

辐照硬化位错动力学模拟的研究进展

吴恺韬, 史佳庆, 刘桂森, 沈耀*

(上海交通大学 材料科学与工程学院, 上海 200240)

摘要:辐照硬化是金属材料的辐照效应之一,开展辐照硬化机理研究有助于设计可靠的反应堆结构材料。辐照产生的缺陷会对位错运动造成阻碍,被认为是辐照硬化的主要原因。近年来快速发展的位错动力学模拟方法为材料的微观组织变化和宏观力学性能之间建立起了桥梁,被广泛用于辐照硬化机理研究。对于一些辐照缺陷如位错环和层错四面体,位错动力学软件已能模拟它们对位错网络演化以及宏观力学响应的影响,使辐照硬化的定量预测成为可能。本文从位错动力学模型、不同类型辐照缺陷硬化效应的位错动力学模拟以及辐照硬化理论模型发展三个方面,综述了辐照硬化位错动力学模拟的研究进展,并展望该研究领域的主要科学问题。

关键词:金属材料;辐照硬化;辐照缺陷;位错动力学

中图分类号: TB31 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-6931(2021)01-0094-14

doi: 10.7538/yzk.2020.youxian.0531

Progress of Dislocation Dynamics Simulation on Irradiation Hardening

WU Kaitao, SHI Jiaqing, LIU Guisen, SHEN Yao*

(School of Materials Science and Engineering, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai 200240, China)

Abstract: Irradiation hardening is one of the most common effects in irradiated metallic material. Investigations on irradiation hardening mechanisms are of great significance to design reliable structural materials for nuclear reactors. Irradiation induced defects act as obstacles to dislocation motion which is believed as the main reason for irradiation hardening. In recent years, the rapid development of dislocation dynamics simulation method built a bridge connecting the microstructure and the macroscopic mechanical properties and widely applied to investigate the mechanisms of irradiation hardening. For some irradiation defects such as dislocation loop and stacking fault tetrahedron, dislocation dynamics simulation is capable of capturing their influences on the evolution of dislocation network and the macroscopic mechanical response, making it possible for quantitative prediction of the irradiation hardening. In this paper, the progress of dislocation dynamics simulation on irradiation hardening was reviewed from three aspects: The basic dislocation dynamics model, the recent dislocation dynamics simulations on

收稿日期:2020-07-31;修回日期:2020-10-12

基金项目:国家磁约束核聚变能发展研究专项资助项目(2018YFE0308105)

作者简介:吴恺韬(1992—),男,上海人,博士研究生,材料科学与工程

*通信作者:沈耀, E-mail: yaoshen@sjtu.edu.cn

typical irradiation defects induced hardening and the development of the theoretical models of irradiation hardening. Some scientific problems for future research were also presented.

Key words: metallic material; irradiation hardening; irradiation defect; dislocation dynamics

利用核能发电是解决人类能源问题的主要途径之一。由于极端的服役环境,反应堆用结构材料的设计始终面临严峻挑战。常用的金属结构材料经过辐照后力学性能会发生改变,如辐照硬化、脆化等^[1-2]。材料的辐照硬化和脆化现象具有相关性,理解辐照硬化机理有助于进一步研究辐照脆化效应^[2-3]。

宏观上材料力学性能的变化与辐照引起的微观组织变化有关。核反应产生的大量高能粒子与结构材料的晶格原子碰撞,后者吸收前者的动能,进一步与其他晶格原子发生级联碰撞,产生大量过饱和的空位和间隙原子。级联反应产生的空位和间隙原子大都快速发生复合,但仍有一部分会在晶体内部聚集形成间隙、空位团簇或扩散至表面、晶界处,随后逐步演化形成位错环、层错四面体和空洞等缺陷。高能粒子轰击原子还会产生嬗变元素。尺寸较小的嬗变元素如氢、氦易与空位结合,降低孔洞的形核难度,加速孔洞的形成。此外材料中的杂质原子依靠级联反应加速扩散、聚集,导致析出相的形成^[4]。

位错是金属材料塑性变形的载体。辐照产生的缺陷对位错运动产生阻碍,被认为是辐照硬化效应的主要原因^[5]。实验上,在透射电子显微镜(TEM)下原位拉伸辐照后的样品,能观察到辐照缺陷对位错滑移的阻碍作用,但很难将其与宏观力学性能关联^[6];对辐照后的块体样品进行力学试验,能获得宏观力学响应以及加载后微观组织的变化,但很难有效捕捉加载过程中的微观过程^[7]。位错动力学模拟方法可弥补以上实验的不足^[8]。位错动力学将位错视为弹性体中的线缺陷,忽略原子细节,对位错网络进行离散划分后根据弹性理论和晶体学理论计算位错的运动,获得外加载荷下位错网络的演化过程和宏观力学响应,揭示晶体变形的机理^[9]。在此基础上,进一步考虑辐照缺陷与位错的相互作用,可模拟辐照缺陷对位错网络演化和力学响应的影响。位错动力学能在材料微观组织变化和宏观力学响应间建立起桥

梁,成为辐照硬化机理研究的重要工具^[10-12]。本文拟对位错动力学方法在辐照硬化效应研究中的应用进行综述,主要关注位错动力学模型、不同辐照缺陷硬化效应的位错动力学模拟以及辐照硬化理论模型三个方面,为后续辐照硬化机理研究提供参考。

1 位错动力学模型

1.1 位错网络的离散划分

任意形状的位错网络都可划分为一定数量的离散位错段,如图1所示。所有位错段的长度、位置、所在滑移系以及连接关系的集合就是位错网络的完整描述。值得注意的是,连接同一滑移系位错段的点称为分化节点,可根据位错线弯曲的程度增减数量,而连接不同滑移系位错段的点称为物理节点,具有实际物理意义,通常是位错反应的产物,不可随意增减^[13]。物理节点还包括终止于表面的节点或弗兰克里德源端点等。

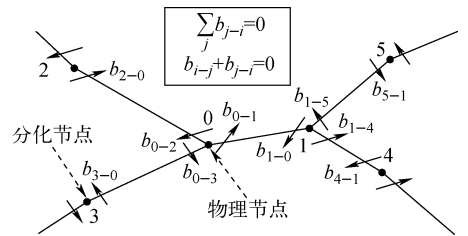


图1 由离散位错段构成的位错网络示意图
Fig. 1 Schematic diagram of dislocation network composed of discrete dislocation segment

1.2 位错的受力

作用在位错节点上的力 f 等于位错构型总能量 E_{tot} 的负梯度^[14]:

$$f = -\partial E_{\text{tot}} / \partial r \quad (1)$$

其中: r 为位错节点位置;负号表示朝着能量降低的方向进行。实际计算中,位错线受力通常分开考虑,包括位错线张力 f_{line} 、位错间的相互作用力 f_{seg} 、外力 f_{ext} 和辐照缺陷的作用力 f_{irr} :

$$f = f_{\text{line}} + f_{\text{seg}} + f_{\text{ext}} + f_{\text{irr}} \quad (2)$$

由于位错的应变能与长度呈正比,位错为降低能量而力求缩短自身长度。这种缩短的趋势可视为作用在位错上的线张力 T ,即单位长度位错的应变能。位错线张力的定义为增加单位长度位错所需的能量,通常估算为:

$$T \approx \mu b^2 / 2 \quad (3)$$

其中: μ 为剪切模量; b 为柏氏矢量的大小。对于一段弯曲的位错,由于线张力作用导致单位长度位错受到的侧向力(垂直于位错线的力),方向指向曲率中心,其表达式如下:

$$f_{\text{line}} = T/R \quad (4)$$

其中, R 为曲率半径。

位错受到的外力以及其他位错的作用力,可根据 Peach-Koehler 公式由所在位置应力场求得^[14]:

$$f_{\text{ext}} + f_{\text{seg}} = (\sigma_{\text{ext}} + \sigma_{\text{seg}}) \mathbf{b} \times \boldsymbol{\xi} \quad (5)$$

