

# 金属钨级联碰撞中势函数的影响

刘丽霞<sup>1</sup>, 陈阳春<sup>2</sup>, 邱荣阳<sup>2</sup>, 胡望宇<sup>1,\*</sup>, 邓辉球<sup>2</sup>

(1. 湖南大学 材料科学与工程学院, 湖南 长沙 410082;

2. 湖南大学 物理与微电子科学学院, 湖南 长沙 410082)

**摘要:**原子间相互作用势函数的精确性会影响分子动力学级联碰撞模拟结果的精确性。本文选取5种典型的金属钨势函数进行比较测试,通过分子动力学方法,用能量为10 keV和50 keV的初级碰撞原子进行级联碰撞模拟,讨论和分析了辐照过程中缺陷的产生、缺陷团簇和位错环的分布。结果表明:对于最终稳定状态下的弗兰克尔对的数目,不同势函数的模拟结果没有明显差别,而对于缺陷的空间分布、缺陷团簇分数及位错环的分布,不同势函数的模拟结果各有特点。本文结果为用于辐照级联模拟势函数的选择提供了参考,也为钨基势函数的进一步优化提供了指导。

**关键词:**钨;级联碰撞;分子动力学;原子间相互作用势函数

中图分类号:TL627

文献标志码:A

文章编号:1000-6931(2021)01-0008-10

doi:10.7538/yzk.2020.youxian.0499

## Influence of Interatomic Potential on Collision Cascade in Tungsten

LIU Lixia<sup>1</sup>, CHEN Yangchun<sup>2</sup>, QIU Rongyang<sup>2</sup>, HU Wangyu<sup>1,\*</sup>, DENG Huiqiu<sup>2</sup>

(1. College of Materials Science and Engineering, Hunan University, Changsha 410082, China;

2. School of Physics and Electronics, Hunan University, Changsha 410082, China)

**Abstract:** The accuracy of interatomic potential will affect the accuracy of the molecular dynamics collision cascade simulation results. In this work, five typical interatomic potentials for tungsten were selected for comparison in neutron collision cascade simulations at the primary knock-on atom energy of 10 keV and 50 keV by molecular dynamics methods. The generation of defects, the distributions of defect clusters and dislocation loops in cascades were systematically analyzed and discussed. The results show that the simulation results of the number of Frenkel defect pairs for different potentials are not significantly different in the final stable state, but the spatial distribution of defects, defect cluster fractions and the distribution of dislocation loops for different potentials have their own characteristics. The current results provide a reference for selecting

收稿日期:2020-07-21;修回日期:2020-09-28

基金项目:国家磁约束核聚变能发展研究专项资助项目(2018YFE0308101)

作者简介:刘丽霞(1993—),女,湖南郴州人,博士研究生,材料科学与工程专业

\* 通信作者:胡望宇, E-mail: wyuhu@hnu.edu.cn

potentials in irradiation cascade simulations, and a guidance for the further optimization of the interatomic potential in tungsten.

**Key words:** tungsten; collision cascade; molecular dynamics; interatomic potential

金属钨(W)材料因其具有高熔点、高热导性和良好的抗溅射性等优良特性,已被认为是用于高温和辐照应用最具前景的第一壁候选材料<sup>[1-4]</sup>。在聚变反应堆中,14.1 MeV 能量的中子辐照是面向等离子体材料所要承受的主要考验。当高能中子轰击到第一壁材料表面,与材料发生剧烈碰撞,会在一定程度上改变材料内部的微观结构,产生一系列辐照缺陷,如点缺陷、缺陷团簇、位错环、孔洞等,从而影响材料的宏观性能,如辐照硬化、脆化、肿胀、蠕变等<sup>[5-7]</sup>。

在研究辐照模拟时,由于高能强流中子难以直接实现辐照模拟,通常以具有一定动能的初级碰撞原子(PKA),即被中子撞击后获得一部分能量的晶格原子来撞击材料的点阵原子模拟级联碰撞过程,通过分析碰撞级联之后材料发生的变化来分析其辐照损伤情况及其抗辐照性能。由于实验装置的限制及科技的发展,计算模拟在研究材料的抗辐照性能方面发挥着越来越重要的作用。目前被广泛应用的计算模拟方法通常有第一性原理(FP)、分子动力学(MD)、动力学蒙特卡罗(KMC)、团簇动力学(CD)和有限元方法(FEM)等,其中分子动力学方法因其可模拟整个碰撞级联过程中每个原子的动态演化过程,且所模拟的时间和空间尺度与中子辐照初期级联碰撞的尺度相一致,而成为模拟级联碰撞的首选方法。近年来,在缺乏高能中子装置进行辐照实验的情况下,尽管国内外在聚变反应堆材料模拟的中子辐照方面进行了许多工作,但仍缺乏系统且完善的模拟平台来实现聚变材料基于中子辐照下从微观到宏观尺度的变化。因此,实施分子动力学研究来建立完善的级联碰撞数据库,为后续的模拟提供输入参考,从而实现不同模拟尺度间信息的有效传递是非常有必要的,将会促进核聚变反应堆中钨材料的发展,具有重要的潜在应用价值。

