氢对低活化钢弹性性能的影响：

模拟与实验的研究

（申请清华大学工学硕士学位论文）

培养单位：材料学院

学 科：材料科学与工程

研 究 生：朱思南

指导教师：张 弛 副教授

二○一八年十一月

**Hydrogen’s Influence on RAFM steels’ Elastic Properties: Simulation Combined with Experiment**

Thesis Submitted to

**Tsinghua University**

In partial fulfillment of the requirement

for the degree of

**Master of Science**

in

**Material Science and Engineering**

by

**Zhu Sinan**

Thesis Supervisor: A. Professor Zhang Chi

**November, 2018**

关于学位论文使用授权的说明

本人完全了解清华大学有关保留、使用学位论文的规定，即：

清华大学拥有在著作权法规定范围内学位论文的使用权，其中包括：（1）已获学位的研究生必须按学校规定提交学位论文，学校可以采用影印、缩印或其他复制手段保存研究生上交的学位论文；（2）为教学和科研目的，学校可以将公开的学位论文作为资料在图书馆、资料室等场所供校内师生阅读，或在校园网上供校内师生浏览部分内容。

本人保证遵守上述规定。

**（保密的论文在解密后遵守此规定）**

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| 作者签名： |  |  | 导师签名： |  |
| 日 期： |  |  | 日 期： |  |

摘要

Abstract

# 第1章 绪论

## 1.1 课题背景与发展现状

### 1.1.1 核聚变能的研究背景

人类世界的正常运转有赖于能源的持续供应。

回顾社会的发展历史，人类文明逐步发展的进程，正是伴随着能源更迭的进程。在长期的农耕文明进程中，低下的生产力使得绝大多数的能源需求仅仅停留在刀耕火种的层面，以柴草为燃料的能源体系可以轻易地维系全人类的生产活动。至农耕文明达到高度发达的水平，生产方式趋于多样化，人口数量稳定增长，人类对能源的需求进一步提升，能源结构开始从生物质能开始向矿物质能转变，煤炭的挖掘和使用逐渐普及。工业革命后，社会整体的工业化、机械化必不可少地扩大了供能的需求，化石燃料开始占据世界能源体系的主导，人类社会对能源的消耗量发生爆炸性增长。到了近现代，随着社会的高速发展，科技不断进步，人口总量爆炸式增长，人类对能源的消耗和需求与日俱增，化石燃料的过度开采逐渐成为一项世界性难题。如表1.1所示，在当今世界能源体系中，占主导地位的原油和天然气的已探明储量目前已严重不足。

表1.1 世界主要能源原料储量及预估剩余使用寿命（2009）【】

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| 燃料种类 | 已探明燃料储量 | 预估剩余使用时间 |
| 煤 | 0.9×1012 吨 | 210年 |
| 原油 | 1.3×1012 桶 | 30-40年 |
| 天然气 | 1.9×1014 m3 | 60-70年 |
| 铀（矿石） | 4.7×106 吨 | 85-270年 |
| 铀（海洋） | 4.5×109 吨 | 81000-260000年 |

关乎全人类命运的能源危机已迫在眉睫。当前世界赖以生存的以化石燃料为根基的能源体系有三大显著弊端：其一，正如上文所述，化石燃料的总储量十分有限，人类对化石能源的开采和依赖有增无减，始终处于不可逆消耗的化石能源终有耗尽的一天；其二，化石燃料的使用伴随着环境污染与温室气体排放，会引起一系列的气候问题，如图1.1所示，世界范围内至少有6个国家的全年二氧化碳排放量超过一百万吨，大大加剧了温室效应的进程；其三，对化石燃料的争夺已经引发了众多政治博弈与军事冲突，造成了一系列严重的社会问题，中东长期以来的石油纷争正是突出体现【】。为了解决能源问题，科研工作者试图寻找清洁、安全、高效、持久的新型能源，使新能源逐步取代现有的化石燃料，最终形成可持续发展的新型能源体系。这也是当今能源科学领域的核心问题。

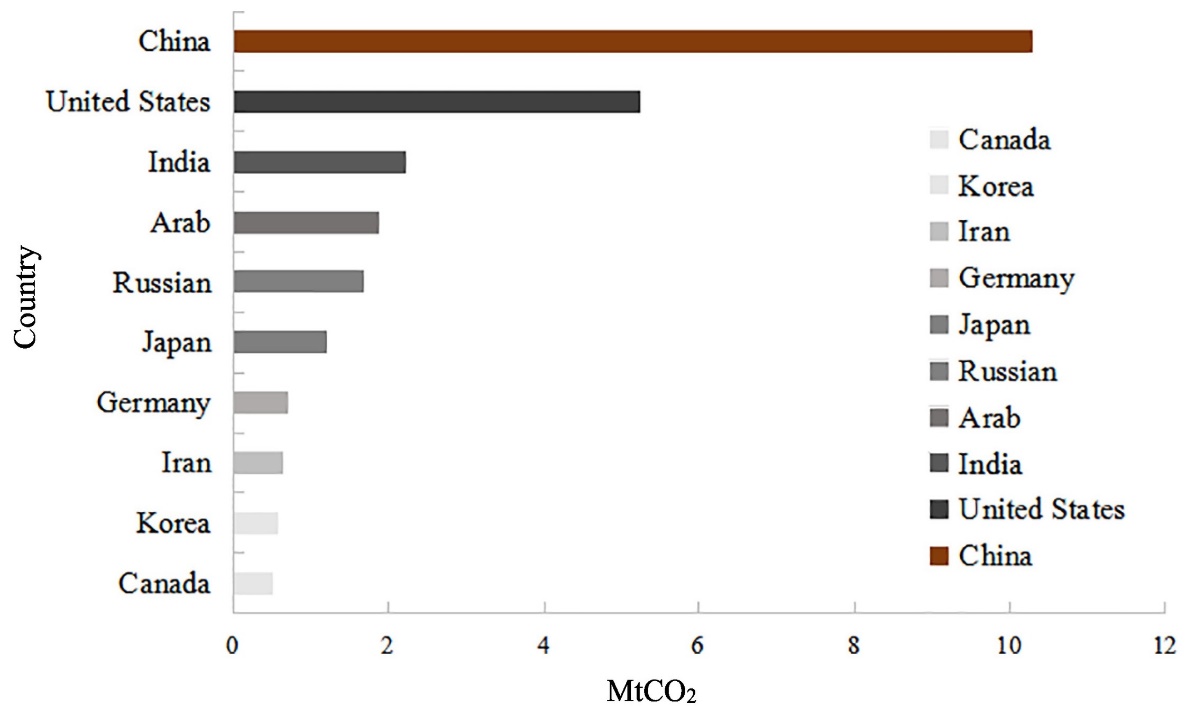


图1.1 全年碳排放最高的十个国家（2014）【】

常见的新型能源备选方案中，依托自然因素发展起来的太阳能、水能、地热能、风能、潮汐能等新型能源具备良好的可持续性，对环境友好，但受到气候、地域、环境限制较大，能量转换效率较低，技术手段尚未完全成熟，目前很难大规模投入运用；基于重核链式反应的核裂变能具有很高的反应效率，但对原料和技术的要求过高，铀矿等重核元素矿石的总储量有限，大批核裂变原料被世界主要有核大国把持，而从海洋中提取高浓度核裂变原料的技术目前尚未成型，历史上的切尔诺贝利、福岛等核泄漏事件也为核裂变能的应用前景蒙上了一层阴影；基于氢同位素的核聚变能开发利用最少，但却因其诸多优良的特性而最具发展前景。聚变反应的原料主要是氢的同位素，以地球表面海洋的储氢量而言，可谓取之不尽用之不竭；聚变反应的反应产物主要是氦，这一惰性气体对环境友好；聚变反应在控制反应进程的状态下，不存在放射性物质泄漏等风险，具有良好的安全性。由此，核聚变能成为最有希望一劳永逸地解决未来能源危机的一种新型能源。