其中: \mathbf{b} 为柏氏矢量; $\boldsymbol{\xi}$ 为位错线方向; σ_{ext} 和 σ_{seg} 分别为外加载荷和其他位错段的应力场。

辐照缺陷周围的应力场也与位错存在着相互作用,不同类型辐照缺陷的影响不尽相同,需分别进行考虑。

1.3 位错的运动

位错受力运动,其运动控制方程^[15]可表示为:

$$\mathbf{f} - B\mathbf{v} - m d\mathbf{v}/dt = 0 \quad (6)$$

其中: \mathbf{v} 为位错运动速度; t 为时间; B 为黏性阻尼系数; m 为位错的等效质量。常温下,滑移速度远小于声速的位错,其运动处于过阻尼区域,即位错在力的作用下瞬时达到稳定速度,位错的质量效应可忽略^[14]。因此位错速度与受力呈正比:

$$\mathbf{v} = \mathbf{f}/B \quad (7)$$

位错滑移的黏性阻尼系数 B 可由分子动力学模拟计算得到,一般在 10^{-4} Pa·s 量级^[16-17]。

1.4 位错运动与塑性应变

大量位错的运动引起材料的宏观塑性变形。假想在一块长为 L 、高为 H 的弹性体中,从一端产生一根刃位错并持续滑移至另一端(图2),产生的平均塑性应变 γ 为:

$$\gamma = b/H \quad (8)$$

若位错仅滑移至弹性体中的 l 处,则此时平均塑性应变^[18]为:

$$\gamma = (b/H)(l/L) = bA/V \quad (9)$$

其中: A 为位错滑过的面积; V 为弹性体体积。

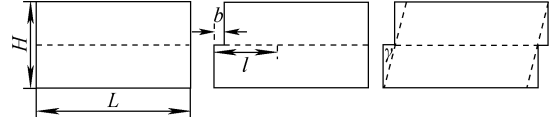


图2 刃位错在弹性体内滑移产生剪切应变的过程

Fig. 2 Shear strain production

by edge dislocation slipping in elastic body

将式(9)推广至一般情况,若某一位错段柏氏矢量为 \mathbf{b} 、滑移面法向为 \mathbf{n} ,在 Δt 时间内滑过的面积为 ΔA ,加和所有位错段滑移产生的塑性应变得^[13]:

$$\Delta \mathbf{e}^p = \frac{1}{V} \sum \frac{\Delta A}{2} (\mathbf{b} \otimes \mathbf{n} + \mathbf{n} \otimes \mathbf{b}) \quad (10)$$

1.5 位错的碰撞反应

当位错与其他位错或辐照缺陷相遇时会发生碰撞反应,导致位错构型发生变化。

位错与位错碰撞发生反应在实验和原子尺度模拟中均得到了验证^[19]。原子尺度模拟的刃位错与螺位错碰撞形成位错结的过程示于图3^[20]。因为碰撞反应涉及的位错核心结构的变化很难用弹性理论描述,在位错动力学模型中需额外设定碰撞反应机制。Bulatov等^[13]采用能量最速下降原理处理位错碰撞后的构型变化,能有效模拟位错的共线湮灭、位错结的形成等过程,如图4所示。当两段位错的最短距离低于阈值时判定发生碰撞(图4a),形成长度为0的位错段 $j-k$,即位错结的形核点(图4b)。 j 和 k 有多种连接初始节点的方式,图4c、d展示了两种可能的方式。根据能量最速下降原理,选取能量降低最多的构型作为最终构型^[13]。

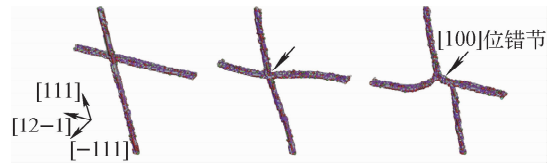


图3 分子动力学模拟的刃位错

与螺位错碰撞产生位错结的过程^[20]

Fig. 3 Process of junction formation by collision of edge and screw dislocation by molecular dynamics^[20]

根据以上分析得到位错动力学模拟流程,如图5所示,具体过程如下:1)输入初始信息,包括初始位错网络构型、材料常数等;2)计算

位错网络中每个位错段的受力;3) 根据位错运动控制方程计算位错速度;4) 利用时间积分法计算位错的位移,特别是节点的移动;5) 计算由位错移动产生的塑性应变,根据加载条件输出应力应变响应;6) 判断位错是否发生碰撞,并根据能量最速下降原理处理碰撞反应;7) 调整位错网络的划分,重复步骤 2。

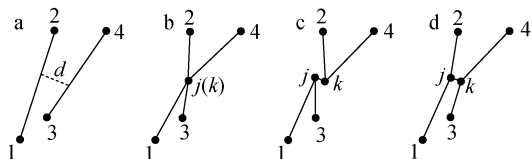


图4 位错动力学模型中位错段的碰撞过程

Fig. 4 Collision between dislocation segments in dislocation dynamics model

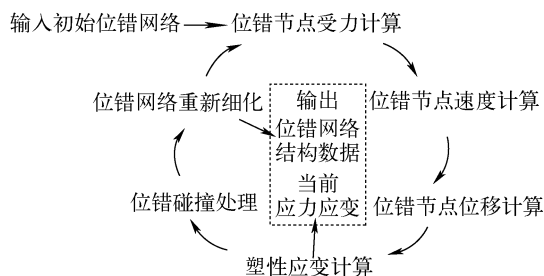


图5 位错动力学模拟流程

Fig. 5 Flow diagram of dislocation dynamics simulation

2 辐照硬化的位错动力学模拟

目前所用位错动力学软件主要包括 ParaDiS^[14]、microMegas^[21]、PDD^[22]等。但这些软件通常不包含辐照缺陷相关模块。为模拟辐照硬化效应,需建立不同类型辐照缺陷与位错间的相互作用模型,并在现有软件框架中增加位错与辐照缺陷作用的模块,这些是位错动力学模拟辐照硬化所需解决的核心问题。辐照缺陷对位错的影响主要体现在弹性相互作用和碰撞过程中的构型变化。弹性相互作用可通过弹性理论分析求解,而碰撞涉及的构型变化涉及原子过程,通常根据原子尺度的模拟结果提炼碰撞机制。典型的辐照缺陷包括位错环、层错四面体、析出相、空洞和气泡,它们与位错的相互作用不尽相同。

2.1 位错环和层错四面体

fcc、bcc 和 hcp 结构的金属经辐照后,都能

观察到位错环的产生^[4]。位错环主要包括间隙型和空位型两种,其中柏氏矢量与所在平面的法向重合的位错环也被称为棱柱环^[23]。层错四面体是由 4 个层错面构成的四面体,其 6 条边均为压杆位错,是低层错能 fcc 金属特有的辐照缺陷^[24]。

位错环和层错四面体具有位错特征,二者应力场均存在解析解,可通过 Peach-Koehler 公式计算它们与位错网络的弹性相互作用。然而位错碰撞位错环和层错四面体的过程十分复杂。从分子动力学模拟结果可知,位错环和层错四面体的尺寸、取向以及中心至位错滑移面的距离都会影响碰撞反应的结果。主要的反应结果包括位错环被完全或部分纳入位错网络、层错四面体尺寸变小、螺位错发生螺旋弯曲、刃位错产生双割阶、位错拖拽位错环移动等^[25-31]。

