金属中模拟辐射损伤对晶体结构和原子错配的依赖性

J. C. Stimac

化学工程系，

加州大学戴维斯分校，美国加利福尼亚州戴维斯，邮编 *95616*；以及
劳伦斯利弗莫尔国家实验室，美国加利福尼亚州利弗莫尔，邮编 *94550*。

C. Serrao 和 J. K. Mason*

美国加利福尼亚州戴维斯市加州大学戴维斯分校材
料科学与工程系，邮编 *95616*。

arXiv:2301.04303v1 [cond-mat.mtrl-sci] 11 Jan 2023

摘要

本研究采用分子动力学和弗伦克尔对累积法，模拟每原子位移数高达 2.0 的情形，考察低温和高辐射通量条件下三种金属的辐射损伤。研究对象包括铁、等原子比 CrCoNi，以及一种与 CrCoNi 具有相同体性质、由单一原子类型构成的虚构金属，称为 A原子。研究发现，CrCoNi 中形成的位错浓度高于铁和 A 原子体系，层错数量也多于 A 原子体系。结果表明，CrCoNi 中的空位和间隙原子浓度显著高于 A 原子体系；这或许反映了 CrCoNi 的势能景观更加粗糙，导致其复合半径更小。文中还介绍了一种模型，用于分解缺陷对储存能的主要贡献，并借此强调亟需采用更高保真度的方法进行点缺陷识别。

I. 引言

核裂变反应堆中的结构部件需要经过工程设计，以承受数十年的辐射照射和高温环境 [1, 2]。下一代裂变反应堆和未来聚变反应堆中的材料将承受高得多的辐照剂量和温度，还可能处于高度腐蚀性环境中 [3, 4]。高能粒子照射会使原子发生位移，并损伤纯金属和合金的晶体结构 [5, 6], ，进而引发各种微观结构变化。就辐射的劣化效应而言，反应堆环境中的结构金属需要考虑五个方面：辐照硬化（低温）、辐射诱导偏析和析出、空洞肿胀、辐射诱导蠕变以及氦脆（高温） [7, 8]。其中，三种中间温度效应在实际应用中通常最为相关，而且往往会同时出现，因为它们都与辐射产生的点缺陷在晶格中迁移的能力密切相关 [9, 10]。

置换型溶质的辐照诱导偏聚通常归因于反向柯肯达尔效应：空位迁移至汇并在其上湮灭时，不同

* jkmason@ucdavis.edu

原子种类沿相反方向的迁移速率各不相同 [11]。偏析程度取决于扩散迁移率的差异；通常，尺寸较小的溶质会富集，而尺寸较大的溶质则会在汇附近贫化 [10, 12]。空洞肿胀是一项严重的工程问题：由于材料内部空洞的形核与生长，材料体积每增加 1 个每原子位移数，体积增幅最高可达 1% [13] 。这一过程由空位和间隙原子浓度失衡所驱动：高迁移率间隙原子在位错及其他汇上湮灭后，会留下相对过量的空位，继而析出形成空洞 [9, 14]。虽然针对辐照蠕变已提出多种机制，但目前认为其主要由两种机制导致：应力诱导的点缺陷优先吸收使取向有利的位错发生攀移，以及位错通过攀移越过障碍物而实现滑移 [9, 15]。

多主元合金（MPEAs） [16, 17]（通常称为高熵合金或成分复杂合金）由几种至多种原子组成，这些原子以名义上的等原子浓度形成固溶体。这类新兴金属作为辐照环境中的结构材料可能表现出良好性能，初步证据表明，其力学性能卓越 [18, 19]，且抗辐射损伤能力 [20, 21] 高于传统金属。一项关于辐射对 CrCoNi 多主元合金影响的实验与计算研究发现，与纯镍和镍铁二元合金的辐照样品相比，该合金的相对无序度、缺陷数量及大型缺陷团簇均有所减少 [20]。作者将这些效应归因于原子种类数量增加导致位错迁移率下降。Lu等人 [22]研究了多种镍基合金（包括纯镍、NiFe、CrCoNi，以及两种五元合金）在预先进行和未进行纳米压痕处理情况下的空洞肿胀，并发现纳米压痕通过提高位错、层错和孪晶界等缺陷的密度，促进空位湮灭，从而增强了抗肿胀能力。然而，令人好奇的是，Veli̇sa等人 [23] 发现，CrCoNi 仅在接近并低于 300 K 的温度下才比 NiCr 表现出更优异的抗辐照性能。其原因尚未得到充分阐明，但据信与这两种合金中形成的化学短程有序（SRO）的具体情况有关。

在原子尺度上模拟辐射损伤，最直接的方法是进行碰撞级联的分子动力学（MD）模拟 [5, 6]。这需要给初级碰撞原子（PKA）赋予较大的初始速度，以模拟中子或其他高能粒子经过时向晶格传递动能的过程。初级碰撞原子发生反冲，使许多

周围原子偏离其晶格位置，并将初始动能转化为热尖峰，其能量足以促进晶格重建，并使生成的点缺陷中的许多（但并非全部）发生复合。由此产生的间隙原子和空位分别分布在受影响区域的边缘和内部，增加材料中的点缺陷浓度，并直接导致辐射最明显的有害影响。

质量守恒要求，单次碰撞级联产生的间隙原子和空位须以弗伦克尔对的形式出现。以这种方式产生的弗伦克尔对数量除以材料中的原子数，称为每原子位移数（dpa），是衡量晶体材料辐射损伤程度的标准指标 [24]。Kinchin and Pease 的早期研究将原子视为硬球，认为它们在碰撞级联过程中发生弹性碰撞，为晶体材料中的辐射效应奠定了理论基础 [25]。如果传递给原子的能量超过材料特定的阈值，则认为该原子已从其晶格位置移位。低于阈值的能量仍可能使原子发生位移，但初始扰动结束后，原子会返回其晶格位置。Norgett, Robinson, and Torrens 的研究进一步发展了 Kinchin and Pease 提出的理论，他们增加了额外项，以考虑电离造成的能量损失以及非弹性碰撞的影响（以下称为 NRT模型） [26]。近来的多项研究认为，NRT模型高估了碰撞级联产生的缺陷数量，并且忽略了原子替位引起的混合效应，因此促使人们提出了多种改进方案 [5, 6]。这些研究意义重大，因为只有采用能够可靠预测每原子位移数的准确损伤模型，才能可靠地比较各种材料的抗辐射损伤能力。

数十年来，人们一直在开展碰撞级联的全尺度原子模拟，这有助于揭示辐射诱导的初级损伤的演化过程 [27, 28]。然而，将分子动力学用于此类研究存在若干局限。正如参考文献 [6]所指出的，当激发电子态被诱导产生时，原子间势无法捕捉偏离玻恩–奥本海默近似所带来的影响。其他主要局限在于，利用现代计算资源能够合理实现的时间和长度尺度。分子动力学模拟通常不超过几纳秒，因此在完整级联模拟中，若要避免事件在时间上重叠，可合理达到的总辐射剂量会受到限制；参考文献 [29, 30] 进一步讨论了这些局限。由于

达到可观每原子位移数所需的计算成本很高，因此历来分子动力学模拟研究的辐射剂量都低于 1.0 每原子位移数。尽管这些研究有助于理解低剂量下的缺陷产生，但核反应堆堆芯中的结构材料在 40 年的服役期内可能承受高达 80 每原子位移数的辐射剂量 [8]。

人们采用了多种策略来规避级联模拟带来的计算限制，其中一种是直接插入高密度的弗伦克尔对 [31–33]。这类弗伦克尔对累积（FPA）技术舍弃了初级撞击事件引发的、具有时间分辨率的高能原子碰撞动力学。相反，它们通过随机将原子从其晶格位置移开，间歇性地引入弗伦克尔对，通常随后进行某种形式的平衡处理和时间积分。这些方法的优势在于，辐射剂量可根据位移原子的数量明确定义，剂量率则可根据位移原子数与模拟时间之比确定。例如，Chartier 等人 [34] 采用 FPA 方法模拟了 UO_2 的辐照，发现稳态位错密度与实验结果相当吻合。不过，FPA 方法的一项主要局限是无法体现热尖峰的相关效应 [30], ，尤其是热尖峰为缺陷扩散和团簇化提供必要热能的作用；这些效应还包括空位与间隙原子碰撞时点缺陷的复合。因此，分析 FPA 模拟时应谨慎考虑这一局限，以避免可能出现不符合物理实际的外推。

Derlet 和 Dudarev 最近的研究 [29] 提出了一种 FPA 方法的变体，进一步简化了辐照微观结构的采样过程。这种方法称为创建-弛豫算法（CRA），与此前的 FPA 方法不同之处在于，它不包含时间积分动力学。与其他 FPA 方法一样，CRA 模拟会随机选择原子，并使其沿随机方向移动随机距离，但之后总是进行势能最小化。整个模拟不断重复这一过程，直至达到指定的位移次数；其标准每原子位移数等于位移原子数除以系统中的原子总数。Dudarev 和 Derlet 将 CRA 应用于不同尺寸的体心立方铁体系，并报告称，完整级联模拟 [35, 36] 与 CRA 在每原子位移数与间隙原子密度的关系上吻合良好，至少在对自变量和因变量进行线性缩放后如此。需要缩放，很可能是因为 CRA 实际上是在零开尔文下进行的[37]；在这种条件下，高温下普遍存在并显著促进辐照材料微观结构演化的点缺陷热驱动扩散可以忽略不计

