

bcc Fe 的刃型位错中氦-空位团的稳定性*

杨 莉^{1,2}, 王小英³, 刘柯钊³, 祖小涛¹

(1. 电子科技大学 应用物理系, 成都 610054; 2. 西华师范大学 物理与电子信息学院, 四川 南充 637002;
3. 中国工程物理研究院 表面物理与化学国家重点实验室, 四川 绵阳 621907)

摘 要: 采用周期性原子阵列方法建立 bcc Fe 中的刃型位错, 利用分子动力学计算了 0 K 时 bcc Fe 的位错芯里氦-空位团的稳定性, 并与理想 Fe 晶体里氦-空位团的稳定性进行比较发现, 位错的作用导致氦-空位团不稳定。点缺陷(He、空位与自间隙 Fe 原子)与氦-空位团的结合能与团中氦-空位比例密切相关, 当氦与空位数之比在 3~6 时, 结合能趋于稳定。

关键词: bcc Fe; 位错; 分子动力学; 氦-空位团; 结合能

中图分类号: O483 **文献标识码:** A

在聚变反应堆中, 第一壁材料会受到很强的中子、中性原子、带电粒子、光子等的作用, 其中最重要的是快中子辐照, 其使得第一壁材料的损坏率极高。当高通量的快中子不断穿过第一壁时, 中子与核的碰撞产生高能的反冲粒子在第一壁内的级联碰撞将产生大量的离位原子和空位, 而这些点缺陷可能演变为位错。位错是晶体中常见的一类结构缺陷, 属于线形缺陷。由核嬗变产生的不溶于基体的氦会与结构材料中的缺陷之一位错相互作用, 形成氦泡, 从而引起材料的肿胀和脆化^[1]。

对于氦与铁中缺陷的相互作用的研究已有很多报道^[2-5], 模拟显示氦以很大的结合能与铁中晶界结合在一起, 不管是间隙形式的氦或替位形式的氦都会被晶界俘获^[6]。近年来, 氦原子与 α -Fe 中刃位错和螺位错的相互作用有人采用分子动力学方法进行了一定研究^[7-8]。这些工作只研究了单个氦原子与位错的相互作用。然而, 在被辐照的材料中, 除了产生大量的氦原子外, 还会有大量的氦-空位团或者氦泡形成。我们采用分子动力学方法模拟研究了小氦-空位(He-v)团与 α -Fe 中刃型位错的相互作用, 发现团和位错的相互作用与团中氦与空位个数之比($n(\text{He}) : n(\text{v})$)密切相关^[9]。K. Morishita 等采用分子动力学方法模拟研究了理想 α -Fe 中氦-空位团的稳定性^[3], 发现在 Fe 中 He、空位和自间隙 Fe 原子与 He-v 团的结合能主要依赖于团中 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比, 而与 He-v 团的大小关系不大。本文对 bcc Fe 的 $a/2\langle 111 \rangle\{110\}$ 刃型位错中 He-v 团的稳定性进行了详细研究, 并与理想 Fe 晶体中的情况进行比较。

1 理论模型

基于 Daw 和 Baskes 等提出的方法建立位错的周期性原子阵列, 它主要的特点是沿着位错线方向和位错的滑移方向(伯格矢量方向)都采用了周期性边界条件^[10]。首先沿着滑移面将晶体分成两部分, 一部分由 N 个晶体面构成, 而另一部分由 $N-1$ 个晶体面构成, 两部分的总宽度相同, 因此沿伯格方向晶面之间的宽度有微小的差别, 即在滑移面上, 上下两部分的晶体面有一定的错位。晶体的 x, y, z 轴分别为 $[111], [\bar{1}\bar{1}2]$ 和 $[1\bar{1}0]$ 方向。沿着 x 和 y 方向也就是伯格矢量方向和位错线方向采用了周期性边界条件, 沿 z 方向采用了固定边界。模拟的晶体大小沿 $[111]$ 方向长约 $44a_0$ (a_0 是铁的晶格常数), 沿 $[\bar{1}\bar{1}2]$ 和 $[1\bar{1}0]$ 方向分别长约 $32a_0$ 和 $45a_0$ 。可移动的原子有 106 400 个。没有考虑温度效应, 所有的模拟都是在 0 K 的条件下采用共轭梯度方法弛豫。系统经过弛豫到达势能最低状态后, 一个包含有 $a/2\langle 111 \rangle\{110\}$ 刃型位错的模拟块就形成了, 见图 1(a)。图 1(b)给出了位错芯附近 $\{110\}$ 面上的部分原子结构。在弛豫后含有位错的系统里放入氦-空位团, 再弛豫到系统的势能最低状态。

