

# 氦离子低温预辐照对不锈钢中氦泡生长抑制作用的Monte Carlo模拟研究\*

郑晖<sup>1)†</sup> 张崇宏<sup>2)</sup> 陈波<sup>3)</sup> 杨义涛<sup>2)</sup> 赖新春<sup>4)</sup>

1)(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100094)

2)(中国科学院近代物理研究所, 兰州 730000)

3)(中国工程物理研究院核物理与化学研究所, 绵阳 621900)

4)(中国工程物理研究院表面物理与化学国家重点实验室, 绵阳 621907)

(2013年9月30日收到; 2014年1月28日收到修改稿)

实验中已发现氦离子低温预辐照不锈钢材料能有效抑制高温辐照阶段的氦泡生长, 但这一结果一直缺少理论解释. 基于持续注入粒子的三维格子气模型, 采用Monte Carlo模拟方法研究了不同温度模式对氦泡生长行为的影响. 研究发现, 计算结果能很好地再现氦离子低温预注入抑制高温氦泡生长的实验现象, 其原理为低温预注入时材料中形成了较高数密度的小氦泡, 由于氦泡数量较多从而限制了氦泡平均尺寸的增大.

**关键词:** 预辐照, 氦泡生长, 抑制作用, Monte Carlo 模拟

**PACS:** 61.80.-x, 64.60.qe, 81.40.Wx

**DOI:** 10.7498/aps.63.106102

## 1 引言

在辐照条件下材料的氦损伤是制约核反应堆寿命的关键问题<sup>[1,2]</sup>, 该问题的有效解决依赖于对氦泡成核生长机理的透彻理解<sup>[3]</sup>, 国内外学者已开展此方面的研究. 氦泡生长由氦原子迁移-聚集形成, 温度越高, 氦原子迁移越快, 氦泡生长速度就越快, 进而对材料的危害越大<sup>[4,5]</sup>. 降低工作温度是减缓堆壁材料氦脆的一条思路, 然而反应堆的工作温度受各种条件限制, 并不能随意降低. 1998年, 文献<sup>[6, 7]</sup>的研究工作给这一思路提供了可行的方案. 文献<sup>[6, 7]</sup>指出, 在高温氦离子辐照之前如果对不锈钢材料做一个低剂量的低温预辐照, 将能有效抑制高温辐照时氦泡的生长, 其效果甚至接近同剂量的低温辐照效果. 低温预辐照对材料有损伤, 但此时两个损伤相加反而小于其中的一个, 这在常

识上较难理解. 本文将通过微观粒子模拟解释这一有趣现象.

开展微观粒子模拟需要做一些理论近似. 首先, 忽略辐照缺陷对氦原子迁移、聚集行为的影响<sup>[8,9]</sup>. 在氦离子注入材料过程中, 除引入氦原子外还会引起原子间级联碰撞, 从而产生间隙原子、空位等辐照缺陷<sup>[10-12]</sup>. 2.5 MeV的氦离子辐照316不锈钢时, 将在氦注入区内产生100多对间隙原子、空位<sup>[13]</sup>. 尽管辐照早期产生的点缺陷很多, 但绝大部分间隙原子、空位会在很短的时间内通过热运动而复合消失, 最后残留下来的数量很少, 比例甚至只有万分之一<sup>[9]</sup>. 因此, 辐照空位俘获氦原子而形成氦泡核的比例是很有限的, 忽略这一因素不会影响对主要物理过程的理解. 其次, 使用格子气模型模拟氦原子在晶格点上的产生、迁移、聚集过程, 而不考虑氦原子在晶胞中的相对位置变化, 事实表明用晶格模型描述合金中的点缺陷热激发

\* 国家自然科学基金 (批准号: 10575124)、国家磁约束聚变研究计划 (批准号: 2011GB108003)、中国工程物理研究院科学技术发展基金 (批准号: 2009A0301019, 9090902) 和中国工程物理研究院中子物理学重点实验室基金 (批准号: 2012AB02) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: zheng\_hui@iapcm.ac.cn

以及杂质原子的偏聚行为是可行的<sup>[14,15]</sup>. 当然, 模型简化近似的合理性最终将通过与实验结果对比而得到检验.

基于格子气模型, 本文采用 Monte Carlo 模拟方法研究了氦原子的注入、迁移、聚集行为, 并解释了低温氦离子预辐照抑制氦泡生长的机理.

## 2 理论模型和计算方法

采用格子气模型<sup>[16]</sup>, 其哈密顿量  $H$  为

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J \sigma_i \sigma_j \quad (\sigma_i = 0, 1). \quad (1)$$

为简化起见, 仅考虑最近邻相互作用. 能量参数  $J$  表征了氦原子加入或逃离氦团簇引起的系统能量的变化,  $\sigma_i$  为格点  $i$  上的氦原子数, 取值为 0 或 1. 模型晶格为面心立方晶格, 与本文研究的 316L 奥氏体不锈钢的基体晶格类型相同. 选取晶格常数  $a$  等于不锈钢基体的晶格常数. 本模型限制每个格点上只能有一个氦原子, 相当于限制氦泡内氦原子浓度不超过  $4/a^2$ , 这与实际情况相差不太远, 不会影响对实际物理过程的研究.

本文模拟沉积区内氦原子的迁移、聚集行为. 模拟系统格点总数  $N_{\text{latt}} = 5 \times 10^5$ . 采用周期性边界条件. 注入粒子最大浓度  $c = 0.1$ , 相当于辐照结束时氦泡所占体积比. 低温和高温注入的粒子数按实验中的辐照剂量比例确定. 高温  $T_2$  与低温  $T_1$  的比值取实验值 1.44, 即  $T_2/T_1 = 1.44$ , 温度单位取为  $J/k_B$ , 其中  $k_B$  为玻尔兹曼常数. 由于模型温度与实际温度的对应关系较难确定, 选择  $0.28J/k_B - 0.40J/k_B$  之间的一组  $T_1$  值进行计算并与实验数据对比, 最后选取与实验数据较接近的计算结果. 低温预注入剂量与高温注入剂量之比的实验值为 1 : 500, 而在模拟中为了使低温预注入粒子数量不至于太少, 将这一比例人为放大至 1 : 49, 这仍然是一个很小的比例, 对于研究低温预注入抑制团簇生长的机理没有影响.