Nordlund<sup>[8]</sup>回顾了近年来材料辐照效应计算机模拟的历史,详细介绍了辐照模拟的研究方法,充分阐明了分子动力学模拟的重要性。

Fikar 等<sup>[9-10]</sup>使用分子动力学方法研究了不同钨势函数的级联模拟,发现尽管不同势函数的离位阈能不同,各势函数级联碰撞之后会产生相似的结果,即稳定状态下的总缺陷数目相差不大,但缺陷的空间分布有一定的差异,这可能与间隙迁移能有关。Setyawan 等<sup>[11]</sup>使用 LAMMPS<sup>[12]</sup>代码通过分子动力学方法研究了钨中高能入射 PKA 在不同温度梯度下(300~2 050 K)的级联碰撞模拟,结果表明稳定状态幸存的缺陷数目对 PKA 能量有较强的依赖性,而对温度的依赖性很小;Yang 等<sup>[13]</sup>研究了金属钨的级联碰撞模拟,结果表明在稳定状态幸存的缺陷数目虽然随辐照温度的升高而略有减少,但对温度的依赖效果并不显著;Warrier 等<sup>[14]</sup>研究了面心立方铜和体心立方钨两种材料中的级联碰撞模拟,发现在 1~5 keV 的 PKA 低能区间内,当进行使离位原子数目稳定在平均值附近的模拟次数统计时,在钨体系中比在铜体系中所需统计的次数要少,即钨体系中更快达到平衡。Fellman 等<sup>[15]</sup>利用分子动力学方法模拟了钨中含空位团簇和孔洞的级联碰撞模拟,结果表明当级联发生区域与空位团簇所在区域重叠时,最后产生的稳定状态下的缺陷数目会减少,这与 Byggmästar 等<sup>[16]</sup>研究的钨中含间隙缺陷团簇的级联碰撞模拟结果相似,Byggmästar 等发现当级联发生区域与间隙缺陷团簇所在区域重叠时,级联产生的最终稳定状态下的缺陷数目有所下降,且当缺陷团簇的尺寸与级联区域体积的大小相当时,级联产生的新增缺陷对数量几乎为 0。Fu 等<sup>[17]</sup>使用一个新开发的 WRe 合金势函数研究了钨及钨铼合金中高能 PKA 的级联模拟,发现缺陷团簇的尺寸和数目均随 PKA 能量的增加而增加,且纯钨中间隙团簇和位错环的移动性比钨铼合金中要高。Zhang 等<sup>[18]</sup>使用分子动力学方法进行了钨中在晶界附近不同温度下的级联碰撞模拟,结果表明空位缺陷的数目与温度无关。

目前已有大量使用分子动力学方法模拟钨基材料级联碰撞的研究,且所使用的原子间势

函数大多各有优缺点,为了使其更好地用于辐照损伤模拟,钨势函数还在不断地进一步优化改进。随着势函数的不断发展,近几年来出现了一些新的优化版本的钨基势函数。不同原子间势函数在辐照级联模拟中的影响有待进一步研究,尤其是不同势函数在级联碰撞过程中辐照点缺陷、缺陷团簇和位错环等分布信息,可为钨基材料初级辐照损伤的理解及退火过程缺陷长时间的演化模拟提供基础,为用于辐照模拟钨势函数的选择和优化提供参考。

本文对金属钨的势函数进行比较测试,分析辐照过程中缺陷的产生、缺陷团簇和位错环分布信息。

## 1 不同势函数的中子辐照级联模拟

折衷考虑到势函数预测准确性和在大尺度计算时的效率,主要选取的势函数类型有 Embedded-atom 方法 (EAM)<sup>[19]</sup> 和 Finnis-Sinclair (F-S)形式<sup>[20]</sup> 两种类型。首先选取了两个目前为止使用得较频繁的势函数:一个是由 Ackland 等<sup>[21]</sup> 开发的 F-S 形式的钨势函数(势函数 AT),另一个是 Juslin 等<sup>[22]</sup> 在势函数 AT 的基础上进行了优化和修正的钨势函数(势函数 JW)。然后选取了最近发表的几个各有优势的钨基合金势函数:Marinica 等<sup>[23]</sup> 发表了 3 个 EAM 势函数(势函数 MV2、MV3 和 MV4),其中的势函数 MV2 被 Bonny 等<sup>[24]</sup> 进行了更新和优化,开发了一个新的 WRe 合金势函数,即势函数 MV2-B; 势函数 MV4 由 Setyawan 等<sup>[25]</sup> 进行了优化,开发了另一个新的 WRe 合金势函数,即势函数 MV4-S;Chen 等<sup>[26]</sup> 新发表了一个可准确预测钨中位错环形成能的 F-S 形式 WRe 合金势函数(势函数 Chen)。本工作选取上述 5 个势函数进行动态级联碰撞模拟测试。

为更好地模拟在级联过程中原子间的短程相互作用,首先对各势函数进行 Ziegler-Biersack-Littmark(ZBL)修正,并计算了其离位阈能,具体的连接参数和形式参考文献[27]。级联模拟采用三维周期性边界条件,模拟晶胞的最外层 6 层原子( $3 \times a_0$ ,  $a_0$  为 0.316 52 nm)设置为边界区域,如图 1 所示 Region-I,模拟均在 300 K 温度下进行。在辐照级联模拟启动前,首先使用共轭梯度法将系统进行静态弛豫,然后整个模

