

# 氦泡对铝的弹性性质的影响<sup>\*</sup>

王海燕<sup>1,2)</sup> 祝文军<sup>1,2)†</sup> 宋振飞<sup>2)</sup> 刘绍军<sup>3)</sup> 陈向荣<sup>1)‡</sup> 贺红亮<sup>1,2)</sup>

1) 四川大学物理科学与技术学院, 成都 610064)

2) 中国工程物理研究院流体物理研究所冲击波物理与爆轰物理重点实验室, 绵阳 621900)

3) 北京师范大学物理系, 北京 100875)

(2007 年 10 月 9 日收到, 2007 年 11 月 14 日收到修改稿)

主要利用分子动力学方法模拟计算了含氦泡的铝的弹性性质. 首先, 应用第一性原理的方法计算了 Al-He 的相互作用势. 其次, 从两个不同的方面研究了氦泡对铝弹性常数的影响, 一是不同的氦泡尺寸(直径分别是 1.6, 2.0, 2.5, 3.0 和 3.5 nm), 二是不同的氦泡压力(即固定氦泡大小, 氦泡内氦原子的个数与空位的比分别大约是 5%, 15%, 45% 和 85%). 结果表明弹性常数随着氦泡半径的增大而减小. 对于固定大小的氦泡, 随着氦泡内的压力变化, 弹性常数基本保持恒定. 最后通过建立弹性复合体模型, 得到的解析解定性上解释了氦泡的大小以及内压对铝的弹性常数的影响, 与分子动力学模拟结果吻合.

关键词: 辐照损伤, 氦泡, 分子动力学, 弹性常数

PACC: 6180, 6780, 7115Q, 6220D

## 1. 引 言

快中子辐照时出现的( $n, p$ )和( $n, \alpha$ )核嬗变反应, 会在金属材料中产生大量的氢、氦等元素. 由于氦不溶于基体材料, 积累的氦将聚集、沉淀, 从而形成氦泡. 在较高温度下, 氦泡易于在晶界、相界及位错处聚集长大. 它的存在改变了材料内部的微观结构, 造成局域晶格畸变、应力分布变化, 甚至肿胀等现象, 对材料的宏观力学性质会产生增脆、硬化等改变, 以及蠕变等损伤<sup>[1]</sup>, 这些严重影响了材料在工程上的应用.

从 20 世纪 70 年以来, 人们就利用高能离子注入技术结合透射电镜及其他相关分析手段来研究氦泡在材料中的成核、长大<sup>[2-11]</sup>, 很多研究也关注形成氦泡后材料物理性质的改变<sup>[12-15]</sup>. 研究结果表明, 当氦泡已经在材料中稳定存在, 且具有一定的浓度时, 会影响到材料的力学性质, 那么它如何影响材料的性质仍然是许多实验和理论学家关注的问题. 在氦泡的形成过程中, 同时伴随着多种缺陷的产生, 例如, 空洞、位错等, 以及基体材料中本身含有的杂质,

这些因素都有可能引起材料性质的改变. 在实验研究中, 样品材料是这些缺陷的集合体, 很难判断出哪种缺陷对材料性质的影响起决定性作用.

因此我们有必要求助于理论研究, 理论研究可以方便地把这些缺陷影响单独地区分出来, 通过建立相应的物理模型, 来研究每一种缺陷的作用. 在氦泡的形成方面, 理论模型、数值模拟有大量研究, Trinkaus 等人<sup>[16]</sup>建立了高温下氦泡在晶界内部和晶界处成核和生长模型. 分子动力学方法可以从原子层次上研究体系的性质, 自然成为研究这类问题的有力工具. 利用此方法成功地研究了氦泡在金属或半导体中稳定性<sup>[17-19]</sup>, 结合蒙特卡罗方法, Bringa 等人<sup>[19]</sup>还研究了氦泡通过扩散机理的形成过程. 国内对氦泡形成机理也有研究, 利用蒙特卡罗方法、分子静力学对氦泡的形成及稳定结构进行了研究<sup>[20, 21]</sup>. 尽管实验和计算模拟都表明氦泡可以在材料中稳定存在, 并且由于它的存在, 辐照材料的力学性质发生了很大的改变, 但是到目前为止, 氦泡是怎样影响材料弹性的, 还是人们关注的一个重要问题. 固体的弹性常数可以为我们理解材料的力学和动力学性质提供有用的信息, 更重要的是可以反映出材料的稳定

<sup>\*</sup> 冲击波物理与爆轰物理重点国防科技实验室基金(批准号: 9140C67010106ZS75), 国家自然科学基金 NSAF 联合基金重点项目(批准号: 10476027 和 10576004)和国家自然科学基金重点项目(批准号: 60436010)资助的课题.

