

中国材料大会 2024
暨第二届世界材料大会
CMC 2024 & WMC 2024

July 8-11, 2024
Guangzhou, China

A03-核材料
A03-Nuclear Materials

Organized by

Chinese Materials Research Society

Website: <https://cmc2024.scimeeting.cn>

A03.核材料

分会主席：吕广宏，汪小琳，王宇钢，刘彤，张涛，韩恩厚

A03-01 主题报告

先进核燃料研发进展

李垣明*、辛勇、邱玺、高士鑫、唐昌兵、刘仕超、李文杰
中国核动力研究设计院

核燃料是反应堆能量源泉也是最核心的关键材料，核燃料的性能直接决定了反应堆的先进性、安全性和经济性。随着国家对于反应堆性能要求的日益提高，传统二氧化铀燃料已无法满足先进反应堆的设计需求。基于此，本文对于先进核燃料的应用场景、设计需求和研究进展进行了总结与分析，重点介绍了研究团队在先进陶瓷燃料、金属燃料及包覆颗粒燃料等方面的研究进展和取得的成果。面向未来不同需求的先进反应堆，这些自主研发的先进核燃料将为我国实现由核大国向核强国的转变提供有力支撑。

A03-02 闪报

极端环境下核燃料包壳热-力学性能的可视化研究

刘彤*、王蓓琪、李懿
上海交通大学

核燃料包壳是核电厂纵深防御中的四大实体安全屏障之一，其性能优劣直接影响核电厂的安全性和经济性。核燃料包壳在 LOCA 等典型事故的极端环境下会经历高温氧化、快速升温、淬火热冲击、压力骤升等工况，可能对其完整性造成严重威胁。因此，有必要深入研究极端环境下核燃料包壳的热-力学响应特性。本研究基于上海交通大学安全服役行为研究平台，对未涂层锆合金与 Cr 涂层锆合金包壳开展了高温蒸汽氧化、鼓胀爆破、环向压缩等实验，并获得了包壳的三维全场位移和应变数据。结果表明：氧化铬层的厚度是影响 Cr 涂层锆合金包壳高温蒸汽氧化后力学性能的关键因素；涂层与基体之间互扩散形成的 Cr-Zr 中间相会导致包壳提早发生脆性转变；在未氧化情况下，Cr 涂层会加速包壳的环压失效。本研究可为新型燃料包壳的后续设计优化提供参考。

A03-03 闪报

UO₂ (111)和 PuO₂ (111)表面本征氧缺陷的理论研究

吕文婷、杨宇*
北京应用物理与计算数学研究所

采用 DFT+U 和热力学分析研究了 UO₂ (111) 和 PuO₂ (111) 表面本征氧缺陷的分布行为和应变调控作用。根据计算的缺陷形成能，我们发现 UO₂ (111) 表面的容易产生氧间隙原子，而在 PuO₂ (111) 表面氧空位和间隙原子同样常见。发现不同氧缺陷对 UO₂ 和 PuO₂ 的电子结构有不同的影响。氧空位在 UO₂ 的带隙中引入了一个深能级缺陷态作为 n 型掺杂，而在 PuO₂ 的价带顶 (VBM) 附近引入了一个浅能级缺陷态作为 p 型掺杂。氧间隙原子的电子态与相邻的 U 原子杂化，导致 UO₂ 的能带结构发生可忽略的变化。相比之下，间隙氧原子在 PuO₂ 的带隙中引入了深能级缺陷态。不同表面深度氧缺陷形成能的变化表明，对于 UO₂ 和 PuO₂，氧空位都倾向于在次表面形成，而氧间隙原子的形成几乎不受表面深度的影响。我们还研究了氧缺陷的应变响应，发现应变通过调控几何键长来调节 UO₂ (111) 和 PuO₂ (111) 表面氧空位的形成能。通过热力学分析，我们给出了化学计量和缺陷 UO₂ (111) 和 PuO₂ (111) 表面的相图，预测了具有不同本征氧缺陷的 UO₂ (111) 和 PuO₂ (111) 表面的环境温度和压力范围，还揭示了应变对这种环境温度和压力范围的调节。本研究加深了我们对锕系金属表面缺陷行为及其氧化特性的机理认识。

A03-04 闪报

波纹界面对 U-10Mo/Al 单片式燃料元件辐照热-力耦合行为影响研究

简晓彬¹、赵云妹¹、丁淑容*²

1. 同济大学
2. 复旦大学

U-10Mo/Al 单片式燃料元件是由 U-10Mo 燃料芯体和 Al 合金包壳组成，通过热等静压工艺形成的一种夹层结构。由于铀密度高、正常工况下辐照性能稳定，U-10Mo/Al 单片式燃料元件在高通量研究试验堆中具有良好的应用前景。制造过程中会在 U-10Mo 芯体和包壳之间产生波纹界面，使得芯体厚度方向上产生非均匀性，影响燃料元件的辐照热-力学性能。本文综合考虑辐照-退火过程中各燃料相的辐照效应，包

括燃料芯体辐照体积生长应变和辐照蠕变, 以及包壳的热膨胀、辐照塑性硬化和热蠕变等行为, 建立各材料三维大变形增量本构关系、应力更新算法和一致刚度模量; 分析波纹界面对燃料元件裂变气体肿胀、等效辐照蠕变、变形场和应力场的影响, 为燃料元件的制造提供理论模型和数值参考。

A03-05 闪报

UO₂ 辐照微结构演化的相场模拟研究

孙丹*¹、辛勇¹、赵纪军²

1. 中国核动力研究设计院
2. 华南师范大学

二氧化铀 (UO₂) 具有熔点高, 辐照稳定性好, 与冷却剂和包壳材料有良好的相容性等优良特性, 是当前核反应堆的主要燃料。UO₂ 陶瓷燃料芯块的性能改进和抗辐照性能机理的工作一直在持续进行, 改进型 UO₂ 应具有经受更高燃耗和长循环周期的能力。掺杂大晶粒 UO₂ 芯块能够降低裂变气体释放, 是当前 UO₂ 改进的重要研究方向。但是微观缺陷行为和晶粒尺寸的变化是如何影响气泡的演化过程很难直接通过实验手段研究。因此, 本工作通过建立多晶 UO₂ 微结构演化相场模型来研究不同燃耗条件下燃料辐照微结构的演化, 同时考虑了晶粒尺寸、外部等静压、重溶等因素的影响。模拟结果表明, 增大晶粒尺寸会增加气泡扩散到晶界的距离, 从而降低了孔隙率; 模拟区域存在温度梯度时, 气泡形核和长大在高温区和低温区有很大的差异, 低温区的形核率较高, 气泡长大速度慢, 高温区的形核率较低, 气泡长大速度较快; 当其他条件相同, 考虑重溶会放缓燃料的气孔率和平均气泡半径增长; 外部等静压对气泡的生长具有阻碍作用, 施加外部等静压后, 气泡半径的分布较为均匀。

A03-06 闪报

α -UH₃ 在冲击压缩下的电子结构及物理性质研究

崔娟、付振国、郑欢、郑淼、李大芳、杨宇*

北京应用物理与计算数学研究所

我们通过第一原理分子动力学 (FPMD) 模拟研究了 α -UH₃ 在 200 GPa 以内的冲击压缩下, 电子态分布和热力学性质的演化机制。我们从状态方程 (EOS) 中获得了其冲击 Hugoniot 曲线, 并将其与其它可能用于储氢的金属氢化物的 Hugoniot 曲线进行了比较。基于对关联函数的详细分析, 我们揭示了冲击压缩下 α -UH₃ 的解离过程, 并对 Hugoniot 曲线中的电子态演化和热力学演化给出了自洽的化学图像。此外, 我们还系统揭示了对冲击压缩下 α -UH₃ 的电输运特性、光学反射率等物理性质。该研究丰富了人们对 α -UH₃ 冲击压缩特性的认识, 预计将有助于克服金属氢化物作为储氢材料应用中的一些难题。

A03-07 邀请报告

选区激光熔化引入异质结构制备高强韧铁马钢研究

柴林江*

重庆理工大学

本研究采用选区激光熔化技术 (SLM) 制备了新型国产低活化铁马钢块状试样。测试了样品的密度、室 (高) 温拉伸及冲击等力学性能, 并利用 XRD、ECCI、EBSD、TEM 和 TKD 对样品的微观组织进行了细致表征。结果发现, 样品由铁素体和马氏体双相组织共同组成, 且出现了较多的纳米复合析出相颗粒。马氏体不均匀分布在块状铁素体内部, 马氏体内部存在高位错密度亚结构, 与典型的铁马钢微观组织存在明显区别。非均匀双相结构的出现归因于 SLM 过程中的快速冷却速率 (105-107 K/s) 和铁素体稳定元素对组织的影响。力学性能测试结果显示, 室温拉伸时抗拉强度 (UTS) 到达了 ~1340 MPa, 延伸率达 16.4%; 550 °C 高温拉伸时抗拉强度达到了 ~700 MPa 的同时, 且具备 31% 延伸率, 上述力学性能显著优于过往报道。对材料强度进行理论计算, 发现样品的高强度主要来源于细晶强化、沉淀强化和位错强化。证实了非均匀变形诱导 (HDI) 强化和 HDI 硬化效果是导致其具有优良强韧性升的主要原因。本研究可为通过 SLM 制备具有高强韧性的核结构材料部件提供重要参考。

A03-08 邀请报告

增材制造在核能行业的机遇和挑战

唐军*

四川大学

增材制造技术作为一种新型加工技术,近年来发展迅速,逐渐呈现出与减材、等材三足鼎立的局面,在航空、航天、生物医疗及其它高端制造等领域已经有较成熟的技术示范,并在最为保守的核能行业也在呈现出较好的势头。本此报告将介绍增材制造技术,特别是以选区激光熔化(Selective Laser Melting, SLM)为代表的增材制造技术前沿发展概况及其在核能领域中的一些研究进展,以及我们团队近期利用增材制造技术在核能领域研究中的一些初步进展,包括利用增材制造实现钨钼合金-低活化钢面向等离子体部件一体化制备、FeCrAl ODS 钢增材制造提升延伸率、同位素热电换能器件制备等。

A03-09 闪报

金属材料中子辐照模拟平台构建

吕广宏*

北京航空航天大学

材料问题是未来先进核能系统实现的关键问题。在目前缺乏聚变中子源进行辐照实验的情况下,开展聚变堆材料中子辐照模拟研究显得愈发紧迫,对于裂变堆的发展亦具有特殊重要性。这方面国内外均处于起步阶段,缺乏系统的研究与完善的模拟平台。金属材料的中子辐照损伤是一个从微观(级联碰撞)到介观(缺陷结构演化)到宏观(力热性能)的一个多尺度问题。本报告介绍依托科技部国际热核聚变实验堆(ITER)专项开展的金属材料中子辐照模拟平台构建总体方案。

A03-10 闪报

钒合金中合金元素钛抑制空位团簇化及空洞成核的机理研究

张朋波*¹、魏明亮¹、王兴¹、李国峰¹、嵇海川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先进核能系统中重要的候选结构材料。大量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],本工作通过第一性原理计算系统地研究了合金元素钛与空位团簇的相互作用进而阐述 Ti 抑制钒合金中空位团簇化及空洞成核的微观物理机制[4]。能量学上, Ti 能够吸引并减小空位团簇的形成能,因此 Ti 能稳定空位团簇。其次,通过计算了一系列不同构型,获得了小尺寸的 Ti-空位复合团簇的最低能量结构(尺寸 1-5)。Ti-空位复合团簇的稳定性随尺寸的增加而明显增大,并且稳定性要高于纯钒中的空位团簇。此外, Ti 的出现使空位团簇饱和尺寸明显减小,进而抑制了空位的团簇化及空洞成核的尺寸。动力学上,通过 NEB 计算获得了小尺寸的空位及 Ti-空位复合团簇的迁移性质。空位团簇的分步解离有着比同时解离更低的势垒。此外, Ti 的存在抑制了空位团簇的解离。空位倾向于迁移至富 Ti 区域,具有比纯钒(0.42 eV)中更低的迁移势垒(0.32 eV)。相反,空位从富 Ti 区域的解离需克服较高的迁移势垒(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及降低了有效扩散率。以上结果表明, Ti 的添加为空位提供了更多的成核位点, Ti 捕获空位团簇形成大量稳定的小尺寸 Ti-空位复合物并弥散至合金中,最终抑制了空位的团簇化及空洞成核,初步阐明了钒合金中 Ti 添加压制空洞形成的机理。

参考文献:

[1] P.B. Zhang*, M.L. Wei, Y.G. Li, J.J. Zhao, P.F. Zheng, J.M. Chen, Interactions of solute atoms with self-interstitial atoms/clusters in vanadium: A first-principles study, J. Nucl. Mater. 553 (2021) 153055.

[2] 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, J. Nucl. Mater. 574 (2023) 154160

[3] 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.

[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)

A03-11 闪报

聚变堆金属钨开裂损伤的数值模拟研究

王园园*

大连理工大学

材料辐照损伤与辐照效应一直是先进核反应堆材料研究关心的问题，它影响着反应堆能否安全运行。尤其是，聚变堆中嬗变反应产生的氢氦元素使材料损伤加深，高温、高热反复冲击引起的表面裂纹甚至部件断裂，严重威胁反应堆安全运行寿命。深入理解材料微观组织对开裂损伤的影响是非常重要的。本报告将汇报我们采用数值模拟方法，开展有无辐照条件下金属钨中脆性裂纹扩展行为的最新进展。金属材料微观结构包括各种相、相分布、应力状态及晶粒取向，这些广义微观组织参量在变形失效过程中演化特征与工程部件服役行为密切相关。辐照缺陷能够显著提高材料的开裂损伤程度，缩短开裂的时间，并降低材料的抗裂性能。如何理解物理场影响的微观结构损伤，揭示金属材料在服役过程中的失效物理机制，从而提出影响裂纹扩展的关键控制因素是本报告关注的问题。我们通过变形相关的载荷将材料组织形貌演化与裂纹扩展相联系，系统地研究气体介质、晶体取向、组织结构对不同类型裂纹扩展的影响。从裂纹路径、载荷-位移曲线、裂纹扩展速度等角度分析辐照缺陷、材料形貌影响的裂纹扩展特性，揭示温度梯度、氢氦气体对裂纹扩展速度的影响，给出裂纹与晶界交互的物理图像。

A03-12 简报

先进核材料遴选/设计的多尺度模拟研究

李永钢^{*1}、魏留明¹、程凡¹、张朋波²

1. 中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所
2. 大连海事大学物理系

先进核材料研发是核能工程应用的关键前提。为了加速核材料的遴选/设计，相关基础问题的理论研究至关重要。基于缺陷基本性质的密度泛函理论（DFT）计算，初级辐照损伤的加速级联退火蒙特卡洛模型 IM3D-ACA 和缺陷长时演化的团簇动力学模型 IRadMat 的自主发展，以及缺陷稳态速率理论模型 SRT 的扩展，建立了材料辐照效应的顺序多尺度模拟平台 IMSMP，并成功应用于先进核材料的遴选/设计研究：1）基于 DFT 高通量计算了 51 种单质金属的抗肿胀性能随空位溶解能和熔点的关系相图，指出 V、Cr、Fe、Mo、Nb、Ta 等 BCC 金属和 Zr、Ti、Hf 等 HCP 金属中不易形成稳定大空洞，可作为高抗辐照材料设计的良好基材；2）基于 IM3D-ACA 快速模拟了不同 PKA 能量下系列单质材料中初级缺陷的演化、存活数目和尺寸分布等关键信息，从缺陷产生角度对比评估了各种基材的抗辐照能力；3）基于 SRT 给出了稳态下材料抗辐照临界晶粒尺寸与空位扩散系数和缺陷产生速率比值间的 1/4 标度律，发现了多晶材料（如 V、Cr、Fe 和 Nb）的空位迁移能越低、晶粒尺寸越小，抗辐照性能越好的一般规律；4）在 IRadMat 中实现了平均场下晶界吸收的细胞模型，研究了非稳态下晶粒尺寸对铁/钨基材料的中子辐照损伤和氢氦滞留的影响规律，并提出了颠覆传统认知的理论设计建议：对于铁基结构材料，可使用纳米晶以提升其抗中子辐照性能；对于钨基面向等离子体材料，反而应使用粗粒晶以同时降低辐照损伤和氢氦滞留。

A03-13 邀请报告

晶界-辐照缺陷与冲击波耦合作用的计算模拟研究

高宁^{*}、常昊、董怡斌
山东大学

通过对辐照缺陷的捕获吸收，控制材料中的晶界被认为是调控材料提高抗辐照性能的关键方法之一。晶界在吸收辐照缺陷后，会改变晶界的局部微观结构，形成晶界处的台阶等局部缺陷，改变其动力学行为和力学性质，这在晶界受到冲击波影响时，表现尤为突出，例如，在聚变堆中面向等离子体钨材料中，等离子体破裂时形成的冲击波，会与材料中的晶界相互作用，造成晶界微裂纹的形成和服役性能的退化，同时，钨材料在高中子能谱的作用下，也会形成大量的位错环和空洞，这些缺陷在高温条件下其扩散机制会被激活，造成晶界对这些缺陷的吸收，因此，研究晶界在吸收不同辐照缺陷后在冲击波作用下的演化行为，对提高钨材料抗辐照及服役寿命均具有重要作用。

针对上述关键科学问题，本研究采用非平衡态分子动力学方法，通过构建不同的晶界，包括对称晶界 S3(111)和 S5(013)及一般晶界(100)/(110)，(100)/(111)及(110)/(111)晶界，首先模拟这些晶界与不同尺寸的 1/2<111>位错环及空洞相互作用，然后开展非平衡态分子动力学，模拟冲击波与吸收缺陷后的晶界的相互作用。系统的研究表明：当冲击波方向垂直于晶界平面时，位错环和空洞的吸收会降低晶界的临界失效冲击速度，特别是大尺寸数密度低的位错环和空洞，可引起近 20%的临界速度的降低；系统分析表明，在此过程中存在两种新的晶界失效机制：空洞形核长大导致晶界失效以及缺陷吸收导致的晶界局部滑移系统开动、位错形成和滑移，微裂纹的形成和扩展，导致晶界失效。对这两种机制相关的过程及物理量分析，发现位错环及空洞与晶界相互作用，改变了晶界局部的应力场和能量分布，导致其在更低的冲击速度条件下

形成滑移系统的开动和传播,因此,这些结果表明:晶界确实可以有效地减少辐照缺陷的数量,但是也会影响晶界的服役性能,特别是需要控制其外部冲击作用的大小,以保证材料能够在晶界、辐照缺陷及冲击作用下安全服役。

A03-14 邀请报告

钼合金中配位环境主导的铼-空位团簇形核规律

孙璐*、李明俊、秦梦路、杨业鑫、佟振峰

华北电力大学

钼铼合金(Mo-Re)是空间热管冷却堆最有望实现工程化应用的堆芯结构材料,具有良好的强度、塑性、以及蠕变性能。然而,反应堆长期高温、高通量中子辐照作用会造成 Mo-Re 合金结构损伤,引发严重的脆化现象,这与辐照诱导的空洞、位错环、以及富 Re 析出团簇的形成与演化密切相关。本工作基于第一性原理计算研究了 Mo 中空位与 Re 的相互作用,揭示了由配位环境主导的 Re-空位团簇形核规律,阐明了空位团簇对于吸引 Re 向其偏聚的作用,为后续探究更大尺寸缺陷团簇的聚集行为奠定了基础。

基于遍历纯金属 Mo 中多空位所有可能的原子构型得到最稳定的空位团簇结构,发现除了双空位表现出弱排斥作用之外,空位之间的结合能随着空位个数增多而呈现波动式上升,表明空位团簇越来越容易形成。这种空位结合能的变化趋势与新加入空位和已存在空位形成的 1NN、2NN 空位对总数有关,针对更大尺寸空位团簇结合能的分子动力学模拟证明了这一规律;当新形成的 1NN 与 2NN 空位对个数相等时,该尺寸团簇的结合能几乎一致,进而得到以空位配位环境表达的大尺寸空位团簇结合能计算公式。

当在金属 Mo 中掺杂 Re 原子后,Re 和 Re 之间表现出弱排斥作用,且会优先以<111>方向的 3NN-Re-Re 原子对形核,形成高对称的 Re 超晶格结构。在此基础之上,空位会首先在 Re 原子附近形成 1NN 或 2NN 距离的 Re-空位(Re-V)缺陷对,这种 Re 对于空位的吸引作用导致空位呈现分散分布。但是当空位个数增加到一定值后,空位开始按照纯金属 Mo 中的形核规律开始聚集成团;表现为空位团簇结合能先随个数增加而缓慢下降,之后在一个“拐点”处开始急剧上升。此外,在所有空位结合能的拐点处都发现了由 1NN-V-V、1NN-V-Re、2NN-V-Re 组成的“ V_2Re_1 ”缺陷对结构。

由于辐照势必导致空位团簇形成,Mo 中已形成的空位团簇将进一步吸引 Re 原子向其偏聚,而且一开始加入的 Re 原子均会与空位形成上述“ V_2Re_1 ”缺陷对结构,并且能够较稳定存在。随着 Re 个数增加,Re-Re 之间的排斥作用超过 Re-V 之间的吸引作用,导致 Re 开始远离已形成的 V_nRe_m 团簇,而倾向于在空位周围的 2NN 位置分布,此时体系中 Re 的平均形成能开始呈现线性上升直至正值,表明 Re 将不再愿意向空位团簇聚集。

A03-15 闪报

含锰合金中显著增强的空位扩散和抗辐照特性

黄绍松*¹、关华清¹、田付阳²、卢晨阳³、徐虬⁴

1. 大连理工大学
2. 北京科技大学
3. 西安交通大学
4. 日本京都大学

空位在固态扩散中起着关键作用,并决定了许多材料的性质。提高合金中空位的迁移率对于部署先进的核能系统至关重要,有助于解决自间隙原子迁移率显著优于空位导致材料辐照损伤问题。本研究报告了一项概念验证结果,展示了一系列基于镍的高浓缩固溶体合金中,锰通过反常弗里德尔振荡效应显著增强空位扩散的普适性规律。第一近邻锰原子的存在破坏了空位引起的弗里德尔振荡,从而为空位对周围原子的长程影响打开了通道,不分原子类型的降低了空位扩散势垒能量。这一效应导致空位和间隙原子的扩散能量显著重叠,从而增强了它们的复合,充分解释了实验结果中辐照下空位团簇的抑制现象。这些显著结果为原子扩散机制提供了新的理解,并开辟了从直接调控原子缺陷性质的角度来设计具有优异性质的先进材料的新途径。

A03-16 闪报

聚变堆材料中氢滞留与脱附的多尺度模拟

侯捷*¹、孔祥山²、刘长松³、Jun Song⁴、Duc Nguyen-Manh^{1,5}、邓辉球¹、胡望宇¹

1. 湖南大学
2. 山东大学
3. 中科院合肥物质科学研究院

4. McGill University

5. United Kingdom Atomic Energy Authority

氘是可控核聚变的燃料之一，同时也是一种没有天然储备的氢同位素，需要在聚变堆中循环并增殖利用。氢（同位素）等离子体在与壁材料接触时会渗入材料内部，与材料中缺陷结合并滞留其中，从而打破燃料自持。而由于氢较快的扩散速率和较低的原子序数，氢的注入、扩散、捕获、脱附等过程的微观细节和机理难以用实验手段准确表征，也无法对氢滞留行为做出准确评估和预测。为此，我们采用多尺度模拟技术对钨、钼两种第一壁材料中的氢滞留与脱附行为进行了系统研究。首先基于密度泛函理论计算获得了氢、空位、间隙等缺陷及其复合体的能量和动力学参数，并构建了外推物理模型；其次，采用二体碰撞近似方法模拟低能氢离子和高能自离子的辐照过程，并构建初级损伤数据库；最后结合对象动力学蒙特卡洛方法，对氢的注入、扩散、捕获、脱附等过程进行定量模拟，获得了与实验高度一致的滞留和脱附数据。模拟结果显示：a)辐照缺陷作为氢陷阱会显著降低氢扩散速率，但该效应与缺陷的势阱深度无关，仅取决于氢的“费米能级”；b)空位型缺陷显著提高氢滞留量，氢从大尺寸空位团簇中脱附所需的温度高于小尺寸空位团簇；c)高 dpa 下空位缺陷逐渐饱和，导致氢滞留量也趋于饱和。以上研究成果可为聚变堆燃料滞留问题提供准确定量的预测与评估。

A03-17

钨中 $1/2 < 111 >$ 刃位错对点缺陷捕获效率的原子模拟研究

樊昕岳¹、金硕¹、郝剑楠³、孙璐⁴、李小椿⁵、梁林云^{1,2}、吕广宏^{*1,2}

1. 北京航空航天大学物理学院
2. 北京市先进核能材料与物理重点实验室
3. 中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室
4. 华北电力大学核科学与工程学院
5. 中国等离子体物理研究所

在未来的核聚变反应装置中，钨作为面向等离子体第一壁材料会受到高温、高能和高通量中子辐照。中子辐照导致材料级联损伤而产生较多点缺陷（空位、自间隙子）和位错，位错作为 sink 对点缺陷有捕获行为。但位错吸收自间隙子的数量大于吸收空位的数量，材料内部剩余大量的空位。这些空位聚集成团簇和空洞，从而导致材料肿胀，最终严重影响材料的服役寿命。然而，由于实验的时间、空间尺度较大，无法直接观察到位错与点缺陷的相互作用过程。因此，在原子尺度上系统且精确地研究位错与点缺陷的相互作用对理解位错影响钨肿胀机制非常重要。

本文中，我们通过分子动力学(MD)和动力学蒙特卡罗(KMC)方法系统研究了点缺陷与刃位错之间的相互作用。首先，我们构建了 $1/2 < 111 > \{110\}$ 和 $1/2 < 111 > \{112\}$ 刃位错模型，利用 MD 和弹性理论两种方法对比了刃位错的应变能以验证模型正确性。基于上述结果，我们研究了刃位错分别与空位和四种 $< 111 >$ 自间隙子的结合能。研究表明，刃位错与自间隙子的相互作用强于它与空位的相互作用。其次，我们通过结合能得到位错对点缺陷的捕获半径。此外，我们通过 MD 和基于弹性理论的偶极子张量方法计算了点缺陷在位错应变场下的扩散势垒。研究表明，点缺陷的扩散势垒是各向异性分布。最后，我们根据捕获半径和扩散势垒，利用 KMC 计算了不同温度下两种刃位错对点缺陷的捕获效率。结果表明，随着温度的升高，自间隙子的捕获效率增加，而空位的捕获效率降低。在相同温度下，位错对自间隙子的捕获效率低于对空位的捕获效率。上述研究结果对理解点缺陷与刃位错之间的相互作用行为具有重要意义，可为速率理论等大尺度模拟方法提供必要的数据集。

A03-18 闪报

 $\Sigma 3 \{112\}$ 非共格孪晶界对纳米孪晶铜抗辐照性能的影响

谢红献^{*1}、孙刘辉¹、何婷婷¹、吕广宏²

1. 河北工业大学
2. 北京航空航天大学

纳米孪晶面心立方金属具有优异的抗辐照性能，但减轻其辐照损伤的内在机制仍存在争议。本研究采用分子动力学模拟方法，系统地研究了 $\Sigma 3 \{112\}$ 非共格孪晶界 (ITB) 对纳米孪晶铜抗辐照性能的影响。模拟结果表明，层错四面体和间隙位错环都很容易被吸收到迁移的 ITB 中。这两种缺陷占据了 ITB 两种不同类型的原子层，并以彼此相反的方向移动，导致它们的湮灭，从而增强了纳米孪晶铜的抗辐照性能。另一个有趣的发现是，间隙和空位都能加速而不是延缓 ITB 的迁移。上述模拟结果进一步从缺陷形成能和迁移能方面得到了证实。本研究深入探讨了纳米孪晶金属的抗辐照损伤机制。

参考文献: Hongxian Xie*, Liuhui Sun, Tingting He, Guang-Hong Lu*, The effect of migrating $\Sigma 3 \{112\}$ incoherent twin boundary on radiation tolerance of nanotwinned copper, Acta Materialia, 2024, 266:119668

A03-18 主题报告

核用材料的腐蚀损伤评定技术研究

韩恩厚*

广东腐蚀科学与技术创新研究院 华南理工大学

国际核电运行经验表明,腐蚀是影响核能安全的第一要素。腐蚀问题长期未得到根本解决的原因首先在于缺乏很好的对长寿命部件的腐蚀加速试验设备与测试技术,对腐蚀损伤的机理认识有待深入。本文介绍了作者团队在过去近 20 年来的部分结果,研制了模拟核电高温高压水中的系列腐蚀加速试验方法与设备,包括电化学腐蚀、应力腐蚀、辐照促进应力腐蚀、腐蚀疲劳、缝隙腐蚀、微动磨损、划伤再钝化、裂纹萌生等设备,模拟核电高温高压水中原位光学、光谱、电化学、声发射、应力腐蚀等测试技术,特别是研制出多种高通量试验设备使得试验效率提高 4-18 倍,划伤再钝化加速试验设备使传统评价试验从年缩短到周,部分设备与技术成为国际首创,由此研发了腐蚀失效机理,并把相关设备、技术成功用于我国自主三代核电材料国产化的评定和现役核电站运行许可证延续中。

A03-19 邀请报告

高性能阻氢耐蚀复合氧化物涂层

张涛*、邓皓玮

广州大学

我国先进核能发展中,某些特种反应堆(如热管堆)选用金属氢化物作为慢化剂材料,而通常氢化物材料高温易分解,产生氢气,堆内结构部件就会面临氢渗透导致氢脆问题。氢渗引发基体材料出现“氢脆”等问题,聚变堆中降低氢滞留也是事关聚变能稳定发展的重要因素。基于先进核能发展需求,我们研发了一种低成本的高性能复合氧化物胶体及涂层和涂覆工艺,可满足小口径(6~20 mm)的各种钢管道内壁和异形件内壁涂覆需求,根据需求可以控制涂层厚度最小至 50 μm 。性能指标:涂层形貌:表面光滑致密,没有气孔,具有金属光泽;涂层与基底结合力~70 MPa;室温~700 $^{\circ}\text{C}$,阻氢因子 PRV 高达~40000;涂层表面硬度:600 Hv;耐蚀性能:耐海水、烟雾及液态金属腐蚀;耐疲劳: $\Delta T=300^{\circ}\text{C}$ 条件下,10 个循环后,涂层性能基本保持不变;涂层适用温度:室温~800 $^{\circ}\text{C}$ 。

A03-20 邀请报告

晶粒形貌对铬涂层力学与氧化性能的影响规律及机制研究

沈朝*

上海交通大学

分别采用多弧离子镀、直流磁控溅射、高功率脉冲磁控溅射技术在钎合金包壳表面制备厚度约 15 μm 金属 Cr 涂层,三种涂层制备技术所制备的金属 Cr 涂层晶粒形貌各不相同。采用 DIC 技术对三种涂层的在室温和高温(340 $^{\circ}\text{C}$)的开裂应变阈值进行原位测试,结果表明,高功率脉冲磁控溅射技术制备的金属 Cr 涂层具有更加优异的韧性。高温水蒸气氧化实验(1200 $^{\circ}\text{C}$)结果表明,高功率脉冲磁控溅射技术制备的金属 Cr 涂层具有更加优异的抗氧化性能。此外,多弧离子镀和直流磁控溅射技术制备的 Cr 涂层在高温水蒸气氧化实验过程中晶粒尺寸发生显著粗化,而高功率脉冲磁控溅射技术制备的金属 Cr 涂层晶粒尺寸基本不变。因此,相较于多弧离子镀和直流磁控溅射技术,高功率脉冲磁控溅射技术在钎合金表面 Cr 涂层制备中具有更加广阔的前景。

A03-21 简报

冷轧 AlCoCrFeNi_{2.1} 共晶高熵合金的微观结构及其抗辐照加速腐蚀性能研究

陈飞达*

南京航空航天大学

共晶高熵合金具有强塑兼备的力学性能以及良好的可加工性,是近年来备受关注的面向新一代先进核能系统的候选结构材料。然而,其双相结构增加了合金在核反应堆内发生局部腐蚀的风险。本文利用冷轧退火手段,在 AlCoCrFeNi_{2.1} 共晶高熵合金(EHEA)中构筑了独特的纳米级交错双相结构。研究表明,合金中形成的异质界面不仅能促进辐照缺陷的自修复,还能利用 FCC 相和 B2 相之间的耐腐蚀

性差异构建阻碍腐蚀扩散的屏障。在 AlCoCrFeNi_{2.1} EHEAs 的交错双相结构中, FCC 相的抗辐照性能得到了增强, 显著减轻了辐照和腐蚀耦合效应的影响。本工作进一步提升了 AlCoCrFeNi_{2.1} EHEAs 的抗辐照加速腐蚀性能, 为深入理解 EHEAs 中异质界面在辐照、腐蚀环境中的演化规律与机制提供了新的视角。

A03-22 闪报

锆合金表面复合涂层高温氧化行为表征

崔严光*

上海核工程研究设计院股份有限公司

本工作介绍了锆合金表面 Cr+Zr 复合涂层的设计、高温氧化行为表征结果和分析。与 Cr 涂层相比, Cr+Zr 复合涂层对锆合金的高温氧化具有更加显著的抑制作用, 是一种有希望的 ATF 包壳设计。通过微观结构表征和第一性原理计算, 说明了涂层抗氧化氧化效果的机理。此外, 本工作对 ATF 涂层锆合金包壳后续发展进行了展望。

A03-23 闪报

紫外线辐射与高温腐蚀对锆合金性能的协同影响研究

宿冉冉^{*1}、张宏亮²

1. 上海交通大学

2. 复旦大学

紫外线辐射与腐蚀之间存在复杂的相互耦合关系, 这种耦合对材料在极端环境中的性能具有关键影响。然而, 这些现象的协同影响尚未得到充分研究。本研究通过对在原位紫外线辐射下暴露于高温腐蚀水中的锆合金进行系统调查, 填补了这一知识空白。我们系统地探讨了紫外线辐射与高温腐蚀对锆合金的协同效应, 采用了包括莫特-肖特基分析、扫描电子显微镜 (SEM)、能量色散 X 射线光谱 (EDX)、透射电子显微镜 (TEM) 以及基于机器学习的量化方法的综合方法。分析结果表明, 紫外线辐射与高温水腐蚀相结合, 导致锆氧化物表面纳米孔隙度变化以及 Fe₃O₄ 晶体的成核与生长。这些颗粒在 320 °C 下经过 90 天后覆盖了大部分紫外线辐射区域, 表明在延长暴露时间后, 整个氧化锆表面将很快被覆盖。Fe₃O₄ 颗粒的存在通过降低氧化锆外表面的氧分压, 减缓了局部腐蚀速率。然而, 在没有 Fe₃O₄ 颗粒覆盖的情况下, 紫外线辐射会由于光诱导的电化学变化而导致局部腐蚀速率和纳米孔隙度的增加。这些发现增强了我们对紫外线辐射与高温水腐蚀之间复杂动态的理解, 为核反应堆材料的抗腐蚀机制提供了新的见解。

A03-24 闪报

结构材料辐照损伤和液态金属腐蚀协同作用的模拟研究

许依春*

中国科学院合肥物质科学研究院

铁素体/马氏体钢具有良好的导热性、低膨胀系数和较好的抗辐照性能, 是第四代铅冷快堆结构材料的主要候选材料。在高温、强辐照和强腐蚀的液态金属服役环境下, 结构材料会发生溶解腐蚀、氧化腐蚀, 且腐蚀随着温度升高、辐照剂量增大而加剧。这不仅导致基体的减薄力学性能退化, 氧化腐蚀产物还降低了材料的导热性, 而且增加了氧化物脱落引起反应堆冷却回路堵塞风险。因此, 厘清结构材料溶解腐蚀和氧化腐蚀微观机制, 为设计耐腐蚀结构材料和预测材料服役寿命提供重要的参数。

结合第一性原理、分子动力学方法, 我们考察了 bcc-Fe 表面液态金属溶解腐蚀的微观过程, 研究合金元素、表面结构、温度以及辐照缺陷、对液态金属腐蚀的影响。结果表明, Si、V、Nb、Mo 可以缓解 LBE 溶解腐蚀; Fe (100) 表面不仅溶解腐蚀能量较高, 辐照缺陷较少, 具有较好的抗辐照和抗腐蚀性能。此外, 我们还考察富氧 LBE 环境下, 氧化初期 bcc-Fe 表面铅铋-氧-缺陷相互作用、氧化腐蚀过程中氧化层中缺陷与铅铋相互作用能量学和动力学特征, 以及实验温度下氧化层非晶化微观过程和合金元素对其能量学和动力学的影响。研究表明, 辐照缺陷不仅促进表面和晶界处氧扩散, 并促进氧化层中铅原子扩散和渗透, 而渗入的铅原子会导致氧化层晶格膨胀, 进而促进膨胀区空位缺陷形成。这种缺陷-液态金属协同作用最终形成含铅比例较高的 Fe₂PbO₄ 铁铅矿, 在辐照温度下很容易形成非晶化。此外, 氧化物中硅不仅增加了近邻铁空位和氧空位形成能, 还增加了铁原子和氧原子扩散的难度, 从而降低了腐蚀速率, 有效的提高了结构材料抗腐蚀能力。不仅为实验现象提供了必要的理论解释, 为抗辐照耐腐蚀铁素体/马氏体钢的优化提供理论依据, 还为铅冷快堆服役工况下大尺寸体系长时间演化的模拟和腐蚀速率的预测提供必要的参数。

A03-25 邀请报告

多功能重离子平台及其在材料辐照研究领域的应用

李锦钰*、张桐民、李军、康龙、魏海元、王富河、杨雅雯、刘会平、周建军
中国科学院近代物理研究所

320 kV 低能重离子综合研究平台（以下简称 320 kV 平台）是中科院近代物理所自主研发的低能、强流、高电荷态静电高压加速器装置，隶属于近代物理所公共技术中心。平台核心设备 ECR 离子源（LAPECR2）是近代物理所自主研发的国际上结构最复杂、磁场最强、电荷态最高、束流产额最高的全永磁 ECR 离子源。目前，已实现 H、He、Xe、Bi、Fe、U 等 30 余种元素的上千种离子束的加速与应用实验，离子束总能量在 5 keV-10 MeV 连续可调。该装置包括 6 个物理实验终端，主要应用于材料辐照、原子物理、低能核天体物理、高能量密度物理等基础前沿学科研究；在第四代先进核能系统及聚变堆材料研发，现役反应堆延寿等方面，有力支撑了国家核能发展战略。

平台拥有清华、北大、北航、哈工大、中科大、中核集团、广核集团及中科院所属院所等 90 家用户单位，重点支撑了用户承担的国家重点研发计划、国家自然科学基金、中科院先导项目、国防科技项目、ITER 等 1300 余项重大项目的实验任务，服务成效显著，支撑发表了包括 PRL、NC、JACS、ACTA MATER 在内的 SCI 论文 800 余篇。320 kV 平台因其优越的性能和高效运行，曾获甘肃省科技进步二等奖、中国工业防腐协会科技进步一等奖、6 次获得中科院兰州区域中心优秀开放平台，在中科院数理领域 17 个研究所所级中心的评估考核中获得优秀，在科技部、财政部组织的全国中央级单位重大基础设施和大型科研仪器开放共享评价考核中，近代物理所连续四年获得优秀，320 kV 平台提供了非常重要的产出支撑。

为更好地服务科研，充分发挥 320 kV 平台在低能重离子实验技术领域的特色和优势，2025 年将对 320 kV 平台离子源系统进行升级更新，将服役近 20 年的全永磁 ECR 离子源（LAPECR2）升级为当前技术最先进的 18 GHz 混合超导 ECR 离子源，新一代混合超导离子源将在离子束产额、电荷态指标方面得到极大提升，可产生毫安级 H、He 离子束，百微安级 Xe^{26+} 、 Ar^{12+} 等高电荷态重离子束。其产生的强流重离子束可以更好的开展先进核能系统材料研发及筛选，也可开展极低反应截面的低能核反应测量或原子分子团簇碎裂动力学及离子束与等离子体相互作用等领域实验研究。

为缓解 320 kV 平台长期束流供需矛盾突出的现状，公共技术中心正在建设一套 300 kV 高功率质子平台。该平台以提供大功率 H/He 离子束为特色，兼顾 C、O 等高电荷态离子束，可产生 3~5 mA 的 H^+ 和 He^+ 离子束、600 μA 的 O^{3+} 、100 μA 的 C^{4+} 等高电荷离子；平台初步建设两个实验终端：材料辐照终端和多功能实验终端，将于 2024 年底建成并投入使用。该平台服役后将有望缓解 320 kV 平台实验机时紧张的现状。

其他平台：

1. EBIS 超低能重离子实验平台：是中科院近代物理研究所 2015 年从德国引进的一台高性能、高电荷态、超低能的重离子平台，填补了国内在超低能重离子领域的空白。该平台是目前国内唯一一台可以提供 200 keV~300 keV 能量范围的超低能高电荷态离子综合性实验平台，主要应用于等离子体物理、原子物理、表面物理等领域的研究。

