

# $\langle 100 \rangle$ 间隙型位错环在纯钨及含氢杂质钨 (010) 表面下运动行为的分子动力学模拟\*

秦梦飞<sup>1)</sup> 王英敏<sup>2)</sup> 张红玉<sup>1)</sup> 孙继忠<sup>1)†</sup>

1) (大连理工大学物理学院, 大连 116023)

2) (大连理工大学材料科学与工程学院, 大连 116023)

(2023 年 4 月 23 日收到; 2023 年 9 月 3 日收到修改稿)

在聚变辐照环境下, 面向等离子体材料钨的近表层中会产生位错环缺陷, 影响材料的力学性能和氢/氦滞留. 本文通过分子动力学方法, 从原子层次研究了半径 1 nm 的  $\langle 100 \rangle$  间隙位错环在 W-(010) 近表面的迁移行为, 分析取向、温度、深度因素和间隙原子对的存在对位错环运动的影响. 结果表明:  $\mathbf{b} // \mathbf{n}$  ( $\mathbf{b}$  代表柏氏矢量,  $\mathbf{n}$  代表表面法线方向) 位错环易向表面移动,  $\mathbf{b} \perp \mathbf{n}$  位错环倾向滞留在材料内, 移动过程中伴随着惯习面翻转和内应力释放;  $\mathbf{b} // \mathbf{n}$  位错环在温度高于 800 K 且深度小于 5 nm 时逸出表面的概率超过 90%, 其他模拟情况下基本全滞留;  $\mathbf{b} \perp \mathbf{n}$  位错环可在温度 800 K 且深度小于 2 nm 时逸出表面, 而在更深处位错环不易移动, 但会在温度升高时发生  $\langle 100 \rangle$  环分解为  $1/2 \langle 111 \rangle$  位错的现象; 氢原子对的存在阻碍位错环迁移, 延长其在材料内的滞留时间, 同时内应力场的变化导致氢在近表层分布不均匀.

**关键词:** 分子动力学模拟, 位错环, 映像力, 氢**PACS:** 52.65.Yy, 61.72.S-, 52.40.Hf, 52.55.Fa**DOI:** 10.7498/aps.72.20230651

## 1 引言

钨具有极高的熔点、高热导率、良好的高温强度、低溅射率和氦/氘滞留等优异性能, 是未来聚变装置中首选的面向等离子体壁材料<sup>[1-3]</sup>. 在聚变环境下, 高通量的中子和氦、氢粒子辐照在钨中形成大量空位和间隙原子, 二者聚集形成的位错环是钨壁材料中一种主要位错形式<sup>[4]</sup>. 辐照会产生氦泡, 位错环的形核和稳定与氦泡密切相关<sup>[5,6]</sup>. 因此, 位错环的存在同时影响材料的力学性能<sup>[7]</sup>和氢/氦滞留<sup>[8,9]</sup>. 研究位错环的动力学行为是理解和评价钨壁材料服役性能的重要基础.

基于位错晶体几何学特征, 纯钨的间隙型位错环主要有  $\langle 100 \rangle$  和  $1/2 \langle 111 \rangle$  两种类型<sup>[10-12]</sup>. 低能辐

照实验表明<sup>[13]</sup>, 在  $T = 773$  K 钨的浅表层内  $\langle 100 \rangle$  位错环大约占总位错体积分数的 50%, 在  $T = 1073$  K 仍然高达 35%—50%. 这表明聚变正常工作温度范围内  $\langle 100 \rangle$  位错环是一类主要的点阵缺陷. 同时, 由于氦离子主要沉积在钨的浅表层  $\leq 1 \mu\text{m}$  深度范围<sup>[14]</sup>,  $\langle 100 \rangle$  型位错环和氦离子相互作用不可避免. Yi 等<sup>[13,15]</sup> 对比研究了纯钨在 150 keV 和 2 MeV 钨离子辐照后的微结构后发现, 两种样品近表层中位错环的数目密度不同, 后者几乎是前者的两倍. 实验上, 由于透射电子显微观察的薄膜样品易于造成位错弛豫和组态重构, 难以原位观察近表层位错环在映像力作用下的运动. 前期研究主要集中于数值模拟: Groves 和 Bacon<sup>[16]</sup> 基于连续介质的弹性理论研究了位错环的旋转, 计算了位错环的能量和线张力, 获得了位错环的稳定晶体学取向;

\* 国家磁约束核聚变能发展研究专项 (批准号: 2019YFE03030004) 和国家自然科学基金 (批准号: 12275040) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: jsun@dlut.edu.cn

Fikar 等<sup>[17]</sup>研究了钨自由表面处  $\langle 100 \rangle$  和  $1/2\langle 111 \rangle$  型棱柱位错环的深度与映像力关系, 发现尺寸较大的位错环较易逸出表面. 这些研究主要针对近表面处位错环静态的性质, 例如位错弹性应力场、映像力和能量, 没有涉及间隙型位错环在映像力作用下的运动行为.

本文针对钨近表面  $\langle 100 \rangle$  型间隙型位错环, 运用分子动力学方法从原子层次上研究在 (010) 表面映像力作用下, 位错环迁移过程中取向和应力场随深度、温度的变化, 并研究了氦间隙原子对与位错环的相互作用.

## 2 计算细节

利用大型分子动力学模拟软件 LAMMPS 开展模拟工作. 在钨的 BCC 晶格中填充 [010] 型哑铃间隙原子对构建位错环. 考察了广泛采用的两个势函数: W-He<sup>[18]</sup> 和 W 势函数<sup>[19]</sup>, 计算得到 [010] 型哑铃间隙原子对的形成能分别为 10.29 eV 和 12.72 eV. 由 W-He 势函数得出的形成能介于参考值 9.88 eV<sup>[20]</sup> 和 11.63 eV<sup>[21]</sup> 之间, 更适合于本文 [010] 间隙位错环的模拟计算. 该势函数为 W-He 体系的嵌入型相互作用势, 包含 Ackland 的 W-W 相互作用势、Beck 的 He-He 相互作用势以及 Juslin 的 W-He 相互作用势三部分.

