

SiC/C界面辐照性能的分子动力学研究*

王成龙¹⁾ 王庆宇^{1)†} 张跃²⁾ 李忠宇¹⁾ 洪兵¹⁾ 苏折¹⁾ 董良¹⁾

1) (哈尔滨工程大学核科学与技术学院, 核安全与仿真技术国防重点学科实验室, 哈尔滨 150001)

2) (环境保护部核与辐射安全中心, 北京 100082)

(2013年12月31日收到; 2014年6月5日收到修改稿)

本文通过分子动力学模拟的方法, 研究了5种含不同空间结构的SiC/C界面的材料受辐照后的缺陷分布随时间以及PKA位置的变化关系, 并与单质SiC中缺陷分布情况进行对比. 利用径向分布函数分析了辐照对界面原子排列情况的影响. 研究表明, SiC/C界面的抗辐照能力明显低于SiC内部, 不同的空间结构对界面缺陷数量存在一定影响. 由径向分布函数推得界面区域石墨原子密度高则界面原子排列情况受辐照影响越大.

关键词: SiC/C界面, 辐照, 分子动力学

PACS: 34.20.-b, 71.15.Pd

DOI: 10.7498/aps.63.153402

1 引言

近年来, 连续SiC纤维增韧SiC(以下简记为SiC_f/SiC)复合材料在轻水堆燃料包壳组件和通道盒^[1], 先进裂变堆如高温气冷堆^[2], 熔盐堆^[3], 气冷快堆^[4], 聚变堆^[5]和其他极端辐照条件下的燃料和堆内组件方面具有良好的应用前景. 其巨大的吸引力在于具有高温强度高、抗蠕变能力强、耐腐蚀性好、抗热冲击以及诱导放射性和放射余热低等一系列优点^[6,7]. SiC_f/SiC复合材料由基体、界面相和纤维三部分组成. 其中纤维/基体界面主要起着使裂纹转向和阻止裂纹扩展的作用, 进而提高材料的延展性. 目前, 主要使用热解碳作为界面相材料来调节纤维-基体间的负荷转移、脱黏和滑动. 有研究表明, 即使在低剂量中子辐照后, SiC纤维与热解碳界面的损伤也将导致纤维与基体的剪切强度和结合强度降低, 从而影响复合材料的整体性能^[8]. 目前SiC/C界面的辐照损伤机理尚不明确, 而纤维/基体界面的优化设计研究也成为近年来的研究热点^[9]. 对于非复合材料而言, 晶界以及界面

被认为是吸收辐照缺陷的陷阱, 并能够提高材料的抗辐照能力^[10,11]. Bai等人利用分子动力学方法解释了晶界吸收辐照缺陷的可能机理^[10]. 目前对于复合结构的界面损伤计算机模拟研究还少有报道, Wallace等^[12]使用分子动力学方法研究了SiC/C界面的辐照性能, 发现界面附近的SiC更容易被损伤. Li等人^[13]使用分子动力学方法对Cu进行了辐照模拟, 并研究了辐照对材料力学性能的影响, 发现空位会影响材料的杨氏模量, 间隙原子会影响材料的屈服应变. 本文将在Wallace等人研究的基础上建立几种不同空间取向的复合界面, 试图探讨界面结构对辐照行为的影响, 希望为研究SiC/C界面辐照损伤机理以及辐照力学性能提供依据.

2 计算模型与方法

2.1 初始结构

由于典型的CVD热解碳是高密度的乱层石墨结构, 并且基面与SiC纤维表面大致平行, 而SiC纤维是纳米晶结构^[14], 因此纤维表面SiC与石墨

* 哈尔滨工程大学中央高校基本科研业务费项目(批准号: HEUCFT1103, HEUCF131507)资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: wangqingyu@hrbeu.edu.cn

原子面之间存在不同角度的空间取向. 本文据此建立的物理模型结构如图 1(a) 所示. 模型上方是晶格常数为 4.359 \AA (以下记为 a_0) 的金刚石型 SiC (3C-SiC), 下方为石墨. 在所有模型中始终保持 SiC 位置不变, 通过改变 α 角的值, 即石墨片层延伸方向与水平方向的夹角 (如图 1(a) 所示), 来获得不同空间结构的物理模型. 同时, 为使模型的 x 和 z 方向能够满足周期性边界条件, 本文从一些特定的 α 值中选取 5 个值作为研究对象, 进行模拟. 这 5 个值分别是 0° , 28.56° , 56.71° , 77.32° 和 90.00° , 为叙述方便, 在后文中将这 5 种模型分别简记为 M0, M28, M56, M77 和 M90, 其中图 1 中所展示的是模型 M56. 同时为与单质 SiC 中缺陷的产生情况进行对比, 本文也对单质 SiC 进行了辐照模拟, 记为 MW.

