

УДК 621.039.531.001.57

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КАСКАДОВ АТОМНЫХ СМЕЩЕНИЙ С ГЕЛИЕВЫМИ ПУЗЫРЬКАМИ НЕБОЛЬШОГО РАЗМЕРА В МАТРИЦЕ ОЦК Fe

© 2013 М.Ю. Тихончев, В.В. Светухин

Научно-исследовательский технологический институт им. С.П.Капицы
Ульяновского государственного университета

Поступила в редакцию 26.11.2013

Проведено молекулярно-динамическое моделирование прохождения каскадов атомных смещений через гелиевые пузырьки небольших размеров (до 1 нм в диаметре) в матрице ОЦК-железа. Моделирование проведено для энергий ПВА от 1 до 30 кэВ. Модель базируется на многочастичном взаимодействии для железа и парных взаимодействиях He-He и He-Fe. Получены качественные и количественные оценки изменения размеров и состава (отношения He/V) гелиевых пузырьков. Показано, что такие пузырьки склонны к частичному растворению при прохождении каскада смещений.

Ключевые слова: моделирование, атомные смещения, гелиевые пузырьки, матрица ОЦК-железа.

1. ВВЕДЕНИЕ

Высокохромистые феррито-мартенситные стали являются кандидатным конструкционным материалом бланкета и первой стенки будущих термоядерных установок [1-3]. Известно, что нейтронное облучение инициирует атомные смещения, которые ведут к микроструктурным изменениям [4-7], а также образованию трансмутационных газов. Ожидается, что наряду с образованием дислокационных петель, пор и другими микроструктурными изменениями накопление трансмутационного гелия будет вызывать деградацию механических свойств конструкционных сталей под облучением. Прежде всего, это касается такого явления как низкотемпературное упрочнение и охрупчивание.

В серии недавних работ (см., например, [8-11]) проведено атомисткое моделирование поведения гелия в матрице ОЦК Fe, содержащего вакансионные кластеры. Установлено, что наиболее энергетически выгодным гелий-вакансионным соотношением является единица (He/V=1, т.е., число атомов гелия в пузырьке совпадает с числом вакансий в занимаемом им вакансионном кластере). Поведение гелиевых пузырьков в ОЦК железе и сталях на его основе активно изучается в последние годы в связи с разработкой реакторов ядерного синтеза. Прохождение каскадов атомных смещений через такие пузырьки моделировалось ранее исследователями группами из США [10,12,13,15],

Тихончев Михаил Юрьевич, кандидат физико-математических наук, начальник лаборатории моделирования поведения неорганических материалов.

E-mail: tikhonchev@sv.ulsu.ru

Светухин Вячеслав Викторович, доктор физико-математических наук, профессор, директор научно-исследовательского технологического института.

E-mail: slava@sv.uven.ru

Японии [8], Китая [13-15] и Германии [11]. Однако все упомянутые группы преимущественно изучали пузырьки размером от 1 нм и больше. В то же время, активно разрабатываемые в последние годы континуальные модели зарождения и роста гелиевых пузырьков в облучаемых сталях исходят из того, что зарождение пузырька начинается из объединения одиночных атомов гелия, т.е., интерес представляют пузырьки, содержащие всего несколько атомов гелия.

Настоящая работа посвящена молекулярно-динамическому моделированию прохождения каскадов атомных смещений через гелиевые пузырьки небольших размеров (до 1 нм в диаметре) в матрице ОЦК-железа.

2. МЕТОДИКА МОДЕЛИРОВАНИЯ

Моделирование проводили методом молекулярной динамики. Целью моделирования является получение характеристик изменения размера и состава гелиевого пузырька после прохождения каскада атомных смещений. При моделировании использовали смешанные потенциалы межатомного взаимодействия.

Для железа в настоящем исследовании мы использовали многочастичный потенциал типа Финниса-Синклера из работы Аккланда, Менделова и др. [16], который получен из потенциала 2 из работы [17] модификацией функции внедрения. Этот потенциал считается на сегодняшний день одним из самых удачных и широко используется различными исследователями. Он хорошо воспроизводит такие параметры кристалла ОЦК-Fe как параметр решетки (включая температурное расширение), энергию сублимации, упругие константы, энергии образования вакансии и собственных межузельных атомов (СМА),

энергию активации вакансии. Для СМА потенциал обеспечивает наибольшую стабильность гантельной конфигурации с ориентацией $\langle 110 \rangle$, что согласуется как с экспериментальными результатами, так и с расчетами *ab initio*.

