原子相互作用,将其自身能量传递给晶格原子,形成初级离位原子(primary knock-on atom,PKA)。由于载能中子能量较高,PKA 具有较高能量,使得周围其他晶格原子移位,形成级联碰撞和子级联碰撞。考虑到分子动力学方法难以模拟非弹性碰撞过程,且碰撞时电子激发能损较低,假设辐照级联碰撞为弹性碰撞,即入射能量全部以动能形式传递给 PKA。为了提高计算效率,对模拟体系进行空间合理划分,在每个区域中心附近随机选取一个原子作为 PKA,辐照初始时刻按设定的能量和矢量方向赋予 PKA 初始速度,以诱发级联碰撞。为了实现不同辐照损伤剂量条件下的级联碰撞模拟,低剂量下采用单次多个 PKA 同时进行的级联碰撞模拟;当辐照损伤剂量高于 0.2 dpa(dpa 表示每个原子平均离位次数,下同)时,则采用 2～4 次串联级联碰撞模拟,每次级联碰撞的模拟间隔时间为 50 ps。为了保证辐照产生的缺陷结构基本达到稳定,每次级联碰撞模拟后,首先在 NPT 系综零压下进行弛豫退火,弛豫时间为 200～1 000 ps,弛豫结束后则进行下一次的级联碰撞模拟。表 2 详细地列出了本文辐照级联碰撞过程的模拟参数。辐照级联过程达到稳定状态之后的晶体模型即为带辐照缺陷的模型。

表 2　辐照级联碰撞模拟参数

Tab. 2　Parameters of irradiation cascade simulations

晶粒尺寸(d)/nm	PKA 数量/个	入射能量(E_{PKA})/keV	NVT(NPT)弛豫时间/ps
5.6	8	2.7～12.3	500
7.8	16	4.8～24.6	1 000
10.0	27	5.9～29.0	1 500
12.0	36	5.4～26.5	2 000

2　辐照缺陷演化过程及影响因素分析

本节利用 MD 方法对图 1 所示的 FeCrAl 晶体模型的晶格原子级联碰撞过程进行模拟,通过原子位移分析获得辐照级联碰撞过程中晶体模型内累积的辐照损伤剂量(ϕ),进一步分析不同温度、晶粒尺寸和辐照损伤剂量下辐照产生的缺陷随着时间的演化规律,并探讨了级联碰撞各阶段点缺陷的数目(如热峰缺陷数 N_{peak} 和稳定存活缺陷数 N_{FP})随着温度与辐照损伤剂量的变化。

2.1　辐照损伤剂量的定量评估

材料的辐照损伤程度可以用辐照损伤剂量 ϕ 来表示,单位为 dpa(displacement per atom),定义为离位原子数 N_d 与模拟体系中粒子总数 N_{total} 之比,即原子平均离位次数。本文选取 FeCrAl 晶体模型中晶格原子最短间距 0.245 nm 作为判定空间点阵原子是否离位的位移阈值。借助 Ovito 软件[29],采用原子位移分析方法对辐照期间不同时刻的晶体模型进行分析,获得级联碰撞过程中累积损伤剂量随着时间的演化规律。图 2 为晶粒尺寸 5.6 nm 的晶体模型在不同温度下单次级联碰撞过程中离位原子

数 N_d 与辐照损伤剂量 ϕ 随着时间的演化曲线,计算条件为:初级离位原子(PKA)数量 8 个、入射方向〈135〉、入射能量 2.7~5.0 keV。由图 2 可知,级联碰撞初始阶段,N_d 随着时间的推移而迅速增加,10 ps 后增长速率逐渐减缓,最终 N_d 趋于一个恒定值,此时对应的辐照损伤剂量亦累积达到平衡值,约为 0.05 dpa。后文所涉辐照损伤剂量均指此稳定阶段的辐照损伤剂量。随着温度的升高,达到相同辐照损伤剂量(0.05 dpa)所需的时间不断延长,且所需 PKA 入射能量 E_{PKA} 越低。这是由于温度升高加快了原子的热运动,材料内部原子更易发生离位迁移,使得级联碰撞后产生的缺陷数量增多且距离更远,缺陷复合能力减弱,故较小 E_{PKA} 即可产生相同的辐照损伤剂量。

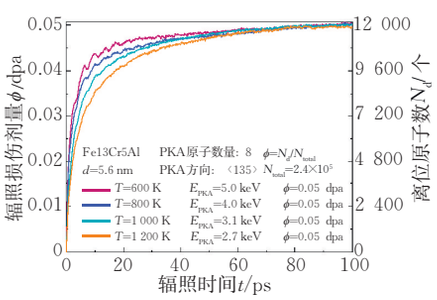


图 2 不同温度下单次级联碰撞过程辐照损伤剂量及离位原子数随着时间的演化曲线

Fig. 2 Evolution curves of irradiation damage dose and displaced atom number over time during a single cascade collision process at different temperatures

单次级联碰撞模拟结果表明,即使在晶体中选取多个 PKA 并施加适当大的入射能量,辐照后晶体模型的损伤剂量仍处于较低的水平,累积剂量不高于 0.20 dpa。为了研究该合金在更高剂量下的辐射损伤特性,对晶体模型进行了串联级联碰撞模拟,每次模拟时间为 50 ps,并设置相同的 PKA 数量与入射能量。为了保证辐照产生的缺陷结构达到稳定,每次级联碰撞后先在恒温零压条件下弛豫退火,使晶体模型达到热力学平衡状态,再进行下一次的级联碰撞。针对图 2 相同的模型,多次级联碰撞的模拟结果如图 3 所示。由图 3 可知,每次级联的初始阶段 0~3 ps,N_d 呈现大幅度波动,但波动幅度随着时间的推移逐渐减小,曲线趋于平缓。在 30 ps 之后,N_d 基本保持不变,即辐照损伤剂量达到稳定状态;实施 3~4 次级联碰撞后,辐照损伤剂量可达 0.4 dpa。在辐照损伤剂量大致相同的情况下,随着温度的升高,多次级联碰撞过程所需的级联碰撞次数减少,且 PKA 入射能量不断降低。

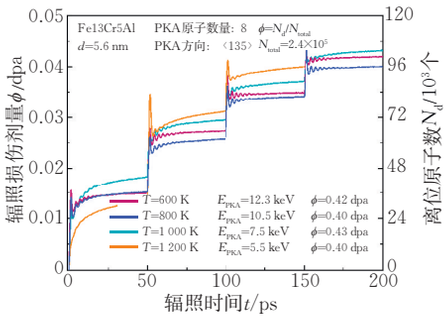


图 3 不同温度下多次级联碰撞过程辐照损伤剂量及离位原子数随着时间的演化曲线

Fig. 3 Evolution curves of irradiation damage dose and displaced atom number over time during multiple cascade collision processes at different temperatures