本文利用 Monte Carlo 模拟和 Metropolis 算法<sup>[17]</sup>. 游离粒子随机迁移一段大小为最近邻格点间距的位移所需的时间  $t_{\text{dis}}$  对应一个 Monte Carlo 模拟步,  $t_{\text{dis}}$  可按下式估算:

$$t_{\text{dis}} = (a/\sqrt{2})^2/D, \quad (2)$$

式中  $D$  为氦原子在不锈钢中的扩散系数, 与温度有关. 设平均每个晶格格点注入一个粒子所需时间为

$t_{\text{inj}}$ , 则  $t_{\text{inj}}$  满足

$$I/h = \left( \frac{a^3}{4} t_{\text{inj}} \right)^{-1}, \quad (3)$$

式中,  $I$  为氦离子辐照的束流强度,  $h$  为氦原子沉积区的平均厚度. 根据文献<sup>[6, 7]</sup> 的实验数据, 计算得到  $t_{\text{inj}} = 1.9 \times 10^6$  s,  $t_{\text{dis}}^{300^\circ\text{C}} = 2.4 \times 10^{-4}$  s,  $t_{\text{dis}}^{550^\circ\text{C}} = 8.2 \times 10^{-8}$  s. 容易看出  $t_{\text{inj}} \gg t_{\text{dis}}$ .

本文引入  $n$  和  $m$  两个重要参数,

$$\begin{aligned} n &\equiv t_{\text{inj}} / (N_{\text{latt}} t_{\text{dis}}^{300^\circ\text{C}}), \\ m &\equiv t_{\text{dis}}^{300^\circ\text{C}} / t_{\text{dis}}^{550^\circ\text{C}}. \end{aligned}$$

在数值模拟中, 低温点每  $n$  步向系统中注入一个氦原子, 高温点每  $n \times m$  步向系统注入一个氦原子. 对应于文献<sup>[6, 7]</sup> 的实验数据,  $n = 1.6 \times 10^4$ ,  $m = 2.9 \times 10^3$ . 由于参数  $n$  和  $m$  较大, 导致对应的计算量难以承受, 我们将先对  $n$  和  $m$  在 100 以内的情况开展计算, 考察计算结果随参数  $n, m$  变化的规律, 然后外推到大参数  $n, m$  的情况.

由于材料中的氦泡对应于格子气模型中的粒子团簇, 因此以下所述的粒子团簇可以理解为氦泡. 本文定义团簇为具有近邻关系的粒子组成的集合. 团簇直径按照相同体积的球直径计算, 如果团簇包含  $N$  个粒子, 则团簇直径  $d$  满足  $\frac{\pi}{6} d^3 = N\Omega$ , 其中  $\Omega$  为每个格点所占体积  $\Omega = a^3/4$ . 由于实验只能观测到超过一定尺寸的“可见”团簇, 因此我们也只统计可见团簇的贡献, 并将包含 10 个及以上粒子的团簇定义为可见团簇.

## 3 参数 $n$ 和 $m$ 对团簇生长的影响

文献<sup>[6, 7]</sup> 对应的高温点模拟计算量达到  $cN_{\text{latt}}nm \approx 2.3 \times 10^{12}$  步, 在目前而言, 该计算量将使得模拟研究难以开展. 为此, 我们采用外推方法. 先选取较小的参数值开展模拟计算, 找出规律后再外推到实际参数的情况. 采用外推方法有一定风险, 不过当外推范围不太大且物理规律十分明显时仍有较高的可信度. 本文计算符合这样的情况.

选择  $n = 10, m = 10$  为基点,  $n$  和  $m$  在 1—100 的范围内变化, 这样的参数取值对应的模拟计算量适中. 考察计算结果对参数  $n, m$  的依赖关系. 由于  $n, m$  的变化范围有两个量级, 只需外推 1—2 个量级就能达到实际情况.

图 1(a) 显示了固定参数  $m = 10$  时平均团簇直径  $\langle d \rangle$  随时间的变化. 图 1 所示的 8 条曲线分别对应于参数  $n = 10, 20, 50, 100$  和预注入温度  $k_B T_1/J = 0.28, 0.40$  的 8 种组合情况. 这里取  $a/2$  为长度单位,  $s$  为斜率. 时间  $t_{inj}/N_{latt}$  在低温点和高温点对应的计算模拟步数分别为  $n$  步和  $n \times m$  步.

从图 1(a) 可以看出, 系统经过一个过渡段后才进入  $\langle d \rangle \propto t^{1/3}$  的稳定生长阶段, 过渡段时间长度约为  $2 \times 10^{-3} t_{inj} - 3 \times 10^{-3} t_{inj}$ , 与预注入时长基本相当. 我们还发现, 平均团簇直径的计算值随参数  $n$  和  $T_1$  的增加而增大.  $n$  增大对应粒子迁移频率的增加, 温度升高也对应粒子迁移频率的增加, 两者都会使团簇生长过程加快.

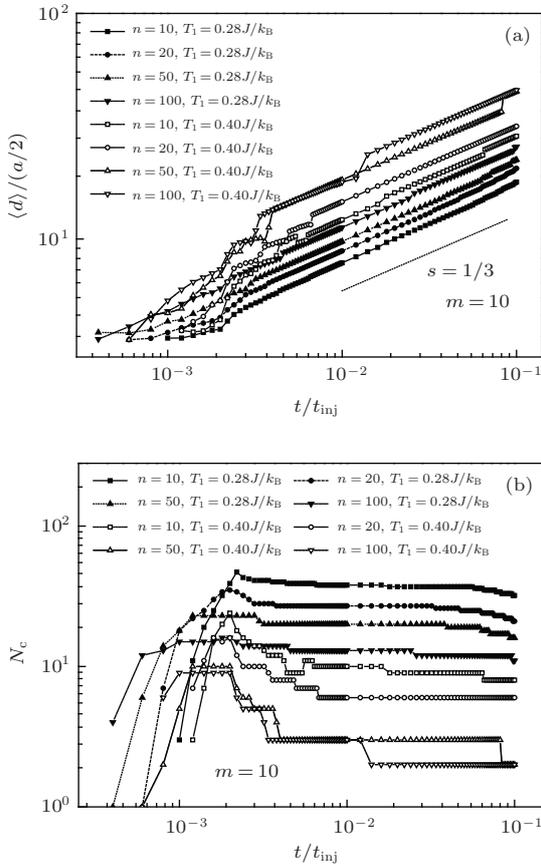


图 1  $m = 10$  时, 平均团簇直径  $\langle d \rangle$  和团簇数量  $N_c$  随时间  $t$  的变化 (a)  $\langle d \rangle$  随  $t$  的变化; (b)  $N_c$  随  $t$  的变化

