

温度对 bcc 铁中 He 行为影响的模拟研究*

陈丕恒[†] 申 亮 敖冰云 李 嵘 李 炬

(表面物理与化学国家重点实验室, 绵阳 621907)

©2008 年 3 月 24 日收到, 2008 年 9 月 23 日收到修改稿)

温度对 bcc 铁中的 He 行为有重要的影响, 基于 bcc 晶格的晶格动力学蒙特卡罗 (Lattice Kinetic Monte Carlo, LKMC) 方法, 模拟研究了 298—1298 K 范围内温度对 bcc 铁中 He 行为的影响. 结果表明, 温度对 bcc 铁中 He 行为的影响可以分为 4 个阶段: (1) 298—598 K, (2) 598—798 K, (3) 798—998 K, (4) 998—1298 K. 第一阶段随着温度的增加, 晶粒内 He 原子浓度略有降低, 但 He 泡中平均 He 原子个数迅速增加; 第二阶段随着温度的增加, 晶粒内的 He 原子浓度迅速降低, 但 He 泡中平均 He 原子个数几乎不变; 第三阶段随着温度的增加, 晶粒内的 He 原子浓度和 He 泡中平均 He 原子个数均迅速减少; 第四阶段随着温度的增加, 晶粒内 He 原子浓度以及 He 泡中平均 He 原子个数均有所增加, 到 1298 K 时, 晶粒内 He 原子浓度与室温时相近, 几乎没有 He 原子从铁晶粒内逃逸出. 模拟结果与文献正电子湮灭实验结果有很好的吻合.

关键词: bcc 铁, He, 晶格动力学蒙特卡罗, 温度

PACC: 6170Q, 6630J, 6185

1. 引 言

低活化的铁素体-马氏体钢 (bcc 结构) 由于抗高温辐照能力强而被广泛推荐为聚变堆技术中包容等离子体的结构材料. 然而在聚变堆运行过程中, bcc 铁长期受到高能中子辐照, 由于 α 粒子注入以及中子引发的 (n, α) 核反应, 会产生 He 原子积累. He 是一种非常轻的原子, 容易和空位 (V) 结合生成稳定的 He-V 结构, 研究发现 He 原子积累会导致 bcc 铁发生氢脆现象, 使其力学性能恶化, 有可能导致破损、断裂等^[1,2]. 然而导致金属结构和性能变化的微观结构尺寸通常只有几个纳米, 很难通过实验仪器直接观察到, 比如 He 及 He 泡的种类和数目等决定材料结构和性能的微观信息往往只能通过测量电阻、正电子寿命等进行间接测量. 对样品进行不同温度退火处理是研究金属中 He 行为的重要方法, 它的基本原理是通过逐渐升温诱发 He-V 缺陷团簇发生迁移、离解或聚合等一系列反应, 通过这些反应获得 He-V 缺陷团簇的大小和组成等信息^[3-5]. Takaki 等^[6]报道了辐照后的纯铁经过 100—400 K 不同温度退火处理后的电阻测量结果, 最近赵雅文等^[7]对

充氦和未充氦的抗氢-2 不锈钢 (HR-2) 样品进行室温至 1100 K 不同温度退火处理, 利用正电子湮灭技术探讨了不锈钢中 He 和缺陷的相互作用. 但是由于影响样品电阻以及正电子寿命的因素众多, 实验测量得到的有关 He-V 团簇发生迁移、离解或聚合等信息往往非常繁杂且难以解释. 为了弄清楚不同退火温度下金属中 He 行为的原子细节, 需要结合不同尺度的理论计算方法来对金属中的 He 行为进行模拟研究, 目前分子动力学 (MD) 和动力学蒙特卡罗 (KMC) 方法是两种最重要的主流模拟方法^[8-11]. 金属中的 He 行为包括不同的时间和空间尺度, 变化范围从几个原子、几个纳秒到几十微米、几年. 这种跨尺度的 He 行为不能采用单一的分子模拟方法进行描述, 需要结合 MD 和 KMC 两种不同尺度的模拟研究方法, 以实现金属中 He 行为的多尺度模拟.

文中采用一种可以模拟 bcc 铁中长期 He 行为的晶格动力学蒙特卡罗方法 (LKMC), 用分子动力学或第一性原理计算得到的金属中缺陷的迁移能、形成能、离解能等数据作为输入参数, 根据这些参数计算得到模拟体系的事件集, 然后通过抽样方法得到体系的下一状态, 从而实现金属中 He 和缺陷相

* 国家自然科学基金 (批准号 20801007) 和中国工程物理研究院科学技术发展基金 (批准号 20060862) 资助的课题.

