

陶瓷型复合燃料烧结过程的相场模拟研究*

廖宇轩¹⁾ 申文龙¹⁾ 吴学志²⁾ 喇永孝¹⁾ 柳文波^{1)3)†}

1) (西安交通大学核科学与技术学院, 西安 710049)

2) (中国原子能科学研究院, 北京 102413)

3) (西安交通大学, 陕西省先进核能技术重点实验室, 西安 710049)

(2024 年 8 月 9 日收到; 2024 年 9 月 23 日收到修改稿)

建立了陶瓷型复合燃料两相烧结过程的相场模型, 利用该模型模拟了 UN-U₃Si₂ 复合燃料的烧结过程. 首先, 研究了两相双晶粒在烧结过程中的烧结颈的演化过程. 结果表明: 具有较高表面能的晶粒在烧结颈形成过程中的表面形变更明显; 两相双晶粒形成的平衡二面角的大小取决于两相的晶界能与表面能的比值; 两相不等大的双晶粒之间未发生大晶粒吞噬小晶粒现象. 然后, 研究了烧结过程中的两相三晶粒之间的气孔收缩和三甲晶界的演化, 以揭示符合燃料烧结过程中气孔的演变规律. 结果发现, 两相三晶粒形成的三甲晶界夹角偏离了 120°, 晶界处的高能势垒阻碍了气孔的空位沿晶界的扩散, 导致三甲晶界处的气孔收缩速率减慢. 最后, 研究了两相陶瓷型复合燃料的多晶烧结过程. 不同体积分数比的两相多晶烧结组织形貌演化的模拟结果表明, 晶界扩散在两相烧结过程中起主要作用, 体积分数较大的相的晶粒生长占据主导地位, 两相晶粒之间存在阻碍晶界迁移的作用, 同相晶粒之间存在晶粒迁移现象.

关键词: 相场模拟, 复合燃料, 烧结, 晶粒生长, 晶界与晶界**PACS:** 02.70.-c, 05.70.Ce, 81.05.Mh, 81.10.Aj**DOI:** 10.7498/aps.73.20241112**CSTR:** 32037.14.aps.73.20241112

1 引言

耐事故燃料能提高反应堆核燃料系统在正常运行工况以及严重事故工况下的安全性和可靠性^[1]. 自福岛第一核电站事故发生以来, 耐事故燃料的研发一直是核燃料领域的研究热点, 而筛选高铀密度和高导热系数的燃料体系是耐事故燃料开发的重要思路^[2]. 选用高铀密度的燃料可以延长反应堆的换料周期, 提高核电站运行的经济性; 采用高导热系数的燃料可以降低燃料芯块和包壳的峰值温度, 增强燃料元件的抵御严重事故能力^[3-5]. 与传统 UO₂ 燃料相比, UN, U₃Si₂ 燃料都具有铀密度高和导热

系数高的优点, 且它们的导热系数随着温度的升高而增加^[6]. 然而, UN 在氧气、水或蒸汽环境中容易发生氧化腐蚀, 而且其粉末制备和芯块烧结的条件也较为苛刻, 在低烧结温度下制得的 UN 芯块很难达到满足燃料应用的密度, 而高烧结温度则会对材料的微观结构造成不利影响; U₃Si₂ 具有更好的抗氧化能力, 但其较低的熔点会降低安全裕度^[7,8]. 因此, UN-U₃Si₂ 复合燃料充分利用两种燃料相的优点, 以其高抗氧化性、高熔点等优势, 成为了一种极具研发潜力的耐事故燃料.

近年来, 国外学者开展了一系列不同温度、不同时间、不同掺杂比例、多种烧结方式下的 UN-U₃Si₂ 复合燃料的烧结实验^[6,9-11]. Ortega 等^[9] 采

* 国家自然科学基金委员会与中国工程物理研究院联合基金 (NSAF 基金)(批准号: U2130105) 和中国核工业集团有限公司领创科研项目资助的课题.

† 通信作者. E-mail: liuwenbo@xjtu.edu.cn

2.2 自由能泛函数

本工作两相烧结相场模型的总自由能泛函数 F 采用以下形式:

$$F = \int_V \left[f(\rho, \eta_1, \eta_2, \dots, \eta_p, \phi_\alpha, \phi_\beta) + \frac{\kappa_\rho}{2} |\nabla \rho|^2 + \frac{\kappa_\phi}{2} |\nabla \phi_\alpha|^2 + \frac{\kappa_\phi}{2} |\nabla \phi_\beta|^2 + \frac{\kappa_\eta}{2} \sum_{i=1}^p |\nabla \eta_i|^2 \right] dV, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} f(\rho, \eta_1, \eta_2, \dots, \eta_p, \phi_\alpha, \phi_\beta) &= A\rho^2(1-\rho)^2 + B \left\{ \left[\rho^2 + 6(1-\rho)(\phi_\alpha^2 + \phi_\beta^2) - 4(2-\rho)(\phi_\alpha^3 + \phi_\beta^3) + 3(\phi_\alpha^2 + \phi_\beta^2)^2 \right] \right. \\ &\quad + \left[\phi_\alpha^2 + 6(1-\phi_\alpha) \sum_{i=1}^r \eta_i^2 - 4(2-\phi_\alpha) \sum_{i=1}^r \eta_i^3 + 3 \left(\sum_{i=1}^r \eta_i^2 \right)^2 \right] \\ &\quad \left. + \left[\phi_\beta^2 + 6(1-\phi_\beta) \sum_{i=r+1}^p \eta_i^2 - 4(2-\phi_\beta) \sum_{i=r+1}^p \eta_i^3 + 3 \left(\sum_{i=r+1}^p \eta_i^2 \right)^2 \right] + a_{GB} \sum_{i=1}^p \sum_{j>i}^p \eta_i^2 \eta_j^2 \right\}, \quad (2) \end{aligned}$$

式中, A 和 B 为与两种材料气孔表面、晶粒相界面和晶界处能量和宽度有关的参数, 单位 J/m^3 ; a_{GB} 为扩散界面参数, 取 $a_{GB} = 1.5^{[22]}$; 方程右侧第 1 项为双势阱函数, 在晶粒内部与气孔内部取得极小值; 方程右侧第 2 项花括号中为多势阱函数, 在晶粒内部取得极小值. 本工作所采用的自由能泛函数能够保证在各个晶粒内部和气孔内部取得 $p+1$ 个极小值.