聚变反应是指由轻原子核聚合反应产生重原子核，并释放出大量能量的过程。如图1.2所示，常见的聚变反应以氢同位素氘和氚作为原料，经过聚合反应生成中子和氦。反应中会产生巨大的能量。为了使反应充分，该反应装置的核心温度须达到1至2亿摄氏度量级【】。这对控制反应程度、保持反应堆稳定性都是一项巨大的挑战。



图1.2 核聚变反应示意图【】

事实上，核聚变反应堆的结构与实验设计，与早年核裂变反应堆的发展模式可谓一脉相承。图1.3给出了核裂变反应堆以及核聚变反应堆结构装置的演变历史。在1941—1942年的美国哥伦比亚大学，Fermi与Szilard等人主导设计了最初的核裂变实验堆。至1942年12月，美国芝加哥大学设计并搭建了第一座具有自行维持反应效果的链式核裂变反应实验堆。1943年11月，美国橡树岭实验室搭建了反应功率达到1MW的石墨核裂变反应堆，这一反应堆从设计到完成建设仅仅经历了9个月的时间。尔后，前苏联、英国、法国等国家也纷纷开始设计和搭建反应堆。军事领域的原子弹、氢弹的横空出世，也为核能研究打了一针强心剂，核裂变能与核聚变能的商用和民用被广泛看好。随着材料科学的迅速发展，核反应堆各部件的材料选择也逐渐趋于理论化和规范化。【】其中前苏联在50年代设计的托克马克装置获得了划时代的巨大成功，被广泛运用至今。相比之下，可控且自维持（self-sustaining，要求局部反应的能量输出与能量输入的比值大于1）的核聚变反应堆的研究和探索要缓慢得多，核心问题正是直面反应装置的结构材料的选择，具体需要解决的问题是材料需要面对高能等离子体的冲击，这对化学稳定性和高温结构稳定性、高温力学性能都有较高的要求。自从托克马克装置的设计理念问世，关于可控核聚变反应堆的建设就一直是能源领域研究和关注的焦点。

经过50多年的研究和探索，核聚变能的开发，已经由核聚变堆的理论设计阶段过渡到了核聚变实验堆各反应部件工程化和商业化可行性、可靠性的实验验证阶段。目前主要的研究焦点包括：氢同位素燃烧可行性、长脉冲的稳定性、屏蔽包层构建的可靠性、氚增殖与回收的工程实现等等【】。具体地，由美国、中国、俄罗斯、欧盟、日本、韩国、印度等主要有核国家联合开展的国际热核聚变实验堆（ITER，International Thermalnuclear Experiment Reactor），正肩负着可控核聚变商用与民用的历史重担。

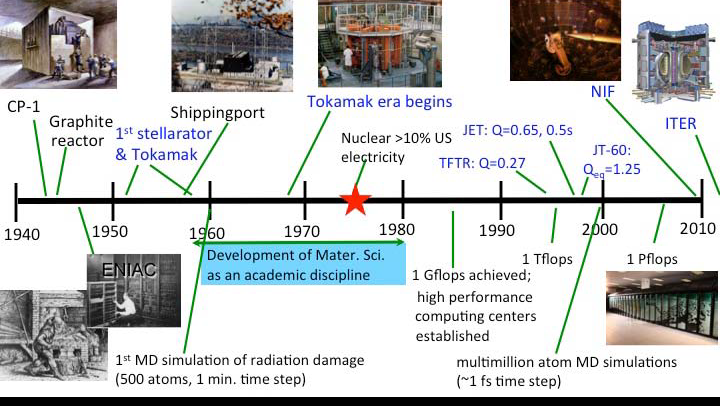


图1.3 核裂变与核聚变反应堆结构发展历程

ITER计划成型于20世纪80年代末期，起初由美国、苏联、欧盟、日本共同开始设计。到了1990年，ITER计划的概念设计已全部完成；在1998年，各参与国进一步完成了ITER计划的工程设计，以及一部分的技术研究工作，并提出了在原料和工程成本上更为节约的先进托克马克反应堆计划；在2001年完成的《工程设计最终报告》，标志着项目整体规划与工程设计的完成；2006年11月，参与项目的7方正式签署协定，ITER计划正式启动。

作为历史上规模最大的国际科技合作计划之一，ITER计划主要分三个阶段进行：第一阶段的目标是完成实验堆建设，具体地，要建设一个聚变功率不低于500MW，能够支持400s以上的原料燃烧的托克马克聚变实验堆，表1.2给出ITER目前的参数设计情况。在实验堆中将得到高效可用的氘氚燃烧等离子体，为后续设计商用聚变反应堆提供指导方向，积累实验数据。第二阶段的主要任务是对核聚变材料的可靠性、燃料的性能、聚变堆的可开发性进行实验验证，期间会继续探索和实现具有高稳定性、高约束、高持续时间的高能等离子体，改进结构材料的物理和化学性能，检验各个部件在辐照损伤、周期性热负载、高温下机械负载、高能电磁辐射下的化学性能及力学性能的稳定性，研究实时大规模制氚技术等等。第三个阶段的工作是进行实验堆的拆卸、实验设备的处理，进行实验结论汇总和相关的理论总结。基于整体实验流程和实验结论，各参与方还将努力建设商用核聚变反应示范堆【】，为最终核聚变能的商用和民用做铺垫。

表1.2 ITER参数设计【】

|  |  |
| --- | --- |
| 性能指标 | 参数设计 |
| 脉冲时间 | ≥400s |
| 聚变功率 | 500MW |
| 能量增益 | ≥10 |
| 等离子体电流 | 15—17.4MA |
| 等离子体中心磁场 | 5.3T |
| 加热及驱动电流功率 | 73—100MW |

当前世界各国对核聚变反应堆的建设和探索还处于初级阶段，核聚变能的和平利用任重而道远。

### 1.1.2 核聚变反应堆结构材料

核聚变反应具有极其严苛的反应条件。如式（1-1），从核聚变反应的反应方程式可知，反应中释放的中子流能量达到14MeV，反应主体会保持极端高温。这对反应堆结构材料的性能提出了极高的要求。具体地，为解决核聚变反应堆结构材料的选择，当前面临的基本需求有：选择能够接触等离子体而确保性质相对稳定的材料，对接触界面的材料进行改良；克服核聚变反应中结构材料性能的退化，特别是辐照环境下性能的退化；对核聚变反应起到充分的保护和聚合作用，以较高的效率收集和传输核聚变反应产生的能量【】。

