

DOI:https://doi.org/10.12442/j.issn.1002-185X.20260159

位移级联对钼铼单晶固溶体合金力学性能影响的分子动力学模拟研究

王晓童¹, 董怡斌², 李唯一³, 李青宇¹, 朱明冬¹, 董元元¹, 颜达鹏¹, 高宁²

(1 中国核动力研究设计院, 四川 成都 610213)

(2 山东大学前沿交叉科学青岛研究院, 山东 青岛 266237)

(3 火箭军工程大学, 陕西 西安 710025)

摘要: 钼铼合金因其高熔点、优异的高温力学性能和抗辐照特性, 被认为是先进核反应堆燃料包壳和堆芯结构材料的重要候选材料。本工作采用分子动力学方法, 通过与纯 Mo 单晶结果对比, 系统研究了位移级联对不同 Re 含量 (5% 和 14%) 的 Mo-Re 单晶固溶体合金力学性能的影响规律。研究表明, Re 含量的增多会使 Mo-Re 单晶固溶体合金在拉伸应力下更多的滑移系统启动, 以有效提高其塑性; 位移级联则显著降低了 Mo-Re 单晶固溶体合金的拉伸强度和塑性, 其底层的物理机制源于级联引入的缺陷诱发了局部的应力集中和能量变化, 导致滑移系统启动的临界应力下降, 加速材料屈服并降低单晶固溶体合金的均匀延伸率。本工作的研究结果揭示了位移级联对 Mo-Re 单晶固溶体合金拉伸力学性能的影响规律及其原子机制, 对先进核反应堆材料的设计与选材具有科学参考价值。

关键词: 钼铼合金, 单晶固溶体, 位移级联, 应力-应变, 分子动力学

中图分类号: TG146.4+12

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2017)0?-0???-0?

难熔金属钼不仅具有优异的高温力学性能、良好的导热导电性能以及出色的耐腐蚀性能, 而且其热膨胀系数低、硬度高, 因此被认为在电子、宇航、能源等领域有着广阔的应用前景[1-2]。然而, 纯金属钼本身存在室温脆性、加工困难和焊接性能差等问题, 对其应用产生了影响。已有研究表明, 通过向钼中加入铼元素, 可以形成所谓的“铼效应”[3], 能够显著改善钼的室温塑性和加工性能, 降低脆韧转变温度, 并提升材料的焊接性能和抗蠕变性能。这些优势使得钼铼合金成为第四代高温核裂变反应堆、聚变堆等先进核反应堆重要的候选材料, 尤其是在空间核电源中有广泛的应用前景[4-9]。

然而, 钼铼合金在核设施中的应用也面临着一些挑战, 比如在辐照条件下可能产生的脆化、肿胀和析出相等问题[10]。研究者对钼铼合金已进行了大量的实验研究, 如 Busby 等人[11]对 Mo-41Re 和 Mo-47.5Re 合金进行了中子辐照实验, 并测试了辐照后的拉伸性能, 研究发现辐照后材料的屈服强度显著提高, 但塑性和韧性明显下降, 表现出辐照硬化与脆化特征, 而且断口形貌分析表明脆性断裂模式占主导地位; 此外, 该研究还指出嬗变效应和辐照诱发元素偏析可能导致 σ 相等析出相的析出, 最终引发辐照诱发脆化。相比之下, Filacchioni 等人[12]发现在低 Re 含量 (如 Mo-5Re) 的合金在高温

辐照后仍能保持一定程度的塑性变形能力, 表现出更好的辐照韧性。Cui 等人[13]采用原位辐照实验技术, 首次系统揭示了 Mo-5Re 合金中位错环挤出 (loop punching) 的起源与发展阶段, 并定量确定了临界气泡的尺寸窗口。在掺杂溶质调控策略方面, Cui 等人[14]还通过原位透射电镜对比研究了 Ti、Zr、Nb 掺杂 Mo-5Re 合金中位错环与氢气泡的差异化演化规律, 发现 Nb 对两者的抑制作用均最为显著。总而言之, 针对钼铼合金的抗辐照问题, 研究者已在损伤演化规律、成分效应及掺杂改性策略方面取得了重要进展, 为该材料的耐辐照设计提供了实验依据。

随着计算材料学的发展, 分子动力学方法在钼铼合金辐照损伤研究中的应用日益广泛。2024 年, Wang 等人[15]发表了钼铼合金位移级联的分子动力学研究成果。该研究采用 EAM 势函数描述 Mo-Re 原子间相互作用, 系统模拟了不同 PKA 能量下的级联碰撞过程, 研究发现在热峰 (thermal spike) 阶段, 钼铼合金产生的弗兰克尔对缺陷数目多于纯 Mo; 但在级联结束时, 钼铼合金的存活缺陷反而少于纯 Mo。该研究揭示了 Re 原子在级联过程中促进了间隙原子和空位的复合湮灭, 从而降低了最终的缺陷留存, 这一结论为理解钼铼合金优异抗辐照性能的原子机制提供了直接证据。2025 年, Wang

收到初稿日期:

基金项目: 中国核动力研究设计院科技创新团队“揭榜挂帅”项目 (项目号 KJCX2S5S-05-FWHT-GKJT-20234308)

作者简介: 王晓童, 女, 博士生, 工程师, 中国核动力研究设计院, 四川 成都 610213, 电话: 028-85908491, E-mail: wangxiaotong@npic.ac.cn; 董怡斌, 男, 博士, 博士后, 山东大学前沿交叉科学青岛研究院, 山东 青岛 266237, 电话: 0532-58630258, E-mail: yibindong@sdu.edu.cn。

等人[16]发表了关于 Re 偏析对钼铼合金辐照损伤行为影响的研究,该工作聚焦于 Re 的固溶和偏析效应对缺陷形成与演化的定量影响,使用 30 keV 的初级碰撞原子 (Primary Knock-on Atom, PKA) 能量进行级联模拟。研究结果表明局部 Re 偏析区域能够有效捕获自间隙原子,阻碍弗兰克尔对的复合,并促进缺陷聚集、位错增殖和钉扎,从而在一定程度上增强辐照损伤效应;此外,级联本身会进一步加剧 Re 的偏析,形成正反馈机制,显著放大损伤效应。特别地,该研究指出均匀化热处理对于调控钼铼合金的抗辐照性能至关重要,这一发现对工程实践具有重要指导意义。

综上所述,尽管国内外学者对钼铼合金的辐照损伤问题已开展了大量实验和模拟研究,但研究主要聚焦于位移级联初期的缺陷生成与演化,而辐照缺陷对韧性、拉伸强度等宏观服役力学性能影响的系统性分子动力学研究相对薄弱;位移级联引入的缺陷如何具体改变材料的应力-应变响应、屈服行为和断裂模式,尚缺乏原子级别的直接模拟证据。针对上述不足,本工作以 Mo-Re 单晶固溶体合金为研究对象,采用分子动力学方法并对比单晶 Mo 的计算模拟结果,首先计算其平衡态下的拉伸性能,建立性能参考数据;继而进行不同 PKA 能量下的位移级联模拟,获得级联后的缺陷构型;最后在辐照后构型基础上进行拉伸模拟,通过对比级联模拟前后的结果,系统评估辐照缺陷对 Mo-Re 单晶固溶体合金服役性能的影响规律,并从原子尺度揭示其物理机理,为后续理解钼铼合金在辐照下的服役性能提供重要数据和机制支撑。

1 研究方法

本工作利用分子动力学程序 LAMMPS (Large-scale Atomic Molecular Massively Parallel Simulator) [17] 进行计算,并使用可视化软件 OVITO (Open Visualization Tool) [18] 对模型进行可视化分析。势函数文件采用 2025 年 Liu 等人开发的势函数[19],该势函数可以较好的描述钼铼合金的性质,且在原子短程相互作用处连接了 Ziegler-Biersack-Littmark (ZBL) 势[20],能够较好描述钼铼合金中的位移级联过程。

基于之前研究[21], Mo-Re 单晶固溶体合金为富 Mo 固溶体,呈体心立方结构 (Body-Centered Cubic, BCC),模型构建时所用晶格常数为 3.15 Å,模拟所用模型的 x、y、z 三个方向分别对应晶体的 [100]、[010]、[001] 晶轴,模型大小为 107 Å × 107 Å × 107 Å,三个方向均为周期性边界条件。基于以上结构,对纯 Mo、Mo-5Re 合金、Mo-14Re 合金进行建模,如图 1 所示。

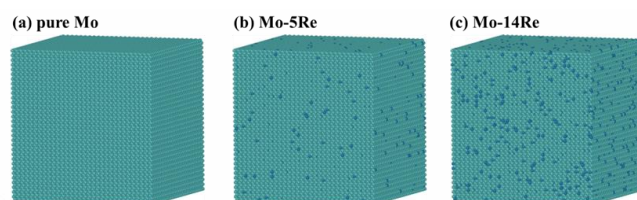


图 1 纯 Mo、Mo-5Re 合金、Mo-14Re 合金原子模型图,其中浅绿色小球为 Mo 原子,深蓝色小球为 Re 原子

Fig. 1 Schematics of pure Mo, Mo-5Re and Mo-14Re computational boxes. The light green balls represent Mo atoms and the dark green balls represent Re atoms

针对该模型,首先采用共轭梯度方法 (Conjugate Gradient, CG) 对此模型进行能量最小化优化,能量和力的搜索收敛标准均设置为 10^{-10} 。在 CG 优化之后,模拟系统采用粒子数 (N)、压强 (P) 和温度 (T) 均不变的 NPT 系综,在 0 压强环境中对体系进行了 20 ps 弛豫,使模拟体系温度达到 300 K,并形成稳定结构,将此结构作为拉伸模拟和级联碰撞的初始结构。