2. 材料成像与分析平台：是近代物理所材料分析领域的关键支撑平台，主要包括场发射透射电子显微镜、聚焦离子束显微镜（FIB-SEM）、电子探针（EPMA）、多晶粉末 X 射线衍射仪、拉曼光谱仪等十余台大型仪器。仪器总价值为 4870 万元，平台主要承担核能材料、润滑材料、半导体材料的形貌、结构、元素成份等材料微区的分析测试任务。

A03-26 邀请报告

陶瓷材料中界面的辐照效应

张宏亮*¹、宿冉冉²、施立群¹

1. 复旦大学
2. 上海交通大学

材料的性能常常受到其中界面的影响，这是因为界面可以影响材料中缺陷的运动和演化，例如阻碍位错运动，捕获各类点缺陷，并为缺陷的扩散提供快速通道，进而影响材料的力学、热学等宏观性能，同时界面区域原子结构和化学组成的变化通常会显著改变材料的机械强度、耐蚀性及抗辐照损伤特性等。在辐照条件下，入射粒子的轰击会在靶材料中产生大量的 Frankel 缺陷对，这些缺陷可以相互结合表现为缺陷复合，也可以扩散聚集形成缺陷团簇，同时也可以迁移到表面、界面等缺陷捕获区域，在此区域聚集、演化，进而对材料的性能产生严重影响。

辐照诱导偏析（RIS）是在辐照下材料晶界中可能发生的最显著变化之一。在合金中发现的 RIS，是由于辐照产生的不同元素原子缺陷的扩散速率不同，缺陷向晶界扩散的通量可能与原组分不匹配，因而在晶界附近造成某些元素原子的增加或减少的偏析现象。尽管 RIS 在金属中是较为普遍的现象，但是陶瓷材料

中是否存在 RIS 现象仍不清楚。我们利用单晶 SiC 合成了精确可控的 SiC 人工晶界, 结合一系列新的实验技术手段首次成功观测到了辐照后 SiC 晶界的 RIS 现象, 并研究了温度及晶界类型对 RIS 的影响。在进一步研究中, 我们发现陶瓷中 RIS 可显著提高陶瓷材料的耐腐蚀性。

MAX 相材料是一类三元纳米层状金属陶瓷材料, 拥有良好的力学性能和优良的耐辐照损伤特性。但是与传统陶瓷相比, MAX 相材料的相稳定性较弱, 特别是在辐照环境下, MAX 相材料会发生从密排六方结构到面心立方结构的相变, 这种辐照诱导的相变可能会严重影响该材料的稳定服役。到目前为止, MAX 相材料的辐照诱导相变的机理还未完全探明, 并且尚无改善 MAX 相材料相稳定性的有效手段。通过分析多种 MAX 相材料辐照过程中缺陷的行为及微观结构变化, 我们发现‘A’原子层容易在辐照粒子的轰击下离开单原子层位置, 形成间隙原子, 并进一步扰乱‘MX’层, 形成固溶体 fcc 相, 是导致相变的直接原因。我们利用在单晶多层膜复合材料中引入高浓度空位缺陷显著提高该材料辐照相稳定性。

A03-27 闪报

钼铌合金辐照析出相的形成演化行为研究

邱玺*, 李垣明、辛勇、孙丹、焦拥军
中国核动力研究设计院

钼铌合金因其优异的高温力学强度, 良好的低温加工性能, 以及与核燃料和冷却工质稳定的相容性, 是目前极具应用前景的新型反应堆堆芯结构材料。但同时钼铌合金在辐照条件下会产生数量较多且结构复杂的脆性析出相, 进而导致合金产生明显的辐照硬化与脆化现象, 从而影响在反应堆的运行安全。本文采用离子辐照的试验手段对钼铌合金辐照析出相的演化特征进行观察, 结合动力学蒙特卡洛和相场的分析手段, 阐明了钼铌合金辐照析出相的产生机制及演化行为, 为后续钼铌合金的优化改进提供了理论支撑。

A03-28 闪报

CoCrFeMnNi 高熵合金的氢氦辐照协同效应和硬化行为研究

黄洪涛¹, 罗彬¹, 付雨晨¹, 范平², 马海亮², 袁大庆²

1. 中山大学 中法核工程与技术学院

2. 中国原子能科学研究院

高熵合金具有优异的高温力学性能、耐腐蚀性能和抗辐照性能等, 是先进核能系统极具潜力的候选材料之一。先进核能系统中的燃料包壳和第一壁等结构部件长期处于高温高辐照和强腐蚀等极端环境下, 材料性能退化, 严重危害反应堆的安全运行。辐照损伤和产生的氢、氦会改变材料的微观结构, 引发肿胀、脆化和硬化等现象, 这是材料性能退化的主要原因之一。此外, 氢、氦同时存在时会进一步增强辐照损伤, 产生复杂的协同效应。因此, 研究高熵合金中氢/氦的协同效应以及辐照诱导硬化行为对其作为新型候选材料的研发具有指导意义。

本文用 270 keV 的氦离子和 140 keV 的氢离子分别在 450 °C、500 °C、550 °C 和 600 °C 下以氦离子单独辐照和氢/氦离子同时辐照的方式对 CoCrFeMnNi 高熵合金进行辐照, 并通过慢正电子多普勒展宽测量、纳米压入测量及 TEM 等测试手段, 系统地研究了不同辐照条件下 CoCrFeMnNi 高熵合金中的氢/氦的综合效应以及辐照诱导硬化行为。

研究表明:

(1) 氢/氦离子同时辐照后样品的 S 参数显著大于氦离子辐照后样品的 S 参数, 表明氢/氦离子同时辐照产生的辐照损伤大于氦离子辐照产生的损伤, 这是氢氦协同效应的结果, 其背后机理可能同氢与空位以及氢、氦与空位分别形成 He-V 复合体和 He-H-V 复合体结构的不同行为有关。

(2) 氦离子辐照后样品的 S-W 曲线在不同温度下的斜率发生变化, 而氢/氦离子同时辐照后样品的 S-W 曲线在不同温度下的斜率相同, 说明氢/氦离子同时辐照后在高熵合金内部产生的 He-H-V 复合体比氦离子辐照后产生的 He-V 复合体具有更好的热稳定性。

(3) CoCrFeMnNi 高熵合金是简单的面心立方固溶体结构, 其晶粒大小约为 104 μm 。CoCrFeMnNi 高熵合金的纳米压入测量结果显示其具有比 P91 铁素体马氏体钢更高的纳米硬度, 且 CoCrFeMnNi 高熵合金的辐照硬化程度远小于后者, 具有优异的抗辐照硬化能力。

A03-29 闪报

核级石墨及其辐照效应

申克*
湖南大学

模块式高温气冷堆和熔盐堆因其固有安全性和高出口温度等优势而成为公认的第四代先进反应堆。山东石岛湾高温气冷堆核电站示范工程于 2023 年成功并网发电, 60 万千瓦高温气冷堆项目已启动, 国内高温气冷堆的推广应用正加速进行。核级石墨作为高温气冷堆的核心材料, 其辐照寿命直接决定反应堆的寿期, 对核电安全性和经济性至关重要。当前可用的核石墨辐照性能相当于在高温气冷堆中运行 40 年, 难以完全满足第四代核电技术的需求, 因此, 研究核级石墨的制备、结构与辐照效应, 对于提高研发下一代耐辐照核级石墨, 具有重要的意义。近年来, 湖南大学先进碳素材料研究团队在核级石墨的骨料设计、提纯、结构表征与辐照效应方面开展了系统性研究工作。在骨料设计方面, 发明了天然微晶石墨基新型低热膨胀系数核级石墨, 利用微晶石墨内部的微缝隙结构, 使石墨的宏观热膨胀系数比进口核石墨 IG-110 降低 30%, 并实现了产业化; 在高温提纯方面, 阐明了杂质元素在石墨中的转变与迁移规律, 提出了杂质“孔内富集理论”, 为进一步提高石墨的纯度提供了理论基础; 在微观结构方面, 研究了中间相转变及其光学织构形成机理, 针对核级石墨复杂的多尺度非均匀结构, 开展了多尺度微观结构表征; 在辐照效应方面, 利用 iDPC-STEM 技术, 在氦离子辐照的高定向热解石墨中成功地实现了 spiro 间隙原子的直接成像, 揭示了辐照缺陷对石墨 c 轴方向热导率的增强作用; 同时, 提出了一种快速、精准的实验方法, 准确测量石墨单晶的真实辐照尺寸变化曲线, 修正了现有中子辐照数据存在的系统误差, 为深入理解石墨辐照尺寸变化行为奠定了基础。

A03-30 邀请报告

金属钨/钨铼合金的中子辐照缺陷、力学性能与氢同位素滞留行为研究

易晓鸥^{*1}、Tatsuya KUWABARA²、Vladimir Kh. ALIMOV^{1,3}、杜玉峰⁴、张磊¹、Azusa MATSUMOTO⁵、Takeshi TOYAMA⁶、Kenta YOSHIDA⁶、Somei OHNUKI¹、Yuji HATANO⁵、韩文妥¹、刘平平¹、万发荣¹、詹倩¹、

Yasuyoshi NAGAI⁶

1. 北京科技大学

2. 日本爱知工业大学

3. 俄罗斯科学院 Frumkin 物理化学与电化学研究所

4. 中国核动力研究设计院

5. 日本富山大学

6. 日本东北大学

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.% 铼合金中子辐照实验, 获得了辐照温度为“<210 °C 至 800 °C”的低剂量中子注量序列“ $4 \times 10^{22} - 1 \times 10^{25}$ n/m² ($E_n > 1$ MeV)”样品。结合电子显微学缺陷表征、微纳力学测试和直线等离子体辐照与热脱附谱分析, 揭示了在中子辐照初期金属钨中缺陷产生和累积的统计规律, 构建了“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, 探明了嬗变元素铼对辐照缺陷群体演化行为、辐照硬化、氢同位素滞留的影响与作用机制。上述工作将有利于钨部件性能的准确预测和评价, 为聚变堆关键材料研发提供参考。

A03-31 邀请报告

损伤回复阶段的再审视: 重离子辐照钨中非饱和与饱和离位损伤的热演化

王诗维^{*1,2}、王汉卿^{3,4}、易晓鸥⁵、谭伟⁶、葛麟⁶、孙钰涵^{3,4}、郭望果⁷、杨启贵⁷、程龙^{3,4}、张晓娜⁶、袁悦^{3,4}、曹兴忠⁷、付恩刚^{1,2}、吕广宏^{3,4}

1. 北京大学物理学院

2. 北京大学核物理与核技术国家重点实验室

3. 北京航空航天大学物理学院

4. 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

5. 北京科技大学材料科学与工程学院

6. 北京工业大学固体微结构与性能研究所

7. 中国科学院高能物理研究所

在核材料中建立离位损伤回复与温度之间的相关性对于理解材料性能退化至关重要。一个长期关注的问题是不同初始缺陷浓度——在损伤饱和极限以下和以上——对离位损伤回复的影响。在本工作中, 我们系统研究了纯钨在室温下用 6 MeV 铜离子辐照至 0.05 dpa (非饱和和损伤, n-SD) 和 0.6 dpa (饱和损伤, SD), 并进行等时退火后, 离位损伤回复的温度依赖性。通过结合透射电子显微镜 (TEM) 和多普勒展宽正电子湮没谱 (DB-PAS) 表征方法, 提供了辐照缺陷热演化的全方位物理图像。结果表明, 钨中不同的初始缺

陷浓度导致损伤回复的明显差异,但对辐照缺陷演化的温度依赖性没有显著影响。在 n-SD 和 SD 钨中,温和的与剧烈的损伤回复分别发生在 973 K 以下与 1123 K 以上。最值得注意的是,在 473 K 退火后,两类样品中均观察到纳米尺寸空洞。在 1873 K 退火后, n-SD 钨中的辐照缺陷完全回复,但由于空洞钉扎,SD 钨中仍存在一些位错。预计 SD 钨中离位损伤的完全回复温度约为 2000 K。当前损伤回复阶段的再审视充分表明,涵盖非饱和与饱和缺陷浓度情景的重要性。因此,我们对重离子辐照钨的损伤回复阶段进行重新定义,包括阶段 I (20 K–RT)、阶段 II (RT–653 K)、阶段 III (653–1123 K) 和阶段 IV (1123–2000 K)。

A03-32 闪报

高熵薄膜的微观变形机制及辐照效应研究

蒋丽*

大连理工大学材料科学与工程学院

核电材料在反应堆强辐照环境下会出现肿胀、脆化等缺陷,从而威胁反应堆的安全运行。发展先进核工程材料是我国核电技术顺利发展、核电系统安全高效运行的基本保障。高熵合金由于出色的热稳定性、高温强度、耐蚀性,是第四代反应堆的新型候选材料[1-3]。而纳米金属薄膜材料拥有高密度的晶界结构,不仅可以有效地阻碍位错运动从而提高材料强度,还可以起到吸收辐照产生的缺陷的作用,并促进其湮灭/复合进而提高材料的辐照损伤性能。在其基础上发展起来的纳米金属多层膜材料不仅拥有高密度的晶界,其高密度的层界面同样可以起到提高材料力学性能及抗辐照性能的作用[4-8]。本文采用磁控溅射的方法分别制备了高熵合金单层薄膜材料及多层薄膜材料,深入研究了每种材料的微观变形机制及辐照效应。结果发现,CoCrCuFeNi 薄膜在 370 dpa 高剂量辐照后无孔洞缺陷产生,材料内部发生纳米尺度的 FCC 向 BCC 结构转变,有效缓解了辐照产生的内应力,使其表现出优异的辐照抗力。Cu/TaNbMo 中熵合金多层膜的变形机制由 TaNbMo 层起主导作用,与传统双金属多层膜相比抗剪切变形能力更强。经辐照后,TaNbMo 层中仅出现纳米级孔洞,与双金属多层膜相比其抗肿胀能力大大提高。该工作不仅研究了成分复杂性对合金抗辐照性能的影响,还探索了结构复杂性主导下的材料微观变形机制及辐照效应,为设计新型反应堆用结构材料提供理论基础。

参考文献

- [1] W.Y. Huo, H. Zhou, F. Fang, et al. Microstructure and properties of novel CoCrFeNiTax eutectic high-entropy alloys, *J. Alloys Compd.* 735 (2018) 897-904.
- [2] Y. Zhang, T.T. Zuo, Z. Tang, et al. Microstructures and properties of high-entropy alloys, *Prog. Mater. Sci.* 61 (2014) 1-93.
- [3] D.B. Miracle, O.N. Senkov. A critical review of high entropy alloys and related concepts, *Acta Mater.* 122 (2017) 448-511.
- [4] Y. Chen, Y. Liu, E.G. Fu, et al. Unusual size-dependent strengthening mechanisms in helium ion-irradiated immiscible coherent Cu/Co nanolayers. *Acta Mater.* 84 (2015) 393-404.
- [5] M. Wang, I.J. Beyerlein, J. Zhang et al. Defect-interface interactions in irradiated Cu/Ag nanocomposites. *Acta Mater.* 160 (2018) 211-223.
- [6] K.Y. Yu, Y. Liu, E.G. Fu, et al. Comparisons of radiation damage in He ion and proton irradiated immiscible Ag/Ni nanolayers. *J. Nucl. Mater.* 440 (2013) 310-318.
- [7] X.Q. Liang, Y.Q. Wang, J.T. Zhao, et al. Size- and ion-dose-dependent microstructural evolution and hardening in He-irradiated miscible Cu/Zr crystalline/crystalline nanolaminates. *Surf. Coat. Tech.* 366 (2019) 255-265.
- [8] L. Jiang, Y.J. Hu, K. Sun, et al. Irradiation-Induced Extremes Create Hierarchical Face-/Body-Centered-Cubic Phases in Nanostructured High Entropy Alloys. *Adv. Mater.* 32 (2020) 2002652.

A03-33 闪报

形变增强含铝高熵合金抗辐照损伤性能研究

杨腾飞*、安旭东、朱九龙、贾同轩、陈志炜、邓辉球、胡望宇

湖南大学

本工作利用低温(77 K)形变在含铝高熵合金 $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ 中引入高密度的位错,通过 500 °C 高温离子辐照发现,位错的引入能够有效的提高材料的抗辐照肿胀性能。相比未变形样品,8.4 %的压缩形变能够将辐照肿胀降低近一个数量级。然而,随着形变量的进一步增加,辐照肿胀反而升高。分子动力学模拟发现,高熵合金中间隙原子和空位更加接近的迁移率促进了位错对间隙原子和空位更为均匀吸收。此外,高熵合金中的化学不均匀性导致位错对间隙原子和空位的俘获半径更加接近,同样也抑制了空位在母体中的过剩。

在更高应变条件下,位错的不均匀分布会引发局域的空位浓度过剩,造成体积肿胀。相关结果表明,通过形变调制位错的密度和分布可以有效的提高高熵合金的抗辐照损伤性能。

A03-34 闪报

钨基高熵合金的抗氦效应性能研究

颜永刚*

Alfred University

四川大学物理学院

高熵合金(HEAs)表现出优异的耐高能粒子辐照性能。本工作研究了钨基难熔高熵合金(WMoTaVNb)在低能氦等离子体注入下的氦效应。在相同辐照剂量(2×10^{24} He/m²)的 65 eV 氦等离子体注入后,WMoTaVNb 展现出比纯 W 更强的抑制表面纳米绒毛结构生长能力。此外,1 MeV 氦离子注入的结果显示 WMoTaVNb 中氦泡的生长缓慢,这被认为是延迟表面纳米绒毛结构生长的主要原因。通过比较钨和 WMoTaVNb 中间隙缺陷向表面区域的运输的分子动力学(MD)模拟进一步解释了以上结果。模拟结果表明,由于化学复杂性,缺陷扩散在高熵合金中展现出高度局部化。这显示如果陷阱突变和表面吸附原子形成机制主导绒毛生长,则间隙缺陷的缓慢运动可能在延迟表面纳米绒毛生长中发挥另一个关键作用。

A03-35 主题报告

核工业特殊用材料发展策略探讨

王黎明*

中核集团

本文从宏观层面系统梳理了核工业产业链各环节所需的特殊材料的现状,包括地质勘探、采冶、转化、浓缩、反应堆、后处理及核技术应用等方面。详细探讨了在各环节中存在的问题和挑战,如材料的耐辐照性、腐蚀性以及高温性能等。基于此,进一步探讨了针对核工业用特殊材料发展的策略,提出了未来研究和技术开发的方向,以期核工业的可持续发展提供有力支撑。

A03-36 闪报

RE₂M₂O₇ 体系陶瓷制备及其在核能领域应用探索

齐建起*、卢开雷、石彦立、段君静、梁乐行、朱姝懿、李子芥、肖勇其、卢铁城

四川大学

RE₂M₂O₇ 体系中 RE 位可为大部分稀土元素, M 位可为 IV 族元素(Ti、Zr 和 Hf 等),具有组成元素原子序数高、密度大、高熔点、优异机械性能和高化学稳定性等理化性能,加之体系烧绿石或缺陷萤石立方结构所具有的光学各向同性,可进一步通过致密化烧结制备成具有高可见光透过的多晶透明陶瓷材料,在核能领域的应用倍受关注。本研究从 RE₂M₂O₇ 结构和物性出发,主要开展了体系在核能领域三个方面的应用探索:在核废固化领域开展了超细 Gd₂Zr₂O₇ 粉体及纳米陶瓷制备并对陶瓷的辐照效应及核废固化性能进行了评估;在核能领域用透明窗口方面开发了一系列 RE₂M₂O₇ 透明陶瓷作为高能射线吸收、辐射探测、光致荧光和光学测温等窗口材料;在新型控制棒材料方面开展了 RE₂M₂O₇ 用于低反应性损耗控制棒材料的制备研究,为新型反应堆控制策略提供支撑。

A03-37 闪报

超高温气冷堆用 Haynes230 合金蠕变过程中显微组织演变研究

刘林¹、郑博文¹、杨亚倩^{2,3}、郝宪朝^{2,3}、马颖澈^{*2,3}

1. 沈阳工业大学材料科学与工程学院, 辽宁 沈阳 110870

2. 中国科学院金属研究所, 辽宁 沈阳 110016

3. 中国科学院核用材料与安全评价重点实验室, 辽宁 沈阳 110016

超高温气冷堆(HTGR)是第四代核能系统重点研发的堆型之一,因其热效率高、出口温度高,使其在发电、制氢(H)、化工等领域具有明显的应用优势。随着出口温度由 HTR-PM 的 700-750 °C 提升到 HTGR 的 800-950 °C,中间换热器(IHX)工作温度显著提升,其候选材料需由现在的 800H 合金更换为承温能力更高的镍基合金。Haynes230 合金是 IHX 管材极具竞争力的候选材料,为了使 IHX 材料能够保持长期的热稳定性,服役过程中 Haynes230 合金在高温持续载荷下抗蠕变性能极为重要,因此十分必要评估其抗蠕变性能。

采用 Haynes230 合金棒材开展了 800-900°C 蠕变试验, 采用 SEM 分析了蠕变断口形貌, 采用 OM、SEM、EBSD、TEM 等分析了合金初始组织和蠕变断后组织。研究结果显示, 1210 °C 固溶处理后 Haynes230 合金平均晶粒尺寸约为 70 μm (晶粒度为 4.5 级), 主要析出相为富 W、Mo 的 M_6C 型碳化物, 主要分布在晶界区域, 呈明显的条带形貌; 蠕变试样断口处有不同程度的颈缩现象, 随着蠕变温度升高和蠕变时间增加, 断口韧窝数量趋于减少, 呈沿晶断裂特征; 纵向剖面组织分析显示, 初始等轴晶沿蠕变加载方向变形, 蠕变加载力越大晶粒被拉大越明显; 不同时间的蠕变试样中均存在富 Cr 的 M_{23}C_6 和富 W、Mo 的 M_6C 碳化物, M_{23}C_6 沿晶界分布, M_6C 形貌与初始组织相近, 未发生分解; 微裂纹主要集中在晶界附近的碳化物条带处, EBSD 分析显示碳化物条带处具有较高的应力集中, 表明晶界处不规则的碳化物聚集对 Haynes230 合金蠕变性能具有较大的影响。由此推断, 调整碳化物分布形态是进一步提升 Haynes230 合金蠕变性能重要手段。

A03-38 闪报

新型稀土铝酸盐中子吸收材料研究

范武刚¹、王晓姣¹、顾军毅¹、陈向阳²、张兆泉^{*1}

1. 中国科学院上海硅酸盐研究所
2. 上海核工程研究设计院股份有限公司

针对大型先进压水堆灰控制棒和黑控制棒组件对事故容错型中子吸收材料的需求, 设计和构建以石榴石相 ($\text{Re}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$)、钙钛矿相 (ReAlO_3) 和单斜相 ($\text{Re}_4\text{Al}_2\text{O}_9$) 的稀土铝酸盐中子吸收材料体系。采用致密陶瓷的形式, 通过选择铝酸盐晶相和调节稀土 Tm, Gd, Tb, Dy 和 Y 的不同比例调控材料的中子吸收价值和应用边际。首先固相反应法制备了致密的铝酸盐陶瓷基体, 包括 YAG ($\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$) 和 YAP (YAlO_3), 并引入 Tm, Tb, Dy 等调节中子吸收价值, 研究这些堆内材料陶瓷的微结构, 力学性能和热物性等关键性能。进一步通过考察烧结助剂对亚临界水中的耐水腐蚀的影响和腐蚀坑及腐蚀产物的形成机制, 探讨在事故条件下的容错性能。结果表明铝酸盐陶瓷基体的热导率较高, 而在掺入 Tm 等重稀土后热导率数值明显下降, 但热膨胀系数吸收基本不变。YAG 和 YAP 陶瓷基体具有良好的抗水腐蚀性能, 单斜相的 $\text{Gd}_4\text{Al}_2\text{O}_9$ 腐蚀速率较快。陶瓷微结构(晶界等)也会显著影响陶瓷的耐临界水腐蚀机制和性能。稀土铝酸盐陶瓷作为新型中子吸收材料显示出较好的力学、热学和高安全性, 有望用于长寿期的压水堆燃料相关组件。

A03-39 闪报

结构与功能一体化 SmB_6 -316L 高效中子屏蔽材料研究

翟玉涛*、宗烨、黄群英

中国科学院合肥物质科学研究院 核能安全技术研究所

先进核能系统如四代堆及聚变堆具有能量密度高和中子辐射能量高、剂量大特点, 中子屏蔽是核安全的关键挑战之一。面向先进核能系统的高能中子和高温等严苛复杂的服役条件, 现有含 B 钢等屏蔽材料已难以满足应用需求。为实现高效热中子屏蔽并降低二次辐射释放, 本研究利用 Sm 和 B 元素对不同能量中子的吸收谱峰相互补充, 以纳米 SmB_6 作为中子吸收剂, 优良力学性能 316L 不锈钢为基体, 设计并制备了 SmB_6 -316L 新型结构与功能一体化中子屏蔽材料。通过机械合金化制备了 SmB_6 固溶的 316L 合金粉末, 并采用放电等离子体烧结 (SPS) 成型, 获得了致密度超过 99% 的 SmB_6 -316L。材料微观组织分析结果显示, 含 Sm 和 B 元素的析出相主要为 200-500 nm 尺寸的 Sm_2O_3 、 SmCrO_3 、 Sm_2SiO_4 化合物, 且主要分布在晶界上, 具有一定的晶粒细化作用。室温拉伸性能结果显示, 随着 SmB_6 含量的增加, 材料的强度升高, 延伸率下降, 断口形貌均为韧性断裂; 其中, 2.0wt% SmB_6 -316L 的抗拉强度为 890 MPa, 延伸率为 21.5%, 其抗拉强度与商用 2wt%B 钢相比提升了 375 MPa, 而延伸率相当。550 °C 高温拉伸结果显示, 2.0wt% SmB_6 -316L 抗拉强度为 656 MPa, 屈服强度为 566 MPa, 延伸率为 18.4%, 具有较优的高温拉伸性能。利用 HINEG 加速器中子源进行中子屏蔽性能测试结果显示, 随着 SmB_6 含量的增加, 材料的中子屏蔽性能增强, 且 2.0wt% 与 4.0wt% SmB_6 -316L 的线性衰减系数分别为 7.15 cm^{-1} 和 11.52 cm^{-1} , 中子屏蔽性能均优于 2.0wt%B 钢。综合实验结果分析可知, 在同等质量百分比中子吸收剂添加量下, SmB_6 -316L 的高温力学性能和中子屏蔽性能均优于 B 钢, 有望满足先进核能系统对高性能中子屏蔽材料需求, 为新型结构与功能一体化高效中子屏蔽材料研究提供了一条可供参考的有效途径。

A03-40 闪报

$\text{Li}_2(\text{Ti,Zr})\text{O}_3$ 聚变堆氚增殖剂烧结有序化相变机理研究

石彦立*、齐建起、卢铁城

四川大学

氚增殖剂是实现聚变堆氚燃料自持的关键功能材料。 Li_2TiO_3 是目前主流的陶瓷氚增殖剂材料之一，通过添加 Zr 形成固溶体可抑制其晶粒生长从而提升其释氚性能，具有发展潜力。研究发现随 Zr 浓度增加， Li_2TiO_3 烧结过程中从阳离子混排无序 α 相到层状有序 β 相的相变被显著抑制。针对当前关于有序-无序过程建模普遍存在的困难，本研究提出了一种阳离子对模型以阐释 $\text{Li}_2(\text{Ti,Zr})\text{O}_3$ 固溶体烧结有序化相变机理。通过将无序系统的结构信息简化为阳离子对的数目，该模型可实现小时级别时间尺度的有序-无序过程模拟。另外，通过模拟 XRD 完成了不同无序度晶体结构与实验观测的直接比较。而决定有序-无序过程速率的关键激活能参数则通过基于第一性原理的进化算法获得。该模型成功复现了实验观察到的有序化抑制效应，并说明了 Zr 浓度与终态无序度的特殊关系是由于有序化速率与实时无序度的耦合造成。

A03-41 邀请报告

关于研发不含 Nb 高性能锆合金的思考

姚美意*、周邦新、徐诗彤

上海大学

锆合金因其优异的核性能，被广泛用作燃料棒的包壳材料，目前商用的包壳材料为了提高燃耗都采用了高 Nb 锆合金。近些年，为了提高核动力装置的灵活机动性，发展“小堆（SMR）”是一个重要的方向，但在某些水冷 SMR 中为了简化系统没有采用加氢除氧装置，这样会造成一回路水中溶解氧（DO）浓度的增加。研究表明高 Nb 锆合金的腐蚀对 DO 非常敏感，所以其不宜在含氧水环境中服役。Zr-Sn 系的 Zr-2 和 Zr-4 合金的耐腐蚀性能对 DO 的敏感程度低于高 Nb 的锆合金，但其成分并不在最佳的范围内，在其成分基础上适当提高 Fe+Cr 含量并降低 Sn 含量可改善合金的耐腐蚀性能。

因此，为了满足我国发展“小型”压水堆中高燃耗燃料组件的需要，应该研发一种能够在含氧水环境中服役的新锆合金。据此，本团队研发了不含 Nb 的 Zr-0.75Sn-0.35Fe-0.15Cr（质量分数，%）合金（JAZ 合金），并进行了 24 kg 和 600 kg 铸锭试生产，加工成了不同尺寸的管材和板材，通过堆外高压釜腐蚀试验获得了令人鼓舞结果：（1）JAZ 合金在多种水化学环境中的耐腐蚀性能均明显优于 M5 和 Zr-4 合金。（2）Zr-4 合金不同型材样品之间腐蚀增重差别很大，这说明 Zr-4 合金的耐腐蚀性能对不同型材的加工工艺、不同批次合金成分的波动和杂质含量的控制都很敏感；JAZ 合金不同型材样品之间腐蚀增重差别不大，这说明 JAZ 合金的耐腐蚀性能对加工工艺不敏感。（3）JAZ 合金在含氧水环境中的耐腐蚀性能明显优于 Zr-4 和 M5 合金，这说明 JAZ 合金的耐腐蚀性能对水中的溶解氧不敏感。

A03-42 邀请报告

800°C以上熔盐堆用高温合金的研发进展

叶祥熙*

中国科学院上海应用物理研究所

作为第四代核裂变反应堆之一，熔盐堆由于其高的能量转换效率、固有安全性、适合钍燃料的利用等优越性，在世界范围内受到越来越多的关注。熔盐堆主要构件需要在高温、氟化物熔盐腐蚀及中子辐照等极端工作环境下长期稳定、安全有效地工作，因而对其所用材料提出了极大的挑战。本报告将简要介绍熔盐堆，并从其工况特点及其对材料的基本需求出发，介绍国内外熔盐堆用高温合金的研发历程和现状。同时重点介绍报告人团队十多年来发展的熔盐堆用 GH3539 合金，以及在研发过程中遇到过的问题、研发现状以及未来合金发展的一些思考。

A03-43 邀请报告

多元钚合金研究进展及其在聚变能源中的应用前景

申海海¹、张鉴玮²、周晓松¹、肖海燕²、祖小涛²、彭述明¹

1. 中国工程物理研究院核物理与化学研究所

2. 电子科技大学物理学院

钚是核聚变反应的关键核燃料，钚的安全贮存和高效利用是核聚变能源应用面临的关键问题之一^[1]，高性能钚材料研制是 ITER 研发计划中的重要研究内容之一。钚以固态钚化物的形式贮存具有贮存密度高、纯度高、安全可靠等优势，因此钚材料的研制在核材料研究领域受到极大关注。已研制的主要钚材料体系包括 Pd^[2]、U^[3]、LaNi₅^[4]、ZrCo^[5]等，但以上体系并不能满足钚材料的全部性能要求，如 Pd 钚存量小、平衡压高，U 具有放射性、易自然，LaNi₅ 易毒化，ZrCo 存在歧化效应。因此，研制新型的钚材料体系迫在眉睫。

多主元合金基于一种全新的合金设计理念,提出了制备多组元合金,通过多种元素的本征特性和元素之间的相互作用使其具有优异的综合性能^[6]。相比传统合金而言,多主元合金另一个显著特点是在合金中引入严重的缺陷,这种晶格缺陷将会有利于提升材料的力学性能。而作为贮氚料来说,晶格缺陷可能有利于增加氚的间隙位置数量^[7],并且增加氢原子的迁移能垒,显著提升多主元合金的固氢性能。因此,多主元合金有望成为一种新型的重要贮氚候选材料,促进核聚变能源的实际应用。作为潜在的新型贮氚候选材料体系,可以通过先进的电镜技术(球差、能量损失谱技术、原子级能谱、积分差分相位衬度成像、原位氢化实验等)和计算方法(分子动力学、机器学习等),进一步完善多主元合金在贮氚领域的理论(基于对组分类型、成分分布(化学短程有序)、相变过程与贮氢/氚性能联系的深入认识),从而设计出综合性能(优异的可逆贮氚容量,合适的热力学性能、快速的动力学性能、良好的循环稳定性、优秀的抗毒性性能等)满足实际工程需求的贮氚多主元合金。

参考文献

- [1] E.I. Moses, The National Ignition Facility (NIF): A path to fusion energy[J]. Energy Conversion Management, 2008, 49: 1795-1802.
- [2] Meng Liu; HongZhi Zhu; JinShui Yang; YanXia Yan; XinLiang Zhu; YongJun Su; Wang, H., Evolution of thermodynamics in Pd-H(D) system by tritium aging[J]. Journal of Nuclear Materials, 2018, 510: 149-155.
- [3] J. Northall, J. P. Knowles, Release of Radiogenic Helium-3 from Uranium Tritide[J]. Fusion Science and Technology, 2017, 71: 246-250.
- [4] D. W. James, G. C. Staack, S. E. Hunyadi Murph, Tritium Aging of LaNi_{4.15}Al_{0.85} (LANA.85) [J]. Fusion Science and Technology, 2017, 71: 565-569.
- [5] S. Konishi, T. Nagasaki, K. Okuno, Reversible disproportionation of ZrCo under high temperature and hydrogen pressure[J]. Journal of Nuclear Materials, 1995, 223: 294-299.
- [6] J.W. Yeh, S.K. Chen, S.J. Lin, J.Y. Gan, T.S. Chin, T.T. Shun, C.H. Tsau, S.Y. Chang, Nanostructured High-Entropy Alloys with Multiple Principal Elements: Novel Alloy Design Concepts and Outcomes[J]. Advance Engineering Materials, 2004, 6: 299-303.
- [7] M. Sahlberg, D. Karlsson, C. Zlotea, U. Jansson, Superior hydrogen storage in high entropy alloys[J]. Scientific Reports, 2016, 6: 36770.

A03-44 邀请报告

聚变堆钨材料的界面设计、制备与性能研究

吴学邦*、解雪峰、王慧、谢卓明、刘瑞、张艳革、李祥艳、刘长松

中国科学院合肥物质科学研究院 固体物理研究所

聚变堆面向等离子体材料是制约核聚变能发展的关键瓶颈之一。金属钨(W)具有高熔点、高热导率等优点,被认为是最有前景的面向等离子体材料。然而,纯钨存在低温脆性、高温再结晶脆性和辐照脆性等缺点,无法满足未来核聚变堆的服役要求,亟需发展兼具优异力学性能和抗辐照性能的钨材料。为此,我们从微结构调控角度入手,揭示了相界面结构对钨材料力学性能与抗辐照性能的作用机制;在此基础上,设计制备了集层片状母晶、超细亚晶和高密度可动性位错于一体的纯钨块材,实现了块体纯钨低温强度和韧性的协同提升。此外,系统地研究了钨材料在循环热负荷下的微观结构和力学性能演化规律,并揭示其热疲劳损伤机理。

- 1.X. F. Xie, Z.M. Xie, R. Liu, Q.F. Fang, C.S. Liu, Wei-Zhong Han, Xuebang Wu, Acta Materialia, 2022, 228: 117765.
2. X.F. Xie, Yange Zhang, Z.M. Xie, X. Cheng, R. Liu, Q.F. Fang, C.S. Liu, Xuebang Wu, Scripta Materialia, 2023, 224: 115136.
3. X. F. Xie, K. Jing, Z. M. Xie, R. Liu, J. F. Yang, Q. F. Fang, C. S. Liu, Xuebang Wu, Materials Science and Engineering: A, 2021, 819, 141496.
4. H. Wang, Z.M. Xie, X. Cheng, K. Jing, L.C. Zhang, J.F. Yang, R. Liu, L. Han, L. Cao, X.P. Wang, Q.F. Fang, C.S. Liu, Xuebang Wu, Journal of Materials Science & Technology, 2023, 140, 221-232.
5. H. Wang, Z.M. Xie, L.C. Zhang, L. Han, R. Liu, Q.F. Fang, X.P. Wang, C.S. Liu, Xuebang Wu, Journal of Nuclear Materials, 2022, 559, 153433.
6. Y.G. Zhang, X.Y. Li, Y.C. Xu, Y.W. Lei, Z.M. Xie, X.P. Wang, Q.F. Fang, C.S. Liu, X.B. Wu, Acta Materialia, 2023, 242, 118469.
7. J.G. Ke, R. Liu, Z.M. Xie, L.C. Zhang, X.P. Wang, Q.F. Fang, C.S. Liu, X.B. Wu, Acta Materialia, 2024, 264, 119547.

