

FeCrAl 合金拉伸力学性能分子动力学研究

叶天舟¹, 姚欢², 巫英伟¹, 章静¹, 王明军¹, 陈平³,
田文喜¹, 秋穗正¹, 苏光辉¹

- (1. 西安交通大学 核科学与技术学院 陕西省先进核能技术重点实验室 动力工程多相流国家重点实验室, 陕西 西安 710049)
(2. 西安交通大学 航空航天学院 机械结构强度与振动国家重点实验室 陕西省先进飞行器服役环境与控制重点实验室, 陕西 西安 710049)
(3. 中国核动力研究设计院 核反应堆系统设计技术重点实验室, 四川 成都 610213)

摘要: FeCrAl 合金优良的高温抗氧化性能使其成为反应堆燃料包壳的候选替代材料之一, 然而 Cr 和 Al 的存在会对其力学性能产生负面影响, 对反应堆的安全运行造成潜在风险。为了分析 FeCrAl 合金体系在微观尺度的变形机制, 采用分子动力学方法研究了温度和应变速率 2 个重要影响因素下 FeCrAl 单晶的力学性能, 对应力应变、缺陷分布、位错密度的变化及变形机制进行了讨论, 分析了溶质原子对模拟结果的影响。结果表明, 温度升高导致原子热运动加剧, 促进了缺陷的形成和生长, 降低了原子间相互作用, 导致弹性模量和抗拉强度随温度的升高而降低。应变速率的升高导致弹性模量和抗拉强度降低, 低应变速率的塑性变形机制主要为孪生变形, 中等应变速率下为位错滑移, 高应变速率下为原子排列无序化的变形机制。温度和应变速率对 α -Fe 和 FeCrAl 具有相同的作用趋势, 但与 α -Fe 相比, FeCrAl 中的 Cr 和 Al 会产生明显的晶格畸变和应力集中, 促进了缺陷和位错的形成和运动, 降低材料的屈服强度和抗拉强度。基于计算结果, 对 FeCrAl 单晶体系建立了基于 F-B 方程的本构模型, 拓展了计算结果的应用范围。

关键词: FeCrAl 合金; 温度效应; 应变速率效应; 分子动力学

中图分类号: TG139^{+.4}

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2023)02-0777-08

FeCrAl 包壳作为事故容错燃料 (ATF)^[1]的其中之一, 由于其具有优异的高温抗氧化和抗腐蚀性能, 抗辐照肿胀能力, 产生的 Al_2O_3 层能抑制氢渗透, 成为反应堆燃料包壳的候选材料之一^[2-4]。然而, 高含量的 Cr 会导致包壳在正常运行工况温度下的脆化, 高含量的 Al 会提高韧脆转变温度 (DBTT), 进而增加加工难度。并且在反应堆中由于受到辐照的影响, 基体中会产生位错、位错环、空洞和析出相等缺陷, 这些缺陷的存在使得材料力学性能发生巨大的变化。在中子辐照环境下, Cr 含量的提高会急剧增加富 Cr α 析出相的密度, 并显著加强辐照造成的硬化和脆化^[5-6]。

分子动力学 (MD) 作为一种微观尺度的常用研究手段, 广泛用于金属材料微观力学性能和缺陷演化行为的研究。从微观的角度分析拉伸变形过程中应力、应变、能量和缺陷的变化趋势, 探讨材料的屈服和断裂机制, 对研究 FeCrAl 合金的辐照脆化和硬化效应具有重要的指导意义。材料的力学性能受到温度、应变速率、缺陷分布、辐照、合金成分等多种因素的影响,

其中温度和应变速率的影响是最为基础和反应堆实际应用中所关注的因素。Wu 等人^[7]通过分子动力学对 bcc 结构的 Fe 纳米丝的研究中发现, 在不同温度下 (温度为 0~900 K, 应变速率为 $3 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$) 塑性变形都是通过孪生变形机制, 并且孪生增殖应力随温度上升而降低。朱旭等人^[8]根据应变速率对 fcc 结构的单晶 Ni 和 Ni_3Al 拉伸性能的影响程度分为了低、中、高 3 种应变速率范围, 3 种范围下材料抗拉强度对应变速率的敏感性和应力应变曲线的特征有所差异。单晶 γ -TiAl 合金^[9]根据不同应变速率对裂纹扩展的影响程度和作用方式也可以分为不同的应变区间, 不同区间的微观缺陷特性不同, 在高应变速率作用下, 体系中大量原子的非晶化可能导致体系以原子排列无序化作为主要的变形机制。

目前国内外已开展部分 FeCrAl 材料辐照前后力学性能的相关实验研究, 相关模拟工作和机理研究还较少。为了探究 FeCrAl 合金拉伸力学性能的微观机理, 采用分子动力学研究了温度和应变速率对 FeCrAl

收稿日期: 2022-07-07

基金项目: 国家重点研发计划 (2019YFB1901003); 中国核工业集团有限公司领创科研项目

作者简介: 叶天舟, 男, 1995 年生, 博士生, 西安交通大学, 陕西 西安 710049, E-mail: mytz123@stu.xjtu.edu.cn

单晶力学性能和变形机制的影响, 建立 FeCrAl 单晶在分子动力学拉伸时的本构方程, 对于 FeCrAl 力学性能的研究和多尺度模拟方法的建立具有重要指导意义。

