

中国材料大会 2025

暨新材料科研仪器与设备展

7 月 5-8 日, 2025

福建 厦门

A03-核材料
A03-Nuclear Materials

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



A03.核材料

分会主席：吕广宏、汪小琳、王宇钢、钟云波、刘彤、冉广、韩恩厚

A03-01 主题报告

上海大学核电关键材料全国重点实验室建设及磁控超常冶金技术进展

钟云波^{*1,2}、林文浩^{1,2}、李强^{1,2}、沈喆^{1,2}、丁彪^{1,2}、郑天祥^{1,2}、时培建^{1,2}、周邦飞^{1,2}、林中泽^{1,2}

1. 上海大学核电关键材料全国重点实验室
2. 上海大学材料科学与工程学院

新一代反应堆高负荷长期稳定运行需求，对核电关键材料的可靠性评价提出了更高的要求。为了建设与我国核电发展需求相适应的材料研发、设计与制造体系，建立更完善的核电材料老化与寿命评估体系，上海大学牵头组建了核电关键材料全国重点实验室。本文介绍了上海大学核电关键材料全国重点实验室建设情况。同时，针对核电关键材料的高冶金质量调控，系统阐述了近年来上海大学钟云波团队在该领域的研究进展。在理论层面，本团队提出磁控超常冶金制备的新思路，开发出多场多相多界面全耦合的数值模拟方法和钢液流场可视化物理模拟方法，系统性的阐明了多模式电磁场对冶金过程流场、温度场、溶质场的调控机制。在技术层面，本团队开发出磁控超常冶金制备技术，其中磁控电渣重熔技术实现了大型精/特钢电渣锭“低倍组织、微观组织、析出相”的三细化，显著提升了特殊钢及特种合金的凝固质量，有效提高了冶金过程中夹杂物及杂质元素的去除效率，实现了铸锭的“纯净化、洁净化”；磁控大钢锭凝固控制技术实现了大尺寸高合金钢铸锭心部疏松、缩孔、偏析等传统凝固难题的有效控制，大幅提升了大钢锭的利用率，为企业节能减排、降本增效提供了有力保障。本团队将继续在冶金领域持续推动技术创新与实践，为核电关键材料的发展持续注入强劲动能。

A03-02 邀请报告

基于异质结构设计的 ODS 合金强塑性协同优化

吕铮*、李晓龙、孙鼎博、李慧、高尚、金峰

东北大学

氧化物弥散强化（ODS）合金中高密度弥散分布的纳米尺寸氧化物赋予材料优异的高温强度和抗辐照肿胀等性能，在航空航天核能等极端服役环境下有重要的应用前景。和大多数传统金属和合金相似，存在强度和塑性权衡的问题——强度高但塑性差，这增加了复杂结构部件的加工难度。引入异质结构是克服材料强塑性权衡的有效手段之一，在多种金属材料体系得到了成功应用。本报告聚焦粉末冶金和激光增材制造的 ODS 高熵合金、ODS-FeCr 钢和 ODS-FeCrAl 合金，针对不同合金及不同制备工艺，介绍异质结构的设计、制备、微观结构特征和对力学性能影响，揭示异质结构的协同强韧化机制及其在 ODS 合金强塑性协同提升方面的应用前景。

A03-03 邀请报告

聚变环境下钨基材料性能优化与应用研究进展

罗来马^{1,2,3*}，魏国庆¹，王亚峰¹，刘祯¹，叶伟¹，吴玉程^{1,2,3}

1. 合肥工业大学材料科学与工程学院
2. 教育部铜合金及成形加工工程研究中心
3. 有色金属与加工技术国家地方联合工程研究中心

钨因其具备高抗溅射性、高导热性和高熔点等特征，被视为聚变装置中面向等离子体材料（PFMs）的首选候选材料。然而，钨的高韧脆转变温度和低再结晶温度限制了其能否完全满足未来 PFMs 的性能需求。鉴此，本研究针对我国聚变工程发展中的重大材料需求，对高性能钨基材料的制备技术和性能进行了深入探究。通过引入钒元素，成功实现了钨粉体的细化，并以此批量制备出纳米级超细的氧化物弥散强化

钨（ODS-W）粉末。生产的 ODS-W 粉末具有小粒度、均匀分布和良好的烧结性能，能在 1400℃的氢气环境中烧结达到 95%的致密度。这种粉末的优秀烧结性能和较低的烧结温度大大简化了大塑性变形前的预烧结工艺。同时，采用旋锻工艺成功制备出变形量达到 75.5%的钨-钒-钇（WVY）复合棒材。拉伸测试结果显示，该 WVY 复合材料在室温下即可开始屈服。此外，为满足核聚变装置中高热负荷部件的需求，研究还聚焦于 W-Re 合金的制备与性能优化。W-10Re 合金通过液-液法制备可显著改善 Re 元素分布均匀性，并在高温压缩下展现出优良的热变形行为。热负荷实验及有限元模拟表明，该合金在模拟核聚变服役工况下保持良好的结构稳定性与耐损伤能力。综上，通过合金设计、粉体制备技术革新与组织调控手段，显著提升了钨基材料在核聚变环境下的服役性能，为高性能钨基结构材料的工程化应用和国产化提供了坚实基础。

A03-04 邀请报告

气相输运外延生长钨单晶涂层的缺陷形成机理、控制与服役行为

谭成文^{*1,2}、于晓东^{1,2}、王振东³、钟武辉³

1. 北京理工大学

2. 海朴精密材料（苏州）有限责任公司

3. 中国原子能科学研究院

热离子空间核电源燃料元件发射极很大程度上决定元件的热电转换效率、发电稳定性以及服役寿命。以合金化钼单晶为基体，钨单晶为功能涂层作为发射极材料具有综合优势。“十三五”中期，我国已突破钨单晶化学气相输运外延生长（CVTE）技术，进入小批量生产阶段。但此过程中暴露出生产稳定性差、缺陷可控性不强等问题，由此造成元件发电不稳、寿命不足等应用隐患

本研究工作围绕 CVTE 钨单晶涂层制备工艺参数与取向/缺陷及其电子发射功效行为、服役寿命之间关系这一科学问题，阐明 CVTE 钨单晶涂层的生长机理，建立生长动力学模型；揭示显微结构随工艺条件的演化规律，阐明不同类型缺陷的形成机制；厘清高温长时条件下钨单晶涂层表面“小晶粒”形成与演化机制，揭示钼沿钨晶界扩散特性随取向差的变化规律。以期丰富并深化金属单晶气相生长及其缺陷理论，为热离子燃料元件钨单晶涂层批量稳定生产和可靠应用奠定科学基础。

A03-05 邀请报告

聚变堆 PFM 的 W-Y 合金增材制造初步研究

唐军*

四川大学

钨合金被认为是未来最理想的第一壁材料。然而，在制备方式上，由传统粉末冶金和机加工技术制备的钨部件存在几何自由度受限、材料利用率低及焊接界面缺陷等技术瓶颈，难以满足聚变堆复杂冷却流道结构的设计需求。为了寻求符合要求的制备手段，增材制造技术（Additive Manufacturing）因其“逐层堆积”的成形特点，被应用于高复杂度钨基构件的整体化制造。

本文聚焦采用激光粉末床熔融（Laser Powder Bed Fusion, LPBF）技术制备钨基合金，提出基于稀土元素钇的原位合金化改性策略，突破钨基材料强韧性协同提升难题。针对杂质氧所导致的晶界弱化问题，通过引入单质钇实现双重强化：其一，钇的高氧亲和力优先于钨基体与氧结合，形成 Y_2O_3 颗粒；其二，原位生成的 Y_2O_3 通过弥散强化机制显著提升材料强度，W-Y 合金的致密度提升至 98.7%，显微硬度达 $452.08 \pm 16.38 \text{ HV}_3$ ，抗压强度 1612.62 MPa，延伸率为 19.69%，与相同条件下制备的纯 W 试样（显微硬度 $325.53 \pm 38.88 \text{ HV}_3$ ，抗压强度 847.88 MPa，延伸率 12.02%）相比，分别提高了 40%和 90%，显著提升了增材制造钨合金的综合性能。

A03-06 邀请报告

高密度钨合金射线屏蔽零件的增材制造技术研究

宋久鹏^{*1}、陈刚¹、万维财¹、梁孟霞¹、史巾博²

1. 西华大学材料科学与工程学院
2. 成都广大精微新材料有限公司

高密度钨合金是以 W 为增强相，以 Ni、Fe、Cu 等一种或者多种过渡金属元素为粘结相的金属基复合材料。与传统的 X 和 γ 射线屏蔽材料铅相比，具有密度高、力学性能好、环境友好等特点，被广泛应用于核反应堆、核医疗设备等领域。传统粉末冶金只能直接成形简单形状的钨合金屏蔽件、且生产周期长、成本高。增材制造技术可以根据屏蔽计算的结果，对屏蔽体进行拓扑优化，实现零件的减重和减体积。然而，目前基于激光和电子束的增材制造技术在打印过程中会造成低熔点粘结相的挥发、钨颗粒的熔化及凝固异常长大、残余孔隙及裂纹等问题，导致材料的微观组织和性能较差。本研究针对常用的 W-Ni-Fe 屏蔽材料，开展了粘结剂喷射和熔融沉积两类间接增材制造技术研究，包括粉末床铺粉用预合金粉末和熔融沉积成型用丝材的制备、3D 打印、脱脂及烧结，所制备屏蔽件的致密度、微观组织、性能与传统粉末冶金制备的钨合金基本一致。

A03-07 闪报

金属钷腐蚀的理论研究进展

邱睿智*

中国工程物理研究院材料研究所

钷金属是原子能工业中重要的活性材料，但其主要工程应用面临的障碍是工况环境下的化学腐蚀。由于钷的强放射性和毒性，实验研究的难度极高。本报告重点介绍了我们团队为钷及其腐蚀产物开发的强关联电子材料计算方法和固溶体模拟技术，并阐述了在腐蚀产物认定以及电化学腐蚀方面的最新研究进展。

A03-08 闪报

液态锂对不同制备工艺钨基材料的腐蚀性影响研究

张德皓、孟献才*

合肥综合性国家科学中心能源研究院（安徽省能源实验室）

钨因其具有耐高温、抗辐照、热传导好、低溅射腐蚀率等性能，被认为是理想的偏滤器靶板材料。液态锂具有氦增值率高以及导热性好等优点，成为氦增殖剂和冷却剂的候选材料。结合了两者的优点的液态锂钨基偏滤器，是未来聚变堆偏滤器的重要解决方案。由于钨材料具有硬度高且脆的特性，传统加工工艺方式很难加工，所以研究人员使用了 3D 打印、等离子体烧结等技术制备钨材料。但是锂作为一种强碱性活泼金属，在高温情况下对结构材料具有很强的腐蚀性。因此，本文开展了 620 K 液态锂对 3D 打印钨以及等离子体烧结工艺纤维增韧钨长达 500 小时的腐蚀实验研究。

结果表明 3D 打印钨以及等离子体烧结纤维增韧钨样品在 620 K 液态锂中均发生质量损失，质量损失速率分别为 $0.038/0.105 \text{ g m}^{-2} \text{ h}^{-1}$ ，腐蚀深度速率为 $18/48 \mu\text{m} \cdot \text{a}^{-1}$ ，与 600 K 液态锂条件下的熔炼法制备的钨相比，3D 打印钨以及等离子体烧结纤维增韧钨的腐蚀深度速率是它的 300 和 600 倍。SEM 分析结果表明，实验后，样品表面裂纹比实验前得数量增加以及尺寸变大，导致原本整体的表面被分割成尺寸相对均匀的块状结构。腐蚀后等离子体烧结纤维增韧钨样品表面空隙尺寸变大，粉末边界发生溶解，粉末变得圆融，钨纤维发生破碎，部分钨纤维与基体分离，而熔炼法制备的钨经过 1320 小时 600 K 液态锂浸泡后，表面形貌没有任何变化；XRD 分析结果显示液态锂得腐蚀并没有使 3D 打印钨以及等离子体烧结工艺纤维增韧钨发生相变。综合以上实验结果可以得出：与粉末熔炼法制备的钨相比，采用 3D 打印以及等离子体烧结工艺生产的钨在质量损失和微观形貌方面的表现较差，耐液态锂腐蚀性不如熔炼法制备的钨。

A03-09 闪报**核用超临界二氧化碳布雷顿循环动力系统材料研发及服役失效机理研究**

郭相龙*

上海交通大学

针对核用超临界二氧化碳布雷顿循环动力系统苛刻的高温高压强腐蚀强辐照的环境，开发新型含铝奥氏体不锈钢，满足核用超临界二氧化碳布雷顿循环动力系统对高强耐蚀抗辐照材料的需求；开发模拟超临界二氧化碳布雷顿循环动力系统服役环境的测试技术，系统研究结构材料在超临界二氧化碳中的腐蚀，辐照腐蚀及应力腐蚀开裂机理，建立材料失效寿命的预测模型。

A03-10 闪报**Zr-Si 共合金化协同提升纳米晶 ODS 合金的高温蒸汽抗氧化性**蔡学成^{*1}、许利东²、沈同德²

1. 香港大学

2. 燕山大学

近期研究表明，具有高晶界分数的纳米晶氧化物弥散强化（ODS）合金与传统粗晶 ODS 合金相比，各方面性能得显著提升，如超高强度、抗蠕变性和耐辐照性。本研究进一步报道了团队开发的 Zr-Si 共合金化纳米晶铁素体 ODS 合金的优异高温蒸汽抗氧化性，并通过详细的组织结构分析揭示了抗氧化机制。研究发现，与超细晶合金相比，Zr 合金化的纳米晶合金在 650 °C 高温蒸汽中的抗氧化性能显著增强；Zr-Si 共合金化后，合金的抗氧化性得到了进一步提升。微结构分析表明，Zr-Si 共合金化的纳米晶合金表面形成了致密且连续的 SiO₂ 内层，这主要是由于偏析的 Si 沿纳米晶界网络通道输运，促进了 SiO₂ 层在氧化初期快速形成。本研究证明了成分设计（Si 微合金化）和结构细化（Zr 合金化稳定纳米晶）对提升 ODS 合金高温抗氧化性的协同作用。

A03-11 闪报**熔盐堆用 SiC 材料辐照与熔盐腐蚀耦合损伤研究**

李健健*

中国科学院上海应用物理研究所

熔盐堆以液态氟化盐作为冷却剂，同时液态氟化盐也作为核燃料的载体，运行温度通常高于 600°C，这意味着熔盐堆服役环境极为苛刻和复杂——高温、强辐照以及熔盐腐蚀，因此对结构材料的安全服役提出了更高的要求和挑战。碳化硅（SiC）作为性能优异的新型核材料有望应用在熔盐堆中，因此它将长期工作在高温、熔盐腐蚀、高剂量中子辐照等多重极端的耦合环境中，这会导致其服役性能不断退化甚至失效。本文利用离子辐照模拟熔盐堆中的辐照环境，重点研究了 SiC 材料在高温辐照和熔盐腐蚀耦合作用下的损伤效应及其机理，利用离子辐照模拟熔盐堆中的辐照环境，重点研究了 SiC 材料在高温 He 离子辐照和熔盐腐蚀耦合作用下的损伤效应及其机理，结果表明辐照明显地促进了 SiC 在熔盐中的腐蚀：熔盐腐蚀导致的表面剥蚀深度随辐照剂量的增加而增加；另一方面，高温熔盐腐蚀也影响了 SiC 中辐照缺陷的演化：在腐蚀区的 He 泡/空洞的数密度降低同时尺寸增大。此外，值得关注的是熔盐中的 Ni 杂质在辐照促进腐蚀的过程中起着关键作用，结果显示它优先与辐照产生反位缺陷即同核 Si-Si 键发生反应从而促进了腐蚀；而此过程中 Si 元素的流失形成的空位反而促进了氦泡粗化。本研究结果可为评价 SiC 材料在熔盐堆工况下的服役性能提供有效数据和理论指导。

A03-12 闪报**小型堆超临界 CO₂ 发电系统用结构材料的腐蚀行为研究进展**

杨万欢、钟巍华*、王志豪、邹吉春、王明浩、陈帅、彭德全、杨文
中国原子能科学研究院

超临界 CO₂ (S-CO₂) 布雷顿循环因其高效的热电转换效率、紧凑结构和简化的循环布局, 在小型堆 (SMR) 领域引起了广泛关注。然而, 鉴于 S-CO₂ 布雷顿循环系统的高工作温度 (450 °C 至 750 °C) 和长设计寿命 (大于 20 年), 合金的腐蚀对其在高温 S-CO₂ 环境中应用带来了重大挑战。材料在 S-CO₂ 环境中会同时导致氧化和渗碳的发生, 造成材料减薄、微结构演化与快速失效。此外, 来自材料和 S-CO₂ 环境的各种物理和化学因素使腐蚀过程更加复杂, 从而使材料选型成为一项具有挑战性的工作。为了了解腐蚀退化机制并筛选材料, 本文全面探讨了高温合金在 S-CO₂ 环境中的腐蚀行为。目前的研究系统地分析了温度、压力、杂质、合金元素和结构对腐蚀的影响。此外, 针对应力-腐蚀耦合, 包括拉伸行为、蠕变、应力腐蚀开裂等, 开展了深入研究。基于上述分析, 我们总结了相关的腐蚀机理和预测模型, 并试图提出材料选型策略, 推荐合适的候选材料。

中国原子能科学研究院对换热器、管道和汽轮机等关键部件候选材料进行了腐蚀试验, 以评估上述部件在 500 °C, 25 MPa 的 S-CO₂ 环境中最长腐蚀 6400 小时的腐蚀行为和寿命退化机制, 本研究专门为满足小型反应堆的研发需求而开展。测试材料包括不锈钢、镍基合金和高熵合金。研究表明, 与镍基合金和不锈钢相比, AlCoCrFeNi_{2.1} 高熵合金具有更为优异的耐腐蚀性。与在镍基合金表面形成致密氧化物保护层类似, AlCoCrFeNi_{2.1} 高熵合金的表面形成了独特的氧化膜结构, 从而抑制材料进一步腐蚀。相比之下, 不锈钢表面则形成多孔的 Fe₃O₄, 不具备长时耐腐蚀性。

原子能院建立了国内首台的高速动态 S-CO₂ 腐蚀试验系统。该系统可完成发电系统管道和热交换器等关键部件和材料在 S-CO₂ 环境中的耐腐蚀性评估。该测试系统的运行最高温度 650 °C, 最高压力 30 MPa, 最高流量 2650 kg/h, 为有效开展反应堆用 S-CO₂ 发电系统材料及部件的服役性能评估奠定了坚实基础, 对推进我国相关工程技术的研发具有重要意义。

A03-13 邀请报告**Al 和 Y 对 14Ni-10Cr 奥氏体不锈钢耐高温铅铋腐蚀行为的影响研究**

李炳生*、张晋涛
西南科技大学

奥氏体不锈钢因其卓越的高温力学性能和抗氧化腐蚀性能, 被视为铅铋冷快堆的潜在结构材料之一。然而, 这种不锈钢在液态铅铋中易发生严重溶解腐蚀。含铝奥氏体不锈钢(AFA 钢)作为一种新型材料, 能够在特定条件下于表面形成稳定的 Al₂O₃ 氧化保护层, 有效抑制溶解腐蚀。低 Ni AFA 钢因其出色的抗辐照和耐腐蚀性能而备受关注。本文研究了两种不同 Al 含量及 Y 添加对低 Ni、低 Cr 的 14Ni-10Cr 钢在液态铅铋共晶中的耐腐蚀性能的影响。研究发现, 在 500 °C 饱和氧 LBE 中腐蚀 500h, 以及在 500 °C 控氧 (10⁻⁷wt.%) LBE 中腐蚀 1750h 后, 14Ni-10Cr-2.5Al、14Ni-10Cr-3.5Al 和 14Ni-10Cr-3.5Al-0.05Y 钢均展现出良好的耐腐蚀性, 其表面形成了稳定的双层氧化膜: 外层为 Fe₃O₄, 内层则由 (Fe-Cr 尖晶石) 和 Fe-Ni 相颗粒、少量 Al₂O₃ 以及 Ni 富集区构成。然而, 在 600 °C 饱和氧 LBE 中腐蚀 500h 后, 这三种钢均遭受了严重的溶解腐蚀, 铅铋最大渗入深度达 137.8 μm。研究表明, 在 14Ni-10Cr 钢中添加 3.5wt.%Al 和 0.05wt.%Y, 可显著提升其在 500 °C 液态铅铋中的耐腐蚀性能。报告还探讨了 Al 含量和 Y 添加对耐腐蚀性产生影响的原因。

A03-14 邀请报告**锆合金表面 Cr/FeCrAl 复合涂层制备及耐腐蚀抗氧化特性研究**

栾佰峰*、杨晓玲、闫安

重庆大学

2011 年福岛核电站失水事故中，锆合金包壳与高温水蒸气发生剧烈氧化反应，迅速产生大量的氢气和热量，最终导致反应堆堆芯熔化和氢气爆炸，对社会和环境造成极大的负面影响。福岛核事故发生以后，为提升核反应堆安全性的新型耐事故燃料包壳材料的开发成为了核工业界的研究热点。在锆合金表面制备涂层以提高其抗氧化性能是短期内最易于实现商业化工程应用的一种方法。FeCrAl 合金因其具有良好的高温力学性能和在蒸汽环境下缓慢的氧化动力学而被作为涂层候选材料之一。但在高温 ($>900^{\circ}\text{C}$) 条件下，严重的 Fe-Zr 互扩散以及低熔点共晶化合物的形成会对 FeCrAl 合金涂层 Zr 包壳的抗氧化性能产生不利的影响，进而限制了其在高温环境下的应用。因此，需要一种有效的扩散阻挡层来阻止或推迟 FeCrAl 涂层与 Zr 基体之间的互扩散反应。Cr 涂层具有与 Zr 基体较好的结合力和相似的热膨胀系数、优异的耐腐蚀、耐高温氧化等性能，成为耐事故包壳表面涂层的首选材料。将金属 Cr 涂层作为 FeCrAl 涂层与 Zr 基体之间的扩散阻挡层可以充分发挥 FeCrAl 和 Cr 两种材料的优势。

本研究采用磁控溅射技术在 Zr-4 合金表面制备了约 $10\mu\text{m}$ 厚的 Cr/FeCrAl 复合涂层。将 Cr/FeCrAl 涂层样品在 360°C 、 18.6MPa 的硼酸锂水溶液中进行 130 天的静态高压釜腐蚀实验，以及在 1000°C 和 1200°C 水蒸汽环境中的氧化实验。通过 X 射线衍射 (XRD)、配置有能谱的扫描电子显微镜 (SEM/EDS)、聚焦离子束 (FIB)、透射电子显微镜 (TEM) 等系统研究了 Cr/FeCrAl 涂层锆合金在腐蚀及氧化前后的物相组成、微观组织形貌及元素分布，旨在揭示其微观组织演变规律与氧化机理。研究结果表明：复合涂层设计细化了涂层晶粒，在高温高压水腐蚀环境中，涂层界面对裂纹偏转起到了很好的作用；Cr/FeCrAl 复合涂层表面的氧化膜经历生长-溶解过程，形成从外到内依次为 FeCr₂O₄ 层、Fe₃O₄ 层、内层 (Cr,Al) ₃O₂ 的连续多层结构，显著提升了 Zr 基体在高温高压水环境中的腐蚀抗力。在高温水蒸气环境中，Cr/FeCrAl 复合涂层表面形成的连续多层氧化膜（外层 Fe₃O₄、中间层 Cr₃O₂、内层 (Cr,Al) ₃O₂）以及 FeCrAl 涂层与 Cr 涂层之间形成的连续 Cr₃O₂ 层，协同作用阻碍了 O 的内扩散，提供了优异的高温蒸汽氧化抗力。

A03-15 主题报告**钍基熔盐堆关键结构材料研究进展及后续发展规划**

黄鹤飞*、冷滨、黄庆、叶祥熙、陆燕玲

中国科学院上海应用物理研究所

熔盐堆内高温、强中子辐照及强腐蚀性等极端服役环境对堆用结构材料提出了严苛的要求。本报告针对钍基熔盐堆用关键结构材料（高温镍基合金与核石墨）的研发做简要的介绍：包括关键材料的研制，力学、热学、辐照、熔盐腐蚀工程数据获取，以及材料工程数据库的建设进展。此外，本报告还将简要介绍上述两类关键材料在高温、辐照、熔盐腐蚀等环境下的服役损伤行为及相关机制研究进展。报告最后，针对钍基熔盐堆后续发展对关键结构材料性能及工程数据的需求，提出了初步的思考与研发工作计划。

A03-16 邀请报告**NbZrTi 难熔高熵合金的设计及服役性能研究**

卢晨阳*

西安交通大学

在核能技术不断发展的背景下，开发高性能堆芯结构材料对核电站安全高效运行意义重大。本工作聚焦核用 NbZrTi 基难熔高熵合金的研发，采用离子辐照、中子辐照、多尺度力学等实验方法，结合模拟计算，深入分析 NbZrTi 合金辐照后的微观组织演化规律，发现 NbZrTi 合金严重晶格畸变使其具有独特缺陷行为，展现出优异抗辐照性能，包括抗辐照硬化、抗辐照肿胀。进一步研究 O、Al、V 等元素添加对 NbZrTi

基合金性能的影响,揭示了局部化学有序对抗辐照性能、强度、塑性的综合调控作用,以及相稳定性对的难熔高熵合金抗辐照性能的重要影响。同时,还开展了合金的堆外性能测试和大尺寸材料制备,推动其作为新型核结构材料的综合性能验证和工程应用。研究揭示了 NbZrTi 基合金抗辐照性能和机制,为核用高熵合金的成分设计与性能优化提供了理论依据和实验支持,对先进核反应堆结构材料的研发具有重要参考价值。

A03-17 邀请报告

基于同步辐射与 TEM 揭示锆合金中 ζ 氢化物的形成机制

李时磊*、王胜杰、王沿东

北京科技大学

通过同步辐射高能 X 射线衍射和 TEM 对锆合金材料在应力作用下的微观行为进行研究,发现了关键相变机制和氢化物成核特征。在 Zircaloy-4 的拉伸实验中,首次观察到在约 370 帕应力下 δ -氢化物转变为 ζ -Zr₂H 相,且 ζ -Zr₂H 与 α -Zr 基体具有高度相似的晶格参数和“六方-六方”取向关系。这一结构相似性表明, ζ -Zr₂H 可能充当 δ -氢化物在 α -Zr 基体中溶解和析出的中间相。此外,对 Zr-1Nb-0.01Cu 包壳管在 400 °C 下的内部压力疲劳处理显示, α -Zr 基体中形成 {10 $\bar{1}2$ } 孪晶和高密度位错,显著增加了氢化物的成核位点。 δ -氢化物中观察到的 {111}<11 $\bar{2}$ > 纳米孪晶及 ζ -氢化物的生成,提供了 ζ -氢化物作为 δ -氢化物前驱相的实验证据。这些发现对理解锆合金的延迟氢脆裂纹行为和氢化物的应力诱导再取向提供了新的微观机制支持。

A03-18 邀请报告

HiPIMS 技术助力核用涂层服役性能提升:面向极端环境的微结构调控与性能优化

李璿*、柏贺达、倪晋扬、白亚雄、高嘉来、殷超然

哈尔滨工业大学(深圳)

在先进核能系统中,结构材料长期暴露于高温、强辐照及复杂腐蚀介质等极端环境,传统材料难以兼顾服役寿命与安全性。表面涂层被广泛认为是提升材料服役表现的有效途径。高能脉冲磁控溅射(HiPIMS)技术凭借高等离子体离化率与优异的靶材利用效率,可显著提升涂层的致密性、界面结合力与微结构调控能力。本研究采用 HiPIMS 工艺制备多种金属与陶瓷类功能涂层,系统考察了晶粒尺寸、相结构与界面形貌等微观特征对其力学稳定性、抗腐蚀与抗辐照能力的影响。通过重离子辐照、液态金属腐蚀、高温高压水蒸气氧化与热震循环等多工况实验,揭示涂层在极端环境下的结构演化规律与失效机制。研究成果为新一代核反应堆关键部件的材料设计与防护技术提供理论依据与技术支持。

A03-19 邀请报告

铜系材料物性的多尺度模拟研究

杨宇*

北京应用物理与计算数学研究所

铜系材料因为在核能与国防中无可替代的战略地位而被人们熟知,我们结合第一性原理计算和多个物理理论,系统给出了铜系材料的基本物性,与实验结果吻合良好,在工程研究中得到广泛应用;此外,铜系金属铀、钚等化学性质活泼,大气环境下极易发生氧化氢化反应,最终使材料性能受到损伤,我们以铀材料内部微观组织结构和杂质元素的氢陷阱行为为出发点,结合原子化学势理论、动力学蒙特卡罗模拟等方法,揭示了铀表面氢蚀的若干关键机制:首次揭示铀的 6d 轨道在其化学腐蚀中起起的决定性作用,揭示不同相铀耐氢蚀性能差异化的原因是氢扩散机制的不同,铈元素的分布起着增强差异化的作用,130 孪晶界是铀中的深氢陷阱,等等。相关研究成果支撑了国防任务的顺利实施。

参考文献:

- 1) Jingyuan Jin, Yajuan Zhang*, Wenting Lv, Xuwen Zhao, Chengzhen Miao, Hefei Ji*, Yu Yang*, “The s-d

interaction induced hydrogen trapping effect in α -U (130)/[001] twin boundary region”, Surfaces and Interfaces 61, 106157 (2025).

2) Wenting Lv, Zhongwei Zhao, Bo Sun, Pengfei Guan*, YuYang*, Ping Zhang, “Intrinsic oxygen defects in UO₂ (111) and PuO₂ (111) surfaces”, Applied Surface Sciences 610, 155511 (2023).

3) Xin-Xin Wang, Hefei Ji, Zi Li, Lijun Zhu, Xianglin Chen, Xiaoyong Yang, Ping Zhang, Peng Shi,* Xiaolin Wang, Yu Yang,* and Wenhui Duan, “What is the Role of Nb on Preferential Hydriding of Double-Phased Uranium, Stabilizing γ -U, or Avoiding Hydrogen Aggregation?”, J. Phys. Chem. C 125, 9364 (2021).

4) X. X. Wang, Z. Li, B. Y. Ao, P. Zhang, P. Wang, Y. Yang*, “A first-principles study on hydrogen distributions in the α -U/UO₂ interface”, J. Phys.: Condens. Matter 32, 195002 (2020).

5) Y. Yang, P. Zhang, P. Shi, and X. L. Wang, “s-d Electronic Interaction Induced H₂ Dissociation on the γ -U(100) Surface and Influences of Niobium Doping”, J. Phys. Chem. C 115, 23381 (2011).

A03-20 邀请报告

铀钚金属燃料辐照行为的离子辐照研究

马海亮、范平、钟豪、张乔丽、李可、屈哲昊、王轩、肖益群、刘聪、杜爱兵、冯伟、任媛媛、郭庆、程章辉、缪泽文、朱升云、袁大庆*
中国原子能科学研究院

金属燃料具有高裂变原子密度、高增殖比、高导热系数以及便于干法后处理等优点，是目前一体化快堆闭式循环技术路线的主要候选燃料。铀钚金属燃料已经被美国堆内辐照试验证实最高能够达到近 20at% 高燃耗。

铀钚金属燃料在堆内受到裂变碎片辐照和温度梯度的共同作用，产生组分重分布、辐照肿胀和裂变气体释放、芯包化学相互作用等行为，影响燃料组件结构完整性，制约了燃料元件燃耗的提升。从燃料元件安全分析角度，期望能够深入了解金属燃料辐照行为，建立基于物理机制的裂变气体释放、气体肿胀等行为的预测模型，确保高燃耗下燃料组件设计性能的安全边界，为我国开展金属燃料的快堆堆内高燃耗辐照试验奠定基础。

燃料芯块在堆内受到辐照损伤主要由重离子裂变碎片造成，其剂量比对应快中子高近 2 个数量级。因此，近年来美国 Argonne 实验室开展了大量裂变碎片重离子辐照金属燃料的堆外辐照试验。相比于堆内辐照后需要数年放射性冷却后才能进行样品分析，采用堆外裂变气体重离子辐照后不产生放射性，可以马上进行分析，加快了辐照后分析进度。

原子能院在一体化快堆专项、叶企孙基金等项目支持下，建立了模拟堆内工况的金属燃料芯块裂变气体离子辐照试验技术，利用 Ar 离子辐照将 U-10Zr(wt.%) 在模拟工况下辐照至 200 dpa，相当于 1at% 燃耗水平。辐照后观察到组分随温度梯度和辐照的变化，获得了不同温度 U-10Zr 的气泡结构和肿胀率数据，为开发基于原子扩散机制的裂变气体释放模型提供了关键参数。利用修正嵌入原子势(MEAM)对 γ 相 U-10Zr 在不同温度以及不同缺陷结构下的扩散行为进行了分子动力学模拟，提出了一个组分重分布的原子尺度机制解释。

A03-21 邀请报告

钨纤维增强钨面向等离子体材料高能离子辐照性能评价

赵天宇^{1,2}、文攀²、唐军¹、都娟*²

1. 四川大学

2. 核工业西南物理研究院

核聚变能被认为是可以最终解决人类社会能源问题和环境问题的最佳能源。受限于服役环境，核聚变反应堆所使用的面向等离子体材料除了需要具备良好的热传导性和力学性能外还需要能够承受高温、强流等离子体冲刷以及高能中子辐照等考验。金属钨因具有高熔点、高热导率、低热膨胀系数、低溅射率、低

氢同位素滞留等优点，被认为是一种具有应用前景的面向等离子体材料。但其固有的脆性以及较低的热稳定性还不足以满足未来核聚变反应堆对面向等离子体材料的要求。

不同于传统强化手段制备的先进钨合金，钨纤维增强钨材料具有很强的概念创新性，其通过韧性纤维和功能界面之间的作用抵消外力冲击起到对基体材料增强的作用，改善了钨基材料脆性问题，但对于其服役性能的研究，特别是抗中子辐照性能评价较少，限制了该材料的进一步工程应用。

因此，本工作利用四川大学 3 MeV 串列加速器对钨纤维增强钨材料开展高能离子辐照研究，并通过正电子湮灭、透射电镜观察及原位力学分析等手段综合评价了该材料在室温下 0-45 dpa 辐照损伤内微观结构及力学性能的演变。

结果表明：高能离子辐照会导致钨基体中产生缺陷，缺陷种类以 $1/2\langle 111 \rangle$ 位错环为主，但在辐照剂量达到 22.5-45 dpa 时，缺陷浓度展示出饱和趋势，位错环的尺寸和数密度的乘积不再明显发生变化，大量的位错环合并后形成了位错线。与之对应的微柱压缩测试结果表明：辐照时，钨基体的极限抗压强度出现显著上升，当辐照剂量达到 45 dpa 时，钨基体中 $\{110\}$ 和 $\{100\}$ 面极限抗压强度均接近 2500 MPa，达到未辐照时的两倍，压缩应变则下降为未辐照前的二分之一。但相较而言，辐照剂量为 45 dpa 时，钨纤维中的位错环数量和尺寸均远远小于钨基体。纳米压痕的结果表明，高能离子辐照前后钨纤维的硬度仅增加了 0.32 GPa，约为钨基体的四分之一。

上述结果表明，钨纤维增强钨材料在服役过程中将面临的力学性能下降的严重问题，但钨纤维能够在辐照环境下保持相对稳定的力学性能，从而为面向等离子体材料的结构完整性提供保障。

A03-22 邀请报告

数据和机理双驱动的核用高熵合金设计研发

郑明杰^{*1}、潘昊^{1,2,3}、李孝晨^{1,4}、杜仲恺^{1,2}、赵仕俊^{1,3}

1. 中国科学院合肥物质科学研究院
2. 中国科学技术大学
3. 香港城市大学
4. 济宁学院

先进核能以其安全、经济、高效、清洁的特点，成为解决能源危机和实现双碳目标的重要能源选择之一。在先进核能系统的极端服役环境下，结构材料需具有高强韧、耐高温、抗辐照、耐腐蚀等优异性能。目前，现有的候选结构材料（铁素体/马氏体钢、低活化钢、ODS 钢等）面临各自的局限性。高熵合金，以其变革性的设计理念、优异的综合性能和广阔的性能提升空间，有望成为新一代核用材料，但其庞杂的成分选择可能性也为合金设计带来了难题。为了满足先进核能系统的需求，研究团队采用数据和知识双驱动的研究新范式，针对新一代核用高熵合金的高效设计和性能提升开展了一系列研究。

针对核用低活化高熵合金、难熔高熵合金、轻质高熵合金三类体系，分别发展了相、结构与性能集成设计模型，机器学习、多尺度模拟与遗传算法相结合的多目标智能设计框架，轻质-固溶-单相-高强韧的多目标优化方法，设计制备的三类新型高熵合金在成分、相结构、力学性能、热物理性能方面均有显著优化和提升，为先进核能系统新材料的研发提供技术和材料支持，研究过程中发展的方法和技术不仅可以应用到先进核能领域，也可以推广应用到航空航天、国防等领域，助力新材料研发与产业化。

A03-23 邀请报告

核用锆合金织构调控、表面改性与疲劳损伤

张聪惠^{*}

西安建筑科技大学

锆合金性能优异，用作包壳管、压力管及条带等堆芯结构材料，通常在高温高压、腐蚀、疲劳和蠕变等极端服役环境工作，因此，对其性能提出严苛要求。首先，从加工端设计满足服役要求的微观组织结构，进而开发事故容错涂层，最后研究疲劳损伤机制，并提出疲劳寿命预测模型。不同的锆合金燃料元件对织