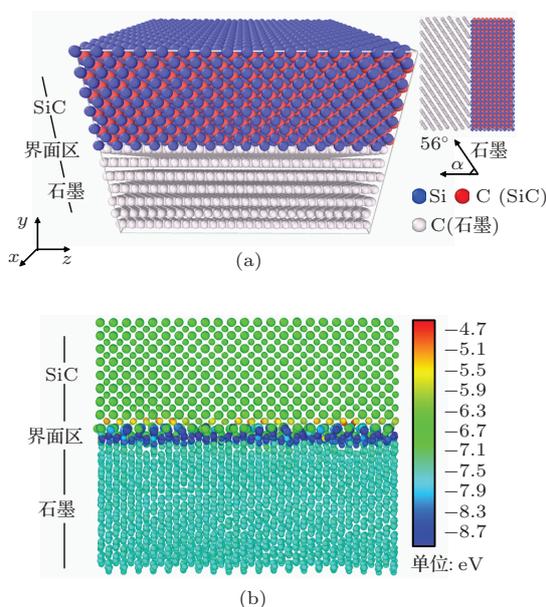


图 1 (网刊彩色) SiC/C 复合模型结构示意图及弛豫后的势能分布 (a) M56 模型结构示意图; (b) M56 模型弛豫后界面及其周围原子的势能分布, 原子颜色代表其势能大小

在 5 个复合模型中, 上方 SiC 部分在 y 向长度均为 22 \AA , 下方石墨部分在 y 向长度均为 26 \AA , 与石墨相邻的第一层原子是 Si 原子. SiC 与石墨间距为 1.7 \AA [12], y 方向采用自由边界, 同时为了在 x 和 z 方向使用周期性边界条件, 各模型 x 和 z 方向长度视具体情况而定. 为防止模拟过程中模型发生移动, 本文在计算过程中采用固定质心的方法, 即每运行一个时间步长, 通过平移整个模型, 将质心调整到初始位置, 起到固定模型的作用. 考虑到辐照过程中发生离位的原子数 (几十)

与模型总原子数 (2.5 万左右) 相比较小, 认为离位原子对整个模型的质心位置影响不大. 其中 M0 截面积为 $16a_0 \times 20a_0$, SiC 原子总数为 13440, 石墨原子总数为 16640; M28, M56 和 M77 截面积均为 $16a_0 \times 14a_0$, SiC 原子总数均为 9408, 石墨原子总数分别为 12432, 12600 和 12544; M90 截面积为 $16a_0 \times 18a_0$, SiC 原子总数为 12096, 石墨原子总数为 16384.

2.2 原子间势函数

SiC 原子之间以及石墨与 SiC 原子之间相互作用均采用混合 Tersoff-ZBL 势函数 [12]. Tersoff 势函数使用了文献 [15] 中的参数, 其原子间相互作用截断半径为 3.0 \AA . ZBL [16] 势函数主要描述短程相互作用, 用于表达两碰撞原子间的作用. 石墨原子间相互作用采用 AIREBO 势函数 [17]. 图 1(b) 是 M56 模型弛豫后的界面局部图形, 其中原子的颜色代表其势能大小.

2.3 模拟细节介绍

在初始模型弛豫阶段中, 6 个模型在 NPH (等原子数、等压、等焓) 系综下, 采用 Langevin 热浴, 使模型温度为 300 K , 并维持 50 ps , 步长均采用 1 fs . 在辐照模拟阶段, 采用 NVE (等原子数、等体积、等能量) 系综, 由于单次辐照模拟存在较大的波动, 因此, 前 5 个模型分别在距离界面 $1a_0$, $2a_0$, $3a_0$ 和 $4a_0$ 的原子平面上选取 10 个 Si 原子, MW 只在一个垂直于 y 轴的原子平面上选取 10 个 Si 原子, 赋予其 1.5 keV 的初始能量作为初级碰撞原子 (primary knock-on atom, PKA), 进行 10 次独立的模拟, 并保持入射方向均与 y 轴呈 7° , 这主要是为避免沟道效应, 模拟过程中步长均为 0.01 fs , 每次运行 60000 步.

本文所有模拟计算均由分子动力学计算程序 LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [18] 来完成. 为进一步分析结构变化, 使用了可视化软件 VMD [19], Atomeye [20] 和 Ovito [21].