[†] E-mail: chenph@live.cn

相互作用过程的模拟. 根据 Robinson 等^[21]描述的 LKMC 模拟步骤, 我们编写了用于模拟 bcc 金属中 He 行为的 LKMC 程序, 采用该程序模拟研究了温度对 bcc 铁中 He 行为的影响.

2. 计算模型和算法

LKMC 方法是蒙特卡洛方法^[12-15]的一种. 基本思想是假定模拟过程中各个基本粒子始终处于晶格中的某些特定位置 (比如格点或间隙位等), 通过对基本粒子的迁移、离解和聚合事件进行抽样, 得到体系的下一状态, 从而实现体系含时过程的模拟. 为了采用 LKMC 方法对 bcc 铁中的 He 行为进行模拟, 需要确定各个基本粒子可能处于的晶格位置, 以及可能发生的事件和相应的概率. 大多数的分子动力学计算结果表明, 在 bcc 铁中 He 原子处于八面体间隙位时能量最低^[6]. 在本次模拟中, 假定 He 处于八面体间隙位, 空位处于 bcc 晶格格点位, 自间隙原子 (SIA) 形成 $[110]$ 方向的哑铃结构, 或 $[111]$ 方向的挤子结构.

图 1 给出了 bcc 铁中 He、空位和自间隙原子的迁移模式. 单个空位和单个 He 的迁移模式分别如图 1 (a) 和图 1 (b) 所示; He-V 团簇中空位、He 的迁移模式分别如图 1 (c) 和图 1 (d) 所示; 单个自间隙原子的迁移模式如图 1 (e) 和图 1 (f) 所示. 其中 He 原子只能从 1 个八面体间隙位迁移至最近邻的八面体间隙位, 空位只能迁移至最近邻的格点位, 自间隙原子

按照“旋转-平移”模式进行迁移, 单个自间隙原子的稳定结构如图 1 (e) 所示, 为 $[110]$ 方向的哑铃结构, 在自间隙原子的迁移过程中, 先由 $[110]$ 方向的哑铃结构转变为图 1 (f) 所示的 $[111]$ 结构, 然后在 $[111]$ 方向发生平移, 最后回到 $[110]$ 方向的哑铃结构, 由于在各个 $[111]$ 方向间旋转的活化能比较低, 仅为 0.1—0.3 eV, 故单个自间隙原子可以发生三维迁移, 而自间隙原子团簇 (SIA_n) 只能在 $[111]$ 方向发生一维迁移. 当 2 个缺陷间的距离小于 1 个晶格常数时, 认为它们属于同 1 个团簇.

缺陷或缺陷簇的迁移概率可以通过式 (1) 计算, 其中 i 可以表示空位、He 原子、自间隙原子或它们构成的团簇. r_m^i 为迁移速率, v_m^i 为迁移振动频率, 一般取 10^{14} s^{-1} ^[27], E_m^i 为迁移活化能, k_B 和 T 分别位 Boltzmann 常数和温度.

$$r_m^i = v_m^i \exp\left(-\frac{E_m^i}{k_B T}\right) \quad (1)$$

$$r_d^i = v_d^i \exp\left(-\frac{E_d^i}{k_B T}\right) \quad (2)$$

缺陷或缺陷簇的离解概率和迁移概率类似, 如式 (2) 所示. 其中的离解活化能 E_d^i 等于该缺陷的结合能 E_b^i 加上该缺陷的迁移活化能 E_m^i , v_d^i 为离解振动频率, 一般取 10^{14} s^{-1} ^[27]. Morishita 等^[27] 和 Fu 等^[28] 分别计算了 Fe-He 体系中单个 He 原子、空位、自间隙原子的迁移能和较小 He-V 团簇的结合能. 文中模拟采用这些数据作为 LKMC 的输入参数, 模拟中考虑的事件和相关的活化能分别如图 2 和表 1 所示.

