

A03.核材料

分会主席：吕广宏、韩恩厚、汪小琳、王宇钢、罗广南、刘彤

A03-01

Towards Experimentally Relevant Time and Length Scales: Multi-Scale Simulation of Radiation Damage in Nuclear Materials

高飞¹, 彭庆², 高宁³, 邓辉球¹, 胡望宇¹

- 1.湖南大学
- 2.密西根大学
- 3.中科院近代物理研究所

The recent developments of multiscale approach of radiation effects and materials performance in fission and fusion environments will be reviewed, focusing on experimentally relevant time and length scales. Large scale MD is used to simulate defect production for PKA energy up to 300 keV in Fe, while SAAMD or LTD/SEAKMC is used to extend time scale to hours at atomic-level simulations. We will demonstrate that the probability of forming <100> dislocation loops significantly increases in a model of ferritic steel (consisting of FeCuNiMn), even at low energy cascades. In addition, we will summarize the possible applications of SAAMD and LTD/SEAKMC, including the migrations of He bubbles and <100> dislocation loops, cascade annealing and dose rate effects in structural alloys. Finally, we will discuss some scientific issues associated with cluster dynamics approach, particularly for exploring the incubation period of void formation and temperature shift in peak swelling in steels.

A03-02

钨中嬗变元素辐照诱导析出机制及其对力学性能影响研究

周洪波¹, 李宇浩¹, 邓辉球², 吕广宏¹

- 1.北京航空航天大学物理学院
- 2.湖南大学物理学院

钨(W)基材料是未来聚变堆最有可能全面应用的面对等离子体材料。但在聚变高能中子(14 MeV)辐照下, W将不仅发生嬗变反应, 产生铼(Re)、锇(Os)等嬗变元素, 而且Re/Os在辐照作用下将会聚集析出, 这与无辐照条件下的W-Re/Os合金行为明显不同。富Re/Os析出相将加剧材料的辐照硬化/脆化, 严重影响聚变装置的运行安全和稳定性。我们首先系统研究了W中嬗变元素Re/Os的聚集析出行为, 发现在本征W中Re-Re相互排斥, 不倾向于聚集; 虽然W中Os-Os相互吸引, 但形核自由能变计算结果显示Os聚集需要克服较高的势垒(~1.10 eV)。因此, 在热平衡条件下Re/Os很难自发聚集成团, 这给出了常规W-Re/Os合金中无富Re/Os析出相的原因。

中子辐照条件下, W中产生嬗变元素的同时还会形成大量的Frenkel缺陷, 即空位和自间隙原子。研究发现Re/Os与Frenkel缺陷间存在很强的相互作用。更重要的是, 空位和自间隙原子的存在能够显著降低Re/Os聚集的形核自由能变, 进而促进W中Re/Os聚集成团。而且, 自间隙原子易于被替位Re/Os所捕获, 形成间隙Re/Os, 而间隙Re/Os的扩散和转向势垒较低, 能够在W中进行快速的三维扩散。因此, 自间隙原子在Re/Os扩散聚集起到了重要的媒介作用。游离的间隙Re/Os可与替位Re/Os结合, 形成稳定的Re/Os-Re/Os对, 而其可继续捕获间隙Re/Os使Re/Os团簇进一步生长。据此, 我们提出了W中嬗变元素Re/Os辐照诱导析出的间隙扩散聚集机制, 给出了辐照条件下嬗变元素聚集形核的物理图像。

通过研究Re对W中 $1/2\langle 111 \rangle$ 螺位错运动的影响, 我们进一步探索了嬗变元素对W力学性能的影响机理。研究发现, Re对螺位错运动的影响与Re在W中的分布密切相关。当Re在W中均匀分布时, Re的加入能够降低 γ 面($1/2\langle 111 \rangle\{112\}$ 和 $1/2\langle 111 \rangle\{110\}$)的广义堆垛层错能, 表明Re能够促进位错的运动, 提高W材料的韧性; 而当Re在W中聚集成团时, Re团簇的存在将显著提高螺位错运动的佩尔斯应力和佩尔斯能垒, 表明Re团簇将阻碍位错的运动, 加剧W材料的硬化和脆化。这揭示了辐照条件下嬗变元素聚集析出加剧W材料辐照硬化的物理本质。

关键词: 钨; 嬗变元素; 辐照诱导析出; 位错运动; 辐照硬化

A03-03

钨/铁中辐照缺陷与界面相互作用的模拟研究

吴学邦, 李祥艳, 刘长松

中国科学院固体物理研究所

近年来, 纳米晶材料表现出优异的抗辐照性能, 通过界面(晶界和相界)调控能有效修复材料内部产生的辐照缺陷, 使得材料表现出自修复特性。然而, 纳米晶材料辐照损伤与修复机制目前仍不清楚, 存在大量问题有待研究。

为研究纳米晶材料中辐照缺陷与界面的相互作用, 我们开发并进一步完善了一套跨时空尺度缺陷产生与演化模拟程序, 主要包括初级辐照损伤模拟的分子动力学模块(MD)、缺陷能量学性质静态计算模块(MS)、探索缺陷跃迁势能面的弹性带(NEB)和两体(Dimer)模块、缺陷在原子尺度和微秒尺度演化的原子动力学蒙特卡洛模块(AKMC)和缺陷在微纳米尺度和宏观时间尺度演化的实体动力学蒙特卡洛模块(OKMC)。

基于上述模拟程序, 研究纳米晶钨中自间隙原子及其团簇复合空位的动态图像。研究发现:(1) 辐照诱导的自间隙原子团簇缺陷在靠近局域紧凑的晶界结构时被反射进晶粒内部, 可与晶粒内部空位进行复合。(2) 自间隙团簇被局域疏松的晶界结构捕获后可通过动态发射复合晶界附近的空位: 单个自间隙原子偏聚至晶界后, 沿晶快速运动, 聚集成双间隙; 其活性与晶界附近空位活性相当时, 晶界附近空位通过双间隙沿晶运动和空位向晶界偏聚的耦合过程而消除。(3) 围绕自间隙原子形成空位-自间隙自发复合区域, 在该区域内空位-自间隙通过自发的间隙发射而复合。在此区域之外, 空位或者自间隙需要克服较低的能垒复合, 具体的原子过程涉及到空位扩散与间隙发射的耦合。进一步提出了“发射阻力”(势阱深度除以势阱半宽度)表征间隙原子从缺陷阱处发射的难易程度, 论证了间隙发射诱导的复合机理在钨、铁、铜金属的表面以及晶界中的普适性。

上述模拟结果表明, 通过复杂的微观过程(如反射自间隙及其团簇, 自间隙沿晶运动、团簇化与空位偏聚的耦合, 自间隙发射与空位扩散、偏聚的耦合), 引入界面可以有效捕获或者复合铁/钨材料中的辐照诱导缺陷, 增强纳米晶材料的抗辐照损伤性能。这为通过细化晶粒提高材料抗辐照损伤性能提供了理论依据。同时近期研究表明晶界捕获缺陷、复合缺陷的能力与晶界结构有关。除了细化晶粒外, 有必要通过晶界工程优化晶界类型, 以取得更佳的抗辐照损伤性能。

关键词: 离位损伤; 跨尺度集成模拟; 纳米晶材料; 自修复

A03-04

金属钨的势函数构建及高能中子辐照模拟研究

邓辉球¹, 胡望宇¹, 高飞¹, 陈阳春¹, 高宁², 周洪波³, 吕广宏³

1. 湖南大学物理与微电子科学学院

2. 中国科学院近代物理研究所

3. 北京航空航天大学物理学院

金属钨被视为未来聚变反应堆中最有可能全面使用的面对等离子体材料。在聚变高能中子的辐照下, 金属钨中会产生大量的点缺陷和位错环, 以及出现嬗变元素等, 严重影响其物理和力学性能。结合第一性原理计算得到的大量典型辐照缺陷结构及相应能量, 我们重新构建了适用于辐照环境的金属钨的势函数。研究发现, 金属钨块体中单个自间隙原子(SIA)最稳定的组态为<111>方向的哑铃状结构; 少于7个的SIA团簇倾向于沿<111>方向平行排布, 包含7个以上的SIA团簇形成较为稳定的1/2<111>间隙型位错环。单个SIA在低温时沿<111>方向一维迁移运动, 在温度较高时可三维运动, 其旋转能垒约为0.3 eV。小的SIA团簇和1/2<111>位错环可沿<111>方向快速迁移运动, 其迁移能垒(<0.1 eV)几乎与缺陷尺寸大小无关, 且在MD模拟的时间尺度下没有观察到它们的旋转。在300K下, 我们模拟了金属钨在低能下(1-40 keV)的离位级联碰撞行为, 发现不同的相互作用势函数对最终所产生的Frenkel缺陷的数量影响并不大。在高能(PKA能量为100-300 keV)中子辐照的离位级联碰撞过程中, 发现随着能量的升高, 稳定的Frenkel缺陷以及空位和SIA团簇的数量显著增多; 级联过程中产生了伯格矢量为1/2<111>类型的完整的间隙型位错环, 以及少量的1/2<111>和<100>类型相混合的位错环。在所有的模拟中都没有观察到完整的空位型位错环, 几乎都是以断断续续的位错线形式出现, 并且空位型的位错以伯格矢量为<100>类型为主, 少部分的1/2<111>类型和混合类型。

关键词: 中子辐照; 分子动力学模拟; 势函数; 辐照缺陷

A03-05

Dislocation bias in bcc Fe based on defect dynamics

徐海譔

美国田纳西大学

The preferential absorption of SIAs by dislocations over vacancies in structural materials is the fundamental cause of void formation, radiation-induced climb, and microstructural evolution of materials exposed to irradiation, and is a key parameter to simulate and design new radiation resistant materials. The bias factor has been included in rate theory models as a parameter to quantify this preferential absorption, but theoretical studies overestimate the bias factor compared with experimental extrapolations.

In this work, we investigate the dislocation bias factor in straight edge and screw dislocations in model bcc iron system. We develop a general approach to estimate the lifetime and interaction probability of the interactions using SEAKMC and actual migration energy barriers. Following this approach, the interaction between point defects and dislocation loops are also investigated and the sink strength of various extended defects are determined. These results provide a mesoscale view of the defect evolution in materials that may be complimentary to the conventional models and will be applicable to other materials including nuclear fuels.

A03-06

中广核科技创新战略专项中的材料问题

赵华

中国广核集团

本报告主要介绍中国广核集团(CGN)情况及在科技创新方面的工作情况,介绍二代、三代核电站关键材料研发面临的问题,先进核燃料组件材料研发和先进核能系统材料研发的进展情况和面临的挑战,对未来 CGN 材料研发提出了展望。本报告有助于国内各材料研发单位了解核电材料研发需求,有利于核电材料研发单位之间的交流,更好的促进我国核电材料技术的发展。

A03-07

新型锆包壳在不同水化学中腐蚀性能及 Raman 光谱研究

廖京京^{1,3}, 杨忠波¹, 邱绍宇¹, 李正操², 彭倩¹

- 1.中国核动力研究设计院反应堆燃料及材料重点实验室
- 2.清华大学材料学院先进材料教育部重点实验室
- 3.清华大学工程物理系技术物理研究所

反应堆安全及高能耗运行要求锆合金包壳具有更优异的耐腐蚀性能,一方面可对锆合金元素添加设计进行改进,另一方面对锆合金均匀腐蚀机理也需深入研究以指导耐腐蚀合金设计,尤其是氧化膜生长结构特性。实验研究了新型锆包壳 Zr-0.5Sn-0.2Nb-0.5Fe-0.2V(N2 合金)的堆外腐蚀行为及腐蚀机理。通过高压釜腐蚀得到了 N2 合金、N36 合金在 360°C/18.6MPa 纯水、PWR 水质、LiOH 溶液和 500°C/10.3MPa 蒸汽四种水质中的增重曲线,并利用 Raman 光谱研究了氧化物分子结构的差异。结果表明,N2 合金在四种水化学条件下均有优于 N36 合金的腐蚀性能。N2 合金有较长的转折时间,氧化膜界面波动发展比 N36 合金更低,腐蚀二次转折后腐蚀速率也比 N36 合金更小。通过 Raman 光谱研究氧化膜外表面发现,不同水化学条件下的氧化膜在 t-ZrO₂ 及 m-ZrO₂ 分子的含量及内应力大小上变化不同,显示了氧化膜不同生长现象。结合氧化膜界面侧及横截面样品的 Raman 分析发现,转折前,界面侧的 t-ZrO₂ 峰强度逐渐增大,且该处有最大的压应力存在。据此深入探讨了腐蚀氧化物晶体的演变过程,及不同水化学、不同合金下的演变差异。

关键词: 新型锆包壳; 均匀腐蚀; 水化学; Raman 光谱; 氧化膜结构及应力

A03-08

镍铬合金在氟盐环境下初期腐蚀机制的理论探索

任翠兰, 殷亚茹, 韩晗, 张伟, 王呈斌, 怀平

中国科学院上海应用物理研究所

镍基合金,如 Hastelloy N 合金,因其具有优异的抗高温蠕变性能和耐熔盐腐蚀行为,被认为是第四代先进核能反应堆—熔盐堆的主要结构材料。已有大量实验研究表明,镍基合金在纯净熔盐环境中的腐蚀速率很低,说明二者的化学兼容性很好;但当熔盐中含有水氧、HF 等杂质时,合金的主要成分 Cr 元素将被加速腐蚀。合金在熔盐环境下长期的腐蚀行为受到易被腐蚀元素 Cr 扩散速率的影响。因此,研究镍基合金在氟盐环境下的腐蚀行为,尤其是腐蚀萌生阶段的机制,可有效地揭示合金与熔盐的界面行为,以期理解合金在熔盐环境下的腐蚀机制。

本工作以 Ni-Cr 二元合金为代表,基于第一性原理方法,首先研究了氟盐中主要杂质组分 HF, F₂, H₂O 等在合金表面的吸附、扩散和分解行为。由于镍基合金的催化作用,这些分子较容易地被分解。Cr 元素的掺杂为这些杂质分子提供了稳定的吸附位,二者具有稳定的化学相互作用,进而导致表面 Cr 元素与基底镍的相互作用减弱。其次,由于合金表面的化学组分对合金的性能至关重要,且很容易受外界环境的影响。我们发现合金表面的化学吸附可以改变 Cr 在镍基合金表面的偏析状态,即 Cr 元素在环境下可以优先偏析到合金表面。再次,我们采用原子动力学方法,对熔盐中代表性成分氟在镍铬合金表面上的吸附致表面形貌的变化及潜在的腐蚀产物形态等进行了研究,将微观表面结构和宏观环境的压强和温度联系起来,获得压强-温度空间下合金表面结构相图,并进一步阐明了合金表面相在环境中的演化规律。随着氟覆盖度的增加,氟-氟之

间的排斥作用和氟-铬之间的强相互作用不仅能降低体系的表面自由能，并可引发金属基底表面形貌的极大变化。最后，对氟吸附致镍铬合金表面形貌及可能腐蚀产物的脱附形态进行了系统研究，结果表明，氟吸附可以极大改变金属表面形貌并极有可能引发以 $\text{CrF}_2/\text{CrF}_3$ 分子形式的脱附，这和已有的实验结果是一致的。

通过本工作的研究，可理解镍基合金在氟化熔盐等强腐蚀环境下的初期相互作用机制，揭示了相关腐蚀机制及受控因素，为进一步改善合金的耐腐蚀性能提供理论依据。

关键词：镍基合金；熔盐环境；初期腐蚀机制；理论模拟

A03-09

铅基反应堆 9Cr-ODS 钢的铅铋腐蚀行为研究

宋亮亮，刘少军，杨新异，毛小东，黄群英，FDS 凤麟核能团队

中科院核能安全技术研究所

铅基反应堆采用铅基合金（铅或铅合金）材料作为冷却剂，具备安全性好、经济性好和可行性好的显著优势，是一种能够实现多种应用且可持续发展的先进核能系统，被第四代核能系统国际组织 GIF 组织评价为有望首个实现工业示范和商业应用的第四代核能系统。氧化物弥散强化钢（ODS）具有优异的高温性能和抗中子辐照性能，是铅基反应堆最具发展潜力的候选结构材料之一。结构材料与液态铅基合金的相容性是影响其在铅基反应堆中工程应用的关键问题之一。

本文利用机械合金化和热等静压成型法制备出两种 Si 含量（0, 0.3Si wt.%）的 9Cr-ODS（Fe-9Cr-1.5W-0.2V-0.15Ta-0.4Mn-0.3Y₂O₃, wt.%），并对其在 550℃/10⁻⁶ wt.%氧浓度静态铅铋共晶体（LBE）环境下的腐蚀行为进行了研究。采用 SEM 对腐蚀层形貌及厚度进行分析，结果表明：腐蚀 1000h 后，未加 Si 样品和加 Si 样品腐蚀层厚度分别为 15.6μm 和 7.7μm；腐蚀时间增加至 3000h 后，未加 Si 样品和加 Si 样品腐蚀层厚度分别为 25.7μm 和 8.8μm。Si 元素的加入使 ODS 钢表面腐蚀层厚度降低 50%以上，腐蚀速率降低约 90%。XRD 对腐蚀界面腐蚀产物物相分析表明：未加 Si 样品表面腐蚀层主要由 Fe₃O₄ 外层、Fe-Cr 尖晶石内层及内氧化区（IOZ）组成；加 Si 样品表面腐蚀层由 Fe₃O₄ 外层、Fe-Cr 尖晶石内层及富 Cr 氧化带组成，但未观察到明显的 IOZ 层。一方面可能是由于 Si 的加入促进了富 Cr 带形成，连续致密的富 Cr 带与 Fe₃O₄ 外层和 Fe-Cr 尖晶石层共同阻碍液态 LBE 中的氧入侵基体。另一方面可能是由于 Si 易与氧发生反应生成 SiO₂，在富 Cr 氧化带下方生成连续 SiO₂ 层有效地阻碍氧的扩散。