图 1(b) 显示了模拟系统中团簇数量  $N_c(t)$  随时间的变化. 从曲线形态看, 团簇生长可分为 3 个阶段. 在低温预注入粒子阶段, 团簇数量快速增加, 在  $t = 10^{-3} t_{inj} - 2 \times 10^{-3} t_{inj}$  达到最大值,  $t = 2 \times 10^{-3} t_{inj}$  对应于低温预注入结束和高温注入开始, 此时模拟系统中的团簇数量  $N_c(t)$  有几十个(阶段 I). 在预注入阶段,  $\langle d \rangle$  增长慢于  $t^{1/3}$  的速

率. 参数  $n$  越小,  $\langle d \rangle$  增长越慢;  $n$  越大,  $\langle d \rangle$  越接近  $\langle d \rangle \propto t^{1/3}$  幂律. 在高温起始阶段, 低温预注入粒子形成的团簇核似乎并不稳定, 因为在随后  $10^{-3} t_{inj} - 2 \times 10^{-3} t_{inj}$  的时间内 (高温注入粒子初期),  $\langle d \rangle$  以远快于  $t^{1/3}$  的速率增大, 团簇数量  $N_c(t)$  相应地迅速减小并达到一个比较稳定的值 (阶段 II). 该数值依赖于参数  $n$  的取值,  $n$  越大则团簇数量越少. 团簇数量基本稳定后, 平均团簇直径进入  $\langle d \rangle \propto t^{1/3}$  的稳定增长阶段 (阶段 III).

本文中粒子团簇在稳定生长阶段的生长律  $\langle d \rangle \propto t^{1/3}$  主要源于成核以后团簇数量  $N_c$  变化缓慢的事实. 由于注入粒子总数  $N \propto t$ , 因此团簇平均直径  $\langle d \rangle \propto (N/N_c)^{1/3} \propto N^{1/3} \propto t^{1/3}$ .

图 2 显示了固定参数  $n = 10$  时得到的模拟结果, 其中参数  $m$  的取值为 10, 20, 50, 100. 从图 2 可以看出,  $t < 10^{-3} t_{inj}$  时系统中没有可见团簇,  $10^{-3} t_{inj} < t < 2 \times 10^{-3} t_{inj}$  时系统中团簇数量急剧增加到几十个的最大值(阶段 I), 之后团簇数量快速减少到从几个到几十个的相对稳定值(阶段 II), 随后团簇数量变化缓慢, 平均团簇直径按  $\langle d \rangle \propto t^{1/3}$  的规律增长 (阶段 III). 参数  $m$  的取值会影响团簇数量减少的快慢,  $m$  值越大则团簇数量减少得越快, 计算结果及其规律与固定参数  $m$  时的情况十分类似.

从图 1(a)、图 2(a) 可以得到  $\langle d \rangle$  与参数  $n, m$  的定量关系. 拟合稳定生长阶段的演化关系  $\langle d \rangle \approx C t^{1/3}$ , 可得到拟合系数  $C$ . 我们关注拟合系数  $C$  与预注入温度  $T_1$  和参数  $n, m$  的定量关系.

图 3(a), (b) 分别显示了稳定生长阶段的平均氦泡直径  $\langle d \rangle$  与参数  $n, m$  的关系. 图 3(a) 中,  $m = 10, t/t_{inj} = 0.08$ ; 图 3(b) 中,  $n = 10, t/t_{inj} = 0.048$ . 从图 3 可以看出, 如果参数  $n$  和  $m$  的取值不小于 10, 则  $\langle d \rangle$  与参数  $n, m$  之间的关系可以用幂函数很好地拟合. 我们拟合了  $T_1 = 0.28 J/k_B, 0.40 J/k_B$  时  $\langle d \rangle$  与参数  $n, m$  的函数关系, 对于  $k_B T_1/J$  在温度区间  $[0.28, 0.40]$  内的拟合函数指数采用线性插值. 得到的平均团簇直径  $\langle d \rangle$  的计算值与参数  $n, m$ 、预辐照温度  $T_1$  和时间  $t$  的经验函数关系为

$$\langle d \rangle = 3.33(N_{latt} \times n)^{0.207T_1+0.081} \times m^{0.571T_1-0.036}(t/t_{inj})^{1/3}, \quad (4)$$

因而有

$$\frac{\langle d \rangle_{(n', m')}}{\langle d \rangle_{(n, m)}} = \left( \frac{n'}{n} \right)^{0.207T_1+0.081}$$

$$\times \left(\frac{m'}{m}\right)^{0.571T_1 - 0.036} \quad (5)$$

(5) 式表明, 在稳定生长阶段, 模拟参数  $n, m$  取值不同的情况下计算得到的团簇平均尺寸仅相差一个常系数. 在下面的计算中, 我们将通过计算  $n = 10, m = 10$  的情况来得到  $n = 1.6 \times 10^4, m = 2.9 \times 10^3$  时的计算结果.