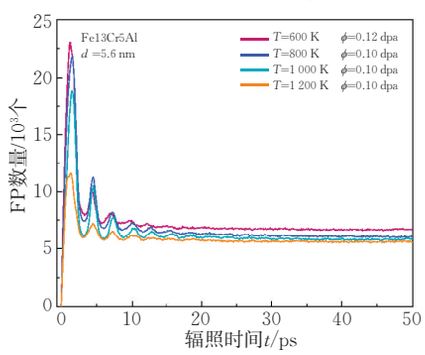
2.2 温度影响分析

级联碰撞的缺陷演化过程主要经历 4 个阶段[30]。第一阶段为碰撞阶段,从 PKA 发生离位启动碰撞开始,至空间点阵中没有任何原子能再建立新的碰撞离位时结束。第二阶段为热峰阶段,离位原子能量传递给周围原子,形成高能无序的碰撞核心,此时缺陷数量达最大值,称为热峰缺陷数 N_{peak}。热峰区温度极高,原子处于近似熔化状态。第三阶段为淬火阶段,离位原子能量逐渐降低并与邻近空位复合,该阶段缺陷数量远小于第一阶段的离位原子数。第四阶段是退火阶段,随着空间点阵原子的扩散和迁移,缺陷进一步重组和相互作用,缺陷数量、结构及分布逐渐趋于稳定,此阶段稳定存活缺陷数用 N_{FP} 表示。退火阶段持续至级联碰撞产生的可迁移缺陷全部逸出时为止,时间尺度从纳秒延伸至月,取决于辐照条件和温度。受计算时间和成本限制,MD 模拟辐照损伤时可观察到级联碰撞前 3 个阶段及退火初始阶段的 10~100 ps。在级联碰撞过程中,晶体点阵上的原子偏离平衡位置,即形成由一个空位和一个间隙原子组成的弗伦克尔缺陷(Frenkel pair,FP)。本小节采用 Wigner-Seitz 缺陷分析方法对辐照过程晶体内部缺陷演化进行分析,获得了辐照期间不同时刻点缺陷的数量、形态和分布,并绘制了 FP 数量或缺陷密度随着时间的演化曲线。

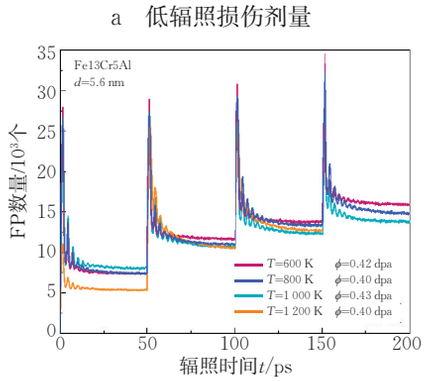
图 4 比较了晶粒尺寸为 5.6 nm 的晶体模型在 600、800、1 000、1 200 K 温度下,低剂量单次级联碰撞及高剂量多次级联碰撞产生的 FP 数量随着时间的演化规律。由图 4 可知,不同温度下每次级联碰撞的缺陷演化过程是十分相似的。碰撞初始阶段,FP 数量迅速上升,t=1 ps 时达到峰值;随后因间隙原子与空位复合,FP 数量迅速减少,20 ps 后基本保

持稳定。值得一提的是,与单晶体材料不同,纳米晶体材料在淬火初始阶段内部 FP 数量呈波动性变化,但波动幅度随着时间的推移而逐渐减小。这是由于级联区出现温度波动,离位原子动能与势能不断转化:当动能最大时缺陷数量最小,反之则缺陷数量达到局部最大值。随着碰撞过程的进行,级联区内的温度以热传导方式向周围原子传递,离位原子能量逐渐减小,缺陷波动明显减弱,材料内部逐步形成稳定的点缺陷。此外,在相同辐照损伤剂量下,温度越高,热峰时刻出现越早,FP 峰值越低,淬火阶段持续时间越短,缺陷波动性越小,退火阶段达到稳定所需时间越短,FP 存活数量越少。由图 2 可知,为保持相同剂量,不同温度下设置了不同大小的 PKA 能量,温度越高 PKA 能量越低。因此,高温下 PKA 能量较低,PKA 平均位移减小,级联碰撞覆盖区域会减小,辐照过程产生的缺陷数量减小。此外,温度升高有利于原子扩散迁移,离位原子更易与附近空位重新复合,缺陷热回复过程加快,稳定阶段存活的 FP 数量减少。

图 4 显示温度和辐照损伤剂量会显著影响缺陷演化过程中热峰时刻 FP 数量 N_{peak} 和稳定存活的



a　低辐照损伤剂量



b　高辐照损伤剂量

图4　不同温度条件下FeCrAl晶体模型的FP数量随着时间的演化曲线

Fig. 4　Evolution curves of the number of FP (Frenkel pairs) in FeCrAl crystal models over time at different temperature conditions

FP 数量 N_{FP}。图 5 给出了不同温度下 N_{peak} 随着辐照损伤剂量的变化曲线。随着辐照损伤剂量的增加,N_{peak} 不断增加,但增长速率逐渐减缓。如前所述,低剂量辐照采用单次级联碰撞,当剂量大于 0.2 dpa 时,则采用 2~4 次串联级联碰撞;但针对相同晶粒尺寸的晶体模型,每次级联碰撞均在 PKA 数量、能量和入射方向相同的条件下进行。因此,随着辐照损伤剂量的增加,缺陷峰值的增大归因于 PKA 能量和级联次数的增加。相比于辐照损伤剂量,温度对缺陷峰值的影响较小。随着温度的升高,N_{peak} 反而不断减小。由图 2 可知,当辐照损伤剂量大致相同时,高温下设置的 PKA 入射能量较低,原子的碰撞过程相对微弱,PKA 平均位移较短,产生的级联区体积较小,从而使得缺陷峰值减小。

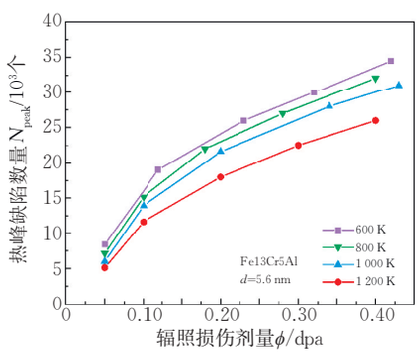


图5　不同温度下热峰缺陷数量随着损伤剂量的变化曲线

Fig. 5　Variation curves of the number of thermal peak defects with damage dose at different temperatures