模拟单元中选取 [100], [010], [001] 分别为  $x$ ,  $y$  和  $z$  方向, 其中  $x$  和  $z$  方向设置为周期性边界条件,  $y$  方向设置为固定边界条件. 模拟单元尺寸为  $16 \text{ nm} \times 18 \text{ nm} \times 16 \text{ nm}$ . 为构建自由表面, 将  $y$  方向上  $y > 16 \text{ nm}$  的部分设置为真空, 同时将  $y < 1 \text{ nm}$  部分的钨原子固定, 防止粒子漂移. 位错环的产生通过删除  $y$  方向上中心处近表面的两层原子, 并将其替换为 [010] 哑铃型间隙原子对来构建 ( $\mathbf{b} \perp$  惯习面). 采用最快速下降法进行能量最小化, 获得力学平衡态. 在 NVT 系综下, 设定时间步长为 1 fs, 分别在 400, 800 和 1200 K 下模拟半径 1 nm 位错环的迁移 (本模拟实验的位错环半径都为 1 nm), 整个模拟时长为 5 ns. 当位错环迁移出自由表面后, 则停止模拟. 指定位错环环心代表环的位置,  $\mathbf{b} \perp \mathbf{n}$  代表柏氏矢量垂直于表面法线方向的位错环,  $\mathbf{b} // \mathbf{n}$  代表柏氏矢量平行于表面法线方向的位错环.

不同深度位错环的形成能可用分子动力学模拟求出, 通过 (1) 式计算映像力:

$$\sigma = \frac{dE(h)/dh}{\pi b d}, \quad (1)$$

式中,  $\sigma$  是单位长度位错环的映像力;  $b$  和  $d$  分别是位错环的柏氏矢量大小和直径;  $E(h) = E_f(h) - E_0$ , 其中  $E_f(h)$  是  $h$  深度位错环的形成能,  $E_0$  是位错环位于模拟单元中心的形成能, 这里  $E_f(h) = E_{\text{loop}} - E_p$ ,  $E_{\text{loop}}$  是体系包含位错环条件下的能量,  $E_p$  是完美晶体的能量.

本文基于最简单的聚集方式——氦原子对, 分析氦与位错环的相互作用. 位错环和氦原子对的结合能为

$$E_B = E_{\text{total}} - E_{\text{loop}+2\text{He}}, \quad (2)$$

其中  $E_B$  是位错环与 [112] 方向的氦间隙原子对的结合能,  $E_{\text{total}}$  是体系中包含位错环和氦间隙氮原子对的总能量 (假设位错环和氦原子距离足够远),  $E_{\text{loop}+2\text{He}}$  是位错环与隙氮原子对发生相互作用时体系的总能量.

## 3 结果与讨论

### 3.1 间隙位错环取向的影响

随机追踪一个  $\mathbf{b} // \mathbf{n}$  型位错环 ( $T = 800 \text{ K}$ ,  $h = 5 \text{ nm}$ ) 的动态演化过程 (图 1).  $t < 0.170$  是位错环运动的第 1 阶段, 发生惯习面翻转 ( $t$  为约化时间,  $t = t_{\text{sim}}/t_0$ ,  $t_{\text{sim}}$  为模拟时间,  $t_0 = 2500 \text{ ps}$ ). 具体地, 初始时刻 ( $t_0 = 0.001$ ) 惯习面为 (010) 面 (图 1(a)), 且  $\mathbf{b} \perp$  惯习面, 位错环开始在映像力作用下移动, 向表面逃逸. 在  $t = 0.018$  时惯习面变为 (0 $\bar{1}$ 1) 面 (图 1(b)), 随后位错环下半部分开始加快运动速度, 下半部分与上半部分位置逐渐持平, 惯习面又变回 (010) 面 (图 1(c) 和图 1(d)).  $t > 0.170$  是位错环运动的第 2 阶段, 即快速迁移阶段. 当  $t = 0.239$  时惯习面转变为 (0 $\bar{1}$ 1) 面 (图 1(e)), 此时位错环距离自由表面最近处约 1 nm.  $t = 0.245$  时, 位错环的一端先与自由表面接触, 位错环中的  $\langle 100 \rangle$  片段开始分解为  $1/2[1\bar{1}\bar{1}]$ ,  $1/2[\bar{1}1\bar{1}]$ ,  $1/2[\bar{1}\bar{1}1]$  和  $1/2[111]$  位错, 形成位错网络 (图 1(g)), 最终  $t = 0.247$  时, 位错环被自由表面完全吸收 (图 1(h)).

位错环向表面迁移过程中应力变化情况如图 2 所示. 在表面映像力作用下, 位错环各部分应力场不均匀, 导致其出现惯习面翻转的现象. 在高温 (高于钨的德拜温度约 400 K)  $T = 800 \text{ K}$ , 激活

