
势函数短程和长程部分对钨中级联损伤影响的分子动力学 模拟研究*

许波 李敏 付宝勤 崔节超[†] 侯氢[‡]

(四川大学原子核科学技术研究所, 辐射物理及技术教育部重点实验室, 成都
610064)

摘 要

核材料在服役环境中遭受高能中子辐照产生的初级损伤, 是导致材料宏观性能退化的重要原因。分子动力学是研究这一微观动力学过程的重要手段, 但其模拟结果强烈依赖于采用的相互作用势。当前, 势函数短程和长程部分对级联损伤缺陷演化的影响规律尚不明确。本研究采用分子动力学方法, 系统研究了势函数短程部分分别连接 Ziegler-Biersack-Littmark、Moliere 和 Krc 三种屏蔽库伦势后对体心立方金属钨中级联损伤演化过程的影响。研究结果表明, 势函数短程部分较“硬”时, 可增大热峰缺陷数目, 同时抑制了子级联的产生, 从而显著促进了大尺寸缺陷团簇和位错环的形成。此外, 修改势函数长程部分的模拟则发现势函数长程部分主要影响大尺寸缺陷团簇和位错环的产生, 但对缺陷数目的影响有限。

关键词: 钨, 分子动力学, 级联损伤, 相互作用势函数

PACS: 02.70.Ns, 61.80.Az, 61.72.J-, 34.20.Cf

基金: 国家自然科学基金(批准号: 11775151, 12105194)和四川省自然科学基金(批准号: 2026NSFSC0017, 2022NSFSC1265, 2022NSFSC1251)资助的课题。

[†] 通讯作者. E-mail: jiechaocui@scu.edu.cn

[‡] 通讯作者. E-mail: qhou@scu.edu.cn

第一作者. E-mail: 15870066362@163.com

1 引言

在反应堆环境下，核材料长期遭受高能中子的轰击^[1-6]。当中子进入材料内部后，会将部分能量转移给晶格原子，这些获得能量的晶格原子若发生离位，则成为初始反冲原子(Primary knock-on atom, PKA)。高能 PKA 会在晶体内部诱发一系列碰撞过程，这一过程被称为级联碰撞(Collision cascade)。级联碰撞首先会在短时间内经历弹道阶段与热峰阶段，在此过程中产生大量间隙原子(Self-interstitial atoms, SIAs)和空位(Vacancies)，即弗兰克尔对(Frenkel pairs, FPs)；之后在淬火阶段，绝大部分 FPs 复合，最终残留稳定的缺陷构型，从而形成初级辐照损伤^[7-8]。在热扩散及连续辐照共同作用下，经过长时间演化，材料内部会形成复杂缺陷类型，最终影响材料的宏观物理性能(如硬化、脆化、肿胀等)，缩短材料的服役寿命^[9-11]。尽管现有研究在微观层面的复杂损伤机制以及宏观长时间尺度的损伤演化模型构建上取得了显著进展^[12-17]，但这些研究的准确性高度依赖于对初级辐照损伤阶段的精确描述。其中，初级辐照损伤产生的缺陷数目与形态，直接影响材料辐照劣化的最终趋势。因此，金属材料中初级辐照损伤问题近几十年间受到核材料领域的广泛关注。

级联碰撞引发的初级辐照损伤过程仅持续皮秒量级，现有实验手段难以对其进行直接观测与精确表征。分子动力学(Molecular Dynamics, MD)方法因其模拟的时空尺度与级联损伤过程相契合，且可以从原子尺度细致追踪缺陷形成演化的动力学轨迹，已成为探究核材料辐照损伤机制的重要手段^[18-19]。MD 计算结果的准确性高度依赖于所选用的原子间相互作用势。在辐照损伤的 MD 模拟中，势函数需要在极宽的原子间距范围内确保能量描述的精确性。具体而言，在级联碰撞的弹道阶段，原子间间距可能极小，此时会存在强烈的库伦排斥作用，这直接决

定了级联碰撞中的能量传递效率与初始位移路径。然而，常规势函数通常基于近平衡态区域数据拟合获得，难以准确再现这一高能非平衡过程。因此，常采用 Ziegler-Biersack-Littmark potential(ZBL) 势^[20]等屏蔽库伦势 (Screened Coulomb Potential, SCP)来描述短程排斥相互作用，并通过过渡项实现其与原有势函数的光滑连接。当然，级联损伤过程中绝大部分原子仍处于平衡态附近，因此势函数的近平衡态区域与长程部分的描述同样影响级联损伤过程。其中，近平衡态区域的拟合精度决定了晶格常数及弹性模量等基础材料性质，是维持晶体结构稳定性的基石；而长程部分虽对总能量贡献较小，却也影响着缺陷间的长程弹性相互作用^[21]。因此，若要利用 MD 精确、高效地模拟辐照损伤行为，需要系统剖析势函数的短程部分、过渡项、近平衡态区域以及长程部分各自对级联损伤演化过程的影响机制及其敏感性。

现有研究表明，势函数近平衡态区间及其与屏蔽库伦势的过渡项的描述，显著影响级联碰撞动力学过程与最终辐照损伤程度。首先，过渡项的硬度直接影响级联的空间分布特征与存活缺陷数量。例如，Setyawan 等人^[22-23]研究钨等金属中的级联损伤时发现，过渡项的描述差异会显著改变离位阈能 (Threshold Displacement Energy, TDE)，进而决定级联形态是否向多子级联(Subcascade)分裂。此外，Sand 等人^[24]针对钨的模拟工作进一步证实，若过渡区势场偏“软”，反冲原子穿透深度将增加，导致热峰密度降低并抑制缺陷复合，使得最终存活的 FPs 数量可达“硬”过渡项时的 2 倍。其次，近平衡态区域的势函数形态决定了能量的耗散路径与缺陷成团行为。级联损伤中，原子运动时与近平衡晶格原子的相互作用主导了热峰冷却过程。因此，不同势函数势能面在近平衡态区域的细微差异，直接影响了点缺陷的空间聚集方式，从而决定了最终缺陷团簇的形成比例与尺寸分

布特征^[25-26]。尽管现有文献探讨了不同势函数及 ZBL 势与原有势函数的过渡项对模拟结果的影响,但目前针对势函数短程部分与长程部分如何具体影响级联过程的系统性分析仍然匮乏。这限制了对辐照损伤微观机制和缺陷演化动力学行为的深入理解。

针对上述问题,本研究聚焦于体心立方(Body-centered cubic, BCC)结构金属钨。以钨为研究对象,是因为钨凭借其优异的高温强度与热稳定性、强抗等离子体侵蚀能力及高导热率等特性,被确定为未来聚变反应堆面向等离子体首选材料^[27]。在服役过程中,钨将不可避免地遭受高能中子的轰击,在材料内部引发剧烈的级联碰撞,并产生大量初级辐照损伤。为了使 MD 准确模拟这一微观损伤过程,深入探究势函数的短程部分与长程部分如何影响级联碰撞过程至关重要。因此,本研究一方面在势函数的短程部分分别引入 ZBL、Molier^[28]和 Krc^[29]三种典型屏蔽库伦势,系统对比其对级联动态过程及最终稳定缺陷的影响;另一方面,在势函数的长程部分引入切换函数,以改变长程部分的变化趋势,利用修改后的势函数模拟钨中级联损伤过程,从而探究该区域如何影响损伤过程中缺陷的产生和演化。本文余下内容安排如下:第二部分详细介绍势函数短程部分与屏蔽库伦势的光滑连接方法、采用切换函数调控势函数长程部分的具体策略,以及本研究所采用的 MD 模拟程序与级联损伤模拟的具体参数设置;第三部分首先分析势函数长程部分改变后对钨平衡态热力学性质的影响,在此基础上,从级联损伤缺陷数目随时间的演化规律、子级联产生特征、残存缺陷数量、缺陷团簇尺寸分布及位错环形成等方面,系统阐述势函数短程与长程部分对级联损伤的调控机制;最后,第四部分归纳总结本研究的主要结论。

2 模拟方法

2.1 相互作用势

Embedded Atom Method (EAM)势与 Finnis-Sinclair (FS)势是金属体系 MD 模拟中应用广泛的两类多体势。两类势函数的物理机理虽存在差异，但其数学形式具有显著的共性，可统一表示为如下形式：

$$E_{total} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} V(r_{ij}) + F_i(\rho_i) \right] \quad (1)$$

其中， E_{total} 为包含 N 个原子体系的总势能； $V(r_{ij})$ 为原子 i 与 j 之间的对势，与两原子间距 r_{ij} 相关； $F_i(\rho_i)$ 为多体能量项，其物理形式随势模型具体定义，且均为原子 i 周围局域电子密度 ρ_i 的函数。

为描述钨原子间的相互作用，本文选取两种不同的原子间势函数。第一种是 Ackland 和 Thetford 构建的 FS 型钨原子相互作用势，下文简称 AT 势^[30]。这一势函数因其在处理高能非平衡过程中的优异稳定性，常被用于模拟金属钨中级联碰撞与缺陷演化行为^[31]。第二种为 Mason 及 Nguyen-Manh 等人开发的 EAM 型钨原子相互作用势^[32]，下文简称 MN 势。该势函数能够精准复现空位团簇结合能等热力学参数^[33]。

为探讨势函数短程部分对 MD 模拟钨中级联损伤过程的影响，本研究在原 AT 势与 MN 势的对势短程部分，分别引入 ZBL、Moliere 和 Krc 三种典型屏蔽库伦势。新对势 V_M^S 构建的关键，在于实现屏蔽库伦势 V_{SCP} 与原势函数对势部分 V 的平滑过渡，本研究采用如下形式连接：

$$V_M^S(r_{ij}) = \lambda(r_{ij}) V(r_{ij}) + [1 - \lambda(r_{ij})] V_{SCP}(r_{ij}) \quad (2)$$

其中， $\lambda(r_{ij})$ 决定了屏蔽库伦势 V_{SCP} 与原势函数对势部分 V 在新对势 V_M^S 中的占比，具体由下式确定：

$$\lambda(r_{ij}) = \begin{cases} 0, & r_{ij} \leq R_0 \\ C_1 + C_2 r_{ij} + C_3 r_{ij}^2 + C_4 r_{ij}^3, & R_0 < r_{ij} < R_1 \\ 1, & r_{ij} \geq R_1 \end{cases} \quad (3)$$