。尽管如此，CRA 可以被视为模拟这样一种条件下的辐射损伤：热驱动扩散虽处于活跃状态，但与其他质量传输机制相比可以忽略不计。

此后，CRA 被用于研究体心立方铁以外材料中的辐射效应。一项研究使用 CRA 模拟了掺碳镍铁体系的辐照，并评估了碳间隙原子降低辐射损伤的能力[38]。另有数项研究将 CRA 应用于钨，以探究在相对较高剂量（高于 1.0 每原子位移数）下每原子位移数与特定物理参数之间的关系，这些研究单独使用 CRA，或结合其他计算或实验方法。所研究的参数包括热导率 [39]，氢脆和氚浓度 [40],以及辐射诱导结构演化 [41]。

本文研究了高辐照铁、等原子比铬钴镍合金，以及一种与 CrCoNi 体性质相同、由单一原子类型构成的虚构金属的微观结构，这种原子称为 A 原子。纳入铁和 A 原子体系的主要动机，是为研究已报道的 CrCoNi 抗辐照性能提供比较基准。本文使用 CRA 模拟了这三种体系的辐照，直至最终剂量达到 2.0 每原子位移数。第 II 节介绍了所采用 CRA 的细节，并分析了其可能适用的实验剂量率和温度范围。该节还概述了我们识别材料缺陷的方法，包括位错、空位、间隙原子和层错，并介绍了用于计算这些缺陷储存能的模型。模拟结果及相关讨论见第 III 节；第 IV 节则总结结论，为该领域的后续研究提供参考。

II. 方法

A. CRA 模拟

所有分子动力学模拟均使用 LAMMPS 软件进行 [42]。所有模拟晶胞均采用正交模拟胞，并在所有晶胞面上施加周期性边界条件，同时保持原子数不变。任何模拟均未定义温度或时间步长。构建初始填充空间的单晶后，模拟晶胞的体积

通过势能最小化进行松弛，此后固定不变。本研究考察了三种材料体系：体心立方铁、等原子比面心立方 CrCoNi，以及面心立方 A原子；其中设计 A原子是为了利用单一虚拟原子类型再现 CrCoNi 的体性质 [43]。与 A原子模型进行比较，可以更直接地识别化学短程有序（SRO）和晶格畸变（LD）所产生的影响；这些因素被广泛认为与多主元合金增强的物理性质有关 [19]。

体心立方铁模拟的模拟体积沿三个维度各包含 40 个晶胞，每个晶胞含有 2 个原子，因此总计 128 000 个原子。该模拟采用 Mendelev-II 嵌入原子法（EAM）势 [44]。面心立方 CrCoNi 模拟沿三个维度各包含 32 个晶胞，每个晶胞含有 4 个原子，因此总计 131 072 个原子。三种原子种类的浓度相等，并在初始时随机、均匀地分布于整个模拟晶胞中。减少面心立方体系中的晶胞数量，是为了使原子总数尽可能接近铁模拟中的原子数。等原子比 CrCoNi 模拟采用 Li 等人开发的 EAM 势 [45]。面心立方 A 原子模拟采用 Jian 等人开发的 EAM 势[46] ，除此之外与 CrCoNi 模拟完全相同。

本研究通过采用创建-弛豫算法（CRA） [29] 模拟反复引入弗伦克尔对所产生的辐照效应， [34, 47]从而绕过了完整碰撞级联模拟所面临的计算限制；基本的 CRA 算法见算法 1。三个实验均使用 CRA 模拟辐射损伤，直至达到 2.0 每原子位移数；这需要在 Fe 系统中总计进行 256 000 次原子位移，在 CrCoNi 和 A 原子体系中则各进行 262 144 次位移。每次原子位移后进行的势能最小化分为两个步骤。首先，对每个原子的位置施加一个随机的小幅高斯分布位移。其次，对原子位置进行标准的基于梯度的能量最小化，以降低体系能量。第一步中施加小幅扰动，旨在帮助体系逃离浅的局部能量极小值，这与热体系中的自然情况相符。在系统地探究扰动幅度与较小体心立方铁体系（含 2000 个原子）的弛豫势能之间的关系后，确定了扰动幅度。具体做法是移动 100 个原子，并在每次位移之间不施加扰动地进行能量最小化。完成所有位移后，

算法 1 创建弛豫算法

$n := 0$ ▷ 位移原子数量

当 $n/N < \phi_{\mathrm{dpa}}$ **时** ▷ N 是原子总数

    从所有原子中均匀随机选择一个原子 i

    将原子 i 移动到模拟晶胞内随机选取的点

    当势能增幅超过阈值**时**

        将原子 i 移动到模拟晶胞内随机选取的点

    结束循环

    使用能量最小化对系统进行弛豫

    $n \leftarrow n + 1$

结束循环

对原子反复进行扰动和能量最小化循环，并在图 1 中按循环次数展示了给定扰动幅度标准差下的势能曲线。研究发现，标准差为 0.005 埃和 0.01 埃时，势能会迅速达到相对稳定的势能极小值；较大的位移往往会引入额外缺陷，而较小的位移则无法可靠地帮助体系逃离浅的势能极小值。后续模拟选择了 0.01 埃的扰动幅度，因为它能以最少的循环次数达到势能极小值。

由于加入扰动的目的是使系统更接近热力学系统，自然会产生一个问题：给定扰动幅度对应的温度是多少？能量均分定理表明，对于热力学系统，相对于理想晶体，每个原子的势能应为（$3/2$）$k_{\mathrm{B}}T$ ；将此值与单次扰动导致的每个原子平均势能增量相等，可得三个系统的等效温度均为 ~30 K。这表明，扰动提供的额外能量与以下假设一致：点缺陷的任何热驱动扩散，与其他质量传输机制相比都微不足道。

除上述三项模拟外，我们还对等原子比 CrCoNi 进行了另一项 CRA 模拟，其每个维度包含 64 个晶胞，总计 1048576 个原子

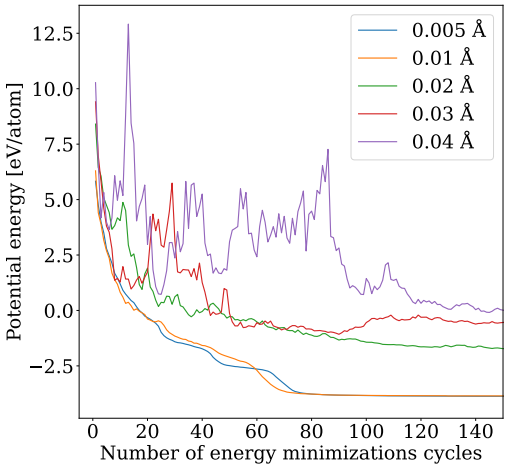


图 1. 高度缺陷化体心立方铁系统的每原子势能随最小化循环次数的变化，能量以孤立原子的能量为基准。扰动幅度为 0.005 埃和 0.01 埃时，系统能够迅速达到较深的势能极小值。

模拟达到 3.0 每原子位移数，以研究系统尺寸的影响。由于能量最小化是 CRA 中计算量最大的步骤，该模拟每进行一次能量最小化，就执行 25 次原子位移（算法 1 的步骤 4），以缩短模拟运行时间；该模拟的体积更大，因此在没有发生弛豫事件的情况下，多个原子位移出现在同一区域的概率更低。这项模拟的主要结果见附录 A。

B. 适用温度和剂量率

如第 I 节所述，使用 CRA 时形成的微观结构，是原子尺度应力场弛豫的直接产物，并不一定代表在热驱动扩散显著的条件下形成的微观结构。我们通过一个简单的论证来界定 CRA 适用的物理条件范围：比较热驱动扩散和碰撞级联所致弹道位移的原子输运速率。适用性的主要判据是，每原子弹道位移速率 K_0 远大于间隙原子跳跃速率 γ_{diff}（假定这是最快的热驱动扩散事件）。在这种条件下，与弹道位移及随后发生的应力弛豫所产生的影响相比，热驱动扩散的任何影响都可以忽略。根据过渡态理论，间隙原子跳跃速率

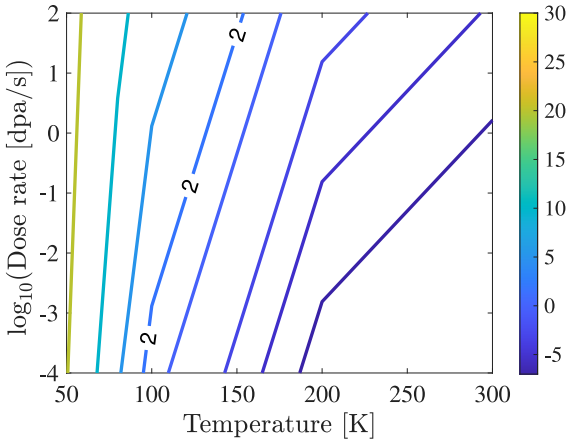


图 2. 适用性度量 $\mathcal{A} = \log_{10}(K_0/\gamma_{\text{diff}})$ 随剂量率对数和温度变化的等高线图。计算采用了文献 [49] 给出的 CrCoNi 中间隙扩散的扩散率和活化能。