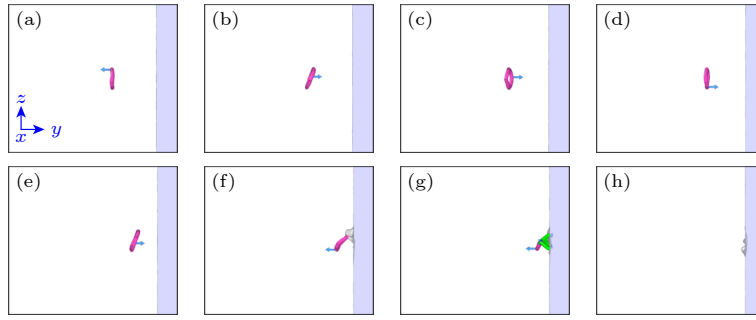


图 1  $b//n$  位错环的取向变化和分解 ( $T = 800$  K, 初始深度  $h = 5$  nm) (a)  $t = 0.001$ ; (b)  $t = 0.018$ ; (c)  $t = 0.115$ ; (d)  $t = 0.170$ ; (e)  $t = 0.239$ ; (f)  $t = 0.245$ ; (g)  $t = 0.246$ ; (h)  $t = 0.247$ ; 图中粉红颜色代表  $\langle 100 \rangle$  位错, 绿颜色代表  $1/2\langle 111 \rangle$  位错, 蓝色箭头表示柏氏矢量方向

Fig. 1. Orientational change and decomposition of a  $b//n$  dislocation loop at  $T = 800$  K and the initial depth of  $h = 5$  nm: (a)  $t = 0.001$ ; (b)  $t = 0.018$ ; (c)  $t = 0.115$ ; (d)  $t = 0.170$ ; (e)  $t = 0.239$ ; (f)  $t = 0.245$ ; (g)  $t = 0.246$ ; (h)  $t = 0.247$ . The pink loop stands for the  $\langle 100 \rangle$  type dislocation, the green one for  $1/2\langle 111 \rangle$ . The blue arrows denote the direction of Burgers vector.

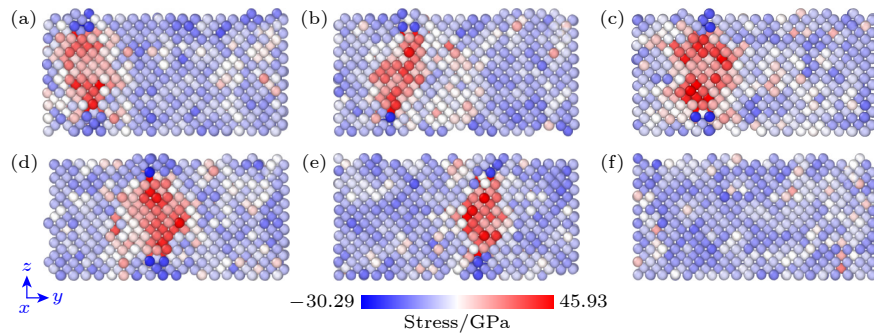


图 2  $b//n$  位错环移动过程中的应力变化图 ( $T = 800$  K, 初始深度  $h = 5$  nm) (a)–(e) 位错环向表面移动过程中的应力图, 其中 (a)  $t = 0.014$ , (b)  $t = 0.018$ , (c)  $t = 0.066$ , (d)  $t = 0.115$ , (e)  $t = 0.239$ ; (f) 位错环完全移出表面后的应力图,  $t = 0.247$

Fig. 2. Stress variation of a  $b//n$  dislocation loop at  $T = 800$  K and initial depth of  $h = 5$  nm in motion: (a)–(e) The stress of the dislocation loop as it moves toward the surface ((a)  $t = 0.014$ , (b)  $t = 0.018$ , (c)  $t = 0.066$ , (d)  $t = 0.115$ , (e)  $t = 0.239$ ); (f) the stress after the dislocation loop has been completely removed from the surface,  $t = 0.247$ .

大量空位和原子交换, 造成间隙原子向低能量的  $(110)$  密堆原子面偏聚,  $\langle 100 \rangle$  位错环分解为  $1/2[\bar{1}1\bar{1}]$  与  $1/2[111]$ . 位错环完全迁移出表面后, 在表面形成局部凸起结构 (图 3). 位错环与自由表面反应前, 它以刃位错的形式存在 (图 4(a)); 而在二者反应时, 位错以刃/螺的混合位错形式出现 (见图 4(b)). 位错环向自由表面移动的过程中伴随着内应力释

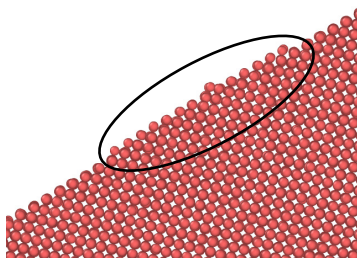


图 3  $b//n$  位错环与表面相互作用后的表面形貌

Fig. 3. Surface morphology after the interaction between  $b//n$  dislocation loop and surface has ceased to occur.

放 (图 2(a)–(f)). 体系释放内应力有多种方式, 例如 Gao 等 [22] 提出位错环分解达到释放内部应力的目的. 本模拟发现在钨近表层处,  $b//n$  间隙位错环通过取向变化和向外移动释放应力.

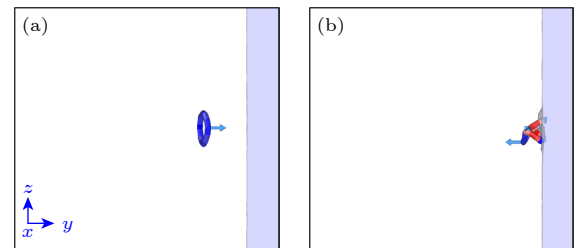


图 4  $b//n$  位错环演化过程中位错类型变化图 (a) 位错环未与表面发生作用时的状态; (b) 位错环与表面发生强烈作用时的状态. 图中蓝色为刃位错, 红色为螺位错

Fig. 4. Variation of the dislocation geometry of a  $b//n$  dislocation loop in motion: (a) The geometry of the dislocation loop away from the surface; (b) the geometry change of the dislocation loop while interacting with the surface. Blue represents the edge dislocation, red represents a screw dislocation.

