

面向等离子体材料钨中氢滞留行为理论模拟研究获进展

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研究室研究员刘长松课题组通过与等离子体物理研究所和中科院金属研究所科研人员合作，在面向等离子体材料钨中氢滞留行为理论模拟研究方面取得新进展。相关研究结果发表在《核聚变》上（Nuclear Fusion 56 (2016) 026004；Nuclear Fusion 56 (2016) 106002）。

低氢滞留是面向等离子体材料（PFM）的必要条件。钨因具有低氢滞留及低物理溅射率、高熔点等优点而成为最有前景的PFM。苛刻的聚变环境（如14MeV中子辐照、高通量氦和氢同位素等离子体轰击、稳态和瞬态高热负荷、以及由此引入的各种化合物灰尘和嬗变元素、热负荷缓冲剂等杂质）会使氢滞留量显著升高。因此，认识和理解聚变环境下钨中氢滞留行为，并寻找有效抑制氢滞留的方法对实现可控热核聚变具有重要意义。

科研人员采用准连续多尺度方法（第一性原理计算结合热力学模型分析）研究了钨中聚变引入杂质（嬗变元素、热负荷缓冲剂）对氢滞留的影响。利用第一性原理建立了杂质与氢相互作用数据库（图1，2），包括多种杂质-氢缺陷簇的稳态亚稳态缺陷构型及其能量学基本参数（形成能、结合能、作用半径等），该数据为更高时间和空间尺度计算模拟（如蒙特卡洛、速率理论等）提供了基础。基于上述第一性原理数据，利用热力学模型分析了Re、Os、Ta、Hf等杂质对氢的溶解和扩散行为的影响。研究发现杂质元素一方面可作为氢的滞留点，降低氢扩散系数，增大氢滞留量，另一方面能缩小空位和自间隙扩散系数差，提高辐照缺陷复合效率，降低辐照缺陷密度，进而减小氢滞留量，定性解释了近期钨合金中氢滞留实验结果(Nucl. Fusion 53(2013)123021; 53(2013)013013; 54(2014)123013)。热缓冲剂杂质Ne和Ar倾向于沿(110)面形成稳定的二维平板结构（图2）。其物理机理是间隙团簇引起局域晶格膨胀，形成沿(110)面扩展的低电荷密度区。随聚集原子个数的增大，间隙杂质团簇倾向于激发自间隙，突变成更加稳定的空位-杂质气体团簇。

上述研究工作得到了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科院的支持。

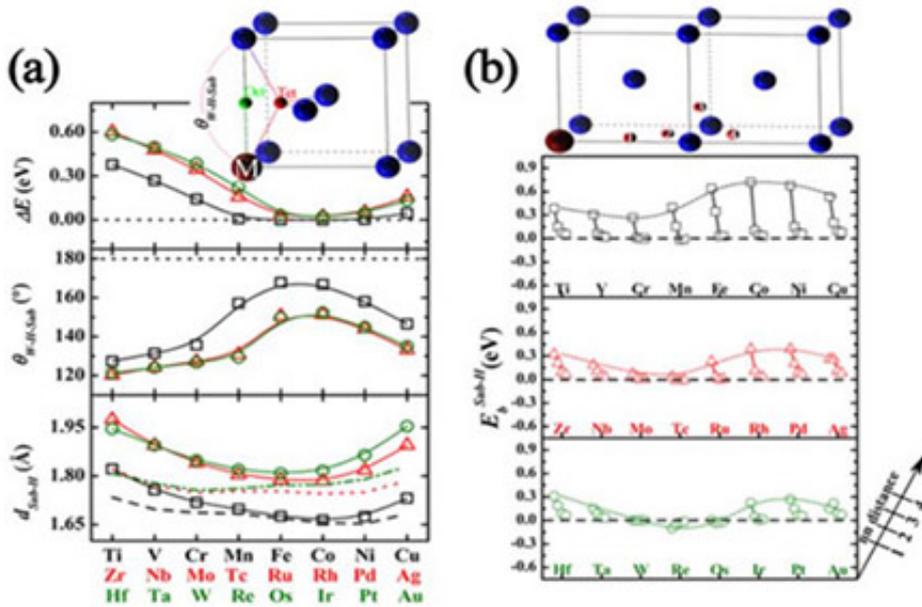


图1. 溶质与间隙氢相互作用 (a) 最优占据位置。其中 ΔE 表示氢在四面体和八面体间隙位置处的能量差， $\theta_{M-H-Sub}$ 为钨、氢和溶质原子的夹角， d_{Sub-H} 为溶质和氢间距离。(b) 溶质与氢结合能

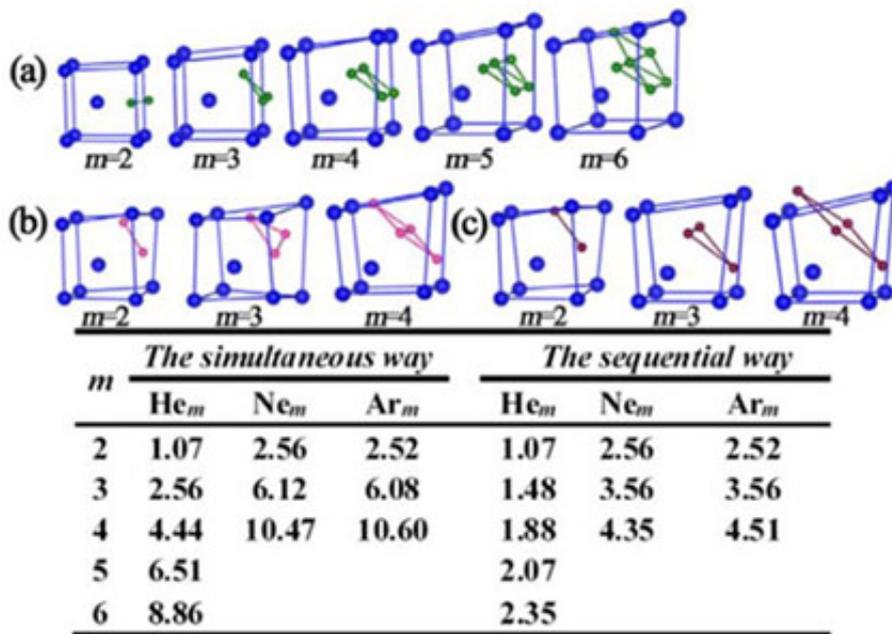


图2. 钨中热负荷缓冲剂杂质（氮、氖、氩）间隙团簇稳定构型和相应结合能

原文地址：<http://www.china-nengyuan.com/tech/99070.html>