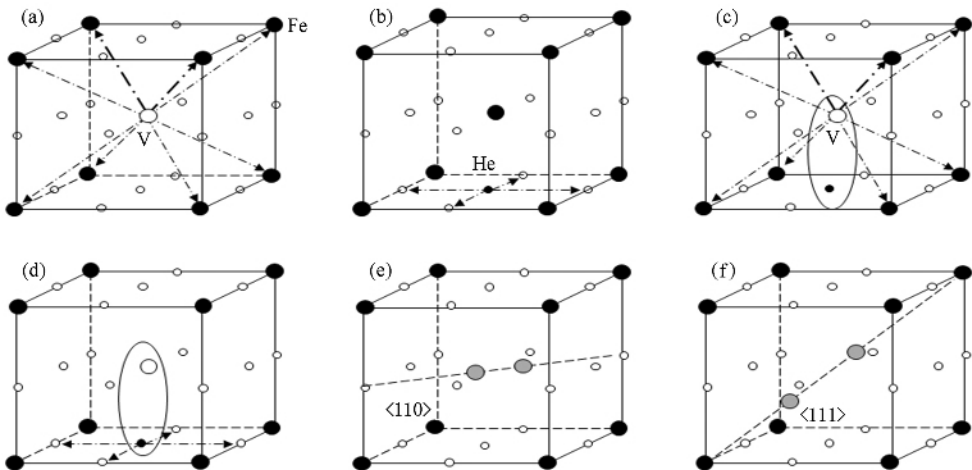


图 1 bcc 铁中缺陷的几种基本迁移方式 (大的实心圆表示 Fe 原子, 大的空心圆表示空位, 浅色大实心圆表示自间隙原子, 小的空心圆表示八面体空位, 小的实心圆表示 He 原子) (a) 自由空位的迁移, (b) 自由 He 原子迁移, (c) He-V 团簇中空位的内部迁移和离解, (d) He-V 团簇中 He 的内部迁移和离解, (e) 单个自间隙原子的结构, (f) 单个自间隙原子发生旋转

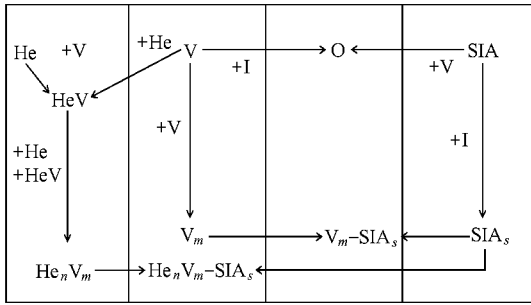


图2 在 LKMC 模拟中所考虑的空位、He、自间隙原子间的相互作用 (V 表示空位, SIA 表示自间隙原子)

表1 模拟中考虑的事件及活化能^[7, 48]

反应	活化能/eV	反应	活化能/eV
HeV → He + V	2.30	He ₂ V ₄ → HeV ₄ + He	3.12
HeV ₂ → HeV + V	0.78	He ₃ → He ₂ + He	0.81
HeV ₃ → HeV ₂ + V	0.83	He ₃ V → He ₂ V + He	1.83
HeV ₄ → HeV ₃ + V	1.16	He ₃ V ₃ → He ₂ V ₃ + He	2.07
He ₂ V → He ₂ + V	3.71	He ₃ V ₃ → He ₂ V ₃ + He	2.91
He ₂ V ₂ → He ₂ V + V	1.61	He ₃ V ₄ → He ₂ V ₄ + He	3.16
He ₂ V ₃ → He ₂ V ₂ + V	1.04	He ₄ → He ₃ + He	0.84
He ₂ V ₄ → He ₂ V ₃ + V	1.32	He ₄ V → He ₃ V + He	1.91
He ₃ V → He ₃ + V	4.59	He ₄ V ₃ → He ₃ V ₃ + He	2.36
He ₃ V ₂ → He ₃ V + V	1.85	He ₄ V ₃ → He ₃ V ₃ + He	2.57
He ₃ V ₃ → He ₃ V ₂ + V	1.80	He ₄ V ₄ → He ₃ V ₄ + He	3.05
He ₃ V ₄ → He ₃ V ₃ + V	1.57	V ₂ → V + V	0.30
He ₄ V → He ₄ + V	5.52	V ₃ → V ₂ + V	0.37
He ₄ V ₂ → He ₄ V + V	2.30	V ₄ → V ₃ + V	0.62
He ₄ V ₃ → He ₄ V ₂ + V	2.03	SIA ₂ → SIA + SIA	0.80
He ₄ V ₄ → He ₄ V ₃ + V	1.97	SIA ₃ → SIA ₂ + SIA	0.92
HeV ₂ → V ₂ + He	2.85	SIA ₄ → SIA ₃ + SIA	1.64
HeV ₃ → V ₃ + He	3.30	He 迁移	0.078
HeV ₄ → V ₄ + He	3.84	SIA 迁移	0.3
He ₂ → He + He	0.46	He _n V _m 迁移	1.1
He ₂ V → HeV + He	1.84	V 迁移	0.65
He ₂ V ₂ → HeV ₂ + He	2.75	SIA _s (s < 4) 迁移	0.1
He ₂ V ₃ → HeV ₃ + He	2.96	SIA _s (s ≥ 4) 迁移	2.0