2.4 缺陷判断方法

采用截断半径为 0.9 \AA 的 Lindemann 球形截断法来判断辐照产生的间隙和空位. 如果以正常

格点位置为球心, 以 0.9 Å 为半径画球, 如果球内没有原子时, 该格点被标记为空位. 类似的, 如果以给定的原子为球心, 以 0.9 Å 为半径画球, 球内没有正常格点位置时, 该原子被标记为间隙^[22]. 由于石墨剧烈的声子振动, 使得该法不适用于判断石墨中产生的缺陷^[12]. 因此, 本文不统计石墨中产生的缺陷. 同时, 由于界面处第一层 Si 原子排列不规则, 无法通过直接的方法准确的判断停留在界面处间隙原子的数量, 本文利用单晶中空位与间隙的数量相等这一基本原则, 分别统计出 SiC 部分界面第一层 C(SiC) 以内空位和间隙的数量 N_v 和 N_{iSiC} , 以及进入到石墨部分 Si 和 C 原子的数量 N_{iC} , 将 N_{iSiC} 与 N_{iC} 之和作为总的间隙数量 N_i , 则 N_v 与 N_i 之差即为停留在界面处第一层 Si 原子和与其邻近的第一层石墨原子之间的间隙数量.

2.5 离位阈能计算(threshold displacement energy, TDE)

界面区域原子链由 $\cdots C-Si-C-Si-graphite-graphite \cdots$ 组成, 为方便叙述, 将界面处紧邻石墨的第一层 Si 原子命名为 1stSi, 第一层 C(SiC) 原子命名为 1stC, 第一层石墨原子命名为 1st graphite, 并以此类推, 单晶 SiC 的 Si 和 C 记为 bSi, bC. 选择 1stC—4thC 区域内的 C 原子和 Si 原子, 并赋予其初始动能和确定方向, 如果 Si 或 C 的移动距离超过 1 Å, 则认为发生了一次离位事件. 对于该移动距离的选取非常重要, 无论过大或过小, 都会造成对离位事件的误判, 影响离位阈能计算的准确性^[23]. 根据下列公式计算得到 Si 和 C 的离位阈能^[24],

$$TDE_{\text{平均}} = \left(\sum_{i=1}^{n_{\text{方向}}} \omega_i \right)^{-1} \sum_{i=1}^{n_{\text{方向}}} \omega_i TDE_i, \quad (1)$$

其中, ω_i 为第 i 个晶向的等效数量, TDE_i 为第 i 个晶向上的离位阈能.

本文选取 $\langle 001 \rangle$, $\langle 111 \rangle$ 和 $\langle 110 \rangle$ 三个晶向, 对于 3C-SiC, 三个晶向的等效个数分别为 6, 4 和 12, 即 $\omega_1 = 6$, $\omega_2 = 4$, $\omega_3 = 12$.

2.6 径向分布函数计算(radial distribution of function, RDF)

为了能够定量的给出界面处原子的排布信息, 了解辐照对界面原子分布情况的影响, 本文计算了界面区域(包含 1stC, 1stSi 和 1stgraphite)原子的径

向分布函数^[25], 即

$$g(r) = \rho(r)/\rho_a, \quad (2)$$

其中, $\rho(r)$ 为原子径向分布的数密度, ρ_a 为界面区域平均原子数密度.

对于 MW 模型, 选择了辐照缺陷最多的区域中 2 层 C 原子和 1 层 Si 原子的 RDF. 同时, 由于各个模型界面处 SiC 原子的数密度相同, 因此本文只计算界面区域石墨原子的数密度, 了解其与径向分布函数的关系.

3 结果讨论

图 2 展示了 PKA 在 $4a_0$ 处的模型 M0 和 MW 的间隙及空位在 SiC 部分中的总数量随模拟时间的变化关系, 从图中可以看到间隙和空位数量随时间先上升并在 0.0775 ps (M0) 和 0.0918 ps (MW) 时达到最大值, 这与文献^[26]中模拟的 Si 入射 SiC 的缺陷数量在 0.1 ps 左右达到峰值相符合, 然后部分间隙与空位复合湮没, 数量随之逐渐下降, 并在 0.4—0.6 ps 范围内趋于稳定. 本文将对 0.4—0.6 ps 内的数据进行平均, 作为稳定缺陷数量. 由于只统计的 SiC 内部缺陷的数量, 所以在模型 M0 中, 空位与间隙的数量不相等, 在模型 MW 中间隙与空位的数量相等.