<sup>†</sup> 通信联系人, E-mail: wjzhu@caep.ac.cn

<sup>‡</sup> 通信联系人, E-mail: xrchen@126.com

性和刚度,这对于我们如何设计第一壁材料、聚变反应环境以及预测材料使用寿命都有很重要的意义.由于辐照过程中环境及辐照强度不同,形成的氦泡的大小和氦泡内的原子数也不同,所以氦泡内的压力也不同.在一定条件下氦泡的内压可以达到基体金属剪切模量的 10%,甚至可以冲出位错环<sup>[22]</sup>.因此本文主要从两个方面来研究氦泡对铝的弹性性质的影响,即氦泡的大小和内压.

本文的主要工作分为两部分,一是建立了 Al-He 之间的相互作用势,二是利用分子动力学方法模拟计算了氦泡对铝的弹性性质的影响.最后对结果进行分析,建立简单的弹性复合模型,从模型得到的结果,很好地解释了我们的计算结果.

## 2. 模拟方法

### 2.1. 相互作用势

在含氦泡的铝体系,存在着三种相互作用势,即 Al-Al, He-He 和 Al-He. 对于 Al-Al 之间的相互作用势,我们采用 Mishin 等人<sup>[23]</sup>的原子嵌入势(EAM)函数描述铝原子之间的相互作用,因为它不仅能准确地计算单晶铝的弹性性质、结合能、缺陷结合能等参数,而且还拟合了铝在高压下的状态方程,能够比较准确的描述铜原子之间的相互作用. He-He 的相互作用采用对势<sup>[24]</sup>来描述,为了使计算的结果和实验结果更好地吻合,我们适当地修改了参数的值( $a = 13.1 \text{ nm}$ ,  $\epsilon = 12.4 \text{ K}$ ,  $r^* = 3.25 \times 10^{-8} \text{ cm}$ ). 然而对于 Al-He 之间的相互作用势,无法通过拟合实验结果来得到,目前只能通过第一性原理计算. 下面详细介绍一下我们建立的 Al-He 相互作用势.

首先建立一个虚拟的面心立方晶体结构, He 位于立方晶体的顶点位置, Al 位于面心,即构成了  $L1_2$  结构. 首先根据第一性原理计算得到这样的 Al-He 体系的总能,用  $E_{(\text{Al-He})}$  表示. 其次删去顶点处的 He 原子,计算得到 Al 体系的总能,用  $E_{(\text{Al})}$  表示,同样地可以得到 He 体系的总能,用  $E_{(\text{He})}$  表示. 那么 Al-He 相互作用势可以通过下式求得:

$$\sum \phi_{(\text{Al-He})} = E_{(\text{Al-He})} - E_{(\text{Al})} - E_{(\text{He})}. \quad (1)$$

Al-He 的相互作用势计算采用基于密度泛函理论(DFT)的平面波赝势方法的 CASTEP 程序<sup>[25,26]</sup>, 交换关联作用选择广义梯度近似(GGA)<sup>[27]</sup>. 离子与电子的相互作用采用超软赝势<sup>[28]</sup>. 布里渊区积分采用

Monkhorst-pack 方法,  $K$  点网格为  $8 \times 8 \times 8$ . 平面波基函数的截断能量取  $380.0 \text{ eV}$ . 这种选择使得由布里渊区积分及平面波基函数的截断这两项数值计算误差满足所设定的能量误差要求( $0.01 \text{ eV/atom}$ ).