遵循阿伦尼乌斯关系 $\gamma_{\text{diff}} = \nu_0 \exp[-E_{\text{a}}/(k_B T)]$，其中 ν_0 是位点跃迁频率的高温极限，E_{a} 是间隙扩散的活化能，k_B 是玻尔兹曼常数，T 是温度。随机游走扩散模型表明，ν_0 可近似为 $6D_0/\lambda^2$，其中 D_0 是扩散率前因子，λ 是间隙位点 [48]之间的距离。

使用文献 [49] 给出的 Cr-CoNi 间隙扩散前因子和活化能后，只剩下温度和 K_0 作为独立变量。定义适用性指标 $\mathcal{A} = \log_{10}(K_0/\gamma_{\text{diff}})$，使 $\mathcal{A}$ 每增加 1，K_0 与 γ_{diff} 的比值就增加一个数量级。图 2 给出了 CrCoNi 的 $\mathcal{A}$ 等高线图，表明适用性会随温度降低、剂量率升高而提高；此外，适用性对温度的依赖远大于对剂量率的依赖，这是扩散率在阿伦尼乌斯关系中呈指数标度的结果。对于所考虑的剂量率，$\mathcal{A} \geq 2$ 对应的温度均处于低温范围。这一低温限制与 II A节所述原子位置扰动所对应的等效温度完全一致。

C. 识别缺陷

对于遭受严重辐射损伤的材料，很难准确识别其中的晶体缺陷。材料中无疑仍存在底层晶格，但传统缺陷模型假设缺陷彼此孤立，或者等价地说，周围原子占据明确的晶格位置。对于辐照材料中可能出现的高缺陷浓度，这一假设并不成立；而在 CrCoNi 等多主元合金中，参考晶格位置的确定更加复杂，因为原子尺寸差异已经扰动了参考晶格。

模拟中的位错数量和类型使用 OVITO 的位错提取算法（DXA） [50]确定；该算法需要设置回路长度试值和回路可伸展性值，分别设为 14 和 9。令人惊讶的是，尽管 CRA 对晶格造成了大范围破坏，DXA 仍表现出相对稳健的性能；在下文第 IIIB 节所报告的网络中，仅出现了极少数孤立的位错线段。

空位的数量通过 OVITO 的 Wigner-Seitz (WS) 分析确定。该方法围绕初始晶体结构中的晶格位置构建 Voronoi 单元，并检查后续时间步中每个 Voronoi 单元的原子占据情况。不含任何原子的 Voronoi 单元被视为存在空位，但这种方法无法精确确定空位位置。研究将 WS 分析与另外两种估算体心立方铁体系中空位浓度的方法进行了比较，其中第一种是体心立方缺陷分析 (BDA) [51]。第二种方法是评估模拟盒的弛豫体积。插入一个弗伦克尔对会产生一个间隙原子和一个被空位占据的晶格位置，从而使受零牵引边界条件约束的晶体膨胀。由于模拟是在恒定体积下进行的，因此在 CRA 中插入弗伦克尔对反而会升高系统压力。通过在零牵引边界条件下弛豫模拟晶胞来评估等效体积变化，并假设插入弗伦克尔对造成的体积变化在整个模拟过程中保持不变，据此估算空位数量。图 3 比较了这三种方法，结果表明，与 BDA 相比，WS 分析得到的结果与根据弛豫体积估算的空位浓度吻合得好得多。WS 分析与弛豫体积法之间的差异倍数可以

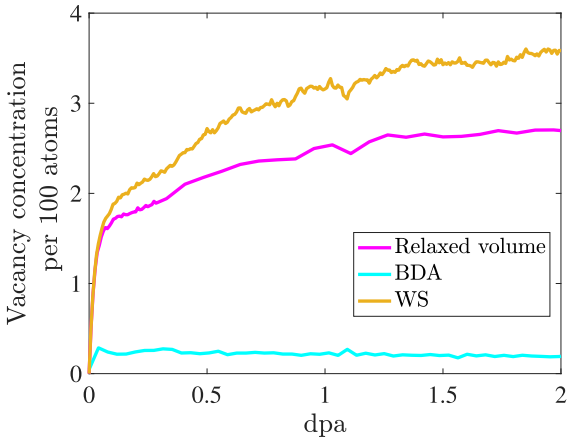


图3. 体心立方铁中空位数量随每原子位移数变化的三种不同估计。由于难以识别缺陷严重材料中的晶格位置，BDA估计值可能不准确。

解释为随着每原子位移数增加，每次有效插入弗伦克尔对所引起的体积变化减少；这与点缺陷相互作用有关。BDA 表现不佳，可能是因为严重的辐射损伤使得在缺乏明确晶格结构的情况下，难以依据局部原子环境特征识别空位。

间隙原子是我们在模拟中最难识别的缺陷类型。非孤立间隙原子可能出现的局部原子构型具有多样性，这意味着基于模板的方法难以实施，甚至可能无法实施；此外，考察穿过晶体材料的表面所包含的预期原子数（伯格斯回路的类似物）也常常会失败，因为构建这类表面存在障碍。在缺乏规范替代方法的情况下，我们采用的方法是构建由Voronoi多面体估算得到的原子体积分布。当间隙原子处于其他方面均为完美晶体的环境中时，间隙原子周围的压缩应力会以特征性的方式减小间隙原子及其周围原子的体积；图4展示了体心立方铁中的一个此类现象示例。我们将模拟中的原子体积分布通过K均值算法分解为多个峰的叠加，每个峰对应孤立间隙原子周围的一种特征原子体积。K均值算法的部分实用性在于，定义峰位置的边界可以从一个时间步到下一个时间步动态更新；随着结构达到更高的缺陷浓度，峰会发生移动并变宽，因此必须进行这种更新。

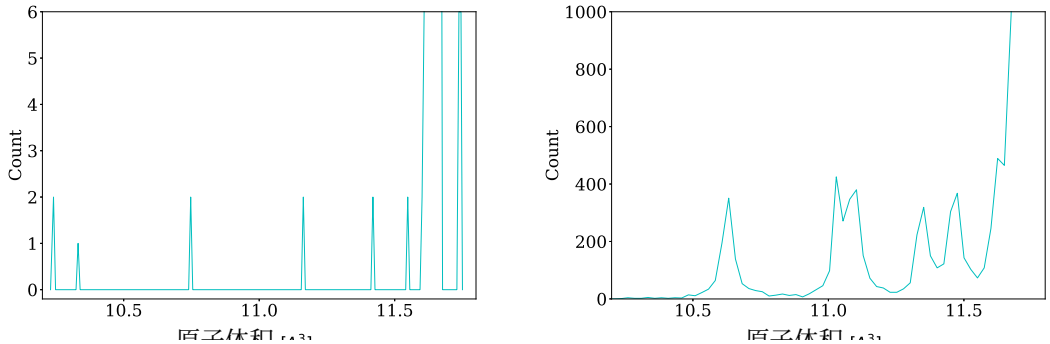


图 4. 通过沃罗诺伊剖分得到的体心立方铁中原子体积分布：（左）孤立间隙原子；（右）0.01 每原子位移数。所有直方图均在分布范围内采用 200 个等宽区间进行统计。孤立间隙原子和 0.01 每原子位移数分布所对应的模拟晶胞分别包含 54 000 个和 128 000 个原子。

将分配给各个峰的原子数与孤立间隙原子对应的原子数进行比较，可以估算模拟中的间隙原子数量，但随着辐射损伤增加、各峰变宽并相互重叠，预计估算精度会降低。

相比之下，面心立方 CrCoNi 和 A 原子体系中的层错（SF）密度相对容易评估。由于属于层错的原子周围的局部原子结构呈密排六方，因此要获得合理的估算，只需统计被分类为 HPC 的原子数（例如，使用 OVITO 的公共邻居分析），并根据晶体结构的几何形状将其换算为等效层错面积。

Warren-Cowley 参数用于量化化学短程有序（SRO）的类型和程度，其定义如下 [52, 53]

$$\alpha_{ij} = 1 - p_{ij}/c_j \tag{1}$$

其中，c_j 是原子类型 j所占的总体比例，p_{ij} 是某原子第一近邻壳层中原子类型为 i 的原子属于类型 j的概率。α_{ij}为正值表示物种 i 和 j 之间存在排斥作用，负值则表示两者之间存在吸引作用。

D. 能量模型

本节建立一个模型，用于将不同类型材料缺陷对总势能变化的能量贡献分解为各部分，并将其表示为每原子位移数的函数。缺陷中储存的势能定义为 $E_{\mathrm{stored}} = E_{\mathrm{pe}} - E_{\mathrm{coh}} - E_{\mathrm{elas}}$，其中 E_{pe} 是总势能， E_{coh} 是参考材料的内聚能， E_{elas} 是弹性应变能。该储存能可建模为各类缺陷贡献之和：

$$E_{\mathrm{fit}} = E_{\mathrm{dis}} + E_{\mathrm{vcy}} + E_{\mathrm{int}} - E_{\mathrm{sro}} \tag{2}$$