 (1-1)

当前主流的核聚变反应装置设计是上述的托卡马克装置，该装置通过磁约束进行驱动，创造氢同位素氘、氚聚变的超高温高压环境，从而实现可控核聚变反应堆的构建。如图1.4所示，托克马克实验装置的结构材料主要指包层系统，其主体功能在于进行氚增殖、能量增殖，并对辐射进行屏蔽。包层系统中的第一壁材料面向高能等离子体，服役期间需要承受电磁辐射、高温、化学相互作用、强中子流、周期性的热负载与机械负载，这对第一壁材料的选择提出了极高的要求，不仅需要优越的抗辐照肿胀性能，还需要具备充分的稳定性，以维持反应中的化学与物理稳定性，并且能够实现高温服役，具备优越的高温力学性能。除了需要满足聚变堆复杂而严苛的服役环境，为了尽可能地减少辐照产生的放射性，降低核辐射及核泄漏事故风险，包层第一壁材料还需要具备低活化的性能特征【】。所谓低活化，是指特定的材料在受到辐照后，形成的放射性主要来自于中等寿命或短寿命的元素，这样的材料可以在较短的时间内进行安全检修操作【】。除此之外，冷却反应也是聚变反应堆中重要的工作，因此结构材料中应当包含冷却剂成分，这对材料与冷却介质之间的相容性也提出了一定的需求。

C:\Users\zsn12\Desktop\论文写作\托克马克.tif

图1.4 托克马克装置示意图

对托克马克装置结构材料的早期研究始于对核裂变反应堆的继承，比如尝试采用传统奥氏体不锈钢等材料作为结构材料。在发现高能等离子体对铁基、镍基合金的严重污染后，各类表面材料、涂层材料被引入，用于结构材料的保护。

直至1980年代，人们通过实验发现了低活化性材料（reduced-activation materials）在辐照反应中的优良表现。所谓的低活化标准主要考察安全性、人工检修难易程度、长期废物处理等原则，具体地，低活化性材料在经受长期中子辐照后，仍然可以维持很低的放射性，有利于人为检修和维护，在废弃之后的长期处理中也可以尽可能做到环境友好。图1.5给出基于上述准则的低活化性元素。这一发现使材料科学领域对聚变堆结构材料的选择逐渐转向由低活化元素参与组分的铁素体/马氏体钢，以及V-Cr-Ti型结构合金，后起的低活化性复合材料以及类似的涂层陶瓷材料。聚变堆结构材料的研究日渐深入。

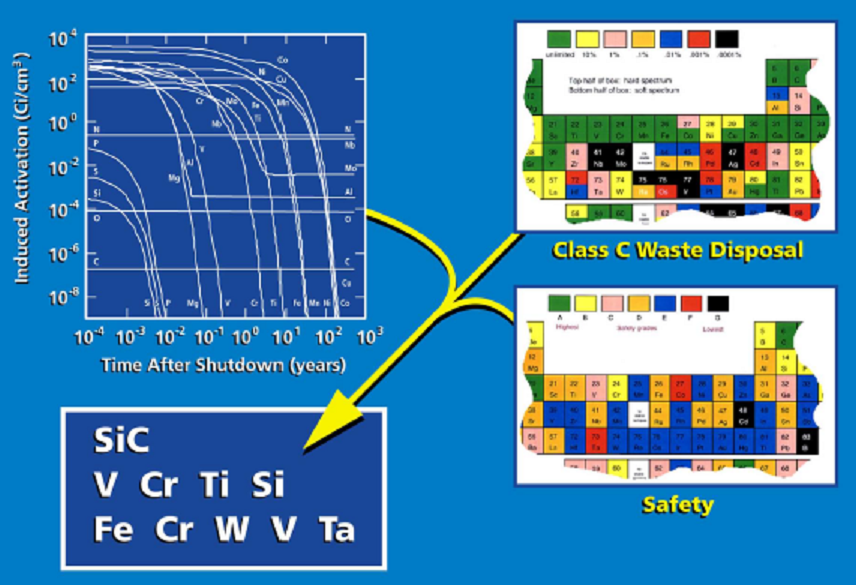


图1.5 基于安全性与长期废物处理准则筛选出的低活化性元素【】

目前可以作为托克马克装置包层系统第一壁材料的候选材料主要为：碳化硅及其复合材料，钒合金，低活化马氏体、铁素体钢。其中，碳化硅及其复合材料具有优良的高温力学性能，并且能在高温下维持化学稳定，且具备优良的低活化特性，但因为工艺上的不成熟，特别是加工和密封的困难，影响了材料的大规模运用，经济性也相对较差；钒合金同样具备较高的热稳定性和高温物理性质，并且有着不错的低活化特性，但是存在制造和焊接上的困难，且容易发生氧化反应，缺乏辐照性能方面的数据，经济性也较差，不利于大规模开发利用；而低活化马氏体、铁素体钢具有较好的高温力学性能，良好的热导率，较好的抗辐照肿胀性能，能够基本满足低活化特性，并具有很好的液态金属相容性，有利于成分参数的设计和调节，加之先进的研究背景与工业基础，是当前主流的核聚变反应堆结构材料【】。

## 1.2 低活化钢简介

低活化钢（Reduced Activation Ferritic/Martensitic steel, RAFM）是以V、W、Ta、Mn、Ti等具有低活化性的元素，取代传统9Cr钢中易活化的Ni、Nb和Mo等元素，得到的具有低活化效应的新型钢种【】。依托于铁素体/马氏体钢丰富的研究基础和工业背景，低活化钢在成分调控、参数设计、热处理方面都有着先天的优势。考虑到铁素体/马氏体钢在核裂变反应堆中已经有一定的应用场景，低活化钢可以充分借鉴以往的使用经验，在核聚变反应堆等新场景中做到更充分更便捷的技术移植。

近年来，各国对低活化钢都有充分的研究，典型的低活化钢钢种有：日本原子能研究机构的F82H，美国橡树岭实验室的9Cr-2WVTa，欧盟的Eurofer97，中国的低活化马氏体钢CLAM,以及印度的IN-RAFM等等。其主要成分设计如表1.2所示。

表1.3 世界主流低活化钢的主要成分参数（wt%）【】

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| 元素 | F82H | 9Cr-2WVTa | Eurofer97 | CLAM | IN-RAFM |
| Cr | 7.50-8.50 | 9.00 | 8.50-9.50 | 8.50-9.50 | 8.90-9.10 |
| V | 0.15-0.25 | 0.20-0.25 | 0.15-0.25 | 0.15-0.25 | 0.20-0.24 |
| W | 1.80-2.20 | 1.90-2.10 | 1.00-1.20 | 1.30-1.70 | 0.90-1.10 |
| Ta | 0.01-0.06 | 0.05-0.06 | 0.05-0.09 | 0.13-0.17 | 0.06-0.08 |
| Mn | 0.05-0.20 | 0.40-0.50 | 0.20-0.60 | 0.40-0.60 | 0.40-0.60 |
| C | 0.08-0.12 | 0.10-0.12 | 0.09-0.12 | 0.08-0.12 | 0.10-0.12 |
| Si | 0.05-0.20 | 0.20-0.24 | <0.05 | <0.01 | <0.05 |