在位错动力学中,可用位错段构成的多边形和四面体表示位错环和层错四面体。通过优化位错段间的碰撞机制^[32-33]、引入位错结的运动^[34]和考虑 fcc 晶体中不全位错的合并分解机制^[35-37],位错动力学模拟能复现原子尺度模拟中位错与位错环、层错四面体碰撞过程中的构型变化。Arsenlis 等^[10]根据 1.5 节中的位错间碰撞规则,模拟了铁中位错网络与大量 $\langle 111 \rangle$ 间隙型位错环的反应,观察到辐照硬化效应和无缺陷通道的形成,如图 6 所示。Shi 等^[34]对位错段碰撞机制进行优化并考虑了铁中 $\langle 100 \rangle$ 位错的运动,模拟刃位错与 $\langle 100 \rangle$ 间隙位错环反应,结果示于图 7。由图 7 可知,不仅位错构型的变化与原子模拟结果一致,反应过程的应力-应变曲线的趋势也相同。

上述方法中构成缺陷的每一小段位错长度仅为 1 nm 左右^[34-35],位错段的精细划分导致计算量增大。在模拟块体材料辐照硬化效应时,有必要简化缺陷模型以提高计算效率。一种可行的方法是将位错环或层错四面体粗粒化,当它们与位错距离较远时仅考虑弹性相互作用,在与位错碰撞过程中根据反应条件设定每个缺陷的总体变化,如被完全吸收而消失、被部分吸收而尺寸变小或不发生变化等^[38-45]。这种方法忽略了辐照缺陷与位错的反应细节,可提高计算效率,但需提前设定碰撞反应的结果。文献^[38]即根据分子动力学模拟结果,设定层

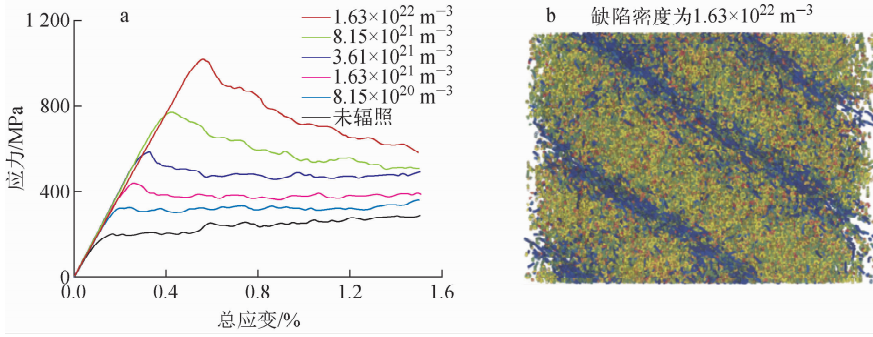
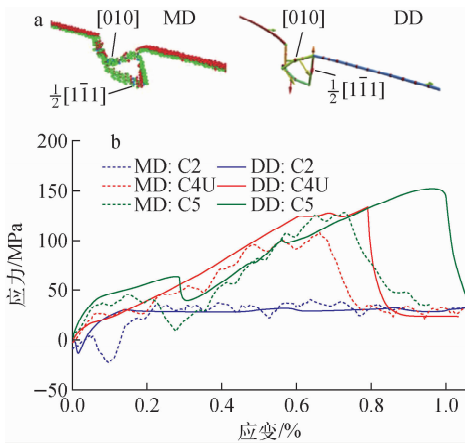


图6 不同密度位错环导致的辐照硬化效应(a)及位错网络与高密度间隙型位错环相互作用产生的无缺陷通道(b)^[10]

Fig. 6 Irradiation hardening effect caused by dislocation loop with different number densities (a) and defect-free channel produced by interaction between dislocation network and high density interstitial loop (b)^[10]

错四面体与位错碰撞后立即被吸收,继而模拟了铜中不同密度层错四面体与位错网络相互作用,观察到宏观硬化和无缺陷通道的形成。

失稳的现象,研究了微柱尺寸和位错交滑移对无缺陷通道宽度的影响,并定量估算了产生无缺陷通道所需的临界缺陷密度,结果如图8所示。连续化处理的方法适用于缺陷对位错的阻碍作用及其自身演化细节明确的情况,是模拟高密度、小尺寸辐照缺陷硬化效应的高效方案。

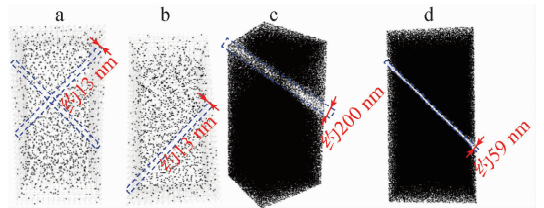


a——位错构型变化;b——应力-应变曲线

图7 刃位错与位错环反应的位错动力学结果与分子动力学结果对比^[34]

Fig. 7 Comparison between dislocation dynamics and molecular dynamics of simulating interaction of edge dislocation and dislocation loop^[34]

除将辐照缺陷粗粒化的方法,Cui等^[46]对位错环采用连续化处理,用数密度函数表示位错环在空间的分布。位错在滑移时须克服来自位错环的阻力,该阻力与位错所处位置的位错环数密度及平均尺寸相关。此外,位错滑移过后位错环被吸收的效应体现为位错滑过的区域位错环数密度下降。Cui等^[12,46]据此模拟了微柱辐照后的压缩过程,观察到了辐照硬化和塑性



a, b——微柱尺寸 300 nm,有交叉滑移和无交叉滑移;
c, d——微柱尺寸 1500 nm,有交叉滑移和无交叉滑移

图8 微柱尺寸和位错交滑移机制对生成无缺陷通道宽度的影响^[12]

Fig. 8 Influences of micropillar size and dislocation cross slip mechanism on width of defect-free channel^[12]

位错环和层错四面体的应力场都有解析解,它们与位错的弹性相互作用可通过 Peach-Koehler 公式计算得到。它们与位错碰撞过程中的变化较为复杂,主要有3种处理方式。第1种是用位错段构成的多边形和四面体表示位错环和层错四面体,根据位错段间的碰撞机制处理。这种方法能复现分子动力学模拟的构型变化,但计算量大,更适用于单一缺陷与位错反应的机理研究。第2种是将位错环和层错四面体粗粒化,提前设定碰撞反应的结果以提高计

算效率,用于研究大量辐照缺陷与位错网络相互作用的规律。粗粒化处理依赖已知的碰撞反应结果,一般可由原子尺度模拟结果提炼获得。第3种是将辐照缺陷连续化,用数密度函数表示辐照缺陷的空间分布,是模拟高密度、小尺寸辐照缺陷硬化效应的高效方案。连续化处理依赖前2种方案的结果,需要定量输入位错滑移阻力与辐照缺陷数密度、平均尺寸的关系,以及位错滑移造成的辐照缺陷密度变化。

2.2 析出相

成分、结构不同的析出相对位错滑移的影响具有显著差异,Argon总结析出相与位错相互作用的微观机制,包括化学强化、层错强化、原子排列强化、共格强化和模量强化,一种析出相一般具备多种强化机制^[47]。

化学强化、层错强化、原子排列强化是由于位错碰撞析出相时额外产生新的界面引起的。化学强化对应析出相-基体界面,层错强化对应fcc金属中共格析出相的层错面,而原子排列强化对应超点阵析出相中的反相界面。若位错穿过析出相额外产生新的界面,单位面积界面能为 χ ,则单位长度位错受到的阻碍应力为 $\tau_{\text{back}} = -\chi/b$,负号表示与驱动位错前进的切应力相反。Huang等^[48]根据镍基合金中的 γ' 相的反相界面能设定位错穿过时的阻碍应力,研究了析出相尺寸、形状对镍基合金力学性能的影响。Rawlings等^[49]根据Fe-Ni-Al-Cr合金中B2-NiAl析出相的反相界面能设定位错受到的阻碍应力,研究了不同尺寸和体积比的析出相对位错滑移的阻碍。