采用的原始程序是 MOLDY 程序, 但对它进行了适当的修改, 引入了位错的建立。Fe-Fe, Fe-He 和 He-

* 收稿日期: 2007-11-05; 修订日期: 2008-03-25

基金项目: 新世纪优秀人才支持计划(NCET-04-0899)

作者简介: 杨 莉(1974—), 女, 四川渠县人, 副教授, 硕士生, 主要从事氦在金属中行为的研究; yanglilkd@tom.com。

联系作者: 祖小涛(1965—), xiaotaozu@yahoo.com。

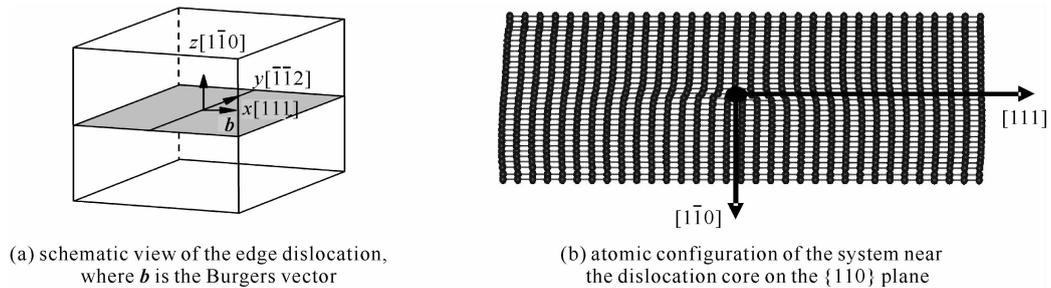


Fig. 1 Schematic view of the simulation cell with the corresponding crystallographic orientations and configuration of the system near the dislocation core

图 1 $a/2\langle 111 \rangle\{110\}$ 刃型位错的结构示意图和位错芯附近部分原子结构

He 之间的相互作用分别采用了 Ackland 修正后的 Finnis-Sinclair 势函数^[11]、Wilson-Johnson^[12] 和修正后的 Beck^[13] 相互作用势。

在位错里氦-空位团(He_nv_m)的形成能定义为

$$E_{f,d} = U_{\text{tot},d+\text{He}_n\text{v}_m} - U_{\text{tot},d} + mE_{\text{Fe}} - nE_{\text{He}} \quad (1)$$

其中 $U_{\text{tot},d+\text{He}_n\text{v}_m}$ 和 $U_{\text{tot},d}$ 分别为位错里有氦-空位团和没有氦-空位团的系统总能量。 $E_{\text{Fe}} = 4.316$ eV 和 $E_{\text{He}} = 0.00567758$ eV 分别是 Fe 和 He 的内聚能。缺陷(氦原子、空位和自间隙 Fe 原子)与 He_nv_m 团的结合能定义为

$$E_b(\text{He}) = E_f(\text{He}) + E_f(\text{He}_{n-1}\text{v}_m) - E_f(\text{He}_n\text{v}_m) \quad (2)$$

$$E_b(\text{v}) = E_f(\text{v}) + E_f(\text{He}_n\text{v}_{m-1}) - E_f(\text{He}_n\text{v}_m) \quad (3)$$

$$E_b(\text{Fe}) = E_f(\text{He}_n\text{v}_{m+1}) + E_f(\text{SIA}) - E_f(\text{He}_n\text{v}_m) \quad (4)$$