为了研究材料模型力学性质的改变,对模型进行拉伸测试模拟。拉伸过程设置为 NVT 系综,沿 z 方向进行拉伸,拉伸两端设置为刚体,将中间区域设置为移动区域并输出其应力应变,画出应力应变曲线,拉伸过程中步长仍设置为 1 fs,应变的机械应变速率为 0.001 ps^{-1} 。温度分别设置在 300 K 和 1073 K 进行拉伸模拟。在拉伸过程中, x 和 y 方向不施加外部应力并允许这两个方向松弛以达到无应力的状态。为了分析拉伸过程的滑移系统启动及可能的位错演化情况,使用 OVITO (Open Visualization Tool) 程序中多面体模板匹配法 (Polyhedral Template Matching, PTM) 方法开展相应的结构分析[22]。

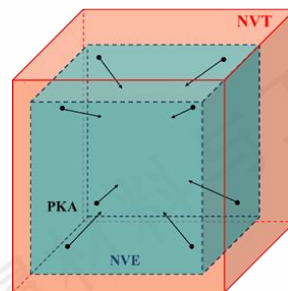


图 2 位移级联分子动力学模拟模型示意图

Fig. 2 Schematic of molecular dynamics simulation model for cascade simulations

基于初始结构,进行位移级联的模拟,在这个结构中,在盒子八个角位置随机选取附近选取一个 Mo 原子作为 PKA,赋予初始能量为 1 keV 和 10 keV,入射方向朝着盒子中心。基于之前工作[23],盒子最外面三层原子设置为 Nose-Hoover 热浴层[24],考虑到钼铼合金在反应堆中的应用场景,温度设置为 1073 K 来控制模拟体系内原子的温度,中间级联区域设置为微正则 (NVE)

系综, 周围使用正则 (NVT) 系综, 如图 2 所示。为了统计辐照后材料内部的缺陷数量与分布, 使用 OVITO 程序中的 Wigner-Seitz (WS) 方法进行统计, 以 $t=0$ 时刻晶格原子位置构造 WS 原胞, 分析辐照后体系缺陷分布与数量。

辐照级联后, 再次在 300 K 和 1073 K 进行拉伸模拟测试, 并将模拟结果与位移级联前的结果进行对比, 获得位移级联对材料力学性能影响的关系。研究分析完美晶体的拉伸模拟测试在 2.1 节, 位移级联模拟的结果与缺陷分布情况在 2.2 节, 位移级联后的拉伸模拟测试结果在 2.3 节。

2 结果与分析

2.1 完美晶体钼铼合金拉伸模拟测试

基于完美晶体结构的纯 Mo、Mo-5Re 和 Mo-14Re 模型进行拉伸模拟, 图 3 给出了 300 K 和 1073 K 下纯 Mo、Mo-5Re 和 Mo-14Re 三种材料沿[001]方向拉伸的应力-应变曲线。可以看出, 在无辐照缺陷的完美晶体状态下, 三种材料的应力应变响应呈现明显差异, 纯 Mo 的极限抗拉强度为最高, 随着 Re 含量的增加, 材料的极限抗拉强度呈下降趋势。

如图 3 所示, 根据级联前纯 Mo 及 Mo-5Re、Mo-14Re 合金在 300 K 与 1073 K 下的应力-应变曲线中可以看出, 所有材料均表现出典型的金属塑性变形特征。弹性应变阶段遵循胡克定律, 随后进入连续屈服阶段, 经历应变硬化后达到极限抗拉强度, 最终发生断裂。在 300 K 时, 纯 Mo 表现出最高的极限抗拉强度 (约 14.7 GPa), 而随着 Re 含量的增加, 强度呈逐渐下降趋势, Mo-5Re 降至约 14.3 GPa, Mo-14Re 降至约 13.5 GPa; 与此同时, 纯 Mo 的断裂应变为 6.2%, 而 Mo-5Re 的断裂应变提高至

6.4%, Mo-14Re 提高至 6.6%, 表明材料塑性提高。温度升高至 1073 K 后, 三种材料的强度均显著下降, 纯 Mo 下降至约 7.4 GPa, Mo-5Re 下降至约 7.3 GPa, Mo-14Re 下降至约 7.1 GPa, 三种材料的极限抗拉强度均约为 300 K 时的 50%, 而断裂应变则提升至 9.5% - 10%, 表明高温促进了滑移系统的热激活, 导致这些单晶材料极限抗拉强度降低但塑性增强。值得注意的是, 在 1073 K 下, 三种材料的应力-应变曲线几乎重合, 说明 Re 的合金化效应在高温条件下被显著抑制。上述结果表明, Re 的添加在低温下能够改善单晶 Mo 的塑性, 同时也会降低材料的强度, 但该效应随温度升高而减弱乃至消失, 这与已发表的实验结果一致[25]。