经过多年发展，低活化钢的研究取得了长足的进展。目前Eurofer97和F82H是两种最为成熟的低活化钢，具备高标准的低活化特性，并进行过长期、全面的性能测试与改良，在加工流程、辐照性能方面也具有较多的经验积累，得到了十分齐全的性能数据库，是ITER计划首选的结构材料。CLAM钢则是中科院核能安全研究所在已有的低活化钢研究成果上，自行研发生产的一种新型低活化钢【】。为了提升材料的高温力学性能，特别是韧性和强度，CLAM钢对W和Ta等元素的比例进行了调节。自2001年问世以来，经过多年的经验积累，历经了多次的机械性能、物理性能、连接性能、辐照性能和微观组织分析研究，CLAM钢在各方面性能上取得了稳定的提升，在冶炼生产规模上达到工业水准，目前已成为世界第三大低活化钢，也是中国聚变堆测试包层模块（TBM，Test Blanket Module）的重要结构材料，并正在逐步向世界范围推广。

当前低活化钢研究的主要方向有：1、探知辐照损伤的主要影响因素，例如时间、温度、原料产出速率等；2、调整辐照强度，积累更多关于辐照引起的硬化、脆化、氢氦协同效应的实验数据；3、研究低活化钢在极端反应条件下的力学性能变化规律，如极端高温下的弹性、塑性、蠕变-疲劳性能；4、实验与模拟计算相结合，从微观角度解释反应堆环境中的氢、氦对材料力学性能的影响。

## 1.3 氢对钢铁力学性能影响的研究现状

本文的主要研究目标是氢对低活化钢弹性性能的影响。弹性性能是金属材料最重要的力学性能指标之一，主要体现材料在外加应力下的应变效应，与材料的强度、刚度、适用环境、预期寿命都有着紧密的联系。考虑到聚变堆结构中，以氢同位素作为反应原料的服役环境，势必对低活化钢在临氢环境下的力学性能提出严峻的考验；而且氢与氦在原子结构上的相似性，对氢元素的研究方法也有望拓展到有关氦元素的研究，具有一定的指导意义，可以为后续针对氦元素的辐照相关的研究提供参考。

有关氢对金属力学性能的研究，最早可以追溯到第二次世界大战后科学界对金属材料脆性断裂的研究。断裂力学方向上取得的巨大进展，比如位错理论的进阶应用、塑性变形理论在应力应变场中的应用，使得对脆性断裂的研究取得了丰硕的成果。【】在研究过程中，氢元素对金属力学性能的影响趋势引人注目，具体地，金属材料在富氢环境中发生脆性断裂的几率增加，倾向于在更小的应力作用、更短的作用时间内产生裂纹，这一现象又称为氢脆效应。

氢脆效应的发生始于金属材料对氢元素的吸收和溶解机制。研究表明，氢在金属中的溶解形式是单一原子或质子。因此，金属表面存在富集的氢原子是金属吸收氢元素的先决条件，而金属对氢的吸收速率往往取决于氢分子裂解的速率。氢分子裂解速率越快，氢原子富集的比例越高，金属吸收氢元素的速度越快。【】图1.6给出了金属表面吸收氢原子的示意图。

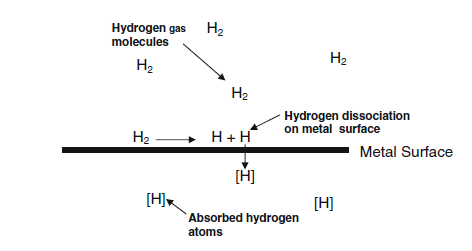


图1.6 金属表面吸氢示意图【】

对于钢铁材料而言，主流的氢脆机理认为，进入钢铁材料内部的氢原子，倾向于在材料的晶界、孔洞、位错等位置富集，一定条件下，过饱和的氢原子及氢离子发生反应，重新结合成氢分子。氢分子产生内压，亦即氢压。氢压对缺陷区域产生作用，使位错运动趋势增加，孔洞及裂纹扩展趋势增强。因而在宏观应力下，缺陷区域受破坏的几率增加，材料发生脆性断裂的几率增加。此外，氢作为一种重要的活性物质，会降低钢铁材料表面的化学位，从而降低表面能。这里的表面包括存在裂纹的内表面。如式（1-2）所示，根据格里菲斯公式，由于氢富集位置的表面能γ值降低，这些位置的临界应力也随之降低，裂纹会倾向于发生扩展。考虑其宏观表现，钢铁材料在会在更低的表观应力下产生裂纹，甚至发生断裂【】。

 （1-2）

钢铁在临氢服役环境中的脆断现象，吸引了材料科学工作者对氢致脆断机理的研究和探索。随着研究的深入，关于氢对钢铁材料力学性能的研究变得愈发广阔，研究思路和方法也趋于多样。力学性能也不仅仅局限于脆性及塑性，而是涵盖了更多的物理量。

然而，不同的钢铁材料，有着千差万别的化学成分、热处理流程，不同的研究课题也采取了多种多样的实验方法和模拟手段，因此得到的结论也不尽相同。以本文考量的弹性性能为例，Makoto Usui等人基于Fe-Cr-Mn奥氏体钢材料的实验表明，充氢的实验流程增加了该钢材的弹性模量【】；相对地，M. Ortiz等人基于AISI 1005 钢和AISI 1070钢的实验结果指出，富氢环境中两种钢材的弹性模量都有一定程度的降低【】；而D. Psiachos等人基于量子力学从头计算的模拟方法给出结论，间隙氢原子倾向于降低α铁的弹性模量【】。

关于氢对钢铁材料力学性能的研究，目前材料科学界以低活化钢为目标的研究较为有限。考察低活化钢的服役环境，更多的关注点被放在低活化钢的高温力学性能、高能粒子辐照、低活化性元素掺杂等等。作为反应堆中最直接的反应原料，氢元素对低活化钢力学性能的影响趋势、作用机理目前尚不明确，而这恰恰有可能成为制约聚变反应堆进一步发展的负面因素。因此，本文选择以低活化钢为研究对象，以力学性能中具有决定性作用的弹性性能为目标参数展开研究。

参考其他以氢对金属材料力学性能影响为研究目标的文献，一般而言，研究的思路及方法大致分为两种：一是采用计算机软件对研究的材料体系进行建模，用模拟计算的方法探究氢对目标材料的影响；二是设计力学实验，针对不同的研究参数设计各种力学实验，直接测定氢的介入对目标材料力学性能的影响。