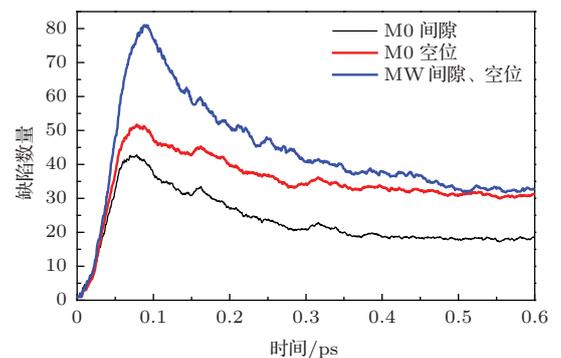


图 2 (网刊彩色) 模型 M0 和 MW 中间隙和空位数量随时间变化关系

图 3 展示了模型 M0(a, b) 和 MW(c, d) 中间隙数量达峰值及稳定时的间隙原子分布图. 从图 3 中可以看到, 模型 M0 无论是在间隙数量达峰值 (a) 或者最终稳定时 (b), 其间隙原子在界面附近的数量都明显高于 SiC 内部的间隙原子数量, 而没有界面的 MW 模型其缺陷分布较为分散. 通过计算界面处 1stC—4thC 区域的原子的离位阈能, 发现界面

附近的Si和C的离位阈能均低于SiC内部的Si和C, 如表1所示, 其中界面处Si和C的离位阈能与文献[12]一致, 单晶SiC的离位阈能与文献[26]接近. 这是因为SiC与石墨的晶格失配在界面区建立了应力场, 使得界面区内原子的离位阈能下降, 降低

了界面的抗辐照能力, 导致界面区产生了更多的间隙和空位[12]. 同时, 无论是在界面还是SiC内部, C的离位阈能均低于Si的离位阈能, 使得从图3中可以清楚的看到C间隙的数量明显多于Si间隙的数量.

表1 1stC-4thC区域的原子的离位阈能(±0.5 eV)

	1 st C	2 nd Si	2 nd C	3 rd Si	3 rd C	4 th Si	4 th C	bSi	bC
M0	8.0	17.9	10.0	20.3	9.9	21.9	10.1	—	—
M28	8.0	17.1	9.3	20.8	8.8	22.0	9.6	—	—
M56	5.6	19.2	8.3	20.0	9.9	20.2	8.9	—	—
M77	8.0	16.6	9.6	21.3	8.8	24.0	9.3	—	—
M90	8.5	18.4	9.6	19.7	9.6	23.4	9.6	—	—
MW	—	—	—	—	—	—	—	55.9	23.9

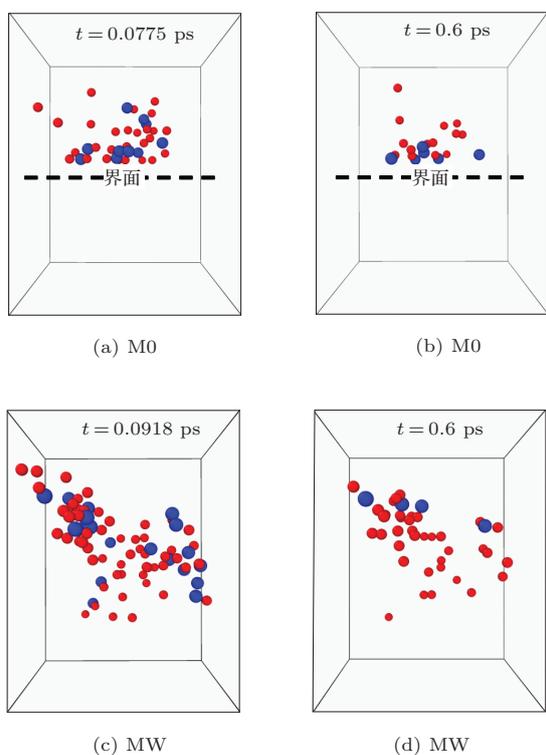


图3 (网刊彩色) 模型M0(a, b)和MW(c, d)中间隙数量达峰值及稳定时的间隙原子分布图. 红色为SiC中的C间隙原子, 蓝色为Si间隙原子.

图4展示了6个模型稳定后缺陷的数量随深度变化的关系. 17.436 Å处, 即4a₀处, 为PKA所在位置, 0 Å处为界面所在位置. 从图中可以看到, MW模型4a₀到1a₀的范围内的缺陷数量与其他复合模型并没有明显差异, 即远离界面的SiC内部所产生的辐照缺陷并不受界面的影响, 这与Swami-

nathan等对SiC倾斜晶界的研究结果一致[27]. 通过前文叙述可知, 由于界面处原子的离位阈能低于内部原子的离位阈能, 使得在界面处SiC侧4层原子区域内五个模型缺陷的数量明显高于单质SiC中相同区域内的缺陷数量. 同时由于5个模型结构的不同, 各个模型界面间隙的数量也存在差异.