进一步, 分析模型在拉伸应力条件下的原子尺度结构变化, 已明确底层材料演化机制。三种模型在拉伸应力下结构变化类似, 如图 4。图中使用 OVITO 软件的 PTM 方法进行相结构的识别, 其中蓝色小球是 BCC 结构, 绿色小球是 FCC 结构, 白色小球是缺陷结构。可以看到在弹性阶段 ($\epsilon < 6\%$), 晶体结构保持完整, 未观察到明显的点缺陷或位错形核, 原子排列仍维持 BCC 结构的有序性; 随着应变增加至屈服阶段 ($6\% < \epsilon < 7\%$), 滑移系统开始启动, 部分位置出现位错形核, 部分位置形成点缺陷; 在应变增加至 7% 时, 位错运动启动, 导致模型开始失稳发生断裂, 此时对应应力应变曲线的断裂点, 应力开始陡降。结合应力应变曲线分析, 可以发现, 随机分布的 Re 原子在 Mo-Re 单晶固溶体合金中起到了降低滑移系统启动临界应力的作用。对于图 3 中显示的 Re 添加后系统的断裂应变增加这一现象, 由于本研究的研究对象是单晶固溶体, 没有涉及到位错线或晶界在缺陷下的运动, 因此, Re 的添加导致的断裂应变的增加, 其原因仍旧来自其对滑移系统的影响。

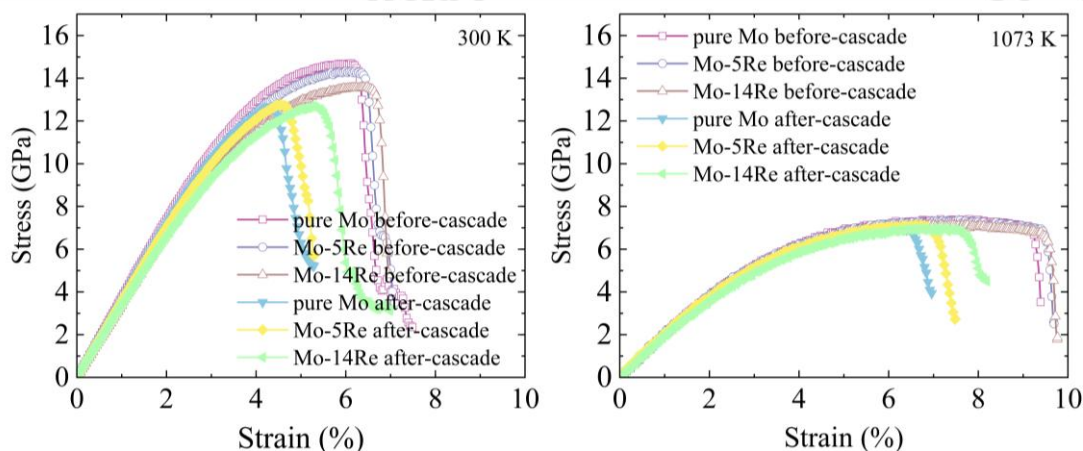


图 3 级联前后的纯 Mo、Mo-5Re 和 Mo-14Re 在 300K 和 1073K 下以 0.001 ps^{-1} 应变速率获得的应力应变曲线

Fig. 3 Stress-strain curves of pure Mo, Mo-5Re, and Mo-14Re before and after cascade under tensile simulation at 300K and 1073 K with strain rate of 0.001 ps^{-1}

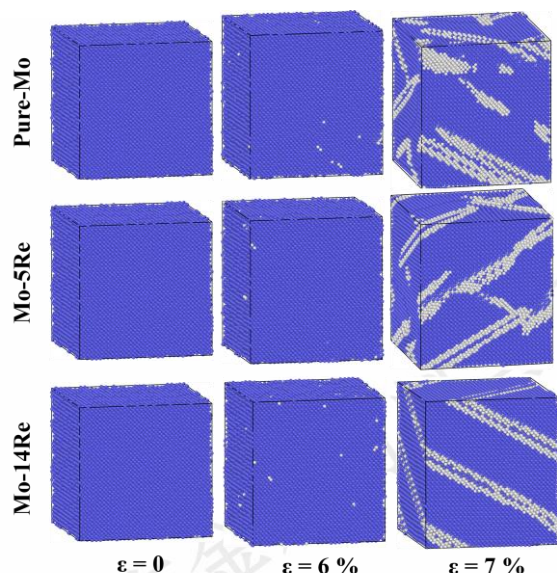


图4 纯 Mo、Mo-5Re 和 Mo-14Re 在 300K 和 0.001 ps⁻¹ 应变速率下拉伸过程的相分布: (a) 初始结构, (b) 拉伸应变为 6% 的结构, (c) 拉伸应变 7% 的结构。其中蓝色和白色小球分别代表其处在 BCC 结构和缺陷状态

Fig. 4 Phase distribution of pure Mo, Mo-5Re and Mo-14Re under stretching at 300 K with strain rate of 0.001 ps⁻¹: (a) the initial structure, (b) structure under $\varepsilon = 6\%$, (c) structure under $\varepsilon = 7\%$. The blue and white balls represent that they are in the states of BCC structure and defects, respectively