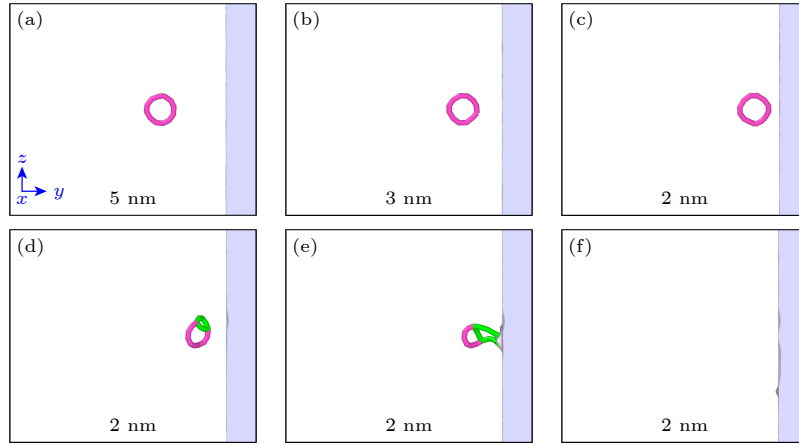


图 5  $b \perp n$  型位错环的取向变化和分解 ( $T = 800$  K) (a)  $t = 0.018$ ; (b)  $t = 0.115$ ; (c)  $t = 0.170$ ; (d)  $t = 0.245$ ; (e)  $t = 0.246$ ; (f)  $t = 0.247$ ; 图中粉红色颜色的为  $\langle 100 \rangle$  型位错, 绿颜色的为  $1/2\langle 111 \rangle$  型位错, 底部物理量代表位错环初始深度

Fig. 5. Orientational change and decomposition of a  $b \perp n$  dislocation loop at  $T = 800$  K: (a)  $t = 0.018$ ; (b)  $t = 0.115$ ; (c)  $t = 0.170$ ; (d)  $t = 0.245$ ; (e)  $t = 0.246$ ; (f)  $t = 0.247$ . The pink loop stands for the  $\langle 100 \rangle$  dislocation, the green part for  $1/2\langle 111 \rangle$ , the physical quantity at the bottom represents the initial depth of the dislocation loop.

图 5 是  $b \perp n$  型位错环 ( $T = 800$  K;  $h = 2, 3, 5$  nm) 在近表面处的演化过程. 图 5(a) 和图 5(b) 显示,  $t = 2$  时位错环 ( $h = 3, 5$  nm) 仍处于原来深度, 并未发生位置变化. 当位错环距离自由表面更近时, 发生分解. 图 5(c) 所示  $h = 2$  nm 处的位错环在  $t = 1.824$  时一部分转变为  $1/2\langle 111 \rangle$  片段 (图 5(d)),  $t = 1.836$  时位错环开始被自由表面所吸收, 形成复杂的位错网络 (图 5(e)), 到  $t = 2$  时位错环完全逃出自由表面 (图 5(f)). 与  $b // n$  取向的情形类似,  $b \perp n$  位错环移出表面的过程中也发生应力释放和刃螺位错转变.

对比 5 nm 深度范围内  $b // n$  和  $b \perp n$  型位错环的运动, 发现前者更容易移出表面, 后者只有在距离表面小于 2 nm 才发生逃逸. 因为前者向表面的迁移可以通过位错滑移来实现, 而后者只能通过位错攀移来实现, 攀移比滑移更加困难.

### 3.2 温度和深度的影响

图 6 描述的是位错环形成能  $E_f(h)$  与距离表面深度  $h$  的关系. 位错环 ( $b // n$  和  $b \perp n$ ) 的形成能均随深度增大呈增大趋势, 在  $h > 5$  nm 时趋于恒定值 172.5 eV. 在  $h < 5$  nm 的范围内,  $b // n$  位错环的形成能为 160.0—172.5 eV, 而  $b \perp n$  位错环的形成能为 169.0—172.5 eV. 前者形成能对深度的负梯度远大于后者, 后者更加稳定. 图 7 是位错环映像力  $\sigma$  随深度  $h$  的变化情况. 映像力随深度减小而增大, 在  $h > 5$  nm 时, 两种位错环的映像力都

很小, 可以忽略; 当  $h < 5$  nm 时,  $b // n$  位错环映像力的变化范围是 0—790 MPa,  $b \perp n$  位错环映像

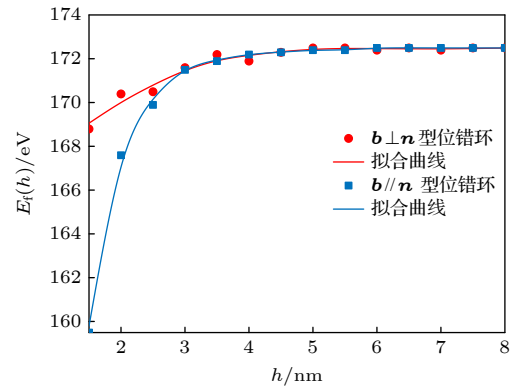


图 6 位错环 ( $b // n$  和  $b \perp n$ ) 形成能随距离表面深度的变化  
Fig. 6. Variation of the formation energies of the dislocation loops ( $b // n$  and  $b \perp n$ ) with increasing depth.

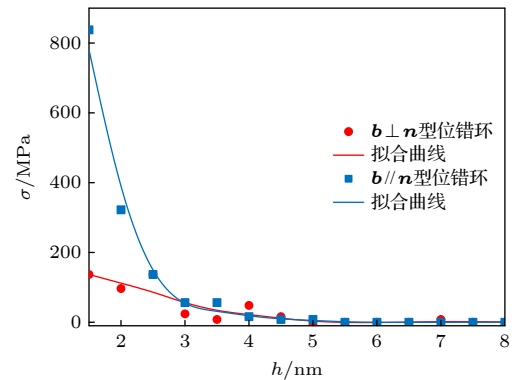


图 7 位错环 ( $b // n$  和  $b \perp n$ ) 映像力随距离表面深度的变化  
Fig. 7. Image forces of the dislocation loops ( $b // n$  and  $b \perp n$ ) with increasing depth.



