

氦泡在 bcc 钨中晶界处成核长大的分子动力学模拟*

周良付¹⁾ 张婧¹⁾ 何文豪¹⁾ 王栋²⁾ 苏雪¹⁾ 杨冬燕¹⁾ 李玉红^{1)†}

1) (兰州大学核科学与技术学院, 兰州 730000)

2) (清华大学材料科学与工程学院, 北京 100084)

(2019 年 7 月 13 日收到; 2019 年 12 月 9 日收到修改稿)

钨 (W) 是潜在的聚变堆面向等离子体材料. 聚变反应中产生的氦 (He) 不溶于金属 W, 并在其中易聚集形成 He 泡, 使 W 基体发生脆化, 从而导致 W 基体的性能发生退化. 在前人工作的基础上, 本文采用分子动力学研究了 He 泡在单晶 bcc-W 中以及 bcc-W 中 $\Sigma 3[211](110)$ 和 $\Sigma 9[110](411)$ 晶界处 He 泡形核长大初期的演化过程. 结果发现, 晶界处 He 泡的长大机制和单晶 W 中有所不同. 单晶 W 中 He 泡通过挤出位错环促进长大. 而 He 泡在 $\Sigma 3[211](110)$ 晶界处的长大机制为: 首先挤出并发射少量自间隙 W 原子, 而后挤出 $1/2 \langle 111 \rangle$ 位错线, 随后, 该位错线会沿晶界面上 $[111]$ 方向迁移出去; 在 $\Sigma 9[110](411)$ 晶界处, He 泡在我们的模拟时间尺度范围内没有观察到 W 自间隙原子的发射和位错的挤出.

关键词: 氦泡, 钨, 晶界, 分子动力学

PACS: 61.72.J-, 71.15.Pd

DOI: 10.7498/aps.69.20191069

1 引言

金属 W 具有高导热系数、高熔点、良好的抗物理溅射、不与氢反应、低氦滞留率等优点, 被认为是最有潜力的聚变堆面向等离子体材料 (plasma facing materials, PFMs)^[1,2]. 其中, 第一壁材料直接受到等离子体区释放的电磁辐射和粒子 (中子、氢的同位素粒子、阿尔法粒子) 辐照. 其中, He 是一种惰性气体元素不溶于 W, 易迁移, 易被缺陷 (如空位、晶界、位错) 捕获, 并在金属中聚集形成 He 泡. He 泡会导致 W 基体发生肿胀、表面粗糙化、以及沿晶脆性断裂等危害^[3-8]. 因此研究 He 泡的成核长大机制, 对设计出抑制 He 泡长大的第一壁材料具有重要意义^[9].

He 泡成核初期的直径较小, 一般在几个埃到几个纳米, 给采用实验方法研究其成核过程及生长机理带来了困难^[10,11]. 因此, 理论模拟成为研究 He 泡成核长大机理的有效直观的工具, 例如用分子动力学模拟研究 He 泡的成核生长过程^[12-16]. 近期 Xie 等^[17]采用分子动力学方法模拟研究了 He 泡在单晶钨中的生长机理, 结果表明 He 泡在成核长大的过程中会逐渐挤出 W 自间隙原子. 这些自间隙原子不断聚集在 He 泡表面形成 $1/2 \langle 111 \rangle$ 棱柱位错环, 当 He 泡压力达到阈值时, 位错环将沿 $[111]$ 方向发射出去; 当 He 泡的半径达到 1.5 nm 时还会出现位错环发射过程中的交滑移机制, 即 $1/2 \langle 111 \rangle$ 棱柱位错环将会通过螺型位错的交滑移机制聚集形成而不是 W 自间隙原子聚集形成. 同时, Liu 等^[18]采用分子动力学模拟研究了

* 国家自然科学基金 (批准号: 11775102) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: liyuhong@lzu.edu.cn

W 中 $\Sigma 5[100](310)$ 倾斜对称晶界处 He 泡的成核生长过程. 结果表明, 在 W 中 $\Sigma 5[100](310)$ 晶界处, 与 He 泡相关联的生长模式抑制了 He 原子向 He 泡的迁移, 从而抑制了 He 泡的生长.

另外, Yang 等^[19]采用分子动力学模拟研究 He 泡在 bcc-Fe 中的生长机制, 研究发现在 bcc-Fe 中 $\Sigma 3[110](112)$ 和 $\Sigma 73b[110](661)$ 倾斜对称晶界处 He 泡的成核长大机制各不相同. $\Sigma 3[110](112)$ 晶界处, 随着 He 泡逐渐成核长大, 会有 Fe 自间隙原子不断被挤出并附着在 He 泡表面按 [111] 方向排列, 随着 He 泡进一步长大这些 Fe 自间隙原子会形成一个 $1/2\langle 111 \rangle$ 棱柱位错环, 随后被发射出去. 相反, $\Sigma 73b$ 晶界处随着 He 原子的加入, He 泡不断地挤出 Fe 自间隙原子, 但这些 Fe 自间隙原子会沿晶界面富集排列, 而不形成位错环, 导致晶界处局部应力增大使晶界位错沿 $[-1-112]$ 方向迁移. 通过以上总结, 不同晶界处 He 泡的长大机制不同, He 泡的长大机制与基体材料微观结构的关联性还有待研究.

