

中子辐照奥氏体不锈钢晶内/晶间孔隙 形貌演化的相场模拟*

程大钊¹⁾ 刘彩艳²⁾ 张超然¹⁾ 屈佳辉¹⁾ 张静^{1)†}

1) (西北工业大学材料学院, 凝固技术国家重点实验室, 西安 710072)

2) (西安理工大学材料科学与工程学院, 西安 710048)

(2024年9月25日收到; 2024年10月8日收到修改稿)

奥氏体不锈钢或镍基合金等 FCC 构型的核反应堆堆芯结构件材料中易于观测到晶间孔隙或晶内各向异性孔隙。孔隙内填充有少量气体, 其形貌与晶体表面各向异性有关, 又易于在晶界形核受晶界特性调控。本文通过建立耦合晶面各向异性与孔隙-晶界交互作用的自由能泛函模拟孔隙及其形貌演化, 研究结果表明, He 气体诱导孔隙形核, He 气体浓度越高, 孔隙的孕育期越短, 形核越快, 长大速率越大。晶界为孔隙形核提供非均质位点, 孔隙优先在晶界处形核长大, 形成沿晶析出的高密度弥散孔隙。晶内孔隙呈各向异性特征, 受界面能各向异性模数、强度及晶体取向调控; 晶间高密度孔隙相互作用且受晶界影响, 各向异性形貌不显著, 位于晶界中间的孔隙近似呈现椭圆形。本文的结果与实验结果符合得较好, 启发堆芯服役构件的寿命预测和堆芯材料设计。

关键词: 孔隙, 各向异性, 相场, 辐照

PACS: 46.25.Cc, 61.72.-y, 61.80.Hg, 61.72.Qq

DOI: [10.7498/aps.73.20241353](https://doi.org/10.7498/aps.73.20241353)

CSTR: [32037.14.aps.73.20241353](https://cstr.cn/32037.14.aps.73.20241353)

1 引言

奥氏体不锈钢具有高强度、高韧性和优异的热强性, 广泛用作核反应堆堆芯结构件材料^[1]。奥氏钢不锈钢通常含有一定量的镍 (Ni) 组元以提高热稳定性, 例如 304 钢含有 8%—10% Ni, 316 L 钢含有 10%—14% Ni。镍组元在中子辐照下发生嬗变反应产生 He 气体。He 气体在基体中溶解度极低, 迁移速度快, 极易与辐照下级联碰撞产生的空位复合^[2-4], 形成“空位-He 气体”团簇, 并进一步吸收更多的 He 气体和空位, 演化为填充 He 气体的欠压孔隙, 导致材料肿胀、脆化、断裂等, 影响服役安全^[5,6]。

在过去的 30 年中, 辐照条件下, 在奥氏体不锈钢、镍、铜等^[7,8]多种面心立方 (FCC) 金属中观察到孔隙各向异性形貌, 孔隙呈现立方体、立方八面体等形貌。孔隙各向性的研究需考虑孔隙内部含有少量 He 气体, 实验上难以捕捉, 计算模拟研究物理建模复杂度高, 因而目前的研究主要针对不含气体原子的空洞开展。Cren^[9] 通过观察不同辐照剂量与温度下镍基合金中的空洞形貌, 认为各向异性空洞形貌是空洞的表面能各向异性、空洞的生长动力学与间隙原子如碳在某些表面的优先吸附这 3 种因素的共同作用所决定的。Niwase 等^[10] 通过透射电子显微镜观察了 He⁺离子和 D⁺离子辐照后 Ni 中的孔隙形貌, 发现入射粒子、辐照剂量、辐照温度均会影响 Ni 中的孔隙形貌, 且孔隙形貌会

* 国家自然科学基金 (批准号: U2267253, 51704243) 和陕西省自然科学基础研究计划 (批准号: 2022JM-238) 资助的课题。

† 通信作者. E-mail: jingzhang@nwpu.edu.cn

随孔隙的生长而变化, 该研究将形貌变化归因于孔隙内部气体压力与孔隙表面张力的共同作用, 认为孔隙内部气体压力大于平衡压力时, 孔隙最终形貌为八面体, 否则为立方体。在所有电子、氦离子和氘辐照的情况下, 大孔隙的最终形状都是立方八面体, 因为其内部气体压力小于平衡压力。此外, 在密排六方结构的 Zr 基合金中也观测到各向异性空洞^[11,12], 在 BCC 结构的 W 合金的晶界中观测到晶间多面体氦孔隙^[12]。

基于对空洞或孔隙各向异性形貌与表面能各向异性关系的认识, Liu 等^[13]在相场模型中引入与晶体取向相关的表面能项, 获得与辐照下铜中观察到的具有小平面和圆角的空洞形貌相一致的结果。Han 等^[14]通过相场法将表面能与点缺陷迁移率各向异性考虑在内, 研究了锆中的空洞演化, 与实验结果一致。在面心立方金属如 Al, Pd, Ni, Cu, Ca, Sr 等金属中, 表面能 γ 的各向异性表现为^[15] $\gamma(111) < \gamma(100) < \gamma(110)$, 在笛卡尔坐标系中, 8 个不同的 (111) 晶面互相连接形成立方八面体。伴随辐照空位和氦气体浓度增大, 孔隙形核长大过程自发进行, 伴随体系总自由能下降。这一过程为使表面能最小化, 体系力图使孔隙表面每一处都处于低表面能晶面, 从而演化为多面体各向异性形貌。综上, 孔隙各向异性由界面能各向异性所致, 受孔隙内部气体压力、点缺陷迁移率各向异性等因素影响^[15-18]。

此外, 晶界会显著影响辐照过程中的点缺陷行为和晶间孔隙形貌。晶界附近的孔隙演化与晶粒内部区域的孔隙演化有显著差异^[16,19]。一方面, He 气体在奥氏体不锈钢中具有极低的溶解度和高迁移率, 易于聚集、形核和长大; 另一方面, 晶界作为点缺陷的强吸收阱, 对其附近的气体原子和空位有很强的吸收作用, 导致 He 气体和空位在晶界偏析沉淀, 形成典型的晶间空洞或孔隙并伴随沿晶界两侧的空洞或孔隙剥蚀带^[17,20]。晶间孔隙受晶界影响, 表现为透镜状或在三叉晶界处表现为凸三角形^[18,20]。

孔隙引起的肿胀效应及高温氦脆效应与孔隙形貌、尺寸及分布有关, 而孔隙形貌受晶体界面能各向异性以及孔隙内部 He 气体影响, 且易于在晶界形核受晶界特性调控导致分布不均。常规将孔隙形貌处理为球形, 认为孔隙呈现均匀分布, 势必会导致对材料肿胀率以及材料性能的评估偏差^[13]。

因此研究中子辐照下奥氏体不锈钢中晶内孔隙各向异性形貌以及晶界对孔隙演化的影响对于研究新一代抗辐照奥氏体不锈钢具有重要意义。

相场方法采用金兹堡朗道自由能泛函最小化驱动扩散方程和力学本构方程来描述 He 气体浓度和空位浓度的空间分布和时间演化, 获得从 He 气体/空位交互到孔隙长大粗化演化全过程。该方法既能耦合成分场、温度场等多物理场的作用, 又可以正确描述由位错、晶界、沉淀等多级材料微观缺陷对孔隙带来的影响。该模拟方法以序参量连续变化表征孔隙界面, 避免了对界面位置的复杂追踪求解, 用于中子辐照模拟可以在守恒场运动方程中直接耦合速率理论将辐照下级联碰撞和嬗变反应等导致的点缺陷浓度变化考虑在内, 已被广泛地用于研究辐照下材料的微观组织演化^[21-25]。