式中， R_0 和 R_1 为过渡项的两个连接点($R_0 < R_1$)； C_1 ， C_2 ， C_3 和 C_4 为拟合参数，其具体表达式如下：

$$C_1 = \frac{R_0^2(R_0 - 3R_1)}{(R_0 - R_1)^3} \quad (4)$$

$$C_2 = \frac{6R_0R_1}{(R_0 - R_1)^3} \quad (5)$$

$$C_3 = \frac{-3(R_0 + R_1)}{(R_0 - R_1)^3} \quad (6)$$

$$C_4 = \frac{2}{(R_0 - R_1)^3} \quad (7)$$

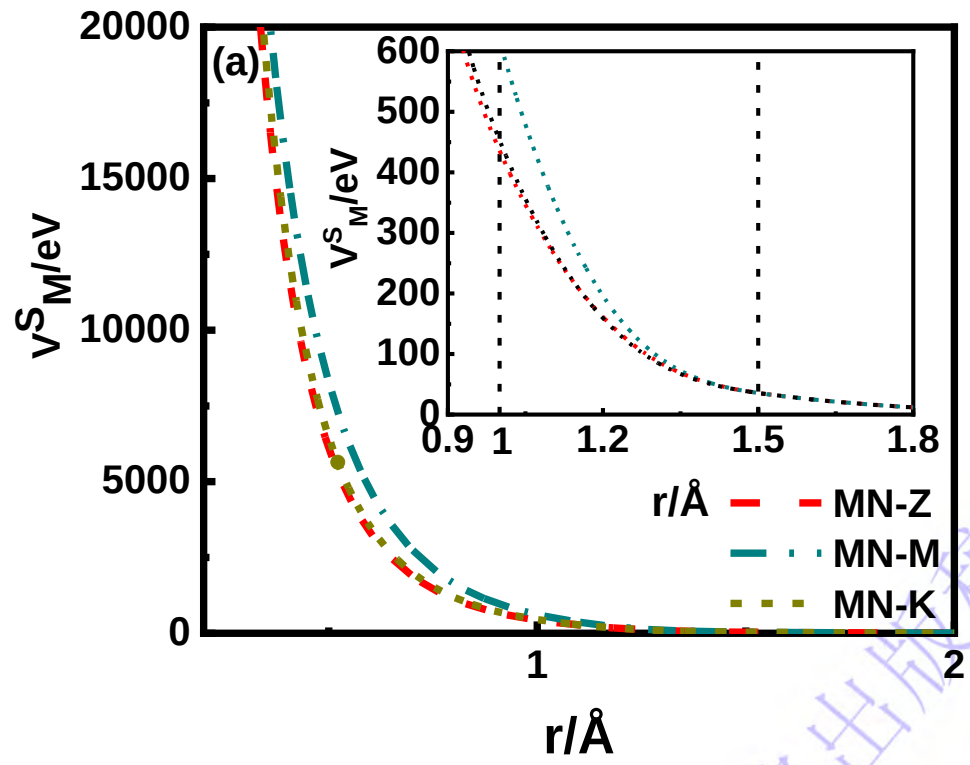
基于上述连接策略，本研究将 AT 势与 MN 势分别与 ZBL、Moliere 及 Krc 三种屏蔽库伦势组合，共构建出六种混合势函数，分别记为 AT-Z 势、AT-M 势、AT-K 势、MN-Z 势、MN-M 势以及 MN-K 势，用以后续级联碰撞演化的对比分析。由于 AT 势与 MN 势在对势部分的函数形态存在明显差异，本研究针对两种势函数分别设置了不同的过渡项连接点(R_0 和 R_1)。如表 1 所示，对于 AT 势，将原子间距 $r < 0.8 \text{ \AA}$ 设为屏蔽库伦势区间， $0.8 \text{ \AA} \leq r \leq 1.05 \text{ \AA}$ 为平滑过渡区间；对于 MN 势，则将屏蔽库伦势主导区间扩展至 $r < 1 \text{ \AA}$ ，过渡项区间设定为 $1 \text{ \AA} \leq r \leq 1.5 \text{ \AA}$ 。图 1 直观展示了拼接完成后的完整对势曲线。从图中可以清晰看出，不同短程排斥势在小原子间距下表现出明显的硬度差异，且各混合势均能在过渡区间内平滑地向近平衡态区域的原势函数形态过渡。

表 1 AT 势和 MN 势同屏蔽库伦势连接的参数设置： a_0 为钨的晶格常数， R_{cut} 是势函数的截断半径

Table 1. Parameters for connecting the AT potential and MN potential with the screened Coulomb potential. a_0 is the lattice constant of tungsten, and R_{cut} is the cutoff radius of the potential function.

AT	MN
----	----

$a_0(\text{\AA})$	3.1652	3.1652
$R_{cut}(\text{\AA})$	3.2496	4.4024
$R_0(\text{\AA})$	0.8	1
$R_1(\text{\AA})$	1.05	1.5



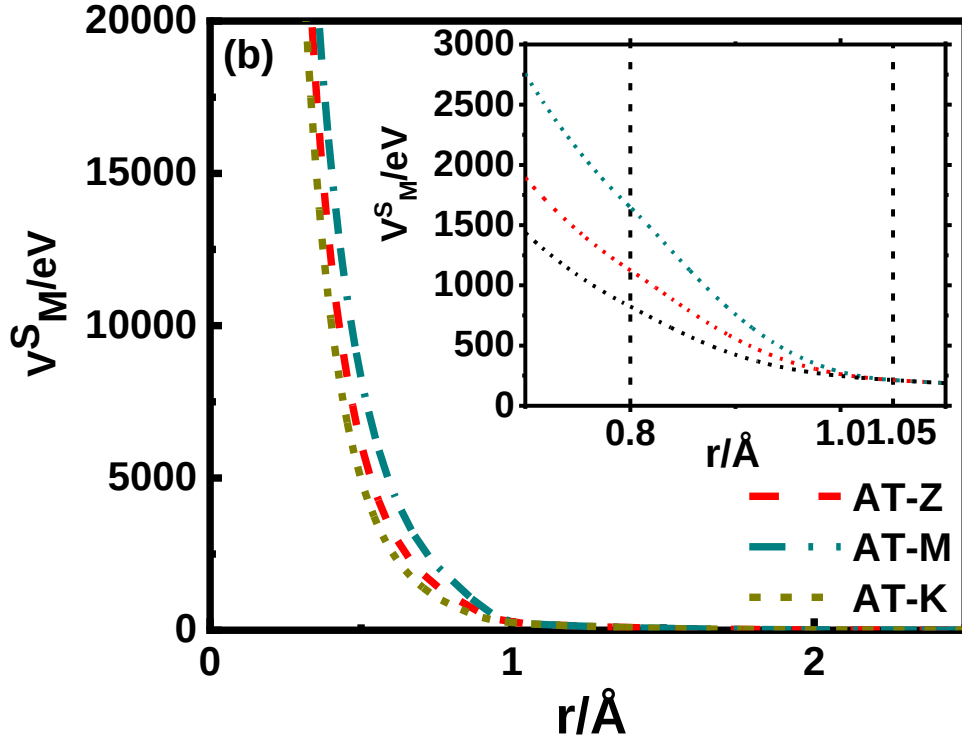


图 1 原势函数对势部分连接屏蔽库伦势构建的混合势：(a) 基于 MN 势构建的混合势；(b) 基于 AT 势构建的混合势

Fig. 1 Hybrid potentials constructed by joining screened Coulomb potentials with the original pair potentials: (a) the MN-based hybrid potentials; (b) the AT-based hybrid potentials.

此外，为了系统探究势函数的长程尾部形态对级联损伤演化过程的影响，本研究引入一个随原子间距变化的切换函数 F_c ，用来修改势函数的对势长程部分，具体表达式如下：

$$V_M^L(r_{ij}) = V_M^S(r_{ij}) F_c(r_{ij}) \quad (8)$$

其中， V_M^L 为长程部分修改后的对势。切换函数 F_c 可实现势函数在指定区间内的平滑过渡，既能完全保留势函数在短程和近平衡态区域的原有特征，又可定向修饰其长程部分，具体形式由下式确定：

$$F_c(r_{ij}) = \begin{cases} 1, & r_{ij} \leq R_m \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sin \left[\frac{\pi}{2} \cdot \frac{2r_{ij} - R_{cut} - R_m}{R_{cut} - R_m} \right], & R_m < r_{ij} < R_{cut} \\ 0, & r_{ij} \geq R_{cut} \end{cases} \quad (9)$$

其中， R_{cut} 是势函数截断半径， R_m 为势函数开始改变的距离。

由表 1 可知，AT 势的截断半径约为 3.25 Å，恰好介于第二与第三近邻原子间距之间，无法研究第三近邻原子对级联损伤的影响；相应地，MN 势的截断半径约为 4.40 Å，能够完整涵盖第三近邻原子的作用。因此，本研究选择 MN-Z 势作为基础框架，在其之上引入切换函数以修饰长程尾部形态。

为了对比分析不同长程区间的影响，本研究设定了两个 R_m 值，分别为 3 Å 和 3.4 Å。其中 3 Å 位于第一近邻和第二近邻原子间距之间，而 3.4 Å 位于第二近邻和第三近邻原子间距之间。经相应修改后的势函数分别命名为 MN-Z30 势和 MN-Z34 势。图 2 展示了势函数长程部分引入切换函数的修改结果。从图中可以直观观察到，在原子间距小于 3.0 Å 的区域，MN-Z30 势、MN-Z34 势与原有势函数 MN-Z 势的曲线完全重合；当间距达到 3.0 Å 时，MN-Z30 势的曲线率先向上偏离原始 MN-Z 曲线；当间距达到 3.4 Å 时，MN-Z34 势的曲线也开始偏离原始曲线；最终，所有曲线均在截断半径处平滑收敛于零。

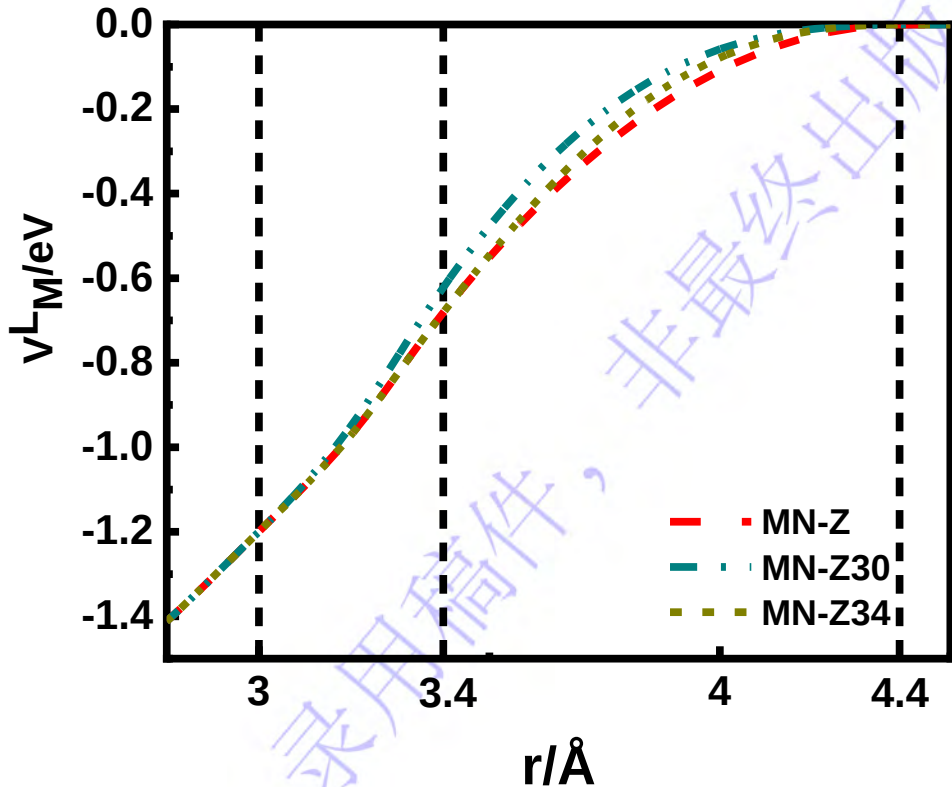


图 2 引入切换函数修改 MN-Z 势长程部分形成的混合势

Fig. 2 Hybrid potentials formed by modifying the long-range part of MN-Z potential with a switching function.