Для описания взаимодействий железа с гелием использовали парный потенциал из работы [18]. Этот потенциал хорошо воспроизводит энергию формирования простых гелиевых дефектов (замещение одного атома Fe атомом He, междоузельный атом He в октаэдральной пустоте ОЦК железа, междоузельный атом He в тетраэдральной пустоте) и хорошо описывает миграцию гелия в ОЦК железе.

Для описания He-He взаимодействий использовали простой репульсивный парный потенциал из работы [19].

Отметим, что подход, основанный на использовании потенциалов разного типа, довольно часто встречается в современной научной литературе, например, при моделировании сплавов на основе железа, содержащих неметаллические элементы (водород, гелий, углерод, кислород).

Построение атомарной модели гелиевого пузырька начинали с задания шаровых вакансионных кластеров в матрице ОЦК железа. Для этого в центре кристаллита ОЦК Fe задавался шар с центром в узле кристаллической решетки и радиусом равным радиусу первой, второй, третьей или четвертой координационной сферы. Узлы кристаллической решетки, попавшие в указанный шар (включая и его поверхность), задавались вакантными. Таким образом, получали вакансионный кластер сферической формы, содержащий 9, 15, 27 или 51 вакансию. Кроме этого, рассматривали кластеры, состоящие из двух вакансий, расположенных друг от друга на расстоянии первой координационной сферы, и кластеры из 6-ти ближайших вакансий с центром масс в центре октаэдрической пустоты ОЦК решетки. Отметим, что последний из этих двух кластеров (6 вакансий) также имеет форму близкую к шару. После построения кристаллита с вакансионными кластерами в этих кластер равномерно помещались атомы гелия. Число атомов гелия соответствовало заданному гелий-вакансионному отношению. В рамках настоящего проекта мы ограничились рассмотрением двух таких отношений: 1.0 и 0.5. Изначально атомы гелия распределялись равномерно по объему кластера.

Вычисления начинались с релаксации построенной системы при температуре 500 К с использованием термостата Берендсена в течение 10 пс. Используемый параметр решетки железа $a_0 = 2.8649$ Е был рассчитан ранее для этой температуры и используемого потенциала. Все вычисления проводили с периодическими граничными

условиями. После релаксации модельного кристаллита моделировали эволюцию каскада атомных смещений. Для этого выбранному атому кристаллита (первично-выбитому атому, ПВА, в нашем случае, это всегда был атом железа) придавали импульс в заданном направлении соответственно рассматриваемой энергии каскада. Для пузырька каждого вида рассматривались ПВА, расположенные на четырех расстояниях от центра пузырька. Эти расстояния незначительно меняются в зависимости от размера пузырька, что обусловлено различием в форме. Так, для пузырька из 2-х вакансий рассматривали расстояния 7.68, 24.6, 41.5 и 58.5 Е. Для случая 6-ти вакансий – это 8.9, 25.7, 42.7 и 59.6 Е. Для всех остальных пузырьков – 8.5, 25.4, 42.4 и 59.3 Е. Направление импульса ПВА всегда параллельно высокоиндексному кристаллографическому направлению $\langle 135 \rangle$ и направлено в центр пузырька. Рассматривали энергии ПВА 1, 3, 5, 15, 20 и 30 кэВ. Моделирование продолжали до полного затухания каскада. Для энергий ПВА 1 – 5 кэВ использовали кристаллиты размером $46a_0 \times 45a_0 \times 47a_0$, для 15 – 30 кэВ – $58a_0 \times 59a_0 \times 60a_0$.

При расчетах не использовали никаких методов сброса температуры. Поэтому температура посткаскадного кристаллита была на 20 – 150 К выше начальной.

После завершения моделирования анализировали кристаллит описанным в предыдущем пункте методом анализа ячеек Вигнера-Зейтца. Причем сначала проводился анализ с учетом только атомов железа, и определялись вакантные узлы решетки. Затем определялись положения атомов гелия. Гелий мог находиться либо в вакантной ячейке, либо занимать междоузельное пространство в решетке железа. Также как и в предыдущей части, определялись кластеры вакансий и СМА. Два атома гелия считали принадлежащими одному пузырьку, если они попадали в один и тот же вакансионный кластер.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Проведенные расчеты не выявили значимого влияния гелиевых пузырьков на параметры радиационного повреждения железа.