力的变化范围是 0—120 MPa。对比可知  $b//n$  位错环更易受到表面效应的影响, 而  $b \perp n$  位错环在材料中更稳定, 其他取向位错环的稳定性介于它们之间。

针对温度因素, 在  $T = 400, 800, 1200$  K 时各生成 30 个含有位错环 ( $b//n$ ) 的钨样本, 模拟得到相应的位错环在钨内部的滞留时间 (图 8),  $t_{400\text{ K}} > t_{800\text{ K}} > t_{1200\text{ K}}$ 。由  $T = \sum_{i=1}^N 1/3 m_i (v_i)^2 / (N-3) k_B$  可知, 系统温度越高位错环迁移速度越大, 越容易克服其束缚势垒迁移出表面, 进而使得位错环在钨中的滞留时间变短。这里  $m_i$  是原子质量,  $v_i$  是原子速度,  $N$  是原子数,  $k_B$  是玻耳兹曼常数

图 8 还给出不同深度 ( $h = 3$  nm (1—10 号),  $h = 5$  nm (11—20 号),  $h = 7$  nm (21—30 号))

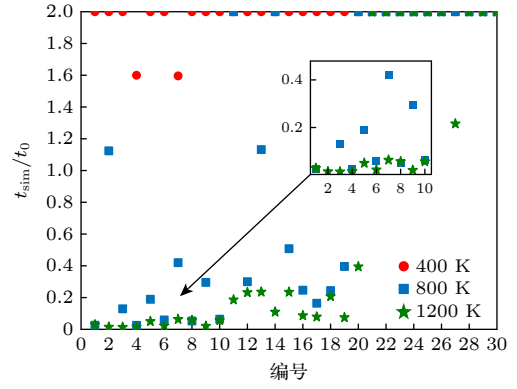


图 8 不同温度和深度下  $b//n$  位错环的滞留时间变化, 图中编号 1—10, 11—20 和 21—30 分别是初始深度  $h = 3, 5, 7$  nm 的位错环

Fig. 8. Retention time variation of the  $b//n$  dislocation loops with temperature and depth. The numbers 1—10, 11—20, and 21—30 are used to specify the dislocation loops located at the initial depth of  $h = 3, 5, 7$  nm, respectively.

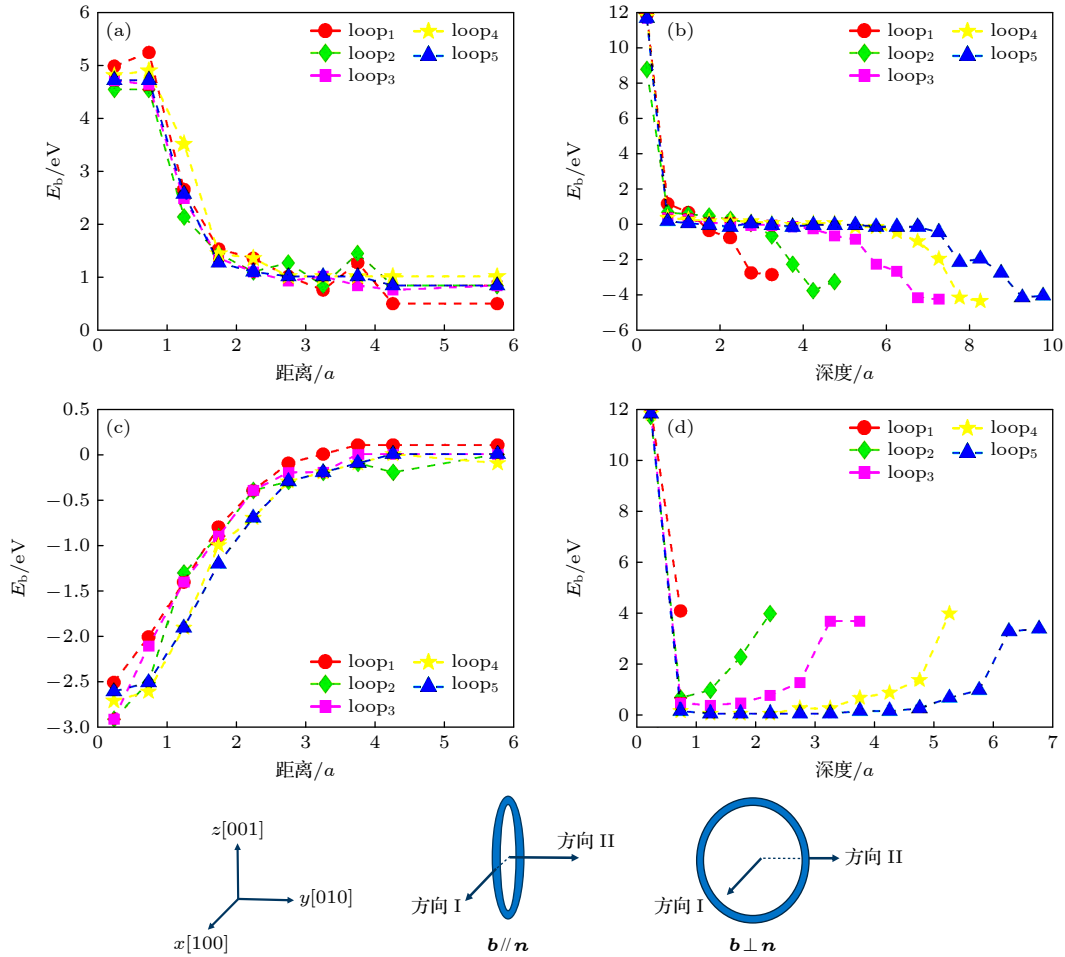


图 9 位错环与氦间隙原子对的结合能 (a), (b)  $b//n$  位错环分别在方向 I 和方向 II 上的结和能; (c), (d)  $b \perp n$  位错环分别在方向 I 和方向 II 上的结和能,  $\text{loop}_1 - \text{loop}_5$  分别对应  $h = 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5$  nm 的位错环。 (a), (c) 横坐标是氦原子对距离位错环的距离; (b), (d) 横坐标是氦原子对距表面的深度