1 分子动力学建模及方法

采用 MD 方法对 FeCrAl 合金在微观尺度下的力学性能进行了分子尺度的研究。FeCrAl 体系的 MD 模拟采用了开源大规模原子/分子并行模拟器 LAMMPS^[10], 模拟过程包括热平衡过程和拉伸过程。FeCrAl 单晶的分子动力学模型的建立采用了 AtomsK 软件^[11], 如图 1 所示。初始模型大小为 14.30 nm×14.07 nm×14.07 nm, 共有 242 000 个原子, Cr 和 Al 原子随机弥散在 bcc-Fe 基体中, 主要选择了成分为 Fe-10%Cr-4.8%Al (质量分数)^[12]的 FeCrAl 进行模拟。模拟中所采用的晶体取向均为[001]、[2 $\bar{1}$ 0]、[120], 对应图 1 中 X、Y 和 Z 方向。3 个方向均设为周期性边界条件, 通过控制体系中原子在 Z 方向的位移, 在恒定的应变速率下模型沿 Z 轴的应变随时间线性增加, 即 Z 方向的拉伸应变为:

$$\varepsilon_{zz} = \frac{l_z - l_{z0}}{l_{z0}} \quad (1)$$

在 Z 轴施加恒定变形前对所模拟的体系在 NPT 系综下进行了约 100 ps 的弛豫, 直至体系的温度和压力达到平衡状态, 给定原子的初始速度分布符合 Maxwell-Boltzmann 分布, 体系的总初始动能 $E_k=3/2kT$ (其中 k 为 Boltzmann 常数, T 为热力学温度), 随后以 10^{10} s^{-1} 应变速率匀速拉伸至变形量达到 20%。时间步长设为 0.001 ps, 每 100 步记录一次原子信息, 包括体系在 3 个方向的应力、应变、总能、势能、动能和原子位置等, 通过 Ovito 软件进行结果的后处理工作。

对于金属通常使用嵌入原子势 (embedded atomic method, EAM) 来描述原子间的相互作用^[13-14]。EAM

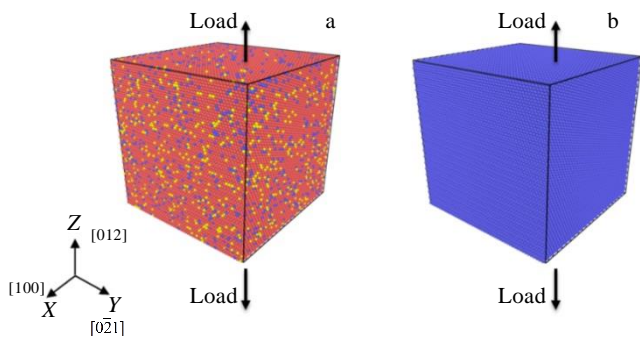


图 1 FeCrAl 合金分子动力学模型

Fig.1 Molecular dynamics model of FeCrAl alloy: (a) red represents Fe, blue represents Cr, and yellow represents Al; (b) blue represents the bcc structure

是基于密度泛函理论, 利用有效介质理论和准原子近似提出的。其主要思想是将每个原子视为基体中的外部杂质, 体系的总势能为相互作用能与嵌入能之和

$$E_{\text{tot}} = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{ij}(r_{ij}) \quad (2)$$

$$\rho_i = \sum_{j \neq i} \psi_{ij}(r_{ij}) \quad (3)$$

公式 (2) 中, 右侧第 1 项为嵌入能项, 第 2 项为相互作用能项, 其中, $\phi_{ij}(r_{ij})$ 为第 i 个原子与第 j 个原子间的对势作用函数, $F_i(\rho_i)$ 为嵌入能函数, ρ_i 为第 i 个原子处受到其他原子的电子云密度之和, 形式如公式 (3) 中所示, $\psi_{ij}(r_{ij})$ 为电子云密度函数。公式 (2) 和 (3) 的具体形式采用了 Liao 等人^[15]拟合得到的 Fe-Cr-Al 多体势函数, 该势函数在缺陷能、声子相关特性、混合焓值、相变、弹性力学性能方面通过与实验值和第一性原理计算值的对比进行了大量的验证工作, 保证了该势函数在一定程度上的可靠性。由于模拟对象的理想化以及微观拉伸试验数据的缺乏, 本研究通过计算 α -Fe 沿[100]方向的应力-应变曲线对所采用的势函数和模拟方法进行了验证, 计算结果与文献[16]中采用 Fe 的经典势函数得到的应力应变曲线符合良好, 如图 2 所示。

2 模拟结果与讨论

2.1 温度效应

温度对单晶体系拉伸过程的影响如图 3 所示。从图中可以看出, 温度对拉伸过程中的弹性段和塑性段均产生明显的影响, 并且 α -Fe 和 FeCrAl 在不同温度下的应力应变曲线的变化趋势都是一致的。随着温度的降低, 弹性模量和抗拉强度均升高, 材料发生硬化。

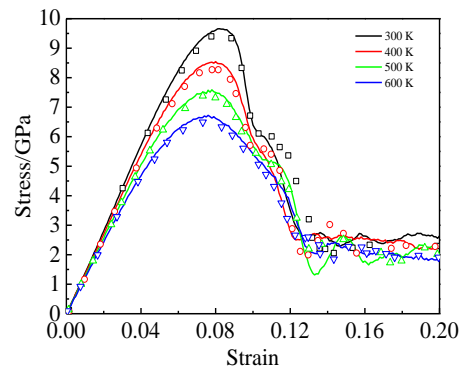


图 2 α -Fe 沿[100]方向在不同温度的应力-应变曲线 (实线为本文模拟结果, 离散点为文献[16]模拟结果)