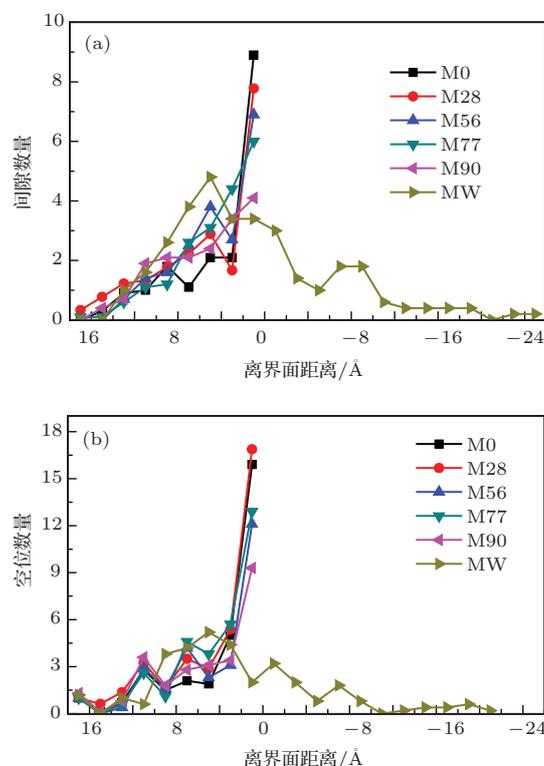


图4 (网刊彩色)PKA处于4a₀位置的模型M0, M28, M56, M77和M90中的SiC部分和MW中间隙(a)和空位(b)数量随模拟时间的变化关系(离界面距离0 Å处即为界面所在位置, 17.436 Å处为PKA所在位置)

图5展示了模型M0的SiC内部缺陷数量随PKA位置的变化关系. 从图中可以看出, 在本文的模拟距离范围之内, 随着PKA到界面距离的增大, SiC内部的缺陷数量也在不断增多. 这是因为当PKA距离界面较远时, 在SiC内部会发生更多的碰撞级联事件, 产生更多的次级碰撞原子, 进而产生更多的缺陷. 同时由于部分间隙原子进入到界面以及石墨当中, 使得从图中可以看到空位的数量大于间隙的数量.

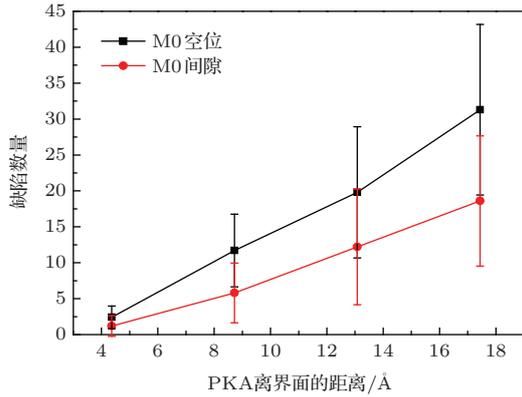


图5 (网刊彩色) 模型M0中SiC部分空位和间隙数量随PKA离界面距离的变化关系

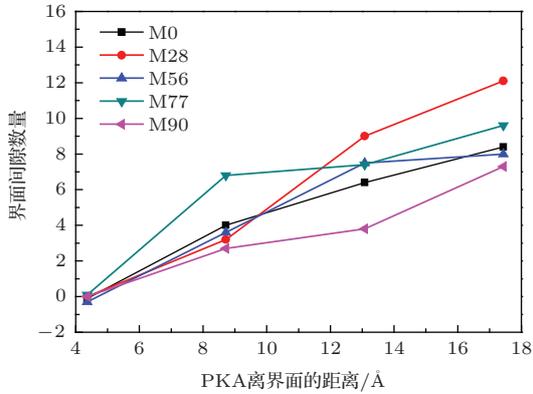


图6 (网刊彩色) 模型M0, M28, M56, M77和M90中停留在界面处的稳定间隙的数量随PKA离界面距离的变化关系

图6展示了模型M0, M28, M56, M77和M90中停留在界面处的稳定间隙的数量随PKA离界面距离的变化关系. 从图中可以看到除模型M56以外, 其余4个模型停留在界面处稳定间隙的数量均

随PKA离界面的距离的增大而增多. 这是由于邻近界面处的原子离位阈能较低以及有更多的次级碰撞原子到达界面共同作用的结果. 图中并未发现界面角度与间隙数量之间存在明显的规律, 但从表1来看, 5个复合模型界面附近的原子离位阈能并没有很大差别, 由此可以推断, 造成界面辐照行为差异的主要原因与离位阈能无关. 值得注意的是, 在较长的模拟时间尺度内 (10^{-9} s量级), 晶界或界面能够表现出有效的吸收辐照缺陷的能力^[10], 但是从本文的模拟结果来看, 在 10^{-12} s 的时间尺度内, 界面并没有对缺陷的消除产生明显的作用, 或许这需要更长的时间尺度去验证.

