

Simulation Study on Cascade in Irradiated Pure α -Zr at Different Irradiation Conditions from Molecular Dynamics

Rongjian Pan¹, Lu Wu¹, Jiantao Qin¹, Tianyuan Xin¹, Wen He¹, Changqing Teng¹,
Bang Wen¹, Xiaoyong Wu¹, Yurii Ovcharenko²

¹The First Sub-Institute, Nuclear Power Institute of China, Chengdu Sichuan

²Institute of Applied Physics, National Academy of Science of Ukraine, Sumy
Email: haoyunjiuzhe2008@126.com

Received: May 5th, 2020; accepted: May 19th, 2020; published: May 26th, 2020

Abstract

The formation and development of cascade in α -Zr crystals at sample temperatures $T = 600$ K, energy of 2, 6 and 10 keV and initially driving directions $\langle 0001 \rangle$ and $\langle 01\bar{1}0 \rangle$ of primary knock atoms (PKA) are investigated by molecular dynamics. The simulation results show that the cascades volume for the initial direction $\langle 0001 \rangle$ of PKA motion is greater than that of the initial direction $\langle 01\bar{1}0 \rangle$ at same all other parameters as temperature is 600 K. The size of cascade is increased with the increasing PKA energy and crystal temperature. However, it is regardless of initial direction of primary knock-on atom (PKA).

Keywords

α -Zr, Irradiation, Cascades, Molecular Dynamics

不同辐照条件下 α -Zr辐照级联的分子动力学模拟研究

潘荣剑¹, 吴璐¹, 覃检涛¹, 信天缘¹, 何文¹, 滕常青¹, 温榜¹, 伍晓勇¹, Yurii Ovcharenko²

¹中国核动力研究设计院第一研究所, 四川 成都

²乌克兰国家科学院应用物理研究所, 苏梅
Email: haoyunjiuzhe2008@126.com

收稿日期: 2020年5月5日; 录用日期: 2020年5月19日; 发布日期: 2020年5月26日

文章引用: 潘荣剑, 吴璐, 覃检涛, 信天缘, 何文, 滕常青, 温榜, 伍晓勇, Yurii Ovcharenko. 不同辐照条件下 α -Zr辐照级联的分子动力学模拟研究[J]. 材料科学, 2020, 10(5): 374-379. DOI: 10.12677/ms.2020.105047

摘要

本文采用分子动力学模拟方法分别在辐照温度为600 K, 三种不同PKA能量2 keV、6 keV和10 keV及两个不同PKA入射方向为 $\langle 0001 \rangle$ 和 $\langle 01\bar{1}0 \rangle$ 方向的条件下开展了 α -Zr晶体内级联形成和发展的研究。模拟结果表明: 在保持辐照温度为600 K不变的条件下, PKA初始入射方向为 $\langle 0001 \rangle$ 的级联体积均是大于 $\langle 01\bar{1}0 \rangle$ 方向的级联体积。级联尺寸随着PKA的晶体温度、能量的增加而增加, 但与PKA的初始入射方向无关。

关键词

α -Zr, 辐照, 级联, 分子动力学

Copyright © 2020 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

由于锆合金在反应堆运行温度下具有较好的辐照阻抗、机械强度和较小的热中子吸收截面, 因此其被广泛作为压水堆的燃料装配体和包壳管[1] [2] [3] [4]。金属及其合金的辐照损伤模拟日益重要, 不仅仅是为了保证当前压水堆的安全, 而且是为了设计第四代反应堆和聚变堆。尽管最近几十年做了大量相关的研究, 然而至今没有获得长时间的中子辐照模型。这种模拟的困难之一在于级联损伤产生的复杂性, 它涉及由初级碰撞原子(PKA)产生的多个离位级联。缺陷团簇包含由级联损伤产生的空位团簇和自间隙原子团簇。这些团簇为更大的缺陷提供了形核, 导致了尺寸和力学性能的变化。在非常短的时间内(典型地, 10^{-10} s 以内)产生离位级联, 这不可能通过实验来分析。辐照过程中级联的形成和发展是非常重要的过程。然而目前深入地理解辐照过程中级联的形成和发展是不充分的。分子动力学方法是一种重要的研究材料性质和缺陷演变的计算模拟方法[5] [6] [7] [8]。