本工作针对辐照下奥氏体不锈钢中孔隙呈现各向异性形貌现象以及晶界处孔隙优先析出现象, 构建孔隙的表面能各向异性模型及晶界促进孔隙优先析出相场模型, 首先研究了辐照下表面能各向异性参数对晶内孔隙形貌和孔隙生长动力学的影响, 进一步研究了双晶体系中 He 气体浓度、晶界以及晶粒取向对孔隙演化的影响。

2 相场模型

分别采用保守场成分序参量 c_v , c_i , c_g 描述体系中空位 (vacancy)、间隙原子 (self-interstitial) 和 He 气体 (gas) 的浓度分布, 采用非保守场相场序参量 η 来区分体系中不同的相区域, 其中, $\eta = 1$ 表示孔隙相, $\eta = 0$ 表示基体相, 在孔隙到基体的界面处 η 从 1 到 0 连续变化。

体系总自由能泛函 F 表示为成分序参量和相场序参量分布的函数, 并由自由能密度在整个体积 V 范围内的积分得到^[2]:

$$F = \int_V [h(\eta)f_{\text{solid}} + j(\eta)f_{\text{pore}} + f_{\text{ela}} + f_{\text{int}} + f_{\text{interaction}}] dV, \quad (1)$$

式中, 自由能密度包括基体化学能项 f_{solid} 、孔隙自由能项 f_{pore} 、弹性能项 f_{ela} 、界面能项 f_{int} 、相互作用项 $f_{\text{interaction}}$ 五部分。 $h(\eta) = (\eta - 1)^2$ 和 $j(\eta) = \eta^2$ 为插值函数, 基体中 $h(\eta) = 1$, $j(\eta) = 0$, 孔隙中 $h(\eta) = 0$, $j(\eta) = 1$, 在孔隙和基体的界面处, 插值函数的值从 0 到 1 平滑变化。

基体化学能项 f_{solid} 形式如下^[26]:

$$\begin{aligned} f_{\text{solid}} &= E_v^f c_v + E_i^f c_i + E_g^f c_g \\ &+ k_B T [c_v \ln(c_v) + c_i \ln(c_i) + c_g \ln(c_g) \\ &+ (1 - c_v - c_i - c_g) \ln(1 - c_v - c_i - c_g)], \end{aligned} \quad (2)$$

式中, E_v^f , E_i^f , E_g^f 分别为空位、间隙原子和 He 气体的形成能, k_B 是玻尔兹曼常数, T 为绝对温度.

孔隙自由能 f_{pore} 表达式如下^[26]:

$$f_{\text{pore}} = (c_v - 1)^2 + c_i^2 + f_g(c_g), \quad (3)$$

其中, f_g 为气体原子自由能, 依据理想气体状态方程获得

$$f_g(c_g) = \mu_g^0 c_g + c_g k_B T \ln c_g + c_g k_B T \ln(k_B T), \quad (4)$$

式中, μ_g^0 为 He 气体化学势.

(1) 式中, 弹性能密度 $f_{\text{ela}} = \frac{1}{2} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^{\text{el}} \varepsilon_{kl}^{\text{el}}$, C_{ijkl} 为弹性模量, 与晶粒取向等相关^[27]. 假设固定参考系下晶粒的弹性模量为 C_{abcd}^0 , C_{ijkl} 具体表示式如下^[27]:

$$C_{ijkl} = \sum_p \varphi_p^2 \mathbf{a}_{ia}^p \mathbf{a}_{jb}^p \mathbf{a}_{kc}^p \mathbf{a}_{ld}^p C_{abcd}^0, \quad (5)$$

式中, \mathbf{a}_{nm}^p ($n, m = 1, 2, 3$) 表示晶粒 p 相对于固定参考系旋转 θ 角度的旋转矩阵, 由于本工作为二维尺度的模拟, 故旋转矩阵为^[28]

$$\mathbf{a}_{nm}^p = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}, \quad (6)$$

$\varepsilon_{ij}^{\text{el}}$ 和 $\varepsilon_{kl}^{\text{el}}$ 为弹性应变分量, $\varepsilon_{ij}^{\text{el}} = \varepsilon_{ij} - \varepsilon_{ij}^*$, 其中 ε_{ij} 为总应变, ε_{ij}^* 为本征应变^[3]. 该模型中的本征应变为空位、间隙原子、He 气体引起的本征应变 ε_{ij}^v , ε_{ij}^i , ε_{ij}^g 以及孔隙本身引起的本征应变 ε_{ij}^p 之和^[3]. 空位、间隙原子和 He 气体的本征应变与其引起的晶格畸变有关:

$$\varepsilon_{ij}^v = \varepsilon_v^0 c_v \delta_{ij}, \quad \varepsilon_{ij}^i = \varepsilon_i^0 c_i \delta_{ij}, \quad \varepsilon_{ij}^g = \varepsilon_g^0 c_g \delta_{ij},$$

其中 ε_v^0 , ε_i^0 , ε_g^0 分别表示由空位和 He 气体引起的晶格参数 a 的膨胀系数, δ_{ij} 为 Kronecker-Delta 函数. 孔隙引起的本征应变 ε_{ij}^p 与孔隙内部 He 气体浓度和孔隙半径有关:

$$\varepsilon_{ij}^p = \frac{(P_g - 2\gamma/R)}{C_{11}},$$

P_g 为气体压力, 根据理想气体状态方程算出, γ 为孔隙界面能, R 为孔隙半径, C_{11} 为弹性模量 C_{1111} 的简略表达形式.

界面能密度 f_{int} 写为

$$f_{\text{int}} = \frac{1}{2} \kappa_v |\nabla c_v|^2 + \frac{1}{2} \kappa_i |\nabla c_i|^2 + \frac{1}{2} \kappa_g |\nabla c_g|^2 + \frac{1}{2} \kappa_\eta |\nabla \eta|^2, \quad (7)$$

式中, κ_v , κ_i , κ_g 和 κ_η 为界面处各变量的梯度项系数. 其中

$$\kappa_\eta = \gamma W = \gamma_0 \{1 + \delta [\cos N(\theta - \theta_0)]\}^2,$$

W 为界面宽度, γ_0 为与表面能有关的系数, δ 为无量纲各向异性强度, N 为无量纲各向异性模数, $\theta = \arctan(\eta_y/\eta_x)$ 为界面法线方向与晶粒取向角 θ_0 的夹角, 其中 η_y 和 η_x 分别是 η 相对于 y 方向和 x 方向的导数, θ_0 为晶粒取向角^[29].

引入晶体取向序参量 φ_p 描述不同的晶粒, p 代表晶粒序号, $\varphi_p = 1$ 表示在 p 晶粒内部, $\varphi_p = 0$ 表示在 p 晶粒外部, φ_p 取 0—1 之间的值表示在 p 晶粒的晶界处. 由于晶界处原子已失去周期性排列, 因此设置各向异性强度 $\delta = \delta_0 \sum_p \varphi_p^2$, δ_0 为无量纲各向异性强度因子, 晶粒内部 δ 为最大值 δ_0 , 晶界处 δ 较小. 晶间孔隙会与晶界发生相互作用, 因此在自由能中加入晶界与孔隙的相互作用项 $f_{\text{interaction}}$, 表示为^[30]

$$f_{\text{interaction}}(\eta, \varphi_p) = a_s \sum_p \eta^2 \varphi_p^2, \quad (8)$$

式中 a_s 为相互作用系数, 与晶界能和孔隙表面能的比值有关.

空位浓度 c_v 、间隙原子浓度 c_i 、He 气体浓度 c_g 的动力学演化分别由 Cahn-Hilliard 方程^[11], 非守恒场变量 η 由 Allen-Cahn 方程^[12] 描述.