A03-45 闪报

偏滤器用钨基材料与铜合金连接技术研究进展

沈旭*、吴玉程
合肥工业大学

偏滤器是磁约束核聚变装置最为关键的系统之一，直接面临高热负荷、高通量等离子体轰击、强中子辐照等极端苛刻的工况。由于钨(W)的高熔点、良好抗离子溅射、低中子活性以及铜(Cu)的良好导热性能，偏滤器部件当前采用 W 材料与 Cu 合金的连接件制作。然而，这两种材料物化性质差异大，在服役时存在较大的热失配应力，连接界面可能开裂而导致接头失效。因此，实现 W 基材料与 Cu 合金的可靠连接，是聚变装置偏滤器部件制备中亟待解决的关键问题。

本报告从核聚变堆用 W 基材料与 Cu 合金的特性出发，从表面与界面设计与调控角度对 W 基材料与 Cu 合金主要连接技术进行归纳总结，主要包括真空钎焊、扩散焊、热等静压以及扩散连接等技术。此外，报告将针对连接质量评价方法，结合工程实际需求，对连接件的等离子体辐照及热负荷损伤行为进行评价。继而对 W 基材料与 Cu 合金可靠连接技术进行展望，为后续研究提供相关参考。

A03-46 闪报

核聚变用 W-Hf 合金的研制

秦思贵*

北京安泰中科金属材料有限公司

为提升核聚变装置用钨的性能，通过“粉末冶金+轧制”工艺添加 Hf 原位生成 W-HfO₂ 合金。添加 Hf 在钨合金中原位生成 HfO₂ 颗粒，细化了钨材料的晶粒，提高了钨合金的强度，100 °C 时抗拉强度为 1048 MPa；在 150 °C 表现出韧性，比纯钨低 50 °C；提高再结晶温度到 1400 °C，比纯钨高约 200 °C；添加 Hf 后，改善了钨瞬态热负荷性能。

A03-47 闪报

掺钾钨轧制厚板的微结构及其辐照损伤行为

梁孟霞¹、颜彬游^{2,3}、宋久鹏^{*1,2,3}、代少伟^{2,3}、任平¹、王昊⁴、柴宗俭⁴、封范⁴、王建豹⁴、练友运⁴、刘翔⁴

1. 西华大学

2. 厦门钨业股份有限公司

3. 国家钨材料工程技术研究中心

4. 核工业西南物理研究院

掺钾钨(AKS-W)是极具潜力的面向等离子体材料之一。但由于大尺寸掺钾钨块材的制备加工技术尚不成熟，要实现其在未来聚变堆中的工程应用还需要进一步研究该材料的结构演化及服役性能。本研究结合工业化的粉末冶金工艺及多道次高温轧制制备了不同变形量的 AKS-W 板材(钾(K)= 83 ppm)。研究了不同变形量下 AKS-W 板材微结构及 K 泡形态的演化机理。发现厚板轧制的 AKS-W 存在边缘晶粒轻度拉长、中心为等轴细晶与煎饼状粗晶穿插的非均匀微观组织。这种组织与厚板轧制过程中的应力梯度及心-边不均匀的纳米 K 泡分布有关。进一步对该材料进行强流氦等离子体辐照研究，结果显示在 50eV 的辐照能量及 1000K 的辐照温度下，具有更细晶粒结构的 AKS-W 相比与纯钨具有更好的抗辐照性能。其中，AKS-W 中存在的 K 泡对氦离子的捕获和其细晶效应的协同对其抗辐照性能起了重要作用。

A03-48 闪报

高熵碳化物弥散强化钨合金力学性能和高温稳定性研究

邓皓玮*、张涛

广州大学

通过碳化物弥散强化是提高钨(W)基体性能的有效手段之一。而弥散强化效果主要受弥散相的尺寸、性质以及弥散相-基体界面性质等因素的影响。近年来研究发现的高熵碳化物(HEC)与传统一元碳化物相比具有优异的热稳定性、硬度、机械强度、抗蠕变性。此外，利用 HEC 的组元众多且含量灵活可调的特性，通过调控 HEC 的晶格常数和弥散相-W 基体的界面结合强度来进一步增强 W 合金的性能。对此，我们利用碳热还原法制备了(HfNbTaZr)C，通过球磨和放电等离子烧结，将(HfNbTaZr)C 作为弥散相掺入到 W 基体中，制备了 W-0.5wt%HEC 合金。同时以相同工艺制备了 W-ZrC 合金作为对比。结果显示，W (110)与 ZrC (200) 错配度为 5.3%相比，HEC(200)与 W (110)错配度仅为 1.8%，同时 HEC 能吸附 W 中的杂质氧。此外，W-HEC 在相界面处发生了元素的互扩散，提高了 HEC 弥散相与 W 基体的界面结合强度。

因此 W-HEC 合金在保持高强度的同时, 高温塑性也得到了大幅提高, 并增强了高温稳定性。这种创新方法为核聚变等高温应用的合金设计与制备、为提高机械性能和高温热稳定性提供了新的思路。

A03-49 闪报

钨基材料热疲劳性能评估及损伤机制研究

王慧、谢卓明、刘瑞、吴学邦*、刘长松
中国科学院固体物理研究所

磁约束聚变装置中, 面向等离子体的第一壁钨基材料直接包围高温等离子体, 通常面临 $5\text{--}20\text{ MW/m}^2$ 的稳态热负荷及 $\sim\text{GW/m}^2$ 瞬态热冲击。高温、高热负荷会导致材料再结晶、开裂甚至表面熔化, 材料性能显著下降。因此, 第一壁材料在服役前, 需要对其热冲击性能进行系统的评估。基于面向聚变堆第一壁钨基材料研发和性能考核的迫切需求, 固体所核材料研究团队近年来成功搭建了 30 kW 高热负荷研究平台 EBMP-30。EBMP-30 最大输出电压 100 kV , 最大输出功率 30 kW , 电子束扫描面积达 $30\times 30\text{ mm}^2$, 扫描频率达 35 kHz , 具有高效、热加载均匀等优点, 适用于第一壁钨材料和部件抗热负荷性能的测试评价。

近期, 我们基于 EBMP-30 电子束热负荷平台, 选取弥散强化钨合金 W-ZrC、W-Y₂O₃ 和 W-K 合金作为研究对象, 开展了钨基材料热疲劳性能及损伤机制的研究。实验考察了热负荷功率 (吸收功率~APD) 在 $10\sim 30\text{ MW/m}^2$ 条件下, 材料微结构演化和力学性能退化情况。结果显示, 与前期研究的 ITER 级纯 W 相比 (20 MW/m^2 热负荷冲击后, 性能退化), W-ZrC 和 W-Y₂O₃ 表现出提升的抗热疲劳性能, 在 20 MW/m^2 热疲劳测试后, 其微结构和力学性能未发生显著变化。然而在 $\text{APD}\geq 22\text{ MW/m}^2$ 时, W-ZrC 和 W-Y₂O₃ 的力学性能出现不同程度退化, 其中, W-Y₂O₃ 的损伤程度较为严重。这是由于 W-Y₂O₃ 中粗大的 Y₂O₃ 颗粒与 W 基体之间的热膨胀系数不匹配, 导致 W 基体在反复热疲劳载荷作用下发生不可逆塑性变形和相间脱粘, Y₂O₃ 颗粒从 W 基体中脱落导致微裂纹, 且最终形成孔洞和宏观裂纹。W-ZrC 在 22 MW/m^2 的热加载后, 仅发生部分再结晶, 没有观察到颗粒脱落和开裂的现象, 仍保持 $\sim 816\text{ MPa}$ 高的极限抗拉强度。W-K 合金在 10 和 13 MW/m^2 热疲劳测试后, 由于热负荷冲击诱导 W-K 合金基体中大长径比不稳定的钾泡通过“瑞利失稳”机制演化成等轴的细小纳米钾泡, 导致合金在维持高强度的同时出现反常的延伸率提升现象 (由热冲击前 24% 提升至 31% , 纯钨和其他钨合金热冲击后延伸率均降低)。在 15 MW/m^2 热疲劳测试后, W-K 合金在 $200\text{ }^\circ\text{C}$ 时发生穿晶和沿晶模式的断裂, 延伸率降低至 6% 。 $\text{APD}\geq 20\text{ MW/m}^2$, W-K 合金出现类似纯钨的再结晶行为, 钾泡尺寸显著增大, 导致明显的脆性断裂。通过对不同钨基材料热疲劳性能的研究, 揭示了循环热冲击条件下材料微结构和力学性能的演化规律及高热负荷疲劳的损伤机理, 为聚变堆钨基材料的优化设计和制备提供参考。

参考文献

- [1]H. Wang, Z.M. Xie, Xuebang Wu, et al., Journal of Nuclear Materials, 559 (2022) 153433.
[2]H. Wang, Z.M. Xie, Xuebang Wu, et al., Journal of Materials Science & Technology, 140 (2023) 221-232.

A03-50 闪报

量子效应下钨空位中的氢同位素交换机制

孙飞*¹、刘启航¹、朱吉鹏²、周海山³、朱大焕³、大矢恭久⁴、罗来马¹、吴玉程¹

1. 合肥工业大学
2. 中国工程物理研究院材料研究所
3. 中国科学院等离子体物理研究所
4. 静冈大学

氚 (T) 在面向等离子体材料 (PFM) 中的滞留会带来放射性安全问题, 并会影响到氚的自持燃烧, 去除 PFM 中的滞留 T 有着重要意义。氢同位素交换法是一种行之有效的除 T 方法, 但目前对氢同位素交换的微观机制还缺乏系统的认识, 尤其是氢 (H) 作为量子效应最显著的元素, 其交换过程必然受到量子效应的影响。本工作考虑了量子效应产生的影响, 研究了钨空位中氢同位素交换的微观机制。首先, 使用路径积分分子动力学 (PIMD) 方法进行了原子尺度的氢同位素交换模拟, 结果表明氢同位素交换的动力是氢同位素与空位的结合能随缺陷填充水平提高而减小。氢同位素交换法能通过同位素之间的位置互换, 使 T 与空位保持最弱的结合状态, 加速 T 的去除。进一步研究发现, 氢同位素脱捕获过程受零点振动能 (ZPE) 差异的影响, 不同类型氢同位素之间表现出竞争脱捕获的倾向性, 其中 T 更容易从空位中脱捕获。而多种氢同位素在被捕获过程则受到同位素浓度和 ZPE 的共同影响。在浓度相同的前提下, 空位对 H 表现出更高的捕获倾向性。另外, 本文还基于速率理论研究了低温下 H、D 显著的扩散系数差异对氢同位素交换效率影响, 结果表明 H 快速扩散导致了更大的氢同位素交换作用范围和更高的交换效率。第一性原理计算发现了氢同位素交换的潜在机制是间隙位置存在的 H 改变了空位中氢同位素的构型, 导致了迁移能的下降,

促进了空位内氢同位素的脱捕获。本文研究揭示了受量子效应影响的氢同位素交换微观机制, 将为未来聚变堆中高效除 T 提供理论参考。

A03-51 闪报

W 基材料表面损伤和燃料滞留行为研究

张学希、乔丽、张弘、王鹏*

中国科学院兰州化学物理研究所

聚变堆面向等离子体材料问题是核聚变能商业化应用亟需解决的关键问题之一。W 基合金材料具有非常好的抗蠕变强度、韧性和较高的再结晶温度, 目前被认为是未来聚变反应堆最有应用前景的面向等离子体材料之一。鉴于此, 本文选取国际上现有热点 W 基合金材料候选材料, 比如纯 W、ITER-W、W-La₂O₃、W-ZrC、W-Re 和 W-K 合金为研究对象, 系统地研究不同等离子体辐照条件下不同 W 合金材料表面起泡和氦滞留行为。结果表明, W 基合金材料表面起泡和燃料滞留行为强烈地依赖于辐照条件。氦等离子体辐照 ($>2.8 \times 10^{24} \text{ D/m}^2$) 使纯 W、W-ZrC 和 W-La₂O₃ 表面出现两种类型的气泡, 即晶粒内和晶粒间的气泡, 不同材料晶粒内气泡均择优生长在晶粒取向为 (111) 取向的晶粒上。W-Re 合金表面仅出现晶粒内的气泡。相较而言, ITER-W 和 W-K 合金具有较高的起泡剂量阈值 ($>1 \times 10^{25} \text{ D/m}^2$), 表明 ITER-W 和 W-K 合金具有更好的抗起泡性能。随着辐照剂量的增加, 不同材料表面气泡的尺寸和密度均增加。在较高辐照剂量 ($>8.6 \times 10^{24} \text{ D/m}^2$) 时, 等离子体对材料表面的刻蚀加剧, 导致纯 W、W-ZrC、W-Re 和 W-La₂O₃ 合金表面气泡发生破裂, 且 W-La₂O₃ 合金表面的 La₂O₃ 颗粒发生优先溅射, 形成微米尺度的凹坑结构。随着辐照剂量的增加, 不同材料内的氦滞留量均增加。当辐照剂量小于 $2.8 \times 10^{24} \text{ D/m}^2$ 时, 纯 W 中的氦滞留量小于 W-ZrC 合金, 但大于 W-Re 合金。当辐照剂量大于 $8.6 \times 10^{22} \text{ D/m}^2$ 时, 纯 W 中的氦滞留量小于 W-(1%) Re 和 W-(5%), 且于 W-ZrC 合金中的滞留量趋于一致。在研究的辐照剂量范围内 ($9.6 \times 10^{22} - 2.6 \times 10^{25} \text{ D/m}^2$), W-La₂O₃、ITER-W 和 W-K 均小于纯 W。高能重离子模拟中子辐照结果表明, 高能重离子预辐照能够有效抑制 W 基合金表面晶粒内气泡的形成。此外, 高能重离子预辐照促使氦向材料内扩散, 导致 W-La₂O₃、W-ZrC 和 W-Re 合金损伤和未损伤区域内的氦浓度均显著增加。随着重离子辐照损伤程度的增加, W 基合金材料内的氦滞留量均增加, 但 W-La₂O₃、W-ZrC 和 W-Re 合金中氦滞留量的增量小于纯 W, 说明 W-La₂O₃、W-ZrC 和 W-Re 合金比纯 W 具有更好的抗辐照损伤性能。当辐照损伤程度大于 0.4 dpa 时, 纯 W 和 W 基合金中的氦滞留总量均趋于饱和。

A03-52 闪报

高剂量氦离子辐照钨的再结晶行为和异常硬度演化

彭加官^{*1,2}、程龙^{1,2}、袁悦^{1,2}、吕广宏^{1,2}

1. 北京航空航天大学

2. 北京航空航天大学先进核能材料与物理重点实验室

为了探究氦离子剂量对聚变面向等离子体材料钨再结晶行为的影响, 我们对镜面抛光的 ND 轧制钨样品进行了 40 keV 的室温氦离子注入, 离子通量为 $1 \times 10^{20} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$, 剂量分别为 $5 \times 10^{21} \text{ m}^{-2}$, $1 \times 10^{22} \text{ m}^{-2}$, $1 \times 10^{23} \text{ m}^{-2}$ 。接着, 样品经历了从 1573 K 至 1873 K (每次增温 100 K) 的周期性退火处理, 每个周期持续 1h。在每轮退火后, 通过扫描电子显微镜 (SEM) 和电子背散射衍射 (EBSD) 对样品进行了准原位表征, 分析了高温退火对钨表面形貌和微观结构的影响。维氏硬度测试显示, 三个剂量的样品在退火过程中展现了相似的硬度演化趋势: 在 1573 K 或 1673 K 前硬度下降, 在 1773 K 或 1873 K 前硬度上升, 最后持续下降直至稳定。这之前实验观察到的氦等离子体和低剂量 ($<1 \times 10^{20} \text{ m}^{-2}$) 氦离子辐照钨的硬度演变曲线存在明显差异。此外, $1 \times 10^{23} \text{ m}^{-2}$ 样品的 SEM 图像揭示, 高剂量氦离子注入后, 钨样品表面出现了大量微米级的鼓泡 (Blister)。这些鼓泡在退火过程中破裂成空穴, 并在 1673 K 时逐渐缩小, 最终在再结晶和晶粒生长的过程中消失。这些结果表明, 氦浓度在抑制钨再结晶行为和影响硬度演化中起着关键作用。我们还通过透射电子显微镜 (TEM) 研究了不同温度下样品内部氦泡的尺寸与深度分布, 并利用经典的分散屏障硬化模型 (DBH) 解释了辐照后不同退火温度下的显微组织与硬度之间的关系。这项研究对于指导氦泡工程以增强钨材料的性能具有重要意义。

A03-53 闪报

氦辐照钨中氢同位素滞留行为研究

张弘¹、乔丽¹、张学希¹、李玉红²、王鹏^{*1}

1. 中国科学院兰州化学物理研究所

2. 兰州大学核科学与技术学院

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。出于安全性和成本考虑，钨中氢同位素滞留须控制在低水平。在聚变环境中，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)，其对燃料滞留的影响不可忽视，研究氦对钨中燃料滞留的影响具有重要的科学意义。

本工作研究了高能氦离子辐照以及重离子与氦离子协同辐照钨中氦滞留行为。利用透射电镜(TEM)观察了钨中氦泡及缺陷演变，利用辉光放电发射光谱(GD-OES)测定了钨中氦的深度分布，利用热解吸光谱(TDS)研究了氦的脱附行为。结果表明，高能氦离子辐照产生位错环等缺陷以及高密度纳米氦泡。氦离子预辐照显著抑制钨表面氦致起泡行为，这一现象归结于氦离子辐照区域高密度氦俘获位对样品中氦的“均匀化”效果。氦离子预辐照使钨中氦滞留总量显著增加，直至损伤水平达到 1.15 dpa 时氦滞留饱和。不同能量(50、200、400 keV)氦离子预辐照钨中大部分氦分布在氦离子辐照区域，且最大氦浓度与最大氢浓度对应的深度一致，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。1173 K 多次退火能够降低氦离子辐照损伤缺陷密度，并使得氦泡发生熟化而轻微长大。更低温度的(573 K)退火则对氦离子辐照损伤缺陷的影响则小得多。多次 573 K 以及 1173 K 退火后，氦离子预辐照钨缺陷分别有 13%和 45%发生退火。对于未来聚变堆而言，钨中的氦难以去除，能够对面向等离子体钨材料的整个服役周期产生影响。针对重离子与不同剂量氦离子协同辐照的研究结果表明，低至 0.5 appm 的氦使重离子损伤区域中氦浓度增加，且氦浓度与氦离子辐照剂量正相关。对于未来的聚变堆而言，如此低浓度的氦导致的氦滞留量增加的现象是不可忽视的。此外，研究了不同损伤程度重离子辐照与同一剂量氦离子辐照对钨中氦滞留的影响，发现当重离子损伤程度为 0.2 dpa 以上时钨中氦滞留饱和。

A03-54 闪报

钨和钼的压缩等离子体流辐照损伤机制研究

梅显秀^{*1}、Vladimir V Uglov²

1. 大连理工大学
2. 白俄罗斯国立大学

研究了面向等离子体的材料(PFM)在与国际热核聚变实验堆(ITER)等聚变反应堆相关的类边缘局部模(ELM)热负荷下的损伤机理。利用压缩等离子体流辐照对钨和钼进行了类 ELM 热负荷实验。通过有限元模拟进行的热力学分析与实验结果相结合，讨论了开裂行为、晶粒结构演变和硬度变化。钨表面出现了宏观裂纹和微裂纹，而钼表面只有微裂纹，主要原因是快速冷却产生了拉应力。钨的高韧-脆转变温度是产生宏观裂纹的另一个必要条件。此外，由于应力的演变，垂直于表面的纵向宏观裂纹在材料内部发生了横向转变。而对于微裂纹，其产生与再凝固的脆化有关，其宽度随熔化深度的增加而增加。当类 ELM 热负荷足以熔化钨和钼时，在 Bénard-Marangoni 不稳定性的作用下，熔融层的高温梯度在其表面形成了亚微米级的胞状亚晶粒结构。从熔融层底部到表面的快速定向凝固诱导了柱状晶的形成。生成的胞状亚晶粒提高了硬度，辐照热效应和生成的柱状晶导致了软化。这些结果有助于我们了解 PFM 在极端工作条件下的失效机制，对开发未来的聚变反应堆具有重要价值。

A03-55 主题报告

核电用 308L 不锈钢焊材环境损伤研究

彭群家^{*1}、林晓冬²、高晓东³、乔利杰³、韩恩厚⁴

1. 中广核集团苏州热工研究院有限公司
2. 中国科学院金属研究所
3. 北京科技大学
4. 广东腐蚀科学与技术创新研究院

308L 不锈钢焊材被广泛用于制备压水堆核电站压力容器的内壁堆焊层，其在高温(280~330 °C)和中子辐照环境下长期服役，会发生热老化脆化和辐照损伤，成为影响材料服役安全的重要因素。

采用加速热老化处理和高温高压水环境腐蚀与应力腐蚀(SCC)试验，研究了 308L 不锈钢焊材的热老化及其对腐蚀损伤行为的影响。结果表明，热老化后 δ 铁素体相发生了调幅分解，并析出富 Ni/Si/Mn/P/Cu 的 G 相，在奥氏体/ δ 铁素体相界面处则发生 Ni、Mn、C 的偏聚。在水中添加溶解氧条件下，热老化后材料在相界面处发生了轻微局部腐蚀，表现出一定的 SCC 敏感性；在水中添加溶解氢条件下，热老化后材料在相界面处未发生局部腐蚀，具有很高的 SCC 抗力。

采用质子辐照模拟中子辐照技术和高温高压水环境腐蚀与 SCC 试验，研究了 308L 不锈钢焊材的辐照损伤及其对腐蚀损伤行为的影响。结果表明，辐照后奥氏体内产生了空洞、Frank 位错环和富 Ni/Si 团簇，

δ 铁素体相内虽未发现明显的结构缺陷,但其调幅分解程度增加,并析出了富 Ni/Si/Mn/P 的 G 相,且在奥氏体晶界和奥氏体/铁素体相界面处均发生了富 Ni/Si、贫 Cr/Mn 的元素偏析。辐照导致晶界和相界发生局部腐蚀,并促进材料的局部变形,明显增加了 308L 不锈钢焊材的 SCC 敏感性。

基于上述研究,设计了相同等效服役时间条件的辐照和热老化组合实验,以揭示辐照与热老化是否存在实时协同作用。初步发现,热老化过程可促进由辐照导致的 δ 铁素体的调幅分解和 G 相析出;辐照过程虽然也促进由热老化导致的铁素体相中的 G 相析出,但会减弱铁素体的调幅分解。这些结果说明在实际服役条件下,308L 不锈钢焊材中铁素体相的组织演变是热老化和辐照协同作用的结果。

本研究揭示了热老化和辐照对 308L 不锈钢焊材组织结构和腐蚀损伤行为的影响,为材料的服役安全评价提供了技术基础。

致谢:感谢科技部国际科技合作专项项目(No.2014DFA50800)和国家自然科学基金面上项目(No.51771031 和 No.51571204)的资助。

A03-56 邀请报告

新型含铝奥氏体不锈钢在超临界二氧化碳中应力腐蚀开裂行为研究

郭相龙*

上海交通大学

超临界二氧化碳冷却核反应堆具有效率高,体积小的优势,但超临界二氧化碳腐蚀能力强,叠加系统压力,导致材料易于发生应力腐蚀开裂。新型含铝奥氏体不锈钢具有高强耐蚀的特性,成为该系统结构材料的重要候选。但是,奥氏体不锈钢在腐蚀环境下容易发生应力腐蚀开裂,制约其应用。

A03-57 邀请报告

铁素体马氏体钢及 ODS 钢中中子辐照诱导晶界偏析研究

崔丽娟^{*1,2}、戴勇²、Manuel Pouchon²、胡逊祥¹

1. 四川大学

2. 保罗谢尔研究所

铁素体/马氏体(FM)钢及其 ODS 钢为聚变堆和第四代裂变堆的候选结构材料,研究其辐照诱导晶界偏析行为对理解辐照后材料性能退化和精准调控微观组织改善材料性能至关重要。此课题研究了 F82H、Eurofer 97 和 ODS Eurofer 在 160 ~ 521 °C 散列中子源辐照前后晶界处的偏析行为。采用三维原子探针(APT)技术对 18 种溶质元素和散裂嬗变元素的 GB 偏析行为进行了定量分析。辐照前,大部分元素在晶界富集,元素的偏析程度与其溶解度有关,符合 Langmuir-McLean 偏析理论。在 300 °C 以下辐照后,三种材料中元素的偏析程度均表现出随着原子尺寸的增大,元素由富集→贫化→富集的变化趋势。在高温(480 ~ 521 °C)下,F82H 的偏析程度仍保持随原子尺寸的变化,而 ODS Eurofer 则表现出不同的辐照偏析行为,即所有元素都在晶界富集。本研究探讨了原子尺寸、电子结构、晶界夹角、辐照温度和活性非金属元素(N 和 O)对晶界辐照偏析的影响规律。

A03-58 邀请报告

三维原子探针在核材料微观组织表征中的应用

胡蓉*

南京工业大学

三维原子探针(Atom probe tomography, APT)技术是目前世界上发展最快的高分辨率显微分析技术之一,APT 技术在金属、半导体、地质等方面应用广泛,并且在核电用金属材料的研究中发挥着不可替代的作用。利用 APT 技术对纳米尺度上微小化学成分变化的高精度分析能力,可以有效分析界面上溶质原子分布,从而解释辐照诱导产生的溶质原子的偏聚/贫化机制;进一步配合团簇分析算法,通过分辨仅有几个乃至几十个原子的纳米级团簇,可以理清辐照诱导辐照增强导致的析出相早期形核机制;从而进一步解释在辐照条件下,溶质原子在基体和界面上与点缺陷之间的交互作用以及多组分溶质原子之间的交互作用,为理解辐照产生的微观结构损伤机制提供重要实验证据。本报告以辐照后 Fe-Mn-Ni-(Si)的样品为例,通过研究 MnNiSi 等主要元素在晶界上的辐照诱导偏聚及在基体中的团簇形核机制,综合显示了 APT 技术在核材料研究领域的应用。

A03-59 闪报

核用增材制造不锈钢高温氢致损伤行为研究

李健健*、付崇龙、白菊菊、林俊
中国科学院上海应用物理研究所

增材制造由于一体化成型、适应复杂结构设计等优势，非常契合未来核能构件智能制造的趋势。不锈钢广泛应用于商业压水堆之中，而且也是第四代裂变堆及聚变堆等先进核能系统的重要候选结构材料之一。因此，本文瞄准增材制造材料在先进核能系统中应用的研究前沿，选择反应堆常用不锈钢（316 和 304 不锈钢）为研究对象，利用选区激光熔化技术（SLM）对其进行加工，通过离子辐照技术并结合测试表征方法，开展 SLM 成型不锈钢高温氦致损伤行为及其机制研究，重点探索 3D 打印材料特殊本征结构-辐照缺陷-力学性能的关联性。

在 700 °C 氦离子辐照实验下开展的有关高温氦致硬化脆化研究中发现，SLM 和传统制造（TM）316L 不锈钢的辐照硬化程度都随着离子剂量的增加而增大，但 SLM 316L 展现出优异的抗高温氦致硬化能力：当 TM 316L 硬化程度为 32%-75% 时，SLM 316L 仅为 6%-47%，并且 TM 316L 在 5×10^{16} ions/cm² 剂量下就呈现了硬化饱和的现象，而 SLM 316L 直到最高剂量 1×10^{17} ions/cm² 都没有明显的硬化饱和。对两种不锈钢的辐照缺陷观察中发现，TM 316L 中明显存在更高密度氦泡（ $7.06 \times 10^{23}/\text{m}^3$ ），远大于 SLM 316L 中（ $3.33 \times 10^{23}/\text{m}^3$ ），而通过 DBH（Dispersed Barrie Hardening, DBH）模型衡量了辐照缺陷对硬化的贡献能够证实，SLM 316L 中存在大量的纠缠位错网络壁和晶界等特殊本征结构对氦具有抑制作用，明显降低了体系内氦泡的密度，这是 SLM 316L 具有更好的抗高温氦致硬化能力的微观解释。在 350-900 °C 温度区间内，进一步开展的有关 SLM 316L 中氦泡演化机制等研究中发现：低温阶段（350-550 °C），氦泡的演化可能受制于氦原子的空位扩散机制；而高温阶段（700-900 °C），氦泡整体迁移合并机制的激活，将会影响氦原子受置换机制调控的迁移行为。而特殊本征结构对氦泡演化影响的差异在温度升高的过程中得以被证实：700-900 °C 的高温下，位错结构附近存在明显的氦泡非均相形核现象；而只有在 900 °C 时，氦泡的聚集行为才在氧化物-基体界面处被发现；而晶界对氦泡的影响在单独开展的薄片样品氦离子辐照（150-450 °C）下被能够被观察到；另外针对 350-900 °C 温度段 SLM 316L 中氦致肿胀的分析发现，SLM 316L 中存在比 TM 316L 更低的肿胀程度。上述结果表明了 SLM 316L 不锈钢中特殊本征结构对辐照缺陷的演化具有显著影响，能够显著降低氦泡对材料性能的影响。

A03-60 闪报

纳米尺度 Si 掺杂提高 ODS 钢高温抗氧化性能与机理

蔡学成^{*1,2}、许利东²、沈同德²

1. 香港大学机械工程系

2. 燕山大学亚稳材料制备技术与科学国家重点实验室

通过加 Si 形成连续的 SiO₂ 自愈膜可以有效提高合金的高温抗氧化性，然而过量的 Si 添加可能严重影响材料的力学性能、焊接性能和辐照性能等。我们开发了一种热稳定的纳米晶 ODS 钢，其 Si 含量较低（小于 1wt.%）。在高温氧化过程中，晶界处偏析的 Si 预先形成了连续的纳米级富 Si 网络，显著促进沿了 SiO₂ 的成核和 Si 元素的输运，因此极短的时间内就在合金表面形成了连续的 SiO₂ 保护膜。这种独特的纳米晶结构和 Si 元素分布特征大大加速了连续 SiO₂ 愈合层的构建，有效地消除了粗晶 ODS 钢中的失稳氧化，并显著降低了高温氧化速率。近期研究显示，这种新颖的“纳米尺度 Si 掺杂”策略可以将 304 奥氏体 ODS 不锈钢、14YWT 铁素体 ODS 钢的抗氧化性提高至 1000 °C 及以上。

A03-61 闪报

选区激光熔化 304L 不锈钢 He 离子辐照

侯娟*、郭玉玉

上海理工大学

增材制造由于其设计灵活性已成为构建反应堆部件的一种有吸引力的技术。其中选区激光熔化（SLM）技术作为金属增材制造中最成熟的技术之一，能够一体成型复杂构件，满足核电设备对复杂设计的需求，从而受到了广泛关注。在本次工作中，利用透射电子显微镜和纳米压痕研究了 SLM 制备的 304L 不锈钢（SS）和传统轧制 304L SS 经过氦离子辐照前后的显微组织和硬度变化。两种样品均在室温下进行了辐照，其氦离子注入剂量为 1×10^{17} ions/cm²。结果表明，与传统轧制 304L SS 相比，SLM 304L SS 具有更窄的辐照损伤区域，较低的氦泡数量密度和辐照硬化程度。这可以归因于 SLM 304L SS 独特的显微结构，其中的亚微米级的胞状亚晶、高密度位错和纳米氧化物颗粒与基体界面可以作为辐照诱导点缺陷的缺陷势阱，促进辐照过程中产生的点缺陷的复合，降低氦泡形核数量，因此 SLM 304L SS 具有更优的抗氦辐照性能。

A03-62 邀请报告**离子辐照对聚变堆用高温超导带材电学性能的影响**高瑞*¹、赵珀¹、卢晨阳¹、洪智勇²、刘华军³、秦经刚³

1. 西安交通大学

2. 上海超导科技股份有限公司

3. 中科院等离子体物理研究所

针对第二代高温超导——稀土钡铜氧化物 $\text{REBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ 带材在未来紧凑型聚变装置中面临的辐照环境，本研究开展了国产化带材的轻/重离子室温辐照实验，利用拉曼光谱（Raman）、球差 TEM 和电子能量损失谱（EELS）等先进的原子尺度表征技术，直观清晰地分析辐照缺陷对超导晶格以及电子结构的影响、探究辐照缺陷影响带材超导特性的内在机理。研究结果表明低剂量的辐照缺陷作为超导层额外的磁通钉扎中心，有效地提升了两种带材的临界电流密度 J_c ；而当辐照剂量过高时，高密度的辐照缺陷严重损伤了超导结构的均匀性，超导层含氧量降低，超导正交相发生向非超导四方相的转变，造成一定程度的非晶化和阳离子无序，同时大剂量辐照缺陷团簇使得超导晶格发生严重扭曲甚至局部“断裂”，团簇周围铜氧晶格的电子结构发生变化，使得带材载流能力大幅下降。值得注意的是掺杂带材由于其本身具备更优的磁通钉扎能力，在不同辐照剂量下载流能力的变化幅度较小，特别是纳米颗粒掺杂形成的局域微观应变对辐照缺陷的演变产生一定影响。上述研究结果对评估超导带材在聚变工况下承受的临界辐照剂量以及耐辐照高温超导带材的研发具有重要意义。

A03-63 邀请报告**氦离子辐照环境下钨表面起泡与变形机制的实验研究**

范存才*

香港城市大学

Helium irradiation blistering in tungsten is of intense interest for plasma-facing materials under fusion-relevant conditions. Previous studies have revealed that the surface blistering is closely related to the subsurface microstructures (e.g., bubbles and cracks) and surface orientation, but its evolutionary mechanisms remain unclear. The present work reports the helium irradiation blistering on the surface planes of tungsten {100}, {110} and {111}. The irradiation was conducted at room temperature and at different circular areas by utilizing a Helium Ion Microscope. It was found that only the blisters formed on tungsten {100} can grow to a larger size, whereas those formed on tungsten {110} or {111} tend to become wrinkled or burst when the irradiated area increases. Combined with micropillar compressions, it was also found that the surface deformation is orientation-dependent and associated with the capability, symmetry and distribution of effective slip systems in tungsten. In addition, the cross-sectional microstructural analyses provided concrete evidence that the blistering deformation starts with the nanocrack nucleation, initiated at the peak in the bubble depth distribution via interbubble fracture, and is followed by the gas buildup in a primary cavity.

A03-64 邀请报告**金属 W 中辐照位错环演化行为与机制研究**

李奕鹏、冉广*、丁一帆、刘歆翌

厦门大学

金属钨由于具有极低的溅射率和氦保留率、较高的熔点和热导率，被认为是聚变反应堆中面向等离子体材料（PFM）的主要候选者。然而，在服役中除了受到高能中子等的轰击，从等离子体中逸出的氦和氦以及氦灰（氦-氦聚变反应的产物）的注入还会引起氦累积，这将诱导钨材料中形成缺陷结构（如空洞、空位/间隙位错环、气泡等），并导致钨的性能退化，包括引起辐照肿胀、硬化和脆化、起泡和氦保留率增加。因此，深入了解钨的辐照行为对钨的实际应用和新型耐辐照钨基合金的开发具有重要意义。本研究利用厦门大学多离子束与透射电子显微镜联机原位辐照设施，开展单 He^+ 和 He^+-H_2^+ 双束协同辐照金属 W 的原位实验，研究了辐照位错环在系列辐照参数下的演化行为与相互作用机制，并建立了位错环特征参量（尺寸、密度、类型等）与辐照参数（温度、剂量率、氢氦比例等）的内在关系。在量化位错环特征参量的基础上，获得了辐照位错环演化的普适概率，典型的动态演化包括了：形核、生长、迁移、合并、湮灭、位错环与位错环反应、位错环与位错线反应、和位错网络的形成等过程；发现了高密度的氦团簇是导致 $\langle 100 \rangle$ 位错环形成的关键机制，为多年困扰的无密集碰撞级联的低能氦离子辐照导致 $\langle 100 \rangle$ 位错环形成提供了合理解释；发现 $\langle 100 \rangle$ 位错环之间反应可生成 $1/2\langle 111 \rangle$ 位错环，并给出了应力场驱动环反应的关键机制，揭示了温度的关键作用（对于钨，最低温度临界值约 880 K）。此外，探究了剂量率对辐照过程中定位错环演

化的成核率、生长速率等因素的影响，揭示了位移损伤率和弹性相互作用协同控制的位错环演化及分布行为。该工作得到国家杰出青年科学基金(项目编号：12225506)的经费支持。

A03-65 闪报

等效模拟堆内服役工况中 SiC_f/SiC 包壳气密性及失效机制研究

刘万理*

四川大学物理学院

碳化硅纤维增强碳化硅 (SiC_f/SiC) 复合材料兼具高强度、耐辐照、耐高温蒸汽氧化、低化学活性等特性，是先进核能系统中耐事故燃料包壳的优异候选材料。服役工况下中子辐照和 径向高热流密度耦合效应引发的包壳概率性开裂是限制 SiC_f/SiC 包壳在反应堆高温高中子辐照环境中长期服役的关键瓶颈。受限于中子资源短缺、中子辐照实验周期长成本高难度大等因素，利用反应堆系统开展 SiC_f/SiC 包壳的考核评价非常困难。本文通过计算模拟厘清服役环境中热-辐照-力耦合作用下 SiC_f/SiC 包壳温度场和应力场分布及演化，在堆外构建反应堆服役工况等效应力场并开展气密性研究。通过解析气密性失效的临界应力及裂纹扩展行为，阐明 SiC_f/SiC 包壳失效机制，建立 SiC_f/SiC 包壳损伤预测模型。项目的实施将为耐事故 SiC_f/SiC 包壳运行安全准则的制定和燃料元件设计优化提供理论基础，助力先进核能体系的进步与发展。

A03-66 闪报

Zr-Sn-Nb 合金在不同水化学环境中的腐蚀行为

刘庆冬*¹、曾奇锋²、于一笑¹、顾剑锋¹

1. 上海交通大学

2. 上海核工程研究设计院有限公司

锆合金的水侧耐腐蚀性能是影响其服役寿命的重要因素。针对 360 °C/18.6 MPa 纯水、含 Li^+ 水 (0.01mol/L)、富氧水 (300 $\mu\text{g/L}$, 300 ppb) 等三种水化学环境中腐蚀 300d 的新型核用锆合金 (Zr-0.45Sn-0.38Nb-0.30Fe-0.05Cu-0.015Si-0.13O) 形成的氧化膜, 利用基于透射电子显微镜(TEM)的旋进电子衍射(PED)技术, 通过对 ZrO_2 晶粒形貌、晶体取向以及氧化膜/基体(O/M)界面成分的表征和分析, 对比研究了三种腐蚀条件下氧化膜显微组织的异同, 探讨水化学环境对腐蚀行为的影响。结果表明, 在腐蚀早期 (42d), 300 ppb 溶解氧环境中的腐蚀增重是纯水和含 Li^+ 水环境中的 3 倍。腐蚀中期的增重趋于平缓, 腐蚀速率降低, 未见明显腐蚀转折。160d 时, 含 Li^+ 水样品率先出现腐蚀加速, 160~200 d 内发生腐蚀转折; 纯水样品的腐蚀速率仍逐渐下降, 直到 260~300d 时才发生腐蚀转折。同时, 由于较高的初始腐蚀速率, 富氧水样品未发现明显的腐蚀转折, 但 300d 时仍具有最高的增重。可见, 相对于纯水环境, 溶解氧和 Li^+ 作用于腐蚀动力学的阶段是不同的: 溶解氧主要提高腐蚀早期的速率, 而 Li^+ 主要诱发较早的腐蚀转折。

A03-67 闪报

硼对 GH3617 合金拉伸性能的影响

管现军*、王佳祺、吴云胜、侯介山、周兰章

中国科学院金属研究所

GH3617 合金作为高温气冷堆中间热交换器最重要的候选材料, 其高温性能对高温气冷堆的设计参数及其服役安全性具有重要意义。硼(B)作为高温合金重要的晶界强化元素, 其合金化可显著改善 GH3617 合金的高温力学性能。鉴于此, 本工作以含 B (20 ppm) 和无 B 的 GH3617 合金为研究对象, 通过不同温度下的拉伸性能测试及其相应的变形行为表征, 探究了 B 在 GH3617 合金中的关键作用。结果表明, 随环境温度升高, 含 B 和无 B GH3617 合金的强度 (包括抗拉和屈服强度) 均表现出先缓慢下降后快速下降的变化趋势; 但抗拉和屈服强度的转变点却存在显著差异。其中, 抗拉强度缓慢下降至快速下降的转变点出现在 700 °C, 而两合金屈服强度的转变点则分别出现在 900 °C 和 850 °C; 两合金经不同温度拉伸后的变形显微组织观察结果表明, 合金抗拉强度较早出现快速下降的原因主要是合金发生沿晶的中温脆性所致; 对比含 B 和无 B 合金不同温度的拉伸塑性发现, 600 °C 以下时, 两合金的均匀延伸率和面收缩率基本保持一致; 但 700 °C~850 °C 温度下, 含 B 合金的塑性明显优于无 B 合金, 提升幅度 (均匀延伸率和面收缩率) 在 10% 以上, 可见 B 元素添加可有效改善合金的中温脆性; 温度较高 (900 °C~1000 °C) 时, 含 B 合金的均匀伸长率稍低于无 B 合金, 但面收缩率却明显高于无 B 合金, 可见 900 °C 以上高温下, B 元素并不利于 GH3617 合金的均匀变形。出现这一现象的主要因素在于, 900 °C 以上高温下, 左右 GH3617 合金性能的关键在于合金的动态再结晶行为; B 可改善合金晶界本身的抗开裂能力, 却对合金晶界附近的抗再结晶性能不利, 致使 900 °C 以上高温下含 B 合金的颈缩行为稍早于无 B 合金。

资助项目：中核集团领创科研项目

通信联系人：周兰章，研究员，E-mail: lzz@imr.ac.cn; 管现军，研究助理，E-mail: xjguan@imr.ac.cn

A03-68 主题报告

Radiation Materials Science for the Nuclear Waste Forms

王鲁闽*

美国密西根大学

Long term safety of nuclear power not only relies on the safe operation of nuclear reactors, but also relies on the safe isolation of radionuclides from the biosphere in a geological repository. Nuclear waste forms are materials to enclose radionuclides in the nuclear waste repository. The requirement for durability of the nuclear waste form depends on the half-life of radionuclides in concern. Since the half-life of some transuranic isotopes are in the order of tens of thousands years, the safety concerns for their chemical and mechanical durability extends to the range of several hundred thousand, or even millions of years. The most popular nuclear waste form is borosilicate glasses, however for enhanced durability, ceramic waste forms have been considered and studied for decades. An important problem of concern is the radiation tolerance of the waste form material. While in service, the waste form will subject to radiation effects from the decays of various types radioactive isotopes. For example, alpha decay of the transuranic elements releases high energy helium and recoils that often leads to solid-state amorphization of ceramic waste forms after only fractions of a dpa. That in turn may result in increased leaching rate of radioactive elements to the environment, raising safety risks for the future generations. This talk will summarize over 30 years of the author's experience on the study of radiation effects in nuclear waste forms, including the most recent results acquired with electron and ion beam irradiation methods.

