



不同温度下bcc-Fe中螺位错滑移及其与□位错环相互作用行为

王瑾 贺新福 曹晗 贾丽霞 豆艳坤 杨文

Screw dislocation slip and its interaction with □ dislocation loop in bcc-Fe at different temperatures

Wang Jin He Xin-Fu Cao Han Jia Li-Xia Dou Yan-Kun Yang Wen

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 068701 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20201659

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201659>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

体心立方Fe中<100>位错环对微裂纹扩展影响的分子动力学研究

Effect of interstitial dislocation loop on expansion of micro-crack in body centered cubic iron investigated by molecular dynamics method

物理学报. 2020, 69(11): 116102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200317>

表面效应对铁<100>间隙型位错环的影响

Surface effect on interstitial dislocation loop in iron

物理学报. 2020, 69(3): 036101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191379>

氦泡在bcc钨中晶界处成核长大的分子动力学模拟

The nucleation and growth of Helium bubbles at grain boundaries of bcc tungsten: a molecular dynamics simulation

物理学报. 2020, 69(4): 046103 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191069>

层错四面体对单晶铜层裂行为影响的分子动力学研究

Effect of stacking fault tetrahedron on spallation of irradiated Cu via molecular dynamics study

物理学报. 2020, 69(3): 036201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191425>

纳米尺度下Si/Ge界面应力释放机制的分子动力学研究

Molecular dynamics study of release mechanism of stress at Si/Ge interface on a nanoscale

物理学报. 2019, 68(2): 026801 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181530>

Fe合金FCC-BCC原子尺度台阶型马氏体相界面迁移行为的分子动力学模拟研究

Molecular dynamics simulation of migration behavior of FCC-BCC atomic terrace-step phase boundary in iron-based alloy

物理学报. 2020, 69(13): 136102 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191903>

不同温度下 bcc-Fe 中螺位错滑移及其与 $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ 位错环相互作用行为*

王瑾[†] 贺新福 曹晗 贾丽霞 豆艳坤 杨文

(中国原子能科学研究院, 反应堆工程技术研究部, 北京 102413)

(2020 年 10 月 8 日收到; 2020 年 11 月 9 日收到修改稿)

采用分子动力学方法模拟研究了不同温度下 bcc-Fe 中螺位错滑移行为和螺位错与 $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ 位错环相互作用机制. 结果表明, 螺位错在低温 2 K 剪切应力下主要沿 $(\bar{2}11)$ 面滑移; 随温度逐渐升高到 823 K, 它容易发生交滑移, 该交滑移在 $(\bar{1}10)$ 和 $(\bar{2}11)$ 面之间交替进行, 因此随温度升高, 临界剪切应力逐渐降低. 当螺位错滑移靠近位错环时, 不同温度下螺位错与位错环相互作用机制不同: 低温 2 K 时, 螺位错与位错环之间存在斥力作用, 当螺位错滑移靠近位错环过程中, 螺位错发生交滑移, 切应力比无位错环时有所降低; 中温 300 K 和 600 K 时, 螺位错与位错环间斥力对螺位错的滑移影响减弱, 螺位错会滑移通过位错环并与之形成螺旋结构, 阻碍螺位错继续滑移, 切应力有所升高; 高温 823 K 时, 螺位错因热激活更易发生交滑移, 位错环也会滑移, 两者在整个剪切过程中不接触, 剪切应力最低.

关键词: bcc-Fe, 螺位错, 位错环, 分子动力学

PACS: 87.10.Tf, 87.15.A-

DOI: 10.7498/aps.70.20201659

1 引言

在聚变反应堆中, 核结构材料将遭受恶劣的工作环境 (高温、高压和高通量的中子辐照), 由此材料会发生级联碰撞和 He 辐照损伤, 经长时间服役, 出现肿胀、硬化和脆化等性能恶化^[1-3]. 低活化铁素体/马氏体钢 (reduced activation ferritic/martensitic steels, RAFM) 作为典型的体心立方 (bcc) 结构 Fe 基材料, 因具有抗高热负荷性能, 抗高能粒子辐照性能和较好力学性能成为未来聚变堆候选结构材料. 然而目前 RAFM 钢的发展瓶颈为辐照脆化和高温强度不足. 辐照硬化脆化主要归因于位错环、富 Cr 析出物、He 泡等辐照缺陷阻碍位错运动^[4-25]. Hardie 等^[4]发现 Fe-Cr 合金在辐照下会产生富 Cr 析出相, 随后, 文献^[5-7]采用分子

