

PMT3540 - Aula 5 - Efeito da irradiação sobre as estruturas de discordâncias

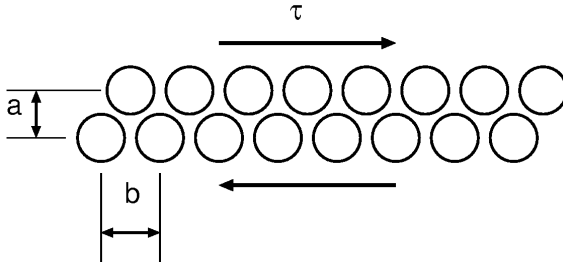
Cláudio Geraldo Schön

Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais
Escola Politécnica da Universidade de São Paulo

18 de setembro de 2019

Tensão teórica de escorregamento

Frenkel (1926)



$$\tau = \frac{Gb}{2\pi a} \sin \frac{2\pi x}{b} \Rightarrow \tau_{max} = \frac{b}{a} \frac{G}{2\pi}$$

Ref.: D. Hull, D. J. Bacon, "Introduction to dislocations" Oxford:Pergamon Press, 3ed., 1984.

Tensão teórica de escorregamento

Exemplo: Cu (CFC)

Cu (300K):

- $G = 48 \text{ GPa}$
- $a_0 = 0,36149 \text{ nm}$
- $a = \frac{a_0}{\sqrt{3}} = 0,2087 \text{ nm}$
- $b = \frac{a_0}{\sqrt{2}} = 0,2556 \text{ nm}$
- $\tau_{max} \approx 9,36 \text{ GPa}$
- $\tau_{CRSS} \approx 0,48 \text{ MPa} (\approx 10^{-4} \tau_{max}!)$

Orowan, Polanyi, Taylor (1934, independentemente) $\Rightarrow$ discordâncias.

Cinemática de discordâncias

Velocidade das discordâncias

Discordâncias se movem por:

- Escorregamento (*Glide*)
- Ascensão (*Climb*)

Para o escorregamento:

$$\ln v_g \propto \ln \tau \Rightarrow v_g = \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^m$$

e

$$\ln v_g \propto \frac{1}{T} \Rightarrow v_g = v_0 \exp \left(-\frac{\Delta H_g}{k_B T} \right)$$

Cinemática de discordâncias

Ascensão

- Importante para discordâncias em cunha e para anéis (*loops*) prismáticos.
- Ocorre pela emissão/absorção de lacunas/intersticiais $\Rightarrow$ movimento não conservativo.

Discordância em hélice

Campo de deslocamento

Em coordenadas cilíndricas (z ao longo da linha de discordância):

$$u_r = u_\theta = 0$$

e

$$u_z = \frac{b}{2\pi} \theta$$

Em coordenadas cartesianas:

$$u_z = \frac{b}{2\pi} \tan^{-1} \frac{y}{x}$$

Discordância em hélice

Campo de deformação

Da definição:

$$\varepsilon_{\theta z} = \frac{1}{r} \frac{\partial u_z}{\partial \theta} = \frac{b}{2\pi r}$$

todos os outros termos do tensor são nulos.

Em coordenadas cartesianas:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} = \frac{b}{2\pi r} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sin \theta \\ 0 & 0 & -\cos \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta & 0 \end{pmatrix}$$

Discordância em hélice

Campo de tensão

O campo de tensão é dado por:

$$\sigma_{\theta z} = G\varepsilon_{\theta z} = \frac{Gb}{2\pi r}$$

Todos os outros termos se anulam.

Em coordenadas cartesianas:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \frac{Gb}{2\pi r} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sin \theta \\ 0 & 0 & -\cos \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta & 0 \end{pmatrix}$$

Discordância em cunha

Campo de deslocamento

$$\begin{aligned}
 u_x &= \frac{b}{2\pi} \left[\tan^{-1} \frac{y}{x} + \left(\frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} \frac{xy}{x^2 + y^2} \right) \right] \\
 u_y &= \frac{b}{2\pi} \left[-\frac{\mu}{(\lambda + 2\mu)} \ln \frac{x^2 + y^2}{c} + \left(\frac{\lambda + \mu}{\lambda + 2\mu} \frac{y^2}{x^2 + y^2} \right) \right] \\
 u_z &= 0
 \end{aligned}$$

onde $\lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}$ e $\mu = G$ são as constantes de Lamé. A constante c é introduzida na equação para fazer o argumento do logaritmo adimensional, mas na determinação das deformações (que são derivadas dos deslocamentos) ele acaba se anulando.