F 中各参数与两种材料的物理参数之间的关系为^[23]

$$\kappa_\eta = \frac{3(\varphi_\alpha \gamma_{gb}^\alpha + \varphi_\beta \gamma_{gb}^\beta) \delta}{4} \quad (3)$$

$$\kappa_\rho = \kappa_\phi = \frac{3\delta \left[2(\varphi_\alpha \gamma_s^\alpha + \varphi_\beta \gamma_s^\beta) - (\varphi_\alpha \gamma_{gb}^\alpha + \varphi_\beta \gamma_{gb}^\beta) \right]}{4}, \quad (4)$$

$$A = \frac{12(\varphi_\alpha \gamma_s^\alpha + \varphi_\beta \gamma_s^\beta) - 7(\varphi_\alpha \gamma_{gb}^\alpha + \varphi_\beta \gamma_{gb}^\beta)}{\delta}, \quad (5)$$

$$B = \frac{\varphi_\alpha \gamma_{gb}^\alpha + \varphi_\beta \gamma_{gb}^\beta}{\delta}, \quad (6)$$

式中, 插值函数 $\varphi_\alpha = \sum_{i=1}^r \eta_i^2 / \sum_{i=1}^p \eta_i^2$, $\varphi_\beta = \sum_{i=r+1}^p \eta_i^2 / \sum_{i=1}^p \eta_i^2$; γ_{gb}^α 和 γ_s^α , γ_{gb}^β 和 γ_s^β 分别为两种材料的晶界能和表面能, 单位 J/m^2 ; δ 为扩散界面的宽度, 单位 m .

式中, 第 1 项 f 为局部自由能密度函数; 第 2 项、第 3 项、第 4 项和第 5 项为梯度自由能, 分别表示气孔表面、 α 相的相界面、 β 相的相界面和晶界处的额外自由能; κ_ρ , κ_ϕ 和 κ_η 为梯度能系数, 取决于两种材料气孔表面、晶粒相界面和晶界处的能量和宽度, 单位 J/m ; V 为空间体积.

本工作采用的 f 表达式为

2.3 演化动力学方程

假设烧结过程中的质量守恒, 上述相场模型中 ρ , ϕ_α 和 ϕ_β 的演化动力学方程为 Cahn-Hilliard 方程^[24]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\mathbf{M} \nabla \frac{\delta F}{\delta \rho} \right) = \nabla \cdot \mathbf{M} \nabla \left[\frac{\partial f}{\partial \rho} - \kappa_\rho \nabla^2 \rho \right], \quad (7)$$

$$\frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\mathbf{M} \nabla \frac{\delta F}{\delta \phi_\alpha} \right) = \nabla \cdot \mathbf{M} \nabla \left[\frac{\partial f}{\partial \phi_\alpha} - \kappa_\phi \nabla^2 \phi_\alpha \right], \quad (8)$$

$$\frac{\partial \phi_\beta}{\partial t} = \nabla \cdot \left(\mathbf{M} \nabla \frac{\delta F}{\delta \phi_\beta} \right) = \nabla \cdot \mathbf{M} \nabla \left[\frac{\partial f}{\partial \phi_\beta} - \kappa_\phi \nabla^2 \phi_\beta \right], \quad (9)$$

式中, t 为时间; $\mathbf{M}$ 为迁移率张量, 表达式为^[23]

$$\mathbf{M} = \frac{\nu_m(\varphi_\alpha \mathbf{D}_\alpha + \varphi_\beta \mathbf{D}_\beta)}{RT}, \quad (10)$$

其中, ν_m 为摩尔体积, R 为气体常数, T 为温度, $\mathbf{D}_\alpha$ 和 $\mathbf{D}_\beta$ 为两种材料的扩散系数张量.

本工作采取的体系扩散机制包括表面扩散和晶界扩散. 因此, 可以认为 $\mathbf{D}_\alpha = \mathbf{D}_\alpha^s + \mathbf{D}_\alpha^{gb}$, $\mathbf{D}_\beta = \mathbf{D}_\beta^s + \mathbf{D}_\beta^{gb}$, 其中, $\mathbf{D}_\alpha^s$ 和 $\mathbf{D}_\alpha^{gb}$, $\mathbf{D}_\beta^s$ 和 $\mathbf{D}_\beta^{gb}$ 分别为两种材料的表面扩散系数张量和晶界扩散系数张量, 表达式为^[23]

$$\mathbf{D}_\alpha^s = D_\alpha^s \rho^2 (1-\rho)^2 \mathbf{T}^s, \quad (11)$$

$$D_{\beta}^s = D_{\beta}^s \rho^2 (1 - \rho)^2 T^s, \quad (12)$$

$$T^s = I - \mathbf{n}_s \otimes \mathbf{n}_s, \quad (13)$$

$$\mathbf{n}_s = \frac{\nabla \rho}{|\nabla \rho|}, \quad (14)$$

式中, D_{α}^s 和 D_{β}^s 为表面扩散系数标量, 取决于两种材料的性质; T^s 为表面投影张量, 保证表面扩散在晶粒与气孔接触表面的切线方向; I 为单位张量; 符号 $\otimes$ 为张量积; $\mathbf{n}_s$ 为垂直于表面的单位法向量.

$$D_{\alpha}^{\text{gb}} = D_{\alpha}^{\text{gb}} \sum_{i=1}^p \sum_{j>i}^p \eta_i \eta_j T^{\text{gb}}, \quad (15)$$

$$D_{\beta}^{\text{gb}} = D_{\beta}^{\text{gb}} \sum_{i=1}^p \sum_{j>i}^p \eta_i \eta_j T^{\text{gb}}, \quad (16)$$

$$T^{\text{gb}} = I - \mathbf{n}_{\text{gb}} \otimes \mathbf{n}_{\text{gb}}, \quad (17)$$

$$\mathbf{n}_{\text{gb}} = \frac{\nabla \eta_i - \nabla \eta_j}{|\nabla \eta_i - \nabla \eta_j|}, \quad (18)$$

式中, D_{α}^{gb} 和 D_{β}^{gb} 为晶界扩散系数标量, 取决于两种材料的性质; T^{gb} 为晶界投影张量, 保证晶界扩散在晶界的切线方向; $\mathbf{n}_{\text{gb}}$ 为垂直于晶界的单位法向量.

η_i 的演化动力学方程为 Allen-Cahn 方程^[24]:

$$\frac{\partial \eta_i}{\partial t} = -L \frac{\delta F}{\delta \eta_i} = -L \left[\frac{\partial f}{\partial \eta_i} - \kappa_{\eta} \nabla^2 \eta_i \right], \quad (19)$$

$$i = 1, 2, \dots, p,$$

式中, L 为表征晶界迁移率的系数, 与两种材料的物理参数之间的关系为^[25]

$$L = \frac{(\varphi_{\alpha} \gamma_{\text{gb}}^{\alpha} + \varphi_{\beta} \gamma_{\text{gb}}^{\beta}) M_b}{\kappa_{\eta}}, \quad (20)$$

$$M_b = \frac{\nu_m (\varphi_{\alpha} D_{\alpha}^{\text{gb}} + \varphi_{\beta} D_{\beta}^{\text{gb}})}{10RT\delta}, \quad (21)$$

其中, M_b 为晶界迁移率.

根据 (7) 式、(8) 式、(9) 式的 Cahn-Hilliard 方程与 (19) 式的 Allen-Cahn 方程, 对所有相场变量进行求解, 可以计算出组织演变过程中任意时刻的微观结构与空间分布. 本工作通过编写程序进行模拟, 采用有限差分法求解相场方程, 在时间上采用显式 Euler 算法对非线性偏微分方程进行离散化, 在空间上采用五点差分法求解 Laplace 项^[26].

