

分子动力学研究 He 对钨 $\Sigma\{112\}$ 对称晶界拉伸性能的影响李芳镖¹, 高宁², 李奕鹏¹, 洪钢¹, 赵尚泉¹, 冉广¹

(1.厦门大学能源学院, 福建 厦门 361102; 2.中国科学院近代物理研究所, 甘肃 兰州 730000)

摘要: 使用分子动力学方法计算模拟了 $\Sigma\{112\}$ 晶界上含有不同大小和浓度 He 泡的钨晶体的拉伸性能。应用共近邻分析和位错分析法分析了晶体屈服前的微观结构演化机理。结果表明: 当晶界上无 He 泡或只含有小尺寸单 He 泡时, 在拉伸屈服前都经历了弹性阶段和结构相变阶段; 在结构相变阶段, 晶格原子的相对位置发生了变化。拉伸过程中, 小 He 泡造成的晶格损伤会自动恢复, 对晶体屈服应力和屈服应变无显著影响, He 泡的能量受周围晶格钨原子间距的影响。晶界上的大尺寸 He 泡造成晶格损伤无法恢复, 并且 He 泡越大, 晶格损伤越大, 相应地屈服应变、屈服应力和弹性模量越小。晶界上高浓度的 He 泡易导致晶界脆化, 使钨晶体在屈服后就开始断裂分离。

关键词: 分子动力学; $\Sigma\{112\}$ 晶界; 金属钨; He 泡; 拉伸性能

中图分类号: TG146.4 **文献标志码:** A **文章编号:** 1009-6264(2019)08-0096-09

Effect of helium on tensile properties of tungsten $\Sigma\{112\}$ symmetrical grain boundary studied by molecular dynamics

LI Fang-biao¹, GAO Ning², LI Yi-peng¹, HONG Gang¹, ZHAO Shang-quan¹, RAN Guang¹

(1.College of Energy, Xiamen University, Xiamen 361102, China;

2.Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Science, Lanzhou 730000, China)

Abstract: Tensile properties of tungsten $\Sigma\{112\}$ symmetrical grain boundary containing He bubbles with different sizes and concentrations were studied by molecular dynamics method. The microstructure evolution mechanism of tungsten crystals before yield was analyzed by means of common neighbor analysis and dislocation analysis. The results show that for the tungsten without He bubbles or with a little size of He bubbles at grain boundary, there are two stages before tensile yield: elastic stage and elastic phase-transition stage. In the elastic phase-transition stage, the relative position of lattice atoms is changed. During the tensile process, the lattice damage caused by the small-scale He bubble will recover automatically and has no significant effect on the yield stress and yield strain of the crystal. The energy of the He bubbles is affected by the distance between the tungsten atoms in the surrounding lattice. The lattice damage caused by large-scale bubble can't be recovered during the tensile process. The larger the bubble is, the smaller the yield strain, yield strength and elastic modulus are. The high concentration of He bubbles on the grain boundary is easy to cause the grain boundary embrittlement, which results in the fracture and separation of tungsten after tensile yield.

Keywords: molecular dynamics; $\Sigma\{112\}$ symmetrical grain boundary; tungsten; He bubble; tensile property

金属钨 (W) 具有高熔点、高导热系数、低溅射率、高物理溅射阈能、低氢固溶度等特点, 被认为是聚变堆中面向等离子体材料 (Plasma facing materials, PFMs) 最佳候选者之一, 全 W-PFMs 概念已在国际热

核聚变实验堆 (ITER) 设计中成为共识^[1]。然而在服役过程中, 从等离子体中逃逸出来的 D、T 粒子, 反应产物 He 和中子, 嬗变产物 He 和 H^[2-4], 以及应力等都会作用于钨, 使其发生性质与性能改变。特别是

收稿日期: 2019-03-14; 修订日期: 2019-04-12

基金项目: 国家自然科学基金(11675230, 11375242, U1832112); 厦门大学能源学院发展基金(2018NYFZ01)

作者简介: 李芳镖(1993—), 主要从事聚变材料辐照行为的计算模拟, E-mail: lifangbiao@foxmail.com。

通信作者: 冉广(1978—), 教授, 博士生导师, 主要从事材料辐照行为研究、新材料研发和构件寿命评估, 电话: 05922185278, E-mail: gran@xmu.edu.cn。

引用格式: 李芳镖, 高宁, 李奕鹏, 等. 分子动力学研究 He 对钨 $\Sigma\{112\}$ 对称晶界拉伸性能的影响[J]. 材料热处理学报, 2019, 40(8): 96-104.

LI Fang-biao, GAO Ning, LI Yi-peng, et al. Effect of helium on tensile properties of tungsten $\Sigma\{112\}$ symmetrical grain boundary studied by molecular dynamics[J]. Transactions of Materials and Heat Treatment, 2019, 40(8): 96-104.