Cahn-Hilliard 方程:

$$\frac{\partial c_v}{\partial t} = \nabla \cdot \left(M_v \nabla \frac{\delta F}{\delta c_v} \right) + \xi_v(r, t) + g_v(r, t) - R_{vi}(r, t), \quad (9)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \nabla \cdot \left(M_i \nabla \frac{\delta F}{\delta c_i} \right) + \xi_i(r, t) + g_i(r, t) - R_{vi}(r, t), \quad (10)$$

$$\frac{\partial c_g}{\partial t} = \nabla \cdot \left(M_g \nabla \frac{\delta F}{\delta c_g} \right) + \xi_g(r, t) + g_g(r, t). \quad (11)$$

Allen-Cahn 方程:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -L \frac{\delta F}{\delta \eta}. \quad (12)$$

式中, M_v, M_i, M_g 分别为空位、间隙原子、He 气体的迁移率, $M_v = D_v c_v / k_B T$; $M_i = D_i c_i / k_B T$; $M_g = D_g c_g / k_B T$; D_v, D_i, D_g 分别为空位、间隙原子、

He 气体的扩散系数; $\xi_v(r, t)$, $\xi_i(r, t)$, $\xi_g(r, t)$ 分别为 t 时刻位置 r 处浓度起伏, 可以将它们理解为临界亚空位团簇的形成或溶解导致点缺陷的捕获或释放而产生; $R_{vi}(r, t)$ 为空位和间隙原子的复合项; $g_i(r, t)$, $g_g(r, t)$ 为辐照点缺陷产生率, 分别表示空位、间隙和 He 气体的浓度产生率. 其中, 空位和间隙由级联碰撞产生, 因此 g_v 和 g_i 相等, He 气体则通过嬗变反应发生; L 为动力学系数; 辐照下, 由于级联碰撞和嬗变反应, 体系中每个位置会随机产生一定数量的空位、间隙原子和 He 气体, 若位点处发生级联碰撞则该位置空位浓度 c_v 和间隙原子浓度 c_i 增加 g_v^0 , 若发生嬗变反应, He 气体浓度 c_g 增加 g_g^0 . 由于孔隙内部没有基体原子存在, 无法发生级联碰撞和嬗变反应, 自然也无法产生空位、间隙原子和 He 气体, 故:

$$g_m = \begin{cases} g_m^0, & \eta < 0.8 \\ 0, & \eta > 0.8 \end{cases} \quad (m = v, i, g). \quad (13)$$

研究单晶内孔隙演化时, 基体中 c_g 设置为 0.03, 远超其平衡浓度 c_g^{eq} , $c_g^{\text{eq}} = \exp(-E_g^f/k_B T)$; 基体空位浓度 c_v 设置为 0.2, 远超其平衡浓度 c_v^{eq} , $c_v^{\text{eq}} = \exp(-E_v^f/k_B T)$; 孔隙内部 He 气体浓度 c_g 设置为 0.6, 间隙原子浓度 c_i 设置为平衡浓度 c_i^{eq} , $c_i^{\text{eq}} = \exp(-E_i^f/k_B T)$, g_v^0 设置为 10^{-5} , g_g^0 设置为 0. 晶内孔隙的形核长大行为较晶间孔隙简单, 因此首先考虑表面能各向异性参数对晶内孔隙长大的影响, 包括各向异性模数 N 和各向异性强度 δ . 辐照下材料中的孔隙诱导肿胀包括孔隙形核与孔隙长大, 但在采用理论和数值模拟方法研究孔隙时, 通常将其视为两个独立的过程 [8,31,32], 认为孔隙形核阶段对孔隙的平衡形状几乎没有影响 [13]. 研究单晶内孔隙

表 1 模型中采用的无量纲化参数
Table 1. Dimensionless parameters used in the model.

参数	值	参数	值
特征时间 t_0/s	5×10^{-3}	空位迁移率 M_v^*	1
特征长度 l_0/nm	20	间隙原子迁移率 M_i^*	1
空位梯度系数 κ_v^*	1	He 气体迁移率 M_g^*	2
间隙原子梯度系数 κ_i^*	1	He 气体形成能 E_g^f/eV	$4^{[33]}$
He 气体扩散系数 κ_g^*	1	空位形成能 E_v^f/eV	$2^{[33]}$
表面能系数 γ_0^*	1	间隙原子形成能 E_i^f/eV	$2^{[33]}$
He 气体化学势 μ_g°/eV	$0.4^{[26]}$	弹性模量 $C_{11}^0 (C_{1111}^0)/\text{GPa}$	$169^{[3]}$
相互作用系数 a_s	1.1	弹性模量 $C_{12}^0 (C_{1122}^0)/\text{GPa}$	$131^{[3]}$
绝对温度 T/K	710	弹性模量 $C_{44}^0 (C_{1212}^0)/\text{GPa}$	$84.5^{[3]}$
动力学系数 L^*	1		

演化时关注的重点为表面能各向异性对孔隙形貌及孔隙长大的影响, 因此单晶内孔隙演化的研究忽略孔隙的形核过程, 模拟区域设置为 64×64 个网格点 (网格点宽度为 l_0), 在模拟区域中心预置一个初始半径为 $5l_0$ 的圆形孔隙.

研究双晶中孔隙演化时, 模拟区域设置为 512×512 个网格点, 在模拟区域中间设置一个宽度为 $48l_0$ 的平直晶界, 晶界左侧晶粒为 φ_1 , 右侧晶粒为 φ_2 , 左侧晶粒 φ_1 取向角 θ_0 统一设置为 0° , 而右侧晶粒 φ_2 取向角 θ_0 不固定, 晶粒和晶界并不演化, 各向异性强度 δ 为 0.2, 各向异性模数 N 不固定. 基体中空位浓度 c_v 设置为 0.243, 间隙原子浓度 c_i 设置为平衡浓度 c_i^{eq} , He 气体浓度 c_g 不固定, g_v^0 设置为 10^{-5} , g_g^0 设置为 0, 同时在初始浓度中设置一定的浓度起伏, 并通过随机热起伏使空位浓度 c_v 和 He 气体浓度 c_g 随机起伏导致孔隙形核以及后续不断长大, 以此来研究晶界对孔隙形核、长大的影响.

物理学参量的无量纲化处理具体如下:

$$\begin{aligned} l^* &= l/l_0; \quad t^* = t/t_0; \\ M_v^* &= M_v \cdot k_B T/D_v; \quad M_i^* = M_i \cdot k_B T/D_v; \\ M_g^* &= M_g \cdot k_B T/D_v; \quad f_{\text{pore}}^* = f_{\text{pore}}/k_B T; \\ f_{\text{interaction}}^* &= f_{\text{interaction}}/k_B T; \quad \kappa_v^* = \kappa_v/(l_0^2 k_B T); \\ \kappa_g^* &= \kappa_g/(l_0^2 k_B T); \quad \gamma_0^* = \gamma_0/(l_0^2 k_B T); \\ g_i^* &= g_i \cdot t_0; \quad g_v^* = g_v \cdot t_0; \quad g_g^* = g_g \cdot t_0; \\ \xi_v^* &= \xi_v \cdot t_0; \quad \xi_i^* = \xi_i \cdot t_0; \quad \xi_g^* = \xi_g \cdot t_0; \quad L^* = L \cdot k_B T \cdot t_0. \end{aligned}$$

其中 $l_0 = \sqrt{\gamma_0/k_B T}$ 为特征长度, $t_0 = l_0^2/D_v$ 为特征时间. 计算采用周期性边界条件, 本工作中所使用的参数在表 1 列出 [3,26,33].

