

温度及深度对钛中氦泡释放过程影响的分子动力学研究

梁力 谈效华 向伟 王远 程焰林 马明旺

A molecular dynamics study of temperature and depth effect on helium bubble released from Ti surface

Liang Li Tan Xiao-Hua Xiang Wei Wang Yuan Cheng Yan-Lin Ma Ming-Wang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 046103 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.046103

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.046103>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I4>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

考虑界面散射的金属纳米线热导率修正

Thermal conductivities of metallic nanowires with considering surface and grain boundary scattering

物理学报.2013, 62(18): 186501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.186501>

组合结构化合物 $\text{Ho}_2\text{Ni}_{7-x}\text{Fe}_x$ ($x=0\text{---}3.0$) 的晶体结构、结构转变和磁性

Structure transformation and magnetisms in $\text{Ho}_2\text{Ni}_{7-x}\text{Fe}_x$ compounds

物理学报.2013, 62(1): 016103 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.016103>

非简谐振动对纳米金刚石表面性质的影响

The influence of anharmonicity on the surface effect in nanodiamond

物理学报.2012, 61(10): 106501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.106501>

聚对苯撑/ $\text{LiNi}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ 纳米复合热电材料的制备及其性能研究

Study on the preparation and properties of polyparaphenylene/ $\text{LiNi}_{0.5}\text{Fe}_2\text{O}_4$ anocomposite thermoelectric materials

物理学报.2012, 61(7): 076502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.076502>

第一性原理研究空位点缺陷对高压下 LiF 的电子结构和光学性质的影响

Effects of the vacancy point-defect on electronic structure and optical properties of LiF under high pressure:

A first principles investigation

物理学报.2011, 60(2): 026102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.026102>

温度及深度对钛中氦泡释放过程影响的分子动力学研究*

梁力 谈效华 向伟 王远 程焰林 马明旺†

(中国工程物理研究院电子工程研究所, 绵阳 621999)

(2014年6月24日收到; 2014年9月22日收到修改稿)

利用分子动力学模拟方法对温度及He泡深度给金属Ti内He泡的体积、压强和释放过程等带来的影响进行了研究. 首先, 通过研究室温下He泡在金属Ti内不同深度处的状态, 得到He泡的形状、压强、体积等物理量随其深度的变化规律. 发现He泡压强随其深度增加逐渐变大, 体积则逐渐减小, 但当He泡深度增大到2.6 nm时, 二者均维持在某个固定值附近. 然后对包含有He泡的Ti体系在温度作用下的演化过程进行了模拟, 发现不同深度处He泡从金属Ti内释放出来所需要的临界温度有很大差别, 总体来看He泡越深, 释放所需的临界温度越高. 但不同温度下He原子的释放速率没有明显差别, 释放过程几乎均为瞬间完成. 最后通过对He泡内部压强和其上方金属Ti薄层的抗张强度进行统计对比, 阐述了金属Ti体内He泡的释放机制: 当He泡内部压强大于其上方Ti薄层抗张强度时, He泡就会将Ti薄层撕裂, 从而使He原子得到释放.

关键词: 氦泡, 氦同位素, 金属Ti, 分子动力学

PACS: 61.66.-f, 65.80.-g, 71.15.Pd

DOI: 10.7498/aps.64.046103

1 引言

由于金属及其合金具有优良的物理化学特性, 它们经常被用在氢的贮存与输运过程中. 随着核聚变技术的发展, 有关氢同位素尤其是氦在金属中贮存方面的研究与应用也日益引起了人们的关注. 与氢不同, 氦在金属体内贮存的过程中, 会发生 β 衰变, 其产物 ^3He 是一种闭壳层原子, 它几乎不溶于任何金属材料^[1-3]. 因此, ^3He 在金属体内极易扩散, 并在缺陷处聚集^[1,4]形成He泡, 引起基体材料肿胀, 降低其力学性能^[5,6]. 当大量He泡从材料表面破裂释放时, 便会造成金属He脆和表面粉化, 从而缩短材料的使用寿命^[7]. 因此, 对金属中He泡的释放问题进行研究是十分有意义的^[8,9].