注: V 表示空位, SIA 表示自间隙原子。

Morishita^[7]等给出了较小 He_nV_m (n < 5, m < 5) 团簇中 He 和空位的结合能, 如表 1 所示。对于较大 He_nV_m (n ≥ 5, m ≥ 5) 团簇中 He 和空位的结合能目前还没有相关的公开报道, 这些能量参数按照 Caturla 等^[9]提出的方法分别根据 (3) 式或 (4) 式对

较小 He_nV_m 中 He 和空位的结合能外推得到, 式 (3) 和式 (4) 中的 a₀、a₁、b₀ 和 b₁ 为根据较小 He_nV_m 中 He 和空位的结合能拟合得到的常数。

$$E_b(\text{He}_n\text{V}_m - \text{He}_{n-1}\text{V}_m) = a_0 + a_1(n^{2/3} - (n-1)^{2/3}), \quad (3)$$

$$E_b(\text{He}_n\text{V}_m - \text{He}_n\text{V}_{-1m}) = b_0 + b_1(m^{2/3} - (m-1)^{2/3}). \quad (4)$$

在每个 LKMC 步中, 首先根据当前缺陷的位置, 计算出可能发生的事件集和相应的频率, 然后根据事件集进行抽样, 并使事件发生, 计算出体系的下一个状态, 时间步长取所有可能发生事件频率之和的倒数。为了提高计算速率, 只对缺陷迁移、离解或聚合所影响的事件进行更新。

为了考虑晶界的影响, 在模拟过程中采用了伪周期性边界条件。伪周期性边界条件如图 3 所示, 它和周期性边界条件类似, 不同之处在于当有缺陷穿过模拟体系的 -x 边界 (或其他边界) 时, 它将可能从 +x 边界 (或相应的反方向边界) 进入模拟体系, 也可能以一定的概率逃离模拟体系, 逃离模拟体系的概率为 1/n, 其中 n 为 x 方向的重复个数。

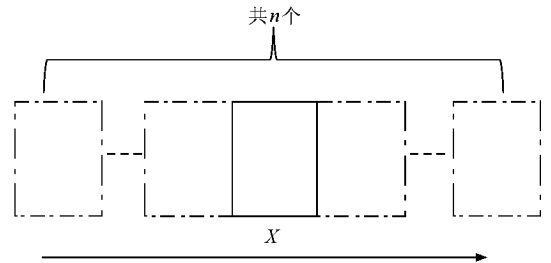


图3 伪周期性边界条件示意图

在有限温度下固体中还会形成有限浓度的原子缺陷, 在热平衡条件下, 金属中的热平衡空位浓度 C_v(T) 可以根据式 (5) 进行计算, bcc 铁中空位的形成能 E_v 为 105 kJ/mol。

$$C_v(T) = \exp\left(-\frac{E_v}{k_B T}\right) \quad (5)$$

3. 模拟结果和讨论

3.1 室温初始状态的模拟

为了获得室温 (298 K) 的初始状态, 首先在 bcc 铁中均匀引入一定浓度的 He, 空位和自间隙原子, 然后采用 LKMC 程序模拟 bcc 铁中的缺陷演化行

为直到体系达到平衡为止. 模拟体系的大小取 $100a_0 \times 100a_0 \times 100a_0$, 其中 a_0 为 bcc 铁的晶格常数, 伪周期性边界条件的重复单元取 $1000 \times 1000 \times 1000$, 相当于模拟晶粒大小为 $28.664 \mu\text{m} \times 28.664 \mu\text{m} \times 28.664 \mu\text{m}$ 的 bcc 铁中的 He 行为. He 的个数取 100 个 (浓度为 100 ppm), 计算过程中 He 的浓度保持不变. 热平衡空位和自间隙原子的数目根据 (6) 式计算, 室温下 bcc 铁中的热平衡空位浓度为 3.93×10^{-13} ppm 在 $100a_0 \times 100a_0 \times 100a_0$ 大小的体系中热平衡空位仅为 3.93×10^{-13} 个, 因此室温下没有考虑空位和自间隙原子的影响.