3 结果与讨论

表面能各向异性、He 气体浓度、晶界与孔隙相互作用等因素会对孔隙的各向异性形貌产生影响，本节将首先讨论晶内孔隙形貌的各向异性特征，并在此基础上进一步讨论 He 气体浓度及晶界与孔隙相互作用对双晶体系中各向异性孔隙演化的影响。

3.1 晶内孔隙形貌各向异性特征

首先排除晶界影响，以晶内孔隙为例研究界面能各向异性特征对孔隙各向异性形貌的影响。通过改变界面能梯度系数的各向异性模数 N 和各异性强度 δ 引入晶面各向异性来研究孔隙形貌演化。各向异性模数 N 取决于晶体结构，本文的模拟在二维方向进行，由于面心立方金属中的各种各向异性孔隙在二维平面的投影均为四边形和六边形形貌^[9]，因此分别采用各向异性模数 N 为 0, 4, 6 模拟无各向异性（各向同性）、四边形、六边形孔隙。各向异性强度 δ 取决于不同表面的表面能 γ 的差值，差值越大则 δ 越大，其中通过第一性原理计算得到，在面心立方结构的纯 Fe 中， $\gamma(100)$ 为 1.049 eV/atom， $\gamma(111)$ 为 0.642 eV/atom， $\gamma(110)$ 为 1.470 eV/atom，3 种晶面族的界面能存在明显差异。本文设置了 δ 分别为 0.05, 0.10, 0.15, 0.20 和 0.25，共 5 组各向异性强度量来研究孔隙各向异性生长及形貌。

不同各向异性模数 N 及不同各向异性强度 δ 情况下 $20000t_0$ 时空位浓度 c_v 的分布如图 1(a) 所示。观察在各向异性强度 δ 相同条件下各向异性模数 N 对孔隙演化影响，发现当各向异性模数 N 为 0 时，孔隙呈现各向同性生长，始终保持圆形。 N 为 4 时，孔隙倾向于沿着表面能较小的平面生长，而在表面能较大的平面生长缓慢，呈现各向异性生长，最终从初始的圆形演化为四边形；当各向异性模数 N 为 6 时，孔隙呈现各向异性生长，演化为六边形。实验中不锈钢辐照后观察到四边形和六边形形貌的孔隙，如图 1(c) 中红色圆圈所示，模拟得到的四边形和六边形孔隙形貌与实验中一致^[8]。 $20000t_0$ 时不同各向异性孔隙周围的应力分量 $\sigma_{11}, \sigma_{12}, \sigma_{22}$ 分布如图 1(b) 所示，其中 σ_{11} 表示沿 x 方向的应力分量， σ_{22} 表示沿 y 方向的应力分量， σ_{12} 对应于 $x-y$ 平面上的剪应力。不同各向异性孔隙周围的应力场分布略有差异，但孔隙内的应力均

为负且小于基体中的应力，这对应于欠压状态，这是由于空位流入而引起的孔隙体积增加大于 He 气体的流入导致孔隙中 He 气体浓度的增大，即表面张力产生的向内的压力大于 He 气体产生的压力，孔隙的本征应变为负，这与文献 [28,34] 中模拟得到的结果相一致。

观察图 1(a) 中 δ 变化时孔隙的演化结果，发现在各向异性模数为 4 或 6 的情况下，随着各向异性强度 δ 逐渐增大，孔隙的各向异性生长现象变得显著，孔隙的形貌从圆形转变为多边形，各向异性强度 δ 越大，多边形孔隙边与边之间的角度越锐利。对比图 1(a) 中 δ 为 0.2 和 0.25 的结果，发现当各向异性强度 δ 为 0.2 时，孔隙不同平面之间的夹角已非常尖锐，进一步增大各向异性强度 δ 的值，孔隙的形貌不再发生变化。

分别统计了各向异性强度 δ 为 0.2，各向异性模数 N 分别为 0, 4 和 6 时孔隙半径随时间的变化，如图 1(d) 所示，以及各向异性模数 N 为 4 时各向异性强度 δ 为 0.05, 0.10, 0.15, 0.20 和 0.25 时孔隙半径随时间的变化，如图 1(e) 所示，结果表明孔隙半径随时间变化曲线近似为抛物线型，演化时间为 $12000t_0$ 时，基体中的空位几乎都被孔隙吸收，孔隙的半径趋于平衡值；各向异性模数 N 和各向异性强度 δ 只会影响孔隙形貌，对孔隙生长速率影响不大。

当各向异性模数 N 为 0 时，孔隙各个方向的表面能 γ 均相同，孔隙倾向于生长成球形以降低总表面积从而降低总表面能，因此呈现各向同性生长。孔隙长大过程表面积持续增大，为降低体系表面能，从形状上孔隙倾向于选择相同体积下具有更小表面积的球形；在局部区域上孔隙更倾向于选择具有低表面能的晶面作为表面，长大过程力图使孔隙的每个局部表面均是低表面能晶面，从而促使孔隙长大过程伴随多边形化，并最终演化成四边形或六边形的特征形貌。孔隙长大过程表面积增大总是引起总表面能增大，但合适的孔隙形貌可以使总表面能尽可能有限的增大。因而，孔隙形貌是具有低表面能晶面的多边形形状与具有小表面积的球形形状相互竞争的结果。