He 将对钨的服役行为产生重要影响,包括力学性能退化、加剧钨的肿胀、影响疲劳寿命和延展性、导致高温脆化和表面起皮与气泡等。这是由于 He 原子具有满壳层电子结构,是化学性质非常不活泼的惰性元素,He 原子很难溶于金属,并且不与金属原子结合。同时由于间隙 He 原子的迁移能低,容易发生迁移、聚集、生长并最终形成氦泡。至今,钨的氦离子辐照行为得到了广泛研究,主要集中在: 1) 表面形貌研究^[5-6]: 起皮与起泡、表面起裂、形成表面纳米绒毛、纳米针等; 2) 力学性能研究^[7-8]: 氦离子辐照影响晶格应变、硬化、疲劳行为等; 3) 辐照试验参数影响微观结构与性能^[9]; 4) 氦气泡演化行为^[10]; 5) 计算模拟分析氦在钨中行为: 包括分子动力学^[11]、加速分子动力学^[12]、速率理论与蒙特卡洛耦合模型^[13]、大尺度原子模拟^[14]等。

在实际服役中,钨将遭受应力作用,因此,研究并理解应力下 He 在钨中的行为显得尤为重要。由于实验条件和测试技术的限制,获得低辐照损伤钨的力学性能会遇到困难,特别是离子辐照导致的薄辐照损伤层的力学性能尤为如此。目前计算模拟(如分子动力学、有限元等)已成为探讨氦辐照下钨的力学行为及失效机制的重要手段,其中分子动力学因为可以准确模拟受力过程中的原子运动轨迹,广泛用于揭示应力作用下材料失效的微观机制。Ma 等^[15]对不同晶向的钨在拉伸过程中的变形特征和微观破坏行为进行分析,得出晶体结构的形变是材料强化的主要影响因素。Lu 等^[16]采用等温加载方式,模拟了钨在等温拉伸弛豫不同时刻的微观结构演变过程,对比了不同晶向的屈服应变、屈服强度和断裂应变。Wang 等^[17]研究了铁晶体的不同晶界在受到辐照损伤后,晶界处的空位和间隙原子对拉伸性能的影响。然而对于晶界上含有 He 泡的钨晶体的拉伸性能的研究却相对较少。因此,本文采用分子动力学研究在 $\Sigma\{112\}$ 对称晶界上不同大小与浓度的 He 泡对钨晶体拉伸性能(如屈服应力、屈服应变等)和微观结构的影响。

1 模拟原理和方法

在本研究中,Atomsk^[18]方法被用来构建 $\Sigma\{112\}$ 对称晶界模型,将 $[\bar{1}12]$, $[1\bar{1}1]$, $[110]$ 3 个晶向分别设为 X 轴、Y 轴和 Z 轴; Y 轴和 Z 轴方向都使用周期性边界条件, X 轴方向使用固定边界条件; 为了消除尺寸效应,模型大小为 $28\text{ nm} \times 9\text{ nm} \times 9\text{ nm}$,约有 15 万个 W 原子,晶界模型如图 1(a) 和 1(b) 所示。

用 LAMMPS(Large-scale atom/scaler massively parallel simulation)软件包^[19]进行分子动力学模拟。计算模拟中势函数的选择尤其重要,对于金属而言,广泛使用嵌入势(Embedded atomic method, EAM),这也是较为精确的势。本文中,对于 W-W 相互作用势,采用 Zhou 等^[20]改进的 EAM 势; 而 W-He 和 He-He 相互作用势,采用广泛使用的 Juslin 和 Wirth^[21]所改进的势函数。模拟计算中,首先将构建好的 $\Sigma\{112\}$ 对称晶界在常温下使用 NPT 系综(恒温恒压,粒子数恒定)进行充分的弛豫。而后在弛豫好的晶界模型基础上构建出作为拉伸的晶界模型,分为两部分,第一部分:向弛豫后晶体的晶界处添加一个 He 原子,充分弛豫后,在距离这个 He 原子 0.1 至 0.2 nm 处再添加一个 He 原子,并充分弛豫[每添加一个 He 原子系统在 NVT 系综(恒温,体积恒定,粒子数恒定)下弛豫 5 ps],经过多次重复操作,使晶界处出现 He 泡。第二部分:向晶界区域(最外的两层原子)分别添加晶界原子数的 5%、10%、20% 和 30% 的 He 原子数,之后将系统在 900 K 恒温, NVT 系综弛豫 2 ns,而后再将系统弛豫到 300 K,使晶界含有一定浓度的小 He 泡。最后将充分弛豫的含有一定大小或者一定浓度 He 泡的晶体在 NPT 系综下以每 1000 步应变率为 0.001(1/Ps)沿 X 轴方向均匀施加载荷,较长的步数可以有效消除加载过程中的基波效应,拉伸至材料形变为 30%。为了接近真实的实验情况和避免数值模拟中热激活引起的复杂影响,模拟过程中采用 Berendsen 热浴^[22]将温度控制在 300 K。运用 OVITO 软件进行结果的可视化^[23],分析方法上主要运用共近邻分析法 CAN(Common neighbor analysis)^[24]和位错分析法 DXA(Dislocation Extraction Algorithm)^[25]进行分析。

2 结果与分析

2.1 晶界无 He 泡的计算模拟结果

图 1 展示了在晶界不含有 He 泡情况下的 $\Sigma\{112\}$ 钨拉伸时的晶体结构的变化过程,图 2 为拉伸过程中的应力-应变曲线。当拉伸应变在 0~7.5% 范围内,如图 1(a) 和 1(b) 所示,钨的应力随应变线性增加,遵从胡克定律,此时晶格排列完整,原子分布均匀且没有位错产生,这阶段为弹性阶段,经过线性拟合,得到这一阶段的弹性模量约为 340 GPa。当应变达到 7.5% 时,晶界处发生了结构相变,晶界处的晶格排列由无序结构转变为有序规则结构,同时晶界沿