因此, 系统分析整个演化过程, 对比纯 Mo 及不同 Re 含量的合金在应力下的原子位移, 可以发现, 如图 5 所示, 随着 Re 的含量增加, 系统被激发的滑移系统数目也在增加, 并且这些被激发的滑移系统分布在系统的不同区域, 所以, 每个滑移系统的启动会导致一个微小的应变, 多个滑移系统的启动会形成更大的应变, 直到某个滑移系统滑移导致位错的形成和快速运动, 形成断裂。而 DFT 计算结果已证实, 滑移系的活化能垒随着 Re 含量的增加而减小[26]。因此, 可以知道对于固溶体单晶结构, Re 含量的增加降低了滑移系统的临界势垒, 导致产生更多的局部滑移系统启动, 从而提高了系统的应变性能。

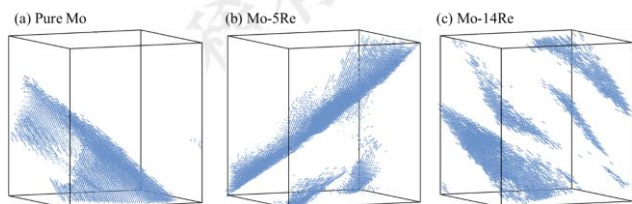


图5 纯 Mo、Mo-5Re 和 Mo-14Re 在 300K 和 0.001 ps⁻¹ 应变率下, 当拉伸应变为 7% 时的启动的滑移系统分布图

Fig. 5 Spatial distribution of activated slip systems under the tensile strain of 7% in pure Mo, Mo-5Re, and Mo-14Re at 300 K with a strain rate of 0.001 ps⁻¹

2.2 位移级联模拟结果与缺陷分布

基于 2.1 节建立的模型, 本节对三种材料分别进行了位移级联模拟, 选定为模型八个角落处的 Mo 原子作为 PKA, 作为研究示例, 入射能量分别选定为 1 keV 和 10 keV, 对应中子能量达到 0.25 MeV, 级联温度控制在 1073 K, 分别连续打八次级联, 分析级联结束后的模型中缺陷数量如图 6 所示。

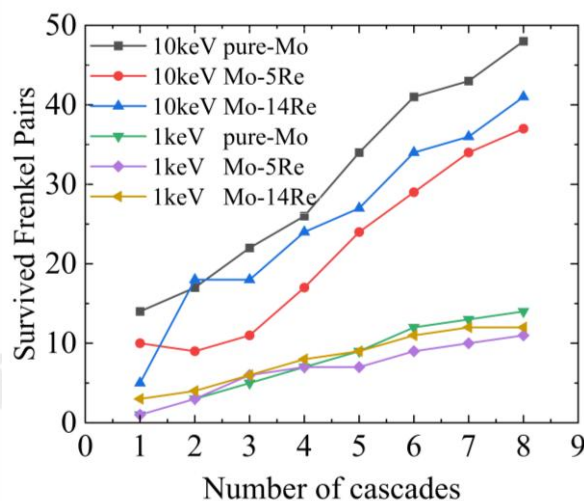


图6 级联后残存的弗伦克尔对数量统计图

Fig. 6 Statistical results of survived Frenkel Pairs of after-cascade models

残存弗伦克尔缺陷对 (Survived Frenkel Pairs) 的数量随级联次数的增加呈上升趋势 (图 6)。在 10 keV PKA 能量下, 纯 Mo 的残余缺陷累积速率最高 (约 5.8 个/次级联), 而 Mo-5Re 和 Mo-14Re 的累积速率分别降低至 4.6 个/次级联和 5.1 个/次级联。这一结果表明向纯 Mo 中添加 Re 元素能够有效抑制级联缺陷的累积, 与文献 [15] 中关于 Mo-Re 合金热峰阶段缺陷产生率的研究结论一致。然而, Re 的抑制效果并非随 Re 含量单调变化。Mo-5Re (5 at.% Re) 的缺陷累积量最低, 而 Mo-14Re (14 at.% Re) 的抑制效果反而减弱。这可能是因为高 Re 含量下 Re 原子发生团簇偏聚, 削弱了对间隙原子的捕获效果, 同时局部晶格畸变的增强反而促进了缺陷簇的形核, 这种发现与文献 [16] 关于 Re 偏聚对辐照损伤影响机制的报道相符。在 1 keV 低能级联下, 三种成分的残余缺陷累积曲线几乎重合, 差异不显著。这表明 Re 元素的作用在低能级联中受到抑制, 原因是低能级联的碰撞序列长度较短, 点缺陷的产生与复合在更短的尺度内完成, Re 原子无法有效发挥其缺陷调控作用, 该结果也与 Wang 等 [15] 在分子动力学模拟中发现的一致。