构有着差异化的需求,对于织构的差异化调控多年来一直是行业难题。对热机械加工过程 Zr-2.5Nb 合金织构调控进行了深入研究,揭示热加工过程塑性变形、动态再结晶、 α 和 β 两相比比例、两相相互作用以及相变的交互作用机制;实验和 VPSC 模拟相结合,对冷加工过程的织构演化和变形机理进行定量研究,实现锆合金织构在加工过程的定量化控制,为合金织构调控工艺开发和生产奠定基础。为了提高锆合金燃料包壳在高温条件下的安全运行,充分发挥 Cr 和 Al 元素优异的抗氧化特性,设计了一种具有成分梯度结构的 CrAl-Cr 复合涂层,探究了复合涂层的高温氧化行为,阐明了成分和结构对涂层抗氧化性的影响规律,并提出复合涂层的氧化失效机制。对 Zr-2.5Nb 合金的低周疲劳损伤行为开展研究,结合晶体塑性有限元 (CPFEM) 对低周疲劳行为进行模拟,验证裂纹萌生的微观组织敏感性,裂纹萌生依赖于晶体取向和滑移系活性,精确预测疲劳裂纹在滑移带、晶界和相界处的萌生位置,并建立了一种基于背应力塑性功的疲劳寿命预测模型。

A03-24 邀请报告

强冲击下含氦泡金属界面动态损伤与失稳破碎理论研究

王欣欣*¹、鲍强¹、伍鲍¹、阎圣宁¹、邵建立²、何安民¹、王裴¹

1. 北京应用物理与计算数学研究所

2. 北京理工大学机电学院

强冲击加载条件下的金属扰动界面的动态破坏现象是惯性约束聚变 (ICF) 等工程装置研究中的关键物理问题,该问题是一个跨尺度、强非线性、多场耦合的复杂动力学过程。炸药爆轰或强激光驱动下,当冲击波从含表面扰动的金属-真空/气体界面反射时,会形成微喷射与微层裂破坏现象。微喷射来源于沟槽斜面粒子因获得横向速度发生高速对撞形成的聚能射流,微射流进一步拉伸破碎便会形成微喷射——高速颗粒态物质脱离主体向外喷射。微层裂来源于界面卸载波与追赶稀疏波的双向拉伸作用形成的液体空化破碎:低熔点金属在衰减冲击波作用下,在压缩波到达自由面时,由于熔化金属强度急剧下降,界面会形成由自由面向金属内部发展的连续液体空化现象。极端辐照条件下,金属内部会发生损伤,形成高内压纳米氦 (He) 泡等缺陷,将对界面破坏现象产生重要影响,使得该问题更加复杂。本报告基于微观分子动力学模拟方法,揭示复杂动力学路径下含氦泡金属界面破碎演化特征及多物理因素耦合影响机理,建立了典型物理过程的理论模型。本研究一方面将服务于重大工程需求,同时也将助力界面破碎动力学理论体系的进一步发展完善。

A03-25 闪报

金属钨中子辐照初期损伤的电子显微学表征

易晓鸥*¹、吉田健太²、桑原竜弥³、胡敏慎¹、井上耕治²、刘辉¹、董思辰¹、大貫惣明^{1,4}、长谷川润²、袁悦⁵、程龙⁵、波多野雄治²、永井康介²

1. 北京科技大学

2. 日本东北大学

3. 日本爱知工业大学

4. 日本北海道大学

5. 北京航空航天大学

金属钨是核聚变堆面向等离子体部件的主要候选材料。服役期间,钨部件承受高温、高通量聚变中子轰击,辐照损伤缺陷不断累积。这些缺陷与氢氦等离子体及嬗变产物相互作用,导致材料性能退化,聚变燃料滞留等问题。本研究以裂变快中子模拟聚变中子,运用多级式辐照技术在比利时 BR2 堆开展纯钨、钨-5 wt.% 铪合金中子辐照实验,获得了两组低剂量中子注量样品“290°C, 4.0×10^{22} – 9.4×10^{23} n/m² ($E_n > 1$ MeV)”和“800°C, 1.0×10^{25} n/m² ($E_n > 1$ MeV)”。基于系统的电子显微学表征,揭示了金属钨中子辐照初期缺陷产生和累积的统计规律,探明了辐照缺陷与钨材料预有缺陷(位错、晶界)相互作用机制,证实了嬗变元素铪对辐照诱导的间隙与空位团簇的演化过程均起到抑制作用。上述工作为构建“辐照缺陷-钨材料服役行为

（辐照硬化、氢同位素滞留）”关联模型提供了重要数据基础，将有利于开展钨部件性能的准确预测和评价，为聚变堆钨材料研发提供参考。

A03-26 闪报

Zr 基非晶合金的双束离子辐照损伤研究

梅显秀*、李娜

大连理工大学

聚变反应堆材料在 14 MeV 中子和氦等离子体等极端辐照环境下面临严峻挑战，辐照引起的多重损伤机制会显著降低材料性能。近年来，非晶材料因其出色的抗辐照性能和结构稳定性，在辐照材料研究中引起广泛关注。本研究聚焦于强级联损伤与 He 注入的协同效应对 Zr_{63.5}Cu₂₃Al₉Fe_{4.5} 非晶与晶体合金的结构稳定性与力学性能的影响机制。结果表明，非晶合金在所有辐照条件下均保持非晶结构，元素分布均匀，He 气泡在材料内部空间分布均一。相比单束 He 辐照，双束辐照增加自由体积，促进 He 原子和气泡迁移，使气泡尺寸增大。力学性能方面，非晶合金均发生软化，塑性变形更趋均匀，锯齿流动减弱，未表现出明显协同效应增强。对于晶体合金，辐照后均发生非晶化转变，形成元素分布不均的非晶结构。在 He 注入条件下，晶体合金中均出现气泡，Cu 富集区泡尺寸大于 Al 和 Fe 富集区。双束辐照进一步增大气泡尺寸，并减小不同元素富集区之间的气泡尺寸差异，表明强级联损伤促进了元素混合，提升了成分均匀性。辐照后的晶体合金表现出软化及轻微锯齿流动特征，双束辐照下硬度更低，塑性不稳定性增强，揭示出协同效应对其微观结构演化与力学行为的调控作用。

A03-27 闪报

变温等离子体辐照下钨中氦滞留行为研究

朱秀丽^{*1}、王婷²、客振华¹、程龙²、袁悦²、吕广宏²

1. 华北电力大学

2. 北京航空航天大学

金属钨因其高熔点、高热导率和低溅射率等优异性能，被公认为聚变装置面对等离子体材料（PFM）的最佳候选之一。然而，高束流密度的氢同位素等离子体照射会引发燃料滞留和表面起泡现象，威胁壁材的服役性能、使用寿命以及装置安全性。温度是决定氦（D）在钨（W）中行为的关键因素，然而前期的研究主要关注恒温效应，未考虑温度不稳定的实际工况。本工作探索性地开展了部分非恒温等离子体辐照下钨材料中氦滞留行为。本征缺陷较少的再结晶钨作为研究对象，分别在 420 K–590 K 与 320 K–720 K 两个温度区间进行了温度持续升高（TR）和持续下降（TD）的氦等离子体辐照。结合扫描电子显微镜和热脱附谱测试，系统评估了温度持续变化对钨中氦滞留、表面起泡及缺陷演化行为的影响。

结果表明，两种温度范围的 TR 和 TD 的两种温度历程下的氦致表面起泡行为存在显著不同。420 K–590 K 下，TD 辐照下材料表面起泡严重，TR 辐照样表面仅有少数晶间泡，晶内泡的形成得到了显著抑制。而在 320 K–720 K 区间，TR 与 TD 辐照钨表面均出现严重的晶内泡和晶间泡，统计结果显示，TD 辐照样表面起泡表现为数密度高、平均尺寸小；TR 辐照的表面起泡则表现为数密度略低、平均尺寸大。热脱附分析进一步指出，TD 辐照下氦滞留量显著增多，而 TR 辐照下滞留的氦较难脱附。这可能是因为，TR 辐照有利于材料内缺陷的聚集演化，促使较大尺寸缺陷的形成。以上研究结果揭示了等离子体辐照过程中温度变化对钨中氦行为及缺陷演化的重大影响。理解这些效应对评估预测面对等离子体材料的性能具有重要意义。

A03-28 闪报

钼酸盐烧绿石结构相变与固化性能研究

赵凤爱*

西南交通大学

安全有效地处置核废料，特别是钚(Pu)等具有高放射性的锕系核素，一直是核能发展的重要挑战，只有妥善解决核废物后处理问题，核能才算是真正意义上的清洁能源。钼酸盐烧绿石因其优异的性能是具有重大应用前景的高放射性核废料固化基材，但在服役阶段长期处于极端辐照环境，微观结构会发生变化，影响材料的固化性能。本工作基于密度泛函理论计算方法研究了钼酸盐烧绿石结构相变前后的固核性能，揭示了钼酸盐烧绿石结构相变对锕系核素固化性能的影响机制。本研究可为钼酸盐烧绿石结构与性能的完整性评估提供理论基础，为高放射性锕系核素的安全与有效固化技术提供参数依据。

A03-29 闪报

台式 X 射线吸收谱仪及核材料应用

张林娟*

中国科学院上海应用物理研究所

X 射线吸收谱 (XAS) 凭借其元素分辨、化学态敏感和局域结构解析能力，已成为能源材料表界面研究的关键工具，尤其在电催化领域，其能够精准揭示活性位点的电子结构演化、动态配位环境变化及反应中间体行为，为解析“构-效关系”提供原子尺度依据。然而，传统 XAS 高度依赖同步辐射光源，存在机时紧张、特殊环境样品禁运、在线测量灵活性差等瓶颈，严重制约其在电催化等时效性研究中的应用。针对上述挑战，本团队基于近 20 年同步辐射吸收谱经验，成功开发了系列小型化台式 X 射线吸收谱仪，实现了通用型、宽能谱、多模态、快扫型等吸收谱技术，在过渡金属电催化 CO₂、含铈 COF 材料、Ti 基 MXene 等材料结构研究中，获得了广泛验证 (SuperXAFS 合作成果: Nat. Commun.2024,15,453; Angew. Chem. Int. Ed. 2023,e202212733; Angew. Chem. Int. Ed. 2021,e202110640; Adv. Sci.2024,11, 2409084)。

A03-30 闪报

聚变堆含锂氚增殖材料的研究进展：制备技术与性能挑战

张敏*

中核北方核燃料元件有限公司

在全球能源危机与碳中和目标的双重驱动下，核聚变能作为清洁可持续能源备受关注。实现氚燃料自持是聚变堆商业化的核心挑战，而含锂固态氚增殖材料（如 Li₂O、Li₄SiO₄、Li₂TiO₃、LiAlO₂ 和 Li₂ZrO₃ 等）通过中子辐照反应 ($6\text{Li} + n \rightarrow \text{T} + 4\text{He}$) 实现氚原位增殖，对维持聚变堆燃料循环至关重要。

本文系统综述了聚变堆用含锂氚增殖材料的研究进展，重点聚焦其核心制备技术及其对材料关键性能（微观结构、机械强度、热物理性质、化学稳定性及氚释放行为等）的影响。鉴于球状颗粒（微球）在优化包层填充率、强化传热传质及促进氚高效释放方面的显著工程优势，微球制备技术成为研究重点。传统湿法（溶胶-凝胶法、冷冻成型法等）与干法（挤出-滚圆法、石墨球床法等）工艺可制备高球形度微球（粒径 0.4~1.2 mm），但球床填充率与应力集中问题等导致的辐照开裂风险可能制约氚释放效率。近年来，纳米化调控（晶粒尺寸 ≤ 100 nm 以缩短氚扩散路径）、3D 打印一体化成型（光固化技术实现孔隙率可调结构）及仿生多孔结构设计（基于三周期极小曲面的连通孔道）等成为研究热点。这些技术显著提升了材料的机械强度、氚增殖比及热稳定性等，但在规模化制备方面受到制约。

当前技术面临的核心科学难题在于：如何协同优化并精确控制微球的重要性能参数，包括高球形度与窄粒径分布、高机械强度、高锂原子密度与低杂质含量以及优异的氚释放性能等。此外，如何在满足上述苛刻性能指标的同时，实现制备工艺的高度可重复性、稳定性及可扩展性，以满足未来聚变堆大规模工程

应用的需求，也是亟需解决的问题。本文深入剖析了现有制备技术的优势、局限及内在科学问题，并展望了未来突破方向。

A03-31 主题报告

核材料中氦致辐照损伤产生机理与控制方法研究

周洪波*、李宇浩、吕广宏

北京航空航天大学

氦是核材料中最常见的杂质元素之一。一方面，中子辐照诱发(n, α)核反应和核燃料衰变均会在产生氦杂质；另一方面，聚变氦等离子体辐照会向材料中注入大量的氦。因此，氦杂质效应是核材料研究的前沿热点之一。众所周知，氦原子最外层为满壳层，是典型的惰性气体元素。但氦在材料中展现出与其化学惰性完全相反的行为，极易自发聚集，继而导致材料出现起泡、起丝、硬化、脆化、肿胀等问题，严重劣化核材料的服役性能。阐明氦在材料中自发聚集的物理原因是解决氦致材料辐照损伤的必由之路，但至今尚不清楚。

以钨基核材料为例，我们采用第一原理、分子动力学、对象动力学蒙特卡洛等不同尺度的计算模拟方法对氦在钨中的行为及其产生辐照损伤的机理。提出了通过应力张量定量测定氦在材料中有效体积的方法，解决了长久以来材料中间隙占位体积与能量相矛盾的争议，发现了拉应变（压应变）对钨中氦溶解的促进作用。类比于亲水和疏水，提出了金属中氦相互作用“electrophobic（疏电子）”的新概念，揭示了氦在金属中“self-trapping（自捕获）”及氦致起泡起丝的物理本质；疏电子机制不仅适用于氦，而且普适于电子吸附能为正的所有元素。疏电子机制导致氦在金属中极易自发聚集，进而挤压原有晶格原子离位形成氦泡，氦泡将通过“loop-punching（发射位错环）”机制进一步长大，而位错环的发射方式与氦泡曲率直接相关。与此同时，氦的疏电子性将导致材料中形成小尺寸的高密度微型氦团簇，这些氦团簇将会协同钉扎位错运动，加剧材料辐照硬化；据此，我们提出了微型氦团簇的协同钉扎硬化模型，且结果与实验相一致。有趣的是，除了不利作用外，氦对间隙缺陷粘附将使其迁移模式由一维变为三维，进而起到提升核材料自修复能力的作用。在此基础上，我们提出氧化物纳米颗粒或满/半满壳层元素掺杂控制氦致辐照损伤的方法，这为抗辐照材料的开发与设计奠定了重要基础。

A03-32 邀请报告

面心立方结构材料中辐照位错环的形核机理研究

马衍*¹、郭龙²、Mihai-Cosmin Marinica³、邓辉球²、Marie Loyer-Prost⁴

1. City University of Hong Kong

2. 湖南大学，物理与微电子科学学院，长沙，中国；

3. 法国巴黎-萨克雷大学，法国原子能与替代能源委员会（CEA），腐蚀与材料行为研究部（SRMP），吉夫-伊维特， F-91191, 法国

4. 法国巴黎-萨克雷大学，法国原子能与替代能源委员会（CEA），先进材料与工艺研究部（SRMA/LA2M），吉夫-伊维特， F-91191, 法国

先进奥氏体钢和镍基高温合金等面心立方（FCC）结构材料具有优异的高温力学性能，是第四代核反应堆核心部件的理想候选材料。但 FCC 材料的辐照肿胀是限制其服役寿命的关键瓶颈。研究表明，肿胀的形核期长度取决于辐照初期位错环的形成与演化。为有效预测 FCC 材料在辐照条件下的结构演化行为并完善材料的优化策略，亟需从原子尺度厘清位错环形核的物理机制与调控规律。为此，本研究采用实验表征与理论模拟的多尺度协同研究范式，选择高纯镍及其合金作为模型材料，结合透射电子显微镜原位辐照技术与辐照后精细表征技术，研究了位错环的演化、类型和形貌特征。通过密度泛函理论计算与大规模分子动力学模拟，从原子尺度揭示了位错环形成的物理起源。突破性发现包括：1）在纯镍中首次观测到空位型位错环[1]，在材料内部形成分别由空位和间隙型位错环主导的多层损伤结构[2]，颠覆了“纯金属仅存在间隙型位错环”的传统认知；2）FCC 结构中间隙原子优先聚集成亚稳态 A15 相团簇而非直接形成位错环

[3] , 当材料承受力学载荷时, 该以 A15 为中间态的位错环形核机制将引发位错环构型的显著取向选择特性, 阐明了应力等因素对缺陷形核路径的调控作用 [4]; 3) FCC 材料中位错环类型 (间隙或空穴) 与位错环形貌密切相关, 利用分子动力学模拟研究了间隙与空穴位错环应力场和位错的 stair-rod 分解, 揭示了应力场的非对称性以及材料本征层错能与不稳定层错能对环形貌的影响[5]。上述成果挑战了传统辐照损伤模型中关于缺陷类型、形核路径与时空演化的简化假设, 不仅深化了对金属辐照损伤本质的认知框架, 更通过定量关联原子尺度机理与介观结构演化为核能材料的抗辐照性能优化提供了创新方法论基础。

参考文献:

[1] K. Ma, B. D'écamps, A. Fraczekiewicz, T. Jourdan, F. Prima, M. Loyer-Prost. (2021). Free surface impact on radiation damage in pure nickel by in-situ self-ion irradiation: can it be avoided?, Acta Materialia 212 116874.

[2] K. Ma, B. D'écamps, A. Fraczekiewicz, F. Prima, M. Loyer-Prost. (2022). Inversion of dislocation loop nature driven by cluster migration in self-ion irradiated nickel, Scripta Materialia 208 114338.

[3] A.M. Goryaeva, C. Domain, A. Chartier, A. D'écamps, T.D. Swinburne, K. Ma, M. Loyer-Prost, J. Creuze, M.-C. Marinica. (2023). Compact A15 Frank-Kasper nano-phases at the origin of dislocation loops in face-centred cubic metals, Nature Communications 14 (2023) 3003.

[4] T. Jourdan, A. Goryaeva, M.-C. Marinica, Preferential nucleation of dislocation loops under stress explained by A15 Frank-Kasper nanophases in aluminum, Physical Review Letters 132 (2024) 226101.

[5] K. Ma, L. Guo, A. Dartois, E. Meslin, C. Ophus, B. D'écamps, A. Fraczekiewicz, A. Knowles, L. Wang, O. Tissot, F. Prima, F. Gao, H. Deng*, M. Loyer-Prost*, Decoding the interstitial/vacancy nature of dislocation loops with their morphological fingerprints in face-centred cubic structure. Science Advances, 11(15) (2025), eadq4070.

A03-33 邀请报告

面心立方金属中纳米空洞结构与能量预测模型

孔祥山*

山东大学

理解空位类缺陷的结构与能量特性对于掌握金属中缺陷的演化过程至关重要, 然而, 现有方法在研究面心立方 (FCC) 金属中的纳米空洞时面临诸多挑战。为此, 我们开发了一种稳健的建模框架, 可精确预测 FCC 金属中纳米空洞的结构与能量特性。研究表明, 通过最大化空位之间的配位数, 可以高效地确定稳定的纳米空洞结构, 并揭示了纳米空洞形成能与其致密因子之间的线性关系。值得注意的是, 我们发现纳米空洞与空位之间的相互作用存在六个离散的结合能级, 这些能级仅与致密因子的变化相关。我们的新模型已通过第一性原理计算和实验验证, 在多个方面优于传统方法。该模型能够有效处理任意尺寸的 FCC 金属纳米空洞, 捕捉原子尺度的结构变化, 并为空位相关损伤机制的理解、多尺度建模及新型金属原子间势函数的开发提供了关键的理论支持和工具。

A03-34 邀请报告

核燃料包壳锆合金氢致力学损伤行为的多尺度研究

公维佳*¹、李时磊²、杨陆峰³、王沿东²

1. 西北工业大学 材料学院

2. 北京科技大学 新金属材料全国重点实验室

3. 中国散裂中子源科学中心

氢是危害金属材料服役安全的重要因素。核燃料包壳锆合金在堆内服役时, 吸收冷却水侧腐蚀产生的部分氢。氢溶质原子迁移特性活跃, 当局部产生富集、浓度超过固溶极限时, 析出氢化物脆性相, 固溶氢与氢化物严重损害包壳材料的抗拉强度、断裂韧性及疲劳寿命。因此, 氢致力学损伤是影响核燃料包壳堆内服役安全的关键问题。本文借助 X 射线 μ CT、同步辐射 X 射线衍射、高分辨中子成像以及高分辨 EBSD 等多尺度表征手段, 系统研究了应力诱导氢扩散与氢化物析出机理、及其对力学损伤行为的影响规律。

在微观尺度上, EBSD 和 ECCI 联用表征证实, 应力诱导氢化物析出的 α -Zr 母体取向特征为 c 轴与板

材 TD 方向夹角 $40\sim 50^\circ$ ；而无应力条件下氢化物母体特征取向为夹角 $20\sim 30^\circ$ 。基于 HR-EBSD 的应变场测定发现，在外界拉伸应力作用下， $\{0001\}\langle 10\text{-}10\rangle$ 滑移系承受显著剪切应力的 $\alpha\text{-Zr}$ 晶粒，成为再取向氢化物的优先成核位点。无论弹性还是塑性应力，外部应力通过与氢化物应变产生相互作用，特别是剪切分量，控制氢化物在不同取向 $\alpha\text{-Zr}$ 晶粒的形核概率，并最终诱导氢化物重取向。

在介观尺度上，X 射线 μCT 揭示了裂尖应力集中区再取向氢化物的片层形貌与三维分布，结合电镜表征，发现 $\{10\text{-}10\}\langle 11\text{-}20\rangle$ 滑移可促进氢化物相互连接，长度可达数百微米，而 $\{10\text{-}11\}\langle 10\text{-}1\text{-}2\rangle$ 孪晶则导致氢化物呈碎片化分布特征。借助高分辨率中子成像，对非均匀应力场中的氢浓度分布进行了定量分析，证实应力诱导氢化物再取向造成局部氢浓度升高约 50 wppm。此外，包壳管环向拉伸测试结果显示，再取向氢化物造成塑性延伸率由 42.4% 下降至 24.6%。

在宏观尺度上，固溶氢造成锆合金应力应变曲线中屈服点现象消失、强塑性下降。电镜表征发现，第二相粒子 $\text{Zr}(\text{Fe},\text{Cr})_2$ 作为微观氢陷阱捕获溶质氢原子，并作为形核位点促进纳米氢化物析出，强析出应变 $\alpha\text{-Zr}$ 晶粒中形成大量位错发射。这些可移动位错可以保持施加的塑性应变，并阻碍位错的快速增殖，从而造成屈服点消失。原位同步辐射高能 X 射线衍射证实，氢促进位错在柱面滑移平面化，造成柱面、锥面及基面的晶格畸变和位错密度均明显下降。

以上研究结果对理解核燃料包壳堆内服役行为提供了新见解，为锆合金氢脆失效分析模型、核燃料包壳结构完整性评价奠定理论基础。

A03-35 邀请报告

AI 技术在核燃料研发领域中的应用

辛勇*

中国核动力研究设计院

核燃料与材料研发长期面临研发周期长和成本高等瓶颈。传统经验驱动范式因效率与预见性不足，已难满足现代核能发展需求。以计算材料学为代表的计算范式虽在一定程度上提升了研发效率，但在处理高维复杂问题（如跨尺度耦合）时仍面临计算成本高昂等挑战。近年来，人工智能技术取得了突破性进展，其强大的数据挖掘和复杂系统问题解决能力，正推动核燃料及材料领域向数据驱动与物理模型深度融合的“科学智能”新范式加速演进。

本文探讨了人工智能与核燃料研发相结合的广阔前景。在材料研发层面，AI 技术能够加速新材料的发现与性能预测，优化材料成分与制备工艺；在燃料元件及组件等整体结构研发层面，AI 可以辅助多物理场耦合分析、结构优化设计以及复杂工况下的行为预测，从而提升核燃料的性能与安全性。本文介绍了锆合金蠕变行为的 AI 预测模型并进行了设计优化；开发了包壳堆内腐蚀行为的智能建模方法；应用深度势能方法开展了核燃料性能模拟研究；实现了基于 AI 的全堆芯核燃料性能高效预测；开发了组合生成式仿真算法进行多物理场和多元件仿真。

展望未来，AI 与核燃料及材料领域的融合将更加深入。在算法层面，提升模型的可解释性、量化模型的不确定性以及发展适用于核领域有限样本数据的学习技术，是核心挑战与重点研究方向。在应用层面，多尺度多物理场耦合仿真加速、拓扑优化与生成式设计、核材料特性通用预训练大模型的构建，以及智能化自动化实验平台的研发，将是未来推动该领域取得突破性进展的关键技术。我们相信，人工智能的深度赋能将为核燃料及材料的创新发展开辟全新路径。

A03-36 邀请报告

锆合金辐照变形数据库的自动建设和模型挖掘

沈耀*、唐纤雪

上海交通大学

锆合金是目前商业水冷核反应堆中包壳管、压力管等结构件的重要材料，研究和预测锆合金辐照变形有助于核材料国产化开发和改进。辐照生长、热蠕变及辐照蠕变等辐照行为相关的实验数据可供锆合金辐

照变形模拟和研究,但新辐照变形实验成本高、耗时长,直接实验数据获取难,而现有公开文献中已积累了大量珍贵实验数据有待充分利用。因此,能自动、准确收集与挖掘文献中散落实验信息的数据库有必要被建设以加速锆合金辐照变形的研究。

锆合金辐照变形数据库的开发主要包括数据采集和模型挖掘两部分。数据采集环节包括文献搜集下载-文档解析-文字图表中关联信息成套录入的自动化采集全流程。对 PDF 格式的文献进行文本转化以及关键信息提取时,我们使用 DeepSeek 等开源大语言模型(Large Language Model, LLM)直接处理文档,取代了光学字符识别和正则表达式等传统工具和算法,以减少格式错乱、内容缺失等问题。针对开源 LLM 对文献中富集实验数据的散点图等图片内容提取能力不强的情况,我们综合人为制定规则、模式识别等传统计算机视觉方法和 LLaVA 等多模态大模型的方法,将启发式算法和 YOLO 算法对散点图等图片提取的较准确结果进行人工修正后作为 LLaVA 等模型的输入信息,进行微调迭代训练,开发感知细节更敏感、识别准确度更高、适用更多图片类型和内容布局的图片内容识别工具。

在模型挖掘环节,将材料领域的知识与数据采集环节的数据充分结合才能真正利用有限数据加速锆合金辐照变形的研究。我们将锆合金辐照变形相关的专业知识和预测模型作为规则限制,并将粘塑性力学模拟程序与优化算法的调用写入 MCP(Model Context Protocol, MCP)智能体。以人为互动的形式引导 LLM 对数据库中的信息按研究主题分类、筛选,对物理模型的参数进行拟合优化,得到模型参数随成分、加工条件等变量的变化规律,同时检测出数据库中的异常数据并对缺失数据进行最优概率预测。

该锆合金辐照变形数据库深度融合人工智能技术和核材料领域知识,为数据驱动探索核材料新知识模型提供整套方法论和工具包。未来有望推广应用,拓展到锆合金其他服役行为与其他核材料研究,有机融合用户的自有数据库,为核材料研究者提供数据定制化查询以及辐照变形模拟等服务,为反应堆结构材料的逆向设计和核电的运维提供模拟参考。

A03-37 邀请报告

面向核能材料中氢、氦的跨尺度、多要素电镜分析技术

李慕鸿*、戚麟、邹成琴、申中海

中国工程物理研究院核物理与化学研究所

核反应堆中普遍存在氢同位素、氦等轻元素导致的结构材料性能衰减问题,制约了反应堆的长期安全运行与服役寿命。受限于氢、氦等轻元素的定量分析技术发展,现阶段对核反应堆结构材料中的氢脆、氦演化以及氢氦协同效应等关键问题的认知仍不充分。电子显微技术为研究氢、氦在材料中的行为提供了强有力的直接观测手段。然而氢、氦元素存在质轻、尺度极小等特征,其在材料中的原子占位、三维分布、压力状态等显微信息的精确定量分析仍面临巨大挑战。

报告将系统介绍近期本研究团队发展的系列跨尺度、多要素核能材料中氢、氦行为电镜分析方法。相关技术实现了从亚埃级的轻原子(氢、氧)占位、纳米级氦泡三维分布、微米级晶粒结构的多尺度观测,以及高精度氢/氦元素分布、氦泡压力变化、微区残余应力等多要素分析。报告还将以金属氢(氘)化物为讨论对象,介绍相关技术在氢化物结构设计和氦泡演化行为研究中的应用实例,为深入了解核能领域相关材料与氢氦相互作用提供了重要的实验支持。

A03-38 闪报

核反应堆材料中氟含量的测试技术研究

王群、王晓姣、张兆泉*

中国科学院上海硅酸盐研究所

核反应堆材料中如果存在氟元素会严重危害反应堆安全性,因为氟的高化学反应性会腐蚀反应堆结构材料(如金属管道、燃料包壳),导致设备强度下降、泄漏或失效。而且由于氟化物可能与其他物质反应生成有害化合物,含氟放射性废物的处理需特殊措施。尽管设计时已考虑耐腐蚀材料,但高温下氟仍能够加速反应堆中相关材料的腐蚀及失效,因此需要严格监控氟的含量。

材料中氟含量的测试方法包括高温水解-离子选择电极法, 阴离子色谱法以及高温红外光谱技术等。其中高温水解-离子选择电极法具有高选择性、高灵敏度(检出限低至 $0.02 \mu\text{g/g}$), 抗干扰能力强、快速便捷等优势, 从而被美国材料试验协会的标准试验方法 ASTM C809 及 C791 指定作为核级氧化铝、碳化硼以及氧化铝和碳化硼复合材料中氟含量的测试方法。但是上述标准中并未涵盖所有技术参数的选择。

氟离子选择电极的检测依赖于游离 F^- 的活度, 而 pH 值直接影响 F^- 的存在形态和电极响应。低 pH (<5.0) 条件下, H^+ 与 F^- 结合生成 HF, 游离 F^- 减少, 导致测量值显著偏低; 高 pH (>8.0) 条件下, OH^- 与电极的 LaF_3 晶膜发生反应 ($\text{LaF}_3 + 3\text{OH}^- \rightarrow \text{La}(\text{OH})_3 + 3\text{F}^-$), 释放额外 F^- , 导致测量值虚高。本项工作中, 我们系统研究了 pH 调控、高温水解过程调控等对核反应堆材料中氟含量检测的影响, 通过优化高温水解工艺、冷凝条件及离子选择电极法技术参数, 提高了核反应堆材料中氟含量检测的可靠性及准确性。

A03-39 闪报

核废物陶瓷固化体辐照抗非晶化规律与评价标准探究

张建*、蒋胜明、胡潇天、尹然、刘淑华、马铭泽

厦门大学

随着我国核能持续发展, 高放核废料处置难题也越来越严峻。高放核废物陶瓷固化体由于地质年代尺度下的结构稳定性和极低的抗水浸出性能, 受到国际范围内的广泛关注。本报告以自然界大量存在的氟磷灰石矿物作为主要研究对象, 基于不同高放核素固化量, 及固化不同原子半径锕系核素两个方面, 制备了不同掺杂量 $\text{Ca}_{10-x}\text{La}_x(\text{PO}_4)_6-x(\text{SiO}_4)_x\text{F}_2$ ($x=1, 2$ 和 6) 及不同掺杂种类稀土 $\text{Ca}_9\text{REE}(\text{PO}_4)_5(\text{SiO}_4)\text{F}_2$ ($\text{REE}=\text{Nd}, \text{Sm}, \text{Tb}, \text{Er}$ 和 Lu) 两种体系的氟磷灰石。然后借助加速器与透射电镜联机原位辐照设施的快速评价优势, 系统表征样品在不同温度下的重离子辐照非晶行为, 获得了临界非晶温度 T_c 随材料成分的变化规律, 并从多方面分析探讨了决定此规律的内在因素, 研究结果对高放核废物陶瓷固化体的辐照非晶性能研究具有借鉴和指导意义。同时表明通过系列温度下辐照获得的临界非晶温度 T_c 的大小是全面评价核材料抗辐照非晶相变能力的指标。

A03-40 闪报

长期时效引起的 GH3617 合金组织及性能退化行为

管现军*

中国科学院金属研究所

GH3617 合金是我国高温气冷堆中间热交换器最重要的候选材料, 其组织和力学性能的长期热稳定性对高温气冷堆设计寿命及服役安全性具有重要意义。GH3617 合金中不含有晶界强化元素——硼 (B), 不易发生元素嬗变, 而发生“氢脆”现象; 在此情况下, GH3617 合金在长期服役过程中的组织稳定性及其力学性能退化行为是否能够满足高温气冷堆 40 年设计寿命的要求是非常值得关注的。鉴于此, 本工作分别以无 B 和含 B GH3617 合金为研究对象, 通过不同温度 ($750^\circ\text{C}\sim 1000^\circ\text{C}$) 下的长期 (最长 10000 h) 时效及时效后的拉伸性能对比, 探究了 B 对 GH3617 合金的热稳定性及其性能退化特征的影响。结果表明, 随时效时间延长, 有 B 和无 B GH3617 合金的室温强度变化均不大, 说明长期时效对合金室温强度影响较弱; 但在高温气冷堆主要服役温度 (950°C) 下, 合金强度明显随时效时间延长而表现出先快速下降后缓慢下降的变化特征。长期时效对合金室温及 950°C 下的塑性影响较为明显, 均表现出先快速下降后缓慢下降的特征。这主要是由合金在长期时效过程中的晶界析出引起的。在 $750^\circ\text{C}\sim 1000^\circ\text{C}$ 时效过程中, GH3617 合金中发生了明显的碳化物析出现象, 碳化物多分布于晶界附近, 形成连续膜状结构, 导致时效后合金发生明显的沿晶断裂。对比不同温度时效合金的显微组织发现, $750^\circ\text{C}\sim 1000^\circ\text{C}$ 时效 GH3617 合金中的碳化物多为 M23C6 型碳化物, 少量为 MC 和 M6C 型碳化物; 此外, 随时效温度升高, 合金中碳化物的尺寸增大, 对性能影响加剧。

A03-41 简报**新型氚增殖-中子倍增复合功能材料铅钛酸锂的制备及释氚性能模拟研究**汪京^{*1}、芦伟²、周启来³

1. 合肥工业大学
2. 安徽大学
3. 武汉理工大学

钛酸锂化学性质稳定、机械强度高，是现行固态增殖包层方案的首选氚增殖剂之一，但其载锂密度较低，需要在球床中交替设置较多的铍或铍钛球区域倍增中子以提高氚增殖率。由于铍的毒性高且资源稀缺性，从而限制了其在固态包层的大规模应用。项目组前期设计采用 Pb 来作为中心原子，已成功制备 Li_2PbO_3 甚至 Li_8PbO_6 陶瓷增殖剂。利用 Pb 对聚变中子的增殖能力，提高 Li 与中子的反应概率从而提高氚增殖率。然而，实测各种 Li-Pb-O 相的熔点偏低 ($<800^\circ\text{C}$)，难以达到目前固态包层设计的服役温度 (约 880°C) 要求，不适于作为氚增殖剂。本研究计划利用 Pb 与 Ti 在化学成键上的相似性，以共晶的方式，用 Pb 取代部分 Ti 作为中心原子，制备成铅钛酸锂共晶化合物，既可以通过铅原子倍增中子进而大幅度地提高氚增殖率，又可以最大限度地保留 Li_2TiO_3 材料优良的机械-物理性能。在此基础上采用蒙特卡洛程序 MCNP 来计算优化铅钛酸锂的元素组成和氚增殖率，并系统地研究该新型增殖材料的氢同位素释放、滞留和渗透性能。

首先，采用 MCNP4C 计算不同中子能量、Pb 含量以及 ^6Li 丰度下铅钛酸锂的氚增殖率，计算结果表明氚增殖率随着 Pb 含量的升高而增大，可以选择在聚变堆包层中子高能区 (能量大于 7.4MeV) 使用铅钛酸锂氚增殖材料，包层的其余增殖区仍然采用传统的钛酸锂与铍交替放置的模式。其次，采用溶胶-凝胶法制备铅钛酸锂陶瓷粉体，通过对干凝胶表征分析发现 750°C 的烧结温度，铅钛酸锂陶瓷粉体的结晶度最好、相组成稳定、Pb 稳定存在于 Li_2PbO_3 相中，Ti 稳定存在于 Li_2TiO_3 相中。通过对不同 Pb 含量铅钛酸锂陶瓷粉体进行一系列表征发现，钛和铅能够按照摩尔比为 1:2 形成 $\text{Li}_2\text{TiO}_3 \cdot 2\text{Li}_2\text{PbO}_3$ 共晶，多余的 Ti 以无定形形式存在，多余的 Pb 以 Li_2PbO_3 单独存在。此外，基于所制备的粉体，采用冷冻干燥法制备了铅钛酸锂陶瓷小球，通过对粉体进行热重和高温原位 XRD 分析确定小球的烧结温度为 900°C 时最合适。在 900°C -2h 的烧结条件下，陶瓷小球的直径小于 1.6mm ，孔隙率小于 25%，破碎载荷有所提升，并且在 Pb 含量 $x=0.40$ 时， $\text{Li}_2\text{Pb}_0.4\text{Ti}_0.6\text{O}_3$ 陶瓷小球的破碎载荷最大，达到 25.33 N ，高于同样条件下所制备 Li_2TiO_3 小球。最后，在日本京都大学针对所制备的新型小球开展中子辐照模拟产氚实验，结果表明 Pb 的引入可以有效降低氚的释放温度窗口。