拟晶胞均通过 Nose-Hoover 热浴和控压方法在等温等压(NPT)系综下进行动态弛豫 20 ps,时间步长设置为 1 fs。弛豫充分之后,为避免沟道效应,且使得级联碰撞在盒子中心区域产生,参考文献[17, 28-29],在模拟晶胞的中心附近随机选取 1 个钨原子作为 PKA 原子,沿典型高指数 $\langle 135 \rangle$ 晶格方向启动级联碰撞模拟,一旦超出模拟盒子边界,则该模拟结果数据无效。在整个级联碰撞过程中,模拟晶胞外层边界区域 (Region-I) 通过速度标定法来控制该区域晶格体系温度保持为 300 K,内部区域 (Region-II) 则在微正则(NVE)系综下自发进行。级联过程使用变时间步长,且控制在  $10^{-3} \sim 10^{-7}$  ps 之间,模拟的总时间根据 PKA 能量 ( $E_{PKA}$ ) 大小的不同选择为 20~60 ps。具体的模拟时间、模拟盒子的边长和模拟事件总数列于表 1。由于级联碰撞过程具有较大的随机性,为降低误差,本文采用随机选择不同 PKA 原子的方式对所有势函数和所模拟 PKA 能量下的每种情况都进行了 15 次模拟级联碰撞过程。本文所使用的分子动力学模拟软件为 LAMMPS<sup>[12]</sup>,辐照级联后产生的点缺陷分析方法为 Winger-Seitz (W-S)原胞方法<sup>[30]</sup>,而位错分析提取为 DXA 位错算法<sup>[31]</sup>。此外,这两种方法均可通过可视化和数据分析软件 OVITO<sup>[32]</sup>来实现。

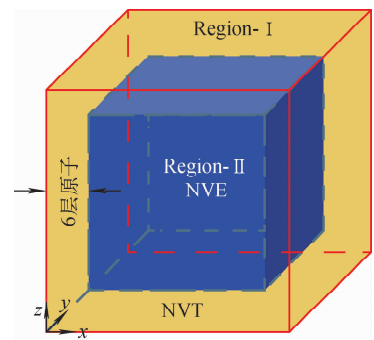


图 1 模拟盒子示意图

Fig. 1 Schematic of simulation box

表 1 势函数级联碰撞模拟参数

Table 1 Collision cascade simulation parameter for potential

$E_{PKA}/\text{keV}$	模拟时间/ps	盒子长度/ $a_0$	模拟次数
10	20	60	15
50	60	100	15

## 2 缺陷的产生

表 2 列出不同势函数在 PKA 能量为 10 keV 和 50 keV 级联过后稳定状态下弗兰克尔缺陷对 (FPs) 的数目。由表 2 可见, 尽管各势函数的离位阈能有差别<sup>[27]</sup>, 但在 PKA 能量为 10 keV 下, 各势函数 FPs 数目的差别很小, 这与之之前 Fikar 等<sup>[9-10]</sup> 获得的结果一致; 在 PKA 能量为 50 keV 下, 不同势函数之间的 FPs 数目略有一些差别, 如果增加模拟次数其差异可能会缩小。此外, FPs 的数目随着 PKA 能量的增加而显著增加。

表 2 不同势函数在稳定状态下的 FPs 数目

Table 2 Number of FPs in stable state obtained by different potentials

$E_{PKA}/\text{keV}$	FPs 数目				
	Chen	AT	JW	MV2-B	MV4-S
10	14(3)	10(3)	12(4)	12(4)	12(3)
50	60(15)	46(11)	43(15)	52(17)	37(10)

注: 括号中为 15 次模拟的标准差

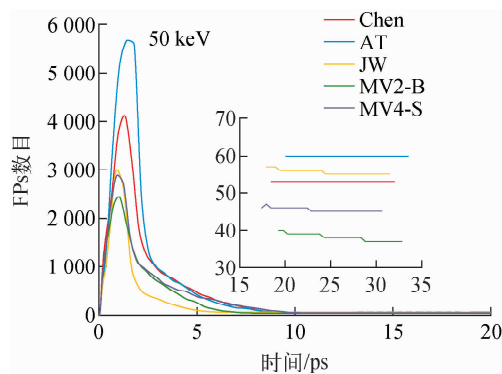


图 2 不同势函数下 FPs 数目随时间的演化

Fig. 2 Number of FPs as a function of simulation time obtained by different potentials

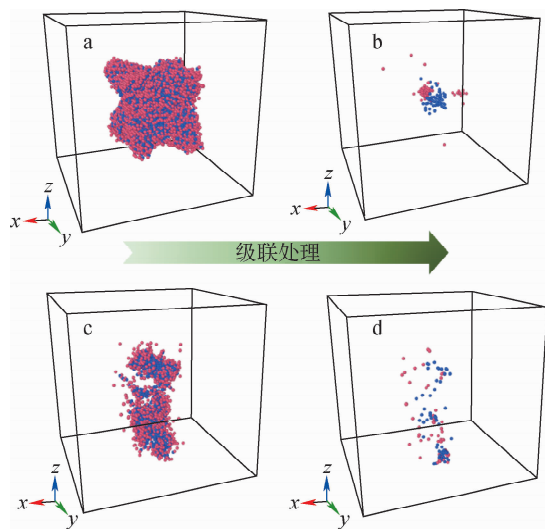
表 3 不同势函数下级联到达热峰和平衡稳定状态的时间

Table 3 Time for cascade simulation with different potentials to reach peak state and equilibrium stable state

势函数	$T_{\text{热峰}}/\text{ps}$	$T_{\text{平衡}}/\text{ps}$
Chen	1.33	8.50
AT	1.41	8.54
JW	0.87	6.46
MV2-B	1.06	6.80
MV4-S	0.91	8.81