其中分别包含位错、空位、间隙原子和化学短程有序贡献项； E_{sro} 的符号反映了短程有序度增加会降低系统能量这一事实。层错对 E_{fit} 的贡献可忽略不计。

弹性各向同性材料中充分发展的位错网络能量可由方程 [54]很好地描述：

$$E_{\mathrm{dis}} = \chi \frac{\mu b^2}{4\pi} \rho \ln\left(\frac{1}{r_c\sqrt{\rho}}\right) \tag{3}$$

其中， μ 为剪切模量， b 为伯格斯矢量， r_c 为位错芯应力场的截断半径， ρ 为位错密度。 r_c 的值近似取为晶格参数 a_0。 χ 是一个用于描述位错整体特征的参数；根据材料和网络的发展情况，其值预计处于区间 $1.0 \leq \chi \leq 1/(1-\nu)$内，其中 ν 为泊松比。计算方程3所需的弹性常数见参考文献 [44, 46], ，模型中使用的材料参数列于表I中。

点缺陷的能量贡献建模如下：

$$E_{\mathrm{vcy}} = \beta e_{\mathrm{vcy}} N_{\mathrm{vcy}} \tag{4}$$

$$E_{\mathrm{int}} = \gamma e_{\mathrm{int}} N_{\mathrm{int}} \tag{5}$$

其中， e_{vcy} 和 e_{int} 分别是通过在其他部分完美的晶体中引入一个空位或间隙原子而得到的孤立空位或间隙原子的形成能。具体而言，在使势能最小化并测量相对于完美晶体的势能变化 ΔE 之后，

表 I. 用于评估位错能的材料性质参数。CrCoNi 和 A原子材料的数值可参见文献 [44, 46]。

	μ [GPa]	b [A]	a_0 [A]	ν
Fe	49.5	2.49	2.87	0.373
CrCoNi	37.0	2.47	3.50	0.414
A原子	43.0	2.47	3.50	0.403

表 II. 孤立点缺陷形成能。

	e_{vcy} [电子伏特]	e_{int} [电子伏特]
Fe	1.71	4.01
CrCoNi	1.49	2.45
A原子	1.62	3.85

孤立点缺陷形成能定义如下:

$$e_{\mathrm{vcy}} = \Delta E_{\mathrm{remove}} + E_{\mathrm{coh}} \tag{6}$$

$$e_{\mathrm{int}} = \Delta E_{\mathrm{add}} - E_{\mathrm{coh}}. \tag{7}$$

这些形成能的数值报告于表II中。 N_{vcy} 和 N_{int} 分别为空位数和间隙原子数，而 β 和 γ 是拟合参数，用于考虑随着每原子位移数增加、点缺陷密度上升时，偏离孤立点缺陷能的情况。

最后， E_{sro} 表示相对于随机固溶体的化学短程有序相关能量，并通过分子静力学计算对 CrCoNi 多主元合金体系进行评估。从初始构型出发，将所有原子的类型随机重新指定为三种组成元素之一，并对结构的势能进行最小化。为考虑统计波动，对每种构型重复该过程五次，并将相对于初始结构的平均势能变化纳入进行拟合的每个每原子位移数对应的模型中。

总体而言，层错的能量贡献可忽略不计；对于 CrCoNi 体系，所有每原子位移数下的平均值仅为 -0.0463 meV/原子。

由此得到的能量模型包含三个可调参数 χ、β 和 γ。要将模型拟合到所涉及的三个系统，首先根据 χ 允许的最小值和最大值，确定位错能的取值范围。随后将位错能固定在下限，并使用最小二乘法求得 β 和 γ 的值，使其在直至 2。0 每原子位移数的整个区间内尽可能减小 E_{stored} 与 E_{fit} 之间的差异。将位错能固定在上限后重复这一过程，即可确定空位项和间隙原子项预测贡献的相应范围。如下文第三节 E 所述，模型误差的最大来源可能是对点缺陷数量 N_{vcy} 和 N_{int} 的估计。

III. 结果与讨论

A. 总能量和压力

弗伦克尔对的不断生成显著提高了模拟系统的势能，尤其是在缺少热驱动点缺陷迁移和复合的情况下。如图5所示，三个系统的能量大致在 0。5 每原子位移数时达到稳态，这表明一种回复机制已被激活，可抵消额外弗伦克尔对导致的能量增加。不过，势能趋于稳定并不意味着微观结构已达到稳态；在 0。5 每原子位移数之后，压力仍缓慢但持续上升，这一现象在图6中的 Fe 系统尤为明显，说明微观结构的至少部分特征仍在演变，直至远高于此的每原子位移数。

结构弛豫过程中保留下来的输入能量可分为局部材料缺陷和整体弹性能——没有原子速度时便不存在动能。弹性能的增加是引入弗伦克尔对的直接结果；将晶体内部的一个原子移至晶体外表面，会使晶体体积增加一个原子体积。尽管如此，模拟是在定容条件下进行的，这意味着只有通过对晶体施加不断增大的压力，才能满足边界条件并维持净体积应变为零。

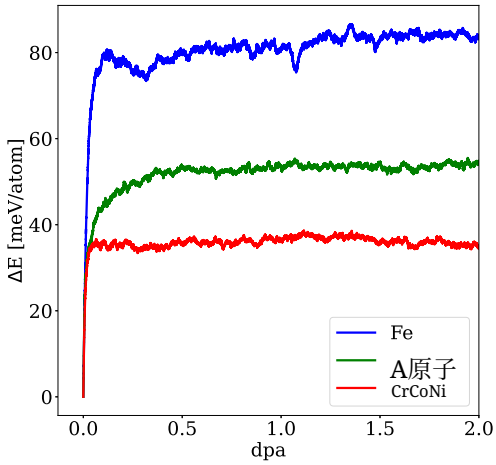


图5. 三种材料体系的模拟晶胞势能随每原子位移数的变化。

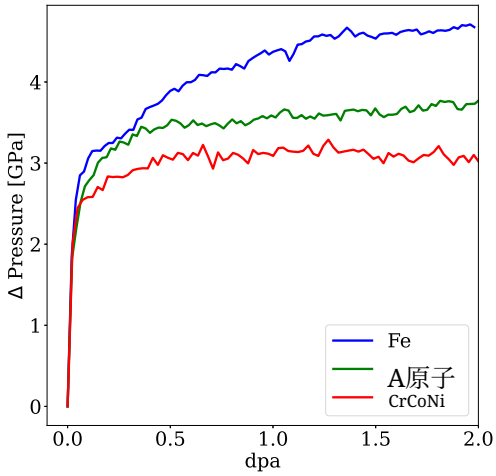


图6. 三种材料体系的模拟晶胞压力随每原子位移数的变化。

弹性能定义为：在零压构型下，对弛豫系统施加弹性功，使其恢复到所需体积。该能量可根据材料的弹性常数以及弛豫构型下系统的体积计算；后者可通过在最小化势能的同时允许模拟盒膨胀来确定。在所有情况下，输入能量中以弹性能形式存在的比例都可以忽略不计：铁、CrCoNi 和 A 原子体系中分别为 3%、0.2% 和 0.3%。因此，输入能量的绝大部分以缺陷形式存在，具体包括位错、间隙原子和空位（第II节D中发现层错的贡献可以忽略不计）。

B. 位错

尽管这三个体系中形成的位错网络明显不同，但三者的位错密度最初都迅速增加，随后回落至稳态值。图7展示了通过 DXA 得到的铁（左）、CrCoNi（中）和 A原子（右）体系在 0.5 每原子位移数（上）和 2.0 每原子位移数（下）时的位错网络；铁和 A原子体系在较高每原子位移数下的网络密度明显更低。图8对位错类型分布随每原子位移数的变化进行了更定量的分析，其中铁系统的位错密度在所有每原子位移数下都明显低于两个面心立方体系。这可以用辐照材料中的主要位错产生机制来解释：孤立的自间隙原子会析出形成间隙原子盘，进而形成位错环；这些位错环不断演化，最终发展成更大的网络。在铁中，这一过程已知会产生更多可动的 $1/2\langle 111\rangle$ 和更少可动的 $\langle 100\rangle$ 位错环，且前者在低温下的数量更多 [55, 56]。 $1/2\langle 111\rangle$ 位错最初是孤立的位错环，但当位错密度和内应力在约 0.8 每原子位移数时达到临界值后，它们似乎具有足够的迁移能力，能够发生迁移并相互反应，从而在形成位错网络的同时降低总体位错密度。

原本预期，CrCoNi 和 A 原子体系中的位错网络会从孤立的外禀弗兰克环开始形成，这些位错环源于间隙原子在 $\{111\}$ 面上的析出。实验已充分证实，这类不可动弗兰克环最终会发生无层错化，形成包含完全位错和肖克利部分位错的可滑移位错网络，但这一过程的确切机制仍在研究之中 [57–59]。图8中出乎意料的是，这种无层错化过程显然从一开始就已发生：即使每原子位移数很低，图8中的肖克利部分位错数量也明显超过其他任何类型的位错。附录 A 中所述规模更大的 CrCoNi 模拟也观察到了类似现象，这表明这并非单纯的有限尺寸效应；图9甚至显示，在辐射损伤的最早阶段，肖克利部分位错环就可能直接形核。虽然外禀弗兰克环的数量确实可测，并且在约 1.0 每原子位移数之前缓慢减少，但肖克利部分位错的数量远在此之前就迅速增长，这强烈表明肖克利部分位错是通过其他机制生成的。要理解辐射最早阶段位错形成机制的具体细节