为了直观地表征两相烧结过程, 本工作中可视化变量 φ 为

$$\varphi = 1.5 \sum_{i=1}^r \eta_i^2 + \sum_{i=r+1}^p \eta_i^2. \quad (22)$$

3 无量纲化处理

本工作相场模型的变量与参数采用无量纲形式. 根据 (7) 式、(8) 式与 (9) 式, 保守场演化方程中含有量纲的量为 t , M , F 和 ∇ , 通过选取参考空间长度 l^* 、参考时间 t^* 和参考能量密度 ε^* 作为参考物理量, 可以得到无量纲 Hamilton 算符 $\tilde{\nabla} = l^* \nabla$ 、无量纲时间 $\tau = t/t^*$ 和无量纲自由能 $\tilde{F} = F/\varepsilon^*$. 将无量纲量代入 (7) 式、(8) 式与 (9) 式, 得到变形后的方程为

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial \tau} &= \tilde{\nabla} \cdot \left(\frac{M \varepsilon^* t^*}{l^{*2}} \tilde{\nabla} \frac{\delta \tilde{F}}{\delta \rho} \right) \\ &= \tilde{\nabla} \cdot \frac{M \varepsilon^* t^*}{l^{*2}} \tilde{\nabla} \left[\frac{1}{\varepsilon^*} \frac{\partial f}{\partial \rho} - \frac{\kappa_{\rho}}{\varepsilon^* l^{*2}} \tilde{\nabla}^2 \rho \right], \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial \tau} &= \tilde{\nabla} \cdot \left(\frac{M \varepsilon^* t^*}{l^{*2}} \tilde{\nabla} \frac{\delta \tilde{F}}{\delta \phi_{\alpha}} \right) \\ &= \tilde{\nabla} \cdot \frac{M \varepsilon^* t^*}{l^{*2}} \tilde{\nabla} \left[\frac{1}{\varepsilon^*} \frac{\partial f}{\partial \phi_{\alpha}} - \frac{\kappa_{\phi}}{\varepsilon^* l^{*2}} \tilde{\nabla}^2 \phi_{\alpha} \right], \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_{\beta}}{\partial \tau} &= \tilde{\nabla} \cdot \left(\frac{M \varepsilon^* t^*}{l^{*2}} \tilde{\nabla} \frac{\delta \tilde{F}}{\delta \phi_{\beta}} \right) \\ &= \tilde{\nabla} \cdot \frac{M \varepsilon^* t^*}{l^{*2}} \tilde{\nabla} \left[\frac{1}{\varepsilon^*} \frac{\partial f}{\partial \phi_{\beta}} - \frac{\kappa_{\phi}}{\varepsilon^* l^{*2}} \tilde{\nabla}^2 \phi_{\beta} \right]. \end{aligned} \quad (25)$$

由此可得无量纲迁移率张量 $\tilde{M} = M \varepsilon^* t^* / l^{*2}$.

根据 (19) 式, 非保守场演化方程含有量纲的量为 t , L , F 和 ∇ . 将无量纲量代入 (19) 式, 得到变形后的方程为

$$\begin{aligned} \frac{\partial \eta_i}{\partial \tau} &= -L \varepsilon^* t^* \frac{\delta \tilde{F}}{\delta \eta_i} = -L \varepsilon^* t^* \left[\frac{1}{\varepsilon^*} \frac{\partial f}{\partial \eta_i} - \frac{\kappa_{\eta}}{\varepsilon^* l^{*2}} \nabla^2 \eta_i \right], \\ i &= 1, 2, \dots, p. \end{aligned} \quad (26)$$

由此可得无量纲迁移系数 $\tilde{L} = L \varepsilon^* t^*$.

本工作取 $t^* = 1/(L \varepsilon^*)$, $\varepsilon^* = B$; l^* 的取值与 δ 有关, 对应无量纲化之后一个单位长度占有的界面宽度, 本工作取 $l^* = \delta/m$; m 为扩散界面在模拟中占据的格点数, 本工作取 $m = 3$.

根据所选取的参考物理量, 无量纲迁移率张量 $\tilde{M}$ 与无量纲总自由能泛函数 $\tilde{F}$ 中 A , B , κ_{ρ} , κ_{ϕ} , κ_{η} 等参数对应的无量纲形式分别为

$$\tilde{M} = \frac{15[(\varphi_\alpha D_\alpha^s + \varphi_\beta D_\beta^s) + (\varphi_\alpha D_\alpha^{gb} + \varphi_\beta D_\beta^{gb})]m^2}{2(\varphi_\alpha D_\alpha^{gb} + \varphi_\beta D_\beta^{gb})}, \quad (27a)$$

$$\tilde{A} = \frac{A}{\varepsilon^*} = \frac{12(\varphi_\alpha \gamma_s^\alpha + \varphi_\beta \gamma_s^\beta) - 7(\varphi_\alpha \gamma_{gb}^\alpha + \varphi_\beta \gamma_{gb}^\beta)}{\varphi_\alpha \gamma_{gb}^\alpha + \varphi_\beta \gamma_{gb}^\beta}, \quad (27b)$$

$$\tilde{B} = B/\varepsilon^* = 1, \quad (27c)$$

$$\tilde{\kappa}_\rho = \frac{\kappa_\rho}{\varepsilon^* l^{*2}} = \tilde{\kappa}_\phi = \frac{\kappa_\phi}{\varepsilon^* l^{*2}} = \frac{3}{4} \left[\frac{2(\varphi_\alpha \gamma_s^\alpha + \varphi_\beta \gamma_s^\beta) - (\varphi_\alpha \gamma_{gb}^\alpha + \varphi_\beta \gamma_{gb}^\beta)}{\varphi_\alpha \gamma_{gb}^\alpha + \varphi_\beta \gamma_{gb}^\beta} \right] m^2, \quad (27d)$$

$$\tilde{\kappa}_\eta = \frac{\kappa_\eta}{\varepsilon^* l^{*2}} = \frac{3}{4} m^2. \quad (27e)$$

 表 1 UN 的物理参数^[27–29]

 Table 1. Physical parameters of UN at 1823 K^[27–29].

Parameter	Value	Unit	Ref.
D_α^s	7.5×10^{-12}	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	[27]
D_α^{gb}	$0.01 D_\alpha^s$	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	[28]
γ_s^α	1.6	$\text{J} \cdot \text{m}^{-2}$	[29]
γ_{gb}^α	0.8	$\text{J} \cdot \text{m}^{-2}$	[29]
δ	6	nm	[29]

 表 2 U_3Si_2 的物理参数^[30–32]

 Table 2. Physical parameters of U_3Si_2 at 1823 K^[30–32].

Parameter	Value	Unit	Ref.
D_β^s	$100 D_\beta^{gb}$	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	
D_β^{gb}	6.5923×10^{-10}	$\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$	[30]
γ_s^β	2.0	$\text{J} \cdot \text{m}^{-2}$	[31]
γ_{gb}^β	1.3	$\text{J} \cdot \text{m}^{-2}$	[32]
δ	6	nm	[32]

Note: D_α^s , D_β^s —surface diffusivity; D_α^{gb} , D_β^{gb} —grain-boundary diffusivity; γ_s^α , γ_s^β —surface energy; γ_{gb}^α , γ_{gb}^β —grain-boundary energy; δ —diffuse interface width.