图7和表2分别为PKA位置在 $4a_0$ 处模型M0, M28, M56, M77, M90和MW界面处辐照前后RDF的变化情况和界面区域石墨原子的密度. 图7(a)—(e)中, 第一个峰代表石墨中最近邻C原子(配位原子)间距约为 1.4 \AA ; 图7(a)—(e)第二个峰和图7(f)第一个峰为Si与最近邻C(SiC和石墨)原子(配位原子)间距离, 约为 1.9 \AA . 结合表2和图7可以看到, 模型M56的石墨原子密度最小且辐照前后界面区域原子的RDF基本重合, 说明模型M56受辐照后, 界面区域原子的排列情况并没有产生很大变化, 具有正常配位数的原子的数量没有发生显著的变化. 而模型M90的石墨原子密度最大且辐照后界面区域原子的RDF的峰值明显下降, 说明模型M90受辐照后, 界面区域原子的排列情况发生了很大的变化, 具有正常配位数的原子的数量下降. 模型M0, M28和M77的情况则介于模型M56和M90之间. 从这一现象可以看出, 界面处石墨原子密度越高, 则辐照对界面原子的排列影响越大. 从模型MW的RDF中可以看出其受辐照后原子排列受影响的程度大于所有带界面的复合模型的受影响的程度.

SiC/热解碳界面的辐照稳定性是决定SiC/SiC复合材料整体性能的重要因素, 界面的辐照损伤将严重影响纤维与基体的结合强度和界面摩擦力^[8,14]. 辐照产生的间隙、空位或者缺陷团簇甚至非晶化对纤维、界面相和基体的残余应力的

表2 模型M0, M28, M56, M77和M90界面区域石墨原子密度 ($1/\text{\AA}^3$)

模型	M0	M28	M56	M77	M90
石墨原子密度	0.135397588	0.135376259	0.11949672	0.167003803	0.36038255