图 6 给出了不同温度下稳定存活缺陷数 N_{FP} 随着辐照损伤剂量的变化曲线。由图 6 可知,N_{FP} 随着辐照损伤剂量的增加而增大。这是由于辐照损伤剂量增加时,模拟设置的 PKA 入射能量更高或者辐照级联的次数增多,级联碰撞加剧,辐照过程产生的子级联数量会增加,且离位原子的平均位移较长,产生的级联体积较大,从而在晶体内部引入了更多的点缺陷。由图 4 可知,随着温度的升高,N_{FP} 有所

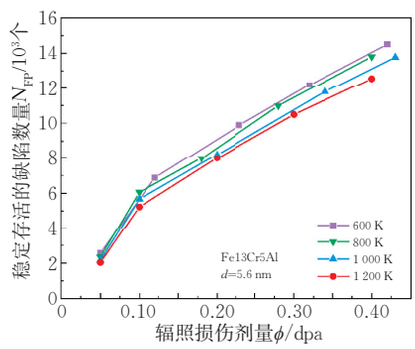


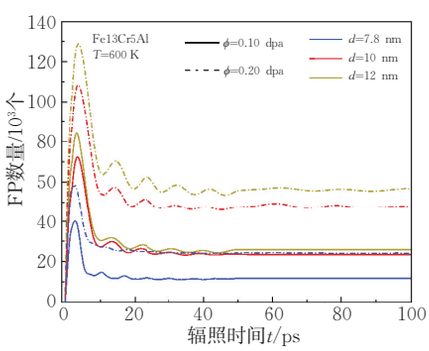
图6　不同温度下稳定存活缺陷数量随着损伤剂量的变化曲线

Fig. 6　Variation curves of the number of stable surviving defects with damage dose at different temperatures

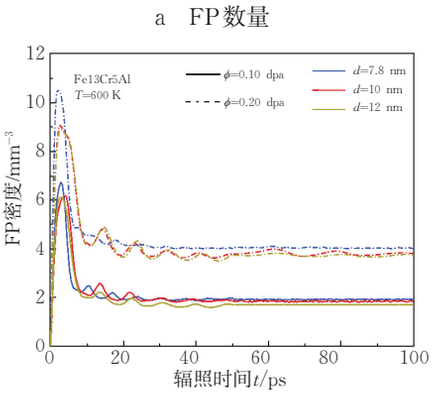
减小。这是由于温度升高加快了离位原子的扩散和迁移速度,这有利于离位原子与邻近的空位发生复合,使得稳定阶段存活缺陷数量减少。

2.3 晶粒尺寸影响分析

图 7 为温度 600 K 时,在 0.10 和 0.20 dpa 的辐照损伤剂量下,不同晶粒尺寸纳米晶 FeCrAl 合金的 FP 数量及其密度随着时间的演化曲线。FP 密度是指单位体积晶体内包含的 FP 数量。在相同的辐照损伤剂量下,FP 数量随着晶粒尺寸的增加而显著增加。这是由于对于较大晶粒尺寸的纳米晶体,模拟体系所包含的原子总数更多。为了实现相同剂量的辐照损伤模拟,当级联次数相同时,模拟设置的 PKA 数量及其入射能量随着晶粒尺寸的增大而逐渐增加(表 2),导致级联体积增大,缺陷数量增多。与 FP 数量变化不同,FP 密度随着晶粒尺寸的增加而不断降低。这是由于纳米晶体中晶界所占比例随着晶粒尺寸的增加而显著降低,离位原子被晶界吸收的概率大大降低,更多的 FP 在淬火阶段和退火阶段复合湮灭,FP 密度随之降低。Zhang 等[31]在 BCC-FeCr 合金级联碰撞的分子动力学模拟研究中也得到了类似结果。由图 7 还可知,辐照损伤剂量越高,FP 峰值越高,但峰值出现的时间越晚,淬火阶段缺陷数波动幅度越大,持续时间也越长。原因如下:当晶体模型参数相同时,高剂量条件下更高能量的 PKA 与其他原子碰撞并触发更多的子级联,缺陷峰值迅速上升。同时,PKA 能量越高,原子的碰撞越发强烈,PKA 平均位移越大,级联体积越大,形成离位峰所需的时间越长,且淬火阶段晶体模型需更多时间用于空位和间隙原子的重组。



a FP数量



b FP密度

图7 不同晶粒尺寸FeCrAl晶体模型的FP数量及其密度随着时间的演化曲线

Fig. 7 Evolution curves of the number and density of FP in FeCrAl crystal models with different grain sizes over time

3 辐照损伤微观机制分析

本节借助可视化后处理软件 Ovito,对辐照条件下原子级联碰撞过程不同阶段的晶体模型,分别采用 Wigner-Seitz 缺陷分析、团簇分析、位错分析及原子近邻分析方法,探讨辐照产生的点缺陷的演化及缺陷团簇的形成特征,研究位错密度随着时间的演化规律及辐照前后的位错空间分布,捕捉晶体材料的非晶相演化过程,获得级联碰撞各阶段非晶原子占比及其随着温度、晶粒尺寸和辐照损伤剂量的变化规律,以揭示 FeCrAl 合金辐照损伤的微观机制。

3.1 点缺陷与缺陷团簇空间分布演化特征

点缺陷是辐照过程中材料内部产生的最主要缺陷,这些缺陷可以迁移、聚集并进一步演化,导致材料的力学性能发生变化。图 8 给出了不同辐照损伤剂量下 FeCrAl 晶体模型在热峰时刻和退火阶段的空位与间隙原子分布。如前所述,辐照作用下,级联碰撞过程热峰时刻点缺陷数量达最大值,如图 8a 所示。其余各图显示,不同辐照损伤剂量下退火阶段点缺陷数量均有所减小。随着辐照剂量的增加,级联碰撞区域不断扩大。Reali 等[32]利用分子动力学模拟在钨等 BCC 金属中子辐照位移级联研究中也观察到了此类似现象。这主要归因于高剂量条件下 PKA 入射能量更高,高能 PKA 能够迁移至更远位置,并将能量传递给周围原子,从而诱发更多次级级联,导致大量原子在碰撞过程中离位。当辐照损伤剂量大于 0.2 dpa 时,级联区缺陷分布呈多体连通形态。这是由于高能 PKA 的沟道效应:PKA 能量越高,平均位移越大,产生的子级联越多。此外,空位聚集于级联碰撞中心区域,周围被间隙原子壳所包围,这是由于间隙原子迁移能低于空位,更易发生迁移。

图 9 以辐照损伤剂量为 0.05 dpa 为例,给出了 600 和 1 000 K 温度下级联碰撞不同阶段的空位与间隙原子分布。由图 9 可知,随着温度的升高,热峰