鉴于此, 我们通过逐个地将 He 原子加入到 bcc-W 中, 研究了 He 泡在单晶 W 中以及两个晶界 $\Sigma 3[211](110)$ 和 $\Sigma 9[110](411)$ 处的成核长大机制, 研究对控制 He 泡成核长大提供详细的理论参考与支撑. 应该指出的是, Zhao 等^[20]通过第一性原理研究了 He 原子在 bcc-W 中的溶解能以及结合能. 结果表明: He 在 bcc-W 中具有较高的溶解能, 为 6 eV 左右; He 与 He 在 bcc-W 中具有较高的结合能 (大于 1 eV). 因此, He 可以在 bcc-W 自发的聚集成核. 同时, 引起 He 泡成核的可能机制有两种, 一种是空位或空洞引起的 He 泡成核机制, 另一种是由于 He 原子的局部富集. 本工作研究的重点是后一种情况, 以了解 He 原子的聚集和 He 泡成核长大初期的演化机制.

2 模拟方法

本文采用分子动力学方法, 并选用美国能源部 Sandia 国家实验室设计开发的大尺度原子/分子模拟器 LAMMPS (the large-scale atomic/molecular massively parallel simulator) 进行模拟^[21]. 同时, 通过可视化软件 OVITO (open visualization tool) 对结果进行可视化^[22]. 对于原子的相互作用势, 分别选用了由 Ackland 和 Thetford^[23], Beck^[24] 以及

Juslin 和 Wirth^[25] 开发的势函数来描述 W-W, He-He 和 W-He 的相互作用. 并采用 ZBL 势来描述原子之间近程的相互作用^[26]. 这势函数的优点在于, 在绝热条件下计算得到的基本能量与第一性原理计算结果符合较好, 并能够准确地描述晶体中的各种缺陷构型. 在模拟 He 泡在单晶 W 中的成核长大时选用了体系为 $40a_0 \times 40a_0 \times 40a_0$ 含 128000 个原子的模拟盒子, 其中 a_0 是 bcc-W 的晶格常数. 在研究 He 泡在晶界 $\Sigma 3[211](110)$ 和 $\Sigma 9[411](110)$ 处成核长大时, 分别选用了体系为 $139.56 \text{ \AA} \times 107.43 \text{ \AA} \times 109.65 \text{ \AA}$ 含 103680 个原子和 $60.15 \text{ \AA} \times 104.45 \text{ \AA} \times 102.95 \text{ \AA}$ 含 108790 个原子的模拟盒子. 在模拟过程中, 首先通过分子静力学 (molecular statics, MS) 方法将模拟体系弛豫到平衡状态. 然后, 在温度为 300 K 以及零压状态的 NPT 系综下逐个连续地引入氦原子, 引入氦原子的速率采用 Xie 等^[17]文献中使用的速率, 即每一个 He 原子引入后体系会平衡 5 ps.

在分析过程中, 运用了 Wigner-Seitz 点缺陷分析方法分析 W 自间隙原子, 用 Dislocation analysis (DXA) 分析方法分析位错^[27]. 同时, 为了研究 He 泡在成核长大初期压强与半径随时间的演化趋势, 用 (1) 式计算 He 泡的压强, 用 (2) 式计算 He 泡的半径^[28,29]. (1) 式和 (2) 式中的 n 表示 He 泡中 He 原子个数, $\sigma_{\alpha\beta}$ 表示第 i 个 He 原子的局部应力分量, Ω_i 和 V 表示通过 Voronoi++ 程序^[30]求得的第 i 个 He 原子的 Voronoi 原胞体积以及 He 泡中所有 He 原子的 Voronoi 原胞体积之和.

$$P = \frac{1}{3V} \sum_i^n \Omega_i [\sigma_{11}(i) + \sigma_{22}(i) + \sigma_{33}(i)], \quad (1)$$

$$R = \sqrt[3]{V/(4\pi)}. \quad (2)$$

3 结果与讨论

3.1 He 泡在单晶 W 中及晶界处的成核长大演化过程

3.1.1 He 泡在单晶 W 中的成核长大

为了研究 He 泡在晶界处的成核长大, 首先研究了 He 泡在单晶 W 中的成核长大. 如图 1 所示, 当模拟时间为 0.072 ns 时, 单晶 W 模拟盒子中有 14 个 He 原子聚集形成 He 团簇并在其周围并挤

出 1 个 W 自间隙原子 (W-SIA)(图 1(a)). 随着 He 原子的继续加入, He 团簇周围有更多的 W 自间隙原子挤出, 当 He 原子的个数增加到 30 时, He 团簇周围有 5 个 W 自间隙原子聚集并沿 [111] 方向排列 (图 1(b)). 当模拟时间为 0.256 ns 时, He 团簇中有 51 个 He 原子, 氦团簇周围有 14 个 W 自间隙原子, 并且这些 W 自间隙原子聚集形成了 $1/2\langle 111\rangle$ 位错环 (图 1(c)). 随着模拟时间的增加, 该 $1/2\langle 111\rangle$ 位错环中 W 自间隙原子的个数增加到 15 个, 并沿 [111] 方向迁移了出去, 这就是氦泡在单晶钨中引起的 punching-loop 机制^[17] (图 1(d)).

