

# 温度场作用下 Fe-Cr 合金中空洞演化与迁移的相场模拟

朱伟<sup>1</sup>, 程大钊<sup>2</sup>, 刘彩艳<sup>3</sup>, 马聪<sup>1</sup>, 吴璐<sup>1</sup>, 张静<sup>2</sup>

(1. 中国核动力研究设计院 第一研究所, 四川 成都 610005)  
(2. 西北工业大学 凝固技术国家重点实验室, 陕西 西安 710072)  
(3. 西安理工大学 材料科学与工程学院, 陕西 西安 710048)

**摘要:** 堆芯关键部件材料 Fe-Cr 基奥氏体钢在高温和辐照环境下长时服役, 辐照空位簇聚形成空洞导致辐照肿胀和硬化现象。本模拟采用相场方法耦合中心温度场和一维温度场研究 Fe-Cr 合金空位簇聚和空洞演化行为。计算结果表明, 中心温度场下, 温度梯度促使空位向中心温度高的区域迁移, 导致中心高温区域空位浓度高, 优先出现空洞形核, 空洞尺寸大, 低温区域空位浓度低, 空洞尺寸小; 一维温度场下, 体扩散机制控制下, 空洞的迁移速度与温度梯度正相关, 与初始孔径无关; 表面扩散机制控制下, 空洞的迁移速度与温度梯度正相关, 与初始孔径负相关。该研究结果启发局域组织老化引起的导热不均材料或宏观温度梯度下服役部件的组织性能预测。

**关键词:** 温度场; 相场; 空洞; 迁移; 体扩散; 表面扩散

中图分类号: TL341

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2024)08-2193-07

Fe-Cr 基奥氏体钢由于具有良好的耐高温、耐腐蚀和优异的力学性能和物理化学相容性, 常用于核反应堆压力容器或堆芯结构材料<sup>[1-2]</sup>。核电材料长期在高温高压和强辐照环境下服役, 形成独特的空洞、位错环、气泡等辐照损伤缺陷组织<sup>[3]</sup>。高温应力加速辐照损伤组织的迁移、溶合及粗化, 损害合金性能, 导致材料失效。

堆芯材料的温度分布与其服役位置有关, 也与材料自身的微观组织有关。不同位置或微观组织处的温度差异形成的温度梯度引起微观辐照组织上的差异。温度梯度导致的热扩散或 Soret 效应<sup>[4]</sup>引起浓度梯度, 导致空位浓度分布不均, 间接导致空洞的不均匀分布, 使材料发生不均匀膨胀, 影响材料力学性能。Hu 等<sup>[5]</sup>使用相场方法研究了温度梯度下空洞的迁移行为, 一维温度场下, 空洞会沿着温度梯度朝着高温方向移动, 中心温度场下, 会在中心温度高处形成大的中心空洞。Wen 等<sup>[6]</sup>使用相场方法研究温度梯度下残余应力对氦泡在铁基体中的迁移行为的影响, 结果表明, 气泡迁移速度随拉伸残余应力、温度梯度和平均温度的增加而增大, 随压缩残余应力和气泡半径的增加而减小。Zahedmanesh 等<sup>[7]</sup>研究热梯度对热迁移和电迁移诱导

Cu 纳米线空洞成核的影响, 当沿线的温度变化超过 25 °C 时, 仅热迁移就会导致 Cu 纳米线中的空位形核长大。

空洞在基体中的迁移是由不同类型的扩散机制控制, 包括体扩散、表面扩散<sup>[5]</sup>和蒸汽传输<sup>[8]</sup>。尺寸较小的纳米级空洞主要通过体扩散和表面扩散机制进行迁移<sup>[8]</sup>。空洞表面附近的原子或空位通过周围的基体从表面的某一位置运动到另一位置, 称为体扩散, 体扩散控制的空洞迁移是由温度梯度导致的; 而表面扩散是原子或空位沿着空洞表面扩散, 与体扩散的区别为表面扩散时周围的基体原子不发生交换, 表面扩散控制的空洞迁移也是由温度梯度导致的; 而对于尺寸较大的微米级空洞, 主要通过蒸汽传输机制进行迁移<sup>[8]</sup>, 基体原子在空洞迁移前端蒸发, 以气相形式穿过空洞内部, 在后端发生凝结导致空洞迁移, 其驱动力为空洞前后两端固体物质的平衡蒸汽压不同。

本研究建立了温度梯度作用下 Fe-Cr 合金中空洞形核长大的相场模型。首先, 给定中心温度场, 在中心温度场下放置双空洞模型, 研究双空洞模型在中心温度场下的演化, 并在此基础上研究了中心温度场下空洞的聚集、形核和长大现象。通过在 Cahn-Hilliard

