



شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای بررسی کوتاه مدت و مونت کارلوی جنبشی برای بررسی بلند مدت آسیب تابش در آهن-آلفا

سید مهرداد زمزمیان^{۱*}، سید امیرحسین فقهی^۱، محمد صمدفام^۲

۱. گروه کاربرد پرتوها، دانشکده مهندسی هسته‌ای، دانشگاه شهید بهشتی، صندوق پستی: ۱۹۸۳۹۶۹۴۱۱، تهران-ایران

۲. گروه مهندسی هسته‌ای، دانشکده مهندسی انرژی، دانشگاه صنعتی شریف، صندوق پستی: ۱۴۵۸۸۸۹۶۹۴، تهران-ایران

*Email: mehrdad.zamzamian@gmail.com

مقاله پژوهشی

تاریخ دریافت مقاله: ۱۴۰۰/۷/۱۲ تاریخ پذیرش مقاله: ۱۴۰۰/۸/۲۳

چکیده

به کمک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی می‌توان تحلیل کوتاه مدت در مقیاس زمانی چند ده پیکوثانیه‌ای را برای مواد آسیب دیده تابشی مورد مطالعه قرار داد. بر همین مبنا به کمک این شبیه‌سازی، تعداد تعادلی عیوب نقطه‌ای بین‌نشین و تهی‌جای و مختصات مکانی آن‌ها در آهن-آلفا به دست آورده شد. سپس با استفاده از نتایج حاصل شده، شبیه‌سازی مونت کارلوی جنبشی شیء به منظور بررسی تأثیر بازپخت آهن-آلفای آسیب دیده تابشی انجام شد. نتایج شبیه‌سازی نشان دادند که در بازپخت یکنواخت آهن-آلفای آسیب دیده تابشی تنها عیوب خوشه‌ای تهی‌جای بزرگ‌تر از ۴ تهی‌جای و $\langle 111 \rangle$ تا دماهایی بالاتر از دمای اتاق پایدار باقی می‌مانند.

کلیدواژه‌ها: شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، شبیه‌سازی مونت کارلوی جنبشی شیء، آهن-آلفا، بین‌نشین، تهی‌جای

Molecular dynamics simulations for short-term investigation and kinetic Monte Carlo for long-term investigation of radiation damage in alpha-iron

S.M. Zamzamian^{1,2}, S.A.H. Feghhi¹, M. Samadfam²

1. Department of Radiation Application, Faculty of Nuclear Engineering, Shahid Beheshti University, P.O.BOX: 1983969411 Tehran, Iran
2. Department of Nuclear Engineering, Faculty of Energy Engineering, Sharif University of Technology, P.O.BOX: 1458889694 Tehran, Iran

Research Article

Received 4.10.2021, Accepted 14.11.2021

Abstract

Using molecular dynamics simulations, short-term analysis on a time scale of several tens of picoseconds of displacement cascade in radiation-damaged materials was studied. Accordingly, this simulation obtained the equilibrium number of interstitial/vacancy defects and their positions in iron-alpha. Then, the object kinetic Monte Carlo (OKMC) simulations were performed using the obtained results to investigate the effect of annealing on the irradiated alpha-iron. The simulation results showed that in the isochronal annealing of the irradiated alpha-iron, only vacancy cluster defects were more significant than four vacancies, and $\langle 111 \rangle$ defects remained stable at temperatures above room temperature.

Keywords: Molecular dynamics simulation, Object kinetic Monte Carlo simulation, Alpha-iron, Interstitial, Vacancy



۱. مقدمه

تغییراتی که به علت تابش‌های یونیزانی مثل نوترون‌ها و پرتوهای گامای پرنرژی در مواد مختلف به ویژه فلزات که مواد ساختاری بسیاری از تجهیزات کاربردی هستند ایجاد می‌شود بسیار قابل توجه هستند [۱]. از جمله مهم‌ترین مواد مورد استفاده در بسیاری از تجهیزات تحت تابش (مانند محفظه‌ی تحت فشار رآکتور) فولاد بر پایه‌ی آهن-آلفا است. از این‌رو مطالعه‌ی آسیب ناشی از تابش بر این ماده به منظور بررسی میزان تشکیل عیوب و نحوه برهم‌کنش آن‌ها به منظور رهنمون شدن به روش‌هایی به منظور افزایش مقاومت در برابر تابش از اهمیت بسزایی برخوردار است.