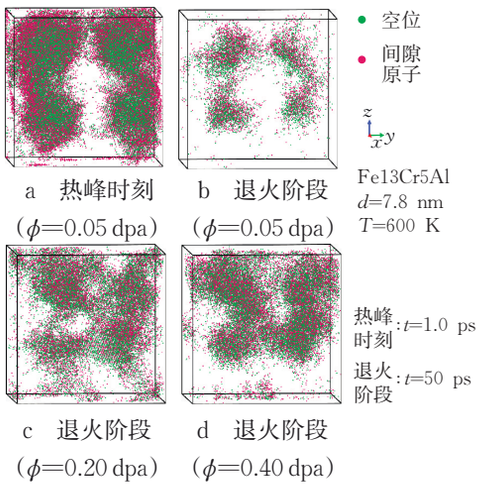


图8　不同辐照损伤剂量下FeCrAl晶体模型在热峰时刻和退火阶段的点缺陷空间分布

Fig. 8　Spatial distribution of point defects in FeCrAl crystal models at thermal peak moments and annealing stages under different irradiation damage doses

时刻与退火阶段的级联区形貌均由多体连通形态转变为多个球状级联体独立分布。这是由于辐照损伤剂量相同时,高温下所需 PKA 入射能量较低,离位原子具有较低的能量,平均运动距离较短,进一步扩散产生的子级联较少,各级联体之间并未连通。随着温度的升高,退火阶段存活缺陷数量显著降低,这是由于高温加速了原子的热运动,间隙原子更易扩散并与邻近的空位重组,缺陷的复合作用更为显著。Niu 等[33]在商业 FeCrAl 合金的离子辐照试验研究中同样观察到,温度升高促使更多原子在退火阶段回复至晶格位置,导致点缺陷密度降低。

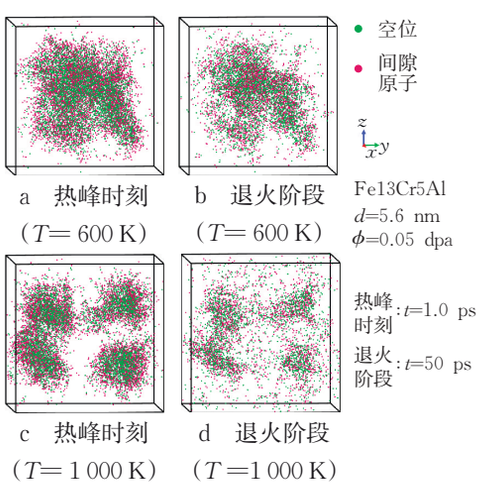


图9　不同温度下FeCrAl晶体模型在热峰时刻和退火阶段的点缺陷空间分布

Fig. 9　Spatial distribution of point defects in FeCrAl crystal models at thermal peak moments and annealing stages at different temperatures

晶粒尺寸亦会影响级联碰撞过程点缺陷的分布。图 10 显示出不同晶粒尺寸 FeCrAl 晶体模型退火阶段的点缺陷分布特征和差异。由图 10 可知,随着晶粒尺寸的增加,级联区形状由球状转变为不规则形状。这是由于晶粒尺寸越大,PKA 入射能量越高,PKA 平均位移越大,沟道效应越明显,离位原子更易扩散产生子级联。

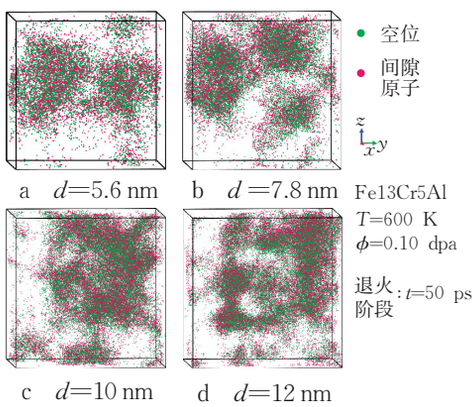


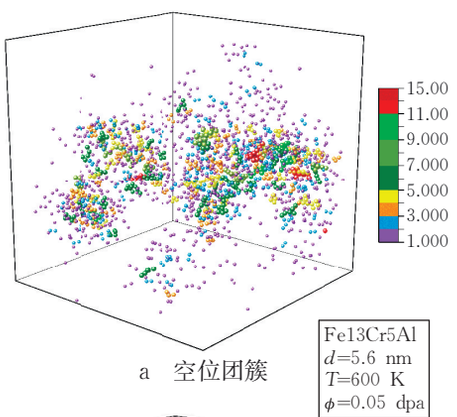
图10　不同晶粒尺寸FeCrAl晶体模型退火阶段的点缺陷空间分布

Fig. 10　Spatial distribution of point defects in FeCrAl crystal models during the annealing stage with different grain sizes

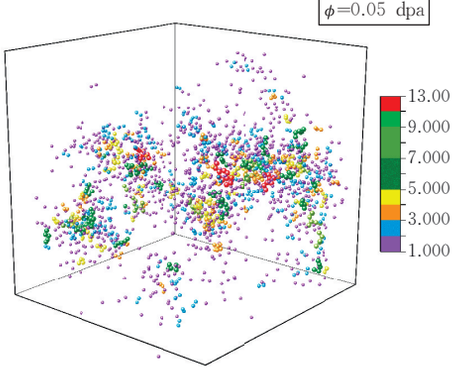
在辐照级联碰撞的退火阶段,点缺陷会发生迁移、聚集并形成团簇,引起材料微观组织演变,从而导致材料宏观性能发生变化。基于上节 MD 模拟得到的空位与间隙原子空间分布,本节进一步对辐照损伤后晶体模型的空位团簇和间隙原子团簇结构进行了深入分析。图 11 以辐照损伤剂量 0.05 dpa 为例,给出了 5.6 nm FeCrAl 晶体模型在级联碰撞稳定后的空位团簇与间隙原子团簇空间分布,图中根据团簇尺寸对缺陷进行了着色。团簇尺寸是指团簇中包含的点缺陷数目,通常以整数形式表示。例如,团簇尺寸为 1 对应单个空位或单个间隙原子,团簇尺寸为 2 对应双空位或双间隙原子,依此类推。由图 11 可知:团簇尺寸为 1 和 2 的缺陷主要分布于级联区的外围区域;而当团簇尺寸大于 3 时,缺陷则主要集中于级联碰撞中心区域。这是由于级联碰撞中心区域缺陷密度更高,更易形成多空位和多间隙原子团簇,且团簇尺寸越大,缺陷形成能越高,缺陷越稳定,中心区域缺陷越不易迁移。此外,图中还显示小尺寸缺陷团的体积分数明显高于大尺寸缺陷团,即团簇尺寸越大,缺陷团簇数量越少。这也是由于团簇尺寸越大,缺陷团形成能越高,多空位或多间隙原子移动、聚集成团越困难。