收稿日期: 2023-10-08

基金项目: 国家自然科学基金 (U2267253, 51704243); 陕西省自然科学基金基础研究计划项目 (2022JM-238)

作者简介: 朱伟, 男, 1984 年生, 博士生, 副研究员, 中国核动力研究设计院第一研究所, 四川 成都 610005, E-mail: 157685076@qq.com

运动方程中添加平流项的方式,研究了温度梯度下不同迁移机制、温度梯度和初始孔径对 Fe-Cr 合金中空洞迁移行为的影响。

## 1 相场模型

### 1.1 运动方程和自由能泛函

基于金兹堡朗道自由能思想,本研究采用保守场序参量  $c_v$  描述空位浓度,非保守场序参量  $\eta$  描述非均匀系统的长程有序,构造体系自由能。空洞中空位浓度  $c_v$  为 1,  $\eta$  为 1; 基体中空位浓度为平衡浓度  $c_v^0$ ,  $\eta$  为 0; 在空洞到基体的过渡界面处,序参量  $\eta$  从 1 到 0 连续变化。系统的总自由能包括化学自由能和梯度能<sup>[9]</sup>,由下式给出,

$$F = \int_V \left[ \frac{h(\eta)f(c_v, T) + \omega(c_v, \eta)}{2} + \frac{1}{2} \kappa_v |\nabla c_v|^2 + \frac{1}{2} \kappa_\eta |\nabla \eta|^2 \right] dV \quad (1)$$

式中,  $h(\eta) = (\eta - 1)^2 (\eta + 1)^2$  为插值函数,基体中  $\eta = 0$ ,  $h(\eta) = 1$ , 空洞中  $\eta = 1$ ,  $h(\eta) = 0$ ;  $f(c_v, T)$  表示化学自由能,  $T$  为绝对温度;  $\omega(c_v, \eta)$  是双势阱函数;  $\kappa_v$  和  $\kappa_\eta$  分别表示空位  $c_v$  和序参量  $\eta$  的梯度项系数。

$f(c_v, T)$  具体表达式如下<sup>[10]</sup>,

$$f(c_v, T) = k_B T \left[ (1 - c_v) \ln(1 - c_v) + c_v \ln c_v \right] + b_4 c_v^4 + b_3 c_v^3 + b_2 c_v^2 + b_1 c_v + b_0 \quad (2)$$

式中,  $k_B$  为玻尔兹曼常数;  $b_0$ 、 $b_1$ 、 $b_2$ 、 $b_3$ 、 $b_4$  均为常数;  $\omega(c_v, \eta)$  具体表达式为<sup>[9]</sup>,

$$\omega(c_v, \eta) = -A(c_v - c_v^0)\eta(\eta + 2)(\eta - 1)^2 + B(c_v - 1)^2 \eta^2 \quad (3)$$

式中,  $A$  和  $B$  均为常数。

空位  $c_v$  和序参量  $\eta$  的动力学演化分别由 Cahn-Hilliard 方程<sup>[11]</sup>和 Allen-Cahn 方程<sup>[12]</sup>描述。

Cahn-Hilliard 方程:

$$\frac{\partial c_v}{\partial t} = \nabla \cdot \left( M_v \nabla \frac{\delta F}{\delta c_v} \right) + \xi_v(r, t) + g_v(r, t) \quad (4)$$

Allen-Cahn 方程:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = -L \frac{\delta F}{\delta \eta} \quad (5)$$

式中,  $M_v$  为空位的迁移率;  $\xi_v$  为热起伏引起的空位浓度变化;  $r = (x, y, z)$  为空间坐标;  $t$  为时间;  $g_v$  为空位和间隙原子的净生成率;  $L$  为动力学迁移率;  $M_v$  可通过爱因斯坦-能斯特方程通过扩散系数  $D_v$  表示<sup>[13]</sup>,

$$M_v = \frac{D_v}{k_B T} = \frac{D_0 \exp(-Q^*/k_B T)}{k_B T} \quad (6)$$

式中,  $D_0$  为扩散常数,  $Q^*$  为空位扩散激活能。由于辐照环境下, 空洞内部没有原子存在, 无法发生级联碰撞, 自然也无法产生新的空位, 因此  $g_v(r, t) = [1 - c_v(r, t)] \cdot g_v^0$ , 使  $c_v(r, t) = 1$  (即空洞) 处空位产生速率为 0, 其中  $g_v^0 = 0.01$ 。