最近几十年人们已经开展了很多金属中氦行为的实验研究^[10-14]. Cipiti和Kulcinski^[12]运用

电镜对不同温度下含He金属钨的表面状态进行了观察. Li等^[13]利用X射线衍射及慢正电子湮没等方法对含有不同He浓度的金属Ti薄膜的晶格结构及空位缺陷分布进行了研究. 刘望等^[14]利用增强质子背散射、扫描电子显微镜、X射线衍射分别对铜钨多层膜中He含量、截面形貌和相结构进行了分析, 并研究了纳米多层膜对氦泡生长的影响. 然而由于研究手段的限制, 利用实验方法很难对金属中He的释放机理进行深入讨论. 因此, 围绕这一问题, 开展了分子动力学模拟方法的研究. Wang等^[15]对室温下金属Pd表面不同深度处He泡的释放过程进行了模拟, 得到了He泡破裂与其深度的关系. Zhang等^[16]通过对不同尺寸的He泡从金属Ti表面释放过程的观察, 揭示了He泡的释放与其大小和所需阈值温度的关系. 且运用分子动力学方法对金属Ti中氦泡的压强进行了计算^[17], 给出了氦泡压强与其内部He/V比值的关系, 以及不同

* 国家自然科学基金(批准号: 51406187)、中国工程物理研究院科学技术发展基金(批准号: 2014B0401060)和中国工程物理研究院电子工程研究所科技创新基金(批准号: S20140805)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: caepiece@163.com

温度下压强与其半径的关系, 并以此为基础建立了氦泡的状态方程. 汪俊等^[18]模拟了氦在钨中的扩散聚集行为, 获得了扩散迁移能, 并从能量角度考察了氦团簇形成初期的生长机理. 可以看出, 对金属中 He 泡的演化行为进行微观机理研究的过程中, 分子动力学模拟是一种有力的工具. 但是到目前为止, 关于温度和深度对 He 泡从金属表面释放所带来的影响及微观机理的认识还没有展开深入的研究.

金属 Ti 由于具有吸氢密度高、室温平衡压低和吸放氢(氦)速率快等优点^[19], 早已成为一种常见的贮氢(氦)材料并引起了人们的广泛关注. 因此, 本文将以金属 Ti 作为研究对象, 采用分子动力学方法对温度与深度给金属 Ti 内 He 泡的体积、压强及释放过程等方面带来的影响进行研究, 并以此为基础揭示金属体内 He 泡的破裂释放机理.

2 模拟方法

本文中模拟工作利用的软件为经典分子动力学模拟软件 LAMMPS (large-scale atomic/molecular massively-parallel simulator). 建立的金属 Ti 体系为密排六方结构, 大小约为 $102 \text{ \AA} \times 118 \text{ \AA} \times 93 \text{ \AA}$, 共包含 64000 个原子. 本文中 [100] 和 [001] 方向均采用周期性边界, [010] 方向则设定为自由边界. 本模拟中 [100] 及 [001] 方向仍对应六角晶系的 a 轴及 c 轴方向, [010] 方向对应于 a 轴垂直的方向, 基矢长度为 $\sqrt{3}a/2$. 金属 Ti 原子之间的相互作用由嵌入原子方法 (embedded atom method)^[20] 作用势描述. Ti 原子和 He 原子之间的作用势通过第一性原理方法拟合而得^[21]

$$V(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{4.35} - 3.21 \left(\frac{r_0}{r} \right)^{1.4} \right], \quad (1)$$

其中, $\varepsilon = 0.02617 \text{ eV}$, $r_0 = 4.7288 \text{ \AA}$. He 原子之间的相互作用采用 Lennard-Jones 作用势^[22] 描述:

$$V(r) = \varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (2)$$

其中, $\varepsilon = 0.000876 \text{ eV}$, $\sigma = 2.559 \text{ \AA}$.

本模拟中, 先将金属体内某一指定区域内的 Ti 原子去除, 再在此区域内随机添加若干 He 原子, 形成 He 泡. 如图 1 所示, He 泡的形状被设定为球体, He 泡的深度 h 由体系的自由表面与 He 泡中心之间的距离表示, He 泡的半径用 r 表示, He 泡上顶点与

体系自由表面之间金属 Ti 薄层的厚度为 t , 则有关系 $t = h - r$.