2.2 级联损伤的 MD 模拟设置

本研究所有 MD 模拟均采用基于 GPU 并行计算的分子动力学程序包 MDPSCU 完成^[34]。ITER 等氦氘聚变反应堆环境中，钨作为面向等离子体材料将要受到 14.1 MeV 高能中子辐照，中子通量约为 $10^{15}\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ ，由此产生 PKA 能量最高约为 300 keV。然而，当 PKA 能量超过某一阈值(钨中约为几十至 100 keV)时，钨中单次级联碰撞会分裂为多个空间上相对独立的子级联^[5,22]。因此，为探讨势函数的长程部分和短程部分对子级联产生的影响，本研究选取的 PKA 能量 E_0 分别为 20 keV、50 keV 以及 80 keV。相应地，构建了不同尺寸的 BCC 结构晶胞，其中对于 20 keV 和 50 keV 的级联模拟，晶胞尺寸设为 $70a_0 \times 70a_0 \times 70a_0$ ；对于 80 keV 的级联模拟，将晶胞尺寸扩展至 $100a_0 \times 100a_0 \times 100a_0$ 。在整个模拟过程中，体系在三个方向上均施加周期性边界条件。

在级联模拟开始前，体系首先经热化升温至 500 K，随后在该温度下自由演化，以获得无内应力的热力学平衡态。随后，在模拟体系中心附近随机选取一个钨原子作为 PKA，并赋予其随机方向的初始速度来模拟级联损伤过程。为保证模拟结果的统计可靠性，每种模拟设置均独立运行 30 次。级联演化过程采用自适应变时间步长，同时严格控制所有原子每步最大位移不超过 0.05 Å。此外，为了模拟级联热峰阶段的能量耗散过程，本研究引入电子-声子耦合(Electron-phonon coupling)模型进行温度控制，确保级联过程结束后，模拟体系温度能够恢复到 500 K。

模拟数据的后处理与可视化主要通过 OVITO 软件^[35]来实现。其中，采用 Wigner-Seitz(W-S)^[36]方法识别空位与 SIA；统计缺陷团簇时，将间距小于第三近

邻距离的同类缺陷(空位或 SIA), 判定为同一缺陷团簇。此外, 使用 Dislocation analysis(DXA)方法^[37]进行位错分析。

3 结果与讨论

3.1 势函数长程部分对热力学性质的影响

如前文所述, 级联碰撞过程主要经历弹道、热峰及淬火三个阶段。其中, 材料的熔点对热峰阶段局部熔化区域的范围与持续时间有影响, 而缺陷的形成能和结合能, 则会影响淬火阶段缺陷的产生及其聚集成团。因此, 在开展金属钨中级联损伤过程的 MD 模拟之前, 本研究首先分析了势函数长程作用对平衡态热力学性质的影响。为此, 采用固液两相共存法(Two-phase coexistence method)^[38-39]分别计算了 MN-Z 势、MN-Z30 势及 MN-Z34 势三种势函数下金属钨的熔点。

此外, 通过在完美晶格体系内移除或插入钨原子, 构建了空位型或 SIA 型单点缺陷和缺陷团簇。所有完美和含缺陷体系均经充分结构弛豫, 以达到势能最低的稳定状态。在此基础上, 通过以下公式分别计算各类型缺陷的形成能与结合能:

$$E_v^f(n) = E_{tot}^{v_n} - (N - n)E_{coh} \quad (10)$$

$$E_{v-v_n}^b = E_v^f(1) + E_v^f(n) - E_v^f(n+1) \quad (11)$$

$$E_I^f(n) = E_{tot}^{I_n} - (N + n)E_{coh} \quad (12)$$

$$E_{I-I_n}^b = E_I^f(1) + E_I^f(n) - E_I^f(n+1) \quad (13)$$

式中, E_{coh} 为完美晶格中单个钨原子的内聚能, N 为完美体系的原子总数, n 为引入的缺陷数目, $E_{tot}^{v_n}$ 和 $E_{tot}^{I_n}$ 分别为包含 n 个空位或 SIA 时体系的总能量, E_v^f 和 E_I^f 分别为空位形成能和 SIA 形成能, $E_{v-v_n}^b$ 和 $E_{I-I_n}^b$ 分别为单空位与含 n 个空位的团簇、单 SIA 与包含 n 个 SIA 的团簇之间的结合能。

表 2 给出了 MN-Z 势、MN-Z30 势及 MN-Z34 势三种势函数对应的钨平衡态

热力学性质，并对比了实验值以及密度泛函理论(Density Functional Theory, DFT)计算结果。从表中可以看出，势函数长程部分的改变会影响体系热力学性质。总体而言，势函数长程部分曲线相较于原始势函数上移后(图 2)，体系熔点降低，与实验值更为接近。同时，空位型缺陷的形成能和结合能降低。但是，间隙型缺陷的形成能和结合能增大，且 MN-Z34 势的计算结果与 DFT 值更加接近。此外，势函数修改起始间距 R_m 位于第二至第三近邻之间的 MN-Z34 势，其各项计算结果与原始 MN-Z 势高度接近，甚至在空位型缺陷的形成能和结合能上，与原始势完全一致，表明第三近邻原子作用对空位型缺陷几乎没有影响。与之相对，修改起始间距 R_m 位于第一至第二近邻区间的 MN-Z30 势则表现出明显的数据偏差。尤其在 SIA 相关性上，MN-Z30 势计算得到的 SIA 间结合能($E_{I-I}^b = 2.720$ eV, $E_{I-I_2}^b = 2.914$ eV)显著高于另外两种势函数。同时，MN-Z30 势预测的体系熔点 T_{melt} 由 MN-Z 势的 5130 K 大幅下降至 4100 K。上述结果表明，第二近邻原子作用对间隙型缺陷性质和熔点具有显著影响。这些基础热力学性质的差异，为后续分析势函数对级联损伤演化过程的影响提供了直接的物理依据。

表 2 MN-Z 势、MN-Z30 势及 MN-Z34 势三种势函数计算得到的钨平衡态热力学性质，并与实验测量值以及 DFT 计算结果进行了对比。熔点的误差来源于两相共存法中判定固液相偏移方向而设定的离散温度点

Table 2. Comparison of equilibrium thermodynamic properties of tungsten among MN-Z, MN-Z30, MN-Z34 potentials, experimental values and DFT calculations. The error in the melting point arises from the discrete temperature steps set to determine the moving direction of the solid-liquid interface in the two-phase coexistence method.

	<u>MN-Z</u>	<u>MN-Z30</u>	<u>MN-Z34</u>	<u>实验值</u>	<u>DFT</u>
<u>势函数修改起始间距R_m(Å)</u>		<u>3</u>	<u>3.4</u>		
<u>熔点T_{melt}(K)</u>	<u>5130±30</u>	<u>4100±50</u>	<u>4850±50</u>	<u>3695^[40]</u>	
<u>单空位形成能$E_f^v(1)$(eV)</u>	<u>3.738</u>	<u>3.718</u>	<u>3.738</u>	<u>3.67±0.2^[41]</u>	
				<u>3.77±0.07^[42]</u>	

双空位结合能 $E_{v-v}^b(\text{eV})$	<u>0.163</u>	<u>0.163</u>	<u>0.163</u>	<u>0.048^[43]</u>
单空位与双空位结合能 $E_{v-v_2}^b(\text{eV})$	<u>0.247</u>	<u>0.207</u>	<u>0.247</u>	<u>0.311^[43]</u>
单间隙原子形成能 $E_f^f(1)(\text{eV})$	<u>9.054</u>	<u>10.267</u>	<u>9.478</u>	<u>9.551^[44]</u>
双间隙原子结合能 $E_{L-L}^b(\text{eV})$	<u>2.357</u>	<u>2.720</u>	<u>2.417</u>	<u>2.45^[45]</u>
单间隙与双间隙原子结合能 $E_{L-L_2}^b(\text{eV})$	<u>2.472</u>	<u>2.914</u>	<u>2.572</u>	<u>3.65^[45]</u>

3.2 势函数短程部分对级联损伤演化过程的影响

本文分别采用 AT 势和 MN 势连接屏蔽库伦势构建的混合势 AT-Z 势、AT-M 势、AT-K 势、MN-Z 势、MN-M 势以及 MN-K 势模拟了钨中 PKA 引起的级联损伤过程。

图 3 显示了六种势函数下 30 次级联损伤过程产生的平均 FPs 数目随时间演化情况。从图中可以看出，随着 PKA 能量由 20 keV 增大到 80 keV，所有势函数下级联到达热峰时的时间和 FPs 数目均随之增加。其中，如图 3(a)所示，MN 势函数短程连接屏蔽库伦势获得三个混合势 MN-Z 势、MN-M 势及 MN-K 势中，在 PKA 能量 $E_0=20$ keV、50 keV 及 80 keV 时，MN-M 势均产生最高的缺陷峰值，而 MN-Z 势和 MN-K 势的结果较为接近。从图 3(b)也可以看出，对于基于 AT 势构建的混合势，在 $E_0=80$ keV 时出现了同样的现象。但是能量更低时，不同势函数获得的缺陷峰值之间的差异不大。这是由于势函数修改短程部分时，AT 势与屏蔽库伦势的连接区间为 0.8-1.05 Å，而 MN 势的区间是 1.0-1.5 Å。因而在低能时，不同基于 AT 势修改的混合势其短程部分的差异对级联损伤演化的影响较小。

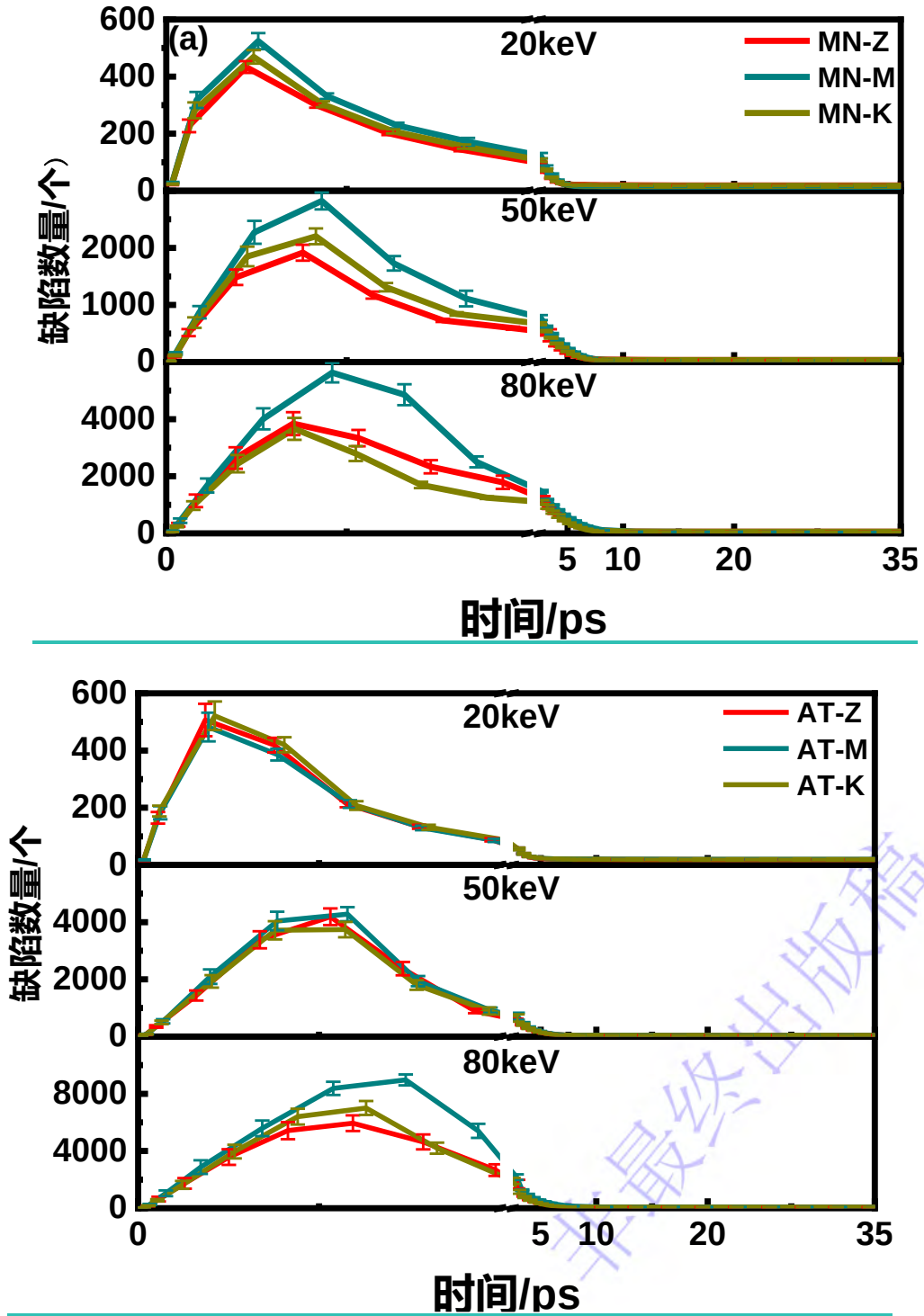


图 3 30 次级联碰撞过程中钨中平均缺陷数量随时间的动态演化，误差棒为 30 次模拟的标准误差。该图对比了不同混合势在 PKA 能量分别为 20 keV、50 keV 和 80 keV 时的演化曲线：(a) 基于 MN 势构建的混合势；(b) 基于 AT 势构建的混合势

Fig. 3 Dynamic evolution of the average number of FPs in tungsten over time during 30 collision cascades. Error bars represent the standard error of 30 independent simulations. The figure compares the evolution curves for different hybrid potentials at PKA energies of 20 keV, 50 keV, and 80 keV: (a) MN-based hybrid potentials; (b) AT-based hybrid potentials.