اولین رویداد ناشی از این تابش‌ها در قالب انتقال انرژی از یک ذره‌ی فرودی به اتمی از ماده و در نتیجه تولید یک اتم ضربه خورده‌ی اولیه^۱ (PKA) است. این اتم سپس از جایگاه خود خارج شده و ایجاد اتم‌های جابه‌جا شده بیش‌تری در قالب یک آبشار جابه‌جایی می‌کند. در نهایت پس از توقف کامل این اتم‌های اولیه و ثانوی و برقراری تعادل، مجموعه‌ای از عیوب نقطه‌ای به صورت بین‌نشین^۲ و تهی‌جای^۳ در ماده‌ی مزبور به وجود می‌آیند [۲]. حضور این عیوب می‌تواند بسیاری از خواص فیزیکی و مکانیکی ماده را دستخوش تغییر قرار دهد [۳]. به‌علاوه، از مهاجرت این عیوب می‌تواند حجمه‌ی متمرکزی از آن‌ها پدید آید که در نهایت ممکن است منجر به تورم یا ایجاد ترک در آن ماده شود [۴]. از آن‌جایی که مقیاس زمانی وقوع این آسیب‌ها پس از انتقال انرژی از ذره‌ی فرودی تا به برقراری تعادل در حد تنها چند ده پیکو ثانیه در مقیاس ابعادی چند ده انگستریم است، بررسی کوتاه مدت این پدیده‌ها به صورت تجربی عملاً غیرممکن است [۵]. از طرفی، بررسی بلندمدت این پدیده‌ها که به مهاجرت و نفوذ عیوب نقطه‌ای در مقیاس زمانی بزرگ‌تر از ثانیه برای مطالعه‌ی تغییرات درشت مقیاس^۴ می‌پردازد، به دلیل نیاز به صرف زمانی بس طولانی برای مطالعه‌ی آثاری مانند تورم بسیار پرهزینه است و بررسی‌های تجربی در این زمینه عموماً به نمونه‌های شاهد در رآکتورهای هسته‌ای خلاصه می‌شود [۶]. از این‌رو، شبیه‌سازی‌های دینامیک مولکولی و مونت کارلوی جنبشی شی^۵ می‌توانند ابزارهایی سودمند برای بررسی این آثار باشند.

۲. روش کار

۱.۲ شبیه‌سازی دینامیک مولکولی (MD)

در شبیه‌سازی دینامیک مولکولی از کد لمپس [۷] به‌همراه پتانسیل بین اتمی توسعه یافته بوسیله‌ی مندلف^۶ و همکارانش برای آهن-آلفا [۸] استفاده شد. مشخص شده است که می‌توان از این پتانسیل به منظور مطالعه‌ی آسیب تابش بهره برد [۹]. شرایط مرزی در هر سه بعد سلول شبیه‌سازی، تناوبی در نظر گرفته شد. اندازه سلول به قدر کافی بزرگ در نظر گرفته شد تا از تداخل آبشار جابه‌جایی با مرزها جلوگیری شود. به منظور واهلش^۷ شبکه بلوری، در ابتدا از ترموستات لانژون^۸ به همراه هنگرد میکروکانونی (NVE) به مدت ۲ پیکوثانیه به منظور بالا بردن و تنظیم با ثبات دما تا ۳۰۰ کلوین استفاده شد. سپس به مدت ۲۰ پیکوثانیه سیستم با استفاده از هنگرد دما ثابت (NVT) واهلش حرارتی شد. گام‌های زمانی در تمامی این فرایندها ۰/۱ فمتوثانیه در نظر گرفته شده بود. ایجاد آبشار جابه‌جایی به‌وسیله‌ی اختصاص انرژی اولیه‌ی ۱، ۳ و ۷ keV هر کدام در ده جهت تصادفی مختلف به یکی از اتم‌های آهن واقع در مرکز سلول شبیه‌سازی به عنوان اتم ضربه خورده‌ی اولیه صورت گرفت و در نهایت تعداد تعادلی عیوب نقطه‌ای و محل فضایی آن‌ها در سلول شبیه‌سازی پس از گذر زمان ۳۰ پیکوثانیه به دست آورده شد.