3.2 晶间孔隙演化及形貌

中子或离子辐照实验表明孔隙容易在晶界处优先形核长大^[18,26,35]。因此，本节以双晶为例引入

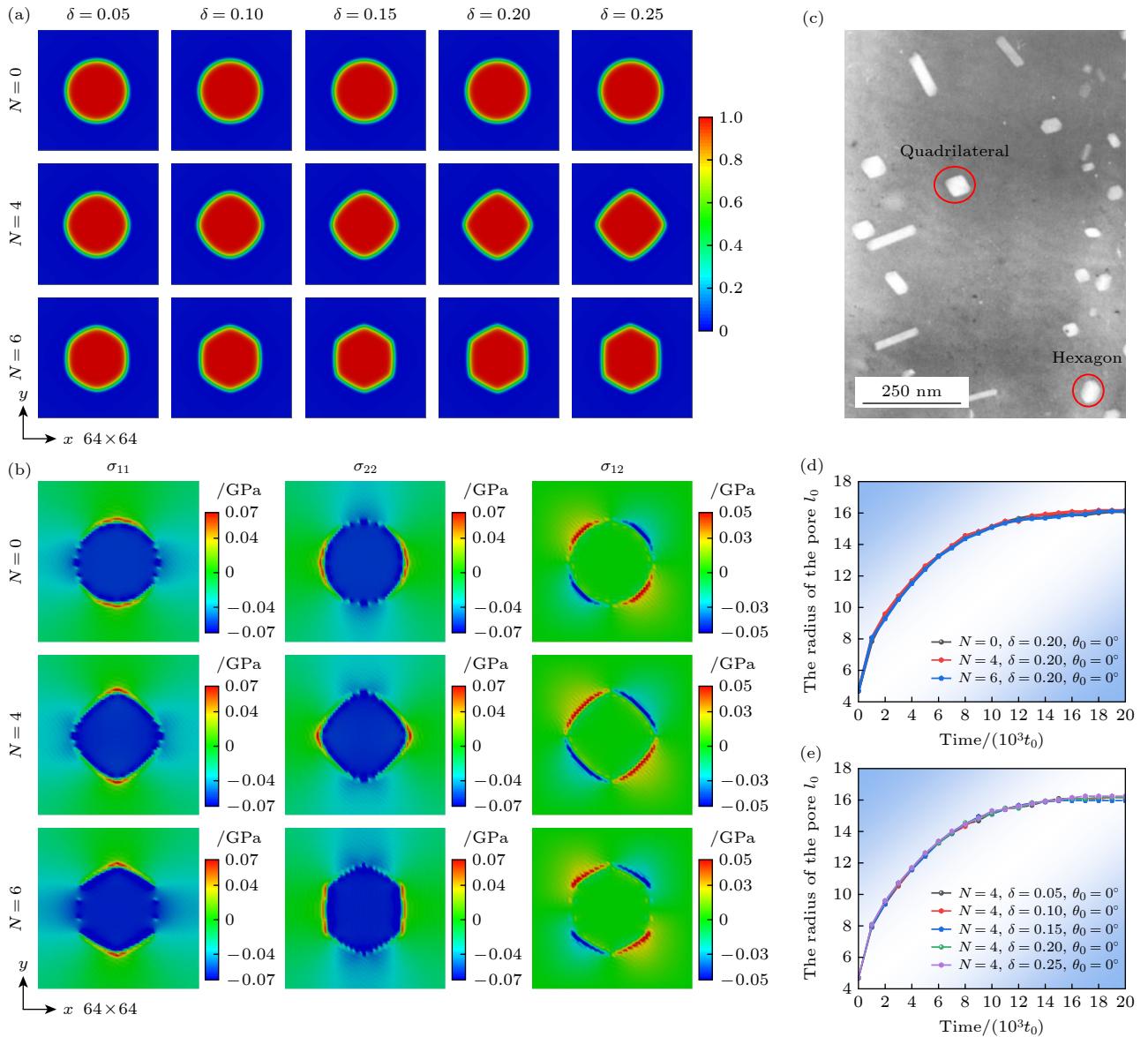


图 1 不同各向异性模数 N 和不同各向异性强度 δ 情况下演化结果及实验观察到的各向异性孔隙 (a) $2.0 \times 10^4 t_0$ 时空位浓度场; (b) δ 为 0.2, $2.0 \times 10^4 t_0$ 时不同各向异性孔隙周围的应力场分布; (c) 辐照下奥氏体不锈钢中观察到的孔隙^[8]; (d) 不同各向异性模数 N 下孔隙半径随演化时间的变化曲线; (e) 不同各向异性强度 δ 下孔隙半径随演化时间的变化曲线

Fig. 1. Evolution results under different anisotropic modulus N and anisotropic strength δ and anisotropic pores observed experimentally: (a) $2.0 \times 10^4 t_0$ vacancy concentration field; (b) distribution of stress field around different anisotropic pores when δ is 0.2 and time is $2.0 \times 10^4 t_0$; (c) the pores observed in irradiated austenitic stainless steel^[8]; (d) variation curve of pore radius with evolution time under different anisotropy modulus N ; (e) variation curve of pore radius with evolution time under different anisotropy intensities δ .

平直晶界, 考察晶界对辐照气体和空位的影响. 考虑辐照条件下, 点缺陷浓度远超平衡值, 因此分别设置基体中 c_g 为 3.47×10^{-2} , 6.94×10^{-2} , 1.04×10^{-1} , 以研究基体中 He 气体浓度对双晶体系中孔隙形核长大的影响. 不考虑各项异性时的孔隙演化结果如图 2(a) 所示, 考虑各项异性时的孔隙演化结果如图 2(b) 所示. 在 3 种浓度条件下, 孔隙均优先在晶界处形核长大, 晶间孔隙细小弥散. 晶内孔隙在晶

间孔隙形核并长大到一定尺寸后析出. 晶界吸收空位和气体原子, 引起晶界处空位和气体原子的偏析簇聚; 同时晶界为孔隙形核提供非均质形核位点, 加速孔隙形核长大.

观察图 2(a), 当基体 c_g 为 3.47×10^{-2} 时, $6000 t_0$ 晶界处出现孔隙核胚, $14000 t_0$ 晶粒内部出现孔隙核胚; 基体 c_g 为 6.94×10^{-2} 时, $4500 t_0$ 晶界处出现孔隙核胚, $7500 t_0$ 晶粒内部出现孔隙核胚; 当基体

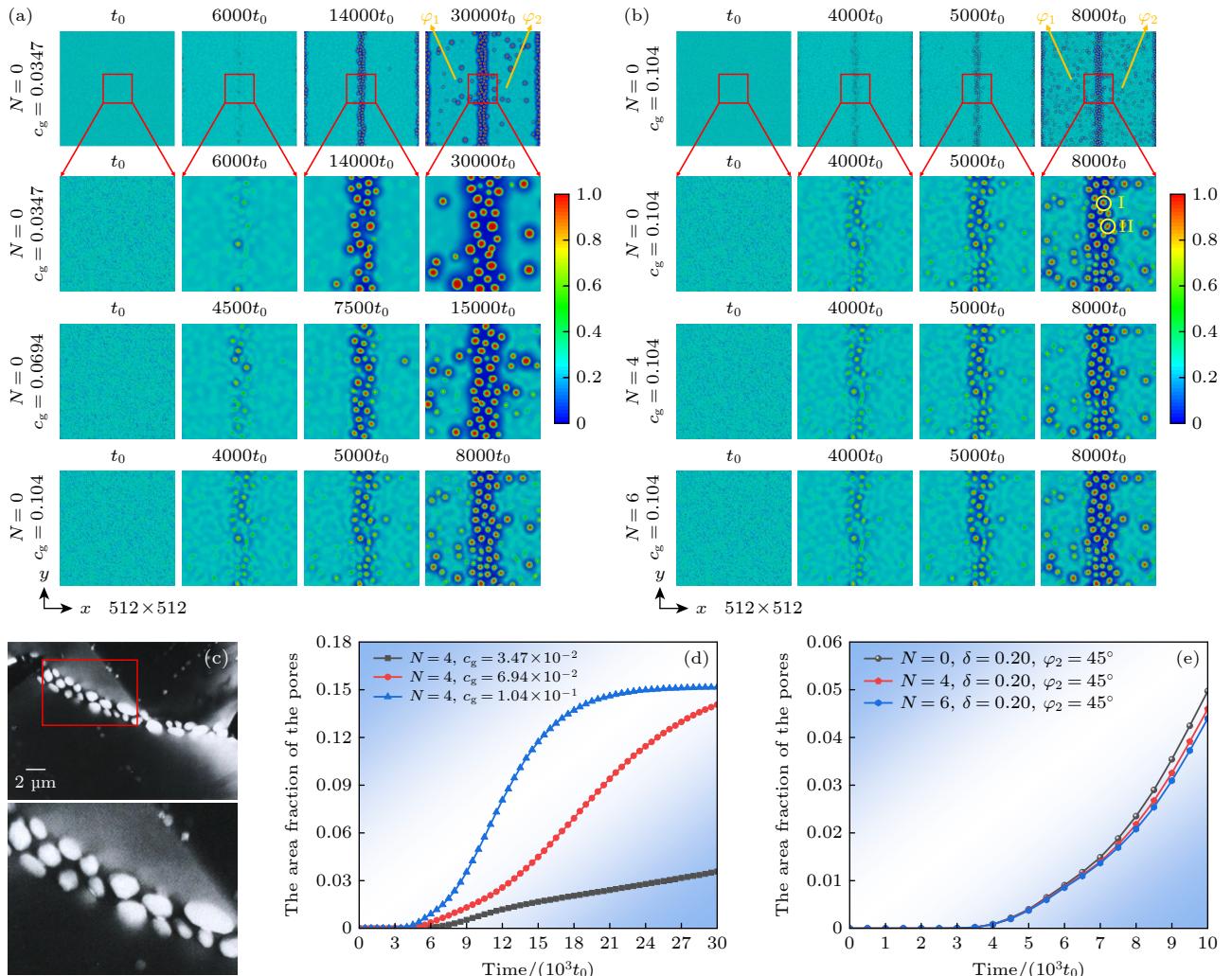


图 2 He 气体浓度 c_g 和各向异性模数 N 对孔隙的形核与长大的影响 (a) N 为 0, He 气体浓度 c_g 不同情况下孔隙的形核与长大; (b) He 气体浓度 c_g 为 1.04×10^{-1} , 各向异性模数 N 为 0, 4 和 6 情况下孔隙的形核与长大; (c) 实验中 1023 K 温度下辐照 25 h 的 AISI 316 SS 不锈钢中观测到的孔隙形貌^[36]; (d) 不同 He 气体浓度 c_g 下孔隙面积分数随时间的变化曲线; (e) 不同各向异性模数 N 下孔隙面积分数随时间的变化曲线