图 2 示出各势函数 FPs 数目在 PKA 能量为 50 keV 下随时间的演化, 表 3 列出各势函数达到热峰状态的时间和演化趋于平衡的时间。结果表明, 50 keV 的 PKA 能量下, 各势函数到达级联热峰的时间 ( $T_{\text{热峰}}$ ) 和趋于平衡状态的时间 ( $T_{\text{平衡}}$ ) 均相差不大, 均在约 1 ps 产生最多的缺陷, 达到热峰状态, 随着级联的演化, 间隙与空位缺陷快速湮灭复合, 且在 10 ps 内趋于平衡, 缺陷状态基本稳定, 各势函数间最后稳定状态下的 FPs 数目差别不大。

此外, 注意到级联热峰阶段缺陷分布的空间形貌主要有两种: 一种是集中型, 其热峰状态构型如图 3a 所示, 另外一种是为分散的连续型次级联结构, 如图 3c 所示。相对而言, 热峰



红色和蓝色小球分别代表钨间隙原子和空位  
a, c——热峰状态; b, d——最终稳定状态

图 3 级联碰撞两种典型的缺陷分布  
Fig. 3 Two typical defects distributions with collision cascade

阶段为集中型时,随着级联的后续演化,间隙和空位的湮灭复合后,稳定状态级联中心可能会形成略大的空位核区域,由较大的间隙团簇和单间隙原子包围,如图 3b 所示,且最后稳定状态下的 FPs 数目会略多于分散型形貌,缺陷团簇的尺寸也会更大,总体上可能会使其拥有更高的团簇分数。热峰阶段为较分散的连续型次级级联结构时,最后稳定状态的缺陷多以单间隙或单空位以及小尺寸的团簇形式存在,很少能观察到较大的缺陷团簇,如图 3d 所示。这与 Fu 等<sup>[17]</sup>在钨及 WRe 合金高能中子辐照中观察到的结果一致,且此类现象在高能 PKA 级联时会更显著。

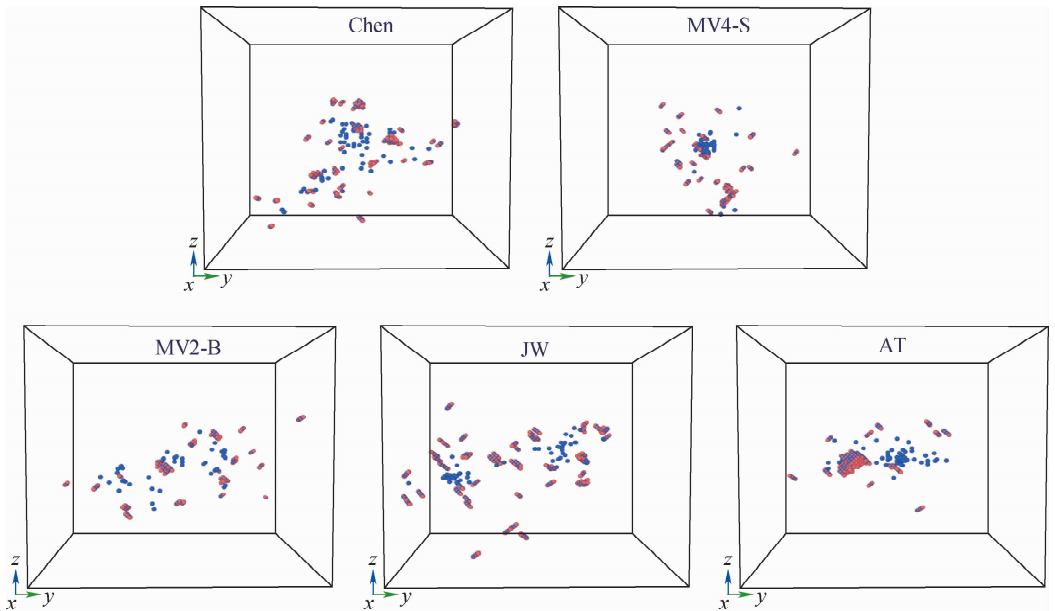
图 4 示出各势函数在 PKA 能量为 50 keV 下的级联过后稳定状态的缺陷构型。由图 4 可见,间隙缺陷多以单间隙 $\langle 111 \rangle$ 哑铃(dumbbell)形式存在,缺陷团簇数目不多,总体上间隙型缺陷团簇比空位型多。且 PKA 能量为 50 keV 下观察到有位错环和位错线的出现,位错环大多是由间隙型团簇形成。而在 PKA 能量为 10 keV 情况下,5 种势函数在稳定状态下的间隙缺陷构型大多数为单间隙 $\langle 111 \rangle$ 哑铃,团簇数目较少,可忽略。本工作中,定义包含 2 个及 2 个以上的净缺陷数(间隙原子/空位)为缺陷团

簇。在已有文献<sup>[17,33-35]</sup>中,间隙为第 3 近邻、空位为第 2 近邻的缺陷团簇截断距离判据已被广泛使用。本文以势函数 Chen 为例,计算了其稳定状态下间隙与空位缺陷的径向分布函数  $g(r)$ ,如图 5 所示。由图 5 可见,级联过后对于间隙原子,主峰在第 3 近邻(NN3)处,而对于空位,主峰在第 2 近邻(NN2)处。基于以上结果,本文中缺陷团簇截断距离判据选取间隙为第 3 近邻、空位为第 2 近邻。