Fig.2 Stress-strain curves of α -Fe along the direction of [100] at different temperatures (curves represent simulation results, and points represent result of Ref.[16])

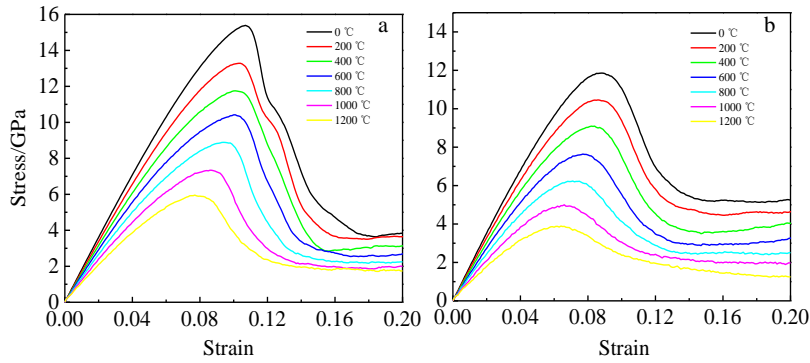


图3 α -Fe 和 FeCrAl 在不同温度的应力-应变曲线

Fig.3 Stress-strain curves of α -Fe (a) and FeCrAl (b) at different temperatures

通过对图3中的应力-应变曲线进行分析,得到了图4中关于温度对弹性模量和抗拉强度的影响。温度造成的弹性模量 E 几乎线性下降,与实验数据^[17]相比,分子动力学计算得到的 FeCrAl 合金在不同温度下的弹性模量普遍偏低而获得的抗拉强度普遍偏高,这是由于分子动力学的拉伸模拟过程只考虑了理想的单晶拉伸情况,而实际的 FeCrAl 合金为多晶并包含多种微量元素,而且在制备过程中会引入大量缺陷和各种组织以及相,对材料起到强化作用,导致弹性模量较大;由于空间和时间尺度的限制,分子动力学模拟的应变速率较实际情况高出 10 个数量级左右,因此抗拉强度远高于实际。抗拉强度 σ_b 在低温时随温度上升而下降迅速,随后几乎成线性下降。与 α -Fe 相比, FeCrAl 中的溶质原子 Cr 和 Al 并未表现出固溶强化的效果,随着 Cr 和 Al 的引入,沿 $\langle 120 \rangle$ 方向拉伸过程得到的弹性模量和抗拉强度都降低,这是由于模拟中尚未考虑位错与溶质原子的相互作用,计算得到的应力-应变曲线主要反映原子间相互作用力的变化。

温度对拉伸过程的弹性段和塑性段均有较大影响,在弹性区域,由于温度越高,原子的热运动愈发

剧烈,原子间距变大,键能减小,因此体系的势能也更高,原子间相互作用力降低,即发生相同应变所需的应力更低,因此弹性段斜率更低,体现为弹性模量降低,如图4所示。在塑性段,不同原子面上的原子开始发生相对移动,导致不规则结构原子数增加和 bcc 结构原子数减少,体系发生塑性变形,随后依次产生 fcc 和 hcp 结构,在应力达到最大值附近, bcc 结构原子数下降速度最快,随后由于断裂后部分原子恢复 bcc 结构而变平或略微上升,如图5所示。从高温和低温的对比中发现,温度越高,非晶结构原子数量的峰值越高且越早到达峰值, fcc 和 hcp 原子在应力峰值点应变之前 4% 左右开始大量出现,在其之后 2% 左右数量达到峰值,其中 hcp 峰值原子数量随温度上升具有明显增加。随后由于断裂面附近的原子倾向于恢复 bcc 结构导致 fcc 和 hcp 结构数量逐渐下降。无序原子的增加使得原子间结合力下降并发生相变,导致弹性模量的降低。

图5中在不同温度下沿 $\langle 120 \rangle$ 方向的拉伸变形机制主要是滑移变形,在低温时会形成少量孪晶,但随温度升高,由于非晶原子的大量增加而抑制了孪晶的

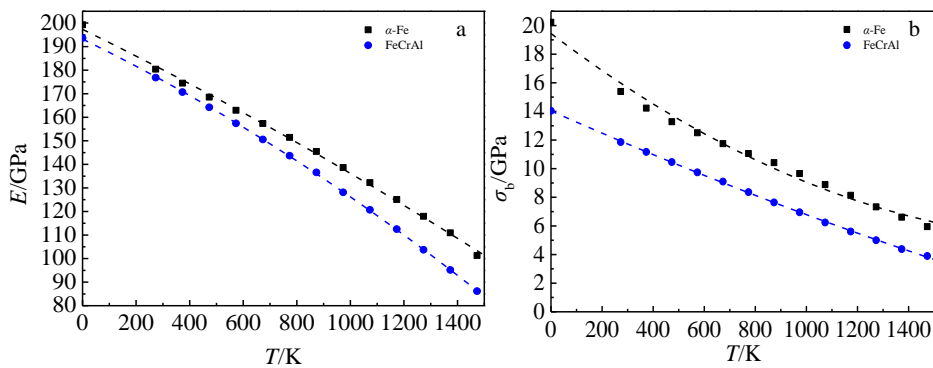


图4 不同温度下 α -Fe 和 FeCrAl 单晶的弹性模量和抗拉强度的变化曲线

Fig.4 Elastic modulus E (a) and the ultimate tensile strength σ_b (b) of α -Fe and FeCrAl single crystal at different temperatures