Fig. 2. Influence of He gas concentration c_g and anisotropy modulus N on pores nucleation and growth: (a) Pores nucleation and growth when N is 0 and He gas concentration c_g is different; (b) pores nucleation and growth when He gas concentration c_g is 1.04×10^{-1} and anisotropy modulus N is 0, 4 and 6; (c) pores morphology was observed in AISI 316 SS stainless steel irradiated for 25 h at 1023 K temperature^[36]; (d) variation curve of pore area fraction with time under different He gas concentration c_g ; (e) variation curve of pore area fraction with time under different anisotropy modulus N .

c_g 为 1.04×10^{-1} 时, $4000t_0$ 晶界处孔隙核胚出现, $5000t_0$ 晶粒内部就已经出现孔隙核胚。晶间孔隙的形核孕育期较晶内孔隙形核孕育期短, 晶界诱导孔隙优先形核长大。此外, He 气体对孔隙形核具有明显的诱导作用, 随基体 He 气体浓度的增大, 晶内/晶间孔隙的形核孕育期均缩短。

分别统计 3 种不同气体浓度下孔隙的面积分数变化, 结果如图 2(d) 所示。基体 c_g 分别为 3.47×10^{-2} , 6.94×10^{-2} , 1.04×10^{-1} 时, 孔隙的面积分数增长曲线差异较大: $25000t_0$ 时, c_g 为 1.04×10^{-1} 情况下孔隙的面积分数已达到最大值, 不再随演化时间

增长, 而 c_g 为 3.47×10^{-2} 和 6.94×10^{-2} 情况下孔隙的面积分数仍在增长; 且气体浓度越高, 孔隙长大的速度越快, 达到平衡的用时越短, 孔隙总体积也越大。可以认为 c_g 的增大只会加快孔隙的形核与长大, 但是无法改变达到稳态时孔隙的面积分数。

进一步研究了气体浓度 c_g 为 1.04×10^{-1} 双晶体系中各向异性模数 N 对孔隙演化的影响, 设置左侧晶粒 φ_1 取向角 θ_0 为 0° , 右侧晶粒 φ_2 取向角 θ_0 为 45° , 图 2(b) 给出了各向异性模数 N 分别取 0, 4, 6 时的情况。各向异性模数 N 为 0 时, 左侧晶粒 φ_1 和右侧晶粒 φ_2 中, 晶内孔隙的形貌均为圆

形; 晶间孔隙的形貌受到晶界与孔隙相互作用的影响并未完全呈现圆形形貌, 而是部分为圆形, 如图 2(b) 中黄色圆圈 I 中孔隙所示, 部分为椭圆形, 如图 2(b) 中黄色圆圈 II 中孔隙所示。各向异性模数 N 为 4 和 6 的情况下, 由于晶界两侧晶粒取向不同, 两晶粒内的孔隙形貌存在差异, 左侧晶粒内部孔隙形貌与图 1(a) 中 N 为 4, δ 为 0.2 时结果相似, 而右侧晶粒 φ_2 内部孔隙形貌相较于左侧晶粒 φ_1 内部孔隙形貌旋转了一定角度; 对于晶间孔隙, 其形貌受到表面能各向异性以及晶界与孔隙相互作用的共同影响, 在晶界与孔隙相互作用的影响下, 晶间孔隙不再呈现明显的各向异性, 越靠近晶

界中心, 孔隙的各向异性越不明显, 部分孔隙近似呈现椭圆形, 孔隙形貌与图 2(c) 所示的实验中 1023 K 温度下辐照 25 h 的 AISI 316 SS 不锈钢中观测到的孔隙形貌一致^[36]。分别统计了不同各向异性模数下双晶体系中孔隙面积分数随时间演化, 结果如图 2(e) 所示, 表明各向异性模数 N 对孔隙形核和长大无明显影响。

进一步研究晶粒间的取向角 θ_0 对晶内/晶间孔隙演化的影响, 晶粒取向与晶内孔隙取向变化的关系如图 3(a) 所示。随着晶粒取向角 θ_0 发生变化, 孔隙的各向异性生长也随之变化, 相对于晶粒取向角 θ_0 为 0° 时的孔隙, 当晶粒取向角 θ_0 为 30° 时, 孔隙

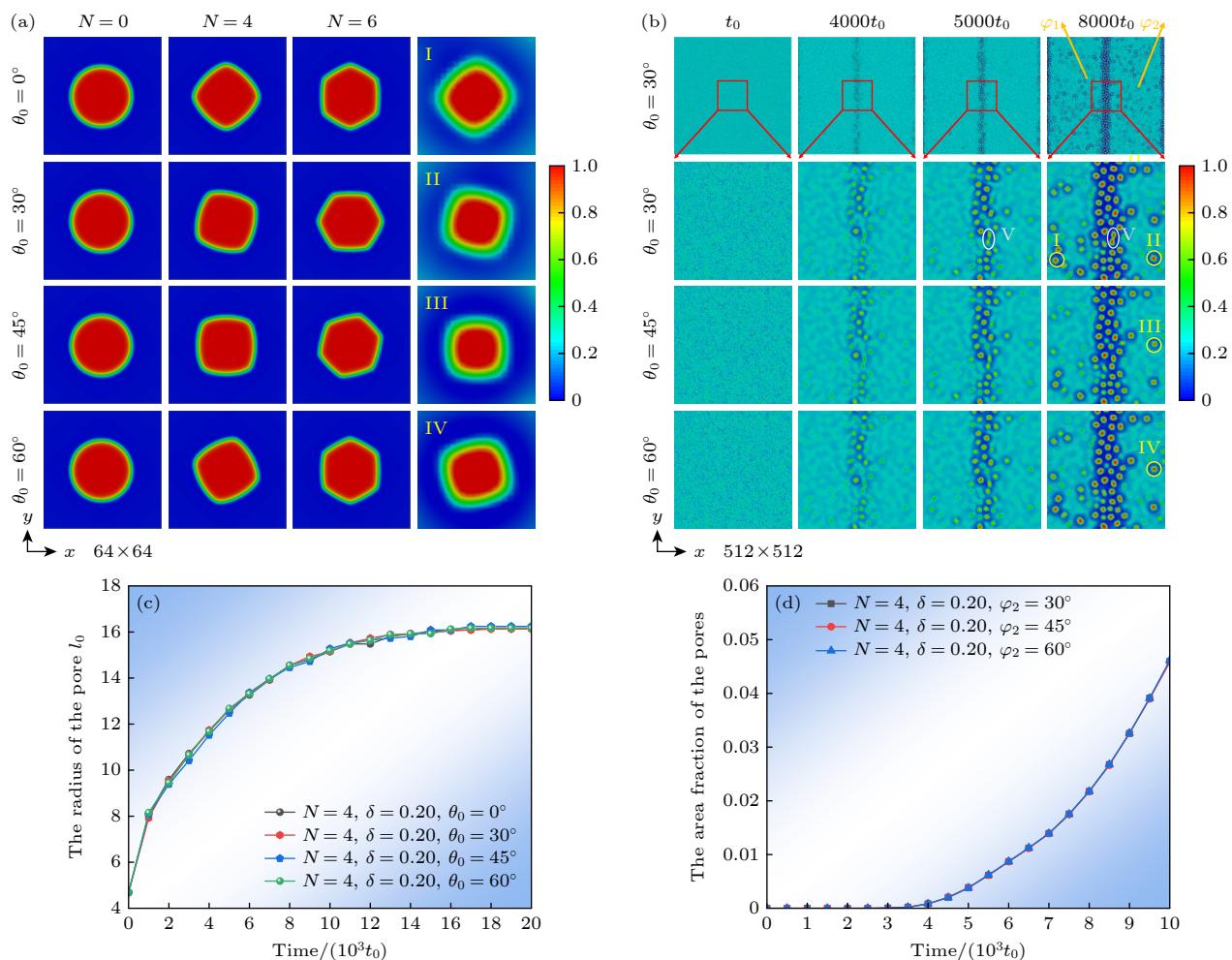


图 3 晶粒取向角 θ_0 对孔隙演化的影响 (a) 晶粒取向角 θ_0 为 $0^\circ, 30^\circ, 45^\circ$ 和 60° 时晶内孔隙长大; (b) 右侧晶粒 φ_2 取向角 θ_0 为 $30^\circ, 45^\circ$ 和 60° 双晶体系中孔隙演化 (图左侧标注 θ_0 为右侧晶粒 φ_2 的取向角); (c) 不同晶粒取向角 θ_0 情况下晶内孔隙半径随演化时间变化曲线; (d) 右侧晶粒取向角不同时孔隙面积分数随演化时间变化曲线