着拉伸方向滑移,如图1(c)、1(d)和图2中B点所标识。从图1(d)观察到,沿 $[110]$ 晶向在拉伸应力作用下,BCC结构中的基本形状单元由长方形转变为结构相变区域中的正菱形,晶格原子的相对位置发生了变化,这与Wang等^[17]对铁晶体的模拟结果类似;如图1(e)所示,随着应变的增加,结构相变区域也随之增加,而BCC结构区域却不断减少。两个区域的晶格排列依旧完整,没有出现晶格损伤。虽然结构相变区域的晶格原子是稳定的,但晶格原子的势能和应力高于BCC完美晶格结构状态下原子的势能和应力。从图2中的BD段可知,钨在拉伸过程中,应力依然随应变线性增加,遵从胡克定律,但弹性模量

却迅速降低,将这阶段定义为弹性相变阶段,经线性拟合得这一阶段的弹性模量约为46 GPa。在弹性相变阶段,高应力、高能量的晶体结构从晶界处往拉伸两端扩展生长,系统能量逐步增加。

如图1(f)、1(g)和图2中的D点所示,当应变率达到22%时,钨的拉伸应力处于最大值。此时,晶界滑移到钨 $[112]$ 晶向的固定边界处,在两端的BCC结构里 (110) 密排面出现滑移,相应出现伯氏矢量为 $1/2\langle 111 \rangle$ 的位错环,滑移系为 $(110)\langle 111 \rangle$ ^[26]。在DE段,应力随应变的增大而急剧减小。这阶段为屈服阶段,钨内部结构开始出现晶面滑移、位错等不可逆的变化,材料的抗载能力快速下降。

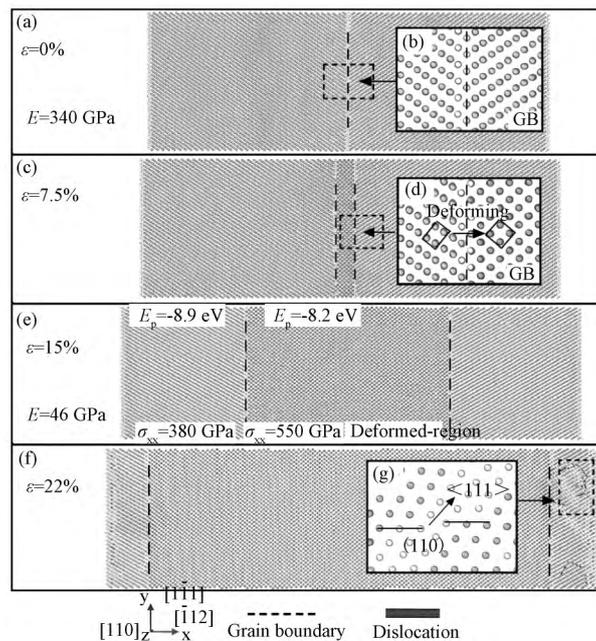


图1 沿 $[110]$ 方向观察,晶界上无He泡的 $\Sigma 3\{112\}$ 对称晶界的拉伸状态图:(a)和(b)无应力时的晶界;(c)和(d)加载7.5%应变,从晶界处开始出现弹性相变;(e)加载15%应变,结构相变区扩大;(f)和(g)加载22%应变, (110) 晶面沿着 $\langle 111 \rangle$ 方向滑移,进入屈服阶段(图中GB:晶界; E :弹性模量; E_p :钨原子势能; σ_{xx} :沿拉伸方向的应力)

Fig.1 Deformation characteristics of $\Sigma 3\{112\}$ symmetrical grain boundary without He bubbles viewed along $[110]$ direction (a) and (b) grain boundary without strain; (c) and (d) elastic phase-transition with 7.5% strain; (e) enlarge of structure phase with 15% strain; (f) and (g) (110) slip along the $\langle 111 \rangle$ direction with 22% strain (GB: grain boundary; E : elastic modulus; E_p : the potential of W atom; σ_{xx} : stresses along the tensile direction)

2.2 晶界含小He泡的计算模拟结果

如图3(a)所示,当晶界处存在小尺寸He泡($N_{He}=10$)拉伸过程中的应力-应变曲线如图4所示。与不含有He泡的情况类似,在 $0 < \varepsilon \leq 7.5\%$,钨的应力随应变线性增加,遵从胡克定律,处于弹性应变阶段。当 $\varepsilon > 7.5\%$ 时,如图3(b)所示,进入弹性相变阶段,高应力、高能量的相变结构区开始由晶界往两端扩展,且在He泡的周围出现了少量的间隙原子

和空位(Frenkel缺陷)。Frenkel缺陷沿x轴方向分布的边界恰好在晶界处。当应变进一步增大时,如图3(c)所示,Frenkel缺陷的数量也沿着拉伸方向增加。沿着 $[110]$ 晶向观察,如图3(d)所示,可以得知,在He泡周围, $[112]$ 晶向的原子在应力的作用下比其他晶格原子沿 $[112]$ 晶向多滑移了半个晶格长度,从而形成了Frenkel缺陷带。在Frenkel缺陷分布带出现了混合位错,此时晶界已经开始远离Frenkel缺陷