共格强化由析出相与基体原子尺寸差异引起,而模量强化由析出相与基体模量差引起,这两种差异导致析出相周围存在应力场并与位错发生弹性相互作用。尺寸和模量的差异在复杂位错结构上的作用力没有解析解,一般采用数值法计算。Shin等^[50]采用有限元法计算了球形析出相模量差引起的应力场,模拟位错绕过不同模量析出相的过程,发现临界分切应力与模量差的0.6次方呈正比。Santos-Guemes等^[51-52]则采用快速傅里叶变换法计算Al-Cu合金中圆盘状 θ' 相周围的应力场,模拟位错绕过不同取向 θ' 相的过程,进一步研究了位错绕过随机分布的 θ' 相所需的临界分切应力,得到

的结果与实验结果一致。

一些研究采用简单函数唯象描述析出相周围应力场与位错的相互作用。Fan等^[53]采用指数函数描述球形析出相相对位错间的阻碍应力,若位错段微元与半径为 r_p 的析出相距离为 r ,则:

$$\tau_{\text{back}} = \begin{cases} \tau_{\text{in}} & r \leq r_p \\ \tau_{\text{in}} \exp\left(-k \frac{r-r_p}{b}\right) & r > r_p \end{cases} \quad (11)$$

其中: τ_{in} 为位错穿过析出相时产生额外界面的阻力; k 为应力场衰减系数。他们利用分子动力学拟合了多种铝合金中析出相的 τ_{in} 和 k ,研究发现,当析出相总体积一定时,位错滑移临界分切应力随析出相尺寸的增加呈现双峰^[53]。Lehtinen等^[54]采用高斯函数描述球形析出相与单位长度位错间相互作用能(式(12)),进而得到单位长度位错线上的受力(式(13)),方向由析出相中心指向位错。他们计算铁中单根刃位错滑过不同间距2 nm碳化物的临界分切应力,通过调节参数 A 获得了与分子动力学模拟一致的结果。

$$U(r) = A \exp(-r^2/r_p^2) \quad (12)$$

其中, A 为析出相钉扎强度。

$$f = -dU/dr = (2Ar/r_p^2) \exp(-r^2/r_p^2) \quad (13)$$

对于一些界面能较高或与基体非共格的析出相,位错通常以Orowan形式绕过,硬球模型是一种合理的简化并得到了广泛应用。硬球模型忽略析出相产生的应力场,仅设定位错不能穿过析出相-基体界面。Bakó等^[55]利用硬球模型研究了ODS钢中 Y_2O_3 析出相的硬化效应,模拟了随机分布析出相对位错滑移的阻碍,得到了与实验一致的结果。Queyreau等^[56]利用硬球模型研究了铁基体中大量球形碳化物和林位错对主滑移系位错阻碍的协同作用,验证了硬化项叠加的经验关系。

2.3 空洞和氦泡

空洞和氦泡对位错滑移的影响在原子尺度模拟中被广泛研究^[57-67]。空洞和具有平衡内压的氦泡对位错的作用相近,如图9所示^[68]。当位错靠近空洞时先受到吸引,发生碰撞后断开,形成2段位错,并在空洞表面上滑移。在外力作用下2段位错复合离开表面,空洞表面留下1个台阶。

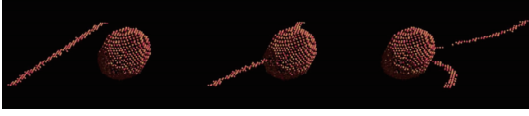


图9 刃位错与空洞相互作用的分子动力学模拟结果^[68]

Fig. 9 Interaction process between edge dislocation and void by molecular dynamics^[68]

位错动力学模拟空洞和氦泡对位错滑移影响的难点在于表面的作用。自由表面导致位错受到镜像力作用,通常采用叠加法进行求解^[69-71],如图10所示。首先根据位错在无限大基体中的应力场 σ_∞ 计算其在假想表面上产生的力(图10a)。通过在自由表面叠加相反的力以达到自由表面上合力为0的边界条件,使用有限元法数值求解反向叠加的力产生的应力场 σ_r (图10b)。将两个应力场叠加即为实际应力场(图10c),进而根据 Peach-Koehler 公式可得位错受到的镜像力:

$$f_{\text{img}} = \sigma_r \cdot b \times \xi \quad (14)$$

此外,终止于表面的位错在移动时留下台阶即产生新的表面,因此在表面移动的位错受到额外的阻碍应力 $-\chi_{\text{sur}}/b$,其中 χ_{sur} 为单位面积表面能。Scattergood 等^[72]近似计算了终止于空洞表面的位错段所受镜像力,但忽略其余位

错受到的镜像力,模拟了空洞对螺、刃位错滑移的阻碍。Crone 等^[73]利用有限元法计算镜像力,研究了空洞表面台阶以及空洞周围应力集中区对位错滑移的影响。

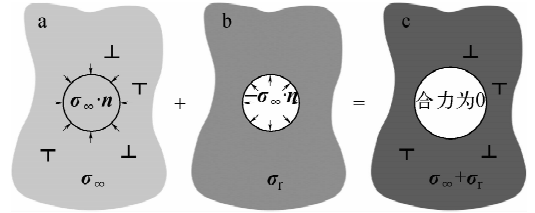


图10 叠加法计算的位错所受镜像力
Fig. 10 Image force on dislocation through superposition method

在位错动力学模拟中,准确计算位错受到的镜像力涉及有限元法的同步计算,计算量大,因此有研究采用唯象模型简化处理。Kumar 等^[74]将氦泡视为析出相,假定位错进入时受到恒定的阻碍应力,模拟了氦泡尺寸对屈服应力的影响。Sobie 等^[75]则忽略空洞表面镜像力的作用,根据分子动力学模拟结果设定位错脱离空洞钉扎所需弯曲的角度,模拟了随机分布空洞对单根位错滑移的阻碍。这两种唯象模型依赖分子动力学结果确定参数,应用范围受限。目前常用的辐照缺陷与位错间作用模型列于表1。

表1 辐照缺陷与位错相互作用模型

Table 1 Interaction model of irradiation defect and dislocation

辐照缺陷类型	构型	弹性作用	碰撞/脱钉机制	相关文献
位错环	位错段构成的多边形	根据位错段应力场计算	位错段之间的碰撞机制	[10, 35-37]
	圆盘(由柏氏矢量、取向和半径描述)	根据位错环应力场计算	设定位错临界弯曲角度或临界分切应力等	[43-48]
	连续数密度函数	根据理论硬化模型结合缺陷数密度与尺寸计算	根据位错滑移面积设定缺陷数密度的变化	[12, 49]
层错四面体	位错段构成的四面体	根据位错段应力场计算	位错段之间的碰撞机制	[38-40]
	四面体(由取向和尺寸描述)	根据层错四面体应力场解析解计算	设定位错临界弯曲角度或临界分切应力等	[41-42]
析出相	连续体中的特殊区域	1) 根据析出相与基体性质差异计算 2) 设定唯象函数计算		[51-55] [56-57]
	硬球	不考虑	设定位错不可进入析出相	[58-59]
孔洞	连续体中的特殊区域	根据自由表面边界条件计算	根据材料表面能设定位错在表面的移动机制	[72-73]
	等效的析出相	不考虑	设定位错临界弯曲角度或临界分切应力等	[74-75]

3 辐照硬化理论模型

通过分析材料辐照后位错结构变化对宏观力学性能的影响,建立辐照硬化理论模型,是预测辐照硬化效应的有效手段。目前基于辐照缺陷与位错相互作用的理论硬化模型主要包括 DBH 模型^[76]、BKS 模型^[77]、FKH 模型^[78]和 CISH 模型^[79]。通过实验观察和测量,获得的辐照缺陷种类、数密度、平均尺寸以及材料屈服强度的变化量,被用于确定各硬化模型适用的缺陷类型,并拟合模型参数。一般情况下, DBH 模型适用于描述析出相造成的硬化, BKS 模型适用于描述空洞或析出相造成的硬化, FKH 模型适用于描述位错环或空位团簇造成的硬化,而 CISH 模型适用于描述高密度小尺寸间隙、空位团簇对位错源钉扎造成的硬化。位错动力学也能模拟单一种类辐照缺陷的硬化效应,为硬化模型选取和参数拟合提供了另一途径。此外,位错动力学能模拟多种类型缺陷的协同作用,分析协同硬化效应的机理,为理论硬化模型的经验叠加提供数据。

