

特约专栏

## 材料基因工程与核燃料元件材料

卢 勇<sup>1</sup>, 王翠萍<sup>1</sup>, 李林阳<sup>1</sup>, 贾建平<sup>2</sup>, 刘兴军<sup>1</sup>

(1. 厦门大学材料学院, 福建 厦门 361005)

(2. 表面物理与化学重点实验室, 四川 绵阳 621907)

**摘 要:** 核能由于其高能量密度和低污染排放等优点, 已经成为未来能源的重要组成部分。然而, 民用核燃料材料因其特殊的放射性, 实验研究的安全防护成本极高, 尤其是经过辐照后的核燃料材料, 分析和表征手段极其有限, 如果采用传统的“试错法”材料研发方法, 将会使材料的研发成本大幅提高, 因此, 材料基因工程的研究思路正是适合于新型民用核燃料材料研究的技术路线。本研究组多年来以开发新型民用核燃料元件材料为目标, 通过第一性原理和 CALPHAD 技术的结合, 先后建立了 U、Pu 等锕系元素的多组元热力学数据库, 并建立了辐照场作用下的热力学模型, 对辐照场作用下核燃料材料的相变热力学和动力学进行了深入研究, 在热力学数据库的基础上, 运用相场动力学模型对核燃料元件材料的凝固和时效过程组织演化规律进行了系统的研究。这种基于材料基因工程的多尺度、多组元的材料设计研发思路为我国新一代具有自主知识产权的民用核燃料元件材料的成分设计、组织控制、工艺优化、性能改善及服役时间预测提供了重要的理论基础, 同时对材料基因工程方法在材料开发中的广泛应用具有重要意义。

**关键词:** 材料基因工程; 核燃料元件材料; 材料设计; CALPHAD; 相场法

**中图分类号:** TB30; TL352 **文献标识码:** A **文章编号:** 1674-3962(2017)06-0414-06

## Materials Genome Initiative and Nuclear Fuel Element Material

LU Yong<sup>1</sup>, WANG Cuiping<sup>1</sup>, LI Linyang<sup>1</sup>, JIA Jianping<sup>2</sup>, LIU Xingjun<sup>1</sup>

(1. College of Materials, Xiamen University, Xiamen 361005, China)

(2. Science and Technology on Surface Physics and Chemistry Laboratory, Mianyang 621907, China)

**Abstract:** Nuclear energy is an important part of the future source of energy due to their higher energy density and lower emission of pollutants. However, the traditional research method of “trial-and-error” may result in higher costs and lower efficiency because of the radioactivity of the nuclear fuel element material. The idea of Materials Genome Initiative (MGI) is suitable for the research and development of the nuclear fuel element material. Focused on the nuclear fuel element material, our research group developed a multi-component thermodynamic database including U, Pu and other elements, by coupling CALPHAD method and the first-principle method. Based on the thermodynamic database, the thermodynamic model under irradiation was established and the phase transformations under irradiation were systematically investigated. The microstructure evolutions during solidification and aging were simulated by using the Phase-Field method. The present multi-scale and multi-component materials design method based on MGI can provide important information for the design of composition, microstructure controlling and property improvement of nuclear fuels materials.

**Key words:** MGI; nuclear fuel element material; materials design; CALPHAD; Phase-Field method

### 1 前 言

核燃料元件的安全性是核反应堆高效率、安全运行的重要保证。然而, 目前核燃料元件材料仍然有许多问题, 即使在核能技术发达的欧洲与日本也经常由于其可靠性造成核反应堆的核燃料元件的寿命降低、严重时会造成核泄漏。

收稿日期: 2016-12-24

基金项目: 中央高校基本科研业务费(20720170038); 国家自然科学基金资助项目(91226023)

第一作者: 卢 勇, 男, 1984 年生, 助理教授, 硕士生导师

通讯作者: 刘兴军, 男, 1962 年生, 教授, 博士生导师, Email: lxj@xmu.edu.cn

DOI: 10.7502/j.issn.1674-3962.2017.06.03

目前,核能的产生和应用,基本上是靠含铀的核燃料。由于世界上广泛应用的  $\text{UO}_2\text{-Zr}$  类型的轻水堆核燃料存在热导率不高,以及事故状态下锆水反应导致的氢爆问题<sup>[1]</sup>,促使核燃料材料有了升级换代的强烈驱动。新型核燃料元件材料的研发不仅涉及传统材料中元素、成分、相组成和组织的设计,还涉及到材料在高温高压、辐照肿胀和应力腐蚀等条件下的材料整体性能的稳定性和安全性,因而传统材料研发思路对于核燃料元件来说并不适用。