在求解之前, 需要先对模型中的各个参数进行无量纲化处理, 具体如下:

$$\Delta x^* = \Delta x / l_0; \quad \Delta y^* = \Delta y / l_0; \quad t^* = t / t_0; \quad M^* = M_v \cdot k_B T / D_0; \\ f^* = f / k_B T; \quad A^* = A / k_B T; \quad B^* = B / k_B T; \quad k_v^* = k_v / (l_0^2 k_B T); \\ k_\eta^* = k_\eta / (l_0^2 k_B T); \quad g_v^* = g_v \cdot t_0; \quad \xi_v^* = \xi_v \cdot t_0; \quad L^* = L \cdot k_B T \cdot t_0. \\ \text{其中, } l_0 \text{ 为特征长度, } t_0 \text{ 为特征时间, 取 } l_0 = \sqrt{\kappa_\eta / k_B T}, \\ t_0 = l_0^2 / D_0.$$

### 1.2 温度梯度下空洞迁移模型

辐照下 Fe-Cr 合金中空洞为纳米级<sup>[14]</sup>, 如第一节所述, 纳米级空洞的迁移机制为体扩散和表面扩散机制。因此本节构建了 Fe-Cr 合金中温度梯度下空洞通过体扩散机制和表面扩散机制传输的相场模型。通过在 Cahn-Hilliard 方程中加入平流项来捕捉温度梯度驱动的空洞迁移<sup>[15]</sup>,

$$\frac{\partial c_v}{\partial t} = \nabla \cdot \left( M_v \nabla \frac{\delta F}{\delta c_v} \right) + \nabla \cdot (v_b c_v) \quad (7)$$

由不可逆热力学中的力-流关系<sup>[16]</sup>可知, 当空洞迁移的驱动力为  $F_b$  时, 其迁移速度为

$$v_b = M_v F_b = D_v F_b / k_B T \quad (8)$$

如图 1 所示, 借助立方体空洞来讨论空洞迁移驱动力  $F_b$ , 假设立方体空洞的边长为  $l$ ,  $\Omega = a_0^3$  为基体原子的体积。当空洞沿着某一方向运动  $\Delta l$  时,  $l^2 \Delta l / \Omega$  个基体原子就沿相反方向移动距离  $l$ , 如果作用在每个基体原子上的力为  $f_b$ , 那么  $l^2 \Delta l / \Omega$  个基体原子就沿相反方向移动距离  $l$  所需的功是  $(l^2 \Delta l / \Omega) \cdot l \cdot f_b = l^3 f_b \Delta l / \Omega$ 。而如果将空洞看成是一个整体, 那么所做的功为  $-F_b \Delta l$  (出现负号是由于空洞的运动方向与基体原子的运动方向相反)。事实上, 无论是将空洞迁移当做一个整体, 还是当做一个个分散的基体原子向相反方向迁移, 其迁移所需的功是相等的。故可推得,

$$F_b = -\left( \frac{4\pi R^3}{3} \right) f_b \quad (9)$$

力  $f_b$  通过二元混合物中的通量-驱动力之间的关系式求得:

$$J_A = -L_{11} \nabla \mu_A - L_{12} \frac{\nabla T}{T} \quad (10)$$

改写成

$$J_A = -L_{11} \nabla \mu_A - L_{12} \frac{\nabla T}{T} = L_{11} (-\nabla \mu_A - \frac{L_{12}}{L_{11}} \times \frac{\nabla T}{T}) \quad (11)$$

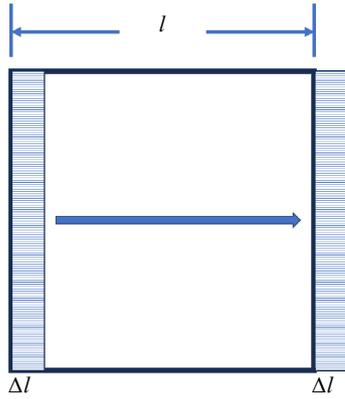


图 1 空洞迁移示意图

Fig.1 Schematic representation of void migration

式中,  $J_A$  是 A 组元的质量通量,  $\mu_A$  是 A 组元的化学位, 系数  $L_{11}$  与扩散系数和热导率有关,  $L_{12}$  是 Soret 效应的系数。式中括号中第一项是由于化学位的梯度导致的力, 第二项是由于温度梯度导致的力, 比值  $L_{12}/L_{11}$  定义为输运热  $Q^*$ 。

故  $f_b$  的表达式如下式所示:

$$f_b = -\frac{Q^*}{T} \left( \frac{dT}{dx} \right)_b \quad (12)$$

式中,  $(dT/dx)_b$  是空洞内部的温度梯度。考虑式 (8)、(9)、(12), 忽略空洞内部温度梯度与基体温度梯度的差异, 即令  $(dT/dx)_b = dT/dx$ , 后者为基体中的温度梯度, 可得,

$$v_b = \frac{4\pi D_v R^3 Q^*}{3k_B T^2 a_0^3} \left( \frac{dT}{dx} \right) \quad (13)$$