## 1.4 计算材料学的发展

## 1.5 力学实验方法概述

## 1.6 本文研究内容与结构

本文选择一种自主研发的低活化马氏体钢作为研究对象，分别采用第一性原理的模拟计算和自行设计的实验，研究氢元素的介入对该钢种弹性性能，特别是杨氏弹性模量的影响规律。在第一性原理计算中，本文使用Materials Studio计算软件，根据密度泛函理论对以bcc-Fe为基体的晶胞进行建模和计算，分别对融入间隙氢原子的晶胞和不融入间隙氢原子的基体晶胞，模拟应力状态下的应变反应，计算弹性模量，定量对比得到弹性模量的变化情况。这里为了使计算顺利进行，采用2×2×2大小的超晶胞，并以Cr原子对特定位置的Fe原子进行取代，用以模拟真实实验环境中的材料成分；对于插入间隙位置的氢原子，设置特定数值的原子占据几率，从而尽可能模拟真实情况下的吸氢状态。在实验过程中，本文首先将原料钢种线切割为直径10mm、高20mm的小圆柱状钢样，然后分两组做热处理，取直接淬火组以及淬火后时效组。再分别对两组钢样取样进行充氢及力学实验，通过力学实验数据，研究充氢过程对两组钢样弹性性能的影响。最后，结合模拟方法与实验方法，对比两种方法得到的结论，讨论模拟结果与实验结果的内在物理成因，从两方面阐述氢对低活化钢弹性性能的影响。

本文的主体内容包括以下部分：

第一章，介绍课题背景，梳理研究现状，介绍本文的研究材料低活化钢，并回顾前人关于氢对钢铁材料性能影响的研究历史与进展，给出本文研究状况的概述。

第二章，介绍第一性原理计算的方法，包括计算原理、软件使用、建模状况、计算结果等。得到用第一性原理研究氢对低活化钢弹性性能影响的初步结论。

第三章，介绍自行设计的实验方法，包括实验材料概述、样本制备及热处理流程、充氢实验、力学实验等。得到用自行设计的实验研究氢对低活化钢弹性性能影响的实验数据。

第四章，对比第一性原理计算结果和实验数据结果，分析二者的联系，研究内在的物理规律，得到本文的研究结论。并对低活化钢及聚变反应堆结构材料的未来发展提出展望。

# 第二章 基于第一性原理的模拟计算

## 2.1 计算理论概述

### 2.1.1 第一性原理研究背景

在物理学和化学逐步发展的历史长河中，人类对物质的研究主要依托于实验与归纳。直到进入20世纪后，随着电子信息工业的飞速发展，计算机科学的日渐兴起，利用计算机进行模拟计算逐渐成为科研工作中一种引人注目的研究方法。

第一性原理计算（First-principles calculation）是当前科学界最为重要的模拟计算方法之一，在量子化学等领域又被称为从头算（ab-initio）方法【】。实际上，在第一性原理计算过程中，运算参数往往只包含特定元素的电子结构，以及原子物理学中的基本物理量（电子电荷量e，电子质量m0，光速c，普朗克常数h等等），是名副其实的从头算方法。从计算原理上看，这是一种以量子力学为理论基础的计算方法，结合微观尺度上电子与原子核的相互作用机理及基本运动规律，目标在于求解体系的电子波函数，并根据电子波函数推导材料的物理性质。通常在一定的计算复杂度与精确度限制下，第一性原理能够得到多种体系的波函数信息，具备广泛普适的运用场景。

科研工作中的第一性原理计算往往有两种使用目的。一是利用第一性原理计算替代实验，对某些现象进行解释和验证，比如在验证一些现象时，部分实验被设计为具有过于高昂的实验成本、过于漫长的实验时间或者过于精细繁琐的实验操作，在实际操作中不具备顺利完成实验的基本条件，此时可以考虑使用第一性原理计算的方法部分替代实验流程。二是利用第一性原理对尚未证实的理论、现象进行预测。比如在材料设计领域，对于一部分在原料、工艺上难以获取或制备的材料，可以用第一性原理计算材料微观尺度特征，进而推导和预测材料的宏观物理性能。

第一性原理的研究内容大体包括：1、微观电子结构。主要是基于量子力学模型，通过模拟计算得到物质的电荷密度、态密度、能带等电子结构特征。2、热力学性质。主要是基于体系的基态能量，对吸附能、表面能、比热容、热膨胀等热力学性质进行研究。3、力学性质。主要是针对材料的弹性性质进行模拟计算，例如压力下的相变计算等。【】本文正是运用第一性原理模拟计算得到了研究体系的弹性模量。

第一性原理因其删繁就简的指导思想而广受欢迎。相比于经验或半经验的计算流程，第一性原理的起始参数只有体系的元素种类、晶胞排列特征、晶格参数以及常用微观物理常数等，适当地控制了模型复杂度，把计算的困难集中抛给计算机的算力。当然，精确求解多粒子体系的薛定谔方程并不是当前计算机算力所能承受的任务，多数情况下薛定谔方程的解析解是无法得到的。这就要求在第一性原理计算方法运用适当的近似和拟合。当前被广泛接受的求解近似解的方法是密度泛函理论。

### 2.1.2 密度泛函理论简介

密度泛函理论（Density functional theory，DFT）是一种基于量子力学的计算方法，常用于包含电子场的多体系统，在物理、化学、材料科学领域都有广泛的应用。该理论的基础是以泛函表示多粒子体系（包含电子和原子核），从而近似求解体系的薛定谔方程。

根据量子力学的观点，多粒子系统的状态方程可以表示为：

** (2-1)

式（2-1）中的H、E、ψ分别代表系统的哈密顿量、能量和波函数。进一步地，系统哈密顿量可以表示为：

** (2-2)

式（2-2）等号右侧的三项分别代表电子动能、原子核与电子相互作用、电子之间的相互作用【】。考虑到常见的多粒子体系中，相互作用的粒子数目量级过高，为了求解薛定谔方程，需要采取近似方法，对方程进行简化处理。根据密度泛函理论的历史发展进程，涉及到的近似处理方法和理论包括：

1. Born-Oppenheimer近似

Born和Oppenheimer提出了绝热近似理论【】。该理论认为，电子质量远小于原子核，可以认为原子核相对电子近乎静止（或只在其平衡位置附近存在振动），亦即，多粒子体系方程可以分为原子核与电子两部分考量，从而进行变量分离，使方程简化。

1. Hartree-Fock近似

在绝热近似的基础上，Hartree和Fock的理论将问题进一步简化：针对某个单一电子，该理论使用一个等效的平均势场替代其他电子对目标电子的库仑作用，且忽略电子之间的相互作用【】。如此近似后，可以率先求解单电子波函数，以电子波函数的乘积表示原体系多电子薛定谔方程的近似解。

1. Hohenberg-Kohn定理

上述1、2近似方法没能将电子相关效应或相对论效应纳入方程。针对这一疏漏，密度泛函理论给出了解决方案，其中具有代表性的是Hohenberg-Kohn定理的提出。基于Fermi和Thomas的均匀电子气模型，Hohenberg和Kohn提出：对于忽略自旋效应的全同费米子体系，体系总能量是基态电荷密度的唯一泛函，体系的基态性质由基态电荷密度决定；体系电荷密度泛函的最小值，对应了体系的基态能量【】。这一理论将原问题的求解具象化，提出了密度泛函方法的求解思路。

1. Kohn-Sham方程

基于上述定理及变分思想，Kohn和Sham做出进一步简化，用无相互作用的势场加上关联项来表达存在相互作用的多电子体系的势场，从而较为方便地求解电子密度及动能泛函【】。然而这一方程并不能得到交换关联势泛函，后续仍需要更多的近似求解方法。