为探讨势函数短程部分对损伤形态演化的影响，图 4 直观展示了 $E_0 = 80 \text{ keV}$

时, AT 及 MN 系列混合势在弹道阶段、热峰阶段以及稳定阶段的代表性级联形态。从图 4 可以看出, 在弹道阶段高能 PKA 的能量耗散行为表现出对势函数短程部分显著的依赖性。其中, 势函数短程部分采用较“软”的 ZBL 势(MN-Z 势与 AT-Z 势)时, 缺陷分布呈现出显著的拉长与分叉特征。如图 4(b)所示, AT-Z 势的模拟出现子级联。相应地, 采用连接 Moliere 势的混合势(MN-M 势和 AT-M 势)模拟时, PKA 的穿透路程明显减小, 离位原子在极短距离内产生, 形成极其紧凑的球状或块状损伤区, 未出现明显的长程分支结构。随着级联演化至热峰阶段, 上述势函数短程部分对能量沉积的影响被进一步放大。其中, 短程部分采用 Moliere 势的势函数形成了空间分布更为紧凑且连续的单一损伤区, 几乎未观察到级联区域的断裂。这主要由于 Moliere 势下弹道阶段 PKA 能量在局部区域快速沉积, 从而提高了热峰中心的能量密度^[24], 并有效抑制了级联的分裂。相对而言, 势函数短程部分较“软”时, 其能量耗散区域更大, 热峰呈现出明显的空间离散特征。这一特征与 Becquart 等人关于短程相互作用对级联形态影响的结论一致^[25]。弹道阶段和热峰阶段不同势函数产生的损伤形态差异直接影响了后续淬火冷却过程中缺陷的复合和最终稳定阶段缺陷分布形态特征。如图 4 中稳定阶段缺陷分布所示, 尽管体系内缺陷数量因复合而大幅减少, 但不同势函数形成的存留缺陷空间结构差异较大。MN-M 势和 AT-M 势由于前期形成了高度局域化的致密级联热峰, 存留的 SIA 在损伤核心区外围呈现出明显的富集趋势, 从而促进了大尺寸间隙团簇的形成。而在势函数短程部分较“软”时, 存留缺陷更多以小尺寸团簇或孤立缺陷的形式在空间中弥散分布。

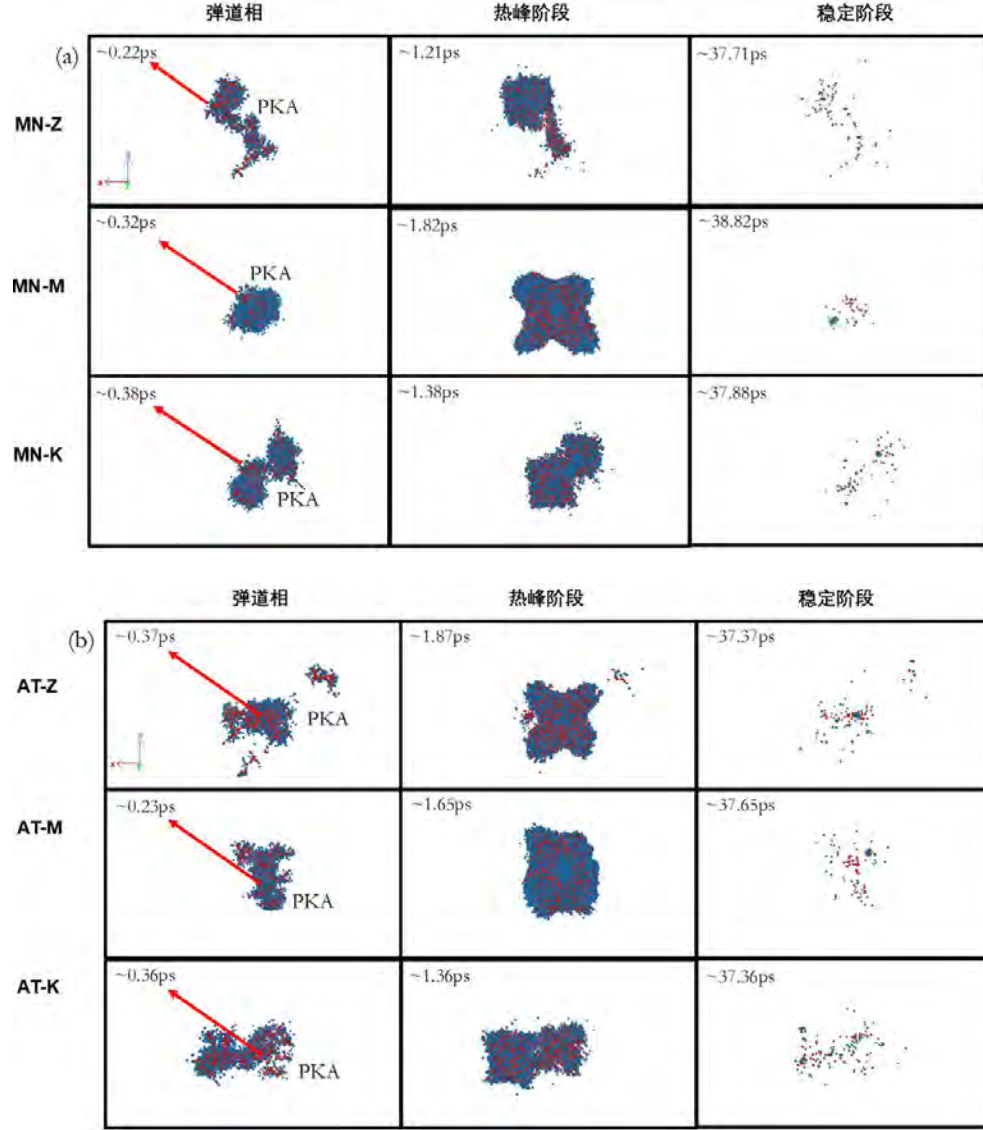


图 4 $E_0 = 80\text{ keV}$ 时，采用不同势函数获得级联碰撞在弹道相与热峰阶段以及稳定阶段的代表性可视化快照：(a) 基于 MN 势构建的混合势；(b) 基于 AT 势构建的混合势。红球代表空位，蓝球代表 SIA

Fig. 4 Representative visualization snapshots of collision cascades in the ballistic phase, thermal spike, and stable state at $E_0 = 80\text{ keV}$ using different potentials: (a) the MN-based hybrid potentials; (b) the AT-based hybrid potentials. Red and blue spheres represent vacancies and SIAs, respectively.

势函数短程部分可能影响子级联的形成。为此，本文统计了不同 PKA 能量下基于 MN 势的混合势和基于 AT 势的混合势产生子级联的占比，并在图 5 中展示。从图 5 可以看出，随着 PKA 能量由 20 keV 提升至 80 keV ，不同势函数下产生子级联的占比均增加。此外，子级联的产生强烈依赖于势函数短程部分的硬度。例如，在图 5(a)的基于 MN 势的混合势中，MN-Z 势在所有能量下均产生最高的

子级联占比(在 $E_0 = 80$ keV 时高达 60%), 而 MN-M 势出现的几率最低(在 $E_0 = 80$ keV 时仅为 43%)。类似地, 在图 5(b)的基于 AT 势的混合势中, 尽管 AT-Z 势与 AT-K 势产生的子级联占比互有高低, 且在 $E_0 = 20$ keV 时, AT-M 势与 AT-Z 势占比持平(均为 30%), 但在更高能量时, AT-M 势下子级联出现的几率依然最低。

上述模拟结果表明, 在势函数短程部分较“硬”时, 极近原子间距下会出现极大的排斥力, 这显著限制了高能反冲原子的长程穿透行为, 从而在热峰阶段塑造了不易破裂的致密单一损伤区。未发生碎裂的致密热峰核心, 是诱发大规模缺陷聚集成团并形成大尺寸位错环的必要条件^[46]。相反, 势函数短程部分较“软”时, 原子间排斥力不足以完全阻断高能反冲原子的长程穿透行为, 允许部分高能原子逃逸出损伤核心区, 在远处诱发碰撞, 形成子级联^[22]。

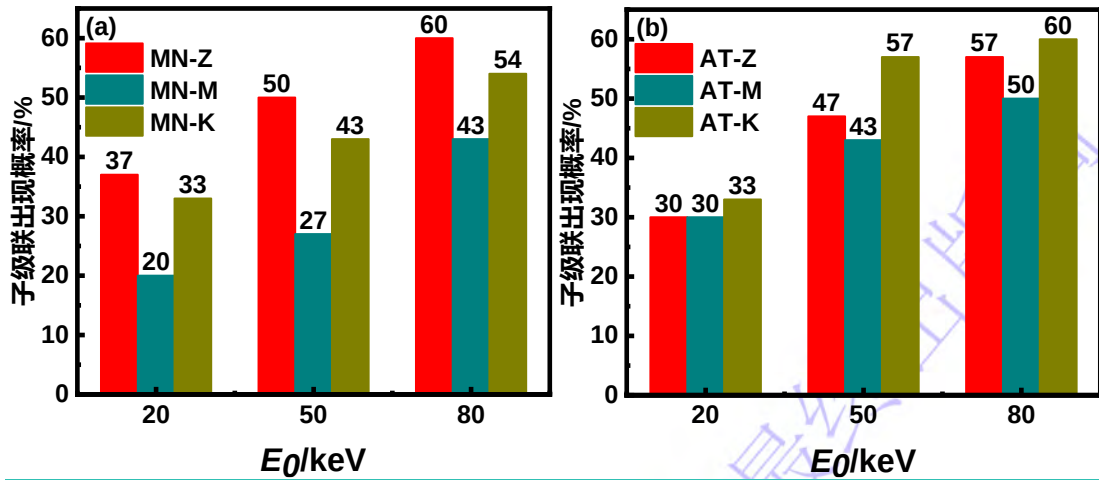


图 5 子级联出现的概率。(a) 基于 MN 势构建的混合势; (b) 基于 AT 势构建的混合势
Fig. 5 Probability of subcascade formation: (a) the MN-based hybrid potentials; (b) the AT-based hybrid potentials.

