合肥研究院纳米晶金属材料钨和铁抗辐照性能计算模拟研究获进展

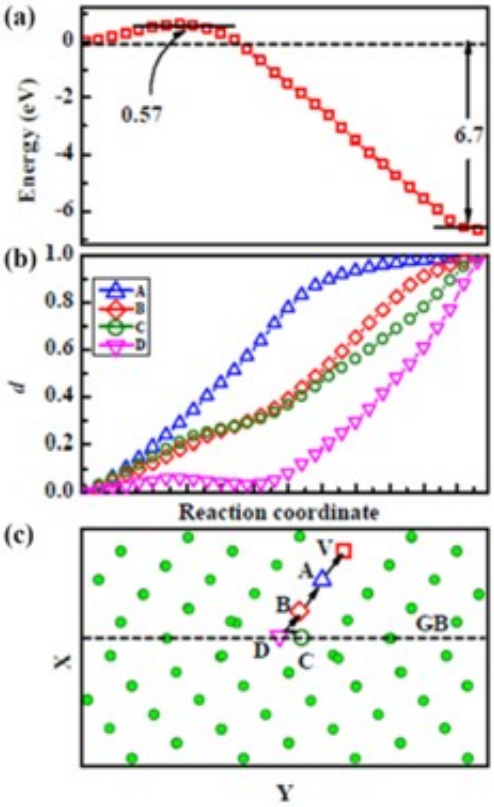

图 1 晶界附近空位-间隙对的复合过程。

(a)复合过程中系统能量的变化；

(b)复合过程中涉及的原子的归一化位，其中 d 是复合中原子的位移除以相应原子的最大位移；

(c)复合过程示意。A、B、C 和 D 是复合过程中位移大于 0.6 Å 的原子，C 是捕获在晶界处的间隙原子。坐标轴 X 和 Y 分别沿着[3 1 0]和[$\bar{1}$ 3 0]。

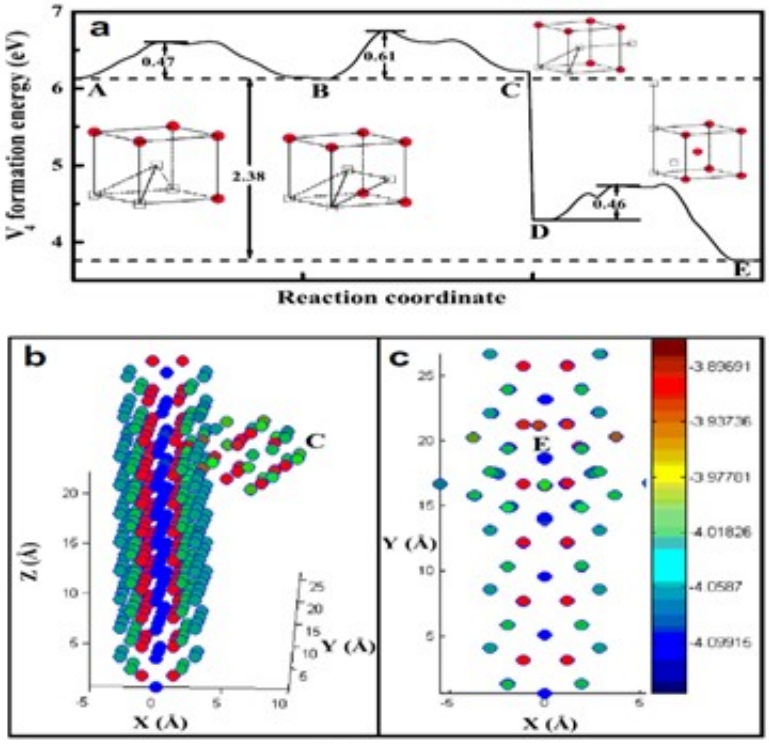

图 2

(a)晶界附近空位团簇 V_4 被晶界吸收过程中一系列构型变化；
(b)晶界附近团簇构型；
(c)晶界处团簇构型。A 点和晶界的距离大概 7.5 Å，E 位于晶界处。