动力学方法对富 Cr 析出物与位错的相互作用机制及硬化机理进行了研究, 模拟发现富 Cr 析出物会阻碍位错运动, 引起剪切应力增大, 且不同析出物尺寸、Cr 含量和切过位置均会对硬化效果产生不同影响. 与之类似, He 泡^[8-10]和位错环^[11-15]也会阻碍位错滑移进而产生硬化. Terentyev 等^[11]发现 $\frac{1}{2}[\bar{1}11]$ 位错环与刃位错之间存在排斥作用, 而当位错环上富集 Cr 时则由排斥转为吸引. Rong 等^[12]发现 $\frac{1}{2}[111]$ 位错环迁移能很低, 容易被刃位错拖拽并随之一起滑移. $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ 位错环与刃位错的相互作用与温度 (300—900 K) 相关^[13]: 当温度较高时, 位错环被刃位错拖拽一起运动; 当温度较低时, 位错环会被刃位错线拖拽一段距离后从位错上分离出来. 可见, 温度会影响位错环与刃位错的相互作用机制. 近年来, Liu 和 Biner^[14]模拟研究了 100—300 K 下 $\frac{1}{2}[111]$ 位错环对螺位错滑移行为

* 国家自然科学基金 (批准号: U1867217) 和国家重点研发计划 (批准号: 2018YFE0308104) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: wangjin118114@sina.com

的影响, 结果表明, 当 $\frac{1}{2}[111]$ 位错环较小时, 环会发生旋转, 先被螺位错吸收随后又释放出位错环; 当 $\frac{1}{2}[111]$ 位错环较大时, 先形成 $[100]$ 位错片段, 最后 $\frac{1}{2}[111]$ 位错环完全转变成 $[100]$ 位错环. 然而高温下 $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ 位错环对螺位错滑移行为的研究还相对较少. 相对于刃位错而言, 螺位错因较低可移动性, 对材料的塑性变形行为具有更为重要的影响^[24,25]. 因此为了充分地理解螺位错在 bcc-Fe 结构材料中所扮演的角色, 本文模拟研究了不同温度下螺位错的滑移行为和 $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ 位错环对螺位错滑移的影响, 并详细探讨了温度对位错环和螺位错之间相互作用的影响机制.

2 原子模型与方法

为了探究螺位错滑移行为及其与 $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ 位错环相互作用机制, 构建了如图 1 所示的两种初始构型. 图 1(a) 是螺位错模型, 图 1(b) 是含 $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ 位错环的螺位错模型. 这两个模型中 x, y, z 轴取向分别为: $[112], [\bar{1}10], [11\bar{1}]$. 模型尺寸是 $40.56 \text{ nm} \times 30.28 \text{ nm} \times 14.34 \text{ nm}$ (晶格常数 $a_0 = 2.8553 \text{ \AA}$), 共包含 1528242 个原子. 螺位错滑移面法向为 $[\bar{1}10]$, 位错线方向为 $[11\bar{1}]$, 柏氏矢量方向为 $[11\bar{1}]$. 图 1(b) 中 $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ 位错环位于螺位错滑移面上, 位错环直径 1.5 nm, 距离螺位错 12 nm. 建立好模型后, 对上述模型进行能量最小化处理得到稳定构型, 随后进行模拟.

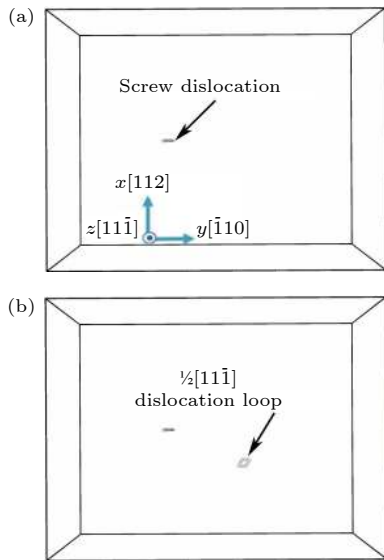


图 1 (a) 螺位错模型和 (b) 含 $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ 位错环的螺位错模型
Fig. 1. (a) Model of screw dislocation; (b) model of screw dislocation with $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ dislocation loop.

采用分子动力学程序 Lammmps^[26] 进行模拟, Fe 原子间相互作用势函数的选取来自于文献^[27]. 在整个模拟过程中, x 和 y 方向采用自由边界条件, z 方向采用周期性边界条件^[15]. 首先, 对初始构型进行能量最小化处理, 得到稳定构型; 随后, 采用 NPT 系综, 对模型在一定温度 2, 300, 600 和 823 K 下进行弛豫, 保持温度稳定; 最后, 采用 NVT 系综, 对弛豫后的构型进行剪切变形, 沿着 z 方向施加应变率为 $3.0 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$, 时间步长为 1 fs.

在模拟分析中采用开源可视化工具 OVITO (open visualization tool)^[28], 用公共近邻分析法 CNA (common neighbor analysis) 分析原子结构的转变, 位错提取算法 DXA (dislocation extraction algorithm) 分析不同柏氏矢量的位错. Fe 原子均用蓝色球形原子表示, 错排原子用白色球形原子表示, $\frac{1}{2}(111)$ 位错用绿色线条表示.