Fig. 3. Effect of grain orientation angle θ_0 on pore evolution: (a) When the grain orientation angles are $0^\circ, 30^\circ, 45^\circ$ and 60° , the intrachrystalline pores growth; (b) pores evolution in the twin-crystal system when the right grain orientation angle θ_0 is $30^\circ, 45^\circ$ and 60° (the left side of the figure is marked with the right grain orientation angle θ_0); (c) variation curve of the pores radius with evolution time under different grain orientation angles θ_0 ; (d) variation curve of the area fraction of pores with evolution time when the orientation angle of the right grain is different.

也随之逆时针旋转 30° ; 而当晶粒取向角 θ_0 为 45° 时, 孔隙也随之逆时针旋转 45° , 多边形孔隙取向形貌随晶粒取向角 θ_0 变化而变化。这是由于晶粒取向发生变化时, 低表面能晶面取向也会随之变化, 而孔隙始终倾向于沿着表面能最小的平面长大。分别统计了晶粒取向角 θ_0 分别为 0° , 30° , 45° 和 60° 时孔隙的半径随演化时间的变化, 结果如图 3(c) 所示, 不同晶粒取向角 θ_0 下, 孔隙半径随演化时间变化基本一致, 表明晶粒取向角 θ_0 对孔隙的生长速率无明显影响。

在图 3(b) 双晶体系中, 选取图中黄色圆圈 I, II, III 和 IV 所示晶粒内部孔隙并放大, 如图 3(a) 最右侧所示, 黄色圆圈 I 所选左侧晶粒 φ_1 内部孔隙取向与图 3(a) 中晶粒取向角 θ_0 为 0° 、各向异性模数 N 为 4 时孔隙形貌相似, 黄色圆圈 II, III 和 IV 所选右侧晶粒 φ_2 内部孔隙形貌随右侧晶粒取向角 θ_0 变化, 并与相应的图 3(a) 中向异性模数 N 为 4 时孔隙形貌相似。对于晶间孔隙, 由于晶界会削弱晶粒各向异性对于孔隙的影响, 因此晶间孔隙的演化随右侧晶粒取向角 θ_0 变化不大。如图 3(b) 中白色圆圈 V 所示, $5000t_0$ 时右侧晶粒取向角为 30° 情况下两个孔隙核胚距离较近, 当两个距离较近的孔隙核胚同时长大到彼此接触时 ($8000t_0$), 由于孔隙的表面能趋向于降低, 两个较小的圆形孔隙就会倾向于合并成一个较大的椭圆形孔隙。分别统计了右侧晶粒 φ_2 取向角 θ_0 为 30° , 45° 和 60° 情况下整个体系中孔隙面积分数随时间的变化, 统计结果如图 3(d) 所示。结果显示, 右侧晶粒 φ_2 取向角 θ_0 为 30° , 45° 和 60° 情况下, 孔隙的面积分数随时间的变化差异不大, 表明各向异性模数 N 对孔隙的形核和长大的影响较小。

4 结 论

本文通过耦合表面能各向异性和孔隙-晶界相互作用的相场模型, 研究了表面能各向异性模量、各向异性强度对晶内孔隙演化的影响, 以及基体 He 气体浓度、晶界和晶粒取向对双晶结构中孔隙演化的影响规律。主要结论如下:

1) 通过调控表面能各向异性模量 N 和各向异性强度, 获得了圆形、四边形、六边形等形貌各异的晶内孔隙, 其中多边形孔隙的边数取决于各向异性模量 N , 边与边之间的夹角锐化程度取决于

各向异性强度。对比不同参数条件下孔隙的长大速率表明, 孔隙长大速率对各向异性孔隙形貌无明显依赖。

2) 通过在相场模型中引入孔隙与晶界交互作用, 研究晶界和晶体取向对孔隙演化的影响。结果表明, He 气体诱导孔隙形核, 基体中 He 气体浓度越大, 晶内和晶间孔隙孕育期越短; 晶界诱导孔隙形核, 晶界吸收空位和气体原子, 诱导孔隙优先在晶界处形核长大, 形成弥散分布的晶间孔隙。He 气体浓度越大, 孔隙的面积分数增长的越快, 更快达到稳态。

3) 多晶体系的晶间孔隙受晶界影响, 其形貌与晶内孔隙有明显差异。晶内孔隙形貌仅与材料各向异性参数有关, 多边形取向随晶粒取向角变化而变化。相对晶内孔隙, 晶间孔隙的各向异性形貌对材料各向异性参数无明显依赖性, 受晶界影响晶间孔隙多呈现椭圆形。由晶间孔隙粗化溶合形成的孔隙, 椭圆形形貌尤为显著。

参考文献

- [1] Yang W D 2000 *Reactor Materials Science* (Beijing: Atomic Energy Press) pp18–19 (in Chinese) [杨文斗 2000 反应堆材料学 (北京: 原子能出版社) 第 18—19 页]
- [2] Yang H, Feng Z H, Wang H R, Zhang Y P, Chen Z, Xin T Y, Song X R, Wu L, Zhang J 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 054601 (in Chinese) [杨辉, 冯泽华, 王贺然, 张云鹏, 陈铮, 信天缘, 宋小蓉, 吴璐, 张静 2021 物理学报 **70** 054601]
- [3] Liu C Y, Feng Z H, Zhang Y P, Yu K, Wu L, Ma C, Zhang J 2024 *Acta Metall. Sin.* **60** 1279 (in Chinese) [刘彩艳, 冯泽华, 张云鹏, 余康, 吴璐, 马聪, 张静 2024 金属学报 **60** 1279]
- [4] Wang H R, Yu K, Wang J C, Wu L, Zhang W, Zhang J 2024 *Mech. Mater.* **189** 104865
- [5] Zinkle S J, Busby J T 2009 *Mater. Today* **12** 12
- [6] Nazarov A V, Mikheev A A, Melnikov A P 2020 *J. Nucl. Mater.* **532** 152067
- [7] Zinkle S J, Farrell K 1989 *J. Nucl. Mater.* **168** 262
- [8] Was G S 2017 *Fundamentals of Radiation Materials Science: Metals and Alloys* (New York: Springer) pp379–484
- [9] Chen C W 1973 *Phys. Status Solidi. A* **16** 197
- [10] Niwase K, Ezawa T, Tanabe T, Fujita F E 1988 *J. Nucl. Mater.* **160** 229
- [11] Griffiths M, Styles R C, Woo C H, Phillip F, Frank W 1994 *J. Nucl. Mater.* **208** 324
- [12] El-Atwani O, Hattar K, Hinks J A, Greaves G, Harilal S S, Hassanein A 2015 *J. Nucl. Mater.* **458** 216
- [13] Liu W B, Wang N, Ji Y Z, Song P C, Zhang C, Yang Z G, Chen L Q 2016 *J. Nucl. Mater.* **479** 316
- [14] Han G M, Wang H, Lin D Y, Zhu X Y, Hu S Y, Song H F 2017 *Comp. Mater. Sci.* **133** 22
- [15] Vitos L, Ruban A V, Skriver H L, Kollár J 1998 *Surf. Sci.* **411** 186
- [16] Tschopp M A, Solanki K N, Gao F, Sun X, Khaleel M A, Horstemeyer M F 2012 *Phys. Rev. B* **85** 064108