相对于传统材料,核材料的实验信息比较匮乏,公开的可以利用的实验信息极少,那么核燃料元件材料的设计过程中可以参照的有价值的信息也就大打折扣了。基于材料基因工程理念的材料设计方法包含了材料基因数据库、高通量的材料设计、制备和检测方法和多尺度的材料计算方法。材料基因组计划能将现有成熟的、运用于材料性能预测和材料行为模拟的各种模型和算法无缝连接到现有的材料产品设计中<sup>[2]</sup>。材料基因组计划的材料研发思路将大大促进先进核燃料、核结构材料的研发效率,节省材料研发成本,降低核材料研发过程中的环境污染。

本文将以往研究组在金属型核燃料材料数据库和多尺度设计方面的研究为例,介绍面向核燃料元件材料的材料基因工程研究方法。

## 2 核燃料元件材料的材料基因工程研究方法

随着新一轮国家重点研发计划“材料基因工程关键技术与支撑平台”的实施,面向核燃料元件材料的材料基因工程研究给新一代事故容错型核燃料和核结构材料的研发提供了重要的机遇。然而,材料基因工程所涉及的材料“基因”数据库,高通量计算、实验和表征手段在核燃料元件材料的研发方面还面临着重大的挑战,目前国内对于核燃料元件的研究工作在实验和计算方面的协作还远远不够,材料基础数据库方面的研究还比较少,在这种情况下,利用现有的理论手段,实现核燃料元件材料的基础热力学、动力学和物性数据库的研发,并结合多尺度材料设计方法,实现核燃料元件材料成分、组织、结构和性能的预测就非常有必要<sup>[3]</sup>。

相较陶瓷性核燃料来说,金属型核燃料的设计通常添加合金化元素,因此,核燃料的设计要考虑到成分、相组成和微观结构等燃料本身的因素以及包壳材料对整个核燃料元件性能和安全性的影响。例如,对于铀基金属型核燃料来说,燃料通常在  $\alpha$  相是平衡相的温度范围内运行。然而,  $\alpha$  相(斜方晶结构)最重要的辐照特性是

它的自身尺寸不稳定性,由斜方晶结构的各向异性引起肿胀,导致核燃料尺寸不稳定<sup>[4]</sup>。此外,由于包壳与核燃料间存在着机械的或化学的相互作用,导致包壳破损的现象时有发生。核燃料-包壳化学相互作用的本质是一个复杂的多组元相互扩散的问题。例如,  $\text{U-Pu-Zr}$  作为核燃料时,当  $\text{U-Pu-Zr}$  被辐照后发生肿胀并接触包壳,包壳中的  $\text{Ni}$  和  $\text{Fe}$  容易扩散到核燃料中,在包壳与核燃料相邻处发生相变,将易形成脆性相或低熔点相<sup>[5]</sup>。一旦燃料与包壳界面处的温度超过低熔点相的熔点时,由于液态物质的渗透会引起包壳破坏,限制了燃料元件在反应堆中的使用寿命。

对于金属型核燃料元件材料来说,材料基因工程的实施方案可以采用如图1所示的框架图来实施。首先基于高通量实验和理论计算,采用 CALPHAD 方法和第一性原理方法建立核燃料和核结构材料的热力学和动力学、物性和辐照性能数据库,在此基础上,通过第一性原理方法、分子动力学、相图计算、相场动力学和有限元等多尺度材料模拟计算方法的集成,实现对核燃料元件材料成分、组织、结构和性能的预测。