A03-42 简报**微生物电解池中硫酸盐还原菌和核黄素衍生物的协同铀提取机制**

张鸿郭、李猛*

广州大学

铀资源短缺和电子传递受限是处理铀矿废水的重要挑战，而核黄素 (RF) 与硫酸盐还原菌 (SRB) 在自然和工程环境中经常共存，但其在铀还原过程中的相互作用机制尚不明确。研究发现，RF 的引入显著降低了微生物电解池 (MEC) 系统的电荷传递电阻 (降低超过 60%)，并提高了铀回收效率，达到 89.8%，明显优于不添加 RF 的系统。RF 通过促进电子传递和增强生物膜密度，有效促进了 U(IV) 矿物的形成与固定。此外，RF 的添加还促使了具有强大电子传递能力和金属抗性特性的微生物种群 (如肠杆菌属) 的富集，同时稳定了与能量产生和氧化还原相关的核心代谢基因的表达。这些发现表明 RF 作为电子载体能够显著增强电极的电化学活性，进而促进 SRB 对 U(VI) 的还原作用，形成稳定的低溶解度铀矿物。研究还表明，在铀胁迫下，SRB 通过硫酸还原和电子传递的协同作用显著提高了铀去除效率。随着 RF 浓度的增加，生物膜的结构变得更加紧密，RF 浓度为 200 mg/L 时，生物膜的铀沉积最为明显。此外，随着 RF 浓度的增加，铀还原效率显著提升，RF-200 系统的铀去除效率达到最高值 (89.8%)。通过对微生物群落分析，研究表明 RF 首先促进了发酵型和还原型细菌的富集，而在铀的压力下，细菌群落发生了适应性转变，肠杆

菌属的丰度显著提高,表明 RF 的添加促进了具有较强电子传递能力的细菌的富集。通过 16S rRNA 基因测序和功能基因分析,研究表明在不同的 RF 浓度和铀胁迫条件下,微生物群落保持了较高的代谢功能,确保了稳定的电子转移和铀提取。因此,研究揭示了 RF 和 SRB 在 MEC 中协同作用的机制,提供了优化铀生物提取的新思路,具有重要的环境修复潜力,尤其在高铀排放水体的处理上具有良好的应用前景。

A03-43 闪报

模拟核芯 CDM 燃料芯块关键力学性能研究

王管、李统业、王凯、何宗倍*

中国核动力研究设计院

陶瓷基弥散微封装燃料(CDM)因具有较好的固有安全性而被核燃料领域的研究者逐渐关注,该燃料由 SiC 基体以及弥散其中的三结构各向同性包覆颗粒(TRISO)微球构成,掌握其关键力学性能特征对 CDM 燃料的设计与堆内辐照行为预测具有重要意义。为此,本文以模拟核芯 CDM 燃料为研究对象,基于压痕法研究了 SiC 涂层以及 SiC 基体的断裂韧性,通过界面区域显微拉曼成像测试表征了碳化硅基体与多层包覆微球的界面区域残余应力分布特征,并结合有限元计算对热残余应力进行了对比分析。结果表明:SiC 基体的断裂韧性值为 $3.96\text{MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$,而 SiC 涂层的断裂韧性值为 $2.10\text{MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$,由此可见 CVD 方法制备的 SiC 具有更大的脆性;OPyC/SiC 基体界面区域内残余应力以压应力和低水平的拉应力为主,大致在 $+0.4\text{GPa}$ 到 -0.2GPa 之间, SiC 基体与包覆颗粒界面两侧应力水平存在明显的阶跃变化,且在 SiC 区域以压应力为主,有助于维持燃料球的预压状态;实测残余应力较模拟值大,归因于裂纹、孔洞、元素迁移等微观缺陷导致的应力集中。该结果对外致密碳层和 SiC 基体界面区域应力、缺陷和性能分析有很好的参考价值,对芯块制备工艺优化具有一定的指导意义。

A03-44 主题报告

RPV 材料辐照损伤研究进展

刘向兵*、李远飞、贾文清、王润中、徐超亮、全琪炜、钱王洁

苏州热工研究院有限公司

核能的安全发展是解决能源问题的重要选择。反应堆压力容器(RPV)是核电站唯一不可更换的金属部件,在服役过程中经受高温、高压、腐蚀和强中子辐照等恶劣环境。长期中子辐照将导致 RPV 韧性降低,增加脆性断裂的风险,掌握 RPV 钢辐照条件下的服役行为并开发可靠预测技术是确保核安全的重要举措。在 RPV 母材及焊材辐照损伤方面,开展了国产 A508-3 钢及进口 16MND5 钢质子辐照实验,利用正电子湮没(PAS)、透射电镜(TEM)、三维原子探针(APT)和纳米压痕等技术对辐照后 RPV 钢微结构缺陷及力学性能进行系统研究。结果表明,国产 A508-3 钢常温辐照下为空位型缺陷作用机制,高温辐照下是空位型基体损伤缺陷与 Mn-Ni-Si 原子团簇作用机制;揭示质子辐照 1.62dpa 下 16MND5 钢中 G 相析出的演变机制;建立重离子与中子辐照性能映射关联方程;开发 PMIE-2020、PMIE-XGboost 脆化方程,与国外主流方程相比,预测结果的准确度更高;开发 MBN、TEP、PAS、IF 等先进无损检测技术;探明国产 RPV 钢离子辐照损伤缓解的最佳热退火工艺为 475°C 保温 150h。在 RPV 堆焊层材料辐照损伤研究方面,开展了 308L 不锈钢热老化、质子辐照以及腐蚀实验,利用扫描电镜(SEM)、透射电镜(TEM)、三维原子探针(APT)和极化曲线测试等技术对热老化-辐照-腐蚀耦合环境下材料微结构演变及腐蚀性能进行系统研究。结果表明,热老化导致 308L 不锈钢中铁素体相发生调幅分解和 G 析出,铁素体/奥氏体相界处 M23C6 型碳化物粗化,诱发 Cr 贫化区。辐照对铁素体相的调幅分解存在注量率效应,阈值约为 $10^{-5}\text{dpa}\cdot\text{s}^{-1}$;辐照会加速 G 相长大,促进 Ni-Si 团簇的析出与长大;热老化、辐照以及二者耦合对材料腐蚀都是起到劣化作用,使得材料腐蚀性能进一步下降;热老化与辐照协同作用会导致铁素体/奥氏体相界(PB)处贫 Cr 与元素偏析,增加了材料发生 SCC 的敏感性。

A03-45 邀请报告

核用复杂结构陶瓷材料中的辐照多级相变

王晨旭^{*1}、王宇钢¹、黄庆²、王京阳³、张洁³、高飞⁴、Cameron Tracy⁵、Rodney Ewing⁵

1. 北京大学
2. 中国科学院宁波材料所
3. 中国科学院沈阳金属所
4. 密西根大学
5. 斯坦福大学

在辐照等极端环境下，多种核用复杂结构陶瓷材料会经历多级相变过程。例如，MAX 相材料在辐照作用下会从初始的六方结构转变为中间态固溶 γ 相，最终形成面心立方 (fcc) 结构，而部分 MAX 相则发生非晶化。类似地，复杂结构（如烧绿石结构）氧化物陶瓷体系在辐照下也会转变为缺陷萤石结构，并在更高辐照剂量下出现非晶化现象。迄今为止，大多数相关研究主要关注材料的初始相结构，但这不足以全面解释其在辐照下的相变与非晶化行为。同时，辐照诱导产生的中间相在结构转变路径中的作用仍缺乏深入研究。本研究结合原位离子辐照实验、透射电子显微镜 (TEM) 与密度泛函理论 (DFT) 计算等，系统揭示了一系列 MAX 相与复杂结构氧化物中独特的相变路径。结果表明，中间相（如 MAX 相材料中的 γ 相与氧化物中的缺陷萤石结构）的结构畸变程度等特性，是决定最终相变结果的关键因素。本研究为理解复杂结构陶瓷材料在极端环境下的多级相变机制以及该类材料的抗辐照性能优化设计提供了新的视角。

A03-46 邀请报告

Cr 涂层 Zr 合金界面 ZrCr_2 相在离子辐照下的结构转变与硬度演化

李博*、阿部弘亨

东京大学

为提高事故容错燃料包壳材料的服役性能，铬 (Cr) 涂层锆 (Zr) 合金技术已成为工程应用的重要研究方向。然而，在反应堆辐照环境中，Cr/Zr 界面形成的金属间化合物 ZrCr_2 相的结构稳定性及其对界面力学行为的影响机制尚未明晰。本研究通过系统实验，揭示了 Cr-Zr 扩散偶中 ZrCr_2 相在 Fe^{2+} 离子辐照作用下的微观结构演化规律及其与硬度变化的关联性，为评估 Cr 涂层锆合金的界面可靠性提供理论支撑。

实验选用高纯 Cr 与商用 Zry-4 合金，经 1050 °C 真空扩散焊接 48 小时制备含连续 ZrCr_2 界面层（厚度约 8 μm ）的 Cr-Zr 扩散偶。采用东京大学高通量辐照装置 (High Fluence Irradiation Facility, the University of Tokyo) 进行 300 °C 条件下的 2.8 MeV Fe^{2+} 离子辐照，剂量梯度设置为 0.1、1 和 5 dpa。通过透射电子显微镜 (TEM) 表征辐照损伤区的微观结构演变，并利用纳米压痕技术定量分析界面各相区的力学性能变化。

研究表明：（1）在 0.1 dpa 的低剂量辐照下， ZrCr_2 相内形成高密度位错环，诱发辐照硬化（硬度提升约 8%）；（2）当剂量增至 1 dpa 时，损伤峰值区出现完全非晶化转变，其周边形成宽度约 300 nm 的晶态-非晶态过渡区，结合损伤模拟确定非晶化临界剂量阈值为 0.7 dpa；（3）5 dpa 高剂量辐照导致非晶区扩展至 1.8 μm 深度，过渡区宽度缩减至 80 nm，表明辐照加速了晶体结构失稳进程。力学性能测试显示， ZrCr_2 相的硬度响应呈现显著剂量依赖性：0.1 dpa 时硬度达 12.4 GPa，1 dpa 时维持 12.0 GPa，而 5 dpa 时降至 10.8 GPa（降幅约 13%）。对比发现，Cr 涂层与 Zr 基体随剂量增加持续硬化，在 1 dpa 后趋于饱和（硬度增幅分别为 17% 和 9%）。

综上所述，本研究揭示了 Cr-Zr 界面金属间化合物 ZrCr_2 在辐照条件下的结构演化路径及其硬度响应特征，明确提出了非晶化的临界剂量阈值。这些发现为评估 Cr 涂层 Zr 合金在堆内环境中的结构稳定性和界面可靠性提供了重要依据，有助于指导未来事故容错燃料包壳的界面工程优化设计。

A03-47 邀请报告**离子辐照核与电子能损诱导的损伤效应及其应用**

刘鹏*、韩心晴、刘泳、潘尚发、朱正辉

山东大学

伴随数十 MeV 至 GeV 高能重离子的应用以及新型复杂物质结构的引入,辐照效应、核技术应用等领域研究体系已发生明显变化;对该条件下,离子与固体相互作用基本机制的认知与理解,已成为能源、信息等多学科前沿领域的共性基础支撑。本报告将围绕离子辐照效应,汇报如下工作进展:(一)针对高能离子辐照强电子能损作用诱导的径迹损伤效应,本工作将辐照实验表征的晶格径迹损伤精细形貌,与热峰模型计算的辐照能量沉积时空演化相结合,通过对决定能量沉积密度的电子能损与离子速度两个参量的分析,归纳出描述径迹损伤的原子能量阈值,并给定了多种晶体中不同径迹精细结构的形成阈值,进一步理解了强电子能损作用下径迹损伤的形成机制与关键因素。(二)针对低能离子辐照核能损诱导的离位损伤与高能离子辐照电子能损诱导的热峰响应两类作用机制之间的耦合效应,本工作通过辐照实验与模型计算,指出其包括(1)协同效应,即核能损产生的离位损伤,将降低材料热导率并增强电—声耦合系数,提升电子能损作用下的局域热峰响应强度,晶格热振动加剧,经淬火形成更为显著的径迹损伤;(2)竞争效应,即电子能损较低时,晶格热峰响应强度较弱,局域的晶格热振动难以诱导形成熔融相与径迹损伤,此时,离位损伤在热峰作用下发生退火再结晶,损伤降低。相关工作为理解复杂辐照环境下多物理量多参数之间的耦合及其诱导的损伤演化等提供支撑;以此为基础,报告简要汇报基于低能离子辐照形成的空位型缺陷以及高能离子辐照形成的径迹损伤分别在电催化、盐差能转换领域中的应用与性能优化结果。

A03-48 邀请报告**离子辐照下难熔高熵合金的缺陷演化和硬/脆化效应**

靳柯*、郭寻、薛云飞

北京理工大学

难熔高熵合金在宽温域下力学性能优异,可适应先进反应堆高温服役环境的挑战,但其抗辐照性能还不清晰,本报告主要讨论 VTaTi 等几种典型难熔高熵合金在离子辐照下微观结构和力学行为的变化特征。在质子和重离子辐照下,难熔高熵合金中形成的位错环比纯金属尺寸更小,聚集程度更低;在高温辐照下,高熵合金中缺陷密度显著更低; VTaTi 中的辐照位错环类型呈现出与通常 BCC 结构金属定性上的差异:在室温下以<100>型为主,且<100>位错环含量随温度的升高而降低,而加入 Nb 元素后的 VNbTaTi 合金以及其它 V 基合金中在相同条件下并未发现<100>环。具有更大晶格畸变和更强的局域化学有序特征的 HfNbZrTi 合金在相同辐照条件下比 VTaTi 有更强的抑制缺陷形成/聚集的能力,但易诱发相失稳。结合纳米压痕、微柱压缩、微悬臂梁断裂和微拉伸等微尺寸力学性能测试技术,我们进一步发现,相比于单质金属,难熔高熵合金在辐照后不仅硬化程度更低,对辐照脆化(包括拉伸塑性和韧性下降)也有更强的抑制作用;在变形模式方面,辐照后的纯 V 和 VTaTi 微柱在压缩时均出现了变形局域化现象但展现出不同形式:纯 V 微柱的变形集中在微柱顶端;VTaTi 微柱发生整体变形但产生大量位错通道。

A03-49 邀请报告**核燃料包壳锆铌合金辐照硬化行为与机理**杨会龙*¹、Sho Kano²、Yoshitaka Matsukawa³、Hiroaki Abe⁴

1. 上海交通大学

2. National Institutes for Quantum Science and Technology

3. Kumamoto University

4. The University of Tokyo

锆铌合金由于具有较传统 Zry 合金更优异的耐腐蚀性能而被作为高性能核燃料包壳材料被广泛应用于

轻水反应堆。然而，反应堆运行中的包壳管长时间承受高温、高压和强辐照的极端环境，出现硬化及脆化现象，使其服役性能严重退化。因此，评价及研究核燃料包壳锆铌合金在辐照环境下的性能退化现象与机理对提高反应堆的安全及经济运行来说具有重要意义。本研究首先通过制备不同铌含量的锆铌二元模型合金，通过拉伸实验，确定了富铌析出相的强化系数。其次，使用高能量离子辐照在锆铌合金中引入较均匀的辐照损伤组织，基于拉伸实验与强化理论，获得了辐照位错环对位错移动的强化系数。另外，选择使用含铌量高的锆铌合金开展加速器离子辐照实验，采用三维原子探针和纳米压痕技术定量表征了富铌纳米团簇及其辐照硬化效果，进一步评估了富铌纳米团簇的强化系数。实验结果表明，富铌第二析出相的强化系数为~0.8，具有最强的强化效果，其次是辐照产生的位错环，其强化系数为~0.3-0.5，然而富铌纳米团簇的强化效果最弱，由其引起的辐照硬化效果也不明显。富铌第二析出相与富铌纳米团簇的化学成分接近，但强化效果却存在显著差异，这主要是由于第二析出相具有与锆基体不同的晶体结构，而纳米团簇尚未形成稳定的晶体结构。该研究探索了锆铌合金中不同微观组织的硬化机理，研究结果对准确理解核燃料包壳材料在辐照工况下的性能退化提供了理论支撑。

A03-50 邀请报告

F/M 钢和 ODS-F/M 钢散裂中子辐照脆化机理研究

彭蕾*, 时靖谊, 孙勇杰, 魏振予, 马一怡

中国科学技术大学核科学技术学院, 安徽合肥, 230027

铁素体/马氏体(F/M)钢以及其改进型 ODS-F/M 钢是未来聚变堆和 Gen IV 反应堆的主要候选结构材料，而高能聚变中子会在结构钢中产生高离位损伤同时通过(n,α)反应引入大量氢原子，氢原子极难溶于结构钢基体且容易通过间隙位迁移最终在缺陷阱(空洞、晶界、位错、相界等)附近聚集形成纳米尺度氢泡。基体内大量的辐照缺陷和氢泡使位错运动阻力变大引起辐照硬化，晶界附近合金元素偏析、脆性析出相粗化和氢泡引起了晶界脆化，辐照硬化和晶界脆化共同导致辐照脆化问题(塑性下降、断裂韧性降低和 DBTT 上升)。瑞士散裂中子源 SINQ 可以很好地模拟先进反应堆中同时产生高剂量离位损伤和高浓度氢原子的辐照环境。因此，课题组基于 SINQ 开展了大量国产先进反应堆材料的高剂量散裂中子辐照实验(STIP-V、VI、VII、VIII)，针对辐照后获得的小样品开展了拉伸、小杆冲击和断裂韧性等辐照后测试研究，结合原子尺度模拟，揭示了一系列 F/M 钢和 ODS-F/M 钢中子辐照诱导脆化的微观机理。

散裂中子辐照后 F/M 钢的拉伸延伸率存在明显的下降及韧脆转变温度 (DBTT) 明显上升，脆化行为随着辐照剂量的增加而增加，高剂量/高氢浓度的辐照样品表现出明显的沿晶断裂特征。进一步通过原子尺度模拟研究了 F/M 钢中氢泡诱导晶界脆化的微观机理，研究结果表明晶界上的氢泡会在局部引起明显的应力与应变集中，进而在拉伸过程中促使微裂纹优先生成，降低晶界强度。这些微裂纹通常起源于位错活跃或氢泡密度高的晶界区域，随后在持续载荷作用下不断萌生扩展，最终合并形成贯穿性沿晶裂纹。裂纹尖端附近的氢泡则进一步增强了应力集中效应，改变了裂尖应力分布，抑制裂尖塑性区的变形能力，促进沿晶裂纹的扩展。针对散裂中子辐照的 ODS-F/M 钢的力学性能测试表明，在较低的辐照剂量下，ODS 钢仍保持一定的均匀延伸率，但是在高的辐照剂量下，室温测试表明 ODS 钢呈现无颈缩的脆性断裂特征，这表明 ODS 钢在高剂量下的韧性损伤十分明显，相较于 F/M 钢表现出更加严重的脆化效应。进一步通过原子尺度模拟研究了 ODS 钢中纳米氧化物颗粒诱导 ODS 钢塑性降级的空隙成核机制，研究结果表明氧化物弥散颗粒的引入明显降低了基体的形核与失效应变，进一步增大氧化钨颗粒的尺寸则会导致基体更容易发生空洞形核，且更早进入损伤失效阶段。

A03-51 邀请报告

黑控制棒吸收体的堆内辐照实验与表征

刘显坤*, 窦海峰, 米向秒, 闫占峰, 田继挺

中国工程物理研究院核物理与化学研究所

摘要：黑控制棒吸收体之碳化硼，因其优异的中子吸收特性、高熔点、低密度以及良好的高温化学稳

定性, 被广泛应用于核电厂压水堆 (PWR)、快中子堆 (FNR) 和轻水堆 (LWR) 等的堆芯控制棒作为中子吸收体材料。然而, 硼与中子发生核反应后会嬗变产生氦, 氦的聚集和释放会导致碳化硼芯块材料的辐照肿胀, 进而可能引起控制棒包壳变形。此外, 吸收体材料中氦气的释放还会导致包壳管内气体压力持续升高, 严重影响芯块与包壳之间的相互作用, 甚至危及反应堆的安全运行。因此, 研发新型吸收体材料 (如不同材料类型、相同材料的不同结构及孔隙率、传统材料的其他组分掺杂等), 并开展其反应堆内的辐照考核实验, 获取中子辐照环境下的辐照损伤行为, 对于持续研发高安全、高有效价值的控制棒吸收体材料以及保障核能的安全利用具有重要意义。

本文针对某种核电堆型用控制棒吸收体材料辐照服役环境需求, 开展了一定孔隙率 (~30%) 碳化硼吸收体材料的堆内辐照装置设计、实验及分析表征研究。通过样品材料堆内辐照的物理和热工迭代优化, 完成了堆内辐照实验装置的设计, 并利用该装置开展了碳化硼吸收体材料的堆内辐照实验, 获取了在一定中子注量和不同辐照温度条件下样品的辐照肿胀、气体释放和微观组织的变化等信息。初步结果表明, 在现有样品设计和累计热中子注量下, 辐照样品的辐照肿胀较小, 样品材料的微观组织和晶粒大小变化也不明显, 材料的晶内和晶间未观察到明显裂纹。X 射线衍射 (XRD) 测试结果显示, 样品的衍射峰型变化不明显, 但存在一定的角度偏移, 表明样品存在微小的辐照肿胀且非晶化程度不大; 拉曼光谱测试结果表明, 辐照后样品的典型峰形和强度发生了明显变化, 与离子辐照存在一定差别, 这很可能与材料中子辐照后其 B-C 化学键部分断裂原因有关。

A03-52 邀请报告

基于机器学习的钨基难熔合金设计及抗氦效应机制研究

陈永刚^{*1}、胡逊祥¹、周楠¹、崔丽娟¹、程龙²

1. 四川大学物理学院

2. 北京航空航天大学物理学院

钨被认为是核聚变装置中最具应用前景的面向等离子体材料之一, 但其在服役过程中容易受到氦效应的严重影响, 从而限制了工程应用。已有研究表明, 通过成分调控形成单相固溶体钨基难熔合金可有效抑制氦效应。然而, 目前对于钨基难熔合金的形成规律, 以及合金成分对氦效应影响的物理机制仍缺乏系统认识, 制约了高抗氦钨基难熔合金的理性设计。本工作围绕“钨基难熔合金相结构形成机制”与“成分与氦效应的关系”两大科学问题, 构建了面向高抗氦效应钨基固溶体合金的机器学习设计方法。首先, 通过提升标签准确性、考虑制备工艺参数和引入基于二次相的描述符, 构建了高质量相结构数据集, 训练的相结构预测模型取得超过 0.9 的 F1 值。在模型解释和第一性原理计算的辅助下, 揭示了元素的电子结构特性通过主导金属间化合物形成, 间接控制单相固溶体合金的形成; 同时发现, 当混合焓接近 0 时, 更有利于形成单相固溶体, 为新型钨基难熔合金的设计提供了理论指导。在此基础上, 通过高通量实验制备了 200 余组钨基难熔合金, 并在 800 °C 下进行氦离子注入实验 (能量 60 eV, 通量 $5 \times 10^{22} \text{ m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$, 总注入剂量 $3.6 \times 10^{26} \text{ m}^{-2}$), 通过表征表面氦诱导线毛形貌, 建立了氦效应实验数据集。进一步训练了氦效应预测模型, 并结合模型解释、微观组织表征与理论模拟, 系统探讨了钨基难熔合金中成分与氦效应之间的内在关联。

A03-53 简报

辐照与力学耦合作用下钼铼合金中辐照缺陷影响蠕变行为的研究

崔德旺^{1,2}、丁一帆^{1,2}、曹子奇^{1,2}、王为一^{1,2}、冉广^{*1,2,3}

1. 厦门大学能源学院, 福建 厦门 361102

2. 福建省核能工程技术研究中心, 厦门 361102

3. 厦门大学材料学院, 福建 厦门 361102

辐照蠕变是指材料在核反应堆辐照环境中遭受小应力作用下发生的材料性能衰退与失效, 其对核反应堆安全运行至关重要。因此, 对辐照蠕变机制的深入研究不仅是工程应用的迫切需求, 更是推动材料科学和能源技术突破的核心动力。与非辐照条件下的蠕变行为不同, 辐照环境下的蠕变取决于辐照缺陷 (位错

环、气泡、孔洞等)的演化及特征,但辐照缺陷如何影响蠕变行为及物理机制至今未解决。本研究以先进核能系统用的钼铌合金为研究对象,利用离子束辐照与外加力学载荷以分别模拟服役过程中的辐照场与应力场。采用原位辐照、力学与温度耦合方法,在透射电镜中原位分析了耦合作用下的微观结构演变并同时获得了应力应变曲线,以此研究了蠕变第一阶段下钼铌合金辐照蠕变行为及机制。研究表明,辐照缺陷既会阻碍位错线的滑移,导致辐照硬化;也会通过缺陷之间的相互作用,降低位错线运动的阻力,使其在较低应力下缓慢滑移,导致性能变化。建立了辐照蠕变速率与辐照参数、微观结构的内在关系,可以得知蠕变速率与辐照温度、辐照剂量呈正相关。此外,辐照诱导的氢气泡会作为位错运动的有效钉扎位点,阻碍位错运动,降低其迁移速率,最终影响材料的宏观塑性变形等。研究结果为理解辐照蠕变机制,先进核能系统用钼铌合金部件的设计选材、寿命评估等提供了实验数据和理论参考。

A03-54 闪报

核材料辐照性能评估及优化设计的多尺度模拟

李永钢^{*1,2}、程凡^{1,2}、张愿愿^{1,2}、涂嘉蕊^{1,2}

1. 中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所
2. 中国科学技术大学研究生院科学岛分院

核材料辐照性能评估及优化设计是核能工程应用的关键前提,相关基础问题的理论研究至关重要。自主研发了材料辐照损伤数据库 MRDB、初级辐照损伤的蒙特卡洛开源软件 IM3D、缺陷/载流子短时退火的动力学蒙特卡洛开源软件 RAM-KMC 和缺陷/载流子长时演化的速率理论连续模型 IRadMat,并突破时/空间关联有效传递等跨尺度耦合技术,建立了材料辐照效应顺序多尺度模拟平台 IMSMP,形成了从微观缺陷产生到介观缺陷演化,再到宏观性能评估的全链条模拟能力,实现了钨/铁等材料在高速离子/中子—高束流氢氦单独/顺序作用下的辐照损伤与氢氦协同作用的多尺度理论描述。由此,系统研究了材料的中子辐照损伤、氢氦效应和遴选/设计等关键科学问题,并采用“数据—模型—机理”联合的研究方法实现了“单晶基材遴选—多晶稳态评估—多晶非稳态预测—最优性能窗口确定”的核材料辐照性能的全流程理论预测,给出了兼具抗辐照、高强度、高稳定性和低氢氦滞留的材料最优性能窗口。

A03-55 闪报

中子辐照对 PbSe 基热电材料的性能影响及其机制研究

陈飞达*、吴淑洁、黄文静、李昌源、王宇豪、汤晓斌
南京航空航天大学

热电技术在绿色能源、废热回收等领域具有重要应用价值,将为我国持续推进“双碳”目标提供有效的协调解决途径。然而,目前大部分热电材料热电转换效率偏低,这成为制约热电材料实用化的主要因素。因此,发展能够有效提升热电材料性能的新概念与新方法已经成为当前高性能热电材料研发的重点与难点。本工作将辐照改性技术与热电材料研发前沿相结合,利用中子辐照对 PbSe 基热电材料中的原子缺陷和能带结构进行调控,成功实现了材料电导率与塞贝克系数的同步增强,辐照改性后材料在 823K 温度下的 ZT 值达到 1.1,较辐照改性前提升超过 18%。结合第一性原理计算,对中子辐照诱发 PbSe 基热电材料形成原子缺陷的能量学机制开展研究,结果表明多元素掺杂状态下中子辐照将优先诱导形成 Pb 原子空位和 Se 间隙原子,其中以六面体间隙面心处的 Se 原子和硒替位处 S、Te 原子的形成能最低,处于能量学稳态。Pb 空位缺陷和 Se 间隙缺陷引起的能带结构变化增大了材料的塞贝克系数,同时它们对声子散射的抑制也降低了热导率,从而促进材料热电性能最终得到增强。本工作将辐照技术与半导体材料相融合,为深入挖掘更多电热协同调控手段提升材料热电性能提供了新的思路。

A03-56 邀请报告

基于核技术的材料物性调控研究

李文庆*

离子束及其相关技术是核科学领域的重要研究方向之一。目前,离子束技术已经被广泛应用于固体表面性质的研究。从材料表面形貌调控到材料物性的优化,离子束技术都发挥着重要作用。课题组近些年通过离子束技术实现了对低维纳米材料的结构以及组分的调制,并将其分别应用于半导体改性、半导体器件制备以及抗辐照材料设计等方面。

A03-57 邀请报告

基于离子径迹技术的力学超材料研究

段敬来*、程宏伟、黄冉、杨玲玲
中国科学院近代物理研究所

Mechanical metamaterials refer to a class of composite materials with artificially designed architectures and exhibit extraordinary mechanical properties that traditional materials do not have. Among them, energy absorption mechanical metamaterials can absorb mechanical energy more efficiently, which requires the material itself to have both high strength and high strain capacity. But in general, there is a trade-off between strength and strain capacity and these two are hardly obtained simultaneously.

In this presentation, we will report a new type of nanobeam lattice which is in quasi-body-centered cubic (quasi-BCC) architecture. Such nanolattices with beam diameters as thin as 34 nm were successfully fabricated by ion track technology, using gold and copper as model materials. The mechanical tests show that, even at a relative density lower than 0.5, the compressive yield strengths of the gold and copper quasi-BCC nanobeam lattices exceed their bulk counterparts. Surprisingly, their energy absorption capacities surpass all previously reported micro/nano-lattices. Based on theoretical analysis and simulations, we disclose that such extraordinary properties are ascribed to the synergy of size effect, geometrical architecture, and intrinsic properties of gold and copper. We then used such metamaterials as the anode of lithium-ion batteries. Benefitting from excellent mechanical robustness, high porosity, and low tortuosity of pores, the nanobeam lattice serves well as the "host" of lithium metal anode and the cycle life of anode is therefore significantly improved.

Our work may provide a new idea for extending ion track technology to emerging multidisciplinary fields of interest.

Reference:

[1] H. Cheng, X. Zhu, X. Cheng, P. Cai, J. Liu, H. Yao, L. Zhang, and J. Duan, Nature Communications 14 (2023)1243.

[2] X. Zhu, H. Cheng, S. Lyu, J. Huang, J. Gu, Y. Guo, Y. Peng, J. Liu, C. Wang, J. Duan, S. Yang, Advanced Energy Materials 13(2023)2300129.

A03-58 主题报告

球形环氢硼聚变材料研究

王嵎民*^{1,2}、张海军^{1,2}、杨爽^{1,2}、曹聪帅^{1,2}、张帅^{1,2}、白岩^{1,2}、赵冠超^{1,2}、石磊^{1,2}、许之遥^{1,2}、王艳琴^{1,2}、
麦海香^{1,2}、刘蔚^{1,2}、吴尚之^{1,2}、刘翔³、冯开明³、刘敏胜^{1,2}

1. 河北省紧凑型聚变重点实验室
2. 新奥科技发展有限公司
3. 核工业西南物理研究院

氢硼聚变的产生条件苛刻,产生可观能量输出的聚变三乘积为氘氘聚变的 2-3 个量级。采用球形环去约束等离子体可以最大程度上发挥其高约束的特点,因而球形环氢硼路线在聚变能商业化方面有较大优势。

球形环氢硼聚变和常规托卡马克氘氚的材料研究体系有较大区别。本文通过对比托卡马克氘氚聚变反应堆（EU-DEMO）和球形环氢硼聚变堆（EHL-3）的参数，估算了球形环氢硼聚变的第一壁和偏滤器热稳态和瞬态负荷。如不加以控制，聚变堆条件下氢硼聚变的第一壁热负荷可超过氘氚聚变一个量级，偏滤器热负荷将超过现有材料的承受极限。在聚变条件下，氢硼等离子体产生高功率的电子回旋辐射以及韧致辐射，为了保证氢硼聚变将实现净能量输出，氢硼聚变堆的第一壁还需要在高热通量以及粒子通量的条件下保证超过 90% 的百 GHz 微波反射率，同时还需要对高功率的 γ 射线进行屏蔽和利用。氢硼聚变的的优势在于无需氦增值包层以及高能中子屏蔽包层。其他方面的材料也可借鉴氘氚的材料研究经验。

通过对微波反射材料的理论计算和测试，CFC 和钨材料在百 GHz 方面的反射率满足需求。在新奥下一代装置的 α 粒子辐射条件下，几种常见的壁材料表明仅发生微米级损伤。在峰值热流密度超过 20MW/m^2 等离子体辐照条件下，CFC 材料出现了较强的侵蚀现象，理论分析表明，辐射增强升华是导致侵蚀现象的主要原因，通过优化增加水冷设计，可显著降低材料的侵蚀速率。

根据球形环氢硼聚变商业化目标的研究路线，估计了从实验装置到聚变示范装置的热流和粒子流的范围，并据此提出了材料体系的需求以及应对策略。

A03-59 邀请报告

EAST 托卡马克等离子体与壁材料相互作用进展

丁锐*

中国科学院合肥物质科学研究院

托卡马克是未来实现受控核聚变能从而解决清洁能源问题的主要研究途径之一，但是否能建成聚变示范反应堆从而可以商用化仍然需要解决多个重要的科学问题，等离子体与壁材料相互作用是其中至为关键的难点之一。本报告主要介绍全超导托卡马克 EAST 装置研究的最新进展以及未来计划，并重点讨论等离子体与壁材料相互作用的相关研究进展，包括面向等离子体材料钨腐蚀与钨杂质输运、中性粒子与材料相互作用、EAST-ITER 联合实验最新结果。

A03-60 邀请报告

损伤钨中氢滞留与脱附行为模拟

李宇浩*¹、马惠芝¹、孔祥山²、周洪波¹、Lu Gang⁴、Gao Fei³、吕广宏¹

1. 北京航空航天大学

2. 山东大学

3. 密歇根大学

4. 加州州立大学北岭分校

聚变堆钨基壁材料将面临高能中子辐照，这将在材料中产生大量离位缺陷。这些缺陷将作为氢同位素的捕获中心，显著提高 H 滞留量，并对氘燃料自持产生严重影响。在此，我们通过第一性原理计算，获得了完备的氢-缺陷复合体演化参数，包括捕获/去捕获能和尝试频率等。结合自主开发的对象动力学蒙特卡洛（OKMC）程序，实现了损伤钨中从缺陷演化到氢注入和脱附的全过程模拟。藉此，基于再捕获频率，建立了缺陷浓度、深度分布和氢脱附峰值温度之间的映射关系，发现了升温过程中缺陷的演化将显著影响氢的脱附行为。耦合上述因素，模拟了多种辐照条件下重离子损伤后钨中氢的注入和脱附过程，计算预测的热脱附谱（TDS）与实验结果吻合较好，证实了该方法的有效性。上述结果还表明基于原子尺度参数的 OKMC 模拟可用于损伤材料中 TDS 谱的精确解析，这对于钨基壁材料的服役行为评估和辐照条件下微观缺陷的表征具有重要意义。

A03-61 邀请报告

钨中位错反应诱导的氢泡形核机理

侯捷*

在磁约束核聚变反应堆中，钨材料需承受高通量氦氟等离子体的直接轰击，导致钨表层产生大量氢同位素气泡，进而影响聚变燃料循环与等离子体稳定运行。尽管此类氢泡被发现已近三十年，但其形成机理始终存在争议，主要原因在于此类气泡能在低能等离子体（不足以产生辐照缺陷）注入下生成，并且可在高纯钨的晶粒内部成核。通过耦合巨正则蒙特卡洛与分子动力学模拟方法，本研究揭示了氢泡的原子尺度成核机制：(i) 氢元素诱导两根 $\langle 111 \rangle/2$ 螺位错发生相互反应，形成 $\langle 001 \rangle$ 刃型位错结；(ii) 在氢环境作用下，该 $\langle 001 \rangle$ 位错结展现出显著稳定性，并在外加应变条件下通过 Orowan 绕越机制演化为 $\langle 001 \rangle$ 型空位位错环；(iii) 随着塑性变形持续进行， $\langle 001 \rangle$ 空位环通过上述机制不断累积，最终引发材料沿 $\{001\}$ 晶面开裂，形成氢致表面气泡。本研究为低能等离子体诱导的氢泡成核问题提供了原子尺度理论解释，其预测结果与近期透射电镜表征数据高度吻合，对理解聚变材料中氢泡演化规律及氢滞留问题具有重要指导意义。

A03-62 主题报告

钎合金中氢化物的标定和延迟断裂

姚仲文*

Queen's University, Canada

钎合金作为核反应堆结构材料的重要组成部分，在长期的高温、高辐射环境下运行，其产生的氢化物可能导致一系列问题，包括机械性能下降、氢脆化，尤其是延迟断裂（DHC）这类现象，对核反应堆安全运行有重要的影响。报告就钎合金中的氢化物类型，标定、分析和最新研究成果进行讨论。

首先，报告将讨论钎合金中稳定相图中不同氢化物的形成机制。就目前一些不同的氢化物结构和进展，结合作者的最新结果发表看法。其次，讨论延迟氢裂纹的机制。当氢被钎基体吸收并在材料应力集中处形成氢化物，尤其在表面缺陷，进而发生延迟氢裂纹。这些氢化物可能不仅导致裂纹的起始，特别是在应力和温度作用下，氢化物的重部，会在一段时间后导致裂纹扩展，引起材料的灾难性破坏。报告将探讨影响延迟氢裂纹的各种因素，如氢浓度、应力状态、温度和微观结构特征等。

此外，将回顾与钎合金中延迟氢裂纹相关的研究成果，以及先进的实验技术，包括原位观察，为解延迟氢裂纹的动力学和行为提供见解。研究重点是理解氢分布、氢化物形貌和环境条件在延迟氢裂纹的起始和扩展中的作用，旨在发展预测模型和缓解策略。进而有效管理延迟氢裂纹对于确保反应堆系统的可靠性和寿命的重要性，突出材料设计等策略，作为减轻延迟氢裂纹敏感性的潜在途径。

A03-63 主题报告

Perspective on Multi-scale Simulations of Fusion Structure Materials

Fei Gao*

University of Michigan, USA

The recent developments in multiscale computer modeling to simulate the behavior of materials in extreme environments will be reviewed. This includes ab initio calculations, self-consistent accelerated molecular dynamics, rate-based long-time dynamics, advanced kinetic Monte Carlo methods, and phase field modeling. Additionally, the state-of-the-art computational approaches for studying microstructural evolution in nuclear materials will be addressed. The review will also demonstrate how these approaches can be applied to study structural materials in fusion environments.