本文采用分子动力学方法对纯 α -Zr 晶体辐照过程中级联产生和发展进行了研究。通过分子动力学计算模拟方法, 研究了晶体辐照温度为 600 K (堆内服役温度)和不同的 PKA 入射方向和能量等辐照条件对纯 α -Zr 晶体辐照过程中级联产生和发展的影响, 探究堆内服役温度条件下, 辐照级联的演化行为规律。

2. 计算方法

计算采用的是基于统计物理学的分子动力学方法——LAMMPS 程序包[9]。采用描述原子间相互作用的嵌入原子势(EAM) [10], 周期性边界条件和 GPU 对包含 180,000 个原子纯 α -Zr 晶体进行了所有的计算。模拟条件: 辐照温度为 600 K、PKA 能量为 2 keV、6 keV 和 10 keV 及 PKA 方向选为 $\langle 0001 \rangle$ 和 $\langle 01\bar{1}0 \rangle$ 方向。开始模拟时对建立的模型晶体在 600 K 温度下进行保温 0.2 ps, 模拟的时间步长取 1 fs。通过原子能量差和通用相邻分析(CNA)来判断原子是属于级联中的原子还是 Zr 基体 α 相内的原子[11] [12] [13]: 如果两个原子间的距离没有超过截断半径 r_{cut} , 则这两个最近邻原子假设是束缚的, 并且 r_{cut} 的值位于原子位置径向分布函数的两个峰的间断中[14]。

3. 结果与讨论

本文以辐照温度为 600 K、PKA 能量为 6 keV 以及 PKA 入射方向为 $\langle 0001 \rangle$ 的条件下纯 α -Zr 在辐照级联中缺陷形成的起始阶段为研究代表，着重探究了级联形成前 (0001) 面和 $(10\bar{1}0)$ 面内晶体内原子的位置、碰撞原子的轨道以及出现热峰后碰撞原子的轨道，如图 1 和图 2 所示。

通过分子动力学模拟，发现基于 PKA 方向、级联的温度和 PKA 能量曲线在体积和几何形成总体来说是不同的。在 PKA 运动方向为 $\langle 0001 \rangle$ 方向的情况下，不同方向级联的线性尺寸是近似相同。与此同时，如果 PKA 运动方向为 $\langle 12\bar{3}0 \rangle$ ，则级联几何方向变长。在每个级联区域内，能够观察到主要来源于它们平衡位置的移动和耗尽区域(富空位)的出现。通过 CNA 方法对原子回位的分析得知，甚至在较小的 PKA 能量下能够观察到结构无序。当级联中原子温度大于熔化温度将导致化学键的破坏。从而导致级联中非平衡非晶态相形成的原子混合。通过碰撞原子轨道的分析得出，在 PKA 能量为 6 keV 和 10 keV 下，级联中的一些原子可以通过大约几个原子间距的平均自由路线值来表征。因此，一个特别类型的隧道产生，从而导致亚级联的形成。