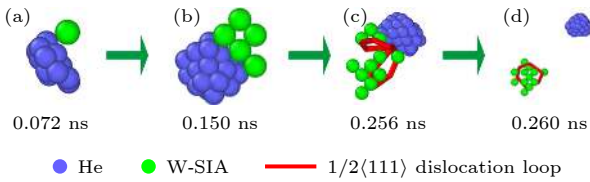


图 1 单晶 W 中氦团簇成核长大初期的位错环发射过程
Fig. 1. The punching-loop at the early stage of nucleation and growth of helium clusters in bulk W.

3.1.2 He 泡在 W 中 $\Sigma 3^{[211]}(110)$ 晶界处的成核长大

在 $\Sigma 3^{[211]}(110)$ 晶界附近两个晶格常数范围

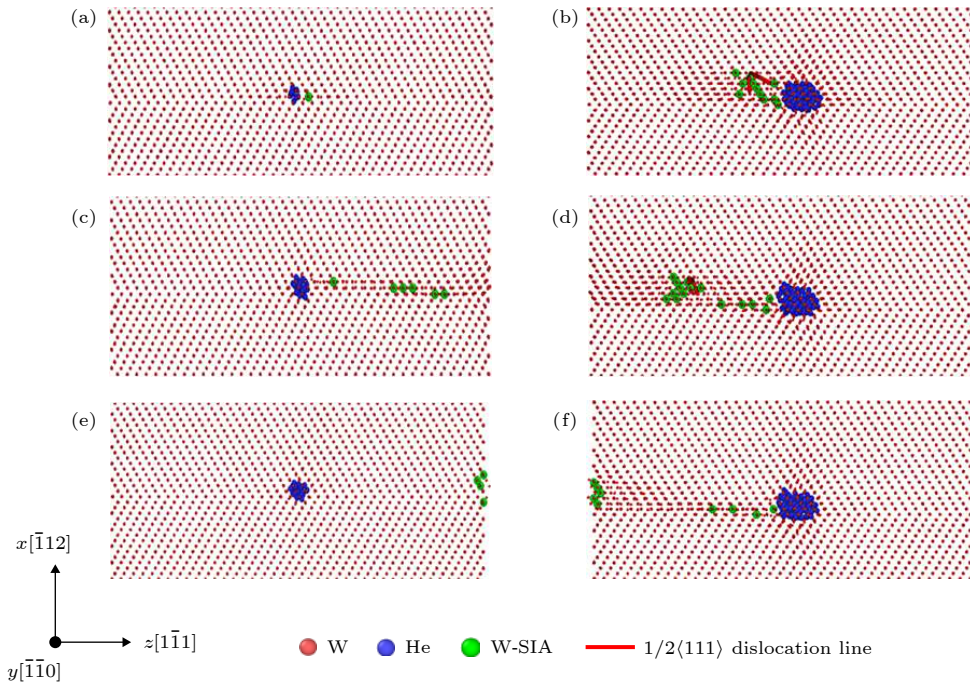


图 2 氦泡在 W 中 $\Sigma 3^{[211]}(110)$ 晶界处的成核长大过程 (a) 0.043 ns, 8 He, 1 SIA; (b) 0.120 ns, 24 He, 6 SIAs; (c) 0.125 ns, 24 He, 6 SIAs; (d) 0.466 ns, 93 He, 21 SIAs; (e) 0.469 ns, 94 He, 22 SIAs; (f) 0.470 ns, 94 He, 22 SIAs

Fig. 2. The nucleation and growth of helium clusters at grain boundary $\Sigma 3^{[211]}(110)$ in W: (a) 0.043 ns, 8 He, 1 SIA; (b) 0.120 ns, 24 He, 6 SIAs; (c) 0.125 ns, 24 He, 6 SIAs; (d) 0.466 ns, 93 He, 21 SIAs; (e) 0.469 ns, 94 He, 22 SIAs; (f) 0.470 ns, 94 He, 22 SIAs.

内逐个引入 He 原子, 如图 2 所示, 当 He 原子的个数逐渐增加到 8 个时, 在晶界处聚集的 He 原子团簇挤出了一个格点 W 原子, 随后挤出的 W 自间隙原子附着在 He 团簇周围 (图 2(a)). 当模拟时间为 0.120 ns 时, 晶界上有 24 个 He 原子聚集形成团簇, 同时 He 团簇周围挤出了 6 个 W 自间隙原子, 并且这些 W 自间隙原子沿 [111] 方向在晶界上迁移出去随后到达表面 (图 2(b)). 随着模拟时间的增加, 又有 W 自间隙原子在 He 团簇周围聚集, 随后这些 W 自间隙原子会形成首尾位于晶界面上的 $1/2\langle 111\rangle$ 位错线, 如图 2(d) 所示. 当模拟时间为 0.466 ns 时, 晶界上有 93 个 He 原子聚集成团簇, 同时, He 团簇周围的 21 个 W 自间隙原子已经形成了 $1/2\langle 111\rangle$ 位错线沿 [111] 方向迁移出去, 最后到达表面. 并且在 $1/2\langle 111\rangle$ 位错线迁移过程中, 其首尾一直被束缚在晶界面上, 如图 2(e) 和图 2(f) 所示.