缺陷成团率是指团簇中点缺陷数量与该类型点缺陷总数的比值,它可以反映辐照损伤后不同类型

点缺陷的成团特征。基于图 11 的团簇分析结果,本节进一步探讨级联碰撞退火阶段的缺陷成团率随着温度与辐照损伤剂量的变化规律,如图 12 所示。由图 12a 可知,空位的成团率高于间隙原子,在高剂量辐照下二者差异更加明显。这是由于空位的形成能低于间隙原子,但迁移能高于间隙原子,空位团易形成但难移动,间隙原子团难形成但易移动。碰撞阶段空位主要分布于级联区中心区域且互相靠近,空位易聚集形成多空位团;而碰撞形成的间隙原子彼此距离较远,在一定的条件下经扩散、迁移才能聚集。在高剂量条件下,PKA 入射能量较高,原子的碰撞更加强烈,级联中心区域的缺陷数量增多,空位更易聚集形成空位团;同时,PKA 能量升高使离位原子平均位移增大,即间隙原子的平均距离增大,不易聚集形成间隙原子团。此外,随着辐照损伤剂量的增加,空位成团率与间隙原子成团率均不断增大。这是由于辐照损伤剂量越大,PKA 能量越高,产生的子级联越多,材料内部缺陷密度越高,缺陷间距越短,更易聚集形成团簇。由图 12b 可知,随着温度的升高,空位成团率不断降低,而间隙原子成团率不断增大。低温下空位成团率高于间隙原子,而高温下间隙原子的成团率更高。原因分析如下:空位在级联中心区域集中分布,空位分布紧凑易聚集形成空位团;间隙原子分布于级联外围区域,彼此距离较远,虽然间隙原子的迁移能低于空位,但低温下不易迁移,不易与其他间隙原子相遇形成团簇。温度升高显著加剧了原子的热运动,间隙原子更易扩散并聚集;而高温下空位团簇不稳定,空位团大量分解,成团率降低。



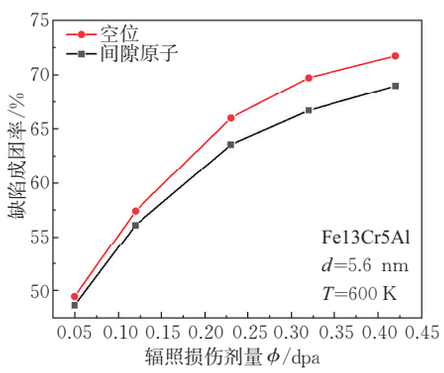
a 空位团簇



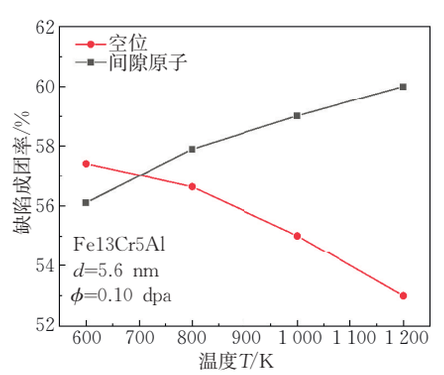
b 间隙原子团簇

图 11 级联碰撞达到稳定后 FeCrAl 晶体模型的空位团簇与间隙原子团簇空间分布

Fig. 11 Spatial distribution of vacancy clusters and interstitial atom clusters in FeCrAl crystal models after cascade collisions reach stability



a 缺陷成团率随着辐照损伤剂量的变化



b 缺陷成团率随着温度的变化

图 12 缺陷成团率随着辐照损伤剂量或温度的变化曲线

Fig. 12 Variation curves of defect clustering rate with irradiation damage dose or temperature

3.2 位错空间分布演化特征

辐照级联碰撞引入的点缺陷会与材料内部已有的位错相互作用,使得晶体材料的位错空间分布和总体密度发生变化,进而影响材料的宏观性能。图 13 给出了不同辐照损伤剂量下晶体位错密度随着时间的演化曲线及典型时刻的位错空间分布。在不同辐照损伤剂量下,位错密度随着时间演化曲线的趋势是一致的。辐照初始阶段,位错密度迅速降低,当 t=1 ps 时(热峰时刻)达到最小值,之后位错密度迅速上升,5 ps 后位错密度呈小范围内波动性变化,整体无显著变化特征。由图 13 可知,FeCrAl 合金纳米晶体的位错主要分布于晶界区域,且刃位

错密度明显高于螺位错。与辐照前相比,热峰时刻的位错缺陷有所减少,这是由于热峰区温度极高,原子接近于熔化状态,原子扩散过程加快,促进了位错的滑移和攀移,运动的位错更易被晶界吸收而湮灭;进入退火阶段后,温度逐渐降低导致位错缺陷增加。由图 13 还可知,随着辐照损伤剂量的增加,热峰时刻位错密度显著降低,该趋势与离子辐照下奥氏体不锈钢的实验观测结果一致[34]。这是由于辐照损伤剂量越大,级联碰撞的 PKA 入射能量越高,原子的碰撞反应越强烈,热峰区内的温度越高,高温下位错的运动越迅速,从而加快了晶界对位错的吸收。随着辐照损伤剂量的增加,退火阶段位错密度也不断降低。

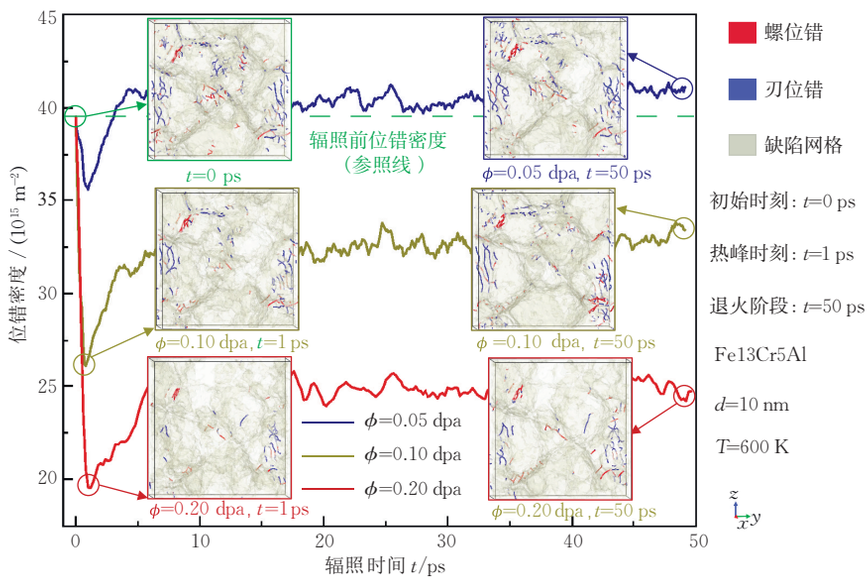


图 13　不同辐照损伤剂量下位错密度随着时间演化曲线及典型时刻位错空间分布

Fig. 13　Evolution curves of dislocation density over time under different irradiation damage doses and typical moments of dislocation spatial distribution