A03-69 邀请报告

先进钨基面向等离子体材料的耐高温负荷性能研究

练友运*

核工业西南物理研究院

近年来的研究表明颗粒弥散强化钨、钨泡强化钨（W-K）等材料具有优异的热、力学性能，与服役工况相关的高热负荷、等离子体辐照等研究也证明了这些钨基材料是潜在的聚变堆面向等离子体材料。本文主要介绍西物院近年来在大尺寸氧化物弥散强化钨和钨泡强化钨的研发进展。为了进一步提升性能并获得大尺寸材料，我们开展了 W-Y₂O₃、W-La₂O₃ 和 W-K 等合金的制备工艺优化研究；通过粉末制备、大尺寸坯烧结以及旋锻和热轧等热塑性加工工艺控制，获得了 20 kg 级的 W-Y₂O₃、W-La₂O₃ 和 W-K 合金棒材和板材。材料的基础性能测试和分析发现这些大尺寸钨合金均保持高的热导率，还兼具优异的低温强/韧性和高再结晶温度，能够极大拓宽钨作为面向等离子体材料的应用温度窗口。利用西物院的 60 kW 电子束材料测试平台（EMS-60）研究上述大尺寸钨合金的耐瞬态热冲击能力，并与目前的各种类型钨材料进行了性能的横向对比。还利用轧制板材和旋锻棒材制备了多种钨铜穿管水冷模块，通过 EMS-60 评估了钨材料和模块在 10-25 MW/m² 稳态高热负荷下的损伤行为；结果表明大尺寸 W-Y₂O₃、W-La₂O₃ 和 W-K 合金以及制备的水冷模块具有优异的耐高温负荷能力，能够承受了超过 1000 次的 20 MW/m² 循环热负荷；特别是旋锻和热轧的 W-K 合金经过 25 MW/m² 稳态热负荷数百次循环均没有产生宏观大裂纹。

A03-70 邀请报告

钨中超高剂量氦等离子体辐照效应及其对通量依赖性研究

程龙*、孙亦文、袁悦、吕广宏

北京航空航天大学

长脉冲高功率运行是未来商业聚变电站的核心要求，对未来聚变堆壁材料性能提出了重大挑战。本工作聚焦长时间高通量高剂量极端等离子体辐照条件所引起的钨基壁材料辐照损伤问题，基于北京航空航天大学与荷兰基础能源研究所两台直线等离子体装置，分别模拟第一壁与偏滤器典型等离子体辐照工况，在 500 K、1E28~1E29 m⁻² 超高剂量条件下系统开展了再结晶钨中氦等离子体辐照效应研究工作，获得了两种典型通量下的钨中氦致起泡、氦滞留变化规律，揭示了两种通量条件下的共通机制：氦致起泡诱导缺陷主导的氦滞留机制、基于晶界构型的晶间氦致起泡形核长大机制、晶内氦致起泡的刃型位错形核机制等作用机理；同时发现到了氦滞留与缺陷演化对等离子体通量的依赖关系。本工作研究成果为深入理解未来聚变堆极端工况下钨基壁材料的等离子体辐照损伤行为，特别是等离子体诱导缺陷形成及其对氢同位素输运行为影响提供了实验数据支持，可为聚变堆工程设计中钨基壁材料性能与寿命预测、氦滞留预测提供参考。

A03-71 邀请报告**金属钨辐照缺陷热力学与动力学行为**

孔祥山*

山东大学

在缺乏专用高强度 14.1 MeV 中子源的情况下,数值模拟是研究和预测聚变中子辐照下钨及其合金中微结构演化的不可或缺的手段。而开展数值模拟研究的关键之一是对辐照缺陷的热力学和动力学行为有清晰全面的认识,并构建较为完备的缺陷性质数据库。为此,我们系统计算获得了钨中空位团簇及其与氢/氦所组成的缺陷复合体的稳定结构、形成能、结合能、作用范围、跃迁频率、跃迁能垒和扩散系数等参数;基于多种钨、钨-氢和钨-氦经验势系统计算获得了 115 种晶界处的空位、自间隙、氢和氦的结合能、作用范围、扩散能垒、扩散系数等性质参数。基于 DFT 和物理模型预测结果评估了现有钨、钨-氢、钨-氦经验势函数在描述辐照缺陷热力学性质方面的有效性。基于上述计算结果,揭示了空位团簇结构和能量关联规律,构建或优化了空位团簇结合能、空位团簇-氢/氦结合能等参数的外推公式,归纳总结了晶界区域辐照缺陷和氢/氦性质参数与晶界本征性质参数间的关联规律,并利用动力学蒙特卡洛程序模拟再现相应的典型实验验证了模型以及外推公式的准确性。最后,以上述计算数据和模型和外推公式预测数据为主,以文献报道数据为辅,利用 MySQL 和 MongoDB 数据库管理软件,建立了拥有检索、下载、可视化等功能的辐照缺陷性质数据库。

A03-72 主题报告**高熵合金和高熵陶瓷中辐照损伤缺陷的演化模拟**

赵仕俊*

香港城市大学

高熵材料由多种主要元素组成,具有较高的构型熵。其最重要的特征是晶格中存在极端的化学无序状态。这种无序状态使得依赖局域原子环境的缺陷性质表现出复杂多变的特性,对于理解这类材料的辐照损伤行为和缺陷演化过程至关重要。我们针对高熵合金材料采用了不同的计算模拟手段,从缺陷产生、形成、扩散、复合以及缺陷之间相互作用的角度,对不同化学无序条件下的辐照损伤行为进行了研究。我们发现,缺陷的扩散和结合特性是决定高熵材料抗辐照性能的主要因素。对于高熵碳化物陶瓷材料,我们的研究表明,缺陷复合的难易程度是控制缺陷演化的关键。总体而言,我们的模拟强调准确描述无序状态下缺陷对局域原子环境的依赖性对于理解长时间缺陷演化至关重要,它决定了缺陷增长的趋势和缺陷扩散率。通过控制局域环境以调控缺陷的能量状态,并进一步影响多主元化学无序材料的缺陷演化规律,是设计耐辐照多主元材料的有效方法之一。

A03-73 主题报告**锆合金中氢化物的标定和延迟断裂**

姚仲文*

吉林大学

锆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。报告就锆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,报告将讨论锆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。当氢被锆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,将回顾与锆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。

A03-74 主题报告**Synergetic Effects of Hydrogen on Cavity Formation in Materials: Past and Future Studies**

Fei Gao*, Lihao Shi Shi

University of Michigan

The formation of cavities and impact of hydrogen in materials under radiation damage are critical topics in materials science, with significant implications for the longevity and integrity of structural materials. Early studies underscored the role of inert gases, particularly helium, in cavity nucleation and growth. However, the combined effects of helium and hydrogen on the stability of structural materials are not fully understood. In ferritic/martensitic alloys subjected to triple ion beam irradiations, the cavities of all sizes were found to consist of a helium core surrounded by a shell of hydrogen atoms, which are stable at the high temperature of 800 K. On the other hand, the various calculations by ab initio and molecular dynamics methods suggested that the binding energy of H to cavity surface is between 0.65 and 0.75 eV, based on which the estimated de-trapping temperature is approximately 360 K. This estimated dissociation temperature does not align with the observed retention of hydrogen at cavity surfaces conducted by recent irradiation experiments, challenging the prevailing knowledge of H effects. We will review the recent progress of computer simulation on synergetic effects of hydrogen on cavity formation, including influence of the strain/stress field, He/V ratio, migration energy, bubble size and helium density, and the future studies to close the gap between experiments and computer simulations are discussed and elucidated.

墙报

A03-P01

Effect of δ -ferrite decomposition on the tensile properties of one modified 316H stainless steel: experimental investigations and crystal plastic finite element simulations

Wenbin Chen, li jiang*

Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences

It has been widely reported that the formation of σ phase due to the decomposition of δ -ferrite at specific conditions plays a negative impact on the mechanical properties of steels, but the affecting mechanism has not been fully explored. In this study, one modified 316 stainless steel was designed to obtain the high strength by Ti alloying, which contains some δ -ferrite. To determine the effect of δ -ferrite decomposition, this steel was aged at 750 °C for 100 hours. The microstructure observations indicate that δ -ferrite has decomposed into σ phase and secondary austenite phase (γ_2), and σ phase particles are also formed at grain boundaries. The tensile test results indicate that the aged samples possess the higher yield strength, but more poor ductility as compared with the as-received ones. The improvement of strength should be due to the σ phase particles resulting from the decomposed δ -ferrite and those formed at the grain boundaries. The fracture observations show that the secondary cracks preferentially occur in the decomposed δ -ferrite rather than the grain boundaries with σ phase, which again indicate that the decomposition of δ -ferrite is the major cause of ductility loss. To deepen the understanding of this common phenomenon, crystal plasticity finite element method was used to simulate the development of strain distribution during the tensile deformation process. It was found that the strain incompatibility occurs at the interface between the σ phase and the γ_2 phase, which becomes more severe in the position with dense σ phase. Our results provide a clearer perspective for the role of the decomposition of δ -ferrite based on the combination of experiments and simulations.

A03-P02

A Review of Irradiation-Tolerant Refractory High-Entropy Alloys

Beiya Wang*

Shanghai Jiao Tong University

Along with the globalization of environmental problems and the rapid development of the field of nuclear technologies, the severe irradiation damage of materials has become a big issue, restricting the development of advanced nuclear reactor systems. Refractory high-entropy alloys (RHEAs) have the characteristics of a complex composition, a short-range order, and lattice distortion and possess a high phase stability, outstanding mechanical properties, and excellent irradiation resistance at elevated temperatures; thus, they are expected to be promising candidates for advanced nuclear reactors. This review summarizes the design, preparation, and irradiation resistance of irradiation-tolerant RHEAs. It encompasses a comprehensive analysis of various aspects, including the evolution of defects, changes in microstructure, and the degradation in properties. Furthermore, the challenges and insufficiently researched areas regarding these alloys are identified and discussed. Building on this foundation, the review also provides a forward-looking perspective, outlining potential avenues for future research.

A03-P03

通过层错和晶界处的纳米 MC 碳化物实现 Ni-12Mo-7Cr-2Nb 基高温合金的强度-塑性结合

王娇阳^{1,2}、蒋力^{*1}

1. 中国科学院大学上海应用物理研究所

2. 中国科学院大学

开发在高温下具有优异强度和延展性组合的耐腐蚀合金是熔盐反应堆(MSR)应用的迫切需求。在本研究中,通过适当的预时效处理,新开发的 Ni-12Mo-7Cr-2Nb 基高温合金在高温下的屈服强度和延伸率分别比固溶态提高了约 50%和 100%。这种预时效合金表现出优异的强度,并且与其他合金相比克服了中温脆化问题。显微组织观察表明,强度和延伸率的提高与纳米碳化物的形成有关。经过预时效处理后,沿着{111}密排面形成了外禀堆垛层错,并且这些层错被超密集的 MC 碳化物颗粒装饰,因此称之为堆垛层错析出相(SFPs)。SFPs 通过与位错的复杂相互作用贡献了析出强化。令人惊讶的是,SFPs 表现出比相同体积分数和尺寸的均匀分散 MC 碳化物更好的强化效果。此外,研究发现“伪连续”的晶间 MC 碳化物颗粒有利于高温塑性,尽管类似的晶间析出相在其他研究中被广泛认为是有害的。通过晶体塑性有限元分析,证明了晶间 MC 碳化物颗粒对晶界滑动的抑制作用能明显减轻三叉晶界处的应变集中。在 750°C测试条件下,晶界 MC 碳化物颗粒通过颗粒刺激形核,促进了晶界和裂纹尖端的局部动态再结晶,从而提高了延伸率。

A03-P04

具有功能梯度中间层的钨铜穿管型偏滤器部件的热应力分析

李义^{1,2}、朱大焕^{*1}、汪洋^{1,2}、何春宇^{1,2}、傅文雪^{1,2}、宣传南^{1,2}、郭宗晓^{1,2}、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. 中国科学技术大学研究生院科学岛分院

聚变装置面临的一个难题是面向等离子体部件要处理运行期间由于粒子轰击、辐射等释放出来的大量的热。偏滤器作为托卡马克主要的排热部件之一将要承受稳态下高达 10-20MW/m² 的热载。钨(W)由于高熔点、低溅射率、良好的热承载和热移除等特点目前已被选为 ITER 偏滤器的面向等离子体材料,中间层铜(Cu)和其合金锆铬铜(CuCrZr)因为高热导率被选作热沉材料。在众多钨铜偏滤器部件结构中,具有中间水冷管的钨铜穿管型部件由于其优异且稳定的热移除能力,已作为众多大中型托卡马克的首选偏滤器部件。但是因为钨材料和热沉材料之间的材料性能差异大,在受热时热膨胀系数失配会导致界面产生热应力集中,进而容易出现界面连接失效,影响其运行寿命和结构完整性。目前,已经在 EAST 上发现钨铜穿管型偏滤器部件在经过长周期运行之后出现界面开裂等损伤。预计在未来更高功率的托卡马克运行工况下,偏滤器界面开裂问题会更加严重,如何缓解这一现象对未来装置的长时稳态运行具有重大意义。

从缓解界面应力的角度出发,最合适的设计是采用 W/Cu 功能梯度材料(Functionally Graded Materials, FGM)替代原本的中层 Cu。通过调控 FGM 中 W 的分布可以实现材料成分和物理性质的缓和过渡,从而解决热膨胀系数失配,可以有效的降低界面热应力。本项工作考虑实际工艺条件的限制,设计了带有 FGM 中间层的钨铜穿管型偏滤器模型,利用有限元的方法来模拟分析其受到 10MW/m² 周期热载时的温度-应力-应变演化,对比分析梯度层的层数、成分和厚度对模型温度、界面热应力、应变的影响。材料参数使用弹塑性模型,FGM 的热物理参数通过 Kerner 法则计算得到。主要通过冷却阶段的 von-Mises 应力和径向应力来评估界面应力缓解程度。

模拟结果显示带有两层梯度层的模型就可以极大缓解界面附近的应力集中。模型整体的最大 von-Mises 应力和径向应力均位于接近连接界面的 W 侧。相比于原本的 Cu 中间层,替换成两层各 0.6mm,成分分布分别是 40 vol% W 和 75 vol% W 的梯度层之后,最大径向应力从 243.38MPa 下降到 26.22MPa,最大 von-Mises 应力从 482.92MPa 降低至 285.86MPa。而且模型的最大塑性应变也有显著下降,从 0.181 下降到 0.0197。

这项研究对带有 FGM 中间层的钨铜穿管型偏滤器的制备具有重要的指导意义,同时对未来聚变堆装置中偏滤器部件结构的设计提供参考。

A03-P05

可自发形成致密 α -Al₂O₃ 耐热不锈钢的制备与抗铅铋腐蚀性能研究

李聪聪、蒋虽合*、吕昭平

北京科技大学

随着第四代裂变堆和聚变堆的发展,核电用金属材料的服役环境愈加苛刻,温度、复杂介质腐蚀等极端服役条件使得对金属材料综合性能的提升越来越迫切。铅冷快堆作为最具发展潜力与现实性的四代核电堆型之一,其反应堆冷却剂及 ADS 系统散裂靶材为铅铋共晶合金(LBE)在有效提高燃料利用率的同时,也带来了对其直接接触材料的腐蚀问题。传统的奥氏体不锈钢(如 316L)在 LBE 服役环境中会发生溶

解腐蚀，而铁马钢（如 T91）则会发生塑性显著降低的液态金属脆性（LME）。

针对上述问题，本课题组通过特殊氧化工艺设计并制备了可自发形成 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 的奥氏体耐热不锈钢。其表面自发形成的 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 厚度约为 200 nm，中间有 Fe、Cr 掺杂。氧化物为几十 nm 宽的柱状晶，与基体呈随机取向。针对传统 Al_2O_3 涂层结合力差的问题，通过稀土 Y 掺杂大幅提高了陶瓷氧化膜和金属基体的结合力，Y 偏聚的氧化膜-基体相界面在 900 °C 冷热循环 100 次（2000 h）不产生裂纹且不发生剥落。

表面自发形成的 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 具有连续、致密、稳定的特性，保护基体免遭 LBE 侵蚀，大幅提高了材料的耐 LBE 腐蚀性能。同时，基体仍可保持优异的高温力学性能且无 LME 现象发生。润湿角实验表明，传统的奥氏体不锈钢在 LBE 中润湿角大，基体发生 Ni 溶解及 LBE 渗入。而已自发形成 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 耐热不锈钢的表面与 LBE 接触角大（不浸润）且不反应，因此在 550 °C、非控氧环境下腐蚀 2000 小时后未发生任何腐蚀。此外，因 $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 硬度远高于基体，其带来的优异耐磨性保证了其在动态（转速约 1.5 m/s）LBE 中仍具备优异的相容性。

A03-P06

应变诱导马氏体对 321 不锈钢在模拟压水堆一回路环境下应力腐蚀裂纹萌生的影响

李东兴*

中国原子能科学研究院

321 不锈钢是常见的反应堆结构材料，在实际应用中经常会发生冷应变，冷应变被认为是引发应力腐蚀开裂的重要因素，而关于冷应变在材料中引入的应变诱导马氏体在应力腐蚀开裂中的作用，目前研究尚不充分。本研究通过进行不同程度的冷、热应变，制备了不同应变诱导马氏体含量的样品，通过在模拟压水堆一回路介质中进行慢应变速率拉伸试验，测试其应力腐蚀敏感性。通过裂纹萌生信息的统计结合微观分析，发现应变诱导马氏体通过优先发生氧化腐蚀和应力腐蚀，抑制了应力腐蚀裂纹萌生。

A03-P07

铁晶界处离位缺陷与氢氦相互作用的能量学性质

钱方清、李祥艳*、刘长松

中国科学院合肥物质科学研究院

铁（Fe）基合金如 RAFM 钢以 $\alpha\text{-Fe}$ 为基体结构，具有高热导、低膨胀率及低活化等优势，现已成为聚变堆结构材料的一大候选材料。在聚变环境下，高能中子辐照导致结构材料中产生大量的离位缺陷，包括空位（vacancy, V）和自间隙原子（self-interstitial atom, SIA）。同时，嬗变反应会产生高浓度的氢、氦（H、He）。实验表明，纳米晶相较粗晶呈现更低的辐照肿胀，这得益于纳米晶中的高密度晶界（GB）可有效俘获缺陷并促进其复合。进一步地，计算模拟还揭示了晶界处由间隙发射/反射（IE/IR）诱导的晶粒内空位复合。这些结果明确了 GB 在抵抗纯离位损伤中所发挥的作用。然而，目前尚不明确晶界是否能够抑制离位缺陷与氢氦协同作用加剧的辐照损伤以及相关的原子细节。

基于此，本文以 $\alpha\text{-Fe}$ 为模拟体系，构造了具有不同晶界特征的 43 个对称倾侧晶界作为主要研究对象。借助分子静力学计算，我们进一步获得了 GB 处辐照缺陷的能量学性质，以此为基础，初步考察了离位缺陷与氢氦的协同作用。结果表明，上述四类缺陷均可偏聚到 GB，且除 H 之外的三类缺陷均可与同类型缺陷相互结合。SIA 与 He 的结合较弱，且几乎不与 H 结合。V 与 H 的结合也很弱，部分晶界处 V 无法捕获与容纳 H，但其与 He 的结合能相对较高且可捕获多个 He。此外发现 H 对 V 间结合能影响远小于 He，且 H 的存在不会改变双空位（V2）的构型，而 He 会导致多数 GB 处 V2 构型发生改变。当 V 中同时存在 H 与 He 时，虽然 H 对团簇捕获 V 的影响依旧很小，但此时 H 均表现为促进捕获 V。最后，发现 H 与 He 共存时对离位缺陷复合的抑制作用略强于 He，而远强于 H。

上述结果初步揭示了晶界处离位缺陷与氢氦的相互作用，为后续考察晶界处氢/氦泡演化以及氢氦介导的缺陷复合过程奠定了基础。

A03-P08

铀钚合金中绝热剪切带的微观结构表征

张胜、肖大武、邹东利*

中国工程物理研究院材料研究所

铀及铀合金广泛应用于核工业领域，其中的铀钚合金是核工业领域重要的金属结构材料。铀钚合金在其服役过程中常发生动态变形，形成绝热剪切带，随后裂纹沿着绝热剪切带扩展，导致铀钚合金的失效。为了探究铀钚合金中绝热剪切带中微观结构的演化规律，本工作采用分离式霍普金森杆实验，得到了不同

应变下的铀钕合金试样。采用金相显微镜、扫描电子显微镜、透射电子显微镜表征铀钕合金中绝热剪切带的微观结构和形貌。本工作发现铀钕合金绝热剪切带可分为晶粒发生严重扭转的变形带和由细小等轴晶粒组成的转变带，转变带的晶粒尺寸为 100 nm 左右。通过高分辨透射电子显微镜表征绝热剪切带中的晶粒发现，单个晶粒中存在着取向差别较大的大量的晶畴，尺寸为 3 nm 左右。旋转动态再结晶机制合理解释了铀钕合金中绝热剪切带纳米晶粒的形成过程。

A03-P09

高熵效应对烧绿石中 He 行为影响的第一性原理研究

高荣荣、夏小怡、刘晨光*

烟台大学核装备与核工程学院

与单一组分烧绿石相比，高熵烧绿石有能够同时固定多种放射性核素的潜力，被认为是一种潜在的核废料固化基材，受到越来越多的关注。本文采用第一性原理方法分析了 B 位高熵陶瓷(HEC) $Gd_2(Ti_{0.25}Zr_{0.25}Sn_{0.25}Hf_{0.25})_2O_7$ 和 $Gd_2X_2O_7$ ($X = Ti, Zr, Sn, Hf$) 对 He 行为的影响。根据 He 在各个间隙位置的形成能可知：He 在 $Gd_2X_2O_7$ ($X = Ti, Zr, Sn, Hf$) 中最容易占据在八面体间隙位置，对于 $Gd_2Hf_2O_7$, He 更容易占据在 Gd-Gd 间隙位置；He 在高熵烧绿石的滞留位置是由两个 Gd 原子、一个 Zr 原子和一个 Ti 原子组成的四面体间隙位置。当存在空位时，He 的位置偏好均是 Gd 空位。根据多个 He 在各个体系的结合能可知高熵烧绿石 $Gd_2(Ti_{0.25}Zr_{0.25}Sn_{0.25}Hf_{0.25})_2O_7$ 比单一成分烧绿石 $Gd_2X_2O_7$ ($X = Ti, Zr, Sn, Hf$) 有更强的容纳能力。

A03-P10

钒合金中单/双间隙迁移机制的机理研究

魏明亮¹、张朋波*¹、李国峰¹、嵇海川¹、王桂秋¹、郑鹏飞²

1. 大连海事大学

2. 核工业西南物理研究院

在高能中子辐照下，结构材料会产生大量的空位（vacancies）和自间隙原子（SIAs）。这些未复合的点缺陷会聚集形成空洞和位错环，导致材料微观结构演变、辐照膨胀硬化，最终使材料的力学性能退化。低活化钒合金因其优异的抗辐照和高温力学性能被认为是先进核能系统中重要的候选结构材料。实验表明^[1]添加合金元素钛（Ti）可以显著抑制钒合金中空洞的形成并降低肿胀率，然而铬（Cr）的添加则导致更严重的肿胀，这与点缺陷的迁移和积聚行为密切相关，但其辐照损伤的微观机制尚不清楚。最近我们报道了钒金属中自间隙/空位团簇的稳定性^[2-4]以及钒合金中 Ti/Cr 对空位团簇迁移的影响^[5]，SIA/Cr 间隙更容易形成三维平行的间隙团簇^[2, 3]，但 SIA 的迁移机制以及 Ti/Cr 对 SIA 迁移的影响仍不清楚。本研究通过第一性原理计算系统地研究了钒金属中单/双间隙的迁移机制以及合金元素 Ti/Cr 对 SIA 迁移的影响。结果表明 SIA 具有三种迁移机制，分别是沿<111>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。SIA 可转变为<110>哑铃结构作为过渡态降低迁移势垒。不同的迁移势垒对应着不同的活化温度，这与实验观察到的 SIA 在低温下为一维迁移，而高温下转变为三维迁移一致^[6]。对于双间隙的迁移，结果表明连续迁移（0.009 eV）比同时迁移（0.94 eV）在动力学上更有利。另一方面，SIA 迁移至 Ti 区域相对于纯钒中具有更低的迁移势垒，而 Ti-SIA 复合物的解离对应着更高的解离能。弥散的 Ti-空位复合物可作为吸收剂捕获自由的 SIA 和空位，并为其复合提供更多的复合位点。因此，Ti 对点缺陷具有钉扎作用，降低了点缺陷的扩散率。而 Cr 易与 SIA 形成混合 V-Cr 间隙，抑制了 SIA 与空位的复合，本工作证明了实验上 Ti 的添加降低了辐照肿胀及空洞的形成，而 Cr 的添加加剧了辐照损伤。

参考文献：

- [1] K. Fukumoto, K. Tone, T. Onitsuka, et al, Nucl. Mater. Energy 15 (2018) 122-127.
- [2] P.B. Zhang, M.L. Wei, Y.G. Li, et al, J. Nucl. Mater. 553 (2021) 153055.
- [3] P.B. Zhang, M.L. Wei, X. Wang, et al, J. Nucl. Mater. 574 (2023) 154160.
- [4] M.L. Wei, P.B. Zhang, S.M. Zhou, et al, Nucl. Mater. Energy 33 (2022) 101296.
- [5] M.L. Wei, P.B. Zhang, X. Wang, et al, J. Nucl. Mater. 591 (2024) 154930.
- [6] W. Jager, H. Trinkaus, J. Nucl. Mater. 205 (1993) 394-410.

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-P11

奥氏体钢中合金元素 Cr/Ni-氮和空位-氮-Cr/Ni 复合缺陷团簇稳定性的第一性原理研究

李国峰、张朋波*、嵇海川、魏明亮

大连海事大学

奥氏体钢 (fcc-Fe) 因其良好的高强度, 耐腐蚀性和抗辐照等优点成为重要的核工程材料。在传统奥氏体钢中过饱和的氮 (N) 易与合金元素形成氮化物析出, 从而降低奥氏体钢的力学性能, 然而在激光增材制备的奥氏体钢中添加饱和 N 和 C 形成的超级奥氏体钢具有超高的强度, 良好的延展性, 以及更强的耐腐蚀性。实验上证明[1]这种超级奥氏体钢主要是内部形成稳定的短程有序结构, 推测该结构包含间隙 O, N 和 C 元素, 从而抑制了高温下氧杂质对材料力学性能的损伤。因此在原子尺度上揭示其优异性能的微观物理机理具有重要意义。基于上述实验和我们最近报道的奥氏体钢中合金元素 Cr/Ni-O 杂质相互作用行为研究[2], 本工作通过第一性原理计算系统地研究了间隙元素 N 与合金元素 Cr/Ni 的相互作用和 N-Cr 复合缺陷团簇的稳定性以及 Cr/Ni 对空位捕获 N 的影响。能量上, Cr 能吸引 N 原子 (结合能为 0.36 eV), Cr 的存在提高了空位捕获 N 的能力, 而 Ni 与 N 排斥作用 (结合能为 -0.20 eV)。其次, 计算了一系列不同构型的 N-Cr/N-C-Cr/N-O-Cr/N-C-O-Cr 复合物的结合能, 获得了小尺寸 Cr_mN_n 团簇 (m, n ≤ 4) 的稳定构型及更大尺寸 N-C-Cr/N-O-Cr/N-C-O-Cr 复合团簇的稳定性。结果表明具有正四面体结构的 Cr₄N₄ 团簇为最稳定的结构单元。由于间隙 O 比 N/C 更容易解离到体相中, 我们测定了一系列 N-O-Cr/N-C-O-Cr 复合团簇中 O 原子的解离能, 结果发现复合团簇中 N 和 C 的存在提高了 O 的解离能, 从而抑制了 O 的解离, 使得材料具有更好的高温力学性能。NEB 计算表明在八面体间隙更稳定的 N 倾向位于四面体间隙作为过渡态从而促进迁移。相对于纯 fcc-Fe (迁移能为 2.16 eV), Cr 的存在降低了 N 迁移势垒 (迁移能为 0.01 eV), 表明 N 更倾向于迁移向富含 Cr 区域。最后通过经验公式表明 N 在纯 fcc-Fe 中扩散系数为 $1.33 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ 。随着 Cr 浓度的增加, N 的有效扩散率降低。本工作表明超级奥氏体钢中形成的 Cr₄N₄ 复合团簇显著抑制了 N 和 O 的解离与扩散, 抑制氮氧化物的形成, 进一步提高了奥氏体钢的力学性能。

参考文献

- [1] Y. Chen, H.M. Zhu, P.B. Zhang, Z.C. Wang, M. Wang, G. Sha, H. Lin, J.Y. Ma, Z.Y. Zhang, Y. Song, P.F. Zheng, L.H. Zhou, S. Li, H. Liu, L.Z. Shen, C.J. Qiu*, An exceptionally strong, ductile and impurity-tolerant austenitic stainless steel prepared by laser additive manufacturing. *Acta Mater.* 250 (2023).
- [2] P.B. Zhang*, T.T. Zou, D. Sun, Y. Yin, J.J. Zhao, Oxygen interaction with alloying elements (Cr/Ni) and vacancies in dilute austenitic iron alloys: A first-principles study, *Fusion Engineering and Design* 163 (2021) 112123.

致谢: 国家自然科学基金 (12175028) 和辽宁省自然科学基金 (No. 2023-MS-128)。

A03-P12

离子辐照下 VTaTi、HfNbZrTi 难熔高熵合金与传统 V 合金缺陷行为和硬化效应对比研究

朱芷希¹、陈尚¹、张秋红¹、李雷¹、V. V. Uglov²、靳柯*¹、郭寻¹、王鲁¹、薛云飞¹

1. 北京理工大学

2. Belarusian State University

先进核能系统中的结构材料面临更为严苛的高温 and 辐照环境, 亟需提升其耐高温、抗辐照性能。近年来, 高熵合金作为一类由多种元素以近等原子比组成的新型合金, 利用其“多主元”效应调控缺陷行为从而提升了材料的抗辐照性能。其中, 难熔高熵合金因优异的高温力学性能得到了特别的关注, 但是其辐照损伤规律和抗辐照性能还不清晰。对此, 我们对比研究了 VTaTi 和 HfNbZrTi 两种典型难熔高熵合金与传统 V-4Cr-4Ti 合金在 Kr 离子辐照下微观结构和力学性能演化的差异, 以便进一步理解难熔高熵合金抗辐照机理, 并为最终反应堆中先进材料的应用设计提供科学指导。

纳米压痕硬度测试结果表明, 辐照后 V-4Cr-4Ti 出现了显著的硬化现象, VTaTi 的硬化程度则明显更低, 而 HfNbZrTi 甚至未出现硬化现象。进一步表征辐照区压痕下的位错形貌发现, V-4Cr-4Ti 中变形位错受到大量辐照位错环钉扎, 是导致硬度大幅增加的主要原因; 同时, 由于变形位错对辐照缺陷的“清扫”作用, 在压痕下还出现了较多无缺陷通道; 相比而言, VTaTi 中位错环尺寸和密度均显著降低, 从而变形位错仅受到微弱的钉扎作用; 而在 HfNbZrTi 中, 在透射电镜下观察不到位错环或其它辐照缺陷的生成, 相应的也并没有观察到变形位错受钉扎的现象。结合计算模拟和原子级 STEM-EDS 结果, 我们认为难熔高熵合金对缺陷生成和演化的抑制作用主要来自于较大的晶格畸变和局域化学成分波动, 导致间隙原子迁移能升高, 抑制了间隙团簇的聚集; 同时由于间隙原子和空位的迁移能范围重叠, 促进了间隙-空位对的复合。值得一提的是, 我们还观察到了 HfNbZrTi 轻微的辐照后软化效应, 并对应着压痕下应变区宽度的增加, 这一特殊现象可能与 HfNbZrTi 难熔高熵合金中的短程有序和间隙杂质占位局域化结构受辐照影响而发生改变有关, 有待后续进一步深入研究。

A03-P13

奥氏体钢中碳与合金元素(铬/镍)相互作用的第一原理研究

嵇海川、张朋波*、李国峰、魏明亮

大连海事大学

奥氏体钢因具有优异的抗辐照和抗高温等优异力学性能是一种重要的核工程材料。碳(C)总是以合金元素或杂质元素的形式存在于奥氏体钢中,当其含量超过奥氏体钢溶解极限时,在高温条件下会导致奥氏体钢的力学性能发生显著变化(如脆化或硬化等)[1],因此研究碳与合金元素之间的相互作用对理解宏观材料性能变化具有重要作用。本工作通过第一性原理计算系统地研究了奥氏体钢中碳与合金元素(Cr/Ni)及空位的相互作用。Cr和Ni都降低了C的固溶能(超过0.10 eV)。Cr和C之间存在较强的吸引作用(结合能为0.23 eV),而Ni与C之间存在较弱的吸引作用(结合能为0.09 eV)。其次,测定了一系列小尺寸Cr-C复合缺陷团簇的稳定性,获得了CrmCn复合团簇的最低能量结构(m,n=1-4),结果表明CrmCn复合团簇的稳定性随尺寸的增加而明显增大,且四面体交错排列的Cr4C4构型最为稳定。进而研究了Cr-C-O复合缺陷的稳定性和C含量对氧解离行为的影响,通过计算了一系列O-Cr7C7-nOn-1(n=1-7)的构型中氧的解离能,结果表明C的增多明显增大了氧的解离能,表明C存在能抑制氧的解离,宏观上提高了材料的高温力学性能,吻合了实验观测结果[1]。最后通过Mac-Nabb和Forester公式预测了添加不同Cr含量(0.01~10wt.%)对C有效扩散率的影响,结果表明C的有效扩散率随Cr含量的增加而显著减小。本工作表明奥氏体钢中C与Cr能够形成稳定的复合团簇,且Cr-C-O复合团簇形成能稳定氧杂质,进而提高奥氏体钢的高温力学性能。

参考文献

[1] Y. Chen, H.M. Zhu, P.B. Zhang, Z.C. Wang, M. Wang, G. Sha, H. Lin, J.Y. Ma, Z.Y. Zhang, Y. Song, P.F. Zheng, L.H. Zhou, S. Li, H. Liu, L.Z. Shen, C.J. Qiu*, An exceptionally strong, ductile and impurity-tolerant austenitic stainless steel prepared by laser additive manufacturing. *Acta Mater.* 250 (2023).

致谢: 国家自然科学基金(12175028)和辽宁省自然科学基金(No. 2023-MS-128)。

A03-P14

一种新型的增材制造 ODS 低活化钢的组织及性能

张舒博¹、马梦晗¹、张文井¹、李恺伦²、蓝宇彬¹、齐霄楠¹、刘伟*¹

1. 清华大学

2. 中国科学院工程热物理研究所

提高低活化钢的高温力学性能是核聚变反应堆包层材料的前沿课题。采用粉末冶金方法制备 ODS 低活化钢不仅制备工艺复杂,而且加工性能差,难以大规模应用。采用纳米 MX 相强化的 CNAs 低活化钢,高温蠕变性能和抗辐照性能达不到 ODS 低活化钢的水平。采用熔铸工艺制备的 ODS 低活化钢难以有效控制氧化物形成的热力学和动力学,其组织均匀性和力学性能有待改善。

我们设计了一种新型的增材制造 ODS 低活化钢及其成形工艺,利用打印过程中的氧气氛围,控制氧化物形成的热力学和动力学过程,使活性元素(Ti、Y等)在基体中原位氧化,形成弥散的氧化物,从而极大地提高了增材制造低活化钢的高温力学性能,600°C抗拉强度从499MPa提升到923MPa,同时其蠕变性能不亚于 ODS-Eurofer97 系列,为一体化制备 ODS 低活化钢复杂构件提供了新思路。

A03-P15

难熔高熵涂层改良的铁素体/马氏体钢在液态铅铋合金中的脆化和腐蚀行为机制

李世江、孙璐、佟振峰*

华北电力大学

铁素体/马氏体钢(F/M 钢)因其卓越的耐腐蚀性和辐照性能有望作为结构材料应用于第四代核反应堆,这是一种以铅铋共晶合金(LBE)作为冷却剂的反应堆。然而,F/M 钢通常对 LBE 敏感,当其暴露于 LBE 时会发生液态金属脆化和腐蚀等相容性问题。

本工作中,使用磁控溅射 TaWVCr 难熔高熵涂层来保护 F/M 钢免受液态金属脆化的影响。为了验证涂层对降低液态铅铋脆化效应的有效性,在 350 °C 的静态饱和氧的 LBE 中,对涂有和未涂有 TaWVCr 涂层(TaWVCr/HT9 vs HT9)的 F/M 钢进行了铅铋腐蚀试验和慢应变速率拉伸试验。结果表明,HT9/TaWVCr 试样的断后伸长率为 17%,是没有涂层的 HT9 试样的 3 倍(<5%)。即使 TaWVCr 涂层的厚度仅有 5 μm 左右,其仍能有效地保护 HT9 钢不受 LBE 的脆化影响。HT9 钢的脆化主要与表面氧化皮开裂有关,氧化皮开裂后尖锐的裂纹扩展到基体内部,为 LBE 的湿润提供通道。相反,TaWVCr 涂层大大保护了 HT9 基体不被氧化裂纹刺穿基体,降低了基体对液态铅铋脆化的敏感性。试样的断裂模式由未涂层的脆性断裂转变为涂层后的韧性断裂。

在较低温度下(~350 °C),F/M 钢容易发生铅铋的脆化效应,这将造成材料的塑性严重缺失。以上的

工作已经证实 TaWVCr 涂层可以有效降低液态铅铋的脆化影响。为了评估涂层在更高温度下的铅铋腐蚀性能,本工作中还对涂覆 TaWVCr 涂层前后的 F/M 钢在 550°C 的静态饱和氧的 LBE 中的腐蚀行为进行了研究。结果表明,HT9 和 TaWVCr/HT9 的断裂模式均为塑性断裂。多尺度的微观表征结果表明,HT9 的腐蚀仍与表面氧化皮开裂有关,氧化皮裂纹延伸至基体,但在裂纹尖端的 Cr₂O₃ 富集区终止。相反,塑性变形过程中涂层发生了氧化和溶解腐蚀,在涂层下方生成双重氧化层,裂纹在磁铁矿层中萌生,而在铬铁矿层中湮灭。此外,在涂层下方的基体内部发现一层由 Cr₂O₃ 和 FeCr₂O₄ 组成的微米级的渗透氧化层,这加速了基体的氧化腐蚀。

通过以上试验分析,TaWVCr 难熔高熵涂层改良的铁素体/马氏体钢在低温 350 °C 以下的饱和氧 LBE 中具有十分出色的抗铅铋脆化能力,但当温度升高到 550 °C 以上,涂层由于自身局部的严重腐蚀和破坏导致其整体的耐铅铋腐蚀能力表现逊色。未来如果该 TaWVCr 难熔高熵涂层想要在铅冷快堆中得到很好的应用,可以考虑在高温(550 °C~) LBE 中通过控制溶解氧浓度来减少涂层的氧化腐蚀和溶解,从而提高铅铋的腐蚀抗力。

A03-P16

金属 Mo 中空洞对于点缺陷及缺陷团簇的偏置因子研究

杨业鑫、孙璐、秦梦路、佟振峰*

华北电力大学

在辐照过程中,原子尺度上缺陷的相互作用会显著影响材料的宏观性能,如空洞膨胀,降低机械性能,并限制裂变和聚变反应堆中结构部件的寿命。近年来的研究表明,金属材料中的位错对点缺陷的捕获偏置机制被普遍认为是辐照金属中空洞肿胀的主要驱动力,然而,基于该理论的空洞肿胀热准则在中等温度范围之外失去了解释力。相反,通过引入空洞偏置的概念,新提出的偏置驱动准则在整个温度范围内几乎等效。本工作基于新提出的空洞偏置驱动机制,利用分子静力学方法并确定了 BCC-Mo 中点缺陷以及一系列尺寸的缺陷团簇与包含 59 个空位的空洞之间相互作用的能量景观图,使用分子动力学计算了不同间隙缺陷的迁移行为,确定了空洞与缺陷之间的相互作用距离,揭示了不同温度下有效偏置与空洞尺寸之间的函数关系,预测了更大尺寸的缺陷团簇被空洞捕获的偏置因子,这些结果将为缺陷演变和微观结构变化的中尺度建模提供了重要的原子输入。

基于分子静力学计算得到的点缺陷以及尺寸 2-7 的缺陷团簇与中心空洞之间相互作用能量的横截面图,研究发现空洞对不同点缺陷的捕获体积有显著的区别。对于间隙缺陷,随着间隙缺陷的尺寸增加,空洞对间隙缺陷的捕获体积沿<111>方向增加。然而,对于中心空洞对不同尺寸的空位型缺陷具有相似的捕获体积。这种空洞与缺陷相互作用的能量景观变化与目标缺陷对其周围点阵原子引入的应变场区域有关。

在确定中心空洞对不同尺寸缺陷的相互作用能量景观图后,基于能量判定标准确定不同温度下中心空洞对目标缺陷之间有效相互作用距离,通过拟合出相互作用距离与目标温度与熔点之间的拟合因子。使用分子动力学方法确定不同类型目标缺陷的迁移行为,结果表明当温度低于 600K 以下时,BCC-Mo 中不同尺寸的间隙缺陷均表现为一维迁移。随着温度的升高,单 SIA 表现出三维迁移的行为,而随着温度增加到 1373K,间隙团簇的迁移仍表现为一维扩散。针对目标缺陷不同的扩散行为,利用平均场速率理论中针对不同迁移行为的目标缺陷使用对应的偏置方程求得空洞对不同目标缺陷的捕获偏置。最后通过计算更大尺寸的目标缺陷与空洞的相互作用距离,利用机器学习方法预测出空洞对感兴趣的目标缺陷的捕获偏置。该工作为研究缺陷演化和微观结构变化的中等尺度模拟计算方法提供了重要的原子输入参数。

A03-P17

基于机器学习方法加速设计具有所需相和性能的低活化高熵合金

李孝晨、郑明杰*、李畅、潘昊、丁文艺、郁杰

中科院合肥物质科学研究院

低活化高熵合金(HEAs)因其优异的力学性能和抗辐照性能而被认为是先进核能系统的新一代候选结构材料。然而,潜在的巨大成分空间给低活化 HEAs 的设计带来了极大挑战。传统试错法难以满足 HEAs 的成分设计需求,而经验参数法主要针对高熵合金的相结构设计,缺乏对性能的预测。近年来发展的机器学习方法为优化设计 HEAs 提供了一种新途径。目前已有的机器学习模型通常集中于 HEAs 的相结构设计或是性能预测,对于合金设计的辅助效果有限。为了实现 HEAs 的高效设计,亟需发展相结构和性能的综合设计方法。