研究表明，富 Si 的 9Cr-ODS 钢具有优异的抗液态铅铋腐蚀性能，可满足铅基反应堆对结构材料的腐蚀性能需求。

关键词：铅基反应堆；9Cr-ODS 钢；Si 含量；铅铋腐蚀；Fe-Cr 尖晶石

A03-10

铍钛合金堆内中子辐照设计及物理与热工安全分析

刘显坤¹，窦海峰¹，米向秒¹，王晶^{1,2}，彭仕先^{1,2}

1.中国工程物理研究院核物理与化学研究所

2.中国工程物理研究院材料研究所

与铍相比，铍合金因具有高熔点、低辐照肿胀、高抗氧化性及与结构材料较好的相容性等特点，近年来已被认为是取代铍，作为聚变堆包层中子倍增材料的首选候选材料。本文通过电弧熔炼加吸铸方法，制备出了 Ti 质量百分含量为 30.8%和 24%的两种铍钛合金，用 XRD 和扫描电镜分别对其结构、成分和微观形貌进行了分析，获取了样品辐照前的基本信息。在此基础上，通过选择、优化 CMRR 研究堆辐照孔道及参数，完成了上述一定尺寸的拟辐照铍钛合金样品入堆辐照的物理和热工安全分析。结果表明，Ti 含量达 24%和 30.8%时，Be₁₂Ti 呈粗大的状且生长有方向性；样品堆内中子辐照满足热工安全，现有设计下可以开展其入堆辐照试验。

关键词：铍合金；中子辐照；物理热工；安全分析

A03-11

模块化小型堆技术方案及材料需求

宋丹戎

中国核动力研究设计院

依托中核集团 50 余年小型动力堆技术及 30 年核电技术基础；多年来持续自主研发，安全性及经济性持续提升；从低参数—中等参数—高参数；从单一供热——热、电、水多联产。开发了模块化小型堆 ACP100，该项目已进入《国家能源科技“十二五”规划》，被列为重大研究（Y28）和重大示范项目（S26）；本文将从研发概况、技术方案、技术优势、示范工程进

展等方面介绍中核集团模块化小型堆。最后文章将介绍小型堆在材料方面的需求，如：新型核级材料研制，核级设备增材制造技术研究，事故容错燃料元件研制，材料大数据研究及应用等。

关键词：小型堆；技术方案；材料需求

A03-12

中国聚变工程实验堆包层材料中氦的驻留问题与去除、回收技术研究

陈长安¹，罗军洪¹，丁芳²，金伟¹，叶小球¹，夏体锐³，高博¹，朱开贵⁴，冯兴文¹，刘显坤⁵，王晶¹，李春京²，冯勇进⁶，向鑫¹

1.中国工程物理研究院材料研究所

2.中国科学院合肥物质科学研究院

3.中国原子能科学研究院

4.北京航空与航天大学

5.中国工程物理研究院核物理与化学所

6.核工业西南物理研究院

中国聚变工程实验堆（CFETR）等离子体真空室包层拟采用钨为面向等离子体第一壁和偏滤器材料、固态含锂陶瓷或液态铅锂合金为氦增殖剂材料、铍或铍合金为中子倍增材料、低活化铁素体/马氏体钢为结构材料。氦、氘等离子体与包层材料表面相互作用以及氦、氘原子在其中输运、驻留与热解吸行为关系到燃料氦的自持循环以及结构类材料氢氦损伤效应评估；全氦增殖包层中氦提取工艺的设计也必须综合考虑氦回收效率与成本、可靠性、安全性等因素而与 ITER 实验包层模块的情况显著不同。在 ITER 计划国内配套研究专项 2015GB109000 以及国家自然科学基金等项目的资助下，项目组较系统地研究氦在面向等离子体第一壁及偏滤器钨材料中的驻留行为与去除方法、等离子体溅射钨粉尘中氦的在线测量及氦回收方法、全增殖包层中氦的提取以及增殖剂材料产氦率在线测量方法、铍钛合金中子辐照肿胀行为及嬗变氦的去除与回收方法、低活化铁素体/马氏体钢中氦的相容性及驻留氦去除与回收方法等科学与工程问题。目前，项目组已开发了空心阴极、级联弧等多种大束流氢氘等离子体源并利用直线等离子体及 Tokamak 装置等离子体辐照、离子注入等实验手段证实了等离子体状态下的氢同位素在钨中有很高的渗透特性且强流氢氘等离子体辐照产生的结构缺陷将显著增加其中氢氘原子的驻留量；建立了钨及低活化钢等结构包层材料中氢氘驻留量与渗透常数的定量测量方法，获得了 CLF-1、CLAM 两种国产低活化铁素体-马氏体（RAFM）钢结构材料中氦的扩散渗透参数，相同温度下氢同位素在钨和 RAFM 钢中的扩散系数高于奥氏体不锈钢 1~2 个数量级而使氢同位素更容易进入和在线去除，在真空和较低的热解吸温度下能较好地去除其中驻留的氢同位素，而氢同位素交换能进一步增加驻留氢同位素的去除效率；由于 RAFM 钢具有较强的氢脆敏感特征，急需通过实验考核高温及含 0.1% 氢的氦气氛下 RAFM 钢是否出现氢脆现象；试制了具有较好分离解吸气体中氢同位素的羟基方钠石分子筛类膜、钡-铈复合以及支撑型钡膜等功能膜材料。项目将最终阐明 CFETR 等工程聚变堆长期等离子体辐照条件下氦、氘在真空室包层壁材料中的输运、驻留机制并掌握真空室氦驻留量的精确评估方法，发展面向等离子体材料、结构材料、增殖剂及中子倍增材料中氦的在线测量、评估、去除及有效回收技术，建立包层材料氦相容性评价的方法。

关键词：中国聚变工程实验堆；包层材料；氦驻留

A03-13

锂基陶瓷氦增殖剂材料缺陷化学的第一性原理模拟

向鑫，张桂凯，唐涛

中国工程物理研究院材料研究所

锂基陶瓷材料如 Li_2O 、 Li_2TiO_3 、 Li_4SiO_4 、 LiAlO_2 、 LiTaO_3 等是聚变堆固态增殖包层中重要的氦增殖剂候选材料。然而，不同的增殖剂材料其产氦率和产氦效率差异显著。这与材料的缺陷化学及氦与材料的相互作用有关。为此，基于密度泛函理论（DFT）的赝势平面波方法，研究了目前固态增殖包层首选的三种氦增殖剂候选材料即 Li_2O 、 Li_2TiO_3 和 Li_4SiO_4 的缺陷化学及氢相关缺陷性质。结果发现， Li_2O 中各本征点缺陷及 H 相关缺陷的形成能、电荷态及相对稳定性随能级而变。平衡态时 Li_2O 中本征点缺陷的相对稳定性为 $\text{V}_{\text{O}}^{2+} > \text{Li}_i^{1+} > \text{Li}_o^{3+} > \text{V}_{\text{Li}}^{1-} > \text{O}_i^{2-} > \text{O}_{\text{Li}}^{1-}$ ；而 H 相关缺陷的相对稳定性为 $\text{H}_o^+ > \text{H}_i^- > [\text{H}_i-\text{Li}_i]^0 > \text{H}_{\text{Li}}^- > [\text{H}_i-\text{O}_i]$ ，且 H_o^+ 和 H_i^- 可能与 V_{O}^0 、 V_{Li}^- 共存。在整个能级范围内， $\beta\text{-Li}_2\text{TiO}_3$ 中各 Li、O 相关本征点缺陷及 H 相关缺陷均只有一个稳定价态。各本征点缺陷形成能按 $\text{O}_{\text{Li}} > \text{O}_i > \text{V}_{\text{Li}} > \text{Li}_i > \text{V}_{\text{O}}$ 的顺序排列，而 H 相关缺陷的相对稳定性按 $\text{H}_o^+ > \text{H}_i^- > [\text{V}_{\text{Li}}-\text{H}]^+$ 的顺序排列，且 V_{O} 、 Li_i 与三种 H 相关缺陷共存。 $\gamma\text{-Li}_4\text{SiO}_4$ 中各本征点缺陷及 H 相关缺陷的形成能、电荷态及相对稳定性随能级而变。在整个能级范围内，各 H 相关缺陷的相对稳定性按 $\text{H}_o > \text{H}_i > [\text{V}_{\text{Li}}-\text{H}]$

> $[O_i-H_i]$ 的顺序排列, 且 V_o^{2+} 与 H_i^+ 和 H_o^+ 缺陷共存。

关键词: 锂基陶瓷; 本征点缺陷; H 相关缺陷

A03-14

氚工艺及材料研究中的氢同位素分析技术进展

占勤, 杨洪广, 何长水, 刘志珍, 杨丽玲, 郭星辰, 张培旭

中国原子能科学研究院

聚变堆的氚燃料体系是世界上氚操作量最大且复杂的氚系统, 操作量范围从每年外供氚源数 kg 量级 ($1E+17Bq$) 至环境排放的 $1E+1Bq$, 跨度达到 16 个量级, 在各个子系统中氚测量的量程范围、时间、精度都存在较大的差异。采用单一的氚测量技术显然难以实现 ITER 或未来聚变堆 DEMO 中的全部测量目标, 不同的氚操作量范围需要选择合理的氚测量方法。

本文针对氚工艺及材料研究中的氢同位素分析技术开展了系统而深入的研究, 相关高精度气相色谱分析、氚电离室、氚微量热计、 β 衰变诱发 X 射线谱仪(BIXS)以及氚浓度深度分布辉光放电光谱分析(GDOES)技术的性能指标达到或接近国际先进水平。

此外, 从氚工厂氚分析检测装备的研发到分析方法的建立上, 也取得了一系列重要研究成果, 为聚变堆氚工厂氚测量与分析系统(ANS)的初步概念设计提供了依据, 并可为我国突破聚变堆氚工厂的整体设计、关键技术研发和安全分析提供氚分析检测与监测技术支持。

关键词: 氚工艺; 氚分析; 电离室; 辉光放电光谱仪

A03-15

氚增殖材料 Li_2TiO_3 和核-壳结构 $Li_2TiO_3-Li_4SiO_4$ 的氚释放行为

戚强¹, 汪京¹, 向茂桥², 周启来³, 赵明忠³, 顾守曦¹, Moeko Nakata³, 周海山¹, 张迎春², Yasuhisa Oya³, 刘松林¹, 罗广南¹

1.中国科学院等离子体物理研究所

2.北京科技大学材料科学与工程学院

3.静冈大学

未来 D-T 聚变反应堆中, 氚燃料的自持是维持反应堆正常运行的关键因素之一。氚增殖材料 Li_2TiO_3 和 Li_4SiO_4 陶瓷以其优越的热-力学性能被视为最有前景的候选材料。新型核-壳结构 $Li_2TiO_3-Li_4SiO_4$ 兼具 Li_2TiO_3 和 Li_4SiO_4 的优点被认为先进的氚增殖材料。本工作主要对比分析了 Li_2TiO_3 和先进氚增殖材料 $Li_2TiO_3-Li_4SiO_4$ 的氚释放行为。

Li_2TiO_3 和 $Li_2TiO_3-Li_4SiO_4$ 小球在日本京都大学反应堆中进行了热中子辐照实验, 并在静冈大学进行了氚的释放实验。对于 Li_2TiO_3 小球, 从氚的释放谱中可以发现, 氚的主要释放形式是 HTO, 占氚总释放量的 99%以上。这主要归因于堆外释氚实验。样品从反应堆中取出暴露于空气, 从而吸附了空气中的水分。在高温下, 氚在样品表面与水进行氢同位素交换, 形成 HTO。 Li_2TiO_3 有一个主要的氚释放峰, 释放温度为 $424^\circ C$, 升温速率为 $30^\circ C/min$ 。释放峰主要是由氚的空位解离机制决定。在较低的温度有一个小的释放峰, 这个峰主要是由于氚的化学物理吸附引起的。通过氚的热释放谱可以获得氚在材料中的解离激活能, 其能量为 $0.415eV$ 。通过氚的恒温释放, 可以获得氚在增殖材料中不同温度的扩散系数。当把吹扫气体由 Ar 气换成 $Ar+2\%H_2$ 时, 氚的释放峰朝着较低的释放温度移动, 这说明吹扫气体中加入 H_2 有助于促进氚的释放。当样品在 $400^\circ C$ 保温 1 小时, 96%的氚从样品中释放出来。说明在高温下绝大部分的氚都可以释放出来, 但是仍有一小部分氚滞留在材料中。

先进氚增殖材料 $Li_2TiO_3-Li_4SiO_4$ 小球的释放谱具有两个释放峰。其中第一个释放峰的温度和 Li_2TiO_3 小球的释放峰温度一致, 其释放峰温度为 $439^\circ C$ 。第二个释放峰的温度为 $553^\circ C$ 。两个释放峰分别由氚在 Li_2TiO_3 和 Li_4SiO_4 中的空位解离机制控制。 $Li_2TiO_3-Li_4SiO_4$ 氚释放总量略小于 Li_2TiO_3 的释放量。尽管此次实验中 $Li_2TiO_3-Li_4SiO_4$ 小球氚释放总量相对于 Li_2TiO_3 并没有明显的增加, 并且在较高的温度出现另一个释放峰, 但是 $Li_2TiO_3-Li_4SiO_4$ 小球具有较高的抗压强度 ($104.79N$), 相对于 Li_2TiO_3 ($40N$) 有明显的优势, 因此 $Li_2TiO_3-Li_4SiO_4$ 小球有望成为新型氚增殖材料。

关键词: 氚增殖材料; 氚释放; 核壳结构, 中子辐照

A03-16

聚变堆氚增殖包层及氚工艺系统阻氚涂层技术研究进展

袁晓明, 杨洪广, 占勤

中国原子能科学研究院

针对未来 ITER 测试包层模块(TBM)、中国聚变工程实验堆(CFETR)等聚变堆氦增殖包层及氦工艺系统中的氦渗透、液态金属腐蚀以及磁流体动力学(MHD)效应等技术问题,中国原子能科学研究院(以下简称“原子能院”)20年来,分别针对氦增殖包层结构材料 RAFM 钢及氦工艺管道 316L 两种不同基体表面 Fe-Al/Al₂O₃ 复合阻氦涂层技术,在材料设计、制备工艺及性能分析表征等方面取得了多项重要进展。

(1) RAFM 钢表面 Fe-Al/Al₂O₃ 复合涂层技术研究现状

2009 年开始在 ITER 国内配套项目支持下,原子能院完成了满足锂铅相容性和自修复等长期服役要求的 Fe-Al/Al₂O₃ 复合涂层设计,结合 RAFM 钢基体热处理制度提出了低温高活性渗铝+高温扩散两步法工艺路线,在满足 RAFM 钢热处理工艺规范的前提下,制备出了具有良好阻氦、耐蚀、电绝缘性能的 Fe-Al/Al₂O₃ 复合涂层,该复合涂层气相氦渗透率降低因子(TPRF)达 3-4 个数量级,综合性能指标达到国际先进水平,该技术可应用于未来聚变堆氦增殖包层复杂结构 RAFM 钢表面阻氦涂层的制备,并且与包层制造过程中的焊后热处理工艺具有很好的匹配性。

(2) 316L 不锈钢表面 Fe-Al/Al₂O₃ 复合涂层技术研究现状

自上世纪九十年代以来,原子能院一直致力于 316L 不锈钢表面阻氦涂层技术研究,采用粉末包埋渗铝+原位氧化工艺突破了细长 316L 不锈钢薄壁管内表面 Fe-Al/Al₂O₃ 复合阻氦涂层技术,该复合涂层气相氦渗透率降低因子(TPRF)达 3-4 个数量级,并完成了研究堆内中子辐照及高温水介质条件下 300 多个等效满功率天(EFPD)的防氦渗透性能评价,TPRF 达到 100。目前原子能院已完全掌握 316L 细长薄壁不锈钢管内外表面 Fe-Al/Al₂O₃ 复合涂层的工程化技术,该技术可应用于未来复杂结构聚变堆氦工艺管道内表面阻氦涂层的制备。

关键词:聚变堆;氦增殖包层;阻氦涂层;Fe-Al/Al₂O₃;氦渗透

A03-17

氦在国产 RAFM 钢中渗透滞留行为及对力学性能影响

王占雷^{1,2},陈长安²,向鑫²,叶小球²,张桂凯²,杨飞龙²,朱开贵¹

1.北京航空航天大学

2.中国工程物理研究院材料研究所

聚变堆包层是实现能量转换、氦增殖以及屏蔽辐照的重要组成部件,结构材料的选择与设计关系到聚变堆的服役寿命及安全可靠性。低活化钢(RAFM)具有高热导率和抗中子辐照等优点,被选为主要候选结构材料。而氢同位素在 RAFM 钢中的渗透与滞留直接影响到材料的服役性能,并加大了氦提取的难度。

本课题组采用气相渗透(GDP)技术获得了氦在两种国产 RAFM 钢(CLAM 和 CLF-1)中的渗透参数,并通过气相热充技术比较了氦在两种钢中的滞留量。结果表明,氦在两种钢中的扩散渗透均属于扩散控制,且氦在 CLF-1 钢具有相对较高的滞留量。通过室温溶液镀铝—选择氧化法制备 Al₂O₃ 阻氦涂层,可有效降低氦渗透率 2-3 个数量级。

在 500 KPa, 773 K, 10 h 条件下对两种钢进行预充氦,对未充氦和预充氦试样进行室温准静态拉伸实验,研究发现预充氦后两种钢均表现出脆性断裂,其断面收缩率损减率分别为 18.65% (CLAM)和 45.98% (CLF-1)。并分别在不同氦含量(0.1%, 1%和 10%)的氦氢混合气中对两种钢进行了在线力学拉伸。结果表明,随着氦含量增加,其氢脆敏感性也随之增加。