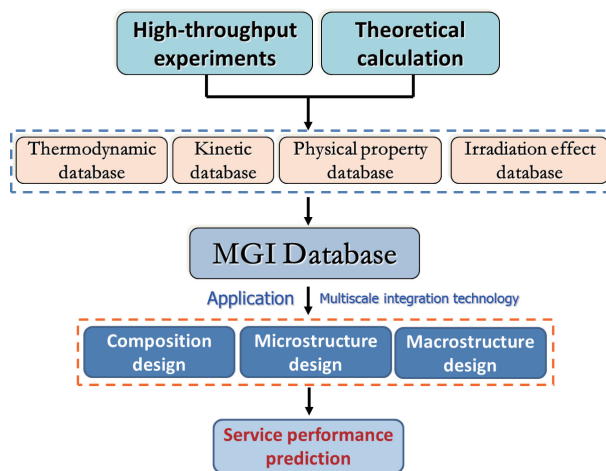


图1 面向核燃料元件材料的材料基因工程研究方法

Fig. 1 Methodology of MGI for nuclear fuel element materials

## 3 核燃料元件材料的多尺度材料设计

近年来本研究组通过收集和整理国内外文献报道的有关核燃料体系的实验相平衡和热力学性质的信息,利用 CALPHAD 计算相图方法,较为系统地优化计算了铀、钚、钍基核燃料和  $\text{Fe}$ 、 $\text{Zr}$  基包壳材料体系的热力学性质,建立了多组元核燃料的热力学数据库,系统地探索了相图计算在核材料设计中的应用。基于热力学数据库,开展了辐照条件下相稳定性的和相平衡的研究,逐步开展了部分重要的铀基二元系在辐照条件下的相图

计算,进行了凝固过程和时效过程的微观组织演化的组织模拟,完善了核燃料元件材料从成分到组织的多尺度材料设计方法。

### 3.1 核燃料元件材料的第一性原理和分子动力学的计算

近年来,国内外学者运用第一性原理和分子动力学方法对核燃料和包壳材料开展了大量的研究工作。这对于开展核燃料元件材料的多尺度设计具有重要的意义。

对于目前应用的铀基核燃料来说,国内外学者普遍采用局域密度近似+U (LDA+U) 或广义梯度近似+U (GGA+U)方法计算体系的总能量和电子结构,进而计算出结合能、生成能、相变热等热力学参量<sup>[6-9]</sup>。对于核燃料来说,实验报道的热力学和物性数据有限,采用第一性原理进行相关计算,可以为后续的热力学优化和成分设计提供有效的数据支撑<sup>[10]</sup>。除此之外,第一性原理方法可以开展裂变产物<sup>[11,12]</sup>、辐照缺陷<sup>[13,14]</sup>等的研究。基于分子动力学的核燃料和包壳材料的研究主要

集中于包括热膨胀、热熔和热导率的热物性计算<sup>[15,16]</sup>,以及对辐照损伤<sup>[17,18]</sup>、裂变产物的形核和扩散<sup>[19]</sup>等的研究。

### 3.2 核燃料元件材料热力学数据库的建立

利用国内外到目前为止所积累的有关核燃料材料的热力学性能及实验相图的信息,本研究组对核燃料元件材料开展相图的热力学计算并建立热力学数据库,预测在不同温度下的相平衡与相变、各种热力学性能等,为核燃料元件材料的研发提供重要的基础理论积累。本研究组在收集本实验室所建立的相关热力学数据库的基础上,综合国际国内所发表的相关热力学计算结果,目前,初步建立了由核燃料元件材料中常用元素(U, Pu, Th, Al, B, C, Co, Cr, Cu, Fe, Mg, Mn, Mo, Nb, Ni, O, Pb, Re, Ru, Si, Sn, Ti, V, W, Zr 等)组成的热力学数据库<sup>[20-36]</sup>,如表 1 所示。其中●代表本实验室完成的体系;▲代表的是其他实验室完成的体系;○代表未完成的体系。

表 1 核材料二元热力学数据库信息

Table 1 Information of binary thermodynamic database of nuclear materials

	Th	Pu	U	Al	Co	Cr	Cu	Fe	Mg	Mn	Mo	Nb	Ni	Pb	Si	Sn	Zn	Zr	V
Th	-	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●
Pu	-	-	▲	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	○	●	●	●
U	-	-	-	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	●	▲	●	●	▲	●
	Ti	Hf	In	Ru	Re	O	Be	Cd	Bi	Ta	W	Yb	Ga	La	Ce	Au	Sc	Pt	As
Th	●	●	●	▲	●	●	●	○	○	○	●	○	○	○	○	●	●	○	○
Pu	●	○	○	●	●	●	●	●	●	●	●	●	○	●	○	○	○	●	○
U	●	○	○	●	●	○	○	○	●	●	●	○	●	▲	●	○	○	○	●