In future fusion reactor applications, prime candidate materials such as ferritic/martensitic steels will be exposed to high-energy neutrons, leading to helium and hydrogen generation due to transmutation reactions. The formation of He is of particular concern because it has negligible solubility in metals and is strongly trapped by lattice defects with excess free volume, such as vacancies, dislocations, grain boundaries (GBs), and particle-matrix interfaces. Helium can cause hardening, increases in the ductile-to-brittle transition temperature,

and swelling as a result of the nucleation and growth of He bubbles. Recent progress in simulating He behavior and microstructural evolution in α -Fe will be discussed, and some interesting results will be highlighted. The synergistic effect of helium and hydrogen also plays a crucial role in microstructural evolution under radiation damage in fusion reactor conditions. This presentation will cover recent advancements in computer simulations on the synergistic effects of hydrogen on He bubble and cavity formation, including the influence of the strain/stress field, He/V ratio, migration energy, bubble size, and helium density. Future studies aimed at bridging the gap between experiments and computer simulations will be discussed and elucidated.

墙报

A03-P01

微堆用钇基合金氢化物中子慢化剂的组分调控与热稳定性研究

胡逊祥*, 赵苛衣, 周楠

四川大学物理学院

微型核反应堆因其体积小、部署灵活和固有安全性高, 广泛应用于深空、深海等特殊场景, 是支撑国家战略的重要技术方向。新一代微堆对堆芯中子慢化剂材料在高温和长寿命条件下的服役性能提出了更高要求。氢化钇作为潜在的高温中子慢化剂, 具备优异的热稳定性和良好的中子物理性能, 但在制备及服役过程中面临氢致开裂和高温释氢等关键挑战。本研究围绕钇基金属氢化物中子慢化剂, 系统分析了其在微堆应用中的优势, 聚焦制备过程中的氢致开裂问题与服役过程中的热稳定性问题, 提出通过微合金化策略缓解氢化引起的内应力。基于第一性原理计算, 研究了 Cr、Zr 等元素对氢在钇中扩散行为及诱导相变机制的调控作用, 结果表明二者有助于提升氢扩散性、抑制氢致开裂。实验方面, 采用直接充氢法成功制备了含 Cr 和 Zr 的钇基合金氢化物, 并通过高温热脱附等手段对其热稳定性进行了系统评估。结果显示, 合金化显著提高了材料的热稳定性, 为微堆中子慢化剂的设计提供了理论与实验支撑。

A03-P02

高熵合金涂层的高剂量离子辐照研究

王子潇¹、龙斌²、尹泽鹏¹、罗红泰¹、林文斌¹、曹俊杰¹、郭立平*¹

1. 武汉大学物理科学与技术学院

2. 中国原子能科学研究院

高熵合金作为先进核反应堆系统的候选材料, 由于其出色的高温稳定性和抗辐射性能, 近来受到了广泛关注。为了了解其在高温辐照条件下的微观结构演变和机械性能, 研究过程中使用 2.7 MeV 的 Si²⁺离子对 NbMoTaW 涂层进行辐照处理, 辐照剂量达到 50 dpa, 温度分别为 450、550 和 600 °C。通过透射电子显微镜和纳米压痕技术对缺陷和辐照引起的硬化进行了表征。在辐照后未观察到空洞, 晶粒结构保持稳定。随着温度的升高, 位错线变得更加扭曲, 更难以滑动, 从而导致高温辐照样品的硬化现象。位错环的平均尺寸略有增加, 但仍约为 9 纳米, 而位错环的密度呈现出波动的趋势。靠近晶界处预先存在的微裂纹随着温度的升高而变窄, 并在 600 °C 时消失。这可以归因于在较高温度下出现的更大程度的膨胀, 此时不可见的空位能够挤压这些微裂缝。这些空位应该是导致在 600 °C 时出现最高辐照诱导硬化现象的关键因素之一。此外, 在 600 °C 时还观察到了晶界处的辐照偏析现象。

A03-P03

基于同步辐射的锆合金氢化物疲劳析出及应力再取向行为研究

王胜杰、李时磊、王沿东*

北京科技大学

本研究结合同步辐射高能 X 射线衍射和多种微观表征技术,系统研究了 Zr-1Nb-0.01C 包壳在内压疲劳处理后氢化物的析出特征,以及不同恒定内压载荷作用下氢化物应力再取向行为及机理。结果表明,在 400 ℃ 下,10 万周次内压疲劳处理会显著增加冷却过程中氢化物的形核位点。在 δ -氢化物和 α -Zr 基体界面附近,分别观察到高密度的 $\{111\}<110>$ 型和 $\{10-10\}<a>$ 型位错。疲劳处理后析出的微米级 δ -氢化物中存在 $\{111\}<11-2>$ 纳米孪晶,这主要是由 δ -氢化物在同一 α -Zr 基体晶粒内部不同区域形核和长大所致。在 δ -氢化物纳米孪晶生长方向前沿和弯曲的微孪晶界附近,可观察到 HCP 结构的 ζ -氢化物,该结果为析出过程中亚稳态 ζ -氢化物作为 δ -氢化物与 α -Zr 基体之间过渡相提供了直接证据。当冷却过程中施加的恒定内压载荷超过 10 MPa 时, δ -氢化物形核位点显著增加,且会发生明显的应力再取向现象。 δ -氢化物 $\{111\}$ 晶面间距随方位角的演化规律表明,不同恒定内压载荷作用下析出的 δ -氢化物具有不同大小的残余应力场。周向氢化物的析出主要受材料本身织构调控,而径向氢化物的形成则要受织构以及外加应力的双重调控。此外,不同恒定内压载荷作用下析出的 δ 氢化物均呈现一定的晶体学织构,且与 α -Zr 基体保持 $\{0001\}_{\alpha\text{-Zr}} // \{111\}_{\delta}$ 和 $<11-20>_{\alpha\text{-Zr}} // <110>_{\delta}$ 晶体学取向关系。随着冷却过程中施加的恒定内压载荷的增大,析出的 δ 氢化物 $\{111\}<11-2>$ 微孪晶的数量逐渐增多。

A03-P04

纳米 Al₂O₃ 和纳米 ZrO₂ 掺杂对纳米 Y₂Ti₂O₇ 的晶粒生长抑制作用及辐照稳定性影响

王泽祯、魏玉婷、李玉红*

兰州大学

材料在极端环境中的服役性能退化行为制约着核能的利用和发展。在辐照环境中,材料会发生辐照效应导致性能下降,而辐照效应本质上是辐照引起的材料中点缺陷累积的结果。由于材料中的界面具有为辐照缺陷提供湮没空间的特性,因此,通过晶粒细化和抑制晶粒长大的方式在材料中引入高密度界面,从而增加间隙原子和空位的复合概率,有利于提高材料的抗辐照性能。

基于此,本文使用溶胶凝胶法,在 pH 为 6.7 和烧结温度为 1000℃的条件下,成功制备出晶粒尺寸为 22.72 nm 的 Y₂Ti₂O₇ 烧绿石,利用 SPS 烧结合成了掺杂纳米 Al₂O₃ 和纳米 ZrO₂ 的纳米 Y₂Ti₂O₇ 烧绿石: Y₂Ti₂O₇、Y₂Ti₂O₇+Al₂O₃、Y₂Ti₂O₇+ZrO₂、Y₂Ti₂O₇+Al₂O₃+ZrO₂。通过高温晶粒生长实验研究了其抗晶粒粗化性能,利用差示扫描量热法(DSC)分析和扫描电子显微镜(SEM)观察,结果表明,掺杂 Al₂O₃ 和 ZrO₂ 的 Y₂Ti₂O₇ 晶界能明显低于未掺杂的 Y₂Ti₂O₇ 晶界能,说明 Al₂O₃ 和 ZrO₂ 的掺杂削弱了晶粒生长的驱动力,有效抑制了晶粒粗化,其中 Al₂O₃ 和 ZrO₂ 的共掺杂对纳米 Y₂Ti₂O₇ 烧绿石的晶粒生长抑制效果最好。在室温下利用 800 keV Kr²⁺辐照实验研究了其辐照稳定性,实验结果表明,在 1.5×10¹⁶ ions/cm² 辐照剂量下(~1.45 dpa),纳米 Y₂Ti₂O₇ 和高温晶粒生长实验之后的 Y₂Ti₂O₇+Al₂O₃+ZrO₂ 都没有发生相变,而非纳米 Y₂Ti₂O₇ 在室温下的临界非晶化剂量仅为 0.37 dpa,这说明,纳米 Y₂Ti₂O₇ 和高温晶粒生长实验之后的 Y₂Ti₂O₇+Al₂O₃+ZrO₂ 具有比非纳米 Y₂Ti₂O₇ 更强的辐照稳定性。同样也说明了通过晶粒细化和抑制晶粒生长的方式可以提升 Y₂Ti₂O₇ 烧绿石的耐辐照性能。

A03-P05

核燃料包壳锆合金固溶氢致力学损伤行为研究

王瑶^{1,2}、梁森茂³、李时磊³、公维佳^{*1,2}

1. 西北工业大学材料学院

2. 西北工业大学太仓长三角研究院

3. 北京科技大学新金属材料全国重点实验室

锆合金热中子吸收截面低,耐腐蚀性能优异、力学性能良好,广泛用作轻水堆核燃料包壳材料。锆合金包壳在堆内服役时,会吸收冷却水侧腐蚀产生的氢。氢溶质原子通过与裂尖区位错交互作用,影响材料的力学性能与塑性变形。然而,由于氢化物脆性的突出作用,固溶氢作用下锆基体塑性变形位错密度与组态演变及其对力学性能的影响,仍需进一步澄清。本研究对预充氢锆合金板材进行 280 ℃ 慢应变速率拉伸

试验, 结合 ECCI、TEM 等技术表征固溶氢作用下锆基体的滑移变形和位错组态演变, 借助原位同步辐射高能 X 射线衍射, 研究拉伸过程不同晶面晶格畸变与位错密度的动态演变规律, 揭示氢对锆基体位错运动、塑性变形行为的作用机理。得出以下结论:

(1) 固溶氢会降低锆合金板材横向加载时的屈服强度(~ 20 MPa)、抗拉强度(~ 15 MPa), 延伸率($\sim 5\%$)。EBSD 统计发现, 相同应变条件下, 充氢试样变形后几何必要位错密度低于未充氢试样。原位同步辐射高能 X 射线衍射证实, 拉伸过程中充氢试样柱面、锥面和基面的晶格畸变和位错密度均低于未充氢试样。此外, ECCI 表征结果显示, 未充氢试样特定取向晶粒上位错密度更高、位错塞积更严重, 增加变形过程抗力。因此, 充氢锆合金屈服强度、抗拉强度的下降主要来源于变形过程中氢与位错交互作用导致的位错密度下降。

(2) 系统研究了固溶氢导致 Zr1Nb 合金板材横向的屈服平台消失的微观机理。屈服后样品的 TEM 表征证实, 充氢锆晶粒内位错密度更低, 位错线平直且主要在柱面滑移系上运动。此外, 充氢样品第二相粒子周围位错呈等距排列, 这是氢屏蔽第二相粒子周围应力场, 减弱钉扎作用的结果。因此, 氢促进滑移平面化, 减弱第二相粒子对位错的钉扎作用, 降低位错运动的临界应力是氢诱导屈服平台的微观机制。

A03-P06

锆合金 δ 氢化物析出应力场调控自催化成核与协同堆垛的相场研究

张润豪^{1,2}、张旭辰^{1,2}、安大勇³、向浩⁴、公维佳^{*1,2}

1. 西北工业大学材料学院
2. 西北工业大学太仓长三角研究院
3. 上海交通大学材料科学与工程学院
4. 散裂中子源科学中心

锆合金中脆性 δ 氢化物的析出是威胁核燃料包壳完整性与服役寿命的核心挑战, 其析出产生的应力场可驱动新氢化物成核并堆积形成中尺度结构, 然而该应力场对 δ 氢化物形核与生长的具体作用机制尚未明晰。为阐明其作用机理, 本研究基于 KKS 模型与 Khachaturyan 微弹性理论, 建立了耦合各向异性界面能与弹性应变能的相场模型, 并结合 SEM 及高分辨 EBSD 实验表征, 系统研究了预存氢化物附近应力场的空间分布特征, 重点分析了其对 δ 氢化物成核、粗化及堆积行为的影响规律。研究结果为锆合金抗氢腐蚀性能优化提供了重要理论支撑, 主要结论如下:

(1) δ 氢化物呈偏离基面约十几度的盘状形态, 其尖端拉应力驱动氢原子富集, 促进沿盘片边缘生长; 建立的包含六种 δ 氢化物变体的相场模型成功复现了实验观察到的微观组织特征: 在单个 α -Zr 晶粒内, 析出的 δ 氢化物最多存在两种取向 (取向差 60°), 且每种取向对应三种生长方向。

(2) 六种 δ 氢化物变体在预存氢化物附近的择优成核位点均位于其尖端区域。变体间弹性相互作用能差异驱动了选择性堆积行为: 同变体新生氢化物因成核驱动力最高, 优先在尖端成核并与原氢化物堆积合并; 切变方向互补的变体成核驱动力次之, 其择优位点向中心轴偏移, 二者协同堆积可缓解基体的剪切应变。此现象源于氢化物尖端上下两侧分别存在的正负强剪切应力区 (高分辨 EBSD 验证), 该应力状态可激活滑移系并促进 δ 氢化物的马氏体转变, 从而分别促进这两类变体的形成。

(3) 二维模拟结果表明, 氢化物生长路径受氢浓度梯度与应力场协同调控: 在演化初期, 基体氢浓度较高, 邻近的小尺寸 δ 氢化物倾向于合并形成细长条状结构; 至演化后期, 基体氢浓度降低, 对于沿 $\langle -1100 \rangle$ 方向相互接近的同一变体氢化物对, 其尖端间隙区域存在显著压应力, 该压应力导致的局部贫氢使间隙区域氢浓度不足以维持氢化物的有效生长, 抑制了二者的直接合并, 从而在中等尺度的条状氢化物之间形成特征性的间隔。

A03-P07

U-50Zr 调幅分解和高温裂变气体行为的相场模拟

冯琳娜*、孙丹、李文杰
中国核动力研究设计院

U-Zr 燃料由于其高导热性而作为先进核反应快堆的常用燃料。实验观察发现 U-50wt%Zr 的调幅分解过程是由无序态的 δ 相, 即亚稳态的 ω 相作为母相, 在高温下转变为富 Zr 相和富 U 相两个新相, 继而彻底转变为 BCC 结构的 γ 相。而进行过辐照的样品发生调幅分解的温度阈值则会大大降低, 这背后的机制目前仍未可知。本文从热力学理论的角度出发, 针对高温下 U-50wt%Zr 的调幅分解现象, 通过拟合得到亚稳相中 U、Zr 相互作用能, 通过分子动力学计算确定了 U-50 wt%Zr 中的空位形成能等, 分别建立了非辐照条件和辐照条件下的 U-50wt%Zr 的调幅分解热力学相场模型, 根据实验中得到的调幅分解时的温度数据, 得到了 ω 相的 U、Zr 的相互作用能表达式, 完善了 U、Zr 体系的自由能函数表达式。基于 Lammmps 开源平台, 使用分子动力学计算了 U-50wt%Zr 中的空位形成能, 确定了模型中所需的重要参数。模拟分析了 U-50wt%Zr 合金在高温时 ω 相调幅分解的过程, 并对辐照和温度对调幅分解的效应进行分析, 研究表明: 富 Zr 相作为析出相在调幅分解初期表现出蠕虫状, 而后是球状, 并在转化为球状后开始粗化过程, 粗化过程要远大于调幅分解过程, 这与实验结果表现一致, 体现了模型的正确性; 裂变气体和空位在体系的蠕虫状时期向富 Zr 相处聚集, 在球状时期聚集在新相的界面处, 形成环状, 并随着析出相的粗化而长大。空位行为和裂变气体行为在模型中展现出了高度的一致性; 裂变气体原子和空位会加速基体原子的扩散, 从而加快调幅分解及析出相粗化的进程。温度不仅加速了裂变气体与空位的扩散过程, 也加速了调幅分解进程。通过考虑掺杂原子、空位、间隙原子、裂变气体原子、晶界的相互作用, 构建了能够精确描述辐照条件下 U-50Zr 系统能量密度的自由能模型, 建立 U-50Zr 合金中调幅分解和裂变气体肿胀及释放的微观物理图像, 预测了 U-50Zr 合金的肿胀。

A03-P08

高分子基中子屏蔽材料设计及性能研究

张世昌、柳伟平、丁文艺、郁杰*

中国科学院合肥物质科学研究院

核反应堆运行会产生大量的 α 、 β 、 γ 射线以及中子, 不仅会对设备器件造成严重损伤, 且对人身安全构成严重威胁。 α 、 β 射线能量较低, 穿透力弱, 易于屏蔽, 而中子和 γ 射线能量较高且穿透力强, 是屏蔽过程的重点关注对象。先进核能系统提出更安全、更高效和小型化发展需求。小型模块化铅冷快堆具有优异的热性能、紧凑的堆芯设计、简单的设施组合以及固有的安全性等优点, 是各国铅冷快堆发展的重要方向之一。小型模块化反应堆 (Small modular reactor, SMR) 空间和质量有限, 参考国外 N.S.MUTSU 反应堆, 其屏蔽体重量约占反应堆总重量的 70%, 可知屏蔽材料的设计与研发至关重要, SMR 对屏蔽材料提出轻量化、耐高温、高效中子屏蔽以及严苛复杂服役环境的适用性挑战。因此, 开发综合性能优良的中子屏蔽材料对先进核能系统具有重要意义。

高分子材料具有质轻、易加工且化学性质稳定等优点, 在复合屏蔽材料研究领域得到广泛关注。根据 Bethe-Bloch 公式, 电子数/质量数高的元素可以通过降低质子和重离子的动能来减少辐射剂量, 并减少二次辐射的产生。氢元素是电子数/质量数最高的元素, 被认为是最有效的辐射屏蔽元素, 其可与入射中子发生弹性散射, 实现对中子的有效慢化。入射中子慢化为热中子之后, 采用中子吸收截面高的元素将其吸收, 达到中子屏蔽的目的。高 Z 元素可与 γ 光子发生光电效应和康普顿散射, 可有效衰减并吸收 γ 光子, 故被广泛用作 γ 光子吸收剂。稀土元素如 Gd、Eu、Sm 因具有较高的热中子吸收截面和原子序数, 有望同时吸收热中子和 γ 光子, 故在辐射屏蔽材料研发领域得到重点关注。综上所述, 富氢高分子材料具有良好的中子慢化效果, 以此为基体, 掺杂具有高中子吸收截面的功能填料所制备的复合屏蔽材料, 可实现快中子的慢化-吸收一体化, 满足反应堆中子防护的需求。

针对屏蔽材料的轻量化需求, 本研究以环氧树脂和聚酰亚胺类材料为高分子基体, 将含 Sm、Gd 的纳米材料与高分子基体进行复合, 通过合理设计, 制备几种高分子基屏蔽材料。研究表明, 所制备屏蔽材料具有良好的热稳定性, 且可实现对中子和 γ 光子的复合屏蔽。MCNP 计算结果表明, 随着稀土填料的含量增加, 复合屏蔽材料对热中子屏蔽效率显著提升。本研究工作的开展, 将有助于增强对高分子复合材料结构与性能之间关系的理解, 为开发和调控新型高分子复合屏蔽材料提供一定的理论依据和数据支撑。

A03-P09

C 含量对 Npimr-3530G 镍基高温合金显微组织及蠕变性能的影响

王鹏^{1,2}、欧美琼^{*1}、郝宪朝¹、高明¹、马颖澈¹

1. 中国科学院金属研究所

2. 中国科学技术大学 材料与科学学院

Npimr-3530G 镍基高温合金是第四代核能系统高温结构件的重要候选材料之一。为了提高合金的高温力学性能，研究了 C 含量对显微组织和蠕变性能的影响。随着 C 含量从 0.04wt.% 增加到 0.09wt.%，合金热轧后等轴晶晶粒的平均尺寸均在 10 μ m 左右，M6C 碳化物的平均尺寸均在 2.8 μ m 左右，但 M6C 数量从 0.1% 提高到 2.6%。固溶处理过程中，M6C 能够钉扎晶界，阻碍晶界迁移，因此 0.04C、0.07C 和 0.09C 合金固溶处理后平均晶粒尺寸分别为 225 μ m、85 μ m 和 84 μ m。固溶处理后，还可观察到细小颗粒状 M23C6 碳化物沿着晶界析出。随着 C 含量从 0.041wt% 增加到 0.071wt% 和 0.093wt%，合金固溶处理后在 750°C/150MPa 下的蠕变寿命分别为 628h、1047h 和 818h，在 850°C/100MPa 下的蠕变寿命分别为 113h、267h 和 210h，在 850°C/130MPa 下的蠕变寿命分别为 24h、45h 和 35h。合金的蠕变寿命先增加后降低的原因主要包括：随着 C 含量增加，合金中 M6C 碳化物数量增多，蠕变过程中 M6C 对位错运动的阻碍作用增强，能够提高合金蠕变寿命；但是，M6C 碳化物数量过多，会使位错严重塞积，M6C 碳化物与基体界面的结合力较弱，界面位错严重塞积易促进孔洞、微裂纹形核，降低合金蠕变寿命；此外，随着 C 含量增加，固溶处理后的晶粒尺寸减小，增大了晶界密度，晶界作为蠕变孔洞、微裂纹的优先形核位置，会进一步促进微裂纹的萌生与扩展。

A03-P10

Stacking faults within secondary phase particles in zirconium alloys

Fuzhou Han^{*1}, Geping Li^{1,2}, Fusen Yuan^{1,2}, Liu Chengze^{1,2}, Wenbin Guo^{1,2}

1. Shi-changxu Innovation Center for Advanced Materials, Institute of Metal Research, Chinese Academy of Sciences

2. School of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology of China

Stacking faults (SFs) and twinning boundaries have been identified as the most important two-dimensional extended defects in the transmission electron microscopy (TEM) studies of crystalline metals and alloys. As typical planar defects that disrupt the periodic arrangement of crystallographic planes and change the local structure, SFs are directly related to partial or incomplete dislocations. Over the past decades, considerable efforts have been made theoretically and experimentally to characterize stacking faults in Laves structured secondary phase particles (SPPs) in zirconium alloys, attempting to reveal their effects on the phase stability and the performance of zirconium alloys. In the present study, stacking faults in SPPs with different configurations, including stripe-like, intersecting and complex shaped ones, were characterized based on the high-resolution transmission electron microscopy (HRTEM) observations, and the potential formation mechanism were discussed. Our work thus provides a fundamental basis to the nature of stacking faults with complex multi-configurations.

A03-P11

氦对钨中氢同位素滞留行为及力学性能的影响

张弘¹、谢尧^{1,2}、朱秀丽²、乔丽¹、张学希¹、王鹏^{*1}

1. 中国科学院兰州化学物理研究所

2. 华北电力大学

钨因其高熔点、优异的导热系数、高的溅射阈值及低的氢滞留特性，被认为是最有潜力的聚变堆面向等离子体材料。聚变环境中，氘-氚(D-T)聚变反应、壁材料元素嬗变以及 T 的 β 衰变可产生大量的低能、

高能氦 (He)，其对燃料滞留及力学性能的影响不可忽视。本工作着眼于钨在聚变堆的服役工况，利用低能等离子体辐照的方法研究了边界氦/氘等离子体对钨的辐照效应，利用高能离子注入方法，研究了材料内部的氦及中子辐照对钨中氢同位素滞留行为及力学性能的影响。实验结果如下：

(1) 观察到边界等离子体中的氦造成钨浅表层非晶化，形成 5~10 nm 的高密度氦泡层并出现类 fuzz 结构。该等离子体辐照影响区对氦致起泡起到显著的抑制作用。氦/氘混合等离子体辐照钨中氦滞留总量与辐照剂量的幂函数成正比，而对氦离子占比以及辐照温度的敏感性较低。(2) 氦离子预辐照使得氦滞留总量显著增加，直至损伤水平为 1.15 dpa 时出现明显的氦饱和。氦离子预辐照样品中大部分氦分布在氦离子辐照区域，表明氦辐照样品中氦的滞留主要由氦泡以及氦-空位复合物主导，而非离位损伤缺陷。高能氦离子预辐照钨中氦滞留总量随氦等离子体辐照剂量的增加而增加。且与未经高能氦辐照样品不同，该系列实验中未出现氦滞留饱和趋势。随氦等离子体辐照温度升高，氦滞留量逐渐降低。在 400~700 K 辐照温度下，高能氦预辐照钨均比原始样品高一个数量级。当辐照温度增加至 800 K 时，高能氦预辐照钨中氦滞留总量显著降低至未预辐照钨的 10%。(3) 在重离子预置离位损伤钨中，氦离子辐照引入的氦-缺陷复合物增加了重离子损伤区域中氦俘获位的数量。且氦浓度会随着氦离子辐照剂量的增加而进一步增加。与单独重离子损伤钨类似，重离子损伤钨在有额外氦离子的辐照下仍然存在损伤程度为 0.2 dpa 以上的氦饱和现象，这有利于控制核聚变装置中的燃料循环和氦自持。(4) 氦等离子体、氦离子、氦离子+氘等离子体辐照后钨样品硬度均增加。氦离子+氘等离子体辐照钨中，氘等离子体辐照造成的叠加效应主导了硬化程度的进一步增加。氦离子辐照钨中额外的氘等离子体辐照使辐照区域脆化而容易萌生裂纹甚至发生材料剥落，这将对钨在聚变堆的实际服役产生不可忽视的负面影响。此外，氘等离子体辐照引起钨的脆化和韧脆转变温度的升高，这意味着氘等离子体辐照将缩小钨在聚变堆中的服役窗口。

A03-P12

Nb 元素对熔盐堆用 GH3535 合金微结构与性能的影响机制研究

刘程鹏*、叶祥熙、黄鹤飞

中国科学院上海应用物理研究所

GH3535 合金由于其优异耐熔盐腐蚀性，成为熔盐堆用关键结构材料。然而，辐照后 He 泡会导致该合金力学性能下降，限制了其服役寿命，研究表明添加 Nb 元素能够提高合金的抗辐照性能。然而，截止到目前，Nb 元素对熔盐堆用 GH3535 合金微结构与性能影响的微观机理尚未完全明确。

本工作以不同成分 Nb 改性 GH3535 合金为研究对象，借助先进电子显微学方法，系统研究了 Nb 元素对合金微观结构、力学性能及抗 He 离子辐照行为的影响。结果表明：Nb 和 Mo 元素协同调控合金中碳化物的类型；Nb 元素通过细晶强化、固溶强化和形变强化协同提高合金的力学性能；固溶 Nb 原子可以减弱空位与 He 泡的结合，抑制 He 泡的形核，并通过降低 He 在 Ni 中的扩散速率减缓 He 泡的粗化，从而提高合金的抗辐照性能。此外，TEM 原位高温力热耦合实验为 Nb 元素促进纳米孪晶的形成以及 He 泡形变合并长大机制提供了直接实验证据。这些发现为优化熔盐堆用 GH3535 合金的成分设计与性能调控提供了理论依据。

A03-P13

Synergistic effects of irradiation and plastic strain on the molten salt corrosion behavior of GH3535 alloy

Hui Liu, Zhenbo Zhu, Weichi Ji, Guan hong Lei, Hefei Huang*

Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences

Synergistic effect of irradiation and plastic deformation on the corrosion behavior of GH3535 alloy in FLiNaK molten salt was explored. Helium bubbles were introduced into GH3535 alloy followed by mechanical loading with the plastic strain up to 10%. After immersed into molten salt for 300 hours, all the samples showed an apparent corrosion-induced Cr depleted layer. The depth of Cr depletion layer increased by 40% for the alloy with helium ion irradiation and 10% plastic deformation, compared with the only corroded sample. Moreover, the

proportion of large-sized helium bubbles increases with plastic deformation. These results indicate that the coupling effect of irradiation and plastic deformation further accelerate the corrosion of GH3535 alloy. In addition, an unexpected outward migration behavior of helium bubbles under different plastic deformation was observed. Helium bubbles migrated closer to the surface as the strain increased up to 3%, while the migration depth declined when the strain reached 10%. It can be ascribed to the interaction between deformation induced dislocations and helium bubbles.

A03-P14

CF4 燃料组件下管座选区激光熔化制备工艺研究：打印参数、支撑与后处理的影响

荀雨轩*、郝若彤、史利青
中核北方核燃料元件有限公司

在 CF 系列核燃料组件中，管座作为关键定位部件，其制造精度直接影响燃料棒的间距与冷却剂流道，对反应堆安全运行至关重要。然而，管座部件结构复杂、尺寸精度要求高，传统制造工艺繁琐，加工难度较大。选区激光熔化（Selective Laser Melting, SLM）技术因其在复杂结构制造方面的优势，在核能领域精密部件的制备中展现出巨大潜力。因此，本研究聚焦利用 SLM 技术制备 CF4 下管座（材质为 316L 不锈钢）的工艺问题，以探索 SLM 技术应用于核燃料管座制备的可行性。

SLM 成形 316L 不锈钢材料的典型表面粗糙度为 6~12 μm ，过高的粗糙度及管座悬垂结构在成形时因底部未烧结粉末缺乏有效支撑及高热梯度导致的变形，严重制约了部件的最终尺寸精度和装配性能。本研究结合实验研究与数值模拟，系统探究了影响 SLM 尺寸精度的核心因素——成形参数、支撑结构设计及后处理工艺。研究发现：

（1）成形参数（激光功率、扫描速度、扫描间距、层厚等）通过调控熔池形态、能量密度和热梯度直接影响精度；过高功率易导致表面孔洞或裂纹，过快速度则可能引起未熔合缺陷，而优化参数组合（如功率 200 W，速度 900 mm/s，间距 0.05 mm，层厚 0.04 mm）可有效平衡致密度与力学性能，减少尺寸偏差。

（2）支撑结构的设计对悬垂结构精度控制至关重要，其密度、形状、角度及去除方式显著影响残余应力和变形。合理设计支撑（如采用柱状加网状支撑）可降低悬垂变形程度达 20% 以上，并便于清除，但不当的支撑去除会引入局部误差。

（3）后处理工艺通过消除残余应力、改善微观结构或加工表面来进一步提升精度；退火有效降低了热应力及翘曲变形，其他后处理手段减少了表面粗糙度及台阶效应对尺寸测量的干扰。综合应用优化成形参数、合理支撑设计（块状+柱状+网格状）及退火处理，可将悬垂结构的平均变形控制在 ± 0.3 mm；最终通过流体抛光处理，整体尺寸误差可进一步降低至 0.05 mm 以内，复杂曲面精度得到显著提升。

本研究表明，实现 SLM 制备高精度 CF4 核燃料管座的关键在于成形参数优化、支撑结构合理设计及针对性后处理工艺的协同作用。通过系统控制这些因素，能够有效提升构件精度以满足核能应用的严苛要求。未来研究需进一步探索打印气氛、粉末特性与成形参数的多因素耦合优化，以及发展智能后处理（如 AI 辅助流体抛光）技术，以持续推动 SLM 在高精度核能部件制造中的应用。

A03-P15

氢在 W-Ni-Fe 合金中的输运、滞留和分布行为

刘徐徐、金伟、朱吉鹏、叶小球、陈长安*
中国工程物理研究院材料研究所

纯钨由于熔点高、热导率好、溅射产额小以及氢滞留量低等优点被认为是面向等离子体的理想材料。然而，纯钨的韧脆转变温度高，且随中子辐照剂量增加而提升，面对高热冲击时易产生裂纹甚至断裂。为克服纯钨的缺点，具有双相结构的 W-Ni-Fe 合金因粘结相韧性好，能够钝化和阻止裂纹失稳扩展，有望成为一种面向等离子体候选材料。课题组利用两种液相烧结工艺制备了不同含量的 W-Ni-Fe 合金，之后采用气相驱动渗透、热解吸谱、二次离子质谱、氢微印等技术，研究了氢同位素在 W-Ni-Fe 合金中输运、分布

和滞留行为。结果表明,氢在 W-Ni-Fe 合金中的渗透率和溶解度均比其在纯钨中高,且氢主要分布于粘结相和界面。其中,粘结相既是氢的扩散通道又是滞留位点,而界面起捕获作用。此外,课题组还通过准静态拉伸实验和断口形貌分析,发现氢通过削弱界面强度从而显著降低材料的延伸率、抗拉强度等力学性能。这些研究结果对深理解氢同位素与 W-Ni-Fe 候选材料的相互作用提供了重要参考。

A03-P16

大晶粒 UO_2 芯块制备工艺研究及性能表征分析

王纪钧^{*1,2}、李昱^{1,2}、曹军文^{1,2}、赵雨梦^{1,2}、杜江平^{1,2}、刘颜硕^{1,2}、李宗书^{1,2}

1. 中核反应堆辐照特种元件制备工艺重点实验室

2. 中核北方核燃料元件有限公司

大晶粒 UO_2 芯块因其在降低裂变气体释放、增强燃料安全性和提高燃料经济性等方面的优势,成为高燃耗燃料和事故容错燃料领域的重要研究方向。本研究旨在开发大晶粒 UO_2 芯块的稳定制备工艺,通过优化添加剂组合和烧结工艺参数,制备出满足高燃耗和事故容错需求的大晶粒 UO_2 芯块。研究过程中,选取 Cr_2O_3 、 SiO_2 、 Al_2O_3 等作为单组分或多组分添加剂添加至 UO_2 粉末中,并采用湿氢气氛烧结法开展大晶粒 UO_2 芯块制备实验,系统探究了烧结气氛以及不同种类、不同添加量的添加剂对 UO_2 芯块晶粒度的影响。研究表明,当 Cr_2O_3 添加量在 400~3200 ppm、 Al_2O_3 添加量在 0~400 ppm、 SiO_2 添加量在 0~400 ppm 范围内变化时, UO_2 芯块的晶粒度呈现不同的变化趋势。其中,使用湿氢烧结气氛并添加 Cr_2O_3 等添加剂,能够成功制备出晶粒度达到 50 μm 级别的 UO_2 芯块。 UO_2 芯块的晶粒度主要受 Cr_2O_3 影响, Al_2O_3 虽有一定作用但影响程度相对有限,而添加 SiO_2 则会在一定程度上抑制 UO_2 芯块晶粒度的增大。除晶粒度研究外,还对大晶粒 UO_2 芯块的热物理性能进行了表征,包括比热、热导率、热扩散系数、热膨胀系数以及弹性模量等。这些性能指标的测定与分析,为进一步评估大晶粒 UO_2 芯块在实际应用中的可行性提供了关键数据支持。研究成果不仅成功打通了大晶粒 UO_2 芯块的制备工艺路线,还为后续的批量生产及在高燃耗燃料领域的工程化应用奠定了理论与实践基础。

A03-P17

钒合金中间隙迁移机制和合金元素钛抑制空洞成核机理研究

张朋波^{*1}、魏明亮¹、嵇海川¹、李国峰¹、王桂秋¹、赵纪军²、郑鹏飞³

1. 大连海事大学

2. 大连理工大学

3. 核工业西南物理研究院

低活化钒合金因优异的抗辐照和高温力学性能被认为是聚变堆第一壁候选结构材料。高能中子辐照下结构材料内部会产生大量空位和自间隙原子等缺陷,实验研究表明钒合金中 Ti 添加能有效压制空洞的形核/长大从而抑制辐照肿胀,而 Cr 添加会导致更严重的肿胀,但其微机理尚不够清楚。基于我们最近钒金属中 Ti/Cr-自间隙/自间隙团簇相互作用和间隙团簇稳定性及空位团簇化的研究[1-3],最近通过第一性原理计算研究了钒合金中间隙迁移机制[4]和 Ti 抑制空位团簇化的微观机理[5]。

研究结果: 1) 自间隙 SIA 有三种迁移机制: 沿 $\langle 111 \rangle$ 方向的一维迁移、平移转向和平移迁移,势垒分别为 0.008、0.19 和 0.44 eV, $\langle 110 \rangle$ 哑铃可作为过渡态降低迁移势垒。双间隙通过连续迁移 (0.009 eV) 比同时迁移 (0.94 eV) 在动力学上更容易。2) SIA 迁移至 Ti 区域相对于纯钒具有更低的迁移势垒,而 Ti-SIA 复合物中 SIA 解离需要克服更高势垒,即 Ti 对点缺陷具有钉扎作用,最终降低了点缺陷的扩散率。相比, Cr 易与 SIA 形成混合 V-Cr 间隙,抑制了 SIA 与空位的复合。3) Ti 能够吸引空位并稳定空位团簇, Ti-空位复合团簇的稳定性随尺寸的增加而明显增大,并且稳定性明显高于纯钒中的空位团簇。Ti 的出现使空位团簇饱和和尺寸明显减小,进而抑制了空位的团簇化及空洞成核的尺寸。4) 动力学上,通过 NEB 计算结果表明空位倾向于迁移至富 Ti 区域具有比纯钒 (0.42 eV) 中更低的势垒 (0.32 eV), 反之需克服较高的势垒 (0.76 eV), 因此, Ti 对空位团簇具有钉扎效应,进而增大了空位团簇的活化能并降低了有效扩散率。总

之，Ti 的添加为辐照空位提供了更多的成核点，弥散的 Ti-空位复合物可以捕获自由的 SIA 和空位，进而形成大量稳定的小尺寸 Ti-空位复合物并弥散在合金中，最终抑制了空位团簇化及空洞成核，初步阐明了钒合金中 Ti 添加压制空洞和降低辐照肿胀。

参考文献:

[1] P.B. Zhang*, M.L. Wei, X. Wang, T.T. Zou*, J.J. Zhao, Y.X. Wei, P.F. Zheng, Interactions of alloying Cr/Ti with substitutional solutes and self-interstitial atoms in vanadium, *Journal of Nuclear Materials*, 574 (2023) 154160.