总体而言,尽管各势函数的离位阈能略有差别<sup>[27]</sup>,但最后稳定状态下的 FPs 数目的差别很小,且各势函数 FPs 数目随 PKA 能量的增加均显著增加。

### 3 缺陷团簇分布

表 4 列出不同势函数在 PKA 能量为 50 keV 下级联模拟缺陷团簇的分布。其中,  $N_{\text{SIA}}$  和  $N_{\text{vac}}$  分别为间隙团簇和空位团簇的平均数量;  $S_{\text{SIA}}^{\text{max}}$  和  $S_{\text{vac}}^{\text{max}}$  分别为最大间隙团簇和空位团簇的原子个数。由表 4 可见,势函数 Chen、AT、JW、MV2-B 和 MV4-S 最大的间隙团簇所包含的原子个数分别为 51、39、30、54 和 40;而其最大的空位团簇分别为 14、47、69、18 和 29。最大的间隙和空位团簇是所有模拟结果中取的最



红色和蓝色小球分别代表钨间隙原子和空位,间隙以哑铃形式显示

图 4 势函数 PKA 能量为 50 keV 下稳定状态的缺陷构型

Fig. 4 Defect configuration in stable state obtained by different potentials at PKA energy of 50 keV

大的一个。团簇数目为 15 次模拟取平均值,各势函数缺陷团簇总体上为间隙团簇数目略多于空位团簇数目。

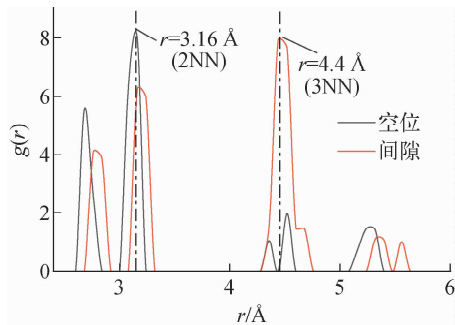


图 5 稳定状态下间隙和空位的径向分布函数

Fig. 5 Radial distribution function of interstitial and vacancy in stable state

表 4 不同势函数下缺陷团簇分布情况

Table 4 Distribution of defect cluster obtained by different potentials

势函数	$N_{\text{SIA}}$	$N_{\text{vac}}$	$S_{\text{SIA}}^{\text{max}}$	$S_{\text{vac}}^{\text{max}}$
Chen	7	5	51	14
AT	5	4	39	47
JW	4	4	30	69
MV2-B	6	6	54	18
MV4-S	5	5	40	29

图 6 示出各势函数 PKA 能量为 50 keV 下的团簇分数。由图 6 可见:所有势函数的间隙团簇分数均大于空位团簇分数,这表明间隙更容易形成团簇;团簇分数较大的势函数 AT 和 MV2-B,在 15 次级联模拟中热峰阶段缺陷主要呈现集中型形貌(所占比例分别为 60%和 80%),与之相比,较为分散的次级联型形貌出现概率略小;其他势函数(Chen、JW、MV4-S)热峰阶段呈现集中型形貌的概率为 30%~40%,致使这些势函数拥有略小的团簇分数,且在势函数 MV4-S 中,间隙和空位的团簇分数相差不大。此现象可能与各势函数的间隙迁移能有关<sup>[9-10]</sup>,势函数 AT、JW、MV2-B、MV4-S 和 Chen 所计算的  $\langle 111 \rangle$  哑铃迁移能分别为 0.03、0.01、0.04、0.03、0.13 eV。 $\langle 111 \rangle$  单间隙拥有较小的迁移能会使得间隙缺陷具有更强的运动性,级联后它们能快速逃离级联中心区域,

形成更广的缺陷分布范围,降低了与空位复合的概率和形成团簇(尤其是较大尺寸团簇)的可能性,最终使得缺陷团簇分数变小。势函数 JW 的间隙迁移能比其他势函数略小,其拥有最小的间隙团簇分数;而尽管势函数 Chen 所计算的  $\langle 111 \rangle$  哑铃迁移能略大于其他势函数,但它在本文所模拟的结果中却未拥有最高的团簇分数,这与在目前总模拟次数中势函数 Chen 在热峰阶段呈现集中型形貌的概率约为 40% 有关(低于势函数 AT 和 MV2-B),继续增加模拟次数可能会有所变化。

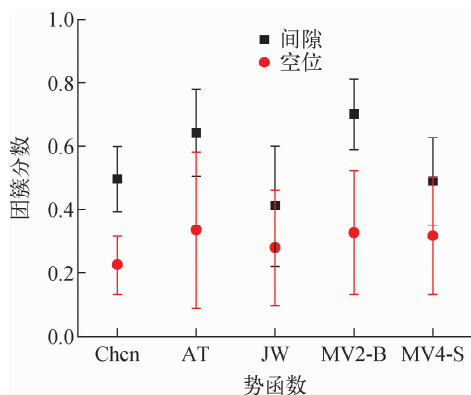


图 6 势函数 PKA 能量为 50 keV 下的缺陷团簇分数

Fig. 6 Defect cluster fraction obtained by different potentials at PKA energy of 50 keV

图 7 示出各势函数 PKA 能量为 50 keV 下的团簇信息分布。图 7 中 5 种势函数的间隙和空位团簇均以小尺寸(包含 2~20 个间隙/空位)团簇为主。由图 7a 可见,势函数 AT 和 MV2-B 出现稍大尺寸间隙团簇的概率比势函数 Chen、JW 和 MV4-S 的要大;图 7b 表明,所有势函数均以小尺寸的空位团簇为主,略大一些的空位团簇主要在势函数 AT 和 JW 及 MV4-S 中观察到。