### 2.2. 弹性常数的计算方法

初始的模拟体系铝的总原子数是 62500, 对应  $25 \times 25 \times 25$  个面心立方晶胞, 晶格常数是  $0.40 \text{ nm}$ . 体系的  $[100]$  ( $x$ )  $[010]$  ( $y$ )  $[001]$  ( $z$ ) 方向均采用周期性边界条件. 考虑辐照效应产生的氦的含量比较低, 形成的氦泡的浓度也比较小的条件, 在这种情况下氦泡与氦泡之间的相互作用比较弱. 因此本文只研究了 62500 个 Al 原子组成的系统中存在单个氦泡的情况, 即在铝的中心挖去一定数量的 Al 原子形成一个球形空洞, 然后在空洞中填入一定数量的 He 原子. 研究氦泡对铝的弹性性质的影响, 我们从两个方面入手, 一是氦泡的大小, 二是氦泡内的压力. 对于氦泡的大小, 我们预置的氦泡的半径分别是  $1.6, 2.0, 2.5, 3.0$  和  $3.5 \text{ nm}$ . 对于氦泡的压力, 我们在固定氦泡半径的条件下, 在空洞中分别加入不同数量的 He 原子, 使得固定大小的氦泡内, 氦原子的个数与挖去铝原子所形成的空位的个数的比分别大约是  $5\%, 15\%, 45\%$  和  $85\%$ . 根据维里定理<sup>[29]</sup>计算得到, 氦泡的直径为  $1.6, 2.0, 2.5, 3.0$  和  $3.5 \text{ nm}$  时对应的最大压力(氦原子与空位的比为  $85\%$ ) 分别是  $8.2, 6.2, 5.8, 3.4$  和  $2.8 \text{ GPa}$ .

计算弹性常数的方法主要有两种. 第一种是通过给晶体一个小的应变, 计算出此时的应变能, 从而得到能量与应变之间的函数关系, 能量对应变的二阶导数即弹性常数<sup>[30]</sup>. 这种方法只适用于完全弹性体系. 对于这样的含氦泡的铝的体系, 通过模拟我们发现它不是一个完全弹性体系, 氦泡在形变过程中有塑性变形产生, 塑性变形产生的能量也在其中, 因此通过此方法计算出来的弹性常数要比实际值偏大. 所以本文采用第二种方法, 即弹性常数反映应变与应力的关系, 也就是弹性常数的定义. 首先对含氦泡的铝体系进行迟豫, 然后给体系一应变张量  $\epsilon = [\epsilon_{ij}]$ ,  $\epsilon_{ij}(i, j = 1, 2, 3)$  是一个小的晶格扭曲, 这样使得原来的布喇非格点位置  $R$  变到了一个新的位置  $R'$ , 即  $R'_i = \sum_j (\delta_{ij} + \epsilon_{ij}) R_j$ . 对于一个均匀的应变参数  $\epsilon_{ij}$  是常数, 并且  $\epsilon_{ij} = \epsilon_{ji}$ , 角标  $i, j$  是笛卡儿坐标分量. 一般地, 应力的九个分量用  $\sigma_{ij}$  表示,  $i$  表示与应力分量平行的坐标轴,  $j$  表示应力所在的

立方晶. 应力的角标  $i = j$  表示应力的法向分量,  $i \neq j$  表示应力的剪切分量. 在弹性范围内, 应力与应变有如下比例关系<sup>[31]</sup>:

$$\sigma_{ij} \propto \varepsilon_{kl}, \quad (2)$$

比例常数就是材料的弹性常数. 另外, 应力和应变均为二阶张量, 因此作为这两个量的比例常数, 弹性常数是一个四阶张量, 用  $c_{ijkl}$  表示. 弹性常数与应力, 应变的关系为

$$\sigma_{ij} = \sum c_{ijkl} \varepsilon_{kl}, \quad (3)$$

面心立方晶体有三个独立的弹性常数, 因此应用三个独立的应力应变关系即可求得. 具体的关系如表 1 中所示.

表 1 用于计算含氦泡的铝的弹性常数的三个独立的应力应变关系. 在第二列中没有列出来的  $\varepsilon_{ij}$  均为 0

应变类型	应变分量的值	应力应变关系
1	$\varepsilon_{11} = \gamma$	$c_{11} = \sigma_{11}/\gamma$
2	$\varepsilon_{22} = \gamma$	$c_{22} = \sigma_{22}/\gamma$
3	$\varepsilon_{13} = \varepsilon_{31} = \gamma$	$2c_{44} = \sigma_{13}/\gamma$

## 3. 结果和讨论

### 3.1. Al-He 相互作用势

我们知道 He 原子属于闭壳层结构, 原子之间的相互作用主要是范德瓦耳斯作用, 一般用两体势来描述这种相互作用. 对于铝氦组成的虚拟结构体系, 由于氦的闭壳层结构, 即使在较强的外界条件下, 两种原子的电子云也很难交叠成键, 因此 Al-He 相互作用仍然主要是范德瓦耳斯作用. 所以本文采用下面形式的两体势来描述 Al-He 之间的相互作用<sup>[32]</sup>:

$$\phi(r) = -\alpha [1 + \beta(r/r_a - 1)] \exp[-\beta(r/r_a - 1)], \quad (4)$$

图 1 是 Al-He 相互作用势随距离变化的函数关系, 采用上式进行数值拟合, 得到参数  $\alpha$ ,  $\beta$  和  $r_a$  的值分别是 0.02434, 7.04582 和 0.567102.

