

面向等离子体钨材料中氢氦气泡形成研究获进展

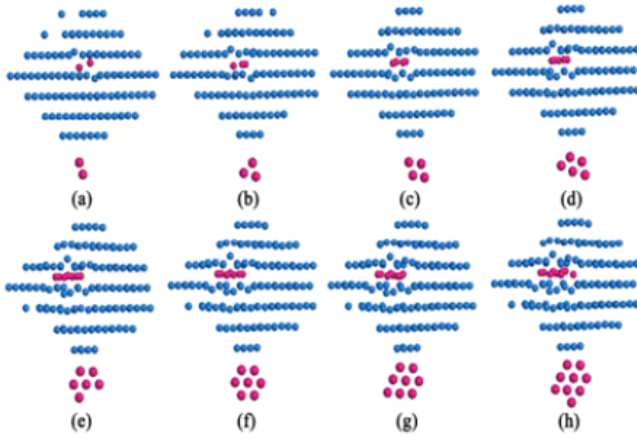


图 1. 2-9 个氦原子在钨(110)层间聚集形成间隙氦原子单层结构，其中蓝色球为钨原子，粉红色球为氦原子。

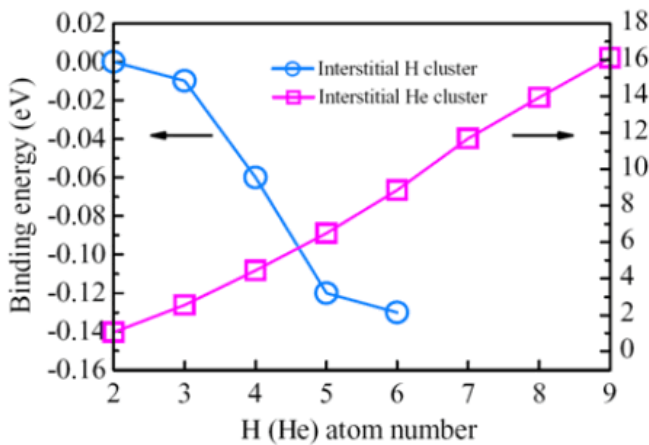


图 2. 间隙氢和氦团簇结合能分别与团簇中氢和氦原子数的关系。

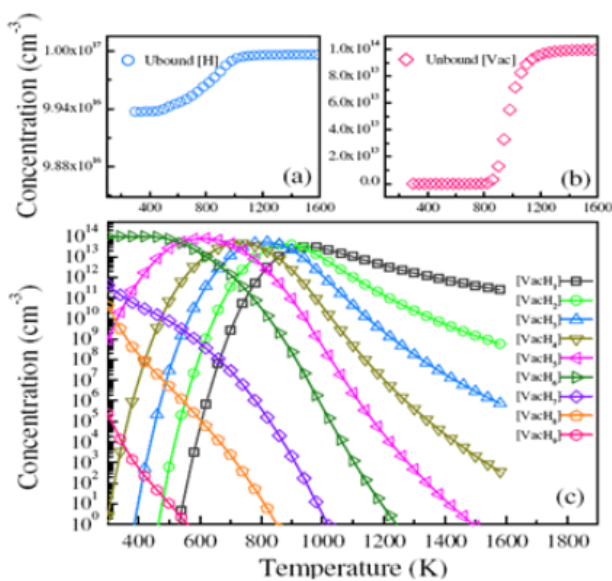


图 3. (a) 和 (b) 分别为间隙氢原子和空位浓度随温度变化；(c) 为空位-氢复合体浓度随温度变化。

近期，中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所内耗与固体缺陷实验室科研人员与合肥研究院等离子体物理研究所和中国科学技术大学科研人员合作，在面向等离子体材料钨中氢氦气泡成核和生长机制研究方面取得新进展，相关科研成果发表在聚变领域权威期刊《核聚变》（Nuclear Fusion）上。

体心立方钨具有高熔点，良好的抗中子辐照和抗溅射腐蚀等优点，被选为国际热核聚变实验堆（ITER）的面向等离子体材料。来自芯部等离子体（D-T聚变反应）中的氢同位素和氦离子在材料中的行为往往导致面向等离子体材料的失效。

科研人员使用密度泛函理论方法研究了金属钨中氢和氦气泡的成核和生长机制，发现氢原子很难在钨的间隙位置聚集，而氦原子倾向于在钨（110）层间聚集形成密堆积的单层结构（见图1）。结合能计算进一步证明了单层结构形成的可能性（见图2）。氦单层可能为实验上观察到的扁平状氦气泡的初始构型。由于局域应力的存在，当氦原子数超过5时，氦单层的近邻可能发射自间隙原子而形成弗兰克尔缺陷对。

此外，基于质量反应定律（the law of mass action），科研人员计算了空位-氦复合体浓度随温度的变化关系（见图3），该结果表明在ITER的服役温度（1000K）附近，空位-氦的复合体大量存在，相比之下空位-氦则更加稳定。研究还表明，氢和氦在空位中的聚集促进了空位与空位之间的结合。

因此，氢和氦气泡可以通过以下两种方式成核和生长：（1）空位捕获氢原子，当氢原子浓度达到阈值时，空位周围发射一个自间隙原子，长大的空位再捕获氢原子再发射自间隙原子直到氦气泡的形成。（2）氢和氦原子在空位中的占据，促进了空位的聚集从而形成空位团簇，而氢和氦在该空位团簇中聚集导致氢和氦气泡的形成。该研究成果为理解面向等离子体材料中氢氦行为和氢氦气泡形成机制等方面提供了新思路。相关研究结果发表在Nuclear Fusion 54, 103007（2014）。

上述研究工作得到科技部国家磁约束核聚变能发展研究专项、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/69520.html>