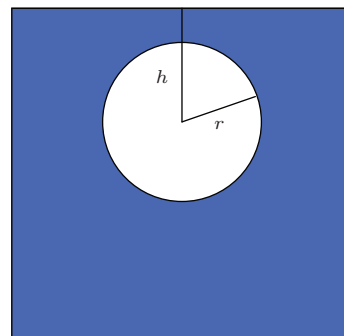


图1 (网刊彩色) 金属 Ti 体系中 He 泡示意 (蓝色区域代表金属, 白色区域代表 He 泡)

在 He 泡建立以后, 首先将含有 He 泡的体系进行充分弛豫, 使其避免因随机放置而产生的 He 原子之间的距离过近、相互作用过大的现象. 然后再将含有不同深度 He 泡的金属 Ti 体系由室温升高到某预设温度, 并在该温度下进行保温处理, 研究预设温度下 He 泡的形状、体积及压强等特性. 为了重点研究温度和深度给 He 泡破裂带来的影响, 本模拟中 He 泡半径 r 均设定为 1 nm , 其内包含有 723 个 He 原子, 即 He 泡内 He 原子与空位的数目比约为 3.

3 结果与分析

首先, 通过研究室温下 He 泡在金属 Ti 内不同深度处的状态, 得到 He 泡的形状、压强、体积等物理量随其深度的变化规律; 然后对包含有 He 泡的 Ti 体系在温度作用下的演化过程进行模拟, 得到不同深度处 He 泡从金属 Ti 内释放所需要的临界温度及不同温度下 He 原子的释放速率; 最后通过对 He 泡内部压强和其上方金属 Ti 薄层的抗张强度进行统计对比, 阐述了金属 Ti 体内 He 泡的释放机理.

3.1 室温下不同深度处 He 泡的特性

为了研究深度对金属 Ti 体内 He 泡的影响, 将含有 He 泡的金属 Ti 体系维持在室温, 并利用 NVT 系综弛豫 10 ps , 使其达到平衡状态, 结果发现 He 泡深度不同, 其形状也不尽相同. 如图 2 所示: 当 He 泡深度 h 在 $2.2\text{--}3.0 \text{ nm}$ 的范围内时, 经充分弛豫后其形状基本上仍为球体, 且保持对称性不变; 当 h 小于 2.0 nm 时, He 泡由球体转变为椭球体, 垂直于金属表面的方向被拉长, 导致 He 泡与金

属表面之间的Ti薄层也出现形变,由平面变成鼓包状,但所有的He原子仍被包含在金属体内;但当He泡深度 h 为1.5 nm时,He泡在弛豫一段时间后开始破裂,He原子如火山喷发式从金属体内释放出来.所以室温下金属Ti体内He泡破裂的临界深度为1.5 nm.也就是说,在金属Ti表面下1.5 nm的深度内,不会有He泡存在,因为He泡一旦到达这个区域,就会被释放掉,这与实验上观察到的现象^[23]是一致的.

图3展示了深度为1.5 nm处He泡的破裂释放过程:(a)为He泡最初的形态;(b)为3.2 ps时,He泡已由球体变为椭球体,并将其上方的金属薄层拱出鼓包;(c)为7.4 ps时,开始有He原子从金属体内

逃逸出来;(d)为10 ps时,He原子通过连接He泡与金属表面的通道被大量释放出来.He泡释放速率很大,释放过程几乎在一瞬间完成.

另外,我们还对室温下不同深度处He泡压强与体积的变化规律进行了统计,结果如图4所示.由于He原子在金属内部的行为与气体状态下完全不同,He泡内部压强相当高,故本模拟中采用修正的气体状态方程,具体形式如下^[24]:

$$P = \frac{Nk_B T}{V_{He}} + \frac{1}{3V_{He}} \left\langle \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \cdot \mathbf{F}_i \right\rangle, \quad (3)$$

式中, P 为He泡内部压强, N 为He原子个数, k_B 为玻尔兹曼常数, V_{He} 为He泡体积, \mathbf{r}_i 与 \mathbf{F}_i 分别为He原子之间的距离和相互作用力.