3 模拟结果与讨论

3.1 切应力-应变曲线

图 2 为不同温度下螺位错及其与 $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ 位错环模型切应力-应变曲线, 图 3(a)–(f) 分别为 2 K 下螺位错在剪切过程中不同应变下 z 截面构型图, 为了便于分析, 模型中均删除 bcc 结构的 Fe 原子, 仅剩余错排原子 (包括界面原子、间隙原子和位错结构原子). 由图 2 可知, 当温度为 2 K 时, 螺位错切应力-应变曲线包含 4 个阶段, 分别为 I, II, III 和 IV. 阶段 I 为弹性变形阶段, 该阶段内螺位错未发生移动, 模型仅发生弹性变形, 应力

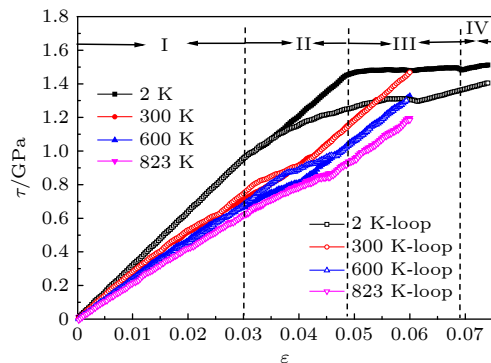


图 2 不同温度下螺位错及其与 $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ 位错环模型切应力-应变曲线

Fig. 2. Shear stress-strain (τ - ϵ) curves of screw dislocation model with and without $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ loop under different temperatures.

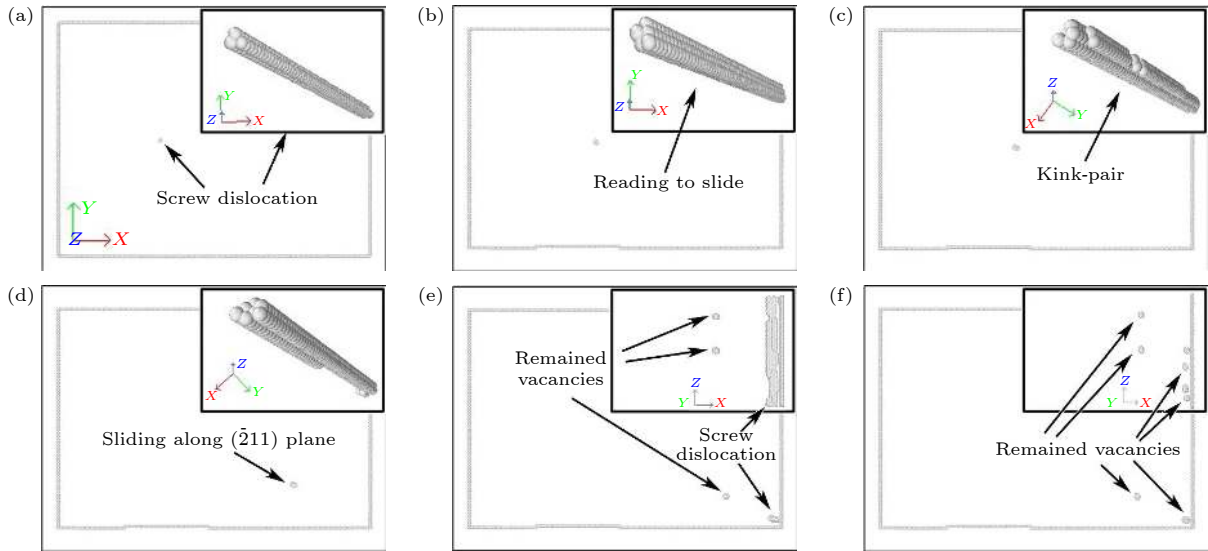


图 3 随应变变量增加的螺位错模型构型图 (a) $\varepsilon = 0$; (b) $\varepsilon = 0.03$; (c) $\varepsilon = 0.048$; (d) $\varepsilon = 0.058$; (e) $\varepsilon = 0.068$; (f) $\varepsilon = 0.075$

Fig. 3. Configurations of screw dislocation model with increasing strain: (a) $\varepsilon = 0$; (b) $\varepsilon = 0.03$; (c) $\varepsilon = 0.048$; (d) $\varepsilon = 0.058$; (e) $\varepsilon = 0.068$; (f) $\varepsilon = 0.075$.

