《中子辐照诱导钨再结晶的模拟研究》*的补充材料

张国帅 尹超† 王兆繁 陈泽 毛世峰 叶民友†

(中国科学技术大学核科学技术学院，合肥 230026)

1. 团簇动力学主方程[1]

$$\frac{\mathrm{d}C_{\mathrm{I}}}{\mathrm{d}t}=G_{\mathrm{I}}+2\alpha_2^-C_{\mathrm{I}_2}+\sum_{n=3}^{N_{\mathrm{I}}}\alpha_n^-C_{\mathrm{I}_n}+\beta_3^-C_{\mathrm{I}_3}+\left(k_{\mathrm{I}_2+\mathrm{V}}^++k_{\mathrm{V}_1+\mathrm{I}_2}^+\right)C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}_2}+k_{\mathrm{I+V}}^+C_{\mathrm{V}}^{\mathrm{eq}}C_{\mathrm{I}}^{\mathrm{eq}}$$
$$-2\alpha_1^+C_{\mathrm{I}}^2-\left(\alpha_2^++\beta_1^+\right)C_{\mathrm{I}}C_{\mathrm{I}_2}-\sum_{n=3}^{N_{\mathrm{I}}-1}\alpha_n^+C_{\mathrm{I}}C_{\mathrm{I}_n}-k_{\mathrm{I+V}}^+C_{\mathrm{I}}C_{\mathrm{V}}-\sum_{n=2}^{N_{\mathrm{V}}}k_{\mathrm{V}_n+\mathrm{I}}^+C_{\mathrm{V}_n}C_{\mathrm{I}} \quad \text{(A1)}$$
$$-k_{\mathrm{I}_1-\mathrm{V}}^-C_{\mathrm{I}}-k_{\mathrm{D+I}}^+C_{\mathrm{I}}-k_{\mathrm{S+I}}^+C_{\mathrm{I}},$$

$$\frac{\mathrm{d}C_{\mathrm{I}_2}}{\mathrm{d}t}=G_{\mathrm{I}_2}+\alpha_1^+C_{\mathrm{I}}^2+k_{\mathrm{I}_3+\mathrm{V}}^+C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}_3}+\alpha_3^-C_{\mathrm{I}_3}+\sum_{n=3}^{N_{\mathrm{I}}}\beta_n^-C_{\mathrm{I}_n}+\beta_4^-C_{\mathrm{I}_4}+k_{\mathrm{I-V}}^-C_{\mathrm{I}}$$
$$-\alpha_2^+C_{\mathrm{I}}C_{\mathrm{I}_2}-\sum_{n=1}^{N_{\mathrm{I}}}\beta_n^+C_{\mathrm{I}_2}C_{\mathrm{I}_n}-\beta_2^+C_{\mathrm{I}_2}^2-k_{\mathrm{I}_2+\mathrm{V}}^+C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}_2}-\sum_{n=1}^{N_{\mathrm{V}}}k_{\mathrm{V}_n+\mathrm{I}_2}^+C_{\mathrm{V}_n}C_{\mathrm{I}_2} \quad \text{(A2)}$$
$$-\alpha_2^-C_{\mathrm{I}_2}-k_{\mathrm{I}_2-\mathrm{V}}^-C_{\mathrm{I}_2}-k_{\mathrm{D+I}_2}^+C_{\mathrm{I}_2}-k_{\mathrm{S+I}_2}^+C_{\mathrm{I}_2},$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}C_{\mathrm{I}_n}}{\mathrm{d}t}\right|_{3\le n\le N_{\mathrm{I}}}=G_{\mathrm{I}_n}+\alpha_{n-1}^+C_{\mathrm{I}}C_{\mathrm{I}_{n-1}}+\beta_{n-2}^+C_{\mathrm{I}_2}C_{\mathrm{I}_{n-2}}+k_{\mathrm{I}_{n+1}+\mathrm{V}}^+C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}_{n+1}}+\alpha_{n+1}^-C_{\mathrm{I}_{n+1}}$$
$$+\beta_{n+2}^-C_{\mathrm{I}_{n+2}}+k_{\mathrm{I}_{n-1}-\mathrm{V}}^-C_{\mathrm{I}_{n-1}}-\alpha_n^+C_{\mathrm{I}}C_{\mathrm{I}_n}-\beta_n^+C_{\mathrm{I}_2}C_{\mathrm{I}_n}-k_{\mathrm{I}_n+\mathrm{V}}^+C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}_n} \quad \text{(A3)}$$
$$-\alpha_n^-C_{\mathrm{I}_n}-\beta_n^-C_{\mathrm{I}_n}-k_{\mathrm{I}_n-\mathrm{V}}^-C_{\mathrm{I}_n},$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}C_{x_i^{\mathrm{I}}}}{\mathrm{d}t}\right|_{N_{\mathrm{I}}+1\le i\le M_{\mathrm{I}}}=G_{x_i^{\mathrm{I}}}+\frac{1}{x_{i+1}^{\mathrm{I}}-x_{i-1}^{\mathrm{I}}}\Bigg[-\left(F_{x_{i+1}^{\mathrm{I}}}C_{x_{i+1}^{\mathrm{I}}}-F_{x_{i-1}^{\mathrm{I}}}C_{x_{i-1}^{\mathrm{I}}}\right)$$
$$+\left(\frac{D_{x_{i+1}^{\mathrm{I}}}C_{x_{i+1}^{\mathrm{I}}}-D_{x_i^{\mathrm{I}}}C_{x_i^{\mathrm{I}}}}{x_{i+1}^{\mathrm{I}}-x_i^{\mathrm{I}}}-\frac{D_{x_i^{\mathrm{I}}}C_{x_i^{\mathrm{I}}}-D_{x_{i-1}^{\mathrm{I}}}C_{x_{i-1}^{\mathrm{I}}}}{x_i^{\mathrm{I}}-x_{i-1}^{\mathrm{I}}}\right)\Bigg], \quad \text{(A4)}$$