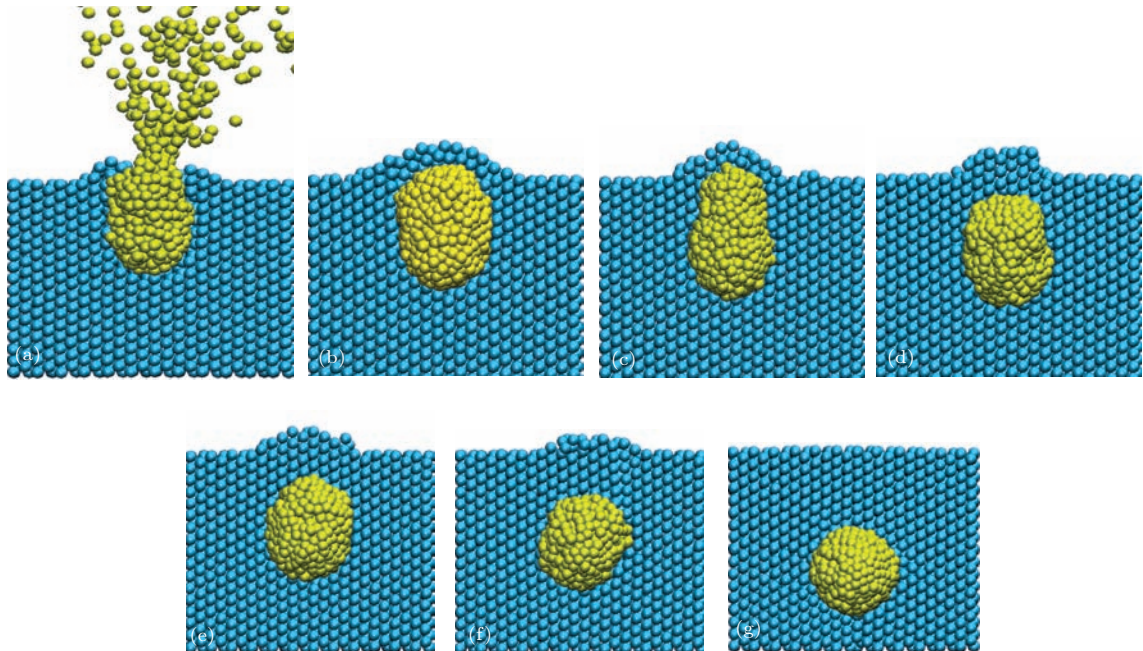


图2 (网刊彩色)不同深度处的He泡弛豫10 ps后的形态(图中蓝色球体代表金属Ti原子,黄色球体代表He原子) (a) 1.5 nm; (b) 1.6 nm; (c) 1.8 nm; (d) 2.0 nm; (e) 2.2 nm; (f) 2.4 nm; (g) 3.0 nm

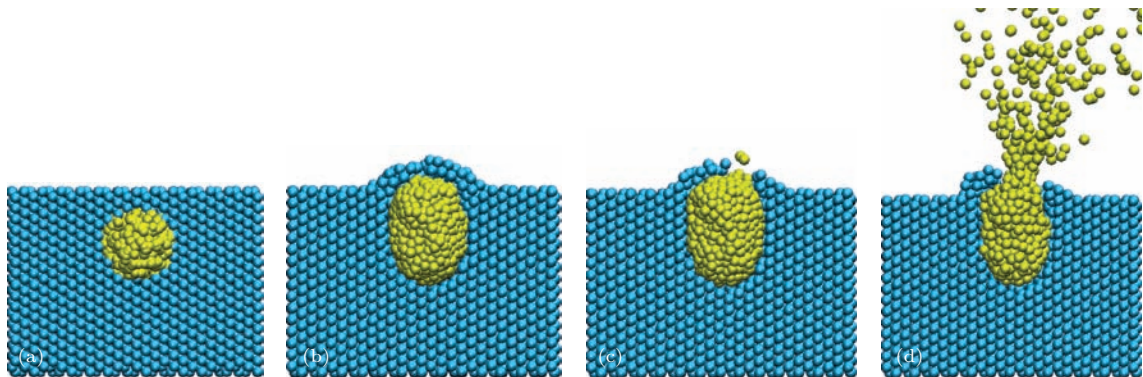


图3 (网刊彩色)深度为1.5 nm处He泡的动态释放过程(图中蓝色球体代表金属Ti原子,黄色球体代表He原子) (a) 0 ps; (b) 3.2 ps; (c) 7.4 ps; (d) 10 ps