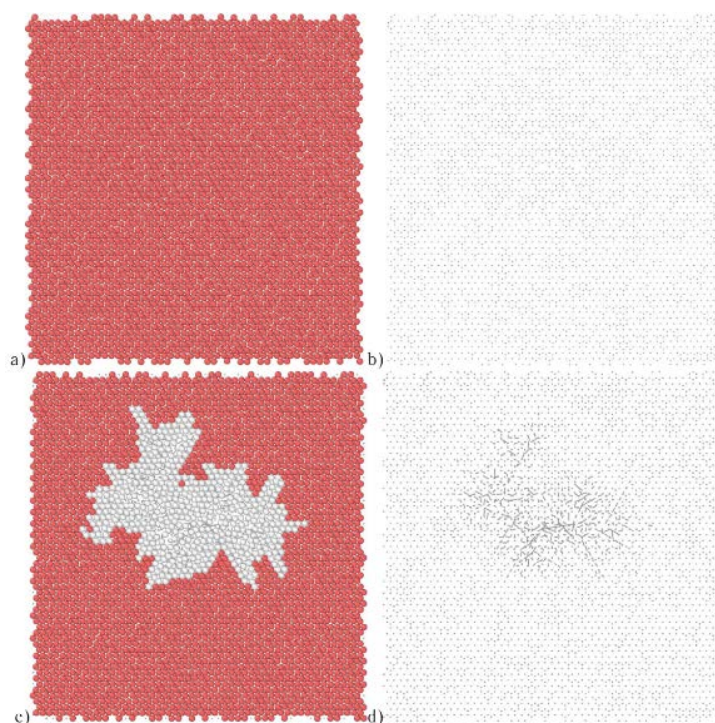


Figure 1. Initial stages of cascades formation in α -Zr ($E_{PKA} = 6 \text{ keV}$) at $T = 600 \text{ K}$ and PKA direction $\langle 0001 \rangle$: (a) locations of atoms inside crystal in a plane (0001) before cascades formation; (b) trajectories of knocked atoms in the plane (0001) before cascades formation; (c) locations of atoms inside crystal in a plane (0001) after 0.4 ps of PKA motion; (d) trajectories of knocked atoms in the plane (0001) after 0.4 ps of PKA motion

图 1. $T = 600 \text{ K}$ 和 PKA 能量为 6 keV, PKA 入射方向为 $\langle 0001 \rangle$ 方向, α -Zr 中级联形成的起始阶段: (a)级联形成前, (0001) 面晶体内部的原子位置; (b) 级联形成前, 碰撞原子的轨道; (c) PKA 运动 0.4 ps 后晶体中原子的位置; (d) PKA 运动 0.4 ps 后 (0001) 面内碰撞原子的轨道

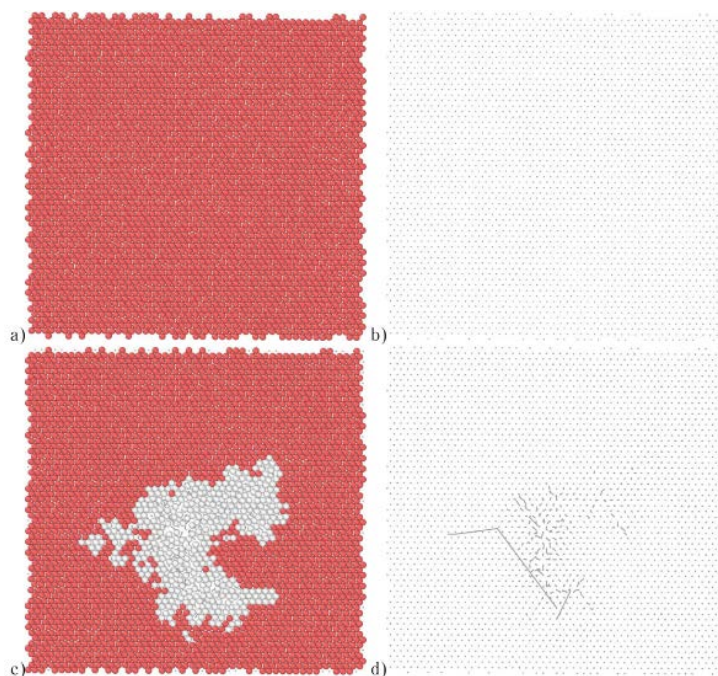


Figure 2. Initial stages of cascades formation in α -Zr ($E_{PKA} = 6$ keV) at $T = 600$ K and PKA direction $\langle 0001 \rangle$: (a) locations of atoms inside crystal in a plane $(10\bar{1}0)$ before cascades formation; (b) trajectories of knocked atoms in the plane $(10\bar{1}0)$ before cascades formation; (c) locations of atoms inside crystal in a plane $(10\bar{1}0)$ after 0.4 ps of PKA motion; (d) trajectories of knocked atoms in the plane $(10\bar{1}0)$ after 0.4 ps of PKA motion