### 3.2. 含氦泡的铝的弹性常数

材料弹性性质的变化可以反映材料力学性质的变化, 本文主要从两个方面模拟计算了辐照损伤产生的氦泡对铝的弹性性质的影响. 表 2 中分别列出了弹性常数  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  和  $c_{44}$  随着氦泡的大小以及氦泡内氦原子个数(氦原子个数不同即氦泡内的压力不

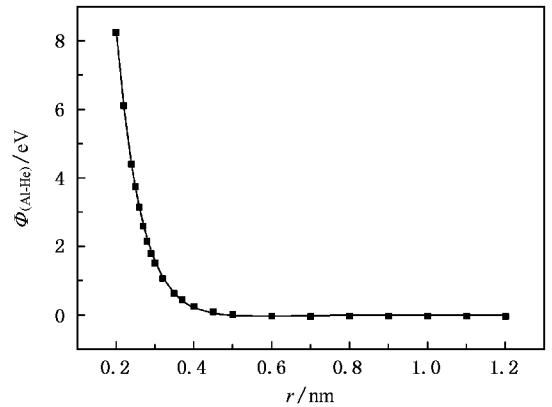


图 1 Al-He 相互作用势随原子之间距离  $r$  变化的函数关系

同)的不同所计算的值. 从表 2 中的数据不难看出三个弹性常数变化的共同规律, 即随着氦泡半径的增大而减小, 对于固定大小的氦泡, 随着氦泡内的压力变化弹性常数基本保持恒定. 然而  $c_{12}$ ,  $c_{11}$  和  $c_{44}$  变化的幅度是不同的, 氦泡的半径从 1.6 增加到 3.5 nm, 三个弹性常数大约分别减小 7%, 5% 和 3%.

表 2 (a)(b)和(c)分别列出了含氦泡(氦泡的直径分别为 1.6, 2.0, 2.5, 3.0 和 3.5 nm; 氦泡内的原子个数与空位的比分别是 5%, 15%, 45% 和 85% 的铝的弹性常数  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  和  $c_{44}$ (单位: GPa)

氦泡的直径/nm	氦原子的个数与空位比			
	5%	15%	45%	85%
(a) $c_{11}$				
1.6	114.4	114.5	114.4	114.3
2.0	113.9	114.0	114.0	113.7
2.5	112.4	112.5	112.4	112.4
3.0	110.0	110.1	110.3	110.3
3.5	108.6	108.7	108.8	109.0
(b) $c_{12}$				
1.6	62.3	62.4	62.4	62.4
2.0	61.9	62.0	62.0	62.1
2.5	61.0	61.1	61.4	61.4
3.0	60.0	60.0	60.2	60.5
3.5	58.2	58.3	58.4	58.5
(c) $c_{44}$				
1.6	32.2	32.2	32.2	32.2
2.0	32.1	32.1	32.1	32.1
2.5	31.7	31.8	31.8	31.8
3.0	31.5	31.5	31.5	31.5
3.5	31.0	31.0	31.0	31.2

弹性常数随着氦泡半径的增大而减小,而在相同氦泡半径的条件下随着氦泡内压的变化基本保持恒定,主要有两方面的原因.对于含氦泡的金属体系,即使氦泡的内压接近 10 GPa,氦泡的体模量也远小于基体金属的模量,因此氦泡对基体金属起软化作用.并且氦泡的半径越大,软化作用越强.另一方面,由于氦泡的内压较高,会引起其周围基体金属压力升高,从而使得周围基体金属的模量增加,但是增加的量相对于基体金属的模量来说并不显著,并且从应力场分布上看,氦泡周围基体金属受氦压影响的区域随  $r^{-3}$  衰减,因此氦压对整个体系的硬化作用是次级的.因此弹性常数随着氦泡半径的增大而减小,而对于内压的变化不敏感.