۲.۲ شبیه‌سازی مونت کارلوی جنبشی شی (OKMC)

در یک شبیه‌سازی دینامیک مولکولی حالت‌های متوالی سیستم با هم ارتباط زمانی دارند به طوری که هر حالت (موقعیت و اندازه حرکت اتم‌ها) به حالت‌های قبل از خود وابسته است. اما در شبیه‌سازی مونت کارلو گذار از این حالت‌ها به صورت مارکوف است، یعنی نرخ‌های گذار r_{ij} تنها به حالت ابتدایی i و حالت نهایی j وابسته است و به حالت‌های قبل‌تر بستگی ندارد. این گذارها به عنوان داده‌های ورودی الگوریتم مونت کارلو هستند که ما می‌توانیم آن‌ها را از قانون آرنیوس ذیل به دست آوریم:

$$r_{ij} = p_{ij} \times \exp(-E_{ij} / k_B T) \quad (1)$$

که E_{ij} انرژی فعال‌سازی، k_B ثابت بولتزمن، T دما برحسب کلوین و P_{ij} پیش ضریب است. مقادیر این پارامترها برای آهن-

1. Primary Knock-on Atom
2. Interstitial
3. Vacancy
4. Macroscopic
5. Object Kinetic Monte Carlo

6. Mendelev

7. Relaxation

8. Langevin Thermostat



الی ۴ برابر تعداد حاصل از رابطه‌ی نارگت و همکاران است. بدین ترتیب می‌توان ادعان داشت که رابطه‌ی نارگت و همکاران تعداد عیوب را بیش از حد تخمین می‌زند و این نتیجه در تطابق با نتایج دیگر محققان است (برای مثال [۱۵]). از طرفی، کالدر و همکاران [۱۶] نیز به وسیله‌ی شبیه‌سازی دینامیک مولکولی عیوب زوج فرنکل به تعداد ۴٫۶، ۱۰ و ۱۸٫۳ را به ترتیب برای PKAهایی با انرژی‌های ۱، ۳ و ۷ keV گزارش داده‌اند که سازگاری بسیار خوبی با نتایج ما دارد. برای مشاهده‌ی وضعیت تشکیل آبشار جابه‌جایی، شکل ۱ نمونه‌ای از سیر تکاملی آبشار آسیب تا رسیدن به واهلش نهایی برای آبشار ناشی از PKA با انرژی ۷ keV را نشان می‌دهد. کره‌های آبی رنگ در این شکل بیانگر تهی‌جای‌ها و کره‌های قرمز رنگ بیانگر بین‌نشین‌ها هستند. از این شکل نمایان است که بین‌نشین‌ها حرکت آزادانه‌تری نسبت به تهی‌جای‌ها دارند و بنابراین باید انرژی مهاجرت کوچک‌تری را دارا باشند. برای تحلیل بیشتر این موضوع باید مختصات مکانی کل عیوب تشکیل شده در شبیه‌سازی‌ها را مورد ارزیابی قرار دهیم. در شکل ۲، نمودار کانتور پراکندگی عیوب نقطه‌ای بین‌نشین و تهی‌جای حاصل از آبشار جابه‌جایی تولید شده از PKAهایی با انرژی‌های ۱، ۳ و ۷ keV به تصویر کشیده شده است. همان‌طور که مشخص است، با افزایش انرژی PKA گستره‌ی پراکندگی عیوب نقطه‌ای نیز بزرگ‌تر می‌شود. هم‌چنین با توجه به شکل ۲ مشاهده می‌شود که میزان پراکندگی بین‌نشین‌ها بیش‌تر از تهی‌جای‌ها است. علت این امر انرژی مهاجرت کوچک‌تر بین‌نشین‌ها نسبت به تهی‌جای‌ها است که به ترتیب ۰٫۳۱ eV و ۰٫۶۴ eV است [۱۷]. این باعث می‌شود که بین‌نشین‌ها آزادانه‌تر و راحت‌تر در ماده طی مسیر کنند و بنابراین گستره‌ی پراکندگی آن‌ها وسیع‌تر باشد. این باعث می‌شود تا تهی‌جای‌ها تشکیل خوشه‌هایی با اندازه‌های بزرگ‌تری نسبت به بین‌نشین‌ها بدهند (همان‌طور که در شکل ۱ نیز می‌توان دید).