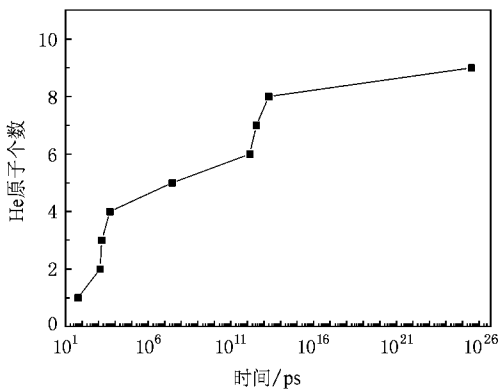


图 4 逃逸至晶界的 He 原子个数和时间关系

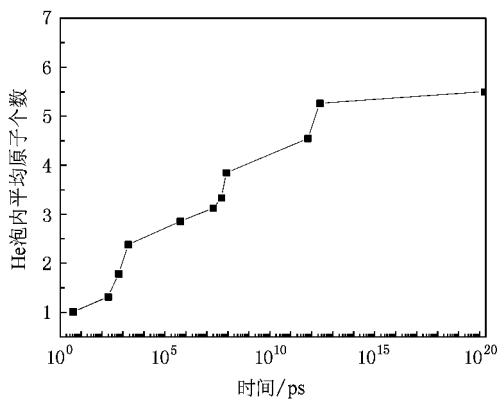


图 5 He 泡内的平均 He 原子个数和时间关系

bcc 铁内单个 He 原子的扩散活化能仅为 0.078 eV, 室温下 1 s 内的扩散次数可高达 4.8158×10^{12} 次, 扩散距离可高达 1 km, 因此 bcc 铁晶粒内的单个 He 原子非常不稳定, 会和其他 He 原子结合为较稳定的 He_n 或者逃逸至晶界处. 图 4 为 bcc 铁中逃逸至晶界的 He 原子个数和时间的关系; 图 5 为 He 泡内的平均原子个数和时间的关系. 结合图 4 和图 5 可

以看出逃逸至晶界处的 He 原子主要发生在最初的 10 s 内, 这主要是由于模拟零时刻, He 主要以单个 He 原子的方式存在, 而单个 He 原子的扩散能力非常强, 很容易从晶粒内逃逸至晶界. 10 s 后 He 主要以较稳定的 He_{4-6} 存在, 扩散能力迅速下降. 从图 4 和 5 还可以看出, 约 3000 s 以后模拟体系达到平衡, 此时 He 主要以 He_{4-6} 的形式存在.

3.2. 不同温度对 bcc 铁中 He 行为影响的模拟

以 2.1 节计算得到的室温平衡态作为初始状态, 模拟不同温度下 bcc 铁中的 He 行为, 直到缺陷的平均尺寸达到平衡为止, 模拟温度范围取 298 K—1298 K, 间隔取 100 K.

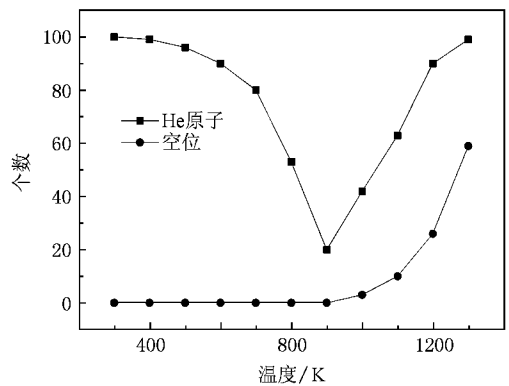


图 6 晶粒内的 He、空位浓度与温度的关系

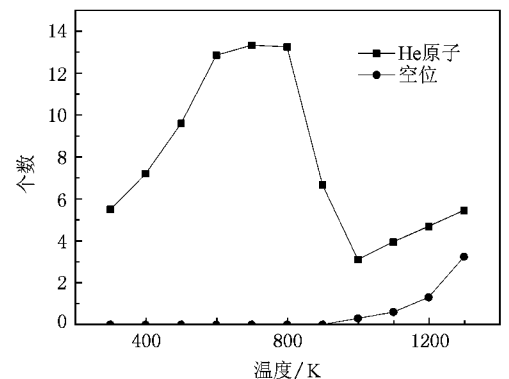


图 7 $\text{He}_n V_m$ 中的平均 He、空位个数与温度的关系

图 6 为不同温度达到平衡时 bcc 铁晶粒内部的 He、空位原子个数和温度的关系. 从图 6 可以看出随着温度的增加, 铁晶粒内的 He 浓度和空位浓度有不同的变化规律, He 原子的浓度先随着温度的增加而减少, 然后随着温度的增加而增加; 空位浓度随着温度的增加呈指数形式增加. He 原子浓度和温度