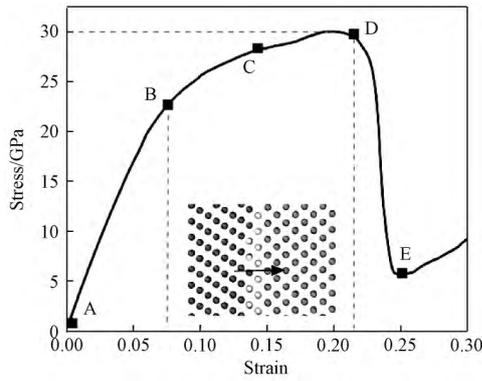


图 2 晶界上无 He 泡时钨的拉伸应力应变曲线
Fig.2 Stress-strain curves of tungsten without He bubbles in the grain boundary

带,晶界的推进速度大于 Frenkel 缺陷带推进的速度。由图 3 (e),当拉伸应变增至 18% 时,可以发现 Frenkel 缺陷的数量显著减小,只有少量存留在 He 泡

周围,此时晶界已经远离 He 泡。当拉伸使晶体进入了屈服阶段($\epsilon = 22\%$) 时,He 泡周围出现了伯氏矢量为 $1/6\langle 112 \rangle$ 的位错环。如图 3 (f) 所示,沿 $[\bar{1}11]$ 观察,在 He 泡周围部分 (110) 晶面发生了滑移,出现了肖克利 (Shockley) 不全位错^[26],这与无 He 泡的钨从拉伸两端出现屈服损伤不同。

钨拉伸过程中 Frenkel 缺陷的变化可由图 3 (g) 做如下解释,图中展示了在拉伸过程中 A、B 和 C 3 个相关原子的运动轨迹。晶体的缺陷区域对抗外部的应力能力较弱,易在应力的作用下发生结构变化^[17]。高应力伴随着晶界往拉伸方向推进,A 原子为 He 泡旁的晶格原子,处在不完整晶格区域,抗应力能力较弱。因此,在应力的作用下沿着 x 轴负方向发生大幅度位移,成为间隙原子。晶界推进到 B 原子所在的区域,该处为完整晶格,抗应力能力较强,因此 B 原子连同周围的晶格原子都沿着 x 轴负方向

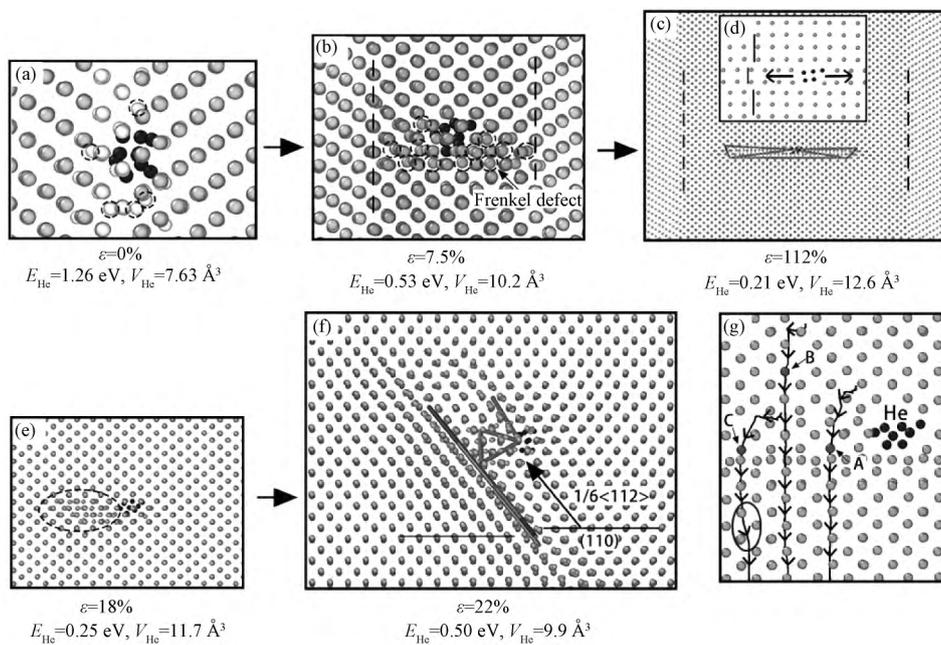


图 3 沿 $[110]$ 方向观察,晶界上含有小 He 泡时拉伸状态图 (a) 无应力时的晶界; (b) 加载 7.5% 应变,从晶界处开始出现 Frenkel 缺陷; (a) 和 (b) 中的圆形虚线圈: 间隙原子; (c) 加载 12% 应变, Frenkel 缺陷增多; (d) $[\bar{1}12]$ 晶向的原子出现滑移; (e) 加载 18% 应变, Frenkel 缺陷减少; (f) 加载 22% 应变,沿 $[\bar{1}11]$ 方向观察, (110) 晶面沿着 $\langle 112 \rangle$ 方向滑移; (g) 拉伸过程中 3 个相关原子的运动轨迹 (A: 自间隙原子, B: 完整晶格处的原子, C: 自间隙原子和空位的湮灭; 黑色原子: He, ϵ : 拉伸应变率, E_{He} : He 原子的平均势能, V_{He} : He 原子的平均体积)