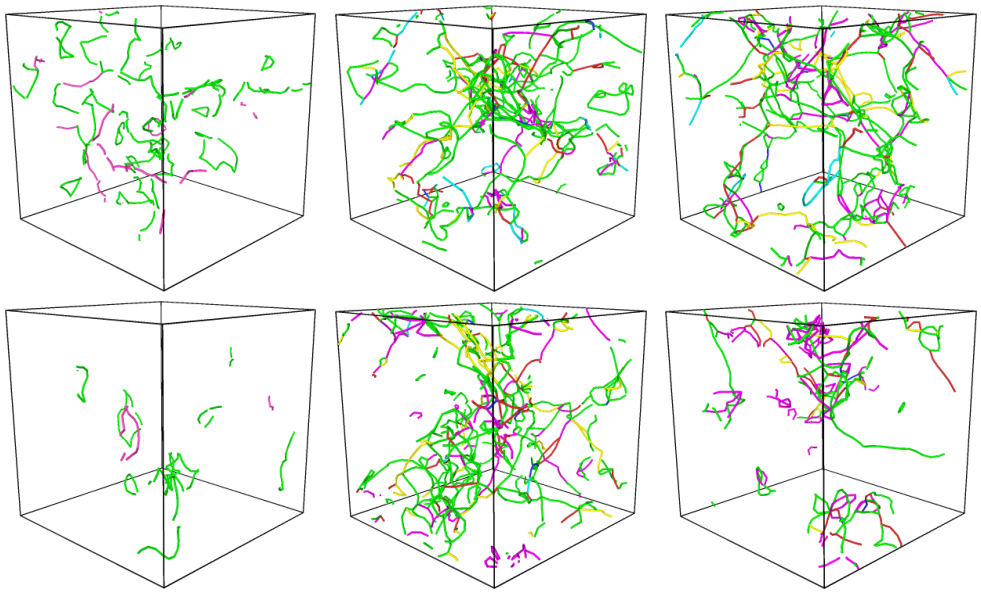


图7. Fe（左）、CrCoNi（中）和 A 原子体系（右）在 0.5 每原子位移数（上）和 2.0 每原子位移数（下）时的位错网络，颜色表示位错类型。对于 Fe 系统，绿色表示1/2⟨111⟩，紫色表示 ⟨100⟩ 位错。对于 CrCoNi 和 A 原子体系，绿色表示 1/6 ⟨112⟩肖克利部分位错，紫色表示 1/6 ⟨110⟩ 阶梯杆位错，黄色表示 1/3 ⟨100⟩ Hirth位错，浅蓝色表示 1/3 ⟨111⟩Frank位错，深蓝色表示 1/2 ⟨110⟩ 完全位错。

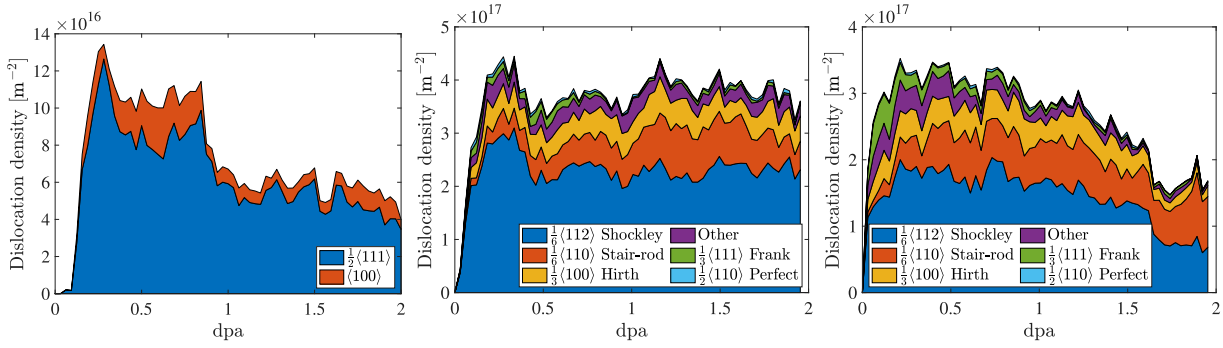


图8. Fe（左）、CrCoNi（中）和 A 原子体系（右）的位错密度和位错类型随每原子位移数的变化。

损伤　还需要开展专门研究，这将留待未来工作。

随着每原子位移数增加，CrCoNi 和 A 原子体系中的不可动阶梯杆位错数量总体上不断增加，这一结果符合主要由 Shockley 部分位错构成的可滑移位错网络逐渐成熟的预期。最后值得注意的是，A 原子体系中的位错网络即使达到 1.6 每原子位移数时，仍在发生显著变化，

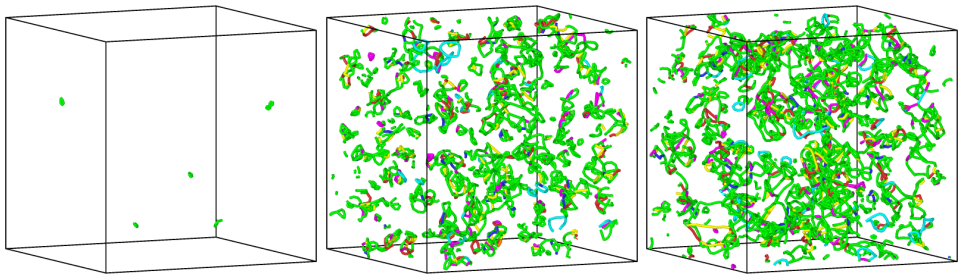


图9. 在0.007（左）、0.01（中）和0.02（右）每原子位移数下，约含一百万个原子的 CrCoNi 体系中的位错网络。绿色为 $1/6\langle 112\rangle$ 肖克利部分位错，紫色为 $1/6\langle 110\rangle$ 阶梯杆位错，黄色为 $1/3\langle 100\rangle$ Hirth位错，浅蓝色为 $1/3\langle 111\rangle$ Frank位错，深蓝色为 $1/2\langle 110\rangle$ 完全位错。

远远超过图5中势能趋于收敛时的 0.5 每原子位移数。尽管位错密度降低了近一半，势能却保持不变，这就要求其他缺陷类型的数量相应增加，这一点将在下文中显得尤为重要。

C. 层错

与预期一致，仅在面心立方 CrCoNi 和 A原子体系中观察到了层错。图10展示了 2.0 每原子位移数下的层错构型，图11报告了层错密度随每原子位移数的变化。这些体系中观察到的极高层错密度，与报告的低层错能数值 [46] 以及图8中较高的部分位错密度相符。有趣的是，在约 0.8 每原子位移数之前，A原子体系的层错密度高于 CrCoNi 体系；但到 2.0 每原子位移数时，情况便发生逆转，A原子体系的层错密度下降了近三倍。这大致与图8中肖克利部分位错密度的下降相关，但两者并非完全吻合。如果层错密度的下降确实是由位错网络的成熟所驱动，那么一个重要的问题是，为什么 CrCoNi 体系中没有观察到肖克利部分位错和层错密度类似的下降。任何解释可能都应涉及化学短程有序，因为（有意设计的）这正是 CrCoNi 与 A原子体系之间的主要差异。可能的机制包括：层错形成后发生的原子重排降低了层错相对于未损伤状态的能量，并提高了消层错势垒；或者局部层错能的波动降低了交滑移的难度，并增加了位错网络的复杂性。

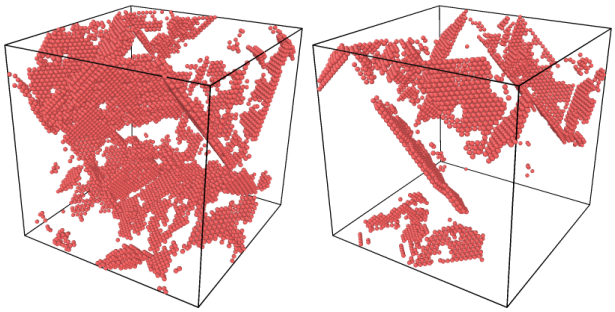


图10. 2.0 每原子位移数时，CrCoNi（左）和 A 原子体系（右）中由局部密排六方配位原子识别出的层错。

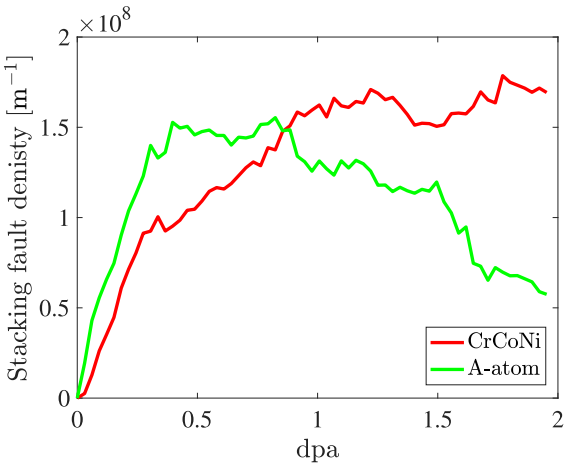


图11. CrCoNi 和 A 原子体系的层错密度随每原子位移数的变化。

这两种机制都可能有助于解释，为什么随着每原子位移数增加，CrCoNi 体系的位错密度不像 A原子体系那样迅速下降。

此处观察到的较高层错密度可能会对辐照 CrCoNi 的力学强度产生重大影响，因为层错可作为位错运动的障碍，从而提高塑性强度。Richie 等人近期利用原位 透射电子显微镜研究了低温条件下的 CrCoNi，并指出，高密度层错和广泛的交滑移可能促成了该合金优异的力学性能 [60]。还有研究认为，层错可通过缓解内应力的累积，降低 CrCoNi 的辐照诱导空洞肿胀 [22]。