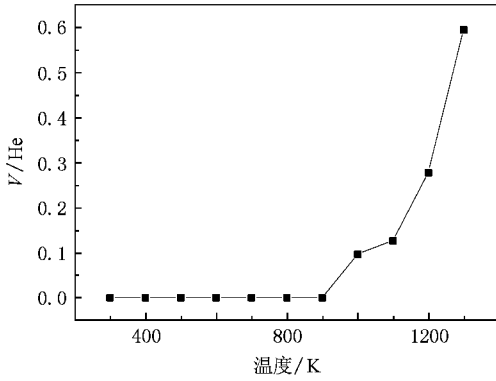


图 8 $He_n V_m$ 中 V/He 平均值与温度的关系

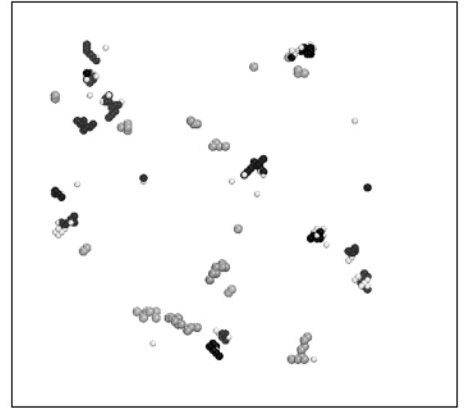


图 11 1298 K 时 $He_n V_m$ 及 SIA_s 的稳定结构,黑、白、灰球分别代表 He、空位、自间隙原子

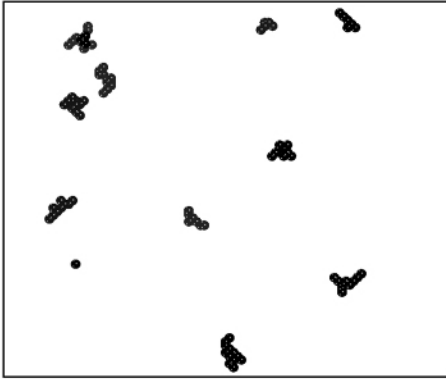


图 9 298 K 时 He_n 的稳定结构,黑色球为 He 原子



图 10 798 K 时 He_n 的稳定结构,黑色球为 He 原子

图 7 为体系达到稳定时 $He_n V_m$ 团簇中平均 He、空位个数与温度的关系.图 8 为 $He_n V_m$ 团簇中平均的空位和 He 原子个数比值与温度的关系.结合图 7 和图 8 可以看出 $He_n V_m$ 团簇中平均 He 原子个数与温度的关系可以分为 4 个阶段:(1)当温度低于 598 K 时,随着温度的增加,平均 He 原子个数迅速增加;(2)598—798 K,随着温度的增加,平均 He 原子个数几乎不变;(3)798—998 K,随着温度的增加,平均 He 原子个数迅速降低;(4)998—1298 K,随着温度的增加,平均 He 原子个数增加. $He_n V_m$ 团簇中平均空位个数与温度的关系与 $He_n V_m$ 团簇中平均空位与 He 原子个数比值的的关系类似,均随着温度增加按照指数规律增加.

图 9—11 分别为 298 K,798 K,1298 K 时, bcc 铁晶粒内缺陷平均尺寸达到平衡时缺陷的分布情况.结合图 6—8 的计算结果表明, bcc 铁中的 He 行为可以分为 4 个阶段.

第一阶段:298—598 K,在这个阶段热平衡空位浓度和 He 原子浓度相比非常低,可以忽略热平衡空位的影响.由于温度比较低,He 原子的扩散能力较弱,扩散距离较短,从晶粒内部扩散到晶界处的 He 原子个数较少,因此随着温度的升高,晶粒内部的 He 原子个数略有降低.此外随着温度的升高,较小的 He_n ($n < 3$)不能稳定存在,发生离解,形成比较大的 He 团簇,因此随着温度的增加 He 泡中平均 He 原子个数迅速增加.

第二阶段:598—798 K,在这个阶段热平衡空位浓度和 He 原子浓度相比仍非常低,热平衡空位的影响不大,但由于温度较高,He 原子的扩散能力变

的关系可以分为两个不同的阶段:(1)当温度低于 898 K 时,随着温度的升高,铁晶粒内的 He 原子浓度减少,且随着温度的增加,减少的速率变大,当温度为 898 K 时,铁晶粒内的 He 原子浓度仅为 20 ppm;(2)当温度大于 898 K 时,铁晶粒内 He 原子浓度随着温度增加而迅速增加.