Fig.3 Deformation characteristics of tungsten with little He bubbles containing 10 He atoms in the grain boundary, the view is along $[110]$ direction (a) grain boundary without strain; (b) there are some Frenkel defects around He bubbles with 7.5% strain; the circular virtual coils in (a) and (b): interstitial atoms; (c) Frenkel defects increasing with 12% strain; (d) the displaced atoms along $[\bar{1}12]$ direction; (e) Frenkel defects decreasing with 18% strain; (f) (110) slip along the $\langle 112 \rangle$ direction with 22% strain, the view is along $[\bar{1}11]$ direction; (g) atomic trajectory (A: self-interstitial atom, B: atom in perfect lattice, C: annihilation of self-interstitial atom and vacancy; Dark atom: He, ϵ : strain, E_{He} : the average potential of He atoms, V_{He} : the average volume of He atoms)

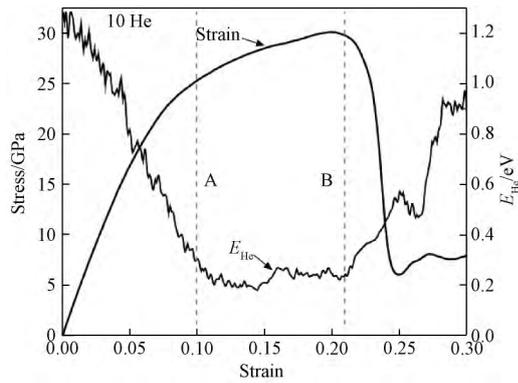


图4 晶界含有小 He 泡时的应力-应变曲线和平均 He 原子势能变化曲线图

Fig.4 Curves of stress-strain and potential-strain of tungsten with little He bubble containing 10 He atoms in the grain boundary

发生较小的位移,拉伸过程中晶格排列处于有序完整状态。晶界推进到 C 原子处,由于 C 原子的周围存在着类似 A 原子一样的间隙原子,因此 C 原子处在不完整晶格区域,在应力的作用下沿着 x 轴负方向同样发生了较大的位移成为间隙原子。随着晶界的远离,Frenkel 缺陷进入热弛豫,可以得知,C 原子不仅在拉伸应力下往 y 轴负方向持续运动,而且还沿着 x 轴正方向发生了一定的位移,间隙原子和空位自发地复合;而间隙原子 A 并没有和空位复合。因此,在弛豫过程中大部分 Frenkel 缺陷会自动消失,只有少量存留在 He 泡周围。

根据图 4 可知,He 泡的平均原子势能(E_{He})的变

化跟应力-应变曲线的正好相反。结合图 3(a)~3(f)的 He 泡平均原子体积(V_{He})的变化趋势,可以得知,图 4 虚线 A 之前的弹性拉伸阶段,拉伸使得 He 泡周围的晶格间距变大,He 泡的体积也随之变大,He 泡的势能随着应变率的增大而线性地减小。当进入弹性相变阶段,即图 4 虚线 A 至虚线 B 段,此时 He 泡处于结构相变区,周围晶格间距不再变化。因此 He 泡体积和势能处于相对稳定阶段,并在拉伸应变达到 12%时,达到最小值,此时 He 原子的平均体积为 12.6 \AA^3 ,平均势能为 0.21 eV。应变达到 22%时,进入屈服阶段,在 He 泡周围出现晶格畸变,He 泡体积减小,He 泡势能快速上升。因此,He 泡势能受其周围晶格间距的影响。对于晶界上无 He 泡和含有小 He 泡($N_{\text{He}} = 10$)的情况,钨的拉伸屈服应变和屈服应力都分别约为 22%和 30 GPa,因此,小 He 泡对 $\Sigma 3\{112\}$ 晶界的拉伸性能的影响较小。

2.3 晶界含大 He 泡的模拟结果

含有大 He 泡的钨拉伸时出现屈服时的晶格结构如图 5 所示,空位-应变曲线如图 6 所示,应力-应变曲线如图 7 所示。观察图 5,大尺寸 He 泡使钨晶体在应力的作用下出现更多的 Frenkel 缺陷,与小 He 泡不同的是,这些 Frenkel 缺陷在热弛豫下并没有消失,而是跟着晶界快速沿着拉伸方向推进。由图 6 可知,在屈服点,晶体中空位数目的变化与 Frenkel 缺陷的变化时相一致的,含有的 He 泡越大,则拉伸过程产生的空位越多;且在接近屈服点时,无论晶界含有的 He 泡为多大,晶体中空位数目都会快速增加。

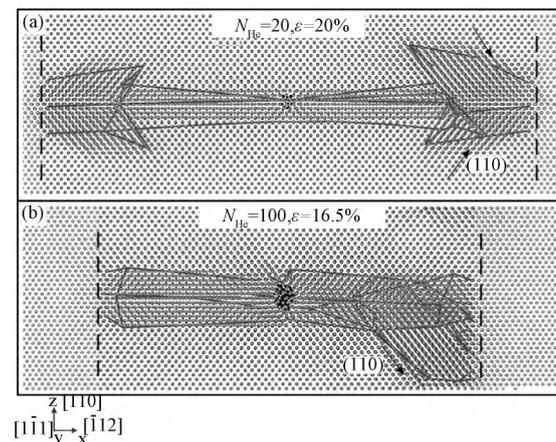


图 5 沿 $[111]$ 方向观察,晶界上含有 (a) 20 个氦原子的氦气泡且应变为 20% 和 (b) 100 个氦原子的氦气泡且应变为 16.5% 的状态图; (N_{He} : He 原子数; 图中箭头为 (110) 面的滑移方向)