3.1.3 He 泡在 W 中 $\Sigma 9^{[110]}(411)$ 晶界处的成核长大

图 3 为 He 泡在 $\Sigma 9^{[110]}(411)$ 晶界处的成核长大动力学演化过程, 图 3(a)—图 3(e) 截图均位于晶界面上. 如图 3(a), 当 $\Sigma 9^{[110]}(411)$ 晶界处有

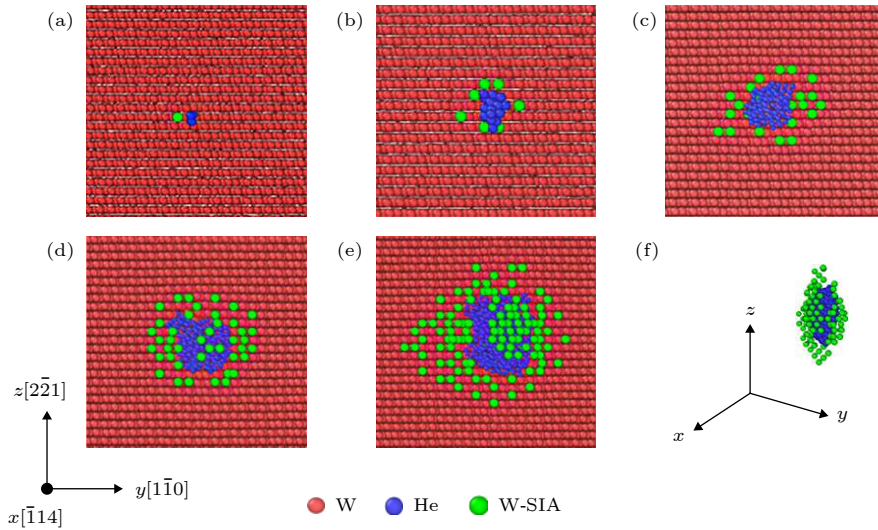


图 3 氦泡在 W 中 $\Sigma 9[110](411)$ 晶界处的成核长大过程 (a) 0.02 ns, 3 He, 1 SIA; (b) 0.1 ns, 19 He, 7 SIAs; (c) 0.5 ns, 99 He, 23 SIAs; (d) 1 ns, 199 He, 44 SIAs; (e) 2 ns, 399 He, 121 SIAs; (f) 2 ns

Fig. 3. The nucleation and growth of helium clusters at grain boundary $\Sigma 9[110](411)$ in W: (a) 0.02 ns, 3 He, 1 SIA; (b) 0.1 ns, 19 He, 7 SIAs; (c) 0.5 ns, 99 He, 23 SIAs; (d) 1 ns, 199 He, 44 SIAs; (e) 2 ns, 399 He, 121 SIAs; (f) 2 ns.

3 个 He 原子聚集形成团簇后可以挤出一个 W 间隙原子, 随着氦原子的加入个数逐渐增多, 会有更多的 W 间隙原子挤出到 He 团簇周围, 并且这些 W 间隙原子成包覆状聚集在 He 团簇周围, 如图 3(e) 和图 3(f) 所示, 在 2 ns 时由氦团簇长大挤出的 W 自间隙已经 He 团簇表面形成一层 W 自间隙原子包壳. 并且, 在我们的模拟时间尺度范围内没有观察到自 W 间隙原子的发射和位错的挤出.

3.2 W 自间隙原子在单晶 W 以及晶界处的迁移能垒

为了解释 3.1 中的现象, 我们用 Nudged Elastic Band(NEB) 方法计算了 W 自间隙原子在单晶 W 中以及晶界处的迁移能垒. 对与单晶 W 中以及 $\Sigma 3[211](110)$ 晶界处, 从本文 3.1.1 和 3.1.2 节可知, He 泡挤出的 W 自间隙原子以及位错是按 $[111]$ 方向迁移的. 因此, 本文对于这两个体系, 计算了 W 自间隙原子沿 $[111]$ 方向迁移的能垒曲线, 得出单晶 W 中 W 自间隙原子的迁移能垒为 5.8 meV, 该结果与第一性原理计算值 4 meV 符合较好^[31]. 图 5 为 W 中 $\Sigma 3[211](110)$ 对称倾斜晶界处, W 自间隙原子沿晶界面上 $[111]$ 方向 ($C_1[111]$) 和最邻近晶界面上 $[111]$ 方向 ($C_2[111]$) 迁移的过渡态曲线, 从而得出 W 自间隙原子沿 $C_1[111]$ 方向和 $C_2[111]$ 的迁移能垒分别为 13.26

和 2.82 meV.

而 $\Sigma 9[110](411)$ 晶界处, 在我们的模拟时间尺度范围内没有观测到 W 自间隙原子的迁移和位错的挤出 (见本文 3.1.3 节), 并且 W 自间隙原子在 $\Sigma 9[110](411)$ 晶界附近存在偏聚行为^[32]. 因此我们在晶界面上找出了两条 W 自间隙原子迁移能垒分别位次最小和最小的方向, 分别为 $[1\bar{1}0]$ 方向和 $[2\bar{2}1]$ 方向. 图 6 为 W 中 $\Sigma 9[110](411)$ 对称倾斜晶界处, W 自间隙原子沿晶界面上 $[1\bar{1}0]$ 方向 ($C[1\bar{1}0]$) 和 $[2\bar{2}1]$ 方向 ($C[2\bar{2}1]$) 迁移的能垒曲线. 可以得出 W 自间隙原子沿 $C[1\bar{1}0]$ 方向和 $C[2\bar{2}1]$ 的迁移能垒分别为 3.27 和 0.27 eV.

