

W-Re合金空位与间隙

从动力学蒙特卡洛模拟得出的辐照W-Re合金中Re析出的机制

在辐照W中Re沉淀的动力学，包括空位和混合间隙溶质的输运

W-Re合金空位与间隙

采用标准晶格kMC研究了W-Re合金在辐照下的动力学演化

Vacancy migration model (空位迁移模型)

Interstitial defect migration model (间隙缺陷迁移模型)

W-Re合金空位与间隙

Vacancy migration model (空位迁移模型)

采用鞍点能量模型(或切割键模型)来模拟空位跃迁的活化能

$$\Delta E_{ij} = \sum_p \epsilon_{\alpha-p}^{sp} - \sum_q \epsilon_{\alpha-q}^{(i)} - \sum_{r \neq \alpha} \epsilon_{V-r}^{(i)} + \sum \Delta E_{ij}^{\text{non-broken}}$$

E_{ij} 是由跳跃原子处于鞍点时的构型与初始构型的能量差给出的，其中 α 为跳跃原子
 V 是空位， ϵ^{SP} 是位于鞍点的原子和邻近原子之间的键能

等式右边的第一项反映了跳跃原子在鞍点的能量，这一项的相互作用距离为2nn

第二项和第三项为跃迁原子的能量和初始态的空位

第四项给出了由于局部溶质浓度变化而导致的未断裂键与状态键之间的能量差

W-Re合金空位与间隙

Interstitial defect migration model (间隙缺陷迁移模型)

这里只考虑 W-W 型自间隙原子和 W-Re 型混合间隙原子

$$\Delta E_{ij} = \begin{cases} E_m + \Delta \mathcal{H}_{ij}, & \text{if } \Delta \mathcal{H}_{ij} > 0 \\ E_m, & \text{if } \Delta \mathcal{H}_{ij} < 0 \end{cases}$$

采用初始系统能量模型计算间隙跳跃的活化能