为了进一步说明弹性常数随氦泡尺寸以及氦泡内压的这种变化规律,我们建立这样一个弹性复合体模型,半径为  $b$  的铝球镶嵌一半径为  $a$  的同心球形氦泡.这样一个复合体,当  $a < r < b$  时弹性解为<sup>[33]</sup>

$$\sigma_r = \frac{(k - b^3 + a^3 P_0)}{b^3 - a^3} - \frac{[(k - 1)P + P_0]b^3 - a^3}{(b^3 a^3)r^3}, \quad (5)$$

$$\sigma_\theta = \sigma_\varphi = \frac{(k - b^3 + a^3 P_0)}{b^3 - a^3} + \frac{[(k - 1)P + P_0]b^3 a^3}{\chi(b^3 - a^3)r^3}, \quad (6)$$

当  $r < a$  时弹性解为

$$\sigma_r = \sigma_\theta = \sigma_\varphi = -P_0 - kp, \quad (7)$$

其中  $\sigma$  是球坐标体系的应力张量,  $P$  是外表面( $r = b$ )所受到的压强,  $P_0$  是氦泡内的压力.常数  $k$  为

$$k = \frac{\chi(1 - \nu)b^3}{\chi(1 - 2\nu)a^3 + (1 + \nu)b^3 + 2\chi E(b^3 - a^3)}, \quad (8)$$

其中  $\chi = \frac{1 - 2\nu_H}{E_H}$ ,  $E$  和  $\nu$  分别是铝的杨氏模量和泊松比,  $E_H$  和  $\nu_H$  是氦(把氦泡看作一弹性球)的杨氏模量和泊松比.这样的复合体系的等效杨氏模量和泊松比  $\bar{E}$  和  $\bar{\nu}$  与氦泡半径的关系为

$$\frac{1 - 2\bar{\nu}}{\bar{E}} = \frac{(1 + \nu)(k - 1)n^3 + \chi(1 - 2\nu)(k - n^3)^2}{2n^3(n^3 - 1)E} + \frac{k^2 \chi}{n^3}, \quad (9)$$

其中  $n = b/a$ .综合(8)和(9)式不难发现等效模量近似地与  $(b/a)^3$  成正比.

为了更清楚地说明模型中氦泡对铝的等效杨氏模量的影响,在图 2 中我们给出了杨氏模量随氦泡

直径  $d$  和氦泡内压的变化关系.在我们的模型中,把氦泡当作一个弹性球来处理,因此  $E_H$  取不同的值反应氦泡内压力的变化.由于我们建立的只是一个简单模型,没有考虑铝基体的各向异性,因此从模型中只能得到的杨氏模量数值,不能与我们前面计算的弹性系数直接进行比较,但从定性上可以清楚地比较氦泡体积和氦压对弹性性质的影响.因为我们只是为了得到定性上的比较结果,所以弹性模型中参数的值也并没有和实际材料进行校核.基体铝的  $E$  值取为 69 GPa,泊松比都取为 0.25.  $E_H$  的值分别取 16, 17, 18, 19 和 20 GPa 来表示氦泡内的不同内压力.在这种条件下,因为基体铝的杨氏模量取为恒值,就忽略了氦压对铝的硬化作用,只考虑氦泡的软化效应.从图中我们很容易发现,系统杨氏模量  $\bar{E}$  随  $E_H$  的变化基本上保持恒定,也就是说氦泡内的压力对系统杨氏模量影响很小.但是,当氦泡的直径从 1.0 增加到 3.5 nm,等效杨氏模量大约减小了 4%,这个结果与前面分子动力学模拟计算的结果定性上是一致的,间接说明氦压对基体铝的硬化效应不是主要影响因素,氦泡的体积效应是影响基体弹性模量的主要因素.