随着级联进入淬火阶段, 绝大部分空位和 SIA 复合, 直至级联结束时, 仅剩少量 FPs 残留。由于势函数短程部分的硬度影响级联过程中损伤区域空间形态, 这必然会影响级联淬火冷却过程中的缺陷复合。图 6 统计了不同势函数下最终存活缺陷数量。从图 6(a)可以看出, 基于 MN 势构建的混合势, 尽管相同 PKA 能量下, MN-M 势在热峰时产生的 FPs 数量最多, 但最终存活缺陷数量反而是三种

势函数下最少的。这一现象表明，最终的缺陷存活量不仅取决于势函数近平衡态区域，也依赖于势函数短程部分的硬度^[26-27]。但是，由图 6(b)可知，对于基于 AT 势的混合势，情况却完全相反。对于所有 PKA 能量，短程最“硬”的 AT-M 势均获得最大的存活缺陷数目。这种差异是因为 AT 势与屏蔽库伦势的连接区间为 0.8-1.05 Å，而 MN 势的区间是 1.0-1.5 Å。通过连接屏蔽库伦势修改不同势函数的短程部分时，实际上也不可避免地带来了不同过渡项。因而，模拟的结果实际上是势函数短程部分和过渡项共同作用的结果^[47]。同时，从图 6 也可以看到，在所有 PKA 能量下，采用基于 AT 势构建的混合势模拟获得的最终存活缺陷数目明显大于基于 MN 势构建的混合势的模拟结果。这一现象表明，势函数近平衡态区域对最终存活缺陷数目的影响十分显著。

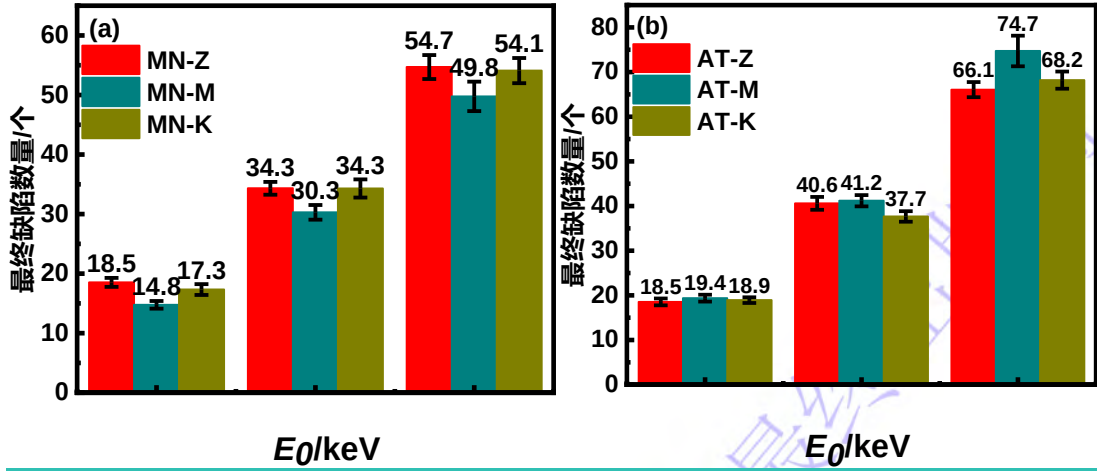


图 6 级联结束存活的 FPs 数量，误差棒为 30 次模拟的标准误差。(a) 基于 MN 势构建的混合势；(b) 基于 AT 势构建的混合势

Fig. 6 Number of surviving FPs at the end of the cascade evolution: (a) the MN-based hybrid potentials; (b) the AT-based hybrid potentials. Error bars represent the standard error of 30 independent simulations.

图 7 展示的是采用不同混合势模拟级联碰撞演化过程时，从热峰到级联结束时缺陷的复合率。尽管在最终存活缺陷数量上，采用基于 MN 势构建的混合势与基于 AT 势构建的混合势的模拟结果存在明显的差异，但从图 7 中可以看到，短程部分采用 Moliere 势(MN-M 势和 AT-M 势)的复合率往往是最高的(除了 AT-M

势在 $E_0 = 20$ keV 时)。这是由于势函数短程部分较“硬”时，其产生的致密热峰将大量空位与 SIA 集中在有限的空间体积内，减少子级联的产生，从而有利于淬火阶段空位和 SIA 的复合。

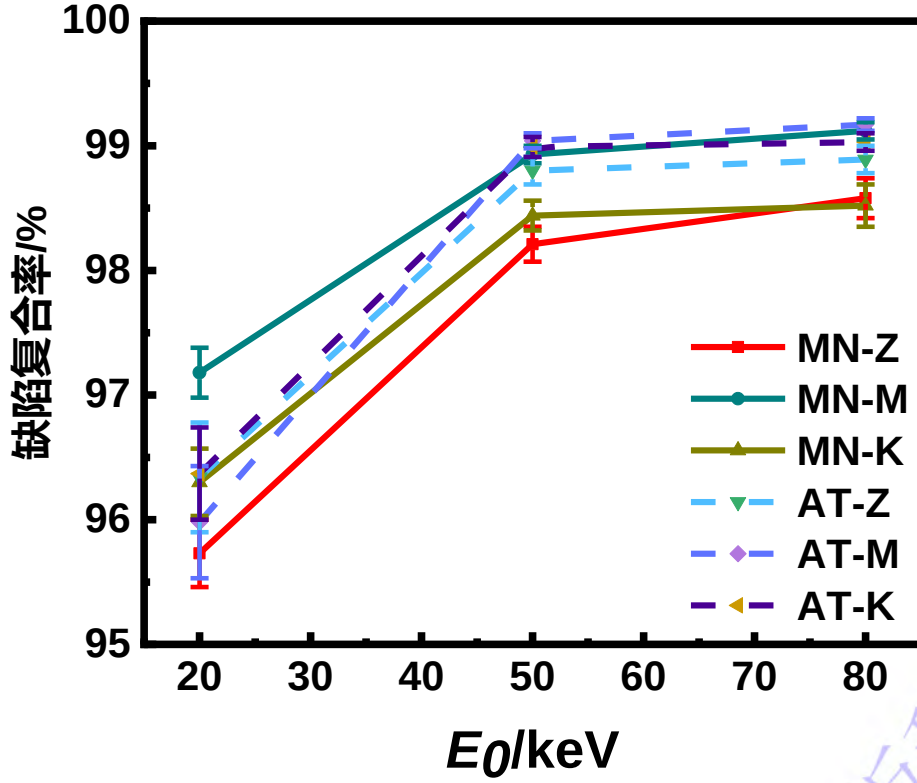


图 7 不同混合势下，缺陷复合率，误差棒为 30 次模拟的标准误差

Fig. 7 Probability of defect recombination under different hybrid potentials. Error bars represent the standard error of 30 independent simulations.

图 8 进一步展示了稳定阶段空位与 SIA 团簇的尺寸分布情况。其中，图 8(a)和(c)分别为基于 MN 势的混合势与基于 AT 势的混合势获得的 SIA 团簇尺寸分布，图 8(b)和(d)则对应空位团簇的尺寸分布。从图 8 可以看到，随着 PKA 能量的升高，所有势函数条件下，空位和 SIA 均倾向于形成更大的缺陷团簇。此外，势函数短程部分同样影响缺陷成团。以 $E_0 = 80$ keV 为例，如图 8(a)与 8(b)所示，MN-M 势产生的单空位和单 SIA 数量显著低于 MN-Z 势和 MN-K 势。然而，相比于另外两种混合势，MN-M 势产生了更大的 SIA 团簇(尺寸>35)和空位团簇(尺寸>12)。从图 8(c)与 8(d)也可以看出，基于 AT 势的混合势出现了类似的现象。

这意味着，势函数短程部分更“硬”时，不仅提高了缺陷的复合率，也促进了存活缺陷的成团。这是由于“硬”的势函数抑制了子级联的产生，因而有利于大尺寸团簇的形成^[48]。

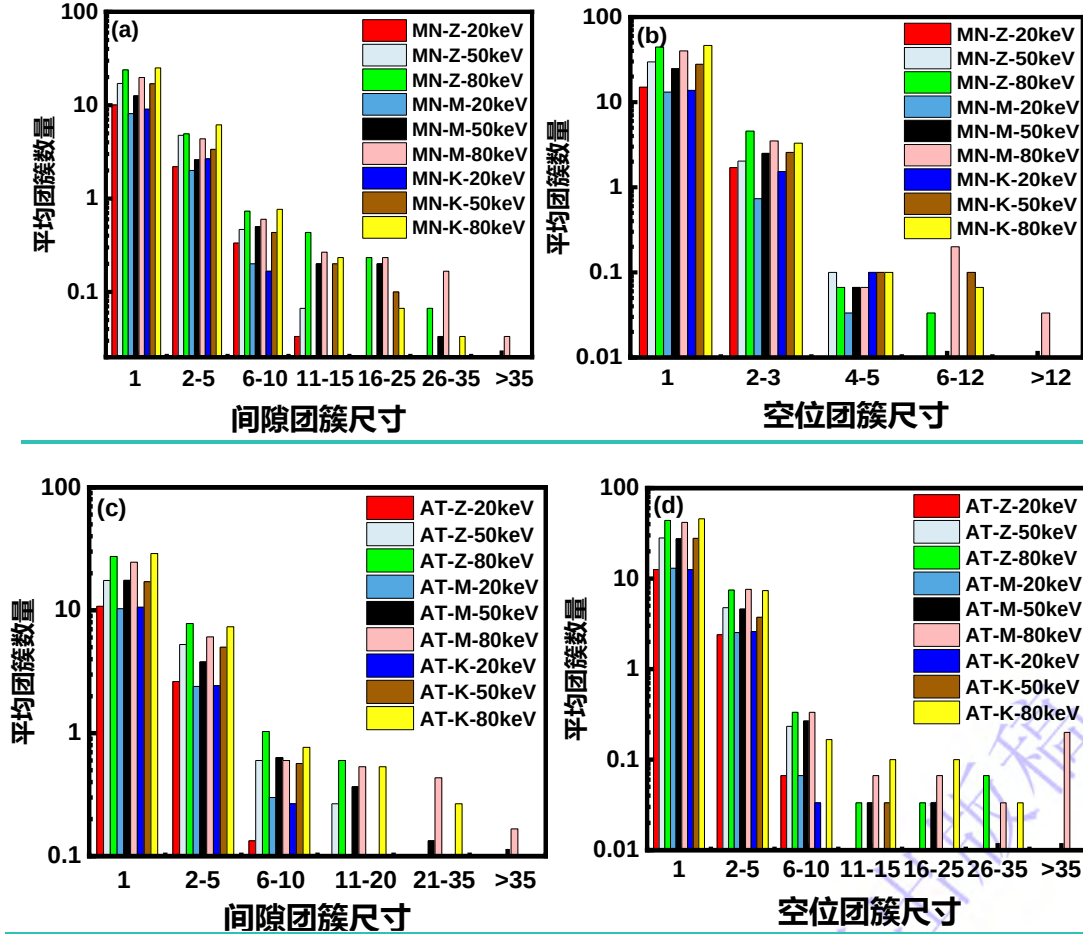


图 8 SIA 和空位的团簇尺寸分布统计。(a)和(b)分别是采用基于 MN 势构建的混合势模拟获得的 SIA 和空位团簇尺寸分布；(c)和(d)分别是采用基于 AT 势构建的混合势获得的 SIA 和空位团簇尺寸分布

Fig. 8 Size distributions of SIA and vacancy clusters. (a) and (b) show the size distributions of SIA and vacancy clusters obtained by simulations with the MN-based hybrid potentials, respectively; (c) and (d) show those with the AT-based hybrid potentials, respectively.