对于体扩散, 其扩散系数  $D_v = 3a_0^3 D_{vol} / (4\pi R^3)$ ,  $D_{vol}$  为空位在基体中的扩散系数,  $R$  为空洞半径<sup>[17]</sup>。当空洞的迁移行为是由体扩散机制控制时, 空洞迁移速度的最终表达式为,

$$v_b = \frac{D_{vol} Q_v^*}{k_B T^2} \left( \frac{dT}{dx} \right) \quad (14)$$

式中,  $Q_v^*$  是空位通过体扩散机制扩散的输运热。对于表面扩散, 其扩散系数  $D_v = 3a_0^4 D_s / (2\pi R^4)$ ,  $D_s$  为空位通过表面扩散的扩散系数<sup>[17]</sup>。当空洞的迁移行为是由表面扩散机制导致时, 空洞迁移速度的最终表达式为:

$$v_b = \frac{2D_s Q_s^* a_0}{k_B T^2 R} \left( \frac{dT}{dx} \right) \quad (15)$$

式中,  $Q_s^*$  是空位通过表面扩散机制扩散的输运热。

## 2 结果与讨论

### 2.1 温度场下空洞的动力学演化

引入不均匀温度场研究温度梯度作用下 Fe-Cr 合金中空位浓度及空洞的演化。为便于求解, 温度场设置为中心温度场, 采用周期性边界条件, 使用傅里叶谱方法对相场方程进行求解, 温度分布具体表述如下:

$$T = \begin{cases} T_1 + \frac{T_2 - T_1}{2} [\cos(\frac{R_1}{R_0})\pi + 1], & R_1 \leq R_0 \\ T_1, & R_1 > R_0 \end{cases} \quad (16)$$

式中,  $T_2$  为中心温度场温度最高值,  $T_1$  为温度最低值,  $R_1$  为模拟区域内任意一点距离模拟中心的距离,  $R_0$  为所设置中心温度场的半径。温度场分布如图 2 所示, 在体系中心处温度最高为  $T_2=900$  K, 向外侧扩展温度逐渐降低直至  $T_1=600$  K 温度。

为研究温度梯度场对已存在空洞稳定性的影响, 在图 2 所示温度场中预设一双空洞模型, 其演化如图 3 所示。从图 3 可以看出, 在温度场作用下, 两空洞均向高温区扩散, 导致双空洞逐渐失稳, 最终在高温区溶合形成一个新的空洞。温度梯度驱使空位从低温区朝高温区迁移, 从而产生 Soret 效应<sup>[4]</sup>, 即温度梯度驱动的热扩散引起浓度梯度。

为进一步澄清温度场作用下空洞的演化规律, 在图 2 所示温度场下研究 Fe-Cr 合金在温度梯度下的空洞动力学演化, 并与无温度梯度下 Fe-Cr 合金中的空洞演化结果进行对比, 结果如图 4 所示。图 4a 和 4b 对比发现, 由于温度梯度促进空位由低温区域向高温区域迁移, 导致存在温度梯度时中心高温区域比均匀温度条件下空位浓度高很多, 空洞优先形核长大; 中心温度场下, 高温区的空洞尺寸比低温区的尺寸更大, 并且由于空位向高温区扩散导致低温区的空位浓度低、空洞形核率低, 而均匀温度场下空洞分布和尺寸都较均匀。此外, 在中心高温温度场作用下, 中心高温

