

钨基材料中子辐照微结构演化的动力学蒙特卡洛模拟研究

周洪波¹, 李中柱¹, 马惠芝¹, 牛瑀泽¹, 孟超¹, 许珂¹, 吕广宏¹

¹北京航空航天大学物理学院, 北京 100191

Email: hbzhou@buaa.edu.cn

摘要: 中子辐照损伤是使聚变堆材料服役性能劣化的最主要环境因素之一, 将严重影响材料的服役寿命和聚变堆的稳态运行。钨是未来聚变堆中最有可能全面应用的壁材料, 但在聚变高能 (14 MeV) 中子辐照下会形成大量的孔洞和位错环, 导致材料出现肿胀、硬化和脆化等问题。中子辐照 (2.2 dpa, 742 °C) 可导致钨硬度升高 (为未辐照钨的 3 倍) 和韧性大幅下降, 严重影响聚变堆运行的安全性和稳定性。但是, 中子辐照下材料服役行为评价难度大、费用高、周期长, 造成系统数据的匮乏, 严重制约了其失效行为、规律的评价与寿命预测技术的发展。在目前缺乏聚变中子源进行辐照实验的情况下, 开展聚变堆材料中子辐照模拟研究显得愈发重要和紧迫。

对象动力学蒙特卡洛 (OKMC) 方法是研究材料中子辐照缺陷演化的重要方法之一。我们开发了具有自主知识产权的 OKMC 模拟程序, 采用 C++模块化设计及面向对象化编程理念, 使程序更易维护。使用关联容器存放对象, 采用二叉树方法抽取事件, 并且加入邻域概念; 通过 sink strength 引入复杂的位错、晶界等缺陷, 大大提升了程序运行效率。首先, 我们应用该程序模拟了美国 HFIR 堆单晶钨低剂量 (0.006 dpa) 中子辐照实验结果 [1], 采用与实验相一致的温度 (90°C) 和中子能谱。在模拟过程中, 我们通过 sink strength 引入虚拟杂质、优化和构建缺陷相互作用 OKMC 模型等方法, 解决了 OKMC 模拟中因自间隙原子高扩散系数会显著影响 OKMC 的时间推进, 以及自间隙和空位的作用半径会显著影响 OKMC 的空位-自间隙湮灭和自间隙的成团行为等问题。我们系统分析了辐照缺陷随中子辐照剂量的演化行为, 模拟得到的 0.006 dpa 中子辐照下产生的空位团簇数密度与实验正电子湮灭测量结果在同一数量级, 这很好的检验了我们程序的准确性。接下来, 我们应用该程序模拟了材料中子辐照的典型现象空洞阵列“void lattice”, 清晰的给出了钨材料中子辐照下形成的 void lattice 结构。我们系统分析了 void lattice 的形成过程, 发现随着辐照剂量的增大, 空位自组织过程大致可以分为三个阶段, 而 PKA 能谱、损伤速率、晶粒尺寸等因素都会对演化结果产生影响。这些研究结果为我们理解中子辐照下钨材料微结构演化行为提供了重要参考。

关键词: 钨; 中子辐照; 对象动力学蒙特卡洛; 缺陷; 空洞阵列

参考文献

- [1] X. Hu, T. Koyanagi, M. Fukuda, Y. Katoh, L. L. Snead, B. D. Wirth., Defect evolution in single crystalline tungsten following low temperature and low dose neutron irradiation, *Journal of Nuclear Materials*. 2016, 470, 278.

基金项目: 国家磁约束核聚变能发展研究专项项目 (NO. 2018YFE0308103), 国家自然科学基金面上项目 (NO. 11675011)。