《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]

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

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}C_{\mathrm{I}_2}}{\mathrm{d}t}=&G_{\mathrm{I}_2}+\alpha_1^+C_{\mathrm{I}}^2+k^+_{\mathrm{I}_3+\mathrm{V}}C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}_3}+\alpha_3^-C_{\mathrm{I}_3}+\sum_{n=3}^{N_{\mathrm{I}}}\beta_n^-C_{\mathrm{I}_n}+\beta_4^-C_{\mathrm{I}_4}+k^-_{\mathrm{I}-\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}}\\&-\alpha_2^+C_{\mathrm{I}}C_{\mathrm{I}_2}-\sum_{n=1}^{N_{\mathrm{I}}}\beta_n^+C_{\mathrm{I}_2}C_{\mathrm{I}_n}-\beta_2^+C_{\mathrm{I}_2}^2-k^+_{\mathrm{I}_2+\mathrm{V}}C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}_2}-\sum_{n=1}^{N_{\mathrm{V}}}k^+_{\mathrm{V}_n+\mathrm{I}_2}C_{\mathrm{V}_n}C_{\mathrm{I}_2}\\&-\alpha_2^-C_{\mathrm{I}_2}-k^-_{\mathrm{I}_2-\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}_2}-k^+_{\mathrm{D}+\mathrm{I}_2}C_{\mathrm{I}_2}-k^+_{\mathrm{S}+\mathrm{I}_2}C_{\mathrm{I}_2},\end{aligned}\tag{A2}$$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}C_{\mathrm{I}_n}}{\mathrm{d}t}_{3\le n\le N_{\mathrm{I}}}=&G_{\mathrm{I}_n}+\alpha^+_{n-1}C_{\mathrm{I}}C_{\mathrm{I}_{n-1}}+\beta^+_{n-2}C_{\mathrm{I}_2}C_{\mathrm{I}_{n-2}}+k^+_{\mathrm{I}_{n+1}+\mathrm{V}}C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}_{n+1}}+\alpha^-_{n+1}C_{\mathrm{I}_{n+1}}\\&+\beta^-_{n+2}C_{\mathrm{I}_{n+2}}+k^-_{\mathrm{I}_{n-1}-\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}_{n-1}}-\alpha_n^+C_{\mathrm{I}}C_{\mathrm{I}_n}-\beta_n^+C_{\mathrm{I}_2}C_{\mathrm{I}_n}-k^+_{\mathrm{I}_n+\mathrm{V}}C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}_n}\\&-\alpha_n^-C_{\mathrm{I}_n}-\beta_n^-C_{\mathrm{I}_n}-k^-_{\mathrm{I}_n-\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}_n},\end{aligned}\tag{A3}$$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}C_{x_i^{\mathrm{I}}}}{\mathrm{d}t}_{N_{\mathrm{I}}+1\le i\le M_{\mathrm{I}}}=&G_{x_i^{\mathrm{I}}}+\frac{1}{x^{\mathrm{I}}_{i+1}-x^{\mathrm{I}}_{i-1}}\left[-\left(F_{x^{\mathrm{I}}_{i+1}}C_{x^{\mathrm{I}}_{i+1}}-F_{x^{\mathrm{I}}_{i-1}}C_{x^{\mathrm{I}}_{i-1}}\right)\right.\\&\left.+\left(\frac{D_{x^{\mathrm{I}}_{i+1}}C_{x^{\mathrm{I}}_{i+1}}-D_{x_i^{\mathrm{I}}}C_{x_i^{\mathrm{I}}}}{x^{\mathrm{I}}_{i+1}-x^{\mathrm{I}}_i}-\frac{D_{x_i^{\mathrm{I}}}C_{x_i^{\mathrm{I}}}-D_{x^{\mathrm{I}}_{i-1}}C_{x^{\mathrm{I}}_{i-1}}}{x^{\mathrm{I}}_i-x^{\mathrm{I}}_{i-1}}\right)\right],\end{aligned}\tag{A4}$$

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}C_{\mathrm{V}}}{\mathrm{d}t}=&G_{\mathrm{V}}+k^+_{\mathrm{V}_2+\mathrm{I}}C_{\mathrm{V}_2}C_{\mathrm{I}}+k^+_{\mathrm{V}_3+\mathrm{I}_2}C_{\mathrm{V}_3}C_{\mathrm{I}_2}+\sum_{n=2}^{N_{\mathrm{V}}}\gamma_n^-C_{\mathrm{V}_n}+\gamma_2^-C_{\mathrm{V}_2}+\sum_{n=1}^{N_{\mathrm{V}}}k^-_{\mathrm{I}_n-\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}_n}\\&+k^+_{\mathrm{I}+\mathrm{V}}C_{\mathrm{V}}^{\mathrm{eq}}C_{\mathrm{I}}^{\mathrm{eq}}-\gamma_1^+C_{\mathrm{V}}^2-\sum_{n=1}^{N_{\mathrm{V}}}\gamma_n^+C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{V}_n}-k^+_{\mathrm{I}+\mathrm{V}}C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}}-\sum_{n=2}^{N_{\mathrm{I}}}k^+_{\mathrm{I}_n+\mathrm{V}}C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}_n}\\&-k^+_{\mathrm{V}_1+\mathrm{I}_2}C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{I}_2}-k^+_{\mathrm{D}+\mathrm{V}}C_{\mathrm{V}}-k^+_{\mathrm{S}+\mathrm{V}}C_{\mathrm{V}},\end{aligned}\tag{A5}$$

$$\begin{aligned}\left.\frac{\mathrm{d}C_{\mathrm{V}_n}}{\mathrm{d}t}\right|_{2\le n\le N_{\mathrm{V}}} &= G_{\mathrm{V}_n}+\gamma^{+}_{n-1}C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{V}_{n-1}}+k^{+}_{\mathrm{V}_{n+1}-\mathrm{I}}C_{\mathrm{V}_{n+1}}C_{\mathrm{I}}+k^{+}_{\mathrm{V}_{n+2}+\mathrm{I}_2}C_{\mathrm{V}_{n+2}}C_{\mathrm{I}_2}\\ &\quad+\gamma^{-}_{n+1}C_{\mathrm{V}_{n+1}}-\gamma^{+}_{n}C_{\mathrm{V}}C_{\mathrm{V}_n}-k^{+}_{\mathrm{V}_n+\mathrm{I}}C_{\mathrm{V}_n}C_{\mathrm{I}}-k^{+}_{\mathrm{V}_n+\mathrm{I}_2}C_{\mathrm{V}_n}C_{\mathrm{I}_2}-\gamma^{-}_{n}C_{\mathrm{V}_n},\end{aligned} \tag{A6}$$

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

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）：

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

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

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

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

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

间隙位错环捕获偏置因子：

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

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

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

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}	$\mathrm{m^2/s}$	8.77×10^{-8}	间隙原子扩散前置系数	[7]
D_{I2}^{0}	$\mathrm{m^2/s}$	7.02×10^{-8}	双间隙原子扩散前置系数	[7]
D_{V}^{0}	$\mathrm{m^2/s}$	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]
$\bar{\gamma}$	$\mathrm{eV/Å^2}$	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}	$\mathrm{g/m^3}$	1.935×10^{7}	纯钨密度	—
N_{A}	$\mathrm{mol^{-1}}$	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