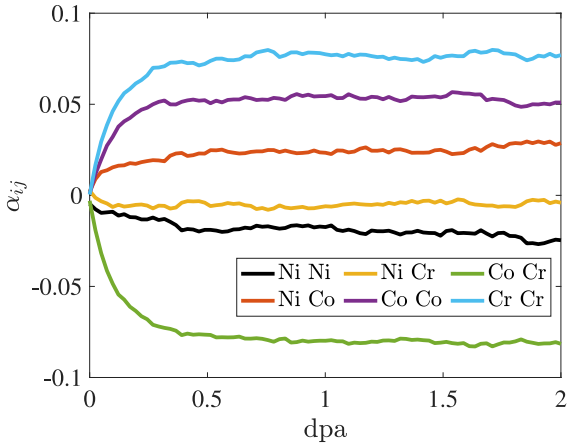


图 12. CrCoNi 系统中 Warren-Cowley 短程有序参数随每原子位移数的变化。

D. 短程有序

以随机固溶体为初始状态的 CrCoNi 体系在 CRA 模拟过程中确实形成了轻微的短程有序。尽管这种有序化在视觉上并不明显，但如图 12 所示的 Warren-Cowley 短程有序参数表明，它在统计上具有显著性。所有 Warren-Cowley 参数均在 0.5 每原子位移数时趋于稳定；其中，Cr 与 Co 成为近邻的可能性增加，而 Cr 和 Co 与其他同种原子成为近邻的可能性均降低。值得注意的是，尽管 CRA 中的原子位移具有无序化作用，这种程度的有序仍然得以形成；而且，这种有序总体上与实验发现 [61] 以及更准确的基于密度泛函理论的蒙特卡洛模拟结果[62]相符。最后，尽管短程有序的程度相对较小，但其对降低体系势能的贡献仍然相当显著；正如下面第三节 E 所述， E_{sro} 的幅度可高达E_{fit}幅度的 30%。

E. 点缺陷与能量平衡

截至目前讨论的结果都涉及位错和层错，即那些有标准鉴定技术、且我们对此普遍有信心的缺陷。点缺陷则并非如此；可以说，文献中尚无能够在高缺陷浓度下可靠发挥作用的鉴定方法（包括本文所用的方法）。本节不仅报告了按第 II 节所述方法计算得出的名义点

缺陷浓度，还强调了这些估算与储存能量之间的不一致。这尤其令人担忧，因为描述点缺陷浓度演化的点缺陷平衡方程，是我们理解辐照材料中损伤发展的基础；[2, 9], 而目前尚不清楚，是否能够通过实验或模拟来评估这些方程中的独立变量。我们由衷希望，未来研究界能够认识到这是一个有待进一步关注的领域。

一种预期是，在低每原子位移数下，空位和间隙原子的浓度应相等，并随位移数线性增加。这是因为弗伦克尔对引入最初会等量地产生两者，而且缺陷密度还不足以发生显著复合。图 13 报告的点缺陷浓度符合这一预期，但随着每原子位移数增加，空位和间隙原子的浓度很快便出现差异，这与文献 [29] 中的 CRA 模拟相同。通常认为，这表明迁移率较高的间隙原子会团簇化形成位错环，或者在达到某个阈值密度后被已有位错环湮灭，而迁移率较低的空位则留在体内。尽管我们的模拟仅考虑了单晶体系，但在更一般的材料中，间隙原子也会迁移到其他类型的汇（例如晶界、相界、空洞）并在那里湮灭。在所有每原子位移数下，铁和 CrCoNi 体系的名义空位浓度相近，且始终比 A 原子体系高 ~50%。不过，WS 方法得出的两个面心立方体系的空位浓度似乎一直增加到 2.0 每原子位移数，这一点值得怀疑，因为如图6所示，这些体系的压力在 0.5 每原子位移数时就已趋于一致；结合下文报告的能量拟合结果，这表明在较高每原子位移数下，WS 方法对面心立方体系空位浓度的高估程度不断增加。令人困惑的是，铁系统似乎并非如此，其空位浓度、压力和能量模型结果彼此一致。这种差异的原因尚不清楚，但凸显了在严重损伤的结构中需要更可靠的空位识别方法（或对空位的构成作出更精确的定义）。

第 IID 节的能量模型 E_{fit} 对三种结构的拟合结果如图 14 所示，拟合参数 β 和 γ 的数值列于表

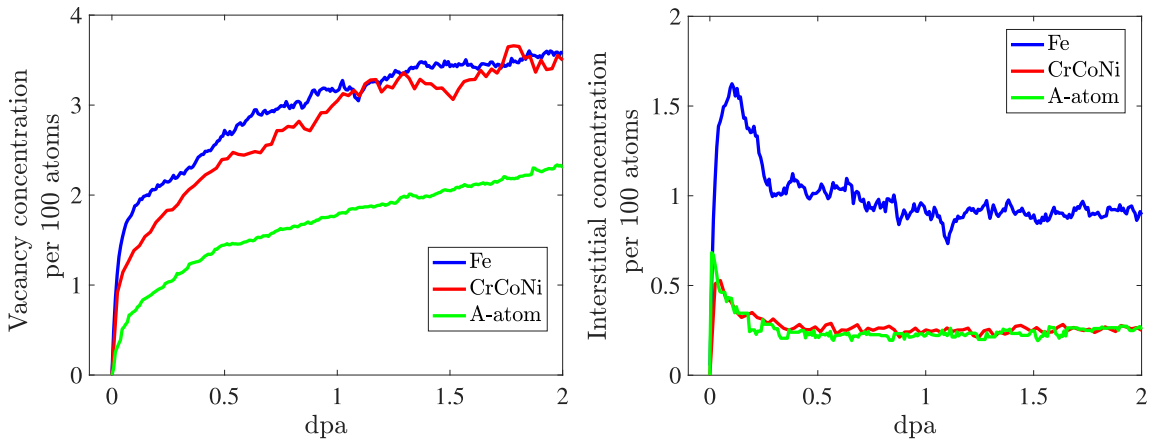


图 13. 三种材料体系中，分别采用 WS 方法和 K均值方法测得的空位和间隙原子浓度随每原子位移数变化的估算结果。

III。该模型对 Fe 系统的拟合效果非常出色，E_{fit} 再现了 E_{stored} 的所有总体趋势以及许多较小的特征。Fe 系统的拟合参数 β 和 γ 在物理上也合理，略低于 1，这正是点缺陷团簇化在能量上有利所必需的。然而，CrCoNi 和 A原子体系并非如此；这两个体系的 E_{fit} 均随每原子位移数持续增加，而不是在 0.5 每原子位移数附近趋于稳定，并且 γ 的数值远高于物理上合理的上限 1.0。尤其是第二个现象表明，间隙原子浓度被严重低估；模型通过提高 γ 的数值，来补偿方程 5 中 N_{int} 数值的不合理偏低。根据 Fe 系统的结果，假设 γ 应为 $\sim$0.9，则在高每原子位移数下，面心立方体系中的间隙原子浓度似乎被低估了二至三倍。尽管体心立方体系和面心立方体系中的稳态间隙原子浓度不一定相当，但图 13 也与面心立方体系中的间隙原子浓度被系统性地低估相同倍数这一判断相符。误差很可能源于面心立方体系中间隙原子与晶格原子的原子体积差异不如体心立方体系显著；在体心立方铁中，间隙原子通常会采取分裂哑铃构型。