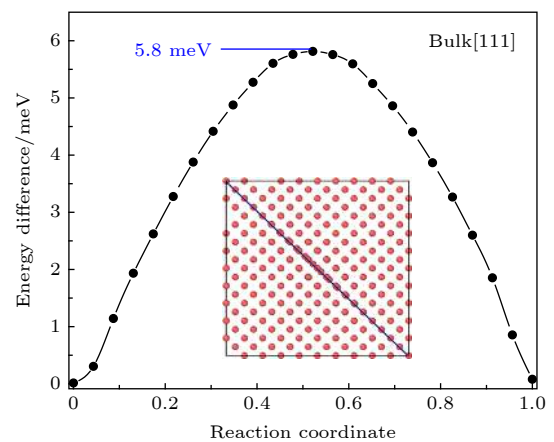


图 4 单晶 W 中自间隙原子的迁移能垒

Fig. 4. Calculation of the migration barrier for a W crowdion defect in bulk W.

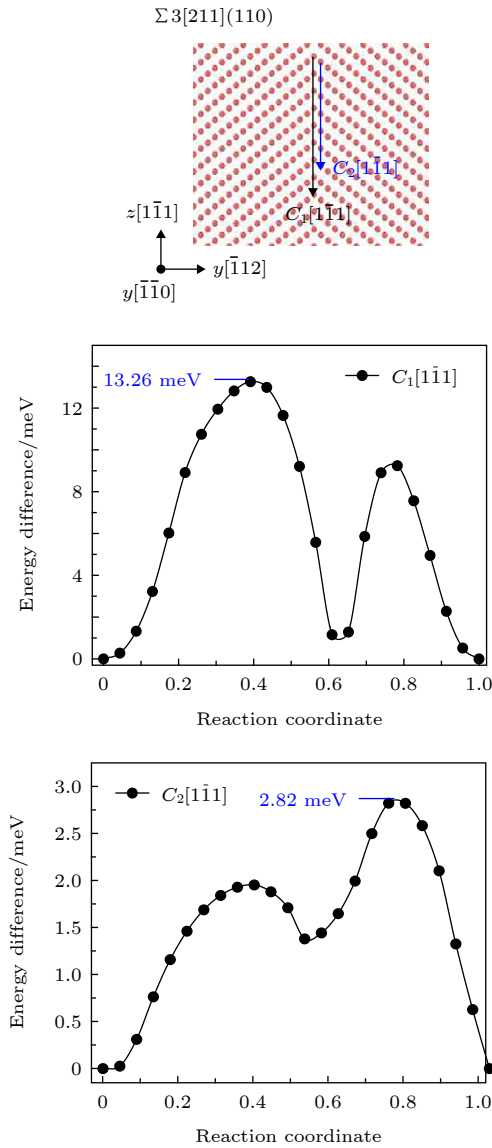


图 5 W 中 $\Sigma 3[211](110)$ 晶界处 W 自间隙原子的迁移能垒
 Fig. 5. Calculation of the migration barrier for a W crowdion defect at grain boundary $\Sigma 3[211](110)$ in W.

从上面的 W 自间隙原子在不同结构中的迁移能垒可以得出: 单晶 W 中和 $\Sigma 3[211](110)$ 晶界处 He 泡周围的 W 自间隙原子的迁移能垒只有几个到十几个毫电子伏特, 在热弛豫过程中只要 W 自间隙原子从 He 泡表面解离就很容易迁移出去; $\Sigma 9[110](411)$ 晶界处 W 自间隙原子的迁移能为零点几个到几个电子伏特, 即使热弛豫过程当中 W 自间隙原子从 He 泡表面解离也很难迁移出去. 因此, 我们在单晶 W 中和 $\Sigma 3[211](110)$ 晶界处观察到了 W 自间隙原子和位错的挤出与发射. 而在 $\Sigma 9[110](411)$ 晶界处 He 泡挤出的 W 自间隙原子则是在 He 泡表面形成一层包壳.