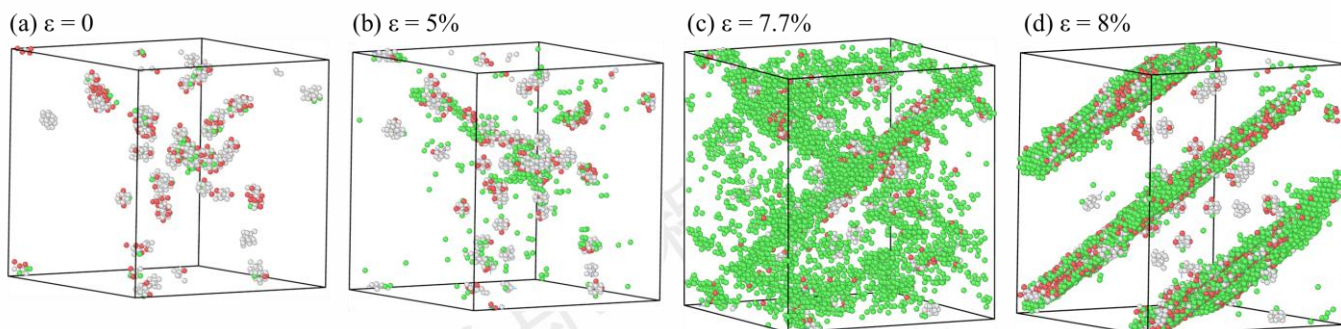


图 7 Mo-14Re 合金级联后拉伸模拟的缺陷分布图。其中绿色、红色和白色小球分别代表这些原子处于 FCC 结构, HCP 结构和缺陷结构状态

Fig. 7 Defects distribution in Mo-14Re alloy after cascade simulations under tensile simulation. The green, red and white balls represent that they are in the states of FCC structure, HCP structure and defect structure, respectively

2.3 位移级联后的拉伸模拟结果

在 2.2 节获得的 8 次连续位移级联 (10 keV PKA) 后的构型基础上, 本节对三种材料分别进行了拉伸模拟, 研究位移级联引入的缺陷对其服役力学性能的影响。如图 3 中给出的级联后纯 Mo、Mo-5Re 和 Mo-14Re 三种体系在 300 K 和 1073 K 下的应力-应变曲线。可以看出, 在室温 (300 K) 条件下, 三种材料均表现出较高的抗拉强度 (~12.7 GPa), 但对应的断裂应变较小 (4.5%~5.2%), 呈典型的脆性断裂特征。而且随 Re 含量增加, 材料的极限抗拉强度并未有明显减弱, 但断裂应变略有增加: pure-Mo 为 4.5%, Mo-5Re 为 4.8%, Mo-14Re 为 5.2%, 表明在室温下 Re 的加入明显改善了钼基材料在辐照条件下的塑性。在 1073 K (高温) 条件下, 三种材料的抗拉强度均显著下降至约 7 GPa (降幅约 45%), 但断裂应变明显增加, 表现出典型的韧性断裂特征。高温下 Re 的合金化效应更为显著: 随 Re 含量增加, 材料的均匀延伸率依次为 pure-Mo (~6.5%)、Mo-5Re (~7.2%) 和 Mo-14Re (~7.8%), 表明 Re 在高温下能更有效地提升材料的塑性。同时对比 300 K 和 1073 K 的结果可以发现, 温度升高显著降低了材料的强度但提升了塑性, Re 的增韧作用在高温下更为突出。

相对于辐照前的应力-应变曲线, 从这些结果中可以看出, 位移级联显著降低了 Mo-Re 合金的拉伸强度和塑性: 室温下极限抗拉强度从约 14 GPa 下降至约 12.7 GPa, 降幅约 9%, 断裂应变从约 6% 下降至约 5%; 1073K 高温下极限抗拉强度从约 7.4 GPa 下降至约 7 GPa, 塑性下降幅度相对较小。为深入揭示钼铼合金在级联后拉伸过程中的内在机制, 以 Mo-14Re 合金模型为例, 进一步分析了相分布与缺陷应力场的演化规律。

图 7 展示了 Mo-14Re 合金在 10 keV 八次级联后拉伸过程中的缺陷分布演化。可以观察到, 初始状态下,

Mo-14Re 模型中存在着部分辐照缺陷; 而且随着应变量的增加, 增加到 5% 左右时, 拉伸优先在已有的辐照缺陷附近产生新的缺陷; 当应变达到 7.7% 时, 滑移系统优先沿 BCC 最常见的 $\langle 111 \rangle$ 方向在 $\{110\}$ 面上从缺陷最密集区域启动; 当应变达到 8% 时, 滑移系统完全启动, 材料失稳。从这些结果, 可以看出, 在 Mo-Re 单晶固溶体合金中, 随机固溶的 Re 原子虽然抑制了辐照缺陷的数量, 但是相对于只有随机固溶 Re 原子的情形, 这些缺陷的存在却导致了系统滑移系统启动所需的临界应力的降低, 可能的原因如上所述, 这些缺陷的存在, 一方面导致系统在这些区域形成应力场和能量场的畸变区域, 在拉伸过程中优先在这些缺陷处形成新的缺陷, 另一方面, 这些缺陷的形核长大, 导致了滑移系统在更小的临界应力下启动, 导致极限抗拉强度的降低。在滑移系统启动及进一步滑移过程中, 这些缺陷对其启动及演化都起到了抑制作用, 因此, 相对于未发生位移级联的情形, 位移级联导致断裂应变降低。从图 7 中, 还可以发现, 位移级联后同一温度下的应变随 Re 含量的增加而变大, 这与位移级联发生前的结果一致, 这仍旧是与多个滑移系统的启动相关, 不再赘述; 而随着 Re 含量的增加, 其极限抗拉伸强度的变化不大, 主要的原因是此数值对应的是滑移系统形成位错开始滑移的临界应力, 在位移级联形成辐照缺陷后, 根据位错在缺陷下滑移的基本理论, 此数值主要受到这些缺陷的影响, 而不是 Re 含量的影响, 因此得到如图所示的结果。