1. LDA和GGA方法

局域密度近似（Local Density Approximation，LDA）是一种求解交换关联势的近似方法，该方法认为交换关联势泛函仅和电子密度在空间各位置的数值相关【】。由于未能考虑电子密度的变化，该方法适用于均匀电子气密度在空间变化较小的体系。在此基础上，广义梯度近似（Generalized Gradient Approximation，GGA）则更为充分地考虑了电子密度的不均匀性，主要手段是引入局域电子密度的梯度作为参数【】，使得计算的准确度得以提升。

密度泛函理论发展到今日，已经从无到有、由浅入深地积累了足够丰富的方法和经验，对计算材料学的发展起到了至关重要的作用。

### 2.1.3 高性能计算方法

第一性原理计算过程中往往伴随着多粒子体系薛定谔方程的求解。尽管在逐步发展的密度泛函理论体系中有许多近似方法，可以帮助得到薛定谔方程的解析解，但对于当前计算机的运算能力而言，大多数多粒子体系薛定谔方程的求解并不是一件轻松的工作。在合理的近似理论下，许多计算任务仍然存在庞大而繁杂的计算流程。例如，某些研究目标的体系中设置了规模较大的超晶胞，超晶胞中可能多达数百的原子数目，使得时间复杂度呈指数级增长。这就需要更强大的计算资源、计算方法来解决计算上的难题。

目前通用的高性能计算方法主要是指并行计算。并行计算（Parallel Computing）依托于高性能计算机或者人工搭建的计算集群，以并行模式使将原复杂任务分解为多个子任务分别求解，从而大大节约时间成本，提升计算效率。并行计算的硬件基础是现代计算机的多核处理器系统，无论是高性能计算机，还是多计算机构成的计算集群，并行计算的关键，都是如何使现有计算资源下的多个处理器高效地协同工作。如图2.1所示，最常见的并行计算网络包含一个控制节点和若干计算节点。控制节点用于接受用户提交的任务，并分发到计算节点上进行计算。在所有的计算节点完成计算任务之后，计算结果被返回至控制节点，在控制节点内进行整合，再由控制节点返回给用户。



图2.1 并行计算网络结构

通过并行计算方法，第一性原理模拟计算中用于计算和求解方程的时间大大缩短，计算精度也得以提升。

## 2.2 Materials Studio软件简介

本文选择以Materials Studio为基本工具，对研究课题进行第一性原理相关的模拟计算。Materials Studio是一款材料科学领域的专业模拟计算软件，由BIOVIA公司（原Accelrys公司）开发。这是一种新兴的模拟计算软件，一个可以高效建模与计算的集成环境，用可视化图形界面替代了传统第一性原理计算方法中的文本输入模式，使建立模型的便捷程度大大提升。该软件常用于包括金属、高分子、陶瓷、催化反应、纳米材料等诸多材料科学不同领域的模拟计算，在高校、研究机构及高新技术公司中广受欢迎。研究者利用该软件可以方便地从物质的微观尺度、特别是原子及分子尺度进行建模，调用完备封装的多种高性能计算模块，以简洁的形式得到较为精确的计算结果，从而探究材料的微观结构与性能间的关系。在进行第一性原理计算时，Materials Studio使用的计算模块是CASTEP（Cambridge sequential total energy package）。

20世纪80年代末期，CASTEP软件包最早由剑桥卡文迪许实验室的TCM组编写，使用的编程语言是当时通用的Fortran77。到90年代中期，CASTEP经历了原Molecular Simulations International公司以及Accelrys公司的商业化历程，并在商业化之后使用新版本Fortran语言重新编写，同时加入并行计算的模块，增强了代码的稳定性。最终该软件包被Materials Studio集成为计算模块。【】CASTEP模块的计算框架是基于密度泛函理论的平面波赝势法。这一方法利用平面波基失（基矢的正交性使得计算过程中可以方便地由实空间向倒空间做傅里叶变换），在LDA或GGA等近似下求解Kohn-Sham方程，求解的方法是传统的自洽迭代。原子核与电子间的相互作用则利用赝势来表达，充分降低了计算复杂度，使计算得以高效进行。当前通用的CASTEP软件包中储存了内容丰富的赝势库，极大地拓展了软件包的使用范围。

本文使用Materials Studio对以低活化钢为代表的Fe-Cr体系进行建模，构建微观尺度上的晶体模型，并调用CASTEP计算模块进行第一性原理模拟计算，从而研究H原子的插入对体系弹性性质的影响。

## 2.3 建模与计算方法

### 2.3.1 基体模型与充氢模型

本文的建模思路是：在确定的尺度内，分别建立代表典型低活化钢的Fe-Cr型基体模型，和在基体模型的基础上插入部分八面体间隙氢原子的充氢模型。对这两种模型，分别利用上述CASTEP模块进行第一性原理计算，得到关于模型的力学性质，特别是弹性性质，并进行对比分析。

当前使用的第一性原理计算方法中采用的是原子尺度的晶胞模型，因而对于本文的研究材料低活化钢而言，尽管材料中含有多种元素成分，但因为模型体系的尺度太小，无法将所有成分元素全部纳入模型中。考虑到低活化马氏体钢的成分配比，Fe和Cr是质量分数最大的两种元素，本文选择建立包含Fe、Cr两种原子的基体模型。首先选取bcc-Fe的晶胞，考虑到bcc晶格中的单位晶胞原子数目仅为2，不利于Cr原子的取代以及后续模拟应力条件的测试，此处选择2×2×2大小的bcc-Fe超晶胞为基体，其中心原子由Cr原子取代，如图2.2所示。



图2.2 Fe-Cr系基体模型

在基体模型的基础上，选择超晶胞中Cr原子周边的八面体间隙位置，插入间隙氢原子，得到如图2.3所示的充氢模型。考虑到实际钢铁材料对氢的吸收量十分有限，氢在材料内的质量分数仅仅处于10-6（ppm）量级，此处在建立充氢模型时，每个间隙位置氢的原子占据率被设置为1.2×10-4。



图2.3 充氢模型

### 2.3.2 第一性原理计算弹性性质

在分别建立起基体模型与充氢模型之后，利用CASTEP软件包，基于密度泛函理论，对两种模型的弹性性质进行计算。

本文采用Perdew与Wang的广义梯度近似泛函（GGA-PW91）作为研究体系中的交换关联势。考虑到Fe是3d元素，计算过程中采用软件自带的Fe\_pv势作为赝势。为了刻画布里渊区，本文依照传统的Monkhorst-Pack模式选择k点网格。经验表明，计算量随着k的增加而增大，同时模型精度也提升。本文在经过数轮精度测试和收敛性测试后，最终选取4×4×4的k点网格。

在设定好相关参数后，本文对模型进行了几何优化。几何优化中，电子步能量的收敛判据设定为2×10-5eV/atom，力的收敛判据设定为0.05eV/Å，应力的收敛判据设定为0.1GPa，而原子位移收敛判据设定为0.002Å。【】

在几何优化达到收敛后，基于优化的模型结构，采用应力-应变模拟方法计算弹性常数【】，这里同样采取上述的GGA-PW91泛函作为体系薛定谔方程中的交换关联势。在应力-应变计算中，收敛的标准被设定得更为严苛，电子步能量的收敛判据设定为4×10-6eV/atom，力的收敛判据设定为0.01eV/Å，原子位移收敛判据设定为4×10-4Å【】。此后，经过一定时间的计算，可以得到Fe-Cr系基体模型和充氢模型的模拟弹性常数。