Fig.5 The characteristic of grain boundary with (a) $\varepsilon = 20\%$ and a helium bubble with 20 He atoms, (b) $\varepsilon = 16.5\%$ and a helium bubble with 100 He atoms, the view is along $[111]$ direction (N_{He} : the number of He atoms in He bubbles. The arrows indicate the direction of slip of (110) plane)

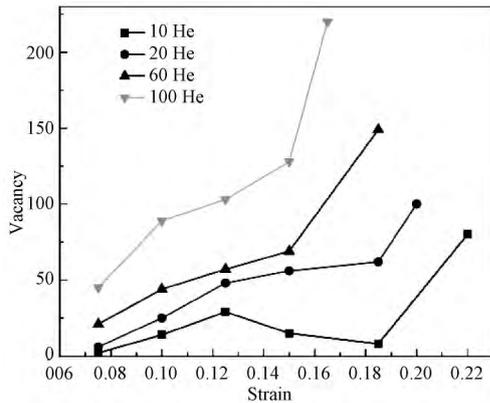


图 6 晶界上含有不同大小 He 泡的空位数-应变曲线图

Fig.6 Vacancy-strain curves of tungsten with different size He bubbles in the grain boundary

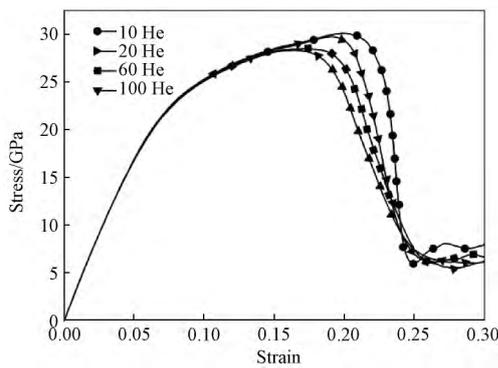


图 7 晶界上含有不同大小 He 泡的应力-应变曲线图

Fig.7 Stress-strain curves of tungsten with different size He bubbles in the grain boundary

由前文分析可知,当晶体不含有 He 泡时,晶体内的空位数量并不随着应变增加而呈现动态变化的过程,因此图 6 不含有 $N_{He} = 0$ 的情况。对于 $N_{He} < 100$ 时,He 泡越大,在拉伸的过程中越多的 Frenkel 缺陷会阻碍周围晶格原子的有序运动,导致更多的缺陷和区域非晶化,由于缺陷抗应力能力较弱,所以晶体屈服应力和屈服应变都会降低。He 泡大小不同,晶体钨拉伸到屈服点时的晶格损伤程度也不同。对于 $N_{He} = 20$ 和 $N_{He} = 100$ 如图 5(a) 和 5(b) 所示,沿 $[-111]$ 观察,拉伸屈服的发生都是从 Frenkel 缺陷带周围(110)密排面出现滑移开始的,伴随着大量的混合位错。观察图 7,对于不同大小的 He 泡,拉伸在弹性阶段($\epsilon \leq 7.5\%$)的弹性模量都是一样的;但对于 $N_{He} = 60$ 和 $N_{He} = 100$ 在弹性相变阶段($7.5\% < \epsilon \leq 20\%$),应力随着应变的增加呈现非线性变化,即弹性模量随应变的增加呈递减趋势,这是因为大 He 泡在拉伸过程产生大量的缺陷会逐渐降低材料拉伸强度,而对于 $N_{He} = 10$ 和 $N_{He} = 20$,产生的缺陷较少,缺陷对拉伸强度的影响可以忽略不计。

2.4 晶界含有不同浓度 He 泡的模拟结果

图 8 和图 9 分别为晶界上含有不同溶度 He 泡的钨在屈服点的晶体结构图和应力-应变曲线图。由图 8 得知,在晶界聚集了许多 He 泡($N_{He} < 20$),大量的位错从晶界处发射出来,He 泡浓度越大的晶界,拉伸过程中发射的位错越多,屈服应变越小。如图 8(a),对于 $C_{He} = 5\%$,在弹性相变阶段($\epsilon > 7.5\%$),在结

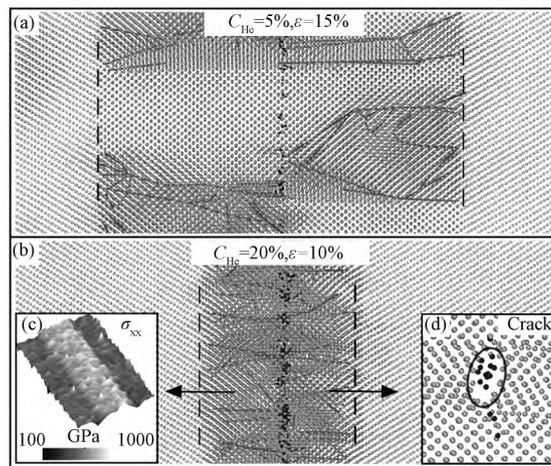


图 8 沿 $[110]$ 方向观察,沿晶界上含有不同浓度的 He 泡在拉伸屈服点的状态图 (a) He 泡浓度 5% 加载应变 15%; (b) He 泡浓度 20%; 加载应变 10%; (c) 应变区沿拉伸方向的应力分布图,应力从 He 泡处往拉伸两端递减; (d) He 泡周围出现裂纹 (σ_{xx} : 沿拉伸方向的应力)