表 3 模拟中的无量纲参数表

Table 3. Non-dimensional parameters used in simulation.

Parameter	Value	Parameter	Value
$\tilde{A}(\varphi_\alpha = 1, \varphi_\beta = 0)$	17	$\tilde{\kappa}_\eta$	6.75
$\tilde{A}(\varphi_\alpha = 0, \varphi_\beta = 1)$	11.5	$\tilde{M}(\varphi_\alpha = 1, \varphi_\beta = 0)$	6817.5
$\tilde{B}$	1	$\tilde{M}(\varphi_\alpha = 0, \varphi_\beta = 1)$	6817.5
$\tilde{\kappa}_\rho(\varphi_\alpha = 1, \varphi_\beta = 0)$	20.25	$\tilde{L}$	1
$\tilde{\kappa}_\rho(\varphi_\alpha = 0, \varphi_\beta = 1)$	14	$\Delta x = \Delta y$	1
$\tilde{\kappa}_\phi(\varphi_\alpha = 1, \varphi_\beta = 0)$	20.25	Δt	2×10^{-5}
$\tilde{\kappa}_\phi(\varphi_\alpha = 0, \varphi_\beta = 1)$	14		

Note: $\tilde{A}$, $\tilde{B}$, $\tilde{\kappa}_\rho$, $\tilde{\kappa}_\phi$, $\tilde{\kappa}_\eta$ —non-dimensional parameters of free energy function; $\tilde{M}$ —non-dimensional mobility; $\tilde{L}$ —non-dimensional Allen-Cahn mobility; Δx , Δy —space scale; Δt —time scale.

本工作利用相场模型对 UN 粉末与 U_3Si_2 粉末在 1823 K 温度下的两相烧结过程进行了数值模拟, 以 UN 为 α 相, U_3Si_2 为 β 相, 模拟中用到的 UN 和 U_3Si_2 的物理参数如表 1 和表 2 所列^[27–32].

将 UN 和 U_3Si_2 的物理参数代入上述方程中, 求得各无量纲参数的具体数值如表 3 所列.

4 结果与讨论

4.1 2 个不同相晶粒烧结

本工作采用相场模型, 模拟了双晶粒结构中 UN 粉末与 U_3Si_2 粉末的两相烧结过程. 所选模拟区域差分网格尺寸为 256×256 , 采用周期性边界条件. 分别研究 UN 粉末与 U_3Si_2 粉末两相烧结组织的形貌演化过程、烧结颈的形成、平衡二面角以及不同晶粒尺寸对组织演变过程的影响.

4.1.1 烧结颈的形成

图 2 为 2 个不同相等尺寸的圆形晶粒在烧结过程中形貌演化的相场模拟. 其中晶粒的半径 $R = 30$, 黄色的部分代表 UN 相晶粒, 绿色的部分代表 U_3Si_2 相晶粒. 从图 2(a) 可以看出, 在烧结过程初期, U_3Si_2 相晶粒具有比 UN 相晶粒更高的表面能, 使其在烧结颈形成过程中更趋向于减小表面积, 颈部附近的晶粒表面向晶粒内部凹陷变形的程度更明显; 在图 2(a)—(d) 两相晶粒烧结过程中, 先后发生了烧结颈的形成和增长, 这一现象与单相晶粒烧结模拟^[33]的结果一致; 仅考虑表面扩散和晶界扩散的模拟烧结颈增长较缓慢, 晶粒位置无明显移动.

图 3 为基于 2 个不同相等尺寸晶粒烧结模拟数据的烧结颈对数增长曲线. 由图 3 可以看出, 烧结颈的增长曲线斜率前后发生改变, 这表明烧结颈

的增长规律并非简单的幂函数关系, 曲线可以划分为 2 个增长阶段: 烧结初期, 烧结过程受表面扩散主导, 颈部快速形成并增长, 斜率为 0.44 左右; 烧结中期, 表面扩散作用减小, 晶界扩散作用增大, 烧结颈的增长速率显著下降, 烧结颈持续缓慢增长, 斜率为 0.21 左右, 满足烧结颈曲线增长规律^[34]. 随着烧结过程的继续进行, 烧结颈将在后期达到稳定状态, 颈部尺寸较大, 晶粒之间紧密接触, 不再适合用烧结前中期的增长规律对烧结颈进行描述.

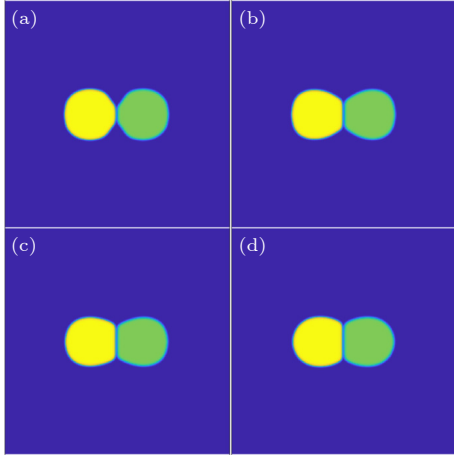


图 2 两个不同相等大圆形晶粒演化的相场模拟 (a) $6 \times 10^4 \Delta t$; (b) $50 \times 10^4 \Delta t$; (c) $200 \times 10^4 \Delta t$; (d) $500 \times 10^4 \Delta t$

Fig. 2. Phase-field simulation of the evolution of two equal-sized circular grains with different phases: (a) $6 \times 10^4 \Delta t$; (b) $50 \times 10^4 \Delta t$; (c) $200 \times 10^4 \Delta t$; (d) $500 \times 10^4 \Delta t$.

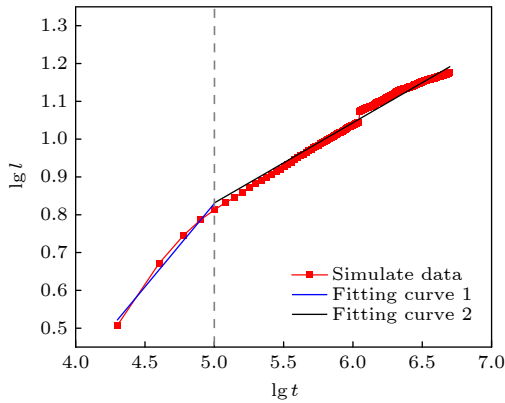


图 3 不同相晶粒的烧结颈对数增长曲线 (l ——颈部长度, t ——时间步)

Fig. 3. Logarithmic growth curves of sintering neck of different phase grains (l —neck length, t —time step).