В результате проведенного исследования было установлено, что гелий-вакансионное отношение уменьшается для случая его начального значения равного единице ($He/V=1$) до значений 0.88, 0.74, 0.88 и 0.98 соответственно возрастанию расстояния от ПВА до центра пузырька.

Соответствующие оценки для начального отношения $He/V=0.5$ составили 0.64, 0.48, 0.66 и 0.58. Т.е., для таких пузырьков, в большинстве

случаев, наблюдается возрастание гелий-вакансионного отношения.

Основным результатом являются оценки доли атомов гелия, уходящих из пузырька в процессе каскадного перемешивания. Атом гелия считаем покинувшим пузырек если после каскада он, либо оказывается в вакансионном кластере, не содержащем других атомов гелия (мономер), или в одиночной вакансии, либо попадает в междоузельное пространство решетки железа. Такие атомы гелия, независимо от их последующего расположения в решетке железа, будем называть одиночными. Подсчет одиночных атомов позволяет оценить степень растворения пузырька в каскаде смещений. Отметим, что в ряде случаев мы также наблюдали расщепление одного пузырька на два пузырька меньшего размера. Однако такие случаи были крайне редки и в дальнейшем не учитывались.

Усреднение числа одиночных атомов гелия проводили по всем промоделированным каскадам для каждого пузырька и расстояния до ПВА. Затем, для каждого пузырька усредняли полученные оценки по расстояниям, используя отношение

$$\bar{n} = (n_1 \left(\frac{r_1 + r_2}{2}\right)^3 + n_2 \left(\frac{r_2 + r_3}{2}\right)^3 - \left(\frac{r_1 + r_2}{2}\right)^3) + n_3 (r_3^3 - \left(\frac{r_2 + r_3}{2}\right)^3) / r_3^3. \quad (6)$$

Здесь нижний индекс соответствует расстоянию между пузырьком и ПВА в порядке его возрастания, r_i и n_i – расстояние и соответствующее ему среднее число одиночных атомов гелия. Наибольшее расстояние (r_4) в усреднении не используется, поскольку для этого расстояния случаев образования одиночных атомов гелия не зафиксировано.

Полученные результаты по оценки доли атомов гелия покинувших пузырек в каскаде атомных смещений представлены на рис. 1. Причем наши результаты дополнены соответствующими оценками, полученными ранее Столлером [9]. Хорошо видно, что наши оценки хорошо согласуются с результатами из работы [9] для пузырьков, содержащих 20-40 атомов гелия. Следует отметить, что в работе [9] использовали другие потенциалы межчастичного взаимодействия. В частности для описания гелия в железе использовали многочастичное взаимодействие. Т.о., наблюдаемое хорошее согласие результатов имеет место несмотря на использование потенциалов разного типа. В тоже время наши оценки следует рассматривать и как важное дополнение ранее полученных результатов, поскольку мы впервые рассмотрели гелиевые пузырьки очень маленьких размеров (2-15 атомов He).