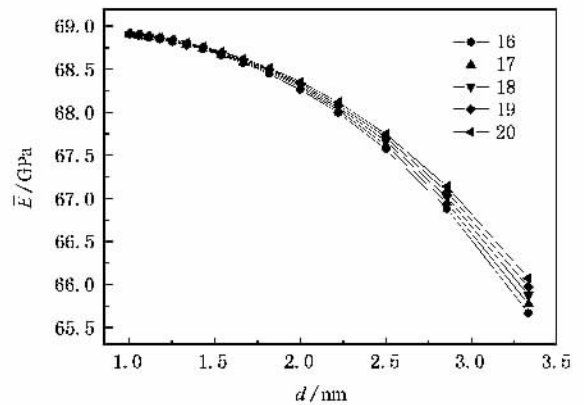


图 2 弹性复合体系模型的等效杨氏模量随氦泡的直径变化的函数关系

## 4. 结 论

本文主要利用分子动力学模拟计算了氦泡对铝的弹性性质的影响.铝原子之间和氦原子之间的相互作用势分别用嵌入势和对势表示.对于 Al-He 相互作用势,我们通过第一性原理计算并用两体势拟合得到.

由于含氦泡的铝不是一个完全弹性体系,因此

我们只能根据应力应变关系计算弹性常数. 模拟体系包括 62500 个 Al 原子, 体系的中心嵌入一氦泡, 泡的直径分别取不同的值 1.6, 2.0, 2.5, 3.0 和 3.5 nm, 固定氦泡的大小, 氦泡内的氦原子个数与空位的比分别是 5%, 15%, 45% 和 85%. 也就是从两个方面来研究了氦泡对铝的弹性性质的影响, 一是氦泡的大小, 二是氦泡的内压. 结果表明, 氦泡的大小对弹性常数有明显的影响, 弹性常数对氦泡内的压力变化不敏感. 通过对分子动力学模拟结果的物

理分析和二维的弹性复合模型计算结果的比较清楚地解释了氦泡的大小和内压对基体铝的弹性性质产生的影响. 这些结果对于评估聚变和裂变反应中辐照材料的静态力学性质有很重要的意义, 并且我们用到的计算弹性常数的方法对于研究其他复合体系弹性性质也有一定的参考价值.

感谢中国工程物理研究院计算机研究所张亚林在并行计算过程中提供的帮助.

- [ 1 ] Wan F R 1993 *Radiation Damage of Metal Material* ( Beijing : Science Press ) p144 ( in Chinese ) 万发荣 1993 金属材料的辐射损伤 [ 科学出版社 ] 第 144 页 ]
- [ 2 ] Raineri V , Coffa S , Szilagy E , Gyulai J , Rimini E 2000 *Phys. Rev. B* **61** 937
- [ 3 ] Cayphas J M , Hou M , Coheur L 1997 *J. Nucl. Mater.* **246** 171
- [ 4 ] Bircher R C , Donnelly S C , Templier C 1994 *Phys. Rev. B* **50** 764
- [ 5 ] Moreno D , Eliezer D 1996 *Scripta Mater.* **34** 1851
- [ 6 ] Vishnyakov V M , Donnelly S E , Carter G 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 238
- [ 7 ] Usmar S G , Wright R N 1992 *Phys. Rev. B* **46** 69
- [ 8 ] Rajainmaki H , Linderoth S , Hansen H E , Nieminen R M , Bentzon M D 1988 *Phys. Rev. B* **38** 1087
- [ 9 ] Iwakiri H , Yasunaga K , Morishita K , Yoshida N 2000 *J. Nucl. Mater.* **283** 1134
- [ 10 ] Ullmaier H 1984 *Nuclear Fusion* **24** 1039
- [ 11 ] Kalin B A , Chernov I I , Kalashnikov A N , Timofeyev V V 1996 *J. Nucl. Phys.* **233** 1142
- [ 12 ] Siegele R , Weatherly G C , Haugen H K , Lockwood D J , Howe L M 1995 *Appl. Phys. Lett.* **66** 1319
- [ 13 ] Vigneron J P , Lousse V , Lucas A A , Obtaka K 2003 *J. Opt. Soc. Am. B* **20** 2297
- [ 14 ] Chung B W , Thompson S R , Woods C H , Hopkins D J , Gourdin W H , Ebbinghaus B B 2006 *J. Nucl. Mater.* **355** 142
- [ 15 ] Majumdar S , Smith P 1998 *Fusion Eng. & Design* **41** 25
- [ 16 ] Trinkaus H 1985 *J. Nucl. Mater.* **133** 105
- [ 17 ] Okuniewski M A , Ashkenazy Y , Heuser B J , Averback R S 2004 *J. Appl. Phys.* **96** 4181
- [ 18 ] Morishita K , Sugano R , Wirth B D , Rubia T 2003 *Nucl. Instr. and Meth. In Phys. Res. B* **202** 76
- [ 19 ] Bringa E M , Wirth B D , Caturla M J , Stolken J , Kalantar D 2003 *Nucl. Instr. and Meth. In Phys. Res. B* **202** 56
- [ 20 ] Yu Y , Pan X X 2005 *The Material Conference of China Academy of Engineering Physics* p60 [ 余 勇、潘晓霞 2005 中物院材料学科 2005 年会论文集 第 60 页 ]
- [ 21 ] Zheng H 2005 *The Material Conference of China Academy of Engineering Physics* p64 [ 郑 晖 2005 中物院材料学科 2005 年会论文集 第 64 页 ]
- [ 22 ] Wolfer W G 1988 *Philos. Mag. A* **58** 285
- [ 23 ] Mishin Y , Farkas D , Mehl M J , Papaconstantopoulos D A 1999 *Mat. Res. Soc.* **538** 535
- [ 24 ] Young D A , McMahan A K , Ross M 1981 *Phys. Rev. B* **24** 5119 ( 1981 )
- [ 25 ] Payne M C , Teter M P , Allen D C , Arias T A , Joannopoulos J D 1992 *Rev. Mod. Phys.* **64** 1045
- [ 26 ] Milman V , Winkler B , White J A , Packard C J , Payne M C , Akhmatkaya E V , Nobes R H 2000 *Int. J. Quantum Chem.* **77** 895
- [ 27 ] Hammer B , Hansen L B , Norskov J K 1999 *Phys. Rev. B* **59** 7413
- [ 28 ] Vanderbilt D 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7892
- [ 29 ] Hoover W G 1991 *Computational Statistical Mechanics* ( Netherlands : Elsevier Science Publishers B. V )
- [ 30 ] Ray J R 1988 *Comp. Phys. Rep.* **8** 109
- [ 31 ] Schreiber E , Anderson O L , Soga N 1973 *Elastic Constants and Their Measurement* ( New York )
- [ 32 ] Cai J , Ye Y Y 1996 *Phys. Rev. B* **54** 8398
- [ 33 ] Sadd M H 2005 *Elasticity : Theory , Applications and Numeric* ( Netherlands : Elsevier Inc. ) p163