3.1 DBH 模型

辐照硬化源于辐照缺陷对位错运动的阻碍。考虑无限长位错通过周期性排列辐照缺陷的过程(图 11),计算所需外加切应力。将辐照缺陷简化为钉扎点,忽略位错间的相互作用,此时外力仅与弯曲位错的线张力保持平衡。假定位错弯曲至 θ_c 时脱钉,根据式(4)可得脱钉所需的外加临界分切应力 τ_c :

$$\tau_c = 2T(\sin \theta_c)/bl \quad (15)$$

其中, l 为辐照缺陷的平均间距^[47]。

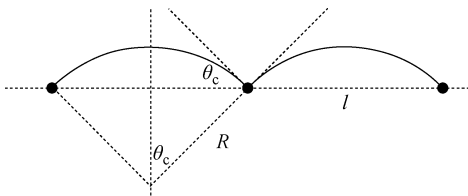


图 11 位错通过周期性排列辐照缺陷

Fig. 11 Dislocation by passing periodic array of irradiation induced defect

设辐照缺陷的平均尺寸为 d 、数密度为 N ,若一段位错滑过面积 A ,那么所碰撞的辐照缺陷数量为 $(Ad) \cdot N$,对应单位面积上的碰撞数

量为 Nd ,因此滑移面上辐照缺陷的平均间距为:

$$l = (Nd)^{-1/2} \quad (16)$$

辐照缺陷对位错的钉扎强度取决于弯曲角度 θ_c 的大小,引入缺陷强度因子 α_{DBH} 替代 $\sin \theta_c$,取 $T = \mu b^2/2$,再将式(16)代入式(15),可得:

$$\tau_{DBH} = \alpha_{DBH} \mu b \sqrt{Nd} \quad (17)$$

式(17)即为被广泛应用的 DBH 模型^[76]。

3.2 BKS 模型

在 DBH 模型的基础上, Bacon 等^[77]又发展出了 BKS 模型。首先他们选取更为精确的线张力表达式:

$$T = \frac{1}{2} \mu b^2 \left(\ln \frac{\bar{d}}{b} + \Delta \right) \quad (18)$$

其中:位错应变能的外截断半径取 d 与 l 的调和平均数,即 $\bar{d} = dl/(d+l)$;内截断半径取 b ; Δ 为量级为 1 的常数。对于不可穿过析出相, $\theta_c = 90^\circ$,再将式(18)代入式(15),可得:

$$\tau_c = \frac{\mu b}{l} \left(\ln \frac{\bar{d}}{b} + \Delta \right) \quad (19)$$

接着考虑缺陷随机分布的影响,如图 12 所示。对于不可穿过析出相,空间中随机分布使得位错脱钉的弯角 θ'_c 小于 90° 。假想一段两端被钉扎的位错,若脱钉所需达到的临界弯角为 θ'_c ,位错应变能外截断半径设为 l ,则位错脱钉的临界分切应力为:

$$\tau_c = \frac{\mu b \sin \theta'_c}{l} \ln \frac{l}{b} \quad (20)$$

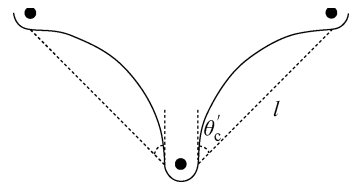


图 12 缺陷空间分布对位错脱钉所需达到弯角的影响

Fig. 12 Influence of defect spatial distribution on critical angle for dislocation to bypass

综合式(19)、(20)可得:

$$\sin \theta'_c = \left(\ln \frac{\bar{d}}{b} + \Delta \right) / \ln \frac{l}{b} \quad (21)$$

另外,滑移面上缺陷之间的平均距离 l 并

非实际钉扎位错线的缺陷平均间距 λ , 式(15)应改为:

$$\tau_c = 2T(\sin \theta_c)/b\lambda \quad (22)$$

Freidel 等^[47]认为, 在流变应力下, 位错每脱离一个缺陷的钉扎后向前滑移, 立刻被另一个缺陷捕获, 这一过程中位错平均滑过的面积应等于滑移面上单个缺陷所占的平均面积。如图 13 所示, 当位错脱离 O 处的钉扎向前滑移至 O' 处时, 假定弧 AO 、 BO 和 AB 的曲率半径都为 R , 灰色区域的面积 S 为:

$$S = \lambda^3/2R \quad (23)$$

滑移面上单个缺陷所占平均面积为 l^2 , 将 $R = \lambda/2\sin \theta_c$ 代入式(23)可得:

$$\lambda = l(\sin \theta_c)^{-1/2} \quad (24)$$

此处 λ 称为 Freidel 采样长度^[47]。

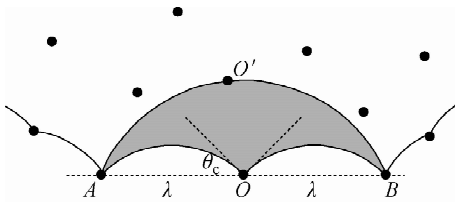


图 13 位错在随机分布缺陷中的滑移
Fig. 13 Dislocation slipping through randomly distributed defect

将式(21)和式(24)代入式(22)中可得:

$$\tau_{\text{BKS}} = \frac{\mu b}{l} \left(\ln \frac{\bar{d}}{b} + \Delta \right)^{\frac{3}{2}} \left(\ln \frac{l}{b} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (25)$$

$$\bar{d} = \frac{dl}{d+l}, l = \frac{1}{\sqrt{Nd}} \quad (25)$$

式(25)即为 BKS 模型的表达式。参数 Δ 取决于缺陷类型, 不可穿过粒子的 Δ 为 1.52, 而空洞的为 0.77。

3.3 FKH 模型

FKH 模型主要基于直位错与棱柱环之间的弹性相互作用^[78], 如图 14 所示, 根据无限小位错环假设, 位错与棱柱环间的相互作用能为:

$$E = An \cdot \sigma \cdot b \quad (26)$$

其中: A 为棱柱环面积; n 为棱柱环法向; σ 为位错在棱柱环中心处应力场。将位错应力场代入式(26)可得:

$$E = \zeta \mu b^2 d^2 / y \quad (27)$$

ζ 取决于位错类型、棱柱环的取向和夹角 θ 。

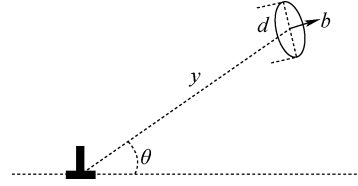


图 14 直位错与位错环的相互作用
Fig. 14 Interaction between straight dislocation and dislocation loop

进一步可得位错与棱柱环间的相互作用力:

$$F = \zeta \mu b^2 d^2 / y^2 \quad (28)$$

Kroupa 等^[78]计算了 fcc 晶体中螺、刃位错与不同取向棱柱环的相互作用能, 得到 ζ 随 θ 的变化关系。计算每种情况下 ζ 的极值并取平均, 得 $\zeta \approx 1/16$ 。当 $y = d/2$ 时, 位错与棱柱环相遇, 此时二者间的相互作用能为 $E \approx \mu b^2 d/8$ 而相互作用力为 $F \approx \mu b^2/4$ 。

将位错与棱柱环的相互作用力视为对位错的钉扎力, 由于该力随距离的平方递减, 仅有距离较近的位错环对位错产生实际钉扎作用。若沿着位错平均分布有间距为 λ 的位错环, 位错脱钉所需外加的临界分切应力为:

$$\tau_c = F/b\lambda \quad (29)$$

λ 取 Freidel 采样长度, 根据式(22)和式(24)可得:

$$\frac{\lambda}{l} = \left(\frac{2lT}{E} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (30)$$