$$\frac{\mathrm{d}C_{\mathrm{V}}}{\mathrm{d}t}=G_{\mathrm{V}}+k_{\mathrm{V}_2+\mathrm{I}}^+C_{\mathrm{V}_2}C_{\mathrm{I}}+k_{\mathrm{V}_3+\mathrm{I}_2}^+C_{\mathrm{V}_3}C_{\mathrm{I}_2}+\sum_{n=2}^{N_{\mathrm{V}}}\gamma_n^-C_{\mathrm{V}_n}+\gamma_2^-C_{\mathrm{V}_2}+\sum_{n=1}^{N_{\mathrm{I}}}k_{\mathrm{I}_n-\mathrm{V}}^-C_{\mathrm{I}_n}$$
$$+k_{\mathrm{I+V}}^+C_{\mathrm{V}}^{\mathrm{eq}}C_{\mathrm{I}}^{\mathrm{eq}}-\gamma_1^+C_{\mathrm{V}}^2-\sum_{n=1}^{N_{\mathrm{V}}}\gamma_n^+C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{V}_n}-k_{\mathrm{I+V}}^+C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}}-\sum_{n=2}^{N_{\mathrm{I}}}k_{\mathrm{I}_n+\mathrm{V}}^+C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}_n} \quad \text{(A5)}$$
$$-k_{\mathrm{V}_1+\mathrm{I}_2}^+C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}_2}-k_{\mathrm{D+V}}^+C_{\mathrm{V}}-k_{\mathrm{S+V}}^+C_{\mathrm{V}},$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}C_{\mathrm{V}_n}}{\mathrm{d}t}\right|_{2\le n\le N_\mathrm{V}} = G_{\mathrm{V}_n} + \gamma_{n-1}^{+} C_\mathrm{V} C_{\mathrm{V}_{n-1}} + k_{\mathrm{V}_{n+1}-\mathrm{I}}^{+} C_{\mathrm{V}_{n+1}} C_\mathrm{I} + k_{\mathrm{V}_{n+2}+\mathrm{I}_2}^{+} C_{\mathrm{V}_{n+2}} C_{\mathrm{I}_2} + \gamma_{n+1}^{-} C_{\mathrm{V}_{n+1}} - \gamma_n^{+} C_\mathrm{V} C_{\mathrm{V}_n} - k_{\mathrm{V}_n+\mathrm{I}}^{+} C_{\mathrm{V}_n} C_\mathrm{I} - k_{\mathrm{V}_n+\mathrm{I}_2}^{+} C_{\mathrm{V}_n} C_{\mathrm{I}_2} - \gamma_n^{-} C_{\mathrm{V}_n}, \tag{A6}$$