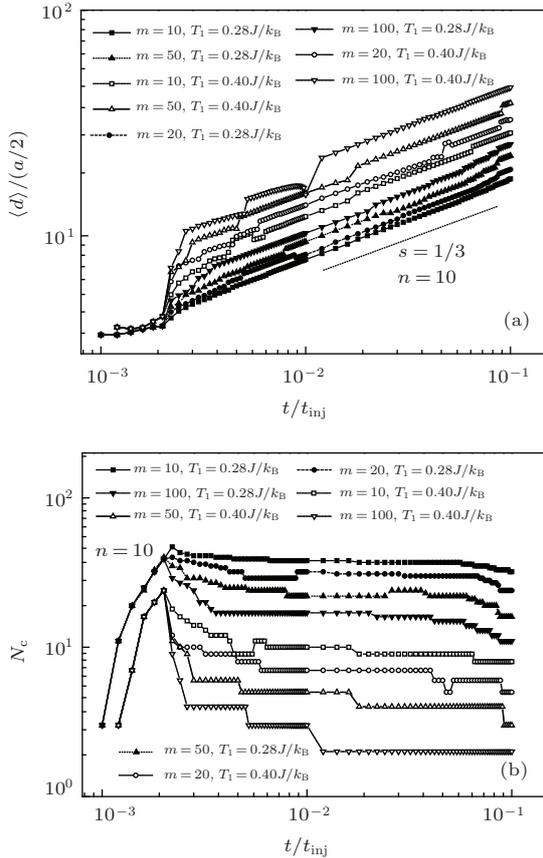


图2  $n = 10$  时, 平均团簇直径  $\langle d \rangle$  和团簇数量  $N_c(t)$  随时间  $t$  的变化 (a)  $\langle d \rangle$  随  $t$  的变化; (b)  $N_c(t)$  随  $t$  的变化

对于单温粒子注入情况, 也需要对参数  $t_{inj}/t_{dis}$  作外推, 为此我们开展了此方面的规律性研究. 注意在低温点有  $t_{inj}/t_{dis} = n \times N_{latt}$ , 在高温点有  $t_{inj}/t_{dis} = n \times m \times N_{latt}$ .

由于当  $t$  较大时  $\langle d \rangle$  更趋于  $\propto t^{1/3}$ , 我们按

$$AT^\alpha \left(\frac{t_{inj}}{t_{dis}}\right)^\beta \left(\frac{t}{t_{inj}}\right)^{1/3}$$

的形式统一拟合温度  $T$  和参数  $t_{inj}/t_{dis}$  值不同时的函数曲线. 图4显示了通过尝试比较后得到的最佳拟合结果, 其中, 拟合参数  $\alpha \approx 1, \beta = 0.23$ .

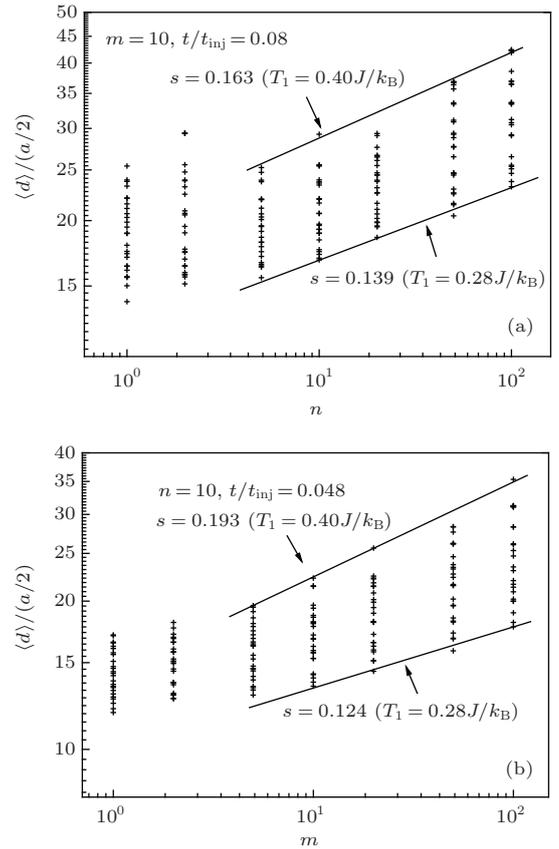


图3 在稳定生长阶段, 平均氦泡直径  $\langle d \rangle$  随模型参数  $n, m$  的变化 (a)  $\langle d \rangle$  随模型参数  $n$  的变化; (b)  $\langle d \rangle$  随模型参数  $m$  的变化

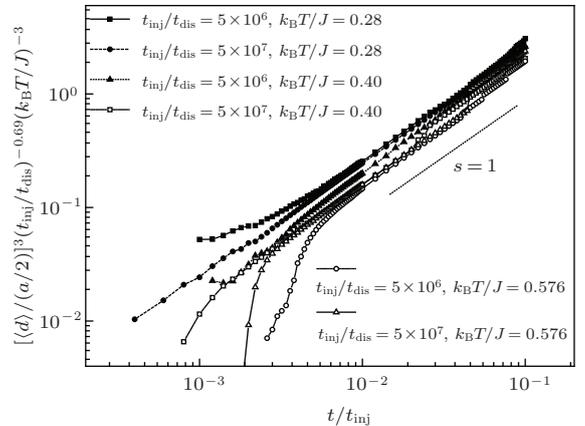


图4  $[\langle d \rangle / (a/2)]^3 (t_{inj}/t_{dis})^{-0.69} (k_B T/J)^{-3}$  与时间  $t$  的关系曲线

从图4可以看出, 当  $t/t_{inj} < 5 \times 10^{-3}$  时, 对应不同温度下的  $\langle d \rangle^3 (t_{inj}/t_{dis})^{-3\beta} T^{-3\alpha}$  与时间  $t$  的关系曲线有明显差异; 而当  $t/t_{inj} > 5 \times 10^{-3}$  时, 曲线基本趋于一致. 拟合稳定生长阶段 ( $t/t_{inj} > 5 \times 10^{-3}$ ) 的数据点, 得到如下经验公式:

$$\langle d \rangle \approx 116 \frac{k_B T}{Ja} \left(\frac{t_{inj}}{t_{dis}}\right)^{0.23} \left(\frac{t}{t_{inj}}\right)^{1/3} \quad (6)$$

因此

$$\frac{\langle d \rangle_{n'}}{\langle d \rangle_n} = \left( \frac{n'}{n} \right)^{0.23} \quad (T = T_1), \quad (7a)$$

$$\frac{\langle d \rangle_{(n', m')}}{\langle d \rangle_{(n, m)}} = \left( \frac{n' \times m'}{n \times m} \right)^{0.23} \quad (T = T_2). \quad (7b)$$