4.1.2 平衡二面角

研究表明, 在烧结过程中, 相邻的 2 个晶粒在晶粒相与气孔相的相界面处形成一个平衡二面角 Ψ ,

Ψ 取决于材料的表面能 γ_s 和晶界能 γ_{gb} , 在各向同性条件下, 晶界处的平衡二面角方程为^[35]

$$\Psi = 2 \arccos \left(\frac{\gamma_{gb}}{2\gamma_s} \right). \quad (28)$$

图 4 分别为不同演化时间下 2 个等尺寸晶粒烧结形成的平衡二面角. 本工作中 UN 相晶界能与表面能的比值为 $\gamma_{gb}^\alpha/\gamma_s^\alpha = 0.5$, 对应计算值为 $\Psi = 151^\circ$, 如图 4(a) 和图 4(d) 所示; U_3Si_2 相晶界能与表面能的比值为 $\gamma_{gb}^\beta/\gamma_s^\beta = 0.65$, 对应计算值为 $\Psi = 142^\circ$, 如图 4(b) 和图 4(e) 所示; 2 个同相晶粒烧结形成的最终平衡二面角均与理论计算值吻合较好. 从图 4 可以看出, UN 相晶粒与 U_3Si_2 相晶粒烧结形成的最终平衡二面角介于 2 个同相双晶粒的最终平衡二面角之间, 达到稳定状态后的平衡二面角随时间无明显变化. 这证明了 2 个不同相晶粒烧结形成的最终平衡二面角只由两种材料的特性所决定, 即与两种材料的晶界能和表面能的不同比值密切相关.

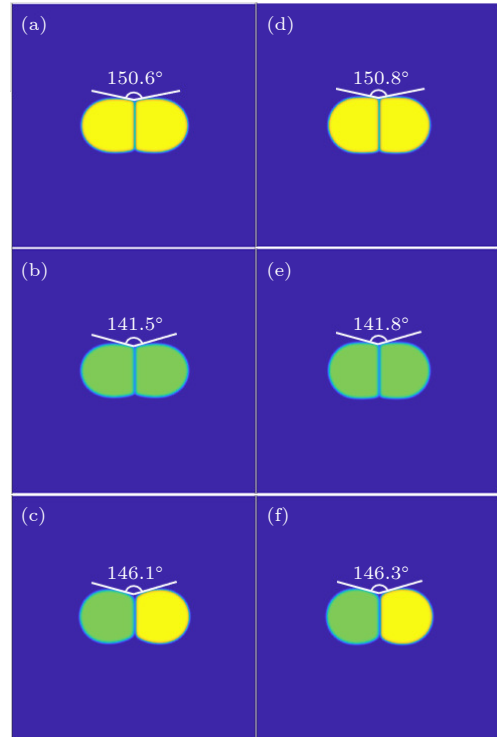


图 4 演化时间 $500 \times 10^4 \Delta t$ ((a)–(c)) 与 $1500 \times 10^4 \Delta t$ ((d)–(f)) 下的平衡二面角 (a), (d) 2 个 UN 晶粒; (b), (e) 2 个 U_3Si_2 晶粒; (c), (f) 1 个 UN 晶粒和 1 个 U_3Si_2 晶粒

Fig. 4. Equilibrium dihedral angles at evolution times $500 \times 10^4 \Delta t$ ((a)–(c)) and $1500 \times 10^4 \Delta t$ ((d)–(f)): (a), (d) Two UN grains; (b), (e) two U_3Si_2 grains; (c), (f) one UN grain and one U_3Si_2 grain.

4.1.3 不同晶粒尺寸的影响

图 5 为 2 个不同相不同尺寸晶粒烧结过程的相场模拟. 由图 5 可以看出, 2 个不同相不同尺寸晶粒的烧结过程与 Sun 等 [36] 模拟的 2 个同相不同尺寸晶粒的烧结过程有着显著的差异: 2 个同相晶粒烧结, 烧结颈向尺寸较小的晶粒一侧迁移, 大晶粒的面积不断增大, 而小晶粒的面积不断减小, 直到最终消失 [36]; 2 个不同相晶粒烧结, 烧结颈向尺寸较小的晶粒一侧迁移, 迁移一段距离后稳定存在, 小晶粒的形状不断发生改变, 最终呈现为扁圆形, UN 相大晶粒和 U_3Si_2 相小晶粒各自的面积无明显变化, 大晶粒并未吞噬小晶粒.

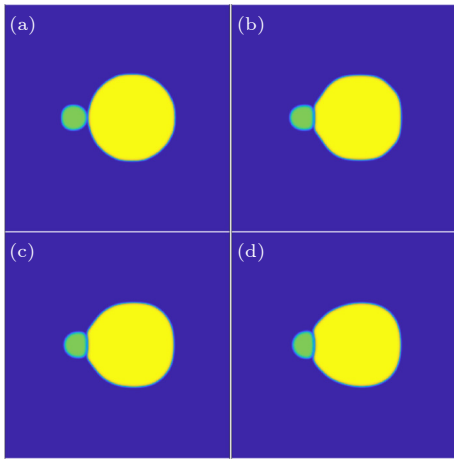


图 5 两个不同相不等大圆形晶粒演化的相场模拟 (a) $2 \times 10^4 \Delta t$; (b) $50 \times 10^4 \Delta t$; (c) $100 \times 10^4 \Delta t$; (d) $500 \times 10^4 \Delta t$.

Fig. 5. Phase-field simulation of the evolution of two unequal-sized circular grains with different phases: (a) $2 \times 10^4 \Delta t$; (b) $50 \times 10^4 \Delta t$; (c) $100 \times 10^4 \Delta t$; (d) $500 \times 10^4 \Delta t$.

在 2 个不同相不同尺寸晶粒的烧结过程中, 晶粒面积和烧结颈尺寸随时间演化的曲线如图 6 所示. 从图 6 可以看出, 不同尺寸的 2 个不同相晶粒烧结过程可以划分为 3 个阶段: 第 1 阶段, 烧结颈快速形成与增长, 大小晶粒的面积几乎不变; 第 2 阶段, 烧结颈缓慢增长, 大小晶粒的面积基本保持稳定; 第 3 阶段, 烧结颈最终达到稳态, 大小晶粒的面积仍然保持不变. 在烧结过程中, 涉及表面扩散和晶界迁移两种动力学机制, 这两种机制的传质速率分别与晶粒气孔接触表面和晶界的曲率相关 [37]. 烧结颈形成之后, 大小晶粒通过表面扩散机制向烧结颈输送物质; 由于 2 个晶粒表面曲率的不同, 导致传质速率不同, 烧结颈向尺寸较小的晶粒

一侧生长, 形成了弯曲的晶界; 在弯曲晶界曲率的驱动下, 晶界向小晶粒所在的凹侧迁移 [36]; UN 与 U_3Si_2 之间不存在相互转化, 不同相晶粒之间不相互传递物质, 物质仅在各自同相区域内, 向靠近烧结颈的一侧传输, 由晶界迁移引起的晶粒合并无法进行. 因此, 曲率不同的 2 个不同相晶粒之间不会发生“大吞小”现象.