如果空位浓度相对准确，且 CrCoNi 和 A 原子体系的间隙原子浓度误差大小相近，那么空位浓度与间隙原子浓度之间的差距将显著更大

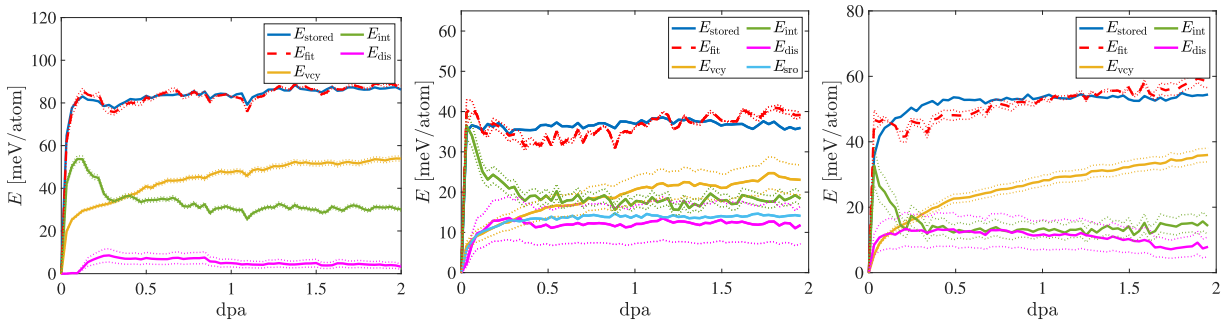


图 14. 第II节D中所述铁（左）、CrCoNi（中）和 A原子（右）系统的储能模型拟合。虚线趋势线是根据位错网络能量的估算界限得出的界限。

表 III. 能量模型拟合得到的参数，用于解释能量偏离孤立缺陷能量的情况。 β 为空位的系数， γ 为间隙原子的系数。

	β	γ
Fe	0.879	0.840
CrCoNi	0.454	2.90
A原子	0.970	1.49

在整个模拟过程中，即使每原子位移数极低，CrCoNi 的这一数值也高于 A 原子体系。若此说法属实，则其对于短程有序和晶格畸变如何影响辐射损伤的发展具有重要意义。根据对点缺陷平衡方程的传统理解， [2, 9], 先前关于 CrCoNi 低温抗辐照性的观察 [23] 意味着，CrCoNi 中空位与间隙原子浓度之间的差距应更小，从而促进点缺陷复合并抑制空位析出。尽管这表面上与我们的结果不一致，但应注意，持续较高的空位浓度并不一定会导致对空洞更易感。具体而言，有证据表明，短程有序和晶格畸变能够增大空位能量阱深度的幅度 [63], ，从而有效减小空位—空位和空位—空洞捕获半径，使空位浓度能够维持在高于 A 原子体系的水平。不过，考虑到空位和间隙原子浓度估算值中明显误差的幅度，目前尚无有力证据

支持这一结论。

关于三个材料体系中观测到的点缺陷浓度差异，还应考虑 CRA 的局限性所带来的其他限制因素。这些模拟未考虑的一个重要因素是碰撞级联伴随的热尖峰。研究发现，与传统合金相比，多主元合金的电子平均自由程更短、热导率更低；有人提出，这可能延长热尖峰持续时间，并增加缺陷复合的程度 [64, 65]。还值得考虑纳米孪晶的潜在影响；实验已观察到，纳米孪晶是 CrCoNi 的一种重要低温强化机制 [60]。虽然 CRA 未诱发任何可见的纳米孪晶，但这可能与模拟晶胞和临界形核事件的相对尺寸有关。纳米孪晶不仅会影响位错网络的演化，在辐照铜中还已显示出能够捕获点缺陷，或促进点缺陷向汇输运的能力 [66]。

IV. 结论

开展 CRA 模拟，研究低温、高剂量率条件下，直至 2.0 每原子位移数时，体心立方铁、面心立方 CrCoNi 和面心立方 A 原子体系中辐照微观结构演变的差异。CrCoNi 体系形成了最高的总体位错密度；即使铁和 A 原子体系中的位错网络逐渐成熟并简化，它仍能维持这一位错密度。CrCoNi 中较高的层错密度，可能与其部分位错密度始终高于其他体系有关。CRA 中连续引入弗伦克尔对，使 CrCoNi 的化学短程有序程度相对于初始随机固溶体略有提高，这与其他建模和实验研究的结果一致。我们建立了材料缺陷储存能模型；模型结果有力表明，根据沃罗诺伊胞体积分布估算的面心立方体系间隙原子浓度，比实际有效浓度低两至三倍。此外，在缺陷浓度较高时，维格纳-塞兹法对面心立方体系空位的识别可能会略微高估空位浓度。不过，对于体心立方铁体系，相同的点缺陷识别方法似乎可靠得多，能量模型也

与模拟结果高度吻合。鉴于点缺陷对辐射损伤演变至关重要，且 CrCoNi 和其他面心立方多主元合金在核应用领域备受关注，我们的结果表明，迫切需要开发更可靠的方法来测量严重受损面心立方材料中的点缺陷浓度，或者重新审视这类材料中点缺陷的定义。

致谢

JCS 衷心感谢美国核管理委员会通过加州大学戴维斯分校的“推进科学职业发展以促进核技术进步”（ASCENT）计划提供部分资助（资助编号：31310019M0009）。本研究部分工作由劳伦斯利弗莫尔国家实验室代表美国能源部在合同 DE-AC52-07NA27344 项下完成。

作者贡献

CS 和 JCS 完成了所有模拟和分析。JKM 确定了项目构想并制定了研究方法。所有作者均参与了论文的撰写、审阅和编辑。

利益冲突

作者声明不存在任何利益冲突。

附录 A：系统尺寸收敛性

如第 II A节所述，为研究系统尺寸的影响，我们对一个包含 1 048 576 个原子的等原子比 CrCoNi 系统进行了模拟，直至 3.0 每原子位移数。图 15（上排）将该系统的行为与包含 131 072 个原子的较小系统的模拟结果（下排）进行了比较。两次模拟的结果非常一致，主要区别在于，较大系统的曲线更平滑，这是因为更多的原子有助于平均掉波动。特别值得注意的是，压力变化和势能变化在相近的每原子位移数下达到相似的渐近值；两个系统中的位错绝大多数都是肖克利部分位错，

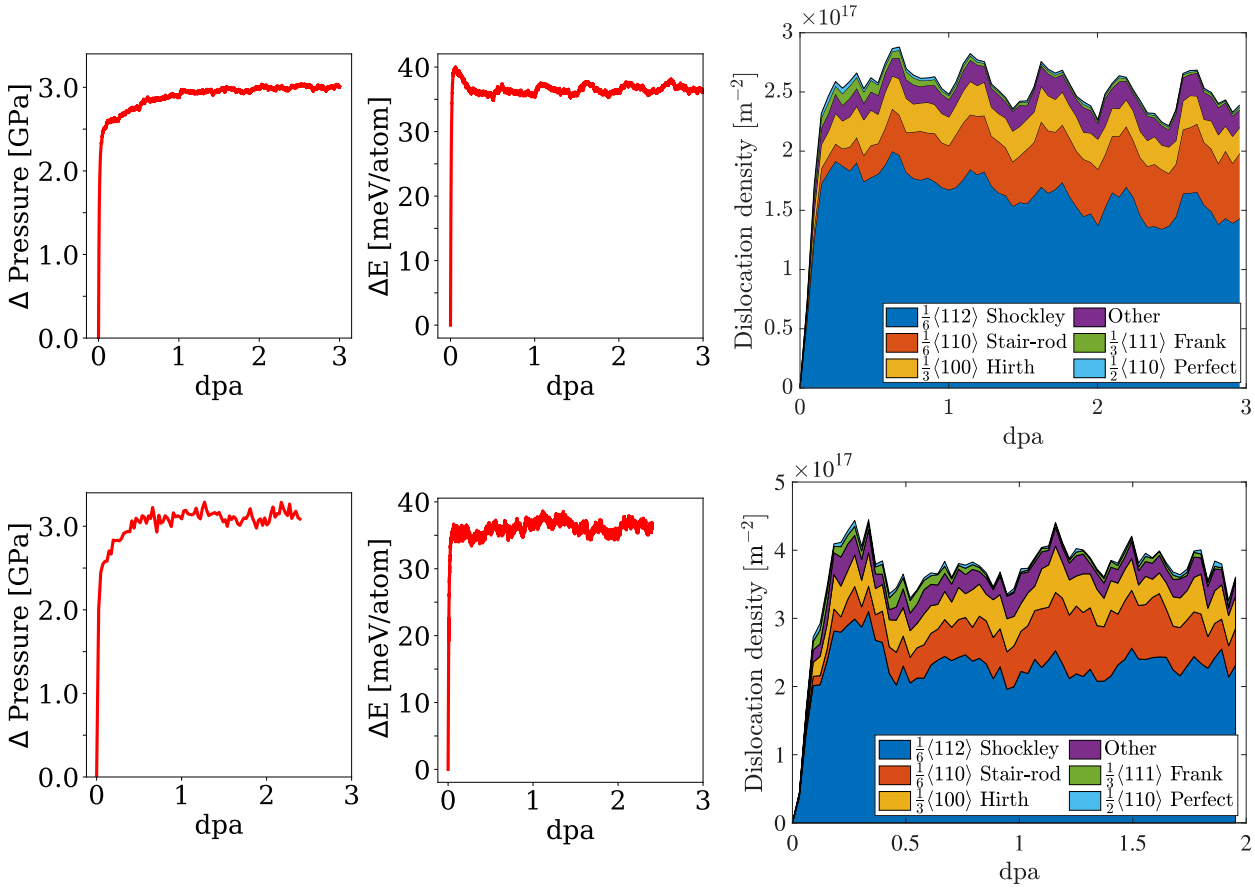


图 15. 等原子比 CrCoNi 两种不同系统尺寸模拟的对比：上排（下排）包含一百万（十万）个原子。对比内容包括压力变化（左）、势能变化（中）和位错密度（右）。