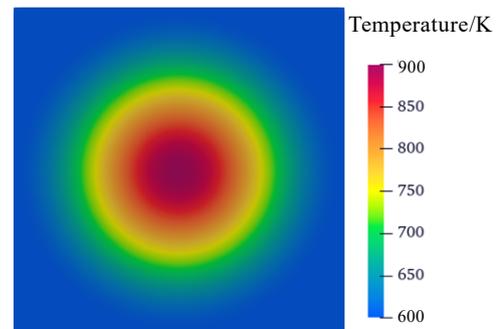


图 2 模拟区域中的中心温度场温度分布

Fig.2 Central temperature field in simulation

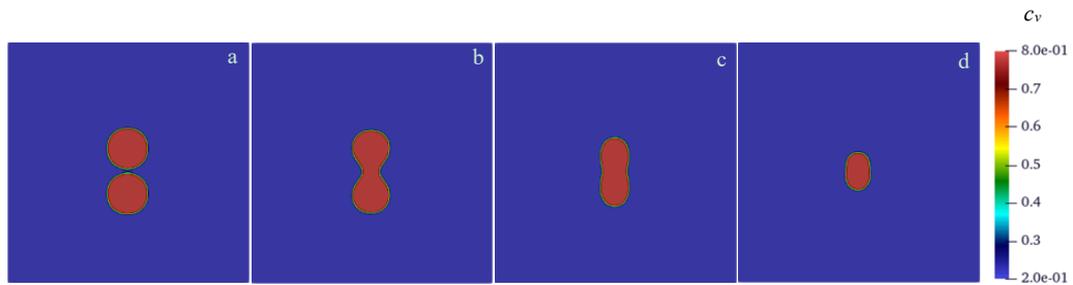


图 3 中心温度场存在时空洞的定向迁移和融合

Fig.3 Directional migration and coalesce of voids in the central temperature filed: (a)  $1 t_0$ , (b)  $4000t_0$ , (c)  $5000t_0$ , and (d)  $10000t_0$

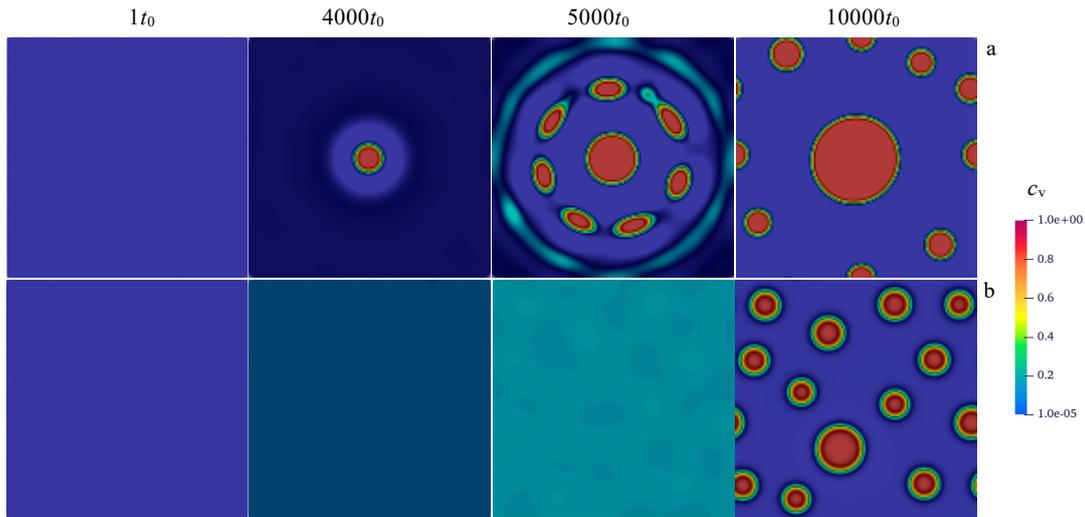


图 4 中心温度场和均匀温度场条件下空洞组织演化对比

Fig.4 Voids microstructures evolution in a central temperature field (a) and in homogenous temperature field (b)

区附近的空洞演化成椭球形有序排列,这是由于这些空洞在靠近中心位置和远离中心位置的温度差异所致。

### 2.2 温度梯度下空洞迁移行为

温度梯度不仅会引起空洞在高温区域优先形核长大,还会驱使空洞沿着温度梯度的方向迁移,且实验表明,对于半径较小的空洞,体扩散和表面扩散是空位和原子扩散的主要机制<sup>[5]</sup>。因此本节通过在相场控制方程中加入平流项的方式分别讨论体扩散机制和表面扩散机制控制下的空洞迁移行为,如图 5 和图 6 所示。

在一维温度场中预设一个无量纲初始孔径  $R^*=10$  的空洞,分别设置不同的无量纲温度梯度  $\nabla T^*=1.0、1.5、2.0$ ,研究了体扩散机制控制下温度梯度对空洞迁移和演化的影响,结果如图 5a 所示。可以看出,随着演化时间推移,空洞持续的从低温区向高温区迁移,在迁移过程中,空洞沿着温度梯度的方向被拉长,这是由于空洞前端温度高,空位迁移率  $M_v$  较大,扩散速度快,末端温度低,空位迁移率  $M_v$  较小,扩散速度慢所致。通过图 5a 中  $5 \times 10^4 t_0$  下演化结果的对比可以看出,温度梯度越大,空洞迁移越快,且空洞两端迁移

率差别越大,因此空洞被拉长的幅度更大。

研究了体扩散机制下初始孔径对空洞迁移行为的影响,给定无量纲温度梯度  $\nabla T^*=1.5$ ,无量纲化初始孔径  $R^*$  分别为 10、15 和 20,演化结果如图 5b 所示。可以看出,同一时间步长下不同初始孔径的空洞迁移距离无明显变化,其形貌变化有略微区别,对比图 5b 中  $5 \times 10^4 t_0$  下演化结果,发现同一温度梯度下,随着半径的增加,空洞虽然都被沿着温度梯度的方向拉长,但是初始孔径更大的空洞形貌改变较小,且其沿着温度梯度方向前端较尖,后端较宽。进一步统计了不同条件下空洞前缘面位置即空洞沿温度梯度方向的最前端位置随时间的变化,如图 7a、7b 所示。可以看出,随着温度梯度的增加,空洞迁移速度明显增加,而初始孔径的改变并不会影响空洞位置随时间变化曲线的斜率,即不影响空洞迁移速度。