پس از به دست آمدن تعداد نهایی عیوب نقطه‌ای حاصل از PKAهایی با انرژی‌های ۱، ۳ و ۷ keV و موقعیت آن‌ها در سلول شبیه‌سازی، از این نتایج در شبیه‌سازی مونت کارلوی جنبشی شی به منظور بررسی تأثیر بازپخت یکنواخت^۳ آهن-آلفا بر بازترکیب عیوب نقطه‌ای تنها و تشکیل خوشه‌های عیوب نقطه‌ای و خوشه‌های بین‌نشین <۱۱۱> استفاده شد.

آلفا برای حالت‌های مختلف عیوب توسط بیورکاس^۱ و همکارانش [۱۰] گزارش شده است که در این پژوهش از این مقادیر استفاده شده است. حال به منظور سادگی، با صرف‌نظر از حالت‌های ابتدایی پیکربندی‌ها، می‌توان الگوریتمی به ترتیب زیر را برای این روش داشت:

۱. تعیین مختصات اولیه‌ی شی‌ها (عیوب) و به دست آوردن تابع جمع‌ی ذیل:

$$R_{ij} = \sum_{j=1}^i r_j \quad (2)$$

برای نهایی از ۱ تا N، که N تعداد کل گذارها در سیستم مورد نظر است.

۲. تولید دو عدد تصادفی واقع در بازه از ۰ تا ۱ برای s و t .

۳. پیدا کردن رویداد i که در آن این شرط برقرار است:

$$R_{i-1} < rR_N \leq R_i$$

۴. در رویداد i ، شی از حالت i به حالت j می‌رود.

۵. افزایش زمان کل شبیه‌سازی به مقدار:

$$\Delta t = \frac{\ln(1/s)}{R_N} \quad (3)$$

۶. محاسبه‌ی مجدد نرخ‌های گذار درگیر در این تغییر.

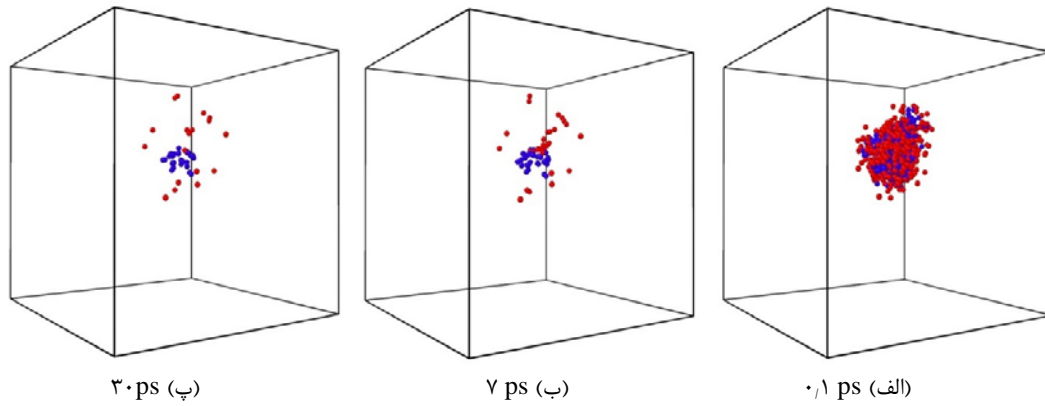
۷. بازگشت به پله‌ی اول تا زمانی که زمان فیزیکی مورد نیاز در شبیه‌سازی به اتمام برسد.