强,扩散距离变大,而此时的热平衡空位浓度很低,不足以和 He 形成比较稳定的 He_nV_m 团簇,因此随着温度的增加,He 原子浓度迅速减少.此外由于温度增加,较小的 He_n ($n < 6$)不能稳定存在,He 原子倾向于形成较大的 He 泡,但由于总的 He 原子个数变少,因此平均 He 泡尺寸几乎不变.

第三阶段:798—998 K,这个阶段热平衡空位的个数依然很少,不足以和 He 形成比较稳定的 He_nV_m 团簇,随着温度的升高,较大的 He_n ($6 < n < 15$)也发生离解,离解出的 He 原子迅速逃逸至晶界处,因此铁晶粒内的 He 浓度迅速降低,平均 He 泡的尺寸也迅速降低.

第四阶段:998—1298 K,这个阶段热平衡空位的浓度随着温度的增加而迅速增加,在 1000 K 时为 11 ppm,与 He 原子的浓度处于同一量级,由于热平衡空位与 He 的结合能力非常强,能形成稳定的 He_nV_m 团簇,因此晶粒内部 He 原子浓度随着温度增加而迅速增加.此后随着温度的增加,较小的 He_nV_m ($n < 4, m < 2$)不能稳定存在, He_nV_m 团簇中的平均 He 原子个数和空位个数随着温度的增加而有所增加.

从室温至 1298 K,温度对 bcc 铁中 He 行为的影响出现了 4 个明显不同的阶段,这 4 个阶段分别对应了不同大小和组分 He-V 团簇发生的迁移、离解或聚合事件.温度较低时热平衡空位的影响可以忽略,此时对应的事件主要是较小的 He_n ($n < 3$)发生迁移或离解,随着温度的增加,较大的 He_n ($3 < n < 8$)能够获得足够的能量发生离解,离解出的 He 原子将和其他 He 泡结合长大为更大的 He 泡或逃逸至晶界处,最后当温度高于 1000 K 时,热平衡空位浓度与 He 原子浓度处于同一量级,必须考虑空位的影响,由于空位的固 He 作用,Fe 晶粒内的 He 原子浓度迅速增加,同时 He 泡尺寸迅速增大.与最近赵雅文等^[7]的实验结果相比,模拟结果与实验结果有很好的吻合,再现了温度对 He 行为影响的 4 个不同阶段,并给出了 4 个不同阶段的原子细节.赵雅文等采用的材料是抗氢-2 不锈钢 (HR-2),属于 fcc 结构,本文模拟的是 bcc 铁中的 He 行为,两者的晶格结构不同,但均给出了类似的结果.此外将 fcc 铁、bcc 铁中的转变温度点进行归一化处理,模拟计算得到的 bcc 铁中的转变温度点和实验观测到的

fcc 铁中的转变温度点几乎一致.模拟计算得到的为 $0.32T_m$ 、 $0.45T_m$ 和 $0.54T_m$,其中 T_m 为熔点,实验观测到的后 2 个转变点为 $0.44T_m$ 和 $0.55T_m$ (第 1 个转变温度点实验上未观测到),这种一致性表明温度对 bcc 铁和 fcc 铁中 He 行为的影响是非常类似的.对其他 bcc 和 fcc 金属的研究结果也表明如果将温度按熔点温度进行归一化处理,那么温度对大多数金属的影响是类似的^[10],因此本文的模拟结果具有一定的普遍性,可为其他金属中的 He 行为研究提供参考.

4. 结 论

采用 LKMC 方法对金属中的 He 行为进行模拟,在获得原子细节的同时可以实现长时间、大尺寸过程的模拟,模拟结果可为相关的退火实验解释提供参考.本文模拟结果表明温度对 bcc 铁中的 He 行为的影响可以分为 4 个阶段:1)298—598 K;2)598—798 K;3)798—998 K;4)998—1298 K.第一阶段:298—598 K,随着温度的增加,晶粒内 He 原子浓度略有降低,单个 He 泡内所含平均 He 原子个数迅速增加,这主要是由于较小的 He_n ($n < 3$)的离解能较低,仅为 0.8 eV 左右,当温度高于 350 K 时,较小的 He_n ($n < 3$)将发生离解或与其他 He 泡结合长大,因此随着温度增加单个 He 泡内平均 He 原子个数迅速增加;第二阶段:598—798 K,随着温度的增加,晶粒内的 He 原子浓度迅速降低,但单个 He 泡内所含平均 He 原子个数几乎不变,与第一阶段不同,第二阶段的平均 He 原子个数几乎不变,这主要是由于晶粒内 He 原子浓度迅速减低所致;第三阶段:798—998 K,随着温度的增加,晶粒内的 He 原子浓度和单个 He 泡内平均 He 原子个数均迅速减少;第四阶段:998—1298 K,这个阶段热平衡空位浓度与晶粒内 He 原子浓度处于同一量级,由于空位的固 He 作用,随着温度的增加,晶粒内 He 原子浓度以及 He 泡内平均 He 原子个数均有所增加,到 1298 K 时,晶粒内 He 原子浓度与室温相当,几乎没有 He 原子从铁晶粒内逃出.