众所周知,原子或空位在自由表面的迁移率通常比它们在基体中的迁移率大几个数量级,因此,研究表面扩散机制下空洞的迁移行为具有重要的意义。在一维温度场中预设一个无量纲半径  $R^*=10$  的

空洞, 分别设置不同的无量纲温度梯度  $\nabla T^* = 1.0, 1.5, 2.0$ , 研究温度梯度对空洞迁移和形貌演化的影响, 结果如图 6a 所示。表面扩散机制控制下, 随温度梯度增大, 其迁移速度均增大, 沿着温度梯度的方向也被拉长。温度梯度越大, 被拉长的越明显。这些现象与体扩散机制控制下温度梯度对空洞迁移行为的影响类似。

表面扩散机制下初始孔径的改变对迁移速率的影响与体扩散机制下的结果不同。给定无量纲温度梯度

$\nabla T^* = 1.5$ , 无量纲化初始孔径  $R^*$  分别为 1.0、1.5 和 2.0, 演化结果如图 6b 所示, 表面扩散机制下, 随着初始孔径的增大, 同一时间步长下, 其纵向位置的改变明显变小, 形貌改变也随之不明显。分别统计表面扩散机制下不同温度梯度和不同初始孔径下空洞前缘面位置随时间的变化, 统计结果如图 7c、7d 所示。可以看出, 无论是体扩散机制还是表面扩散机制, 一定温度梯度和初始孔径下, 空洞前缘面位置随时间的变化都近似成一条直线, 说明空洞的迁移速度基本不变。

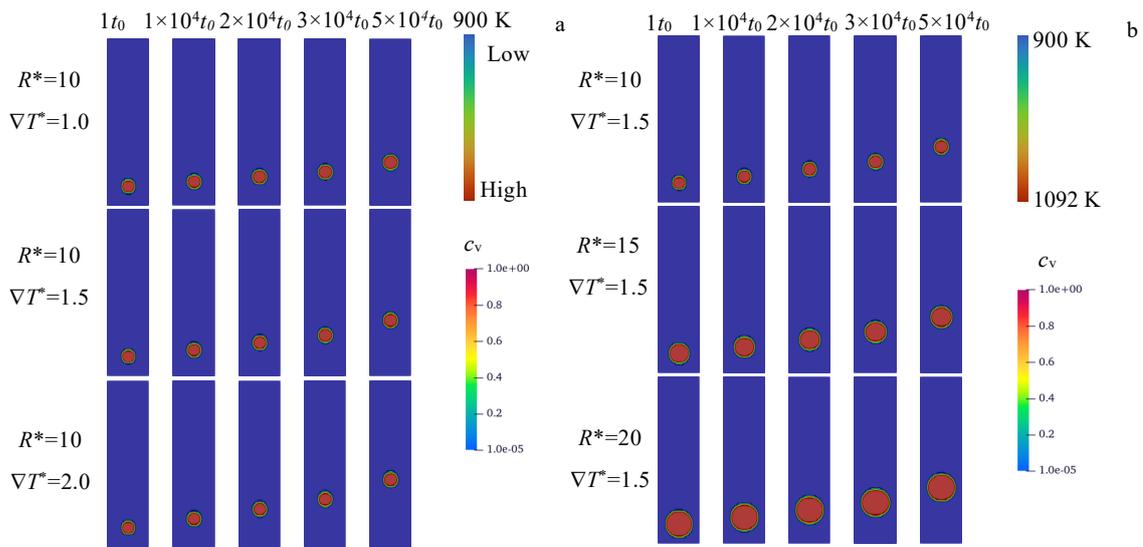


图 5 体扩散机制控制下空洞迁移

Fig.5 Void migration with a bulk diffusion mechanism: (a) migration of  $R^*=10$  void upon various temperature gradients and (b) migration of voids with different initial sizes upon  $\nabla T^*=1.5$