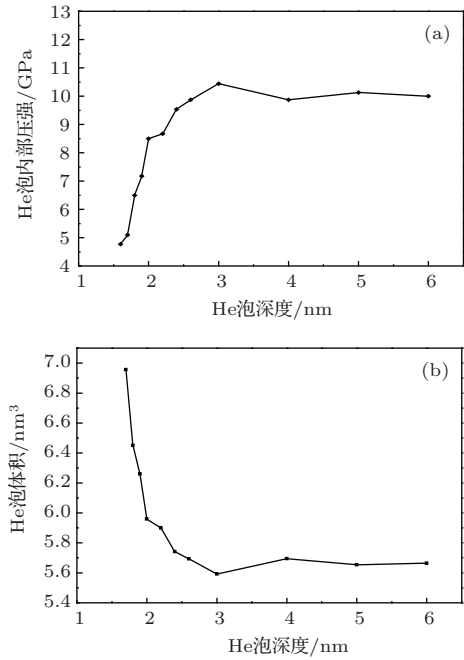


图4 室温下 He 泡的内部压强和体积随其深度的变化 (a) 压强; (b) 体积

从图4可以看出,当He泡深度较小时,其内部压强与深度成正比,但当深度大于2.6 nm时,压强值基本保持在10 GPa左右,波动很小. He泡体积的变化也呈现类似的变化趋势,但相反的是随深度的增加,体积逐渐小,当深度大于2.6 nm时,体积则基本保持在5.7 nm³左右. 这种现象出现的原因将会在后面进行解释.

3.2 He泡在温度作用下的释放规律

为了对He泡在温度作用下的释放规律进行研究,将包含有不同深度He泡的金属Ti体系升温到预设温度,并在此温度下保持一段时间,观察He泡的状态. 发现原本在室温下由于深度太大不会被释放的He泡在高温下出现了释放现象,释放过程与室温下非常相似,几乎是瞬时喷发式释放.

图5给出了不同深度处He泡从金属体内释放所需的最低温度(临界温度). 从图5可以看出,总体上He泡深度越大,所需的临界释放温度越高. 可将此曲线划分为两个阶段: I阶段, He泡深度在1.5—1.8 nm范围内,曲线斜率很小,即随着深度每增加1 nm,所需的临界释放温度只增加十几开尔文; II阶段, He泡深度在1.8—2.0 nm范围内,曲线斜率急剧增加,即随着深度每增加1 nm,所需的临界释放温度要增加几百开尔文. 另外,模拟中还发

现,当对深度大于2 nm的He泡进行升温时,即使将体系的温度升高至将近1000 K,金属Ti晶格已出现局部晶格无序现象,He泡也没有发生破裂,这种现象出现的原因将会在后面进行解释.

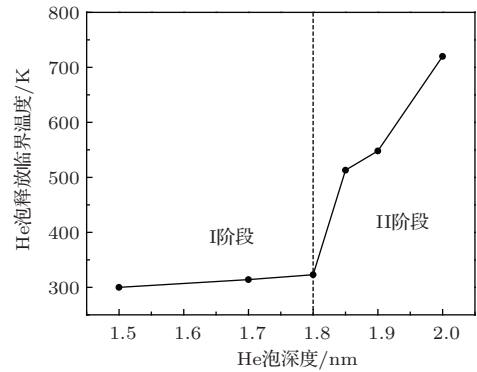


图5 He泡从金属Ti内释放出来所需的温度随He泡深度的变化

接着对He原子的释放过程进行了研究,图6给出了深度为1.8, 1.85和2 nm处的He泡分别在其临界释放温度下所释放出的He原子总数随时间的变化. 从图6可以看出,各种情况下的释放过程基本一致,均在约30 ps的时间范围内大部分He原子已从金属体内逃逸出去. 图6的内插图给出了不同情况下He泡的释放速率随时间的变化. 随着时间的增加,释放速率首先在2—3 ps的时间范围内从0/ps激升到150/ps,达到速率峰值;然后在接下来的约10 ps时间内又阶越式下降到很小的水平. 这种现象是较易理解的,初期释放速率的快速上升是由于He泡内部压强较大,很多He原子就借助其内部巨大的压力从金属体内迅速冲出去;后期,He泡内剩余的原子已不太多,其内部的压强急剧下降,因此释放速率也开始快速减小.

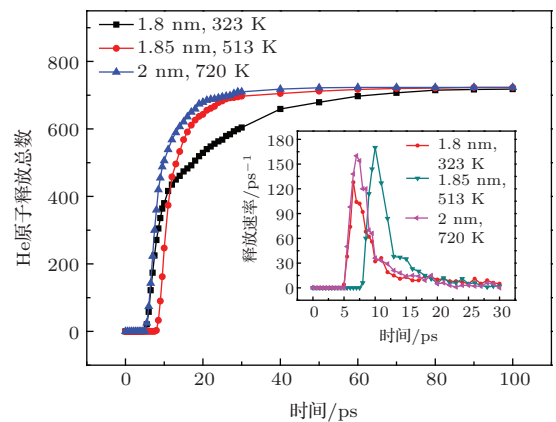


图6 (网刊彩色) 深度为1.8, 1.85和2 nm的He泡在其临界释放温度下释放的He原子总数随时间的变化规律

3.3 金属Ti中He泡的破裂释放机理研究

为了阐述金属Ti中He泡的破裂释放机理, 分别对不同厚度的Ti薄层在300, 400, 500, 600和700 K温度下的抗张强度进行了计算, 并分别统计了深度为2.0和4.0 nm的He泡在不同温度下的压强和体积.

