合肥物质科学研究院固体所在面向等离子体钨材料氢氦效应研究中获进展

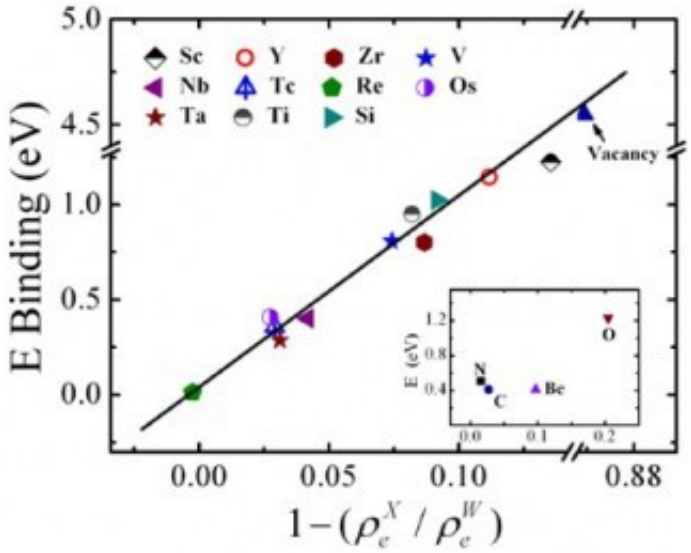

图 1 钨中替代元素-He 结合能与相对电荷密度之间的关系。ρ_e^W 和 [illegible] 指纯 [illegible] 中 [illegible] 所处位置的电荷密度。插图为间隙 C/N/Be/O-He 结合能与相对电荷密度间的关系。

技术 新能源网 china-nengyuan.com

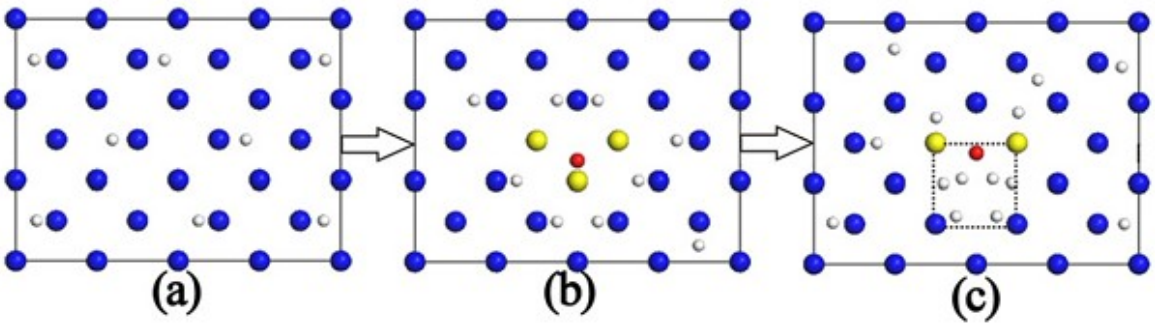

图 2 钨中杂质诱捕氢形成氢泡机制示意图。蓝色大球为钨原子，白色小球为氢原子，红色小球为杂质间隙原子，（a）纯 W 中间隙 H 均匀分布，没有聚集成间隙 cluster，（b）间隙 H 聚集在 O 周围形成 O-Hn，周围出现不稳定格点（黄色大球），(c)不稳定格点处产生空位，形成稳定的 V-O-Hn cluster。

近期，中科院合肥物质科学研究院固体物理研究所科研人员通过与等离子体所及近代物理所科研人员的合作，在面向等离子体钨材料氢氦效应的计算模拟研究方面取得新进展。相关研究结果发表在聚变领域期刊《核聚变》（Nuclear Fusion）和《核材料》（Journal of Nuclear Materials）上。

钨基材料由于具有高熔点、高溅射阈值、低氚滞留、低热膨胀系数等优点，成为国际热核聚变堆最有希望的面向等离子体材料（PFM）。在聚变服役过程中，PFM在强束低能H/He离子流的辐照下引起结构显著变化（如H/He聚集、长大起泡甚至形成表面纳米丝状结构），从而降低PFM表面热导率，增大表面熔化蒸发和芯部污染的可能性。另一方面，钨在中子辐照下会嬗变一些新元素Re, Os和Ta等；同时添加合金元素（Re，Ta，Os，Ti和V）可以有效改善其脆性和硬度。因此，钨中嬗变/合金元素与He之间相互作用方面的研究显得尤为重要。固体所研究人员基于第一性原理计算研究16种元素（包括常见嬗变/合金元素）与He之间的相互作用以及He在杂质元素周围的扩散性质。研究发现，间隙原子（Be，C，N和O）对He的捕获半径是替代原子的2倍，其对He的捕获效应更为显著。而替代原子与He之间的结合能正比于He原子所在位置的电荷密度，即He更易在电荷密度较低处聚集（见图1）。扩散计算表明Re/Ta处He

的迁移与扩散行为几乎不受影响；而Os，Ti和V对He有明显的捕获作用。对比分析表明，相比于Ti，Os，Re和V等元素，Ta更适合作为钨的合金元素，这为高性能钨合金的设计提供了新思路。相关研究结果发表在《核聚变》（Nuclear Fusion, 2013, 53, 073049）上。

针对钨中氢泡形成机制问题，研究发现间隙杂质原子的引入能引起局域晶格畸变，导致周围格点的稳定性降低，空位易于在该区域产生。间隙杂质原子可以作为氢的诱捕点，形成间隙杂质原子和多个间隙氢原子的缺陷团。该缺陷团的形成会显著弱化周围钨原子间相互作用，甚至导致某些格点不稳定，达到空位自发形成的一个必要条件。基于计算结果，我们初步提出氢泡成核机制（图2）：氢原子在间隙杂质原子（如氧）周围聚集导致周围出现不稳定格点，在该格点处形成新的空位并进一步捕获更多的氢原子，形成空位-杂质-氢团簇。该团簇通过在其周围弱键区域内形成新的空位，从而捕获更多的原子，最终形成氢泡。相关研究结果发表在《核材料》（Journal of Nuclear Materials 2013, 433, 357-363）上。

上述研究工作得到科技部国际热核实验堆（ITER）计划专项、国家自然科学基金委和中国科学院的支持。

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/51746.html