- [17] Gao Z Y, Huang J, Liu H C, Ge W, Luo F P, Zhang B W, Liu G Y, Sun B R, Shen T D, Xue J M, Wang Y G, Wang C X 2023 *Scripta Mater.* **232** 115497
- [18] Yan Z F, Yang T F, Lin Y R, Lu Y P, Su Y, Zinkle S J, Wang Y G 2020 *J. Nucl. Mater.* **532** 152045
- [19] Hirth J P, Pond R C, Lothe J 2007 *Acta Mater.* **55** 5428
- [20] Jiang Y B, Liu W B, Li W J, Sun Z Y, Xin Y, Chen P H, Yun D 2021 *Comp. Mater. Sci.* **188** 110176
- [21] Qi X Y, Liu H, Wang Y 2023 *Acta Metall. Sin.* **59** 1513 (in Chinese) [戚晓勇, 柳何, 王晖 2023 金属学报 **59** 1513]
- [22] Liu X X, Liu W B, Li B Y, He X F, Yang C X, Yun D 2022 *Acta Metall. Sin.* **58** 943 (in Chinese) [刘续希, 柳文波, 李博岩, 贺新福, 杨朝曦, 恽迪 2022 金属学报 **58** 943]
- [23] Moladje G F B, Thuillet L, Becquart C S, Legris A 2022 *Acta Mater.* **225** 117523
- [24] Sakaël C, Domain C, Ambard A, Thuillet L, Legris A 2023 *Int. J. Plast.* **168** 103699
- [25] Liu C Y, Zhang Y P, Cheng D Z, Yu K, Teng C Q, Wu L, Zhang J 2024 *Nucl. Eng. Des.* **425** 113321
- [26] Millett P C, El-Azab A, Wolf D 2011 *Comp. Mater. Sci.* **50** 960
- [27] Bhattacharyya S, Heo T W, Chang K, Chen L Q 2011 *Model. Simul. Mater. Sc.* **19** 035002
- [28] Jiang Y B, Liu W B, Sun Z P, La Y X, Yun D 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 026103 (in Chinese) [姜彦博, 柳文波, 孙志鹏, 喻永孝, 恽迪 2022 物理学报 **71** 026103]
- [29] Greenwood M, Hoyt J J, Provatas N 2009 *Acta Mater.* **57** 2613
- [30] Tonks M R, Zhang Y, Butterfield A, Bai X M 2015 *Model. Simul. Mater. Sc.* **23** 045009
- [31] Golubov S I, Ovcharenko A M, Barashev A V, Singh B N 2001 *Philos. Mag.* **81** 643
- [32] Russell K C 1971 *Acta Mater.* **19** 753
- [33] Wen P, Tonks M R, Phillipot S R, Spearot D E 2022 *Comp. Mater. Sci.* **209** 111392
- [34] Wang Y Y, Zhao J J, Ding J H, Zhao J J 2022 *Int. J. Refract. Met. H.* **105** 105824
- [35] Lin Y R, Chen W Y, Tan L, Hoelzer D T, Yan Z, Hsieh C Y, Huang C W, Zinkle S J 2021 *Acta Mater.* **217** 117165
- [36] Schroeder H, Kesternich W, Ullmaier H 1985 *Fusion Eng. Des.* **2** 65

Phase field simulation of intra/intergranular pore morphology evolution in neutron-irradiated austenitic stainless steel*

Cheng Da-Zhao¹⁾ Liu Cai-Yan²⁾ Zhang Chao-Ran¹⁾
Qu Jia-Hui¹⁾ Zhang Jing^{1)†}

1) (*State Key Laboratory of Solidification Processing, School of Materials Science and Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China*)

2) (*School of Materials Science and Engineering, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China*)

(Received 25 September 2024; revised manuscript received 8 October 2024)

Abstract

Intergranular or intragranular anisotropic pores can be easily observed in the FCC structure of nuclear reactor core structural materials, such as austenitic stainless steel or nickel-based alloys. Austenitic stainless steel contains a certain amount of nickel (Ni), and Ni undergoes transmutation reaction under neutron irradiation to produce helium. Helium combines with vacancy and continuously absorbs more helium and vacancy, evolving into under pressure pores filled with a small amount of helium. The morphology of pores is influenced by both the surface anisotropy of the crystal and grain boundary characteristic because pore nucleation predominantly occurs at grain boundary. The swelling effect caused by pores and the embrittlement effect of high temperature helium are related to the morphology, size and distribution of pores. The phase field method can couple multiple physical fields and accurately describe the effects of material microscopic defects on pores. In this study, we use the phase field method to simulate the evolution and morphology of pores, establishing a free energy functional coupling between crystal plane anisotropy and pore-grain boundary interactions. Our results demonstrate that helium gas induces pore nucleation, with higher concentrations leading to shorter incubation period, faster nucleation rate, and greater growth rate. Grain boundaries act as heterogeneous nucleation sites for helium pores, leading to the formation of pores along these boundaries and high-density diffusion pores within the grains. The intragranular pores exhibit anisotropic characteristics regulated by interfacial energy's anisotropic modulus, the strength of the anisotropy, and crystal orientation. The high-density intergranular pores interact with each other significantly and are influenced by grain boundaries, while the anisotropic morphology is negligible. Additionally, it has been observed that the pores located in the middle of grain boundaries tend to become an elliptical. The stress inside the pores that contain a small amount of helium gas is negative, which is lower than the value in the matrix. These findings presented herein align well with experimental results, which inspires the prediction of service life of core components and the design of core materials.

Keywords: pores, anisotropic, phase field, irradiation

PACS: 46.25.Cc, 61.72.-y, 61.80.Hg, 61.72.Qq

DOI: [10.7498/aps.73.20241353](https://doi.org/10.7498/aps.73.20241353)

CSTR: [32037.14.aps.73.20241353](https://cstr.aps.org/cstr/32037.14.aps.73.20241353)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. U2267253, 51704243) and the Natural Science Basic Research Program of Shaanxi Province, China (Grant No. 2022JM-238).

† Corresponding author. E-mail: jingzhang@nwpu.edu.cn



中子辐照奥氏体不锈钢晶内/晶间孔隙形貌演化的相场模拟

程大钊 刘彩艳 张超然 屈佳辉 张静

Phase field simulation of intra/intergranular pore morphology evolution in neutron-irradiated austenitic stainless steel

Cheng Da-Zhao Liu Cai-Yan Zhang Chao-Ran Qu Jia-Hui Zhang Jing

引用信息 Citation: [Acta Physica Sinica](#), 73, 224601 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20241353

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241353>

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

α相三氧化钼中各向异性双曲声子极化激元的耦合性质

Coupling interactions of anisotropic hyperbolic phonon polaritons in double layered orthorhombic molybdenum trioxide

物理学报. 2023, 72(7): 077101 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222144>

腔光子-自旋波量子耦合系统中各向异性奇异点的实验研究

Observation of the anisotropic exceptional point in cavity magnonics system

物理学报. 2020, 69(4): 047103 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191632>

基于相场方法的多孔合金马氏体相变模拟

Phase-field method based simulation of martensitic transformation in porous alloys

物理学报. 2023, 72(14): 148102 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230212>

黑磷各向异性拉曼光谱表征及电学特性

Anisotropic Raman characterization and electrical properties of black phosphorus

物理学报. 2021, 70(3): 037801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201271>

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>

人工磁场下各向异性偶极玻色气体的量子相变

Quantum phase transitions of anisotropic dipolar bosons under artificial magnetic field

物理学报. 2024, 73(13): 130503 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240376>