图7所示为Ti薄层抗张强度的计算结果. 从图7可以看出, 强度随其厚度的增大而增大, 随温度的升高而降低, 如在400 K下, 厚度为0.6 nm的金属薄层抗张强度为10.96 GPa, 而厚度为1.5 nm的金属薄层则增加到11.56 GPa; 厚度为1.2 nm的金属薄层, 室温下抗张强度为12.5 GPa, 但当温度升高到700 K时, 强度降低到了9.3 GPa左右. 另外, 从图7还可以看出, 不管在室温还是在高温状态下, 当Ti薄层的厚度 t 大于1.6 nm时, 其抗张强度将基本保持不变. 这正好解释了之前提到的室温下He泡深度 h 大于2.6 nm时, 其内部压强与体积会维持在一个稳定值附近. 这是因为当He泡的深度较小时, 其上方金属薄层的抗张强度也较小, He泡对金属晶格的挤压效应比较明显, 所以在He泡内部压强的作用下, 其体积的膨胀程度较大, He泡膨胀的同时也对其内部压强产生一定程度的缓解与释放. 随着He泡深度的加深, 金属薄层的抗张强度越来越大, 所以He泡的可膨胀空间越来越小, 当其深度达到2.6 nm后, 金属抗张强度几乎不再改变, 因此He泡对周围金属晶格的挤压程度和其自身的形变程度则将基本保持不变, 从而导致He泡的内部压强和体积也将保持在一个稳定值附近(这里用到了前面提到的关系式 $t = h - r$).

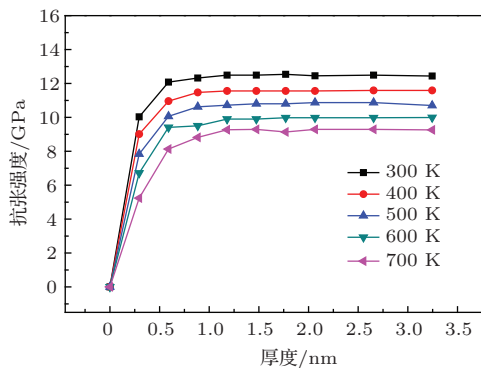


图7 不同温度下Ti薄层的抗张强度随其厚度的变化

对深度为2.0和4.0 nm的He泡分别在300, 400, 500, 600和700 K温度下的压强和体积的计

算结果如图8所示. 为了方便比较, 图8(a)还给出了厚度分别为0.9和3.2 nm的Ti薄层的抗张强度随温度的变化趋势, 由实线表示; 虚线表示的则是He泡的内部压强随温度的变化. 图8(b)所示为深度为2.0和4.0 nm的He泡体积随温度的变化趋势.