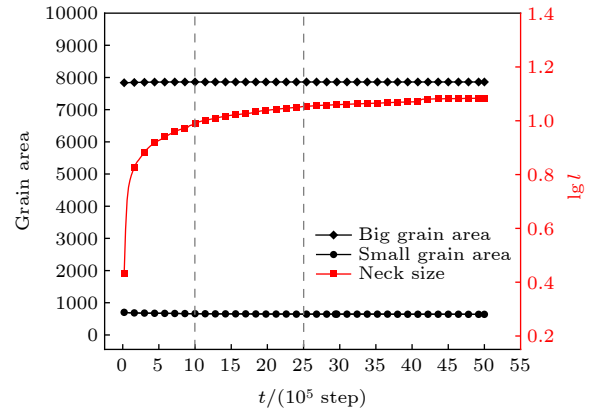


图 6 晶粒面积与烧结颈尺寸的演化曲线

Fig. 6. Evolution curves of grain area and sintering neck sizes.

4.2 多晶粒烧结

4.2.1 三叉晶界的形成与气孔收缩

图 7 为在 UN 相晶粒与 U_3Si_2 相晶粒的 4 种不同个数比例下, 3 个晶粒烧结形成的三叉晶界, 演化的总时间步长为 $10^7 \Delta t$. 从图 7(a) 和图 7(d) 可以看出, 在 3 个同相晶粒的烧结过程中, 形成了夹角为 120° 的稳定三叉晶界, 这是因为 3 条晶界具有相同的能量, 且 120° 的角度使得晶界的能量分布均匀, 从而达到了晶界能平衡的状态 [36]. 从图 7(b) 和图 7(c) 可以看出: 在 2 个同相晶粒与另一个不同相晶粒的烧结过程中, 形成了夹角偏离 120° 的三叉晶界, 这是由于两相的晶界能存在差异, 为了实现晶界能的平衡并使体系的能量最小化, 夹角需要根据不同晶界能的大小进行合理的分配; 两相晶界能的差异越大, 夹角偏离 120° 的程度越大; U_3Si_2 相晶粒具有比 UN 相晶粒更高的晶界能. 因此, 在 U_3Si_2 相晶粒一侧的夹角趋向于大于 120° , 而在 UN 相晶粒一侧的夹角趋向于小于 120° .

在 4 种不同的两相晶粒个数比例下, 三叉晶界处的气孔率随时间演化的曲线如图 8 所示. 在模拟研究中考虑了两种扩散机制, 其中表面扩散被认为

是一种非致密化过程, 主要促进烧结颈的形成和生长; 而晶界扩散被视为了一种极其重要的致密化机制^[34], 涉及到了空位的传输, 是造成三叉晶界处气孔收缩的根本原因. 从图 8 可以看出, 3 个 UN 相晶粒的气孔收缩过程明显快于其他三种情况. 在晶界扩散过程中, 物质原子从晶界处迁移向与气孔接触的颈部表面, 气孔空位沿晶界扩散并最终湮灭; 由于 U_3Si_2 相晶粒具有比 UN 相晶粒更高的晶界能, 与其形成的晶界存在更高的能量势垒, 使得晶界附近的原子或空位在扩散过程中需要克服更大的能量障碍, 导致了原子与气孔空位的扩散速率减慢. 因此, 在包含 U_3Si_2 相晶粒的 3 个晶粒烧结过

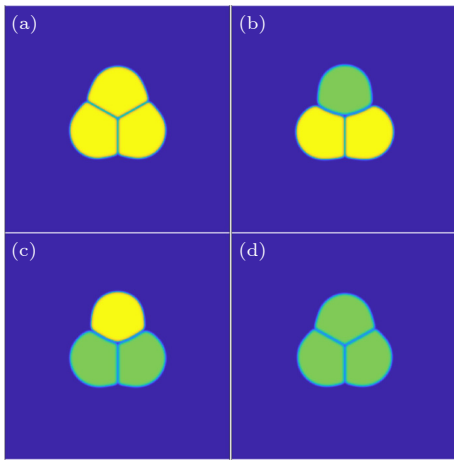


图 7 四种不同相晶粒个数比例下 3 个晶粒烧结的三叉晶界 (a) 3 个 UN 晶粒; (b) 2 个 UN 晶粒和 1 个 U_3Si_2 晶粒; (c) 1 个 UN 晶粒和 2 个 U_3Si_2 晶粒; (d) 3 个 U_3Si_2 晶粒

Fig. 7. Trident grain boundaries of the sintering of three grains with four different phase grain number ratios: (a) Three UN grains; (b) two UN grains and one U_3Si_2 grain; (c) one UN grain and two U_3Si_2 grains; (d) three U_3Si_2 grains.

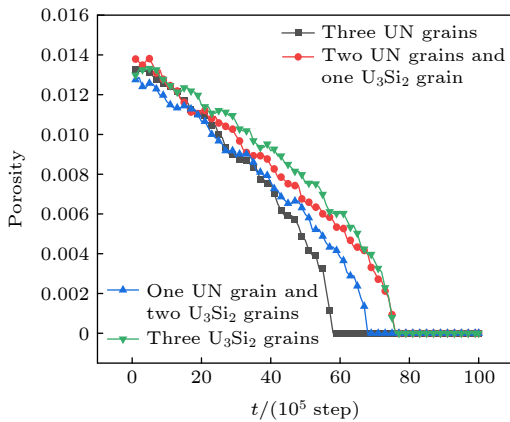


图 8 三叉晶界处气孔率的演化曲线

Fig. 8. Evolution curves of the porosity at triple grain boundaries.

程中, 三叉晶界处的气孔收缩过程显著减缓. 而在包含 UN 相晶粒与 U_3Si_2 相晶粒的情况下, 两相的晶界能、表面能和扩散系数的不同都会影响三叉晶界处的气孔收缩, 使得气孔收缩速度的快慢变得更加复杂.

4.2.2 不同体积分数比的两相组织演变

为了研究 UN 相与 U_3Si_2 相的不同体积分数比对烧结过程中 UN- U_3Si_2 两相复合燃料微观组织演变的影响, 构建了 4 种具有不同两相体积分数比的两相多晶组织, 并进行了两相烧结相场模拟. 其中, α 相的体积分数分别为 80%, 70%, 60% 和 50%, 而 β 相的体积分数则分别为 20%, 30%, 40% 和 50%. 图 9 展示了这 4 种不同体积分数比的两相多晶组织的初始形貌.

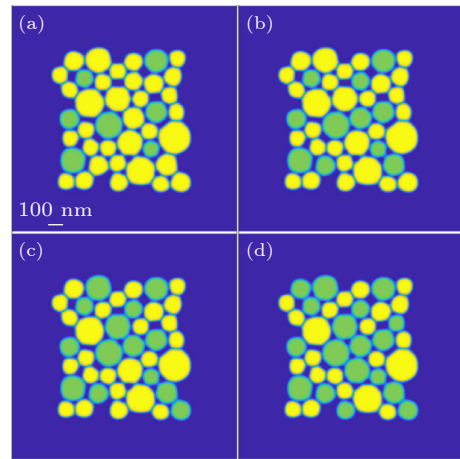


图 9 不同体积分数比的两相多晶组织初始形貌 (a) 80% α -20% β ; (b) 70% α -30% β ; (c) 60% α -40% β ; (d) 50% α -50% β

Fig. 9. Initial morphology of two-phase polycrystalline structures with different volume fraction ratios: (a) 80% α -20% β ; (b) 70% α -30% β ; (c) 60% α -40% β ; (d) 50% α -50% β .