[2] M.L. Wei, P.B. Zhang*, S.M. Zhou, X. Wang, G.Q. Wang, J.J. Zhao, Vacancy clustering behaviors and stable configurations in vanadium metal: First-principles investigations, *Nucl. Mater. Energy*, 33 (2022) 101296.

[3] M.L. Wei, P.B. Zhang*, H.C. Ji, G.F. Li, G.Q. Wang, Y.C. Wang, P.F. Zheng, Migration mechanisms of mono-/di-interstitials in vanadium with alloying Ti/Cr, *Journal of Nuclear Materials* 603 (2025) 155407.

[4] M.L. Wei, P.B. Zhang*, X. Wang, G.F. Li, H.C. Ji, G.Q. Wang*, J.J. Zhao, P.F. Zheng, Towards understanding the mechanism of titanium suppressing vacancy clustering/void nucleation in vanadium alloy, *J. Nucl. Mater.* 591 (2024) 154930.

致谢：国家自然科学基金（12175028）和辽宁省自然科学基金（2023-MS-128）。

A03-P18

Al 元素对 Ni 基高熵合金间隙团簇行为的微观作用机制研究

林也平*、邓辉球、杨腾飞

湖南大学

间隙团簇的元素驱动迁移行为对于理解辐照条件下材料微观结构的演变至关重要，但其背后的机制仍不清楚。在本研究中，我们利用分子动力学模拟来探究不同尺寸的间隙团簇在 AlxNiCoCrFe 高熵合金（HEAs）中随 Al 浓度变化的迁移行为。我们的研究表明，随着 Al 浓度的增加，受限的一维（1D）运动显著增加。然而 3D 运动的增强却十分有限，仅限于中等尺寸的间隙团簇，突显了缓慢的 1D 团簇动力学相比于 3D 运动在含铝 HEAs 抗辐照性能中的关键作用。这些变化主要是由 Al 与其他组成原子（如 Fe 和 Cr）之间的协同相互作用驱动，而非仅由单个溶质效应单独决定。本研究获得的见解为通过调整成分复杂性来调节间隙团簇动力学以设计先进的辐射耐受合金提供了有价值的指导方针。

A03-P19

掺钾钨轧制厚板的微观组织演变及其抗辐照性能研究

梁孟霞¹、宋久鹏*¹、任平¹、谢芳¹、颜彬游²、封范³、代少伟²、王建豹³、练友运³、刘翔³

1. 西华大学

2. 厦门钨业股份有限公司

3. 核工业西南物理研究院

掺钾钨材料因具有掺杂量低（ $K < 100$ ppm）且工业化基础好的突出优点，越来越受到聚变领域的重视，有望成为未来聚变堆候选的面对等离子体材料。本项目采用工程化制备技术制备了厚度不低于 6.5 mm，最大变形量 85%，钾含量 75 – 85 ppm 的掺钾钨板材，研究了其微观组织和钾泡形态的演变。进一步采用直线等离子体装置研究了变形量为 68% ~ 70% 的掺钾钨板材和纯钨板材在低能（ < 100 eV）强流（ $1021 \sim 1022$ ions/m²s）氦离子辐照条件下随不同辐照时间及总辐照剂量的微结构变化。研究表明厚板掺钾钨中心区域及边缘区域存在晶粒形貌及织构差异。这种明显的差异主要归因于在高温轧制过程中因温度分布不均产生不同程度的动态再结晶、因厚度较大产生的不均匀应变，以及材料中不均匀分布的纳米钾泡。经氦离子辐照后，掺钾钨表面产生的绒毛层厚度明显低于纯钨，内部产生的刃型位错环密度及尺寸也低于纯钨，前者总体表现出更好的抗辐照性能。绒毛层的厚度随辐照剂量和温度的增加而增加，其形貌受到掺钾钨的取向/织构影响。在相同辐照条件下，垂直于轧制方向的表面平均晶粒尺寸最小，其抗氦离子辐照性能也更

优异。

A03-P20

A Selection Study on base Material for Gadolinium-Containing Burnable Poisons in a Prismatic High-temperature Gas-cooled Reactor

Anzhou Qi*, Hao Dong, Guoming Liu, Liyingying Zhang, Xiaochuaniaochuan Jiang, Teng Shen, Jingyu Guan
China Unclear Power Engineering Co.Ltd

The prismatic high-temperature gas-cooled reactor is a new type of reactor that China National Nuclear Corporation is independently developing. Burnable poison is an indispensable part of the core of the reactor, which serves to absorb excess neutrons in the core to balance the reactivity of the core. In order to adapt to the physical characteristics and structural design of the gas-cooled micro-reactor core, it is necessary to develop new burnable poisons blocks. To ensure that the burnable poisons can adapt to high-temperature and irradiation environments and possess excellent stability, the selection and design of the base materials are crucial. After determining that Gd should be used as a neutron absorption material, screening work has been carried out for the base materials of the fuel poison core blocks. Through investigation, four types of fuel poison core block systems have been proposed: Gd-Al phase + SiC-based, Gd₂O₃ + FSZ-based, Gd₂O₃ + Mg-PSZ-based, and Gd₂O₃ + Al₂O₃-based. By means of the trial production of core block samples, followed by their characterization and testing, the performance of these four base systems has been analyzed. A comprehensive evaluation of the advantages and disadvantages of each system has led to the selection of Gd₂O₃+FSZ-based as the base for the gas-cooled micro-reactor fuel poison core blocks.

A03-P21

掺杂 ZrC 对聚变堆第一壁 W 中氢同位素捕获行为的影响研究

张学希¹、乔丽¹、张弘¹、谢卓明²、解雪峰²、王鹏*¹

1. 中国科学院兰州化学物理研究所
2. 中国科学院固体物理研究所

理解和预测面向等离子体材料（PFMs）中氢同位素的滞留情况对聚变研究至关重要。本文系统地研究了一种新型候选面向等离子体材料 W-ZrC 合金，在 400 K 至 850 K 的温度范围内经受一系列氦等离子体辐照后的表面起泡和氦滞留行为。表面形貌观察表明，W-ZrC 合金的起泡严重程度在 600 K 时达到最大，与 W 钨相比，温度显著提高了 100 K。对纯 W 和 W-ZrC 合金表面气泡的定量统计分析显示，随着温度升高，平均气泡直径增大，同时气泡面密度相应减小。W 和 W-ZrC 合金上的气泡源于材料表面的空洞，形核位点位于晶内和晶界区域。W-ZrC 合金气泡下方的晶界空洞会偏向沿着 ZrC 弥散相和 W 晶粒之间的相界扩展，且晶界处的 ZrC 弥散相能有效抑制晶内空洞的扩展。当辐照温度高于 500 K 时，注入的氦原子能够溶解在 W-ZrC 合金的 ZrC 晶粒中，并在高温下在其中储存，从而在约 980 K 处产生一个新的高温热脱附谱（TDS）峰。此外，W-ZrC 合金中的总氦滞留量高于纯 W，尤其是在 600 K 和 700 K 的辐照温度下。本研究为理解 W-ZrC 合金的表面起泡和氦滞留行为提供了关键见解，为优化其作为聚变反应堆面向等离子体材料的性能奠定了基础。

A03-P22

热压烧结碳化硅材料高能 Xe 离子辐照的微观结构与力学性能演化研究

王再宏*

中核北方核燃料元件有限公司

碳化硅（SiC）凭借其优异的高温性能和低中子反应截面，成为第四代先进核能系统和耐事故燃料的

关键候选材料。然而，在反应堆运行过程中，中子辐照引发的离位损伤会导致 SiC 材料微观结构演变，影响其力学性能和长期服役稳定性。鉴于中子辐照实验的高成本和时间消耗，高能重离子辐照被广泛采用作为实验室模拟研究 SiC 辐照损伤机制的有效方法。本研究采用能量为 4.59 MeV 的 Xe 离子对热压烧结 SiC 材料进行辐照实验，同时结合 SRIM 模拟结果，系统研究了其在室温和 350 °C 下的辐照行为，重点关注微观结构演化（包括非晶化、晶体结构变化、化学键合状态等）及宏观力学性能（硬度）的响应。

研究结果表明：（1）4.59 MeV Xe 离子在 SiC 中产生的辐照损伤峰值位于约 1.0 μm 深度处，损伤层延伸至约 1.5 μm 。（2）室温辐照导致热压烧结 SiC 样品表面发生显著非晶化，晶体结构衍射峰强度明显减弱，并伴随 Si-Si 键断裂。（3）350 °C 高温辐照条件下，由于热激活促进点缺陷（离位原子与空位）的复合，样品晶体结构衍射峰强度相较原始未辐照样品反而增强；同时，表面观察到碳原子富集现象。（4）力学性能测试显示，室温辐照引起的非晶化严重破坏共价键网络，导致样品硬度急剧下降。高温（350 °C）辐照后硬度进一步降低，归因于辐照损伤与高温协同作用破坏了原始晶体结构，促进了新晶界形成和晶界滑移，从而引发软化效应。本研究通过揭示不同温度下 Xe 离子辐照对热压烧结 SiC 微观结构与力学性能的影响规律，为深入理解其辐照损伤机制提供了关键实验依据。所得结果对耐事故燃料包壳及第四代先进核能系统燃料元件的 SiC 基材料设计优化与抗辐照性能提升具有重要的基础支撑价值。

A03-P23

钨、铁蠕变机制的原位 SEM-EBSD 分析

冯译文、聂禹非、郝思洁、程龙、袁悦、吕广宏*

北京航空航天大学

为实现碳中和目标，核能作为重要的清洁能源将在未来能源体系中发挥关键作用。然而，关键结构材料在极端服役环境下的性能退化问题，仍是制约核能安全与可持续发展的重大技术挑战。聚变堆的第一壁、偏滤器及裂变堆堆芯等关键部位所用的核心功能材料(如钨和铁基合金)，需长期服役于高热负荷、中子辐照和复杂应力场等极端条件下，易发生缓慢而显著的蠕变变形，进而影响其结构稳定性与服役寿命。尽管蠕变行为在高温服役条件下广泛存在，其微观机制至今仍存在诸多争议。目前对蠕变的预测主要依赖基于经验参数的唯象模型，缺乏对微观机制的深入理解。这一局限主要源于蠕变过程中材料微观结构演化难以通过原位手段实现高分辨率、长时间尺度的动态追踪。为此，本研究采用原位拉伸加热设备（位移分辨率达 100 nm，时间分辨率达 0.01 s），结合扫描电子显微镜（SEM）与电子背散射衍射（EBSD）技术，通过在样品同一区域开展全变形过程追踪，系统研究了钨与铁在 300–900 K 温度范围及 0.6–0.9 σ_y （ σ_y 为屈服强度）应力下的蠕变行为。通过蠕变曲线拟合得到稳态蠕变速率，进一步获得了两种材料在不同应力、温度区间的蠕变激活能、激活体积和应力指数因子等关键参数。为建立宏观蠕变行为与微观结构演化之间的内在联系，基于 SEM/EBSD 分析了蠕变过程中材料的晶粒取向信息演化、几何必需位错（GND）密度、KAM（核平均取向差）等结构参数的演化规律。总结而言，本研究通过原位、多尺度、多手段联合表征方法，打通蠕变行为从宏观响应到微观机制的关联路径，为构建基于物理机制的蠕变预测模型提供实验基础，也为先进核能材料的设计与服役评估提供理论支持和技术支撑。

A03-P24

叠片式微结构钨的抗氙致起泡性能

宋汉丰*¹、祁超²、彭加官¹、郭鹏程³、赖俊运³、程龙¹、袁悦¹、王波³、吕广宏¹

1. 北京航空航天大学

2. 中国科学院理化技术研究所

3. 北京工业大学

钨因其优异的热学和力学性能，被认为是聚变反应堆中面向等离子体的理想候选材料之一。然而，氢同位素等离子体辐照导致的表面起泡问题严重限制了其实际应用。表面起泡不仅会显著降低材料热导率，还会增加物理溅射、表面熔化和蒸发的风险。因此，提高钨材料的抗起泡性能对托卡马克装置的长时间稳

定运行至关重要。

本研究中将厚度为 0.05 mm、0.1 mm 的温轧钨箔和厚度为 2.5 mm 的温轧钨块、再结晶钨块通过简单叠压制备成叠片式钨样品。将该样品（TD×ND 面）暴露于束流密度为 $3 \times 10^{20} \text{ ions m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ 的氘等离子体中，分别开展剂量为 $1 \times 10^{25} \text{ m}^{-2}$ 和 $5 \times 10^{25} \text{ m}^{-2}$ 的辐照实验。结果表明，在低剂量下，温轧和再结晶钨块表面出现大量直径小于 $5 \mu\text{m}$ 的气泡，而钨箔表面仅出现少量直径小于 $1 \mu\text{m}$ 的气泡；在高剂量下，钨块表面的气泡密度显著增加（超过 30000 mm^{-2} ），而钨箔表面的气泡密度仍低于 5000 mm^{-2} ，气泡尺寸几乎基本保持不变，且钨箔表面的气泡边缘均伴随裂纹产生；钨箔厚度越薄，抗起泡性能越优异。使用聚焦离子束截面分析发现，钨箔中的气泡空腔均形成于距暴露表面约 $1 \mu\text{m}$ 处，并沿垂直于表面的方向扩展，最终在气泡边缘形成裂纹。钨箔的抗起泡性能主要归因于以下微观结构特征：[110]择优取向晶粒、纳米级晶粒以及垂直于表面的晶界，这些结构特征有效抑制了气泡的形成与生长。此外，气泡边缘形成的裂纹以及钨箔之间的缝隙为气体释放提供了自由表面通道，进一步提升了材料的抗氘致起泡能力。

基于上述结果，我们提出了叠片式微结构钨的设计方案，即通过具有深度形变织构的钨箔简单的叠压来替代块体钨作为面向等离子体材料。进一步的，通过钎焊实验，成功将叠片式微结构钨与铜基底连接，界面无裂纹和孔隙，且钎料部分填充了钨箔之间的缝隙，确保了结构的完整性。这一设计不仅成本低廉，适合大规模生产，而且符合 ITER 材料手册中晶粒沿表面法向延伸的要求，能够避免裂纹导致的导热性能下降。综上所述，本研究为开发高性能面向等离子体组件提供了新的设计思路。 **A03-P04**

A03-P25

扫描电镜中含氘 316LN 钢原位拉伸行为研究

蒋韞哲、彭加官、雷沁、张梦琦、王浩、程龙*、袁悦、吕广宏
北京航空航天大学 物理学院

核聚变堆关键结构材料 316LN 不锈钢在含氘服役环境下的力学行为与损伤机制是评估其可靠性的核心议题。本研究旨在系统探究气态充氘对 316LN 不锈钢在不同拉伸温度（室温、200 ℃、300 ℃）条件下的力学性能和微观变形机制所产生的复杂影响。为此，实验采用了扫描电子显微镜（SEM）原位拉伸技术，精确控制加载与变形过程，并结合电子背散射衍射（EBSD）分析以追踪晶体学取向的演化和微观组织变化。同时，通过热脱附谱（TDS）测量，对样品中的氘滞留行为进行了表征。研究中，通过对比充氘样品与经过同等热处理的未充氘样品在相同拉伸条件下的表现，重点分析了材料的弹性模量、屈服强度、抗拉强度及伸长率等关键力学参数的变化规律，并细致观察了变形过程中表面滑移形貌的特征。

研究结果揭示了温度与氘对 316LN 钢性能的协同影响。普遍规律显示，无论是否充氘，随拉伸温度从室温升高至 300 ℃，材料的强度（屈服强度、抗拉强度）和塑性（伸长率）均呈现总体下降趋势。然而，氘的引入显著加剧了材料塑性的恶化：在室温下，充氘导致强度和塑性均大幅降低；当温度升至 200 ℃ 时，氘对强度的削弱效应有所减缓，但塑性损失依然明显；而在 300 ℃ 时，观察到一种反常现象，即充氘样品在塑性持续降低的同时，其强度指标反而出现了轻微的提升。微观变形观察进一步证实，氘的存在促进了平面滑移的发生，并导致应变在局部区域高度集中，这与宏观上观察到的塑性降低及早期裂纹扩展紧密相关。

此外，TDS 分析结果明确了实验条件下 316LN 样品中的氘总滞留量及其主要的脱附温度区间（200~500℃），为原位拉伸实验中加热温度的选择（确保氘在测试温度下仍未脱附完全）提供了关键依据。本研究通过多尺度实验手段，深入阐明了氘在不同温度下对 316LN 不锈钢力学性能及微观变形行为的复杂调控规律，不仅为揭示其氢（氘）脆敏感性及其内在机理提供了宝贵的实验数据和原位微观结构演化图像，也为未来核聚变反应堆结构材料的优化设计、安全评估以及在含氢同位素环境下的长期服役性能预测奠定了一定科学基础。

A03-P26

CVD 钨高温离子辐照缺陷演化研究

王汉卿^{1,2}、王诗维³、尹皓^{1,2}、孙钰涵^{1,2}、闫皎辉⁴、袁悦^{*1,2}、程龙^{1,2}、付恩刚³、靳科⁴、吕广宏^{1,2}

1. 北京航空航天大学物理学院
2. 北京航空航天大学先进核能材料与物理北京市重点实验室
3. 北京大学核物理与核技术全国重点实验室
4. 北京理工大学材料科学与工程学院

钨(W)因具有高熔点、高溅射阈值、低氢同位素滞留等特点成为未来国际热核聚变试验堆(ITER)的候选面对等离子体材料。近年来,使用化学气相沉积技术制备的钨基材料(CVD-W)因其出色的热学性能和低氢滞留特性引起了广泛关注。在微观结构上,CVD-W由垂直于表面,且在表面具有[001]晶体学择优取向的粗大柱状晶粒构成。目前,CVD-W在中子辐照下的缺陷演化研究还比较缺乏。

本实验使用厦门钨业公司生产的CVD-W以及安泰科技有限公司生产的轧制钨(ITER-like W)作为实验样品,在北京大学核物理与核技术全国重点实验室的NEC5SDH-2 2×1.7 MV串列加速器使用6 MeV铜离子在室温、773 K和973 K下对样品进行峰值损伤为0.6 dpa(SRIM计算结果)的辐照实验(模拟中子辐照)。在重离子辐照后,对样品进行了包括透射电子显微镜(TEM)和纳米压痕(NI)测试。在高温辐照下,位错环有序化排列形成位错筏(raft)结构,且空洞(void)密度随辐照温度上升而增加。随辐照温度上升,辐照硬化现象加重。我们发现同辐照参数下CVD-W相对ITER-like W具有相对更大的位错环尺寸和更小的空洞密度。结合两种材料的微观结构,我们对辐照缺陷演化的温度效应进行了讨论。

本文探究了高温重离子辐照下温度和材料初始微观结构对CVD-W缺陷演化的影响,对材料筛选和多重辐照协同研究提供了参考。

A03-P27

氦辐照对钨中氦滞留的抑制效应

秦颖¹、程龙¹、袁悦^{*1}、李宇浩¹、胡地¹、郝思洁¹、Arkadi Kreter²、吕广宏¹

1. 北京航空航天大学
2. 德国于利希研究中心

氦注入是一种关键的辐射冷却手段,用于缓解偏滤器承受的极端热负荷并保护面向等离子体第一壁材料。本研究利用PSI-2与Pilot-PSI开展了不同含量Ne掺杂氦等离子体对钨表面形貌及氦滞留行为的影响研究。结果表明,在低温(500 K)条件下,顺序氦氦辐照会显著增加钨的表面粗糙度,并完全抑制氦致起泡;而在相同条件下,混合氦氦等离子体辐照则形成微米尺寸的氦泡。高温(~1200 K)下,无论氦浓度为5%还是20%,混合氦氦辐照均能完全抑制起泡。此外,所有样品的氦滞留相较于纯钨均有不同程度的降低。在500 K时,D滞留量最多降低50%;在1200 K时,5%氦掺杂浓度下约降低30%,而20%氦浓度时D滞留量降至检测下限以下。这主要源于氦的溅射效应及氦-空位复合体对氦的钉扎作用,从而有效抑制了氦泡的形成。本研究揭示了Ne作为聚变堆辐射冷却掺杂杂质具有重要的应用潜力,并为优化面向等离子体第一壁材料服役性能提供了科学参考。

A03-P28

近端探针热脱附技术开发与初步应用

于倩楠^{1,2}、程龙^{*1,2}、袁悦^{1,2}、郝思洁^{1,2}、吕广宏^{1,2}

1. 北京航空航天大学 物理学院
2. 北京航空航天大学 北京先进核能材料与物理重点实验室

在可控核聚变能开发进程中,面向等离子体材料的燃料滞留行为是制约装置长脉冲运行与燃料循环效率的关键瓶颈问题。托卡马克装置中,等离子体与第一壁材料的相互作用会导致材料表面产生辐照损伤并引发氢同位素滞留,不仅降低材料服役寿命,还可能因滞留燃料的突然泄漏威胁装置安全。传统热脱附谱技术TDS虽能获取材料整体脱附量,但无法表征氦滞留的微区特性,更难以揭示其与等离子体束流空间分

布的关联规律。尤其在低斯型束流密度分布的辐照条件下,材料表面会形成复杂的氙浓度梯度与缺陷分布,需发展兼具高空间分辨率和检测能力的微区表征技术。

针对上述挑战,本研究自主开发了近端探针热脱附技术,可直接对金属表面微区热脱附行为进行研究。该技术通过集成真空获得、温度控制、探针控制、信号检测以及标定系统,构建了空间分辨率优于 500 μm 、检测下限为 $\sim 10^{-4}$ 原子比的微区热脱附测试系统。利用探针直接接触待测样品表面,通过施加脉冲电压使得接触点瞬间升温,致使滞留在材料近表面的氙局部脱附并被四极质谱仪收集检测。通过磁控溅射镀膜样品测试实验,验证了该技术在微区检测中具有较高的可靠性和稳定性。对于等离子体辐照的样品来说,利用探针控制系统实现定点加热,成功揭示了氙浓度分布与束流密度的空间关联性,展现出该技术对复杂滞留分布的诊断能力。

近端探针热脱附技术为氙滞留微区表征提供了一种操作便捷、经济高效的测试手段。这一设计突破传统 TDS 的检测模式,首次实现对等离子体辐照样品表面氙滞留的微区解析,为理解等离子体与第一壁材料的相互作用提供了关键实验手段,对可控核聚变能开发具有重要推进价值。

A03-P29

基于高温退火 ODS 钢再结晶及硬度变化的测温方法研究

张馨元¹、刘一凡¹、王浩¹、袁悦^{*1}、张晓新²、燕青芝²、程龙¹、郝思洁¹、吕广宏¹

1. 北京航空航天大学物理学院
2. 北京科技大学材料科学与工程学院

氧化物弥散强化钢 (Oxide Dispersion Strengthened Steel, ODS 钢) 因其优异的热稳定性和抗辐照损伤能力,在先进聚变堆结构材料领域具有重要应用前景。本研究选用低活化铁素体/马氏体型 9Cr-1Si ODS 钢作为研究对象,通过轧制工艺储存材料的变形能,在 1173~1473 K 真空环境下进行等时退火处理。采用维氏硬度测试、光学显微分析和电子背散射衍射 (EBSD) 等表征方法,系统研究退火温度对材料组织演变与再结晶行为的影响规律,并进一步探索维氏硬度作为温度评估手段的可行性。

研究表明: (1) 维氏硬度随退火温度升高呈现先升后降的非单调变化趋势,显微组织由长条状逐渐转变为等轴状; (2) 基于 EBSD 的 GOS 分析显示,1173 K 开始发生局部再结晶行为 (GOS<2° 的晶粒比例增加),1273~1473 K 区间再结晶分数提高; (3) EDS 分析证实未退火样品中存在弥散分布的纳米氧化物颗粒和碳化物,其在 1173~1273 K 温度区间可能通过钉扎位错和抑制晶界迁移,导致该区间出现异常的硬度变化和再结晶抑制现象。本研究旨在基于 JMAK 模型拟合退火温度与维氏硬度之间的定量关系,为 ODS 钢在高温退火状态下的温度评估方法提供理论支撑。

A03-P30

辐照空位缺陷与晶粒尺寸影响 BCC 金属塑性机制的分子动力学研究

闫晨鑫、金硕、梁林云*、吕广宏
北京航空航天大学

在聚变服役条件下,金属钨将同时受到氢氦等离子体、中子与热载荷的三重辐照作用。辐照过程中,高能粒子与晶格原子发生碰撞,形成初级离位原子并产生级联效应,进而在材料内部产生大量点缺陷,如空位和间隙原子。在应力场与热场的共同作用下,这些缺陷进一步聚集演化为纳米尺度的空位团簇、孔洞等微结构。在微观尺度上,这些辐照诱导的空位型缺陷与位错、晶界、孪晶等塑性变形载体之间存在复杂的相互作用,显著影响材料的变形机制,表现为辐照硬化、脆化甚至失效。近年来,纳米结构金属材料因其超高强度和潜在的抗辐照能力受到关注。通过晶粒细化提高强度的霍尔-佩奇关系已被广泛研究,然而当晶粒尺寸降低至一定尺度时,材料可能表现出反霍尔-佩奇效应,其物理机制尚不明确。尤其在辐照缺陷存在条件下,晶粒尺寸与缺陷之间协同作用如何影响位错滑移、孪晶形核等塑性变形机制,目前仍缺乏系统的原子尺度研究。因此,深入理解空位型缺陷与晶粒尺寸对材料塑性行为的协同影响,对于预测和设计抗辐照结构材料具有重要意义。

本研究采用分子动力学方法,系统研究了纳米晶 bcc 结构钨材料在不同晶粒尺寸下引入空位缺陷后的拉伸行为,发现晶粒尺寸、空位的数目和类型对塑形机制产生了重要的影响。我们针对晶粒尺寸在 6 nm 至 50 nm 范围内的金属 W 多晶体,在单轴拉伸过程中的力学响应进行了深入研究。通过近邻原子分析(CNA)与位错提取算法(DXA)对拉伸过程中的原子构型进行了解析。研究结果显示,在临界晶粒尺寸约为 20 nm 处,材料表现出从霍尔-佩奇行为向反霍尔-佩奇行为的转变,这一转变与塑性机制由位错运动向孪晶形成的演化密切相关。为了考虑模拟辐照效应,我们引入了 1 %至 5 %空位浓度的点缺陷。结果表明,随着空位浓度的增加,材料的屈服强度显著降低,弹性变形阶段显著减小。当空位浓度为 0.03%时,处于屈服点的多晶钨体内部位错大量位错被晶界吸收,导致位错机制逐渐失效。同时,通过对比单空位、双空位与五空位团簇,我们发现空位团簇能够明显扰动局部应力场,促进位错与孪晶的异质形核,例如在三叉晶界处形核,从而影响位错主导的变形机制。本研究从原子尺度揭示了 BCC 金属钨中晶界结构、辐照缺陷与塑性行为单元之间的相互作用微观机制,为设计和优化 bcc 金属在辐照环境下的结构稳定性的材料设计提供了理论依据。

A03-P31

化学气相沉积钨中位错密度对氘致起泡及滞留行为的影响研究

王浩¹、张学希²、袁悦^{*1}、程龙¹、郝思洁¹、吕广宏¹

1. 北京航空航天大学

2. 中国科学院兰州化学物理研究所

化学气相沉积钨(CVD-W)凭借其优异的材料性能,被认为是未来聚变堆面向等离子体材料的潜在选择之一。然而,目前针对 CVD-W 在聚变环境下受氢同位素辐照引起的氘致起泡及燃料滞留行为的研究仍相对有限。退火是一种通过调控材料本征缺陷密度以提升其性能的有效手段。本工作将样品置于高温退火炉中,分别退火 1 小时和 4 小时,所得样品记为 CVD-1 和 CVD-4。随后,通过氘等离子体辐照模拟聚变堆工况下氢同位素对材料的辐照效应,辐照剂量设定为 $5 \times 10^{24} \text{ D} \cdot \text{m}^{-2}$ 、 $1 \times 10^{25} \text{ D} \cdot \text{m}^{-2}$ 及 $2 \times 10^{25} \text{ D} \cdot \text{m}^{-2}$ 。利用扫描电子显微镜和热脱附谱仪对辐照后样品的表面形貌和氢同位素滞留情况进行表征。结果表明,随着辐照剂量的增加,样品表面的起泡程度及内部氘滞留量均明显增加。与 CVD-1 相比,CVD-4 在表面氘致起泡和内部氘滞留方面均表现出显著降低。因此,钨的氘致起泡及氢同位素燃料滞留行为与内部位错密度密切相关。退火处理对于提升材料在聚变堆严苛工况下的服役性能具有重要意义。本研究为未来聚变堆面向等离子体材料的选择和应用提供了实验数据和理论参考。

A03-P32

Study of Deformation Behaviour in Annealed Copper via In Situ Tensile Testing and EBSD Analysis

Fengning Liu^{1,2}, Jiaguan Peng^{1,2}, Siyang Mei^{1,2}, Yunzhe Jiang^{1,2}, Mengqi Zhang^{1,2}, Qiannan Yu^{1,2}, Tiangang Zhang¹, Long Cheng^{*1,2}

1. School of Physics, Beihang University, Beijing

2. Beijing Key Laboratory of Advanced Nuclear Materials and Physics, Beihang University, Beijing, 100191, China

In this paper, we systematically investigate the influence of annealing temperature on the deformation behavior of high-purity copper under fusion environments, employing in-situ EBSD and tensile testing. This study mainly focuses on the microstructure evolution during deformation, including the evolution of grain size, texture, geometrically necessary dislocations, and their effects on the mechanical properties. The results show that annealing temperature governs microstructural reconstruction dominated by dynamic recrystallization and grain boundary migration, leading to temperature-dependent degradation in elastic modulus, yield strength, and ultimate tensile strength. 300°C-annealed samples demonstrate anomalous improvement in fracture elongation compared with the pristine sample, attributed to a texture transition from Brass to Goss that enhances strain hardening.

through coordinated activation of multiple slip systems. 500°C-annealed sample exhibits equivalent peak strain geometrically necessary dislocation (GND) density to pristine and 300°C-annealed samples despite thermal-induced initial GND reduction, while 800 °C-annealed sample shows constrained GND evolution due to recrystallization-mediated grain coarsening. These findings establish a micromechanical framework for performance assessment and lifetime projection of ITER divertor heat sink materials under thermal cycling conditions.

