

聚变堆用钨基合金体系原子间相互作用势函数的构建及其应用

邓辉球¹, 陈阳春¹, 刘丽霞², 邱荣阳¹, 胡望宇²¹湖南大学物理与微电子科学学院, 长沙, 410082²湖南大学材料科学与工程学院, 长沙, 410082Email: hqdeng@hnu.edu.cn

摘要: 金属钨 (W) 因其优良的性能, 被视为未来核聚变装置中最有可能全面采用的面对等离子体材料。然而其服役的工况环境极为恶劣, 不仅面临着 14MeV 高能中子和高通量 H/He 等离子体的强辐照, 还面临着中子辐照嬗变产物 (Re、Os 和 Ta 等) 析出相致使材料脆化等问题。研究发现通过添加合金化元素、弥散强化和晶粒细化等途径可以提高钨基面向等离子体材料的抗辐照性能。无论是中子辐照产生的嬗变元素还是人为合金化引入的合金元素, 都将极大地改变 W 材料的性能, 所以 W 基多元合金体系的研究显得尤为必要。由于实验上的困难性, 计算模拟作为增加我们对材料中子辐照过程材料微观缺陷结构演化的理解以及解释或扩展实验观察的工具而受到越来越多的关注, 但是原子尺度上的计算模拟严重依赖于描述原子间相互作用的势函数的准确性。为此, 我们自主构建了一系列以 W 为基的合金势函数, 包括 W-Re、W-Ta、W-V、W-Mo 和 W-Ta-He 等体系[1-5]。在势函数的拟合和验证过程中重点检验了辐照缺陷的性质, 包括点缺陷的形成能和结合能、间隙位错环的稳定性以及氦缺陷团簇的结合能与迁移能等。构建的势函数采用 Finnis-Sinclair 形式, 并进行了短程 ZBL 修正处理, 可适用于超大规模的原子尺度计算模拟。利用所构建的势函数, 我们系统研究了金属 W 中自间隙型缺陷的稳定性和运动特性以及嬗变元素与 W 中间隙型缺陷 (点缺陷、间隙团簇、间隙位错环和晶界等) 的相互作用, 发现 Re-W 混合哑铃对的旋转和迁移势垒都很低, 在 W 中可三维扩散; 晶界与 Re-W 混合哑铃对的作用距离和偏析能都比较大。应用大规模并行分子动力学方法, 我们对金属 W、W-Re 和 W-Ta 等合金进行了系统的高能中子辐照级联碰撞模拟研究, 其中初级碰撞原子能量高达 300keV (与 14MeV 中子的能量相当), 发现在金属 W 和 W 合金中都出现了 $1/2\langle 111 \rangle$ 间隙位错环和 $1/2\langle 111 \rangle$ - $\langle 100 \rangle$ 混合型间隙位错环, 嬗变/合金化元素与 W 的间隙团簇和位错环的相互作用很强, 其对材料中总的缺陷数目影响不大, 但会减弱间隙团簇和位错环的移动。

关键词: 钨基合金; 势函数; 辐照级联碰撞; 缺陷; 分子动力学模拟

参考文献:

- [1] Yangchun Chen, Huiqiu Deng*, *et al.*, New interatomic potentials of W, Re and W-Re alloy for radiation defects, *Journal of Nuclear Materials*, 2018, 502, 141–153.
- [2] Yangchun Chen, Huiqiu Deng*, *et al.*, Development of the interatomic potentials for W-Ta system, *Computational Materials Science*, 2019, 163, 91–99.
- [3] Fen Zhou, Huiqiu Deng*, *et al.*, New interatomic potentials for studying the behavior of noble gas atoms in tungsten, *Journal of Nuclear Materials*, 2015, 467, 398–405.
- [4] Jun Fu, Huiqiu Deng*, *et al.*, Molecular dynamics simulations of the high-energy radiation damage in W and W-Re alloys, *Journal of Nuclear Materials*, 2019, 524, 9–20.
- [5] Yangchun Chen, Huiqiu Deng*, *et al.*, The interactions between rhenium and interstitial-type defects in bulk tungsten: A combined study by molecular dynamics and molecular statics simulations, *Journal of Nuclear Materials*, 2019, 522, 200–211.

基金项目: 国家磁约束核聚变能发展研究专项 (No. 2018YFE0308101); 国家自然科学基金项目 (No. 51771073)