

科研进展

固体所在辐照效应模拟软件开发与辐照损伤自修复机理研究方面取得新进展

文章来源：李祥艳 发布时间：2017-09-01

近期，固体所刘长松研究员课题组在辐照效应模拟软件开发与辐照损伤自修复机理研究方面取得新进展，课题组李祥艳等自主开发了一套纳米晶材料辐照损伤跨尺度模拟软件，利用上述软件，李祥艳、许依春等与等离子体所科研人员合作，在钨纳米晶辐照损伤自修复机理研究方面取得新进展，相关研究成果发表在Nuclear Fusion (Nucl. Fusion 57, 116055 (2017)) 杂志上，登记软件著作权一项。

近年来人们在实践中发现纳米晶金属具有优异的抗辐照损伤性能。认识纳米晶材料中辐照缺陷的产生、演化与修复过程需要跨时间、空间尺度的理论模拟研究。基于此，固体所刘长松研究员课题组自主开发了一套纳米晶材料辐照损伤跨尺度模拟软件(图1)。软件模块主要包括模拟辐照损伤结构长时间演化的温度加速的分子动力学模块(TAD)、缺陷能量学性质的静态计算模块(MS)、探索缺陷跃迁势能面的弹性带算法(NEB)和两体算法(Dimer)模块、缺陷在原子尺度和微秒尺度演化的原子动力学蒙特卡洛模块(AKMC)和缺陷在微纳尺度尺度和宏观时间尺度演化的实体动力学蒙特卡洛模块(OKMC)。其他还包括缺陷定位、分析与可视化辅助程序模块等。软件平台主要功能：可模拟核能结构材料中辐照缺陷在纳秒、秒、小时时间尺度和纳米、微米空间尺度上的演化行为，获得不同温度下缺陷演化过程、缺陷能量学和动力学性质、缺陷构型分布等信息。

课题组科研人员利用自主开发的上述软件，模拟分析了钨纳米晶中自间隙原子及其团簇复合空位的动态图像。钨及其合金是制备核聚变堆偏滤器部件及面向等离子体材料的候选材料。在聚变堆中，这些部件和材料须承受14MeV的中子辐照和10MWm<sup>-2</sup>的热流。辐照会在钨纳米晶中产生由平行的一维线性原子串构成的自间隙原子团簇缺陷。辐照诱导的缺陷会在基体中累积，不仅造成钨的力学性能降级，还会导致钨中氢/氦的滞留增多。通过引入缺陷阱(如晶界)可与辐照缺陷相互作用，使辐照缺陷湮灭。然而，辐照缺陷在长时间尺度上与引入的晶界相互作用机理尚不清楚。模拟研究发现：(1)辐照诱导的自间隙原子团簇缺陷在靠近局域紧凑的晶界结构时被反射进晶粒内部，可与晶粒内部空位进行复合(图2)；(2)自间隙团簇被局域疏松的晶界结构捕获后可通过动态发射复合晶界附近的空位：单个自间隙原子偏聚至晶界后，沿晶快速运动，聚集成双间隙；其活性与晶界附近空位活性相当，晶界附近空位通过双间隙沿晶运动和空位向晶界偏聚的耦合过程而消除(图3)。这些结果表明，通过复杂的微观过程(如反射自间隙及其团簇，自间隙沿晶运动、团簇化与空位偏聚的耦合)，引入的晶界能有效捕获或者耦合钨材料中的辐照诱导缺陷，增强钨纳米晶的抗辐照损伤性能。

该研究工作得到国家磁约束聚变项目、国家自然科学基金和合肥大科学中心等项目的资助。

文章链接：<http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1741-4326/aa80a8/meta>