已完成的三元核燃料材料体系主要有: U-Al-Co、U-Al-Ga、U-Al-Mo、U-Al-Zr、U-B-Cr、U-B-Fe、U-B-Mo、U-B-W、U-C-Al、U-C-B、U-C-Fe、U-C-Si、U-Cr-Nb、U-Fe-Co、U-Mo-Cr、U-Mo-Nb、U-Mo-Ti、U-Mo-V、U-Mo-W、U-Mo-Zr、U-Pu-Cr、U-Pu-Mg、U-Pu-Nb、U-Pu-O、U-Si-Fe、U-Si-Mo、U-Si-Nb、U-Si-Ti、U-Th-Cr、U-Th-Cu、U-Th-Mg、U-Th-Mn、U-Th-Nb、U-Th-O、U-Th-Pu、U-Th-Zr、U-Ti-Zr、Pu-C-Cr、Pu-C-Mo、Pu-C-Nb、Pu-Zr-Ti、Th-Co-Fe、Th-Ti-Zr。其余交叉的二元和三元系均采用最新的文献报道的数据。该数据库覆盖面广,所含信息量巨大,将在核燃料材料的研发以及核反应堆的安全运行等方面提供一定的理论依据。

### 3.3 核燃料元件材料热力学数据库在核燃料设计中的应用

利用本研究组所建立的核燃料元件材料热力学数据

库,可以计算各个二元系、三元系以及多元系的稳态及亚稳相平衡、液相面、各种极端条件下的相平衡(如:极高温度、极低温度、气体状态等)、各种热力学性质(如:Gibbs 自由能、形成焓、形成熵、活度、相变驱动力、热容等)等,同时可以进行平衡状态下相分数和体积分数的计算,平衡和非平衡过程组织凝固的模拟等。

U-Mo 合金燃料具有铀密度更高、 $\gamma$  相稳定、辐照性能优良和后处理简单等优点,已成为 RERTR 计划开发低浓铀燃料的热点,目前是研究试验堆用燃料的重要发展方向<sup>[37]</sup>。通过添加合金元素,提高 U-Mo 合金  $\gamma$  相的稳定性是一种常用的方法,借助热力学数据库,可以对合金化元素的种类和含量进行设计。

从热力学的角度来说,为了能获得更稳定的 bcc 相结构的  $\gamma$ U 相,合金化元素必须要与 U 或 Mo 形成较大的稳定 bcc 相区,根据热力学数据库的筛选可知,满足

条件的元素有: Cr, Nb, Ti, V 和 Zr 等。借助相图计算方法,可以研究这 5 种 bcc 相稳定化元素对 U-Mo 合金中  $\gamma$ U 相相区的影响。例如, Cr 虽然可以和 Mo 形成稳定的 bcc 相,但 U-Cr-Mo 合金的  $\gamma$ U 相的单相区比 U-Mo 合金的小,当 Cr 的添加量为 5 at% 时,  $\gamma$ U 单相消失,因此 Cr 的添加,无法起到稳定  $\gamma$ U 相的作用。添加 Nb,  $\gamma$ U 单相范围稍微减小,但总体较稳定,当 Nb 含量达到 10 at% 时,  $\gamma$ U 相仍稳定存在。因此, Nb 的添加一定程度上可起到稳定  $\gamma$ U 相的作用。Ti 元素的少量添加一定程度上可起到稳定  $\gamma$ U 相的作用,当添加量大于 5 at% 时,会引起 bcc 相区的缩小。V 的添加量达到 5 at%,  $\gamma$ U 单相几乎消失,因此 V 的添加,可能无法起到稳定  $\gamma$ U 相的作用。Zr 可以和 U 形成稳定的 bcc 相,可起到 bcc 相稳定化作用,是金属燃料的常用添加元素之一,根据计算结果可知, Zr 的添加可起到很好的稳定  $\gamma$ U 相的作用。

此外,运用热力学数据库也可以研究 Th、Pu 等核元素对 U-Mo 基金属燃料的影响。例如,通过计算可知,当 U-Mo 合金中添加少量的 Th 时,会使 U-Mo 合金中稳定的 bcc ( $\gamma$ U) 转化为 bcc ( $\gamma$ U) + fcc ( $\alpha$ Th) 两相平衡,随着 Th 含量的增加, bcc ( $\gamma$ U) + fcc ( $\alpha$ Th) 两相区范围不断扩大,不利于燃料组织的稳定性。因此 Th 的添加无法起到稳定  $\gamma$ U 相的作用。当 U-Mo 合金中添加少量的 Pu 时,会降低 bcc ( $\gamma$ U) 的熔点,但和 Th 相比, Pu 的添加对 bcc ( $\gamma$ U) 的影响远远小于 Th 的影响。因此,若采用 Pu 替代部分的 U 进行燃料设计时,需要控制 Pu 的添加量。