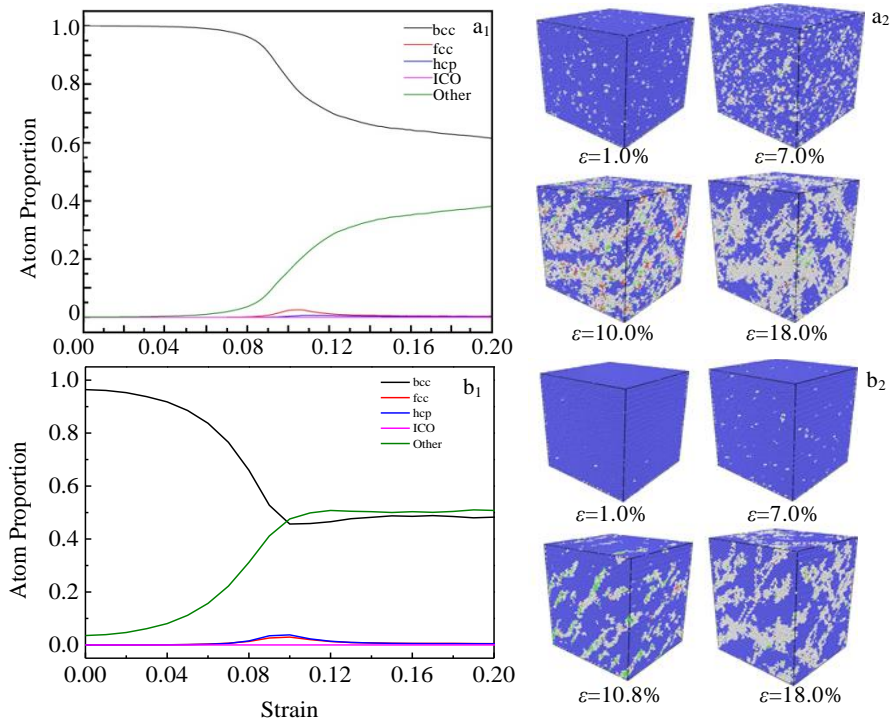


图 5 在高温 (873 K) 和低温 (1 K) 下不同晶体结构数量随应变的变化曲线 (左) 以及晶体结构分布云图 (蓝色代表 bcc, 绿色代表 fcc, 红色代表 hcp, 白色代表非晶结构)

Fig.5 Atom proportion of different crystal structures versus strain at high temperature (873 K) (a₁) and low temperature (1 K) (b₁); crystal structure distribution at high temperature (a₂) and low temperature (b₂)

产生与增殖, fcc 和 hcp 结构的数量在高温下也更广泛。拉伸导致密排面上的原子发生滑移产生位错和滑移系 {110}<111>和 {211}<111>的开动。在低温时开动的滑移系大部分是 {211}<111>, 而高温使得更多具有较大施密特因子的滑移系上的切应力达到临界分切应力 (critical resolution shear stress, CRSS) 而开动。单晶体的临界分切应力 τ_c 表示为^[18]

$$\tau_c = \tau_f + \alpha G b \rho^{1/2} \quad (4)$$

式中, τ_f 是晶格阻力, α 是原子间相互作用系数, G 是剪切模量, b 是伯氏矢量, ρ 是位错密度。对于没有初

始位错的单晶, 由于温度越高, 弹性模量越小, 晶格阻力也就越小, 高温产生更多的离位原子从而产生点缺陷, 缺陷数量随温度呈指数上升, 更早产生缺陷团簇和位错。Cr 和 Al 对晶格的作用也促进了位错的形核和滑移, FeCrAl 体系中的位错普遍都在 8% 应变附近产生, 比 α -Fe 体系产生更早, 如图 6 所示。拉伸过程中出现的位错类型包括 $1/2\langle 111 \rangle$ 、 $\langle 100 \rangle$ 、 $\langle 110 \rangle$ 和少量其他类型, 均在应力峰值后产生, 其中在各个温度最容易形成的是 $1/2\langle 111 \rangle$ 位错, 其次是 $\langle 100 \rangle$ 位错, 其位错密度比前者低 1 个数量级以上。温度和溶

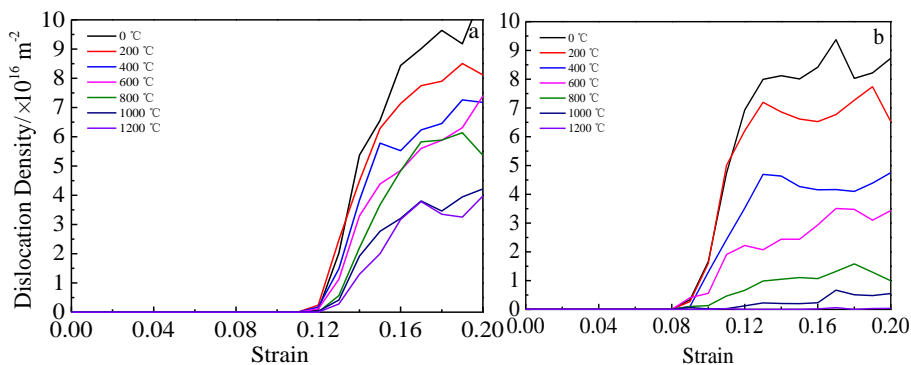


图 6 α -Fe 和 FeCrAl 在不同温度下的位错密度随应变的变化曲线

Fig.6 Relationship between dislocation density and strain of α -Fe (a) and FeCrAl (b) at different temperatures