Discordância em cunha

Campo de deformação

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} & \varepsilon_{xy} & \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yx} & \varepsilon_{yy} & \varepsilon_{yz} \\ \varepsilon_{zx} & \varepsilon_{zy} & \varepsilon_{zz} \end{pmatrix} = \frac{b}{2\pi(x^2+y^2)^2} \begin{pmatrix} -y \left[\frac{\mu y^2 + (2\lambda + 3\mu)x^2}{(\lambda + 2\mu)} \right] & \frac{x}{(1-\nu)} (x^2 - y^2) & 0 \\ \frac{x}{(1-\nu)} (x^2 - y^2) & -y \left[\frac{\mu y^2 - (2\lambda + \mu)x^2}{(\lambda + 2\mu)} \right] & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Discordância em cunha

Campo de tensão

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \frac{Gb}{\pi(1-\nu)r} \begin{pmatrix} -\sin \theta (2 + \cos 2\theta) & \cos \theta \cos 2\theta & 0 \\ \cos \theta \cos 2\theta & \sin \theta \cos 2\theta & 0 \\ 0 & 0 & -2\nu \sin \theta \end{pmatrix}$$

Energia da discordância

Discordância em hélice

Lembrando (energia por unidade de volume em um campo elástico):

$$u_{el} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=x,y,z} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=r,\theta,z} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}$$

Aplicando à discordância em hélice:

$$u_{el} = \frac{1}{2} \sigma_{\theta z} \varepsilon_{\theta z} = \frac{Gb^2}{8\pi^2 r^2}$$

Integrando em r obtemos a energia por unidade de comprimento de linha.

$$U_{dis} = \int_{r_0}^{r_{max}} u_{el} 2\pi r dr = \frac{Gb^2}{4\pi} \ln \left(\frac{r_{max}}{r_0} \right) + U_c \quad (1)$$

onde r_0 é o raio do núcleo, que corresponde à região em que a elasticidade linear deixa de ser válida. A energia dessa região é adicionada como uma constante de integração (U_c).

Energia da discordâncias

Discordâncias em cunha e mistas

Para o caso de discordâncias em cunha o resultado para a energia elástica por unidade de comprimento de linha é:

$$U_{dis} = \frac{Gb^2}{4\pi(1-\nu)} \ln \left(\frac{r_{max}}{r_0} \right) + U_c$$

Para o caso geral (discordâncias mistas):

$$U_{dis} = \left[\frac{Gb^2 \sin^2 \psi}{4\pi(1-\nu)} + \frac{Gb^2 \cos^2 \psi}{4\pi} \right] \ln \left(\frac{r_{max}}{r_0} \right) + U_c(\psi) =$$

$$\frac{Gb^2(1-\cos^2 \psi)}{4\pi(1-\nu)} \ln \left(\frac{r_{max}}{r_0} \right) + U_c(\psi)$$

onde ψ é o ângulo no plano que contém a linha da discordância entre a direção da linha e a direção correspondente à configuração em cunha.

Energia da discordância

Valores típicos

- $r_0 \approx 5b$
- r_{max} : livre caminho médio entre discordâncias
- $U_c \approx 0,1 u_{el}$

$$U_{dis} = \alpha Gb^2$$

com $\alpha \approx 0,5 - 1,0$.

Trabalho de escorregamento

Um elemento de linha $d/$ de uma discordância com vetor de Burgers b , sob a ação de uma tensão de cisalhamento τ , se move no plano de escorregamento por uma distância ds , o trabalho realizado será:

$$dW = A\tau \left(\frac{dsd/}{A} \right) b$$

Definimos a força de escorregamento F_b por:

$$F_b = \frac{dW}{dsd/} = \tau b$$

Tensão de linha

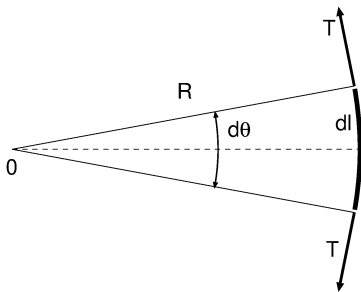
$$T = \alpha G b^2$$

mas

$$T d\theta = \tau b dl \Rightarrow \tau = \frac{T}{bR}$$

portanto

$$\tau = \frac{\alpha G b}{R}$$

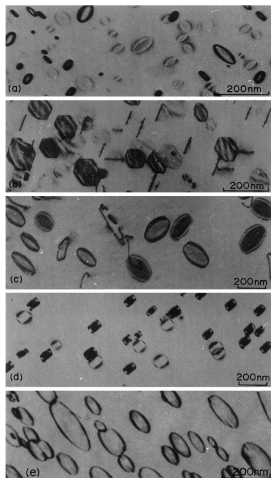


Efeitos da cascata de danos sobre a microestrutura

- Kiritani → dano é manifestação de aglomeração (*clustering*) de defeitos.
- Consequência da supersaturação de defeitos (lacunas e intersticiais)
 - Têmpera a partir de temperaturas muito altas
 - Irradiação por elétrons
 - Irradiação por nêutrons e íons pesados
 - Deformação plástica severa ou deformação dinâmica

M. Kiritani "Similarity and difference between fcc, bcc and hcp from the view point of point defect cluster formation" *J. Nucl. Mater.* **276**, 2000, 41 – 49.

Irradiação por elétrons



Irradiação por elétrons (> 1 MeV)

- a. Anéis de Frank em Al (111)
- b. Anéis de Frank em Cu (111)
- c. Anéis de Frank em Ni (111)
- d. Anéis prismáticos em Fe (100)
- e. Anéis de Frank em Zn (plano basal)

M. Kiritani "Similarity and difference between fcc, bcc and hcp from the view point of point defect cluster formation" *J. Nucl. Mater.*

276, 2000, 41 – 49.

Irradiação por nêutrons

Fusão ou Fissão

- *Clusters* de lacunas

- metais CFC (exceto Al) → grande número de *clusters* formados em cascatas ou subcascatas, normalmente organizados em tetraedros de defeitos de empilhamento
- Alumínio → não se observam tetraédros de defeitos de empilhamento, os *clusters* se organizam em forma de anéis de Frank
- Metais CCC → não se observam *clusters* de lacunas

- *Clusters* de intersticiais → comuns em metais CFC e CCC

M. Kiritani "Similarity and difference between fcc, bcc and hcp from the view point of point defect cluster formation" *J. Nucl. Mater.* **276**, 2000, 41 – 49.

Resumo

Schibli e Schäublin sistematizam os efeitos microestruturais do dano por irradiação de nêutrons:

- *Black dots* < 1 nm
- Anéis de Frank ou prismáticos
- Tetraedros de defeito de empilhamento
- Cavidades e bolhas (Aula 6)
- Precipitados (Aula 7)

R. Schibli, R. Schäublin "On the formation of stacking fault tetrahedra in irradiated austenitic stainless steels – a literature review"
J. Nucl. Mater. **442**, 2013, S761 – S767.

Fim da primeira parte

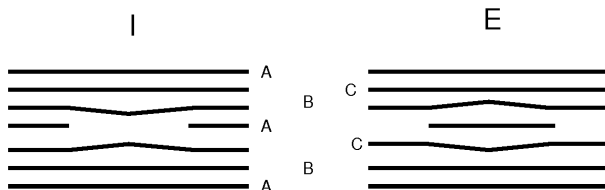
Black dots

Literalmente: pontos pretos. *Clusters* muito pequenos, com menos de 1 nm de diâmetro, que não podem ser diretamente observados na resolução típica do TEM. Podem ser formados diretamente como *clusters* de formato indefinido, ou já formar cavidades ou anéis (de intersticiais ou de lacunas).

R. Schibli, R. Schäublin "On the formation of stacking fault tetrahedra in irradiated austenitic stainless steels – a literature review"
J. Nucl. Mater. **442**, 2013, S761 – S767.

Anéis de Frank

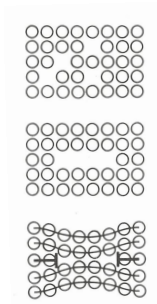
Cascata de dano: enorme população de lacunas e de intersticiais fora de equilíbrio → nucleação de anéis de Frank.



Anéis de Frank intrínsecos (I) e extrínsecos (E) → Defeito de empilhamento (DE).

Formação de anéis de Frank

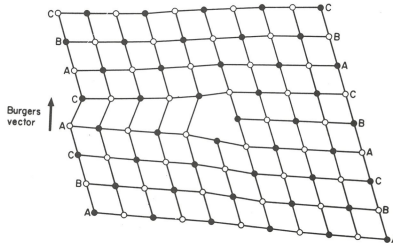
Formação de um anel intrínseco pela condensação de lacunas fora de equilíbrio.