### 3.4 辐照条件下材料热力学稳定性的研究

核燃料的服役过程中会受到辐照的影响,合金体系中的相平衡关系也会随之改变,此时的热力学平衡相图将不再适用于辐照过程中相稳定性的研究。基于 Martin 等人提出的辐照条件下有效自由能模型<sup>[38]</sup>,结合平衡相图热力学数据库,可以实现对辐照条件下相稳定性的预测。基于本实验室优化的最新 U-X (X: Nb, Zr) 二元合金系的热力学参数,结合计算辐照条件下平衡相图的有效自由能模型<sup>[38]</sup>,首次计算了辐照条件下 U-Nb 合金和 U-Zr 合金的平衡相图,分析了不同辐照条件对其扩散系数、自由能及平衡相图的影响<sup>[20]</sup>。U-Nb 二元系辐照下的相图如图 2 所示,在高温区,辐照下平衡相图的相平衡关系与热力学平衡相图基本保持一致,  $\gamma$  (U, Nb) 相依然发生相分离,形成富 U 和富 Nb 相,即  $\gamma$  (U, Nb)  $\rightarrow$   $\gamma_1 + \gamma_2$ ; 而在低温区,由于辐照的影响,  $\gamma$  (U, Nb) 相的溶解度间隙由原来的开口状逐渐变成一个封闭区域,并发生了  $\alpha\text{U} + \gamma_2 \leftrightarrow \gamma$  (U, Nb) 和  $\gamma_1 + \gamma_2$

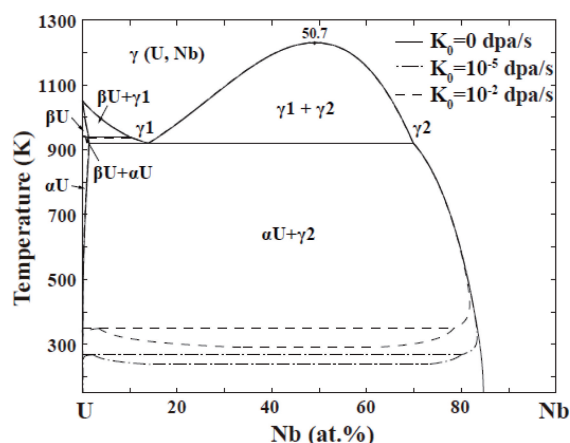


图 2 U-Nb 二元系辐照下的相图与热力学平衡相图的比较<sup>[20]</sup>

Fig. 2 Comparison of phase diagram under irradiation of U-Nb binary system with thermodynamic equilibrium phase diagram<sup>[20]</sup>

$\leftrightarrow \gamma$  (U, Nb) 相变反应,形成了连续固溶的  $\gamma$  (U, Nb) 相。U-Zr 二元系辐照下的相图如图 3 所示,在高温区,辐照下平衡相图的相平衡关系与热力学平衡相图基本保持一致,  $\gamma$  (U, Zr) 相依然发生相分离,形成富 U 和富 Zr 相,即  $\gamma$  (U, Zr)  $\rightarrow$   $\gamma_1 + \gamma_2$ ; 而在低温区,由于辐照的影响,发生了  $\delta \leftrightarrow \gamma$  (U, Zr) +  $\alpha$  (U) 和  $\delta + \alpha$  (Zr)  $\leftrightarrow \gamma$  (U, Zr) 相变反应,从而形成了连续固溶的  $\gamma$  (U, Zr) 相。

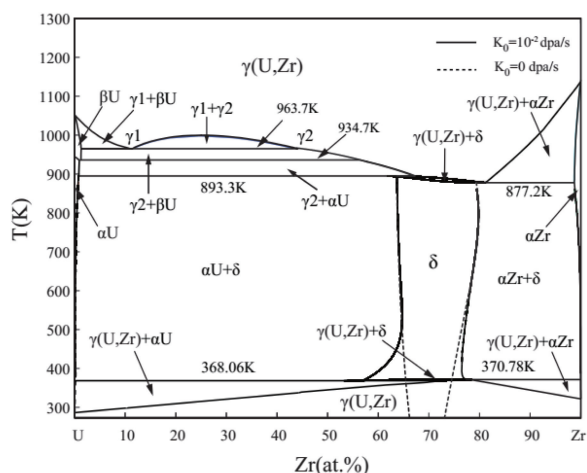


图 3 U-Zr 二元系辐照下的相图与热力学平衡相图的比较<sup>[20]</sup>

Fig. 3 Comparison of phase diagram under irradiation of U-Zr binary system with thermodynamic equilibrium phase diagram<sup>[20]</sup>