随应变变量增加而线性增加, 应变区间和应力区间分别为 $\varepsilon = 0-0.03$ 和 $\tau = 0-0.98$ GPa, 当 $\varepsilon = 0$ 时, 构型如图 3(a) 所示, 螺位错未滑移, 稳定存在于基体中, 图 3(a) 右上角为位错结构放大图. 阶段 II 为位错滑移启动阶段, 该阶段内应力仍随应变变量增大而增大, 但由于位错已准备启动滑移, 因此曲线斜率比阶段 I 稍有降低, 应变区间和应力区间分别为 $\varepsilon = 0.03-0.048$ 和 $\tau = 0.98-1.45$ GPa, 当 $\varepsilon = 0.03$ 时, 螺位错结构发生变化, 准备启动滑移 (图 3(b)); 当 $\varepsilon = 0.048$ 时, 螺位错以扭结对形核^[29]并开始滑移 (图 3(c)). 阶段 III 为稳定滑移阶段, 如图 3(d) 和图 3(e) 所示, 位错以扭结对形式沿着 $(\bar{2}11)$ 面^[15] 稳定滑移, 应变区间 $\varepsilon = 0.048-0.068$, 该阶段内应力出现平台, 平台应力值为 1.45 GPa, 不随应变变量增大发生变化, 位错划过后在基体内残留下空位, 这些空位以聚集的错排原子显示 (图 3(e)), 是与文献 [30] 结论相似. 阶段 IV 为位错划出模型阶段, 当 $\varepsilon = 0.075$ 时, 位错已经划出模型, 基体中只剩下残余空位, 模型构型如图 3(f) 所示, 图 3(f) 右上角为临近右边界模型 x 截面局部放大图, 可见残余空位线性排列, 该阶段剪切应力引起弹性变形, 应力随应变变量增加线性增加, 应变区间和应力区间分别为 $\varepsilon = 0.068-0.075$ 和 $\tau = 1.45-1.52$ GPa. 随着温度升高和 $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ 位错环插入, 切应力-应变曲线与单根螺位错模型存在明显不同 (见图 2), 这表明温度和位错

环的存在会显著影响螺位错滑移行为, 下文 3.2 节和 3.3 节将详细阐明该滑移行为的差异.

3.2 温度对螺位错滑移行为的影响

由图 2 可知, 随温度升高, 螺位错切应力-应变曲线与 2 K 时明显不同, 均不存在应力平台阶段. 图 4(a) 和图 4(d), 图 4(b) 和图 4(e), 图 4(c) 和图 4(f) 分别为 300, 600 和 823 K 下螺位错在应变变量 $\varepsilon = 0.03$ 和 0.045 下的 z 截面构型图. 当 $\varepsilon = 0.03$ 时, 螺位错因温度升高均已发生了滑移, 如图 4(a)—(c) 所示, 模型基体 (尤其是螺位错附近) 产生大量错排原子, 600 和 823 K 下错排原子数目明显比 300 K 多, 图右上角为螺位错及其附近原子结构放大图, 这些错排原子会促进螺位错滑移, 因此温度越高, 螺位错滑移应力越低 (与图 3(b) 和图 2 相对应); 当 $\varepsilon = 0.045$ 时, 螺位错均已滑移出模型, 如图 4(d)—(f) 所示, 详细观察发现, 位错划过后在基体内会残留下空位, 这些空位排布可用来近似表征位错的滑移痕迹. 与 2 K 下模型对比发现, 300, 600 和 823 K 下位错滑移痕迹存在不同, 这主要归因于螺位错的交滑移行为. 已有研究表明, 螺位错典型滑移面为 $\{112\}$ 和 $\{110\}$ ^[15], 在本文中, 当温度从 2 K 升高到 823 K 时, 由于温度热激活作用^[13-15], 它会沿着 $(\bar{2}11)$ 和 $(\bar{1}10)$ 面发生交替滑移, 因此模型临界剪切应力逐渐降低, 与图 2 中 $\varepsilon = 0-0.045$ 时的切应力-应变曲线变化相对应;