A03-P33

平均场框架下间隙型辐照缺陷一维运动模型开发与应用

庞洋洋、王腾腾、李宇浩、周洪波*、吕广宏

北京航空航天大学

在聚变堆等先进核能系统中，材料受高能中子辐照及氢氦等离子体协同轰击，易产生复杂的损伤缺陷。传统团簇动力学（CD）模型通常基于各向同性的三维扩散假设，未能充分考虑间隙型缺陷在晶格中常见的一维迁移（1D）与随机转向（1DR）行为，导致反应速率被系统性高估，进而影响缺陷团簇形成与演化预测的准确性，限制了模型的物理可信度。

我们采用对象动力学蒙特卡洛（OKMC）方法，在周期性模拟盒中对间隙缺陷的 1D/1DR 迁移行为进行模拟，统计其异种反应的平均等待时间，并基于滞留时间算法精确求解平均场条件下的反应速率系数。结果表明，OKMC 所得的一维反应速率显著低于传统经验公式值，从微观机制上揭示了传统 CD 模型高估速率的问题根源。进一步地，基于超过十万条 OKMC 模拟数据，我们构建了一个包含团簇尺寸、迁移势垒、转向势垒、尝试频率及浓度等 11 项输入特征的前馈神经网络预测模型。该模型经标准化预处理与 ReLU 激活函数训练后，在验证集上取得了决定系数 $R^2 = 0.955$ ，残差分布集中且无明显系统偏差。将此机器学习模型动态嵌入 CD 模拟框架，并针对 HFIR 堆 0.02 dpa 的辐照条件进行团簇演化模拟。结果显示，引入一维迁移物理机制后，小尺寸间隙团簇的数密度显著上升，而大尺寸团簇的生长速率降低，模拟结果与实验观测高度吻合，明显优于传统三维扩散模型的预测。

综上所述，本研究通过 OKMC 精准标定与机器学习预测相结合的策略，系统地将间隙型缺陷的一维迁移效应引入平均场 CD 框架，有效提升了反应速率建模的物理真实性与计算精度。

A03-P34

W-K 与 W-Hf 合金氦等离子体辐照下的起泡取向效应研究

张梦琦、栾思博、孙亦文、彭加官、程龙*、袁悦、吕广宏

北京航空航天大学

可控核聚变装置中面向等离子体材料的性能直接影响聚变堆的稳定运行。钨（W）因其优异的高温强度、低氢同位素溶解度及良好的抗辐照性能，被认为是聚变堆第一壁材料的理想候选。然而，在氦等离子体辐照条件下，钨材料表面会产生起泡、裂纹等辐照损伤，严重影响材料服役性能。本研究通过合金化改性策略，系统考察了纯钨（PW）以及钨钾合金（W-K）和钨铪合金（W-Hf）在不同晶体取向（100、110、111）下的氦致起泡行为。其中，K 和 Hf 的添加旨在通过不同的作用机制改善钨的抗辐照性能：K 作为间隙型溶质可能通过形成纳米气泡抑制氦扩散，而 Hf 作为置换型溶质可能通过形成稳定氢化物降低氦溶解度。

实验采用能量为 40 eV、注量 2.5×10^{26} D/m² 的氦等离子体在 500 K 和 800 K 下对样品进行辐照。通过电子背散射衍射（Electron Backscatter Diffraction, EBSD）表征样品晶体取向，结合扫描电子显微镜（Scanning Electron Microscopy, SEM）和聚焦离子束（Focused Ion Beam, FIB）技术系统分析了表面起泡形貌特征。结果表明：三种材料的法向（ND）起泡密度和尺寸均显著高于轧向（RD），表明晶界与表面相对几何关系对氦扩散和气泡形核具有决定性作用；500 K 辐照时 W-K 和 W-Hf 合金的起泡程度较纯钨减轻，而 800 K 时 W-K 的起泡行为与纯钨相近，W-Hf 仍表现出最优异的抗起泡性能，这一温度依赖性差异揭示

了两种合金元素在高温下的不同作用机制。晶体取向分析显示：(111) 晶面主要形成高穹顶泡和阶梯状泡，(110) 晶面以低穹顶泡为主，(100) 晶面则呈现未气泡区与分散小泡共存的特征，这种差异主要源于不同晶面氦扩散能力的差异以及表面原子排列方式的影响。

进一步采用飞行时间二次离子质谱 (Time-of-Flight Secondary Ion Mass Spectrometry, TOF-SIMS) 分析表明：Hf 元素周围存在明显的 D 富集，而 K 元素周围的 D 富集程度较低，这与 Hf 更强的 D 吸附能力及其与 D 的化学亲和性相关。本研究不仅从缺陷物理角度揭示了钨基材料中氦致起泡行为的温度依赖性、取向依赖性和合金化效应，更为聚变堆用抗辐照钨基材料的成分设计与晶体取向优化提供了重要理论依据。研究结果表明，通过合理的合金化设计和晶体取向控制，可显著提高钨基材料在聚变环境中的抗辐照性能。

A03-P35

多种类型微结构钨中氦等离子体辐照效应研究

栾思博、张梦琦、孙亦文、程龙*、袁悦、吕广宏

北京航空航天大学物理学院

聚变能被视为解决当前能源问题的最佳方案，但聚变装置中的材料服役环境极其苛刻，其中材料问题是实现可控核聚变的关键挑战之一。钨材料因其优越的抗等离子体辐照性能，被认为是聚变堆面对等离子体的首选材料。然而，辐照下的氦致起泡会影响等离子体运行的稳定性，氦滞留量将影响燃料的回收率与自持效率。本研究以晶粒拉长平行于辐照表面的轧制钨 (ND-W)、晶粒拉长垂直于辐照表面的轧制钨 (RD-W)、化学气相沉积钨 (CVD-W) 与锻造钨为研究对象，综合使用包括直线等离子体装置 (Linear plasma device, LPD)、热脱附谱仪 (Thermal Desorption Spectroscopy, TDS)、扫描电镜 (Scanning Electron Microscopy, SEM) 在内等实验方法，开展微结构对辐照响应影响的研究工作。

在 ND-W、CVD-W 与锻造钨上进行氦等离子体辐照 (辐照温度，辐照剂量)，观察结果显示，ND-W 样品的起泡数量和尺寸明显多于锻造钨和 CVD-W，原因是其平行晶界结构使氦溶质能沿晶界延伸形成大气泡，而垂直晶界的锻造钨和 CVD-W 则限制了气泡生长。TDS 结果表明，锻造钨的氦滞留量显著高于 ND-W 和 CVD-W，这归因于其较高的晶界密度和缺陷，有效捕获并滞留氦原子，从而增加了滞留量。在 RD-W 上进行低温氦等离子体辐照 (辐照温度 450 K，辐照剂量)，随着辐照时间的增加，观察到起泡数量和密集程度显著增加。起泡形状由初期的圆形转为椭圆扁平，且结构完整，表明辐照时间对表面结构变化有直接影响。热脱附实验表明，氦的滞留量随辐照时间的延长逐渐达到饱和，说明辐照时间的延长对氦滞留量增加的影响受限。在 RD-W 上进行高温氦等离子体辐照 (辐照温度 770 K，辐照剂量)，随着辐照时间增加，起泡现象由稀疏变密集，泡的尺寸增大，且形状仍为扁平椭圆。随时间延长，泡结构破裂增多，导致氦气释放，泡内变为空腔。TDS 结果显示，氦滞留量随辐照时间增长而下降，尤其是当辐照时间超过 1 小时后，由于泡破裂，氦滞留显著减少。

本论文以钨中氦致起泡和氦滞留为辐照效应代表现象，从金属缺陷物理出发研究氦致起泡与氦滞留行为对微结构、缺陷的依赖关系，对设计开发新型抗等离子体辐照钨基面对等离子体材料具有重大的意义。

A03-P36

基于点云表征深度学习的辐照损伤微结构高效预测研究

林鑫、许珂、李宇浩、周洪波*、吕广宏

北京航空航天大学

材料问题是聚变堆等先进核能系统面临的关键问题。在聚变堆极端服役环境下，材料承受高通量中子辐照，产生大量空位、空洞、自间隙原子和位错环等离位缺陷，严重影响材料的微观结构和力热性能。对象动力学蒙特卡洛方法 (OKMC) 是研究材料辐照损伤微观结构演化的有效工具。然而，OKMC 模拟通常需要巨大的计算资源和极长的模拟时间尺度，这严重限制了其在材料高通量筛选和辐照行为快速评估中的应用。

我们提出了一种融合三维点云表征与变分自编码器 (VAE) 深度学习的计算预测模型。将传统 OKMC

模拟输出的复杂辐照损伤微观结构转化为三维点云数据, 利用 VAE 强大的非线性特征提取与数据生成能力, 对大规模 OKMC 模拟生成的点云数据集进行无监督学习, 构建能够有效刻画微观结构演化规律的低维连续潜在空间。在此基础上, 建立关键辐照条件与潜在空间编码向量的定量映射关系, 并通过训练好的 VAE 解码器直接从预测的潜在编码向量生成对应的微观结构点云, 从而绕过耗时的随时间迭代的 OKMC 模拟过程。在相同辐照条件下, 模型预测的空位团簇和间隙型位错环的尺寸分布、数密度与完整 OKMC 模拟结果展现出良好的一致性, 而计算耗时缩短超过 3 个数量级。这从微观结构高效预测的角度, 提供了突破辐照损伤模拟的计算瓶颈的有效方案, 为聚变堆材料的快速筛选评估与性能预测提供了重要参考。

A03-P37

从会合位错到位错阻塞

聂禹非¹、郝思洁¹、程龙*¹、袁悦¹、谢红献²、吕广宏¹

1. 北京航空航天大学

2. 河北工业大学

阻塞 (Jamming) 是一种自然界中普遍存在的基本现象, 在多个科学领域得到了广泛研究。在材料科学中, 位错阻塞在控制塑性变形过程中起着关键作用。然而, 在实验中直接观察阻塞过程中的位错动力学仍面临巨大挑战。以往的研究主要依赖于介观尺度的计算模拟, 这类方法通常引入简化假设, 难以捕捉位错行为中的关键特征。在本研究中, 我们以体心立方结构钨为模型材料, 采用分子动力学模拟对位错阻塞现象进行原子尺度的研究。我们发现, $1/2\langle 111 \rangle$ 型位错反应是造成位错阻塞的主要原因。阻塞状态与非阻塞状态之间的转变是由会合位错的形成与解锁过程的竞争所控制, 从而首次将位错反应的动力学行为与阻塞现象直接联系起来。我们提出的这一机制不仅为理解位错阻塞与初级蠕变之间的关系提供了理论基础, 也推导出与实验数据高度一致的应力指数。更重要的是, 该机制首次建立了位错堵塞与材料力学强度之间的直接联系, 为描述其他 BCC 金属在不同温度下的强度提供了理论依据。

A03-P38

北航气体驱动渗透装置及钨中氚渗透系数测量

雷沁*、孙亦文、程龙、袁悦、郝思洁、吕广宏

北京航空航天大学

在托卡马克装置中, 钨由于其高熔点、低溅射率、低氢滞留等特性, 被认为是最具应用潜力的聚变堆第一壁材料。氢同位素在钨中的扩散与渗透行为不仅会直接影响聚变堆中氚的回收与处理, 还与系统安全和材料服役寿命密切相关。因此, 深刻理解氢同位素在钨中的渗透机制, 进而实现对其行为的精确预测, 并制定有效的抑制策略, 对于保障未来聚变堆的安全稳定运行、提高燃料利用效率以及延长装置服役寿命具有关键意义。

在装置运行过程中, 钨将直接暴露于高温等离子体中, 氢同位素主要以等离子体驱动的方式渗透。由于等离子体是由包含离子和中性粒子组成的复杂混合体, 因此也可采用离子驱动和气体驱动等方式对渗透行为进行研究。本研究依托北京航空航天大学物理学院自主设计并搭建的气体驱动渗透 (Gas-Driven Permeation, GDP) 实验装置平台, 以商业轧制钨和锻造钨为研究对象, 开展了温度范围为 873 K-1023 K 的系列渗透实验。该实验装置具备优良的高真空密封性能, 可适用于厚度为 0.1–2 mm 的钨样品, 其上下游腔体的真空度均优于 $\sim 10^{-5}$ Pa, 其最高工作温度可达 800 °C, 并支持最高约 1×10^5 Pa (即 1 atm) 的驱动气体压力。此外, 该装置兼容石英管焊接组件, 具备开展高温气态氚充注实验的能力。

根据实验获得的瞬态渗透曲线, 计算得出轧制钨与锻造钨样品在 873 K-1023 K 温度区间内的扩散系数分别为: $1.24 \times 10^{-4} \exp(-1.19 \text{ eV/kbT}) \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ 和 $1.78 \times 10^{-4} \exp(-1.20 \text{ eV/kbT}) \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ 。未来将进一步开展多种类型钨材料的系统化气体驱动渗透实验, 持续积累相关基础参数与实验数据, 为聚变堆第一壁材料中氢同位素渗透行为的建模、评估与预测提供有力支持。

A03-P39**(Fe, Ni)3V 长程有序合金的重离子辐照效应**

刘辉¹、易晓鸥^{*1}、胡婧²、董思辰¹、方昊¹、宋中正¹、韩文妥¹、刘平平¹、Somei OHNUKI^{1,3}、万发荣¹、詹倩¹

1. 北京科技大学
2. 中广核研究院有限公司
3. 日本北海道大学

铁基长程有序合金(Fe, Ni)₃V 是一种在先进核能系统结构部件中具有丰富应用潜力的材料,这得益于其优异的室温韧性、延展性、高温力学性能以及由长程有序结构带来的耐损伤缺陷累积特点。本研究利用 HIRFL-SFC 提供的 532 MeV Xe 离子对(Fe, Ni)₃V 合金进行 360 °C 多能级离子辐照,以模拟快中子辐照引起的位移损伤,获得了约 8 μm 近似均匀损伤层,平均损伤剂量 3 dpa。综合利用透射电子显微学分析和截面纳米压痕测评,揭示了辐照缺陷和微观结构演变的统计特征及其对辐照硬化的影响。在距入射表面约 3 μm 处,辐照缺陷主要由 a/2<110>型全位错滑移位错环以及高密度缠结的 a/2[110]位错线组成;而在距入射表面约 6 μm 处,辐照缺陷则主要由 a/2<110>型全位错滑移位错环以及低密度缠结的 a/2[011]位错线组成。截面纳米压痕结果证实该合金辐照硬化显著,基于弥散强化势垒模型分析了辐照缺陷统计特征与辐照硬化之间的定量关联规律。

A03-P40**医用金属镁的放射核素衰变损伤与体液腐蚀协同效应**

董思辰¹、王诗维²、易晓鸥^{*1}、陈琦³、刘辉¹、宋中正¹、韩文妥¹、刘平平¹、Somei OHNUKI^{1,4}

1. 北京科技大学
2. 北京大学物理与核技术国家重点实验室
3. 宁波瑞臻生物科技有限公司
4. 日本北海道大学

本课题聚焦医用放射核素的可降解密封籽源包壳材料,以镁作为模型体系研究放射核素衰变损伤与人体体液腐蚀协同效应。采用 6 MeV Fe⁴⁺进行室温下辐照加速实验,模拟放射性同位素的 α 和 β 衰变射线引起的位移损伤,辐照注量 2×10¹⁸ ions/m²,获得了 5.5 μm 损伤层,峰值损伤达到 0.367 dpa。透射电子显微学表征证实离子辐照在纯镁中诱导产生了辐照位错环(<a>型、<c>型)和辐照孔洞,但不同晶粒取向向下缺陷的种群规模和尺寸存在差异。其中基面取向产生的<a>型及<c>型环尺寸略大,而柱面取向向下<a>型环的数密度更高。在辐照基础上进一步开展了体外腐蚀实验,追踪了纯镁在 PBS 人工体液中浸泡 9 h 后的析氢量、腐蚀表面粗糙度、腐蚀层厚度、腐蚀增重变化。辐照损伤的累积加速了纯镁的腐蚀降解过程,同等浸泡时间下辐照态样品的析氢量、腐蚀表面粗糙度、腐蚀层厚度和增重分别增加 41%、44.8%、20%、25%。在柱面取向向下纯镁表现出更强的损伤与腐蚀协同效应。研究成果可为医用金属镁及合金在放射性密封籽源领域的应用提供科学参考。

A03-P41**He 离子辐照下难熔多主元合金与单质的氦泡行为对比研究**

朱芷希¹、原久茜¹、朱振博²、李雷¹、张秋红¹、董亚光¹、豆艳坤³、贺新福³、郭寻¹、靳柯^{*1}、黄鹤飞²、杨文³、薛云飞¹

1. 北京理工大学
2. 中国科学院上海应用物理研究所
3. 中国原子能科学研究院

近年来,多主元合金在先进反应堆中的应用潜力备受关注。在服役环境下,中子辐照不仅产生离位损

伤, 还可引起嬗变等反应形成氦并产生氦泡, 严重影响服役性能, 阐明多主元合金中的氦泡行为对评估其服役性能至关重要。此前有关 Ni-Co-Fe-Cr 体系 3d 过渡族多主元合金的氦泡研究大多表明, “晶格畸变”与“化学无序”等多主元特征是抑制氦泡尺寸的主要原因。然而, 我们针对具有优异高温性能的难熔多主元合金的氦泡实验结果表明, 难熔多主元合金中的氦泡尺寸相比于单质或相似简单合金体系并非必然受到抑制, 相关机制尚不清晰。对此, 我们结合实验和第一性原理计算, 对比研究了 V-Nb-Ta-Ti 和 Hf-Nb-Zr-Ti 两种典型难熔多主元合金体系与难熔金属单质在不同温度 He 离子辐照下的氦泡行为差异。氦离子辐照实验结果表明, 与子体系单质相比, 在室温至 700°C 不同辐照温度下, VNbTaTi、VTaTi 与 HfNbZrTi 中的氦泡总是尺寸更大、密度更低, 并造成更大的肿胀, 这与“成分复杂度增加有助于抑制氦泡生长”的前期普遍预期不同。通过第一性原理计算, 并结合不同温度区间下典型 He 原子迁移模型, 认为难熔多主元合金中更低的空位形成能、更低的间隙氦原子迁移能和更低的氦-空位结合能, 以及由化学复杂度带来的低能迁移路径, 协同促进了 He 原子的迁移并促进了氦泡的长大。研究结果表明, 更多的主元数并不一定更强地抑制每种形式的辐照缺陷, 研究多主元合金的辐照损伤效应时必须考虑具体的元素组合。

A03-P42

不同氧杂质含量下 Nb 的离子辐照硬化与脆化效应

闫皎辉¹、周晓旻¹、朱芷希¹、陈尚¹、李雷¹、郭寻¹、李炳生²、靳柯*¹

1. 北京理工大学
2. 西南科技大学

辐照硬化和脆化是反应堆结构材料面临的关键问题, 而对离子辐照后材料力学性能变化的评价一直是领域内面临的重要挑战。本文以具有不同氧含量 (210~3600 ppm) 的单质金属 Nb 为研究对象, 结合纳米压痕和微悬臂梁弯曲测试, 研究了 25 μ m 深度的均匀 Fe 离子辐照后的硬化和脆化效应和相关机制。在硬化方面, 利用截面压痕测试发现, 辐照区硬度均匀, 且与未辐照区有鲜明差异; 随氧含量的上升, 辐照前 Nb 的硬度即增大, 同时辐照硬化程度也相应增大。微悬臂梁测试显示, 三种氧含量下 Nb 在辐照后最大载荷均显著提升, 表现出与纳米压痕测试结果一致的辐照硬化效应。同时, 在三种氧含量下, Nb 均有一定的塑性变形能力, 然而除低浓度氧含量条件下外, 微悬臂梁在测试过程中无论辐照前后均发生预制裂纹处扩展, 而高氧下裂纹扩展发生更早; 中、高浓度氧含量下, 辐照后的 Nb 中均发生载荷骤减提前, 结合原位表征可知裂纹失稳扩展提前, 也定性反映了辐照脆化, 结合弹塑性断裂力学理论量化了辐照后的断裂韧性下降, 以中氧含量为例, 断裂韧性下降了约 10%。

A03-P43

应变和缺陷对 Ti₃C₂T₂ (T = F, O, OH) MXenes 材料光学性质的调控作用

吕文婷*、张宇龙、杨宇

北京应用物理与计算数学研究所

MXenes 材料在吸附核素和核材料腐蚀防护方面具有潜在的应用价值, 保持结构完整性对于实际应用非常重要。制备过程中会引入多种表面官能团, 我们研究了辐射引起的孔洞缺陷对 MXenes Ti₃C₂T₂ (T = F, O, OH) 的电子结构和光学性能的影响以及双轴应变对孔洞结构光学性能的调控作用, 建立了不同缺陷类型和光学性能之间的构效关系, 阐明了应变对缺陷材料光学性能调控的微观机制。孔洞缺陷主要改变了 Ti₃C₂T₂ 深能级的电子分布, 在 Ti₃C₂F₂ 和 Ti₃C₂O₂ 中, 缺陷会破坏 F-p 和 O-p 轨道的局域化, 释放出更多的离域电子。另外缺陷会在 Ti₃C₂(OH)₂ 的深能级中产生更多 O-H 键的孤立峰。这些体系的光学吸收区域主要集中在紫外 (UV) 区域, 吸收起点在红外范围内。对于 Ti₃C₂F₂ 和 Ti₃C₂O₂, 三角形、菱形和六边形的空穴缺陷可以显著提高紫外区域的光吸收强度。而对于 Ti₃C₂(OH)₂, 空穴缺陷将增强可见光 and 红外区域的光响应。-4%~4% 的双轴应变会导致微弱 (< 0.05 Å) 的键合变形, 紫外频率范围内的吸收光谱对孔洞缺陷和应变条件表现出明显的依赖性。我们的结果可用于检测 Ti₃C₂T₂ (T = F, O, OH) MXenes 的结构完整性和应变条件。

A03-P44

V-4Cr-4Ti 合金中空位缺陷行为及合金元素效应

孙淑贤¹、张朋波^{*1}、魏明亮¹、魏雅霞²、郑鹏飞²

1. 大连海事大学

2. 核工业西南物理研究院

钒（V）合金因其优异的高温性能和低活化特性，被视为重要的候选聚变堆结构材料。其中，V-4Cr-4Ti 合金凭借良好的力学性能和抗辐照肿胀能力，成为目前最具代表性的钒基合金。在高中子辐照下，材料内部会形成大量空位缺陷。实验表明，Ti 的加入有助于抑制空洞的形核和长大，从而降低辐照肿胀；而 Cr 的加入则会加剧辐照肿胀。本工作基于团队之前报道的钒中添加合金元素 Ti/Cr 对空位及其团簇化行为的影响[1]，采用第一性原理方法研究了 V-4Cr-4Ti 合金中空位缺陷的形成和迁移行为，探究合金元素 Ti/Cr 对空位团簇化的影响以及 V-4Cr-4Ti 合金中空洞形核和长大的机理。

研究表明：能量学上，V-4Cr-4Ti 合金中单空位的形成能介于 1.54~2.55 eV 之间，平均值为 2.19 eV，明显低于纯钒（2.43 eV）。结构分析表明，当空位邻近区域存在 Ti 原子时，其形成能相对较低，并随着 Ti 原子数量的增加而进一步降低；相比，空位周围存在 Cr 原子时，形成能通常较高。合金元素 Cr/Ti 对空位的影响主要局限于空位的第一近邻，表现为短程效应。V-4Cr-4Ti 合金双空位和三空位复合缺陷的形成能分别为介于 3.22~4.74 eV 和 5.15~6.93 eV 之间。富 Ti 区域双空位更倾向于形成第二近邻构型，且形成能（3.22 eV）显著低于纯 V（4.35 eV），而在 Cr 附近双空位形成能较高（4.25~4.74 eV）。三空位团簇在 Ti 附近易形成致密的紧凑结构（5.15 eV），而在 Cr 附近则偏好沿[100]方向形成一维链状结构（6.14 eV）。动力学上，NEB 过渡态计算表明 Ti 区域的空位迁移势垒较低，Ti 能驱动空位迁移并形成小尺寸的 Ti-空位复合物，而空位向 Cr 区域迁移势垒较高，这表明合金元素 Ti 对空位缺陷具有钉扎效应，抑制了大尺寸空位团簇的形成及长大。

致谢：国家自然科学基金（12175028）和辽宁省自然科学基金（2023-MS-128）

参考文献：

[1] M.L. Wei, P.B. Zhang*, X. Wang, G.F. Li, H.C. Ji, G.Q. Wang*, J.J. Zhao, P.F. Zheng, Towards understanding the mechanism of titanium suppressing vacancy clustering/void nucleation in vanadium alloy, J. Nucl. Mater. 591 (2024) 154930.

A03-P45

Fe 基非晶复合材料的 He 及自离子协同辐照研究

张小楠^{*1}、叶雨萌²、梅显秀³

1. 大连交通大学，基础部理学院

2. 大连交通大学，材料科学与工程学院

3. 大连理工大学物理学院，三束材料改性教育部重点实验室

非晶复合材料保留了非晶合金对入射粒子有良好容纳性的耐辐照结构优势，同时引入第二相粒子提供相界作为高密度的缺陷捕获位点，或可以延迟“He 泡到空洞”的转换，提升材料的服役寿命。

本研究采用 He 离子辐照以及 He 离子和 Fe 离子协同辐照非晶复合材料 FeSiB，探究复合材料的耐辐照性能，尤其关注材料内部泡的行为；同时与同成分的 Fe 基非晶材料的辐照演化作比较，探寻 Fe 基非晶复合材料应用于聚变环境的可能性。

辐照后，复合材料中的晶相构成没有发生变化，主要结晶相依然为 α -Fe 相和 Fe₂B 相；在协同辐照后，晶粒细化。He 离子辐照后，晶体与非晶区域均分布着大量 He 泡，平均直径约为 1.39nm，相较于晶体区域，同深度的非晶区域中 He 泡平均尺寸更大，且相界面观察到了贫泡区域以及 He 泡的联通生长。加入 Fe 离子协同辐照后，相较于单 He 辐照，泡尺寸显著增大，平均直径达到 2.17nm，甚至可以观察到直径达到 8.2nm

的大 He 泡。和同成分的非晶合金比较, He 离子辐照后, 两者 He 泡尺寸相当; 而协同辐照中, Fe 离子对非晶复合材料中泡尺寸的影响远大于非晶合金中。通过自离子辐照构造缺陷汇, 弥散注入 He 离子成泡位点, 可以抑制复合材料中相界面处泡连通行, 如何通过调控材料相界面抑制大 He 泡形成以降低材料恶化风险需要进一步探究。

A03-P46

焊丝成分对 Hastelloy XR 合金焊接接头的组织与性能的影响

徐文博^{1,2,3}、郝宪朝^{2,3}、马颖澈^{*2,3}

1. 东北大学 材料科学与工程学院

2. 中国科学院金属研究所

3. 中国科学院金属研究所 核用材料安全与评价重点实验室

为优化 Hastelloy XR 合金焊接接头的力学性能及高温抗蠕变能力, 本研究设计了三种 W 含量不同的焊丝 (分别含 W 0.8%+B 0.006%、2%、3%, 其余成分与 XR 母材一致), 采用钨极氩弧焊与 XR 母材进行焊接, 制备出三种成分的焊接接头, 结果表明, 三种焊丝在相同工艺参数下, 接头均可实现良好的成形情况, 焊接接头组织特征接近。三种焊丝焊接接头中焊缝金属的显微硬度均高于母材, 01 焊丝在母材、焊缝、热影响区的平均显微硬度都高于其他两种焊丝焊接接头, 可能是因为 B 元素的晶界强化作用有效提升了材料韧性。室温及高温 (750°C、850°C) 拉伸实验表明, 三种接头短时强度相近, 均满足焊接评定要求, 但高温下断裂位置由母材转移至焊缝。EBSD 分析表明, 2 号焊丝接头织构强度最高, 应力集中显著, 而 1 号和 3 号接头晶界取向分布更均匀, 有利于应力分散。

进一步开展 900°C/43 MPa 蠕变实验表明, 01 焊丝焊接接头的高温持久时间远超其他两种焊接接头, 达到 2 倍以上, 透射电镜分析表明, B 的添加不仅抑制晶界滑移和裂纹萌生, 还促进富 Mo 的 M₆C 和富 Cr 的 M₂₃C₆ 碳化物弥散析出, 协同提升抗蠕变能力。综上, 含 0.8% W + 0.006% B 的 1 号焊丝在保持良好短时强度的同时, 显著优化了 XR 合金焊接接头的高温耐久性, 更具工程应用潜力。

A03-P47

Hermeticity Testing of SiC/SiC Composite Cladding Tubes under Internal Pressure Loading

Weijun Wang*, Huafeng Zhang, Bo Xu, Shuyan Kong, Ran Chen, Zongyue Feng, Gang Zheng

State Power Investment Corporation Research Institute Co.

The application of SiC fiber-reinforced SiC/SiC composites as pressurized water reactor (PWR) fuel cladding remains under research and exploration. As the second safety barrier in nuclear power plants, preventing fission product release is one of the key performance requirements for SiC/SiC composite cladding. In order to measure composite hermeticity under more representative PWR conditions, an in-situ internal pressure loading hermetic test system was developed and relevant test configurations were identified. A duplex-layer structured SiC/SiC composite cladding was studied to investigate the influence of the outer chemical vapor deposition (CVD) SiC coating thickness on its gas-tightness, and then hermeticity testing of composite cladding tubes with optimized overcoating thickness were conducted under internal pressure loading conditions. The results indicate that a CVD-SiC coating thickness of no less than 130 μm is necessary to achieve an SiC/SiC composite cladding tube that meets the leakage rate design requirements, and the current SiC/SiC composite cladding tube meets the hermeticity allocation at pressures up to 15 MPa. In-situ internal pressure loading hermetic test technique is an effective method for measuring hermeticity changes in a composite cladding material as a function of applied stresses. It can be used to determine the maximum internal pressure limit at which the SiC/SiC cladding retains its gas-tightness and to investigate the influence of slow crack growth on leakage rates during long-term testing.

A03-P48

基于 HiPIMS 技术的铅冷快堆包壳涂层性能研究

倪晋扬*、李璠、刘向力、柏贺达、白亚雄、高嘉来

哈尔滨工业大学（深圳）

在铅冷快堆（LFR）运行过程中，包壳材料需同时承受辐照损伤、高温热应力、铅铋（LBE）腐蚀与磨损等极端环境，常规结构材料如 316L、T91 等难以兼顾多重服役性能，长期稳定性面临严峻挑战。鉴于新型结构材料开发周期长、成本高等问题，制备高性能表面防护涂层或可作为一种极具前景的替代技术路径。在众多涂层制备技术中，高能脉冲磁控溅射（HiPIMS）凭借其瞬时高功率输出所实现的高离化率等离子体，能制备出结构致密且膜基结合力优异的涂层，其特性尤其适用于 LFR 包壳涂层的服役要求。本研究聚焦于 FeCrAlY、Mo、CrN 三种涂层材料，系统评估其在摩擦磨损、热震、重离子辐照及 LBE 腐蚀等工况下的性能。其中经成分与工艺优化的 FeCrAlY 涂层在静/动态 LBE 腐蚀环境中可生成致密稳定的氧化膜以阻止侵蚀；Mo 涂层凭借其在 LBE 中的难溶性及优异的抗辐照特性为基底提供有效防护；CrN 作为陶瓷涂层具有较好的耐腐蚀与辐照特性，通过构筑 Cr/Cr_xN/CrN 的循环梯度结构，进一步提升了其力学性能与长期服役稳定性。本研究为 HiPIMS 技术在 LFR 包壳防护涂层领域的应用提供了重要理论支撑，并为新型包壳涂层材料的开发设计开拓了新思路。

A03-P49

Y2O3 颗粒在 W-Y2O3 复合材料轧制过程中诱导显微结构演变机理分析

陈宇¹、罗来马^{1,2,3}、朱晓勇^{*1,2,3}、姚刚⁴、朱大焕⁵、吴玉程^{1,2,3}

1. 合肥工业大学 材料科学与工程学院 合肥 230009
2. 合肥工业大学 高性能铜合金材料及成形加工教育部工程研究中心 合肥 230009
3. 合肥工业大学 有色金属与加工技术国家地方联合工程研究中心 合肥 230009
4. 内蒙古科技大学 材料科学与工程学院 包头 014010
5. 中国科学院 合肥物质科学研究院等离子体物理研究所 合肥 230031

核聚变能被视为保护环境和满足未来能源需求的重要解决方案之一。为确保聚变堆的正常运行，妥善解决托卡马克(Tokamak)装置中面向等离子体的偏滤器热负荷损伤问题显得尤为重要。在聚变堆运行期间，面向等离子体材料（PFMs）会受到持续的热负荷损伤，其中偏滤器部位需承受 5~20 MW/m² 高热峰值的稳态热负荷和约高达 2 GW/m² 的瞬态热负荷。W 在热稳定性和力学性能方面仍然存在一些缺陷，例如低温脆性、再结晶脆化及中子辐照引发的脆化。因此，将弥散的氧化物(Y2O3、La2O3、HfO2)及碳化物(TiC、TaC、ZrC)等第二相颗粒引入钨基复合材料中，将是提升材料性能的有效策略。这些第二相颗粒弥散分布在晶粒内部和晶界中，可显著降低晶界杂质浓度(如 N、O、C)在晶界上的偏析，还能通过钉扎晶界提升再结晶温度和裂纹拓展阻力，从而改善复合材料的高温稳定性和抗热负荷性能。

本研究采用高温烧结并结合不同压下量(20%-68%)制备 W-0.5 wt% Y2O3 复合材料(WYO)，并对其显微结构和组织演变进行分析。目的是深入探究在不同压下量变形过程中，Y2O3 颗粒如何影响 WYO 复合材料的显微结构、组织演变及材料性能。为实现这一目标，我们使用了扫描电子显微镜（SEM）、电子背散射衍射（EBSD）等技术，对材料的微观结构和组织演变进行了细致研究。

研究表明，随着压下量的增加，Y2O3 颗粒细化，并更均匀地分布在 W 晶粒的晶界处及内部，能够有效增强晶界的钉扎，从而提高材料的相关性能(硬度、致密度、热导率)。此外，Y2O3 颗粒的存在抑制了连续再结晶过程中异常晶粒的生长，并与晶粒中位错的滑移机制共同调控着强 γ 纤维和强 α 纤维组织的演变。这些发现为核聚变堆中 PFMs 钨基复合材料的显微组织设计及性能优化提供一些有价值的指导和参考。

A03-P50

基于相场模拟与深度学习的多晶钨辐照 He 气泡演化规律研究

姜彦博、邓辉球*

湖南大学

核聚变堆面向等离子体材料面临严峻的辐照损伤挑战，多晶钨中氦气泡的演化行为直接影响材料的热导率与力学性能。传统实验受限于极端工况实现难度，而单一模拟方法难以覆盖全参数空间。本研究提出相场模拟-深度学习协同框架，实现多晶钨辐照氦气泡演化规律的定量预测。首先建立耦合氦原子浓度场和空位场的相场模型。通过 Voronoi 算法生成 0.5-100 nm 晶粒尺寸的多晶结构，模拟 10^{19} - 10^{20} ions/m 辐照通量下气泡形核-生长-粗化的全过程动力学。构建全连接神经网络（FNN），采用 SELU 激活函数与自适应矩估计优化器。输入特征包含晶粒尺寸、辐照通量、时间变量，输出预测气泡平均直径与面密度。模拟结果显示在 3.6×10^{19} 和 3.2×10^{20} ions/m 条件下，气泡分布和密度随晶粒尺寸的变化 TEM 实验结果吻合（MRE<9%）。通过参数空间映射，本研究揭示晶粒细化与辐照强度的协同作用，晶粒尺寸大于 50 nm 以及辐照通量大于 2.5×10^{19} ions/m 时，孔隙率开始显著增长。晶粒尺寸 100-150 nm 之间出现孔隙率的峰值，这是由于晶界对缺陷的吸收作用以及晶界促进气泡形核的竞争作用导致的。该模型将实验数据外推，有望为聚变堆钨组件设计提供关键理论工具。此外，本研究框架可扩展至其他辐照损伤行为预测，推动核材料智能设计范式发展。

A03-P51

相场法模拟界面能和弹性能对氢化钇形貌和生长取向的影响

高懿波、邓辉球*

湖南大学

氢化钇是先进热中子谱反应堆中一种优良的高温慢化剂材料。为了深入理解氢化钇的形貌、生长方向及其在应力作用下的演变规律，本研究建立了一种微力学相场模型，综合考虑了界面能各向异性和弹性能各向异性对氢化物生长的影响。通过该模型，系统地研究了在不同应力状态下， δ -氢化物的形貌和生长方向的变化规律。

首先，通过低尺度模拟获取了界面能的信息，并在此基础上构造了一个描述界面能各向异性的函数。这一函数能够准确反映界面能在不同方向上的差异，为模拟 δ -氢化物的生长提供了可靠的输入参数。利用该模型，成功模拟了单晶 δ -氢化物的生长过程，并与 Wulff 构造预测的形貌进行了对比，结果表明 δ -氢化物呈大饼状，其惯习面为（0001）面。这一结果与实验观测结果高度一致，验证了模型的可靠性。

进一步的模拟研究表明，在大的剪切应变影响下， δ -氢化物会稍微偏离其惯习面，但仍然保持大饼状的特征。而在应力作用下， δ -氢化物的取向发生了显著变化。特别是在拉伸环向应力作用下，单晶 δ -氢化物的取向从周向逐渐转向径向。

通过上述研究发现，界面能和弹性能的各向异性是影响 δ -氢化物形貌和生长取向的关键因素。这些发现为深入理解核燃料棒包壳中氢化物的微观结构演化及其对力学性能的影响提供了重要的理论依据，同时也为优化核燃料棒的设计和提其安全性提供了科学指导。

A03-P52

高能氦预辐照对钨材料氦氢协同行为的影响研究

谢尧¹、朱秀丽*¹、张弘²、王鹏²

1. 华北电力大学

2. 中国科学院兰州化学物理研究所

钨因其高熔点、低氢同位素滞留率及良好热导率，被视为聚变堆面向等离子体材料（PFM）的热门候选材料。在聚变堆运行过程中，低能（1-100eV）氦和氢同位素，以及由于 β 衰变和高能中子轰击而在嬗

变反应中产生的高能氦均会对钨的材料特性造成影响。已有研究表明，氦离子辐照会显著改变钨的微观结构（如形成纳米气泡、位错环等），进而影响钨中氢同位素的滞留行为。

本工作研究了氦氢混合等离子体辐照对高能氦离子预辐照钨氦滞留行为影响，对比了氦氢等离子体混合辐照与纯氦等离子体辐照对高能氦离子预辐照钨的表层“修饰”效应及氦滞留行为。利用扫描电镜观察氦氢等离子体混合辐照后钨表面形貌，高能氦预辐照钨和未预辐照钨均未发现较明显的起泡现象。利用球差透射电镜观察到了浅表层高密度纳米氦泡及类 fuzz 结构，且在氦氢混合等离子体注入深度（0~10nm）范围内，钨呈现非晶结构。该现象表明，氦氢混合等离子体辐照能够降低 fuzz 结构的生成温度，且高密度氦氢离子撞击使得浅表层晶体结构完全破坏，这也解释了氦氢混合等离子体辐照对氦泡的形核和长大过程的抑制作用。在氦氢混合等离子体辐照下，与未预辐照钨中氦滞留总量随着辐照剂量增加而持续增加的趋势不同，高能氦预辐照钨的氦滞留总量随辐照剂量增加逐渐出现饱和趋势。由于高能氦离子预辐照产生离位损伤缺陷以及高密度纳米氦泡，因此高能氦预辐照钨中氦滞留总量比未预辐照钨高一个数量级，但随着氦氢混合等离子体辐照剂量增加，二者差距显著减小，此外高能氦预辐照钨在氦氢混合辐照下氦滞留量比在纯氦等离子体辐照下的氦滞留量低一个数量级，这也体现了氦的抑制作用，这与上述钨浅表层氦氢混合等离子体辐照影响区对氦向内扩散的抑制作用有关。

A03-P53

壁材料钨中氦脱附行为模拟研究

王岱鹏*

华北电力大学

为探究氢同位素在聚变堆钨基面向等离子体材料中的滞留与释放机制，本研究基于速率理论及扩散-捕获模型，利用 TMAP 程序模拟了不同注入参数对钨中氦滞留与释放行为的影响。研究对象为厚度 1mm 的钨材料，模型中设定两种缺陷：去捕获能为 0.85 eV 的 trap1（模拟位错/晶界）和 1.1 eV 的 trap2（模拟单空位）。系统分析了 400-700 K 注入温度和 10-300 分钟注入时间对氦浓度深度分布及热脱附谱特征的影响。结果表明：当注入时间从 10 分钟延长至 300 分钟时，氦扩散深度和最大氦浓度深度与注入时间的平方根呈线性关系。脱附峰位偏移和氦脱附量随注入时间增加呈对数增长趋势。当注入温度从 400 K 升至 700 K 时，各类 trap 对应的氦捕获深度与注入温度增加呈指数增长趋势，最大氦浓度值随注入时间增加而显著下降，trap1 下降幅度更大。注入温度 600K 时，trap2 对应的氦已经扩散至最底层，而 trap1 需 650K。500K 以下时 p1 峰位偏移和脱附量下降均呈指数关系，p2 则指数关系不明显，500 K 以上两峰合并为单峰，峰位偏移量随注入温度增加而上升，总脱附量呈指数衰减。此研究揭示了不考虑辐照过程中缺陷演变的理论情况下，注入时间和注入温度对氦捕获深度与随后的氦热脱附行为的影响结果，能够为解读实验观测的热脱附谱特征提供理论参照。

A03-P54

Deuterium behavior in tungsten after plasma exposure at two kinds of declining temperatures

Yi-Han Liu¹, Xiu-Li Zhu^{*1}, Long Cheng², Yue Yuan², Guang-Hong Lu²

1. School of Nuclear Science and Engineering, North China Electric Power University

2. School of Physics, Beihang University

Temperature is a significant factor that affects the deuterium (D) behavior in tungsten, one of the most promising candidates for plasma-facing materials in fusion devices. This work aims to comparatively study deuterium-induced surface blistering, deuterium retention, and the defect evolution in pristine (W) and pre-damaged (Pre-W) tungsten exposed to deuterium plasma at two declining temperatures: the high initial temperature group (HTD), declining from 720 K to 420 K, and the low initial temperature group (LTD), declining

from 570 K to 370 K.