其中, $E = \tau_c b l^2$, 可理解为位错滑过 l^2 面积外力所做的功等于位错与位错环之间的相互作用能。综合式(27)、(29)、(30)可得:

$$\tau_{\text{FKH}} = \frac{1}{8} \mu b N^{\frac{2}{3}} d \quad (31)$$

FKH 模型更适用于描述钉扎强度较弱的缺陷^[6]。

3.4 CISH 模型

Singh 等^[79]借鉴了 Cottrell 气团的概念, 认为辐照产生的小棱柱环在位错应力场作用下聚集在位错周围并阻碍位错源开动。在外力作用下位错靠近棱柱环, 当距离小于临界距离 y_c 时认为棱柱环被位错吸收, 且钉扎作用消失, 位错源得以开动, 因此产生了屈服后外力下降的现象。取临界距离 y_c 下位错环与位错的相互作用力作为钉扎力, 根据式(28)、(29)可得:

$$\tau_{\text{CISH}} = \alpha_{\text{CISH}} \frac{\mu b}{\lambda} \frac{d^2}{y_s^2} \quad (32)$$

参数 α_{CISH} 取决于位错环与位错的相对取向关系,通常在 0.1 左右。实验中,CISH 模型成功预测了一些材料辐照后的上屈服点^[80-81]。

3.5 多种缺陷的协同硬化效应

位错环^[46,75,82]、空洞^[73,75,77]、析出相^[56,83]等单一类型辐照缺陷对位错滑移的阻碍作用可通过位错动力学模拟计算,并优选上述理论硬化模型对结果进行拟合。然而,辐照材料中通常存在多种缺陷并对位错滑移产生协同影响。实验上通常对不同种类缺陷的硬化效应叠加,经验叠加方式主要包括线性叠加以及平方和开方两种^[84]。假定每种缺陷在材料中单独存在时造成的硬化为 τ_i ,则线性叠加的结果为:

$$\tau_c = \sum \tau_i \quad (33)$$

平方和开方的结果为:

$$\tau_c = \sqrt{\sum \tau_i^2} \quad (34)$$

Queyreau 等^[56]用位错动力学模拟了点缺陷和晶格阻力、析出相和林位错三者的协同阻碍作用,发现点缺陷和晶格阻力 τ_0 对总阻力的贡献满足线性叠加关系,而析出相 τ_{BKS} 和林位错 τ_i 的贡献则满足平方和开方的叠加关系。

4 结语

本文对位错动力学应用于辐照硬化模拟的研究进展进行了综述。首先针对位错动力学模型进行了介绍,主流的位错动力学软件通常不包含辐照缺陷相关的模块,建立不同类型辐照缺陷与位错的相互作用模块是位错动力学模拟辐照硬化的核心。对于不同类型的辐照缺陷分别分析了它们与位错的相互作用,阐述了不同辐照缺陷硬化效应的位错动力学研究成果。随后介绍了用于定量描述辐照硬化的理论模型,位错动力学的模拟结果可用于确定各理论模型所适用的缺陷类型并拟合参数。目前,利用位错动力学研究辐照硬化的机理已取得了一定成果,该领域仍有如下几方面值得重视。

1) 孔洞硬化效应的模拟。聚变堆和第 4 代裂变堆中的材料处于高温高剂量的辐照环境中,孔洞在辐照缺陷中的占比将大幅提高。准确考虑孔洞与位错作用的模型依赖有限元法同

步计算,所需计算量较大。进一步模拟孔洞对与位错网络的相互作用,需要对表面镜像力计算进行合理简化。

2) 多种辐照缺陷的硬化效应模拟。材料经辐照后往往产生不止一种辐照缺陷,模拟多种辐照缺陷的协同硬化效应对辐照硬化的预测具有重要意义。目前关于位错动力学模拟还鲜有报道。模拟多种辐照缺陷时不仅需要考虑每种缺陷与位错的相互作用,还需要考虑辐照缺陷间的相互作用,如可运动的位错环与空洞间的相互作用。

3) 位错交滑移和攀移机制的影响。位错滑移受辐照缺陷阻碍时,可通过交滑移或攀移绕过缺陷继续滑移,忽略位错的交滑移和攀移可能会导致模拟的硬化结果偏高,尤其对于中高温和低应变速率的加载条件,在位错与辐照缺陷的作用模型中有必要考虑位错的交滑移和攀移机制。

4) 理论硬化模型的叠加方法。现有的理论硬化模型基于单根位错与辐照缺陷的相互作用,单一类型的辐照缺陷均有相应的理论硬化模型。但在考虑多种辐照缺陷的硬化机制时,叠加不同的理论硬化模型依赖经验方式,缺乏基于物理的叠加方法。未来可利用位错动力学模拟结果中位错网络和辐照缺陷演化的细节,通过分析统计实际钉扎位错的缺陷数量与各自数密度的关系,发展基于位错网络与辐照缺陷相互作用的叠加模型。

5) 变形过程中位错密度和辐照缺陷数密度的演化。变形过程中辐照缺陷与位错发生反应,可能被位错吸收或发生其他变化,因此辐照缺陷数密度随塑性应变增加而变化。此外,晶体内存在的辐照缺陷对位错产生钉扎,可能使位错密度演化的规律有别于纯晶体中的演化规律。位错密度和辐照缺陷密度的演化规律可在位错动力学模拟结果中提炼得到。位错密度和辐照缺陷密度的演化规律以及理论硬化模型可进一步应用于晶体塑性模型中,实现更大尺度的辐照硬化模拟。

参考文献:

- [1] ZINKLE S J, WAS G S. Materials challenges in nuclear energy[J]. Acta Materialia, 2013, 61