为了探究势函数短程部分对位错环产生的影响，图 9 和图 10 分别统计了 30 次模拟结果得到的总位错环数目和长度。从图中可以看出，对于所有混合势，模拟产生的位错环数量和总长度均随着 PKA 能量的增加而增加。此外， $1/2\langle 111 \rangle$ 型位错环的数量和总长度均明显高于 $\langle 100 \rangle$ 型位错环。在分析势函数短程部分影响时，如图 9(a)和 10(a)所示，短程部分采用 Moliere 势的 MN-M 势在 $E_0 = 50 \text{ keV}$

和 80 keV 下生成的位错环数量和总长度均显著高于较“软”的 MN-Z 势和 MN-K 势。而从图 9(b)和 10(b)可以看出，在 $E_0 = 20$ keV 和 50 keV 时，AT-M 势产生的位错环数量及总长度均未明显超过另外两种混合势；但在 $E_0 = 80$ keV 时，AT-M 势产生了更多的位错环，且位错环总长度更长。由此可见，在势函数短程部分较“硬”时，高能 PKA 可以产生更多的位错环。

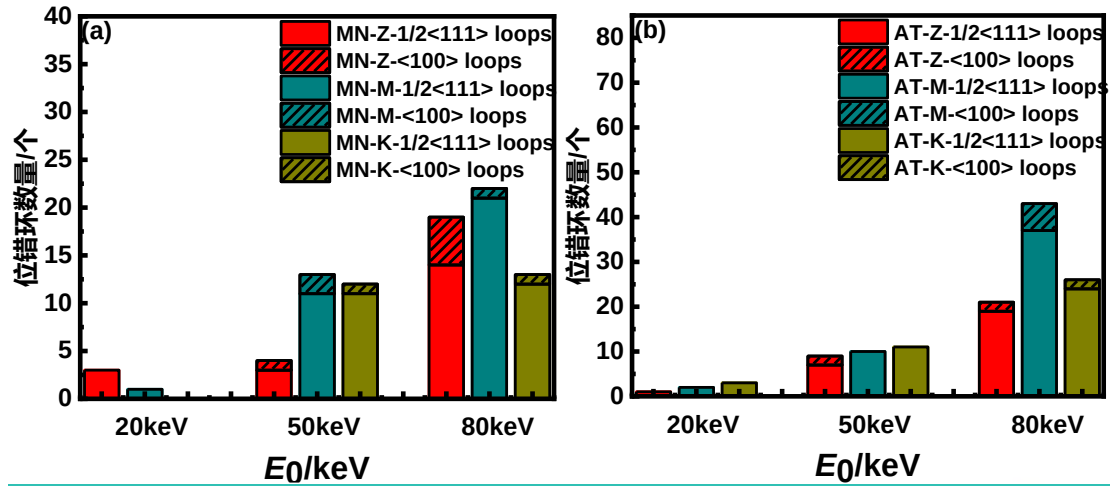


图 9 级联结束时，不同 PKA 能量下，30 次模拟获得的位错环数量：(a) 基于 MN 势构建的混合势；(b) 基于 AT 势构建的混合势

Fig. 9 Number of dislocation loops obtained from 30 simulations at different PKA energies at the end of the cascade evolution: (a) the MN-based hybrid potentials; (b) the AT-based hybrid potentials.

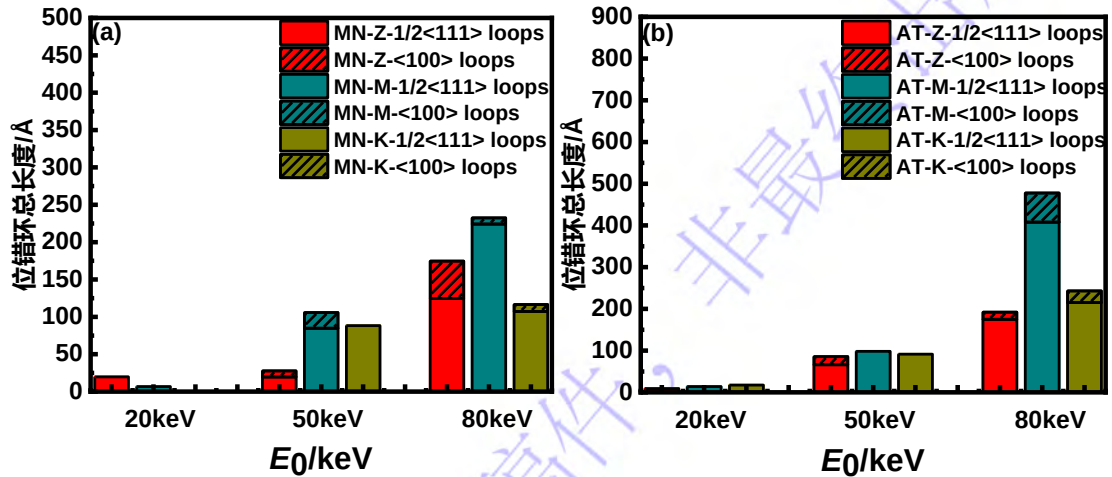


图 10 级联结束时，不同 PKA 能量下，30 次模拟获得的位错环总长度。(a) 基于 MN 势构建的混合势；(b) 基于 AT 势构建的混合势

Fig. 10 Total length of dislocation loops obtained from 30 simulations at different PKA energies at the end of the cascade evolution: (a) the MN-based hybrid potentials; (b) the AT-based hybrid potentials.

3.3 势函数长程部分对级联损伤演化过程的影响

为了系统探究势函数长程部分对级联损伤演化的影响,本文通过引入切换函数,构建了 MN-Z 势、MN-Z30 势和 MN-Z34 势三种势函数,用以模拟钨中 PKA 引起的级联损伤过程。

图 11 展示的是级联碰撞中 FPs 随时间的动态演化过程。由图可知,虽然 MN-Z30 势模拟获得的金属钨的熔点明显小于原始 MN-Z 势预测的结果,但是对于模拟的 PKA 能量区间,除了 $E_0=50\text{ keV}$ 时,三种势函数模拟获得的 FPs 随时间演化曲线及热峰时缺陷数目并没有显著的差别。由此可见,势函数长程部分对级联损伤过程中产生的缺陷数目及缺陷复合的影响并不明显。

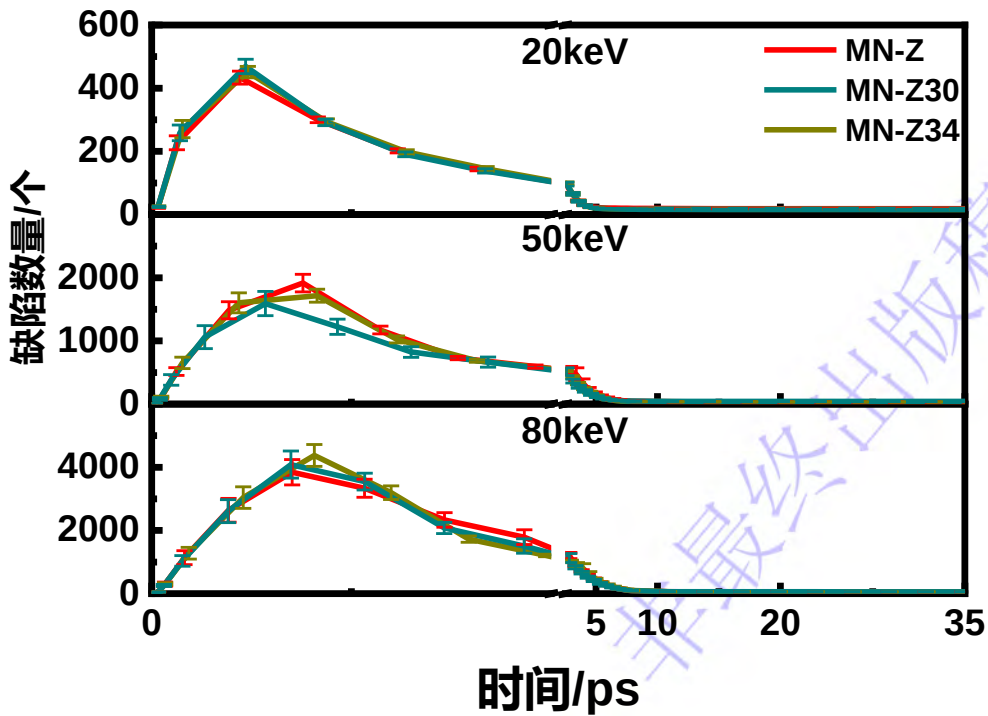


图 11 采用 MN-Z 势、MN-Z30 势和 MN-Z34 势模拟获得的级联碰撞过程中钨中平均缺陷数量随时间的动态演化, 误差棒为 30 次模拟的标准误差

Fig. 11 Temporal evolution of defect number in tungsten during collision cascades simulated with MN-Z, MN-Z30, and MN-Z34 potentials. Error bars represent the standard error of 30 independent simulations.

级联结束后最终存活的缺陷数展示在图 12 中。从此图同样可以看到,不同势函数下,存活缺陷数均随着 PKA 能量的增加而增加。但是除了 $E_0=50\text{ keV}$ 时,

采用 MN-Z30 势模拟获得的缺陷数目明显高于另外两个势函数外，其它 PKA 能量下，三种势函数的模拟结果差距并不大。此外，如图 13 所示，三种势函数对于从热峰时到级联结束缺陷的复合率的影响也并不明显(特别是 $E_0 = 80$ keV 时)。

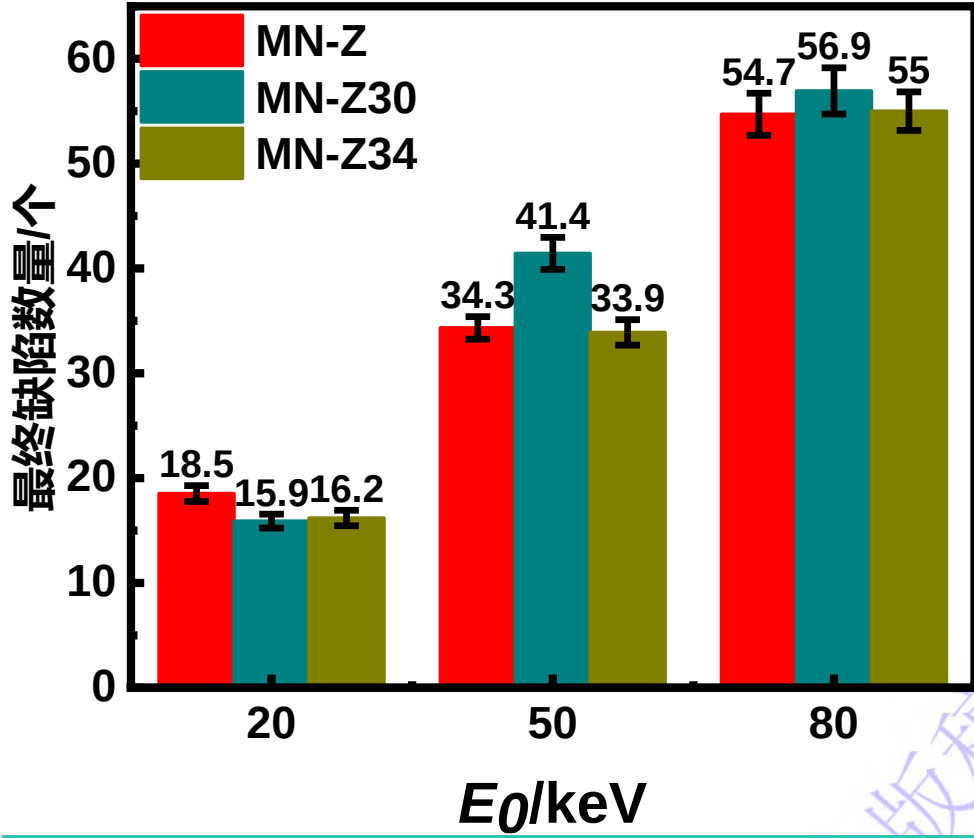


图 12 采用 MN-Z 势、MN-Z30 势和 MN-Z34 势模拟获得的级联结束后最终存活平均 FPs 数量，误差棒为 30 次模拟的标准误差

Fig. 12 Number of surviving FPs at the end of the cascade evolution simulated with MN-Z, MN-Z30, and MN-Z34 potentials. Error bars represent the standard error of 30 independent simulations.