شبیه‌سازی مونت کارلوی جنبشی شی روشی مرسوم و قابل اعتبار برای مطالعه‌ی آسیب تابش در مقیاس زمانی بلند مدت است [۱۱، ۱۲].

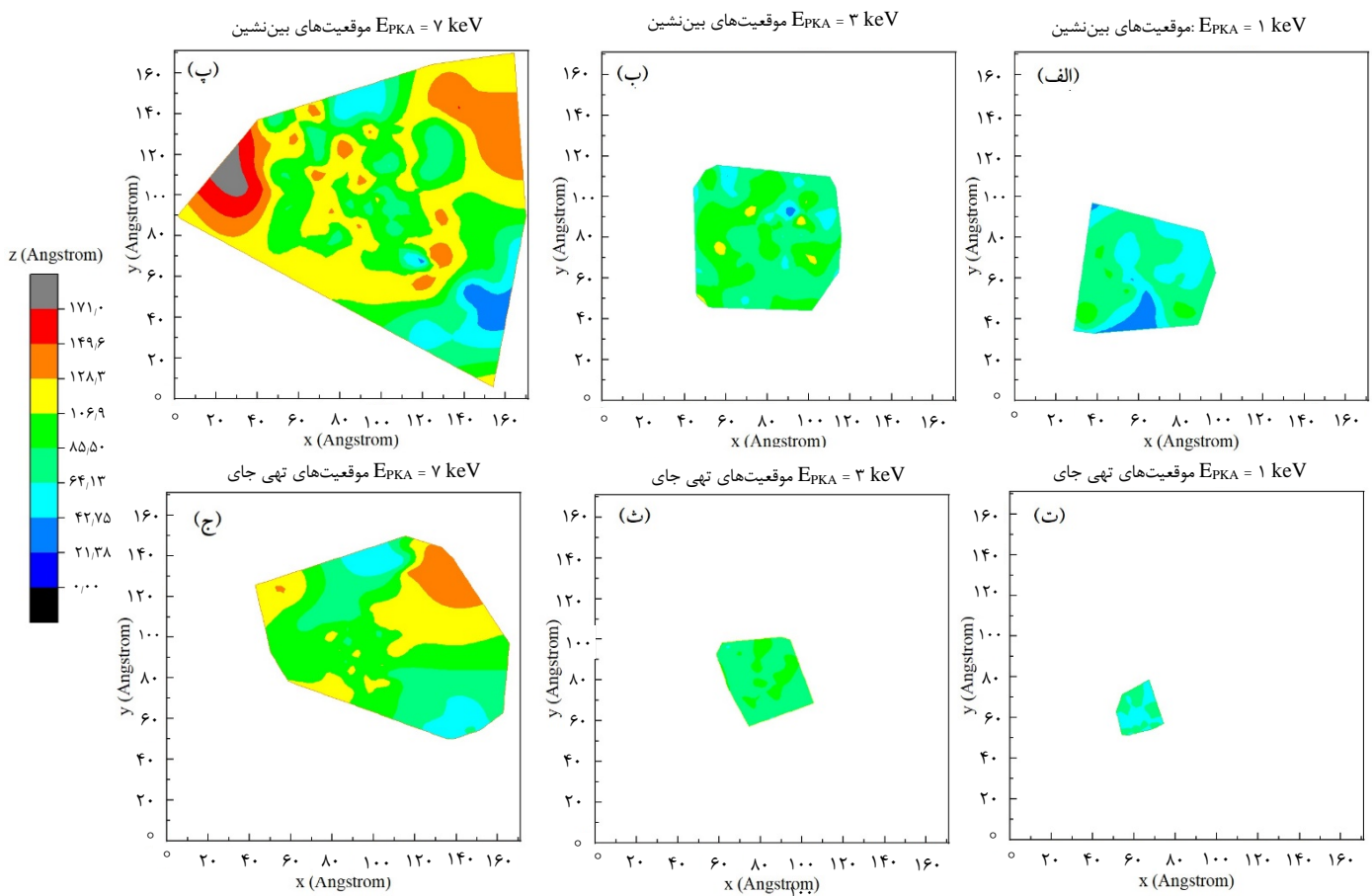
۳. نتایج و بحث

نارگت و همکاران [۱۳] رابطه‌ی $N_F = 0.78 E_{PKA} / 2E_d$ (که E_d در این رابطه انرژی جابه‌جایی است و تقریباً برابر با ۴۰ eV [۱۴] است) را برای تخمین عیوب پیشنهاد داده‌اند. با توجه به نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، آنچه که برای تعداد زوج‌های فرنکل^۲ باقی‌مانده پس از سپری شدن ۳۰ پیکوثانیه زمان واهلش بعد از ایجاد آبشار جابه‌جایی به دست آمد برای PKAهایی با انرژی‌های ۱، ۳ و ۷ keV به ترتیب 5.9 ± 1.95 ، 9.29 ± 2.46 و 18.25 ± 4.87 بود. این تعداد عیوب در حدود ۲





شکل ۱. سیر تکاملی آبشار آسیب ناشی از PKA با انرژی ۷ keV در سه نقطه‌ی زمانی (الف) ۰٫۱ ps، (ب) ۷ ps و (پ) ۳۰ ps پس از آسیب. قرمزها: بین‌نشین، آبی‌ها: تهی‌جای.