从缺陷团簇分布方面来看,各势函数的缺陷团簇均以小尺寸(包含 2~20 个间隙/空位)的团簇为主;各势函数的间隙迁移能对其级联过程中缺陷的空间分布范围有影响,而缺陷的空间分布与团簇分数有关,热峰时缺陷为集中型形貌时,最终稳定状态下产生缺陷团簇的数目会更多且尺寸会更大,这种情况下获得一个较大团簇分数的可能性更高。

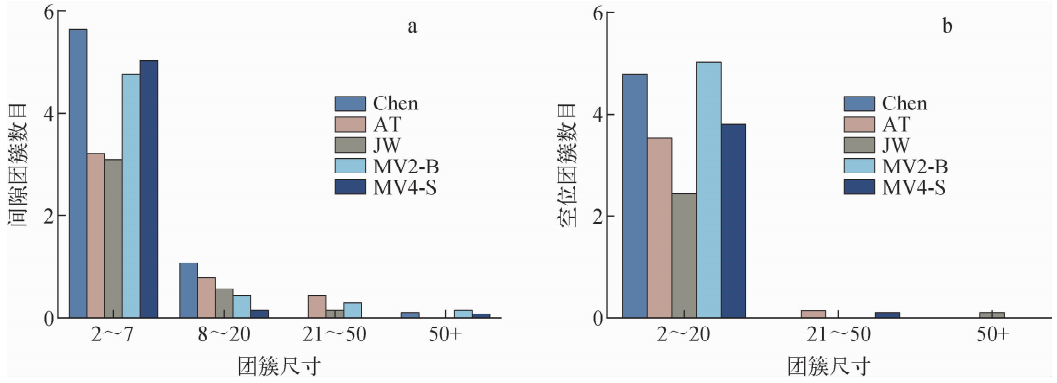


图7 势函数 PKA 能量为 50 keV 下的缺陷团簇分布

Fig. 7 Defect cluster distribution obtained by different potentials at PKA energy of 50 keV

#### 4 位错信息分布

图8 示出各势函数 PKA 能量为 50 keV 下的位错信息分布。在模拟过程中,5 种势函数均观察到有位错线及位错环的产生。根据文献[26]所计算的各势函数位错环的形成能来看,势函数 Chen 与第一性原理(DFT)中  $1/2\langle 111 \rangle$  位错环的形成能低于  $\langle 100 \rangle$  位错环形成能的趋势一致,且结果最相符。势函数 AT 和 JW 也与 DFT 结果有相似的趋势,但这两个势函数  $1/2\langle 111 \rangle$  和  $\langle 100 \rangle$  位错环之间的形成能差值相对较小,而势函数 MV2-B 和 MV4-S 所计算的位错环形成能的结果与 DFT 结果不一致。势函数 Chen、AT、JW 和 MV4-S 4 种势函数级联后所产生的位错环以  $1/2\langle 111 \rangle$  间隙型位错环为主,与实验上观察到的结果一致<sup>[36]</sup>。而势函数 MV2-B 以  $\langle 100 \rangle$  位错环出现较多,  $1/2\langle 111 \rangle$  位错环略少,这与势函数 MV2-B 所预测的位错环形成能为  $\langle 100 \rangle$  位错环低于

$1/2\langle 111 \rangle$  位错环有关。此外,势函数 AT 和 JW 分出现了 1 次  $\langle 100 \rangle$  间隙型位错环和空位环,而势函数 Chen 和 MV4-S 目前未观察到  $\langle 100 \rangle$  位错环,这可能与模拟次数的限制有关,也可能与位错环形成能有关。势函数 Chen 所预测的  $\langle 100 \rangle$  位错环的形成能高于  $\langle 111 \rangle$  位错环,所以势函数 Chen 的模拟结果观察到的位错环以  $\langle 111 \rangle$  类型为主。在本文 PKA 能量为 50 keV 下模拟结果所观察到的位错环以小尺寸的为主,而 MV4-S 势函数在小尺寸下(原子数  $< 20$ )亦是  $1/2\langle 111 \rangle$  位错环的形成能低于  $\langle 100 \rangle$  位错环,随位错环尺寸的增大,则为  $1/2\langle 111 \rangle$  位错环的形成能高于  $\langle 100 \rangle$  位错环,所以势函数 MV4-S 在小尺寸位错环下可能会以  $\langle 111 \rangle$  类型为主,而大尺寸位错环更可能为  $\langle 100 \rangle$  类型。

图9 示出各势函数 PKA 能量为 50 keV 下位错环的尺寸和数量分布。由图 9a 可见,在势函数 Chen、AT 和 JW 中占主导地位的为  $1/2\langle 111 \rangle$  小尺寸位错环,略大尺寸的  $1/2\langle 111 \rangle$  位错环主要在势函数 AT 中出现。由图 9b 可见:  $\langle 100 \rangle$  位错环主要在势函数 MV2-B 中出现,且以间隙型位错环为主;势函数 AT 中观察到 1 次小尺寸的间隙型  $\langle 100 \rangle$  环,势函数 JW 中观察到 1 次大尺寸的空位  $\langle 100 \rangle$  环。