关键词:RAFM 钢;渗透;Al₂O₃ 阻氦层;氦损伤

A03-18

基于 WBS 和 TRL 方法的聚变堆氦工艺材料发展路线图研究

杨洪广,占勤,袁晓明

中国原子能科学研究院

针对聚变堆氦自持及氦燃料循环的技术发展需求,采用工作分解结构(WBS)和技术成熟度评价方法,分析聚变堆氦燃料内外循环系统的技术流程,开展氦增殖剂、阻氦涂层、氦纯化、氦汲取、氦储存、氦测量与分析等关键技术体系研究,提出聚变堆氦燃料循环工艺与材料的技术成熟度等级(TRL)评价标准,给出中国聚变工程实验堆(CFETR)氦工艺材料的发展路线图建议,推动 CFETR 氦工厂及氦自持等关键技术研发。

关键词:CFETR;氦燃料循环;氦工艺材料;工作分解结构;技术成熟度等级

A03-19

辐照间隙型位错环与晶界反应的分子动力学模拟

高宁¹,D. Perez²,吕广宏³,王志光¹

- 1.近代物理研究所
- 2.Los Alamos National Laboratory
- 3.北京航空航天大学

高能粒子与材料相互作用，形成大量过饱和的辐照缺陷，诱发辐照损伤，影响材料的服役性能。最近的研究表明，晶界捕获辐照损伤缺陷是提高材料抗辐照性能的重要途径之一。不同于简单点缺陷与晶界的相互作用，在本研究中，利用分子动力学，针对辐照损伤形成的缺陷团簇与不同晶界的相互作用，开展原子尺度的模拟研究，尤其是间隙型位错环与晶界的相互作用、对晶界结构的影响以及相应的力学性能演化的响应。模拟研究表明，位错环与晶界 $\text{Sig}3\{111\}$ 、 $\text{Sig}3\{112\}$ 的相互作用，是位错环伯格矢与界面法向夹角、位错环与界面间的距离以及晶界的自由体积及应力场分布的函数。 $1/2\langle 111 \rangle$ 位错环能够被 $\text{Sig}3\{111\}$ 晶界完全吸收，而被 $\text{Sig}3\{112\}$ 晶界转向，不仅仅改变其伯格矢，而且改变其惯性面。当伯格矢与界面法向夹角为直角时，位错环会沿着平行界面一维运动而完全不被界面捕获吸收。而界面与位错环相互反应之后，造成界面结构的演化，进而影响了材料在晶界处的力学性质。除了对称晶界外，纳米晶界与辐照损伤形成的间隙型位错环之间，也显示出类似的相互作用，同时，由于晶粒尺寸在纳米量级，晶界吸收位错环之后，会造成部分晶粒长大，影响纳米材料的抗辐照性能。因此，本研究首次模拟了晶界对位错环的相互作用以及对相互反应后力学性能的影响，为未来抗辐照材料的研发提供了重要的参考。

关键词：位错环；辐照损伤；抗辐照材料；分子动力学

A03-20

氦对钨中氢行为影响的分子动力学研究

李小椿，卢焘，潘新东，徐玉平，周海山，罗广南

中国科学院等离子体物理研究所

聚变环境下的材料问题是未来聚变能源实现的关键问题。面对等离子体材料作为聚变堆中的重要材料，其选择尤为关键。钨 (W) 及 W 合金因其高熔点和低溅射率被视为目前最有前途的面对等离子体材料，将可能在下一代聚变堆中全面应用。低能大束流的氢 (H) /氦 (He) 等离子体辐照将导致 W 的表面起泡问题，严重影响等离子体的稳定性并降低材料的服役寿命。基于我们自行开发的 W-H-He 体系势函数，采用分子动力学模拟研究了 W 中 He 对 H 行为的影响。我们首先研究了 H 和 He 在小尺寸的空位团簇里面的结合能，H 和 He 空位簇之间的结合能是正值，这意味着 He 空位团簇可以捕获多个 H 原子，这些研究给出了 W 中 H 和 He 相互作用的基本信息。我们评估了 He 团簇和 He 空位簇对 H 在 W 中扩散行为的影响，由于 He 团簇对 H 的捕获效应，He 团簇会显著限制 H 在 W 中的扩散系数，而空位的存在，会更加减缓 H 的扩散。紧接着，我们研究了 W 中不同空位浓度、不同 H/He 比率和不同温度下，H 和 He 的协同效应，计算结果给出了 H 和 He 相互作用的动态图像。目前的模拟将有助于理解 W 中 He 对 H 行为的影响，有助于理解和解释实验。

A03-21

核结构材料中辐照缺陷演化和热导率变化的数值模拟研究

王园园¹，丁建华¹，黄绍松¹，赵纪军¹，王云志²

1.大连理工大学物理学院

2.美国俄亥俄州立大学材料科学与工程学院

第四代裂变堆、聚变堆等未来先进核能系统的极端辐照环境对金属结构材料辐照损伤十分严重。因此，探究复杂辐照环境中关键结构材料的微缺陷演化对理解先进核反应堆的材料辐照损伤机理有着重要的意义。材料辐照损伤是一个从纳观、微观、介观到宏观的多尺度问题，尤其是辐照环境下材料微观组织演化过程复杂且是随时间变化的热力学不稳定结构。介观尺度中的相场法是一种基于热力学和动力学理论的半唯象方法，用于模拟材料的组织演化。另外，速率理论也是从介观尺度上来描述物理现象，提供或处理材料内缺陷在不同亚稳态体系长时间动力学演化的相关信息。本研究建立了二/三维相场模型，利用第一性原理分子动力学计算模拟获得温度效应的纯铁和纯钒参数，研究了辐照、温度协同作用下纯铁和纯钒中空洞形核长大过程及其对材料热导率的影响。此外，采用速率理论模拟了不同温度和辐照剂量下，材料中空位和位错环尺寸和密度的演化过程。主要结果如下：

1) 相场法模拟纯铁和纯钒在不同辐照、温度下空洞的演化发现：纯钒的空洞密度大于纯铁，但纯钒的空洞所占比例小、尺寸小。速率理论研究辐照下产生的位错环发现：与纯铁相比，纯钒中位错环密度较高，但纯钒的位错环尺寸较小；随着辐照剂量的增加，空洞和位错环尺寸及密度均增加；温度的升高促使空洞和位错环的尺寸增大，但密度却降低了。模拟得到的位错环演化趋势与实验观察结果基本吻合。

2) 基于三维相场模型, 模拟了辐照空洞形核长大的过程以及空洞体积分数对材料热导率的影响规律。材料中空洞体积分数越大, 热导率下降越多, 该结果与 Maxwell 模型和 Bauer 模型计算得到的结果一致。

关键词: 辐照缺陷演化; 金属结构材料; 相场法

A03-22

高纯铁中位错缺陷的演化 - 运用电子弱束像的原位在线观察

姚仲文^{1,2}, Mike Jenkins³, Mark Kirk⁴

1. 吉林大学
2. 加拿大皇后大学
3. 牛津大学
4. 阿贡国家实验室

本实验中, 我们所采用的材料是成分严格控制的高纯铁, 杂质含量低于 1 ppm。实验主要是在美国阿贡国家实验室的离子在线辐照装置 (The IVEM-Tandem User Facility - Argonne National Laboratory) 上进行和完成的。采用的离子束是 150KeV 的铁离子。透射电子显微镜 Hitachi H-9000NAR 是在 200KV 下操作, 并采用弱束成像条件。

通过在不同温度和不同辐照剂量的在线观测, 我们发现:

1. 辐照产生的位错主要包括间隙型的 $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ 和 $\langle 100 \rangle$ 位错环, 以及可能的纳米空洞。这两种位错环的组合结构在 475-480 °C 左右发生逆转。
2. 在辐照温度低于 400 °C 的情况下, 位错结构主要是由不规则的非韧性 $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ 位错环组成, 以及少量的微小的 $\langle 100 \rangle$ 位错环。
3. 在辐照温度高于 500 °C 的情况下, 位错结构从成核到长大主要是由单一的方状规则的韧性的 $\langle 100 \rangle$ 位错环组成。
4. 在辐照温度低于 500 °C 而高于 400 °C 的情况下, $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ 位错环表现极度活跃, 并且被同时出现的 $\langle 100 \rangle$ 位错环缓慢吸收。随着温度升高并接近 475 °C 时, 这种吸收现象加速, 高于 480 °C 之后, 已鲜有 $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ 位错环生成。而在高于 500 °C 之后, 已完全看不到任何 $\frac{1}{2}\langle 111 \rangle$ 位错环生成, 只有 $\langle 100 \rangle$ 位错环生成并长大。
5. 附加的一些实验表明 Cr 元素以及微量的 C 元素都会影响这个转变温度。

通过本次研究, 我们首次发现并提出了纯铁中位错环结构的转变温度, 大量的计算表明在这种转变与位错在不同温度的稳定性有密切的关系, 其根本原因是由于铁弹性模量的温度依赖性造成的。这些结果及信息对研究核用铁素体钢的辐照效应有着积极的意义。

关键词: 辐照缺陷; 位错环; 高纯铁; 原位在线观测; 电子显微镜

A03-23

金属/陶瓷(Fe/MgO)界面结构及其离子辐照损伤行为与机理研究

付恩刚^{1,2}, 杜进隆^{1,2}, Y.Q. Wang³, J.K. Baldwin³, M.M. Li⁴, M. Kirk⁴

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. 美国洛斯阿拉莫斯国家实验室
4. 美国阿贡国家实验室

界面具有捕获并促使辐照引起的间隙子型缺陷和空位型缺陷湮灭的特性。理解界面的结构对其捕获辐照缺陷的影响有助于我们在原子尺度上设计耐辐照材料。我们利用原位离子辐照实验研究辐照引起的缺陷与界面之间相互作用行为和机制, 实验观察到辐照引起的缺陷团簇被界面所湮灭。

在 MgO (100) 基片上通过电子束蒸镀的方式制备了单晶 Fe 薄膜, 并制备了其平面透射电子显微镜 (PTEM) 样品。在平面透射电子显微镜样品上进行了原位 Kr 离子辐照实验, 结果表明, 辐照引起的缺陷团簇在 Fe(100)/MgO(100)界面不是直接湮灭, 而是首先分裂成两个较小的缺陷团簇, 然后部分湮灭。为了理解 Fe/MgO 界面消除辐照缺陷团簇的机制以及界面与辐照引起缺陷团簇的相互作用过程, 我们研究了 Fe/MgO(100) 界面的界面结构。实验发现, Fe 薄膜与 MgO 基片之间的晶体取向关系如下: Fe(100)//MgO(100), Fe[011]//MgO[001]且 Fe[01]//MgO[010]。通过高分辨透射电子显微镜并结合平面透射电子显微镜, 我们发现, Fe/MgO 界面的失配位错网由两组互相垂直的失配位错构成, 其伯格斯矢量分别为 $\mathbf{b}=1/2\text{Fe}[0\ 1]$ 和 $\mathbf{b}=1/2\text{Fe}[011]$ 。在远场应力为零的边界条件下, 利用 Frank-Bilby 方程和各向异性弹性理论, 我们计算了 Fe/MgO 界面处由于失配位错网存在而形成的周期性界面应力场。结果表明, 界面处的失配位错应力场促使辐照引起的间隙子型缺陷和空位型

缺陷在界面处湮灭。界面处的失配位错是决定界面捕获辐照缺陷的确定性因素，界面对辐照缺陷的捕获效率和界面的失配位错密度有关。

关键词：界面结构；原位辐照；位错网络；应力场

A03-24

新型纳米结构抗辐照核材料

任峰¹，秦文静¹，魏国¹，王辉¹，邓辉球²，胡望宇²

1.武汉大学

2.湖南大学

先进核反应堆对材料的抗辐照性能提出了非常高的要求，特别是氦的控制是一大难题。本工作提出了利用含纳米空洞多层膜界面、纳米孔道等结果来控制氦泡的形成和生长。

使用钨作为面向等离子体材料也带来了其他独特的挑战。很多研究表明辐照导致的微观结构变化会导致钨材料的失败，包括氦泡、孔洞、纳米丝结构的形成以及脆化和硬化[3]在高温条件下高浓度的氦原子聚集会导致纳米丝结构甚至裂纹的形成，这些问题会导致钨表面稳定性、热导率以及光反射率等的急剧退化。我们特意设计一种新颖的具有纳米孔道结构的纳米钨薄膜，与块材钨相比，在抑制纳米丝形成以及抗热冲击性能上显示出优越的性能。首先，在氦等离子体辐照实验中，纳米孔道钨薄膜开始形成纳米丝的起始剂量为 $\sim 1.7 \times 10^{21}$ ions/cm²，高于块材钨形成纳米丝的起始剂量（ $\sim 2.5 \times 10^{20}$ ions/cm²）的下一个数量级。即使在最高剂量的氦等离子体（ 3.2×10^{22} ions/cm²）辐照条件下，在纳米孔道钨薄膜表面形成的纳米丝厚度仅只有 ~ 1.5 μm ，是形成于块材钨上的纳米丝厚度的一半还小。分子动力学模拟计算同样也阐明了氦原子从纳米孔道结构的释放机制。

在 ZrO₂/Al₂O₃ 多层膜的生长过程中，通过调控沉积条件，有意的在其中一种材料中引入少量的尺寸为 1 nm 的空洞，纳米空洞均位于 Al₂O₃ 层内。He⁺离子辐照后，与不含空洞的 YSZ/Al₂O₃ 多层膜相比，其在微观结构和力学性能的均有异常的变化。首先，在 He⁺离子辐照剂量最高至 1×10^{17} ions/cm² 后，含纳米空洞的多层膜中的气泡尺寸较大，且都是分布在 Al₂O₃ 层内，而不是界面处或者 YSZ 层内，并且氦泡的尺寸与 Al₂O₃ 层的层厚相当，甚至大于 Al₂O₃ 层的层厚。其次，含纳米空洞的多层膜在高剂量的 He⁺离子辐照后，表现出辐照软化，而不是常见的辐照硬化。这些实验结果表明，多层膜由于纳米空洞的存在，导致辐照过程中引入的氦原子在空洞处聚集，形成较大的氦泡；氦泡导致的多层膜的界面混乱，以及氦泡作为新引入的界面，可以作为位错源，促进位错的移动，造成了辐照软化现象。

关键词：抗辐照；纳米多层膜；纳米孔道；纳米空洞

A03-25

Hastelloy N 合金中 He 泡与位错环演化的协同效应研究

高杰，黄鹤飞，刘继召，李燕

中国科学院上海应用物理研究所

Hastelloy N 合金以其优异的抗氟化盐腐蚀性性能被公认为熔盐堆中的最优备选合金结构材料。然而在反应堆服役过程中，镍基体易与中子发生 (n, α) 核嬗变反应，进而产生大量的 He 原子。He 原子在合金中特别是晶界处的迁移聚集会形成 He 泡，最终使合金的力学性能降低。另外，中子辐照在材料中引起的离位损伤也是材料劣化的重要因素。值得注意的是 He 泡与离位损伤的演化之间可能存在协同效应，这将对 Hastelloy N 合金服役性能产生重大影响。然而，目前尚未有相关报告。在本研究中，Hastelloy N 合金样品在 650°C 下分别被 (I) 单束 He⁺ 离子，(II) 单束 Xe⁺ 离子和 (III) 两束离子先后辐照。利用透射电子显微镜和纳米压痕技术，研究了三种合金样品中氦泡和位错环的演化及其对合金样品硬化的影响。透射电子显微镜结果显示，在 He 和 Xe 先后辐照下，合金样品中 He 泡和位错环的尺寸分别大于相应单束离子辐照下合金样品中 He 泡或位错环的尺寸。同时，两种微观结构的数量密度相比单束离子辐照条件均出现下降。纳米压痕结果显示，双束离子先后辐照后合金样品的硬度明显高于单离子辐照条件下的综合硬化值。这两个方面的结果表明在双束离子先后辐照条件下，Hastelloy N 合金样品中的 He 泡与位错环演化出现了明显的协同效应，该协同效应在引起材料硬度变化上得到了充分体现。该研究中协同效应的机制可解释如下：合金中预先形成的 He 泡，通过捕获 Xe 离子辐照引入的空位，从而抑制了 Xe 辐照引入的间隙原子与空位之间的复合湮灭。因此，存活空位和间隙原子可以分别促进 He 泡和位错环的生长。此外，双束离子先后辐照合金样品后的硬度升高也印证了 He 泡和位错环演化过程中的协同效应。这项研究结果有利于更合理地评估 Hastelloy N 合金在 MSR 中服役的辐照性能。

A03-26

3C-SiC 中 He 与辐照缺陷团簇相互作用及 He 脱附性质研究

尤玉伟

中科院合肥物质科学研究院

立方碳化硅 (SiC) 因具有耐高温、低密度、高热导和低辐照活性等优异性能被视为聚变堆包层结构材料的候选材料之一。中子辐照可造成 SiC 严重损伤形成大量缺陷、缺陷团簇和空洞, 诱导嬗变反应生产氦 (He) 并形成气泡, 导致材料性能退化, 最终威胁聚变堆的稳定和安全。因此, 理解辐照缺陷和 He 行为及其相互影响, 认识辐照缺陷和缺陷团簇对 He 聚集和脱附行为的影响, 及认识气泡形成的微观机理等至关重要。首先, 基于 DFT 方法研究了 SiC 中辐照空位团簇和间隙 He 团簇的稳定性, 空位团簇与 He 相互作用, 及空位团簇对 He 动力学行为的影响。研究发现, 仅包含碳空位的空位团簇形成能最小, 同时包含碳和硅空位的空位团簇的结合能最大。空位和空位团簇可为 He 提供聚集的自由空间, 含 Si 空位的空位团簇与 He 的结合强度比无硅空位的空位团簇与 He 的结合强度更大 (如图 1)。空位团簇与 He 的结合能随 He 原子数与空位数比率线性增大, 空位团簇尺寸越大捕获 He 的能力越强。空位与 He 结合形成的团簇周围发射格点 C 或 Si 原子比从该团簇中发射 He 原子困难。此外, SiC 中空位和空位团簇的存在阻碍了 He 的扩散, 降低了材料中 He 的扩散率。