图 10 为经过 $8 \times 10^6 \Delta t$ 的演化时间后, 4 种不同体积分数比的两相多晶烧结组织的最终形貌. 通过对比图 9 与图 10 同种情况下的组织形貌可以发现, 晶粒个数和晶粒间的气孔显著减少, 这表明同相晶粒之间发生了合并, 气孔发生了收缩, 晶界扩散起到主要作用^[34]. 从图 10(a)—(d) 可以看出, 在 α 相体积分数大于 β 相体积分数的情况下, β 相晶粒基本呈现出嵌入在 α 相基体中的分布, 表明在烧结过程中 α 相的晶粒生长占据了主导地位. 在 α 相晶粒与 β 相晶粒的接触界面处, 均存在有尺寸较小的 α 相晶粒或 β 相晶粒, 未完全与各自

同相的大晶粒发生合并. 这表明 α 相或 β 相的存在会对另一相的晶界产生阻碍作用, 阻碍其晶界的迁移, 导致其小晶粒无法快速合并, 造成其晶粒长大速率减慢. 在图 10(a)—(d) 中, 随着 β 相的体积分数增加, α 相的体积分数减少, 两相晶粒的接触面积会增大, 两相之间存在的阻碍作用也会增强. 在图 9 中, 存在只与不同相晶粒相互接触的 α 相小晶粒或 β 相小晶粒, 而在图 10 中, 这些晶粒消失或其面积明显减少, 这表明 α 相或 β 相晶粒也可以通过晶粒迁移方式, 向同相晶粒传输物质, 物质通过另一相晶粒的晶界与相界面进行扩散, 迁移的晶粒会逐渐变小, 最终消失^[38].

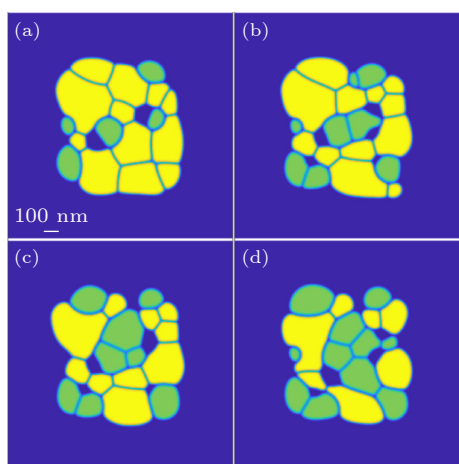


图 10 不同体积分数比的两相多晶组织最终形貌 (a) 80% α -20% β ; (b) 70% α -30% β ; (c) 60% α -40% β ; (d) 50% α -50% β

Fig. 10. Final morphology of two-phase polycrystalline structures with different volume fraction ratios: (a) 80% α -20% β ; (b) 70% α -30% β ; (c) 60% α -40% β ; (d) 50% α -50% β .

5 结 论

1) 建立了两相烧结相场模型, 将两相的表面能和晶界能与相场模型参数关联起来, 模拟了 UN- U_3Si_2 复合燃料的烧结过程. 模拟结果表明, 烧结颈形成过程中, 具有更高表面能的 U_3Si_2 相晶粒在颈部附近的表面变形程度更大; 由不同相晶粒烧结形成的最终平衡二面角, 其取值由两相的晶界能和表面能的不同比值所决定; 不同相晶粒之间不存在大晶粒吞噬小晶粒的现象.

2) 3 个晶粒烧结过程中的气孔收缩与三叉晶界演变的模拟结果表明, 为实现晶界能的平衡, 不同相晶粒烧结形成的三叉晶界夹角在较高晶界能

的 U_3Si_2 相一侧大于 120° , 在较低晶界能的 UN 相一侧小于 120° ; 晶界处的高能量势垒会限制气孔空位的晶界扩散, 使三叉晶界处的气孔收缩变慢.

3) 不同体积分数比值的 UN- U_3Si_2 两相多晶烧结组织形貌演化的模拟结果表明, 烧结组织中存在同相晶粒间的合并与气孔的收缩, 晶界扩散在两相烧结过程中起主要作用; 体积分数较大相的晶粒生长占据主导地位; 两相体系中的一相会阻碍另一相的晶界迁移; 同相晶粒之间能通过晶粒迁移方式进行物质传输.

参考文献

- [1] Kim H G, Yang J H, Kim W J, Koo Y H 2016 *Nucl. Eng. Technol.* **48** 1
- [2] Kurata M 2016 *Nucl. Eng. Technol.* **48** 26
- [3] Leenaers A, Van den Berghe S, Koonen E, Jacquet P, Jarousse C, Guigon B, Ballagny A, Sannen L 2004 *J. Nucl. Mater.* **327** 121
- [4] Zinkle S J, Terrani K A, Gehin J C, Ott L J, Snead L L 2014 *J. Nucl. Mater.* **448** 374
- [5] Terrani K A, Wang D, Ott L J, Montgomery R O 2014 *J. Nucl. Mater.* **448** 512
- [6] Johnson K D, Raftery A M, Lopes D A, Wallenius J 2016 *J. Nucl. Mater.* **477** 18
- [7] Watkins J K, Gonzales A, Wagner A R, Sooby E S, Jaques B J 2021 *J. Nucl. Mater.* **553** 153048
- [8] Wood E S, White J T, Nelson A T 2017 *J. Nucl. Mater.* **484** 245
- [9] Ortega L H, Blamer B J, Evans J A, McDevitt S M 2016 *J. Nucl. Mater.* **471** 116
- [10] White J T, Travis A W, Dunwoody J T, Nelson A T 2017 *J. Nucl. Mater.* **495** 463
- [11] Lopes D A, Uygur S, Johnson K D 2017 *J. Nucl. Sci. Technol.* **54** 405
- [12] Liu X X, Gao S S, La Y X, Yu D L, Liu W B 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 148201 (in Chinese) [刘续希, 高士森, 喇永孝, 玉栋梁, 柳文波 2024 物理学报 **73** 148201]
- [13] Liu D K, Wang Q Y, Zhang T, Zhou Y, Wang X 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 066102 (in Chinese) [刘东昆, 王庆宇, 张田, 周羽, 王翔 2024 物理学报 **73** 066102]
- [14] Wang K L, Yang W K, Shi X C, Hou H, Zhao Y H 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 076102 (in Chinese) [王凯乐, 杨文奎, 史新成, 侯华, 赵宇宏 2023 物理学报 **72** 076102]
- [15] Liu M Z, Zhang R J, Fang W, Zhang S Z, Qu X H 2012 *Acta Metall. Sin.* **48** 1207 (in Chinese) [刘明治, 张瑞杰, 方伟, 章书周, 曲选辉 2012 金属学报 **48** 1207]
- [16] Kumar V, Fang Z Z, Fife P C 2010 *Mater. Sci. Eng. A* **528** 254
- [17] Biswas S, Schwen D, Wang H, Okuniewski M, Tomar V 2018 *Comput. Mater. Sci.* **148** 307
- [18] Du L F, Yang S M, Zhu X W, Jiang J, Hui Q, Du H L 2018 *J. Mater. Sci.* **53** 9567
- [19] Hötzer J, Seiz M, Kellner M, Rheinheimer W, Nestler B 2019 *Acta Mater.* **164** 184
- [20] Wang Y U 2006 *Acta Mater.* **54** 953