为了清楚显示温度对团簇生长的影响, 图5(a), (b), (c)分别给出了  $k_B T/J = 0.28, 0.40, 0.576$  时的计算结果. 在团簇稳定生长阶段, 对应不同参数  $t_{inj}/t_{dis}$  值的曲线基本重合, 其中温度较低 ( $T = 0.28 J/k_B$ ) 时曲线重合得很好. 对于较高温度 ( $T = 0.576 J/k_B$ ), 在生长前期 ( $t/t_{inj} < 6 \times 10^{-3}$ ) 平均团簇直径  $\langle d \rangle$  显著向下并发生偏离; 而对于  $T = 0.40 J/k_B$ , 曲线向下偏折程度小一些. 对于  $T = 0.40 J/k_B$  和  $T = 0.576 J/k_B$  这两个温度, 在稳定生长阶段 ( $t/t_{inj} > 6 \times 10^{-3}$ ), 对应不同参数  $t_{inj}/t_{dis}$  的曲线分散性显著增大, 而这种分散性具有随机性, 无法通过调整拟合参数  $\alpha, \beta$  减小, 这与较高温度下团簇迅速生长导致系统中团簇数量很少而统计涨落增大有关.

#### 4 计算结果及讨论

下面模拟3种粒子注入条件下团簇的成核、生长行为, 3种粒子注入条件分别为低温  $T_1$  注入、高温  $T_2$  注入和先低温  $T_1$  后高温  $T_2$  (双温  $T_1 \rightarrow T_2$  注入). 注入条件仅仅是系统温度有差别, 其他模拟参数均相同. 模型中注入粒子总数等于格点总数的10%, 在双温注入模式中低温注入的粒子数仅占注入粒子总数的1/50, 即格点总数的0.2%. 高注入温度与低注入温度比值固定为  $T_2/T_1 = 1.44$ . 我们关注团簇在稳定生长阶段的行为. 通过计算  $\langle d \rangle_{(10,10)}$ , 再按(5)式乘以适当系数得到  $n = 1.6 \times 10^4, m = 2.9 \times 10^3$  时平均团簇直径的演化关系. 对于单温注入, 我们先计算  $\langle d \rangle_{n=10}$  或  $\langle d \rangle_{n \times m=100}$ , 再按(7)式得到实际  $T_1$  或  $T_2$  注入时平均团簇直径的演化关系.

图6和图7显示了低温  $T_1$  注入、高温  $T_2$  注入和先低温  $T_1$  后高温  $T_2$  注入 (温度变换发生在  $t/t_{inj} = 2 \times 10^{-3}$ ) 3种粒子注入模式下的平均团簇直径、团簇数量随时间的变化. 图6对应的模型参数  $T_1 = 0.28 J/k_B$ , 图7对应的模型参数  $T_1 = 0.40 J/k_B$ .

从图6(a)和图7(a)可以看出: 将3种不同注入温度模式按团簇生长快慢的顺序由大到小排列

依次为高温  $T_2$  注入,  $T_1 \rightarrow T_2$  双温注入, 低温  $T_1$  注入. 由此可知: 虽然低温  $T_1$  预注入剂量小但有明显抑制后期团簇生长的效果; 预注入温度  $T_1$  越低, 则预注入抑制团簇生长的效应就越明显. 由图6(a)可知, 双温注入的平均团簇直径  $\langle d \rangle$  和低温  $T_1$  注入的  $\langle d \rangle$  非常接近, 两者只有高温  $T_2$  注入的  $\langle d \rangle$  的38%左右.

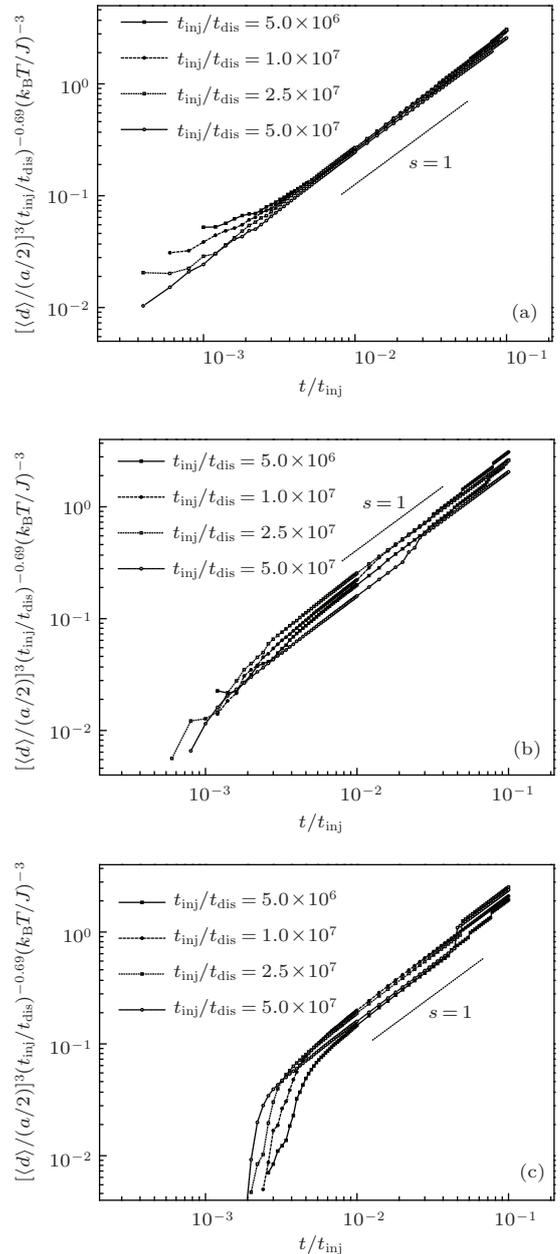


图5 不同温度条件下,  $[(d)/(a/2)]^3 (t_{inj}/t_{dis})^{-0.69} (k_B T/J)^{-3}$  与时间  $t$  的关系曲线 (a)  $T = 0.28 J/k_B$ ; (b)  $T = 0.40 J/k_B$ ; (c)  $T = 0.576 J/k_B$

图6(b)和图7(b)显示了团簇数量随时间的变化. 由此可以看出: 低温  $T_1$  预注入将早期 ( $t/t_{inj} = 2 \times 10^{-3}$ ) 团簇数密度提升到较高的水

平, 相比而言, 高温  $T_2$  直接注入时早期阶段的团簇数密度很低, 二者有几十倍甚至几百倍的差距; 早期形成的团簇数量在后续演化中变化很小.