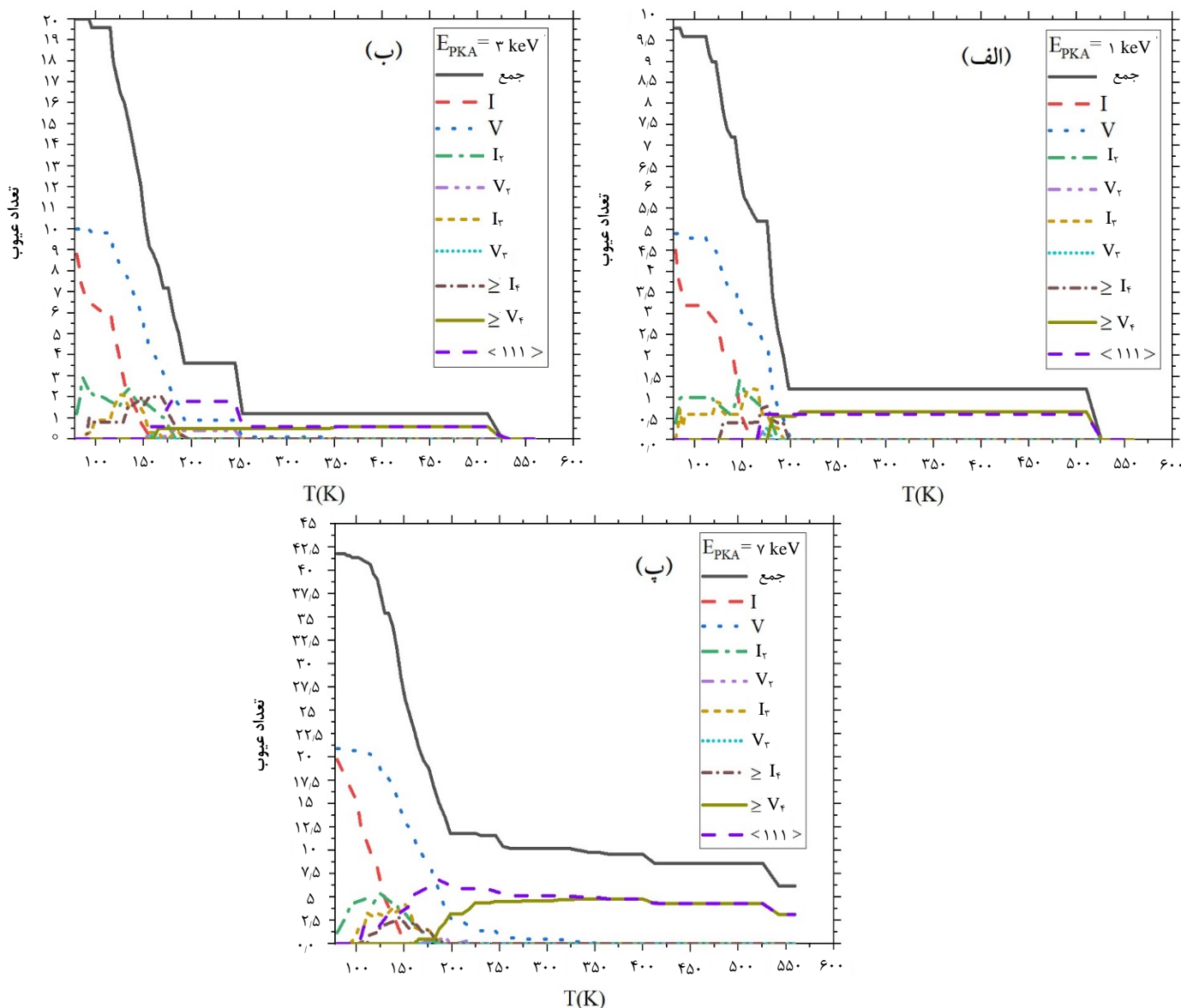


شکل ۲. نمودار کانتور پراکندگی عیوب نقطه‌ای بین‌نشین و تهی‌جای حاصل از آبشار جابه‌جایی تولید شده از PKAهایی با انرژی‌های ۱، ۳ و ۷ keV هر کدام در ۱۰ جهت تصادفی مختلف.

باز ترکیب می‌شود. عموم خوشه‌های عیوب تشکیل شده نهایتاً تا دمای اتاق باقی می‌مانند و فراتر از این دما تنها خوشه‌های تهی‌جای برابر یا بزرگ‌تر از ۴ تهی‌جای و خوشه‌های بین‌نشین <۱۱۱> پایدار باقی می‌مانند.

شکل ۳ تعداد این عیوب را بر حسب دمای بازپخت (کلوین) برای سه PKA (الف) ۱ keV، (ب) ۳ keV و (پ) ۷ keV نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، تعداد کل آسیب‌ها عموماً در دمای بازپخت ۲۰۰ کلوین دچار افت شدیدی ناشی از





شکل ۳. بازپخت یکنواخت آهن-آلفای آسیب دیده از PKAهایی با انرژی‌های ۱، ۳ و ۷ keV.

۴. نتیجه‌گیری