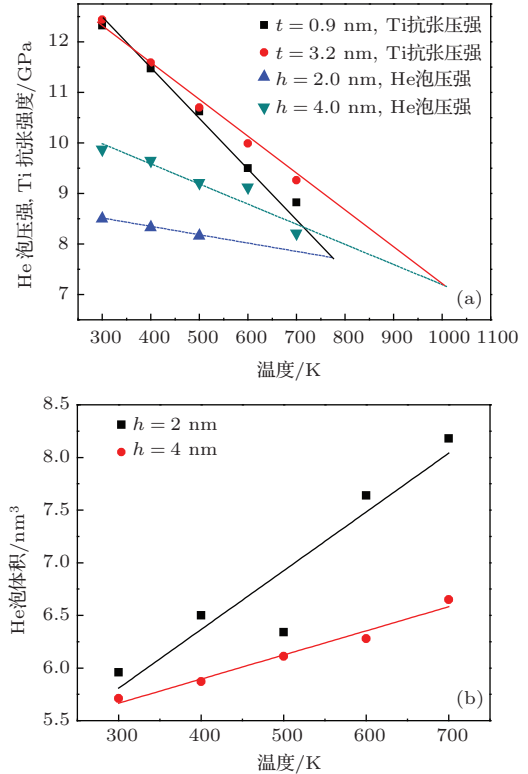


图8 (a)不同温度下He泡压强与金属强度的关系; (b)不同深度处He泡体积随温度的变化

从图8(a)可以看出, 随温度升高, 相同厚度的Ti薄层抗张强度呈线性下降, 且厚度越小, 下降越明显. He泡压强也随温度升高而下降, 但深度小的He泡下降程度更平缓. 首先对He泡压强随温度升高而下降的变化趋势进行分析. 因为He泡上方金属薄层的抗张强度随温度升高而减小, 在高温下其对He泡的挤压程度则有所减弱, 且随温度升高金属体内He原子的运动更剧烈, 因此He泡对周围晶格的挤压程度便更大, 故其体积会有所增加, 如图8(b)所示, 且深度越小的He泡体积增加越明显. 所以, 在上述作用下, 温度越高, He泡的内部压强得到的缓解和释放的程度越大, 便出现了压强随温度升高而减小的趋势.

另外, 将深度为2.0 nm处的He泡压强曲线与厚度为0.9 nm的Ti薄层抗张强度曲线延长相交, 发现交点的横坐标标在700—800 K之间, 这与图5中给出的深度为2 nm的He泡破裂所需的临界温度

720 K 很接近. 而将深度为 4.0 nm 的 He 泡压强曲线与厚度为 3.2 nm 的 Ti 薄层抗张强度曲线延长相交, 发现交点的横坐标在将近 1000 K 处, 这也与前面提到的将深度大于 2 nm 的 He 泡进行升温, 即使体系的温度升高至将近 1000 K, 金属晶格已出现局部熔化时, He 泡也没有发生破裂的现象相符合. 从上面的分析可以得出结论: 当某深度处的 He 泡压强曲线与其上方相应厚度的 Ti 薄层强度曲线相交时, He 泡就会发生破裂, 也就是说当 Ti 薄层的抗张强度不足以支撑 He 泡内部压强给它带来的挤压、冲击时, He 泡便会把 Ti 薄层撕裂, 形成一条连接 He 泡与体系自由表面的通道, He 原子便通过此通道释放出去, He 泡发生破裂. 此交点的横坐标即对应该深度处 He 泡破裂所需的临界释放温度.

4 结 论

利用分子动力学模拟方法对温度与 He 泡深度给金属 Ti 内 He 泡的体积、压强及释放过程等方面带来的影响进行了研究. 首先, 研究室温下 He 泡在金属 Ti 内不同深度处的状态, 发现经过充分弛豫后, 深度较小处的 He 泡由球体变为椭球体, 且深度为 1.5 nm 的 He 泡经过短暂弛豫过程便发生破裂; He 泡内部压强随深度增加逐渐增大, 但当深度大于 2.6 nm 时, 压强值将基本保持在 10 GPa 左右; 相反, He 泡的体积随深度增加逐渐减小, 当深度大于 2.6 nm 时, 体积则基本保持在 5.7 nm^3 左右. 然后, 对包含有 He 泡的 Ti 体系在温度作用下的演化过程进行了模拟, 发现高温可使更深处的 He 泡发生破裂, 临界释放温度随 He 泡深度呈增加趋势; 且不同温度下的释放过程基本一致, 均在约 30 ps 时间内几乎将全部 He 原子释放出去. 最后, 通过对 He 泡内部压强和其上方金属 Ti 薄层的抗张强度进行统计对比, 发现当 Ti 薄层抗张强度小于其下方 He 泡内部压强时, He 泡就会将 Ti 薄层撕裂, 形成一条连接 He 泡与体系自由表面的通道, 使 He 原子得到释放, 从而揭示了金属 Ti 体内 He 泡的释放机理.