Fig. 9. Binding energy of the dislocation loop with a pair of helium atoms: (a), (b) The binding energies in direction I and II of  $b//n$  dislocation loops; (c), (d) the binding energies for the  $b \perp n$  dislocation loop.  $\text{loop}_1 - \text{loop}_5$  correspond to the dislocation loops located at  $h = 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5$  nm. The abscissa of (a) and (c) represents the distances between the pair of helium atoms and the dislocation loop, and the ordinate of (b) and (d) is for the depth.

$b//n$  位错环在材料中的滞留时间, 滞留时间随深度增大呈增加趋势. 计算时, 当模拟时间达到 2 即 5 ns 时停止模拟, 这样所有滞留时间超过 5 ns 的位错环都标记在  $t_{\text{sim}}/t_0 = 2$  处. 对比图 7, 在  $h = 3$  nm 时位错环映像力大于  $h = 5, 7$  nm 情形. 由此推知离自由表面越近, 位错环所受映像力越大, 越容易脱离钨点阵的束缚, 环滞留时间变短. 当  $h = 5$  nm 时, 位错环受到的映像力很小, 但发生涨落, 使得它在初始位置附近微小移动, 导致位错环以一定概率移动到映像力较大的作用区域. 此外, 演化过程中环形状会发生改变, 产生额外的力. 这些因素最终使部分位错环也能成功向表面处移动. 对于  $b \perp n$  型位错环而言, 它很难逃逸出表面, 但是温度升高易于发生位错类型的转变 (详见附录 A).

### 3.3 氦原子对位错环运动的影响

为分析氦与位错环之间的相互作用, 计算了位错环 ( $b//n$  和  $b \perp n$ ) 与方向 I 和方向 II 上氦间隙原子对的结合能 (图 9). 当  $b//n$  时, 沿方向 I 的结合能由 4.5 eV 逐渐减小至约 0 eV (图 9(a)). 可见距离位错环越近, 氦间隙原子对越容易被吸收, 吸收范围约是  $3a < r < 6a$  ( $r$  指氦原子距位错环中心的距离,  $a$  为晶格常数). 方向 II 上的结合能随深度增加而减小, 其中表面第 1 层原子下的值最大 (图 9(b)), 在此方向上  $b//n$  位错环排斥氦间隙原子对. 对于  $b \perp n$  型位错环而言, 得到的结果与前面不同. 沿方向 I, 结合能从 -3 eV 升至约 0 eV (图 9(c)), 在此方向表现为排斥氦原子, 排斥范围约为  $0 < r < 4a$ . 沿方向 II,  $b \perp n$  位错环对氦间隙原子对呈现吸收作用, 距离表面最近处结合能最大 (图 9(d)).

图 10 给出了不同条件下  $b//n$  位错环在钨近表面的滞留时间统计结果. 在  $T = 800$  K,  $h = 3$  nm 和  $T = 1200$  K,  $h = 3, 5$  nm 下分别有 7/10, 10/10, 6/10 的位错环移出自由表面, 其他均滞留于材料内部. 与图 8 相比, 当有氦间隙原子对存在时, 位错环在钨内的滞留时间明显增加, 同时能迁移出表面的数量也明显变少.

在钨近表层,  $b//n$  比  $b \perp n$  位错环更易向自由表面逃逸, 且逃逸深度更大, 后者倾向于钉扎在钨材料内部. 无论哪种位错环都会在有限的区域内吸附表层的氦原子, 而由于  $b \perp n$  位错环稳定存在于材料内部, 更易为氦原子提供吸附位点, 导致材料

浅层区域氦浓度增大, 为以后生成高密度的氦团簇提供条件 [23], 氦团簇生长为氦泡, 向外迁移并破裂会产生绒毛 [24], 进一步影响偏滤器的使用寿命.

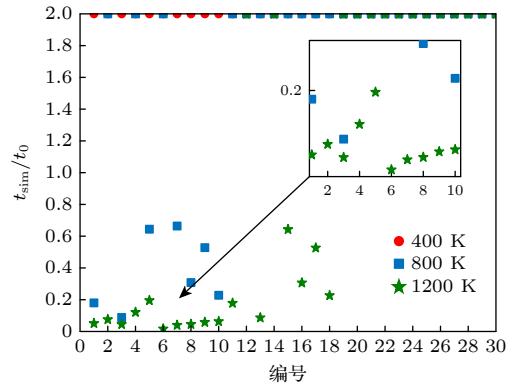


图 10 不同温度下  $b//n$  位错环的滞留时间图 (体系中含氦原子对) 图中编号 1—10, 11—20 和 21—30 分别是初始深度  $h = 3, 5, 7$  nm 的位错环

Fig. 10. Variation of the retention time with temperature and depth for the  $b//n$  dislocation loops existing in the W lattice cell containing a pair of helium atoms. The numbers 1–10, 11–20, and 21–30 are used to specify the dislocation loops located at the initial depth of  $h = 3, 5, 7$  nm, respectively.

## 4 结 论

本文运用分子动力学方法, 从原子尺度上模拟研究钨近表面处纳米位错环的动态演化. 模拟结果发现:

1) 对于真空自由表面映像力作用下的  $b//n$  和  $b \perp n$  位错环, 前者受力不均, 易向表面逃逸, 后者倾向滞留于钨内部. 位错环迁移过程中发生惯习面翻转, 伴随内应力释放和刃螺位错转变. 位错环完全逸出后在钨表面形成局部凸起结构.