式中: E_b 为结合能; E_f 为形成能; $E_f(\text{SIA})$ 为自间隙原子的形成能。

2 结果与分析

通过计算位错里氦原子、空位和自间隙 Fe 原子与氦-空位团的结合能来研究位错里氦团的稳定性。首先采用分子动力模拟计算 bcc Fe 的位错芯里放入氦-空位团前后体系总能量,利用公式(1)计算小氦-空位团 He_nv_m ($n, m = 1, 2, 3, 4, 5, 6$) 在 bcc Fe 的刃型位错芯里的形成能。然后利用公式(2),(3)和(4)分别计算氦原子、空位和自间隙 Fe 原子与氦-空位团的结合能。

图 2 给出了 Fe 的位错芯里 He 与氦-空位团的结合能,为了与理想 Fe 晶体中氦团的稳定性进行比较,图中同时给出了理想 Fe 晶体中氦与 He-v 团的结合能。从该图中可以看出位错芯里 He 与 He-v 团的结合能与理想 Fe 晶体里 He 与 He-v 团的结合能随 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例的变化相似,都是随着 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例增加而降低,当 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例增大到 3 以后,结合能基本保持恒定,但是位错芯里氦与氦-空位团的结合能比在理想晶体里的低。在 Fe 的位错芯里,当 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例为 0 时,氦 He-v 团的结合能为 2.75 eV,而当 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例增加到 6 时,结合能降低到约 1 eV;而在理想 Fe 晶体中,当 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例为 0 时,结合能为 5.25 eV,当 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例增加到 6 时,结合能降低到约为 2 eV。 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例为 0 对应的氦与 He-v 团的结合能就是间隙氦的形成能^[3]。因为位错芯里间隙氦更容易形成^[6],所以它的形成能比在理想晶体里低。由 He 与 He-v 团的结合能可以得知,在位错里的 He-v 团中的氦原子较理想晶体中更容易从 He-v 团中分离出来。

为了分析 He-v 团的稳定性,有必要对团中空位的稳定性进行分析。图 3 给出了 Fe 的位错芯里空位与 He-v 团的结合能,图中同时给出了理想 Fe 晶体中空位与 He-v 团的结合能。该图显示随着 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比

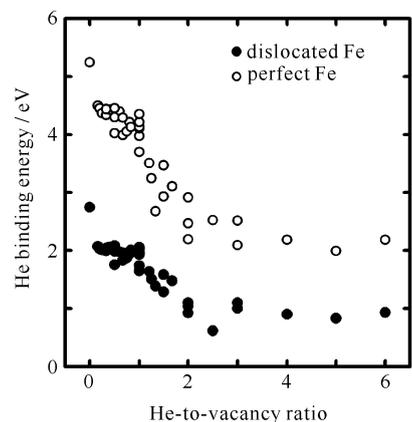


Fig. 2 Binding energies of a He atom to a He-vacancy cluster in dislocated and perfect Fe as a function of He-to-vacancy ratios

图 2 Fe 的位错芯和理想晶体里氦与氦-空位团的结合能

例的增加,空位与He-v团的结合能增加,当 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例增加到3以后,结合能基本恒定。当 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例较小时($n(\text{He}) : n(\text{v}) < 1$),位错芯里空位与He-v团的结合能与理想晶体中相当,但是当 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例较大时($n(\text{He}) : n(\text{v}) > 1$),两者差别较大,位错芯里空位与He-v团的结合能比理想晶体中低。以上说明低 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例的氦-空位团在位错里和在理想晶体里的稳定性相当,空位都较易从团中分离出来。而对于高 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例的氦-空位团,位错导致空位更易与团分离。