辐照级联碰撞稳定后,晶体模型的位错空间分布会对原子扩散、晶界滑移等微观结构演变过程产生重要影响。图 14 以温度 600 K、晶粒尺寸 10 nm 为例,给出了不同辐照损伤剂量下退火阶段的位错空间分布。通过比较图 14a～图 14d 可知:当辐照损伤剂量为 0.05 dpa 时,退火后位错缺陷数量较辐照前略有增加;而当剂量达到 0.2 dpa 及以上时,辐照损伤后位错缺陷数量则显著减少。原因分析如下:当辐照损伤剂量较低时,晶界区域变化较小,材料内部未发生非晶化现象,辐照引入的点缺陷使材料的晶格畸变增多,位错缺陷增加;当剂量较高时,晶体中出现非晶相组织,且晶界厚度加宽(参见后文图 16 和图 18 的分析),位错可能被晶界吸收或者被非晶原子吞没形成非晶相,使得晶体中的位错缺陷减少。

温度对位错密度演化过程的影响如图 15 所示。与辐照前相比,当温度为 600 K 时,辐照损伤后晶体模型的位错密度基本保持不变;而当温度达到 800 K 及以上时,退火阶段的位错密度较初始时刻显著降低。这归因于温度升高导致原子移动更加频繁,间隙原子更易迁移并与邻近空位复合,缺陷回复增强,退火阶段存活缺陷数量减少,位错密度随之降低。Massey 等[35]在商业 FeCrAl 基合金材料(C35M 合金)的中子辐照试验中也观察到类似现象。

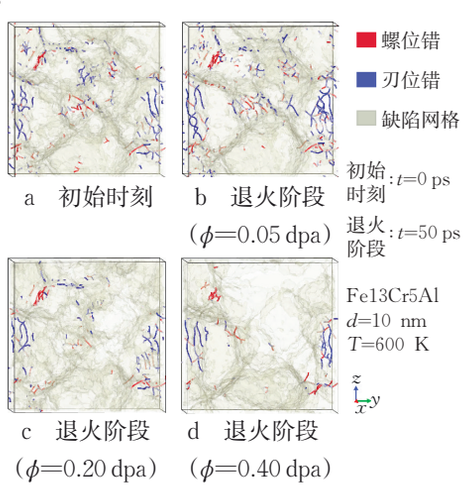


图 14　不同辐照损伤剂量下 FeCrAl 晶体模型退火阶段的位错空间分布

Fig. 14　Spatial distribution of dislocations in FeCrAl crystal models during the annealing stage under different irradiation damage doses

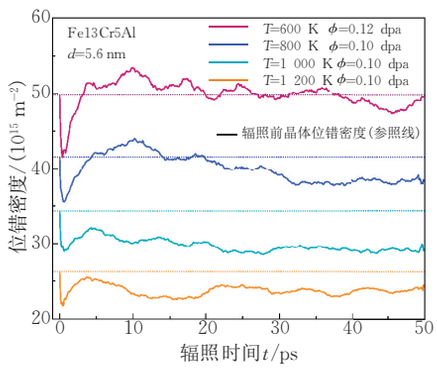


图 15 不同温度下 FeCrAl 晶体模型的位错密度随着时间的演化曲线

Fig. 15 Evolution curves of dislocation density over time in FeCrAl crystal models at different temperatures

3.3 非晶相形成和演化过程

如前所述,辐照级联碰撞会引起晶体微观结构改变,除了引入大量点缺陷和缺陷团簇、造成位错空间分布及总体密度变化外,还会导致部分晶态组织转变为非晶态组织,这是辐照损伤的重要结果之一。图 16 以晶粒尺寸为 5.6 nm、温度为 600 K 为例,给出了辐照级联碰撞过程中 BCC 结构原子和非晶结构原子占比随着时间的演化曲线。为了达到 0.42 dpa 的辐照损伤剂量,共进行了 4 次串联级联碰撞。不同级联过程中非晶原子占比的时间演化曲线形状相似:辐照前非晶结构原子占比低于 BCC 结构原子;辐照初始阶段 0~3 ps,非晶原子占比先迅速上升后迅速下降,5 ps 后略微下降直至平缓,30 ps 后基本保持不变。值得指出的是,非晶原子占比随着时间演化曲线与 FP 数量随着时间演化曲线整体形状十分相似,表明辐照级联引入的点缺陷对非晶原子数量和比例产生了直接影响。随着辐照级联次数的增加,退火阶段非晶原子占比不断增大。此外,BCC 结构原子占比随着时间的演化趋势与非晶结构原子完全相反,随着辐照级联次数的增加,退火阶段的 BCC 结构原子占比不断减少。4 次串联级联碰撞后,非晶和 BCC 结构原子的占比分别为 75% 和 25%。

为了更直观地展示辐照损伤导致的非晶结构的演变,图 16 给出了不同时刻的原子排列快照,其中原子按晶格结构着色,深红色代表非晶原子,深蓝色为 BCC 原子。由图 16 可知,第 1 次辐照级联达到稳定后(t=50 ps),晶体内部出现了以晶界为核心的非晶相组织。Wan 等[36]在晶粒尺寸为 5~12 nm 纳米非晶 TiSiN 复合薄膜的离子辐照试验中也观察到了类似行为。原因如下:级联碰撞产生的点缺陷易聚集于晶界的两侧,晶界原子层厚度显著加宽,当辐照损伤剂量达到一定值时,晶体模型发生以晶界为核心的非晶化现象。近期,美国桑迪亚国家实验室的研究人员借助原位重离子辐照技术和 MD 模拟方法,进一步证实了辐照诱导缺陷会导致晶界发生局部粗化与原子结构重构[37]。