感谢刘柯钊研究员给予的帮助和指导.

- [1] Wilson K L, Thomas G J 1976 *J. Nucl. Mater.* **63** 266
- [2] Kaletta D 1983 *Rad. Eff.* **78** 245
- [3] Zhang C H, Chen K Q, Wang Y S, Sun J G 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 1774 (in Chinese) [张崇宏、陈克勤、王引书、孙继光 1997 物理学报 **46** 1774]
- [4] Mansur L K, Lee E H, Maziasz P J 1986 *J. Nucl. Mater.* **141** 633
- [5] Trinkaus H, Singh B 2003 *J. Nucl. Mater.* **323** 229
- [6] Takaki S, Fuss J, Kugler H 1983 *Rad. Eff.* **79** 87
- [7] Zhao Y W, Liu K Z, Chen X L 2006 *Phys. Exp.* **26** 11 (in Chinese) [赵雅文、刘柯钊、陈向林 2006 物理实验 **26** 11]
- [8] Zheng H 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 389 (in Chinese) [郑 晖 2007 物理学报 **56** 389.]
- [9] Perujo A, Forcey K S 1995 *Fus. Eng. Design* **28** 252
- [10] Ullmaier H 1993 *Rad. Eff.* **78** 1
- [11] Kalashnikov A N, Chernov I I, Kalin B A 2002 *J. Nucl. Mater.* **377** 307
- [12] Robinson M 1983 *Phys. Rev. B* **27** 5347
- [13] Evans J H, Escobar G T, van Veen A 2004 *Nucl. Instr. Meth. B* **217** 276
- [14] Wang X P, Xie F, Shi Q W, Zhao T X 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2699 (in Chinese) [王晓平、谢 峰、石勤伟、赵特秀 2004 物理学报 **53** 2699]
- [15] Tang J, Yang X Q, Qiu K 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3307 (in Chinese) [唐 军、杨先清、仇 康 2005 物理学报 **54** 3307]
- [16] Fedorov A V, van Veen A, Ryazanov A I 1996 *J. Nucl. Mater.* **385** 233
- [17] Morishita K, Sugano R, Wirth B D 2003 *J. Nucl. Mater.* **323** 243
- [18] Fu C C, Willaime F 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 175503
- [19] Caturla M J, Soneda N, Alonso E, B D 2003 *J. Nucl. Mater.* **276** 13

Simulation of He behavior in bcc Fe on heating^{*}

Chen Pi-Heng[†] Shen Liang Ao Bing-Yun Li Rong Li Ju

(National Key Laboratory for Surface Physics and Chemistry, Mianyang 621907, China)

(Received 24 March 2008; revised manuscript received 23 September 2008)

Abstract

Temperature is an important factor for the behavior of He in metals. In this paper, we write a LKMC (lattice kinetic Monte Carlo) program to simulate the behavior of He in bcc Fe under the temperature range of 298—1298 K. The simulation results show that the temperature influence on He behavior can be divided into four different stages: 1) 298—598 K, 2) 598—798 K, 3) 798—998 K, 4) 998—1298 K. In the first stage: with the increase of temperature, the concentration of He in the grain has a little decrease, but the average number of He in He bubbles increases greatly; In the second stage, with the increase of temperature, the concentration of He in the grain decrease rapidly, but the average size of He bubbles almost keeps constant. In the third stage, with the increase of temperature, the concentration of He in grains and the average numbers of He in He bubbles both decrease rapidly. In the third stage: with the increase of temperature, the average numbers of He atoms in the grain and the average size of He bubbles both increase. At 1298 K, the average number of He atoms is almost equal to that at room temperature, and almost no He escapes from Fe grains.

Keywords: bcc Fe, He, LKMC, temperature

PACC: 6170Q, 6630J, 6185

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 20801007) and the Foundation for Development of Science and Technology of China Academy Engineering Physics (Grant No.20060862).

[†] E-mail: chenph@live.cn