$$\left.\frac{\mathrm{d}C_{x_i^\mathrm{V}}}{\mathrm{d}t}\right|_{N_\mathrm{V}+1\le i\le M_\mathrm{V}} = G_{x_i^\mathrm{I}} + \frac{1}{x_{i+1}^\mathrm{V} - x_{i-1}^\mathrm{V}} \left[-\left(F_{x_{i+1}^\mathrm{V}} C_{x_{i+1}^\mathrm{V}} - F_{x_{i-1}^\mathrm{V}} C_{x_{i-1}^\mathrm{V}} \right) + \left(\frac{D_{x_{i+1}^\mathrm{V}} C_{x_{i+1}^\mathrm{V}} - D_{x_i^\mathrm{V}} C_{x_i^\mathrm{V}}}{x_{i+1}^\mathrm{V} - x_i^\mathrm{V}} - \frac{D_{x_i^\mathrm{V}} C_{x_i^\mathrm{V}} - D_{x_{i-1}^\mathrm{V}} C_{x_{i-1}^\mathrm{V}}}{x_i^\mathrm{V} - x_{i-1}^\mathrm{V}} \right) \right]. \tag{A7}$$

2. 结合能及位错环捕获偏置因子表达式[1]

缺陷与可移动缺陷反应的结合能（使用毛细管近似）:

$$E_{\mathrm{I}_n}^\mathrm{f} = E_{\mathrm{I}_{n-1}}^\mathrm{f} + E_\mathrm{I}^\mathrm{f} - E_{\mathrm{I}_n-\mathrm{I}}^\mathrm{b}, \tag{A8}$$

$$E_{\mathrm{I}_n-\mathrm{I}}^\mathrm{b} = E_\mathrm{I}^\mathrm{f} + \frac{E_{\mathrm{I}_2}^\mathrm{b} - E_\mathrm{I}^\mathrm{f}}{2^{2/3}-1}\left[n^{2/3} - (n-1)^{2/3} \right], \tag{A9}$$

$$E_{\mathrm{I}_n-\mathrm{I}_2}^\mathrm{b} = 2E_\mathrm{I}^\mathrm{f} - E_{\mathrm{I}_2}^\mathrm{b} + \frac{E_{\mathrm{I}_2}^\mathrm{b} - E_\mathrm{I}^\mathrm{f}}{2^{2/3}-1}\left[(n+1)^{2/3} - (n-1)^{2/3} \right], \tag{A10}$$

$$E_{\mathrm{I}_n-\mathrm{V}}^\mathrm{b} = E_\mathrm{V}^\mathrm{f} + \frac{E_\mathrm{I}^\mathrm{f} - E_{\mathrm{I}_2}^\mathrm{b}}{2^{2/3}-1}\left[n^{2/3} - (n-1)^{2/3} \right], \tag{A11}$$

$$E_{\mathrm{V}_n-\mathrm{V}}^\mathrm{b} = E_\mathrm{V}^\mathrm{f} + \frac{E_{\mathrm{V}_2}^\mathrm{b} - E_\mathrm{V}^\mathrm{f}}{2^{2/3}-1}\left[n^{2/3} - (n-1)^{2/3} \right]. \tag{A12}$$