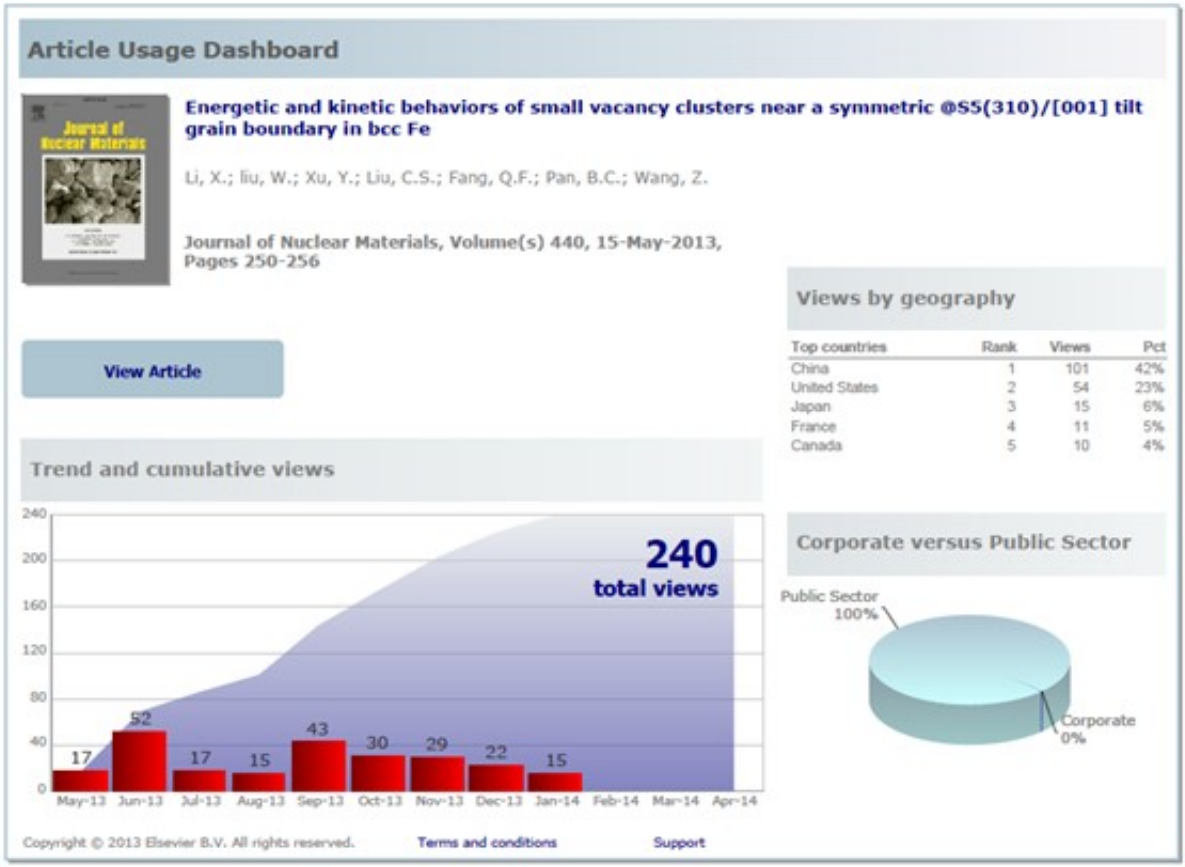

图 3 两篇发表在《核材料》上的文章使用情况

近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所科研人员与合肥研究院等离子体物理研究所、中国科学院近代物理研究所科研人员合作，在纳米晶金属材料钨和铁抗辐照性能计算模拟研究方面取得新进展。相关研究成果发表在聚变领域期刊《核聚变》（Nuclear Fusion）和核材料领域期刊《核材料》（Journal of Nuclear Materials）上。

钨及其合金中的辐照损伤问题是聚变研究中的重要问题之一。辐照诱导的微观缺陷不仅会使材料性能降级，还会改变H/He在基体材料中的滞留等行为。近年来的研究表明，纳米晶和纳米级氧化物弥散增强的材料通常能降低辐照缺陷在基体中的累积，从而表现出较佳的抗辐照损伤性能。

然而，其微观机制尚不清楚。合肥研究院固体所研究人员使用分子动力学和静态计算方法，考察了晶界在修复纳米结构钨中辐照损伤方面扮演的能量学和动力学角色。研究发现，在辐照过程中，相对于空位而言，间隙原子被晶界优先吸收，从而在级联碰撞冷却后形成晶界附近富含空位而晶界内部间隙高度局域的缺陷结构。晶界通过降低其附近空位/间隙的形成能和扩散能垒而作为缺陷阱，特别是间隙在晶界附近不需要克服能垒即可迁入晶界。

优先进入晶界内的间隙可与附近的空位以低能垒、多原子协同参与的方式复合（图1）。同时研究人员发现，晶界增强空位扩散、复合的区域较为有限（1-1.5纳米），使得该区域体积分数较小（几个百分点）。这表明实验上提高钨基材料抗辐照性能的两种途径——细化钨晶粒和加入纳米小颗粒——后者可能更为有效。相关研究结果发表在《核聚变》（Nuclear Fusion, 2013, 53, 123014）杂志上。

针对候选结构材料——铁素体/马氏体钢的辐照损伤问题，科研人员使用分子动力学、静态计算和温度加速的动力学方法，考察了晶界附近小型空位团簇的能量学和动力学行为。研究表明：晶界除了作为点缺陷（空位和间隙）的阱外，还可以作为小型空位团簇（所含空位数1-9）的阱。空位团簇在晶界附近具有较高的活性。其经过块体扩散、局部吸收和局部沿晶扩散过程而被晶界吸收（图2）。相关研究结果发表在《核材料》（Journal of Nuclear Materials, 2013, 440, 250-256）杂志上。

为了深入考察晶界对辐照缺陷产生和演化的影响，科研人员使用静态计算系统考察了钨、钼、铁等金属中部分晶界附近空位/间隙的扩散复合问题，获得了晶界与缺陷作用的一系列参数：缺陷形成能，偏聚能，扩散-复合能垒，以及相应的作用范围。这些参数为分析材料的抗辐照性能和设计新的高性能抗辐照材料提供了重要的基础数据。相关研究结果发表在《核材料》（Journal of Nuclear Materials, 2014, 444, 229-236）杂志上。文章发表后受到国内外同行们的关注（参见艾斯维尔科技期刊Elsevier Science & Technology Journals近期提供的文章使用情况图Article Usage Dashboard，图3）。

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/58891.html