图 2. $T = 600$ K, PKA 能量为 6 keV 和 PKA 入射方向为 $\langle 0001 \rangle$ 方向, α -Zr 中级联形成的开始阶段; (a) 级联形成前, 一个 $(10\bar{1}0)$ 面内晶体内原子的位置; (b) 级联形成前, 一个 $(10\bar{1}0)$ 面内碰撞原子的轨道; (c) PKA 运动 0.4 ps 后, 一个 $(10\bar{1}0)$ 面内晶体内原子的位置; (d) PKA 运动 0.4 ps 后, 一个 $(10\bar{1}0)$ 面内碰撞原子的轨道

辐照温度为 600 K, 不同 PKA 能量值和运动方向, α -Zr 的级联中最大级联体积、级联表面和级联内原子数, 见表 1。根据计算得到的数据分析, 发现在辐照温度保持 600 K 的条件下, PKA 入射方向为 $\langle 01\bar{1}0 \rangle$ 的级联尺寸比 PKA 入射方向为 $\langle 0001 \rangle$ 的级联尺寸更大。并且发现级联尺寸是随着辐照温度的增加而增加, 而与 PKA 入射方向无关。这意味着高温下受到辐照的样品的辐照损失将增加。

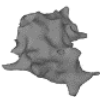
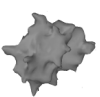
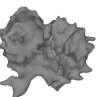
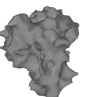
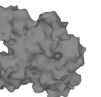

4. 结论

1) 辐照温度为 600 K, PKA 初始入射方向为 $\langle 0001 \rangle$ 的级联体积均大于 $\langle 01\bar{1}0 \rangle$ 方向的级联体积。在大多数相同的 PKA 初始入射方向和 PKA 能量情况下, 当晶体辐照温度增加时, 级联的尺寸(体积、原子数)相对地增加。

2) 级联尺寸是随着辐照温度的增加而增加, 而与 PKA 入射方向无关。这意味着高温下受到辐照的样品的辐照损失将增加。

Table 1. Maximal values of cascade volume $V_c^{(\max)}$, its surface $S_c^{(\max)}$, and number of atoms in cascade $N_c^{(\max)}$ in α -Zr sample at different values of PKA energy, direction of PKA motion and irradiation temperature of 600 K at the corresponding thermal spikes

表 1. 辐照温度为 600 K, 不同 PKA 能量和入射方向在相对应的热峰下, α -Zr 的级联中最大级联体积 $V_c^{(\max)}$, 级联表面 $S_c^{(\max)}$ 和原子数 $N_c^{(\max)}$

$E_{\text{PKA}}, \text{keV}$		2		4		6	
$T = 600 \text{ K}$	方向	$\langle 0001 \rangle$	$\langle 01\bar{1}0 \rangle$	$\langle 0001 \rangle$	$\langle 01\bar{1}0 \rangle$	$\langle 0001 \rangle$	$\langle 01\bar{1}0 \rangle$
	$V_c^{(\max)}, \text{nm}^3$	9785.52	9025.15	28725.32	27856.68	45632.45	44366.39
	$S_c^{(\max)}, \text{nm}^2$	2035.74	1989.58	4235.67	3950.58	5468.36	5295.34
	$N_c^{(\max)}$	4569	4236	15,462	16,563	19,586	18,967
	快照						