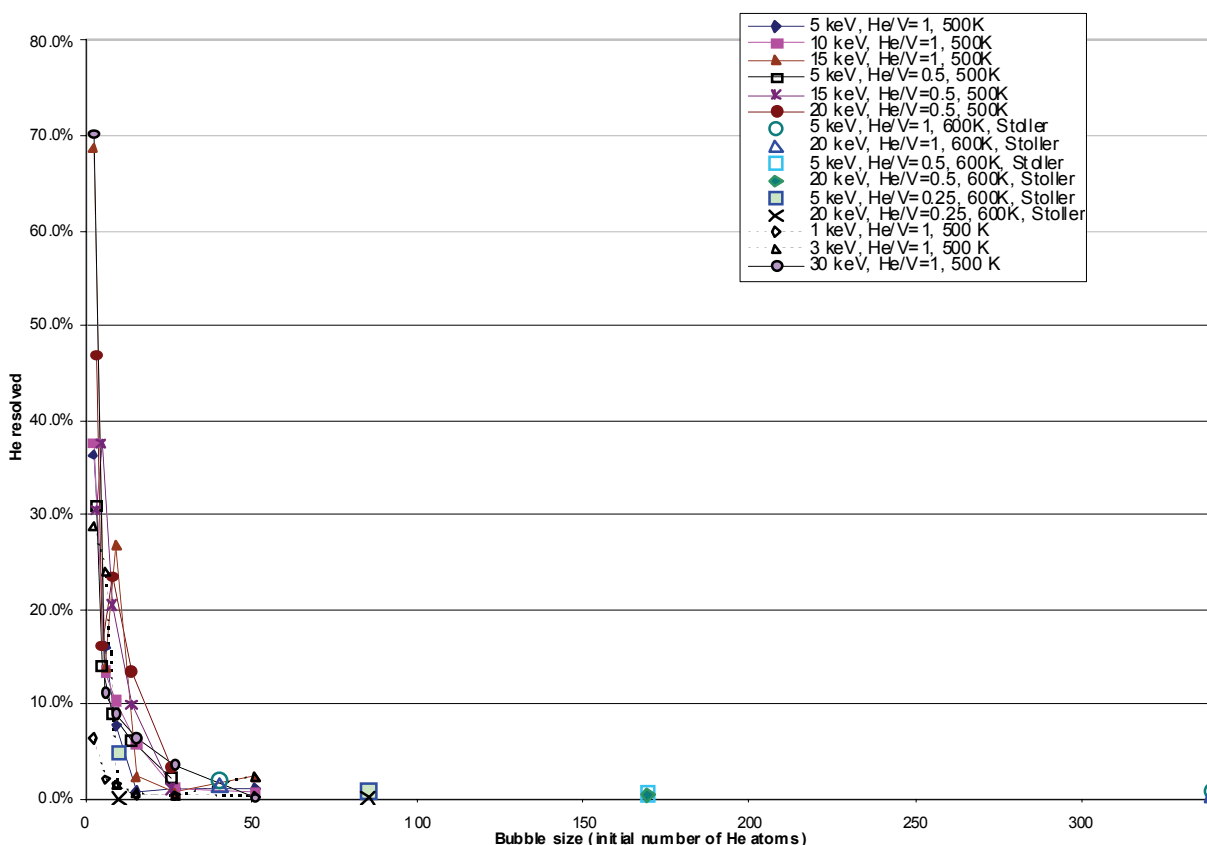


Рис. 1. Доли гелия, растворяющегося в каскаде атомных смещений, %

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключении сформулируем основные полученные результаты.

Путем молекулярно-динамического моделирования прохождения каскадов атомных смещений через гелиевые пузырьки в матрице ОЦК-железа получены качественные и количественные оценки изменения размеров и состава (отношения He/V) гелиевых пузырьков небольшого размера. Рассмотрены энергии каскада от 1 до 30 кэВ. В качестве пузырьков рассматривали заполненные гелием вакансионные кластеры сферической формы содержащий 9, 15, 27 или 51 вакансию, а также кластеры, состоящие из двух вакансий, расположенных друг от друга на расстоянии первой координационной сферы, и кластеры из 6-ти ближайших вакансий с центром масс в центре октаэдрической пустоты ОЦК решетки.

Показано, что начальное гелий-вакансионное отношение $He/V=1$ уменьшается после прохождения каскада до значения ~ 0.9 . В тоже время, для начального отношения $He/V=0.5$ наблюдается его небольшое возрастание до ~ 0.6 .

Не выявлено значимого влияния гелиевых пузырьков на параметры радиационного повреждения железа. Получены оценки доли атомов гелия, уходящих из пузырька в процессе каскадного перемешивания. Показано, что такие пузырьки склонны к частичному растворению в каскаде.

Полученные нами результаты следует рассматривать как дополнение полученных ранее оценок, которые целесообразно учитывать при построении моделей зарождения и роста гелиевых пузырьков под облучением в рамках многомасштабного подхода.

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки в рамках государственного задания на 2012-2014 гг. и при частичной поддержке РФФИ – проекты 12-08-97076 и 13-01-00945