质原子的作用都会导致非 bcc 结构的增加和体系的局部无序化, 阻碍了位错的形成, 使得在相同应变下的位错密度逐渐降低。

2.2 应变速率效应

应变速率对 Fe 和 FeCrAl 应力-应变曲线的影响如图 7 所示, 拉伸温度为 360 °C。分别对 α -Fe 和 FeCrAl 体系对比了 4 种不同的应变速率 (1×10^8 、 1×10^9 、 1×10^{10} 和 $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$) 的影响。应变速率对弹性段的影响并不明显, 直到应变速率达到 $1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$ 才发现明显变化, 随应变速率增加, 弹性模量呈上升的趋势。通过对 FeCrAl 体系的应力应变曲线分析得到在 4 种不同应变速率下, 弹性模量分别为 148.89、156.22、157.17 和 204.99 GPa, 抗拉强度分别为 8.24、8.71、9.32 和 11.60 GPa。应变速率对应力应变曲线的影响更多体现在塑性变形, 应变速率对弹性应变能随应变的变化影响较小, 而对位错的产生和移动影响较大。随着应变

速率的上升, 抗拉强度明显增加, 而且在应变速率较低时增加更为显著, 且断裂后需要在更大的应变下应力才能恢复到稳定值。图 8 展示了 α -Fe 和 FeCrAl 在不同应变速率下在应力最大值附近的晶体结构分布图。应变速率对塑性段的影响体现在变形机制的变化。在低应变速率 (1×10^8 和 $1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$), 塑性变形机制主要是孪生变形, 孪生系统为 $\{112\}\langle 111\rangle$, 在孪晶产生后的应力应变曲线具有明显的锯齿状。而随应变速率增加, 大量 $\{110\}$ 面上的原子开始沿 $\langle 111\rangle$ 方向移动, 在中等应变速率 (应变速率 $1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$) 情况下, 初始阶段与低应变速率情况差别不大, 应力峰值前产生的孪生变形急剧降低, 滑移变形逐渐成为主要变形机制, 在拉伸过程中不再产生明显的锯齿状变化。在高应变速率 ($1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$) 情况下, 弹性模量显著变大, 同时峰值应力和应变都明显增加, 非晶原子结构大量增加, 位错滑移被削弱。

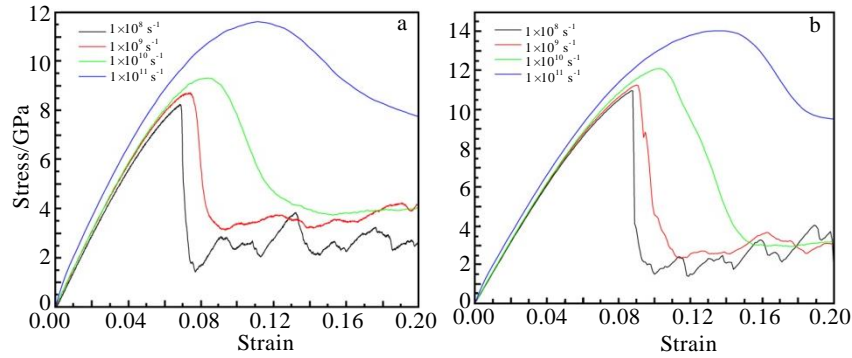


图 7 α -Fe 和 FeCrAl 在不同应变速率的应力-应变曲线

Fig.7 Stress-strain curves of α -Fe (a) and FeCrAl (b) at different strain rates

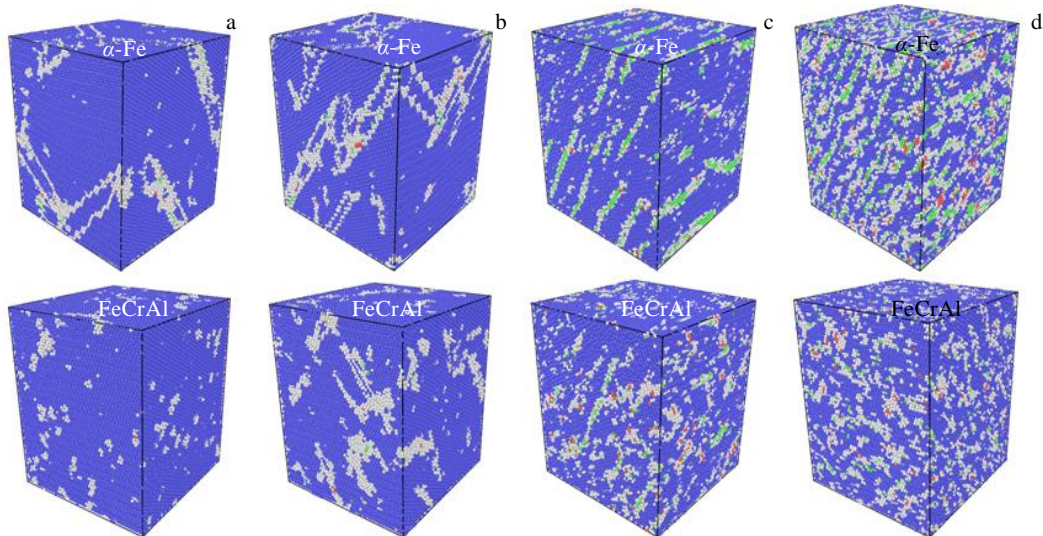


图 8 α -Fe 和 FeCrAl 在不同应变速率拉伸过程中的晶体结构分布云图

Fig.8 Crystal structure distribution α -Fe and FeCrAl at different strain rates: (a) $\dot{\epsilon}=1 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$, (b) $\dot{\epsilon}=1 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$, (c) $\dot{\epsilon}=1 \times 10^{10} \text{ s}^{-1}$, and (d) $\dot{\epsilon}=1 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$