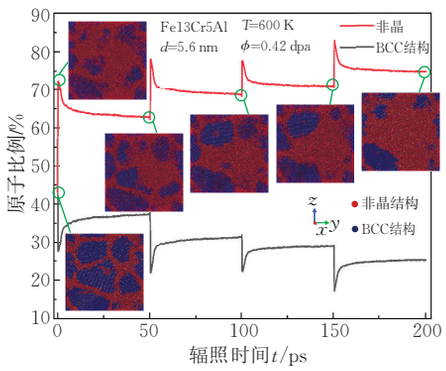
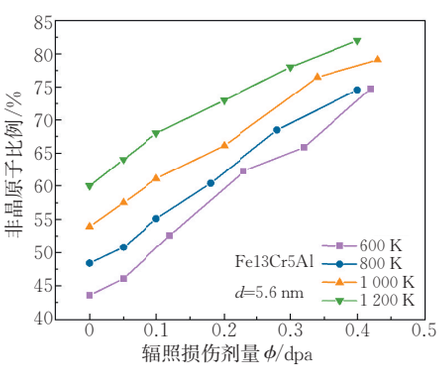


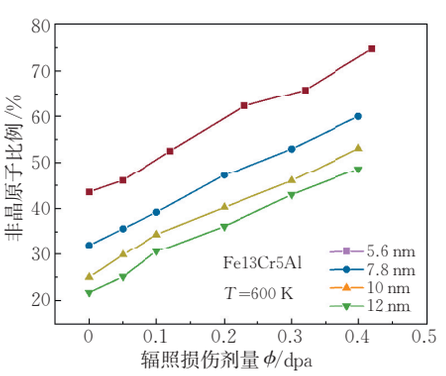
图 16 级联碰撞过程中晶体模型不同结构原子占比随着时间的演化曲线及不同时刻原子排列快照

Fig. 16 Evolution curves of the ratio of different structural atoms in the crystal model during cascade collisions over time and atomic arrangement snapshots at different moments

图 17 给出了不同温度与晶粒尺寸下级联碰撞



a 不同温度条件



b 不同晶粒尺寸条件

图 17 不同温度与晶粒尺寸条件下晶体内非晶原子占比随着辐照损伤剂量的变化曲线

Fig. 17 Variation curves of the ratio of amorphous atoms in the crystal under different temperatures and grain sizes with irradiation damage dose

稳定后晶体模型的非晶原子占比随着辐照损伤剂量的变化曲线。由图 17 可知:相同辐照损伤剂量下,随着温度的升高,非晶原子占比不断增大;但晶粒尺寸越大,晶体内非晶原子占比越低。

图 18 和图 19 给出的辐照前后 FeCrAl 晶体模型的原子排列快照显示,与辐照前相比,低温或低剂量辐照条件下晶界原子层厚度有所增加,晶粒大小和形状并无显著变化。但在高温高剂量条件下,晶界处发生了大量非晶原子聚集现象,材料晶体结构和形貌发生改变。由图 18 可知:当辐照损伤剂量为 0.2 dpa、温度为 600 K 时,晶界附近开始形成局部非晶区域;当温度升高至 1 200 K 时,晶体中出现了大面积非晶化现象。由图 19 可知,晶粒尺寸越大,晶体内产生连续或大面积非晶相所需的辐照损伤剂量越大。这表明,通过增加晶粒尺寸可以显著提升纳米晶 FeCrAl 合金的抗辐照损伤能力。总之,辐照会导致晶体内非晶相产生,剂量越大,非晶相区域也越大。随着温度升高或晶粒尺寸减小,晶体材料的非晶化程度加剧。

4　结论

本文基于 MD 方法模拟了高温-中子辐照条件下 FeCrAl 合金晶体的级联碰撞过程,分析了辐照过程中点缺陷的生成及演化规律、位错密度及空间分布演化特征、非晶相形成及演化过程,揭示了 FeCrAl 合金辐照损伤的微观机制,主要得出以下结论。

(1)辐照损伤过程会引起 FeCrAl 合金晶体微观结构改变,辐照后晶体中产生了大量点缺陷及缺陷团簇,且辐照损伤剂量越高,点缺陷团簇数量越多,缺陷成团率也越高。

(2)辐照引入的点缺陷聚集于晶界的两侧,致使晶界与非晶结构原子增多。低剂量条件下晶界厚度加宽但未发生明显非晶化,而高剂量条件下晶体模型发生了以晶界为核心的非晶化现象,且损伤剂量越高,非晶化程度越高。

(3)辐照还会导致晶体位错空间分布和总体密度变化。低剂量辐照后位错密度略高于辐照前,但高剂量条件下位错密度明显降低。

参考文献:

[1] 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.

[2] 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.

[3] Qiu B W, Wang J, Deng Y B, et al. A review on ther-

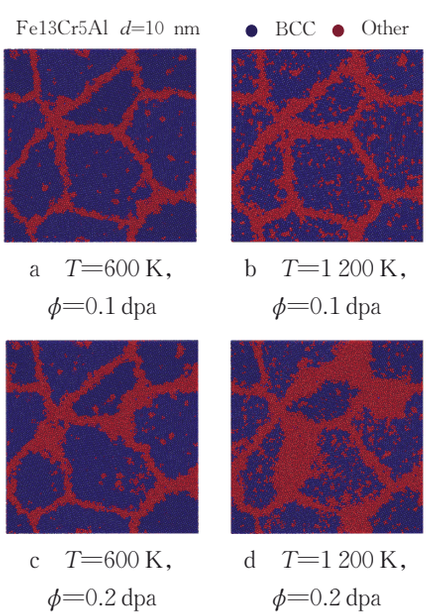


图 18　不同温度条件下 FeCrAl 晶体模型辐照前后的原子排列快照

Fig. 18　Atomic arrangement snapshots of the FeCrAl crystal model before and after irradiation under different temperature conditions

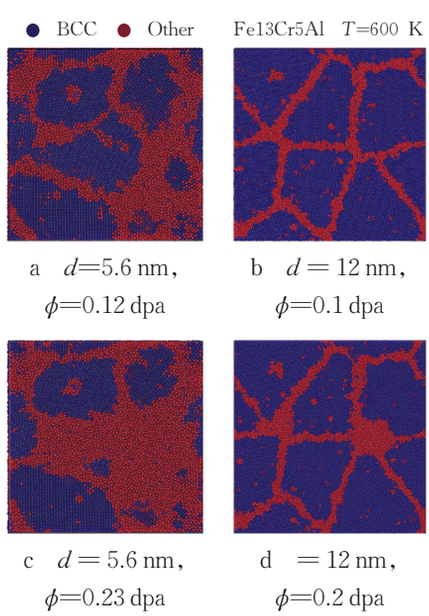


图 19　不同晶粒尺寸条件下 FeCrAl 晶体模型辐照前后的原子排列快照

Fig. 19　Atomic arrangement snapshots of the FeCrAl crystal model before and after irradiation under different grain sizes

mohydraulic and mechanical-physical properties of SiC, FeCrAl and Ti_3SiC_2 for ATF cladding[J]. Nuclear Engineering and Technology, 2020, 52(1): 1-13.