如前所述, 在本项研究中, 我们仅考虑了 Mo-Re 单晶固溶体合金中的缺陷和 Re 原子相互作用对此系统力学性能的影响, 其本质是对滑移系统启动和演化的影响, 而没有涉及晶界及位错等在辐照形成的缺陷特别是形成较大尺寸偏聚相的演化对力学性能的影响。从这些结果分析可以知道, 单晶固溶体合金在仅考虑小尺寸辐

照缺陷时,其对力学性能起到退化作用,同时,根据材料本身的结构特征,可以知道,晶界及位错网络与辐照缺陷的相互作用是对实验观测到的辐照脆化也具有重要的影响,考虑到本文的篇幅限制,我们在后续文章中进行详细报道。

除了上述讨论外,还需要指出的是,分子动力学研究级联模拟的时间窗口有限(皮秒到纳秒量级),而真实核反应堆中的辐照损伤是长时间累积的过程。本模拟捕捉的是级联碰撞的瞬时结果,后续缺陷的聚集、演化以及析出相析出等行为需要在更长时间尺度的模拟中进一步研究,这需要获得关键缺陷的演化能量,以实现不同尺度间的真正有效传递,实现跨尺度模拟预测,因此,需要开展各种缺陷演化的加速分子动力学模拟,以实现上述目标。

3 总结

本工作采用分子动力学方法,系统研究了位移级联对不同 Re 含量(0%、5%、14%)的 Mo-Re 单晶固溶体合金拉伸力学性能的影响规律,得到以下主要结论:

(1) 完美晶体状态下,Re 的添加可改善 Mo 的室温塑性,断裂应变随 Re 含量增加从 6.2%提升至 6.6%,同时极限抗拉强度从 14.7 GPa 下降至 13.5 GPa;而温度升高至 1073 K 后,三种材料的应力-应变曲线几乎重合,Re 的合金化效应被显著抑制。

(2) 位移级联后,残余弗伦克尔缺陷对数量随级联次数呈线性累积,累积速率与 PKA 能量正相关。Re 元素能够有效抑制缺陷累积,抑制效果呈非单调成分依赖:Mo-5Re 体系的缺陷累积速率最低(4.6 个/次),优于 Mo-14Re(5.1 个/次)和纯 Mo(5.8 个/次),其机制为低 Re 含量下 Re 原子对间隙原子的有效捕获,以及高 Re 含量下 Re 偏聚导致的局部晶格畸变促进缺陷形核。

(3) 位移级联显著降低了 Mo-Re 单晶固溶体合金的拉伸强度和塑性:室温下极限抗拉强度从约 14 GPa 下降至约 12.7 GPa(降幅约 9%),断裂应变从约 6%下降至约 5%;高温下强度从约 7.4 GPa 下降至约 7 GPa,塑性下降幅度相对较小。系统的研究分析表明,这些变化均与位移级联形成的缺陷对系统滑移系统的启动及后续的滑移紧密相关,辐照缺陷的存在导致应变过程中更多缺陷在其附近形成,导致了局部应力场和势能场在这些区域的畸点,从而降低了滑移系统在此处启动的临界应力,导致其在更小的应变下发生断裂。