弹性常数主要指弹性张量值，常用于表征材料的弹性性质。联系各向异性材料的应力应变关系的广义弹性张量一共有21个独立的数值。利用其中的一部分数值，可以求解材料的弹性模量。

## 2.4 模拟结果

### 2.4.1 弹性模量计算

由弹性常数可以计算弹性模量，如式（2-3）、式（2-4）、式（2-5）。

 （2-3）

**  （2-4）

** （2-5）

其中，C11、C12、C44是由CASTEP模块计算出的三项主要弹性常数。B代表体弹性模量（单位为GPa），G代表剪切模量（单位为GPa），基于体弹性模量和剪切模量可以计算出杨氏弹性模量E（单位为GPa）。

如表2.1所示，经过计算，相比于体模型，插入了间隙氢原子的充氢模型的体弹性模量B、剪切模量G以及杨氏弹性模量E都有了一定程度的降低。

表2.1 两种模型的弹性模量计算结果

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| 模型 | B（GPa） | G（GPa） | E（GPa） |
| 基体模型 | 292.86 | 64.97 | 181.49 |
| 充氢模型 | 243.33 | 51.98 | 145.57 |

### 2.4.2 计算结果分析

计算结果中，充氢模型的体弹性模量相比基体模型有明显的下降。体弹性模量是材料在弹性体系中，对外界均匀压应力的抵抗能力，亦即抵御因外界压应力而造成形变的能力。该数值由引起材料形变的临界压应力与此时材料的体积减小量的比值定义，如式（2-6）所示。

 （2-6）

从微观角度分析，体积模量的决定因素是化学键的强度，亦即晶体中化学键对压应力的抵抗能力。由此，根据本文第一性原理模拟计算的结果，可以认为氢原子对模型内八面体间隙位置的占据，一定程度上降低了相邻化学键的强度。因而，与模型中H原子紧邻的Fe-Fe键、Fe-Cr键的强度都有所降低，相较于基体模型，在更低的外加压应力下即可发生畸变，对外加应力的抵抗能力降低。

充氢模型的剪切模量相比于基体模型也有所下降。在材料科学领域，剪切模量常常用来表征材料的刚度，由材料受到的剪切应力与其引起的剪切应变的比值决定。在本文的模拟计算中，剪切模量与模型的晶体结构并无明显的联系。但值得注意的是，剪切模量的降低意味着宏观材料的刚度下降，这对实验设计具有重要的指导意义。

与基体模型相比，充氢模型的杨氏弹性模量也存在明显的下降。杨氏模量是表征材料弹性性质的首要参数，也是衡量固体材料刚度的重要参数。如式（2-7）所示，杨氏弹性模量由单轴应力与应变的比值定义。

 （2-7）

与体弹性模量类似，杨氏模量可以表征固体材料抵抗形变的能力，该数值越大，材料越不容易发生形变。对于微观尺度的分析也与体弹性模量类似，可以认为氢原子的介入降低了紧邻的化学键强度，使得模型晶胞更易于发生畸变。考虑到杨氏弹性模量简洁的定义形式，以及成熟的测量标准，本文后续的实验设计正是针对这一参数展开。这也是杨氏弹性模量作为首选弹性参数的最大优势。

## 2.5 本章小结

本章采用第一性原理的方法，基于Materials Studio计算软件建立了两种超晶胞模型，分别代表低活化钢基体模型，与插入了氢原子的充氢模型，并计算出两种模型的弹性性质。

计算结果表明，相比于基体模型，充氢模型的体弹性模量B、剪切模量G以及杨氏弹性模量E的数值都有所下降。可以解释为，氢原子的介入，降低了晶胞模型中化学键的强度，因而在第一性原理计算中，充氢模型倾向于在更低的应力下产生畸变。

本文后续的实验设计以杨氏弹性模量为研究对象，力图使实验结果与模拟计算结果相互拟合。

# 第三章 基于电解充氢与力学实验的研究

本章采用自行设计成分并冶炼的低活化钢作为研究对象，在完成热处理与样本制备后，采用电化学充氢方法营造钢样的富氢环境，并以压缩实验得到材料的压缩应力-应变曲线，表征样本在充氢前、充氢后的弹性性质，探究氢对低活化钢样本弹性性质的影响机理。

## 3.1 实验材料及准备工作

### 3.1.1 实验材料

本文的低活化钢实验材料由实验室自行设计成分，并进行冶炼，其主要化学成分如表3.1所示。在Cr、W、Mn、C等主要元素的设计上，本文基本参照了中国低活化马氏体钢（China Low Activation Martensitic steel，CLAM）的成分配比；为了提升材料的机械性能，获得更优越的高温力学性能，提升材料的抗辐照性，实验材料中Ta的质量分数相比于经典的CLAM有一定程度的降低，V的质量分数则有所提升。

表3.1 实验用低活化钢主要成分

|  |  |
| --- | --- |
| 成分元素 | 质量分数（wt%） |
| Cr | 8.6 |
| W | 1.5 |
| Mn | 0.55 |
| V | 0.29 |
| C | 0.102 |
| Ta | 0.09 |
| N | 0.024 |
| P | 0.005 |
| S | 0.001 |
| Fe | 基体 |

### 3.1.2 样品制备

为了使后续实验顺利进行，须率先对材料进行热处理及样品制备。

冶炼后得到板状的低活化钢钢样。首先使用线切割机切割出若干圆柱状钢样，如图3.1所示，圆柱直径为10mm，高度为20mm。然后对这些圆柱状低活化钢样本进行初步的热处理。将样品均匀摆放在真空管式炉炉腔内，设定程序化加热系统，在16小时的升温过程中加热至990℃，并恒温2小时。加热过程中保持管式炉封闭。为了避免加热过快或温度分布不均匀而对当前样品的组织形态造成不可逆的损伤，本文在使用管式炉式加热程序时，设置前期快速加热，中期阶段性恒温，后期缓慢加热；每一段升温过程中须保证温度匀速升高，总体温度呈阶梯式增长。在恒温过程接近结束时，更换高温作业防护服，打开管式炉，迅速用实验钳夹出样品，置于20℃的清水中进行淬火。由于管式炉打开的过程中，外界空气的吸入会迅速降低炉壁温度，因此夹出样品并逐一完成淬火的操作必须尽快完成，避免样品之间的淬火温度差异过大。

C:\Users\zsn12\Desktop\三视图.tif

图3.1 实验用低活化钢样品三视图

取10枚淬火后的低活化钢样品，分为A、B两组，每组各有5枚样品。对于A组样品，本文采取恒温时效处理。具体地，将样品均匀、分散地放置于真空管式炉的炉腔内，设定管式炉升温程序，匀速加热至400℃，然后保持恒温4小时。恒温过程中保持管式炉密封，防止空气进入造成温差效应，或产生氧化层。等温时效完成后，打开管式炉，令样品自然冷却至室温。对于B组样品，淬火后直接在室温下放置相同的时间，作为对照组。将A、B两组样品分别用砂纸及自动磨样机打磨，除去样品表面的氧化层及污迹，直到表面光亮为止。砂纸最细须磨至800目左右。