其次, 使用 DFT 和 OKMC 方法相结合研究立方 SiC 中空位团簇对 He 热脱附行为影响。基于计算获得的 He 与空位团簇相互作用的能量学和动力学参数并使用 SRIM 获得注入 He 离子的分布参数。基于以上参数使用 OKMC 模拟宏观尺度下立方 SiC 中 He 等时退火行为 (如图 2 所示), 并将 OKMC 针对 He 热脱附行为的模拟结果与相同条件下实验结果进行了比较。研究发现, 能量为 0.5KeV 剂量为 $1 \times 10^{19}/\text{m}^2$ 的 He 离子室温注入后 3C-SiC 中空位浓度非常小, He 脱附主要表现为低温脱附且主要来自间隙 He 贡献。能量为 1KeV 剂量为 $1 \times 10^{19}/\text{m}^2$ 的 He 离子室温注入后, 3C-SiC 中 He 脱附既有低温脱附又有高温脱附, 高温脱附峰对应温度小于含有硅空位的空位团簇中 He 的脱附峰对应温度, 而与碳空位团簇中 He 脱附峰对应温度接近, 此时 He 捕获位置主要是碳空位团簇。能量为 3KeV 剂量为 $1 \times 10^{19}/\text{m}^2$ 的 He 离子室温注入 3C-SiC 中, He 的脱附只有高温脱附峰, 此时空位团簇处于不饱和状态, 高温脱附峰的位置与 He 从含有硅空位的空位团簇中的脱附峰位置相近, 此时 He 的捕获位置主要是含有硅空位的空位团簇。

关键词: 聚变堆结构材料; 氢氦效应; 辐照损伤; 计算模拟

A03-27

中子辐照对反应堆压力容器钢弹性模量的影响

李承亮¹, 束国刚², 刘伟¹

1.清华大学材料学院

2.中广核工程有限公司核电安全监控技术与装备国家重点实验室

材料性能参数弹性模量作为设计输入用于开展反应堆压力容器 (以下简称 RPV) 的应力分析与结构完整性评价等工作。快中子辐照损伤是导致 RPV 材料性能劣化的主要原因之一, 辐照对 RPV 钢弹性模量的影响及其在 RPV 全寿期内的变化规律一直是核电设计者关注的焦点。采用辐照实验堆在 290°C 对 RPV 钢开展了中子加速辐照考验, 然后在热室内采用超声共振频谱仪设备测试了辐照后 RPV 钢的弹性模量、泊松比、剪切模量与纵波声速等四项参数。结果表明: 华龙一号 RPV 在全寿期内其弹性模量等参数未发生明显变化, 快中子辐照损伤对上述材料性能参数基本无影响。该研究结论有助于提高 RPV 长寿期服役时结构完整评价结果的可靠性, 并为未来 RPV 延寿论证提供支持。

关键词: 反应堆压力容器; 辐照损伤; 弹性模量; 结构完整性; 安全评价

A03-28

聚变堆用先进钨材料的四点弯曲测试及其 DBTT 研究

王万景¹, 罗广南¹, 李强¹, 王兴立¹, 秦思贵², 刘国辉²

1.中国科学院等离子体物理研究所 (ASIPP)

2.安泰科技有限公司

钨金属作为聚变装置中面对等离子体材料具有熔点高、溅射低和氢同位素滞留低等优点, 另一方面较高的韧脆转变温度 (DBTT) 却又极大的限制了其使用温度窗口。为此, 材料界从晶粒细化和掺杂等多个角度开展了优化其力学性能的研究, 但是在这些研究中却存在检测方法不统一的问题, 导致其性能对比评估的混乱。针对此问题, 本研究以安泰科技生产的商业化 ITER 级钨材料四点弯曲测试为起点, 通过对比不同的测试方法和样品加工工艺, 深入研究各种钨材料的 DBTT 以及其与

材料制备工艺、微观结构和服役行为的关系，进而为制定聚变装置用先进钨材料的测试方法和验收标准奠定基础。

早在 2010 年 ITER 组织针对钨材料性能已经提出了详细的要求，包括晶粒大小等级、密度、轧制工艺、退火工艺和高温拉伸力学性能等多个方面。然而在近期的钨铜穿管模块的高热辐照试验中却发现，这些性能无法表征在此过程中的钨块纵向开裂问题，为此，ITER 组织计划增加两个指标：一个是 1500℃退火 1 小时后的 HV30 需要大于 410，另一个是四点弯曲表征的 DBTT 数值。本课题组在开展钨材料四点弯曲测试研究中发现，安泰科技生产的常规轧制钨材料的 DBTT 在 150℃左右，和文献中 DBTT 在 400℃左右的数值差距很大。为此，本课题组针对该批次轧制钨材料开展了高温拉伸和夏氏冲击等实验，并分析了加载速度、样品加工工艺与 DBTT 的关系等，进而扩展了我们的研究对象，比如对比不同厂家和不同制备工艺钨材料的微观结构与力学性能的关系，使我们对钨材料的 DBTT 有了更深入的认识。后期还深入开展材料力学性能检测与辐照损伤、开裂等服役行为之间的关系，希望以这些工作为基础制定针对 CFETR 用先进钨材料的测试方法和验收标准。

关键词：钨材料；四点弯曲；DBTT

A03-29

3omega 薄膜热导测试方法在探究聚变面对等离子体材料辐照后表面热导变化中的应用

孙彦东，曲世联，徐贲，刘伟

清华大学

面对等离子体材料在服役时会受到高热流和高束流等离子体的辐照，表面形成纳米尺度损伤结构，导致表面热导下降，严重影响部件的使用寿命、等离子体的稳定性及装置的安全性。因此准确测试损伤层的热导率极其重要。由于损伤层结构与带基体的薄膜类似，我们搭建了基于 3omega 方法测试辐照损伤层热导率的测试平台。并且利用平台测试了 W 材料在 He 辐照损伤后的热导率。结果如下：He 离子在室温条件下辐照，使得 W 材料表面热导率下降了 1 个数量级，He 等离子体辐照使得 W 材料表面热导率下降了 2 个数量级。

A03-30

高能铁离子辐照对氢同位素在低活化钢中滞留行为的影响

徐玉平，吕一鸣，周海山，罗广南

中科院等离子体物理研究所

低活化铁素体马氏体钢被认为是 ITER TBM 及 DEMO 堆包层的主要候选结构材料。核聚变燃料氦在材料中的滞留行为关系到聚变堆的安全性和经济性。聚变 14MeV 中子辐照将在材料中产生大量的辐照缺陷，这些缺陷将影响材料中的氢同位素滞留行为。截止目前，由于 14MeV 中子源的短缺及中子辐照样品易活化的特点，这个问题还没得到系统的研究。高能重离子辐照长期被应用于模拟高能中子辐照效应。本文中，借助了高能铁离子对国产低活化钢进行了辐照，并与未辐照的样品进行对比，研究其氢同位素滞留行为，探究了辐照损伤对氢同位素滞留行为的影响。

样品在兰州近代物理研究所的 HIRFL 加速器中进行了 340.6MeV 的铁离子辐照，相比普通的离子辐照，该辐照具有以下几个优点：1.射程远，损伤深度可达约 25 μm ；2.借助梯度减能装置，辐照损伤在表面到 25 微米深度范围内接近于均匀；3.借助液氮冷却的样品靶，保持辐照温度在零下 196 摄氏度，尽可能的避免缺陷热回复。为了表征辐照缺陷，已开展了正电子湮灭多普勒展宽实验、正电子湮灭寿命谱实验以及透射电镜实验。随着辐照剂量的提升，正电子湮灭寿命谱显示出现了长寿命的新型空位型缺陷，多普勒展宽 S 参数则出现了上升显示总体的空位型缺陷浓度提升，透射电镜结果显示位错环密度升高。最后，为了表征辐照缺陷对氢同位素滞留的影响，采用气氛暴露的方法在低活化钢中引入氦，再借助热脱附谱仪对氦滞留行为进行了分析并与未辐照样品进行了对比。

关键词：离子辐照；氢同位素；低活化钢；滞留

A03-31

60keV 氦离子辐照诱导流变行为导致的钨表面大塑性起泡

朱开贵，韩文佳，俞坚钢

北京航空航天大学物理学院

我们进行了纯 W 和 W 掺杂样品的 60KeV 氦辐照实验行为研究。实验后通过扫描电镜观察(SEM)，X 射线衍射(XRD)和透射电镜(TEM)进行表征分析，发现纯 W 和 W 掺杂样品都发生了很严重的起泡以及剥落现象。起泡深度与氦的注入深度接近，但是泡的直径达到 20 到 30 微米，泡的顶部隆起很高，泡皮的塑性延伸率超过 50%。已有的文献中都没有报道过类

似的氦辐照后钨表面如此奇特的起泡现象，我们的结果属于首次观察到。基于以上实验发现，我们认为，在 60keV 的氦辐照条件下，纯 W 和 W 合金样品表面起泡行为来自于氦泡的气体压力导致的氦泡生长以及离子注入过程基体 W 原子离位损伤动态过程的共同作用。聚焦离子束（FIB）切割氦泡也验证了氦泡的空心结构，证实了其符合内部氦泡不断长大的气压模型。我们对这一起泡机理的解释，说明了辐照条件对 W 辐照性能的影响很大。我们认为氦泡皮层中的塑性变形现象不仅是中高能辐照特有和必然存在的实验现象，而且在满足中子辐照与低能氦氦辐照共同存在的托卡马克聚变装置中，钨表层的非晶化以及辐照诱导的流变行为同样会存在，应引起足够重视。我们根据辐照过程涉及到的微观机理，整理绘制了钨在氦辐照后随剂量增加内部结构发生变化最终演变发生起泡现象以及泡皮产生大的塑性变形并最终破裂的过程。

关键词：第一壁；钨；氦辐照；表面气泡

A03-32

核燃料元件包壳材料锆合金的腐蚀和吸氢研究

姚美意，周邦新，李强，张金龙，谢世敬，黄娇，梁雪，彭剑超，刘文庆

上海大学

锆合金是水冷核反应堆中用作核燃料包壳的一种重要结构材料，腐蚀和吸氢是影响锆合金使用寿命的主要因素。本文主要介绍上海大学核材料研发团队在锆合金包壳材料方面开展的主要工作以及取得的进展，主要包括氧化膜显微组织及晶体结构演化与锆合金耐腐蚀性能之间的关系研究、锆合金成分的优化研究、锆合金的腐蚀相关机理研究和锆合金的腐蚀吸氢规律及其机理研究等。通过认识合金成分和显微组织影响锆合金腐蚀和吸氢的规律及其机理，为开发具有我国自主知识产权的高性能锆合金材料、优化制造工艺，提高核燃料元件的使用性能和寿命提供实验与理论依据，满足核电的发展和运行的需要。

关键词：锆合金；腐蚀；吸氢；氧化膜；显微组织

A03-33

Factors driving stable growth of He clusters in W: First-principles study

Y.X. Wang

Key Laboratory of Nuclear Physics and Ion-beam Application (MOE), Institute of Modern Physics, Department of Nuclear Science and Technology, Fudan University

The evolution of helium (He) bubbles is responsible for the surface morphology variation and subsequent degradation of the properties of plasma-facing materials (PFMs) in nuclear fusion reactors. These severe problems unquestionably trace back to the behavior of He in PFMs, which is closely associated with the interaction between He and the matrix. In this paper, we decomposed the binding energy of the He cluster into three parts, those from W–W, W–He, and He–He interactions, using density functional theory. As a result, we clearly identified the main factors that determine a steplike decrease in the binding energy with increasing number of He atoms, which explains the process of self-trapping and athermal vacancy generation during He cluster growth in the PFM tungsten. The three interactions were found to synergetically shape the features of the steplike decrease in the binding energy. Fairly strong He–He repulsive forces at a short distance, which stem from antibonding states between He atoms, need to be released when additional He atoms are continuously bonded to the He cluster. This causes the steplike feature in the binding energy. The bonding states between W and He atoms in principle facilitate the decreasing trend of the binding energy. The decrease in binding energy with increasing number of He atoms implies that He clusters can grow stably.

A03-34

铀镓合金中氦行为研究进展

陈丕恒

中国工程物理研究院材料研究所

综合应用第一性原理计算、分子动力学和速率理论结合正电子湮灭寿命仪、X 射线衍射分析和热解析技术等实验手段较系统地研究了铀镓合金中衰变子体浓度变化、氦泡演化过程，评估了这些因素对材料晶格常数和宏观力学性能的影响。

关键词：铀镓合金；氦泡；力学性能

A03-35

轻重离子辐照对烧绿石结构 Lu₂Ti₂O₇ 非晶性能的影响

张建, 焦绪丽, 付上朝, 林劲辰, 叶成, 吴采宇, 朱瑞华
厦门大学

采用常规陶瓷烧结工艺制备烧绿石结构的 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 。在室温下, 用 800 keV Kr^{2+} 和 200 keV He^+ 进行辐照。用 GIXRD 进行对辐照样品的表征后发现: 用 800 keV Kr^{2+} 辐照样品, 在辐照剂量达到 $2 \times 10^{14} \text{ ions/cm}^2$ 时, 样品出现非晶, 随着剂量的增加, 非晶量不断增加, 增加到一定程度后, 非晶量不再变化, 样品最终不能完全非晶; 用 200 keV He^+ 进行辐照时, 即使辐照剂量达到 $2 \times 10^{17} \text{ ions/cm}^2$, 样品也没有出现非晶现象。通过分子动力学模拟对结果进行分析后发现: 重离子辐照时, 样品在较小范围内产生的较多的缺陷, 且电子能损较低, 样品温度升高较少, 缺陷复合率低, 易非晶; 轻离子辐照时, 在较大范围内生成比较少的缺陷, 且电子能损较高, 样品温度升高较多, 缺陷复合率高, 不易非晶。

关键词: 烧绿石; 非晶; 离子辐照; 分子动力学

A03-36

高放废物钙钛锆石玻璃陶瓷固化体的离子辐照效应研究

陈亮, 律鹏, 张冰焘, 张建东, 张利民, 王铁山
兰州大学核科学与技术学院

核能的发展必将会产生大量放射性强、发热率高、毒性大、腐蚀性高的高放射性废液。目前国际上对于高放废液普遍的治理主线是: “固化—深地质处置”。作为第一层工程屏障的高放废物固化体材料, 其长期辐照稳定性直接影响高放废物的成功处置。钙钛锆石玻璃陶瓷兼具硼硅酸盐玻璃与钙钛锆石陶瓷的优点, 对富铀系核素高放废液有很好的包容能力, 是目前国际上固化材料研究领域的热点方向。然而目前对其辐照损伤机理研究内容非常有限。本文利用 8 MeV Au^{3+} 和 15 MeV Si^{5+} 离子辐照模拟铀系核素 α 衰变及裂变碎片强辐射场, 结合掠入射 X 射线衍射 (GIXRD)、原子力显微镜 (AFM)、扫描电子显微镜 (SEM)、透射电子显微镜 (TEM) 和飞行时间二次离子质谱 (TOF-SIMS) 等材料分析表征方法研究了不同离子辐照前后钙钛锆石玻璃陶瓷的微观结构和表面形貌变化。实验结果表明: 相比于单一钙钛锆石晶相, 两种离子辐照后钙钛锆石玻璃陶瓷中钙钛锆石晶体无明显非晶化趋势, 而非晶比明显增大, 且 Si 离子辐照样品的非晶比明显高于 Au 离子辐照样品, 这主要与表面形貌的变化密切相关; Au 离子辐照后钙钛锆石玻璃陶瓷表面形成了许多凹坑和小凸起, 且钙钛锆石晶体的颗粒尺寸明显减小, 而表面的元素分布没有明显的变化, 即无明显相分离或元素迁移现象发生; Si 离子辐照后钙钛锆石玻璃陶瓷表面形成了尺寸约为 $2 \sim 8 \mu\text{m}$ 的大量微米级凸块, 钙钛锆石晶体的颗粒尺寸无明显变化, 但其颗粒密度显著降低。所有元素均遵循一致的分布, 即这些凹凸区域的强度较低, 在这些凹凸的一些间隙中的强度较高, 并无明显晶体相和玻璃相的差别。结合多种表征分析, 可认为 Au 离子辐照导致表面形貌的变化主要与离子辐照导致表面的溅射效应有关。Si 离子辐照后形成的微米级凸块与电子能量沉积引起玻璃基体的相分离和膨胀密切相关。本项目研究内容涉及钙钛锆石玻璃陶瓷固化体长期辐照稳定性评价相关的基础科学问题, 是针对新研究对象开展的原创性工作。本论文实验结果可为尽快实现钙钛锆石玻璃陶瓷在富铀系核素高放废液固化的应用提供重要的基础科学依据。

A03-37

hcp-Zr 中碰撞级联的分子动力学模拟研究

周韦¹, 田继挺¹, 薛建明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. 北京大学物理学院重离子物理所