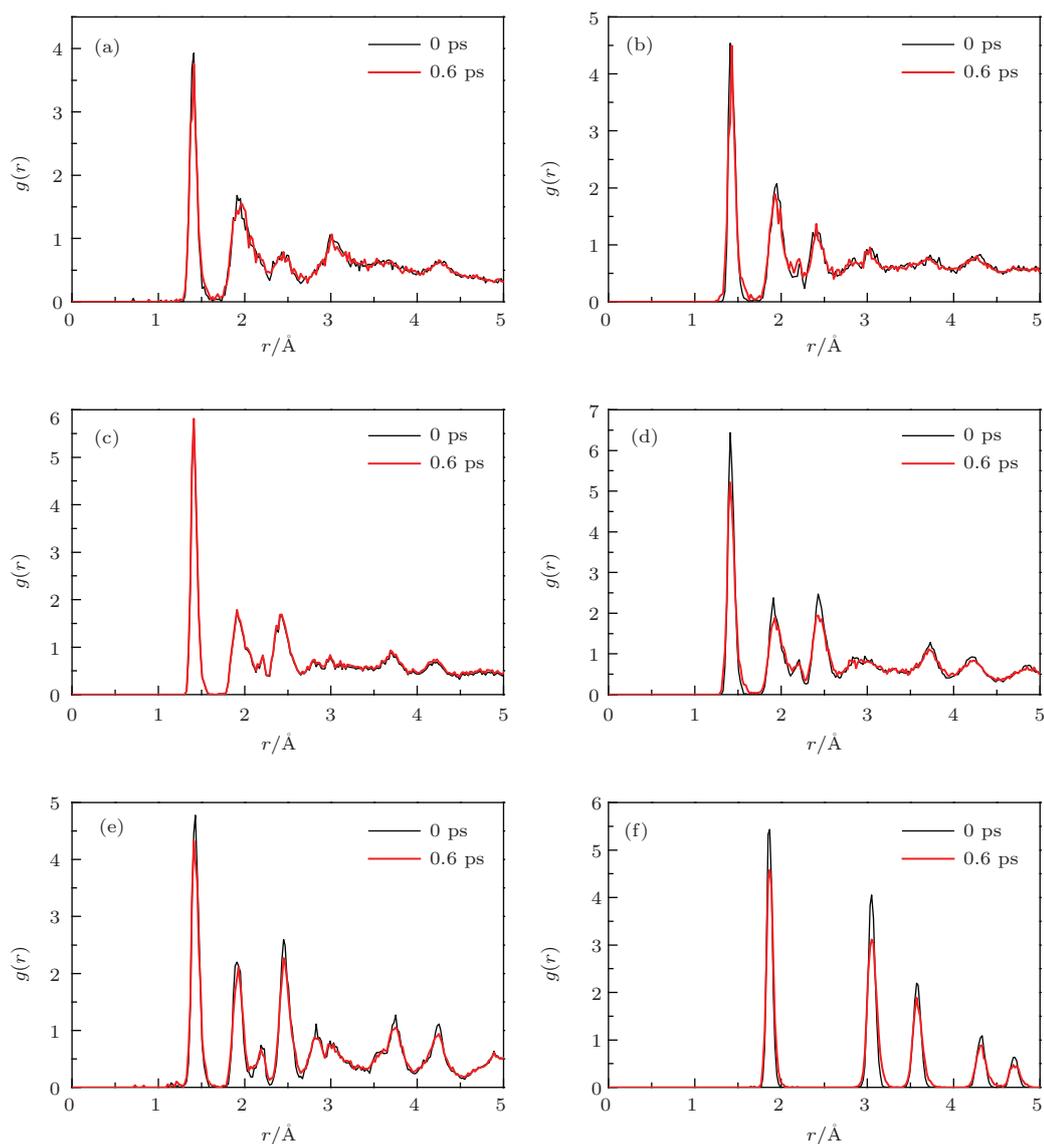


图7 (网刊彩色) 模型 M0 (a), M28 (b), M56 (c), M77 (d), M90 (e) 和 MW (f) 界面处辐照前后的径向分布函数

释放, 辐照肿胀等均有影响. 实验研究发现, 热解碳的辐照各向异性是导致界面失效的主要原因之一 [9,14,28], 而我们的结果证实界面附近 SiC 的辐照行为也与界面的空间取向有关. 但由于目前所研究的时间尺度仅仅是辐照初期, 并未考虑更长时间尺度的缺陷迁移和相互反应, 辐照剂量与实验值和实际使役条件也有差异, 因此界面的这种空间取向问题究竟对材料整体的辐照性质产生何种影响仍需要进一步研究.

4 结 论

本文基于分子动力学模拟, 对不同空间结构的 SiC/C 界面的辐照性能进行了研究. 研究表明, 界

面处原子具有较低的离位阈能, 即抗辐照能力较差, 使得界面处 SiC 侧 4 层原子区域内缺陷的数量明显高于单质 SiC 材料相同区域内的缺陷数量. 在一定距离范围内, PKA 距离界面越远, 停留在界面处的间隙缺陷越多. 同时, 最终停留在界面处的缺陷数量与界面空间结构有关, 即界面辐照行为受界面空间结构影响. 界面处较多的缺陷数量可能会对材料的整体性质产生显著的影响. 通过对界面区域原子的径向分布函数的分析, 可以推出界面区域石墨原子密度越高则受辐照后径向分布函数变化越大, 即界面原子排布受辐照影响越大. 本文的研究结果将对后续 SiC/C 界面辐照损伤机理和辐照力学性能研究提供理论基础和参考.

本论文的部分计算工作得到了哈尔滨工程大学舰船仿真研究中心和中科院超级计算中心的支持, 在此表示感谢.