针对上述问题,本研究提出了一种基于机器学习的集成设计策略,并设计制备出一种具有体心立方(BCC)结构的单相低活化高熵合金 Fe₃₅Cr₃₀V₂₀Mn₁₀Ti₅。在相结构设计方面,构建了两个准确率>85%的机器学习分类模型来分别筛选固溶强化(SS)和单相 BCC 的 HEAs。在性能预测方面,建立了一个基于

机器学习回归算法的 HEAs 硬度预测模型, 其相关系数 (R) >0.9 。通过相结构与性能的集成设计策略, 高效设计具有所需相和性能的低活化 HEAs。新设计制备的硬度为 555.9 ± 15.3 HV 的 BCC 单相低活化 HEA ($\text{Fe}_{35}\text{Cr}_{30}\text{V}_{20}\text{Mn}_{10}\text{Ti}_5$) 满足设计要求, 通过实验验证了这种集成设计策略的有效性。结合参数法分析, 提出了两种新的有效筛选 SS 和 BCC 的相分类准则, 准确率均超过 95%。

综上, 本研究利用基于机器学习的集成设计策略实现了低活化高熵合金的高效设计, 相关研究成果将促进其他先进材料的结构和性能集成设计。

A03-P18

钢合金元素在液态铅铋中的团聚行为

丁文艺*、姜志忠、郑明杰

中国科学院合肥物质科学研究院核能安全技术研究所

铅铋共晶合金 (LBE) 具有熔点低、沸点高、高导热和中子物理性能好等优点, 是第四代铅基反应堆的主要候选冷却剂材料。然而在服役工况下, 液态 LBE 和与之接触的结构材料 (如主容器、包壳、堆内构件等结构件) 之间存在相容性问题。从结构材料选取的角度, 由于要和具备一定温度 (瞬时甚至达 650°C) 的液态 LBE 直接接触, 将遭受溶解腐蚀、氧化和重金属冲刷腐蚀等 (液态金属腐蚀效应), 将直接危害其自身完整性; 力学性能测试还表明, 液态金属环境下的材料还会发生脆化 (即液态金属脆化效应)。从液态 LBE 的角度, 在材料发生腐蚀的同时, 大量的腐蚀产物 (合金元素、氧化物等) 也将进入液态 LBE, 长时间运行工况下, 这些物质可能会发生团聚甚至成团堵塞承担载热功能的管道, 从而影响液态 LBE 的流动性和导热性能。在本工作中, 结合第一性原理分子动力学模拟, 开展主要钢合金元素在液态铅铋中的团聚行为研究。通过分析钢主要合金元素在高温液态铅铋中的分与合, 统计过程中的能量变化、电荷分布、原子间对分布函数和均方原子位移等, 揭示反应堆用钢的主合金元素在液态铅铋中的团聚、分解行为, 为铅铋在反应堆工况下的提纯提供原子尺度计算的数据支持。

A03-P19

超高剂量氘等离子体辐照下钨中氘滞留行为研究

孙亦文¹、尹皓¹、王军¹、程龙*¹、周海山²、袁悦¹、吕广宏¹

1. 北京航空航天大学

2. 中国科学院等离子体物理研究所

钨作为目前聚变领域公认的最有前途的面对等离子体材料, 在聚变装置中面临着极其恶劣的服役环境。逃离磁场束缚的边缘等离子体不仅会在材料中产生大量的辐照诱导缺陷, 还会造成燃料粒子的滞留, 这将严重影响氘自持。在中型和大型托卡马克装置中, 等离子体辐照剂量的年运行值可达 $1 \times 10^{28} \text{ m}^{-2}$, 在 ITER 装置中年运行值高达 $1 \times 10^{30} \text{ m}^{-2}$ 。然而, 目前在已发表的研究工作中, 对高于 $1 \times 10^{28} \text{ m}^{-2}$ 的辐照实验剂量鲜有报道。为研究高剂量氘等离子体辐照下钨中氘滞留机制, 开展了一系列高剂量氘等离子体辐照实验, 最高剂量可达 $1 \times 10^{29} \text{ m}^{-2}$ 。本工作以再结晶钨作为研究对象, 主要基于辐照后样品表面形貌和氘滞留两方面对辐照效应进行分析。扫描电镜结果显示随着辐照剂量的增加, 样品表面起泡逐渐增加并趋近饱和, 且在最高剂量下样品表面泡结构出现了破裂现象。此外, 在低起泡密度区域, 起泡呈现出明显的晶粒取向依赖性。核反应分析结果显示, 在最高辐照剂量样品中, 距离表面 4 微米深度区域内氘浓度高达 0.012 at.fr. 。根据核反应分析和热脱附谱结果, 计算了样品中氘的总滞留量。结果显示随着辐照剂量的增加, 氘总滞留量先增加后趋于饱和。基于速率理论对热脱附谱进行拟合, 发现所有辐照剂量条件下缺陷均分布在距离表面 10 微米深度内, 且在最高辐照剂量下缺陷浓度趋于饱和。本工作中氘滞留饱和和可归因于样品表面形貌演化和辐照诱导缺陷浓度增长两方面因素。首先表面泡密度和破裂泡数量的增加, 增强了氘在样品表面的反射以及再发射。同时在辐照诱导缺陷的协同作用下, 氘原子向材料内部的扩散受到明显抑制。本研究结果为理解聚变装置长时间极端工况下钨中氘同位素滞留机制提供了重要参考, 可用于建立聚变装置中氘同位素滞留的预测模型。

A03-P20

环氢络合物的形成及其对锆力学性能的影响的分子动力学研究

麻文学、高宁*

山东大学

锆合金由于其低热中子吸收截面, 优良的耐腐蚀性能, 机械性能高等特点。而己在核裂变反应堆中作为燃料包壳和结构材料广泛应用。在反应堆服役期间, 锆合金会被高能粒子损坏, 导致晶格缺陷及其团簇

的形成,影响结构 Zr 合金的演变并进一步降低材料的性能以及核反应堆的相关寿命。此外,或者是由于辐照分解或水与 Zr 之间的腐蚀反应,氢气从冷却水中释放出来,也会与锆合金相互作用,并可能显著影响机械性能。因此,研究氢与辐射缺陷之间的相互作用对于了解锆合金的辐照损伤具有重要意义。

为了研究研究氢与辐照缺陷之间的相互作用对于锆合金力学性能的影响,本研究分析了氢原子在不同位错环上的偏聚机制,以及偏聚后所形成的氢-环混合物对锆的屈服强度和剪切强度的影响。利用分子动力学 (MD) 方法,广泛研究了锆中氢原子与间隙或空位位错环之间的相互作用。结果表明,氢原子与位错环的结合是各向异性的(吸引或排斥),具体取决于氢原子相对于位错环核心的位置。各向异性由环路引起的过量体积和应力场控制。对于 $1/3[2-1-10]$ 间隙位错环,氢原子优先偏聚在环的外侧附近并靠近环的分解结。而对于 $1/3[2-1-10]$ 或 $1/6[20-23]$ 空位环,氢原子更喜欢在环内部附近偏析。目前的工作表明,Zr 中可以形成大的环氢络合物。氢与环的结合在 600 K 以下稳定,而在 900 K 时观察到解离。环-氢复合物的形成影响滑移系统的激活,导致 Zr 产生更高的屈服应力。该效应随着空位或间隙环中 H 与空位或间隙的比率的增加而增加。结果表明,应考虑大环氢络合物的影响,以充分了解锆合金中的辐照损伤。

A03-P21

铬涂层中铯碘扩散行为的第一性原理研究

林舒滢、马宇、刘文冠*

中山大学

Cs and I can migrate through fuel-cladding interfaces and accelerate the cladding corrosion process induced by the fuel/cladding chemical interaction. Cr coating has emerged as an important candidate for mitigating this chemical interaction. In this study, first-principles calculations were employed to investigate the diffusion behavior of Cs and I in the Cr bulk and grain boundaries to reveal the microscopic interaction mitigation mechanisms at the fuel-cladding interface. The interaction between these two fission products and the Cr coating were studied systematically, and the Cs and I temperature-dependent diffusion coefficients in Cr were obtained using Bocquet's oversized solute-atom model and Le Claire's nine-frequency model, respectively. The results showed that the Cs and I migration barriers were significantly lower than that of Cr, and the Cs and I diffusion coefficients were more than three orders of magnitude larger than the Cr self-diffusion coefficient within the temperature range of Generation-IV fast reactors (below 1000 K), demonstrating the strong penetration ability of Cs and I. Furthermore, Cs and I are more likely to diffuse along the grain boundary because of the generally low migration barriers, indicating that the grain boundary serves as a fast diffusion channel for Cs and I.

A03-P22

液态铅中腐蚀产物化学形态的从头算分子动力学研究

姜林兵¹、张宝亮²、刘文冠^{*1}

1. 中山大学

2. 中国原子能科学研究院

Liquid lead (Pb) is a promising coolant for lead-cooled fast reactors, and has advantages over lead-bismuth eutectic (LBE) in many aspects. But it can also cause severe corrosion to structural materials at high temperatures. In this study, the chemical states of 10 alloying elements as well as H and O in liquid Pb were investigated via *ab initio* molecular dynamics, and the local structure, dissolution and charge transfer were analyzed systematically. In liquid Pb, the coordination numbers (CNs) of Fe and Ni are the smallest, with the value of 7.72 and 7.01, respectively, and Al, Mn, Mo, Nb, Ti, and Si have the biggest CNs with about 12. This is correlated with the effective atomic radii in liquid Pb. Judged by the dissolution energy, the tendency of alloying elements to dissolve in liquid Pb is $Al > Si > Ni > Cu > Fe > Mn > Nb > Cr > Mo$. The calculated Bader charges show that the alloying atoms undergo minimal electron transfer in liquid Pb except Ti. H_2 , H_2O , and O_2 will decompose quickly and cannot exist in liquid Pb. Then, the alloying element will form a strong binding with O atom, especially Al and Si. O atoms can lead to an increase in the coordination of alloying atoms in liquid Pb and obviously reduce their diffusion coefficients in most cases. These findings can provide guidance for predicting material corrosion and designing future high-performance corrosion-resistant materials.

A03-P23

间隙氧原子驱动的局部化学有序对 NbZrTi 基合金中辐照缺陷演化行为的影响

苏钰雄、卢晨阳*

西安交通大学

设计能够承受极端辐照的合金是开发核反应堆和航空航天应用材料的一个重要方面。利用局部化学有

序有望显著提高体心立方多主元素合金的机械性能。然而,这种有序性对辐照缺陷的动态演化的影响仍未得到充分了解。在本研究中,我们通过掺杂不同浓度的间隙氧原子,在 NbZrTi 多主元合金中设计了不同程度的局部化学有序和局部晶格畸变。这种方法以合金元素对氧的不同化学亲和力为指导。然后,我们采用透射电子显微镜、纳米压痕和原位压缩测试,全面评估了在高温氦辐照过程中,掺入不同浓度氧的 NbZrTi 基多主元素合金中氦气泡、位错环和析出相的微观结构演变,以及它们对温度和辐照剂量的响应。通过对微结构和化学元素进行第一性原理计算和原子尺度分析,我们发现间隙氧原子能驱动一系列有益的特性,如增强局部化学秩序、局部晶格畸变和化学波动。这些因素有效地减少了氦泡膨胀,抑制了位错环和析出相的产生和增长。这种通过操纵间隙氧原子来协调体心立方多元素合金中辐照缺陷的策略,为制造核应用领域的先进合金提供了一个实用的蓝图。

A03-P24

氧气对铀水反应的抑制效应及抑制机理研究

丁茜¹、曹坤¹、李海波¹、陈广¹、潘启发¹、宾韧¹、廖俊生^{*2}

1. 表面物理与化学重点实验室
2. 中国工程物理研究院材料研究所

铀在使用、贮存和运输过程中,通常面临的不是 O₂, H₂O 等单一气氛环境,而是 O₂+H₂O 等多种气氛的耦合,导致铀的腐蚀行为非常复杂。研究铀在潮湿气氛中的腐蚀行为,深入认识腐蚀机理,是建立准确可靠的氧化模型、开发有效表面防腐蚀技术的关键。铀材料在水氧复合气氛中的腐蚀规律已大致清楚,但对腐蚀机理的认识尚未达成共识。本工作综合采用反射光谱法和气氛分析法研究了不同氧分压下的铀水腐蚀行为,获得了不同温度时氧气实现抑制效应的临界压力(53.7~94.2 Pa);同时利用拉曼光谱和显微镜对腐蚀产物进行了原位监测,发现腐蚀产物主要是 UO₂ 和氢化物,并且在低氧分压下生成的铀氧化膜结构较差。为解释铀在水氧复合气氛中的腐蚀行为及腐蚀机理,进一步采用红外反射吸收光谱(IRRAS)结合同位素技术研究了水和氧气在铀表面的吸附和解离,探究了其解离产物和吸附构型。结果表明,室温下水在铀表面发生解离,并有部分分子态的水吸附,比例约为 3:2;在 153 K 以下,水以多层无定形冰的形态吸附于铀表面,升温过程中转变为结晶态的冰并最终在 164 K 时完全脱附;水氧共吸附时,水汽解离生成的 H 与氧气解离生成的 O 结合为新的 OH,在氧 18 同位素气体存在时,生成的 ¹⁸OH 造成了红外光谱中的 OH 峰位发生分裂。

A03-P25

渗氮 W18Cr4V 钢在高温钠中氮元素流失行为研究

付晓刚*

中国原子能科学研究院

装卸料提升机是钠冷快堆换料系统的重要机械设备,在装卸料过程中负责燃料组件运输。导轨摩擦副是装卸料提升机稳定运行的关键部件。渗氮 W18Cr4V 钢具有高硬度和高耐磨性,是导轨摩擦副制造的候选材料。氮元素在高温钠中的溶解度很低。然而,在试验过程中,已经观察到渗氮 W18Cr4V 钢中大量氮原子持续不断地流失至高温钠中。为了理解渗氮 W18Cr4V 钢在高温钠中氮元素流失行为,渗氮 W18Cr4V 钢、纯铬样品和渗碳 W18Cr4V 钢在高温钠中开展了不同时间的相容性试验研究,试验结果表明:在纯铬样品和渗氮 W18Cr4V 钢在 700°C 钠相容性试验后,渗氮 W18Cr4V 钢显示出质量减少,纯铬样品显示出质量增加。纯铬样品试验后 XRD 图谱中出现了 Cr₂N 的衍射峰,表明氮原子会在高温钠中迁移并重新扩散至纯铬样品表面形成 Cr₂N。尽管氮原子在高温钠中的溶解度较低,但仍可以迁移扩散至其他金属表面,使得钠中的氮原子始终处于不饱和状态,从而促使渗氮 W18Cr4V 钢中的氮原子不断向钠中溶解。渗氮 W18Cr4V 钢和渗碳 W18Cr4V 钢在 600°C 和 650°C 钠环境中的相容性试验后,渗碳层中的碳原子也会向钠中扩散流失,导致渗碳层的硬度下降。在 W18Cr4V 钢渗氮层和渗碳层中,间隙原子氮和碳在高温钠环境中的扩散行为相似,受过饱和浓度驱动向高温钠中流失扩散。

A03-P26

He⁺和 H²⁺双束协同辐照过程中预有位错线和析出相对 W-0.5ZrC 合金微观组织演变的影响

黄金池^{*1}、钟庆鸿^{1,2}、陈哲³、曹子奇^{1,2}、丁一帆^{1,2}、周哲辉^{1,2}、马雁⁴、冉广^{1,2}

1. 厦门大学能源学院
2. 福建省核能工程技术研究中心
3. 核工业西南物理研究院
4. 华北电力大学

在聚变堆中,从等离子体中逃逸的氢同位素以及通过氘氚反应产生的氦的混合辐照,会引入辐照损伤,导致面向等离子体材料中出现空位、间隙原子、氢和氦气泡等缺陷,这会导致材料的肿胀和硬化,从而降低其服役寿命。预有位错线和析出相是材料中常见的微结构组织,其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,但是较少的研究关注到不同密度的预有位错线和不同大小粒径的析出相对辐照缺陷的作用。本文通过在 900°C 下 30 keV He⁺和 H₂⁺双束协同辐照过程中的原位 TEM 观察,定量分析在不同密度的预有位错线和不同大小粒径的析出相的影响下, W-0.5ZrC 合金中气泡的演变特征(成核、迁移、聚集和生长)及预有位错线的行为。在原位分析中,获得了随着辐照剂量的增加气泡的平均尺寸和体积数密度关系,揭示了不同类型缺陷阱以及同一类型缺陷阱在不同状态下对辐照缺陷均有显著的影响。结果表明,线性的预有位错线促进了气泡的生长,抑制了形核。以弯曲形式为特征的预有位错线对气泡形核表现出强烈的抑制作用。而与线性预有位错线相比,交错网格形式的预有位错线不仅抑制了气泡的生长,而且抑制了气泡形核。ZrC 析出相对气泡生长的影响很小,但会降低气泡的形核位置。分散的小颗粒析出相可以更好地减少辐照早期的气泡形核。一旦小析出相的吸收能力饱和,气泡的生长可能会急剧加速。氢的存在使得线性的预有位错线保持高的迁移率。目前的研究结果对了解钨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(12105238 和 12275083)的经费支持)

A03-P27

固溶温度对热轧态 Hastelloy XR 镍基合金组织演变的影响

吕焱龙^{1,2}、杨亚倩^{2,3}、王旻^{1,2,3}、郝宪朝^{1,2,3}、马颖澈^{*1,2,3}

1. 中国科学技术大学材料科学与工程学院, 辽宁 沈阳 110016
2. 中国科学院金属研究所, 辽宁 沈阳 110016
3. 中国科学院核用材料与安全评价重点实验室, 辽宁 沈阳 110016

超高温气冷堆(VHTR)是第四代核能系统重点研发的堆型之一,其核心组件之一的中间换热器(IHX)蒸汽管道和传热管需要在 750-950°C、4-7MPa 的环境下长期服役,这对候选材料提出了苛刻要求。国内外形成的主要候选材料包括 Inconel617、Haynes230(国内对应 GH3230)、Hastelloy X(国内对应 GH3536)、Hastelloy XR、GH3128、ChS57 等,其中 Hastelloy XR 是在 Hastelloy X 合金成分基础上,通过优化 Si、Mn 含量提高耐蚀性、降低 Co 含量抑制辐照活化、添加 B 元素提高高温强度等合金化策略发展而成的改进型合金。目前关于 XR 合金高温蠕变性能、冷加工对蠕变性能的影响、蠕变过程中碳化物演变、He 气氛中腐蚀行为的研究较多,而对固溶处理过程中组织演变的研究较少。对于高 Mo 含量的 Ni-Cr-Fe-Mo 合金而言,热加工成形及热处理过程中细小的再结晶晶粒与变形的原始晶粒交错分布,这种组织不均匀现象会降低合金的服役性能,因此如何改善组织均匀性是合金制备的关键科学问题。

采用热轧成形的合金板材,通过 OM、SEM、EBSD 等研究了固溶温度对 Hastelloy XR 合金组织均匀性及碳化物的形貌、分布的影响,通过 TEM、EPMA 等明确了合金中碳化物结构与化学组成。研究结果表明:(1)热轧态合金中碳化物为面心立方结构的 M₆C 和 M₂₃C₆,其中 M 为金属元素,M₆C 中富 Mo,Mo 含量约为 50%;M₂₃C₆ 中富 Cr,Cr 含量约为 60%。两种碳化物形貌无明显差别,并且大部分均以链状结构分布于晶界,少部分呈颗粒状分布于晶内。(2)晶界处链状碳化物完全溶解温度为 1210°C,晶内颗粒状碳化物的溶解温度高达 1280°C,与合金熔点接近。(3)合金晶粒长大及分布均匀性与固溶温度和碳化物密切相关。热轧态呈现细小再结晶、粗大的变形晶混合组织,这种晶粒不均匀现象随固溶温度提升至 1180°C 以上时得到明显改善。(4)在 1000-1180°C 范围内合金晶粒长大倾向较小;随着碳化物溶解,晶粒粗化倾向显著增大。(5)综合晶粒尺寸变化规律和碳化物溶解行为,合金热变形中间固溶处理温度可适当提高,推荐选用 1100-1240°C,成品固溶处理温度推荐范围为 1180-1200°C。

研究结果可用于指导合金均匀化处理、锻造、热轧、热挤压、固溶处理等关键工序温度选用,碳化物存在形式、分布特点及其溶解行为对于合金组织均匀性控制的提供试验依据。

A03-P28

800 keV Kr²⁺离子辐照下 Al-Zn-Mg-Cu (7050)合金析出相稳定性研究

方昊¹、易晓鸥^{*1}、于虎城¹、刘辉¹、董思辰¹、李书磊²、黄子敬³

1. 北京科技大学
2. 中铝材料应用研究院有限公司
3. 厦门大学

本课题选取 Al-Zn-Mg-Cu (7050-T6)合金作为空间站结构材料模型体系,运用 800 keV Kr²⁺离子开展空间环境中太阳质子流辐射过程的加速模拟实验。研究了合金中代表性强化相 η'-MgZn₂、η-MgZn₂ 经室温 1 dpa、10 dpa 辐照后的尺寸与相结构稳定性。基于透射电子显微学表征证实析出相的辐照稳定性与辐照致溶

解、辐照增强 Ostwald 熟化机制密切相关。在 1 dpa 辐照损伤下, 合金中的纳米弥散相 η' -MgZn₂ 仍表现出良好的尺寸稳定性, 但部分 η' -MgZn₂ 因碰撞级联引起的局部原子重排发生溶解, 数密度下降约 11%; 平衡相 η -MgZn₂ 分布于晶界及晶粒内部, 辐照后出现显著粗化, 数密度下降约 43%。在 10 dpa 辐照损伤下, 纳米强化相 η' -MgZn₂ 和平衡相 η -MgZn₂ 几乎完全溶解。未来合金设计中应关注 η' -MgZn₂、 η -MgZn₂ 的尺寸和相结构稳定性, 并通过调控析出相/基体界面稳定性、增加辐照缺陷吸收势阱以延缓上述过程, 提高材料的耐辐照损伤特性。

A03-P29

Mo 和 C 含量对 Inconel 617 合金显微组织和力学性能的影响

刘毓轩^{1,2}、欧美琼¹、高明^{*1}、郝宪朝¹、侯坤磊¹、马颖澈¹

1. 中国科学院金属研究所 核用材料与安全评价重点实验室, 辽宁 沈阳 110016
2. 中国科学技术大学 材料科学与工程学院, 辽宁 沈阳 110016

获得均匀细小的碳化物(包括 M₂₃C₆、M₆C 和 MC)是提高高温气冷堆关键部件材料 Inconel 617 合金力学性能的关键。针对显著影响碳化物特征的元素 Mo 和 C, 研究了低 Mo (9wt.%) 与高 Mo (9.6wt.%) 合金的组织性能, 并在低 Mo 合金基础上研究了四组不同 C 含量(0.04wt.%, 0.06wt.%, 0.08 wt.% 和 0.1 wt.%) 合金的组织性能。Thermo-calc 热力学计算结果显示, 随着 Mo 含量从 9wt.% 提高到 9.6wt.%, M₆C 数量从 1.72% 提高到了 2.29%; 随着 C 含量从 0.04wt.% 提高到 0.1wt.%, M₂₃C₆ 数量从 0.8% 提高到了 2%。实验结果表明, 低 Mo 与低 C 合金中仅存在 1~2 μ m 块状 MC 与 100~500nm 颗粒状 M₂₃C₆, 高 C 合金中还存在 1~2 μ m 的块状 M₂₃C₆, 高 Mo 合金除了上述碳化物还析出了 3~6 μ m 的块状 M₆C。1175°C/30min/空冷热处理后, 合金中的 MC、M₆C 和块状 M₂₃C₆ 难以溶解, 颗粒状 M₂₃C₆ 则回溶较为充分。EPMA 结果显示, 固溶后残留的颗粒状 M₂₃C₆ 中 Mo 含量(约 8wt.%) 低于未溶解的块状 M₂₃C₆ (Mo 约 15wt.%)。随着 Mo 含量从 9wt.% 提高到 9.6wt.%, 合金 750°C 抗拉强度从 487MPa 提高到了 574MPa, 延伸率则从 109% 降低到 51%。随着 C 含量从 0.04wt.% 提高到 0.1wt.%, 合金 750°C 抗拉强度由 451MPa 提高到了 557MPa, 延伸率则从 128% 降低到了 74%。合金强度提高的主要原因包括: 1) 增加 Mo 和 C 含量使碳化物数量增多, 增强了第二相强化效应; 2) 高 Mo 合金 γ 基体中 Mo 含量(约 10wt.%) 显著高于低 Mo 合金 γ 基体中的 Mo 含量(约 5wt.%), 从而提高了固溶强化效应。合金塑性下降, 主要是原因高 Mo 和高 C 含量使大尺寸的 M₆C、M₂₃C₆ 数量增加, 促进了裂纹萌生与扩展, 降低了合金塑性。综上, Inconel 617 合金中 Mo 和 C 含量分别控制在 9wt.% 和 0.06wt.% 可获得较为均匀细小的碳化物, 使合金兼具优异的高温强度和塑性。

A03-P30

辐照对 Zr-1Nb 合金显微组织和耐腐蚀性能的影响

李志康*

上海大学

锆合金因导热性好、热中子吸收截面小、耐腐蚀性能优良而被广泛应用于水冷核反应堆的核燃料包壳材料。随着核电向高燃耗、长寿期方向发展, 锆合金的耐水侧腐蚀性能成为限制锆合金在水冷核动力堆中使用寿命的关键因素。不仅如此, 锆合金包壳在服役时除外侧与高温高压水接触发生腐蚀外, 还会受到堆内中子辐照损伤, 这也会对锆合金的服役寿命造成影响。锆合金包壳在堆内的腐蚀数据表明, Zr-Nb 系锆合金拥有比 Zr-Sn 系和 Zr-Sn-Nb 系锆合金更加优异的耐腐蚀性能。因此, 研究辐照损伤对 Zr-Nb 系合金显微组织及腐蚀行为的影响规律, 有助于深入理解 Zr-Nb 系合金的堆内腐蚀行为, 可为研发高性能锆合金提供理论依据。

本研究在 360 °C 下对 Zr-1Nb 合金进行了剂量为 1、5 和 10 dpa 的 Ar 离子辐照, 然后在模拟压水堆一回路水环境中进行 150 d 的腐蚀实验, 结合氧化膜厚度和腐蚀增重评估了辐照对 Zr-1Nb 合金耐腐蚀性能的影响; 利用 TEM、SEM、和 Raman 光谱仪对辐照前后样品氧化膜断面形貌、氧化膜截面显微组织和相组成进行了表征和分析。主要研究结果如下: (1) 辐照前 Zr-1Nb 合金为等轴晶组织, 平均晶粒尺寸约 5 μ m。第二相呈带状分布在合金基体中, 平均尺寸约 48 nm, 主要为体心立方结构的 β -Nb, 少量为密排六方结构的 Zr(Nb,Fe)₂; (2) 辐照后 Zr-1Nb 合金基体中产生大量 <a>型位错环, 且在辐照损伤峰值处位错环密度最高。在辐照 10 dpa 样品中发现了 <c>型位错环, 而在辐照 5 dpa 样品中未观察到 <c>型位错环; (3) 当辐照损伤剂量达到 4.32 dpa 时 β -Nb 发生了非晶化转变, 而 Zr(Nb,Fe)₂ 第二相在辐照损伤剂量为 0.01 dpa 时就发生了非晶化转变, 说明 β -Nb 第二相的辐照稳定性强于 Zr(Nb,Fe)₂ 第二相; (4) 当腐蚀至 60 d 时, 辐照损伤区未被完全氧化, 辐照损伤区形成的氧化膜孔隙裂纹密度较低、柱状晶区占比较高、柱状晶粗短、排列较乱、柱状晶内存在更多亚晶且 t-ZrO₂ 占比较低。此时锆合金的腐蚀主要受辐照损伤区内 O/M 界面迁移的影响, 辐照样品的腐蚀速率比未辐照样品的的小; 在腐蚀 60 d 至 150 d 时, 辐照损伤区全部氧化并继续腐蚀, 此时锆合金的腐蚀主要受两个因素的影响, 一是 O/M 界面的迁移, 二是辐照损伤区腐蚀后形成的特

殊组织结构的氧化膜会影响氧在氧化膜中的传输，辐照样品的腐蚀速率比未辐照样品的的大。

A03-P31

钇对 Fe-13Cr-6Al-2Mo-0.5Nb-0.15Zr 合金 475°C脆性的影响

王春东*

上海大学

自日本福岛核事故之后，耐事故容错燃料包壳材料的概念应运而生。FeCrAl 合金凭借其优异的高温抗氧化性能和良好的力学性能，被誉为最具有潜力的一种事故容错燃料包壳的候选材料。研究表明，高铬铁素体不锈钢在 280 ~ 500°C 长时间使用时会产生 α' 相， α' 相的析出显著降低了材料的塑性，并严重影响合金的辐照硬化脆化程度。因在 475°C 时最为明显，故被称为“475°C 脆性”。Mo, Nb, Zr 元素的添加促进了晶内 Laves 相的析出，在提高合金屈服强度的同时降低了合金的延伸率。稀土元素 Y 广泛应用于金属材料领域，是提高材料微观结构稳定性和高温氧化性能的重要元素。通过观察和分析合金在 475°C 下不同时效时间的显微组织和力学性能，更深入地确定了 Y 对 FeCrAl 合金“475°C 脆性”的影响，也为开发可以避免“475°C 脆性”的 FeCrAl 燃料包壳合金提供了进一步的指导。

本研究以不同 Y 含量 Fe-13Cr-6Al-2Mo-0.5Nb-0.15Zr 合金为研究对象，在 475°C 分别时效 500 h、2000 h、5000 h 和 10000 h。根据时效过程中力学性能的变化来评估 Y 对 FeCrAl 合金“475°C 脆性”的影响。采用 OM、TEM、和 3DAP 对合金时效过程中的显微组织进行表征和观察。其中主要研究结果如下：（1）含 Y 合金中有 Fe₁₇Y₂ 相的析出，该相可作为 Laves 相的形核点，使得 Laves 相在 Fe₁₇Y₂ 相周围析出。（2）在时效初期，合金晶内析出大量的 Fe₂(Mo_{0.3}Nb_{0.7})Al 纳米亚稳过渡相。随着时效时间的延长，0Y 合金中大量均匀分布的纳米相逐渐转变为平衡的 Laves 相。当时效时间达到 5000 h 时，0Y 合金中不再存在纳米相，只存在 Laves 相。时效 10000 h 后，无 Y 合金中只剩下大量的粒状 Laves 相，而含 Y 合金中仍存在大量的纳米相。（3）Y 元素与空位有着较强的结合能，这阻碍了 Laves 相形成元素（Mo、Nb 和 Zr）的扩散，抑制了含 Y 合金时效过程中纳米级 Fe₂(Mo_{0.3}Nb_{0.7})Al 相向 Laves 相的转变。（4）由于 Laves 相的减少合金的延伸率而有所提高。含 Y 合金的延伸率随 Y 含量的增加而降低，但仍高于无 Y 合金。Y 的加入提高了合金的时效塑性，削弱了合金的 475°C 脆性程度，但效果随 Y 含量的增加而减弱。（5）时效过程中，由于析出相的固溶和粗化以及边界迁移引起的波及效应，使得 Laves 相和晶界周围形成了一定宽度的无析出区（PFZ）。

A03-P32

球磨后还原对 Cu-Y₂O₃/W 复合材料的显微组织与性能影响

刘家琴、马冰、丁文杰、周宇生、吴玉程*

合肥工业大学

本报告主要阐述聚变堆偏滤器先进热沉材料 Cu-Y₂O₃/W 机械合金化制备过程中还原热处理对微观组织结构及力热性能的影响。采用机械合金化、煅烧还原、结合原位反应和放电等离子烧结法制备了 Y₂O₃/W 复相增强铜基复合材料，探究不同还原温度对铜基复合材料微观组织结构及力热性能的影响。结果表明，添加 W 颗粒前驱体的样品经过原位反应及还原处理生成了 Y₂O₃ 与 W。球磨后复合粉末在还原过程中，原位生成的弥散相更加细小且与铜的位向关系更加稳定，从而钉扎在晶界，并在烧结过程成为阻碍晶粒长大的位点，从而细化铜晶粒。Cu-Y₂O₃/W 在还原过程保持良好的热稳定性能，样品的晶粒平均尺寸在经过 800°C 还原后仍能维持在 1 μ m 以下。经过还原热处理后，材料的塑性得以提升，电导率也有所增加，这是因为在还原过程，除去了前驱体粉末中铜粉末的氧，净化了铜基体。此外，以偏钨酸铵(AMT)作为 W 颗粒前驱体的样品经 800°C 还原后，具有 337 MPa 的抗拉强度及 28% 的断裂延伸率。

A03-P33

瞬态热负荷脉冲次数对钨中氦滞留的影响

任猛冲¹、袁悦*¹、封范²、程龙¹、练友运²、周海山³、吕广宏¹

1. 北京航空航天大学

2. 西南物理研究所核聚变科学中心

3. 中国科学院等离子体物理研究所

钨 (W) 具有熔点高、导热性能好、氦滞留率低等优良性能，被认为是未来聚变反应堆极有前景的面向等离子体材料 (PFM)。在未来的运行中，W 偏滤器必须持续承受高能中子、等离子体以及稳态/瞬态高热负荷的作用。瞬态热负荷下 W 材料的表面损伤和微观缺陷演化是聚变堆中燃料滞留的关键因素。目前

已有大量研究表明瞬态热负荷会导致 W 表面发生粗糙、开裂甚至熔化等损伤，然而有关瞬态热负荷对氢同位素等离子体辐照引起的 W 表面起泡以及滞留影响的研究却十分匮乏。

本工作探究了不同脉冲次数的瞬态热负荷对再结晶 W 表面起泡以及氘(D)滞留的影响规律以及潜在的微观机制。实验首先利用热功率密度为 0.15 GW m^{-2} 的电子束，在样品表面加载 100-1500 次脉冲。随后将热损伤样品进行低能 (40 eV) D 等离子体辐照，辐照温度为 500 K，辐照剂量均为 $1 \times 10^{26} \text{ D m}^{-2}$ 。结果表明，随着热负荷脉冲次数的增加，D 诱导的起泡明显减少甚至消失，同时亚晶结构逐渐形成，数密度逐步增大。与仅 D 等离子体辐照的样品 (滞留量 $2.35 \times 10^{20} \text{ D m}^{-2}$) 对比发现，较低脉冲数 (100 次) 加载的样品 D 滞留明显降低 ($5.45 \times 10^{19} \text{ D m}^{-2}$)，随着脉冲数增加到 500 和 1500 次时，D 滞留分别达到 $1.98 \times 10^{20} \text{ D m}^{-2}$

和 $4.56 \times 10^{20} \text{ D m}^{-2}$ 。基于氘迁移分析程序 (TMAP)，我们认为总 D 滞留是热负荷诱导的起泡抑制减少的缺陷与热应力引起的塑性变形产生的缺陷之间竞争的结果。D 滞留量随着脉冲次数的增加先减少后上升，拐点略高于 500 次脉冲。此外，由于热应力范围广泛，延长辐照时间将导致热诱导缺陷捕获大量 D，从而加剧样品内部较深范围的 D 滞留。这项工作探讨了热负荷对 W 中 D 滞留影响的微观机制，为理解瞬态高热负荷对未来聚变相关研究中燃料滞留行为的潜在影响提供了理论参考。

A03-P34

含铝奥氏体不锈钢的 600°C 液态铅铋腐蚀行为研究

周洪涛²、王旻^{*1,2}、马颖澈^{1,2}

1. 中国科学院金属研究所 师昌绪先进材料创新中心，辽宁 沈阳 110016
2. 中国科学院金属研究所 核用材料与安全评价重点实验室，辽宁 沈阳 110016

铅基快堆 (LFR) 是一种属于第四代先进核能系统的新型快中子反应堆，是国内外开展应用研究工作的热点堆型之一，其关键性组件之一燃料包壳需要在高温、液态铅铋共晶合金 (LBE) 环境下长期服役，这对候选材料提出了苛刻要求。基于稳定致密的 Al_2O_3 氧化膜在 LBE 环境下具有优异的耐蚀性，在 15-15Ti 合金成分的基础上，通过调控 Ni、Al 等元素，研制出不同 Al 含量 (0-5 wt.%)、全奥氏体基体的系列含铝奥氏体不锈钢 (Alumina-forming austenite steel, AFA 钢)，并在 600°C 液态铅铋环境中分析了它们的腐蚀行为 (最长达 5000h)。

通过观察腐蚀样品的表面和截面形貌，对不同成分合金的氧化层结构和成分进行了分析。结果表明：

(1) 15-15Ti 形成连续较厚的双层氧化层结构，外层主要由 Fe_3O_4 和 PbFe_4O_7 (铅铁矿) 组成，内层主要为 Fe-Cr 尖晶石，最大氧化腐蚀深度达 $70 \mu\text{m}$ ；(2) AFA 钢可在样品表面形成纤薄、连续的 Al_2O_3 氧化膜，未发生可见的氧化或溶解腐蚀现象，但在局部位置发生内氧化、形成“菌落”状的氧化结节；(3) AFA 钢局部氧化区形成三层氧化层结构，外层主要由 Fe_3O_4 和 $\text{PbFe}_6\text{O}_{10}$ (铅铁矿) 组成，中层为 (Fe, Cr, Al) 氧化物层，内层为 (Cr, Al) 氧化物和 Ni 的富集区交互存在的网格状层，内氧化深度最大不超过 $20 \mu\text{m}$ ；(4) AFA 钢腐蚀 1000h 以内氧化结节占合金表面的比例不高于 15%，随时间延长最多可增加至 50%~60%，无氧化结节位置仍保持完好的纤薄 Al_2O_3 氧化膜；(5) 预氧化可显著抑制氧化结节的形成，预氧化样品腐蚀 5000h 表面氧化结节覆盖比例至多不超过 5%。

综上，在 600°C 静态饱和氧 LBE 环境中 AFA 钢能形成 Al_2O_3 氧化膜层，呈现出比 15-15Ti 更优异的抗腐蚀性能，但在 LBE 腐蚀过程中氧化铝膜层仍存在生长不充分，导致氧化铝膜不稳定性，发生局部氧化腐蚀现象。

A03-P35

MAX 相材料辐照下相稳定性研究

肖昊*

北京大学物理学院

$\text{M}_{n+1}\text{AX}_n$ 相材料是一类具有独特纳米层状结构的三元化合物，其中 M 代表早期过渡金属，A 代表主族元素，X 代表碳或者氮元素，n 等于 1,2,3。它的结构可以看做 MX_6 八面体与 A 原子层的相互堆叠，这种特殊的结构使得 MAX 相材料同时含有金属特性与陶瓷特性，例如优良导电导热特性、耐火性、抗氧化性、抗腐蚀性等。这些特性使得 MAX 相材料在核能材料领域具有很好的应用前景。但由于种类众多且结构复杂，MAX 相材料在辐照下的抗非晶化机制尚未研究清楚。

在本研究中，我们对三种 MAX 相： Ti_2AlC 、 Cr_2AlC 和 Ti_2SnC 进行了室温下的原位 Kr 离子辐照实验与第一性原理分子动力学模拟。实验与模拟结果都表明，这三种 MAX 相材料在辐照下会经历有序-无序相变，从初始六方相结构转变为两种阳离子混合的固溶中间态。随着剂量增大， Cr_2AlC 和 Ti_2SnC 展现出向非晶相转变的趋势，三种材料在辐照下的相稳定性表现出明显的差异。我们发现，三种 MAX 相在辐照下

的相稳定性与之前研究中通常认为的初始结构中相反位缺陷形成能并无直接关联,而是更多地依赖于固溶中间态的晶格畸变。一方面,晶格畸变大的固溶中间态中缺陷更难复合;另一方面,诱导具有较大晶格畸变的固溶中间态转变为非晶所需的缺陷浓度更低。基于这一发现,我们提出利用固溶中间态的晶格畸变作为判据,以筛选出在辐照下具有高稳定性的 MAX 相材料,并将此判据推广应用于烧绿石等其他复杂氧化物中。

A03-P36

金属材料表面微区的近端探针热脱附行为研究

于倩楠¹、程龙^{1,2}、袁悦^{1,2}、吕广宏^{*1,2}

1. 北京航空航天大学, 北京 100191
2. 北京航空航天大学 先进核能材料与物理重点实验室, 北京 100191

托卡马克装置壁材料中氢同位素滞留行为是当前聚变领域中的研究热点。在等离子体与壁材料强烈相互作用下,辐照诱导缺陷捕获燃料粒子,导致严重的燃料滞留问题,进而影响燃料循环效率。研究材料中氢同位素滞留行为对评估未来聚变装置中的燃料滞留问题至关重要。目前,材料内部氢同位素滞留研究主要集中于热脱附谱测量方法,仅可获得氢同位素在块体样品中的宏观滞留情况。本工作基于热脱附谱方法,自主设计开发了近端探针热脱附技术并搭建了相应测试平台,可直接对金属表面微区热脱附行为进行研究。