并且从 0.25 每原子位移数到模拟结束，整体位错密度都相对稳定。

---

[1] S. J. Zinkle 和 J. T. Busby, 《今日材料》**12**, 12 (2009).[2] G. S. Was, 《辐射材料科学基础：金属与合金》（施普林格，2016）。[3] 第四代国际论坛, 《第四代核能系统技术路线图》（2002）。[4] 第四代国际论坛, 《GIF 2020 年度报告》（2020）。

[5] K. Nordlund, S. J. Zinkle, A. E. Sand, F. Granberg, R. S. Averback, R. Stoller, T. Suzudo, L. Malerba, F. Banhart, W. J. Weber 等，《自然·通讯》9，1（2018）。[6] K. Nordlund, S. J. Zinkle, A. E. Sand, F. Granberg, R. S. Averback, R. E. Stoller, T. Suzudo, L. Malerba, F. Banhart, W. J. Weber 等，《核材料学报》512，450（2018）。[7] W. Schilling 和 H. Ullmaier，《金属辐射损伤物理》，载于《材料科学与技术》（John Wiley & Sons, Ltd, 2006），第9章，第180–241页。[8] S. J. Zinkle 和 G. Was，《材料学报》61，735（2013）。[9] L. Mansur，《核材料学报》216，97（1994）。[10] A. J. Ardell 和 P. Bellon，《固态与材料科学最新观点》20，115（2016）。[11] T. Anthony，《冶金学报》17，603（1969）。[12] A. Ardell，载于《第四代系统的材料问题》（施普林格，2008），第285–310页。[13] F. Garner, M. Toloczko 和 B. Sencer，《核材料学报》276，123（2000）。[14] S. Taller, G. VanCoevering, B. D. Wirth 和 G. S. Was，《科学报告》11，1（2021）。[15] J. Matthews 和 M. Finnis，《核材料学报》159，257（1988）。[16] B. Cantor, I. Chang, P. Knight 和 A. Vincent，《材料科学与工程：A辑》375，213（2004）。[17] J.-W. Yeh, S.-K. Chen, S.-J. Lin, J.-Y. Gan, T.-S. Chin, T.-T. Shun, C.-H. Tsau 和 S.-Y. Chang，《先进工程材料》6，299（2004）。[18] B. Gludovatz, A. Hohenwarter, D. Catoor, E. H. Chang, E. P. George 和 R. O. Ritchie，《科学》345，1153（2014）。[19] E. P. George, D. Raabe 和 R. O. Ritchie，《自然综述：材料》4，515（2019）。[20] F. Granberg, K. Nordlund, M. W. Ullah, K. Jin, C. Lu, H. Bei, L. Wang, F. Djurabekova, W. Weber 和 Y. Zhang，《物理评论快报》116，135504（2016）。[21] Z. Zhang, D. E. Armstrong 和 P. S. Grant，《材料科学进展》123，100807（2022）。[22] C. Lu, T.-N. Yang, K. Jin, G. Velisa, P. Xiu, Q. Peng, F. Gao, Y. Zhang, H. Bei, W. J. Weber 等，《核材料学报》524，60（2019）。[23] G. Velisa, Z. Fan, M. Crespillo, H. Bei, W. Weber 和 Y. Zhang，《合金与化合物学报》832，154918（2020）。[24] A. E521-16，使用带电粒子辐照研究中子辐射损伤效应的标准实践（2016）。

[25] G. Kinchin 和 R. Pease，《物理学进展报告》18，1（1955）。[26] M. Norgett, M. Robinson 和 I. M. Torrens，《核工程与设计》33，50（1975）。[27] K. Nordlund，《计算材料科学》3，448（1995）。[28] K. M. Beardmore 和 N. Grønbech-Jensen，《物理评论E》57，7278（1998）。[29] P. M. Derlet 和 S. L. Dudarev，《物理评论：材料》4，023605（2020）。[30] E. Chen, C. Deo 和 R. Dingreville，《物理学杂志：凝聚态》32（2019）。[31] J.-P. Crocombette, A. Chartier 和 W. J. Weber，《应用物理快报》88，051912（2006）。[32] V. Belko 和 A. Y. Kuznetsov，《核仪器与方法：物理研究B辑：束流与材料及原子相互作用》248，77（2006）。[33] A. Chartier, T. Yamamoto, K. Yasuda, C. Meis 和 S. Matsumura，《核材料学报》378，188（2008）。[34] A. Chartier, C. Onofri, L. Van Brutzel, C. Sabathier, O. Dorosh 和 J. Jagielski，《应用物理快报》109，181902（2016）。[35] J. Byggm¨astar, F. Granberg 和 K. Nordlund，《核材料学报》508，530（2018）。[36] F. Granberg, J. Byggm¨astar 和 K. Nordlund，《欧洲物理杂志B辑》92，1（2019）。[37] A. Chartier 和 M.-C. Marinica，《材料学报》180，141（2019）。[38] G. Ge, F. Chen, X. Tang, H. Huang, J. Lin, S. Shen 和 J. Gao，《核材料与能源》24，100785（2020）。[39] D. R. Mason, A. Reza, F. Granberg 和 F. Hofmann，《物理评论：材料》5，125407（2021）。[40] D. R. Mason, F. Granberg, M. Boleininger, T. Schwarz-Selinger, K. Nordlund 和 S. L. Dudarev，《物理评论：材料》5，095403（2021）。[41] D. R. Mason, S. Das, P. M. Derlet, S. L. Dudarev, A. J. London, H. Yu, N. W. Phillips, D. Yang, K. Mizohata, R. Xu 等，《物理评论快报》125，225503（2020）。[42] A. P. Thompson, H. M. Aktulga, R. Berger, D. S. Bolintineanu, W. M. Brown, P. S. Crozier, P. J. t. in Veld, A. Kohlmeyer, S. G. Moore, T. D. Nguyen, R. Shan, M. J. Stevens, J. Tranchida, C. Trott 和 S. J. Plimpton，《计算物理通讯》271，108171（2022）。[43] C. Varvenne, A. Luque, W. G. N¨ohring 和 W. A. Curtin，《物理评论B》93，104201（2016）。[44] M. Mendelev, S. Han, D. Srolovitz, G. Ackland, D. Sun 和 M. Asta，《哲学杂志》83，3977（2003）。

[45] Q.-J. Li, H. Sheng, and E. Ma, 《自然·通讯》10, 1 (2019)。[46] W.-R. Jian, Z. Xie, S. Xu, Y. Su, X. Yao, and I. J. Beyerlein, 《材料学报》199, 352 (2020)。[47] A. Chartier, C. Meis, J.-P. Crocombette, W. J. Weber, and L. R. Corrales, Phys. Rev. Lett. 94, 025505 (2005)。[48] S. M. Allen, R. W. Balluffi, and W. C. Carter, 材料动力学（约翰·威立父子出版公司，2005）。[49] S. Zhao, Y. Osetsky, and Y. Zhang, 《材料学报》128, 391 (2017)。[50] A. Stukowski, 材料科学与工程中的建模与仿真 18, 10.1088/0965-0393/18/1/015012 (2010)。[51] J. J. M¨oller and E. Bitzek, 《MethodsX》3, 279 (2016)。[52] J. Cowley, 《物理评论》77, 669 (1950)。[53] F. Walsh, M. Asta, and R. O. Ritchie, 《美国国家科学院院刊》118 (2021)。[54] N. Bertin and W. Cai, 《固体力学与物理学杂志》121, 133 (2018)。[55] J. Marian, B. D. Wirth, and J. M. Perlado, 《物理评论快报》88, 255507 (2002)。[56] K. Arakawa, T. Amino, and H. Mori, 《材料学报》59, 141 (2011)。[57] D. Gelles, 载于《物理系统的位错建模》（爱思唯尔，1981），第158–162页。[58] D. Rodney, 《材料学报》52, 607 (2004)。[59] T. Kadoyoshi, H. Kaburaki, F. Shimizu, H. Kimizuka, S. Jitsukawa, and J. Li, 《材料学报》55, 3073 (2007)。[60] Q. Ding, X. Fu, D. Chen, H. Bei, B. Gludovatz, J. Li, Z. Zhang, E. P. George, Q. Yu, T. Zhu, et al., 《今日材料》25, 21 (2019)。[61] F. Zhang, S. Zhao, K. Jin, H. Xue, G. Velisa, H. Bei, R.Huang, J.Ko, D.Pagan, J.Neuefeind, et al., 《物理评论快报》118, 205501 (2017)。[62] J. Ding, Q. Yu, M. Asta, and R. O. Ritchie, 《美国国家科学院院刊》115, 8919 (2018)。[63] S. L. Thomas and S. Patala, 《材料学报》196, 144 (2020)。[64] Y. Zhang, G. M. Stocks, K. Jin, C. Lu, H. Bei, B. C. Sales, L. Wang, L. K. B´eland, R. E. Stoller, G. D. Samolyuk, et al., 《自然·通讯》6, 1 (2015)。[65] Y. Zhang, Y. N. Osetsky, and W. J. Weber, 《化学评论》122, 789 (2021)。

[66] Y. Chen, K. Y. Yu, Y. Liu, S. Shao, H. Wang, M. Kirk, J. Wang, and X. Zhang, 《自然·通讯》**6**,1 (2015)。