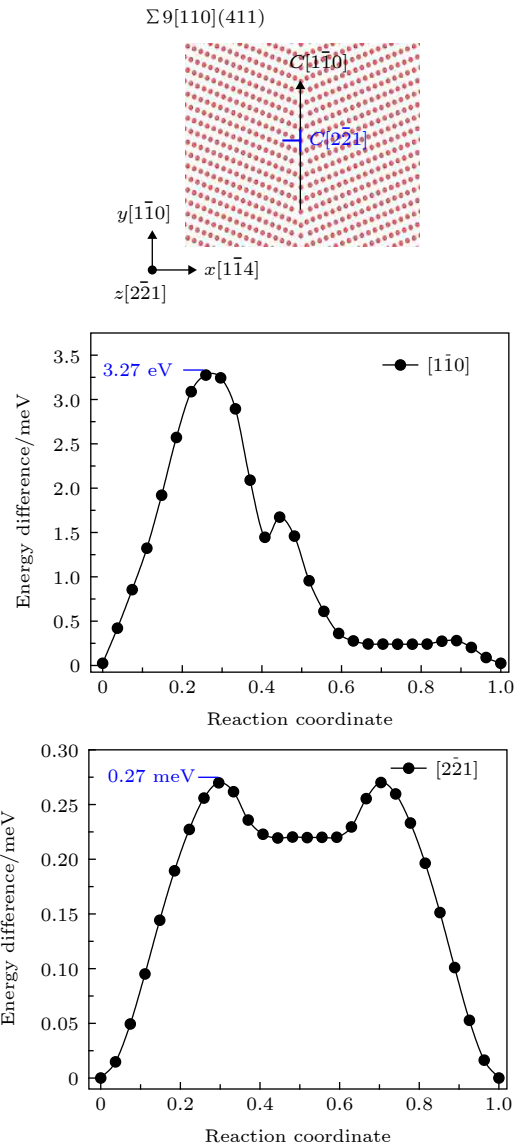


图 6 W 中 $\Sigma 9[110](411)$ 晶界处的自间隙原子的迁移能垒
 Fig. 6. Calculation of the migration barrier for a W crowdion defect at grain boundary $\Sigma 9[110](411)$ in W.

3.3 W 自间隙原子在单晶 W 以及晶界处氦泡的压强与半径随时间的演化

从图 7(a)—图 7 (c) W 自间隙原子在单晶 W 以及晶界处氦泡的压强与半径随时间的演化可以得出: He 泡在单晶 W 和 $\Sigma 3[211](110)$ 晶界处成核长大演化过程初期压强较高, 并随着 He 原子的不断加入而快速下降并趋于稳定; 而在 $\Sigma 9[110](411)$ 晶界处氦泡的压强在 He 原子引入初期就已经趋于稳定. 对于这种现象, 通过计算单晶 W 中和晶界处弗伦克尔缺陷对的形成能得到解释. 如表 1 所列, 在单晶 W 中和 $\Sigma 3[211](110)$ 晶界处弗伦克尔

缺陷对的形成能分别为 14.10 eV(与文献 [33] 结果 14.10 eV 一致) 和 12.73 eV, 而 $\Sigma 9[110](411)$ 晶界处弗伦克尔缺陷对的形成能为 3.84 eV. 因此, $\Sigma 9[110](411)$ 晶界处弗伦克尔缺陷形成能较低, 当氦原子的加入后较容易形成 W 自间隙原子, 近而

释放氦泡成核初期的压力.

同时, 不管是单晶 W 中还是 $\Sigma 3[211](110)$ 和 $\Sigma 9[110](411)$ 晶界处, 当氦泡的压强随时间趋于稳定后, 每当压强出现骤降, 氦泡的半径都会迅速增加, 从而在氦泡半径随时间演化的曲线上形成小台阶. 因此, 氦泡在 W 中可以通过间歇性释放压力来促进生长.

表 1 单晶 W 及晶界处弗伦克尔缺陷对的形成能
Table 1. Formation energy of frenkel defect pair in bulk W and at grain boundaries.

缺陷位置	弗伦克尔缺陷对的形成能/eV
单晶W中	14.10
$\Sigma 3[211](110)$ 晶界处	12.73
$\Sigma 9[110](411)$ 晶界处	3.84

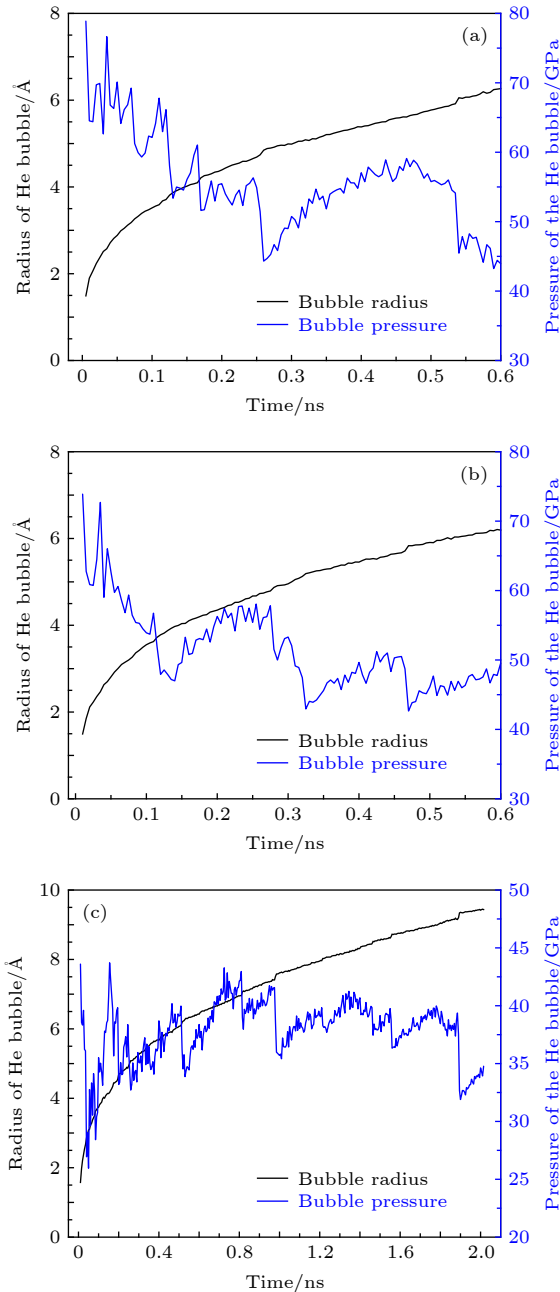


图 7 (a) 单晶 W 中氦泡的压强与半径随时间的变化; (b) $\Sigma 3[211](110)$ 晶界处氦泡的压强与半径随时间的变化; (c) $\Sigma 9[110](411)$ 晶界处氦泡的压强与半径随时间的变化