参考文献 References

- [1] Perepezko J H. *Science*[J], 2009, 326: 1068
- [2] Primig S, Leitner H, Clemens H, et al. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*[J], 2010, 28: 703
- [3] Leichtfried G, Schneibel J H, Heilmaier M. *Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 2006, 37(10): 2955
- [4] Huang Hongtao(黄洪涛), Wang Weijun(王卫军), Zhong Wuyue(钟武烨), et al. *Atomic Energy Science and Technology*(原子能科学技术)[J], 2020, 54(3): 505
- [5] Tan Shuanbin(谭拴斌), Guo Rangmin(郭让民), Yang Shenghong(杨升红), et al. *Chinese Journal of Rare Metals*(稀有金属)[J], 2003, 6: 788
- [6] Dong Di(董帝), Huang Hongtao(黄洪涛), Xiong Ning(熊宁), et al. *China Molybdenum Industry*(中国钼业)[J], 2018, 4(42): 6
- [7] Qiu Xi(邱玺), Gao Shixin(高士鑫), Li Quan(李权), et al. *Materials Reports*(材料导报)[J], 2023, 37(2): 101
- [8] Zeng Yi(曾毅), Sun Yuanjun(孙院军), An Geng(安耿), et al. *Powder Metallurgy Technology*(粉末冶金技术)[J], 2023, 41(4): 307
- [9] Chang Tian(常恬), Gao Xuanqiao(高选乔), Lin Xiaohui(林小辉), et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2023, 52(1): 388-397
- [10] Chang Tian(常恬), Lin Xiaohui(林小辉), Zhang Weiwei(张伟伟), *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2026, 55(5): 1374-1384
- [11] Busby J T, Leonard K J, Zinkle S J. *Journal of Nuclear Materials*[J], 2007, 366(3): 388-406.
- [12] Filacchioni G, Casagrande E, De Angelis U, et al. *Journal of Nuclear Materials*[J], 1994, 212-215: 1288-1291.
- [13] Cui Dewang, Zhao Shangquan, Cao Ziqi, et al. *Acta Materialia*[J], 2025, 294: 121149.
- [14] Cui Dewang, Wang Yiwei, Cao Ziqi, et al. *Acta Materialia*[J], 2025, 283: 120550.
- [15] Wang Xudong, Qiu Rongyang, Dou Yankun, et al. *Nuclear Engineering and Technology*[J], 2024, 41: 101804.
- [16] Wang jing, Han Chenxu, Zong Hongxiang, et al. *Computational Materials Science*[J], 2025, 250: 113704.
- [17] Plimpton S. *Journal of Computational Physics*[J], 1995, 117(1): 1-19.
- [18] Stukowski A. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2010, 18(1): 015012.
- [19] Liu Zhen, Li Boliang, Guo Yaolin, et al. *Computational Materials Science*[J], 2025, 260: 114180.
- [20] Ziegler J F, Biersack J P, Littmark U. *Treatise on Heavy-Ion Science*[M], 1985: 93.
- [21] Busby J T, Ohriner E K, Snead L L, et al. *Molybdenum-rhenium alloys for spacecraft reactor applications*[A]. 2005 Space Nuclear Conference[C], San Diego, 2005: 276.

- [22] Larsen P M, Schmidt S, Schiøtz J. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*[J], 2016, 24(5): 055007.
- [23] Dong Yibin, Wang Fei, Setyawan W, et al. *Acta Materialia*[J], 2025, 288: 120880.
- [24] Martyna G J, Klein M L, Tuckerman M. *Journal of Chemical Physics*[J], 1992, 97(4): 2635-2643.
- [25] Schneibel J H, Felderman E J, Ohriner E K. *Scripta Materialia*[J], 2008, 59: 131-134.
- [26] Zheng Zhenghui, Lai Chen, Wang Guangda, et al. *Materials Characterization*[J], 2025, 229: 115604.

Molecular Dynamics Study on the Effects of Displacement Cascades on the Mechanical Properties of Molybdenum-Rhenium Single-Crystal Solid Solution Alloys

Wang Xiaotong¹, Dong Yibin², Li Weiyi³, Li Qingyu¹, Zhu Mingdong¹, Dong Yuanyuan¹, Yan Dapeng¹, Gao Ning²

(1 Nuclear Power Institute of China, Sichuan Chengdu, 610213, China)

(2 Institute of Frontier and Interdisciplinary Science and Key Laboratory of Particle Physics and Particle Irradiation (MOE), Shandong University, Shandong Qingdao, 266237, China)

(3 Rocket Force University of Engineering, Shanxi Xi'an, 710025, China)

Abstract: Due to their high melting points, excellent high-temperature mechanical properties, and radiation resistance, molybdenum-rhenium (Mo-Re) alloys have been considered as primary candidates for fuel cladding and core structural materials used in advanced nuclear reactors. In this study, molecular dynamics simulations were employed to systematically investigate the effects of displacement cascades on the mechanical properties of Mo-Re single-crystal solid-solution alloys with different Re contents (5% and 14%), using pure Mo single crystals as a benchmark. The results indicate that increasing the Re content could activate more slip systems within the Mo-Re single-crystal solid-solution alloys under tensile stress, thereby effectively enhancing their plasticity. Results further indicated that displacement cascades could significantly degrade both the tensile strength and plasticity of the Mo-Re alloys. The underlying physical mechanism may be from the defects introduced by the cascades, which can induce localized stress concentrations and energy perturbations, resulting in a reduction in the critical stress required to activate slip systems, thereby accelerating material yielding and decreasing the uniform elongation of the single-crystal solid-solution alloys. Therefore, the results of this study elucidate the influence of displacement cascades on the tensile mechanical properties of Mo-Re single-crystal solid-solution alloys, as well as the underlying atomic-scale mechanisms, providing valuable scientific insights for the design and selection of materials for advanced nuclear reactors.

Key words: Mo-Re alloy, single-crystal solid solution, displacement cascade, stress-strain, molecular dynamics

Corresponding author: Ning Gao, Ph. D., Professor, Institute of Frontier and Interdisciplinary Science and Key Laboratory of Particle Physics and Particle Irradiation (MOE), Shandong University, 266237, P. R. China, Tel: 0532-58630258, E-mail: ning.gao@sdu.edu.cn;

Yibin Dong, Ph. D., Postdoctoral, Institute of Frontier and Interdisciplinary Science and Key Laboratory of Particle Physics and Particle Irradiation (MOE), Shandong University, 266237, P. R. China, Tel: 0532-58630258, E-mail: yibindong@sdu.edu.cn.