在级联中发现不仅有大量的He-v团形成,而且有He-v团与Fe形成的团体(He-v-Fe)^[14],当He-v团长大到一定程度时会使得团中的Fe原子发射出去,因此Fe原子与团的结合能能够从另一方面反应团的稳定性。图4研究了Fe的位错芯里自间隙Fe原子与He-v团的结合能与 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例的关系,同时给出了理想Fe晶体里自间隙Fe原子与He-v团的结合能。虽然理想Fe晶体里,在整个研究的 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例范围内,Fe原子与He-v团的结合能随着 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例增加而明显降低。 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例为0对应的结合能高达6.58 eV,这刚好是Frenkel对的形成能,因为理想Fe晶体里自间隙原子和空位形成能分别为1.70和4.88 eV。在Fe的位错芯里,发现自间隙Fe原子与He-v团的结合能最大不超过2 eV,其原因是在位错芯里空位形成能和自间隙原子形成能都较低。但是结合能随 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例在低 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例段随着 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例增加而降低,当 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例增加到3以后,自间隙原子与团的结合能基本相同。

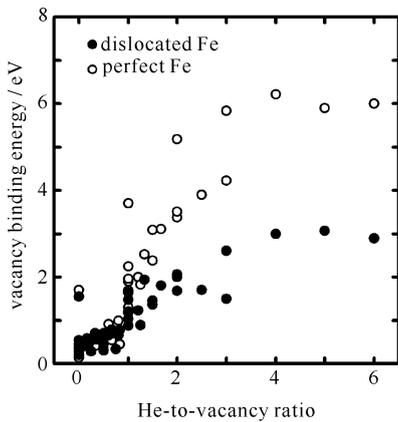


Fig. 3 Binding energies of a vacancy to a He-vacancy cluster in dislocated and perfect Fe as a function of He-to-vacancy ratios

图3 Fe的位错芯和理想晶体里空位与氦-空位团的结合能

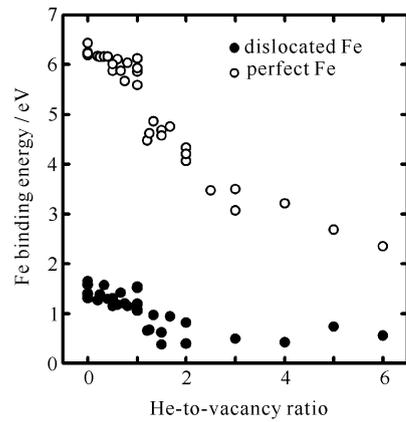


Fig. 4 Binding energy of an iron atom to a He-vacancy cluster in dislocated and perfect Fe as a function of He-to-vacancy ratios

图4 Fe的位错芯和理想晶体中自间隙Fe原子与氦-空位团的结合能

从图2~4发现在Fe的位错芯里He、空位和自间隙Fe原子与氦-空位团的结合能基本上都比理想晶体中的要低,也就是说氦-空位团在位错里的稳定性比在理想晶体里差。虽然在bcc Fe的刃型位错芯里,氦-空位团的形成能比在理想晶体里的低,即氦-空位团容易被捕获在位错芯里^[9],但是通过以上分析发现被位错捕获的氦-空位团的稳定性比在理想晶体里差,究其原因可能是位错产生的应力场导致氦-空位团不稳定,因此相应的结合能比在理想晶体里低。

3 结论

通过采用分子动力学模拟计算bcc Fe的刃型位错芯里氦、空位和自间隙Fe原子与氦-空位团的结合能,发现结合能随 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例的变化关系与理想Fe晶体里类似,但是在位错芯里的结合能比在理想晶体里相应的结合能都要低,位错导致氦-空位团不稳定。在位错芯里,当 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例在3~6范围内,氦-空位团的稳定性与 $n(\text{He}) : n(\text{v})$ 比例基本无关。

参考文献:

- [1] Sugano R, Morishita K, Iwakiri H, et al. Effects of dislocation on thermal helium desorption from iron and ferritic steel[J]. *J Nucl Mater*, 2002, **307-311**:941-945.
- [2] Morishita K, Sugano R, Wirth B D. MD and KMC modeling of the growth and shrinkage mechanisms of helium-vacancy clusters in Fe[J]. *J Nucl Mater*, 2003, **323**(2-3):243-250.
- [3] Morishita K, Sugano R, Wirth B D, et al. Thermal stability of helium-vacancy clusters in iron[J]. *Nucl Instr and Meth B*, 2003, **202**:76-81.