图 9a 为 FeCrAl 单晶位错密度随拉伸应变的变化情况，其中虚线代表应力峰值对应的应变大小。应变速率越大，屈服强度上升，这是由于应变速率的提高使原子的运动速率增加，在原子间的相对位移还未产生大量缺陷和位错时就发生了大量原子键的断裂，导致发生整体断裂时所需的应力显著变大，抗拉强度上升，导致材料的硬化，并且位错运动所需的临界切应力也会随着应变速率的提高而增加，塑性变形得不到充分发展，表现为脆性断裂。对于低应变速率和中等应变速率，位错的快速增殖和滑移对塑性变形具有贡献，位错密度的增加幅度随应变速率的增加先上升后下降直至为零，表明在低应变速率下，体系的主要变形机制为孪生变形，滑移变形较弱，而在中等应变速率下，滑移系由于更严重的局部应力集中而易于开动，滑移变形成为主要的变形机制。图 9b 为不同应变速率情况下 FeCrAl 非晶结构随拉伸应变的变化情况，在不同应变速率下的变化规律都是先上升后由于断裂后原子的回复作用而下降到一个稳定值。但是随着应变速率的提高，体系中的非晶原子峰值显著增加并逐渐消失，大量非晶结构的存在阻碍了位错的产生和滑移系的开动，因此导致位错密度逐渐下降。在高应变速率区，体系为大量原子排列无序化的变形机制。

2.3 溶质原子的作用

合金体系中的受力分布情况会受到随机分布的 Cr 和 Al 的影响。图 10a 为温度在 1 K 情况下不同种类原子的 3 个主应力随拉伸应变的变化过程，图 10b 为各类原子的部分径向分布函数 $g(r)$ 在原子距离为 $0.2 \text{ nm} < r < 0.5 \text{ nm}$ 的部分，其中包括了不同原子之间第一近邻和第二近邻的距离，即各原子对 $g(r)$ 的前 2 个峰值，代表了原子对的键长。与 $\alpha\text{-Fe}$ 不同的是，Cr 和 Al 会造成局部的应力集中和晶格畸变。FeCrAl 体系中 Cr 原子主要受到周围原子的拉应力，且 Cr 原子与 Fe 原子具有最小的键长，说明 Cr 原子对周围原子

有更强的吸引作用，容易与 Fe 原子形成更强的金属键，造成晶格收缩。Fe-Al 键长与 Fe-Fe 相近，但 Cr-Al、Cr-Cr 和 Al-Al 的键长较长，说明其相互作用较弱。Cr 和 Al 原子附近的应力集中和晶格畸变会促进滑移系的开动，并削弱孪生变形的产生，因此随着应变速率的上升，FeCrAl 会更早进入滑移变形区，同时由于 FeCrAl 中的 Cr 和 Al 造成晶格畸变，非晶原子显著增加，因此会比 $\alpha\text{-Fe}$ 更早进入大量原子无序化变形区。

2.4 本构模型

为了外推得到其它温度和应变速率情况下 FeCrAl 单晶体系的塑性变形过程，需要分析整理计算结果规律，得到材料塑性变形与温度和应变速率的关系。塑性本构模型的建立中采用了常用的 F-B (Field-Backofen) 方程^[19]的形式对模拟结果进行拟合

$$\sigma = C\varepsilon^n \dot{\varepsilon}^m \tag{5}$$

其中 C 、 m 、 n 为拟合系数， m 和 n 通过以下各式获得

$$n = \left. \frac{\partial \ln \sigma}{\partial \ln \varepsilon} \right|_{\varepsilon, T} \tag{6}$$

$$m = \left. \frac{\partial \ln \sigma}{\partial \ln \dot{\varepsilon}} \right|_{\varepsilon, T} \tag{7}$$

从图 11 中可以看出，在忽略应变速率的影响下， m 与 n 与温度 T 可以考虑为线性关系。 n 随着温度的升高而减小， $n=0.97-9.82 \times 10^{-5}T$ ，如图 11a 所示； m 随 ε 增加而略微逐渐降低，但随着温度的升高而显著增加， $m=3.64 \times 10^{-5}T$ ，如图 11b 所示； C 与温度有较大影响，代入 n 和 m 的值并计算不同温度下的 C 在不同应变速率下塑性段的平均值得到 C 随温度 T 的变化趋势， $C=2.27-7.6 \times 10^{-4}T$ 。将拟合系数代入公式 (5) 即可得到不同温度和应变速率下的应力应变曲线。拟合结果可用于定性分析 FeCrAl 在微观尺度的力学性能变化趋势以及与其它材料的分子动力学模拟结果进行对比研究和材料优化设计。