Fig.8 The characteristic of grain boundary with different concentration of He bubbles in the grain boundary, the view is along $[110]$ direction (a) $C_{He} = 5\%$, $\epsilon = 15\%$; (b) $C_{He} = 20\%$, $\epsilon = 10\%$; (c) distribution of σ_{xx} in highly-deformed region; (d) crack around He bubbles (σ_{xx} : stresses along the tensile direction)

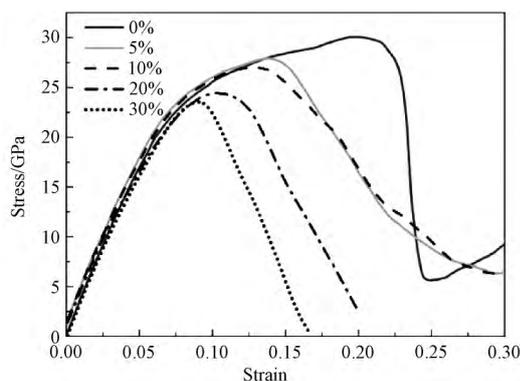


图9 晶界上含有不同浓度 He 泡的应力-应变曲线图

Fig.9 Stress-strain curves of tungsten with different concentration of He bubbles in the grain boundary

表1 钨晶界上含有不同大小(N_{He})或者不同浓度(C_{He}) He 泡的拉伸屈服应变和屈服应力,及在屈服点晶体内的空位数目

Table 1 The yield stress and yield strain of tungsten with different size (N_{He}) or different concentration of He bubbles (C_{He}) in the grain boundary, and the number of vacancies in crystal at yield point

Yield point	N_{He}					C_{He}			
	0	10	20	60	100	5%	10%	20%	30%
Strain	22%	22%	20%	18.5%	16.5%	15%	12.5%	10.0%	9.0%
Stress/GPa	30.11	30.08	29.72	28.35	28.02	27.9	26.97	24.45	23.56
Vacancy	-	75	102	149	220	1108	1437	-	-

裂分离,这不同于单晶钨拉伸时先颈缩再断裂的情况^[15]。由以上分析可知,当晶体含有高浓度 He 泡时($C_{\text{He}} \geq 20\%$),在屈服断裂前,晶体内部空位数量几乎不变;屈服断裂后,空位数量瞬间增加到无穷大或者无法统计,因此高浓度 He 泡晶体在屈服点时的空位数量并不出现在表 1 中。从图 8 可知,屈服应变和屈服应力是随着 He 浓度的增加而降低的,对于低浓度 He ($C_{\text{He}} \leq 10\%$),在屈服点后,晶体进入塑性变形。而对于高浓度 He ($C_{\text{He}} \geq 20\%$),晶体在屈服点后,直接断裂分离。综合图 7 和图 9 可知,对于晶界上含有不同大小或者不同浓度的 He 泡,在弹性阶段,弹性模量的大小相同。但在弹性相变阶段,由于 He 不溶于 W 相比含有单个大 He 泡而言,个数小且离散的 He 泡,其 He 脆的作用面积更大,对晶界韧性的降低作用更加明显。

3 结论

1) 当晶界上不含 He 泡时,钨在拉伸屈服前经历了弹性阶段和弹性相变阶段;在弹性相变阶段,弹性

模量降低,晶界往拉伸两端滑移,BCC 晶格结构发生改变;当晶界上含有小 He 泡时,在弹性相变阶段,拉伸会使钨晶体内部出现 Frenkel 缺陷带,随后大部分 Frenkel 缺陷又会在拉伸弛豫过程中湮灭;He 泡的能量在弹性阶段先快速减小,接着在弹性相变阶段保持稳定,最后在屈服点后又快速上升。小 He 泡对钨的屈服应变和屈服强度没有显著影响;3) 晶界上含有大 He 泡时,He 泡尺寸越大,钨拉伸至屈服时的晶格损伤越大,屈服应变和屈服应力越低;对于大 He 泡($N_{\text{He}} \geq 60$),在弹性相变阶段,晶体钨的弹性模量逐渐降低;4) 晶界上含有不同浓度的 He 泡时,浓度越大,屈服应变和屈服应力越低;在拉伸过程中,大量的位错会从晶界处的 He 泡发射出去,晶格结构变得无序化;对于高浓度 He ($C_{\text{He}} \geq 20\%$),相比于单个大 He 泡,个数小但离散分布的 He 泡引起的氢脆面积更大,对晶界韧性的降低作用更加明显,易使材料发生拉伸断裂。