Ref.: D. Hull, D. J. Bacon, "Introduction to dislocations" Oxford:Pergamon Press, 3ed., 1984.

Parcial de Frank

A discordância que delimita um anel de Frank logo após sua formação não é uma discordância completa, mas sim uma parcial de Frank, com vetor de Burgers $b = \frac{1}{3}[111]$, essa discordância é sésil.



Ref.: D. Hull, D. J. Bacon, "Introduction to dislocations" Oxford:Pergamon Press, 3ed., 1984.

Evolução dos anéis de Frank

Produção de anéis prismáticos em metais de alta EDE

As parciais de Frank podem se dissociar para reação:

$$\frac{1}{3}[111] + \frac{1}{6}[11\bar{2}] \rightarrow \frac{1}{2}[110]$$

Exemplo em Al-5%Mg, note o desaparecimento das franjas de interferência no anel A.

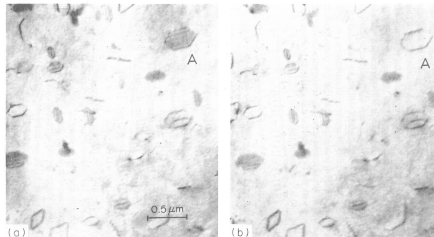


FIG. 5.12. Prismatic and sessile dislocation loops in an aluminium 3.5 per cent magnesium alloy quenched from 550°C into silicone oil at -20°C. (a) Immediately after quenching; some of the loops, e.g. A, contain stacking faults and are Frank sessile dislocations. (b) After being heated slightly; stacking fault in one of the loops has disappeared indicating that the loop is now a perfect dislocation. (From Westmacott, Barnes, Hull and Smallman, *Phil. Mag.* 6, 929, 1961.)

Ref.: D. Hull, D. J. Bacon, "Introduction to dislocations" Oxford:Pergamon Press, 3ed., 1984.

Evolução dos anéis de Frank

Produção de anéis prismáticos em metais de alta EDE

As parciais de Frank podem se dissociar para reação:

$$\frac{1}{3}[111] + \frac{1}{6}[11\bar{2}] \rightarrow \frac{1}{2}[110]$$

A reação de dissociação depende do balanço de energia entre o anel de Frank e o custo de formação do anel prismático, que tem que ser compensado pelo desaparecimento do DE. Hull e Bacon deduzem a expressão:

$$\gamma_{DE} > \frac{Ga^2}{24\pi r} \left(\frac{2 - \nu}{1 - \nu} \right) \ln \left(\frac{2r}{r_0} \right) \quad (2)$$

r : raio do anel.

Usando valores típicos para o Al, os autores estimam que a EDE tem que ser superior a 60 mJ m^{-2} para que a reação seja energeticamente favorável.

Ref.: D. Hull, D. J. Bacon, "Introduction to dislocations" Oxford:Pergamon Press, 3ed., 1984.

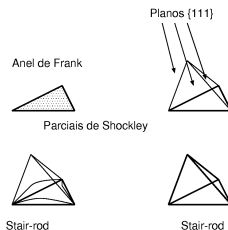
Evolução dos anéis de Frank

Tetraedros de defeitos de empilhamento em metais de baixa EDE

Em metais de baixa EDE, a parcial de Frank pode se decompor pela reação:

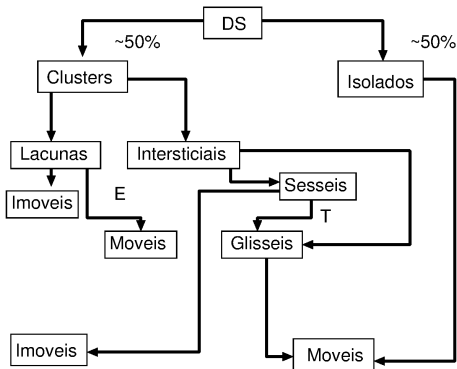
$$\frac{1}{3}[111] \rightarrow \frac{1}{6}[101] + \frac{1}{6}[121]$$

A discordância $\frac{1}{6}[101]$ é conhecida pelo termo em inglês "stair-rod" e a parcial de Shockley é emitida em um plano de escorregamento que intersecta o plano do anel original.



Panorama geral

Produção fortemente segregada: *clusters* de lacunas no centro da cascata, *clusters* de intersticiais na periferia.