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. E. Gaganidze, C. Petersen, E. Materna-Morris, C. Dethloff, O.J. Weiß, J. Aktaa, A. Povstyanko, A. Fedoseev, O. Makarov, V. Prokhorov, J. Nucl. Mater. 417 (2011) 93.
2. L. Malerba, A. Caro, J. Wallenius, J. Nucl. Mater. 382 (2008) 112.
3. M. Matijasevic, A. Almazouzi, J. Nucl. Mater. 377 (1) (2008) 147.
4. L.K. Mansur, A.F. Rowcliffe, R.K. Nanstad, S.J. Zinkle, W.R. Corwin, R.E. Stoller, J. Nucl. Mater. 329–333 (2004) 166.
5. M. Tikhonchev, V. Svetukhin, A. Kadochkin, E. Gaganidze, MD simulation of atomic displacement cascades in Fe–10 at.%Cr binary alloy, Journal of Nuclear Materials 395 (2009) p. 50–57.
6. M. Tikhonchev, V. Svetukhin, E. Gaganidze, MD simulation of atomic displacement cascades near chromium-rich clusters in FeCr alloy // Journal of Nuclear Materials, 442 (2013) S618–S623.
7. V. Svetukhin, P. Lvov, M. Tikhonchev, E. Gaganidze, N. Krestina. Modeling of chromium nanoclusters growth under neutron irradiation // Journal of Nuclear Materials, 442 (2013) S624–S627.
8. K. Morishita, B. D. Wirth, T. Diaz de la Rubia, A. Kimura. Effects of Helium on Radiation Damage Processes in Iron. Lawrence Livermore National Laboratory, Preprint UCRL-JC-144458, 2001. P.6.
9. R.E. Stoller, D.M. Stewart, An atomistic study of helium resolution in bcc iron // Journal of Nuclear Materials 417 (2011) 1106–1109.
10. R.E. Stoller, in: 15th International Conference on Fusion Reactor Materials. October 16th to 22nd, Charleston, SC, USA.
11. H. Trinkaus. The effect of cascade induced gas resolution on bubble formation in metals // Journal of Nuclear Materials 318 (2003) 234–240.
12. F. Gao, H.L. Heinisch, R.J. Kurtz. Diffusion of He interstitial and di-He cluster at grain boundaries in α -Fe // Journal of Nuclear Materials 367–370 (2007) 446–450.
13. L. Yang, X. T. Zu, Z. G. Wang, H. T. Yang, F. Gao, H. L. Heinisch, and R. J. Kurtz, Effects of interatomic potential on He bubble creation by cascades in α -iron // JOURNAL OF APPLIED PHYSICS 103, 063528 (2008).
14. P.H. Chen, X.C. Lai, K.Z. Liu, X.L. Wang, B. Bai, B.Y. Ao, Y. Long, Development of a pair potential for Fe–He by lattice inversion // Journal of Nuclear Materials 405 (2010) 156–159
15. J. Pu, L. Yang, F. Gao, H.L. Heinisch, R.J. Kurtz, X.T. Zu, Interaction of displacement cascade with helium bubbles in α -iron: Computer simulation // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 266 (2008) 3993–3999
16. G.J. Ackland, M.I. Mendeleev, D.J. Srolovitz, S.W. Han, A.V. Barashev, J. Phys. Condens. Matter. 16 (2004) S2629.
17. M.I. Mendeleev, S. Han, D.J. Srolovitz, G.J. Ackland, D.Y. Sun, M. Asta, Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron // Philos. Mag., V. 83, N. 35 (2003), pp. 3977–3994.
18. N. Juslin, K. Nordlund, Pair potential for Fe–He. J. of Nucl. Mater. 382 (2008) 143.
19. D.E. Beck, A new interatomic potential function for helium. Molecular Physics, 1968, Vol. 14, No. 4, 311.

**SIMULATION OF INTERACTION BETWEEN ATOMIC DISPLACEMENT CASCADES
AND SMALL HELIUM BUBBLES IN BCC IRON MATRIX**

© 2013 M.Yu. Tikhonchev, V.V. Svetukhin

Research Technological Institute named after S.P. Kapitsa of Ulyanovsk State University

A molecular dynamics simulation of atomic displacement cascades near helium bubbles of small size (up to 1 nm in diameter) in the matrix of the bcc iron was performed. Simulation is carried out for the PKA energies from 1 to 30 keV. The model is based on the N-body interactions for iron and simple pairwise He-He and He-Fe interactions. Qualitative and quantitative changes in the size and composition (the ratio of He / V) of helium bubbles were evaluated. It was show that such bubbles trend to partial dissolution under atomic displacement cascade.

Keywords: simulation , atomic displacements, helium bubbles, bcc iron matrix.

*Mikhail Tikhonchev, Candidate of Physics and Mathematics,
Head at the Non-Organic Materials Behaviour Modelling
Laboratory. E-mail: tikhonchev@sv.ulsu.ru
Viacheslav Svetukhin, Doctor Physics and Mathematics,
Professor, Director of Research Institute of Technology.
E-mail: slava@sv.uven.ru*