به منظور مطالعه‌ی میزان آسیب ناشی از تابش در آهن-آلفا در مقیاس زمانی کوتاه مدت، از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی استفاده شد. در این راستا، نتایج شبیه‌سازی حاکی از آن بودند که تعداد زوج‌های فرنکل باقی‌مانده پس از گذر زمان ۳۰ پیکوثانیه از وقوع آبشار جابه‌جایی برای PKA هایی با انرژی‌های ۱، ۳ و ۷ keV به ترتیب $۵/۹ \pm ۱/۹۵$ ، $۹/۲۹ \pm ۲/۴۶$ و $۱۸/۲۵ \pm ۴/۸۷$ هستند. از این نتایج و محل فضایی این عیوب در سلول شبیه‌سازی آهن-آلفا برای شبیه‌سازی مونت کارلوی جنبشی شی به منظور بررسی تأثیر بازپخت یکنواخت آهن-آلفا بر بازترکیب عیوب نقطه‌ای تنها و تشکیل خوشه‌های عیوب نقطه‌ای و خوشه‌های بین‌نشین <111> استفاده شد. مشاهده

شد که تمامی عیوب غیر از عیوب خوشه‌ای تهی‌جای بزرگ‌تر یا مساوی ۴ تهی‌جای و <111> تا دماهایی فراتر از دمای اتاق پایدار باقی می‌مانند که این پایداری به انرژی PKA بستگی دارد. این عیوب برای PKAهایی با انرژی‌های ۱ و ۳ keV نهایتاً تا حدوداً ۵۲۰ کلوین و برای PKAهایی با انرژی ۷ keV تا فراتر از این دما پایدار باقی می‌مانند.