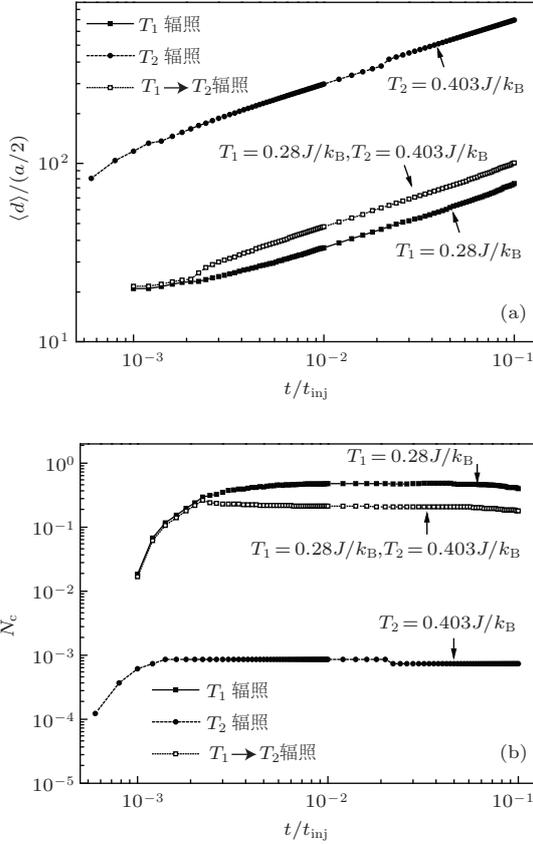


图6 当  $T_1 = 0.28 J/k_B$ ,  $T_2 = 0.403 J/k_B$  时, 3种不同注入温度模式下, 平均团簇直径  $\langle d \rangle$  和团簇数量  $N_c$  随时间  $t$  的变化关系 (a)  $\langle d \rangle$  随  $t$  的变化; (b)  $N_c$  随  $t$  的变化

无论何种注入温度模式, 稳定生长阶段的平均团簇直径  $\langle d \rangle$  与时间  $t$  均满足  $\langle d \rangle \propto t^{1/3}$  关系, 而我们主要关注团簇在稳定生长阶段的行为. 不难发现, 双温注入的团簇生长函数可近似用两个单温生长函数表示为

$$\langle d \rangle_{T_1 \rightarrow T_2} = [\langle d \rangle_{T_1}]^\alpha [\langle d \rangle_{T_2}]^{1-\alpha}, \quad (8a)$$

$$N_{c, T_1 \rightarrow T_2} = [N_{c, T_1}]^\alpha [N_{c, T_2}]^{1-\alpha}, \quad (8b)$$

式中,  $\langle d \rangle_{T_1 \rightarrow T_2}$ ,  $N_{c, T_1 \rightarrow T_2}$  和  $\langle d \rangle_{T_i}$ ,  $N_{c, T_i}$  分别表示双温注入和单温  $T_i$  ( $i = 1, 2$ ) 注入条件下的团簇平均直径、团簇数量; 参数  $\alpha$  满足  $0 < \alpha < 1$ . (8a), (8b) 两式具有完全相似的形式, 这是由  $N_c \langle d \rangle^3 \propto t$  的粒子注入条件决定的. 参数  $\alpha$  定量刻画了低温预注入抑制团簇生长效应的强弱.  $\alpha$  值越接近于1, 表明低温预注入的效应越强, 系统中团簇生长行为越接近于整个过程均为低温的情况.

参数  $\alpha$  与预注入温度  $T_1$  的关系密切, 本文在固定  $T_2/T_1 = 1.44$  的情况下,  $\alpha$  和  $T_1$  之间的关系

如图8所示. 文献[6, 7]对应的参数  $\alpha$  值在0.67和0.78之间, 按照图8可估计对应的模型温度参数  $k_B T_1/J$  值在0.32和0.36之间.

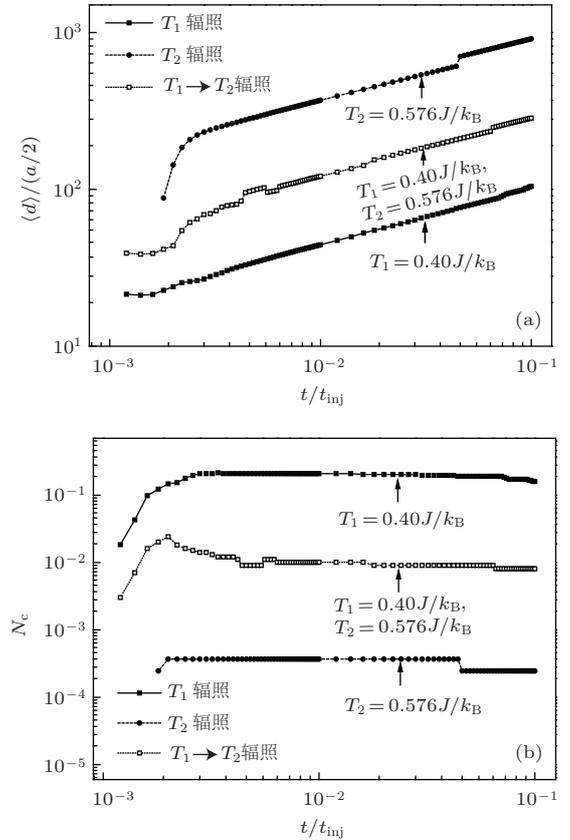


图7 当  $T_1 = 0.40 J/k_B$ ,  $T_2 = 0.576 J/k_B$  时, 3种不同注入温度模式下, 平均团簇直径  $\langle d \rangle$  和团簇数量  $N_c$  随时间  $t$  的变化关系 (a)  $\langle d \rangle$  随  $t$  的变化; (b)  $N_c$  随  $t$  的变化