Surface observation indicates that severe blistering is present on the W with LTD exposure but not on the W with the HTD. Statistical results indicate that the blister number density on W with LTD exposure is ~ 2 times that with the HTD. A similar surface observation is noted on the Pre-W: blisters are rarely found after HTD exposure, but large blisters, ranging from several micrometers to nearly a hundred micrometers, are present after LTD exposure. Compared to the W sample, the formation of small blisters is suppressed while the large ones are bigger on the Pre-W, indicating the suppressive effect of pre-damage on the small blisters and the facilitating role in the large ones. This pre-damage effect is consistent with the previous work, where the plasma exposures were performed at constant temperatures. Thermal desorption spectra reveal that the HTD exposure reduces the amount of D retention but introduces a high-temperature desorption peak in W. For the Pre-W, the HTD exposure results in a lower D retention and lower temperature of desorption peaks. Compared to the W sample, the amount of D retention is higher in the Pre-W in both LTD and HTD exposure cases. This is understandable since pre-damage defects act as strong D traps. The difference lies in the amount of D enhancement and the de-trapping energies of D. Further analysis of D retention based on TMAP simulation will be conducted to help understand the effect of declining temperature range on D diffusion, trapping, and defect evolution.

The observed differences in D-induced surface blistering and D retention under various temperature-declining exposures emphasize the importance of temperature range in shaping the behavior of D aggregation and trapping in both W and Pre-W, along with the influence of pre-damage, contributing to a deeper understanding of D retention in W under different irradiation conditions.

A03-P55

Revealing the interaction mechanisms of substitutional and interstitial solutes in metals through machine learning

Kang-Ni He, Rui Wang, Guo-Zheng Feng, Liang Chen, Xiang-Shan Kong*

山东大学材料学院模拟计算组

The interaction among point defects in metals significantly influence the microstructure and property evolution of metals, possessing both fundamental research value and practical engineering significance. Tungsten, with its high melting point, low hydrogen retention, and low sputtering rate, has become a primary candidate material for the plasma-facing materials of fusion reactors. Using first-principles calculations, we have systematically established a database of binding energies for the interactions between transition metal solutes and common light solutes such as hydrogen, oxygen, carbon, and nitrogen in tungsten. Furthermore, we investigated the solubility and diffusion characteristics of these solutes, providing explanations and guidance for related experiments. Building upon this foundation, we applied machine learning (ML) methods, utilizing our group's accumulated data and literature survey data, to extend the research system from tungsten to other body-centered cubic (BCC) and face-centered cubic (FCC) metal hosts. Employing wrapper feature selection method, we systematically optimized the features and, combined with advanced ML interpretation approach SHapley Additive exPlanations (SHAP), we thoroughly analyzed the complex relationships between binding energy and feature parameters. This analysis intuitively and quantitatively illustrated the contribution size and direction of various factors to the binding energy, laying a foundation for the subsequent feature selection of multi-substitutional-interstitial solutes and substitutional-interstitial-vacancy clusters. Based on the aforementioned steps, we have established a high-precision predictive model for solute binding energies in BCC and FCC metal hosts. This model predicts the binding energy data for 3,542 alloy systems involving substitutional-interstitial solutes at minimal computational cost.

A03-P56

原位研究 He+辐照过程中缺陷阱对微观组织演变的影响黄金池^{*1,2}、韩秉锟^{1,2}、曹子奇^{1,2}、丁一帆^{1,2}、钟庆鸿^{1,2}、周哲辉^{1,2}、马雁³、冉广^{1,2}

1. 厦门大学

2. 福建省核能工程技术研究中心

3. 华北电力大学

空间热离子核反应堆服役过程中，裂变中子及其嬗变的氦会对发射极材料持续辐照，导致材料中产生间隙原子、空位以及嬗变产生的氦组成的基本辐照缺陷，这会导致材料的肿胀和硬化，降低其寿命，甚至严重威胁到反应堆电源的运行。材料中常见的缺陷阱，如预先存在位错、第二相粒子、自由表面对辐照导致的缺陷团簇（间隙原子和空位）有强力的吸收作用，但是较少的研究，尤其是原位跟踪它们对辐照缺陷的作用。本文利用透射电镜（TEM）系统研究了原位 30 keV He⁺辐照下 Mo-6Nb 合金第二相粒子、预先存在位错和自由表面周围辐照诱导点缺陷的微观组织演变。统计结果表明，在不同缺陷阱处，环的大小和密度有很大差异。分散的第二相粒子可以有效地分散缺陷，并在界面处提供重合点，从而抑制成核，降低密度。线性预先存位错对位错生长的抑制作用更大。而第二相粒子与预先存在位错的耦合区不仅可以抑制晶核的形成，还可以抑制晶核的生长，并且与密度和形状有关。同一根位错上的不同形态的片段表明，螺旋位错的出现与位错的性质有关，辐照缺陷提供了螺旋形成所需的钉住位点和原子，最后，自由表面的作用力加速了螺旋的形成。自由表面还可以引起环的旋转并向特定方向移动，最终与{-11-2}平行，形成“绒毛”状结构。。目前的研究结果对了解钼合金的辐照行为和优化制备工艺具有重要意义。（该工作得到国家自然科学基金(12275083 和 12105238)的经费支持）

A03-P57**体心立方金属中位错环交节类型与三维形貌的弹性调控机制**丁一帆¹、李奕鹏²、曹子奇¹、冉广^{*1}

1. 厦门大学

2. 北京航空航天大学

在体心立方（bcc）金属中，位错环之间的交互作用在调控微观结构演化与辐照硬化性能方面具有关键作用。尽管<100>型位错交节在理论上被广泛预测为辐照过程中位错环合并的重要产物，其三维几何结构及弹性能却因缺乏直接实验数据而长期未明。本研究通过原位扫描透射电子显微镜（STEM）技术联合分子动力学模拟，首次清晰揭示了 bcc 金属中位错环可通过滑移旋转其惯习面以形成近螺型<100>交节，这一现象突破了几何限制下应形成刃型交节的传统观点。进一步分析表明，交节类型由位错自能的减少与旋转惯习面引起的能量增加之间的竞争决定，其本质受弹性各向异性主导。在不同 bcc 金属中，弹性各向异性比 A（ $A=2C_{44}/(C_{11}-C_{12})$ ）是预测交节类型的关键参量。在实验和模拟上均发现，短交节易发生面外拱起，这一行为由位错环间的相互作用能驱动，且拱起程度随位错环半径增大呈幂律衰减，在约 18 nm 处表现出清晰的平面-拱起转变界限。该研究不仅建立了<100>交节形成的统一弹性判据，而且为辐照条件下三维位错网络的形成机制及其缺陷演化行为提供了新的理论与实验依据。

A03-P58**离子辐照剂量率与 H/He 协同影响纯铁中位错环演化行为与机制的研究**曹子奇^{1,2}、钟庆鸿^{1,2}、黄金池^{1,2}、冉广^{*1,2,3}

1. 厦门大学能源学院

2. 福建省核能工程技术研究中心

3. 厦门大学材料学院

离子辐照是模拟中子辐照研究材料微结构损伤特征与过程的高效方法。然而，离子辐照普遍存在剂量率过高和核反应产物（如氢、氦）缺乏的问题，这使得离子辐照实验结果与中子辐照实验结果存在差异。

因此,厘清剂量率与氢氦作用对位错环演化行为的影响及机制,对于理解离子辐照技术的有效性具有重要意义。本研究选用体心立方结构的纯 Fe 为研究材料,开展了 Fe 单束、Fe + He 双束协同以及 Fe + He + H 三束协同原位离子辐照实验,在保持氢氦载量恒定(45 appm H/dpa 和 10 appm He/dpa)条件下,进行了剂量率从 10^{-5} ~ 10^{-3} dpa/s 变化下的室温和 723 K 的位错环演化过程与特征的跟踪。对位错环成核、生长、迁移及形态演化进行了量化分析。研究结果表明:在 Fe 单束辐照条件下,位错环的迁移频率和尺寸对剂量率高度敏感,高剂量率显著促进小尺寸环的快速形成与一维迁移且密度增大,而且会导致大尺寸位错环进行迁移。在引入 He 离子后,位错环形核提前发生,低剂量率条件下易形成大尺寸<100>位错环,而高剂量率下<100>环比例降低,形成更多小尺度<111>位错环并发生惯习面的转变。在 Fe+ He + H 三束协同辐照中,氢与氦的共同作用进一步放大了剂量率对位错环演化行为的影响,与 Fe + He 双束协同的结果相似。本研究结果对理解离子辐照技术研究材料辐照损伤行为的有效性提供了实验数据和理论参考。

A03-P59

原位 TEM 研究 RPV-16MND5 焊缝在 Fe+辐照中的析出相演化行为与机理

于虎城^{1,2}、曹子奇^{1,2}、黄继勇^{1,2}、丁一帆^{1,2}、冉广*^{1,2,3}

1. 厦门大学能源学院
2. 福建省核能工程技术研究中心
3. 厦门大学材料学院

长期中子辐照使反应堆压力容器(RPV)钢在服役过程中逐渐发生脆化,这与 RPV 钢中的辐照引起的析出相、位错环、溶质团簇、元素偏聚等微结构的演化直接相关。焊缝作为压力容器的关键部位,其脆化行为倍受关注。尽管焊缝材料中 M3C 析出相已被广泛关注,但其抗辐照性能和相稳定性在很大程度上尚未得到清晰认识。本研究通过原位透射电镜研究了压力容器焊缝材料中 M3C 析出相在 400 keV Fe+辐照下从室温至 550°C 温度范围内的演化行为与机理。明确了 M3C 析出相从晶体到非晶转变的临界剂量与温度内在关系。在低温区域(< 300°C),临界剂量几乎与温度无关,辐照至 3 dpa 即可发生非晶化,而在较高温度下,温度升高显著延缓了非晶化过程,在 550°C 辐照至 8 dpa 才观察到非晶化现象。在各个温度下的辐照期间,均未观察到 M3C 析出相的明显溶解。STEM-EDS 结果表明,M3C 析出相以及焊缝基体中的 C、Mn 会向相界扩散,导致 C 和 Mn 在相界发生偏聚。此外,原子探针断层扫描(APT)结果表明,550°C 辐照至 10 dpa 后,焊缝基体中出现典型的富 Mn-Ni-Si 溶质团簇,并且观察到 Mn、Ni 元素偏聚在位错环上,这或许可以解释由于 Mn、Ni 溶质原子与位错环的相互作用,使得 550°C 辐照下<100>位错环占比显著下降。本研究结果为进一步理解中子辐照环境下的 RPV 钢焊缝性能衰退提供了实验数据与理论参考。

A03-P60

铝合金中 Mg₂Si 相和富 Si 相的辐照缺陷演化行为研究

刘正煜^{1,3}、王左江^{1,3}、曹子奇^{1,3}、朱士坤^{1,3}、冉广*^{1,2,3}

1. 厦门大学能源学院, 福建 厦门 361102
2. 厦门大学材料学院, 福建 厦门 361002
3. 福建省核能工程技术研究中心, 福建 厦门 361102

5xxx 系列铝合金作为固溶强化材料具有优异的机械强度、耐腐蚀性和抗辐照肿胀性,被认为是未来先进研究堆的重要结构材料。然而在反应堆中,铝合金材料受到中子辐照后,Al 将嬗变形成 Si,进而持续形成 Mg₂Si 和富 Si 析出相。析出相界面作为强缺陷阱,会与辐照缺陷相互作用从而影响材料的微观结构和力学性能。然而,这些析出相对辐照自间隙原子和空位与气体原子的影响及机制至今仍未被充分阐明。本研究在原位透射电子显微镜中对预先形成的 Mg₂Si 和 Si 析出相的 5xxx 系铝合金在室温及 523-603 K 进行了 400 keV Al⁺和 30 keV He⁺辐照,研究了析出相及附近辐照缺陷的演化行为及机制。结果表明,在相同辐照损伤和 Al/He 离子辐照下,发现 Mg₂Si 与富 Si 析出相附近的缺陷演化存在显著差异;以及 Mg₂Si 尺寸影响周围位错环或内部 He 泡的形成速率,但不改变缺陷在界面分布特征。Mg₂Si 内部与基体的 He 气泡尺寸

和密度相似。辐照下 Mg_2Si 与基体中的气泡行为相近；退火中，由于 He 原子和空位迁移率差异导致了 Mg_2Si 内气泡生长更快。由于析出相的界面特征不同，富 Si 析出相没有表现出与 Mg_2Si 中的类似气泡演化特征。本研究结果对于理解含 Mg 元素的铝合金辐照行为提供实验数据参考。

A03-P61

原位辐照与退火研究螺旋位错周期性螺旋化及其解离机制

王为一^{1,2}、崔德旺^{1,2}、曹子奇^{1,2}、冉广*^{1,2,3}

1. 厦门大学能源学院
2. 福建省核能工程技术研究中心
3. 厦门大学材料学院

螺旋位错作为金属材料中常见的一类晶体缺陷，能够有效影响其他位错的迁移，从而对材料的塑性变形和力学性能产生重要影响。尽管以往对螺旋位错的初始形成行为与机制进行了研究与探讨，然而在辐照与随后退火过程中的螺旋位错的演化行为与机制仍缺乏系统性的研究。本研究以 Mo-5Re 合金为研究对象，采用 800 keV Kr^{2+} 和 30 keV H_2^+ 双束协同辐照技术，在 650°C 下原位研究了螺旋位错演变特征；随后将温度提升至 950°C 进行原位退火，探究了辐照过程与高温退火过程中的螺旋位错结构的形成、解离与恢复行为。结果表明，辐照导致螺旋位错呈现出显著的非对称周期性特征：螺旋的一侧在辐照下逐渐呈现明显的二次螺旋，而另一侧始终保持光滑。二次螺旋结构的形成与位错段的固有性质（螺型/刃型占比）密切相关。位错段以螺型还是刃型为主决定了点缺陷沿位错核的不同管道扩散路径，从而产生了一种新的二次螺旋弯曲机制。在高温退火阶段，随着温度升高，空位的热激活显著增强，驱动位错环及二次螺旋结构吸收空位而收缩与湮灭。同时，在原子沿位错线的管道扩散导致位错自攀移和空位的体扩散导致初始螺旋位错结构逐渐解离。这一发现不仅深化了对辐照损伤条件下位错演化的认知，也为理解高温环境下材料的微观结构稳定性提供了新的见解。

A03-P62

原位辐照研究温度对钼铼合金中筏状位错环形成与演化的影响

韩秉铨^{1,2}、崔德旺^{1,2}、曹子奇^{1,2}、王为一^{1,2}、冉广*^{1,2,3}

1. 厦门大学能源学院
2. 福建省核能工程技术研究中心
3. 厦门大学材料学院

钼铼合金凭借其优异的高温综合性能，成为了空间核反应堆堆内结构材料的理想候选者。然而在长期辐照环境中服役时，钼铼合金将遭受载能粒子辐照、高温和应力作用等，在其基体中形成位错环、气泡、空洞等辐照缺陷，产生辐照脆化与硬化、辐照肿胀与生长、辐照蠕变等，导致宏观性能发生显著衰退。其中，辐照位错环在温度与应力等作用下将沿特定取向形成排列一致的线状缺陷（筏状位错环），然而对于其形成与演化及物理机制，至今仍然未有清晰的认识与理解。本研究以 Mo-5Re 合金为研究对象，在透射电子显微镜中对其进行 He^+ 辐照，开展了 500°C 、 600°C 、 700°C 和 800°C 下的原位表征与分析，以探究温度对筏状位错环形成与演化的影响。结果表明，温度显著影响筏状位错环的形成与演化过程。较低温度下，筏结构的形核与生长困难，难以形成筏结构，这归因于低温对位错环一维运动的抑制。随辐照温度升高，筏结构的形核变得容易、孕育期缩短；温度增加了位错环相互作用的几率，促进了筏结构形成。然而，当温度进一步升高之后，筏结构变得不稳定。因此，筏结构形成的难易程度强烈依赖于辐照温度与辐照剂量。本研究结果为理解筏状结构的形成与演化提供了实验数据参考。

A03-P63

一种应用于 Wigner-Seitz 缺陷识别的参考晶格自适应重构方法

李文华、高宁*

山东大学

本研究提出了一种基于分子动力学模拟(MD)步骤中每一或特定模拟步的原子结构来自适应重构 Wigner-Seitz 点缺陷识别所需的参考晶格的新方法。该方法能够准确且高效地获取在位移级联与位错相互作用后形成的点缺陷以及复杂缺陷团簇等缺陷信息,以及它们与位错的相互作用过程。本文详细介绍了相关算法及其验证方法。研究结果表明,该方法在识别位移级联与位错线以及位错网络相互作用过程的辐照缺陷方面表现出很好效果,能够准确识别所有简单和复杂的缺陷及缺陷团簇。因此,该新方法为原子尺度上探索复杂 MD 演化后辐照缺陷的密度和尺寸提供了一种全新的途径,从而为原子尺度理解和预测材料中的辐照损伤提供了更准确的信息。

A03-P64

钨中小空位团簇的扩散和解离

曹紫阳、孔祥山*

山东大学材料学院模拟计算组

金属钨由于具有高熔点、低氢滞留、低溅射率等许多优点,已成为聚变堆面向等离子体的主要候选材料。钨在被中子辐照后会产生损伤,在内部产生空位团簇,在服役于高温或辐照环境下,这些空位团簇的扩散会加速空洞、气泡等微观结构的形成进而影响材料的服役性能和服役寿命。扩散系数描述了空位团簇在晶格中的迁移能力,是预测材料长期稳定性和缺陷演化的重要参数。空位团簇的存活寿命则衡量了空位团簇在解离的存续时间,直接影响材料的宏观扩散行为和缺陷演变。因此,准确计算钨中空位团簇的扩散系数和存活寿命,不仅有助于深入理解微观扩散机制,还能为材料的优化设计和抗辐照性能提升提供理论依据。我们编写了一套 C 语言程序,采用了时间停留算法,设定超胞结构,构建跃迁能垒库以及在空位每次跃迁前构建跃迁事件表等方式来模拟钨中小空位团簇的跃迁行为,从而计算小空位团簇的扩散系数和存活寿命,并拟合阿伦尼乌斯方程来得到小空位团簇的扩散激活能和指前因子。研究发现三空位团簇的扩散系数显著高于单空位扩散和双空位扩散,具有成为空位和嬗变元素扩散的主要机制的潜力。

A03-P65

锆合金在纯水、LiOH 水和 DO 水中的腐蚀行为差异

刘庆冬*

上海交通大学

采用透射电子显微镜(TEM)结合旋进电子衍射(PED)与电子能量损失谱(EELS)技术,研究了 Zr-0.45Sn-0.38Nb-0.30Fe-0.05Cu-0.015Si-0.13O 合金(质量分数,wt.%)在 360 °C、18.6 MPa 的纯水、LiOH 水和溶解氧(DO)水环境中腐蚀 300 天的氧化行为,分析了氧化膜及 O/M 界面处微观结构、织构特征及成分分布的差异。结果表明,Li⁺的引入显著破坏了氧化膜的柱状晶粒结构,增加晶界密度,从而加速 O²⁻的扩散,诱导较早的腐蚀转折。相比之下,DO 水环境下初期腐蚀速率显著提高,导致氧化膜晶粒畸变加剧,织构减弱,其与氧化膜的快速生长相关。在 Li⁺水和 DO 水的 O/M 界面均观察到 h-ZrO₂ 层,其出现与腐蚀阶段及应力状态密切相关。纯水和 Li⁺水环境中的氧化膜织构演化表现出一定的周期性,反映出锆合金腐蚀的应力驱动机制;而在 DO 水中,由于晶粒严重畸变而导致应力释放及腐蚀转变受抑,未观察到类似的织构周期性演化。本研究强调了水化学环境及应力状态在调控锆合金腐蚀机制中的关键作用。

A03-P66

NbZrTi 基多主元合金辐照行为研究

苏钲雄*、卢晨阳

西安交通大学

传统面心立方结构 (FCC) 多主元合金 (MPEAs) 的中子吸收截面较高, 且高温力学性能不足, 而体心立方结构 (BCC) MPEAs (如 NbZrTi 基合金) 因兼具低中子吸收截面、高温稳定性及潜在抗辐照性能备受关注。然而在高温辐照条件下, 材料的 He 泡肿胀、位错环与析出相的演化仍是制约其应用的关键问题。近年来人们发现在 NbZrTi 中掺杂间隙氧原子可以有效提高材料的强塑性, 但间隙氧原子对辐照损伤行为的影响还未被揭示。本工作提出了通过间隙氧原子优化 NbZrTi 基合金局部化学有序 (LCO) 和晶格畸变的普适设计策略。这归因于间隙氧增强了 LCO 程度和晶格畸变, 从而减缓了间隙原子和氦原子的扩散, 最终降低了氦泡的成核和生长速率和限制了位错环的增大。本研究证明了使用间隙氧来调节难熔高熵合金中 LCO 和局部晶格畸变的有效性, 这一策略不仅提高了合金的辐照耐受性, 还有望为先进核反应堆中的合金设计提供有前景的路径。

A03-P67

低活化铁素体马氏体钢中氦渗透和滞留行为研究

李文翔^{1,2}、金伟^{*1}、朱吉鹏¹、刘徐徐¹、董春风²、叶小球¹、陈长安¹

1. 四川江油表面物理与化学重点实验室

2. 西华大学

低活化铁素体/马氏体钢是聚变堆的重要结构材料。然而, 其长期服役过程中氢同位素的滞留会导致材料性能退化, 氦的渗透也会带来燃料损失和安全隐患。因此, 研究氢同位素在 RAFM 钢中的渗透行为具有重要的科学和工程意义。本研究使用气相驱动渗透法获得了国产的一种低活化铁素体/马氏体钢 (CLF-1) 在 (623~823) K 温度范围内的氦渗透率、扩散系数和溶解度; 通过拟合不同气压下的稳态渗透通量, 首次得到了气相氦在 CLF-1 钢表面的解离和复合系数, 分别为 $\sigma_{k_d}=2.6 \times 10^{-7} \exp(-86 \text{ (kJ} \cdot \text{mol}^{-1})/\text{RT}) \text{ mol} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{Pa}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ 和 $\sigma_{k_r}=3.78 \times 10^{-5} \exp(-56 \text{ (kJ} \cdot \text{mol}^{-1})/\text{RT}) \text{ m}^4 \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ 。实验发现了 CLF-1 钢中氦的反常渗透现象, 即渗透通量达到峰值后逐渐降低, 后又伴随温度调控的缓慢的上升或者持续降低。通过气相热充制备钢-氦相互作用样品, 利用程序升温脱附谱技术结合自主开发的氢输运模型解析, 发现 CLF-1 钢中的氦捕获位点类型主要为空位型团簇 (活化能~0.78 eV) 和位错 (活化能~1.87 eV), 高温下位错逐渐占主导。XRD 表征显示, 不可逆氢捕获效应和氢诱发相变是引起 CLF-1 钢中氦反常渗透的主要机制。

A03-P68

氦等离子体辐照对 WTaTiVCr 难熔高熵合金与纯钨微结构的影响

蒲国*

西南科技大学

本研究通过真空热压烧结技术制备了 WTaTiVCr 难熔高熵合金 (RHEAs)。在合金中, 低熔点的 Ti 元素倾向于在枝晶间分布, 形成富 Ti 的析出物; 而高熔点的 W 和 Ta 元素则主要分布在枝晶内部, 与其他元素共同构成了体心立方 (BCC) 相和 Laves 相。通过对比在氦 (He) 等离子体辐照下的 WTaTiVCr RHEAs 与纯 W, 我们发现两者的相结构均保持稳定。然而, 由于等离子体辐照导致的表面溅射效应以及损伤区域产生的结构缺陷, 通过计算得出的晶粒尺寸均有所减小。在辐照注量为 $8.19 \times 10^{25} \text{ m}^{-2}$ 时, WTaTiVCr RHEAs 和纯 W 的表面都观察到了突起和空洞的形成。当辐照注量增加到 $1.16 \times 10^{26} \text{ m}^{-2}$ 时, RHEAs 的 BCC 相中出现了更为密集的绒毛结构, 而富 Ti 相中则主要形成了含有大量空洞的非密集绒毛结构, 这种结构与纯 W 表面的绒毛结构相似。研究揭示, 辐照缺陷和表面溅射效应共同作用促进了表面突起和纳米绒毛的形成, 并通过离子刻蚀过程揭示了绒毛是由突起逐渐转变而来的形成机制。与处于相同等离子体环境下的纯 W 相比, RHEAs 的质量损失较小。分析认为, 纯 W 表面大量的蚀刻空洞是导致其在高密度 He 等离子体溅射下产生较大质量损失的主要原因。

A03-P69

第一性原理研究 Be 在 Mo (110) 表面的吸附, 扩散和聚集行为

李海俊、刘悦林*

烟台大学

深入理解铍 (Be) 杂质在钼 (Mo) 表面的沉积行为对于 Mo 作为托卡马克装置第一镜材料的应用具有非常重要的意义。本文应用第一性原理计算方法, 系统研究了 Be 原子在 Mo(110)表面及近表面区域的热力学稳定性、扩散行为以及结合与聚集特性。Be 原子吸附于 Mo(110)表面 Hollow 位置最稳定, 随着 Be 原子吸附个数的增加, 其平均吸附能逐渐减小且由吸热转为放热。两个 Be 原子倾向于在两个相邻的 Hollow 位置沿着<111>方向结合成对, 其结合能和最佳距离分别为 0.46 eV 和 2.26 Å。多个 Be 原子在 Mo(110)表面也倾向于结合聚集形成 Ben 团簇, 这些团簇以类平行四边形结构排布并且存在较大结合能。在 Mo(110)近表面体内区域几层, 相同深度下 Be 原子都倾向于占据 OIS 位置。随着溶解深度增加, 我们分析了 Be 原子总溶解能、结构贡献溶解能以及电子相互作用贡献溶解能等三者的关系, 无论从数值大小还是变化趋势, Be 在 Mo(110)近表面体内区域几层 OIS 间隙位总溶解能主要来自于结构溶解能的贡献。Be 在 Mo(110)表面吸附层的最优扩散路径为 Hollow→Bridge→Hollow, 其扩散能垒为 0.57 eV; 而从表面向体内扩散时, 其最优迁移路径为 Hollow→OIS1→OIS2→OIS3→OIS4→OIS5, 其相应扩散能垒分别为 3.69 eV、0.46 eV、0.93 eV、0.55 eV 和 0.65 eV; 进入体内之后, 其最佳迁移路径为 OIS→TIS→OIS, 其扩散能垒为 0.72 eV。在相同温度下, Be 原子的扩散系数随着深度的增加逐渐趋近于在本征 Mo 体系的扩散系数。Be-Be 原子对在 2il 层和 3il 层上 (选取 2il 层和 3il 层作为例子) 存在最佳作用距离分别为 1.96 Å 和 1.93 Å 并且此时具有最大结合能分别为 1.10 eV 和 1.20 eV。同时, Be-Be 原子对之间距离小于~3.80 Å 时, 它们之间的结合能均为正值, 表明此时 Be-Be 原子对的最大作用距离范围为~3.80 Å; 而对于相邻各层之间 Be-Be 原子对的结合, 我们发现分别位于 3il 与 4th 的两个 Be 原子 (即 4th-3il Be-Be 对) 具有最大的结合能。多个 Be 原子在近表面区域聚集时, Ben 团簇极易挤走近邻 Mo 原子形成团簇核。这些研究结果为预测 Mo 作为第一镜材料性能优化设计以及清洗方案提供了原子尺度理论依据。

A03-P70

第一性原理研究铍在钼中能量和聚集行为以及空位和自间隙的影响

莫翱瑜、李海俊、邵鹏、李波、杨坤杰、刘悦林、韩全福*

烟台大学核装备与核工程学院

铍 (Be) 在等离子体辐照后的聚集行为对未来聚变装置中的钼 (Mo) 具有重要意义。利用第一性原理计算结合热力学模型, 明确确定了铍在钼中聚集的最佳构型, 特别关注了空位和自间隙 (SIAs) 的影响。作为成核的初始形式, Mo 中 Be-Be 对结合能的物理来源主要是由其位置的电荷密度决定的。基于我们所有的计算结果, 我们提出了 Mo 中富 Be 区形成的潜在聚集机制: Be 原子首先聚集在间隙位置, 形成 Be_n 簇。当 Be 原子数达到 6 个时, 它们形成一个近似“八面体”结构, 取代中心的 Mo 原子, 产生 Be₆V 簇和 SIA。它们充当成核位置, 继续吸引更多 Be 原子, 成长为更大的 Be_nV 和 Be_n-SIA 簇。随着 Be_n-SIA 簇的膨胀, 过量的 Be 原子取代了更多的 Mo 原子, 产生了额外的 SIAs 和空位, 并进一步传播了 Be_n-SIA 和 Be_nV 簇的形成。这一级联过程最终导致 Mo 内部富 Be 区域的发展。我们的研究结果为推进 Mo 作为第一镜材料提供了重要的数据支持, 也为辐照条件下金属中杂质的聚集行为提供了有价值的理论见解。

A03-P71

基于机器学习 MTP 势函数研究钨晶界处氢输运行为

wmq wei、qi wang*

中国工程物理研究院材料所

摘要：了解氢在钨中的传输和保留机制对于开发用于核聚变应用的坚固的等离子体面材料至关重要。钨中的晶界（GBs）通过作为快速扩散路径或强俘获位点显著影响氢的迁移率。在这项研究中，我们通过主动学习开发了一个定制的矩张量势（称为 MTP-GBs-WH），使大规模分子动力学模拟具有接近密度泛函理论的精度，但大大提高了计算效率。系统模拟了 8 种具有代表性的 GB 结构，揭示了氢扩散活化能谱分布，反映了不同的 GB 结构特征。扩散活化能随 GB Voronoi 体积的增大而减小，随 GB 能量的增大而增大。我们详细的结构分析揭示了两种主要的氢传输机制：隔离在孤立势阱内的“势阱跃迁”和通过相互连接的通道的“平面跃迁”。利用轻推弹性带计算和局部结构分析，我们证明了氢的迁移路径和能垒可以从 GB 结构中解释。这些发现提供了对 GB 几何形状和氢输运之间相互作用的全面的原子水平理解，为未来聚变反应堆中钨基材料的设计和评估提供了有价值的见解。

ABSTRACT: Understanding hydrogen transport and retention mechanisms in tungsten is critical for developing robust plasma-facing materials for nuclear fusion applications. Grain boundaries (GBs) in tungsten significantly influence hydrogen mobility by serving either as rapid diffusion pathways or as deep trapping sites. In this study, we develop a tailored moment tensor potential (termed as MTP-GBs-WH) through active learning, enabling large-scale molecular dynamics simulations with near-density-functional-theory accuracy but dramatically enhanced computational efficiency. Systematic simulations of eight representative GB structures reveal a wide spectrum of hydrogen diffusion activation energies, reflecting diverse GB structural characteristics. A strong correlation emerges: diffusion activation energies decrease with increasing GB Voronoi volume and increase with rising GB energy. Our detailed structural analyses uncover two primary hydrogen transport mechanisms: “basin hopping” within isolated potential wells and “planar migration” through interconnected channels. Employing nudged elastic band calculations complemented by local structural analyses, we demonstrate that hydrogen migration paths and energetic barriers can be interpreted from GB structures. These findings provide a comprehensive atomic-level understanding of the interplay between GB geometry and hydrogen transport, offering valuable insights for the design and evaluation of tungsten-based materials in future fusion reactors.

A03-P72

Identifying optimal metallic solutes for stabilizing and strengthening uranium twin-boundaries a high-throughput computational approach

Guoqing Zhang*

Institute of Materials, China Academy of Engineering Physics

Twin boundaries (TBs) significantly influence the mechanical properties and corrosion behavior of uranium alloys, yet strategies to enhance their stability and strength remain poorly understood. Here, we systematically investigate the segregation behavior and strengthening effects of 29 metallic solutes at the α -U (130) TB using high-throughput first-principles calculations. By analyzing local atomic cluster structures and segregation energies, we identify clear periodic trends in segregation energies across 3d, 4d, and 5d transition-metal series, primarily driven by atomic size mismatch and chemical bonding interactions. Quantitative correlations between segregation energies and atomic-scale descriptors are established to elucidate segregation mechanisms. Through high-throughput computational screening, several solutes (Re, Os, Ti, Nb, Hf, Ta, and W) are identified as optimal solute candidates that effectively enhance TB cohesion and mechanical properties. These findings provide a fundamental atomic-scale understanding and practical guidelines for designing uranium alloys with enhanced TB stability and mechanical performance.