本文利用分子动力学模拟研究了 hcp-Zr 中的高能碰撞级联、碰撞级联与刃位错的作用, 以及连续辐照时的级联交叠过程, 发现了非热阶段碰撞级联过程中实验尺度大团簇的两种形成机制, 可用于解释极低剂量辐照时 Zr 基体中出现的位错环现象, 并提出了位于基面的 $\langle c \rangle$ -型空位环的一种可能成核机制。研究表明, hcp-Zr 中的一个高能级联无法直接用几个分离的低能子级联来等效, 高能 PKA 可显著促进团簇的形成, 有 10% 的 80 keV 级联直接产生了 TEM 可观测尺度 ($\sim 3 \text{ nm}$) 的大团簇, 与极低剂量实验结果符合较好。hcp-Zr 中, 级联区或级联区一部分相对刃位错严重不对称分布时, 刃位错将明显促进空位团簇的成核, 一个 20 keV 的 PKA 甚至可直接产生实验尺度的 $1/2[-1100]$ 空位环, 该空位环经高温退火后可转化为实验上观察到的位于棱柱面的 $1/3[11-20]$ 位错环, 实现了 hcp-Zr 中从开始 PKA 产生的碰撞级联到实验尺度位错环形成的全过程模拟。在 hcp-Zr 连续辐照的级联交叠过程中, 随机产生的新级联会促使之前的团簇发生裂解或合并, 并可产生实验尺度的大团簇, 且在 hcp 晶格基面上会出现小的 $\langle c \rangle$ -型空位团簇, 这可能是由局域晶格应变引起的。本文进一步计算了不同应变场下 $\langle a \rangle$ -型与 $\langle c \rangle$ -型团簇的形成能, 发现 hcp-Zr 的辐照生长提供的双向应变 (a 轴拉伸 + c 轴压缩) 会使得 $\langle c \rangle$ -环的形成能明显

低于<a>环而更容易形成，提出了一种<c>型空位环的可能成核机制。

关键词：锆；碰撞级联；团簇；分子动力学

A03-38

核径迹纳米孔道在能源转换中的基础研究及应用

谢彦博

西北工业大学

利用载能重离子轰击固体薄膜，在材料上制造损伤而制备纳米孔道是纳米孔道材料器件制备的一项重要技术和手段。而利用核径迹方法能够制备出小至亚纳米，上至百纳米的孔道，目前已经在材料、生命科学、化学等诸多交叉研究领域发挥了重要的作用。其中，利用核孔道技术进行新能源并收集电能也是其中重要的研究方向之一。在外界压力差驱使下，流体带动孔道内溶液中的离子传输产生电能，由于其简单有效、无污染等使其受到了广泛关注。核径迹纳米孔膜由于其低成本、高通量、孔径尺寸可控、以及界面性质易调节等特点，在压力驱动的动电效应能量收集研究方面具有独特优势及较大的研究前景。而提高其作为能量收集装置的关键问题之一即是利用核径迹损伤制备纳米孔道，构建高效率大功率能量转换器件。

A03-39

事故容错材料的研究进展与思考

彭述明

中国工程物理研究院核物理与化学研究所

近年来，中国工程物理研究院核物理与化学研究所系统开展了事故容错材料研究，重点关注三个体系：Zr合金、SiCf/SiC复合材料和FeCrAl涂层。

在中国绵阳研究堆(CMRR)内对Zr-Sn合金与Zr-Sn-Nb合金开展了中子辐照实验，快中子注量 $3.0 \times 10^{19} - 8.0 \times 10^{20} \text{ n/cm}^2$ ($E > 0.1 \text{ MeV}$)。通过轴向拉伸、SEM、TEM、中子衍射和中子小角散射等实验研究了辐照后锆金的力学性能和微观结构变化。结果表明，锆合金辐照后出现了明显的硬化行为，断裂模式仍为韧性断裂，低剂量阶段的硬化主要源自辐照产生的点缺陷团簇，长大后即坍塌或切变形成位错环。对Zr-Sn-Nb合金开展了质子和Ne+辐照实验，研究了第二相粒子Zr(Fe, Cr, Nb)₂的非晶化机制及退火再结晶行为，分析了第二相的非晶化过程及元素含量变化情况。通过FIB制样系统原位分析了Zr-Sn-Nb合金中的氢化物，发现形成的氢化锆为面心立方结构的 δ -ZrH_{1.5-1.66}相，与密排六方结构的 α -Zr基体间存在 $[010]_{\alpha} // [1-10]_{\delta}$, $(001)_{\alpha} // (111)_{\delta}$ 外延关系。利用分子动力学模拟研究了hcp-Zr中实验尺度的大团簇即位错环的形成机制。发现单个80keV的移位级联可直接产生实验尺度的大团簇，材料中的内禀位错也有可能促进附近的单个级联直接产生大团簇。

采用KD-II和KD-S型SiC纤维为增强体，PyC、BN和SiC涂层为界面相，通过先驱体浸渍裂解工艺(PIP)制备了SiCf/SiC复合材料。研究了纤维类型、界面种类、基体性能和裂解温度对SiCf/SiC复合材料结构及性能的影响规律；开展了SiCf/SiC复合材料在模拟核环境下的离子辐照、水热腐蚀和水蒸汽腐蚀等研究；利用优化后的PIP工艺制备了SiCf/SiC复合材料包壳管。结果表明：(1)较KD-II SiCf/SiC复合材料，KD-S SiCf/SiC复合材料的性能更加优异，室温弯曲强度可达到955MPa；(2)具有层状结构的BN和PyC涂层能显著提高复合材料的力学性能；(3)在SiC基体中掺杂SiC微粉可显著提高SiC基体的导热性能；(4)提高裂解温度可显著提高复合材料的结晶度和纯度，提高其导热，但高温易造成SiC纤维受损，降低复合材料力学性能；(5)通过提高裂解温度和表面沉积SiC涂层，可显著提高SiCf/SiC复合材料抗水热腐蚀能力；(6)高温水蒸汽加速了SiCf/SiC复合材料表面玻璃态SiO₂的生成；(7)采用缠绕成型等工艺制备出管壁厚度小于1mm，内径8~10mm，孔隙率小于5%，长度超过1m的SiCf/SiC复合材料包壳管；(8)对SiCf/SiC复合材料开展了低剂量中子辐照实验，发现辐照后材料的弯曲强度减小，断裂韧性稍有下降，断口处纤维拔出较明显，界面结合力可能减弱。

FeCrAl具有优异的抗氧化性能，作为涂层有望改善Zr合金包壳的事故容错能力，但Zr-Fe高温互扩散及相应金属间化合物的影响，涂层结合强度及高温稳定性尚不能满足反应堆事故容错的要求。针对Zr-Fe互扩散，团队在FeCrAl涂层与Zr合金基体间引入ZrO₂缓冲层。考察了ZrO₂/FeCrAl复合涂层的高温氧化性能。结果表明，由等离子体电解氧化法在Zr-4合金表面制备的ZrO₂缓冲层能够有效缓解Zr-4与FeCrAl涂层间的高温相互扩散，避免了金属间化合物生成，提升了FeCrAl涂层高温稳定性，改善了Zr-4合金的耐氧化性能。氧化动力学数据表明，800℃和1000℃蒸汽环境下ZrO₂/FeCrAl复合涂层样品氧化速率常数比Zr-4合金分别降低了2个数量级和1个数量级。

A03-40

钢系氧化物的第一性原理研究

王保田¹, 张平², 王芳卫^{1,3}

1. 中国散裂中子源, 中国科学院高能物理研究所, 东莞 523803

2. 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088

3. 北京凝聚态国家实验室, 中国科学院物理研究所, 北京 100080

因具有 5f 电子, 锕系金属在形成氧化物和氢化物的时候会表现出非常丰富的物理效应。比如电子关联效应、自旋轨道耦合效应和晶体场效应等等。大部分轻锕系体系还需要考虑磁性。这些效应相互影响和竞争, 使得计算模拟该类体系困难重重。近年来, 我们使用第一性原理方法研究了一系列锕系氧化物 ($\text{ThO}_2\text{-CmO}_2$) [1-6] 的结构、磁结构、电子结构、弹性常数、弹性模量、声子谱、自由能以及各种热力学性质, 探讨了强关联效应、自旋轨道耦合效应和非谐效应等。这一系列工作, 不仅扩展了人们对锕系材料在强关联领域的认识, 也为它们在核能领域的应用提供了大量力学和热力学数据, 得到了国际同行的广泛关注和引用报道。

关键词: 二氧化铀; 二氧化钷; 第一性原理; 声子谱; 弹性常数

A03-41

高温气冷堆核燃料及材料研究

刘兵

清华大学核研院

高温气冷堆核燃料元件由石墨材料和包覆燃料颗粒组成, 石墨材料作为慢化剂和燃料元件的结构支撑材料, 决定高温堆核燃料的机械性能和化学性能, 并影响高温堆反应特性; 包覆燃料颗粒是高温堆燃料的重要构成单元, 目前通用的包覆燃料颗粒由四层各向同性的陶瓷材料构成 (tristructural isotropic), 简称 TRISO 包覆燃料颗粒。TRISO 包覆燃料颗粒是高温堆安全特性的第一道保障, 其中碳化硅材料是主要的结构承压层和阻挡裂变产物的屏障, 并且具有良好的抗氧化能力, 以石墨材料为基体, TRISO 包覆燃料颗粒为主要单元的高温堆核燃料, 可以耐较高的反应堆温度和燃耗, 是一种具有广阔应用前景的新型核燃料。

目前 TRISO 型核燃料的研究重点, 除了核燃料设计, 制造工艺以外, 其相关材料在事故状态下的服役行为, 也是研究的重点。

关键词: 高温气冷堆; TRISO 包覆燃料颗粒; 石墨

A03-42

Learning a Force Field to predict Phase Diagrams

丁向东

西安交通大学

Atomic simulations provide an effective means to understand the underlying physics of structural phase transformations. However, this remains a challenge for certain allotropic metals due to the lack of an accurate classical interatomic potential. Based on machine learning (ML) techniques, we develop a hybrid method in which interatomic potentials describing martensitic transformations can be learned with a high degree of fidelity from ab initio molecular dynamics simulations (AIMD). Using zirconium as a model system, for which an adequate semi empirical potential describing the phase transformation process is lacking, we demonstrate the feasibility and effectiveness of our approach. Specifically, the ML-AIMD interatomic potential correctly captures the energetics and structural transformation properties of zirconium as compared to experimental and density-functional data for phonons, elastic constants and stacking fault energies. Molecular-dynamics simulations successfully reproduce the transformation mechanisms and reasonably map out the pressure-temperature phase diagram of Zr.

A03-43

钨中氦泡生长的螺位错交滑移及刃位错攀移机制

谢红献¹, 吕广宏², 于涛³

1. 河北工业大学

2. 北京航空航天大学核能与物理工程学院

3. 钢铁研究总院功能材料研究所

我们用分子动力学模拟的方法研究了氦泡半径对金属 W 空位处氦泡生长机制的影响。发现氦泡的半径超过一定值时,

在氦泡内压的作用下，首先在氦泡表面沿{111}密排晶向产生几个可滑移刃型位错萌芽；随着内压的增加，其中的一个可滑移刃型位错向远离氦泡的方向生长，从而形成一个类似“套索”的结构，其前端为刃型位错，其两侧为符号相反的螺型位错，在氦泡附近应力场的作用下，符号相反的两个螺位错向相反的方向交滑移，并最终相遇湮灭，形成一个棱柱位错环。我们还用分子动力学模拟的方法还研究了 W 中刃位错对氦泡生长机制的影响。发现刃位错对其张应力区的氦原子具有强烈的吸引作用，在位错的吸引作用下，氦原子快速向位错芯部扩散集聚，即刃位错的存在有利于氦泡的形核。当氦原子在位错芯区集聚到一定数量时，就会在其周围挤出 W 间隙原子，该间隙 W 原子直接被刃位错吸收，引起刃位错在垂直于其滑移面方向上攀移；在整个模拟过程中没有发现氦泡向周围基体中挤出棱柱位错环。我们还进一步从能量角度比较了氦泡生长的刃位错攀移机制和向基体推出棱柱位错环机制，发现刃位错攀移机制更有利于氦泡的生长。

关键词：氦泡；钨；位错

A03-44

中子辐照导致金属材料微观结构演化多尺度模拟研究

贺新福

中国原子能科学研究院

金属材料在反应堆中应用广泛，如压力容器钢、奥氏体不锈钢等。金属材料在反应堆中经受高能中子辐照，产生大量的缺陷，缺陷在温度场、应力场等作用下经过演化改变了材料的微结构，如形成位错环、空洞、SFT、析出物等，是一个典型的多尺度问题。近年来，中国原子能科学研究院反应堆材料先进模拟团队针对 RPV 钢、奥氏体不锈钢、高熵合金以及某些特种材料的辐照损伤行为开展了多尺度模拟研究，并开发了面向我国超级计算机的大规模并行计算程序。本报告简要介绍了中国原子能科学研究院反应堆材料先进模拟团队针对中子辐照导致 RPV 钢、奥氏体不锈钢等材料微观结构演化方面的工作进展以及下一步的工作计划。

关键词：金属材料；辐照损伤；微结构演化；多尺度模拟

A03-45

中子辐照损伤的 OKMC 模拟研究

杨章灿

华中科技大学能源与动力工程学院

在服役条件下，聚变堆面向等离子体材料（PFM）将承受 14 MeV 高能中子的辐照。中子辐照可引起材料的离位损伤、嬗变元素产生等效效应，导致辐照肿胀、辐照硬化、脆化等后果，对材料的力热性能造成严重影响。而准确了解和理解材料在中子辐照下微结构演化机理是预测其力热性能变化的基本先决条件。动力学蒙特卡洛（Kinetic Monte Carlo, KMC）方法是研究材料微结构演化的常用方法之一，可在介观尺度对材料中缺陷产生、聚集以及生长行为做长时间的演化研究。本报告将以钨为例，阐述 KMC 方法在钨的中子辐照损伤模拟研究中的应用，详细介绍在不同辐照条件下（如中子注量率、温度等），钨中空洞、位错环等微结构的分布、尺寸、数密度等参数随时间变化规律，并且将所得结果与 JOYO、HFIR 裂变中子堆实验结果进行比较。

关键词：中子辐照；动力学蒙特卡洛；微结构；力热性能

A03-46

第一壁材料氚滞留分析方法

王鹏¹，乔丽¹，张翰文¹，Liang Gao^{1,2}

1.Lanzhou Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences

2.Max-Planck-Institut für Plasmaphysik

核聚变是潜在的清洁安全能源，其燃料大量存在于海水中至少可以供人类使用几十亿年。世界上包括中国在内 35 国共同参与的国际热核实验堆（ITER）预计 2025 年完成建造，将最终验证磁约束核聚变能科学可行性和工程技术可行性。ITER 和将来商用堆的顺利实现面临两大类瓶颈问题：高参数稳态运行中的等离子体物理问题以及反应过程中氦的循环/自持。研究氢同位素在壁材料中的滞留对实现燃料循环控制乃至 ITER 以及将来商用堆高参数稳态运行至关重要。本文对目前几种常用的氢同位素测量方法进行了综述，对比了几种测量方法的优劣，并讨论了利用光谱进行燃料滞留深度测量的可能性。

A03-47

氢同位素在聚变堆结构材料中的行为研究

周海山, 徐玉平, 刘皓东, 吕一鸣, 戚强, 丁芳, 罗广南
中国科学院等离子体物理研究所

磁约束聚变堆中, 结构材料如低活化钢、铜合金等不可避免的暴露于氦环境, 因此研究氢同位素在结构材料中的行为对于聚变堆的核安全以及氦自持有重要的意义。中科院等离子体所聚变堆材料科学与技术研究室近年来对 ITER 以及 CFETR 候选结构材料开展了系统的氢同位素行为研究, 包括以下几个方面: (1) 研究了低活化钢以及铜合金的氢同位素渗透参数, 例如扩散率、渗透率、溶解度等; (2) 开展等离子体辐照驱动的氢同位素渗透行为研究, 重点研究了表面条件对渗透行为的影响, 测量了结构材料的氢同位素表面再结合系数; (3) 研究了辐照损伤对氢同位素渗透行为的影响, 例如高能氦/铁离子以及氦等离子体辐照损伤的影响; (4) 研究了氧化行为的影响; 上述成果一定程度上丰富了我国聚变堆材料研究数据库, 为聚变堆设计提供了有利参考。

关键词: 氢同位素; 结构材料; 聚变堆

A03-48

钨中长时高剂量氦等离子体辐照效应的实验与计算模拟初步探索

程龙, 刘秘, 郭望果, 侯鹏飞, 王诗维, 尹皓, 祝亦达, 袁悦, 吕广宏
北京航空航天大学

聚变装置中壁材料将受到高束流密度等离子体辐照, 强烈的等离子体与材料相互作用将造成材料的辐照损伤, 对材料微观结构、性能以及氦循环效率产生显著影响, 从而影响偏滤器的服役性能乃至托卡马克装置的运行稳定性。未来聚变装置(如 ITER、CFETR), 壁材料每年累积辐照剂量最高可达 10^{31} m^{-2} , 远超当前辐照损伤效应的研究参数范围。本研究通过开展钨材料的长时高剂量等离子体辐照实验研究, 探索高剂量下现有商业钨材料的服役性能, 为未来聚变装置中钨材料服役行为与使用寿命提供参考。

本研究以实验室自制再结晶钨 (REX) 为参考, 采用商业轧制钨 (切割面平行 (ND)、垂直于晶粒延展方向 (RD)、化学气相沉积钨 (CVD) 等材料, 表面经镜面抛光和去应力退火后, 在北航直线等离子体装置 STEP 上开展高束流氦 (D) 等离子体辐照实验。D 等离子体束流密度为 $2\sim 4 \times 10^{22} \text{ D m}^{-2}\text{s}^{-1}$, 最高剂量 $1 \times 10^{28} \text{ D m}^{-2}$ (64 小时连续辐照), 辐照温度 $500 \square 600 \text{ K}$, 离子入射能量为 40 eV 。辐照后, 利用扫描电镜, 热脱附谱等方法进行表征与分析。

分析辐照后表面形貌变化, 发现: REX 钨表面损伤程度随辐照剂量增加而增强, 可观察到表面鼓泡及边缘破碎, 部分晶粒内裂纹垂直于样品表面; ND 钨表面损伤严重, 出现直径近 100 微米的扁平鼓泡结构, 随着剂量的增加, 鼓泡结构破裂的同时伴随着泡表层回落至基体; RD 钨表现出较好的抵抗表面损伤的性能, 表面鼓泡密度、尺寸较低, 仅在剂量高于 $1 \times 10^{27} \text{ D m}^{-2}$ 时可观察到; CVD 钨也具有较好的抵抗表面损伤的性能, 其表面起泡的剂量阈值更高, 鼓泡结构多依附于柱状晶粒周围的晶界。采用热脱附谱测量辐照后样品中 D 的脱附行为, 发现在 REX 钨与 RD 钨中脱附量与辐照剂量的开平方成正向关系, ND 钨与 CVD 钨中脱附量逐渐饱和。