Fig. 7. (a) The radius and pressure of the He bubble as a function of simulation time in bulk W; (b) the radius and pressure of the He bubble as a function of simulation time at at grain boundary $\Sigma 3[211](110)$; (c) the radius and pressure of the He bubble as a function of simulation time at at grain boundary $\Sigma 9[110](411)$.

4 总结

本文采用分子动力学方法模拟了 W 中 $\Sigma 3[211](110)$ 和 $\Sigma 9[110](411)$ 晶界处氦泡初期的成核长大过程, 得出以下主要结论:

1) 晶界处氦泡的长大机制和单晶 W 中有所不同. 单晶 W 中氦泡通过挤出位错环促进长大. 而 $\Sigma 3[211](110)$ 晶界处氦泡通过先挤出并发射少量自间隙 W 原子, 而后挤出 $1/2(111)$ 位错线, 随后, 该位错线会沿晶界面上 $[111]$ 方向迁移出去; 在 $\Sigma 9[110](411)$ 晶界处氦泡在我们的模拟时间尺度范围没有观察到自间隙子和位错的发射;

2) 氦泡在单晶 W 和 $\Sigma 3[211](110)$ 晶界处成核长大演化过程初期压强较高, 随着氦原子的不断加入而快速下降并趋于稳定; 而在 $\Sigma 9[110](411)$ 晶界处, 氦泡的压强在其成核长大演化过程初期就已经趋于稳定, 这是由于 $\Sigma 9[110](411)$ 晶界处弗伦克尔缺陷形成能较低, 随氦原子的加入较容易形成 W 自间隙原子, 从而释放氦泡成核初期形成的压力;

3) 氦泡在 W 中可以通过间歇性释放压力来促进生长.

感谢中国科学院近代物理研究所先进核能材料研究室高宁研究员给出的意见和帮助.

参考文献

[1] Pintsuk G 2012 *Comprehensive Nuclear Materials* (Vol. 5) (Oxford: Elsevier Press) p551
[2] Hirai T, Escourbiac F, Carpentier-Chouchana S, Durocher A,

- Fedosov A, Ferrand L, Jokinen T, Komarov V, Merola M, Mitteau R, Pitts R A, Shu W, Sugihara M, Barabash V, Kuznetsov V, Riccardi B, Suzuki S 2014 *Phys. Scr. T* **159** 014006
- [3] Wei Q, Li N, Sun K, Wang L 2010 *Scr. Mater.* **63** 430
- [4] Hetherly J, Martinez E, Di Z, Nastasi M, Caro A 2012 *Scr. Mater.* **66** 17
- [5] Guo H Y, Xia M, Yan Q Z, Guo L P, Ge C C 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 077803 (in Chinese) [郭洪燕, 夏敏, 燕青芝, 郭立平, 陈济红, 葛昌纯 2016 物理学报 **65** 077803]
- [6] Wang J, Gao X, Gao N, Wang Z G, Cui M, Wei K, Yao C, Sun J, Li B, Zhu Y, Pang L, Li Y, Wang D, Xie E 2015 *J. Nucl. Mater.* **457** 182
- [7] Ding M S, Du J P, Wan L, Ogata S, Tian L, EvanMa, Han W Z, Li J, Shan Z W 2016 *Nano. Lett.* **16** 4118
- [8] Ma Y T, Liu J B, Han L, Tian L F, Wang X C, Meng X M, Xiao S Q, Wang B 2016 *Acta Phys. Sin.* **68** 040702 (in Chinese) [马玉田, 刘俊标, 韩立, 田利丰, 王学聪, 孟祥敏, 肖善曲, 王波 2016 物理学报 **68** 040702]
- [9] Wang X X, Zhang Y, Zhou H B, Wang J L 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 046103 (in Chinese) [王欣欣, 张颖, 周洪波, 王金龙 2014 物理学报 **63** 046103]
- [10] El-Atwani O, Gonderman S, Suslov S, Efe M, Temmerman G D, Morgan T, Bystrov K, Hattar K, Allain J P 2015 *Fusion Eng. Des.* **93** 9
- [11] Miyamoto M, Mikami S, Nagashima H, Iijima N, Nishijima D, Doerner R P, Yoshida N, Watanabe H, Ueda Y, Sagara A 2015 *J. Nucl. Mater.* **463** 333
- [12] Wang J, Niu L-L, Shu X, Zhang Y 2015 *Nucl. Fusion* **55** 092003
- [13] Kobayashi R, Hattori T, Tamura T, Ogata S 2015 *J. Nucl. Mater.* **463** 1071
- [14] Sandoval L, Perez D, Uberuaga B P, Voter A F 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 105502
- [15] Yang S T, Hu N W, Gou X Q, Wang C L, Zhu X L 2016 *RCS Advances* **64** 59875
- [16] Yang L, Deng H Q, Gao F, Heinisch H L, Kurtz R J, Hu S Y, Li Y L, Zu X T 2013 *Nucl. Instrum. Methods B* **303** 68
- [17] Xie H X, Gao N, Xu K, Lu G H, Yue T, Yin F X 2017 *Acta Mater.* **141** 10
- [18] Liu X Y, Uberuaga B P, Perez D, Voter A F 2018 *Mater. Res. Lett.* **9** 522
- [19] Yang L, Gao F, Kurtz R J, Zu X T, Peng S M, Long X G, Zhou X S 2015 *Acta Mater.* **97** 86
- [20] Zhao Q, Zhang Z, Li Y, Ouyang X 2017 *Sci. Technol. Nucl. Ins.* **2017** 1
- [21] Plimpton S 1995 *J. Comput. Phys.* **117** 1
- [22] Stukowski A 2010 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 015012
- [23] Ackland G J, Thetford R 1987 *Philos. Mag. A* **56** 15
- [24] Beck D E 1968 *Mol. Phys.* **14** 311
- [25] Juslin N, Wirth B D 2013 *J. Nucl. Mater.* **432** 61
- [26] Ziegler J F, Biersack J P, Littmark U 1985 *The Stopping and Range of Ions in Matter* (Vol. 1) (New York: Pergamon Press) p93
- [27] Stukowski A, Albe K 2010 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18** 085001
- [28] Guo S H, Zhu B E, Liu W C, Pan Z Y, Wang Y X 2009 *Nucl. Instrum. Methods B* **267** 3278
- [29] Yang L, Zu 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
- [30] Rycroft C H, Grest G S, Landry J W, Bazant M Z 2006 *Phys. Rev. E* **74** 021306
- [31] Chen L, Liu Y L, Zhou H B, Jin S, Zhang Y, Lu G H 2012 *Sci. Chin. Phys. Mech.* **55** 614
- [32] He W H, Gao X, Gao N, Wang J, Wang D, Cui M H, Pang L L, Wang Z G 2018 *Chin. Phys. Lett.* **35** 49
- [33] Banisalman M J, Oda T 2019 *Comput. Mater. Sci.* **158** 346