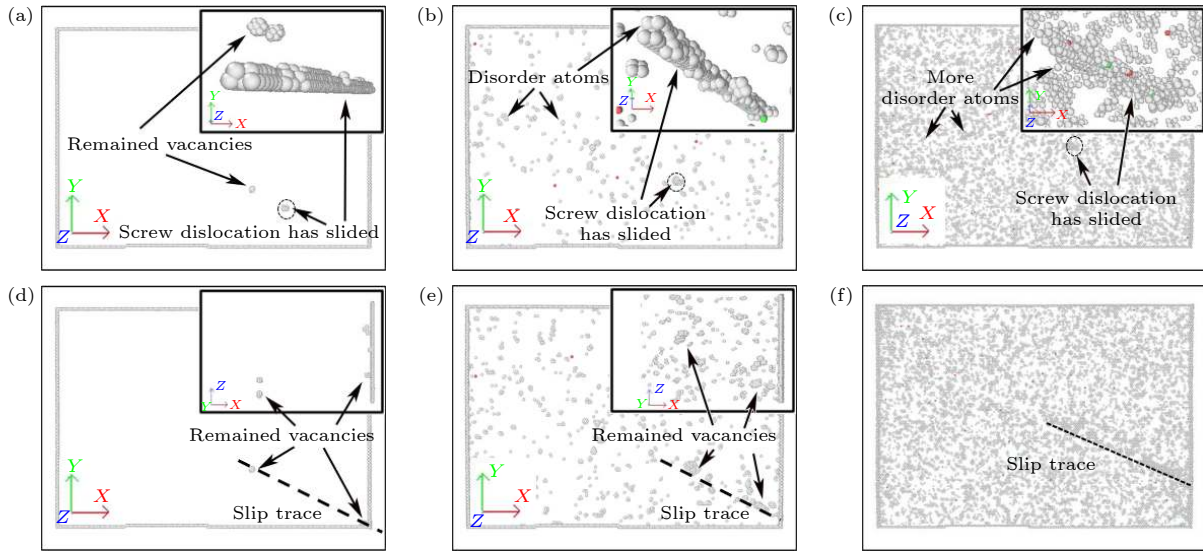


图 4 不同温度下螺位错模型在 $\varepsilon = 0.03$ (a), (b), (c) 和 0.045 (d), (e), (f) 时的构型图 (a), (d) 300 K; (b), (e) 600 K; (c), (f) 823 K
 Fig. 4. Configurations of screw dislocation model when $\varepsilon = 0.03$ (a), (b), (c) and 0.045 (d), (e), (f) under different temperatures: (a), (d) 300 K; (b), (e) 600 K; (c), (f) 823 K.

当 $\varepsilon > 0.045$ 时, 300, 600 和 823 K 下位错均已滑移出模型, 由于交滑移的发生, 位错滑移出模型时距离底端边界的位置明显比 2 K 时有所升高 (823 K 较为明显), 而应变有所降低, 这表明温度越高, 位错滑移速度越快, 交滑移越明显.

3.3 螺位错与 $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ 位错环相互作用

当模型中存在位错环时, 不同温度下位错环对螺位错滑移行为产生不同影响. 图 5(a)—(c) 分别为 2 K 下含 $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ 位错环的螺位错模型在不同应变下 z 截面构型图. 当 $\varepsilon = 0.015$ 时, 螺位错未发生滑移, 螺位错和位错环 z 截面结构如图 5(a) 所示, y 截面结构和位错环结构放大图如右上角所示; 当 $\varepsilon = 0.03$ 时, 螺位错准备发生滑移, 位错环发生旋转^[31](图 5(b)); 当 $\varepsilon = 0.06$ 时, 螺位错未滑移通过位错环, 而是从位错环上面滑过并在模型右界面上划出, 位错环完整保留在基体内, 螺位错滑移轨迹上留下残余空位缺陷 (图 5(c)). 与不含位错环模型相比, 该模型中螺位错滑移轨迹存在不同, 这主要是由于当螺位错滑移靠近位错环时, 两者之间的排斥作用^[11] 导致螺位错在 $(\bar{2}11)$ 面上滑移受阻, 它会沿着 $(\bar{1}10)$ 面滑移, 之后在 $(\bar{1}10)$ 和 $(\bar{2}11)$ 面之间发生交滑移, 因此螺位错滑移出模型时距离底端边界的位置明显升高, 模型切应力明显降低, 与图 2 中切应力-应变曲线相对应.

随着温度升高到 300 K 和 600 K 时, 螺位错

会滑移通过位错环并与位错环发生交互作用, 模型在不同应变下 z 截面构型如图 6(a)—(c) 和图 6(d)—(f) 所示. 当 $\varepsilon = 0.015$ 时, 由于温度升高, 位错环容易翻转, 螺位错也在热激活作用下已经发生了滑移 (图 6(a) 和图 6(d)), 此时螺位错与位错环间距离明显比图 5(a) 近; 当 $\varepsilon = 0.03$ 时, 螺位错沿着 $(\bar{2}11)$ 面滑到位错环处, 与之相互作用形成螺旋 (helix turn)^[14](图 6(b) 和图 6(e)), 该结构阻碍螺位错继续滑动, 因此切应力有所升高 (图 2); 之后, 螺旋只能沿着螺位错线柏氏矢量方向发生滑移, 当 $\varepsilon = 0.045$ 时, 新的 $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ 位错环从螺位错中分离出来 (图 6(c) 和图 6(f)), 该新位错环与螺位错柏氏矢量方向一致, 但沿着 Z 轴向上滑移了一定距离, 这与文献 [14] 研究结论一致. 可见, 当温度为 300 和 600 K 时, 螺位错在剪切运动过程中, 会与位错环发生交互作用: 一方面, 位错环会阻碍螺位错运动, 起到硬化效果; 另一方面, 螺位错成为位错环快速滑移运动的通道, 促使位错环发生滑移.