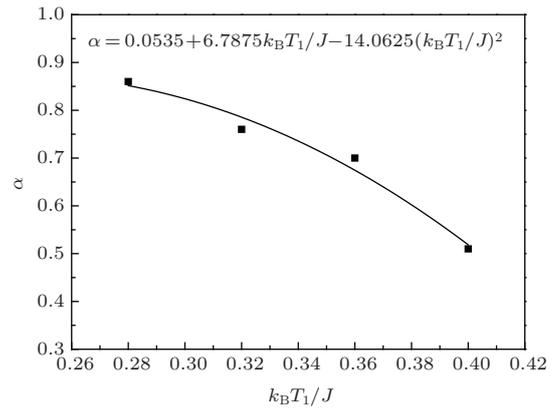


图8  $\alpha(T_1)$  及其二次拟合曲线

低温预注入抑制团簇生长的原理可以用团簇的成核性质解释. 系统中的团簇数量在成核阶段就基本确定, 在后续演化过程中变化缓慢; 团簇成核行为敏感地依赖于温度, 温度越低则成核数量越多, 温度越高则成核数量越少. 因此, 低温预注入

在材料中产生了更多数量的团簇核, 其数量在后续过程中得以基本保持, 而较多的团簇数量对应于较小的平均团簇尺寸.

在数值模拟中可以清楚看到, 团簇生长主要靠吸收周围的游离粒子完成. 一旦团簇核形成以后, 周围新增的粒子会以很大的概率附着在团簇表面使之进一步长大, 此时团簇周围形成新核的概率非常低, 因此团簇数量在成核阶段就基本确定了, 后续变化很小(图9). 实际上, 在本文整个模拟过程中, 我们基本没有看到团簇由于迁移而相遇合并的事例<sup>[18]</sup>, 可见对于本文模型而言, 团簇依靠新增粒子附着而生长的机理远远强于迁移-合并生长机理.

本文模型忽略了辐照缺陷对氦原子行为的影响. 不过从计算结果与实验现象符合的情况来看, 辐照缺陷对氦原子行为的影响可能是一种平均场的效果, 没有从本质上改变本文模型所反映的氦原

子迁移、聚集行为及其随温度的变化规律.

本文模拟中预注入剂量比例为2%, 高于实验值(0.2%), 这一数值上的人为放大是模拟计算的需要, 模拟结果不会因此有本质改变, 但定量上会有少量变化. 只要低温预注入剂量不是太小, 其抑制氦泡生长的效应都应该是明显的. 是否存在一个预注入剂量阈值, 在该阈值以下预注入的抑制生长效应不显现. 这还有待进一步研究.

本文简化模型适用于描述辐照缺陷易于回复的材料中氦泡成核、生长过程及随辐照参数的变化规律. 模拟结果表明, 氦离子低温预辐照具有抑制氦泡生长的显著作用, 这具有一定的普适性, 不仅仅适用于不锈钢材料, 也可以适用于其他抗辐照材料. 氦离子低温预辐照方法非常简单, 却能有效地抑制氦离子高温辐照阶段材料中的氦泡生长, 因此在反应堆抗辐照结构材料研制中有可能发挥重要的作用.

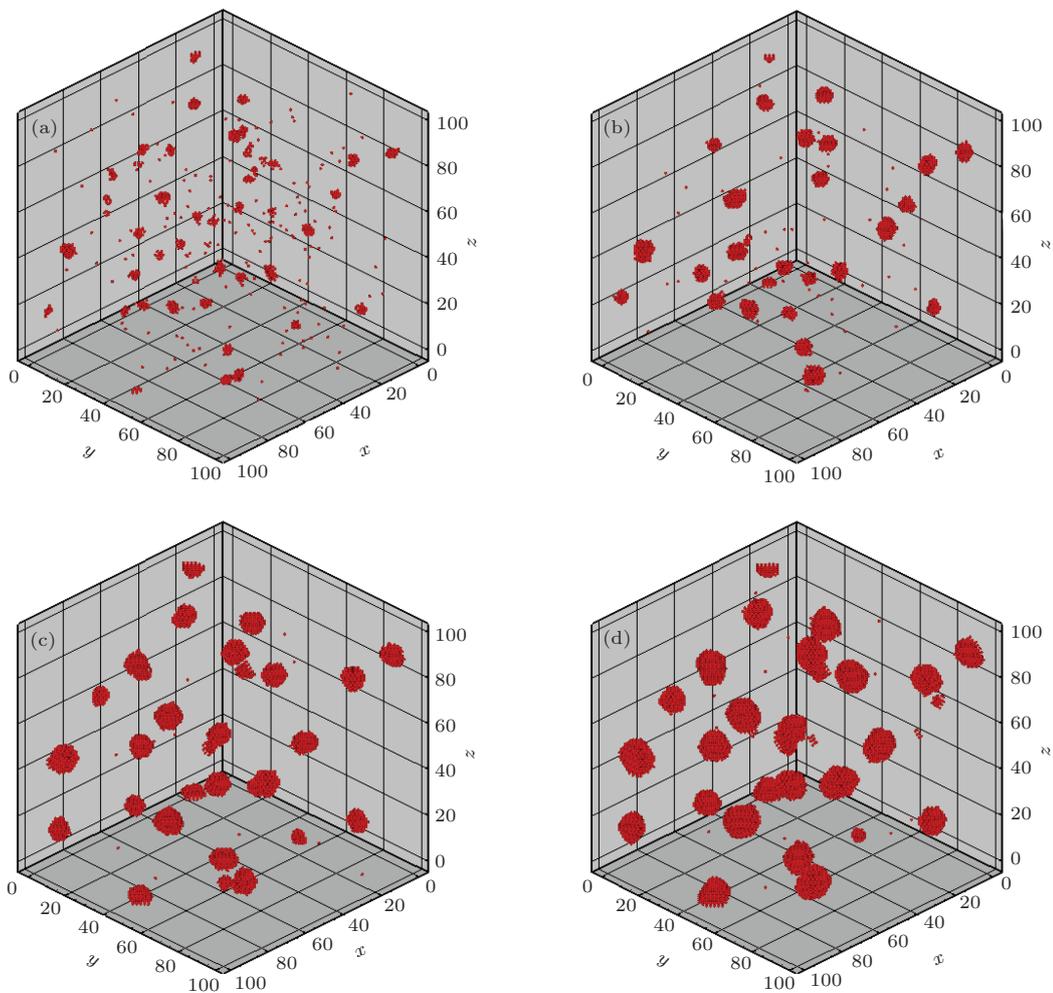


图9  $T_1 \rightarrow T_2$  双温粒子注入的高温段 ( $t/t_{inj} \geq 2 \times 10^{-3}$ ) 团簇构型  $T_1 = 0.32 J/k_B$ ,  $T_2 = 0.461 J/k_B$   
 (a)  $t/t_{inj} = 0.002$ ; (b)  $t/t_{inj} = 0.004$ ; (c)  $t/t_{inj} = 0.01$ ; (d)  $t/t_{inj} = 0.02$

