

合肥研究院面向等离子体材料钨中氢溶解和扩散研究获进展

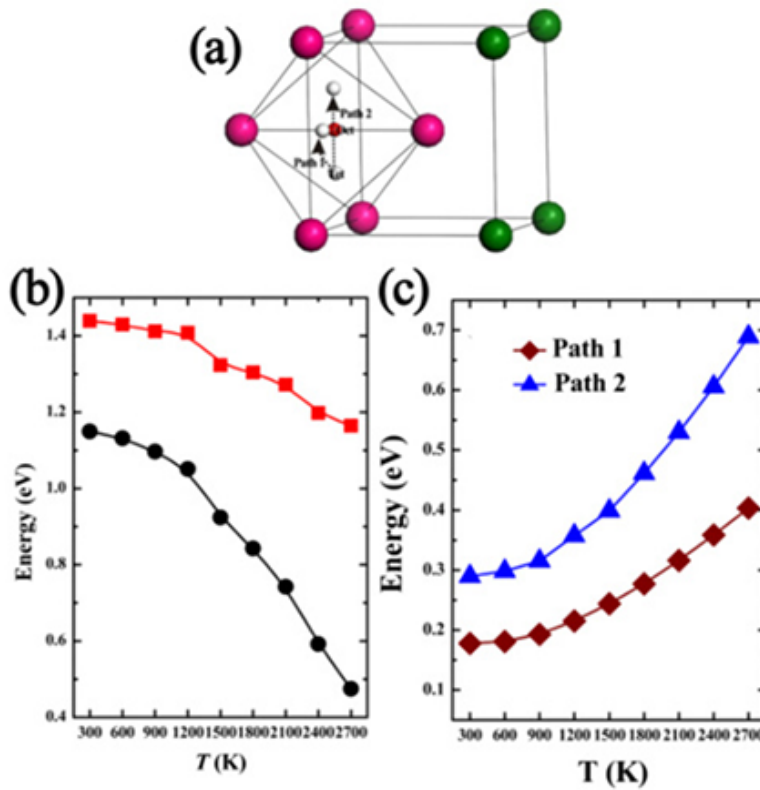


图1. 钨中氢溶解能和扩散激活能随温度变化关系。(a) 间隙氢扩散示意图。大球代表钨, 白色小球和红色小球分别代表四面体和八面体间隙位置。Path1 和Path2 分别为氢从四面体位置跃迁到第一近邻四面体间隙和第二近邻四面体间隙位置。(b) 溶解能。红色方框和黑色圆圈分别代表八面体间隙和四面体间隙溶解能。(c) 扩散激活能。

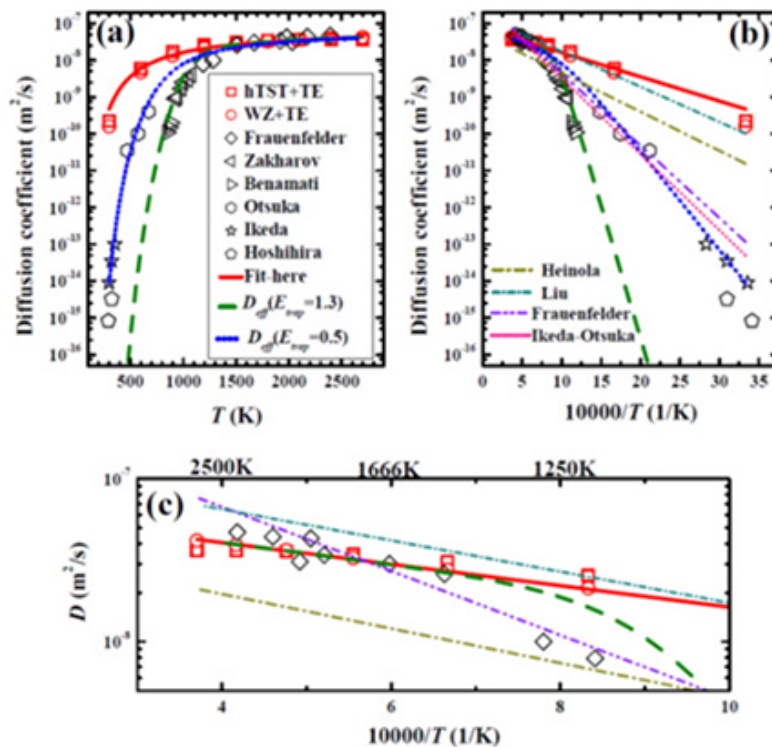


图2. 钨中氢扩散系数

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通过与等离子体物理研究所科研人员合作，在面向等离子体材料钨中氢溶解和扩散研究方面取得新进展，相关科研成果发表在《材料学报》上（Acta Materialia 84, 426-435, 2015）。

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）的面向等离子材料。作为面向等离子体材料，在运行过程中将受到高能和高通量的氢同位素等离子体的轰击。这些氢同位素等离子体将穿透材料表面，扩散到材料内部并滞留其中，进而改变材料的力学性质，如诱导空位产生，引发氢脆，降低力学强度等。此外，氦价格昂贵且具有放射性，大量滞留在面向等离子体材料中还会造成燃料的损失和对周围环境潜在的放射性危害。因此，研究钨中氢同位素的滞留行为十分必要。

溶解度和扩散系数是理解氢同位素滞留性质的最基本的物理参数，但是到目前为止，相关研究数据十分稀少且存在较大差异。近期，合肥研究院固体所科研人员采用第一性原理方法研究了氢的扩散和溶解性质，并采用准简谐近似方法考察了温度对它们的影响。研究发现，温度无法改变钨中氢的最优占据位置和最优扩散路径，但是会显著影响溶解能和扩散激活能（图1）。

随着温度的增加，氢的溶解能逐渐降低而扩散激活能逐渐增大。基于第一性原理计算结果，采用Sievert定律和过渡态理论计算出了300 - 2700K内氢的溶解度和扩散系数。其计算结果在高温范围内（大于1500K）与实验数据一致，在低温范围内与实验数据有较大差异。低温范围内的差异可以通过缺陷捕获效应进行解释（图2）。同时，科研人员发现与未进行温度修正的第一性原理计算结果相比，温度修正的第一性原理结果与实验数据更符合。这表明在采用第一性原理研究氢滞留性质时，需要对计算得到的数据进行温度修正。

上述研究工作得到科技部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/75561.html>