随着温度进一步升高到 823 K, 模型在不同应变下 z 截面构型如图 7(a)—(c) 所示. 当 $\varepsilon = 0.015$ 时, 由于温度很高, 位错环更容易发生翻转, 螺位错也更容易发生交滑移 (图 7(a)); 当 $\varepsilon = 0.03$ 时, 螺位错继续交滑移, 位错环也因热激活继续翻转, 它们之间没有接触 (图 7(b)); 当 $\varepsilon = 0.045$ 时, 位错环沿 Z 轴向下滑移了一段距离, 同时螺位错也滑移接近模型右边界 (图 7(c)). 由此可知, 823 K



图 5 2 K 下随应变变量增加含位错环的螺位错模型构型图 (a) $\epsilon = 0.015$; (b) $\epsilon = 0.03$; (c) $\epsilon = 0.06$

Fig. 5. Configurations of screw dislocation model with dislocation loop with increasing strain at 2 K: (a) $\epsilon = 0.015$; (b) $\epsilon = 0.03$; (c) $\epsilon = 0.06$.

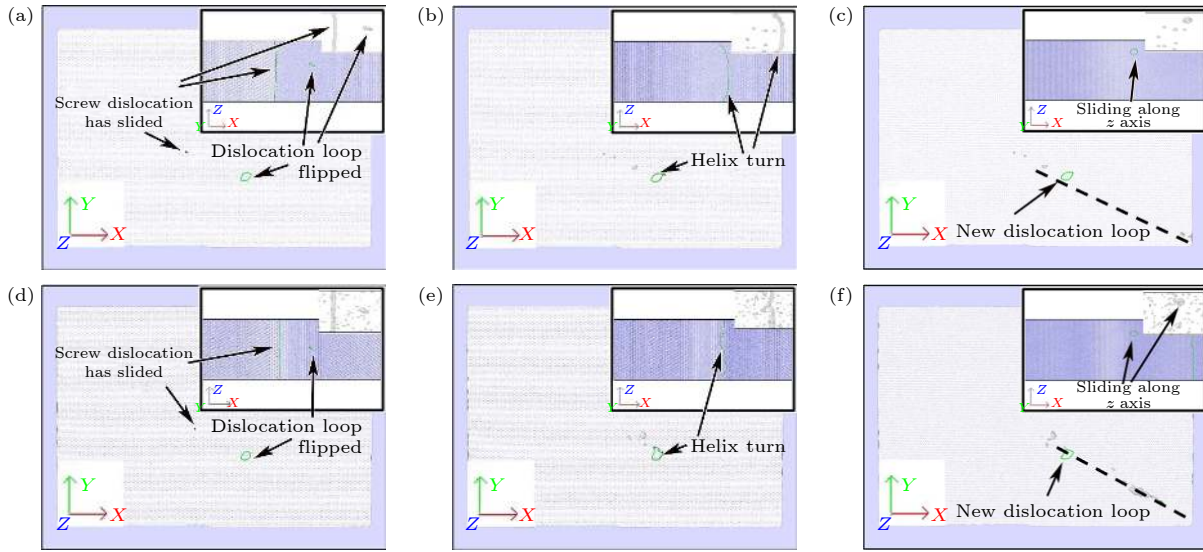


图 6 不同温度下含位错环的螺位错模型在 $\epsilon = 0.015$ (a), (d), 0.03 (b), (e) 和 0.045 (c), (f) 时构型图 (a), (b), (c) 300 K; (d), (e), (f) 600 K

Fig. 6. Configurations of screw dislocation model with dislocation loop when $\epsilon = 0.015$ (a), (d), 0.03 (b), (e), and 0.045 (c), (f) under different temperatures: (a), (b), (c) 300 K; (d), (e), (f) 600 K.

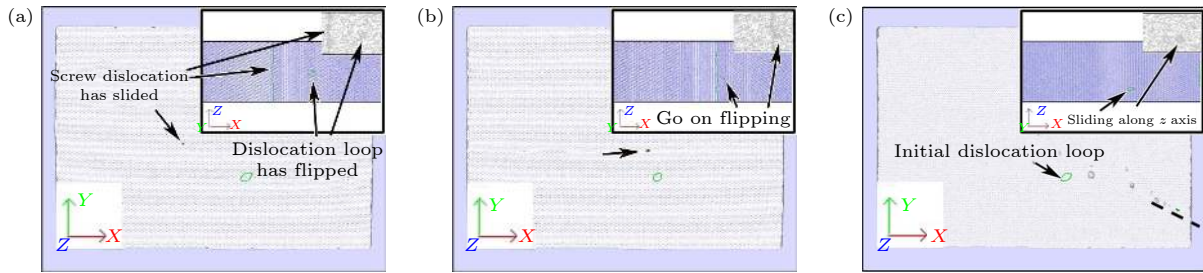


图 7 823 K 下随应变变量增加含位错环的螺位错模型构型图 (a) $\epsilon = 0.015$; (b) $\epsilon = 0.03$; (c) $\epsilon = 0.045$

Fig. 7. Configurations of screw dislocation model with dislocation loop with increasing strain at 823 K: (a) $\epsilon = 0.015$; (b) $\epsilon = 0.03$; (c) $\epsilon = 0.045$.