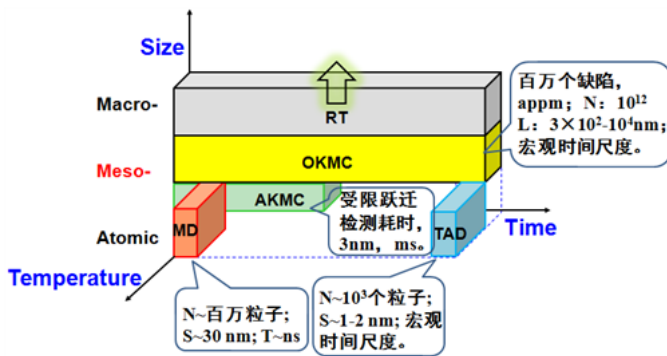


图1. 纳米晶辐照损伤效应跨尺度模拟软件中主要模块时间和空间尺度范围。

科学岛报



科学岛视讯



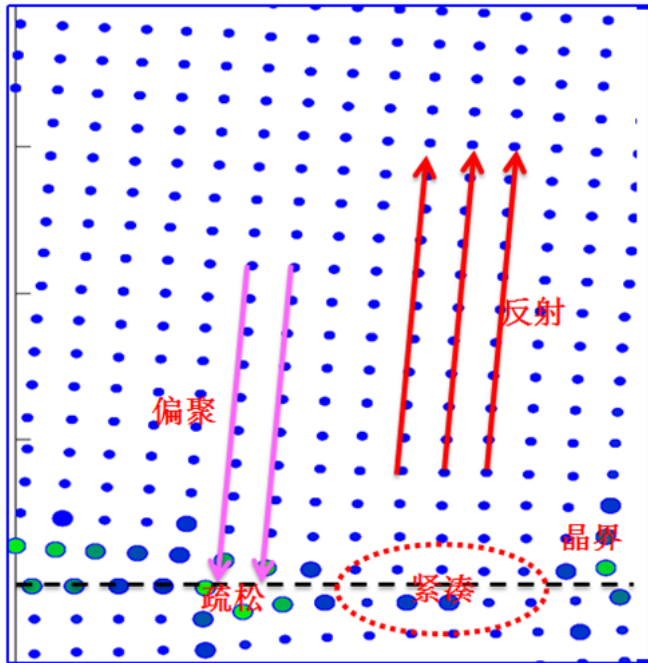


图2. 分子动力学模拟中观察到的局域紧凑的晶界结构反射自间隙原子团簇与局域疏松的晶界结构吸收间隙型缺陷间相互作用过程。

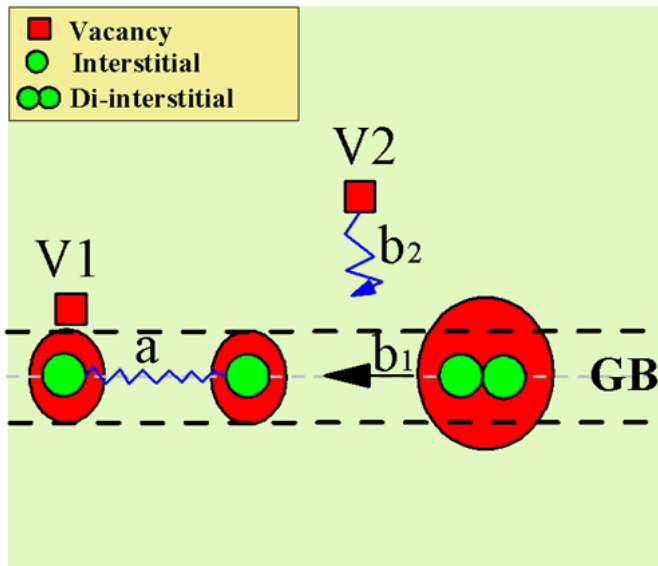


图3. 结合有限温度下分子动力学模拟、静态计算和动力学蒙特卡洛模拟计算给出的钨纳米晶中辐照缺陷复合动态图像。

子站

[内部信息](#) | [院长办公室](#) | [监督与审计处](#) | [人事处](#) | [财务处](#) | [资产处](#) | [科研处](#) | [高技术处](#) | [国际合作处](#) | [科发处](#) | [科学中心处](#) | [研究生处](#) | [安全保密处](#) | [离退休](#) | [基建管理](#) | [质量管理](#) | [后勤服务](#) | [信息中心](#) | [河南中心](#) | [健康管理中心](#) | [科院附中](#) | [供应商竞价平台](#) | [职能部门](#) |

友情链接



[版权保护](#) | [隐私与安全](#) | [网站地图](#) | [常见问题](#) | [联系我们](#)

Copyright © 2016 hfcas.ac.cn All Rights Reserved 中国科学院合肥物质科学研究院 版权所有 皖ICP备 050001008

地址: 安徽省合肥市蜀山湖路350号 邮编: 230031 电话: 0551-65591245 电邮: yzxx@hfcas.ac.cn