2) 当温度接近于 0 K 且深度  $h < 5$  nm 时,  $b//n$  和  $b \perp n$  位错环受到的映像力分别为 0—790 MPa 和 0—120 MPa. 在有限温度下,  $b//n$  位错环在  $T \geq 800$  K 且  $h \leq 5$  nm 范围逸出表面的概率超过 90%, 在其他情况下滞留率约达 100%.  $b \perp n$  位错环在  $T = 800$  K 且  $h \leq 2$  nm 范围也发生迁移, 深度增大位错环不易移动, 但  $T > 800$  K 时部分  $\langle 100 \rangle$  环片段会分解为  $1/2\langle 111 \rangle$  位错.

3) 当钨中存在氦间隙原子对时, 在  $h > 1.5$  nm 深度的位错环平面内对氦原子对的最大吸收范围是  $3a < r < 6a$ , 垂直于位错环平面方向上的最大排斥范围是  $0 < r < 4a$ . 对比无氦原子存在的情形, 位错环在材料内的滞留概率增大. 其中  $T = 800$ ,

1200 K 且  $h = 5$  nm 时, 位错环在材料内滞留的概率分别增加 70% 和 40%.  $b \perp n$  位错环受到氮间隙原子对制约也更能迁移出表面. 另外, 位错环和氮原子之间的相互作用造成钨材料内氮分布不均匀.

## 附录A 温度对 $b \perp n$ 位错环运动的影响

图 A1 给出了深度  $h = 5$  nm 条件下, 温度对  $b \perp n$  位

错环运动的影响. 图 A1(a) 和图 A1(b) 表明在 400 K, 位错环类型以及位置几乎未改变, 只有形状发生了一点变化. 当  $T = 800$  K, 虽然位错环的位置不变, 但是在  $t = 0.980$  时位错环中有一小部分发生了  $\langle 100 \rangle$  向  $1/2\langle 111 \rangle$  位错的转变 (见图 A1(c) 和图 A1(d)). 当  $T = 1200$  K 时, 位错环中有更多部分向  $1/2\langle 111 \rangle$  位错转变, 并且转换频率比 800 K 时更高 (见图 A1(e)–(h)). 虽然  $b \perp n$  型位错环很难逃逸出表面, 但是温度升高易于发生位错类型的转变.

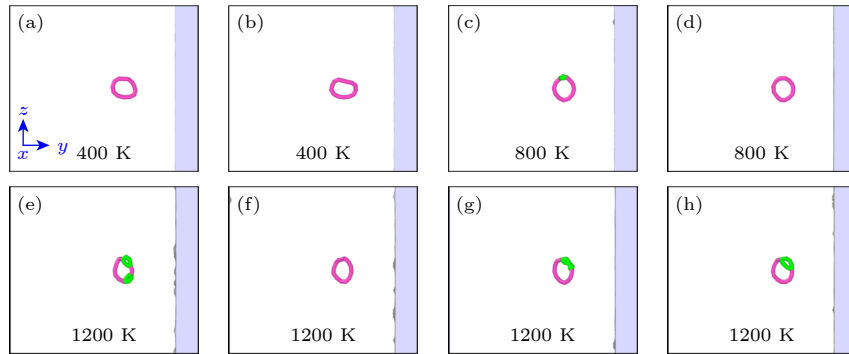


图 A1 不同温度  $b \perp n$  位错环的运动演化过程 (初始深度  $h = 5$  nm) (a)  $t = 0.980$ ; (b)  $t = 2.000$ ; (c)  $t = 0.980$ ; (d)  $t = 2.000$ ; (e)  $t = 0.540$ ; (f)  $t = 0.960$ ; (g)  $t = 1.600$ ; (h)  $t = 2.000$ ; 图中粉红色色的为  $\langle 100 \rangle$  型位错, 绿颜色的为  $1/2\langle 111 \rangle$  型位错

Fig. A1. Orientational change and decomposition of a  $b \perp n$  dislocation loop at the initial depth of  $h = 5$  nm: (a)  $t = 0.980$ ; (b)  $t = 2.000$ ; (c)  $t = 0.980$ ; (d)  $t = 2.000$ ; (e)  $t = 0.540$ ; (f)  $t = 0.960$ ; (g)  $t = 1.600$ ; (h)  $t = 2.000$ . The pink loop stands for the  $\langle 100 \rangle$  type dislocation, the green one for  $1/2\langle 111 \rangle$ .