至此，A、B两组样品已全部完成制备。

## 3.2 充氢实验

本文研究氢对低活化钢弹性性能的影响，因此需要在实验中营造富氢环境，尽可能使低活化钢材料对实验环境中的氢有所吸收，从而捕捉氢对样品的影响。常规的实验氢环境往往有两种方案：一是利用高压储氢设备作为反应环境，优点是氢浓度高，纯度高，对充氢实验而言效率较高，缺点是设备昂贵，成本过高，且安全性较差，有燃烧甚至爆炸危险；二是利用电化学实验法进行充氢，又称为电解充氢法，这一方法利用电解池对电解液进行电解处理，在液态实验环境中产生氢气，其优点是操作简便，实验流程安全可靠，成本低廉，缺点是实验环境氢气浓度较低，易混入杂质，并且无法营造干燥的实验环境。

C:\Users\zsn12\Desktop\论文写作\zsn\Fig. 2.tif

图3.2 电化学充氢实验装置

出于安全性以及实验成本的考虑，本文采用电化学实验方法制造富氢环境，对低活化钢样品进行充氢处理。如图3.2所示，本文采用电解方法充氢，电解池中装有0.5 mol/L的NaOH溶液作为电解液，低活化钢样品被阴极导线连接，铂片由阳极导线连接，恒流电源的电流密度设置为0.3 A/cm2。实验装置整体放置在恒温箱内，避免温度变化对电解速率产生影响。

 （3-1）

 （3-2）

如上式（3-1）、式（3-2）所示，电解过程中的化学反应实际是H2O的分解。但考虑到纯净水的导电性能较差，离子含量较低（按pH=7的中性纯水计算，OH-和H+离子浓度仅为10-7），不利于电解反应的持续进行，故此处使用NaOH的水溶液作为电解液，溶液具有良好的导电性能，阴阳离子储量充足，可以在反应中持续产生氢气。使用碱溶液的另一原因是，碱性实验环境可以对打磨处理后的低活化钢样品起到保护作用，避免反应过程中的酸性腐蚀。

在制备完好的A、B组样品中各取两枚，取样时尽力保证样品的形态、大小一致，以减少实验误差。对于A组（等温时效组）的两枚样品，取其中的一枚样品连接在图3.2的电解充氢装置的阴极，另一枚作为空白对照。充氢实验在恒定的电流密度下持续反应4小时。反应过程中可以观察到大量的气泡持续产生，此时样品已处在富氢环境中。由于氢气具有可燃性，高浓度的氢气存在爆炸危险，因此实验过程中需要打开通风橱，避免实验室空气中氢气浓度过高。完成充氢过程并断开电源连接后，迅速取出充氢后的样品，利用滤纸干燥样品表面，与同组内作为对照的另一枚样品一起进行后续的力学实验。考虑到样品离开富氢环境后，充氢过程中吸收的氢倾向于迅速逃逸，而实验环境中无法提供持续干燥的富氢环境，也无法保持氢在试样中的富集，为使充氢试样的实验效果更明显，充氢后须及时进行后续力学实验操作。对于B组（无等温时效组）的两枚样品，实验流程与A组样品完全一致。

## 3.3 力学实验

为了探究充氢实验对低活化钢试样弹性性能的影响方式，本文选择对经过上述电化学充氢实验的低活化钢试样进行压力实验。本文研究所选用的测试机器是校内力学实验室装配的WDW-100/E型电子万能试验机，该仪器可以进行高温、常温、低温等不同条件下的拉伸、压缩、弯曲、剪切、撕裂等力学实验，可以对多种金属、非金属及复合材料进行力学性能测试和分析研究。仪器的载荷可自行调节，标称的最大载荷值达到200kN。仪器的控制系统装配有电子测控系统，测量精度高，控制准确。配套的计算机系统软件可用于即时数据存储、数据分析、曲线绘制，操作简单方便。如图3.3所示，压力测试中使用到的模块主要包括计算机、升降装置、压头、底座和支架等。

对A（等温时效组）、B（无等温时效组）两组试样，各组已分别取了两枚样品进行了上述电化学充氢实验。为了防止经过充氢流程的试样中，吸收的氢气过快逸散，应在充氢结束后迅速进入压力实验。

如图3.4所示，将钢样放置于试验机配套的固定装置内，牢固固定样品，然后将固定装置整体放置于电子万能试验机的上下压头正中央。调节升降压头，先使用粗调节模式，使下压头回到底座处，中间不留空隙，使上压头接近触碰固定装置的上表面，确保固定装置已稳定安装。然后将升降模式调整为精调节。在计算机中打开电子控制系统软件，设置上压头精调节的下行速度为0.1mm/s，并设置上压头的截止压力（须小于标称的最大载荷值），然后点击开始压力测试。压力实验过程中，上压头以此恒定速度向固定装置中的低活化钢试样施加纵向压力，使得钢样逐渐产生弹性压缩。此过程中，以连接器与试验机传感器相连的计算机会以0.1s的时间间隔，持续记录压头的压力与位移值。考虑到压头与固定装置、钢样表面之间不存在相对运动，该记录值也是低活化钢试样的力-位移实验数据。随着试验机的工作，上压头持续下压，直至压头压力值接近或达到预设的截止压力，压头停止下压，试验机暂停工作，一轮压力实验结束。手动粗调节上下压头间隔距离，取出固定装置，夹出压缩后的试样，原高20mm的圆柱形试样被压缩变形，压缩后高度约为10mm，中部均匀向外侧沿轴向隆起，样品表面发热。对固定装置附近的铁屑、氧化皮等进行清洁，保证试验机工作台的洁净。计算软件中完整记录的力-位移实验数据可以导出，用于后续的分析。



图3.3 WDW-100/E型电子万能试验机示意图



图3.4 固定装置示意图

如上述，对于A、B组样品，分别有一枚充氢试样，和一枚对照试样。充氢试样在完成充氢实验后，会直接进入到力学实验阶段，得到充氢试样在压缩过程中的力-位移实验数据；而同组的不充氢试样，也会在相同的电子试验机上以相同的实验参数、实验条件进行压力实验，得到其压缩过程中的力-位移实验数据。在完成全部实验后，两组样品中选出的四枚试样各自得到力-位移实验数据，这四组实验数据可用于后续的计算和分析。

## 3.4 电子显微镜表征

在进行实验的同时，可以用相同的热处理工艺制备A、B组的扫描电镜样品。扫描电镜样品规格大约是直径20mm、高5mm的圆片状，用自动磨样机及砂纸打磨至2000目，并用金刚石抛光膏进行抛光，使试样表面光滑成镜面，用4%体积分数的硝酸酒精进行腐蚀。本次观测使用的是MERLIN VP Compact扫描电子显微镜，这是德国蔡司公司出品的一款高精度场发射扫描电子显微镜。

分别观测A、B组的电镜样品，得到如图3.3、图3.4所示的低活化钢扫描电子显微镜照片。



图3.3 时效组(A组)低活化钢样品扫描电镜照片



图3.4 对照组(B组)低活化钢样品扫描电镜照片

## 3.5 实验结果

# 第四章 结论与展望

## 4.1 讨论与分析

## 4.2 本文结论

## 4.3 展望