

表面微结构对钨中氢氦滞留行为影响机制的团簇动力学研究

李永钢¹, 郑洪蓉¹, 曾雉¹

¹中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所物质科学计算研究室,
安徽合肥市蜀山区蜀山湖路 350 号, 230031

Email: ygli@theory.issp.ac.cn

摘要：材料表面微结构的改变及其对氢氦动力学行为的影响是探究聚变堆面向等离子体材料的表面侵蚀、氢氦滞留和氦自持等问题的关键 [1]。鉴于制约因素的复杂性和实验上的困难，相关基础问题的理论研究至关重要。我们从离子、中子与固体相互作用和微观缺陷动力学等基础物理出发，基于速率理论、扩散理论和高效数值方法的发展建立空间分辨多元缺陷团簇动力学模型 (SMCD) [2]，并结合参数传递的顺序多尺度模拟框架研究高温等离子体辐照下典型钨表面微结构（预辐照损伤和多离子共沉积，杂质/合金元素，表面晶向、界面和阻挡层等）中缺陷的动力学演化过程和氢氦的滞留分布 [3-5]。通过与实验的直接对比验证，定量地揭示来表面微结构对钨中氢氦滞留行为的影响机制，指出了表面微结构是比空位型缺陷更重要的氢氦捕陷态。由此，我们通过建立通用的捕陷模型（由捕陷强度、密度及其对缺陷位点饱和度和结合能等特征参量来描述对可动点缺陷/氢氦的捕获能力），发展了捕陷态俘获氢氦的一般性理论，提出了调控高捕陷态密度和分布以及设计氢氦脱附路径是降低氢氦滞留的重要途径。其结果将直接为实际等离子体环境下面向等离子体材料的辐照损伤及氢氦效应提供理论指导和预测。

关键词：聚变堆钨材料；辐照损伤与氢氦协同；表面微结构；氢氦滞留；团簇动力学模拟

参考文献

- [1] K. Nordlund et al., Multiscale Modelling of Plasma-wall Interactions in Fusion Reactor Conditions, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2019, 47, 224018.
- [2] Y.G. Li et al., A Cluster Dynamics Model for Accumulation of Helium in Tungsten under Helium Ions and Neutron Irradiation, *Commu. Comput. Phys.*, 2012, 11, 1547-1568.
- [3] L.M. Wei, Y.G. Li* et al., Key Factors in Radiation Tolerance of BCC Metals under Steady State, *Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. B*, 2019, 455, 134-139.
- [4] Z. Zhao, Y.G. Li* et al., Effect of Grain Size on the Behavior of Hydrogen/Helium Retention in Tungsten: A Cluster Dynamics Modeling, *Nucl. Fusion*, 2017, 57, 086020.
- [5] Y.G. Li et al., Ion Radiation Albedo Effect: Influence of Surface Roughness on Ion Implantation and Sputtering of Materials, *Nucl. Fusion*, 2017, 57, 016038.

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 11975018, 11775254, 11605231 和 11534012)；国家磁约束核聚变能发展研究专项 (2018YFE0308100)；国防基础科研核科学挑战专题 (TZ2018004)；中国科学院“青年创新促进会” (2016386)。