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

Zhou Liang-Fu¹⁾ Zhang Jing¹⁾ He Wen-Hao¹⁾ Wang Dong²⁾
Su Xue¹⁾ Yang Dong-Yang¹⁾ Li Yu-Hong^{1)†}

1) (*School of Nuclear Science and Technology, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China*)

2) (*School of Materials Science and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China*)

(Received 13 July 2019; revised manuscript received 9 December 2019)

Abstract

Tungsten (W) is a potential candidate for plasma facing materials (PFMs) of fusion reactor. The helium (He) produced in fusion reaction is insoluble and easy to gather and form to He bubbles in W, resulting in embrittlement and degradation of the performance of the W matrix. In this paper, based on molecular dynamics, the nucleation and growth of helium bubbles in the bulk and at $\Sigma 3[211](110)$ and $\Sigma 9[110](411)$ grain boundaries of W was studied. As a result, the growth mechanism of Helium bubbles at grain boundary of W was different from in bulk. Helium bubbles in bulk W grow up by extruding dislocation rings. The growth mechanism of helium bubbles at $\Sigma 3[211](110)$ grain boundary was as follows: Firstly, a small amount of W interstitial atoms were extruded and emitted. And then the $1/2\langle 111 \rangle$ dislocation line was extruded. Finally, the $1/2\langle 111 \rangle$ dislocation line would migrate along the direction of $[111]$ of the grain boundary interface. Moreover, the emission of W interstitial atoms and dislocation extrusion of the helium bubble were not observed in our simulated time scale at the $\Sigma 9[110](411)$ grain boundary. Then we used the NEB method to calculate the diffusion barrier of self-gap atoms in the bulk and at $\Sigma 3[211](110)$ and $\Sigma 9[110](411)$ grain boundaries of W, which explained the simulation results. The migration energy barrier of W self-gap atoms in the bulk and at $\Sigma 3[211](110)$ grain boundary was only a few to a few millielectron volts. So as long as W self-gap atoms dissociated from the surface of the He bubble in the thermal relaxation process, they can be easily migrated out. However, The migration energy of the W self-gap atom at the $\Sigma 9[110](411)$ grain boundary can be from a few tenths to a few electron volts. Even during the thermal relaxation process, the W self-gap atoms dissociated from the surface of the He bubble. It was difficult for the W self-gap atoms migrated out. Finally, the correlation between He bubble size and stress released was given. Either in bulk or at $\Sigma 3[211](110)$ and $\Sigma 9[110](411)$ grain boundaries of W, after the pressure of the helium bubble becomes stable with time, the radius of the helium bubble would increase rapidly whenever the pressure dropped sharply. So there was a small step on the curve of the evolution of the radius of the helium bubble with time. Thus, helium bubbles in W could promote growth by releasing pressure intermittently.

Keywords: Helium bubbles, Tungsten, grain boundary, molecular dynamics

PACS: 61.72.J-, 71.15.Pd

DOI: 10.7498/aps.69.20191069

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11775102).

† Corresponding author. E-mail: liyuhong@lzu.edu.cn