- (3): 735-758.
- [2] GROSSBECK M L. Effect of radiation on strength and ductility of metals and alloys[M]// Comprehensive Nuclear Materials. Amsterdam; Elsevier, 2012: 99-122.
- [3] ZINKLE S J, BUSBY J T. Structural materials for fission & fusion energy[J]. Materials Today, 2009, 12(11): 12-19.
- [4] ZINKLE S J. Radiation-induced effects on microstructure[M]// Comprehensive Nuclear Materials. Amsterdam; Elsevier, 2012: 65-98.
- [5] ODETTE G R, LUCAS G E. Embrittlement of nuclear reactor pressure vessels[J]. JOM Journal of the Minerals, Metals&Materials Society, 2001, 53(7): 18-22.
- [6] ZINKLE S J, MATSUKAWA Y. Observation and analysis of defect cluster production and interactions with dislocations[J]. Journal of Nuclear Materials, 2004, 329: 88-96.
- [7] ZINKLE S J, SINGH B N. Microstructure of neutron-irradiated iron before and after tensile deformation[J]. Journal of Nuclear Materials, 2006, 351(1-3): 269-284.
- [8] MONNET G. Multiscale modeling of irradiation hardening: Application to important nuclear materials[J]. Journal of Nuclear Materials, 2018, 508: 609-627.
- [9] 庄茁, 崔一南, 高原, 等. 亚微米尺度晶体反常规塑性行为的离散位错研究进展[J]. 力学进展, 2011, 41(6): 647-667.
- ZHUANG Zhuo, CUI Yinan, GAO Yuan, et al. Advances in discrete dislocation mechanism on submicro atypical plasticity[J]. Advances in Mechanics, 2011, 41(6): 647-667(in Chinese).
- [10] ARSENLIS A, RHEE M, HOMMES G, et al. A dislocation dynamics study of the transition from homogeneous to heterogeneous deformation in irradiated body-centered cubic iron[J]. Acta Materialia, 2012, 60(9): 3 748-3 757.
- [11] CUI Y, PO G, GHONIEM N. Does irradiation enhance or inhibit strain bursts at the submicron scale?[J]. Acta Materialia, 2017, 132: 285-297.
- [12] CUI Y, PO G, GHONIEM N. Size-tuned plastic flow localization in irradiated materials at the submicron scale[J]. Physical Review Letters, 2018, 120(21): 215501.
- [13] BULATOV V V, CAI W. Computer simulations of dislocations[M]. UK: Oxford University Press, 2006.
- [14] ARSENLIS A, CAI W, TANG M, et al. Enabling strain hardening simulations with dislocation dynamics[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2007, 15(6): 553-595.
- [15] GILLIS P P, KRATOCHVIL J. Dislocation acceleration[J]. Philosophical Magazine, 1970, 21: 425-432.
- [16] OLMSTED D L, HECTOR L G, CURTIN W A, et al. Atomistic simulations of dislocation mobility in Al, Ni and Al/Mg alloys[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2005, 13(3): 371-388.
- [17] QUEYREAU S, MARIAN J, GILBERT M R, et al. Edge dislocation mobilities in bcc Fe obtained by molecular dynamics[J]. Physical Review B, 2011, 84(6): 064106.
- [18] HULL D, BACON D J. Introduction to dislocations[M]. Amsterdam: Elsevier, 2011.
- [19] BULATOV V V, HSIUNG L L, TANG M, et al. Dislocation multi-junctions and strain hardening[J]. Nature, 2006, 440: 1 174-1 178.
- [20] HAGHIGHAT S H, SCHÄUBLIN R, RAABE D. Atomistic simulation of the $a_0 \langle 100 \rangle$ binary junction formation and its unzipping in body-centered cubic iron[J]. Acta Materialia, 2014, 64: 24-32.
- [21] DEVINCRE B, MADEC R, MONNET G, et al. Modeling crystal plasticity with dislocation dynamics simulations: The ‘microMegas’ code [M]// Mechanics of Nano-objects Presses Des. US: Presse Des Mines, 2011.
- [22] GHONIEM N M, TONG S H, SUN L Z. Parametric dislocation dynamics: A thermodynamics-based approach to investigations of mesoscopic plastic deformation[J]. Physical Review B, 2000, 61(2): 913-927.
- [23] HIRSCH P, SILCOX J, SMALLMAN R, et al. Dislocation loops in quenched aluminium[J]. Philosophical Magazine, 1958, 3(32): 897-908.
- [24] LORETTO M, CLAREBROUGH L, SEGALL R. Stacking-fault tetrahedra in deformed face-centred cubic metals[J]. Philosophical Magazine, 1965, 11: 459-465.

- [25] OSETSKY Y N, BACON D J. Atomic-level dislocation dynamics in irradiated metals [M] // Comprehensive Nuclear Materials. Amsterdam: Elsevier, 2012.
- [26] MARIAN J, WIRTH B D, SCHÄUBLIN R, et al. MD modeling of defects in Fe and their interactions[J]. Journal of Nuclear Materials, 2003, 323(2-3): 181-191.
- [27] BACON D J, OSETSKY Y N, RONG Z. Computer simulation of reactions between an edge dislocation and glissile self-interstitial clusters in iron[J]. Philosophical Magazine, 2006, 86(25-26): 3 921-3 936.
- [28] OSETSKY Y N, RODNEY D, BACON D J. Atomic-scale study of dislocation-stacking fault tetrahedron interactions, Part I: Mechanisms [J]. Philosophical Magazine, 2006, 86(16): 2 295-2 313.
- [29] LIU X Y, BINER S B. Molecular dynamics simulations of the interactions between screw dislocations and self-interstitial clusters in body-centered cubic Fe[J]. Scripta Materialia, 2008, 59(1): 51-54.
- [30] TEREPTYEV D, GRAMMATIKOPOULOS P, BACON D J, et al. Simulation of the interaction between an edge dislocation and $\langle 100 \rangle$ interstitial dislocation loop in alpha-iron[J]. Acta Materialia, 2008, 56(18): 5 034-5 046.
- [31] TEREPTYEV D, BACON D J, OSETSKY Y N. Reactions between a $1/2\langle 111 \rangle$ screw dislocation and $\langle 100 \rangle$ interstitial dislocation loops in alpha-iron modelled at atomic scale[J]. Philosophical Magazine, 2010, 90(7-8): 1 019-1 033.
- [32] DROUET J, DUPUY L, ONIMUS F, et al. Dislocation dynamics simulations of interactions between gliding dislocations and radiation induced prismatic loops in zirconium[J]. Journal of Nuclear Materials, 2014, 449(1-3): 252-262.
- [33] DROUET J, DUPUY L, ONIMUS F, et al. A direct comparison between in-situ transmission electron microscopy observations and dislocation dynamics simulations of interaction between dislocation and irradiation induced loop in a zirconium alloy[J]. Scripta Materialia, 2016, 119: 71-75.
- [34] SHI X J, DUPUY L, DEVINCRE B, et al. Interaction of $\langle 100 \rangle$ dislocation loops with dislocations studied by dislocation dynamics in alpha-iron[J]. Journal of Nuclear Materials, 2015, 460: 37-43.
- [35] MARTINEZ E, MARIAN J, ARSENLIS A, et al. Atomistically informed dislocation dynamics in fcc crystals[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2008, 56(3): 869-895.
- [36] MARTINEZ E, MARIAN J, ARSENLIS A, et al. Dislocation dynamics study of the strength of stacking fault tetrahedra, Part I: Interactions with screw dislocations[J]. Philosophical Magazine, 2008, 88(6): 809-840.
- [37] MARTINEZ E, MARIAN J, PERLADO J M. A dislocation dynamics study of the strength of stacking fault tetrahedra, Part II: Interactions with mixed and edge dislocations[J]. Philosophical Magazine, 2008, 88(6): 841-863.
- [38] de LA-RUBIA T D, ZBIB H M, KHRAISHI T A, et al. Multiscale modelling of plastic flow localization in irradiated materials[J]. Nature, 2000, 406: 871-874.
- [39] GHONIEM N M, TONG S H, SINGH B N, et al. Dislocation interaction with radiation-induced defect clusters and plastic flow localization in fcc metals[J]. Philosophical Magazine, 2001, 81(11): 2 743-2 764.
- [40] KHRAISHI T A, ZBIB H M, de LA-RUBIA T D, et al. Modelling of irradiation-induced hardening in metals using dislocation dynamics[J]. Philosophical Magazine Letters, 2001, 81(9): 583-593.
- [41] KHRAISHI T A, ZBIB H M, de LA-RUBIA T D, et al. Localized deformation and hardening in irradiated metals: Three-dimensional discrete dislocation dynamics simulations[J]. Metallurgical and Materials Transactions B, 2002, 33(2): 285-296.
- [42] NOGARET T, RODNEY D, FIVEL M, et al. Clear band formation simulated by dislocation dynamics: Role of helical turns and pile-ups[J]. Journal of Nuclear Materials, 2008, 380(1-3): 22-29.
- [43] GURURAJ K, ROBERTSON C, FIVEL M. Post-irradiation plastic deformation in Fe grains investigated by means of 3D dislocation dynamics simulations[J]. Journal of Nuclear Materials, 2015, 459: 194-204.