从位错信息分布来看,势函数 Chen、AT、JW 和 MV4-S 4 种势函数级联后所产生的位错以伯格矢量  $1/2\langle 111 \rangle$  间隙型位错环为主,与实验结果一致;而势函数 MV2-B 以  $\langle 100 \rangle$  位错环出现较多,  $1/2\langle 111 \rangle$  位错环略少,与实验结果略有出入。这与各势函数预测的不同类型的

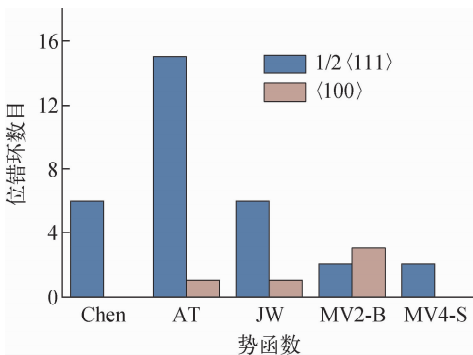
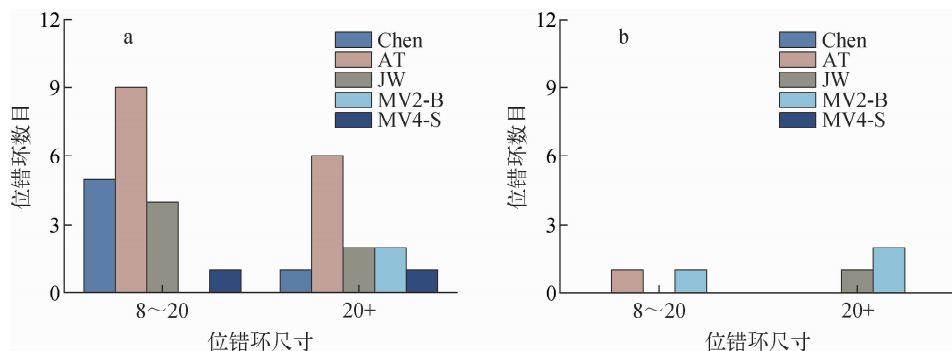


图8 势函数 PKA 能量为 50 keV 下的位错分布

Fig. 8 Dislocation distribution obtained

by different potentials at PKA energy of 50 keV



结果为 15 次重复模拟统计的总和

a—— $1/2\langle 111 \rangle$ 位错环;b—— $\langle 100 \rangle$ 位错环

图 9 势函数 PKA 能量为 50 keV 下位错环的尺寸和数量分布  
Fig. 9 Size and number distributions of dislocation loop obtained by different potentials at PKA energy of 50 keV

位错环形成能大小有关,与在第一性原理计算中  $1/2\langle 111 \rangle$ 位错环的形成能低于  $\langle 100 \rangle$ 位错环的结果相比,在这 5 个势函数中,势函数 Chen 的计算结果与第一性原理计算结果最相符。

## 5 小结

本文对 5 个典型的钨势函数进行了 PKA 能量在 10 keV 和 50 keV 下的中子辐照级联碰撞模拟,系统分析和讨论了级联碰撞过程中缺陷的产生与分布、缺陷团簇和位错环的数目与结构等信息,获得的结果对于钨基材料初级辐照损伤的理解以及退火过程缺陷长时间的演化模拟提供了基础,为用于辐照模拟钨势函数的选择和优化提供了参考。得到的主要结论如下:

1) 对于级联碰撞到达热峰状态的时间及平衡稳定状态下 FPs 数目,不同势函数的模拟结果没有明显差别。

2) 在所模拟的 PKA 能量下,不同势函数产生的缺陷团簇均以小尺寸(净缺陷数 $<20$ )为主,对于势函数 AT 和 MV2-B,缺陷团簇分数比其他势函数较高,且较易出现大尺寸缺陷团簇,这与其热峰阶段易呈现集中型缺陷形貌有关。

3) 从位错环的分布来看,势函数 Chen、AT、JW 和 MV4-S 级联碰撞模拟后所产生的位错环以  $1/2\langle 111 \rangle$ 间隙型位错环为主,与实验结果一致,MV2-B 势函数出现的  $\langle 100 \rangle$ 间隙位错环比  $1/2\langle 111 \rangle$ 间隙位错环略多,与实验结果

不符。

## 参考文献:

- [1] BOLT H, BARABASH V, KRAUSS W, et al. Materials for the plasma-facing components of fusion reactors[J]. Journal of Nuclear Materials, 2004, 329: 66-73.
- [2] NEU R, BOBKOV V, DUX R, et al. Final steps to an all tungsten divertor Tokamak[J]. Journal of Nuclear Materials, 2007, 363: 52-59.
- [3] WITTLICH K, HIRAI T, COMPAN J, et al. Damage structure in divertor armor materials exposed to multiple ITER relevant ELM loads[J]. Fusion Engineering and Design, 2009, 84: 1 982-1 986.
- [4] FEDERICI G, SKINNER C H, BROOKS J N, et al. Plasma-material interactions in current Tokamaks and their implications for next step fusion reactors[J]. Nuclear Fusion, 2001, 41: 1967.
- [5] WAS G S. Fundamentals of radiation materials science: Metals and alloys[M]. New York: Springer, 2007.
- [6] XU H, STOLLER R E, OSETSKY Y N, et al. Solving the puzzle of  $\langle 100 \rangle$  interstitial loop formation in bcc iron[J]. Physical Review Letters, 2013, 110(26): 265503.
- [7] ARAKAWA K, AMINO T, MORI H. Direct observation of the coalescence process between nanoscale dislocation loops with different Burgers vectors[J]. Acta Materialia, 2011, 59(1): 141-145.