参 考 文 献

- [1] Federici G ,Wuerz H ,Janeschitz G ,et al.Erosion of plasma-facing components in ITER [J].Fusion Engineering and Design 2002 (s61/62) : 81-94.
- [2] Thomas G J.Experimental studies of helium in metals [J].Radiation Effects and Defects in Solids ,1983 ,78(1/4) : 37-51.
- [3] Trinkaus H ,Singh B N.Helium accumulation in metals during irradiation-where do we stand? [J].Journal of Nuclear Materials , 2003 ,323(2) : 229-242.
- [4] Feng F ,Liu X ,Lian Y ,et al.Synergistic effects of ELMs and H-He irradiation on the degradation behavior of tungsten treated with high-energy-rate forging [J].Journal of Nuclear Materials 2019 ,516: 178-184.
- [5] Huang S L ,Ran G ,Lei P H ,et al.Effect of crystal orientation on self-assembly nanocones formed on tungsten surface induced by helium ion irradiation and annealing [J].Nanomaterials 2016 ,6(11) : 1-12.
- [6] Ran G ,Liu X ,Wu J ,et al.In situ observation of surface morphology evolution in tungsten under focused Ga⁺ ion irradiation [J]. Journal of Nuclear Materials 2012 ,424(1/3) : 146-152.
- [7] Huang S L ,Ran G ,Lei P H ,et al.Effect of crystal orientation on hardness of He⁺ ion irradiated tungsten [J].Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 2017 ,406: 585-590.
- [8] Chen W Q ,Liu W ,Xu B ,et al.Characterization of dose dependent mechanical properties in helium implanted tungsten [J].Journal of Nuclear Materials 2018 ,509: 260-266.
- [9] Pentecoste L ,Thomann A ,Brault P ,et al.Substrate temperature and ion kinetic energy effects on first steps of He⁺ implantation in tungsten: Experiments and simulations [J].Acta Materialia 2017 ,141: 47-58.
- [10] Sandoval L ,Perez D ,Uberuaga B P.Formation of helium-bubble networks in tungsten [J].Acta Materialia 2018 ,159: 46-50.
- [11] Xie H X ,Xu K ,Lu G H ,et al.Dislocation climbing mechanism for helium bubble growth in tungsten [J].Scripta Materialia 2018 , 174: 98-102.
- [12] Yia X O ,Arakawab K ,Ferronic F ,et al.High-temperature damage evolution in 10 keV He⁺ irradiated W and W-5Re [J].Materials Characterization 2018 ,145: 77-86.
- [13] Gao E ,Ghoniem N M.A coupled rate theory-Monte Carlo model of helium bubble evolution in plasma-facing micro-engineered tungsten [J].Journal of Nuclear Materials 2018 ,509: 577-590.
- [14] Hammond K D ,Blondel S ,Hu L ,et al.Large-scale atomistic simulations of low-energy helium implantation into tungsten single crystals [J].Acta Materialia 2018 ,144: 561-578.
- [15] 马彬 ,饶秋华 ,贺跃辉 ,等.单晶钨纳米线拉伸变形机理的分子动力学研究 [J].物理学报 2013 ,62 (17) : 368-372.
MA Bin ,RAO Qiu-hua ,HE Yue-hui ,et al.Molecular dynamics simulation of tensile deformation mechanism of the single crystal tungsten nanowire [J].Acta Physica Sinica 2013 ,62(17) : 368-372.
- [16] 卢敏 ,余冬海 ,刘长菊. [110]、[112]、[111]晶向钨纳米线拉伸微结构演变 [J].四川大学学报(自然科学版) 2017 ,54(1) : 147-155.
LU Min ,YU Dong-hai ,LIU Chang-ju.Microstructure evolution on tensile of tungsten nanowires with different crystal orientations of [110] , [112] and [111] [J].Journal of Sichuan University(Natural Science Edition) 2017 ,54(1) : 147-155.
- [17] Wang J ,Gao X ,Gao N ,et al.Grain size effects on He bubbles distribution and evolution [J].Journal of Nuclear Materials 2015 , 457: 182-185.
- [18] Hirel P.AtomsK: A tool for manipulating and converting atomic data files [J].Computer Physics Communications 2015 ,197: 212-219.
- [19] Plimpton S.Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics [J].Journal of Computational Physics ,1995 ,117: 1-19.
- [20] Zhou X W ,Wadley H N ,Johnson R A ,et al.Atomic scale structure of sputtered metal multilayers [J].Acta Materialia 2001 ,49 (19) : 4005-4015.

- [21] Juslin N ,Wirth B D.Interatomic potentials for simulation of He bubble formation in W [J].Journal of Nuclear Materials ,2013 ,432 (1/3) : 61–66.
- [22] Berendsen H J C ,Postma J P M ,Gunsteren F V W ,et al.Molecular dynamics with coupling to an external bath [J].Journal of Chemical Physics ,1984 ,81(8) : 3684–3690.
- [23] Stukowski A.Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO –the open visualization tool [J].Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering ,2010 ,18(1) : 2154–2162.
- [24] Honeycutt D J ,Andersen C H.Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard–Jones clusters [J].Journal of Physical Chemistry ,1987 ,91(19) : 4950–4963.
- [25] Frank F C.Crystal dislocations–Elementary concepts and definitions [J].Philosophical Magazine ,1951 ,42(331) : 809–819.
- [26] 冯端.金属物理学 第三卷 [M].北京: 科学出版社 ,1999.