该研究结果从热力学角度很好地解释了 Bleiberg 等人的实验结果,即在辐照条件下,原本在高温条件下稳定的  $\gamma$  相可以在低温稳定存在<sup>[39]</sup>。



### 3.5 凝固和时效过程的组织演化模拟

核燃料元件的微观组织对其本身的力学性质、抗辐照性能以及高燃耗条件下的失效行为有非常重要的影响,对于材料的微观组织设计也是材料基因工程的重点研究内容。目前,对微观组织演化过程的模拟主要通过相场动力学来实现<sup>[40]</sup>。基于材料热力学和动力学数据库可对核燃料及核结构材料的微观组织演化进行模拟,从而实现组织和工艺的优化设计。本研究组通过耦合温度场、弹性应力场和浓度场建立相场动力学模型<sup>[41-44]</sup>,基于热力学数据库,对 U-Nb 合金凝固组织和时效组织的演化过程进行模拟,揭示其在不同工艺条件下的组织演变规律。

引入最新热力学数据,模拟了 U-Nb 合金在不同凝固条件下的组织演变过程。首先,模拟了在等温凝固条件下, U-Nb 二元合金的组织演变过程,如图 4a 所示。获得了典型的枝晶形貌,重现了合金凝固过程中枝晶臂间相互碰撞、竞争的生长过程,并分析了凝固过程固相率及枝晶尖端生长速率的变化。其次,考虑潜热对凝固过程中组织形貌的影响,模拟了非等温条件下的凝固过程,如图 4b 所示。这些模拟结果对核燃料在铸造过程中溶质原子的分布、枝晶形貌及凝固温度等提供重要的理论参考。

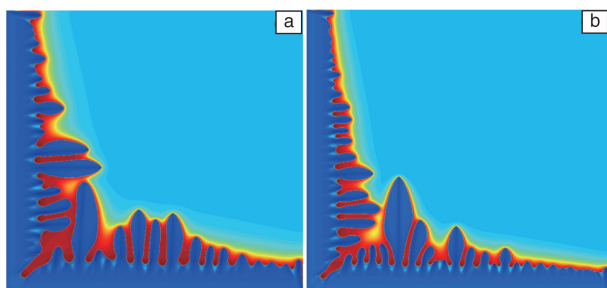


图 4 初始温度为 1525 K 的条件下, Nb-86U (at%) 合金的等温 (a) 和非等温 (b) 凝固过程中浓度场模拟结果

Fig. 4 The simulation results of concentration field during isothermal (a) and anisothermal (b) solidification of Nb-86U (at%) alloy at 1525 K

文献报道的关于 U-Nb 合金时效过程的组织演变过程比较复杂,为了阐明各种组织的形成机理,本研究组基于最新的热力学数据库,模拟了不同温度和初始成分条件下的 U-Nb 合金时效过程的组织演化过程,重点对  $\gamma$  相 U-Nb 合金在时效过程中,晶界形核机制对新生的  $\alpha$  晶粒和富 Nb 的  $\gamma$  晶粒彼此协同长大的生长过程的影响,及晶界片层状组织的形成机理和低温马氏体中的调幅分解进行了模拟,模拟结果如图 5 所示。

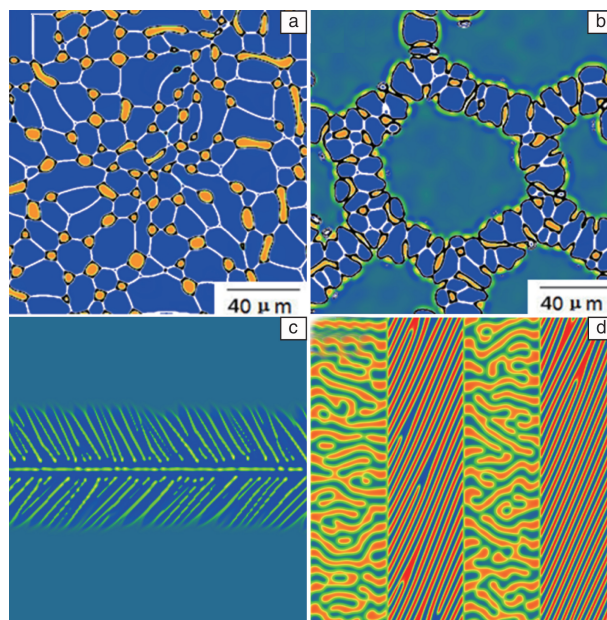


图 5 单晶 (a) 和多晶合金 (b) 时效过程的组织模拟结果; 共析转变过程 (c) 和 (130) 马氏体孪晶中调幅分解 (d) 的模拟结果

Fig. 5 Simulation results of microstructure evolution during aging in single crystal (a) and polycrystal (b); Simulation results of eutectoid transformation (c) and spinodal decomposition in (130) martensitic twins (d)