下螺位错始终未滑移通过位错环,这与 2 K 下位错滑移过程相似,但不同的是,由于此时温度较高,位错滑移速度增加,同时螺位错更易发生交滑移,因此螺位错滑移出模型的应变量和切应力与 2 K 下模型要低。

综上所述,当模型中存在位错环时,不同温度

下螺位错与位错环相互作用机制可分为三方面:低温 2 K 时,螺位错与位错环之间存在斥力作用,当螺位错滑移靠近位错环时,螺位错发生交滑移,未通过位错环,因此位错环没有产生阻碍作用,剪切应力比纯螺位错模型要低;中温 300 和 600 K 时,位错环容易翻转,螺位错与位错环间斥力对螺位错

滑移影响减弱,两者靠近时螺位错滑移通过位错环,螺位错继续滑移受位错环所阻碍,因此剪切应力有所升高;高温 823 K 时,斥力影响更弱,位错环更容易翻转和滑移,螺位错也更容易发生交滑移,该温度下螺位错交滑移行为占主导,在整个滑移过程中始终未通过位错环,因此位错环没有产生阻碍作用,剪切应力与纯螺位错模型差距不大.

4 结 论

在前人研究螺位错滑移行为的基础上,本文进一步揭示了不同温度下螺位错的滑移行为,详细探讨了位错环缺陷与螺位错的相互作用机制,结论总结如下:

1) 当温度为 2 K 时,单根螺位错在剪切应力下沿着 $(\bar{2}11)$ 面滑移,临界剪切应力为 1.45 GPa;随温度逐渐升高到 823 K,切应力逐渐降低,螺位错易在 $(\bar{1}10)$ 和 $(\bar{2}11)$ 面发生交滑移,其中 823 K 下交滑移行为较明显.

2) 低温 2 K 时,螺位错易发生交滑移,螺位错在整个滑移运动过程中未通过位错环,切应力低于纯螺位错模型.

3) 中温 300 K 和 600 K 时,螺位错滑移通过位错环,并与之相互作用形成螺旋结构,阻碍螺位错继续滑移,切应力高于纯螺位错模型.

4) 高温 823 K 时,螺位错更易发生交滑移,位错环也更容易翻转和滑移,螺位错在整个滑移运动过程中始终未通过位错环,切应力与纯螺位错模型差距不大.

该研究对服役过程中核结构材料的塑性变形行为有一定理论指导意义,但是由于结构材料基体内不仅存在 $\langle 111 \rangle$ 位错环,还有 $\langle 100 \rangle$ 位错环,而且不同类型位错环拥有不同柏氏矢量,因此本文只是研究了位错环一隅,为了完整全面地阐明位错环与螺位错相互作用机制,还需进一步研究.