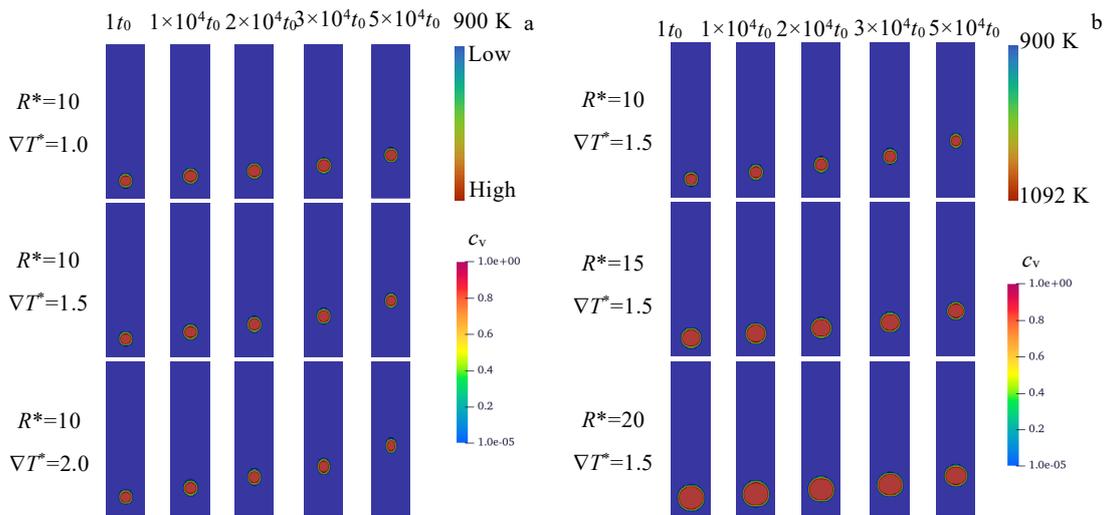


图 6 表面扩散机制控制下空洞迁移

Fig.6 Void migration with a surface diffusion mechanism: (a) migration of  $R^*=10$  void upon various temperature gradients and (b) migration of voids with different initial sizes upon  $\nabla T^*=1.5$

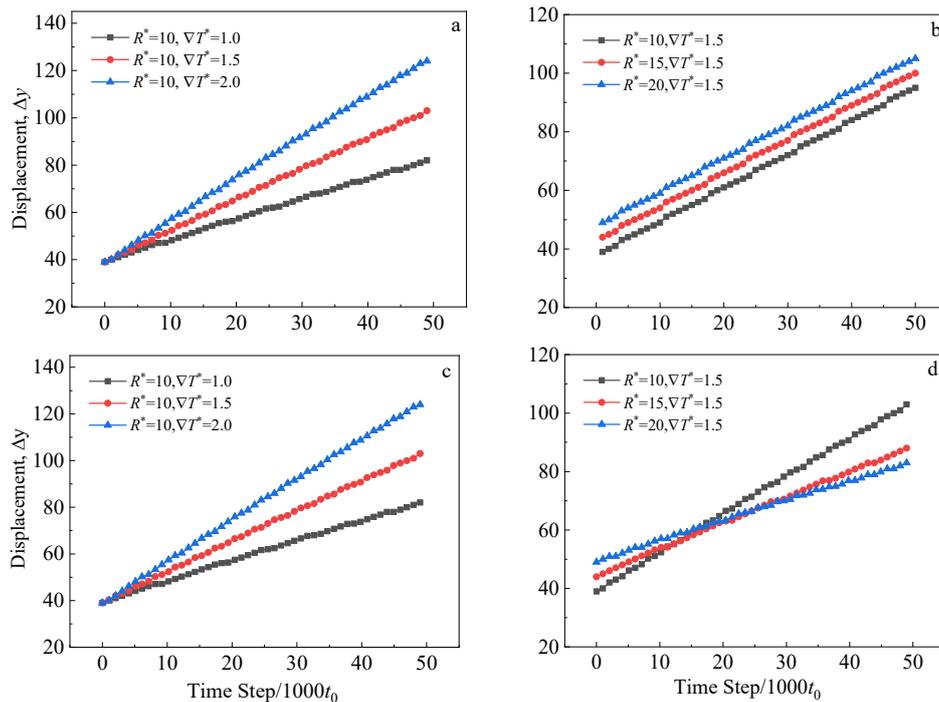


图 7 空洞迁移前端位置随时间变化

Fig.7 Temporal evolution of voids leading edge position: (a-b) voids migration through bulk diffusion mechanism, and (c-d) voids migration through surface diffusion mechanism

### 3 结 论

1) 温度梯度驱使空位朝着温度更高的区域迁移, 因此点缺陷在高温区的浓度远远高于低温区的, 从而产生所谓的 Soret 效应。中心温度场作用下, 空位和空洞向中心高温区扩散, 在高温区形核长大以及溶合, 高温区空洞尺寸大, 密度小。