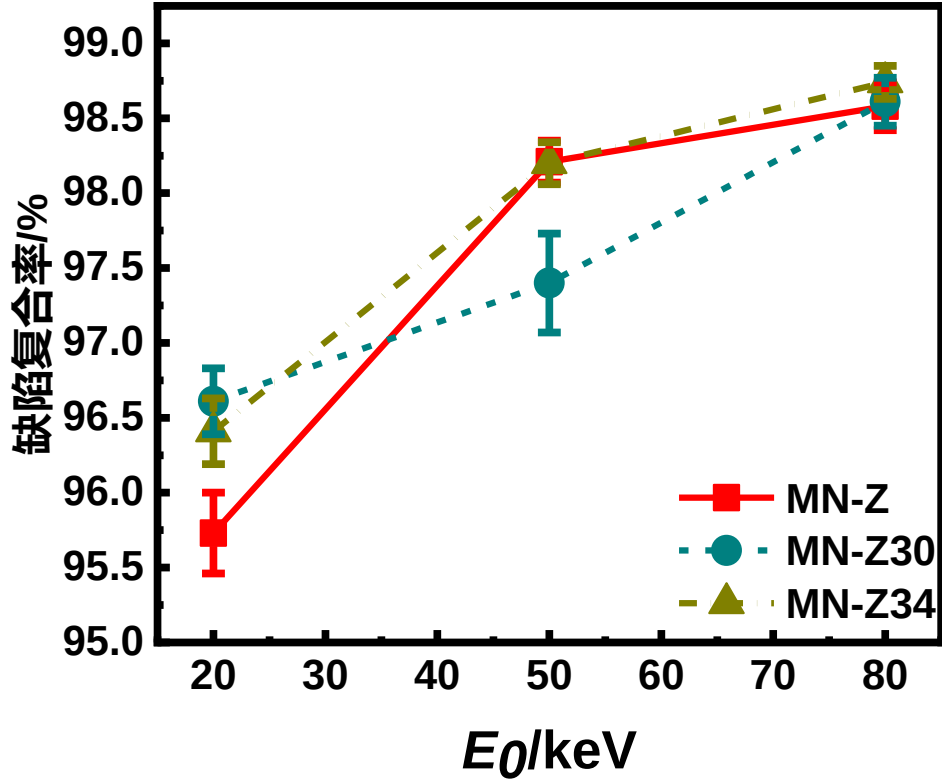


图 13 采用 MN-Z 势、MN-Z30 势和 MN-Z34 势模拟获得的不同 PKA 能量下缺陷平均复合率，误差棒为 30 次模拟的标准误差

Fig. 13 Probability of defect recombination at different PKA energies simulated with MN-Z, MN-Z30, and MN-Z34 potentials. Error bars represent the standard error of 30 independent simulations.

为了进一步探究势函数长程部分是否影响缺陷的成团行为，本文统计了三种势函数下，30 次级联模拟过程中的子级联出现的几率。如图 14 所示，MN-Z30 势模拟获得的子级联占比在所有能量下均低于原始 MN-Z 势。例如在 $E_0 = 80 \text{ keV}$ 时，MN-Z 势的子级联发生率高达 60%，而 MN-Z30 势仅为 43%。MN-Z34 势的模拟结果处于 MN-Z30 势和 MN-Z 势之间。由于 MN-Z30 势和 MN-Z34 势相比原始 MN-Z 势，其对势长程部分向上偏离，因而子级联的差异说明这种偏离有效限制了高能 PKA 向远处的能量耗散，抑制了级联区域的碎片化，进而在热峰阶段塑造了不易破裂且能量密度极高的致密单一损伤区。这种致密热峰的空间结构，为缺陷的复合和聚集成团提供了条件。

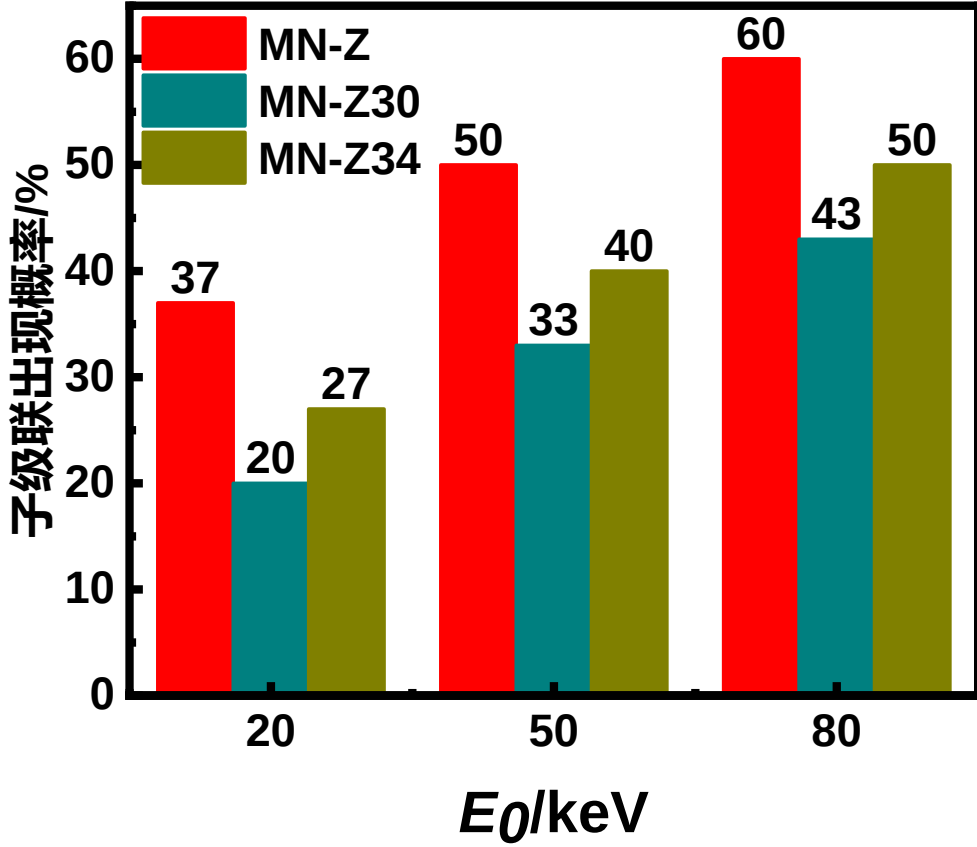


图 14 采用 MN-Z 势、MN-Z30 势和 MN-Z34 势模拟获得的不同 PKA 能量下子级联出现的概率

Fig. 14 Probability of subcascade formation at different PKA energies obtained from simulations using MN-Z, MN-Z30, and MN-Z34 potentials.

接下来, 本文统计了级联结束时稳定阶段空位团簇与 SIA 团簇尺寸分布, 并展示在图 15 中。观察图 15(a)中 SIA 团簇的尺寸分布可以发现, 在相同 PKA 能量下, MN-Z30 势和 MN-Z34 势产生大尺寸 SIA 团簇的几率明显更大。例如, 在 $E_0 = 80 \text{ keV}$ 时 MN-Z30 势和 MN-Z34 势产生了尺寸大于 40 的 SIA 团簇。图 15(b) 则表明, 空位团簇的尺寸统计中有着类似的规律。例如 $E_0 = 80 \text{ keV}$ 时, 仅有 MN-Z30 势产生了尺寸大于 12 的空位团簇。上述在 MN-Z30 势中观察到的大尺寸团簇, 一方面是因为抑制了子级联的出现, 另一方面也与修改 MN-Z 势引起的平衡态热力学性质的改变有关。如表 2 所示, MN-Z30 势的 SIA 结合能($E_{L_1}^b = 2.720 \text{ eV}$, $E_{L_2}^b = 2.914 \text{ eV}$)相比原始 MN-Z 势(2.357 eV 与 2.472 eV)出现了显著的升高。MN-Z30 势更高的 SIA 结合能, 有助于 SIA 成团。

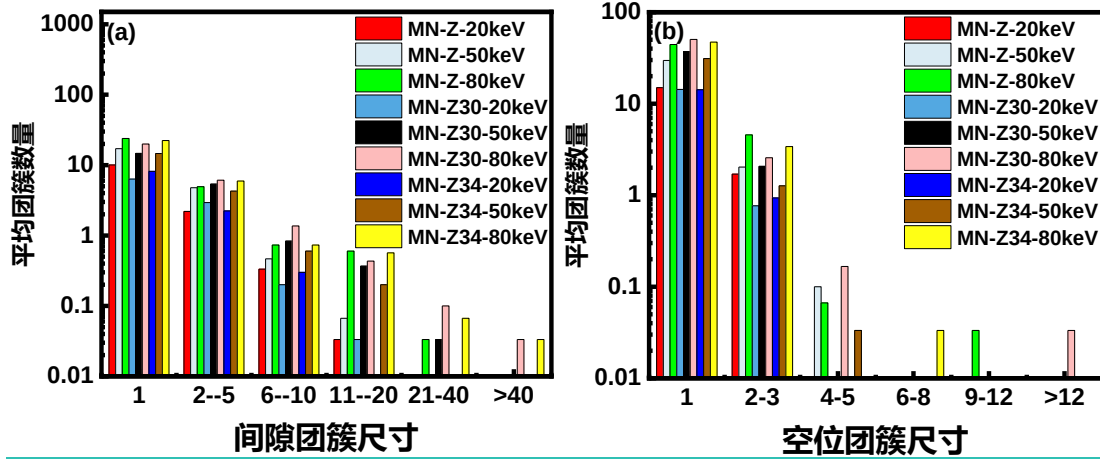


图 15 采用 MN-Z 势、MN-Z30 势和 MN-Z34 势模拟获得的不同 PKA 能量下空位团簇与 SIA 团簇尺寸分布: (a) SIA 团簇; (b) 空位团簇

Fig. 15 Size distributions of SIA and vacancy clusters at different PKA energies obtained from simulations using MN-Z, MN-Z30, and MN-Z34 potentials: (a) SIA clusters; (b) vacancy clusters.