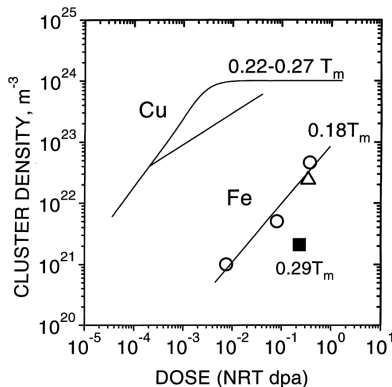


- DS:** Defeitos sobreviventes
- T:** Transformação (pela absorção de lacunas)
- E:** Emissão de lacunas

Adaptado de: B. N. Singh *et al.* "Aspects of microstructure evolution under cascade damage conditions" *J. Nucl. Mater.* **251**, 1997, 107 – 122.

Propriedades dos *clusters*

Simulações de MD

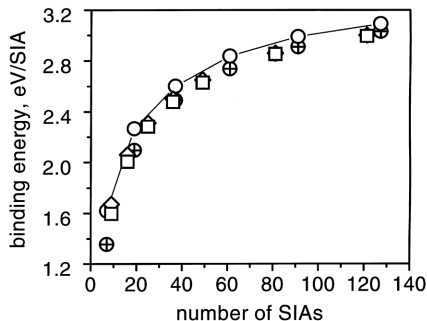


Comparação de densidade de clusters em Fe e Cu produzidos por nêutrons de fissão em $T < 0.3 T_f$.

Yu. N. Osetsky *et al.* "Stability and mobility of defect clusters and dislocation loops in metals" *J. Nucl. Mater.* **276**, 2000, 65 – 77.

Propriedades dos *clusters*

Simulações de MD



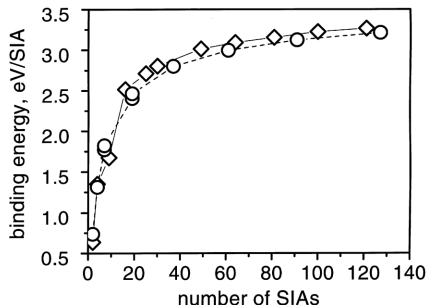
Intersticiais

- ○: anéis hexagonais
 $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle \{111\}$
- ⊕: anéis hexagonais
 $\langle 100 \rangle \{100\}$
- ◇: anéis quadrados
 $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle \{111\}$
- □: anéis quadrados
 $\langle 100 \rangle \{100\}$

Yu. N. Osetsky *et al.* "Stability and mobility of defect clusters and dislocation loops in metals" *J. Nucl. Mater.* **276**, 2000, 65 – 77.

Propriedades dos *clusters*

Simulações de MD



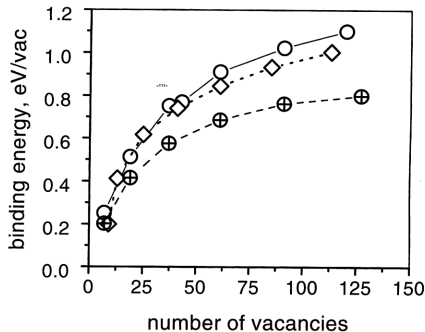
Intersticiais

- : conjuntos de *dumbbells*
 $\{100\}$ e anéis de Frank
 $\frac{1}{3} \langle 111 \rangle \{111\}$
- ◇: conjuntos de *crowdions*
 $\langle 110 \rangle$ e anéis prismáticos
 $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle \{110\}$

Yu. N. Osetsky *et al.* "Stability and mobility of defect clusters and dislocation loops in metals" *J. Nucl. Mater.* **276**, 2000, 65 – 77.

Propriedades dos *clusters*

Simulações de MD



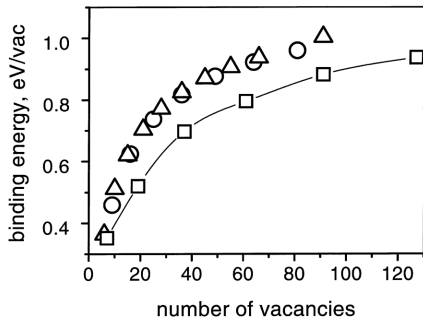
Lacunas

- : anéis prismáticos $\frac{1}{2} < 111 >$
- ⊕: anéis com defeito de empilhamento $\frac{1}{2} < 110 >$
- ◇: anéis prismáticos $< 100 >$

Yu. N. Osetsky *et al.* "Stability and mobility of defect clusters and dislocation loops in metals" *J. Nucl. Mater.* **276**, 2000, 65 – 77.