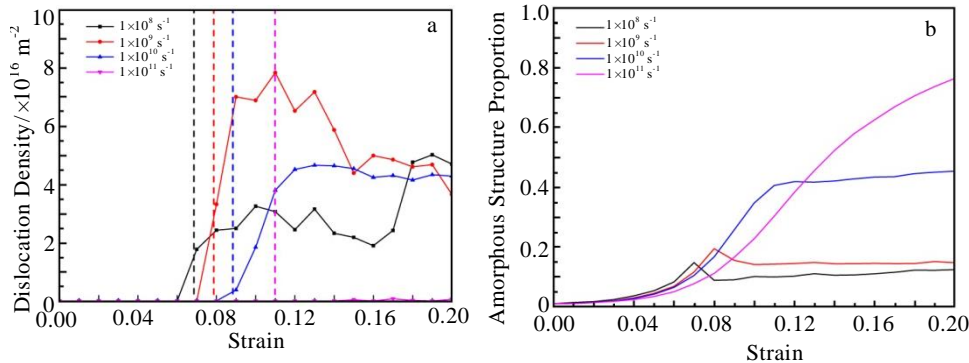


图 9 不同应变速率下 FeCrAl 单晶的位错密度和非 bcc 结构原子占比随应变的变化曲线

Fig.9 Curves of dislocation density versus strain (a) and the proportion of amorphous structure versus strain (b) of FeCrAl at different strain rates

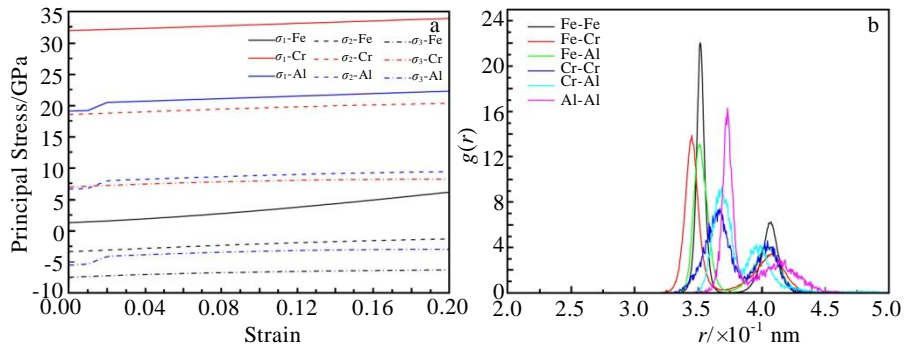


图 10 Fe、Cr 和 Al 原子平均主应力和各原子对的部分径向分布函数

Fig.10 Average principal stresses of Fe, Cr and Al atoms (a) and the partial radial distribution functions (b)

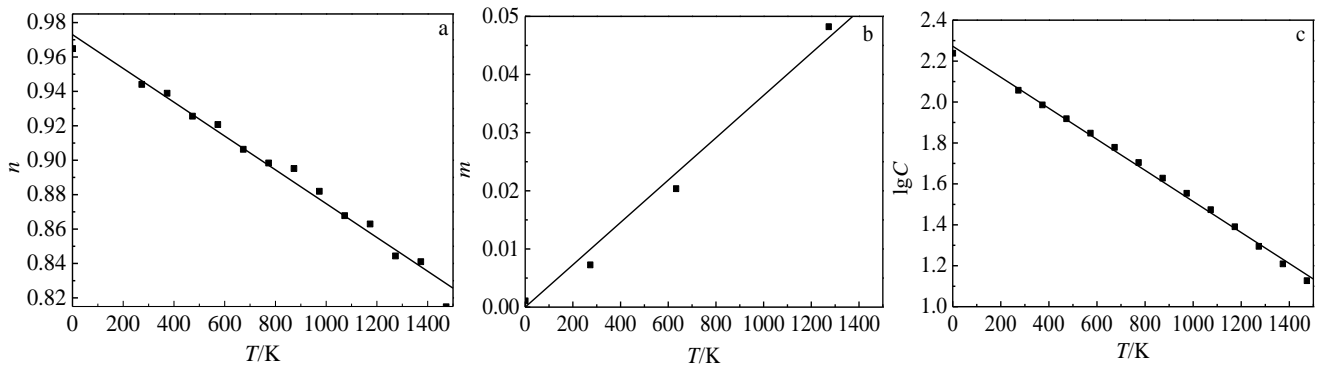


图 11 拟合参数随温度的变化关系

Fig.11 Correlation of fitting parameters n (a), m (b), C (c) and temperature

3 结 论

1) 基于分子动力学方法的单轴拉伸模拟手段研究了温度和应变速率对单晶 FeCrAl 力学性能的影响, 根据温度和应变速率的模拟结果, 拟合 Field-Backofen 方程中的系数得到了 FeCrAl 单晶与温度和应变速率相关的本构方程。

2) FeCrAl 单晶的弹性模量和抗拉强度随温度的升高而降低, 这是由于温度越高, 原子热振动越剧烈, 原子间相互作用力降低, 发生相同应变所需的应力相应更低, 导致弹性模量降低; 温度升高导致非 bcc 结构原子的大量增加, 缺陷团簇和位错更早产生和运动, 屈服强度降低。

3) FeCrAl 单晶的弹性模量和抗拉强度随应变速率的升高而增加, 不同应变速率情况下, FeCrAl 单晶的拉伸变形机制不同。在低应变速率下, 塑性变形机制主要孪生变形, 同时也存在少量滑移变形, 应力应变曲线存在明显锯齿状; 在中等应变速率下, 孪生变形被削弱, 位错的增殖和滑移增强, 变形机制为位错滑移; 在高应变速率下, 由于非晶原子的大量增加, 无序化区域扩大, 阻碍了孪晶和位错的形成, 体系的