# The influence of helium bubble on the elastic properties of aluminum<sup>\*</sup>

Wang Hai-Yan<sup>1)‡</sup> Zhu Wen-Jun<sup>1)†</sup> Song Zhen-Fei<sup>1)</sup> Liu Shao-Jun<sup>3)</sup> Chen Xiang-Rong<sup>1)‡</sup> He Hong-Liang<sup>1)‡</sup>

<sup>1</sup> *Department of Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China*

<sup>2</sup> *Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics Research, Institute of Fluid Physics, Mianyang 621900, China*

<sup>3</sup> *Department of Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875, China*

( Received 9 October 2007 ; revised manuscript received 14 November 2007 )

## Abstract

The elastic properties of helium-bubble embedded aluminum have been investigated by molecular dynamics simulation. First, the interaction potentials between aluminum and helium atoms are parametrized with the help of first-principle method. Secondly, we studied the influence of helium bubble on the elastic properties of aluminum from the following two aspects: the size of helium bubble (the diameters being 1.6, 2.0, 2.5, 3.0 and 3.5 nm, respectively) and the internal pressure of helium bubble (the ratios of the number of helium atoms to the vacancies being about 5%, 15%, 45% and 85%, respectively). The results show that the elastic constants  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  and  $c_{44}$  decrease with increasing diameter of helium bubble, however, for a fixed size they are almost independent of the internal pressure of helium bubble. Using the elastic composite system model, the influence of the size and internal pressure of helium bubble on aluminum is explained qualitatively based on the analytical results and is consistent with our calculated results.

**Keywords** : irradiated damage, helium bubble, molecular dynamics, elastic constants

**PACC** : 6180, 6780, 7115Q, 6220D

<sup>\*</sup> Project supported by the Science and Technology Foundation of State Key Laboratory for Shock Wave and Detonation Physics ( Grant No. 9140C67010106ZS75 ), the National Natural Science Foundation NSAF ( Grant Nos. 10476027 and 10576004 ) and the State Key Program of National Natural Science of China ( Grant No. 60436010 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : wjzhu@caep.ac.cn

<sup>‡</sup> Corresponding author. E-mail : xrchen@126.com