此外,相场法在核燃料元件材料研究中的应用越来越受到国内外研究者的青睐<sup>[45]</sup>。基于多相场模型,可以实现对核燃料中空洞和气泡演化<sup>[46,47]</sup>、位错<sup>[48]</sup>、氢化物析出<sup>[49]</sup>、晶粒长大<sup>[50]</sup>等组织和缺陷演化过程的模拟,这对核燃料元件材料的设计和服役过程中安全性能评估等具有重要的意义。

## 4 结 语

本文以铀基金属型核燃料元件材料热力学数据库的建立和应用为例,介绍了以材料基因工程理念为指导的金属型核燃料的多尺度设计思路,以及基于热力学数据库,对辐照条件下相稳定性和微观组织演化的计算模拟方法,说明了材料基因工程研究方法在我国新一代核燃料元件材料研发中的重要作用。

## 参考文献 References

- [1] Gong Haiguang (宫海光), Guo Dingqing (郭丁情), Tong Lili (佟立丽), et al. *Nuclear Science and Engineering* (核科学与工程) [J], 2015, 35 (3): 525-531.
- [2] Liu Zikui (刘梓葵). *Science China Press* (科学通报) [J], 2013, 58 (35): 3618-3622.
- [3] Devanathan R, Brutzel V L, Chartier A, et al. *Energy & Environmen-*