[4] 杜沛南, 张瑞谦, 裴静远, 等. 长尺寸薄壁FeCrAl管材工程规模制备技术[J]. 科技成果管理与研究, 2024(2): 54-57.

[5] 高士鑫, 李文杰, 陈平, 等. FeCrAl包壳燃料棒辐照行为研究[J]. 核动力工程, 2017, 38(5): 175-177.

[6] 周军, 邱绍宇, 杜沛南, 等. 耐事故燃料包壳用FeCrAl不锈钢的研究进展[J]. 材料导报, 2017, 31(A02): 5.

[7] Matijasevic M, Almazouzi A. Effect of Cr on the mechanical properties and microstructure of Fe-Cr model alloys after n-irradiation[J]. Journal of Nuclear Materials, 2008, 377(1): 147-154.

[8] Terentyev D, Bonny G, Domain C, et al. Mechanisms of radiation strengthening in Fe-Cr alloys as revealed by atomistic studies [J]. Journal of Nuclear Materials, 2013, 442(1/2/3): 470-485.

[9] Bachhav M, Robert Odette G, Marquis E A. α' precipitation in neutron-irradiated Fe-Cr alloys[J]. Scripta Materialia, 2014, 74: 48-51.

[10] Malerba L, Caro A, Wallenius J. Multiscale modelling of radiation damage and phase transformations: The challenge of FeCr alloys[J]. Journal of Nuclear Materials, 2008, 382(2/3): 112-125.

[11] Little E A, Stow D A. Void-swelling in irons and ferritic steels: II. An experimental survey of materials irradiated in a fast reactor[J]. Journal of Nuclear Materials, 1979, 87(1): 25-39.

[12] Field K G, Hu X X, Littrell K C, et al. Radiation tolerance of neutron-irradiated model Fe-Cr-Al alloys[J]. Journal of Nuclear Materials, 2015, 465: 746-755.

[13] Zhang D L, Briggs S A, Field K G. Role of refractory inclusions in the radiation-induced microstructure of APMT[J]. Journal of Nuclear Materials, 2018, 505: 165-173.

[14] Briggs S A, Edmondson P D, Littrell K C, et al. A combined APT and SANS investigation of α' phase precipitation in neutron-irradiated model FeCrAl alloys [J]. Acta Materialia, 2017, 129: 217-228.

[15] Kobayashi S, Takasugi T. Mapping of 475 ℃ embrittlement in ferritic Fe-Cr-Al alloys[J]. Scripta Materialia, 2010, 63(11): 1104-1107.

[16] 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.

[17] 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.

[18] 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.

[19] 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.

[20] 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: 227-230.

[21] 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: 1156-1160.

[22] 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.

[23] 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.

[24] Hirel P. Atomsk: A tool for manipulating and converting atomic data files[J]. Computer Physics Communications, 2015, 197: 212-219.

[25] 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.

[26] Amara H, Fu C C, Soisson F, et al. Aluminum and vacancies in α-iron: Dissolution, diffusion, and clustering[J]. Physical Review B, 2010, 81(17): 174101.

[27] Thompson A P, Aktulga H M, Berger R, et al. LAMMPS: A flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales[J]. Computer Physics Communications, 2022, 271: 108171.

[28] 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.

[29] Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the Open Visualization Tool[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2010, 18(1): 015012.

[30] 郁金南. 材料辐照效应[M]. 北京: 化学工业出版社,

2007.

[31] Zhang J H, He H, Liu W B, et al. Effects of grain boundaries on the radiation-induced defects evolution in BCC Fe-Cr alloy: A molecular dynamics study[J]. Nuclear Materials and Energy, 2020, 22: 100726.

[32] Reali L, Boleininger M, Mason D R, et al. Atomistic simulations of athermal irradiation creep and swelling of copper and tungsten at high dose[J]. Acta Materialia, 2025, 288: 120814.

[33] Niu M Y, Wang H, Huang X F. Positron annihilation investigation of hardening behavior induced by Fe^{2+} irradiation in low-Cr FeCrAl alloys[J]. Journal of Materials Research and Technology, 2023, 24: 7291-7301.

[34] Li S L, Hu J, Chen W Y, et al. Evolution of cellular dislocation structures and defects in additively manufactured austenitic stainless steel under ion irradiation[J]. Scripta Materialia, 2020, 178: 245-250.

[35] Massey C P, Zhang D L, Briggs S A, et al. Deconvoluting the effect of chromium and aluminum on the radiation response of wrought FeCrAl alloys after low-dose neutron irradiation[J]. Journal of Nuclear Materials, 2021, 549: 152804.

[36] Wan Q, Yang B, Chen Y M, et al. Grain size dependence of the radiation tolerances of nano-amorphous Ti-Si-N composite coatings[J]. Applied Surface Science, 2019, 466: 179-184.

[37] Barr C M, Chen E Y, Nathaniel J E, et al. Irradiation-induced grain boundary facet motion: in situ observations and atomic-scale mechanisms[J]. Science Advances, 2022, 8(23): eabn0900.

Research on the Effects of Irradiation Damage of FeCrAl Alloys at the Atomic Scale

CUI Jian[1], *YAO Huan*[2,3*], *WU Changwei*[3], *WU Junmei*[3], *WANG Pengfei*[4], *CHEN Ping*[4]

(1.Huineng Coal Power Group Co., Ltd., Ordos 017000, China;
2. Ordos Institute of Technology, Ordos 017000, China;
3. School of Aerospace Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China;
4. Nuclear Power Institute of China, Chengdu 610041, China)

Abstract: As a promising candidate material for nuclear fuel cladding, it is important to understand the damage characteristics of FeCrAl alloy under irradiation conditions. The cascade collision process of the alloy at different doses of irradiation damage were simulated using molecular dynamics (MD) method. The evolution characteristics of grain boundary (GB) atoms and amorphous phases were analyzed, and the spatial distribution of point defects and dislocations before and after irradiation were compared to reveal the mechanisms of the generation and evolution of irradiation induced defects. The results show that a large number of point defects and defect clusters were introduced during irradiation, and the higher the irradiation damage dose, the larger the number of clusters and the higher the defect cluster fraction; The point defects introduced by the irradiation preferred to aggregate at GBs, which lead to an increase in the fractions of GB and amorphous atoms. The thickness of GB increased at low doses without significant amorphization, while at high doses amorphous phases were formed with GB as the core, and the higher the dose, the higher the degree of amorphization. The irradiation also lead to the changes in the spatial distribution and overall density of dislocations, which was slightly higher after irradiation at low doses than in the absence of irradiation, but would significantly decrease with the increase of dose.

Keywords: FeCrAl alloy; irradiation damage; microscopic mechanism; molecular dynamic

(责任编辑　王德平)