Propriedades dos *clusters*

Simulações de MD



Lacunas

- ○: anéis prismáticos $\frac{1}{2} < 110 >$
- ◻: anéis de Frank $\frac{1}{3} < 111 >$
- △: tetraedros de defeito de empilhamento

Yu. N. Osetsky *et al.* "Stability and mobility of defect clusters and dislocation loops in metals" *J. Nucl. Mater.* **276**, 2000, 65 – 77.

Mobilidade dos *clusters*

Simulações de MD

- Pequenos *clusters* de intersticiais movem-se indistintamente (tanto para Cu, quanto para Fe) em qualquer direção, a energia de ativação diminui com o aumento do número de átomos do *cluster*.
- Para *clusters* maiores (4 a 19 intersticiais) a movimentação é limitada na direção do *crowdion*.
- Para *clusters* ainda maiores (20 - 30 intersticiais), comportamento diferente dos dois metais
 - Fe: movimento unidimensional, como no caso dos *clusters* menores
 - Cu: dissociação e recomposição periódica, eles passam a ser imóveis no estado associado
- *Clusters* de lacunas no Fe são móveis e tem comportamento similar ao de *clusters* de intersticiais de tamanho similar.

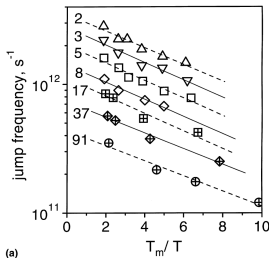
Yu. N. Osetsky *et al.* "Stability and mobility of defect clusters and dislocation loops in metals" *J. Nucl. Mater.* **276**, 2000, 65 – 77.

Quantificação da difusividade

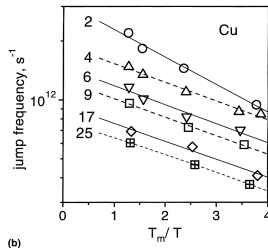
Simulações de MD

A frequência de saltos de um defeitos de tamanho n segue uma relação de Arrhenius

$$\nu^n = \nu_0^n \exp\left(-\frac{H_m^n}{k_B T}\right)$$



(a) Fe,

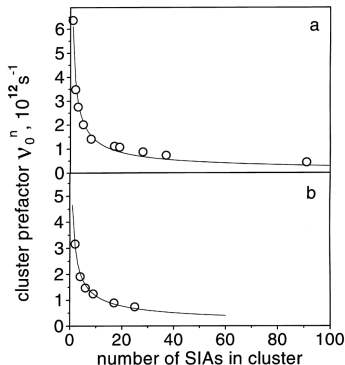


(b) Cu

Yu. N. Osetsky *et al.* "Stability and mobility of defect clusters and dislocation loops in metals" *J. Nucl. Mater.* **276**, 2000, 65 – 77.

Quantificação da difusividade

Simulações de MD



$$\nu^n = \nu_0 n^{-S} \exp \left(- \frac{\langle H_m \rangle}{k_B T} \right)$$

	ν_0 [10^{12} s^{-1}]	S	$\langle H_m \rangle$ [eV]
(a) Fe $\frac{1}{2} \langle 111 \rangle$	6,1	0,66	$0,023 \pm 0,003$
(b) Cu $\frac{1}{2} \langle 110 \rangle$	4,7	0,61	$0,024 \pm 0,003$

Yu. N. Osetsyky *et al.* "Stability and mobility of defect clusters and dislocation loops in metals" *J. Nucl. Mater.* **276**, 2000, 65 – 77.

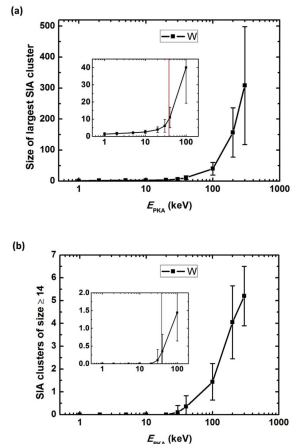
Simulações mais recentes

Simulações de MD de cascatas

Formação de *clusters* de intersticiais em W puro:

- a. média do maior tamanho de *cluster* em função da energia do PKA.
- b. Número de clusters com tamanho maior que 14 em função da energia do PKA.

A linha vermelha indica a energia de 38 keV em que os autores identificam uma mudança de regime (Aula 4) na produção de pares de Frenkel. As barras de erro representam o desvio padrão da média.