- tal Science* [J], 2010, 3: 1406–1426.
- [4] Yu Jinnan (郁金南). *Irradiation Effect of Material* (材料辐照效应) [M]. Beijing: Chemical Industry Press, 2007.
- [5] B. R. T. 弗罗斯特. *Nuclear Materials* (核材料) [M]. Beijing: Science Press, 1999.
- [6] Freyss M, Petit T, Crocombette J P. *Journal of Nuclear Materials* [J], 2005, 347: 44–51.
- [7] Jia Huimin (贾慧敏). *Dissertation for Master* (硕士论文) [D]. Yantai: Yantai University, 2011.
- [8] Liu X Y, Andersson D A, Uberuaga B P. *Journal of Materials Science* [J], 2012, 47: 7367–7384.
- [9] Younsuk Y, Oppeneer P M. *MRS Bulletin* [J], 2011, 36 (03): 178–184.
- [10] Li Qin (李 琴), Luo Yang (罗 洋), Ye Xinyu (叶信宇), *et al. Nonferrous Metals Science and Engineering* (有色金属科学与工程), 2015 (6): 37–46.
- [11] Nerikar P V, Liu X Y, Uberuaga B P, *et al. Journal of Physics: Condensed Matter* [J], 2009, 21: 435602.
- [12] Liu X Y, Sickafus K E. *Journal of Nuclear Materials* [J], 2011, 414 (2): 217–220.
- [13] Dorado B, Jomard G, Freyss M, *et al. Physical Review B* [J], 2010, 82 (3): 035114.
- [14] Crocombette J P, Torumba D, Chartier A. *Physical Review B* [J], 2011, 83 (18): 184107.
- [15] Kurosaki K, Yamada K, Uno M, *et al. Journal of Nuclear Materials* [J], 2001, 294 (1): 160–167.
- [16] Basak C B, Sengupta A K, Kamath H S. *Journal of Alloys and Compounds* [J], 2003, 360 (1): 210–216.
- [17] Brutzel L V, Vincent-Aublant E. *Journal of Nuclear Materials* [J], 2008, 377 (3): 522–527.
- [18] Aidhy D S, Millett P C, Desai T, *et al. Physical Review B* [J], 2009, 80 (10): 104107.
- [19] Martin G, Maillard S, Brutzel L V, *et al. Journal of Nuclear Materials* [J], 2009, 385: 351–357.
- [20] Wang Jian (王 见), Li Zhisheng (李志圣), Liu Xingjun (刘兴军), *et al. The Chinese Journal of Nonferrous Metals* (中国有色金属学报) [J], 2007, 17: 96–100.
- [21] Wang Cuiping, Yu Peng, Liu Xingjun, *et al. Journal of Alloys and Compounds* [J], 2008, 457: 150–156.
- [22] Wang Cuiping, Li Yifu, Liu Xingjun, *et al. Journal of Alloys and Compounds* [J], 2008, 457: 208–213.
- [23] Wang Jian, Wang Cuiping, Liu Xingjun, *et al. Journal of Nuclear Materials* [J], 2008, 374: 79–86.
- [24] Liu Xingjun, Li Zhisheng, Wang Jian, *et al. Journal of Nuclear Materials* [J], 2008, 380: 99–104.
- [25] Wang Jian, Wang Cuiping, Liu Xingjun. *Journal of Nuclear Materials* [J], 2008, 380: 105–110.
- [26] Li Zhisheng, Liu Xingjun, Wang Cuiping. *Journal of Alloys and Compounds* [J], 2009, 476: 193–198.
- [27] Liu Xingjun, Wang Cuiping. *Journal of Alloys and Compounds* [J], 2009, 469: 186–192.
- [28] Wang Cuiping, Fang Wei, Liu Xingjun, *et al. Journal of Nuclear Materials* [J], 2009, 392: 525–530.
- [29] Wang Cuiping, He Ye, Liu Xingjun, *et al. Journal of Alloys and Compounds* [J], 2009, 487: 126–131.
- [30] Wang Cuiping, Li Zhisheng, Liu Xingjun, *et al. Journal of Phase Equilibria and Diffusion* [J], 2009, 30: 535–552.
- [31] Li Zhisheng, Liu Xingjun, Wang Cuiping. *Journal of Nuclear Materials* [J], 2010, 403: 1–6.
- [32] Wang Cuiping, Yu Wenjie, Liu Xingjun, *et al. Journal of Nuclear Materials* [J], 2011, 412: 66–71.
- [33] Wang Cuiping, Wang Guicheng, Liu Xingjun, *et al. Journal of Nuclear Materials* [J], 2013, 440: 214–219.
- [34] Liu Xingjun, Zhao Yilu, Wang Cuiping, *et al. Journal of Nuclear Materials* [J], 2014, 451: 366–371.
- [35] Liu Xingjun, He Qin, Wang Cuiping, *et al. Journal of Nuclear Materials* [J], 2014, 453: 169–175.
- [36] Huang Yixiong, Lu Yong, Wang Cuiping, *et al. CALPHAD* [J], 2016, 52: 120–124.
- [37] Yin Changgeng (尹昌耕), Chen Jiangang (陈建刚), Sun Changlong (孙长龙), *et al. Atomic Energy Science and Technology* (原子能科学技术) [J], 2009, 43: 389–393.
- [38] Martin G. *Physical Review B* [J], 1984, 30: 1424–1436.
- [39] Bleiberg M L, Jones L J, Lustman B. *Journal of Applied Physics* [J], 1956, 27: 1270–1283.
- [40] Chen Longqing (陈龙庆). *Science China Press* (科学通报) [J], 2013, 58 (35): 3638–3641.
- [41] Wheeler A, Boettinger W J, McFadden G B. *Physical Review E* [J], 1993, 47 (3): 1893–1909.
- [42] Boettinger J, Warren J A, Beckermann C, *et al. Annual Review of Materials Research* [J], 2002, 32: 163–194.
- [43] Kim S G, Kim W T, Suzuki T. *Physical Review E* [J], 1998, 58 (3): 3316–3323.
- [44] Ode M, Suzuki T, Kim S G, *et al. Science and Technology of Advanced Materials* [J], 2000, 1: 43–49.
- [45] Li Y, Hu S, Sun X, *et al. npj Computational Materials* [J], 2017, 3 (1): 16.
- [46] Semenov A A, Woo C H. *Journal of Nuclear Materials* [J], 2011, 411: 144–149.
- [47] Millett P C, Tonks M. *Computational Materials Science* [J], 2011, 50: 2044–2050.
- [48] Hu S, Henager C H, Li Y, *et al. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* [J], 2012, 20: 015011.
- [49] Guo X H, Shi S Q, Zhang Q M, *et al. Journal of Nuclear Materials* [J], 2008, 378: 110–119.
- [50] Ahmed K, Pakarinen J, Allen T, *et al. Journal of Nuclear Materials* [J], 2014, 446: 90–99.