## 参考文献

- [1] Krashennnikov S I 2022 *Plasma Phys. Control. Fusion* **64** 124005
- [2] Janeschitz G 2001 *J. Nucl. Mater.* **290–293** 1
- [3] Philipps V 2011 *J. Nucl. Mater.* **415** S2
- [4] El-Atwani O, El-Atwani E, Esquivel E, Efe M, Wang Y Q, Maloy S A 2018 *Acta Mater.* **147** 277
- [5] Ma Y T, Liu J B, Han L, Tian L F, Wang X C, Meng X M, Xiao S Q, Wang B 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 040702 (in Chinese) [马玉田, 刘俊标, 韩立, 田利丰, 王雪聪, 孟祥敏, 肖善曲, 王波 2019 物理学报 **68** 040702]
- [6] Cui M H, Gao N, Wang D, Gao X, Wang Z G 2019 *Nucl. Instrum. Meth. B* **460** 60
- [7] Bernard E, Sakamoto R, Yoshida N, Yamada H 2015 *J. Nucl. Mater.* **463** 316
- [8] Grigorev P, Bakaev A, Terentyev D, Van Oost G, Noterdaeme J M, Zhurkin E E 2017 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B-Beam Interact. Mater. Atoms* **393** 164
- [9] Matsui T, Muto S, Tanabe T 2000 *J. Nucl. Mater.* **283** 1139
- [10] Guo W G, Wang S W, Ge L, Fu E G, Yuan Y, Cheng L, Lu G H 2020 *Nucl. Fusion* **60** 034002
- [11] El-Atwani O, Cunningham W S, Trelewicz J R, Li M, Wirth B D, Maloy S A 2020 *J. Nucl. Mater.* **538** 152150
- [12] Harrison R W, Greaves G, Hinks J A, Donnelly S E 2017 *J. Nucl. Mater.* **495** 492
- [13] Yi X O, Jenkins M L, Kirk M A, Zhou Z F, Roberts S G 2016 *Acta Mater.* **112** 105
- [14] He R 2020 *M. S. Thesis* (Lanzhou: Lanzhou University of Technology) (in Chinese) [贺冉 2020 硕士学位论文 (兰州: 兰州理工大学)]
- [15] Yi X O, Jenkins M L, Hattar K, Edmondson P D, Roberts S G 2015 *Acta Mater.* **92** 163
- [16] Groves P P, Bacon D J 1970 *Philos. Mag.* **22** 83
- [17] Fikar J, Gröger R, Schäublin R 2017 *Nucl. Instrum. Meth. B* **393** 186
- [18] Juslin N, Wirth B D 2013 *J. Nucl. Mater.* **432** 61
- [19] Marinica M C, Ventelon L, Gilbert M R, Proville L, Dudarev S L, Marian J, Bencteux G, Willaime F 2013 *J. Phys. Condens.* **25** 395502
- [20] Harder J M, Bacon D J 1988 *Phil. Mag. A* **58** 165
- [21] Chen L, Liu Y L, Zhou H B, Jin S, Zhang Y, Lu G H 2012 *Sci. China-Phys. Mech. Astron.* **55** 614
- [22] Gao N, Shen T L, Kurtz R, Wang Z G, Gao F 2017 *Scr. Mater.* **136** 64
- [23] Sharafat S, Takahashi A, Hu Q, Ghoniem N M 2009 *J. Nucl. Mater.* **386–388** 900
- [24] Zhang H Y, Sun J Z, Wang Y M, Stirner T, Hamid A Y, Sang C F 2020 *Fusion Eng. Des.* **161** 112004

# Molecular dynamics simulation of dynamic migration of $\langle 100 \rangle$ interstitial dislocation loops under (010) surfaces of pure W and W containing helium impurity\*

Qin Meng-Fei<sup>1)</sup> Wang Ying-Min<sup>2)</sup> Zhang Hong-Yu<sup>1)</sup> Sun Ji-Zhong<sup>1)†</sup>

1) (*School of Physics, Dalian University of Technology, Dalian 116023, China*)

2) (*School of Materials Science and Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116023, China*)

( Received 23 April 2023; revised manuscript received 3 September 2023 )

## Abstract

In the fusion irradiation environment, dislocation loop defects occurring under plasma-facing tungsten surface affect its mechanical properties and hydrogen/helium retention. This paper studies the dynamic behaviors of a  $\langle 100 \rangle$  loop with a radius of 1 nm under the W (010) surface by using molecular dynamics simulation at the atomic level. It is found that the dislocation loop direction, bulk temperature, depth, and helium atoms can greatly affect the motion of dislocation loops, showing that the  $\mathbf{b} // \mathbf{n}$  dislocation loop, where  $\mathbf{b}$  is the Burgers vector and  $\mathbf{n}$  denotes the surface normal direction, tends to move towards the surface and the  $\mathbf{b} \perp \mathbf{n}$  dislocation loop tends to stay in the material. In the course of its migration, the habit plane of dislocation loop may change and the internal stress decreases gradually. The probability of a  $\mathbf{b} // \mathbf{n}$  dislocation loops escaping from the surface is over 90% when the temperature is higher than 800 K and their initial depth is less than 5 nm. The  $\mathbf{b} \perp \mathbf{n}$  dislocation loop can escape from the surface when the temperature is 800 K and the initial depth is less than 2 nm. It is found that  $\langle 100 \rangle$  dislocation loops decompose into  $1/2\langle 111 \rangle$  dislocations at elevated temperatures. Helium atoms impede the migration of dislocation loops and increase their retention time. The existence of dislocation loops results in the uneven distribution of helium atoms under the W surface, and will potentially affect the surface morphology of tungsten.

**Keywords:** molecular dynamics simulation, dislocation loop, image force, helium

**PACS:** 52.65.Yy, 61.72.S-, 52.40.Hf, 52.55.Fa

**DOI:** [10.7498/aps.72.20230651](https://doi.org/10.7498/aps.72.20230651)

\* Project supported by the National MCF Energy R&D Program of China (Grant No. 2019YFE03030004) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12275040).

† Corresponding author. E-mail: [jsun@dlut.edu.cn](mailto:jsun@dlut.edu.cn)



间隙型位错环在纯钨及含氦杂质钨(010)表面下运动行为的分子动力学模拟

秦梦飞 王英敏 张红玉 孙继忠

**Molecular dynamics simulation of dynamic migration of interstitial dislocation loops under (010) surfaces of pure W and W containing helium impurity**

Qin Meng-Fei Wang Ying-Min Zhang Hong-Yu Sun Ji-Zhong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 245204 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230651

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230651>

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

表面效应对铁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>

体心立方Fe中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>

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

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

物理学报. 2021, 70(6): 068701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201659>

镁中位错和非晶作用机制的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of mechanism of interaction between dislocation and amorphism in magnesium

物理学报. 2022, 71(14): 143101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212318>

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>

注氢纯铝中间隙型位错环一维迁移现象的原位观察

*In-situ* study of one-dimensional motion of interstitial-type dislocation loops in hydrogen-ion-implanted aluminum

物理学报. 2022, 71(1): 016102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211229>