致 谢

非常感谢本文参与的所有作者详细的讨论, 使得本论文能够顺利地完稿。

基金项目

本次工作得到了以下项目的资金支持: 中国核工业集团有限公司领创科研项目(JJXM-JTLC-2020-02); 国防基础科研计划资助项目(JCKY2017201C016)。

参考文献

- [1] Montgomery, R., *et al.* (2017) Use of Multiscale Zirconium Alloy Deformation Models in Nuclear Fuel Behavior Analysis. *Journal of Computational Physics*, **328**, 278-300. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2016.09.051>
- [2] Cinbiz, M.N., *et al.* (2016) The Influence of Stress State on the Reorientation of Hydrides in a Zirconium Alloy. *Journal of Nuclear Materials*, **477**, 157-164. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2016.05.013>
- [3] Szewc, W., *et al.* (2016) Onset of Plasticity in Zirconium in Relation with Hydrides Precipitation. *Acta Materialia*, **114**, 126-135. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.05.025>
- [4] Pan, R.J., *et al.* (2017) Effects of Alloying Elements (Sn, Fe, Cr, Nb) on Mechanical Properties of Zirconium: Generalized Stacking-Fault Energies from First-Principles Calculations. *Computer Condensed Matter*, **10**, 22-24. <https://doi.org/10.1016/j.cocom.2017.01.001>
- [5] Tikhonchev, M., *et al.* (2013) MD Simulation of Atomic Displacement Cascades near Chromium-Rich Clusters in FeCr Alloy. *Journal Nuclear Materials*, **442**, S618. <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2012.11.058>
- [6] Dolgusheva, E.B., *et al.* (2016) Study of Peculiarities of the Thermal Expansion of Zirconium Thin Films by Molecular-Dynamics Simulation. *Computational Materials Science*, **111**, 231-238. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2015.09.034>
- [7] Liu, Y.Y., *et al.* (2011) Molecular Dynamics Simulation of Thermodynamic Properties for Pb-Au Alloys. *Rare Metal Materials and Engineering*, **40**, 0018-0021. [https://doi.org/10.1016/S1875-5372\(11\)60011-8](https://doi.org/10.1016/S1875-5372(11)60011-8)
- [8] Zhang, X.L., *et al.* (2017) Strain Effect Analysis on Thermal Conductivity of Ge Thin Films. *Rare Metal Materials and Engineering*, **46**, 370-374. [https://doi.org/10.1016/S1875-5372\(17\)30096-6](https://doi.org/10.1016/S1875-5372(17)30096-6)
- [9] Plimpton, S. (1995) Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*, **117**, 1-19. <https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>
- [10] Mendeleev, M.I., *et al.* (2007) Development of an Interatomic Potential for the Simulation of Phase Transformations in Zirconium. *Philosophical Magazine Letters*, **87**, 349-359. <https://doi.org/10.1080/09500830701191393>
- [11] Honeycutt, J.D., *et al.* (1987) Molecular-Dynamics Study of Melting and Freezing of Small Lennard-Jones Clusters. *The Journal of Physical Chemistry*, **91**, 4950-4963. <https://doi.org/10.1021/j100303a014>

-
- [12] Faken, D., *et al.* (1994) Systematic Analysis of Local Atomic Structure Combined with 3D Computer Graphics. *Computational Materials Science*, **2**, 279-286. [https://doi.org/10.1016/0927-0256\(94\)90109-0](https://doi.org/10.1016/0927-0256(94)90109-0)
- [13] Stukowski, A. (2012) Structure Identification Methods for Atomistic Simulations of Crystalline Materials. *Modelling Simulation Materials Science and Engineering*, **20**, Article ID: 045021. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/20/4/045021>
- [14] Li, J.H., *et al.* (2008) Interatomic Potentials of the Binary Transition Metal Systems and Some Application in Materials Physics. *Physics Reports*, **455**, 1-134. <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2007.09.004>