J. Fu., Y. Chen *et al*. "Molecular dynamics simulations of high-energy radiation damage in W and W – Re alloys" *J. Nucl. Mater.*

524, 2019, 9 – 20.

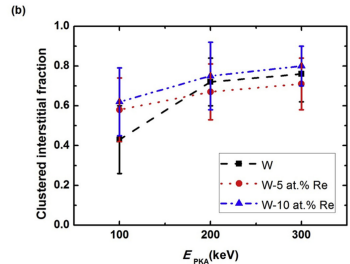
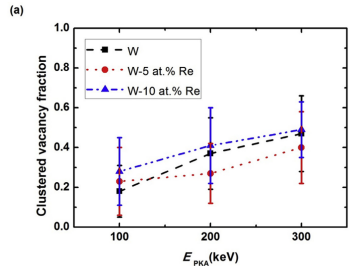
Fração de defeitos em *clusters*

Fração de defeitos em *clusters*:

- a. Lacunas com tamanho maior que 3
- b. Intersticiais com tamanho maior que 4

As barras de erro representam o desvio padrão das diferentes simulações.

J. Fu., Y. Chen *et al.* "Molecular dynamics simulations of high-energy radiation damage in W and W – Re alloys" *J. Nucl. Mater.* **524**, 2019, 9 – 20.



Distribuição de defeitos em *clusters*

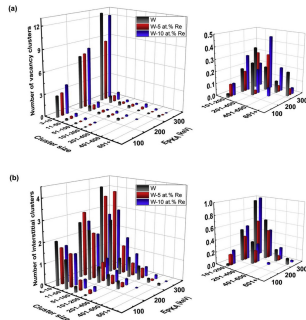
W puro e ligas W – Re

Distribuição de defeitos em *clusters*:

- a. Lacunas com tamanho maior que 3
- b. Intersticiais com tamanho maior que 4

As barras de erro representam o desvio padrão das diferentes simulações.

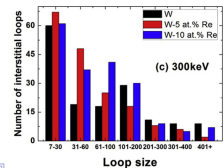
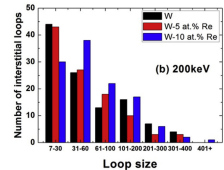
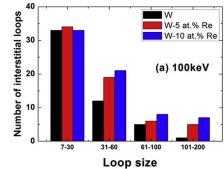
J. Fu., Y. Chen *et al.* "Molecular dynamics simulations of high-energy radiation damage in W and W – Re alloys" *J. Nucl. Mater.* **524**, 2019, 9 – 20.



Formação de anéis intersticiais

W puro e ligas W – Re

E_{PKA} [keV]	Re [at%]	$\frac{1}{2} < 111 >$	$< 100 >$	mistos	total
100	0	50	0	1	51
	5	63	0	1	64
	10	64	0	5	69
200	0	100	0	10	110
	5	99	0	5	104
	10	103	0	13	116
300	0	136	1	18	155
	5	159	0	15	174
	10	170	0	20	190



J. Fu., Y. Chen *et al.* "Molecular dynamics simulations of high-energy radiation damage in W and

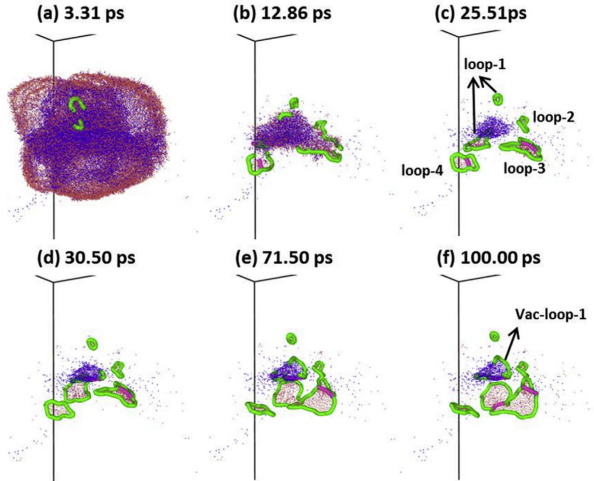
W – Re alloys" *J. Nucl. Mater.* **524**, 2019, 9 – 20.

Formação dos anéis

Simulações por MD de cascatas de 300 keV em W

Esferas azuis: intersticiais,
esferas vermelhas: lacunas,
linhas verdes:
discordâncias com
 $\mathbf{b} = \frac{1}{2} \langle 111 \rangle$, linhas em
rosa: discordâncias com
 $\mathbf{b} = \langle 100 \rangle$.