参考文献

- [1] Ullmaier H 1984 *Nucl. Fusion* **24** 1039
- [2] Sokolov M A, Tanigawa H, Odette G R, Shiba K, Klueh R L 2007 *J. Nucl. Mater.* **367** 68
- [3] Dai Y, Long B, Tong Z F 2008 *J. Nucl. Mater.* **377** 115
- [4] Hardie C D, Williams C A, Xu S, Roberts S G 2013 *J. Nucl. Mater.* **439** 33
- [5] Sukanuma K, Kayano H 1983 *J. Nucl. Mater.* **118** 234
- [6] Terentyev D, Haghghat S M H, Schaublin R 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 55
- [7] Jia L X, He X F, Dou Y K, Wu S, Wang D J, Yang Wen 2017 *Nuclear Power Engineering* **38** 115 (in Chinese) [贾丽霞, 贺新福, 豆艳坤, 吴石, 王东杰, 杨文 2017 *核动力工程* **38** 115]
- [8] Wang Y X, Xu Q, Yoshiie T, Pan Z Y 2008 *J. Nucl. Mater.* **376** 133
- [9] Osetsy Y N, Stoller R E 2015 *J. Nucl. Mater.* **465** 448
- [10] Yang L, Zhu Z Q, Peng S M, Long X G, Zhou X S, Zu X T, Heinisch H L, Kurtz R J, Gao F 2013 *J. Nucl. Mater.* **441** 6
- [11] Terentyev D, Bergner F, Osetsy Y 2013 *Acta Mater.* **61** 1444
- [12] Rong Z, Osetsy Y N, Bacon D J 2005 *Philos. Mag.* **85** 1473
- [13] Jia L X, He X F, Dou Y K, Wang D J, Wu S, Cao H, Yang W 2019 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res.* **456** 103
- [14] Liu X Y, Biner S B 2008 *Scripta Mater.* **59** 51
- [15] Hale L M, Zimmerman J A, Weinberger C R 2014 *Comput. Mater. Sci.* **90** 106
- [16] Yang L, Gao F, Kurtz R J, Zu X T 2015 *Acta Mater.* **82** 275
- [17] Zhang L, Fu C C, Hayward E, Lu G H 2015 *J. Nucl. Mater.* **459** 247
- [18] Martinez E, Schwen D, Caro A 2015 *Acta Mater.* **84** 208
- [19] Zhurkin E E, Terentyev D, Hou M, Malerba L, Bonny G 2011 *J. Nucl. Mater.* **417** 1082
- [20] Wakai E, Hishinuma A, Kato Y, Yano H, Takaki S, Abiko K 1995 *J. Phys. IV France* **5** C7-277
- [21] Xu H X, Stoller R E, Osetsy Y N, Terentyev D 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 265503
- [22] Terentyev D, Bacon D J, Osetsy Y N 2010 *Philos. Mag.* **90** 1019
- [23] Pascale E T, Shehadeh M A 2018 *Int. J. Plasticity* **9** 2
- [24] Song G, Lee S W 2019 *Comput. Mater. Sci.* **168** 172
- [25] Xia Z Y, Zhang Z J, Yan J X, Yang J B, Zhang Z F 2020 *Comput. Mater. Sci.* **174** 109503
- [26] LAMMPS Molecular Dynamics Simulator <http://lammps.sandia.gov/> [2020-10-7]
- [27] Caro A, Hetherly J, Stukowski A, Caro M, Martinez E, Srivilliputhur S, Zepeda-Ruiz L, Nastasi M 2011 *J. Nucl. Mater.* **418** 261
- [28] Stukowski A 2010 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [29] Gordon P A, Neeraj T, Li Y, Li J 2010 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 085008
- [30] Jaime M, Wei C, Vasily V B 2004 *Nature Mater.* **3** 158
- [31] Bacon D J, Osetsy Y N, Rong Z 2006 *Philos. Mag.* **86** 3921

Screw dislocation slip and its interaction with $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ dislocation loop in bcc-Fe at different temperatures*

Wang Jin[†] He Xin-Fu Cao Han Jia Li-Xia Dou Yan-Kun Yang Wen

(Reactor Engineering Technology Research Department, China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, China)

(Received 8 October 2020; revised manuscript received 9 November 2020)

Abstract

Reduced activation ferritic/martensitic (RAFM) steel, as a typical body centered cubic (bcc) iron based structure material, has become a candidate material for future fusion reactor. Nano-scale prismatic interstitial dislocation loops formed in irradiated RAFM have been studied for many years because of their significant influences on the mechanical properties (e.g. irradiation embrittlement, hardening, creep, etc.). Compared with edge dislocation, screw dislocation has very important influence on plastic deformation behavior because of its low mobility. Thus, the mechanism of interaction between screw dislocation and interstitial dislocation loops has become an intense research topic of interest. In this study, the slip behavior of screw dislocation and the mechanisms of interaction between screw dislocation and $\frac{1}{2}[11\bar{1}]$ dislocation loop in bcc-Fe at different temperatures are investigated by molecular dynamics simulation. The results show that the screw dislocation mainly slides along the $(\bar{2}11)$ plane at a low temperature of 2 K under the increase of shear stress. With the temperature increasing to 823 K, it is prone to cross slip, and then the cross slip occurs alternately in the $(\bar{1}10)$ plane and the $(\bar{2}11)$ plane. Therefore, with the increase of temperature, the critical shear stress decreases gradually. When the screw dislocation slips close to the dislocation loop, the mechanism of interaction between screw dislocation and dislocation loop is different at different temperature: at low temperature of 2 K, there is repulsive force between screw dislocation and dislocation loop, when screw dislocation slip approaches to the dislocation loop, the cross slip of screw dislocation can occur, and shear stress is lower than that from the model without dislocation loop; at medium temperatures of 300 K and 600 K, the influence of repulsive force on the cross slip of screw dislocation can be weakened, and screw dislocation will slip through the dislocation loop then form the new structure named helix turn, which further hinders screw dislocation slipping and results in the increase of shear stress; at a high temperature of 823 K, the screw dislocation is more likely to cross slip due to the thermal activation, and the slip of dislocation loop is also easier to occur, but the screw dislocation and the dislocation loop do not contact each other in the whole shearing process, therefore the shear stress is lowest.

Keywords: bcc-Fe, screw dislocation, dislocation loop, molecular dynamics

PACS: 87.10.Tf, 87.15.A-

DOI: 10.7498/aps.70.20201659

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. U1867217) and the National Key Research and Development Program of China (Grant No. 2018YFE0308104).

[†] Corresponding author. E-mail: wangjin118114@sina.com