变形机制转变为原子排列无序化的变形机制。

4) 由于 FeCrAl 合金体系中的受力分布情况会受到随机分布的 Cr 和 Al 的影响发生晶格畸变和应力集中, 促进了缺陷和位错的形成和运动, 在不同温度下弹性模量和抗拉强度都比 α -Fe 更低。随着应变速率上升, 相较于 α -Fe 更早进入滑移变形区和大量原子无序化变形区, 降低了材料的屈服强度和抗拉强度。

参考文献 References

[1] Qiu B, Wang J, Deng Y *et al. Nuclear Engineering and Technology*[J], 2020, 52(1): 1
 [2] Rehak R B. *JOM*[J], 2018, 70(2): 176
 [3] Little E A, Stow D A. *Journal of Nuclear Materials*[J], 1979, 87(1): 25
 [4] Tao Xiaokang(陶小康), Huang Zhongguo(黄重国), Guo Qingmiao(郭青苗) *et al. Hot Working Technology*(热加工工艺)[J], 2018, 47(6): 5
 [5] Mathon M H, Carlan Y de, Geoffroy G *et al. Journal of Nuclear Materials*[J], 2003, 312(2-3): 236
 [6] Briggs Samuel A, Sridharan Kumar, Field Kevin G. *Advanced Materials & Processes*[J], 2016, 12: 1 340 452

- [7] Wu Qian, Wang Yong, Han Tao *et al.* *Journal of Engineering Materials and Technology*[J], 2021, 143(3): 031 007
- [8] Zhu Xu(朱 旭), Jiang Wugui(江五贵), Li Yuancai(李源才) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2021, 50(4): 9
- [9] Luo Dechun(罗德春), Zhang Ling(张 玲), Fu Rong(付 蓉) *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2018, 47(3): 7
- [10] Plimpton S. *Journal of Computational Physics*[J], 1995, 117(1): 1
- [11] Hirel P. *Computer Physics Communications*[J], 2015, 197: 212
- [12] Field K G, Briggs S A, Sridharan K *et al* *Journal of Nuclear Materials*[J], 2017, 489: 118
- [13] Daw Murray S, Foiles Stephen M, Baskes Michael I. *Materials Science Reports*[J], 1993, 9(7-8): 251
- [14] Daw M S, Baskes M I. *Physical Review B Condensed Matter*[J], 1984, 29(12): 6443
- [15] Liao Xichuan, Gong Hengfeng, Chen Yangchun *et al.* *Journal of Nuclear Materials*[J], 2020, 541: 152 421
- [16] Maulana A, Arkundato A, Sutisna *et al.* *AIP Conference Proceedings*[J], 2020, 2314(1): 101 063
- [17] Yamamoto Y, Pint B A, Terrani K A *et al.* *Journal of Nuclear Materials*[J], 2015, 467: 703
- [18] Monnet G, Pouchon M A. *Materials Letters*[J], 2013, 98: 128
- [19] Chang Le, Zhou Changyu, Peng Jian *et al.* *Rare Metal Materials and Engineering*[J], 2017, 46(7): 1803

Molecular Dynamics Study on Tensile Mechanical Properties of FeCrAl Alloy

Ye Tianzhou¹, Yao Huan², Wu Yingwei¹, Zhang Jing¹, Wang Mingjun¹, Chen Ping³, Tian Wenxi¹,
Qiu Suizheng¹, Su Guanghui¹

(1. State Key Laboratory of Multiphase Flow in Power Engineering, Shaanxi Key Lab. of Advanced Nuclear Energy and Technology, School of Nuclear Science and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

(2. State Key Laboratory for Strength and Vibration of Mechanical Structures, Shaanxi Key Laboratory of Environment and Control for Flight Vehicle, School of Aerospace Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

(3. Science and Technology on Reactor System Design Technology Laboratory, Nuclear Power Institute of China, Chengdu 610213, China)

Abstract: FeCrAl alloy is one of the candidate materials for reactor fuel cladding due to its excellent oxidation resistance at high temperature. However, the presence of Cr and Al has negative effects to the mechanical properties and poses a potential risk to the safety of reactor operation. In order to analyze the deformation mechanism of FeCrAl alloy system in microscale, the mechanical properties of FeCrAl single crystal under the influence of temperature and strain rate were studied by molecular dynamics method. The defects distribution, dislocation density change and deformation mechanism were discussed, and the effect of solute atoms on the result of simulation were analyzed. The results show that the increase of temperature increases the thermal motion of atoms, promotes the formation and growth of defects, reduces the interaction between atoms, and results in the decrease of elastic modulus and tensile strength. The increase of strain rate leads to the decrease of elastic modulus and tensile strength. The plastic deformation mechanism of low strain rate is mainly deformation twinning, of middle strain rate is dislocation slip, and of high strain rate is deformation with atomic arrangement disorder. The effect of temperature and strain rate on α -Fe and FeCrAl is similar, but Cr and Al in FeCrAl cause significant lattice distortion and stress concentration, promoting the formation and movement of defects and dislocations and reducing the yield strength and tensile strength. Based on the calculated results, a constitutive model for FeCrAl crystal system was established based on Field-Backofen equation, which extended the application of the simulation results.

Key words: FeCrAl alloy; temperature effect; strain rate effect; molecular dynamics method

Corresponding author: Wu Yingwei, Ph. D., Professor, Shaanxi Key Laboratory of Advanced Nuclear Energy and Technology, School of Nuclear Science and Technology, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, P. R. China, E-mail: wyw810@mail.xjtu.edu.cn