J. Fu., Y. Chen *et al*. "Molecular dynamics
simulations of high-energy radiation
damage in W and W – Re alloys" *J. Nucl.
Mater.* **524**, 2019, 9 – 20.

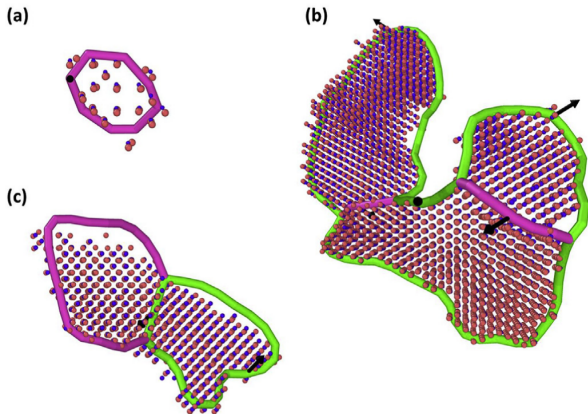


Formação dos anéis

Detalhes dos anéis

Esferas azuis: intersticiais,
esferas vermelhas: lacunas,
linhas verdes: discordâncias
com $\mathbf{b} = \frac{1}{2} \langle 111 \rangle$, linhas em
rosa: discordâncias com
 $\mathbf{b} = \langle 100 \rangle$.

- a. anel $\langle 100 \rangle$ com 24 intersticiais
- b. maior anel observado no W puro, com 755 intersticiais
- c. anel misto com 247 intersticiais



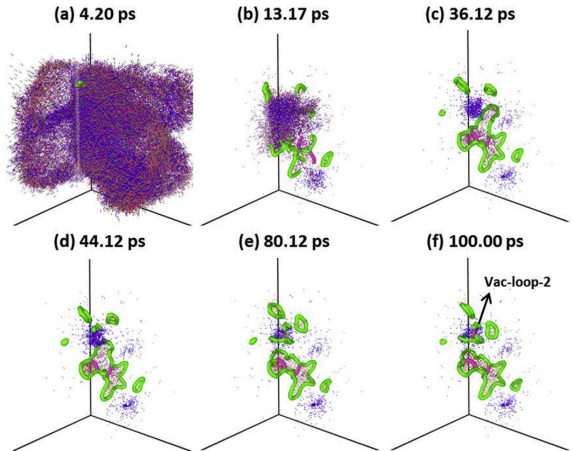
J. Fu., Y. Chen *et al.* "Molecular dynamics simulations of high-energy radiation damage in W and W – Re alloys" *J. Nucl. Mater.* **524**, 2019, 9 – 20.

Formação dos anéis

Simulações por MD de cascatas de 300 keV em W – 10Re

Esferas azuis: intersticiais de W, esferas vermelhas: lacunas, esferas verdes: intersticiais de Re, linhas verdes: discordâncias com $\mathbf{b} = \frac{1}{2} \langle 111 \rangle$, linhas em rosa: discordâncias com $\mathbf{b} = \langle 100 \rangle$.

J. Fu., Y. Chen *et al.* "Molecular dynamics simulations of high-energy radiation damage in W and W – Re alloys" *J. Nucl. Mater.* **524**, 2019, 9 – 20.

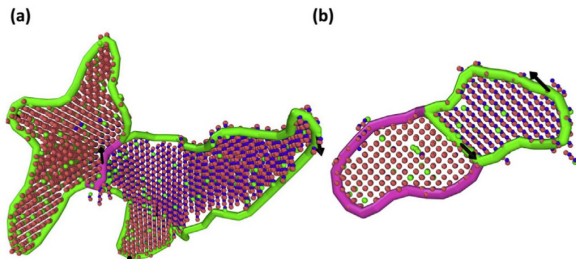


Formação dos anéis

Detalhes dos anéis formados em W – 10Re

Esferas azuis: intersticiais de W, esferas vermelhas: lacunas, esferas verdes: intersticiais de Re, linhas verdes: discordâncias com $\mathbf{b} = \frac{1}{2} \langle 111 \rangle$, linhas em rosa: discordâncias com $\mathbf{b} = \langle 100 \rangle$.

- a. maior anel observado no W-10Re puro, com 735 intersticiais
- b. anel misto com 234 intersticiais



J. Fu., Y. Chen *et al.* "Molecular dynamics simulations of high-energy radiation damage in W and W – Re alloys" *J. Nucl. Mater.* **524**, 2019, 9 – 20.