## 5 结 论

通过对三维格子气模型的 Monte Carlo 模拟, 本文解释了较低温度下低剂量的氦离子预注入能显著抑制较高温度氦注入时的氦泡生长的有趣实验现象. 这是由于低温预注入能形成较高数密度的氦泡核, 而氦泡数密度在后续阶段变化很小, 从而有效降低了相同演化时间的氦泡尺寸, 明显抑制了高温阶段的氦泡生长.

## 参考文献

- [1] Ullmaier H 1983 *Radiat. Eff.* **78** 1
- [2] Mansur L K, Rowcliffe A F, Nanstad R K, Zinkle S J, Corwin W R, Stoller R E 2004 *J. Nucl. Mater.* **329–333** 166
- [3] Zhang C H, Yang Y T, Song Y, Jang J S, Sun Y M, Jin Y F, Li B S 2009 *Nucl. Phys. Rev.* **26** 48 (in Chinese) [张崇宏, 杨义涛, 宋银, Jang J S, 孙友梅, 金运范, 李炳生 2009 原子核物理评论 **26** 48]
- [4] Farrell K, Maziasz P J, Lee E H, Mansur L K 1983 *Radiat. Eff.* **78** 277
- [5] Maloy S A 2005 *J. Nucl. Mater.* **343** 367
- [6] Zhang C H, Chen K Q, Wang Y S, Sun J G 1998 *J. Nucl. Mater.* **258–263** 1623
- [7] Zhang C H, Chen K Q, Wang Y S, Sun J G 1998 *Nucl. Instrum. Meth. B* **135** 256
- [8] Miyamoto M, Ono K, Arakawa K, Birtcher R C 2007 *J. Nucl. Mater.* **367–370** 350
- [9] Ou X, Kogler R, Zhou H B, Anwand W, Grenzer J, Hubner R, Voelskow M 2012 *Phys. Rev. B* **86** 224103
- [10] Gao H, Wang H Y, Yuan Y G 2012 *Rare Metals* **31** 290
- [11] He X F, Yang W, Fan S 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 8657 (in Chinese) [贺新福, 杨文, 樊胜 2009 物理学报 **58** 8657]
- [12] Zhu Y, Li B H, Xie G F 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 046103 (in Chinese) [朱勇, 李宝华, 谢国锋 2012 物理学报 **61** 046103]
- [13] Wang Y S, Chen K Q, Zhang C H, Quan J M, Sun J G, Zhao Z Y 1996 *Nucl. Tech.* **19** 5 (in Chinese) [王引书, 陈克勤, 张崇宏, 权晶明, 孙继光, 赵卓雍 1996 核技术 **19** 5]
- [14] Zheng H, Shen L, Bai B 2009 *Acta Phys. Chim. Sin.* **25** 2531 (in Chinese) [郑晖, 申亮, 白彬 2009 物理化学学报 **25** 2531]
- [15] Zheng H, Shen L, Bai B, Sun B 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 016104 (in Chinese) [郑晖, 申亮, 白彬, 孙博 2012 物理学报 **61** 016104]
- [16] Zheng H, Zhang C H, Sun B, Yang Y T, Bai B, Song Y, Lai X C 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 156401 (in Chinese) [郑晖, 张崇宏, 孙博, 杨义涛, 白彬, 宋银, 赖新春 2013 物理学报 **62** 156401]
- [17] Landau D P, Binder K 2005 *A Guide to Monte Carlo Simulation in Statistical Physics* (New York: Cambridge University Press) p1
- [18] Goodhew P J, Tyler S K 1981 *Proc. Roy. Soc. London A* **377** 151

# Inhibition effect of low-temperature pre-irradiation of helium ions on the growth of helium bubble in stainless steel: a Monte Carlo simulation\*

Zheng Hui<sup>1)†</sup> Zhang Chong-Hong<sup>2)</sup> Chen Bo<sup>3)</sup> Yang Yi-Tao<sup>2)</sup> Lai Xin-Chun<sup>4)</sup>

1) (*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100094, China*)

2) (*Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730000, China*)

3) (*Institute of Nuclear Physics and Chemistry, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China*)

4) (*State Key Laboratory for Surface Physics and Chemistry, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621907, China*)

( Received 30 September 2013; revised manuscript received 28 January 2014 )

## Abstract

Zhang Chong-Hong group has found that pre-irradiation of helium ions at low temperature with very low dose could effectively suppress helium bubble growth in materials. This experimental result lacks theoretical explanation. In this paper, we use Monte Carlo simulation to study the effects of different temperature modes on helium bubbles based on a three-dimensional lattice gas model under continued particle injection, and find that the phenomenon that pre-irradiation of helium atoms at low temperature can suppress the helium bubble growth occurs in simulation results as it does in the experiments. The reason is that small helium bubbles with high number density are produced by pre-irradiation at low temperature, and the high number density of bubbles controls the increase of sizes of helium bubbles.

**Keywords:** pre-irradiation, helium bubble growth, inhibition effect, Monte Carlo simulation

**PACS:** 61.80.-x, 64.60.qe, 81.40.Wx

**DOI:** [10.7498/aps.63.106102](https://doi.org/10.7498/aps.63.106102)

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10575124), the National Magnetic Confinement Fusion Program of China (Grant No. 2011GB108003), the Science and Technology Development Foundation of China Academy of Engineering Physics, China (Grant Nos. 2009A0301019, 9090902), and the Foundation for the Key Laboratory of Neutron Physics of China Academy of Engineering Physics (Grant No. 2012AB02).

† Corresponding author. E-mail: [zheng\\_hui@iapcm.ac.cn](mailto:zheng_hui@iapcm.ac.cn)