参考文献

- [1] Rajainmaki H, Linderroth S, Hansen H E, Nieminen R M, Bentzon M D 1988 *Phys. Rev. B* **38** 1087
- [2] Singh A, Maji S, Nambissan P M G 2001 *J. Phys.: Condens. Matter* **13** 177
- [3] Trinkaus H, Singh B N 2003 *J. Nucl. Mater.* **323** 229
- [4] Iwakiri H, Yasunaga K, Morishita K, Yoshida N 2000 *J. Nucl. Mater.* **283–287** 1134
- [5] Ehrlich K, Bloom E E, Kondo T 2000 *J. Nucl. Mater.* **283–287** 79
- [6] Kawano S, Sumiya R, Fukuya K 1998 *J. Nucl. Mater.* **258–263** 2008
- [7] Wang P X, Song J S 2002 *Helium in Materials and the Permeation of Tritium* (Beijing: National Defense Industry Press) pp1, 2 (in Chinese) [王佩璇, 宋家树 2002 材料中氦及氚渗透 (北京: 国防工业出版社) 第 1, 2 页]
- [8] Li N, Fu E G, Wang H, Carter J J, Shao L, Maloy S A, Misra A, Zhang X 2009 *J. Nucl. Mater.* **389** 233
- [9] Lindau R, Moslang A, Preininger D, Rieth M, Rohrig H D 1999 *J. Nucl. Mater.* **271–272** 450
- [10] Birtcher R C, Donnelly S E, Templier C 1994 *Phys. Rev. B* **50** 764
- [11] Galindo R E, Veen A V, Evans J H, Schut H, Hosson J T M D 2004 *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **217** 262
- [12] Cipiti B B, Kulcinski G L 2005 *J. Nucl. Mater.* **347** 298
- [13] Li Y, Deng A H, Zhou Y L, Zhou B, Wang K, Hou Q, Shi L Q, Qin X B, Wang B Y 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 047801
- [14] Liu W, Wu Q Q, Chen S L, Zhu J J, An Z, Wang Y 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 176802 (in Chinese) [刘望, 邬琦琦, 陈顺礼, 朱敬军, 安竹, 汪渊 2012 物理学报 **61** 176802]
- [15] Wang L, Hu W Y, Xiao S F, Yang J Y, Deng H Q 2011 *J. Mater. Res.* **26** 416
- [16] Zhang B L, Wang J, Li M, Hou Q 2013 *J. Nucl. Mater.* **438** 178
- [17] Zhang B L, Wang J, Hou Q 2011 *Chin. Phys. B* **20** 036105
- [18] Wang J, Zhang B L, Zhou Y L, Hou Q 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 106601 (in Chinese) [汪俊, 张宝玲, 周宇璐, 侯氢 2011 物理学报 **60** 106601]
- [19] San-Martin A, Manchester F D 1987 *Bull. Alloy Phase Diagr.* **8** 30
- [20] Daw M S, Baskes M I 1984 *Phys. Rev. B* **29** 6443
- [21] Wang J, Hou Q, Wu Z C, Long X G, Wu X C, Luo S Z 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 1666
- [22] Jorgensen W L, Chandrasekhar J, Madura J D, Impey R W, Klein M L 1983 *J. Chem. Phys.* **79** 926
- [23] Snow C S, Brewer L N, Gelles D S, Rodriguez M A 2008 *J. Nucl. Mater.* **374** 147
- [24] Allenand M P, Tildesley D J 1987 *Computer Simulation of Liquids* (Oxford: Clarendon) pp56–60

A molecular dynamics study of temperature and depth effect on helium bubble released from Ti surface^{*}

Liang Li Tan Xiao-Hua Xiang Wei Wang Yuan Cheng Yan-Lin Ma Ming-Wang[†]

(Institute of Electronic Engineering, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621999, China)

(Received 24 June 2014; revised manuscript received 22 September 2014)

Abstract

Using molecular dynamics simulation, the effects of temperature and depth of helium bubble on volume, pressure and releasing process of helium bubble in metal Ti are investigated. First, through studying the states of helium bubble at different depths at room temperature, the variation regularities of volume, pressure and releasing process of helium bubble with its depth are acquired. The results show that with depth augmenting, the pressure of helium bubble increases gradually, while the volume decreases, but these two parameters are kept at some level when the depth is greater than 2.6 nm. Then, the evolutions of model system with helium bubble at various temperatures are simulated. The critical temperatures of helium bubble released from Ti surface at different depths are greatly different. On the whole, the critical temperature is in direct proportion to depth. But the releasing rates at different temperatures are almost unanimous. Finally, the mechanism of helium bubble released from Ti surface is explained on the basis of statistics and analyses of pressure of helium bubble and tensile strength of the metal thin film above the bubble. It is found that helium bubble would tear the Ti film above it when the pressure in helium bubble is greater than the strength of Ti film, and then helium atoms will be released from the metal.

Keywords: helium bubble, isotope of hydrogen, metal Ti, molecular dynamics simulation

PACS: 61.66.-f, 65.80.-g, 71.15.Pd

DOI: [10.7498/aps.64.046103](https://doi.org/10.7498/aps.64.046103)

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51406187), the Science and Technology Development Foundation of China Academy of Engineering Physics (Grant No. 2014B0401060), and the Technology Innovation Foundation of Institute of Electronic Engineering, China Academy of Engineering Physics (Grant No. S20140805).

[†] Corresponding author. E-mail: caepiee@163.com