- [4] Sugano R, Morishita K, Kimura A, et al. Microstructural evolution in Fe and Fe-Gr model alloys after He⁺ ion irradiations[J]. *J Nucl Mater*, 2004, **329-333**:942-946.
- [5] Yang L, Zu X T, Xiao H Y, et al. Atomistic simulation of helium-defect interaction in alpha-iron[J]. *Appl Phys Lett*, 2006, **88**:091915.
- [6] Kurtz R J, Heinisch H L. The effects of grain boundary structure on binding of He in Fe[J]. *J Nucl Mater*, 2004, **329-333**:1199-1203.
- [7] Heinisch H L, Gao F, Kurtz R J, et al. Interaction of helium atoms with edge dislocations in α -Fe[J]. *J Nucl Mater*, 2006, **351**(1-3):141-148.
- [8] Heinisch H L, Gao F, Kurtz R J. Atomistic modeling of helium interacting with screw dislocations in α -Fe[J]. *J Nucl Mater*, 2007, **367-370**:311-315.
- [9] Yang L, Zu X T, Wang Z G, et al. Interaction of helium-vacancy clusters with edge dislocations in α -Fe[J]. *Nucl Instr and Meth in Phys Res B*, 2007, **265**(2):541-546.
- [10] Osetsky Y N, Bacon D J. An atomic-level model for studying the dynamics of edge dislocations in metals[J]. *Model Simul Mater Sci Eng*, 2003, **11**(4):427-446.
- [11] Ackland G J, Bacon D J, Calder A F, et al. Computer simulation of point defect properties in dilute Fe-Cu alloy using a many-body interatomic potential[J]. *Philos Mag A*, 1997, **75**(3):713-732.
- [12] Wilson W D, Johnson R D. Interatomic potentials and simulation of lattice defects[M]. New York: Plenum Press, 1972.
- [13] Biersack J P, Ziegler J F. Refined universal potentials in atomic collisions[J]. *Nucl Instr and Meth in Phys Res*, 1982, **194**:93-100.
- [14] 杨莉, 祖小涛, 肖海燕, 等. α -铁中位移级联过程中缺陷的生成和 He-空位复合物的形成[J]. 物理学报, 2005, **52**(10):4857-4862. (Yang L, Zu X T, Xiao H Y, et al. Defect production and formation of helium-vacancy clusters in cascades of iron at different concentration of helium. *Acta Physica Sinica*, 2005, **54**(10):4857-4862)

Stability of helium-vacancy clusters in edge dislocations in bcc Fe

YANG Li^{1,2}, WANG Xiao-ying³, LIU Ke-zhao³, ZU Xiao-tao¹

- (1. *Department of Applied Physics, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, China;*
 2. *School of Physics and Electronic Information, China West Normal University, Nanchong 637002, China;*
 3. *National Key Laboratory for Surface Physics and Chemistry, CAEP, Mianyang 621907, China*)

Abstract: The $a/2\langle 111 \rangle\{110\}$ edge dislocation in bcc Fe was created using periodic array of dislocations methods. Molecular dynamic calculations were performed to study the stability of He-vacancy clusters in the dislocation core in bcc Fe, and the results were compared with simulations performed in perfect bcc Fe. The comparison show that the He-vacancy clusters are unstable for the effects of the dislocation field. The binding energies of an interstitial He atom, a vacancy and a self-interstitial Fe atom to the He-vacancy clusters depend mainly on the He-to-vacancy ratios of the clusters. In the dislocation core, for the ratio larger than 3 and less than 6, the binding energies are almost unchanging.

Key words: bcc Fe; Dislocation; Molecular dynamics; He-vacancy cluster; Binding energy