该平台包括真空获得、温度控制、信号检测、探针控制、标定等五个系统。将探针直接接触待测样表面,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氘局部脱附并被四极质谱仪收集检测。该平台能够稳定输出最大功率为 12 kW 的脉冲电流;配备的高分辨四极质谱仪检测限为 3.0×10^{-15} hPa;红外热像仪的加热空间分辨率约为 50 微米,测温精度 $\pm 10^\circ\text{C}$ 。该平台可实现空间分辨率优于 500 微米和氘浓度检测限不低于 $\sim 10^{-4}$ 原子比。在不同热载条件下,热流在钨样品表面均呈现出以探针针尖与样品接触点为圆心的稳定圆形分布。

在该平台上针对不同氘浓度的钨氘化合物标准样品以及高通量氘等离子体辐照样品进行了局部热脱附实验。使用相同热载条件在样品表面同一微区连续进行 10 组实验并计算氘气脱附量,结果显示脱附量呈递减趋势。基于有限元方法对探针在样品表面微区加热进行模拟,得到加热作用体积,四极质谱仪检测的氘脱附量对应于该作用体积,通过计算发现其与一般热脱附谱方法测量的氘总滞留结果保持良好对应关系,验证了近端探针热脱附技术的可靠性。

本文总结了在近端探针热脱附测试平台上开展的一系列钨材料表面微区加热实验结果,对于理解氢同位素在金属样品中局部热脱附行为、测量氢同位素的空间分布有重要意义。

A03-P37

改良低活化铁马钢的组织性能和长时高温时效后析出相转变机制的研究

杨栋天*、熊良银、刘实

中国科学院金属研究所

用于聚变反应堆的低活化铁素体马氏体(RAFM)钢因其良好的综合力学性能和相对较低的制造成本而被选为第一壁的主要结构材料候选材料。其中 CLF-1 钢是 585 院与金属所根据国家 ITER 计划的总体部署以及中国 DEMO 聚变堆的发展战略而研发设计的,目的是为将来的中国聚变示范堆提供材料 and 设计数据。本研究在 CLF-1 钢基础上通过加入 Ti 元素和调控热机械处理工艺(TMT)实现了高温(650°C)、蠕变性能的提高(命名为 CLF-P 钢)。结合热力学模拟和第一性原理计算,利用光学显微镜、X 射线衍射、场发射扫描电子显微镜及电子背散射衍射和透射电镜对常规正火回火(NT)、热机械处理条件和长期时效态下的微观组织结构进行了表征,并用高分辨率透射电镜对析出相的晶体结构进行了测定,以及研究了 MC 相在高温长期时效中的转变行为。结果表明,通过调控 TMT 工艺,CLF-P 钢的 650°C 抗拉强度已经达到近 400 Mpa,提高了近 100MPa; 650°C、160Mpa 的蠕变寿命超过 300 h。650°C 下时效 2000 小时后,对三种主要析出相进行了具体的观察。 M_{23}C_6 保持半共格, (Ta/V) C 相保持共格,但界面自由能有所提高。TiC 相有三种不同的表现形式:共格但大尺寸,非共格但小尺寸,非共格且大尺寸。较高的界面自由能对应着较低的粒子稳定性,观察到的析出强化减弱是由于 TiC 相生长引起的界面自由能提高和长时高温时效后共格程度的降低。进一步研究结合能和表面能在不同晶面下的变化,长期时效后,因为晶面能量密度的不同,部分 TiC 相在 (220) 晶面下生长并粗化。

A03-P38

原位研究 Mo-5Re 合金在辐照过程中的 loop punching 机制

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

1. 厦门大学能源学院, 福建 厦门 361102
2. 厦门大学化学化工学院, 福建 厦门 316005
3. 福建省核能工程技术研究中心, 厦门 361102

核能材料在辐照环境中服役时, 载能粒子会在其内部形成辐照缺陷。在众多辐照缺陷(如位错环、气泡、堆垛层错四面体等)中, He 气泡因其会导致材料肿胀与脆化而备受关注。对气泡生长的根本原因进行研究能够深入理解材料退化机制。loop punching 是一种气泡生长机制, 其中, 气泡通过发射自间隙原子(SIAs)或棱柱环而生长。该机制已有计算模拟进行报道, 但是仍旧缺乏试验证据。本研究利用 TEM 原位研究了 30keV He+辐照下 Mo-5Re 合金中的 loop punching 机制。获得了研究 loop punching 所推荐的温度窗口, 在这一窗口范围内可获得合适密度的气泡, 并且能够避免级联过程中小尺寸缺陷团簇如 SIAs 的显著影响。通过量化气泡和位错环的特征, 得到了发生 loop punching 的临界气泡尺寸, 并进一步计算了发生 loop punching 的能量学条件, 如临界气泡压力和临界 He-空位比例。实现 loop punching 所需的临界最小 He-V 比约为 2; 以及所需的最小临界压力为 17.8 GPa, 其约为剪切模量的 17%。此外, 气泡和位错环之间的相互作用表现出吸引力, 这有助于稳定位错环的成核与生长。研究结果为进一步理解固体中 He 气泡的生长原因与位错环的形成提供了重要的试验数据参考(该工作得到国家自然科学基金(U2341256)的经费支持)。

A03-P39

纳米氧化物在热机械处理与高温长时效过程中的演化行为及对 ODS 铁素体合金组织和性能的影响

马浩博^{*1}、李静^{1,2}、熊良银^{1,2}、刘实^{1,2}

1. 中国科学技术大学 材料科学与工程学院
2. 中国科学院金属研究所

氧化物弥散强化(Oxide dispersion strengthened, ODS)铁素体合金以其优异的蠕变强度和杰出的耐辐照肿胀性能成为未来聚变反应堆和第四代裂变反应堆系统的主要候选材料。ODS 合金通常由粉末冶金工艺制备, 为了满足使用环境中尺寸和性能的需求, 通常需要进行进一步的热机械处理。这一过程中纳米氧化物(Nano-oxides, NOs)的稳定性缺少深入的研究, 包括 NOs 对位错运动的阻碍强度及是否发生位错对 NOs 的剪切作用等。同时, 在服役中的高温环境中, NOs 的粗化行为会导致合金微观组织与力学性能的失稳, NOs 的热稳定性直接影响了合金的服役性能。因此, 本文重点研究了热机械处理和高温长时效过程中 NOs 的演化行为。主要内容如下:

(1) 研究了一种添加 Ti、Zr 元素的 ODS 铁素体合金在热机械处理后纳米氧化物结构、尺寸的演变及对合金组织和力学性能的影响。HRTEM 的统计结果显示合金中立方晶系的 Y-Zr-Ti-O 复合粒子转变为三方晶系的 Y₄Zr₃O₁₂ 和正交晶系的 Y₂TiO₅ 纳米颗粒。这种结构变化是由于在变形过程中与基体呈“共格”关系的 Y-Zr-Ti-O 复合粒子具有可剪切性, 表明它们应被视为位错运动的“软”障碍。在后续的退火过程中, 重新析出具有较低形成能的 Y₄Zr₃O₁₂ 和 Y₂TiO₅ 粒子。同时, 由于再析出 NOs 的钉扎作用, 阻碍了位错运动和晶界迁移形成了较高的位错密度与均匀分布的纳米晶粒, 显著增强了合金的室、高温屈服强度。

(2) 对热机械处理前后的两种 ODS 铁素体合金分别进行 1000h 的高温时效实验, 研究不同结构 NOs 的高温稳定性及对合金微观组织的影响。TEM 与 HRTEM 的结果表明随着温度的升高, NOs 的粗化程度愈加显著, 不同种类 NOs 的粗化速率与“NOs—基体”的界面结构相关。对于 Y₂(Zr_yTi_{1-y})₂O₇ 粒子, 与基体呈 cube-on-cube 的取向关系且具有较低的总界面能, 时效过程中较为稳定。对于 Y₄Zr₃O₁₂ 粒子, 与基体具有不固定的取向关系且计算得出的总界面能均较高, 导致其在高温时效过程中迅速粗化。同时, 热机械处理后合金中较高的位错密度作为溶质原子的快速扩散通道可以加速 NOs 的粗化。

A03-P40

Effects of solvent, water and oxygen content on counting rate and fluorescence characteristics of liquid scintillator

Yue Li¹, Wei Lu^{*1}, Yongqiang Zhang², Guoqiang Zhong², Weihua Wang¹

1. Anhui University
2. Institute of Energy, Hefei Comprehensive National Science Center

Scintillator is a kind of material that can emit light pulses after absorbing high-energy particles or rays. It plays an important role in high-sensitivity and large-scale radiation detection, especially in the construction and safe operation of nuclear fusion reactors. Liquid scintillator consists of an organic solvent and one or more scintillation solutes. It has the characteristics of strong n/γ resolution, short decay time, unlimited dimension and low cost. However, the impact of solvent selection and moisture content on the fluorescence properties of

scintillators has not been adequately investigated in recent literature. Traditional liquid scintillators consisting of scintillation solvents 2, 5-diphenyl-oxazole and 1, 4-bis (5-phenyl-2-oxazolyl) benzene were prepared, and the different water contents were determined using Karl Fischer method. The fluorescence emission spectra and scintillation sensitivity were systematically measured with different solvents and their water contents. The results show that the scintillation count rate is the highest when the solvent is p-xylene and the water content is less than 20 ppm, which provides experimental data for the design of liquid scintillator. The experiments show that the dissolved oxygen has obvious quenching effect on scintillation count rate, and it is necessary to deaerate the solvent by distillation and argon to reduce its oxygen content to below 0.07ppm.

A03-P41

含 B 13Cr ODS 钢的微观组织与力学性能

李荆、刘常主、莫逸、司宇、吴浩然、毛小东*
上海大学

ODS 钢具有优异的抗辐照和耐高温性能,是第四代裂变堆及聚变堆的优选结构材料。B 是耐热钢中常用的微合金化元素,可显著提高材料高温蠕变性能。但天然 B 中 ^{10}B 的热中子吸收截面高达 3837 barn,易与中子反应产生 He 和 Li 导致结构材料氢肿胀。因此,核用合金中极少加入 B。与此相比, ^{11}B 的热中子吸收截面仅为 0.005 barn,若采用提纯的 ^{11}B 同位素作为 ODS 钢微合金化元素,既可发挥 B 对界面的调控作用,又可避免嬗变导致的 He 肿胀。本工作研究了 ^{11}B 添加对 13Cr ODS 钢力学性能和微观组织的影响。力学性能结果表明,与不含 B ODS 钢相比,含 ^{11}B ODS 钢的室温延伸率提升了 43%。650 °C 高温条件下,含 ^{11}B ODS 钢抗拉强度保持为 364 MPa,延伸率提升了 30%。添加 ^{11}B 后,ODS 钢的断裂模式由混合断裂机制转变为单一的韧性断裂。APT 及 TEM 分析表明, ^{11}B 在 ODS 钢的晶界发生偏聚,导致平均晶粒尺寸从 447 nm 增加到 575 nm,纳米氧化物数密度由 $6.179 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ 提升到 $8.138 \times 10^{22} \text{ m}^{-3}$ 。 ^{11}B 微合金化对晶粒组织均一化和纳米析出相起到了同步调节作用,从而平衡材料的强度与韧性。 ^{11}B 的微合金化为 ODS 钢的强塑性匹配研究带来新的思路,有助于进一步提高 ODS 钢的综合性能。

A03-P42

Experimental study on corrosion compatibility of laser-welded RAFM steel with liquid lead lithium

Huan Li*, Wei Lu, Weihua Wang, Delin Chu
Anhui University

The liquid lead lithium blanket is considered to be one of the most promising blanket concepts. Low activation ferritic martensitic (RAFM) steel is candidate structural materials for blanket design at present. However, during the long-term operation of fusion reactor, it's inevitable for structural material and its welded joints to experience adverse corrosion from liquid lead lithium. In this paper, the self-developed rotating corrosion apparatus was used to conduct a corrosion test of laser-welded RAFM steel exposed to liquid lead lithium for thousands of hours. The influence of corrosion time on the corrosion of laser-welded RAFM steel was analyzed. The results show that the corrosion rates of RAFM steel and its welded joints are 130.78 and 145.65 $\mu\text{m} \times \text{year}^{-1}$, respectively. The corrosion process includes two stages: incubation period and matrix dissolution. The incubation period is mainly due to the slow dissolution of the passivation layer with different thickness. At the same time, the grain boundary is preferentially eroded. When the passivation layer slowly dissolves, the liquid lithium lead directly contacts the substrate to cause dissolution corrosion, and the overall corrosion rate is determined by the dissolution rate of the iron element.

A03-P43

Fe 基非晶复合材料的 He 及 He+Fe 离子束辐照损伤研究

张小楠*¹、梅显秀²

1. 大连交通大学, 理学院
2. 大连理工大学, 物理学院, 三束材料改性教育部重点实验室

非晶合金具有各向同性,长程无序的结构,且内含大量的自由体积,在我们之前的研究中证明其有良好的耐离子辐照性能。非晶复合材料保留了非晶合金耐辐照的结构优势,且引入的第二相粒子带来的相界作为高密度的缺陷捕获位点,被认为可以防止 He 原子聚集成大气泡,延迟“He 泡到空洞”的转换,提升材料的服役寿命。

本研究拟通过非晶合金退火获得 FeSiB 非晶复合材料,采用 He 离子辐照以及 He+Fe 协同辐照,探究复合材料的耐辐照性能,尤其关注相界面处泡的行为。

辐照后,复合材料中的晶相构成没有发生变化,依然为非晶合金 FeSiB 退火后析出的 $\alpha\text{-Fe}$ 相和 Fe_2B

相；而在协同辐照后，材料晶粒细化。He 离子辐照后，由于入射粒子占据间隙位在晶面间产生了拉应力，随着 He 离子与 Fe 离子的协同入射，离子“锤击效应”更加明显，拉应力转变为了压应力。He+Fe 协同辐照时，离子束含有少量的 O^{4+} 离子，高价态的 O 离子辐照在复合材料的表面形成了直径约几百纳米的胞状突起。He 离子辐照后，晶体与非晶区域均分布着尺寸 ≤ 1 纳米的 He 泡，且可以观察到沿着相界密布连接的 He 泡；协同辐照后，相较于单 He 辐照，泡尺寸增加而密度减小；非晶区域 He 泡尺寸略大于晶体区域，且晶界处观察到了贫泡区域。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处泡连通行为，或可以抑制大 He 泡形成，降低材料恶化风险。

A03-P44

Fe-H-He 三元势函数开发及其在材料协同辐照损伤研究中的应用

黄浩轩、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。在聚变服役过程中，高能中子辐照、低能强流氢氦等离子体轰击和高热负荷等极端环境将对材料造成严重的损伤。这些损伤效应的协同作用直接决定了聚变堆材料的服役行为与性能。大量实验研究表明协同损伤效应与单一损伤之间存在显著区别，但由于实际影响因素众多、实验条件与结果迥异，至今协同损伤的微观机制尚不清楚。从本质上而言，材料的协同辐照损伤源于离位缺陷与氢氦的演化行为及其与温度的耦合作用。因此，系统研究不同温度下离位缺陷与氢氦的相互作用，给出氢氦对离位缺陷演化影响的微观机制对于理解聚变堆材料协同损伤效应具有重要意义。

针对先进核能系统中材料协同辐照损伤关键问题，我们以铁为研究对象，开发一套适用于协同辐照损伤研究的铁-氢-氦三元势函数。以第一性原理计算结果为参考，通过详细的评估测试，证实了该势函数能够准确描述氢氦在铁中的溶解聚集行为、氢氦-离位缺陷（空位、自间隙原子及其团簇）的耦合强度与协同迁移、离位缺陷中氢氦的最佳占位与相互作用等，因此可用于离位缺陷与氢氦的协同演化模拟。

在此基础上，我们采用该势函数开展了铁中氢泡（氢-空位复合体）对氢的捕获作用及氢氦对空洞热力学稳定性的影响研究。结果表明，虽然氢氦之间互相排斥，氢在空位处的偏析将加速其对氢的捕获速率。应力分析发现，这一反常结果源于高氢/空位比条件下氢泡周围的各向异性应力场对间隙氢原子溶解的促进作用。该应力场产生了厚度约 5 Å 的弱氢俘获区域（与氢的结合能为 0.1~0.2 eV），使得进入该区域的氢原子更容易进入氢-空位复合体区域而非逃离。有趣的是，在 300 K 的模拟温度下，这一区域会使得氢原子自发聚集形成氢片，与前期应变钨中的模拟结果一致。此外，通过分子静力学计算发现，氢和氦的协同作用会促进空洞的形核与生长，同时抑制空位-自间隙原子的复合。这表明氢氦的加入能够提高辐照后材料中残余缺陷的数目，很好地解释了实验上发现氢氦能够显著提高材料肿胀率的现象。

上述研究结果从原初过程上阐明了氢氦与离位缺陷（特别是空位）的耦合作用，为理解先进核能系统中材料的协同损伤问题提供了重要参考。

A03-P45

温度与外压对辐照后 U-Zr 燃料肿胀影响的数值模拟研究

陈星迪、毛笑笑、丁淑蓉*
复旦大学

U-Zr 金属燃料具有热导率高、铀密度高、耐腐蚀等特点，在小型模块化反应堆中具有良好的应用前景。在堆内辐照环境下，U-Zr 金属燃料会产生辐照肿胀、热膨胀、辐照蠕变、热蠕变等复杂的辐照效应，研究 U-Zr 金属燃料在不同条件下的宏观体积肿胀行为具有重要意义。有实验表明，天然铀在较低温度下进行辐照后，对其在不同外压条件下进行热加载或热循环，天然铀会产生不同程度的肿胀行为。本研究基于 U-Zr 金属燃料，综合考虑裂变气体原子的晶内扩散和晶界重溶等效应以及燃料骨架的复杂力学行为，建立了 U-Zr 金属燃料肿胀的多尺度数值模拟方法，实现了对 U-Zr 燃料宏观体积生长、裂变气体肿胀的有限元计算。并对辐照后 U-Zr 金属燃料在不同外压条件下进行热加载与热循环的过程进行了模拟，分析了其在辐照后产生肿胀的影响规律及影响机制，为 U-Zr 金属燃料进一步的研究和工程运用提供技术支撑和分析手段。

A03-P46

Nb、Cr 对 0.03C-16Cr-15Ni-2Mo-0.6Nb-Fe 奥氏体不锈钢组织和性能的影响

梁睿^{1,2}、姜岳峰^{2,3}、梁田^{*2,3}、王平¹、马颖澈²

1. 东北大学材料科学与工程学院, 沈阳, 110016
2. 中国科学院核用材料与安全评价重点实验室 (中国科学院金属研究所), 沈阳, 110016
3. 师昌绪创新材料研究中心 (中国科学院金属研究所), 沈阳, 110016

奥氏体不锈钢是压水核反应堆堆内构件用主要材料, 其性能直接影响着核反应堆安全稳定运行。本文以堆芯组件用 0.03C-16Cr-15Ni-2Mo-0.6Nb-Fe 奥氏体不锈钢为研究对象, 采用 OM、SEM、XRD、EPMA、Thermo-calc 热力学计算等和单轴拉伸研究 Nb、Cr 含量对 0.03C-16Cr-15Ni-2Mo-0.6Nb-Fe 不锈钢轧制态组织和力学性能的影响。结果表明: (1) Nb 含量为 0.29wt.%, 组织中析出尺寸较小且分布不均匀的初生 NbC; Nb 含量增加到 0.45wt.%, NbC 在晶界上的析出相增多; 随着 Nb 含量增加到 0.6wt.%, NbC 析出相增多且尺寸变大, 且沿着晶界以及晶内弥散分布。Cr 元素含量从 16.42 wt.%, 17.90 wt.% 增加到 20.90wt.% 时, 未发现 Cr_{23}C_6 析出。(2) 当 Nb 元素由 0.29wt.% 增加到 0.45wt.% 时, 合金的 350°C 高温屈服和抗拉强度降低, 延伸率基本不变。而当 Nb 含量增加到 0.6wt.%, 合金的屈服和抗拉强度提高, 延伸率也增加。当 Cr 含量从 16.42wt.% 增加到 20.90wt.%, 合金的屈服和抗拉呈现单调递增的趋势而延伸率逐渐降低。这是由于 Nb、Cr 元素的固溶强化、细晶强化以及 NbC 的沉淀强化作用提高所导致的。(3) 经过 650°C 时效 2h 的敏化处理, Cr 含量在 20.90wt.% 时在晶界上仍未发现 Cr_{23}C_6 的析出, 晶间腐蚀实验也未见晶间腐蚀现象。

A03-P47

钨的辐照蠕变研究

聂禹非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

蠕变为金属在恒定应力与一定温度下所发生的缓慢而又连续的一种形变。在国防、航空和能源领域, 长期处于一定应力、温度条件下的工程部件都存在着由于蠕变影响而导致部件失效的风险。在核聚变领域, 金属钨作为最具前景的壁材料, 不仅长期处于一定应力和温度的服役条件, 同时会受到氦等离子体辐照。氦的引入对材料结构会造成破坏, 从而加速蠕变导致力学性能退化, 可能造成巨大的安全隐患。然而目前关于氦对蠕变行为影响研究较少, 需要系统深入研究。

本工作采用分子动力学方法, 开展了初步的蠕变机制研究工作。采用分子动力学可以弥补蠕变实验成本高、时间长的缺点, 另一方面可从原子尺度观测蠕变中微观结构的实时演化。

本工作主要研究了应力、温度以及氦浓度等条件对于纳米多晶钨蠕变速率以及蠕变机制的影响。首先在恒定应力 (3 GPa) 和温度条件 (2500 K) 下改变氦浓度 (0.01、0.1、0.15、0.25), 发现随着氦浓度增加稳态阶段蠕变速率显著提升, 同时稳态蠕变时间缩短以及第三阶段会提前发生, 这表明了氦使得蠕变性能退化。为了进一步明晰氦致使钨蠕变性能退化的原因, 我们对比研究了含氦与不含氦时钨的应力因子变化, 发现不加氦时应力因子分别时 0.76 (<2 GPa)、1.57 (2-4 GPa)、4.96 (>4 GPa), 这表明在低应力 (1-2 GPa) 蠕变机制主要由晶界扩散和晶内扩散主导; 在中间应力 (2-4 GPa) 蠕变机制为晶界滑移和扩散主导的混合蠕变机制; 在高应力 (>4 GPa) 蠕变机制为幂指数蠕变机制, 即位错从晶界处形核。加入氦后, 应力因子分别为 1.7 (<2.5 GPa)、5.82 (>2.5 GPa), 这说明氦的加入使得晶界滑移变得更加容易, 因此即使在低应力区间晶界也已经发生了滑移, 且幂指数蠕变也更容易发生, 即位错更易从晶界处形核。

上述结果给出了应力、温度以及氦浓度等条件对于纳米多晶钨蠕变行为的影响, 发现氦加速了多晶钨蠕变性能的退化。考虑到聚变装置中更加复杂的辐照工况, 进行部件结构和材料设计时需要关注氦与蠕变对材料服役行为与寿命的影响。

A03-P48

各向异性应变对铁中<100>位错环形成的影响研究

唐馨雅、李宇浩、周洪波*、吕广宏

北京航空航天大学

材料辐照损伤是核聚变等先进核能系统面临的共性问题, 其本质在于强辐照条件下缺陷的形成与演化, 这将对材料的微观结构与力学性能产生重要影响。铁及其合金材料广泛应用于核能系统当中。位错环是铁材料在高能粒子辐照下产生的一种常见缺陷, 位错环的演化行为与铁材料的辐照肿胀、辐照硬化等密切相关。大量实验研究表明, 铁中位错环根据其取向主要可分为两类, 即<100>位错环和 1/2<111>位错环。由于<100>位错环难以迁移, 其将显著影响铁材料辐照后的微观结构与宏观性能。但需要指出的是, 能量学计算表明 1/2<111>位错环的形成能远低于<100>位错环, 因此后者的形成过程一直是核材料领域的热点问题。前期研究提出了多种可能的<100>位错环形成机制, 包括位错环反应机制、冲击波形成机制、高温

声子驱动机制等。虽然上述机制能一定程度上解释相关实验中<100>位错环的形成，但其普适性一直备受争议。在核服役环境下，材料中将产生大量应力，这将改变辐照缺陷的稳定性，但其对<100>环形成的影响尚不清楚。

据此，我们采用分子动力学方法系统研究了单轴应力/应变对铁中位错环反应的影响。具体而言，我们在不同模拟温度下，考察了应变铁中两个 $1/2\langle 111 \rangle$ 位错环的反应过程。计算结果表明，高温下单轴拉应变可以显著提高<100>位错环的形成概率，且这一作用随拉应变大小的增加逐渐增强。例如，在无应变条件下，双环反应不生成<100>位错环；但在 3%拉应变下，<100>环的形成概率上升为 90%。原子结构分析发现，双环反应生成<100>位错环将经历五个主要阶段：①双环耦合形成固着复合体，并产生<100>段；②<100>段分裂成两个不同方向的 $1/2\langle 111 \rangle$ 螺位错；③螺位错段不断地扩展长大；④螺位错与周边的 $1/2\langle 111 \rangle$ 刃位错进行反应形成新的<100>段；⑤<100>环的尺寸进一步增大，形成完整的<100>环。在此基础上，我们进一步分析了应变对上述五个阶段热力学与动力学行为的影响。结果发现，一方面单轴拉应变会降低<100>环与 $1/2\langle 111 \rangle$ 环的形成能之差。例如，在零应变下(127SIA)，<100>环和 $1/2\langle 111 \rangle$ 环形成能之差高达 4.06eV，而在施加 2%单轴应变后其降低为 0.94eV。这表明拉应变将显著提高<100>位错环的稳定性。另一方面，单轴应变会降低各个阶段对应的激活能垒，进而从动力学上促进<100>位错环的形成。以第二阶段为例，在无应变条件下，该过程对应的激活能垒高达 2.59eV，因而难以发生；但在 3%拉应变下，激活能垒仅为 0.38eV，远低于无应变下的结果。应变对双环反应产生<100>位错环的促进作用得到了多种铁基势函数的验证，证实了模拟结果的可靠性，这将为理解铁中<100>位错环的形成以及铁基结构材料的服役性能评估提供重要参考。

A03-P49

中子辐照下钨中缺陷演化的团簇动力学模拟研究

王腾腾¹、牛瑀泽¹、郑淇蓉²、李永钢²、李宇浩¹、周洪波^{*1}、吕广宏¹

1. 北京航空航天大学，物理学院，北京 100191

2. 中国科学院合肥物质科学研究院，固体物理研究所材料物理重点实验室，合肥 230031

钨(W)材料以其熔点高、导热性能好、溅射阈值高等优点，被视为未来聚变堆中最可能全面使用的面对等离子体材料。但是，在聚变服役环境下，W基面对等离子体材料将遭受严酷的高能中子辐照，通过级联碰撞在材料中形成大量离位缺陷，这些缺陷将会在材料中迁移、聚集和湮灭，进而形成空洞、位错环等，导致材料辐照肿胀、硬化和脆化，严重劣化W基材料的服役性能。因此，研究W基材料中子辐照下缺陷演化行为对抗辐照材料开发至关重要。

我们采用自主开发的团簇动力学程序系统研究了中子辐照下辐照缺陷的演化规律。通过与HFIR堆、BR2堆和JOYO堆中子辐照实验进行对比，团簇动力学模拟所得的空位团簇和位错环数密度与实验结果在同一量级，缺陷平均尺寸误差小于20%，验证了程序的准确性和可靠性。在此基础上，我们探究了温度对W基材料中子辐照缺陷演化的影响。研究发现，在低温时，空位可动性较差，这限制了空位型缺陷的生长，其主要以小尺寸团簇的形式存在，团簇的最大尺寸不超过2nm。而在高温下，空位的频繁迁移和小空位团簇的解离为大空位团簇的成核和生长创造了条件，使得空位团簇的数密度降低，而平均尺寸显著增大。总体而言，温度升高将驱动空位迁移，从而促进空位型缺陷的长大。进一步，我们开展了CFETR辐照条件下材料中子辐照损伤模拟，预测了CFETR聚变中子辐照下W材料中辐照缺陷演化规律，这将为评估CFETR材料中子辐照条件下的服役行为提供参考。

A03-P50

烧结温度对钨纤维增韧钨复合材料的组织和性能的影响

陈寅*、陈畅、吴玉程

合肥工业大学

钨材料是未来核聚变装置中极具应用潜力的面向等离子体材料。然而，钨(W)的低温脆性、再结晶脆性以及高的韧脆转变温度限制了其应用。基于纤维增韧原理，以拉拔态的钨纤维(W_f)作为增韧相，利用放电等离子烧结设备制备了钨纤维增韧钨基(W_f/W)复合材料。通过研究 W_f/W 复合材料微观组织和力学性能的变化，阐明了 W_f 含量以及烧结温度对 W_f/W 复合材料组织与性能的影响规律。揭示了对 W_f/W 复合材料断裂行为的影响机理。主要得到了以下主要结论：当烧结温度为1300-1700℃时，随着烧结温度的提高， W_f/W 复合材料的致密度和热导率逐渐升高，当烧结温度为1700℃时， W_f/W 复合材料的致密度达92.5%，此时复合材料的热扩散系数和热导率分别为56.2mm²/s和132.4W/(m·K)。随着烧结温度的升高，复合材料的界面结合强度逐渐增加，其断裂行为也随之发生变化，界面开裂逐渐被抑制，钨纤维由韧性断裂转变为脆性沿晶断裂。当烧结温度为1400~1500℃时， W_f/W 复合材料具有较好的强韧性，1400℃烧结

的 W_f/W 复合材料断裂能最大达 3.50KJ/m^2 。

A03-P51

柱状晶钨高温辐照损伤及氢同位素滞留行为研究

王汉卿¹、王诗维²、袁悦^{*1}、付恩刚²、曹兴忠³、程龙¹、吕广宏¹

1. 北京航空航天大学物理学院

2. 北京大学物理学院

3. 中国科学院高能物理研究所

钨因其具有高熔点、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）的关键候选材料。近年来，使用化学气相沉积（CVD）技术制备的钨基材料引起了广泛关注。通过高纯 WF_6 和 H_2 制备的 CVD-W 具有高致密度、高纯度（ $>99.999\%$ ）等特点，且其热导率较传统锻造钨有明显优势。在微观结构上，CVD-W 由垂直于表面，且在表面具有 $\langle 001 \rangle$ 择优取向的柱状晶粒构成。这种特殊的结构对材料氦致起泡和氦滞留有着明显的影响。目前，重离子辐照对柱状晶钨的氦行为影响的相关研究还比较缺乏，有待进一步的研究。

本实验使用厦门钨业公司生产的柱状晶钨以及安泰科技有限公司生产的轧制态钨和再结晶钨（1873 K，1 小时退火）作为实验样品，首先在北京大学核物理与核技术国家重点实验室的 NEC5SDH-2 2×1.7 MV 串列加速器使用 6 MeV Cu^{+} 离子，在室温、573 K、773 K 和 973 K 下对样品进行峰值损伤为 0.6 dpa（SRIM 计算结果）的四组辐照实验。部分室温辐照样品后续分别进行了 573 K、773 K、973 K 等时退火。之后样品在北京航空航天大学的高温等离子体装置 STEP 上进行了 500 K，40 eV 氦等离子体辐照，氦的束流密度为 $1.0 \times 10^{22} \text{ D m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ，总的辐照剂量为 $1.0 \times 10^{26} \text{ D m}^{-2}$ 。在重离子辐照后，对样品使用正电子湮没多普勒展宽谱分析样品表面 250 nm 深度以内的空位型缺陷分布。纳米压痕测试和透射电镜（TEM）被用于对辐照缺陷的分析。

本文将通过进一步的正电子表征分析不同退火方式对离位损伤产生的空位型缺陷演化的影响，以及柱状晶中空位型缺陷分布状态随退火温度的变化趋势。使用热脱附谱（TDS）表征样品总的氦滞留以及捕获氦的缺陷类型，探究损伤状态的柱状晶钨是否仍然具备本征态下相对于轧制钨材料的低氦滞留特性。结合聚焦离子束（FIB）和 TEM 探究退火方式和温度对不同材料中辐照缺陷演化行为的影响。

聚变堆第一壁材料面临着复杂严苛的服役条件。本文探究了高温重离子辐照对柱状晶钨缺陷及氦行为的影响，对多重辐照协同研究提供了参考。

A03-P52

分子动力学对 W-Fe 界面材料的模拟与计算

董怡斌¹、Wahyu Setyawan²、高宁^{*1}

1. 山东大学

2. Pacific Northwest National Laboratory

由于钨材料具有高密度，高熔点，耐磨性良好，高拉伸强度，良好的伸长率，低蒸汽压，优异的热稳定性和高辐射吸收能力等优点，被选为 ITER 面向等离子体材料和未来聚变堆面向等离子候选材料[1]。而在高辐照损伤下，由于钨材料本身的脆性，限制了其在聚变堆中的广泛应用。为了解决这一关键问题，研究人员提出界面材料具有良好的热容性和力学性能，有作为新型面向等离子候选材料的研究潜力。同时 W/Fe 界面材料还可以应用到抗辐照磁存储装置中，在空间卫星与反应堆中具有广泛应用潜力。为了揭示 W/Fe 界面材料作为辐照材料的优异性，本工作运用分子动力学研究了该种材料的结构并计算其界面能，研究不同取向晶面结合的稳定性和界面强度；进行辐照损伤模拟，分析材料内部初级损伤演化过程，并发现半共格界面对辐照损伤的吸收作用；并对其进行拉伸和剪切测试，结合弹性常数计算，分析其力学性能受界面的影响，解释了 W/Fe 界面材料的力学性能和抗辐照的物理机制，为在聚变堆中应用的新型 W 合金与新型磁存储装置研发提供了重要的科学参考。

A03-P53

氢化钪作为中子慢化剂的脱氢动力学机制

唐孟、邓辉球^{*}

湖南大学物理与微电子科学学院

金属氢化物中子慢化剂在反应堆中的应用面临着严重的失氢问题。在高温和中子辐照条件下，快中子

位移对间隙氢的损伤会导致氢化物外表面附近的氢损失到周围环境中。由于脱氢过程无法通过原子水平的实验技术手段直接获得，目前尚未给出相关损失路径。因此，我们基于第一性原理计算，选取在高温下能保持更高氢含量的氢化物——氢化钷，开展了氢化钷脱氢动力学机制的研究，并给出了氢化钷中的脱氢路径。

本工作首先计算了氢化钷中的缺陷性质和缺陷扩散势垒，并发现间隙氢原子很容易形成和迁移（形成能-0.19 eV，扩散势垒 0.53 eV）。随后，我们针对氢化钷低米勒指数（100）、（110）和（111）面，构建了一系列不同终端类型的表面结构，利用表面能公式计算了相关表面能。结果显示，终端是氢原子的 111-stoi-4H 表面是最容易形成的化学计量表面，其表面能是 0.77 J/m²。对于非化学计量的表面，表面能依赖于温度和氢分压，因此我们首先计算出恒温 300 K 和 900 K 下的表面相图，然后根据表面能公式给出了氢化钷的表面相图。此外，考虑到在实际应用中，结构中的氢含量随着温度和时间逐渐减少，我们主要聚焦于非富氢终端类型 100-non-2Y, 110-non-2Y1H, 110-non-2Y2H, 111-stoi-4H, 111-non-1H-2, 111-non-2H-3 和 111-non-3H-1 表面的脱氢行为。我们研究了氢在不同终端类型表面以空位、弗兰克对以及间隙原子缺陷形式扩散的可能路径。计算结果表明，不同终端类型表面由于原子排列方式的不同，氢化钷中的脱氢机制会略有不同。但是总的来说氢在氢化钷中最倾向于先在体内形成间隙氢原子，然后以间隙原子形式向表面迁移，到达表面后再解吸。

本工作结合氢化钷的表面相图，给出了氢化钷中脱氢的可能路径，加深了对脱氢机制理解，为未来开展微型核反应堆的中子慢化剂材料研究提供了理论基础。

A03-P54

The effects of Si content in ERNiMo-2 deposited metals on deformation and fracture behavior during creep process

Yucheng Zhu^{1,2}, Qingchun Zhu², Li Jiang², Zhijun Li^{*2}

1. University of Chinese Academy of Sciences

2. Shanghai institute of applied physics, Chinese academy of sciences

The microalloying of suitable elements could play a multiplier effect in regulating the properties of alloy. In this paper, the ERNiMo-2 deposited metals with different Si content were prepared. The influence of Si element on carbides evolution in as-weld state and after creep state ERNiMo-2 deposited metals was investigated. The results showed that the Si addition could obvious influence the carbides, which could divided into eutectic carbides, nano-sized carbides and grain boundary carbides, in as-weld state deposited metals and its evolution during creep, and therefore affects the creep elongation of the deposited metals. The nano-sized carbides distributed in form of island reduced the minimum creep rate and caused the micro-strain concentration near grain boundary which leading to the crack of the sample without Si at low deformation. Due to the uniform distribution of strain and the continuous distribution of grain boundary carbides, the Si-containing samples have higher creep elongation. This research is of great value for adjusting the composition of ERNiMo-2 welding wire and improving the design of the creep performance of welded parts.

