

聚变堆金属材料中辐照缺陷演化及辐照硬化行为的计算模拟

赵纪军, 王园园

大连理工大学三束材料改性教育部重点实验室, 大连 116024

Email: zhaojj@dlut.edu.cn

摘要：材料在中子辐照环境下的损伤行为是聚变堆材料研究的核心问题，它影响着聚变堆能否安全运行。因此，探究材料在复杂辐照环境中的微缺陷演化，以及辐照微结构与力学性能间的关联性对理解聚变堆材料的辐照损伤机理有着重要的意义。材料辐照损伤是一个从纳观、微观、介观到宏观的多尺度问题，尤其是辐照环境下材料微观组织演化过程复杂且是随时间变化的热力学不稳定结构。以低活化钢基体金属铁为研究对象，采用相場法，并利用第一性原理分子动力学计算模拟获得温度效应的材料参数，研究了辐照、温度协同作用下结构材料中空洞形核长大过程及其对材料热导率的影响。另外，从细观物理机制出发，基于多尺度分析，构建了一个可在宏观尺度下有效预测面对等离子体材料钨的辐照缺陷与辐照硬化的理论模拟框架。将与辐照点缺陷能量相关的缺陷演化动力学方程与晶体塑性有限元方法耦合，建立了基于辐照硬化机制的定量的多尺度模拟框架，研究了辐照条件（包括温度、辐照剂量等）对钨硬化行为的影响，计算结果与实验数据吻合较好。上述计算模拟结果可为聚变堆金属材料的设计与研发提供理论参考依据。

关键词：聚变堆材料；多尺度；缺陷演化；辐照硬化；计算模拟

基金项目：国家磁约束核变能发展研究专项（2015GB118001、2018YFE0308100 和 2018YFE0308105），科学挑战专题资助（TZ2018004）