上述实验结果表明, 钨材料的微观组织结构、晶界参数特征等因素对超长剂量下 D 等离子体的辐照效应具有重要影响。具有柱状晶结构的 CVD 钨表现出较好的抗氢致起泡和较低的 D 滞留性能。基于分子动力学的计算模拟展示了钨中晶界作为 H 逃逸通道的作用, 可较合理的解释该实验结果。未来将采用离子束分析技术、透射电子显微镜等测量方法, 并结合速率理论计算, 进一步分析辐照条件下具有不同微结构钨材料中缺陷的演化行为与 D 的扩散与捕获行为, 为优化钨微结构、获得更好的抗等离子体辐照材料提供实验依据。

关键词: 钨; 氦; 等离子体与材料相互作用; 直线等离子体装置; 高剂量

A03-49

钨中氢聚集致塑性形变的原子模拟

许珂, 张雪松, 金硕, 吕广宏
北京航空航天大学

在聚变反应堆面向等离子体材料中, 获得溶解在钨中氢原子聚集形成氢泡的微观机制对于抑制氢泡形成、提升聚变材料服役性能具有重要意义。但由于缺乏氢致钨原子离位关键过程的理论预测与模拟再现, 钨中氢泡成核的完整机制一直未达到共识。

在本文中, 结合原子间经验势计算与弹性力学分析, 我们首先研究了钨中间隙氢的一种片状稳定构型, 获得了与已有的第一原理计算一致的结果[1]: 该片状结构的稳定性主要来源于氢原子之间的弹性结合能, 即氢原子通过对周围钨晶格产生

的各项异性应变相互吸引[2]。这样的作用等价于间隙氢通过片状聚集的形式将钨晶格所受的应力集中到了一小部分区域。通过能量计算,得出在理想情况下面积足够大时,氢片的厚度可以无限增大。而随着氢片的逐渐变厚,其尖端应力将达到临界值,钨晶体发生塑性形变,即钨原子的离位,以释放氢片周围应力,创造出空位-氢复合体,促进了氢片的继续长大。本文最后利用分子动力学模拟再现了片状间隙氢团簇的生长以及随之产生的塑性形变过程,验证了上述的计算推导。该过程不涉及钨晶体本征缺陷,被认为是钨中氢泡成核的一种可能机制。

关键词:钨;氢泡;塑性形变;分子动力学

A03-50

聚变堆第一壁钨涂层对氢同位素等离子体驱动与气体驱动渗透低活化钢的影响

徐跃¹, 廣岡慶彦², 吴玉程¹, 罗来马¹, 咎祥¹, 朱晓勇¹

- 1.合肥工业大学
- 2.日本核融合科学研究所

低活化铁素体钢由于其良好的力学及抗辐照性能被作为聚变示范堆(DEMO)第一壁的重要候选材料。从当前的一些 DEMO 设计中可知,第一壁的厚度一般在 5 mm 左右以减少材料在高的工作温度下的热-机械应力^[1]。未来的聚变堆将采用增殖包层结构以实现氦自持,因此,第一壁材料将会面临氢同位素的双向渗透问题,即边界等离子体中的氘(D)、氚(T)等离子体驱动渗透(plasma-driven permeation, PDP)进入增殖包层区域,以及在相反方向上,增殖包层中产生的 T₂ 气体驱动渗透(gas-driven permeation, GDP)进入边界等离子体中。需要特别指出的是,PDP-D 进入增殖包层会降低 T 的回收提取效率;GDP-T 进入边界等离子体区域(其作用类似于加料过程)会增大边界等离子体密度,降低其能量,严重时甚至会影影响装置芯部等离子体稳定运行。因此,在第一壁表面涂覆一层防渗透涂层至关重要。钨(W)由于其高熔点,高热导率以及低的氢同位素滞留等优点而被选为良好的第一壁涂层。

本研究工作在直线等离子体装置中进行,主要研究了三种不同结构的 W 涂层对氢同位素 PDP 和 GDP 的影响规律,分别是真空等离子体喷涂 W 涂层(vacuum plasma-sprayed W, VPS-W),物理气相沉积 W 涂层(sputter-deposited W, SP-W)和复合双层 W 涂层(VPS+SP-W)。研究发现,VPS-W 涂层孔隙率较高,致密度低,存在通孔结构;SP-W 涂层结构致密,无孔隙。VPS-W 涂层抑制氢同位素等离子体驱动渗透,但不影响气体驱动渗透;SP-W 涂层抑制气体驱动渗透,但实验发现 SP-W 会显著增强氢同位素等离子体驱动渗透,此现象在日本九州大学球形托卡马克 QUEST 上也观察到^[2]。实验证实,采用复合双层结构的 W 涂层(VPS+SP-W)可以同时抑制双向等离子体驱动与气体驱动渗透^[3]。实验表明,材料表面再结合系数是决定 PDP 过程的关键参数。氢同位素在材料中的扩散输运机理尚需深入研究。

A03-51

Al₂O₃ 阻氦涂层材料的制备及其性能研究

杨燕^{1,2}, 金成刚², 黄天源², 黄建军¹, 诸葛兰剑³, 吴雪梅²

- 1.深圳大学物理与能源学院
- 2.苏州大学物理与光电能源学部&苏州纳米科技协同创新中心
- 3.苏州大学分析测试中心

在聚变堆中涉氦结构材料的内壁表面制备性能优良的阻氦涂层,已成为聚变堆实现氦自持和氦安全最可行的关键技术之一。Al₂O₃ 由于其阻氦因子远大于其它候选材料,成为当前阻氦涂层材料研究的热点。但是,Al₂O₃ 的晶化温度较高,其中,具备最高化学稳定性和最好阻氦性能的 α -Al₂O₃, 其形成温度高达 1200°C。为了在低温条件下制备出高质量、高稳定性的 Al₂O₃ 阻氦涂层材料,本文开展了 Al₂O₃ 阻氦涂层材料的制备及其性能研究。

本文采用低温等离子体物理气相沉积中的射频(频率 13.56MHz)磁控溅射法制备了 Al₂O₃ 阻氦涂层材料。选用高纯氩气(纯度 99.99%)为载气,所用靶材为烧结 Al₂O₃ 陶瓷靶(纯度 99.99%),靶基距为 8 cm,本底真空优于 7×10⁻⁴ Pa。射频功率、工作气压、气体流量、基片台偏压、溅射时间等工艺参数均可调整。选用抛光不锈钢、p 型单晶 Si 陪片和石英玻璃等作为基底材料,并分别经过认真且严格的处理和清洗,以尽量减小基底对材料的不利影响。溅射时,基底台通过循环水冷系统保持室温。XRD 结果表明,室温下利用射频磁控溅射法制备的 Al₂O₃ 为非晶结构。进一步开展了热退火处理研究。采用 GIXRD、AFM、SEM、TEM 等表征手段研究样品材料的物理结构、表面形貌、均匀性、致密度等物理性质,采用 EDS、XPS、FTIR、Raman 等分析样品材料的元素成分、主要化学基团、热稳定性等,利用椭圆偏测试样品的厚度和折射率,利用 UV-vis 研究材料的透光性。另外,研究了样品材料的硬度、弹性模量、结合强度、抗热冲击性能等热力学特性,并开展

了氢渗透率测试。通过对样品材料的各种表征测试和性能研究，寻找出最优化的制备工艺参数。

关键词：阻氚涂层；Al₂O₃；射频磁控溅射；热力学特性

A03-52

基于第一性原理研究氢在 α -Al₂O₃ 中的溶解和扩散行为

潘新东^{1,2}，李小椿¹，卢焘^{1,2}，徐玉平¹，吕一鸣^{1,2}，周海山¹，罗广南¹

1.中国科学院等离子体物理研究所，合肥 230031，中国

2.中国科学技术大学，合肥 230026，中国

核聚变能作为一种战略能源，是一种最有前途的清洁能源之一，开发聚变能将是我国推动未来发展的一项紧迫任务。作为聚变反应的燃料，氘在聚变堆里的渗透和滞留行为决定了聚变堆的经济性和安全性，阻氘渗透涂层技术是聚变能安全领域关键的科学技术之一。在众多候选材料中， α -Al₂O₃ 由于其较低的氢渗透率成为当前阻氘涂层材料研究的重点。本文采用第一性原理密度泛函理论，系统研究了氢在 α -Al₂O₃ 中的溶解和扩散行为。研究发现，单个氢原子在 α -Al₂O₃ 内部的最稳定存在的位置为由氧离子组成的八面体间隙，且不能在其他间隙位置稳定存在。由于其溶解能（4.0eV）非常高是氢在 W（0.86 eV）中溶解能的 4.7 倍，Mo（0.62 eV）的 6.5 倍，Fe（0.3 eV）的 13.3 倍，所以其在 α -Al₂O₃ 内部的溶解度非常低，这也是 α -Al₂O₃ 阻氘的一个重要原因。氢原子由 α -Al₂O₃ 八面体间隙向其最近邻八面体间隙的扩散激活能为 1.01eV，向其次近邻八面体间隙的扩散激活能为 1.66eV，远高于其在其他金属结构材料，且其单个八面体间隙可容纳多个氢原子，形成团簇，从而阻滞氘在 α -Al₂O₃ 中的渗透。

关键词： α -Al₂O₃；溶解；扩散

A03-53

聚变堆氚工厂的阻氘涂层研究及进展

张桂凯，陈长安，汪小琳

中国工程物理研究院材料研究所

面向 ITER 和 CFETR 应用的公斤级氘循环系统中，除了考虑降低不锈钢材料（SS）的氢/氘渗透扩散外还必须尽可能降低高温条件下氘的环境排放和实现聚变能源堆的氘自持。为此，我国通过国家磁约束聚变能发展研究专项依托国内优势单位部署了阻氘涂层基础问题及工程化技术研发工作。中物院材料研究所近年来为满足工程应用需求开展了较为系统的阻氘材料设计、制备技术和适用于部件级的工艺探索，掌握了在大尺寸不锈钢构件表面制备 Al₂O₃ 阻氘涂层的“室温熔盐电镀+选择氧化”的技术路线和关键工艺参数，经氘/氘渗透性能测试证明了阻氘因子达到 1000@500℃，达到国际领先水平。从理论和实验上研究了 Al₂O₃/SS 体系阻氘渗透的物理机制，阐释了 Al₂O₃ 和 Fe-Al 中及其界面的氢/氘微观行为，初步评估了涂层材料的氘老化效应等系列基础科学问题。最后，结合中国核聚变能源发展的战略目标，针对确定阻氘材料性能满足 CTETR 原型电站运行条件及形成可靠、稳定、工业规模阻氘涂层生产能力的目标，提出了 CTETR 氘工厂中阻氘涂层的总体考虑及挑战。

关键词：聚变堆结构材料；氘渗透；氘安全；阻氘涂层

A03-54

利用离子束技术开展核材料辐照损伤的模拟研究

王志光

中国科学院近代物理研究所，兰州市南昌路 509 号，730000

未来先进核能系统中材料服役的工况条件苛刻，特别是材料处于多物理量（高温、强辐照、应力、腐蚀）的协同作用的环境中，对材料性能提出了很高的要求，不仅要求材料具有好的机械稳定性和热稳定性，还要求材料需要具备好的抗辐照损伤以及抗氢/氢脆化等的的能力。目前已有的材料是否能够适用于未来先进核能系统，成为核材料科学领域悬而未决的问题。对极端条件下核材料中辐照损伤行为的研究成为影响新一代核能系统建设的主要瓶颈之一。

利用强离子（束）可快速模拟极端条件下材料中的粒子辐照损伤行为，非常适合于新一代核能系统的候选结构与功能材料的评价、筛选与新型抗强辐射材料的设计研制，已成为国际学术界的共识。本报告将简要介绍利用强离子（束）模拟中子辐照材料损伤的实验平台、技术，重点举例介绍我们依托兰州重离子加速器国家实验室 HIRFL 装置等建立的比较系统的核能材料评价研究实验平台与技术方法，以及近期针对先进核能系统需求开展的候选材料辐照损伤评价研究与新材料研发的进展。

A03-55

重离子辐照调控单层二硫化钼缺陷状态的应用机理研究

陈燕
华南理工大学

以二硫化钼为代表的过渡金属硫族化合物具有独特的电学、光学、磁学及催化等性质，近来受到了广泛关注。研究发现调控二硫化钼缺陷状态是一种能有效改变 MoS₂ 性能的新方法，但其影响机理仍不清楚。在我们的工作中，我们系统地阐述了晶格缺陷如何影响 MoS₂ 的电子结构和电化学催化活性。我们通过化学气相沉积法 (CVD) 制备出结构和组成可控的单层 MoS₂ 模型系统，并通过不同剂量 (5×10^{11} - 5×10^{13} ions/cm²) 和不同能量 (500eV-6MeV) 的 Au 离子辐照在单层 MoS₂ 中引入缺陷。我们通过拉曼光谱，光致发光光谱，X 射线光电子能谱，扫描隧道显微镜，扫描隧道谱等表征手段阐明了辐照条件对 MoS₂ 缺陷状态 (如缺陷类型和缺陷密度) 的影响。结果表明离子辐照是一种有效调控 MoS₂ 缺陷状态的工具，可以用来改变 MoS₂ 和其他 TMDs 材料的电学，光学和电化学性能。

关键词：离子辐照；辐照效应；薄膜材料

A03-56

基于双参数方法的 Fe-Mn-Cr-Co-Ni 基多主元合金快速设计与制备

郑明杰，丁文艺，曹伟涛，胡深洋，刘少军，黄群英，凤麟核能团队
中国科学院核能安全技术研究所

多主元合金具有优异的抗中子辐照性能和高强韧性、工作温域宽等特性，是先进核能系统有潜力的候选结构材料，如何快速有效地对合金成分进行筛选是多主元合金研究的热点和难点之一。本文利用参数法对多主元合金的成分进行快速筛选，提出一种预测多主元合金固溶性能的双参数方法。

传统的混合焓定义中存在相消效应，我们提出了一种新的参数—焓模和，并基于焓模和定义了两个焓焓竞争参数：焓焓差与焓焓商。相比传统的参数方法，新的双参数法可以更有效地区分易形成固溶体的合金与易相分离的合金。该方法的有效性经过高焓合金、高焓钢、普通钢、非晶合金的文献数据的验证。

为进一步验证双参数方法的有效性，设计了 Fe-Mn-Cr-Co-Ni 基合金，并采用熔炼法制备了 Fe-Mn-Cr-Co-Ni 基的高焓合金和高焓钢样品。TEM、SEM、XRD、和 EBSD 等微结构分析表明：制备的 Fe_{36.2}Mn₁₃Cr_{14.9}Co_{22.4}Ni_{13.5} 和 Fe₅₀Mn_{12.4}Cr_{13.5}Co_{15.4}Ni_{8.7} 形成了稳定的 FCC 固溶体，成分分布均匀，类似于等比例高焓合金 Fe₂₀Mn₂₀Cr₂₀Co₂₀Ni₂₀，达到了设计要求。这表明双参数方法是一种有效的多主元合金设计的快速筛选方法，并可用于指导多种类型的合金成分设计与优化。

关键词：多主元合金；成分设计；快速筛选；双参数方法；固溶体

A03-57

速率理论在核燃料裂变气体行为模拟中的应用

恽迪，谢鑫，张文华
西安交通大学

核燃料在辐照过程中产生的裂变气体会使燃料发生肿胀，这种肿胀在金属燃料中尤为明显，并影响燃料的服役性能。为了优化核燃料的设计并分析和预测燃料的服役性能，模拟计算作为堆内辐照实验的重要辅助手段为研究人员所广泛应用。在对核燃料裂变气体行为的模拟计算方面速率理论作为一种经典方法而被广泛采纳。然而，基于速率理论的裂变气体模型中仍有诸多核心参数带有很大的不确定性。这些核心参数包括裂变气体原子与气泡的扩散系数、裂变气体气泡的形核因子以及气泡的重溶系数等。本文首先简要介绍速率理论在核燃料裂变气体行为的典型应用，继而介绍一种通过分离效应实验推算模型核心参数的思路。本文的模拟计算使用基于有限元方法的多物理场仿真平台 COMSOL Multiphysics，对 Xe 原位离子注入条件下 TEM 薄样品单晶 Mo 中裂变气体、气泡的行为进行模拟计算。模拟得到在 300℃ 的条件下气泡尺寸和数量密度随辐照时间的分布。通过将模拟结果与高纯度的单晶 Mo 薄样品中注入 Xe 离子束的原位透射电镜实验数据进行拟合，推算出裂变气体模型的关键参数。该原位观察实验使用 300keV 能量的 Xe 离子束，离子通量最高达到 4×10^{16} ions/cm²。通过在有物理基础支持为前提下的对裂变气体模型的简化，实现了速率理论模型未知参数个数 (模拟计算自由度) 小于实验结果提供的自由度。因而为速率理论模型的验证提供了较为完备的参考。本文也为进一步研究金属燃料中的裂变气体行为奠定了良好的基础。

关键词：核燃料；燃料肿胀；裂变气体；速率理论；分离效应实验

A03-58

离子束与 TEM 联机设施在材料辐照行为研究中的机遇与挑战

冉广, 王鲁闽, 李宁, 张建, 黄金池, 周哲辉
厦门大学能源学院

堆芯材料服役条件非常苛刻, 需在辐照、高温、腐蚀、受应力、热循环等极端条件下长期稳定工作, 并按可预测的方式老化与失效, 其特殊性体现在辐照效应与辐照催生效应, 难以在非辐照条件下再现。对于在辐照环境中的材料, 建立和验证以第一性原理为基础的科学预测模型, 准确可信地预测材料和系统寿命, 是一个重大基础和应用挑战。由于多数反应堆中子辐照实验和检测只能分开进行, 失去综合性变化的同时原位性, 以及动力学过程和空间分布信息。而与此同时, 现存极少数的中子辐照设施和特殊实验手段, 无法满足对辐照行为进行深入系统研究。