A03-P55

离位损伤剂量率和 PKA 能谱对钨中辐照缺陷演化行为的影响研究

赵味、牛瑀泽、马惠芝、李宇浩、周洪波*、吕广宏

北京航空航天大学物理学院，北京，100191

材料问题是聚变能实现面临的关键问题之一，其中面对等离子体材料的选择尤为重要。钨(W)基合金被视为最有前景的面对等离子体材料，但在聚变服役环境下，W 将面临 14.1MeV 的中子辐照，这将造成严重的辐照损伤，显著影响材料的服役性能。目前，实验主要采用裂变中子辐照和高能离子辐照来模拟聚变中子辐照。然而，与中子辐照相比，重离子辐照的剂量率要高 3-4 个数量级，产生高能 PKA 碰撞级联的概率也明显更高。已有研究表明，剂量率增加会降低空洞的数密度并抑制空洞的生长，同时会降低辐照肿胀。此外，重离子辐照高能 PKA 直接产生大尺寸缺陷团簇的概率更高。因此，系统研究剂量率和 PKA 能谱对辐照缺陷的演化对于理解重离子辐照与中子辐照的差异性具有重要意义。

我们采用自主开发的对象动力学蒙特卡罗程序系统研究了剂量率和 PKA 能谱对 W 中辐照缺陷演化的影响，并揭示了温度在其中所发挥的重要作用。研究表明，提高剂量率可以促进空位团簇聚集，促使其数密度升高、尺寸降低。这是由于剂量率的增加导致缺陷演化时间的缩短，从而降低了空位迁移的频率，导致可移动空位浓度的增加，最终促进了空位团簇的初始成核。值得注意的是，辐照温度升高会提高空位的迁移频率，从而可以补偿剂量率增加所导致的辐照微结构的差异。进一步，研究发现重离子辐照下的空洞数密度明显高于中子辐照。这是因为重离子辐照时，抽取到高能 PKA 的概率比中子辐照更高，从而使

得模拟体系中引入的空位团簇尺寸更大。这些大尺寸空位团簇将作为稳定的形核位点，进而促进空洞的形成。这些因素导致重离子辐照与中子辐照的缺陷微结构产生显著差异。

A03-P56

钨中氢滞留及脱附机理的团簇动力学模拟

陈孝茹^{1,2}、张愿愿^{1,2}、郑淇蓉^{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

针对钨基面向等离子体材料在高温等离子体作用下的氢同位素（氘/氚）滞留这一关键问题，实验热脱附谱（TDS）虽简单高效但很难准确标定氢滞留的俘获状态及其微观机制，相关基础问题的理论研究至关重要。为此，我们基于平均场速率理论，扩展了氢滞留/脱附的团簇动力学模型（IRadMat-TDS）。模型实现了固有缺陷对可动缺陷的饱和吸收及发射作用的物理建模，并计及了多晶界捕获效应对钨中氢滞留行为的影响。采用恒定升温速率的高温退火模拟，系统地研究了~ keV 辐照条件下多晶钨中缺陷随尺寸、时间、深度、温度的长时间动力学演化行为。研究发现：1）实验探测到的热脱附谱应当是多个高斯单峰的叠加，以往模型中的能量单点近似无法准确描述这种多重作用。2）严格标定了位于 500 K 和 550 K 附近的两个热脱附峰分别对应于晶界和辐照诱导空位/氢致空位对氢的捕获，且其俘获量占比表明晶界对氢滞留的贡献最大，空位的贡献次之，位错的贡献最低。3）氢存在两种热脱附机制，即从低结合能缺陷处的直接脱附，以及“低结合能缺陷处脱附—高结合能缺陷捕获—再脱附”的间接脱附。这对理解钨基面向等离子体材料的辐照损伤和氢滞留问题具有重要的理论指导意义。

A03-P57

Zr 元素对新型核用镍基高温合金凝固偏析与元素扩散的影响

姚志强^{1,2}、秦学智³、王佳祺^{2,4}、吴云胜^{2,5}、管现军^{2,5}、周兰章^{*2,5}

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. 中国科学院宁波材料技术与工程研究所 中国科学院海洋关键材料重点实验室

4. 中国科技大学 材料科学与工程学院

5. 中国科学院金属研究所 中国科学院核用材料与安全评价重点实验室

高温气冷堆反应堆结构材料在服役时面临着高温和中子辐照等严苛环境，对高温性能，尤其是与晶界相关的蠕变等性能提出了更高要求。固溶强化型镍基高温合金以其优异的综合性能和良好的组织稳定性成为了该结构材料的重要候选材料。众所周知，Zr 是高温合金中的重要晶界强化元素，相关研究已经证实添加 Zr 能够有效改善合金的力学性能，但在凝固过程中带来偏析加剧和低熔点相析出，在均匀化过程中促进晶粒长大和孔洞形成等不利影响，继而影响合金后续的热加工性能。当前有关 Zr 对固溶强化型镍基高温合金凝固偏析和均质化过程中元素扩散的影响却鲜有研究。探究 Zr 对合金凝固偏析和均匀化过程中元素扩散的影响，能够改善新型核用镍基高温合金热加工性能，从而为后续工业化生产提供理论指导。

通过 Thermo-Calc 热力学软件、电子探针（EPMA）、热重分析（DTA）等研究了 Zr 元素对合金凝固行为、元素偏析和均匀化处理过程中元素扩散的影响规律，构建了该合金的元素扩散动力学模型，并揭示了 Zr 元素在凝固过程中的作用机制。结果表明，不同 Zr 含量铸态合金均在枝晶间析出富 Zr 型 MC 碳化物，其面积分数随 Zr 含量增加而增加，而 Zr 元素对二次枝晶间距无显著影响。Scheil-Gulliver 模型的模拟结果显示合金的凝固行为与元素偏析在 Zr 的影响下显示出不同的趋势，且凝固过程中 Zr 在固-液界面处形成富 Zr 液膜，阻碍液相内的元素向固相扩散，从而扩大凝固温度区间，并显著增加 Zr、Mo 和 Mn 元素在凝固过程中的偏析程度。基于扩散动力学模型估算出 Cr、Mo、Mn 和 W 元素在 1200 °C 下的扩散系数随着 Zr 含量的增加而增加，因此适当的 Zr 微合金化能够促进均质化过程中的元素扩散，但过量的 Zr 元素则在凝固过程中造成严重的元素偏析，对后续合金的热加工性能产生不利影响。

A03-P58

位错对 Al0.1CoCrFeNi 高熵合金中 He 气泡行为的影响

朱九龙、杨腾飞*

湖南大学

用透射电子显微镜（TEM）研究了不同位错密度的 Al0.1CoCrFeNi 高熵合金（HEA）在进行 773 K 和 973 K 下 400 keV，注量为 $1.5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-2}$ 的 He 辐照后，He 泡的演变过程。He 泡的平均尺寸和数量密度都

随着位错密度的增加而减小,这表明位错的引入可以抑制 $\text{Al}_{0.1}\text{CoCrFeNi}$ HEA 中 He 气泡引起的体积膨胀。此外,在 773 K 下,He 气泡分布的深度范围也随着位错密度的增加而减小,因此假设 He 原子不仅可以被位错吸收,而且可以沿着位错快速迁移,这分别分散了 He 原子的偏析并降低了其局部浓度。除了 He 气泡外,由于位错吸收辐照引起的缺陷,辐照引起的不全位错环的尺寸也随着位错密度的增加而减小。在 973 K 下,He 泡沿着位错分布和聚集,进一步说明了位错是有效的辐照缺陷陷阱。本研究的实验结果证明了位错对 He 辐照引起的结构损伤的影响,这将有助于设计用于核应用的耐辐照 HEA。

A03-P59

锆合金中 Nb 元素对锆合金力学和热力学性能的影响

孔祥刚、吴璐*

中国核动力研究设计院

合金元素 Nb 在提高核反应堆中锆合金的性能方面发挥着重要作用。采用实验和理论方法研究了 Nb 掺杂对力学和热力学性能的影响机理。这项研究的结果表明,铌掺杂可以细化晶粒并提高硬度。硬度从纯 Zr 的 2.67 GPa 增加到 Zr1.5Nb 的 2.99 GPa,第一性原理计算发现硬度随着 Zr 基体中 Nb 浓度的增加而降低,即从纯 Zr 的 2.45 GPa 增加到 Zr1.5Nb 的 1.78 GPa。理论计算得到的结论是随着 Zr 基体中 Nb 浓度的增加硬度降低,说明晶粒细化可能在硬度增加中起主要作用。此外,关于 Nb 掺杂对热膨胀系数的影响,Nb 含量的增加导致热膨胀系数降低,这可能是由于 Nb 和 Zr 原子之间的强结合能所致。3 个样品的导热系数呈现出相似的变化趋势,表明热导率在室温下开始下降,最低值在 400 °C 左右。纯锆试样的导热系数始终较高,在测试范围内比 Nb 掺杂试样的导热系数更明显,并随着掺杂浓度的增加而降低。其可能原因可能源于 Nb 取代掺杂和晶粒再细化导致 Zr 晶格的畸变,这两者都会导致声子传播散射,从而阻碍声子的传播。本研究获得的结果可有助于开发先进的核燃料包壳材料。

A03-P60

奥氏体不锈钢表面电子束熔覆 AlCrNiSi_x 涂层在超临界二氧化碳中的腐蚀行为研究

邹吉春²、李伸²、杨万欢^{*1}、王文琴²、钟巍华¹、陈梦瑶¹

1. 中国原子能科学研究院

2. 南昌大学

超临界二氧化碳 (S-CO_2) 布雷顿循环发电系统具有能量转换效率高、结构紧凑等优势,在小型模块化反应堆中极具应用前景。奥氏体不锈钢是目前工程常用的核电材料,兼具较好的耐蚀性和经济性,是目前小型堆结构部件的候选材料之一。但 S-CO_2 发电系统的服役环境严苛,奥氏体不锈钢面临氧化、渗碳反应及高流速冲刷等腐蚀问题,会导致材料损失、力学及热物性能下降,甚至发生部件失效。目前,开发奥氏体不锈钢表面抗 S-CO_2 腐蚀涂层是解决其工程需求的可行办法之一。本文采用电子束熔覆技术在 304 不锈钢表面制备 AlCrNiSi_x 耐蚀涂层,并基于自主研发的超临界二氧化碳均匀腐蚀试验系统,完成了 1600 小时的静态腐蚀试验,针对腐蚀前后样品采用 SEM、EDS、XRD 和 TEM 等微观表征方法,获得了涂层的腐蚀行为规律,阐明了 Si 含量对涂层在 S-CO_2 环境中腐蚀行为的影响机制。结果表明:涂层与基体结合良好,涂层由 B2 相和 FCC 双相结构组成,涂层截面沿深度方向均为规则的网状结构;涂层在 500°C/25MPa 的 S-CO_2 环境中腐蚀 1600h 后,生成的 Al_2O_3 以及 Cr_2O_3 对涂层在 S-CO_2 中的均匀腐蚀性能具有决定性的影响,显著增强了不锈钢基体的耐腐蚀性。

A03-P61

EAST 装置高周期等离子体运行后穿管型钨铜偏滤器表面损伤研究

汪洋^{1,2}、朱大焕^{*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,合肥,230021

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。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/m² 下 5000 次循环和 20MW/m² 下 300 次热循环。虽然 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。

EAST 下偏滤器 monoblock 部件经历三轮实验高达 10452 次超过 8 秒的有效等离子体放电后, 通过装置内高分辨红外相机发现 C5 和 L4 窗口 monoblock 部件在放电过程中出现了异常温升。在实验维护期间, 对 C5 和 L4 模块进行取样分析, 结合超声无损 (NDT) 检测技术, 显示样块最左侧钨串出现钨铜界面损伤。后续对最左侧钨串的 SEM 检测发现管壁上部出现钨铜分层开裂现象, 裂纹中心在铜管正上方略偏左侧 (左侧倒角影响), 严重影响部件的水冷传热, 制约长脉冲高参数等离子体的实现。据评估, 界面开裂可以对部件表面造成 70-135% 的温升影响。试验期间经过长时高温热负荷, 钨块表面出现再结晶, 对再结晶区域表面热流反演得出材料表面平行热流值约为 130MW/m^2 , 倒角处的垂直热流达到 16MW/m^2 。偏滤器表面出现了丰富的损伤现象, 如: 瞬态裂纹网格出现, 可能来自于短瞬态高达 GW/m^2 量级的热流。表面异常的二次钨再结晶出现, 晶粒尺度可达到 1.3mm , 与装置内复杂的高温环境有关。纯钨与 C 颗粒相互作用生成的 W_2C 出现, 形成致密的 $\text{W-W}_2\text{C-W}$ 的三层表面结构。EAST 装置原位钨铜 monoblock 部件服役性能及寿命研究为其在 ITER 及未来聚变堆装置中的应用提供了重要数据参考。

A03-P62

合金中稀土元素与熔盐堆裂变产物 Te 的交互作用研究

韩纷纷*、吴集金、贾彦彦、叶祥熙、冷滨、黄鹤飞

中国科学院上海应用物理研究所

Ni-16Mo-7Cr 系镍基高温合金 GH3535, 具有优良的高温力学性能和抗氟盐腐蚀性能, 是熔盐核反应堆的关键合金结构材料, 但是该合金与熔盐接触的合金表面会发生由裂变产物 Te 导致的晶间开裂问题, 这将会缩短合金结构材料的服役寿命, 进而威胁熔盐堆的安全运行。因此, 改善 GH3535 合金的抗 Te 脆性能成为熔盐堆用合金材料研究的一个重要课题。

本文系统回顾了熔盐堆合金 Te 致开裂现象的研究进展, 研究了合金中添加稀土元素 La、Y 对 GH3535 合金抗 Te 腐蚀行为的影响及机理, 以及评估了 MCrAlY 涂层在阻挡 Te 扩散行为中的作用。采用 X 射线衍射, 扫描电镜及能谱 EDS 分析、电子探针、透射电镜等分析方法, 观察合金在不同条件下的微观组织形貌演变以及断裂组织分析, 结果表明: (1) 稀土元素的添加能显著降低 Te 在合金中的扩散深度, 降低沿晶裂纹深度, 从而改善合金的抗 Te 脆性能, 其机理在于在合金表面偏聚或形成稀土碲化物, 阻挡表面 Te 扩散; 在晶界上形成碲化物相起到固定 Te 的作用; (2) MCrAlY 涂层也能显著降低 Te 的扩散深度, 其机理在于涂层表面上形成 Cr_3Te_4 化合物层以阻挡 Te 扩散, 但 MCrAlY 涂层抗熔盐腐蚀性能不佳, 需要对涂层成分进行合理优化。

A03-P63

重离子辐照对氧化锆涂层微观结构、力学性能和铅铋腐蚀行为影响

朱昌达*、杨吉军

四川大学

研究了离子辐照对射频磁控溅射制备 ZrO_2 涂层微观结构、力学性能和腐蚀性能的影响。对比辐照前后, 发现衍射峰变得更尖锐, 这表明辐照诱导了晶粒生长。此外, ZrO_2 在 28.2° 处的衍射峰消失了, 在 30.2° 、 35.2° 、 38.2° 、 50.4° 和 60.2° 处出现了许多新的衍射峰, 其中在 38.2° 处的衍射峰与 m-ZrO_2 相吻合 (PDF #34-1484), 而其他衍射峰则与四方或立方 ZrO_2 相吻合 (四方: PDF #97-009-3029, 立方: PDF #97-010-5553)。这表明在辐照过程中发生了相变。这在意料之中, 因为许多研究都表明单斜氧化锆在辐照过程中会发生从单斜到四方或从单斜到立方的转变。当辐照通量增加到 6×10^{15} 离子/平方厘米时, 没有观察到 ZrO_2 衍射峰变宽或消失。即使在当前最高的辐照通量下, 相变仍未完全完成, 最终状态是四方相和残余单斜结构的混合物。此外, 拉曼分析结果与 XRD 结果相一致。随着辐照通量的增加, 观察到晶粒长大和辐照诱导硬化效应。之前的研究人员已经对辐照后涂层的硬度进行了大量研究。一般来说, 纳米硬度对氦气泡、微裂纹和位错等缺陷很敏感。氦气泡和位错通常会通过硬化效应提高辐照材料的纳米硬度, 相反, 微裂纹的形成会降低辐照材料的纳米硬度。在这里, 高离子通量辐照后在氧化锆涂层内部观察到的高密度空位团可以解释为什么辐照样品的纳米硬度高于未辐照样品, 以及为什么高离子剂量辐照样品的硬度值高于低离子剂量和中离子剂量辐照样品。为了进一步研究辐照对涂层抗铅铋腐蚀性能的影响, 辐照样品在 650°C 下进行了静态铅铋腐蚀试验。在 650°C 下经过 1000 小时的铅铋共晶 (LBE) 腐蚀后, 辐照涂层仍能保持结构的完整性, 保护基体免受铅铋腐蚀。然而, 与未辐照涂层相比, 辐照诱导的缺陷为氧原子从 LBE 快速向内扩散提供了通道, 从而在 ZrO_2 涂层下面形成了更厚的富铬氧化物层。尽管辐照涂层仍具有良好的抗铅铋腐蚀性能, 但辐照过程中发生的相结构转变、晶粒长大和辐照诱发的缺陷增强扩散等原因限制了 ZrO_2 作为铅铋耐腐蚀涂层的应用。据报道, 氧化锆的临界晶粒尺寸会影响相结构的稳定性。Pitcher 等人报告说, 当晶粒尺寸较大时, 单斜 ZrO_2 的总能量最低; 随着晶粒尺寸减小到纳米级, 如 30 纳

米以下，四方 ZrO_2 的总能量将低于单斜和无定形 ZrO_2 ，从而导致四方相的稳定；当晶粒尺寸进一步减小到 2-3 纳米以下时，无定形 ZrO_2 将成为能量最稳定的相。因此，我们下一步计划通过掺杂 Y、Al 或 Si 等元素来减缓晶粒生长，从而提高涂层的抗辐照性能。这项研究还有助于深入了解辐照诱导的微结构变化如何影响氧化锆作为腐蚀保护层的性能。

A03-P64

体心立方铁中位错 Bias 与辐照肿胀率的多尺度计算

郝剑楠¹、Luis Casillas-Trujillo²、徐海谭^{*2}

1. 中国科学院力学研究所

2. 田纳西大学

晶界、位错等扩展缺陷作为金属材料中的“势阱”，能够吸收大量辐照产生的点缺陷及缺陷团簇。位错型缺陷具有长程各向异性应变场，且通常对间隙型缺陷捕获效率高于空位型缺陷（Bias），将导致材料中剩余大量空位型缺陷造成孔洞肿胀等宏观现象，严重影响材料服役性能。因此，评估和预测材料辐照肿胀率对改善和设计核用金属材料十分重要。然而，由于不能充分考虑缺陷局域各向异性应变导致的缺陷动力学偏析差异，基于弹性力学与平均场的肿胀率计算值通常比实验肿胀率高 1-2 个数量级。

本文考察了缺陷在复杂应变场中各向异性扩散机制，提出了一个基于点缺陷寿命（lifetime）的 Bias 肿胀率通用理论框架。以体心立方铁相中的位错为例，研究了 $1/2\langle 111 \rangle$ 螺位错和 $1/2\langle 111 \rangle\{110\}$ 刃位错对点缺陷的 Bias。采用自演化原子动力学蒙特卡罗方法(SEAKMC)计算点缺陷寿命，研究位错对缺陷的捕获效率。得到了不同温度和位错密度下缺陷捕获效率、吸收强度和位错 Bias。发现了位错 Bias 与位错密度和温度的对数依赖关系。在 Bias 基础上计算获得了不同位错密度和工作温度下的最大辐照肿胀率，与不同辐照源（中子、质子、电子、重离子）对不同铁样品（辐照、退火、冷轧）辐照肿胀率符合良好。

本文揭示了影响缺陷各向异性扩散及与位错等扩展缺陷相互作用的动力学机理，提出的基于 lifetime 的 Bias 计算方法可以广泛用于金属中孔洞、位错环、界面、晶界等其他扩展缺陷与点缺陷相互作用计算。

A03-P65

温度对压力容器材料电偶腐蚀行为的影响

李梓民、王璨*

广东腐蚀科学与技术创新研究院

核反应堆的压力容器（RPV）采用低合金钢（LAS）A508 制成，外覆 309L/308L 不锈钢堆焊层，以提高 RPV 在严苛环境中的耐腐蚀性。然而，在 RPV 的运行过程中，不锈钢堆焊层可能由于机械损伤、点蚀和应力腐蚀开裂等原因而出现损伤。这会导致原本受到保护的 LAS A508 暴露在腐蚀性环境中，并且由于低合金钢与不锈钢之间成分和腐蚀电位的巨大差异，很可能会发生电偶腐蚀。除电位差外，电偶腐蚀在很大程度上取决于腐蚀环境条件，其中之一就是温度。具体而言，在不同工况下 RPV 及其部件会处于不同的温度下，停堆时温度介于室温与 80°C 之间，功率运行时温度介于 300 与 360°C 之间。因此，本研究重点研究这两种温度条件对异种金属间的电偶腐蚀行为的影响。

本研究采用电化学试验，如 OCP、ZRA 和动电位极化等，以及浸泡试验来研究不同金属的电偶腐蚀相互作用。同时，利用 OM 和 SEM 表征电偶腐蚀的表面形貌特征。电化学试验结果表明，温度对 LAS A508/309L/308L SS 在模拟一回溶液中的电偶腐蚀行为有显著影响。电偶腐蚀效应在 25°C 下比在 300°C 下更明显，这种差异归因于两种条件下不同金属之间腐蚀电位的不同，在停堆和运行温度条件下，腐蚀电位分别为 357 mV vs.SCE 和 ~55 mV vs.SCE。对暴露样品的表面形貌观察表明，在停堆温度条件下，LAS A508 受到均匀腐蚀和局部腐蚀的影响，有随机分布的凹坑，而 309L/308L SS 表面在电偶腐蚀试验中几乎没有变化。在运行温度条件下，电耦合的两种不同金属都发生了腐蚀，但 LAS A508 表面的腐蚀更为严重，大尺寸凹坑随机分布。为了证实电化学研究的推论，研究进行了一项专门设计的浸泡试验，模拟了 RPV 的实际使用环境，结果表明，由于两种材料在高温环境下的腐蚀，电偶腐蚀效应较弱。其中，LAS A508 腐蚀更严重，尤其是在异种金属焊缝之间的界面区域。

此外，浸泡试验表明，所研究的异种金属电偶腐蚀效应在很大程度上受到阳极（LAS A508）与阴极（309L/308L SS）面积比的影响，当实际阳极与阴极面积比超过 1:6000 时，平均腐蚀超过 0.3mm/y。最后，从腐蚀形貌演变结果可以看出，电偶腐蚀沿着焊缝-熔合线界面发展，而不是沿着 LAS A508 的深度方向发展。

总之，尽管在所研究的两种条件下都会发生电偶腐蚀，但在停堆温度条件下，电偶腐蚀的危害更大。此外，本研究中观察到的 LAS A508 母材沿焊缝熔合线而非深度方向的电偶腐蚀扩展可以说有利于 RPV 的运行可靠性。

A03-P66**Preparation, Microstructure, and Performance Study of (MoTaTiVW) C5 High-Entropy Ceramic.**

Meijiao Luo*

North China Electric Power University

Abstract : High-entropy ceramics are a novel class of materials derived from high-entropy alloys. These ceramics exhibit outstanding characteristics including high temperature strength, corrosion resistance, and radiation resistance, making them promising materials for nuclear applications. The fabrication of high-entropy ceramics through sintering poses challenges, as they are easy to fabricate but difficult to densify. Furthermore, the level of densification significantly affects the hardness, fracture toughness, and other key properties of these ceramics. This study focused on the fabrication of (MoTaTiVW) C5 high-entropy ceramics using hot-press sintering technique with carbide powder as the primary raw material. The impact of sintering temperature (1600–1900 °C) and holding time (2–6 hours) on the microstructural and mechanical properties of high-entropy ceramics was investigated. The findings indicate that optimizing the sintering temperature and holding time effectively enhances the density of (MoTaTiVW) C5 high-entropy ceramics. Furthermore, at a sintering temperature of 1900 °C and a holding time of 4 hours, the carbides of refractory metals titanium and vanadium are completely dissolved. The sintered samples exhibit a predominant face-centered cubic (FCC) structure of the (MoTaTiVW) C5 high-entropy ceramic phase. The density of (MoTaTiVW) C5 high-entropy ceramics achieved through sintering exceeds 98%, with hardness and fracture toughness values of 18.28 GPa and 2.31 MPa·m^{1/2}, respectively.

A03-P67**钨中片状氢团簇影响刃位错滑移的分子动力学研究**

刘伊帆、许珂、梁林云*、吕广宏

北京航空航天大学, 物理学院, 北京 100191

钨及钨基金属因其高熔点、良好的热力学性能、高溅射阈值和低氢同位素滞留量等优点, 被视为未来托卡马克装置中最有前途的面对等离子体候选材料。在聚变服役条件下, 钨将遭受氢氦等离子体、中子与热的三重辐照。其中, 氢等离子体辐照将导致氢及氦的同位素在钨中滞留和起泡。普遍认为, 氢在钨中的滞留与辐照产生的缺陷密切相关。然而, 最近的实验和理论结果均表明, 钨中的氢滞留和起泡起源于高浓度氢的自聚集形核, 而与预置缺陷无关。原子尺度的模拟结果也指出, 氢在钨中自发聚集形成二维片状结构。氢团簇的存在会阻碍位错的滑移, 显著提升材料的硬度, 进而破坏材料的力、热性能和等离子体的稳定性。尽管如此, 目前关于钨中片状氢团簇与位错相互作用的物理机制尚不明确, 特别是缺乏定性和定量分析氢团簇与位错相互作用影响材料硬化的规律。

基于此, 我们采用分子动力学方法系统研究了不同温度下钨中 $1/2\langle 111 \rangle\{110\}$ 刃位错的滑移行为及存在片状氢团簇对临界剪切应力的影响规律。计算结果表明, 对 $1/2\langle 111 \rangle\{110\}$ 刃位错, 其迁移率与施加的应力成正比, 而与温度成反比。在位错速度与应力成正比的条件下, 通过测量在恒定剪切速度不同温度下促使位错滑移的临界剪切应力, 拟合得到描述位错滑移行为的阻力系数, 其仅与温度有关, 且随温度线性增加, 符合声子散射理论。在此基础上, 我们进一步研究了八面体间隙片状氢团簇对其滑移行为的影响规律。结果表明, 不同取向的片状氢团簇对位错滑移的影响规律有所不同。(001) 面取向的片状氢团簇对位错滑移的阻碍作用相较于 (100) 面和 (010) 面的片状氢团簇较弱。对取向相同的片状氢团簇, 其半径和厚度越大, 刃位错切过氢团簇所需的临界剪切应力 (CRSS) 越高。主要原因是当刃位错与氢团簇接触时, 较大半径和厚度的氢团簇会在位错线附近聚集更多的氢原子, 增加了对刃位错的钉扎作用, 从而提高位错滑移所需的 CRSS, 增强了钨的硬化效应。以上结果可为理解钨中片状氢团簇与刃位错的相互作用规律以及评估钨基壁材料的辐照力学性能提供数据参考。

A03-P68**多种类型微结构钨中氦等离子体辐照效应研究**

张梦琦、孙亦文、栾思博、程龙*、袁悦、吕广宏

北京航空航天大学物理学院, 北京, 100191

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 550 K, 辐照剂量 $1.2 \times 10^{26} \text{ D/m}^2$), 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 $1.98 \times 10^{25} \text{ D/m}^2$ 、 $5.94 \times 10^{25} \text{ D/m}^2$ 、 $9.90 \times 10^{25} \text{ D/m}^2$), 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 $0.72 \times 10^{26} \text{ D/m}^2$ 、 $2.16 \times 10^{26} \text{ D/m}^2$ 、 $3.60 \times 10^{26} \text{ D/m}^2$), 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, 氦滞留量显著减少。

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-P69

钨基高熵合金中 fuzz 生长的慢化效应研究

孙钰涵¹、王晓杰²、贺瑜²、袁悦^{*1}、沈同德²、程龙¹、吕广宏¹

1. 北京航空航天大学物理学院

2. 燕山大学亚稳材料制备科学与技术国家重点实验室

高性能面向等离子体材料的研发是推进聚变能发展的关键任务之一。近年来, 高熵合金作为一种新型结构材料, 在高温下具有优异的综合性能, 如抗氧化、耐腐蚀、断裂韧性和良好的热稳定性, 表现出其在核应用中的潜力。而高熵合金特有的迟滞扩散效应慢化了缺陷的迁移、长大, 提升了材料的抗辐照性能; 鸡尾酒效应与晶格畸变效应极大地拓展了合金的设计范围, 通过元素调控等方式, 为提高材料的抗辐照性能提供了新的可能。本工作报道了钨基高熵合金 (WTaCrV、WTaCrVTi) 在低能高束流氦等离子体辐照下绒毛结构 (fuzz) 生长的慢化效应, 并结合相关结果提出该合金元素调控与性能优化的可能方法。

两种钨基高熵合金由高温高压烧结法 (900 °C、4 GPa) 制备, 晶粒尺寸约 30 nm, 并具有良好的强度与热稳定性。在 60 eV、1073 K 的 He 等离子体长时间辐照下, 两种钨基高熵合金表面均出现半球状结构且分布着较粗且平均长度分别为 210 nm (WTaCrV)、220 nm (WTaCrVTi) 的 fuzz 结构, 而相同辐照条件下的纳米晶 W 表面 fuzz 结构平均长度则超过 330 nm。TEM 结果显示, 两种钨基高熵合金中 fuzz 内部均匀分布着纳米级氦泡, 且氦泡平均尺寸 (WTaCrV~7.3 nm, WTaCrVTi~7.2 nm) 小于纯钨中氦泡平均尺寸 (~8.6 nm)。此外, He 等离子体辐照前后, 两种钨基高熵合金表面元素含量出现明显变化, fuzz 结构中 V、Cr、Ti 三种元素含量降低, 而 fuzz 尖端、根部与基体内部的元素分布也有显著区别, 我们认为这是 He 趋向性溶解导致其结合能变化的结果。

以上结果表明, 与传统面对等离子体材料 (纯钨) 相比, 钨基高熵合金能够抑制氦泡长大进而减慢 fuzz 结构的生长, 且该材料对 fuzz 生长的抑制效果或与元素含量与分布有关, 因此有望通过进一步元素调控, 设计并制备出更为优异的新型聚变堆面对等离子体材料。

A03-P70

硼含量对高硼钢热导及力学性能的影响

戚强*、蔡宇博、周海山、罗广南

中国科学院等离子体物理研究所

聚变能因其释放的巨量能量而被视为终极能源。但是聚变反应释放的高能中子却会导致包括中心超导体内的聚变设备的无法运行, 所以要使用屏蔽材料慢化吸收这些中子。高硼钢 (HBS) 作为屏蔽材料, 具有工艺成熟、强度高优点, 且已确定在 ITER 真空室夹层中。得益于 10B 很高的中子反应截面, 高硼钢可以有效地拦截热中子以及中能中子, 但是过多的硼元素会在材料中形成网状的硼化物相, 并导致材料综合性能的快速下降。因此提高硼含量的同时保证材料仍具备较好的综合性能具有一定的意义。同时考虑到脆性材料的低热导率会使材料更难承受热冲击, 因此有必要结合热学模型对高硼钢的各项性质作综合的

探究。

本文通过热等静压 (HIP) 制备了硼相分布均匀的、含硼量分别为 2wt.% 以及 3.3wt.% 的高硼钢。使用 FLUKA 计算了剂量当量换算下的屏蔽效率,发现经低能量中子透射后,高硼样品的剂量当量比低硼样品的低了一个数量级。采用 SEM (扫描电子显微镜) 和 EBSD (背向散射电子绕射) 对材料的微观结构进行表征,并用 XRD (X 射线衍射) 精修确定相组成为 γ -Fe 和 B0.9Fe1.1Cr0.9 以及各相的含量。之后采用选择性腐蚀确定了硼相的微观形貌。采用激光闪射法测量了高硼钢的热导,并结合汉密尔顿热导模型给出了硼相可能的热导数值,发现常温下高硼样品的热导下降了 17%。原因如下:一是硼相的热导显著低于铁相,硼含量的提升导致硼相增加从而影响整体热导。二是硼相颗粒随硼含量的提升形状发生改变并连接,而这种连接会影响了热流的传输。最后测试了两种样品的拉伸强度,发现低硼样品发生韧性断裂且力学性能优于 ASTM-A887 标准,同时高硼样品发生脆性断裂。

用 HIP 制备高硼钢能有效的分散硼相并提升材料的性能,这使得研究者可以进一步提升硼的含量以提升屏蔽材料的屏蔽效率。但是过高的硼含量仍不可避免地导致材料性能的下降,所以需要根据聚变堆的具体环境确定使用的高硼钢。

A03-P71

梯度偏压对锆合金表面 Cr 涂层的微观组织及 抗氧化性能的影响

杨晓玲¹、栾佰峰*¹、吴金龙¹、阮海波²、黄伟九²

1. 重庆大学材料学院

2. 重庆文理学院材料科学与工程学院

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毁和氢爆,对社会和环境造成极大地负面影响。福岛核事故发生以后,为提升核反应堆安全性,新型耐事故燃料包壳材料的开发成为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有效方法。Cr 涂层由于其优异的抗高温氧化性能、耐腐蚀性能以及与基体良好的相容性,被认为是最有前景的耐事故涂层包壳材料。磁控溅射制备的纯 Cr 金属涂层通常呈现柱状晶的生长形貌,而柱状晶的连续性晶界作为结构性本征缺陷,是难以消除的氧原子快速扩散通道,不利于金属 Cr 涂层性能的改善。本研究通过磁控溅射技术和连续改变偏压的沉积工艺,在 Zr-4 合金表面制备了梯度偏压 Cr 涂层。通过纳米压痕和划痕实验测试了 Cr 涂层的表面硬度、膜基结合力等基本力学性能;通过配置有能谱的扫描电子显微镜 (SEM/EDS)、X 射线衍射 (XRD)、电子背散射衍射 (EBSD)、聚焦离子束 (FIB)、透射电子显微镜 (TEM) 等多种分析手段系统研究了梯度偏压 Cr 涂层的耐高温高压水腐蚀性能及高温蒸汽氧化性能。研究结果表明,-60~-150V 梯度偏压制备的 Cr 涂层呈现等轴晶结构,与恒定偏压 (-150V) 柱状晶 Cr 涂层相比,纳米硬度略有下降,但膜基结合力显著提高,综合力学性能优异。高温高压水腐蚀条件下,恒定偏压 Cr 涂层易产生晶间裂纹,而梯度偏压 Cr 涂层组织致密,耐腐蚀性能更为优异。在高温蒸汽条件下,梯度偏压 Cr 涂层晶粒更易长大,晶界密度更低,抑制了氧的向内扩散,氧化膜厚度更薄,表现出更优异的抗氧化性能。因此,本研究设计制备的梯度偏压 Cr 涂层可改变柱状晶晶粒形貌并获得等轴晶,有效提高 Zr 基体的抗氧化性能,为 ATF 涂层的开发和应用提供了有益的参考。

A03-P72

面向等离子体材料 W-Hf 合金的再结晶行为以及抗热震性研究

尹怡、王铁军*、秦思贵、史英丽、于宏新

钢铁研究总院

探索聚变反应堆偏滤器的面向等离子体 W 材料承受极端热负荷时的性能退化意义重大。利用粉末冶金和轧制工艺制备了高性能 W-0.3%Hf 合金,研究了 Hf 的添加对 W 合金再结晶行为的影响。W-0.3%Hf 合金经过 1400 °C /1 h 退火后开始再结晶,在 1600 °C/1 h 退火后完全再结晶。W-0.3%Hf 合金再结晶温度相较于纯 W 提高了约 200 °C。通过 EMS-60 装置对 W-0.3%Hf 合金进行了脉冲时间为 5 ms 的单次热冲击,研究其热负荷损伤行为。当功率密度为 0.22-0.33 GW/m² 时,W-0.3%Hf 合金表面未产生任何表面损伤。功率密度为 0.44-0.66 GW/m² 时,W-0.3%Hf 合金表面出现了明显的平行裂纹,并且表面损伤程度随着功率密度的增加而加剧。经过 0.66 GW/m² 的热冲击后,W-0.3%Hf 合金负载表面的裂纹平均宽度最大,达到了 3.66 μ m。

A03-P73

含 Cr 难熔高熵合金涂层在液态铅铋共晶中的腐蚀行为研究

邓九国¹、张伟¹、邱玺²、朱昌达¹、周明扬²、周毅²、杨吉军*¹

1. 四川大学原子核科学技术研究所辐射物理及技术教育部重点实验室
2. 中国核动力研究设计院

在铅冷快堆的发展过程中, 结构材料与液态铅铋共晶(LBE)的相容性仍然是一个重大问题。表面涂层技术被视为一种有前途的方法, 因为它有望保护结构材料表面免受磨损, 改善耐腐蚀和化学性能等。TiNbZrMoV 难熔高熵合金(RHEA)涂层已被证明能减轻 LBE 腐蚀, 且该涂层保持了良好的完整性, 没有明显的消耗。然而, 该涂层比其他金属涂层具有更高的氧化程度。Cr 作为难熔金属之一, 有望形成保护性氧化物, 由于铁素体/马氏体钢基体中含有 Cr, 这有利于涂层与基体之间的冶金结合。因此, 我们采用 Cr 替代 TiNbZrMoV 体系的所有单元素, 以寻求性能更好的 RHEA 体系。本文采用磁控溅射技术制备了 5 种含 Cr 的 RHEA (CrNbZrMoV, TiCrZrMoV, TiNbCrMoV, TiNbZrCrV 和 TiNbZrMoCr) 涂层, 并研究了其在 550、600 和 650°C 下液态 LBE 中的耐腐蚀性能。在制备的沉积态涂层中, TiNbCrMoV 涂层具有 BCC 结构, 其他涂层呈非晶。腐蚀结果表明, 在这些涂层中, TiNbCrMoV 涂层表现出最好的耐腐蚀性, 其次是 TiNbZrCrV 和 CrNbZrMoV 涂层, 最后是 TiCrZrMoV 和 TiNbZrMoCr 涂层, 这与涂层本身的结构稳定性有关。对于 TiNbCrMoV 和 TiNbZrCrV 涂层, Cr 的存在有利于提高抗氧化性。这些涂层表现出元素的低传质特性, 且 TiNbCrMoV 涂层还表现出优异的抗氧化性。非晶态 TiNbZrCrV 涂层没有发生明显的原子向外扩散, 不同的是, Cr、V 和 Ti 原子在 TiNbCrMoV 涂层中发生向外扩散, 并在表面生成保护性氧化层, 这归因于晶界为原子扩散提供了通道, 表明晶体结构在耐腐蚀性中起着积极作用。

A03-P74

基于 MOOSE 平台的 UO₂ 燃料微结构与宏观力热性能双向耦合多尺度模拟研究

李柄慷¹、孙丹²、魏首¹、李磊¹、梁林云*¹、辛勇²、吕广宏¹

1. 北京航空航天大学
2. 中国核动力研究设计院

二氧化铀(UO₂)是一种被广泛应用的重要核燃料。然而, 在反应堆运行过程中, UO₂ 遇到的主要挑战包括辐照引起的肿胀、裂变气体释放、以及由此导致的燃料开裂和重结构问题, 这些问题共同作用劣化了燃料的力热性能, 严重危及到反应堆运行的效率和安全性。

UO₂ 燃料的宏观性能变化是一个典型的多尺度和多物理现象, 从原子尺度的高能粒子与晶格原子碰撞引起的离位点缺陷, 到介观尺度上的缺陷扩散、聚集和微观结构的演化, 最终影响宏观尺度上的力热性能。很难采用实验或者单一的模拟方法系统分析辐照缺陷如何影响 UO₂ 燃料的宏观力热性能。为了克服这一挑战, 我们结合相场和宏观有限元方法, 系统研究辐照条件下 UO₂ 中介观尺度上气泡形貌及演化行为, 以及由此导致的宏观尺度有效热导率和弹性模量的变化规律。相场模型主要考虑了 UO₂ 在辐照及不同温度、应力条件下的空位、自间隙原子和气体原子氙的扩散、反应、聚集行为, 以及气泡的成核、生长和连通的动力学演化过程。计算得到的孔隙率、有效热导率和弹性模量作为输入参数, 赋值给有限元计算中每个积分点上, 通过有限元计算得到宏观燃料芯块的温度和应力分布, 预测燃料芯块的力热性能。有限元计算得到的温度和应力分布再返回给下一时间循环中相场方法计算孔隙率、有效热导率和弹性模量, 然后不断重复直到满足总燃耗需求, 最终实现相场和有限元方法之间的实时双向耦合。基于此模型, 我们在 MOOSE 有限元平台上自主开发了一款新软件, 采用模块封装的方式将外部的相场方法引入到宏观有限元 MOOSE 平台中实现有效实时双向耦合, 给出反应堆工况下燃料微观结构影响宏观力热性能的变化规律, 以期后续研究 UO₂ 燃料的微结构优化和宏观辐照性能评价提供参考, 满足反应堆工况需求。

A03-P75

辐照缺陷位错环形核与演化机制的模拟研究

郭龙、邓辉球*

湖南大学物理与微电子科学学院

在核反应堆的运行过程中, 材料需经受高能粒子辐照、高温和高压等极端严苛环境的考验。尤其是高能粒子辐照, 会在材料内部诱发多种缺陷及团簇的形核。随着辐照剂量的持续累积, 这些缺陷团簇经历长期的演变, 逐渐导致材料性能下降。位错环作为辐照诱导产生的典型缺陷, 对材料服役性能具有显著影响, 成为实验与计算模拟研究的焦点。因此本文针对位错环的微观机制、介观演化和宏观性能开展多尺度计算模拟研究, 以深入理解其形核形态、演化行为、相互作用和长时间演化机制, 从而揭示其复杂演化过程的内在规律。

首先, 本文运用了分子动力学(molecular dynamics, MD)模拟深入探讨了具有不同层错能的典型核

用材料中空位型和间隙型弗伦克尔环的形核形态特性。研究发现，六边形空位环稳定的原因在于形核过程中环边缘应力易累积，促进 $1/3\langle 111 \rangle$ 位错片段分解，进而触发肖克莱位错的形核与运动。而对于间隙环，通过位错分解模型证明了，在高温下，不稳定层错能远高于本征层错能的材料易分解，因其体系能量超过分解能垒，这解释了退火实验中观测到的间隙环形态从圆形转变为六边形的现象。本文提出了位错环形核形态与材料层错能性质之间的关联机制，提高了对位错环微观形核形态机制的理解。

其次本文运用非平衡分子动力学模拟方法，深入研究了 $1/2\langle 111 \rangle$ 位错环在动态冲击波应力场下的演化行为。根据棱柱形间隙位错环与分切应力的协同作用，本文提出位错环在冲击波动态应力场下惯习面旋转角度与激活滑移系统的分切应力成正比，且随位错环尺寸增大而减小。 $1/2\langle 111 \rangle$ 位错环在冲击波应力场中诱导孪晶形核，整个过程符合孪晶反孪晶不对称理论和非施密特效应，与实验的观测一致。这个过程中位错环直接诱导位错网络的形核，为辐照实验中的位错网络形成提供新形核源。

此外，通过 MD 模拟重点研究了不可动 $\langle 100 \rangle$ 位错环间的相互作用现象。密排方向挤列子的形核是驱动不可动位错环相互作用的关键，其形成过程受到温度和位错环空间关系的共同调控。位错环之间形成挤列子的临界温度约为 580 K。在空间分布效应方面， $\langle 100 \rangle$ 位错环的空间分布对相互作用的影响可通过局部平均压强或位错密度进行量化。这深化了对 $\langle 100 \rangle$ 位错环相互作用的理解，为实验和大尺度模型构建提供了理论指导。

最后，本文根据位错环性质构建了介观尺度团簇动力学 (cluster dynamics, CD) 模型。模型涵盖多种辐照缺陷团簇，利用距离方差和离散连续模型，剖析了 C15 团簇和位错环的形成自由能关系，构建了温度依赖的缺陷团簇转化模型，最终应用于辐照诱导的缺陷形核、演化和相互作用过程。本文得到的位错环数密度与辐照剂量的长时间演化规律与实验结果吻合。可动位错环间的相互作用驱动着位错环数密度的长时间演化。进一步地，将缺陷数密度纳入宏观硬化模型后，发现位错环对辐照诱导的材料硬化具有最大贡献。本文深入探讨了探测方法、缺陷团簇以及本征位错对材料硬度性能的影响，发现相较于纳米压痕测量方式，微柱压缩测量及其与缺陷的相互作用会导致硬度值偏低。

本文综合运用了 MD、CD 以及力学模型，从微观到介观再到宏观进行了多尺度模型与模拟。研究聚焦于位错环形核形态特征、动力学演化、相互作用以及长时间演化机制，为理解辐照后材料性能变化提供了重要依据。