间隙位错环捕获偏置因子:

$$Z_{\mathrm{I}_n}^\mathrm{I} = Z_\mathrm{D}^\mathrm{I} \max\left[\frac{2\pi}{\ln\left(4r_{\mathrm{I}_n}/b\right)}, 1 \right], \tag{A13}$$

$$Z_{\mathrm{I}_n}^{\mathrm{I}_2} = Z_\mathrm{D}^\mathrm{I} \max\left[\frac{2\pi}{\ln\left(4r_{\mathrm{I}_n}/b\right)}, 1 \right], \tag{A14}$$

$$Z_{\mathrm{I}_n}^\mathrm{V} = Z_\mathrm{D}^\mathrm{V} \max\left[\frac{2\pi}{\ln\left(4r_{\mathrm{I}_n}/b\right)}, 1 \right]. \tag{A15}$$

表 A1 本研究模型使用的纯钨参数
Table A1. Tungsten parameters used in this research model.

参数	单位	数值	描述	参考文献
a	nm	0.317	晶格常数	[3]
b	nm	0.274	伯格斯矢量大小	[2]
G	GPa	161	纯钨剪切模量	[4]
r_{IV}	nm	0.465	复合半径	[2]
$E_{\mathrm{I}}^{\mathrm{f}}$	eV	9.466	间隙原子形成能	[2]
$E_{\mathrm{V}}^{\mathrm{f}}$	eV	3.20	空位形成能	[5]
$E_{\mathrm{I}}^{\mathrm{m}}$	eV	0.013	间隙原子迁移能	[7]
$E_{\mathrm{I}}^{\mathrm{m}}$	eV	0.024	双间隙原子迁移能	[7]
$E_{\mathrm{V}}^{\mathrm{m}}$	eV	1.66	空位迁移能	[7]
$E_{\mathrm{I2}}^{\mathrm{b}}$	eV	2.12	SIA-SIA 结合能	[2]
$E_{\mathrm{V2}}^{\mathrm{b}}$	eV	0.6559	Vac-Vac 结合能	[2]
D_{I}^{0}	m^2/s	8.77×10^{-8}	间隙原子扩散前置系数	[7]
D_{I2}^{0}	m^2/s	7.02×10^{-8}	双间隙原子扩散前置系数	[7]
D_{V}^{0}	m^2/s	1.77×10^{-6}	空位扩散前置系数	[7]
$Z_{\mathrm{D}}^{\mathrm{I}}$	—	1.20	位错捕获间隙原子偏置因子	[2]
$Z_{\mathrm{D}}^{\mathrm{I2}}$	—	1.20	位错捕获双间隙原子偏置因子	[1]
$Z_{\mathrm{D}}^{\mathrm{V}}$	—	1.00	位错捕获空位偏置因子	[2]
$\bar{\gamma}$	$eV/Å^2$	0.235	空洞平均表面能密度	[8]
E_{111}	eV/Å	0.827	位错环平均线能量前对数因子	[8]
ρ_{W}	g/m^3	1.935×10^7	纯钨密度	—
N_{A}	mol^{-1}	6.02×10^{23}	阿伏伽德罗常数	—
M_{W}	g/mol	183.85	纯钨摩尔质量	—

参考文献

[1] Mannheim A, van Dommelen J A W, Geers M G D 2018 *Mech. Mater.* **123** 43

[2] Li Y G, Zhou W H, Ning R H, Huang L F, Zeng Z, Ju X 2012 *Commun. Comput. Phys.* **11** 1547

[3] Setyawan W, Nandipati G, Roche K J, Heinisch H L, Wirth B D, Kurtz R J 2015 *J. Nucl. Mater.* **462** 329

[4] Hu X, Koyanagi T, Fukuda M, Kumar N, Snead L L, Wirth B D, Katoh Y 2016 *J. Nucl. Mater.* **480** 235

[5] Becquart C S, Domain C, Sarkar U, DeBacker A, Hou M 2010 *J. Nucl. Mater.* **403** 75

[6] Kong X S, Wu X, You Y W, Liu C S, Fang Q F, Chen J L, Luo G N, Wang Z 2014 *Acta Mater.* **66** 172

[7] Faney T 2013 *Ph. D. Dissertation* (California: University of California, Berkeley) pp24－40

[8] Ma P W, Mason D R, Dudarev S L 2020 *Phys. Rev. Mater.* **4** 103609