图 16 统计了三种势函数在不同 PKA 能量下产生的位错环数量与位错环总长度。从此图可以看出，在 $E_0 = 50 \text{ keV}$ 和 80 keV 时，MN-Z30 势和 MN-Z34 势产生的位错环数目和总长度明显超越了原始 MN-Z 势。但是，在 $E_0 = 20 \text{ keV}$ 时，只有采用 MN-Z 势模拟时出现了位错环。这是因为相较于 MN-Z 势，MN-Z30 势和 MN-Z34 势其长程部分的向上偏离有利于 SIA 间的结合，同时可有效抑制级联演化中子级联的产生（如图 14 所示），进而促进致密热峰区域的形成。这都有利于残存 SIA 的聚集和大尺寸位错环的形成。因此，在 $E_0 = 50 \text{ keV}$ 与 80 keV 时，MN-Z30 势和 MN-Z34 势会促进位错环的生成，导致其数量与总长度增加。

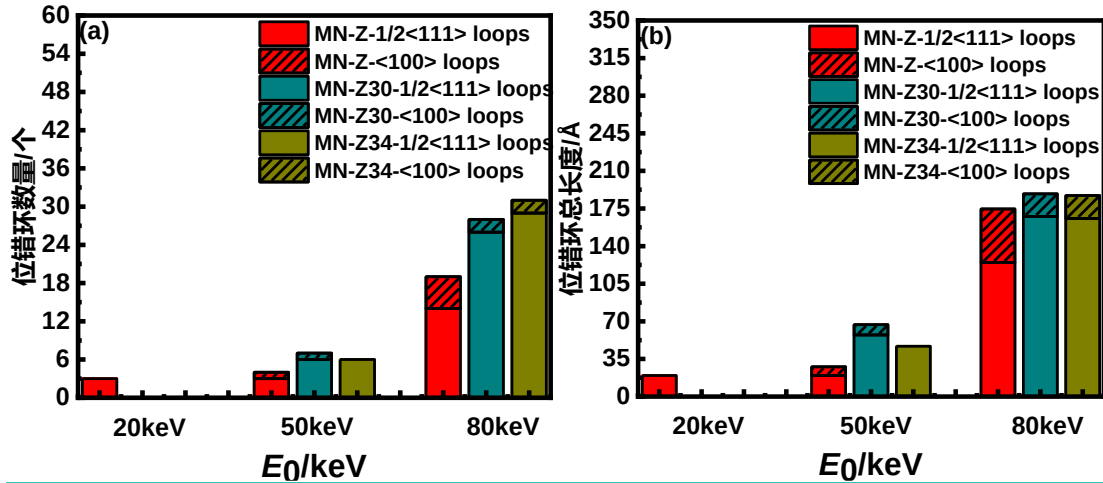


图 16 采用 MN-Z 势、MN-Z30 势和 MN-Z34 势模拟获得的不同 PKA 能量下 30 次模拟位错环总数量和总长度：(a) 位错环总数量；(b) 位错环总长度

Fig. 16 Total number and length of dislocation loops obtained from 30 simulations at different PKA energies using MN-Z, MN-Z30, and MN-Z34 potentials: (a) total number; (b) total length.

4 结 论

本研究采用分子动力学模拟，系统探究了势函数短程部分和长程部分对金属钨中初级辐照损伤动力学过程的影响。得出以下结论：

(1) 势函数短程部分的硬度从根本上决定了碰撞初期的能量传递效率与空间分布。“硬”的势函数短程部分可有效限制高能 PKA 的长程穿透行为，显著抑制了子级联的分裂，从而形成了致密的单一热峰损伤区。这增大了热峰时缺陷数目，也有利于缺陷的复合，同时促进了大尺寸缺陷团簇和位错环的产生。

(2) 通过引入切换函数改变势函数长程部分，并用以模拟级联损伤的研究结果表明，势函数长程部分对级联损伤过程缺陷产生数目和级联结束时存活缺陷数目的影响并不明显，但是会影响大尺寸缺陷团簇和位错环的产生。

参考文献

- [1] Jäger W, Wilkens M 1975 *Phys. Status Solidi A* **32** 89
- [2] Stoller R E, Odette G R, Wirth B D 1997 *J. Nucl. Mater.* **251** 49
- [3] Stoller R E, Greenwood L R 1999 *J. Nucl. Mater.* **271-272** 57
- [4] Gilbert M R, Dudarev S L, Derlet P M, Pettifor D G 2008 *J. Phys.: Condens. Matter* **20** 345214
- [5] Sand A E, Dudarev S L, Nordlund K 2013 *EPL* **103** 46003
- [6] Yi X, Jenkins M L, Briceno M, Roberts S G, Zhou Z, Kirk M A 2013 *Philos. Mag.* **93** 1715
- [7] Frenkel J 1926 *Z. Phys.* **37** 243
- [8] Kinchin G H, Pease R S 1955 *Rep. Prog. Phys.* **18** 1
- [9] Was G S 2016 *Fundamentals of Radiation Materials Science: Metals and Alloys* (New York: Springer) pp1—20
- [10] Xu H, Stoller R E, Osetsky Y N, Terentyev D 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 265503
- [11] Arakawa K, Amino T, Mori H 2011 *Acta Mater.* **59** 141
- [12] Li M, Cui J, Wang J, Hou Q 2014 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **337** 45
- [13] Cui J, Hou Q, Li M, Qiu M 2022 *Nucl. Mater. Energy* **32** 101232
- [14] Zhang C, Zheng Q, Li Y 2023 *Nucl. Mater. Energy* **35** 101443
- [15] Liu L X, Jiang M X, Gao N, Chen Y C, Hu W Y, Deng H Q 2025 *Chin. Phys. B* **34** 046103
- [16] Jiang L, Li M, Fu B Q, Cui J C, Hou Q 2024 *Chin. Phys. B* **33** 036103
- [17] Chen W, Li M, Fu B Q, Chen T, Cui J C, Hou Q 2025 *Chin. Phys. B* **34** 046108

-
- [18] Zhong Y, Nordlund K, Ghaly M, Averback R S 1998 *Phys. Rev. B* **58** 2361
- [19] Björkas C, Nordlund K, Dudarev S L 2009 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B* **267** 3204
- [20] Biersack J P, Ziegler J F 1982 *Ion Implantation Techniques* (Berlin: Springer) pp122—156
- [21] Ouyang Y, Wu J, Zheng M, Han H, Zhu Y, Huang X, Liu H, Duan H 2018 *Comput. Mater. Sci.* **147** 7
- [22] Setyawan W, Selby A P, Juslin N, Stoller R E, Wirth B D, Kurtz R J 2015 *J. Phys.: Condens. Matter* **27** 225402
- [23] Wang D, Gao N, Setyawan W, Pang L L 2016 *Chin. Phys. Lett.* **33** 096102
- [24] Sand A E, Dequeker J, Becquart C S, Domain C, Nordlund K 2016 *J. Nucl. Mater.* **470** 119
- [25] Becquart C S, De Backer A, Olsson P, Domain C 2021 *J. Nucl. Mater.* **547** 152816
- [26] De Backer A, Becquart C S, Olsson P, Domain C 2021 *J. Nucl. Mater.* **549** 152887
- [27] Rieth M, Boutard J L, Dudarev S L, Ahlgren T, Antusch S, Baluc N, Barthe M F, Becquart C S, Ciupinski L, Correia J B, Domain C, Fikar J, Fortuna E, Fu C C 2011 *J. Nucl. Mater.* **417** 463
- [28] Molière G 1947 *Z. Naturforsch. A* **2** 133
- [29] Wilson W D, Hagmark L G, Biersack J P 1977 *Phys. Rev. B* **15** 2458
- [30] Ackland G J, Thetford R 1987 *Philos. Mag. A* **56** 15

-
- [31] Liu L, Qiu R, Chen Y, Jiang M, Gao N, Huang B, Gao F, Hu W, Deng H 2023 *J. Nucl. Mater.* **580** 154415
- [32] Mason D R, Nguyen-Manh D, Becquart C S 2017 *J. Phys.: Condens. Matter* **29** 505501
- [33] Mason D R, Granberg F, Boleininger M, Schwarz-Selinger T, Nordlund K, Dudarev S L 2021 *Phys. Rev. Mater.* **5** 095403
- [34] Hou Q, Li M, Zhou Y, Cui J 2013 *Comput. Phys. Commun.* **184** 2091
- [35] Stukowski A 2010 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [36] Nordlund K, Averback R S 1997 *Phys. Rev. B* **56** 2421
- [37] Stukowski A, Bulatov V V, Arsenlis A 2012 *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* **20** 085007
- [38] Morris J R, Song X 2002 *J. Chem. Phys.* **116** 9352
- [39] Zheng L, Luo S N, Thompson D L 2006 *J. Chem. Phys.* **124** 154504
- [40] [Lassner E, Schubert W D 1999 *Tungsten: Properties, Chemistry, Technology of the Element, Alloys, and Chemical Compounds* \(New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers\) p9](#)
- [41] [Mrovec M, Gröger R, Bailey A G, Nguyen-Manh D, Elsässer C, Vitek V 2007 *Phys. Rev. B* **75** 104119](#)
- [42] [Ehrhart P, Jung P, Schultz H, Ullmaier H 1991 *Atomic Defects in Metals* Vol. 25 \(Berlin: Springer\) p88](#)
- [43] [Hofmann F, Nguyen-Manh D, Gilbert M R, Beck C E, Eliason J K, Maznev A A, Zheng W, Machado D, Belli L, Zinkle S J, Nelson K A 2015 *Acta Mater.* **89** 352](#)

-
- [44] [Nguyen-Manh D, Horsfield A P, Dudarev S L 2006 *Phys. Rev. B* **73** 020101](#)
- [45] [Setyawan W, Nandipati G, Kurtz R J 2017 *J. Nucl. Mater.* **484** 30](#)
- [46] Liu J, Byggmästar J, Fan Z, Granberg F, Nordlund K 2023 *Phys. Rev. B* **108** 054312
- [47] Stoller R E, Tamm A, Beland L K, Osetsky Y N, Caro A 2016 *J. Chem. Theory Comput.* **12** 2871
- [48] De Backer A, Sand A E, Nordlund K, Malerba L, Olsson P, Becquart C S 2016 *EPL* **115** 26001

Molecular Dynamics Simulations on Effects of Short- and Long-Range of Interatomic Potential on Cascade Damage in Tungsten^{*}

Xu Bo Li Min Fu Bao-Qin Cui Jie-Chao[†] Hou Qin[‡]

(Key Laboratory for Radiation Physics and Technology, Institute of Nuclear Science and
Technology, Sichuan University, Chengdu 610064, China)

Radiation damage induced by high-energy neutron irradiation in nuclear reactor environments is the primary cause of macroscopic property degradation in nuclear materials. Although molecular dynamics (MD) simulations have been extensively applied to probe the atomic-scale evolution of radiation damage, the predictive accuracy of such simulations is strongly dependent on the interatomic potentials adopted. In this study, MD simulations were performed to systematically investigate the distinct effects of the short- and long-range components of interatomic potentials on primary knock-on atom (PKA)-induced cascade evolution in body-centered cubic tungsten (W).

Two well-validated many-body potentials for W, namely the Finnis-Sinclair-type potential developed by Ackland and Thetford (AT potential) and the EAM-type potential proposed by Mason et al. (MN potential), were employed for the simulations. To examine the influence of short-range interactions, six hybrid potentials were constructed by combining the two base potentials with three screened Coulomb potentials (Ziegler-Biersack-Littmark, Molière, and Kr-C). Additionally, a switching function was adopted to modify the long-range region of the MN potential to evaluate the influence of long-range interactions. Simulations were performed at three PKA energies (20, 50, and 80 keV), with 30 independent calculations conducted for each condition to ensure the statistical reliability of the

results.

The simulation results reveal that the short-range repulsion of interatomic potentials dominates the energy transfer efficiency and spatial distribution of collision cascades. A stiffer short-range potential constrains the penetration of high-energy PKAs, inhibits subcascade formation, and produces dense thermal spikes. Such behaviors increase the defect yield at the thermal spike phase, enhance defect recombination efficiency, and promote the formation of large-sized defect clusters and dislocation loops. Conversely, modifying the long-range potential region primarily alters the equilibrium thermodynamic properties of W, including its melting point, as well as the formation and binding energies of vacancies and self-interstitial atoms. While the long-range potential component exerts a negligible influence on the total number of cascade-induced defects, it substantially affects subcascade splitting, the clustering of surviving defects, and the number and total length of dislocation loops.

This study clarifies the respective roles of short- and long-range potential components in cascade damage, serving as a valuable reference for the selection and optimization of interatomic potentials in MD simulations of radiation damage in W.

Keywords: Tungsten, Molecular dynamics, Cascade damage, Interatomic potentials

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11775151 and 12105194), and the Natural Science Foundation of Sichuan Province, China (Grant Nos. 2026NSFSC0017, 2022NSFSC1265 and 2022NSFSC1251).

† Corresponding author. E-mail: jiechaocui@scu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: qhou@scu.edu.cn

The first author. E-mail: 15870066362@163.com

录用稿件，非最终出版稿