- [21] Fan D, Chen L Q 1997 *Acta Mater.* **45** 611
- [22] Moelans N, Blanpain B, Wollants P 2008 *Phys. Rev. B* **78** 024113
- [23] Ahmed K, Yablinsky C A, Schulte A, Allen T, El-Azab A 2013 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **21** 065005
- [24] Cahn J W 1961 *Acta Metall.* **9** 795
- [25] Allen S M, Cahn J W 1979 *Acta Metall.* **27** 1085
- [26] Biner S B 2017 *Programming Phase-Field Modeling* (Switzerland: Springer International Publishing) p18
- [27] Holt J B, Almassy M Y 1969 *J. Am. Ceram. Soc.* **52** 631
- [28] Qi X Y, Liu W B, He Z B, Wang Y F, Yun D 2023 *Acta Metall. Sin.* **59** 1513 (in Chinese) [戚晓勇, 柳文波, 何宗倍, 王一帆, 恽迪 2023 *金属学报* **59** 1513]
- [29] Bocharov D, Gryaznov D, Zhukovskii Y F, Kotomin E A 2013 *J. Nucl. Mater.* **435** 102
- [30] Cooper M W D, Gamble K A, Capolungo L, Matthews C, Andersson D A, Beeler B, Stanek C R, Metzger K 2021 *J. Nucl. Mater.* **555** 153129
- [31] Beeler B, Baskes M, Andersson D, Cooper M W D, Zhang Y F 2019 *J. Nucl. Mater.* **514** 290
- [32] Cheniour A, Tonks M R, Gong B, Yao T K, He L F, Harp J M, Beeler B, Zhang Y F, Lian J 2020 *J. Nucl. Mater.* **532** 152069
- [33] Chockalingam K, Kouznetsova V G, van der Sluis O, Geers M G D 2016 *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **312** 492
- [34] Rahaman M N 1995 *Ceramic Processing and Sintering* (New York: Marcel Dekker) p446
- [35] Riedel H, Svoboda J 1993 *Acta Metall. Mater.* **41** 1929
- [36] Sun Z Y, Yang C, Liu W B 2020 *Acta Metall. Sin.* **56** 1295 (in Chinese) [孙正阳, 杨超, 柳文波 2020 *金属学报* **56** 1295]
- [37] Ahmed K, Allen T, El-Azab A 2016 *J. Mater. Sci.* **51** 1261
- [38] Yadav V, Vanherpe L, Moelans N 2016 *Comput. Mater. Sci.* **125** 297

Phase-field simulation of sintering process of ceramic composite fuel^{*}

Liao Yu-Xuan¹⁾ Shen Wen-Long¹⁾ Wu Xue-Zhi²⁾

La Yong-Xiao¹⁾ Liu Wen-Bo^{1)3)†}

1) (*Institute of Nuclear Science and Technology, Xian Jiaotong University, Xi'an 710049, China*)

2) (*China institute of atomic energy, Beijing 102413, China*)

3) (*Shaanxi Key Laboratory of Advanced Nuclear Energy and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China*)

(Received 9 August 2024; revised manuscript received 23 September 2024)

Abstract

Due to the limitation of existing experimental techniques, it is difficult to observe the evolution of microstructure in the sintering process in real time, resulting in a lack of in-depth understanding of the sintering mechanism of two-phase composite fuels. Therefore, it is greatly important to carry out theoretical simulation studies in the sintering process of composite fuels. In this work, a phase-field model of the two-phase sintering process of ceramic composite fuel is established, and the sintering process of UN-U₃Si₂ composite fuel is simulated by using this method. The simulation results show that during the formation of sintering neck, the surface deformation of the grains with higher surface energy is significant. The size of the final equilibrium dihedral angle formed by the two-phase double grains depends on the ratio of the grain boundary energy to the surface energy of the two phases. The phenomenon of large grains swallowing small grains does not occur between the two unequal double grains. Subsequently, the pore shrinkage and the properties of the trident grain boundary among the two-phase three grains are investigated in the sintering process. It is found that the angle of the trident grain boundary formed by the two-phase three grains deviates from 120°. The high-energy barrier at the grain boundary hinders the diffusion of the pore vacancies along the grain boundary, resulting in a slow shrinkage rate of the pore vacancies at the trident grain boundary. In addition, the simulation results of the microstructure evolution of two-phase polycrystalline sintered tissue with different volume fraction ratios show that the grain boundary diffusion plays a major role in the two-phase sintering process. The grain growth of the phase with a higher volume fraction is dominant, and there exists a hindrance to the migration of grain boundaries between two-phase grains. The phenomenon of grain migration exists between grains of the same phase.

Keywords: phase field simulation, composite fuel, sintering, grain growth, grain boundary and interface boundary

PACS: 02.70.-c, 05.70.Ce, 81.05.Mh, 81.10.Aj

DOI: 10.7498/aps.73.20241112

CSTR: 32037.14.aps.73.20241112

^{*} Project supported by the Joint Fund of the National Natural Science Foundation of China and the China Academy of Engineering Physics (NSAF Joint Fund) (Grant No. U2130105) and the Innovative Scientific Program of China National Nuclear Corporation (CNNC).

[†] Corresponding author. E-mail: liuwenbo@xjtu.edu.cn



陶瓷型复合燃料烧结过程的相场模拟研究

廖宇轩 申文龙 吴学志 喇永孝 柳文波

Phase-field simulation of sintering process of ceramic composite fuel

Liao Yu-Xuan Shen Wen-Long Wu Xue-Zhi La Yong-Xiao Liu Wen-Bo

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 210201 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20241112

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241112>

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

外加应力作用下 UO_2 中空洞演化过程的相场模拟

Phase-field simulation of void evolution in UO_2 under applied stress

物理学报. 2022, 71(2): 026103 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211440>

Fe-Cr合金晶界偏析及辐照加速晶界偏析的相场模拟

Phase field simulation of grain boundary segregation and radiation-enhanced segregation in Fe-Cr alloys

物理学报. 2021, 70(11): 116101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201840>

大晶粒 UO_2 燃料裂变气体释放行为相场模拟研究

Phase-field simulation on fission gas release behavior of large grain UO_2 fuel

物理学报. 2024, 73(6): 066102 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231773>

运动晶界与调幅分解相互作用过程的相场法研究

A phase-field study on interaction process of moving grain boundary and spinodal decomposition

物理学报. 2022, 71(7): 078101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211973>

取向角对小角度非对称倾斜晶界位错运动影响的晶体相场模拟

Phase field crystal simulation of effect of misorientation angle on low-angle asymmetric tilt grain boundary dislocation motion

物理学报. 2020, 69(14): 140504 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200133>

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>