2) 相场模型耦合热-物质传输理论描述温度梯度下 Fe-Cr 合金中空洞的迁移行为, 在体扩散机制控制下空洞沿着温度梯度方向由低温区域向高温区域迁移, 其形貌沿着温度梯度的方向被拉长, 其迁移速度与温度梯度成正相关, 与初始孔径尺寸无关。

3) 进一步采用表面扩散机制描述空洞迁移, 空洞方向由低温区域向高温区域迁移时形貌发生了改变, 其迁移速度与温度梯度呈正相关, 而与初始孔径成负相关。

#### 参考文献 References

[1] Granberg F, Byggmästar J, Nordlund K. *Journal of Nuclear Materials*[J], 2020, 528: 151843  
 [2] Tunes Matheus A, Greaves Graeme, Kremmer Thomas M et al. *Acta Materialia*[J], 2019, 179: 360  
 [3] Gao Zhiying, Huang Jia, Liu Haocheng et al. *Scripta*

*Materialia*[J], 2023, 232: 115497  
 [4] Platten Jean K. *Journal of Applied Mechanics*[J], 2005, 73(1): 5  
 [5] Hu S Y, Henager C H. *Acta Materialia*[J], 2010, 58(9): 3230  
 [6] Wen Peng, Tonks Michael R, Phillpot Simon R et al. *Computational Materials Science*[J], 2022, 209: 111392  
 [7] Zahedmanesh Houman, Croes Kristof. *Microelectronics Reliability*[J], 2020, 111: 113769  
 [8] Vance Ian W, Millett Paul C. *Journal of Nuclear Materials*[J], 2017, 490: 299  
 [9] Rokkam Srujan, El-Azab Anter, Millett Paul et al. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2009, 17(6): 064002  
 [10] Yang Hui(杨 辉), Feng Zehua(冯泽华), Wang Heran(王贺然) et al. *Acta Physica Sinica(物理学报)*[J], 2021, 70(5): 214  
 [11] Li Yulan, Hu Shenyang, Sun Xin et al. *Journal of Nuclear Materials*[J], 2010, 407(2): 119  
 [12] Pendl Kevin A, Hochrainer Thomas. *Computational Materials Science*[J], 2023, 224: 112157  
 [13] Jiang Yanbo, Liu Wenbo, Li Wenjie et al. *Computational Materials Science*[J], 2021, 188: 110176  
 [14] Sun C, Zheng S, Wei C C et al. *Scientific Reports*[J], 2015, 5(1): 7801  
 [15] Wang Yafeng, Xiao Zhihua, Hu Shenyang et al.

- Computational Materials Science*[J], 2020, 183: 109817
- [16] Mauro John C. *Materials Kinetics*[M]. Amsterdam: Elsevier, 2021: 19
- [17] Zhang Liangzhe, Tonks Michael R, Millett Paul C *et al.* *Computational Materials Science*[J], 2012, 56: 161

## Phase Field Study of Voids Evolution and Migration of Fe-Cr Alloy upon Temperature Gradient

Zhu Wei<sup>1</sup>, Cheng Dazhao<sup>2</sup>, Liu Caiyan<sup>3</sup>, Ma Cong<sup>1</sup>, Wu Lu<sup>1</sup>, Zhang Jing<sup>2</sup>

(1. The First Sub-Institute, Nuclear Power Institute of China, Chengdu 610005, China)

(2. State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

(3. School of Material Science and Engineering, Xi'an University of Technology, Xi'an 710048, China)

**Abstract:** The austenite Fe-Cr steels, the critical in-pile components, has been in service for a long time under high temperature and irradiation; the irradiated vacancies aggregate into voids leading to irradiation swelling and hardening. In this paper, the phase field method coupled the central temperature field and one-dimensional temperature field was used to study the vacancy clustering and voids' evolution behavior of Fe-Cr alloy. The calculation results show that in the central temperature field, the temperature gradient promotes the migration of vacancy to the region with high central temperature, leading to high vacancy concentration in the central high temperature region, giving priority to void nucleation and large void size; while is leads to low vacancy concentration and small void size in the low temperature region. In one-dimensional temperature field, under the control of bulk diffusion mechanism, the migration velocity of the void is positively correlated with the temperature gradient, but not with the initial radius of void. Under the control of the surface diffusion mechanism, the migration velocity of the void is positively correlated with the temperature gradient but negatively correlated with the initial radius of void. The results of this study provide insights into the prediction of microstructure and properties of service components in materials with uneven thermal conductivity due to local microstructure aging or under macroscopic temperature gradients.

**Key words:** temperature gradient; phase field; voids; migration; bulk diffusion; surface diffusion

---

Corresponding author: Zhang Jing, Ph. D., Professor, State Key Laboratory of Solidification Processing, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, P. R. China, E-mail: jingzhang@nwpu.edu.cn