- [44] GURURAJ K, ROBERTSON C, FIVEL M. Channel formation and multiplication in irradiated FCC metals: A 3D dislocation dynamics investigation[J]. *Philosophical Magazine*, 2015, 95(12): 1 368-1 389.
- [45] TERYTYEV D, MONNET G, GRIGOREV P. Transfer of molecular dynamics data to dislocation dynamics to assess dislocation-dislocation loop interaction in iron[J]. *Scripta Mater*, 2013, 69(8): 578-581.
- [46] CUI Y, PO G, GHONIEM N M. A coupled dislocation dynamics-continuum barrier field model with application to irradiated materials[J]. *International Journal of Plasticity*, 2018, 104: 54-67.
- [47] ARGON A. *Strengthening mechanisms in crystal plasticity*[M]. UK: Oxford University Press, 2008.
- [48] HUANG M, ZHAO L G, TONG J. Discrete dislocation dynamics modelling of mechanical deformation of nickel-based single crystal superalloys[J]. *International Journal of Plasticity*, 2012, 28(1): 141-158.
- [49] RAWLINGS M J S, DUNAND D C. Dislocation dynamics modeling of precipitation strengthening in Fe-Ni-Al-Cr ferritic superalloys[J]. *Journal of Materials Research*, 2017, 32(22): 4 241-4 253.
- [50] SHIN C S, FIVEL M C, VERDIER M, et al. Dislocation-impenetrable precipitate interaction: A three-dimensional discrete dislocation dynamics analysis[J]. *Philosophical Magazine*, 2003, 83: 3 691-3 704.
- [51] SANTOS-GUEMES R, ESTEBAN-MANZANARES G, PAPADIMITRIOU I, et al. Discrete dislocation dynamics simulations of dislocation-theta' precipitate interaction in Al-Cu alloys[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2018, 118: 228-244.
- [52] SANTOS-GUEMES R, BELLON B, ESTEBAN-MANZANARES G, et al. Multiscale modelling of precipitation hardening in Al-Cu alloys: Dislocation dynamics simulations and experimental validation[J]. *Acta Materialia*, 2020, 188: 475-485.
- [53] FAN H D, NGAN A H W, GAN K F, et al. Origin of double-peak precipitation hardening in metallic alloys[J]. *International Journal of Plasticity*, 2018, 111: 152-167.
- [54] LEHTINEN A, GRANBERG F, LAURSON L, et al. Multiscale modeling of dislocation-precipitate interactions in Fe: From molecular dynamics to discrete dislocations[J]. *Physical Review E*, 2016, 93(1): 013309.
- [55] BAKÓ B, WEYGAND D, SAMARAS M, et al. Discrete dislocation dynamics simulations of dislocation interactions with Y₂O₃ particles in PM2000 single crystals[J]. *Philosophical Magazine*, 2007, 87: 3 645-3 656.
- [56] QUEYREAU S, MONNET G, DEVINCRE B. Orowan strengthening and forest hardening superposition examined by dislocation dynamics simulations[J]. *Acta Materialia*, 2010, 58(17): 5 586-5 595.
- [57] OSETSKY Y N, BACON D J. Comparison of void strengthening in fcc and bcc metals: Large-scale atomic-level modelling[J]. *Materials Science and Engineering A*, 2005, 400: 374-377.
- [58] SCHÄUBLIN R, CHIU Y L. Effect of helium on irradiation-induced hardening of iron: A simulation point of view[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2007, 362(2-3): 152-160.
- [59] HAGHIGHAT S M H, SCHÄUBLIN R. Molecular dynamics modeling of cavity strengthening in irradiated iron[J]. *Journal of Computer-Aided Materials Design*, 2007, 14: 191-201.
- [60] HAGHIGHAT S M H, LUCAS G, SCHÄUBLIN R. Atomistic simulation of He bubble in Fe as obstacle to dislocation[C]// *Iop Conference Series: Materials Science and Engineering*. [S. l.]: [s. n.], 2009.
- [61] HAGHIGHAT S M H, FIVEL M C, FIKAR J, et al. Dislocation-void interaction in Fe: A comparison between molecular dynamics and dislocation dynamics[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2009, 386: 102-105.
- [62] HAGHIGHAT S M H, SCHÄUBLIN R. Influence of the stress field due to pressurized nanometric He bubbles on the mobility of an edge dislocation in iron[J]. *Philosophical Magazine*, 2010, 90(7-8): 1 075-1 100.
- [63] OSETSKY Y N, BACON D J. Atomic-scale mechanisms of void hardening in bcc and fcc metals[J]. *Philosophical Magazine*, 2010, 90(7-8): 945-961.
- [64] GRAMMATIKOPOULOS P, BACON D J, OS-

- ETSKY Y N. The influence of interaction geometry on the obstacle strength of voids and copper precipitates in iron[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2011, 19(1): 015004.
- [65] OSETSKY Y N, STOLLER R E. Atomic-scale mechanisms of helium bubble hardening in iron [J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2015, 465: 448-454.
- [66] ABE Y, TSURU T, SHI S, et al. Effect of the dilation caused by helium bubbles on edge dislocation motion in iron: Molecular dynamics simulation[J]. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 2016, 53(10): 1 528-1 534.
- [67] DOIHARA K, OKITA T, ITAKURA M, et al. Atomic simulations to evaluate effects of stacking fault energy on interactions between edge dislocation and spherical void in face-centred cubic metals[J]. *Philosophical Magazine*, 2018, 98(22): 2 061-2 076.
- [68] HAGHIGHAT S M H, FIKAR J, SCHÄUBLIN R. Effect of interatomic potential on the behavior of dislocation-defect interaction simulation in α -Fe [J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2008, 382(2-3): 147-153.
- [69] GIESSEN E V D, NEEDLEMAN A. Discrete dislocation plasticity: A simple planar model[J]. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 1995, 3(5): 689-735.
- [70] CUI Y, LIU Z L, ZHUANG Z. Quantitative investigations on dislocation based discrete-continuous model of crystal plasticity at submicron scale[J]. *International Journal of Plasticity*, 2015, 69: 54-72.
- [71] AKARAPU S, ZBIB H M, BAHR D F. Analysis of heterogeneous deformation and dislocation dynamics in single crystal micropillars under compression[J]. *International Journal of Plasticity*, 2010, 26(2): 239-257.
- [72] SCATTERGOOD R, BACON D. The strengthening effect of voids [J]. *Acta Metallurgica*, 1982, 30(8): 1 665-1 677.
- [73] CRONE J C, MUNDAY L B, KNAP J. Capturing the effects of free surfaces on void strengthening with dislocation dynamics[J]. *Acta Materialia*, 2015, 101: 40-47.
- [74] KUMAR N N, DURGAPRASAD P V, DUTTA B K, et al. Modeling of radiation hardening in ferritic/martensitic steel using multi-scale approach[J]. *Computational Materials Science*, 2012, 53(1): 258-267.
- [75] SOBIE C, BERTIN N, CAPOLUNGO L. Analysis of obstacle hardening using dislocation dynamics: Application to irradiation-induced defects[J]. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2015, 46a(8): 3 761-3 772.
- [76] WAS G S. *Fundamentals of radiation materials science*[M]. Berlin: Springer, 2017.
- [77] BACON D, KOCKS U, SCATTERGOOD R. The effect of dislocation self-interaction on the Orowan stress[J]. *Philosophical Magazine*, 1973, 28(6): 1 241-1 263.
- [78] KROUPA F, HIRSCH P. Elastic interaction between prismatic dislocation loops and straight dislocations[J]. *Discussions of the Faraday Society*, 1964, 38: 49-55.
- [79] SINGH B N, FOREMAN A J E, TRINKAUS H. Radiation hardening revisited: Role of intracascade clustering[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 1997, 249(2-3): 103-115.
- [80] SINGH B N, GHONIEM N M, TRINKAUS H. Modelling of hardening and localized plasticity in metals irradiated under cascade damage conditions[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2002, 307: 159-170.
- [81] VICTORIA M, BALUC N, BAILAT C, et al. The microstructure and associated tensile properties of irradiated fcc and bcc metals[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2000, 276: 114-122.
- [82] MONNET G. New insights into radiation hardening in face-centered cubic alloys[J]. *Scripta Materialia*, 2015, 100: 24-27.
- [83] MONNET G. Investigation of precipitation hardening by dislocation dynamics simulations[J]. *Philosophical Magazine*, 2006, 86(36): 5 927-5 941.
- [84] JIAO Z, HESTERBERG J, WAS G S. Insights into the sources of irradiation hardening in a neutron irradiated 304L stainless steel following post-irradiation annealing[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2019, 526: 151754.