研究表明, 离子辐照与中子辐照在材料辐照中具有很好的对应性, 且离子辐照具有设施广泛, 辐照样品不具有放射性, 辐照时间短(可以短至几十分钟)、费用低, 辐照温度与剂量可以精确控制等特点, 国内外许多研究者采用离子模拟中子辐照研究材料的辐照行为。由于传统的离子辐照后再进行样品微观结构分析的研究方法无法准确观察点缺陷团的形成长大及其与材料中特征微观结构的相互作用过程。因此, 世界上共建立了 10 余套 TEM 与离子加速器相连接设施, 以研究材料在高速离子束辐射时, 通过 TEM 有效地观察其微观结构的变化, 获得辐照过程中显微结构在时间与空间上详实的演变行为与动力学过程。能够对不同温度和应力的辐照条件下, 材料中缺陷团的形成机理进行研究。而多离子束与 TEM 联机设施能够模拟核反应堆中嬗变产物(H 和 He)和裂变产物与位移损伤对材料的叠加效应, 更准确的探索辐照行为与研究辐照机理。

本报告将着重分析离子束与 TEM 联机设施在材料辐照行为研究中的机遇与挑战。同时介绍厦门大学核能研究所正在兴建的三离子束与 TEM 联机设施进展情况。该设施包括: 一台 400 千伏离子注入机, 一台 50 千伏氢、氦同轴离子源, 一台 300 千伏透射电子显微镜和相关联机配套部件。同时 TEM 中配备有拉伸台、热台、压缩台、冷台等, 可以研究辐照场(氢、氦与位移损伤协同效应)、热场、力场等多场耦合效应。预计将在 2018 年下旬兴建成功, 届时将为核工程材料研发、国产化核电材料抗辐照性能检测与评估、辐照损伤机理研究以及核燃料循环和废物终极处理研究等提供帮助。

A03-59

重离子损伤钨中氦行为研究

袁悦¹, 朱秀丽¹, 张颖¹, 程龙¹, 施立群², 吕广宏¹

- 1.北京航空航天大学
- 2.复旦大学现代物理研究所

钨(W)被认为是聚变装置中面对等离子体材料(PFM)的重要候选材料。服役过程中, W-PFM 将受到低能高束流氦等离子体和高能中子的轰击。高能中子辐照将影响等离子体与壁材料的相互作用, 对 PFM 服役性能产生更严峻挑战。本工作中, 我们利用重离子辐照模拟中子辐照对钨材料进行预损伤处理, 利用直线等离子体发生装置模拟聚变低能高束流氦等离子体辐照环境, 研究辐照损伤对钨中氦行为的影响。

研究表明, 损伤钨中氦滞留普遍增加, 但表面氦致起泡现象受等离子体辐照参数影响。高束流(10^{24} D/m²s)氦等离子体辐照下, 损伤钨表面起泡数量相比于无损钨大幅减少, 损伤钨中氦致起泡行为被抑制; 低束流(10^{22} D/m²s)氦等离子体辐照下, 损伤钨表面氦致起泡尺寸变大, 直径超百微米、起泡形核深度接近十微米, 损伤钨中氦致起泡行为加重。弹性反冲探测分析和热脱附谱测试结果表明, 损伤缺陷对氦的强捕获不仅使损伤钨的损伤层氦滞留量增加, 同时增加损伤钨体内氦滞留。这种体内氦滞留增强效应在高束流氦等离子体辐照下抑制损伤钨表面小尺寸泡的形成, 而在低束流氦等离子体辐照下促进损伤钨体内大尺寸泡的形成。

由于钨中氢同位素扩散、捕获、脱附等行为受辐照温度的影响极大, 我们进一步研究了等离子体辐照温度对损伤钨中氦行为的影响。结果显示, 损伤钨中氦滞留及其表面起泡行为有明显的温度依赖关系。随辐照温度升高, 氦浓度下降; 辐照温度为 550 K 时, 表面起泡现象最严重, 氦滞留量最高; 当辐照温度升高至 750 K 时, 表面起泡数量急剧减少, 氦滞留总量急剧下降。辐照温度为 550 K 时, 损伤钨中氦滞留增强效应最强。

本工作阐述了辐照损伤对钨中氦滞留及起泡行为的影响规律, 系统讨论了不同等离子体束流密度及不同辐照温度时损伤钨中氦浓度深度分布、热脱附特性、表面起泡特征, 为评估聚变堆中钨材料的服役性能提供参考。

关键词: 重离子辐照; 钨; 氦行为

A03-60

钨钼合金面向等离子体材料加速器钨自离子辐照初步研究

唐军, 杨晓亮, 陈龙庆, 唐毅, 宋阳一鹏, 邓浩

四川大学

面向等离子体材料 (Plasma Facing Material) 是可控聚变能否实现的关键技术问题之一。面向等离子体材料服役时直接面对高温等离子体, 托卡马克装置中偏滤器 PFM 同时遭受到稳态热冲击 (1000°C 、 $\sim 5\text{-}20\text{ MWm}^{-2}$)、等离子体破裂时瞬态热冲击 ($\sim \text{GWm}^{-2}$)、高能中子轰击 (14 Mev)、低能/高注量率等离子体辐照 ($\sim 10^{22}\text{-}10^{24}\text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$ 、 $<500\text{ eV}$) 等多辐射场协同作用。金属钨的高熔点、低物理溅射率、优良的高温强度, 较低 H 滞留率, 以及良好的等离子体兼容性等诸多优点, 使得全 W-PFM 成功应用在一些托卡马克装置中偏滤器表面, 成为国际热核聚变实验堆 ITER 后续堆型设计中共识。但是由于纯钨的低温脆性和多场辐照性能退化等问题, 需要通过对钨的掺杂合金化/复合材料等手段提高其服役性能。在众多的钨基 PFM 体系中, W-K 合金由于再结晶温度 (RCT) 高和韧脆转变温度 (DBTT) 低, 被认为是最具前景的 PFM 候选材料之一。

本文将汇报利用四川大学引进的荷兰 HVE $2\times 3\text{ Mev}$ 串列静电加速器研究钨钼合金 W 自离子辐照损伤行为。在辐照温度 650°C 、 W^{2+} 注量率 $\sim 10^{14}\text{ ion/cm}^2\cdot\text{h}$ 的条件下, 对 ITER 级纯钨和钨钼合金进行了辐照对比研究。经 SRIM 程序计算, 能量 3 Mev 钨离子的损伤峰位于约 250 nm 位置(投影射程), 单个入射离子在损伤峰位置的损伤率高达 28 dpa/ANG 。通过调节钨离子的注量率和辐照时间控制样品的总辐照剂量。SEM 形貌分析结果表明, 两种样品的晶粒尺寸和辐射诱导相变随着 dpa 剂量 ($<32\text{ dpa}$) 变化不大。但随钨自离子注量增加, 都会产生不同程度的表面损伤, 损伤程度不断增大, 且钨钼合金耐自离子辐照损伤明显优于商业纯钨。我们还探讨了采用不同钨自离子辐照方式以减少模拟中子辐照的失真度。研究结果将对预评估钨基 PFM 的中子辐照损伤具有重要参考价值。

关键词: 钨钼合金; 面向等离子体材料; 加速器; 钨自离子; 辐照损伤

墙展

A03-P01

锆合金在 360°C 含氧水环境中的早期腐蚀行为

刘庆冬¹, 曾奇锋², 张浩¹, 张乐福¹

1. 上海交通大学
2. 上海核工程研究设计院

通过动水循环高压釜回路, 考察了国产新锆合金 SZA-4 ($0.1\sim 0.4\text{ Nb-}0.6\sim 1.0\text{ Sn-Fe-Cr-Ge}$) 和商用 ZIRLO 合金 ($\text{Zr-}1.0\text{ Nb-}1.0\text{ Sn-}0.1\text{ Fe}$) 在含有 $\sim 2.0\text{ ppm}$ 溶解氧的 $360^{\circ}\text{C}/20.0\text{ MPa}$ 高温高压水中的早期腐蚀行为, 用配有 EDS 的 TEM 分析了这两种 Zr 合金基体和腐蚀 30 天后氧化膜的显微组织及成分分布。结果表明, 部分再结晶退火的 SZA-4 合金为完全再结晶晶粒和仅发生回复的等轴晶粒组成的“混晶”组织, 主要含有富 Nb 的 $\text{Zr}(\text{Fe}, \text{Cr})_2$ 相及少量的 Zr_3Fe 相, 而去应力退火的 ZIRLO 合金由均匀分布的短板条晶粒组成, 主要以 $\beta\text{-Nb}$ 和 $\text{Zr}(\text{Nb}, \text{Fe})_2$ 相为主。SZA-4 合金在 DO 环境中的腐蚀增重明显低于商用 ZIRLO 合金, 且随着时间的延长, 增重差异逐渐增加, 即说明 SZA-4 具有较好的耐腐蚀性能。两种合金均由外层疏松的等轴晶和内层致密的柱状晶组成, 未发生腐蚀转折。SZA-4 合金的氧化膜厚度 ($1.0\text{-}1.2\mu\text{m}$) 明显低于 ZIRLO 合金 ($1.3\text{-}2.0\mu\text{m}$), 且含有较少的横向裂纹。横向裂纹可能是样品制备过程中氧化膜内应力快速释放的结果, 体现了不同性质的氧化膜缓解固有应力的能力。SZA-4 和 ZIRLO 合金中的第二相可延迟氧化至氧化膜外层等轴晶区, 均未充分氧化。SZA-4 中的 Cr 能够更好地把 Fe“束缚”在 $\text{Zr}(\text{Fe}, \text{Cr})_2$ 相中发生原位氧化, 而 ZIRLO 合金中的 Fe 在 $\text{Zr}(\text{Nb}, \text{Fe})_2$ 相初始氧化时即迅速扩散至周围氧化膜中, 增加了 Fe 在氧化膜中的浓度。固溶原子 Fe 和 Nb 的不同是造成两种 Zr 合金早期腐蚀增重差异的主要原因。

关键词: 锆合金; 腐蚀; 氧化膜; 溶解氧; 显微组织

A03-P02

受离子辐照材料的纳米压痕硬度分析模型

肖厦子¹, 余龙²

1. 中南大学
2. 北京大学

先进核能系统的研发与核材料力学性能的辐照效应研究密切相关。相比于中子辐照而言, 离子辐照具有辐照源充足、辐照条件可控、实验周期较短以及费用较低等优点, 这使得离子辐照实验在近年来被广泛应用于辐照效应微观机理的研究。由于离子辐照条件下的样品辐照深度通常是有限的, 并且在辐照层内的辐照剂量沿辐照深度呈非均匀的分布。因此, 纳米压痕技术逐渐被广泛应用于受离子辐照材料的宏观力学行为的表征。受离子辐照材料力学性能的纳米压痕研究根据辐照方向和压入方向的空间关系可分为表面纳米压痕和横截面纳米压痕。其中, 表面纳米压痕是指当压入方向与辐照方向平行时, 压头从

受辐照样品的表面压入的情况；而横截面纳米压痕是指当压入方向与辐照方向垂直时，压头从受辐照样品的横截面开始压入的情况，这样影响受辐照材料宏观力学性能表征的因素不仅包括压入深度，同时还包含压头与受辐照样品表面的距离。本文针对这两种纳米压痕的方式，分别建立了相应的硬度分析模型，该模型的核心在于提出了塑性区域内平均缺陷密度的概念，在不同压入深度和压头位置的情况下，考虑缺陷梯度分布和未辐照基底对材料硬度测量的共同影响。通过与不同组实验结果进行比对，我们发现：（1）两种理论模型的结果都与实验数据吻合较好，能够有效验证模型的合理性与可靠性；（2）相对于表面纳米压痕而言，横截面纳米压痕需要更加复杂的样品加工，但是在一定的压入条件下，该方法能够通过硬度的分布情况表征离子辐照的深度。该模型的提出对理解受离子辐照材料的硬化行为提供了良好的理论基础。

关键词：离子辐照；硬度；理论模型

A03-P03

ZrCo 贮氚合金研究进展及应用前景

寇化秦，罗文华，唐涛，黄志勇，桑革，张光辉

中国工程物理研究院材料研究所

氚作为一种宝贵的核聚变燃料，在可控聚变能源以及聚变核武器中具有重要的战略意义和显著的使用价值。由于氚的稀缺性与放射性，在实际使用过程中如何对其实现安全、高效地储存与运输，是氚科学与技术领域重点关注的问题。利用金属氢化物可逆吸/放氢的特性，选择合适的金属或合金可以进行氢同位素（氘、氚、氦）的安全储存、转移、泵输、纯化与捕集。

ZrCo 合金由于具有室温离解压低、吸氢速率快、储氢容量高、非核、低自燃、体积膨胀小等优点，被认为是最有潜力的氚贮存、运输材料。在国际热核实验反应堆（ITER）的概念设计中，也将 ZrCo 合金作为氚核燃料循环系统内氚气气体储存与供给的重点备选材料。为了推动 ZrCo 合金在氚处理技术方面的应用，中国工程物理研究院近年来针对它的抗歧化性能、活化性能、抗杂质中毒性能、氢同位素效应以及相关吸/放氢反应的热力学、动力学性能开展了系统研究，取得了显著进展。本文简要介绍了 ZrCo 贮氚合金的科学研究现状以及相关技术应用，并对 ZrCo 贮氚合金的未来应用前景进行展望。

关键词：贮氚；ZrCo 合金；抗歧化；热力学；动力学

A03-P04

元素改性对 ZrCo 系合金氢化行为的作用机制研究

张光辉，唐涛，桑革

中国工程物理研究院材料研究所

氚的安全处理，储存及运输需要在室温下平衡压尽可能低，以保障放射性氚的吸收完全，尽可能避免氚在转运过程中的进入环境；另一方面，在氚的供给过程，需要氚解吸的温度尽可能低，以避免高温下氚在系统中渗透率增加。因此在 ITER 或 CFETR 等为磁约束聚变堆氚核燃料循环中的 SDS 系统以及氚回收系统中选择合适的贮氚材料，对于可控核聚变堆的发展是极为重要的关键技术之一。前期研究已证实 Ti、Hf 等元素掺杂改性可有效改善 ZrCo 合金的氢致歧化效应。然而 Zr、Ti、Hf 等组元均极易与空气中氧气发生反应生成致密氧化膜，不利于 ZrCo 合金吸氢过程中 H_2 在活性位点的解离，以及向晶格内部的扩散。为研究 Ti、Hf 替代 Zr 对 ZrCo 合金的活化工艺的影响，以及材料表面状态对储氢合金初次吸氢性能的影响，获得元素改性 ZrCo 合金氢化过程微观机制，本工作采用了热场显微镜原位观测结合 *PVT* 测试手段表征 ZrCo 及 Ti/Hf 元素替换改性后合金片材的初次吸氢过程的形貌变化及粉化过程，研究 Ti、Hf 元素掺杂对 ZrCo 合金吸氢（氘）动力学的影响机制。本工作研究了元素改性后具有抗歧化性能的 ZrCo 合金的吸氢动力学的影响，通过原位在线测量的手段获得了 ZrCo 及其改性合金的吸氢动力学及微观形貌变化。Ti 替代 Zr 大幅降低 ZrCo 合金的初次吸氘动力学，形成规整的层片状氢化物结构，有效降低 ZrCo 的氢化过程的粉化效应，其氢化过程符合壳层缩核模型。Hf 替代 Zr 改善 ZrCo 合金的初次吸氘动力学，粉化现象较为严重。Hf 替代 Zr 的 ZrCo 合金基本保持吸放氢动力学与 ZrCo 相同。其氢化过程符合边界进攻模型。

关键词：ZrCo 合金；元素改性；氢化行为

A03-P05

铀铌合金中夹杂物力学性能的纳米压痕表征

陈冬，李瑞文，郎定木，蒙大桥

中国工程物理研究院材料研究所

U-Nb 合金具有高的密度、特殊的核性能以及优异的耐腐蚀性能，可作为潜在的快中子堆用核燃料。Nb 元素主要用于改善 U 材料的耐腐蚀性能。在高温时，U 和 Nb 能完全互溶形成 BCC 结构的 γ 相，从 γ 相区淬火到室温，根据不同的 Nb 含量，

能获得不同结构的亚稳相。当 Nb 含量在 3.8-6.5 wt.% 时, 为单斜结构的 α'' 相。 α'' 相合金具有优异的耐腐蚀性, 在实际使用中倍受关注。Nb 和 U 的熔点和密度相差很大, 冶金过程中需要在高温下长时间保温并借助电磁搅拌使 Nb 均匀溶解在 U 中。虽然高温冶金中常采用带保护涂层的石墨坩埚, 但也很难避免 C 元素对 U 熔体的污染。C 很容易与 U 和 Nb 元素形成碳化物夹杂, 在 U-Nb 合金中主要的夹杂物包括 Nb₂C、U(N, C) 以及少量的 UO₂。

夹杂物的存在会显著降低材料的耐腐蚀性能和力学性能。在氧化和氢化腐蚀过程中夹杂物位置往往是优先形核点, 加速氧化和氢化腐蚀。夹杂物对力学性能的影响主要体现在降低材料的断裂强度和延伸率。一般来说硬的夹杂物倾向于和基体界面分离产生微孔, 而软的夹杂物倾向于自身破裂产生微孔。因此, 有必要对 U-Nb 合金中典型夹杂物的力学性能进行表征, 为 U-Nb 合金断裂过程微孔的形核、长大以及聚集等研究提供支撑。