A03-P76

选区激光熔化 304L 不锈钢 He 离子辐照 PIA 行为研究

郭玉玉*

上海理工大学

增材制造技术是通过计算机建模来逐层构造三维金属部件的有效方法。选区激光熔化 (SLM) 技术是发展最为成熟的金属增材制造技术之一，具有设计自由度高、一体成型复杂构件等优势而受到了核电领域的广泛关注。反应堆的堆芯构件的服役环境较为苛刻，面临严重的氦脆，肿胀和硬化等问题。而在本次工作中，SLM 制备的 304L SS (SLM 304L SS) 和传统轧制 304L SS 在室温下进行 350MeV 的氦离子辐照，其注入剂量为 1×10^{17} ions/cm²，并对辐照后的两种样品在 700°C 下分别进行 10 小时、100 小时、和 300 小时的退火处理，这是为了研究氦泡对退火时间的依赖性和氦泡的长大机制，以及退火对辐照硬化的影响。利用透射电子显微镜、扫描电子显微镜和纳米压痕进行相关表征。结果表明，随着退火时间的延长，两种样品中的氦泡尺寸增大，数量密度减小，最终趋于稳定状态。退火 10-100 小时是氦泡快速长大时期，同时伴随着氦泡数量密度的显著下降。退火 100-300 小时是氦泡进入了稳定长大时期，且氦泡数量密度未发生显著变化。但 SLM 304L SS 经过高温长时间退火后具有更低的肿胀系数，因此 SLM 304L SS 具有更优的抗氦泡粗化性能。通过 Arrhenius 模型计算的表观活化能 (Eact) 可确定退火 10 小时的氦原子倾向于通过置换机制扩散，氦泡以迁移和聚结 (MC) 机制长大。进行退火处理后，两种样品均出现了明显的辐照硬化回复现象。SLM 304L SS 的辐照硬化程度从 22% (辐照后) 降低到 6.1% (退火 300 小时后)，传统轧制 304L SS 的辐照硬化程度从 54% (辐照后) 到 31% (退火 300 小时后)，因此 SLM 304L SS 在高温长时间退火后具有更低的辐照硬化程度以及具有良好的抗辐照硬化能力。退火 10 和 100 小时后，SLM 304L SS 中的胞状亚晶和纳米氧化物颗粒保持相对稳定，对氦泡具有捕获作用。退火 300 小时后，胞状亚晶开始分解，纳米氧化物颗粒不再提供捕获氦泡的作用，但仍存在高密度位错，并成为了抑制 SLM 304L SS 中氦泡长大的主要贡献者，其势阱强度和稳定性均高于纳米氧化物颗粒，因此 SLM 304L SS 在长期服役环境下具有更好的抗氦辐照性能。

A03-P77

基于加速分子动力学的多组元合金中空洞形核研究

贾同轩¹、李仕倡¹、林也平¹、高宁²、邓辉球¹、胡望宇¹、杨腾飞^{*1}

1. 湖南大学
2. 山东大学

一些多组元浓合金显示出了优异的高温抗肿胀性能,目前对其抗肿胀的微观机制研究更多集中在间隙型缺陷行为方面。由于空位型缺陷的迁移率较低,因此多组元合金中空位型缺陷的演化过程和机制仍然不清楚。本研究利用自适应加速分子动力学对比了纯 Ni 和 NiFe_x 二元浓合金中空位的迁移和演化机制,发现纯 Ni 中空位更容易聚集生长成大尺寸空位团簇,成为空洞的形核中心,然而 NiFe_x 二元浓合金形成更多数量的小尺寸及中等尺寸空位团簇,空洞形核生长被抑制,这一现象随着 Fe 含量增加表现更加显著。这主要由于 Fe 的加入使空位团簇的局部势能鞍点升高且更为无序引起的。此外, NiFe_x 中的空位迁移具有较强的化学偏向性,其倾向于和 Fe 原子进行交换从而进行迁移,使得空位团簇附近出现缺 Fe 富 Ni 的局域环境。本研究表明多组元浓合金中初始空洞形核被抑制可能也是其抗肿胀的关键机制之一。

A03-P78

钨中位错与氢氦协同作用模拟

李小椿*、徐白川、周海山、罗广南
中国科学院等离子体物理研究所

钨被视作核聚变装置中面向等离子体材料的主要候选材料。在聚变堆材料服役过程中,高能中子辐照、低能强流氢/氦等离子体轰击和高热负荷等极端环境将对材料造成严重的损伤。在钨中会产生位错等辐照缺陷,且位错的存在会引起严重硬化。在钨中最常见的就是 $1/2\langle 111 \rangle$ 螺位错与 $1/2\langle 111 \rangle\{110\}$ 刃位错,此外辐照点缺陷的聚集会形成大量的间隙性位错环 $1/2\langle 111 \rangle$ 。钨中位错可以捕获氢/氦原子,导致氢/氦滞留。为了系统探究钨中位错对氢/氦行为的影响,本文应用分子动力学方法研究了钨中氢/氦与位错的相互作用以及其中的扩散行为。

通过分子静力学方法计算了氢/氦在位错不同位置的结合能分布,得出氢/氦倾向于在螺位错的中心核心区域、刃位错的拉伸核心区域和位错环边缘区域被捕获。通过弹性能量带(NEB)方法计算了氢/氦在位错中的迁移能垒,发现位于位错核心区域的氢/氦原子倾向于沿着螺位错线盘旋迁移与倾斜于刃位错线一定角度扩散。

接下来研究了位错与氢团簇对氢原子的协同影响。基于氢团簇的尺寸,将研究对象分为小尺寸氢团簇和大尺寸氢泡。首先,运用分子静力学方法探究了结合能的影响因素,并发现其数值随氢团簇尺寸增加而增加,随与位错核心距离的增加而减小,并随着已捕获氢原子数量的增加而减小。此外,还生成了不同数量氢与氢原子在位错核心的稳定构型,以研究氢团簇与氢原子对位错核心的协同影响。随后,利用分子动力学方法研究了大尺寸氢泡与位错对氢原子动力学行为的影响。通过在位错核心构建不同尺寸的氢泡,揭示了氢泡在位错核心的实际生长过程。并观察到氢原子向位错核心的氢泡聚集过程,这解释了实验中预先进行氢辐照引起氢原子滞留量增加的现象。但值得注意的是,氢泡的陷阱突变成成为阻碍氢原子进一步靠近的屏障。研究结果有助于深入理解位错、氢团簇以及氢原子之间的复杂相互作用,为解释实验中观察到的现象提供了微观机理的解释。

A03-P79

氚增殖剂 Li_4TiO_4 中空位对氚行为的影响及氚在完美晶体中扩散的第一性原理研究

卢中华、石彦立*
四川大学

Li_4TiO_4 是一种非常有潜力的氚增殖剂陶瓷材料,它可作为产氚燃料被用于聚变反应堆设计中。释氚效率是判断氚增殖材料释氚性能好坏的一个关键参数。众所周知,空位缺陷会捕获氚,进而阻碍氚释放过程。目前针对 Li_4TiO_4 中空位对氚行为影响的研究非常有限。本研究利用 DFT 对 Li_4TiO_4 中氧/锂空位($\text{V}_{\text{O/Li}}$)和空位-氚复合缺陷($\text{V}_{\text{O/Li}}+\text{T}$)进行研究,得到了不同带电缺陷的原子结构、形成能以及电子结构。 V_{O} 的主要价态是+2 价和 0 价, V_{Li} 的主要价态是-1 价,+1 价是($\text{V}_{\text{O}}+\text{T}$)的主要价态,0 价是($\text{V}_{\text{Li}}+\text{T}$)的主要价态。氚原子在 V_{O} (V_{Li})中的滞留形式是与空位旁 Ti 成键(与空位旁 O 成键)。此外,通过 CI-NEB 方法得到氚穿过晶体的最有利路径为沿 $\langle 001 \rangle$ 晶向(激活能为 0.410 eV)。经晶格振动修正后在 300 K 的温度下激活能变为 0.362 eV,沿 $\langle 110 \rangle$ 和 $\langle 1-10 \rangle$ 晶向的激活能分别为 0.562 eV 和 0.618 eV,说明氚在完美 Li_4TiO_4 晶格中的扩散具有各向异性。本研究在原子尺度解释了缺陷的形成机制及氚的扩散性质,为设计优化高效释氚的新型氚增殖剂材料提供有价值的指导。

A03-P80

内应力和氢渗透对 Er_2O_3 涂层阻氢性能影响的研究

郑忠洋、李和平*

华中科技大学

能有效防止氢渗透的陶瓷涂层在氢能和核聚变反应堆等领域中展现出了广泛的应用前景,本研究深入探讨了 Er_2O_3 涂层在抗氢渗透方面的性能表现,并揭示了内应力在其中扮演的关键角色。研究发现, Er_2O_3 涂层的内应力对其抗氢渗透性和涂层寿命具有显著影响。为了调控内应力,我们设计了具有层状结构的 Er_2O_3 涂层,并通过实验观察到了内应力随着涂层层数的增加而增加的趋势。在实验中,我们制备了厚度为 97 nm 的 15 层 Er_2O_3 涂层,并测量了其氢渗透降低系数 (Permeation reduction factor, PRF)。结果表明,该涂层的 PRF 达到了最高值 626,显示出优异的阻氢性能。然而,随着内应力的进一步增加,涂层的 PRF 开始下降,这表明过高的内应力会对涂层阻氢性能产生不利影响。此外,我们的实验观察和计算模拟结果还表明, Er_2O_3 涂层的性能与渗入涂层的氢原子密切相关。氢原子渗入涂层后,会削弱 Er-O 键,从而降低 Er_2O_3 的力学性能,进而影响其阻氢性能。综上所述,本研究通过调控 Er_2O_3 涂层的内应力和研究氢同位素渗透对涂层性能的影响,为设计具有高 PRF 和长寿命的氢渗透屏障提供了参考。

A03-P81 **α - Al_2O_3 /AlPO₄ 阻氢渗透涂层的制备、结构调控与性能优化**

莫少杰、赵子瑞、李和平*

华中科技大学材料科学与工程学院

α - Al_2O_3 具有高理论阻氢水平和高化学稳定性,被认为是理想的阻氢材料。然而, α - Al_2O_3 的形成温度高达 1200 °C 以上,远超过钢的淬火回火温度,会对钢的组织及性能产生不利影响。在本研究中,我们采用热化学反应法,在 500 °C 低温条件下制备 α - Al_2O_3 /AlPO₄ 阻氢渗透复合涂层,并通过引入聚丙烯酸(PAA)进一步提高了 α - Al_2O_3 纳米颗粒在浆料中的分散性。经聚丙烯酸改性后的 α - Al_2O_3 /AlPO₄ 阻氢涂层的抗腐蚀性是钢基体的 3094 倍,比未改性涂层提高 6 倍。改性后,涂层的硬度由 224±54 HV 增加到 524±54 HV。聚丙烯酸的添加使涂层的抗热震能力明显增强。改性后,涂层在 600 °C-水冷条件下的热震循环次数从 120 次提高到 300 次。并且热震后,改性涂层的表面仍然致密,未观察到裂纹和剥落现象。经 1200 °C 的高温氧化后,未改性涂层的表面出现大量裂纹,而改性涂层依然保持完好。经过阻氢渗透性能测试,改性后的复合涂层在 400、450 °C 的阻氢因子分别达到 1890、1935,使钢基材的阻氢同位素能力提高了三个数量级。这项作为高性能 α - Al_2O_3 复合涂层的低温制备与结构调控提供了新思路。

A03-P82**基于第一性原理的高熵陶瓷缺陷行为研究**

李仕倡、贾同轩、王瑞、陈志炜、刘智骁、邓辉球、胡望宇、杨腾飞*

湖南大学

多组元过渡金属碳化物同时兼备金属和陶瓷的性质,表现出一系列优异的力学、热学性能,已成为结构材料领域的前沿热点。目前,在多组元过渡金属碳化物中,关于过渡金属对碳化物点缺陷性质的影响仍不清楚。本工作利用特殊性准随机结构(The special quasi-random structure, SQS)建模和第一性原理(The density functional theory, DFT),计算了 TiC、(TiZr)C、(TiZrNb)C、(TiTaNbZr)C、(TiTaNbZrHf)C 五种碳化物的电子结构以及缺陷性质。结果表明,新金属组元的增加影响原金属组元与碳原子之间的电荷分布(稳定性),导致过渡金属空位形成能存在差异。随着组元数增加,金属和 C 的空位形成能呈现降低趋势,其中 Zr、Nb、Ta 元素的加入最为显著。此外, C 空位形成能远小于金属,迁移势垒也是如此,因此辐照条件下,多组元过渡金属碳化物中空位的形成与扩散可能以 C 为主。

A03-P83**人工智能辅助 TEM 图像快速分析研究**

余淼森、常昊、高宁*

山东大学前沿交叉科学青岛研究院

铁基合金是目前核反应堆中主要的结构材料。在服役过程中,这些结构材料会受到高通量的中子辐照,从而产生间隙子和空位等缺陷,这些缺陷会发生扩散并聚集形成缺陷团簇,例如空洞、位错环、堆垛层错四面体等,造成其内部的微观结构发生变化,影响材料的服役行为。对这些辐照缺陷微观结构分析,到目前为止,主要是基于透射电子显微镜(TEM)进行分析表征,由于辐照缺陷的结构复杂性及较高的数密度,

利用 TEM 分析往往需要大量的人力并不可避免地引入较大的误差, 造成对缺陷分析的不确定性。

为了解决上述关键问题, 本研究提出了一种基于人工智能图像识别快速准确分析和表征辐照缺陷 TEM 图像的新方法。该方法将透射电子显微镜 (TEM) 图像模拟技术与人工智能算法相结合, 可方便快捷地识别和分类实际 TEM 图像中的各种复杂辐照缺陷。其中, 为了获得性质确切的训练集, 本研究中不仅使用了已有的文献结果, 而且通过搭建体心立方晶体结构中两种位错环 ($1/2\langle 111 \rangle$ 和 $\langle 100 \rangle$ 位错模型)、间隙原子团簇模型以及面心立方晶体结构中常见的堆垛层错四面体缺陷模型, 开展分子动力学和加速分子动力学模拟, 获得稳定的缺陷结构, 然后采用开源透射电子显微图像程序 TEMSIM 对上述缺陷结构进行 TEM 图像模拟, 获得缺陷的准确的 TEM 图像, 将计算模拟所得的 TEM 模拟图像及实验 TEM 图像作为训练集, 输入至人工智能识别图片程序 YOLOv7 中, 显著提高了训练模型对缺陷团簇的识别准确度, 实现了对单个及多个辐照缺陷快速高效准确识别。通过这种方法, 进一步加强了实际 TEM 图像中辐照缺陷数目和种类的分析, 为反应堆结构材料辐照缺陷性质分析提供一种高效的解决方案。

A03-P84

碳化硅在液态铅铋合金中的腐蚀机理研究

李琦琦¹、许依春^{*2}

1. 中国科学技术大学

2. 中国科学院合肥物质研究院固体物理研究所

碳化硅(SiC)具有低中子活性、抗高温蠕变和氧化、耐辐照以及高热导率等特性, 成为铅冷快堆包壳或新型燃料元件涂层的候选材料。然而, 高温、辐照环境, 液态铅铋 (LBE) 仍然会溶解 SiC 表面形成非晶 Si 表面, 并渗透 SiC 基体, 导致晶粒脱落, 使得 SiC 服役性能退化。因此, 厘清 LBE 环境下碳化硅腐蚀的机理, 对碳化硅在铅冷快堆中的应用至关重要。

本文以立方碳化硅(3C-SiC)和 LEB 为研究对象, 采用第一性原理计算方法研究了碳化硅基体和 $\Sigma 3(111)$ 、 $\Sigma 9(221)$ 、 $\Sigma 27(552)$ 、 $\Sigma 5(120)$ 、 $\Sigma 5(130)$ 、 $\Sigma 13(150)$ 六种晶界结构、铅铋在块体和晶界中的替代、铅与碳和硅作用机理、铅对碳空位和硅空位产生及辐照对碳和铅扩散的影响。结果表明, 以 $[1-10]$ 为转轴的晶界 ($\Sigma 3(111)$ 、 $\Sigma 9(221)$ 、 $\Sigma 27(552)$) 比 $[100]$ 为转轴的晶界 ($\Sigma 5(120)$ 、 $\Sigma 5(130)$ 、 $\Sigma 13(150)$) 更稳定; 铅铋更容易替代硅原子, 且铅比铋更容易进入到碳化硅中, 与被替代原子体积和电子相互作用密切相关; 同时, 替代 Pb 会降低近邻 C 空位形成能及其远离 Pb 原子的扩散能垒, 从而促进周围碳空位的产生, 且沿着远离铅原子路径扩散, 从而揭示 LBE 腐蚀环境下 SiC 中 Pb、C 局域富集实验现象。

A03-P85

CRAFT 直线等离子体装置研发进展

李宇*

中科院等离子体所

等离子体与材料相互作用是核聚变领域的关键科学问题。相比托卡马克, 利用直线等离子体装置开展此类研究具有几何尺寸简单、诊断方便及实验成本低等优势。尽管国内国外已经有大量此类装置, 除了位于荷兰 DIFFER 的 Magnum-PSI, 它们的束流远远低于 ITER 偏滤器预期 (约 2 个数量级)。受国家“十三五”资助, 中科院等离子体所即将建成超导强流直线等离子体装置 SWORD。本文将描述其最新进展。

A03-P86

AlNbTiZr 高熵合金包壳氧化行为的数值模拟研究

王青青*

中国核动力研究设计院

本工作通过基于密度泛函理论的第一性原理方法研究了 AlNbTiZr 高熵合金表面氧化行为。计算了氧吸附能, 分析了 O 吸附能随局部环境中 Al、Nb、Ti、Zr 原子数的变化趋势, 发现当 Ti 和 Zr 原子位于 O 原子局部环境时, 吸附能相对较低, 且 Al 和 Nb 原子较多的空位, 吸附能较高。通过功函的计算分析发现 O 原子的吸附与吸附位点和局域元素有关。表面上原子的 eg 和 t_{2g} 分波态密度揭示了原子对 O 的吸附能力依次是 Ti>Zr>Nb>Al。目前的研究结果揭示了实验上 AlNbTiZr 高熵合金包壳氧化层中不同元素分布的微观机理。

A03-P87

聚变堆用钨合金的激光增材制造及裂纹抑制研究

马梦晗、张舒博、张文井、牛奕茗、刘伟*
清华大学材料学院

核聚变反应堆中,钨由于其出色的高温力学性能、高热导率以及较好的抗等离子体辐照性能,成为偏滤器的主要候选材料。而钨的本征脆性导致其难以通过传统工艺实现具有复杂结构的偏滤器的成型。激光粉末床熔融技术(LPBF)具有高自由度的特点,可以满足复杂构件的成型需求。然而激光增材制造钨及钨合金始终存在成形问题,即 LPBF 工艺中引入的高热应力会诱发裂纹的产生。此外,有研究通过调控打印工艺降低热应力,或通过合金化改善钨的本征脆性来抑制裂纹,但是这些方法从理论上仍难以彻底消除裂纹。因此,采用合理的后处理制度进一步弥合裂纹是非常重要的。

本研究采用 LPBF 技术制备 W-TaC 合金,首先通过调控工艺和成分尽量减少成形过程中形成的裂纹,其次利用热等静压(HIP)进一步处理,一方面消除微孔及微裂纹,另一方面对于部分难以通过热等静压弥合的裂纹处,通过诱导碳化物在裂纹处析出从而达到裂纹自修复的优异效果。最终实现了裂纹密度减少了 90%,更重要的是,提供了一种激光增材制造制备无裂纹钨合金的新思路。

A03-P88

阴极粉体材料选型对氧泵在 LBE 中控氧效果影响研究

吴伟豪*
华北电力大学

The lead-bismuth eutectic (LBE) alloy, due to its excellent thermal conductivity, high density, and low neutron absorption cross-section, is an important candidate material for coolant in lead-cooled fast reactors and accelerator-driven systems (ADS), as well as for spallation targets. However, the interaction between LBE and structural materials at high temperatures can easily lead to corrosion problems, severely affecting the safety and lifespan of the system. Oxygen pump technology, by adjusting the magnitude and direction of the applied voltage between the two electrodes of the pump, enables effective transport of oxygen ions between LBE and air, making it one of the effective methods for oxygen control in LBE systems. This study selected three types of cathode powders—LSM, LSM-GDC, and Ni/NiO—to assemble oxygen pumps and tested their oxygen control efficiency and limits at 500°C. The study systematically investigated the impact of cathode powder selection on the oxygen control effect in the LBE system. The results indicate that metal-type cathode powders (such as Ni/NiO) are ineffective as cathode materials because oxides cannot serve as a replenishable oxygen source. Air-type cathode powders LSM and LSM-GDC both achieved effective control of oxygen concentration in the LBE system. The LSM-GDC oxygen pump, with a mass ratio of 1:1, demonstrated an average oxygen increase rate of 0.204 mg/h and an average oxygen decrease rate of 0.039 mg/h for oxygen concentrations ranging from 0.5×10^{-6} wt.% to 30×10^{-6} wt.%. In contrast, the LSM oxygen pump, assembled with pure LSM cathode powder, improved the oxygen increase rate and decrease rate by 36% and 53.57%, respectively. After continuous oxygen reduction for 56 hours and 26 hours, the LSM-GDC oxygen pump and the LSM oxygen pump reduced the oxygen concentration in LBE to the lowest values of 0.52×10^{-6} wt.% and 0.65×10^{-6} wt.%.

A03-P89

热处理工艺对增材制造 316L 不锈钢辐照损伤行为影响

黎颖熹、宋淼*
上海交通大学

激光粉末床熔融技术制备的 316L 奥氏体不锈钢在轻水堆和液态金属冷却快堆中具有显著的应用潜力。因此,近年来许多研究者对增材制造 316L 不锈钢的辐照损伤进行了大量研究,但对其内在微观结构(如位错胞、元素偏析和氧化物夹杂)及其对辐照损伤的影响仍不甚了解。本研究旨在探究增材制造 316L 不锈钢微观结构的热稳定性及其对辐照行为的影响。

首先,对原始样品进行了四种不同的热处理,分别在 650 °C、800 °C、950 °C 下进行 1 小时以及在 1200 °C 下进行 2 小时的热处理。原始样品和热处理后的样品在密歇根离子束实验室分别用 5 MeV 的 Fe 离子和 3 MeV 的 He 离子在 550 °C 下进行 50 dpa 和 0.1 dpa 辐照。表征结果表明,经过完全再结晶热处理工艺后的增材制造 316L 不锈钢表现出更加优越的抗辐照肿胀性能。此外,在所有 Fe 离子辐照的样品中都观察到富含镍硅的团簇;在完全再结晶样品中, Ni₃Si 析出相优先在位错环附近形成,而在其他样品中,它们则往往分布在空洞周围。而在 He 离子辐照的样品中观察到氦泡更倾向于聚集在位错胞附近。

这些现象表明样品的辐照损伤行为对热处理工艺非常敏感,通过热处理工艺实现微观结构的分离,有助于加深我们对增材制造 316L 不锈钢辐照损伤的理解。

A03-P90

GH3535 厚板高功率激光焊接接头的微观组织与力学性能

潘杨^{1,2}、黎超文^{*1}、朱庆春¹、严益¹

1. 中国科学院上海应用物理研究所
2. 中国科学院大学

GH3535 镍基合金是钍基熔盐堆的主要结构材料。常用的窄间隙激光填丝焊接工艺焊接反应堆厚板构件需要多层多道焊接,降低了焊接效率且易出现未熔合缺陷。高功率激光焊接具有大熔深和高效率的特点,为实现堆用厚板构件高效焊接提供了一种新的解决方案。本研究采用高功率(29kW)激光焊接工艺,实现了 22mm 的 GH3535 合金单道全焊透。探讨了高功率、大冷速条件下接头微观组织、缺陷分布以及力学性能的演变。结果表明:焊缝组织主要由胞状晶与长程柱状晶构成,有 M_6C 与 M_2C 碳化物分布在枝晶间;沿熔深方向,焊缝底部因较高的冷却速率而呈现出低程度的元素偏析并具备较强的<001>取向。此外,在枝晶间分布有少量微孔隙,在焊缝中部表现出较高的微孔隙体积分数,微孔隙的分布与二次枝晶间距、凝固组织形态以及匙孔模式下深层熔池的快速消耗有关。焊缝的显微硬度大于母材,在焊缝中,焊缝中部较小的晶粒尺寸以及更高的析出相体积分数使其硬度更高。在 700°C 条件下,拉伸试样均在焊缝区断裂,大量分布的微孔隙对接头焊缝的抗拉强度没有影响,但使得焊缝的延伸率降低了 25%;高功率激光焊接接头高温拉伸性能显著优于窄间隙激光填丝焊接接头。

A03-P91

微观结构对中子辐照钛酸锂铀释放行为影响

顾守曦*

中科院等离子体物理研究所

中子辐照所采用的样品为 Li_2TiO_3 固态增殖剂小球和块体,由北京科技大学张迎春老师课题组提供。增殖剂小球晶粒尺寸分别为 2 μm 和 40 μm ,块体的相对密度分别为 70%TD 和 10%TD。中子辐照实验在日本京都大学反应堆研究所 KURRI 上进行,中子辐照剂量 $8.25 \times 10^{15} n/cm^2$,辐照温度 <370K。中子辐照后固态增殖剂堆外铀释放行为研究在日本静冈大学 T-TDS 系统进行。提铀系统主要通过炉子加热,让样品中滞留的铀通过表面解吸和氢同位素交换释放,释放出的总铀 (HTO+HT) 通过正比计数器 1 测量,之后 HTO 被水鼓泡器捕获通过液闪定量分析,HT 通过正比计数器 2 测量后被 CuO 床氧化成 HTO,继续被水鼓泡器捕获后采用液闪定量分析。程序升温铀释放结果表明晶粒尺寸为 40 μm 的钛酸锂小球释铀峰温度相对于 2 μm 钛酸锂小球想高温偏移。等温热解吸铀释放研究表明在 623K 下,40 μm 钛酸锂小球仅释放了约 50% 的铀,滞留量显著大于 2 μm 钛酸锂小球;673K 下 2 μm 钛酸锂小球已经实现铀的完全释放,而 40 μm 钛酸锂小球依然有部分铀滞留。通过采用不同升温速率,结合 Arrhenius 方程拟合得到 2 μm 和 40 μm 钛酸锂小球表面解吸激活能分别为 0.76eV 和 1.12eV。对于不同相对密度钛酸锂铀释放研究结果表明,低相对密度的钛酸锂 HTO 释放峰主要在 650K,而高密度钛酸锂 HTO 释放主峰在 800K,次强峰在 650K,这表明随着孔隙率的增大,有利于铀的低温释放。

A03-P92

Pore structure development of oxidized nuclear graphite

Rongcheng Li, Qing Huang*

Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences

The oxidation-induced microstructure evolution of nuclear graphite (IG-110 and NBG-17) is studied. Graphite samples were oxidized in air at 500 °C. Complicated oxidation paths were observed on the ion-milled surface of oxidized graphite samples. The weight loss of graphite samples during oxidation is mainly attributed by the oxidation paths which are extended and broadened constantly. In contrast, the original gas-escape pores only experience a limited expansion during oxidation. The size of oxidation paths is generally smaller than 1 μm in IG-110 (generally smaller than 5 μm in NBG-17) for the oxidized graphite even when the weight losses is up to ~30%, which should be taken into account in estimating the oxygen diffusivity in oxidized graphite. Graphite sheets edges exposed in the oxidation paths could scatter the phonon and electrons strongly. Therefore, the thermal conductivity declines dramatically with oxidation time. At weight loss around 30%, the thermal conductivity of the oxidized graphite decreased to ~16.8% of the corresponding original value.

仅发表论文

A03-PO01

固溶处理对一种先进核反应堆用 Ni-Fe 基高温合金组织和性能影响

伍金荣^{1,2}、秦学智³、王佳祺^{1,2}、赵志鹏^{1,5}、吴云胜^{1,4}、管现军^{1,4}、周兰章^{*1,4}

1. 中国科学院金属研究所 师昌绪先进材料创新中心
2. 中国科学技术大学 材料科学与工程学院
3. 中国科学院宁波材料技术与工程研究所 中国科学院海洋关键材料重点实验室
4. 中国科学院金属研究所 中国科学院核用材料与安全评价重点实验室
5. 东北大学 材料科学与工程学院

Ni-Fe 基高温合金具有优异的力学性能、抗氧化腐蚀和抗辐照性能，成为第四代核反应堆堆内构件的候选材料。反应堆严苛的服役工况对构件服役的安全性和可靠性提出了更高要求。然而，大型构件经热加工成型后会明显存在残余应力和组织不均匀现象，这会影响构件服役寿期。采用合适固溶处理工艺不仅可以消除内应力，改善合金组织均匀性，还可以提高材料综合力学性能，这对保障反应堆安全运行具有重要工程意义。

本工作以一种新型 Ni-Fe 基高温合金热挤压管材为研究对象，探究了固溶处理工艺对微观组织及高温拉伸性能的影响。结果表明，热挤压管材从内壁到外壁晶粒尺寸逐渐减小，位错在晶界处大量塞积，组织存在残余应力。经固溶处理后，退火孪晶界比例提高，晶界迁移过程中的“生长事故”机制主导了退火孪晶形成。当固溶处理温度升高到 1080 °C 时，管材的内中外部晶粒尺寸呈现均匀分布，平均晶粒尺寸约 74 μm。合金在 750 °C 下屈服强度和抗拉强度小幅提高，延伸率和断面收缩率明显增加。经固溶处理后，由低 Σ 重位点阵 (CSL) 晶界产生的强化作用大于晶粒尺寸增加产生的弱化作用，占主导地位。综合考虑强度-塑性良好匹配，该合金最佳固溶处理工艺为 1080 °C 保温 30 min。本研究为固溶强化型 Ni-Fe 基高温合金的强韧化提供了理论指导。

A03-PO02

四代核电用长寿命铁镍基 GH1059 合金长期时效组织与性能演变

吴云胜^{1,2}、秦学智³、赵志鹏⁴、王佳祺²、管现军^{1,2}、侯介山^{1,2}、郭永安^{1,2}、周兰章^{*1,2}

1. 中国科学院金属研究所 中国科学院核用材料与安全评价重点实验室，辽宁沈阳 110016
2. 中国科学院金属研究所 师昌绪先进材料创新中心，辽宁沈阳 110016
3. 中国科学院宁波材料技术与工程研究所 中国科学院海洋关键材料重点实验室，浙江宁波 315201
4. 东北大学 材料科学与工程学院，辽宁沈阳 110819

GH1059 合金是中国科学院金属研究所自主研发的核用铁镍基高温合金，具有优异的高温强韧性、抗氧化腐蚀及抗中子辐照性能，已成为我国第四代先进核反应堆热端部件的候选材料。作为一种新型核用高温合金，要保证其在 30~40 年内实现长寿命和高可靠服役，以确保核电站的安全运行，这对合金的组织稳定性提出了较高要求。对于不同成分体系的高温合金，其高温长期时效组织演变和退化规律存在差异，并且组织演变和退化影响合金力学性能的机制也不同。因此，开展 GH1059 合金在典型服役温度 (550°C~750°C) 下长期时效 (0h~7000h) 组织演变规律及其对力学性能的影响研究，对于深入认识该合金具有重要的工程意义。

结果表明，时效过程中，富 Nb 的纳米级 MC 型碳化物形貌及含量无明显变化，且未发生分解。晶界富 Cr 的 M₂₃C₆ 型碳化物的析出行为与时效温度和时间密切相关。随着时效温度的提高，M₂₃C₆ 型碳化物的粗化动力学呈现先增加后降低的变化趋势。时效温度为 550°C 时，M₂₃C₆ 析出速度较慢，时效 5000h 后，仅在晶界析出少量颗粒状 M₂₃C₆；时效温度为 600°C~650°C 时，随着时效时间的延长，晶界 M₂₃C₆ 由断续颗粒状向连续膜状转变，Cr 元素的再分布过程决定其粗化速率呈先快后慢的变化趋势，650°C 下 M₂₃C₆ 碳化物粗化速度达到峰值；时效温度高于 650°C 时，随着时效时间的延长，M₂₃C₆ 仍然发生粗化，但基本保持断续颗粒状形貌。晶界 M₂₃C₆ 的形貌特征决定了长期时效态合金力学性能的变化趋势。断续分布于晶界的颗粒状 M₂₃C₆ 提升晶界裂纹扩展抗力，优化了合金的 750°C 拉伸屈服强度及室温冲击韧性；连续分布于晶界的膜状 M₂₃C₆ 为晶界裂纹扩展提供有利通道，劣化了屈服强度及冲击韧性，并促使冲击失效模式由穿晶断裂向沿晶断裂转变。综上所述，GH1059 合金时效过程中无有害相析出，MC 未发生分解，时效温度低于 600°C 时，颗粒状 M₂₃C₆ 断续分布于晶界，提升合金强塑性，因此 GH1059 合金具有优良的组织及力学性能稳定性。

A03-PO03

基于机器学习势函数研究钨晶界处氢输运行为

魏美琦、王琦*

中国工程物理研究院材料所

钨合金材料作为一种有前景的等离子体第一壁材料, 聚变反应堆面临的极端条件会使材料辐照损伤。最近研究表明, 通过减小材料晶粒尺寸并引入高密度晶界, 有望减轻钨材料辐照损伤, 但由于晶界属于扩展缺陷且界面结构复杂, 氢(H)在晶界处的输运特性仍然知之甚少。本工作借助矩张量势形式的机器学习原子间势模型, 使用分子动力学模拟结合动态(active-learning)机器学习, 针对 10 种晶界构建了高精度的机器学习势函数(MTP-GBs-WH), 能量精度 <10 meV/atom, 力精度 <400 meV/Å。与从头算分子动力学相比, 这种方法将计算效率提高了 6 个数量级。基于 MTP-GBs-WH, 我们进行了纳秒长的分子动力学模拟, 对每个晶界下单个及多个 H 的扩散系数以及激活能进行了定量计算, 并利用 H 分布的概率密度图, 阐明了 H 原子在晶界中的微观输运机制, 并与实验数据对比良好。

A03-PO04

600 合金及焊缝在高温高压水环境下的应力腐蚀和腐蚀疲劳行为研究

王明浩、彭德全*

中国原子能科学研究院

600 合金是一种典型的以 Ni-Cr 为主要成分的镍基合金, 运行经验表明, 镍基 600 合金及其焊接材料 82/182 合金作为压水堆水室隔板等位置的备选材料在高温高压水环境中具有应力腐蚀开裂(SCC)与腐蚀疲劳(CF)敏感性。对模拟压水堆一回路高温高压环境下的合金材料进行应力腐蚀和腐蚀疲劳试验, 采用直流电压降法在线监测裂纹扩展行为, 主要探究了 600 合金基体与焊缝材料在特殊水环境下的应力腐蚀及腐蚀疲劳行为。结果表明在同样条件下, 焊缝裂纹扩展速率低于 600 合金基体, 焊缝材料腐蚀疲劳行为受加载条件的影响较大, 随着最大应力强度因子 K_{max} 的增大与应力比 R 的减小, 腐蚀疲劳裂纹扩展速率(CFCGR)升高, 加载波形对其影响有限。在焊缝材料裂纹尖端观察到 Ti 元素的富集, 对抗腐蚀疲劳能力具有一定的提升。

A03-PO05

Artificial intelligence-assisted characterization of radiation defects in TEM images

Miaosen Yu*

Shandong University Qingdao Institute of Frontier and Interdisciplinary Science

Iron-based alloys, specifically ferritic or austenitic steels, are commonly used as structural materials in nuclear plants due to their ability to resist harsh environments. These materials are subjected to high-flux neutron irradiation during operation, resulting in the production of defects such as interstitials and vacancies that could diffuse and accumulate to form clusters. This study proposes a auxiliary approach for identifying and characterizing these irradiation defects. The methodology combines transmission electron microscope (TEM) image simulation technology with an artificial intelligence algorithm, allowing for the convenient and rapid identification and classification for defects in actual TEM images. Through this approach, the virtual TEM images have been used for the examination and classification of defect clusters, such as dislocation loops and stacking fault tetrahedra.

A03-PO06

表面机加工对核电用奥氏体不锈钢应力腐蚀开裂行为的影响

武焕春^{1,2,3}、刘向兵^{*1,2}、徐超亮^{1,2}、全琪炜^{1,2}、李远飞^{1,2}、董海涛^{1,2}、安英辉⁴、姜冠男⁴

1. 苏州热工研究院有限公司

2. 国家核电厂安全及可靠性工程技术研究中心

3. 北京科技大学北京材料基因工程高精尖创新中心

4. 大亚湾核电运营管理有限责任公司

奥氏体不锈钢在核电站中有广泛的应用, 常用作一回路主管道材料在高温高压水环境下长期服役。本文以 304L 和 316L 不锈钢为研究对象, 研究了两种不锈钢在 300 °C 高温高压水中的氧化行为, 并用电化学的方法对氧化膜的腐蚀性能进行评估; 利用 U 弯样品在不同高温高压水环境下开展了两种不锈钢的应力腐蚀开裂研究, 分析了表面机加工对应力腐蚀开裂的影响。研究结果显示: 随着氧化时间的延长, 两种不锈钢样品表面的氧化物颗粒不断增加, 浸泡 80 天后, 两种材料的氧化膜厚度可达到微米级; 随着浸泡时间的延长, 两种不锈钢的抛光样品和机加工样品表面氧化膜的耐蚀性均有所增强, 但机加工样品的氧化膜耐蚀性不如抛光样品。在 300 °C 高温水环境下浸泡 365 天后, 仅部分 304L 不锈钢机加工样品萌生应力腐蚀裂纹; 在含 500 mg/L 氯离子的环境下, 浸泡 100 天后两种不锈钢机加工样品在变质层处开始萌生裂纹,

浸泡 365 天后,萌生的应力腐蚀裂纹数量和长度均显著增加。不管是否添加氯离子,浸泡 365 天后所有抛光后的样品均未萌生应力腐蚀裂纹。结合试验结果分析可知,表面机加工一方面增加了不锈钢表面的残余应力水平;另一方面破坏了样品表面的微观结构,形成了变质层,导致高温水环境下形成的氧化膜保护性降低,两方面共同导致了应力腐蚀裂纹的萌生。氯离子对应力腐蚀开裂的裂纹萌生和扩展均有显著的促进作用,500 mg/L 的氯离子约裂纹扩展约 15 倍。

A03-PO07

Microstructure evolution and mechanical properties of the wire arc additive manufacturing GH3535 alloy

Yuanwen Wang, li jiang, yucheng zhu, jiaoyang wang, yang pan, zhijun li, chaowen li*

Shanghai Institute of Applied Physics

GH3535 nickel-based alloy is an important structural material for the fourth-generation nuclear reactors-molten salt reactors. The GH3535 nickel-based alloy bulk structure were fabricated by wire arc additive manufacturing (WAAM), and a comprehensive analysis of their microstructure evolution and mechanical properties were investigated. The microstructure of GH3535 alloy produced by WAAM exhibited coarse columnar dendrites ranging from tens to hundreds of microns. The M6C eutectic carbides and nano-sized M2C carbides at interdendritics and grain boundaries were observed. High density dislocation due to repeated deformation of thermal inhomogeneity can be observed in printed GH3535 alloy. Synchrotron radiation XRD results show that the dislocation density of WAAM GH3535 alloy is about $1.7 \times 10^{14} \text{ m}^{-2}$. Additionally, the mechanical properties of the printed GH3535 alloy at different deposition heights were evaluated. At the bottom, The yield strength, tensile strength and elongation were 548MPa, 805MPa and 28.6%, respectively. The yield strength and geometrically necessary dislocation shows a decreasing trend with the increase of deposition height. The inhomogeneity of mechanical properties along the deposition direction of the printed GH3535 alloy was attributed to the geometrically necessary dislocation, which is the result of the calculation of strengthening mechanism.

A03-PO08

快堆蒸汽发生器用 2.25Cr-1Mo 钢在高温钠中老化行为研究

刘子晖、付晓刚*、阮章顺、王荣东

中国原子能科学研究院

蒸汽发生器是钠冷快堆重要部件之一,其内部传热管会受到 505℃高温钠腐蚀,以及 60MPa 拉应力,2.25Cr-1Mo 钢由于具有良好机械性能和抗应力腐蚀开裂能力而被应用于传热管的制造。为了解传热管在服役期间老化状况,对 2.25Cr-1Mo 钢在 620℃高温钠环境下施加 60MPa 拉应力,进行不同时间加速老化试验,来模拟长时间服役后材料状况,并对老化后 2.25Cr-1Mo 的组织 and 性能变化规律进行了研究,结果表明,2.25Cr-1Mo 在表层发生合金元素溶解向钠中扩散,老化 72.3h 后 Cr、Mo 元素出现明显溶解扩散现象,随着老化时间增加,合金元素扩散层逐渐变宽;在老化初期碳化物以 M_3C 形式存在,老化 72.3h 后出现长条状碳化物,随着老化时间延长,Cr、Mo 元素向晶界扩散,碳化物逐渐粗化并在晶界聚集;在老化过程中,由于合金元素溶解以及第二相颗粒粗化,导致对位错钉扎效果减弱,使得材料室温抗拉强度和屈服强度逐渐下降,后趋于稳定。