A03-P73

稀土型金属氢化物（氢化钪）在不同环境气氛下的释氢动力学研究

王涵、马明旺*、阮周石林、王杏、李健达

微型核反应堆作为先进核能系统的重要发展方向,对结构紧凑、慢化能力强且具备良好热稳定性的慢化剂材料提出了更高要求。氢化钪(YH₂)凭借其高氢原子密度和优良的热物理性能,被视为新型金属氢化物慢化剂的有力竞争者。考虑核反应堆内气体成分,研究不同环境气氛下氢化钪的释氢动力学过程,对评估其在堆芯内工作的慢化效率和工作寿命具有重要意义。

本文利用精准控制温度、氢流量与氢压的方法制备了无裂纹块状氢化钪(YH₂)样品,避免了充氢过程中样品内部的应力集中造成的裂纹萌生。采用热重-热吸谱(TG-TDS)技术研究了氢化钪在高纯氩气、高纯氢气、真空三种典型气氛环境下的释氢过程,结合X射线衍射(XRD)、X射线光电子能谱(XPS)和扫描电子显微镜(SEM)等表征技术分析了解氢前后样品的相结构与形貌变化。实验结果表明,环境气氛对释氢行为具有显著影响。在惰性氩气和氢气环境中,YH₂的释氢过程以相结构的变化为主,其起始释氢温度较高。相比之下,在真空环境中由于表面气压较低,促进了氢气逸出,整体释氢过程向低温段偏移。不同气氛下氢热脱附曲线的对比分析表明,气相对氢化钪的释氢过程影响显著,高纯氢气环境下氢化钪体现的较强热稳定性。

A03-P74

空位对 AlNbTiZr/Zr 界面稳定性影响的第一性原理研究

王青青¹、孔祥刚¹、虞游²、信天缘¹、潘荣剑¹、赵民¹、覃检涛¹、马聪¹、吴璐*¹

1. 中国核动力研究设计院
2. 成都信息工程大学

当 AlNbTiZr 涂层中存在缺陷时,AlNbTiZr/Zr 界面的结构和性能会发生显著变化。然而,缺陷对界面结合的影响缺乏定量评估,实验研究的结果也难以指导界面结构的设计。本工作通过第一性原理计算研究了具有不同类型的空位缺陷和空位形成能的 AlNbTiZr/Zr 界面结构,并通过量化界面能和粘附功来研究界面结合稳定性。有趣的是,VacZr(Zr 空位)的 VFE 在界面的基体侧比在纯 Zr 中更高,使其更难形成。这意味着高熵涂层抑制了空位的形成,增强了 Zr 包壳的初期抗辐照性能。无论空位原子的类型,含有空位的界面能更高,粘附功低于完美界面。因此,它们比完美界面更不稳定,这意味着空位削弱了界面的稳定性。此外,具有 VacAl(Al 空位)的界面表现出最差的稳定性。可以推断,在实验研究中,应尽量减少涂层界面处 Al 空位的浓度。根据电荷分析结果,与含有空位的界面相比,完美界面处的电荷重排和积累更为显著。此外,Al-p 与 Zr-eg 和 Zr-t_{2g} 轨道的分波态密度表明,在完美界面处存在更强的电子耦合,表明化学键更强。这进一步证明了空位削弱了界面的结合强度和稳定性。目前的结果从界面稳定性的角度为讨论空位对 AlNbTiZr/Zr 界面性能的影响提供了新的见解,对 Zr 合金包壳高熵涂层领域具有重要意义。

A03-P75

高 Cr 镍基合金中 Mo 元素对点缺陷产生及扩散影响机理研究

孔祥刚、王青青、吴璐*

中国核动力研究设计院

核电作为一种能量密度高、清洁、可持续能源,是解决全球能源短缺和环境污染问题的重要途径之一。正如原子能之父费米所说:“核技术的成败取决于材料在反应堆中强辐射场下的行为”。材料的堆内服役性能直接决定了反应堆的经济性和安全性。性能优良的核燃料包壳材料是保证核反应堆安全运行的关键问题之一,开发新型耐事故材料仍是反应堆发展所急切关注的问题。42KhNM 铬镍合金以其优异的高温抗氧化性、高强度和高韧性、较好的耐高温蒸汽腐蚀和抗辐照性能,作为燃料元件包壳材料时可大大延长换料周期。但是 Mo 元素在合金中对点缺陷的产生及扩散影响机理尚不清楚。本研究采用第一性原理方法和经典分子动力学方法计算了自间隙原子和空位形成能及扩散势垒。考虑了 fcc 金属中 SIA 的六种传统对称构型:挤列子(C)、劈裂子<100>哑铃(S100)、劈裂子<110>哑铃(S110)、劈裂子<111>哑铃(S111)、八面体(O)、四

面体(T)。计算结果显示劈裂子<100>哑铃(S100)最为稳定形成能约为 3.936 eV, Mo 原子的加入, 降低了形成能至 3.500 eV, 使其更容易形成。相邻劈裂子<100>哑铃(S100)位点扩散时, 势垒由无 Mo 原子存在时的 0.386 eV 降低为 0.238 eV, 使其更容易扩散。采用经典分子动力学方法分析了发生级联碰撞时 Mo 元素对缺陷演化规律的影响, 模拟结果发现达到顶峰状态时, Mo 存在的条件下出现更多的缺陷, 而恢复到稳定阶段时又发生更多的复合, 这与第一性原理计算得到的结果相一致。这表明 Mo 元素存在的情况下, 导致缺陷更容易形成, 但也更容易扩散发生复合。

A03-P76

基于修正 GTN 模型的 9Cr 铁素体/马氏体钢散裂中子辐照后损伤断裂模拟

邹人和、朱文涛、刘逸飞、解尧、时靖谊、彭蕾*

中国科学技术大学

9Cr 铁素体/马氏体 (FM) 钢因其优异的抗辐照肿胀能力、高热导率以及良好的力学性能, 已被广泛用于先进核反应堆结构材料的设计。然而, 反应堆内高辐照剂量的服役环境会引起材料辐照脆化, 进而对反应堆安全构成严重威胁。目前针对 9Cr FM 钢中子辐照(尤其是高能中子辐照)后的实验数据仍然不足, 因此亟需建立一种可考虑辐照效应的损伤断裂模型。传统 GTN 模型仅适用于高应力三轴度条件, 无法有效描述剪切下的损伤积累及 Lode 参数的作用。本文引入了一种适用范围更广修正 GTN 模型, 并提出一种新的加权组合硬化方程, 提高了材料应变硬化行为的拟合精度, 通过对辐照剂量为 5–20 dpa 的 9Cr FM 钢拉伸试验数据进行反演拟合, 完成了 GTN 参数的校准, 构建了可考虑辐照效应的损伤断裂模型, 并基于最新获得的三点弯曲断裂韧性实验数据进行了模拟验证。模拟得到的拉伸应力应变曲线以及弯曲载荷位移曲线与实验数据高度一致, 充分表明所构建模型能够在不同辐照与试验条件下准确捕捉材料的变形及损伤断裂行为。结合 GTN 参数的物理意义, 本文进一步探讨了辐照剂量、辐照温度以及试验温度对模型关键参数的影响, 为辐照环境下 9Cr FM 钢的损伤断裂建模与工程评估提供了理论支撑。

A03-P77

基于 3D-DIC 方法评估 9Cr 铁素体/马氏体钢的散裂中子辐照后断裂韧性

朱文涛¹、解尧^{1,2}、时靖谊¹、彭蕾*¹、戴勇²

1. 中国科学技术大学

2. 保罗谢尔研究所

9Cr 铁素体/马氏体 (F/M) 钢因具有良好的抗辐照肿胀/蠕变等性能, 被认为是先进核反应堆的主要候选结构材料。在反应堆高温、高辐照剂量的服役环境中, 9Cr-F/M 钢的辐照脆化效应显著, 材料抵抗裂纹失稳扩展的能力降低, 表现为断裂韧性的降低。辐照样品由于反应堆空间有限, 通常尺寸较小且具有一定放射性, 无法使用接触式测量工具, 因此很难精确测量其裂纹扩展以及断裂韧性。三维数字图像相关 (3D-DIC) 作为一种原位测量方法, 可以精确测量样品表面的裂纹扩展和应变场。本文采用三种方法 (卸载柔度法、表面裂纹法和热处理模拟法) 对散裂中子辐照前后 9Cr-F/M 钢的准静态断裂韧性进行了测试表征。通过 3D-DIC 获取了辐照前后 9Cr-F/M 钢在三点弯曲实验中的位移变化和裂纹扩展情况, 其中测得的施力点位移 (LLD) 用于卸载柔度法和表面裂纹法的断裂韧性计算, 弯曲位移 (BD) 用于热处理模拟法的计算。通过建立裂纹扩展-位移关系, 用于估算特定位移下的裂纹扩展情况, 从而计算其断裂韧性。断裂韧性随着测试温度 (室温至 350°C) 或辐照剂量的升高而降低。将三种基于 3D-DIC 获得的断裂韧性结果进行了比较分析。结果表明, 对于辐照后 9Cr-F/M 钢, 三种方法测得结果相近, 表面裂纹法可能会略微低估辐照后样品的裂纹扩展, 略微高估其断裂韧性, 但弥补了在高剂量辐照脆化加剧导致加/卸载循环较少时卸载柔度法无法测量材料裂纹扩展的不足, 且在裂纹扩展-位移关系方面, 相较于热处理模拟法更能体现出不同 9Cr-F/M 钢的材料差异。

A03-P78

EAST 装置偏滤器钨铜穿管部件在原位高热负荷下的表面损伤行为研究

汪洋^{1,2}、朱大焕^{*1}、钱心颜^{1,3}、王琮^{1,3}、丁锐¹、陈俊凌¹

1. 中国科学院合肥物质科学研究院等离子体物理研究所

2. 中国科学技术大学

3. 安徽大学

EAST、WEST、ITER 等中大型托卡马克装置中都将穿管型钨铜部件 (W/Cu monoblock) 作为偏滤器高热负荷部件, 并且由于其优异且可靠的抗热震性能, 有望应用在 CFETR、BSET 等未来聚变堆装置中[1]。过去的数十年, 为评估 monoblock 结构的服役性能做了大量的台面高热负荷测试, 测试结果表明其抗热震性能基本为 10 MW/m^2 下 5000 次循环和 20 MW/m^2 下 300 次热循环[2]。虽然 W/Cu monoblock 部件在台面实验上通过了预期参数的热负荷测试, 但是由于托卡马克装置内部部件服役环境复杂, monoblock 在原位托卡马克内的原位表现存在很多未知。EAST 装置在 2021 年春季实验前将下偏滤器外水平靶板大部分更换为 monoblock 部件, 目的之一就是测试 monoblock 部件在托卡马克原位热流条件下的服役性能。

2021 年, 具有大倒角 ($1.5 \text{ mm} \times 17 \text{ mm}$) 的类似 ITER 的 W/Cu 单体块安装在 EAST 下偏滤器水平靶板上。带倾角的主动水冷 W/Cu monoblock 结构类似 ITER 未来鱼鳞偏滤器偏滤器的设计, 可以降低部件发生熔化的概率, 但也可能导致其他类型的损伤。经过三次等离子体运动, 约 14436 次等离子体试验后, 事后分析发现了明显的表面损伤, 包括壳层的形成、表面粗糙度增加、宏观裂纹、网状裂纹和其他类型的损伤。损伤的空间位置与热通量的环向径向分布程度密切相关。在尖缘区域, 宏观裂纹是由稳态热载荷下的塑性应变引起的, 而微裂纹是由瞬态热载荷引起的脆性裂纹。由于热负荷和入射角的变化, 网状裂纹表现出四种不同的形态特征。在熔化部件附近观察到异常晶粒生长 (AGG), 晶粒尺寸达到异常的 7.1 mm 。裂纹的形成和扩展都与材料的退化有关, 如机械强度降低、断裂韧性降低、脆化增加等。熔融钨(W)和低 Z 碳杂质(C)在极高的温度下可以反应形成碳化钨 (W_2C)。

EAST 下导流器 W/Cu 单体块的这种损坏为这些类似 ITER 的 W/Cu 单体块的使用性能提供了重要的见解, 可以为 ITER 和其他聚变反应堆装置的未来使用提供重要的参考数据

[1] Pitts, R. A. ,et al, A full tungsten divertor for ITER: Physics issues and design status J. Nucl. Mater, 2013, 438, S48.

[2] Hirai, T. ,et al, Status of technology R&D for the ITER tungsten divertor monoblock J. Nucl. Mater, 2015, 463, 1248.

A03-P79

钨中预辐照损伤对氢滞留与脱附影响机理的多尺度模拟

涂嘉蕊^{1,2}、张愿愿^{1,2}、李永钢^{*1,2}

1. 中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所

2. 中国科学技术大学研究生院科学岛分院

摘要: 在聚变反应堆中, 面向等离子体材料在服役过程中将会受到高能的中子以及高束流离子 (氦、氘和氚) 的强烈轰击, 导致材料产生大量的缺陷, 进而引起严重的热力学性能退化及燃料滞留。针对中子辐照下 W 基材料的辐照损伤与氢氦协同问题, 基于实验测得的中子能谱, 采用 SPECTRA_PKI 程序计算初级离位原子 (PKI) 能谱, 利用 IM3D 和 MMonCa 程序分别模拟初级辐照损伤和缺陷演化及其分布行为, 并发展了扩散捕获模型 TDS-DT 程序模拟氢的滞留与脱附, 从而构建了一套高效的多尺度模拟研究方法。系统研究了中子辐照下缺陷的产生演化及其对氢滞留与脱附的影响, 发现了预辐照损伤产生的大量的空位型团簇作为 H 新的捕获点, 极大的增加了 H 在表面处的滞留及脱附温度, 导致了更严重的表面损伤。新的理论方法和研究结果对面向等离子体材料的协同辐照效应具有重要的理论指导意义。

A03-P80

钨中氢饱和滞留的团簇动力学模拟

张愿愿、李永钢*

中科院合肥物质研究院固体物理研究所

氢同位素 (HIs) 滞留是聚变装置中钨 (W) 基面向等离子体材料 (PFMs) 的一个关键问题。微结构, 特别是固有缺陷-位错 (DLs) 和晶界 (GBs), 对 HI 在 W 中的滞留和解吸行为有显著影响。然而, 现有的 DLs 和 GBs 的解析俘获强度模型无法解释典型的 HIs 饱和滞留现象。因此, 我们提出了一种适用于各类微观结构的通用捕获位点模型以改进传统的团簇动力学模型, 模拟了低能高通量氘 (D) 入射 W 后 D 的演化和滞留行为, 得到了与实验定量一致的滞留趋势和深度分布。研究发现: 晶界对 D 最大俘获浓度高于位错, 存在一个临界饱和通量 (10^{23} m^{-2}): 低于该值时, 饱和区域主要在近表面辐照区, 离子诱导缺陷和 GBs 对 D 总滞留起主要作用; 高于该值时饱和区域扩展至更深处, 这是由于 GBs 俘获扩散至体内的 D, 表明高通量下 D 饱和滞留是由于 GBs 对 D 有限俘获。基于俘获位点模型, 期望为聚变堆面向等离子体材料的氢滞留行为与微结构建立定量关联。

A03-P81

SiOC 陶瓷涂层在改善聚变堆用 SiC 和低活化钢异质连接性能方面的应用

罗熠程¹、景玮晨¹、侯文康¹、李靖彤¹、张舒婷²、周刚*¹

1. 中国科学院金属研究所, 沈阳, 10016, 辽宁省沈阳市沈河区文化路 72 号
2. 核工业西南物理研究院, 成都, 610041, 四川省成都市双流区西航港街道黄荆路 5 号

阻氚涂层是解决聚变堆氚自持和氚安全防护的关键技术之一, SiC 作为阻氚涂层中较为热门的材料, 其与低活化钢之间存在热失配问题, 本研究拟设计一种具有缓解热失配的 SiOC 陶瓷涂层来改善两种异质材料的连接性能。通过金属有机化学气相沉积 (MOCVD) 技术在 CLF-1 钢衬底上制备了 SiOC 涂层, 并对其微观结构、化学成分及抗热震性能进行了系统表征。经过分析可得, SiOC 涂层在 1050°C 的温度下沉积后微观表面颗粒均匀致密, 呈现非晶结构, 厚度约为 4 μm , 界面处形成厚度约 400nm 的致密 Cr_2O_3 扩散层, 有效缓解了涂层与基体的热膨胀系数差异; XPS 结果显示涂层内部 Si-O 键占主导地位, 为碳含量较低四面体网络结构, 这种富 O 结构与扩散层中的 Cr 元素构建了 Si-O-Cr 电桥的键合模式, 显著增强涂层与基体的化学结合; 经过 50 次热循环的热震测试后, 涂层未出现开裂、翘曲或脱落现象, 划痕测试的结果显示热震后结合强度仅下降 11%, 展现了优异的抗热震和界面结合性能。本研究结果表明, 使用 MOCVD 技术制备的 SiOC 涂层在聚变堆高温循环的服役环境中具有优异的结合性能, 可作为中间过渡层用以改善 SiC 和低活化钢两种异质材料的连接性能, 为聚变装置面向等离子体部件的设计提供了新思路。

A03-P82

N 对 12Cr 新型铁素体/马氏体钢显微组织和力学性能的影响

周伟^{1,3}、邢炜伟^{2,3}、梁田^{2,3}、郝宪朝^{2,3}、王平¹、马颖澈*^{2,3}

1. 东北大学 材料科学与工程学院
2. 中国科学院金属研究所 师昌绪先进材料创新中心
3. 中国科学院金属研究所 核用材料与安全评价重点实验室

为提升铁素体/马氏体耐热钢在高温服役环境下的持久强度, 常通过添加氮元素以促进 MX 相形成, 并与 M_{23}C_6 碳化物产生协同强化作用。本项研究针对一种新型 12Cr 铁素体/马氏体耐热钢, 系统分析了氮含量 (0.02wt.%, 0.06wt.%, 0.10wt.%, 0.15wt.%) 对该新型铁马钢的显微组织及力学性能的影响规律。研究表明, 随氮含量增加, 组织中 MC 碳化物由汉字状转变为块状, M_{23}C_6 尺寸从 174nm 增至 315nm, MX 相析出量增加, 板条宽度先减小后增大, BN 的数量逐渐增加, 且由块状向条状转变。力学性能呈现先升后降趋势: 氮含量从 0.02wt.% 增至 0.10wt.% 时, 新型铁马钢的室温抗拉强度、屈服强度分别由 948 MPa、790 MPa 提升至 1041 MPa 和 873 MPa, 630°C/230MPa 持久寿命由 124 h 大幅延长至 1112 h; 当氮含量进一步增至 0.15wt.% 时, 抗拉强度、屈服强度和持久寿命分别下降至 985 MPa、774 MPa 和 73 h。性能的提

升源于氮优化 MC 相形貌, 促进 MX 相析出, 细化板条, 同时抑制 $M_{23}C_6$ 过度粗化; 但高氮 (0.15wt.%) 时, BN 数量及尺寸剧增、B 被大量消耗, $M_{23}C_6$ 过度粗化削弱钉扎效应, 导致力学性能恶化。研究表明, 控制氮含量为 0.06wt.%–0.10wt.% 时, 新型铁马钢可兼具优异的高温强度和抗蠕变性能。

A03-P83

核用增材制造 GH3535 合金辐照行为研究

张雯朝、赵霖、张建峰、杨金蕾、李健健*

中国科学院上海应用物理研究所

增材制造技术因其具有高精度、复杂结构制造容易和一体化成型等优势, 为熔盐堆构件制备提供了智能制造的方案。镍基合金具有优越的高温机械性能、耐熔盐腐蚀和耐中子辐照性能, 被认为是小型模块化熔盐堆的候选结构材料之一。本研究采用选区激光熔化 (Selective laser melting, SLM) 技术, 通过优化扫描策略和扫描参数, 成功制得了增材制造 GH3535 合金样品。基于多尺度表征手段 (如 SEM、EBSD、EDS 和 TEM 等), 研究并发现其具有特殊的本征结构 (如位错胞、亚/晶界和析出相等), 并通过拉伸测试进一步验证了其优异的屈服强度 (约 700MPa) 和抗拉强度 (约 900MPa)。为评价增材制造 GH3535 合金是否适用于熔盐堆辐照工况, 开展了氦离子辐照实验。基于纳米压痕测试结果, 发现增材制造 GH3535 合金 (50dpa 的硬化率为 60.85%) 相较于传统铸造 GH3535 合金 (10dpa 的硬化率为 172.55%) 具有更好的抗辐照硬化能力。并通过 TEM 观察并统计了高辐照剂量下辐照诱导缺陷的形成, 利用 DBH 模型分析验证了辐照缺陷与力学性能的关联性。研究表明, 增材制造 GH3535 合金的特殊本征结构, 赋予了其优异的抗辐照硬化能力, 并初步分析了本征界面结构-辐照缺陷-力学性能的关联性。本研究为增材制造 GH3535 合金的微观结构、力学性能和辐照行为提供了实验数据, 对增材制造技术在熔盐堆中的开发与应用提供了依据。

A03-P84

First Principles study on Embrittlement Behavior of Gadolinium-doped Nickel Grain Boundaries

Feifei Zhang^{1,2,3}, Ali Wen^{1,3}, Boyuan Ning^{1,3}, Dongbo Xiong⁴, Xue Hai^{1,2,5}, Chunyan Zou^{1,2}, Jingen Chen^{1,2}, Ping Huai^{1,5,6,7}, Cuilan Ren^{*1,2,3}

1. Shanghai Institute of Applied Physics

2. University of Chinese Academy of Sciences

3. State Key Laboratory of Thorium Energy, Shanghai Institute of Applied Physics

4. Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences

5. Center for Transformative Science, ShanghaiTech University

6. Shanghai High Repetition Rate XFEL and Extreme Light Facility (SHINE)

7. Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences

Understanding the microstructure and mechanical properties of Gadolinium (Gd) doped nickel grain boundaries (GBs) is essential to enhance the service performance of structural materials. The structural stability and mechanical properties of typical $\Sigma 3$, $\Sigma 5$, $\Sigma 9$ and $\Sigma 11$ GBs in Gd-doped nickel alloys were systematically calculated by first-principle method. The results indicate that Gd has the capacity to segregate for all four GBs. Notably, its susceptibility to segregation is heightened at the $\Sigma 5$ and $\Sigma 9$ GBs. By analyzing the brittle effect through Rice-Wang model, it is determined that Gd has a brittle effect on all four GBs, which originates from both mechanical and chemical components. The mechanical component arises from weakened bonding due to increased bond length. The chemical component intensifies embrittlement at the $\Sigma 3$ and $\Sigma 11$ GBs, while mitigating it at the $\Sigma 5$ and $\Sigma 9$ GBs, which is mainly due to covalent bond formation. First-principles tensile tests showed that Gd doping causes a decrease in GB fracture energy and theoretical tensile strength. This work elucidated the microscopic embrittlement mechanism influence of Gd on the GBs of nickel alloys, which can provide reliable theoretical guidance for design and optimization as well as structural modulation of high-stable

nickel alloys.

A03-P85

铌元素对 Ni-20W-6Cr 合金在不同温度下微观结构的影响

宋奥翔^{1,2}、刘程鹏¹、叶祥熙^{*1,2}

1. 中国科学院上海应用物理研究所
2. 中国科学院大学

研究了不同铌(Nb)含量的 Ni-20W-6Cr 合金在 750 ℃ 和 850 ℃ 下热暴露 500 小时后的微观结构演变。结果表明,在 750 ℃ 时,含 2 wt.%和 4 wt.% Nb 的合金中析出了 MC 碳化物,而含 6 wt.% Nb 的合金中形成了针状 γ' 相。在 850 ℃ 时,含 2 wt.% Nb 的合金中未观察到析出物,含 4 wt.% Nb 的合金中析出了 MC 碳化物,而含 6 wt.% Nb 的合金中形成了 γ' 和 δ 相。结果表明,适量添加 Nb 元素促进了 MC 碳化物的析出,而过量的 Nb 元素则促进了 Ni₃M (γ' 和 δ) 相的析出。温度升高会降低 MC 碳化物的稳定性,并促进 δ 相的析出。

A03-P86

合金元素 Mo 和 W 对镍基合金在熔融氯盐中腐蚀的影响

迟良道、孙华、周兴泰*

上海应用物理研究所

氯化物熔盐(NaCl-KCl-MgCl₂)具有熔点低、沸点高、储热密度大和成本低等诸多优点,成为聚光太阳能系统中导热流体(HTF)和储热介质(TES)的理想材料。随着对更高系统热效率的需求不断增加,发电和热能传递及存储介质的操作温度已超过 700 ℃,在更高温度下应用熔融氯盐给下一代聚光太阳能系统带来了一些额外的挑战。经广泛筛选,镍基合金具有优异的机械性能和耐腐蚀性,成候选的结构材料。镍基合金在熔融氯盐中的腐蚀主要是由 H₂O、O₂、HCl 等杂质引起的,导致合金中 Cr 的溶解,而合金元素 Mo 和 W 在腐蚀过程中的具体作用尚不明确。本研究通过双坩埚体系下浸泡腐蚀实验并结合微观分析,对比 Ni-W-Cr 合金(GH3539)和 Ni-Mo-Cr 合金(GH3535)在 800 ℃ 氯气条件下 NaCl-KCl-MgCl₂ 氯盐中的腐蚀行为,分析了合金元素(Mo 和 W)、微观结构和合金腐蚀行为之间的关系。与 GH3535 相比, GH3539 合金受到的腐蚀更为严重。合金元素产生的 M₆C 析出相影响 Cr 的向外扩散。在氯盐中, W 比 Mo 对腐蚀更敏感,导致 GH3539 的耐腐蚀性比 GH3535 更差。通过此项研究,阐述 Mo/W 元素对镍基合金耐熔盐腐蚀的影响机制,对合金设计提供一定的理论基础。

A03-P87

NiCrAlYSi 涂层对熔盐堆用 GH3535 合金抗 Te 致晶间开裂性能影响研究

吴集金^{1,2,3}、韩汾汾¹、姜肃猛⁴、李伟⁴、黄鹤飞^{*1}

1. 中国科学院上海应用物理研究所
2. 中国科学院大学
3. 上海科技大学
4. 中国科学院金属研究所

熔盐反应堆是六种第四代先进核能系统之一,因具有常压运行、本征安全性、高热效率、无水冷却等显著优势而备受关注。目前,作为熔盐堆候选结构材料的 GH3535 合金展现出良好的高温力学性能、耐腐蚀性和抗中子辐照特性。然而,熔盐堆运行过程中产生的裂变产物 Te 会诱发的合金脆性晶间开裂,该问题仍亟待解决。在 GH3535 合金中适量添加 Cr、Al、Y、La 等有益元素能够有效抑制 Te 扩散。但新合金开发存在成本高、周期长的问题。因此,可通过在合金表面施加具有良好耐高温热腐蚀性能和抗氧化性能的 MCrAlY 防护涂层,发挥多种元素的综合作用来进一步抑制 Te 扩散。

本研究采用电弧离子镀技术在 GH3535 合金基材上制备了 NiCrAlYSi 涂层。进一步研究了 NiCrAlYSi 涂层样品在 800 °C 下, 分别处于 0 mg/cm²、0.5 mg/cm²、1.0 mg/cm²、2.0 mg/cm² 和 4.0 mg/cm² 五种不同浓度的 Te 蒸汽氛围中腐蚀 100 h 的 Te 蒸汽腐蚀行为试验。结果表明, 在不同 Te 浓度下, Te 在 NiCrAlYSi 涂层中的扩散深度均小于 20 μm, 显著低于其在 GH3535 合金中的扩散深度。此外, 几种 Te 浓度下的样品拉伸性能均未出现劣化现象。该涂层几百纳米大小的超细晶结构及其较高的 Cr 含量促进了涂层表面致密的 Cr₃Te₄ 反应层形成, 这抑制了 Te 进一步内扩散, 从而显著提高 GH3535 抗 Te 致晶间开裂性能。

此外, 还研究了涂层样品在 800 °C, 两种 Te 浓度下 (1.0 mg/cm² Te 和 2.0 mg/cm² Te), 时效 100h、500h、1000h、3000h 不同时长后微观结构的演变, 并评估了在 700 °C 下该涂层于 FLiNaK 熔盐中的抗腐蚀性能。结果显示 Te 扩散深度随着时效时间增加而变大, 表面 Cr₃Te₄ 层逐渐变得不再连续, 但样品整体拉伸性能并未发生劣化。时效过程中涂层内高含量 Cr 促进了反应产物 Cr₃Te₄ 向 Cr₇Te₈ 的转变并向涂层内部释放出 Te 原子, 涂层中的 Y 能够捕获内扩散的 Te 并形成 YTe 相。而腐蚀结果显示, 在氟化物熔盐中腐蚀 500 h 后, 涂层内部产生大量腐蚀孔洞。这是由于涂层中的活性元素 (如 Cr、Al) 易与氟盐反应生成稳定的氟化物, 从而加速了腐蚀过程。此外, 高密度的晶界促进了活性元素溶解, 进一步削弱了涂层的抗熔盐腐蚀能力。

A03-P88

700°C下液态钠中 CVD 碳化硅的腐蚀行为

容嘉河、刘慧、杨新梅、黄鹤飞*

中国科学院上海应用物理研究所

由熔盐反应堆 (MSR) 和含有碳化硅陶瓷及液态钠的热管组成的太空热管反应堆设计, 展现出广阔的发展前景。液态钠中碳化硅的腐蚀数据对热管的设计至关重要。因此, 本研究在对 CVD 碳化硅样品进行了在 700°C 的液态钠中腐蚀实验, 并探讨了钠中的氧杂质对 CVD 碳化硅腐蚀机制的影响。研究发现, CVD 碳化硅中的晶界是优先被侵蚀的部分。结果表明, 钠中的氧杂质对碳化硅的腐蚀过程起着关键作用。XPS 光谱、拉曼光谱和化学反应的吉布斯自由能分析显示, 钠中的氧杂质能够与碳化硅及碳化硅表面的 Si-O 键发生反应, 生成 Na₂O·nSiO₂ 和石墨。Na₂O·nSiO₂ 的溶解增加了钠中硅元素的浓度。随着氧杂质浓度的增加, 腐蚀晶界的宽度和深度、腐蚀表面的石墨化程度以及钠中硅元素的浓度均有所增加, 并降低了 CVD 碳化硅的表面硬度。

A03-P89

镍基合金晶界类型对氦泡演化行为研究

段睿宸、黄鹤飞*、朱振博

中国科学院上海应用物理研究所

镍基合金 (Ni-17Mo-7Cr) 因其优异的耐熔盐腐蚀性能, 被视为熔盐堆关键候选结构材料。然而, 在服役过程中, 镍易与中子发生嬗变反应生成氦原子; 高温条件下, 氦原子倾向在晶界偏聚并形核形成氦泡, 导致晶界直接脆化。基于 EBSD 分析, 本研究筛选了 11 种具有特定重位点阵密度的晶界, 利用分子动力学方法构建了相应晶界模型。通过在模型中引入 4000 appm 浓度的氦原子并进行 400 ps 的 NPT 系综弛豫模拟氦原子在不同晶界的聚集行为。结果表明: 随着晶界能的增加, 晶界处的氦浓度显著提高, 氦团簇/气泡尺寸减小而数密度增加。为验证模拟结果, 采用 FIB 技术从高温 He 离子辐照 (700°C, 3E16 ions/cm²; 500 keV) 的试样中提取包含 Σ3、Σ9、Σ11 和 Σ15 晶界的 TEM 样品进行表征。实验结果显示, 氦泡的尺寸分布按晶界能大小递减, 为 Σ3 > Σ11 > Σ9 > Σ15, 而其数密度呈现相反趋势, 与 MD 模拟结果一致。进一步对不同晶界的氦结合能及其扩散行为进行了模拟计算, 结果表明: 高能晶界对氦的结合能较高, 显著促进了晶界对氦的吸收, 导致高的氦浓度; 同时, 高能晶界的氦扩散速率较低, 抑制了氦团簇的粗化, 形成了高密度、小尺寸的氦团簇/气泡。本研究为理解晶界氦泡的演化行为及其对镍基合金力学性能的潜在影响

提供了关键见解，并为提升结构材料的辐照耐受性奠定了理论基础。

A03-P90

700℃熔盐环境下电沉积镍涂层与 347H 不锈钢界面处合金元素界面扩散行为研究

窦欣懿、黄鹤飞*

中科院上海应用物理研究所

熔盐核反应堆作为高效清洁能源，其核反应堆在高温复杂介质下运行，对材料耐腐蚀性要求极高。高温氯盐回路中，347H 不锈钢易发生氧化、硫化及合金元素溶解，性能下降。镍涂层因其与基体结合好、高温稳定性高，成为重要防护手段。但目前 Ni 涂层在高温氯盐环境中微观腐蚀行为，如元素扩散、界面反应等研究仍不充分。本研究聚焦于核反应堆回路中高温氯盐环境对 347H 不锈钢的腐蚀问题，通过电沉积工艺制备镍涂层，深入剖析其在高温氯盐条件下的界面扩散与降解行为。研究结果揭示了镍和铬之间的相互扩散会引起空位积累和空洞形成，这可能是由于两种元素在扩散过程中对晶格结构的影响。此外，氯盐中的硫渗透进入涂层，促进了锰硫化物 (MnS) 的析出，进一步改变涂层的微观结构。同时，外部铁的沉积在涂层表面形成了一个新的阻挡层，这一层的存在对于抑制腐蚀过程起到了关键作用。这些因素综合作用，有效遏制了铬和镍向外扩散，显著抑制了 347H 不锈钢在高温氯盐中的腐蚀。深入理解这些现象背后的物理化学过程，对于优化镍涂层设计、提升涂层的耐腐蚀性能以及推动核反应堆回路中相关材料的应用具有重要的理论和实际意义。

A03-P91

钠对 Cr12MoV 钢的浸润行为研究

韩小军^{1,2}、付晓刚*¹

1. 中国原子能科学研究院

2. 天津大学

金属燃料单棒是钠冷快堆核燃料组件中的重要组件。金属燃料单棒的包壳材料-Cr12MoV 钢与燃料芯体之间的热量传递依靠液态金属钠来完成，因此钠对 Cr12MoV 钢浸润不充分可能在钠中产生空泡进而影响金属燃料单棒内钠的传热效率。为了研究钠对 Cr12MoV 钢的浸润行为，研究了 Cr12MoV 钢表面粗糙度、氧化膜厚度以及试验温度与时间对钠浸润金属的影响。结果表明：温度是影响钠浸润 Cr12MoV 钢的主要因素，温度越高浸润效果越好；Cr12MoV 钢表面越光滑钠越容易浸润金属表面；Cr12MoV 钢表面氧化物影响钠的浸润。

A03-P92

高温超高真空环境下镍基合金的挥发行为研究

杨万欢、钟巍华*、邹吉春、陈帅、彭德全、杨文

中国原子能科学研究院

反应堆结构材料在高温、超真空环境服役时，其合金组分可在熔点温度以下发生固态挥发导致材料失效。现有研究多聚焦液态金属挥发，对固态合金长期热-真空耦合作用下的挥发机制认知不足。本研究针对镍基合金开展 800 °C/ 9×10^{-6} Pa 环境 3000 小时模拟实验，揭示其表面组织演变规律与挥发动力学特性，阐明固态合金在高温高真空环境下的材料退化行为，为相关材料设计研发提供关键实验及理论支撑。

A03-P93

基于粒子群优化算法的离子辐照样品纳米压入模型研究

刘聪、马海亮*、范平、李可、张乔丽、袁大庆

中国原子能科学研究院

堆芯结构材料在服役过程中产生点缺陷、位错环、空洞等各类辐照缺陷,导致辐照硬化和脆化。重离子辐照损伤速率高,无活化,是开展材料辐照效应研究的高效手段。但重离子辐照损伤深度较浅,通常只在材料表面数微米的区域,且辐照剂量沿深度方向呈现非均匀分布,导致不同深度辐照硬化程度不同。纳米压入技术是表征材料离子辐照硬化的常用手段,通过连续刚度技术可以获得材料在不同深度的纳米硬度。但纳米压入的塑性区可达压入深度的 5-10 倍,所测硬度实际上是压痕下方塑性区内材料硬度的综合体现,即便是通过深度敏感的纳米压入技术获得的不同深度的硬度也不是该深度所对应的真实硬度。为了获得离子辐照样品的不同深度下的真实硬度,必须考虑压入尺寸效应和压入塑性区的影响。由于离子辐照样品的辐照硬化呈现深度依赖性,导致压入尺寸效应的特征长度和塑性区尺寸也存在深度依赖性,并且在压入深度远大于辐照损伤层时应逐渐趋近于未辐照样品的参数。本文提出的离子辐照样品纳米压入模型结合了辐照硬化模型和压入硬度体积分数模型,并考虑了描述压入尺寸效应的特征长度和塑性区尺寸参数随本体硬度的变化,结合粒子群全局优化算法可以可靠地提取辐照硬化参数。以 350°C,40MeV 铁离子辐照铁马钢为例,应用连续刚度测量方法获得了辐照前后铁马钢的硬度-压入深度曲线,采用离子辐照样品纳米压入模型拟合,获得了铁马钢在不同剂量下的辐照硬化数据。

A03-P94

基于第一性原理的 U-Nb 合金孪晶介导的微观结构演变与力学响应机制研究

温欣¹, 李聪毅², 刘彤^{1*}

1. 上海交通大学机械与动力工程学院, 核燃料循环与核材料研究所, 上海, 200240;
2. 上海交通大学溥渊未来技术学院, 上海, 200240

铀铌 (U-Nb) 合金因具有独特的双屈服行为和形状记忆效应而备受关注,这些特性与其亚稳态的单斜 α'' 相结构和孪晶边界 (twin boundary, TB) 介导的变形机制密切相关。然而,最近的 U-Nb 低温时效实验表明合金在低温老化过程中会发生显著硬化现象并伴随着延展性的骤降 (可下降到极值零),传统实验表征手段未能观测到低温老化过程中明显的第二相沉淀和元素偏析,暗示在极细尺度 ($<3\text{ nm}$) 下的溶质原子重排和 TB 微结构扰动可能是关键诱因。为阐明原子尺度下微观结构变化对力学性能的影响机制,本研究结合第一性原理密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 与从头算分子动力学模拟 (ab initio molecular dynamics, AIMD), 系统探究了 Nb 掺杂和晶体对称性对 U-Nb{130}孪晶界结构稳定性、电子结构演化、力学性能及温度驱动的 Nb 扩散行为的影响。计算结果表明,相较于正交 α -U 相,单斜 α'' -U 孪晶结构具有更高的结构稳定性与孪晶形成倾向。Nb 掺杂通过抑制能量涨落和调控电子结构进一步稳定 TB,并驱动 Nb 原子自发偏析至孪晶界。偏析的 Nb 原子将作为“钉扎点”有效阻碍 TB 迁移,并抑制 Nb 原子的长程扩散,导致 Nb 原子在基体中分布不均匀从而显著降低了力学性能,这直接为低温老化实验中观察到的力学性能退化现象提供了合理解释。本研究首次从原子尺度建立了 U-Nb 合金在低温老化过程中“溶质偏析 $\rightarrow$ 孪晶界钉扎 $\rightarrow$ 扩散抑制 $\rightarrow$ 力学性能退化”的完整因果链,为理解孪晶调制力学行为的内在机制提供了原子尺度的关键理论证据。

仅发表论文

A03-PO01

稀土元素铽和钐掺杂 LiMgPO₄ 材料的制备及其热释光和光释光性能研究

付黎、唐开勇*、樊海军、李志远、张思远、周末

核生化灾害防护化学全国重点实验室

稀土元素掺杂可提升释光材料性能,是核辐射剂量监测领域的研究热点,本研究采用固相反应法成功制备了未掺杂、稀土元素铽 (Tb) 单掺、稀土元素钐 (Sm) 单掺及 Tb/Sm 共掺的 LiMgPO₄ 材料,系统研究了稀土掺杂对其热释光 (TL) 和光释光 (OSL) 性能的影响。掺杂不同的稀土元素对 TL 性能影响显著,未掺

杂样品的 TL 信号接近本底值，单掺杂 Tb 的 TL 曲线在 50-350 °C 范围内包含有三个峰，并且 TL 强度明显增强；单掺杂 Sm 的 TL 信号接近本底值；共同掺杂 Tb 和 Sm 的 TL 曲线峰形、峰位与 LiMgPO₄:Tb 基本一致，但是 TL 信号整体下降，尤以~270 °C 高温峰减弱最为显著。这表明掺杂剂的类型决定了 TL 的性质，稀土元素 Tb 的加入能增强材料的 TL 信号，而 Sm 元素增加会减小材料的 TL 信号；故 Tb 是 TL 信号的主要激活剂，而 Sm 可能抑制其发光。掺杂不同稀土对 OSL 衰减曲线结果表明，掺杂加速了 OSL 衰减速度，未掺杂 LiMgPO₄ 衰减速度最慢，衰减到初始值的 10% 需要 3.2s，而掺杂材料均在 3s 以内；Tb 和 Sm 共掺样品表现出最优初始 OSL 强度，分别是不掺杂、Tb 单掺和 Sm 单掺的 1.41、1.27、1.96 倍；辐射照射后 24h 内，Sm 单掺剩余 OSL 信号强度最大，表明 Sm 的引入提升了 OSL 信号的稳定性。综上可知，稀土元素 Tb 对 TL 和 OSL 信号的贡献大于稀土元素 Sm 的贡献，但是稀土元素 Sm 可增强 OSL 信号稳定性，结合了 Tb 的高灵敏度和 Sm 的稳定性优势，为开发高性能核辐射剂量监测材料提供了新思路。

A03-PO02

固相氧化法制备含铯废钠固化体

铁臻*

西安交通大学/北京原子能科学研究院

快堆在退役过程中将产生大量放射性废钠，安全有效地处置放射性废钠是成功退役的关键。本文采用固相氧化处理快堆的碱性液态金属冷却剂，玻璃组分与废钠高温反应合成固化体。围绕放射性废钠的固相氧化处理工艺开展实验探索，在 800-1200°C 高温条件下与碱性液态金属冷却剂进行直接反应。利用 X 射线衍射（XRD）和扫描电镜（SEM）表征物相组成与表面形貌。通过硬度测试评估固化体的机械性能，热重分析（TGA）监测固化体的热稳定性。对照碱液处理废钠，测试结果表明固相氧化工艺产物为均一玻璃相，高温下无元素挥发。此外，还系统考察了不同玻璃配比，保温时间等变量对固化体结构的影响。