- [8] NORDLUND K. Historical review of computer simulation of radiation effects in materials[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2019, 520: 273-295.
- [9] FIKAR J, SCHAEUBLIN R. Molecular dynamics simulation of radiation damage in bcc tungsten[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, 2007, 255(1): 27-31.
- [10] FIKAR J, SCHAEUBLIN R. Molecular dynamics simulation of radiation damage in bcc tungsten[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2009, 386-388: 97-101.
- [11] SETYAWAN W, NANDIPATI G, ROCHE K J, et al. Displacement cascades and defects annealing in tungsten, Part I: Defect database from molecular dynamics simulations[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2015, 462: 329-337.
- [12] PLIMPTON S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics; Academic press professional[J]. *Journal of Computational Physics*, 1995, 117(1): 1-19.
- [13] YANG X D, DENG H Q, HU N W, et al. Molecular dynamics simulation of the displacement cascades in tungsten with interstitial helium atoms[J]. *Fusion Science and Technology*, 2014, 66(1): 112-117.
- [14] WARRIER M, BHARDWAJ U, HEMANI H, et al. Statistical study of defects caused by primary knock-on atoms in fcc Cu and bcc W using molecular dynamics[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2015, 467(1): 457-464.
- [15] FELLMAN A, SAND A E, BYGGMÄSTAR J, et al. Radiation damage in tungsten from cascade overlap with voids and vacancy clusters[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2019, 31: 405402.
- [16] BYGGMÄSTAR J, GRANBERG F, SAND A E, et al. Collision cascades overlapping with self-interstitial defect clusters in Fe and W[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2019, 31: 245402.
- [17] FU J, CHEN Y C, FANG J Z, et al. Molecular dynamics simulations of high-energy radiation damage in W and W-Re alloys[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2019, 524: 9-20.
- [18] ZHANG C G, ZHOU W H, LI Y G, et al. Primary radiation damage near grain boundary in bcc tungsten by molecular dynamics simulations[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2015, 458: 138-145.
- [19] DAW M S, BASKES M I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals[J]. *Physical Review B*, 1984, 29: 6443.
- [20] FINNIS M W, SINCLAIR J E. A simple empirical N-body potential for transition metals[J]. *Philosophical Magazine A*, 1984, 50: 45-55.
- [21] ACKLAND G J, THETFORD R. An improved N-body semi-empirical model for body-centred cubic transition metals[J]. *Philosophical Magazine A*, 1987, 56: 15-30.
- [22] JUSLIN N, WIRTH B D. Interatomic potentials for simulation of He bubble formation in W[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2013, 432: 61-66.
- [23] MARINICA M C, VENTELON L, GILBERT M R, et al. Interatomic potentials for modelling radiation defects and dislocations in tungsten[J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2013, 25: 395502.
- [24] BONNY G, BAKAEV A, TEREITYEV D, et al. Interatomic potential to study plastic deformation in tungsten-rhenium alloys[J]. *Journal of Applied Physics*, 2017, 121: 165107.
- [25] SETYAWAN W, GAO N, KURTZ R J. A tungsten-rhenium interatomic potential for point defect studies[J]. *Journal of Applied Physics*, 2018, 123: 205102.
- [26] CHEN Y C, LI Y H, GAO N, et al. New interatomic potentials of W, Re and W-Re alloy for radiation defects[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2018, 502: 141-153.
- [27] LIU L X, LI X C, CHEN Y C, et al. Evaluation of tungsten interatomic potentials for radiation damage simulations[J]. *Tungsten*, doi.org/10.1007/s42864-020-00037-7.
- [28] STOLLER R E. The role of cascade energy and temperature in primary defect formation in iron[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2000, 276(1-3): 22-32.
- [29] GAO F, CHEN D, HU W, et al. Energy dissipation and defect generation in nanocrystalline silicon carbide[J]. *Physical Review B*, 2010, 81: 184101.
- [30] NORDLUND K, AVERBACK R S. Point defect

- movement and annealing in collision cascades[J]. *Physical Review B: Condensed Matter*, 1997, 56(5): 2 421-2 431.
- [31] STUKOWSKI A, BULATOV V V, ARSENLIS A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces[J]. *Modelling & Simulation in Materials Science & Engineering*, 2012, 20(8): 085007.
- [32] STUKOWSKI A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO-the open visualization tool[J]. *Modelling & Simulation in Materials Science & Engineering*, 2010, 18(6): 2 154-2 162.
- [33] FU B, XU B, LAI W, et al. Computer simulation of displacement cascades in tungsten with modified F-S type potential[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2013, 441(1-3): 24-28.
- [34] SAND A E, DUDAREV S L, NORDLUND K. High-energy collision cascades in tungsten: Dislocation loops structure and clustering scaling laws[J]. *Europhysics Letters*, 2013, 103(4): 46003.
- [35] JUSLIN N, JANSSON V, NORDLUND K. Simulation of cascades in tungsten-helium[J]. *Philosophical Magazine*, 2010, 90(26): 3 581-3 589.
- [36] YI X O, JENKINS M L, BRICENO M, et al. In situ study of self-ion irradiation damage in W and W-5Re at 500 °C[J]. *Philosophical Magazine*, 2013, 93(14): 1 715-1 738.