1. G.S. Was, *Fundamentals of Radiation Materials Science, Metals and Alloys*, Springer (2007).
2. S.M. Zamzamin, et al., *Atomistic simulation of the effect of carbon content and carbon-rich region on irradiation response of α -Fe on picosecond timescale*, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res.*, B **443**, 70-78 (2019).
3. K.L. Murty, I. Charit, *An introduction to nuclear materials: fundamentals and applications*, *John Wiley & Sons* (2013).
4. T. Toyama, et al., *Effects of neutron flux on irradiation-induced hardening and defects in RPV steels studied by positron annihilation spectroscopy*, *J. Nucl. Mater.*, **532**, 152041 (2020).
5. D.J. Bacon, et al., *MD description of damage production in displacement cascades in copper and α -iron*, *J. Nucl. Mater.*, **323(2-3)**, 152-162 (2003).
6. ASTM E185-10, *Standard Practice for Design of Surveillance Programs for Light-Water Moderated Nuclear Power Reactor Vessels*, *ASTM International, West Conshohocken*, (2010).
7. S. Plimpton, *Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics*, *J. Comput. Phys.*, **117(1)**, 1-19 (1995).
8. M. Mendeleev, et al., *Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron*, *Philos. Mag.*, **83(35)**, 3977-3994 (2003).
9. K. Nordlund, J. Wallenius, L. Malerba, *Molecular dynamics simulations of threshold displacement energies in Fe*, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res.*, B **246(2)**, 322-332 (2006).
10. C. Björkas, K. Nordlund, M.J. Caturla, *Influence of the picosecond defect distribution on damage accumulation in irradiated α -Fe*, *Phys. Rev.*, B **85(2)** (2012).
11. V. Jansson, L. Malerba, *OKMC simulations of Fe-C systems under irradiation: Sensitivity studies*, *J. Nucl. Mater.*, **452(1)**, 118-124 (2014).
12. C. Domain, C.S. Becquart, L. Malerba, *Simulation of radiation damage in Fe alloys: an object kinetic Monte Carlo approach*, *J. Nucl. Mater.*, **335(1)**, 121-145 (2004).
13. M. Norgett, M. Robinson, I. Torrens, *A proposed method of calculating displacement dose rates*, *Nucl. Eng. Des.*, **33(1)**, 50-54 (1975).
14. S. Miyashiro, S. Fujita, T. Okita, *MD simulations to evaluate the influence of applied normal stress or deformation on defect production rate and size distribution of clusters in cascade process for pure Cu*, *J. Nucl. Mater.*, **415(1)**, 1-4 (2011).
15. R.E. Stoller, *Primary radiation damage formation*, *Comprehensive Nuclear Materials*, **1**, (2012).
16. A.F. Calder, et al., *Computer simulation of cascade damage in α -iron with carbon in solution*, *J. Nucl. Mater.*, **382(2-3)**, 91-95 (2008).
17. K. Nakashima, R.E. Stoller, H. Xu, *Recombination radius of a Frenkel pair and capture radius of a self-interstitial atom by vacancy clusters in bcc Fe*, *J. Condens. Matter Phys.*, **27(33)**, 335401 (2015).

COPYRIGHTS

©2021 The author(s). This is an open access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution (CC BY 4.0), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, as long as the original authors and source are cited. No permission is required from the authors or the publishers.



استناد به این مقاله

سید مهرداد زمزمیان، سید امیرحسین فقهی، محمد صمدفام (۱۴۰۲)، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای بررسی کوتاه مدت و مونت کارلوی جنبشی برای بررسی بلند مدت آسیب تابش در آهن-آلفا، ۱۰۳، ۱۳۰-۱۳۵

DOI: [10.24200/nst.2022.1658](https://doi.org/10.24200/nst.2022.1658)

Url: https://jonsat.nstri.ir/article_1521.html