参考文献

- [1] Yueh K, Carpenter D, Feinroth H 2010 *Nucl. Eng. Intern.* **55** 14
- [2] Snead L L, Katoh Y, Windes W, Smit K 2008 *Trans. Amer. Nucl. Soc.* **98** 1019
- [3] Forsberg C W, Peterson P F, Kochendarfer R A, Areva N P 2008 *In Proc. 2008 International Congress on Advances in Nuclear Power Plants*, Anaheim, June 8–12, 2008, p8026
- [4] Charpentier L, Dawi K, Balat-Pichelin M, Bèche E, Audubert F 2012 *Corros. Sci.* **59** 127
- [5] Giancarli L, Golfier H, Nishio S, Raffray R, Wong C, Yamada R 2002 *Fusion Eng. Design* **61** 307
- [6] Kohyama A, Konishi S, Kimura A 2005 *Nucl. Eng. Des.* **37** 423
- [7] Li W T 2007 *Introduction of nuclear material*(Beijing: Chemical Industry Press) p446 (in Chinese) [李文焱 2007 核材料导论 (北京: 化学工业出版社) 第446页]
- [8] Nozawa T, Ozawa K, Kondo S, Hinoki T, Katoh Y, Snead L L, Kohyama A 2005 *J. ASTM Int.* **2** JAI12884
- [9] Nozawa T, Katoh Y, Snead L L 2007 *J. Nucl. Mater.* **367** 685
- [10] Bai X M, Voter A F, Hoagland R G, Nastasi M, Uberuaga B P 2010 *Science* **327** 1631
- [11] Ackland G 2010 *Science* **327** 1587
- [12] Wallace J, Chen D, Wang J, Shao L 2013 *Nucl. Instrum. Methods. Res. Sect. B* **307** 81
- [13] Li W N, Xue J M, Wang J X, Duan H L 2014 *Chin. Phys. B* **23** 036101
- [14] Katoh Y, Ozawa K, Shih C, Nozawa T, Shinavski R J, Hasegawa A, Snead L L 2014 *J. Nucl. Mater.* **448** 448
- [15] Tersoff J 1989 *Phys. Rev. B* **39** 5566
- [16] Zeigler J F, Biersack J P, Littmark U 1985 *The Stopping and Range of Ions in Solids* (Vol.1) (New York: Pergamon Press)
- [17] Stuart S J, Tutein A B, Harrison J A 2000 *J. Chem. Phys.* **112** 6472
- [18] Plimpton S 1995 *J. Comp. Phys.* **7** 1
- [19] Humphrey W, Dalke A, Schulten K 1996 *J. Mol. Graphics* **14** 33
- [20] Li J 2003 *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **11** 173
- [21] Alexander S 2010 *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [22] Wang J W, Shang X C, Lv G C 2011 *Mater. Eng.* **10** 005 (in Chinese) [王建伟, 尚新春, 吕国才 2011 材料工程 **10** 005]
- [23] Yang L, Zu X T, Xiao H Y, Yang S Z, Liu K Z, Gao F 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4857 (in Chinese) [杨莉, 祖小涛, 肖海燕, 杨树政, 刘柯钊, Gao F 2005 物理学报 **54** 4857]
- [24] Farrell D E 2008 *Ph. D. Dissertation* (Evanstone: Northwestern University) (in USA)
- [25] Liu H M, Fan Y S, Tian S H, Zhou W, Chen X 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 062801 (in Chinese) [刘华敏, 范永胜, 田时海, 周维, 陈旭 2012 物理学报 **61** 062801]
- [26] Devanathan R, Rubia D T, Weber W J 1998 *J. Nucl. Mater.* **253** 47
- [27] Swaminathan N, Wojdyr M, Morgan D D, Szlufarska I 2012 *J. Appl. Phys.* **111** 054918
- [28] Naslain R R, Pailler R J F, Lamon J L 2010 *Int. J. Appl. Ceram. Technol.* **7** 263

Molecular dynamics study of cascade damage at SiC/C interface*

Wang Cheng-Long¹⁾ Wang Qing-Yu^{1)†} Zhang Yue²⁾ Li Zhong-Yu¹⁾
Hong Bing¹⁾ Su Zhe¹⁾ Dong Liang¹⁾

1) (*College of Nuclear Science and Technology, Fundamental Science on Nuclear Safety and Simulation Technology Laboratory, Harbin Engineering University, Harbin 150001, China*)

2) (*Nuclear and Radiation Safety Center, MEP, Beijing 100082, China*)

(Received 31 December 2013; revised manuscript received 5 June 2014)

Abstract

Continuous silicon carbide (SiC) fiber-reinforced SiC (SiC_f/SiC) composites have been considered to be used as structural materials in advanced nuclear reactors for its excellent properties. Their mechanical properties have been greatly improved during the last decade. But the radiation damage at the SiC and pyrolytic carbon interface would degrade the mechanical integrity of the composites, while the mechanism of degradation is remaining unknown at present. In this study, molecular dynamics simulations have been used to model the irradiation cascade of five SiC/C composite systems. According to the angle between the graphite layer and the interface, the models are marked as M0, M28, M56, M77 and M90, in which the number represents the angle. Forty primary knock-on atoms (PKAs) at different positions in each composite system are used to bombard the interface. In each run a collision cascade may be initiated by giving one of the 40 atoms 1.5 keV kinetic energy. The relationships between the distribution of defects and simulation time and PKA position are systematically studied, and compared with those in bulk SiC, which are marked as MW. Results show that the radiation damage resistance of SiC/C interface is significantly lower than bulk SiC, and the interface structure has an impact on the number of defects. Radial distribution function (RDF) is employed to examine the coordination of interfacial atoms. The results show that the higher the density of graphite atoms in the interface, the larger impact the irradiation on the RDF and coordination.

Keywords: SiC/C interface, irradiation, molecular dynamics

PACS: 34.20.-b, 71.15.Pd

DOI: [10.7498/aps.63.153402](https://doi.org/10.7498/aps.63.153402)

* Project supported by the Fundamental Research Funds for the Central Universities, China (Grant Nos. HEUCFT1103, HEUCF131507).

† Corresponding author. E-mail: wangqingyu@hrbeu.edu.cn