夹杂物由于尺寸小, 传统的力学性能测量手段如显微硬度等很难对其进行表征。最近二十多年发展起来的纳米压痕技术能很好地满足对夹杂物的力学性能(包括硬度和弹性模量)进行准确的测量。本研究对 U-5.5Nb 合金中典型夹杂物形貌和成分进行了表征, 并采用纳米压痕技术对 Nb₂C 和 U(N, C) 夹杂物以及基体的弹性模量、硬度以及载荷-位移曲线进行了测量, 根据测量获得的硬度值对夹杂物和基体的强度和塑性指数进行了理论计算和讨论。结果表明, Nb₂C 夹杂物表现出最高的弹性模量和硬度, 分别为 246.5GPa 和 24.6GPa, 且容易发生弹性变形, 而 U(N, C) 夹杂物的弹性模量和硬度远低于 Nb₂C 夹杂物, 分别为 153.5GPa 和 4.3GPa, 且容易发生塑性变形。两种夹杂物力学性能的差异导致不同的微孔形核机制。断口附近组织分析表明, Nb₂C 夹杂物在合金断裂过程中更容易和基体发生分离产生微孔形核, 而 U(N, C) 夹杂物更容易发生自身破裂产生微孔形核。以上研究能为 U-Nb 合金断裂行为研究以及合金中夹杂物控制提供实验支撑。

关键词: U-Nb 合金; 夹杂物; 力学性能; 纳米压痕

A03-P06

U-Nb 合金相图构建研究

莫文林¹, 莫川¹, 杜勇², 周鹏³, 张延志¹, 陈向林¹, 张鹏国¹, 唐岳娥¹, 孟宪东¹, 张雷¹, 张昌盛⁴, 夏元华⁴, 柯海波¹, 张德志¹, 法涛¹, 白彬¹, 汪小琳⁵

1. 中国工程物理研究院材料研究所
2. 中南大学
3. 湖南科技大学
4. 中国工程物理研究院核物理与化学研究所
5. 中国工程物理研究院

U-Nb 合金是重要的核工程材料。美国和前苏联都开展过 U-Nb 合金相图的研究, 但是 U-Nb 合金相图仍然存在争议。我国还未开展过 U-Nb 合金实验相图相关的研究。系统研究 U-Nb 合金相图能够解决相组成的差别, 获得更准确的共析点的成分, 指导实际生产。本研究通过平衡合金法、热分析法和高温中子衍射来开展 U-Nb 合金相图的研究。

设计制备了 13 种不同 Nb 含量 U-Nb 合金。对其铸态微观组织观察, 结果显示, 随合金元素 Nb 含量增加, 凝固组织从等轴晶逐渐转变为树枝晶, 并且树枝晶逐渐粗化。结合晶体结构分析, 获得了不同 Nb 含量 U-Nb 合金的凝固序列。

对淬火态微观组织、结构、相成分以及力学性能进行分析, 结果显示, 随 Nb 含量增加, U-Nb 合金晶体结构发生 $\alpha\phi \rightarrow \alpha^2 \rightarrow \alpha^2 + \gamma^0 \rightarrow \gamma^0 \rightarrow \gamma^0 + \gamma_1 \rightarrow \gamma_1 \rightarrow \gamma_1 + \gamma_2$ 的转变; 同时获得了不同 Nb 含量 U-Nb 合金淬火态微观组织、晶格参数、力学性能。在此基础上建立了 U-Nb 合金淬火态亚稳相图。

在相图争议方面, 对淬火态样品分别在 605℃、635℃、655℃、675℃ 进行退火热处理, 通过对退火态样品微观组织、晶体结构和相成分进行分析, 排除了美俄相图相区争议, 富 Nb 端 635-664℃ 温度区间的双相区为 $\alpha + \gamma_1$ 而非 $\beta + \gamma_2$ 。采用 DSC 对零变量反应温度进行测试, 准确测得 $\alpha + \gamma_2 \rightarrow \gamma$ 反应温度为 634.1℃。依据零变量反应温度和 605-675℃ 热处理结果的分析, 准确测定了偏析点的成分为 11.5±0.5at%。

依据最新的实验数据, 利用 CALPHAD 方法对 U-Nb 二元体系进行了重新优化, 获得了我国第一张以实验数据为基础的 U-Nb 合金相图。基于相图, 在 U-Nb 合金成分优化、工艺优化、新型高性能合金设计方面开展了有趣的尝试。

关键词: U-Nb 合金; 相图; 高温中子衍射; CALPHAD

A03-P07

低活化铁素体/马氏体钢晶粒尺寸与碳化物的协同控制及其对性能的影响

陈胜虎, 金晓杰, 戎利建

中国科学院金属研究所

低活化铁素体/马氏体钢具有膨胀系数小、导热性能好、辐照肿胀率低、工艺性能好等优点，被视为四代核能系统和 ADS 系统的主要候选结构材料。但现有铁素体/马氏体钢的高温力学性能（高温强度及蠕变性能）在 550℃ 以上明显降低，且抗液态金属（Pb 或 Pb-Bi）腐蚀性能不理想，限制了铁素体/马氏体钢的使用温度，直接影响到未来反应堆的工作效率。为同步提高铁素体/马氏体钢的高温性能和抗液态金属腐蚀性能，提出晶粒尺寸和碳化物的协同控制思想，通过细化晶粒尺寸来提高抗液态金属腐蚀性能；通过细化碳化物尺寸以及提高碳化物的均匀分布性，来保证细晶结构的稳定性和提高高温力学性能。以回火态 9Cr2WVTa 钢为研究对象，发明了旋转锻压工艺制备超细晶铁素体/马氏体钢的工艺，不仅实现晶粒尺寸的细化，晶粒尺寸~350 nm；而且碳化物尺寸明显减小（尺寸~50nm）、分布均匀，后续退火处理消除变形导致的位错塞积。细晶强化和碳化物的弥散强化可实现强度的提升；同时细小弥散分布的碳化物可改善加工硬化能力、并抑制裂纹的萌生与扩展，提升材料的塑性。基于晶粒尺寸与碳化物的协同控制，使室温拉伸强度和塑性分别提高了近 15%和 33%，550℃ 拉伸强度和塑性分别提高了近 10%和 28%。持久过程中，超细晶铁素体/马氏体钢中细小弥散的碳化物一方面会阻碍晶界迁移，保证了晶粒尺寸的稳定性；另一方面可有效钉扎位错运动，提升临界应力，降低蠕变速率，使 550℃/240MPa 和 550℃/260MPa 下持久寿命提高一倍以上。

粗晶样品和超细晶样品在 650℃ 空气中氧化后的增重结果表明，超细晶样品的氧化速率明显低于粗晶样品，经 500 小时氧化后，粗晶样品的氧化增重是超细晶样品的 3 倍。高温氧化机理研究发现 Mn 在超细晶材料氧化膜的形成过程中起到关键作用，与普遍认为的晶粒细化促进富 Cr 氧化物的形成机理不同，超细晶材料优异的高温氧化性能主要是由于 Mn 的快速扩散促进富 Mn 氧化物的形成，提高了氧化膜的致密性。超细晶样品在 550℃ 含饱和氧浓度的静态 LBE 合金中 500 小时后的结果表明，与粗晶样品相比，超细晶样品的抗 LBE 氧化性能显著优于粗晶样品，氧化膜厚度减少约 1/3，这主要是由于超细晶组织促进了氧扩散区、内层氧化膜/外层氧化膜界面处 Mn 元素的明显富集，以及内层氧化膜/基体之间的氧扩散区内 Cr 的富集程度，提高了氧化膜的致密性。

关键词：低活化铁素体/马氏体钢；超细晶组织；力学性能；高温腐蚀性能

A03-P08

反应堆压力容器内壁面异种金属材料焊接缺陷的修复及力学评价

陈涛^{1,2}，陆文杰¹，陈亮¹，徐晓¹，刘攀^{1,2}，邱振生¹，刘东杰¹

1.深圳中广核工程设计有限公司

2.核电安全监控技术与装备国家重点实验室

某核电站反应堆压力容器制造期间 UT 检测显示，顶盖法兰内壁面堆焊层出现大范围连续焊接缺陷，高度位于密封面不锈堆焊层与低合金钢母材的焊接熔合线附近，环向跨度大于 8°。针对上述缺陷开展了根本原因分析，结合技术现状给出修复方案并展开详细的力学评价，从应力、疲劳和密封角度分析该缺陷对 RPV 性能的影响，论证了该修复方案的可行性。该补焊不锈钢方案已得到制造厂的采纳，可为工程上类似问题的处理提供借鉴。

关键词：异种金属焊缝；焊接缺陷；焊接修复；力学评价；反应堆压力容器

A03-P09

长时间高剂量辐照下不同钨材料氢致起泡研究

刘秘，郭望果，程龙，傅青伟，侯鹏飞，王诗维，尹皓，袁悦，吕广宏

北京航空航天大学，物理科学与核能工程学院，北京市海淀区学院路 37 号，100191

钨（W）作为聚变堆最佳候选材料，在长时间高剂量辐照下，钨中氢将不断聚集起泡生长，导致泡壁的破裂、剥落，这将严重削弱钨材料的性能与污染等离子体核心。因此，长时间高剂量辐照下钨表面氢致起泡问题的研究十分重要。然而，目前长时间高剂量辐照效应的实验数据十分匮乏，有待进一步研究。

本论文采用北航直线等离子体装置 STEP，对多种钨材料在 500K 下进行时长达 30 h 的低能（50 eV）氩等离子辐照，单次剂量最高 2.2×10^{27} D/m²。采用的钨材料种类为：轧制 RD-w（氩沿轧制方向入射）、轧制 ND-w（氩沿垂直于轧制方向入射）、化学气相沉积 CVD-w、1673K 自己制备再结晶 REX-self-w 与 1673K 商业再结晶 REX-com-w。辐照后，采用 SEM 观察形貌、FIB 表征泡腔结构。

30h 与 3h 辐照时间对比，发现五种材料在 30h 辐照下表面起泡尺寸、密度、泡的破裂都不同程度的增加。其中，ND-w 表面起泡严重破裂，泡壁剥落，表面变得疏松；CVD-w 表面起泡从无到有且伴随着晶界开裂；REX-self-w 表面起泡尺寸变大，晶内小泡出现破裂。然而，REX-com-w 表面起泡损伤急剧增加，起泡密度十分大，破裂很严重，起泡的晶粒取向依赖性大大减弱，甚至有晶粒剥落现象。长时间辐照效应表明，钨表面层有不断生成的新缺陷吸收氩成核、聚集、长大成泡，严

重加剧了钨表面起泡损伤程度。

五种材料在长时间辐照下的表面起泡损伤程度大小关系为： $S_{\text{REX-com}} > S_{\text{ND}} > S_{\text{REX-self}} > S_{\text{RD}} > S_{\text{CVD}}$ 。其解释如下：RD-w 中占主导的垂直晶界促进了氦从表层向体内扩散，这减弱了表面晶界氦聚集起泡；与 RD-w 相反，ND-w 中占主导的平行晶界阻碍了氦向体内扩散，加强了氦在表层晶界聚集起泡；CVD-w 因晶粒内缺陷少致密度高，且其柱状晶结构使得平行晶界缺乏，所以表面起泡被严重抑制；REX-com-w 的抗辐照起泡性能远远低于 REX-self-w，原因可能是商业制备时使用了氢气作保护气体而导致晶界结合强度变差，以及再结晶过程不充分也导致了晶粒内缺陷大量残余，严重降低了商业再结晶钨的性能。研究表明，在长时间高剂量辐照下钨表面起泡损伤程度趋于严重；垂直晶界抑制氦聚集起泡，平行晶界促进氦聚集成泡；本论文中的长时间高剂量辐照下晶界方向与缺陷浓度对钨表面起泡的影响机制，可以为聚变堆的材料设计与应用提供参考价值。

关键词：长时间；高剂量；氢致起泡；钨

A03-P10

T91 钢 550 °C 时效初期析出相演变行为研究

胡丽娟，张巧凤，董海英，梁婉怡，林保全，周志浩，谢耀平

上海大学材料科学与工程学院

T91 钢具有良好的高温性能、抗氧化性能、焊接性能以及成本较低等特点，从而成为电站过热器及主蒸汽管道主要材料。T91 钢的高温蠕变以及疲劳性能已有大量研究，而对其时效初期显微组织及力学性能变化的研究较少。为了研究时效初期 T91 钢析出相变化以及因显微组织变化影响 T91 钢力学性能的规律，本文采用 Thermal-Calc 软件、金相显微镜、透射电子显微镜和显微硬度仪等试验设备，研究了 T91 钢经 1050 °C 固溶处理及 550 °C 时效不同时间后显微组织及力学性能的变化。结果表明，时效初期，随着时效时间的延长，析出相的尺寸增大且数量增多，马氏体发生回复，亚晶界合并粗化，导致 T91 钢的硬度下降；时效后的 T91 钢，其析出相尺寸细小、种类较多。MX 型析出相主要在晶界和基体内析出，随着时效时间的延长其尺寸变化不大； M_2X 型析出相呈针状，属于亚稳相，主要在时效早期析出； $M_{23}C_6$ 碳化物呈“包夹”式结构，富 Fe、Cr、V、Ti 等元素，随着时效时间的延长其尺寸增大，中间贫 Cr、Fe 元素区域缩小，形状逐渐由椭圆形变成圆形。

关键词：T91 钢；时效初期；析出相；微观组织；力学性能

A03-P11

纳米碳化硅弥散强化镍基复合材料的显微结构及性能研究

杨超¹，Ondrej Muransky²，Tao Wei²，Hanliang Zhu²，黄鹤飞¹，周兴泰¹

1.中国科学院上海应用物理研究所

2.澳大利亚核科学与技术组织

本文论述了利用高能球磨、放电等离子体烧结、高温退火等工艺，成功制备了新型纳米碳化硅弥散强化镍基复合材料以满足熔盐堆内小型结构件的需求。通过高分辨中子衍射 (HRND)、电子背散射衍射 (EBSD)、扫描电镜术 (SEM)、透射电镜术 (TEM) 以及电子显微探针分析 (EMPA) 等技术对该系列复合材料进行了显微结构表征，较为系统地研究了该材料的机械性能，抗氢脆性能以及抗氟化盐腐蚀性能。研究发现，纳米碳化硅颗粒均匀弥散在镍基体中，并大幅提高材料的强度。通过调整纳米碳化硅颗粒的初始添加量以及改变球磨和退火等工艺，可以显著优化材料的机械性能。进一步研究发现，在混合粉中添加 16wt.% 的钼粉后，钼原子在烧结过程中固溶于镍基体中，提高材料抗氟化盐腐蚀的同时形成固溶强化，该强化作用随着纳米碳化硅颗粒初始添加量的增加而降低；与此同时，烧结和高温退火后基体中会形成 Ni_3Si 纳米析出相，这些纳米析出相和未反应的纳米碳化硅颗粒形成弥散-沉淀强化，从而大幅提高材料的力学强度；烧结过程中，部分纳米碳化硅颗粒会和钼反应生成 Mo_2C 颗粒，阻碍基体晶粒在高温下长大，从而增强晶界强化作用。此外，该颗粒与基体的界面大量吸附氢，从而大幅抑制了基体中氢泡的生成和长大，减小了氢脆和肿胀对材料性能的影响。该新型弥散强化镍基复合材料的成功制备为未来高温熔盐堆的结构材料的研发提供了新的思路。

关键词：金属基复合材料；粉末冶金；熔盐堆；结构材料

A03-P12

金属铀固/液界面能分子动力学计算

胡贵超¹，唐清富¹，郭军¹，马荣¹，徐贵²，罗超¹

1.中国工程物理研究院材料研究所

2.清华大学材料学院

金属铀由于其高密度和核性能在核工业中得到了广泛的关注,关注点为材料的综合力学性能与抗腐蚀性能。材料的性能取决于材料的显微组织形貌,如晶粒度,相组成,位错与缺陷等因素,而凝固过程或结晶过程是微观组织形成的初始步,彻底的理解固液共存体系的物理过程有益于掌握材料微观组织控制机理。本文采用了经典形核法(CNT)计算了金属铀固液界面能大小,界面扰动法(CFM)计算了金属铀固液界面能及其各向异性,期望借此能加深金属铀的凝固过程的认识。经典形核法计算的固液界面能结果为 $\gamma_0=77.23\text{mJ/m}^2$,界面扰动法计算结果为 $\gamma_0=85.65\text{mJ/m}^2$,各向异性参数为 $e_1=2.40\%$, $e_2=0.39\%$,两种方法的计算结果比较接近,由于缺乏实验数据,采用 Turnbull 经验公式估算值 83.87mJ/m^2 与计算结果进行了对比,估算值与计算结果吻合较好。

关键词:铀;分子动力学模拟;经典形核法;界面扰动法;固液界面能;各向异性

A03-P13

晶粒尺寸影响 Ni-Mo-Cr 基高温合金抗碲脆能力的研究

蒋力¹,李志军¹,符彩涛²

1.中国科学院上海应用物理研究所

2.上海理工大学

Ni-Mo-Cr 基高温合金具有优异的抗熔盐腐蚀能力和高温强度,是熔盐堆首选的结构材料。但是该合金在熔盐试验堆中服役后表面出现开裂,严重威胁熔盐堆的服役安全和商业化前景。根据前期研究,服役过程中产生的裂变产物碲(Te)会沿着合金晶界扩散并弱化晶界强度进而导致开裂,称之为碲脆。由于晶界在碲脆现象中起到主导作用,晶粒尺寸的影响不容忽视,但目前缺乏系统研究。本课题以粗晶和细晶两种组织形态的 Ni-Mo-Cr 基高温合金为研究对象,对其进行高温渗 Te 实验,采用 SEM、FIB-TEM、EPMA 等手段表征其表面腐蚀产物组成和沿晶 Te 扩散行为。结果表明,表面腐蚀产物分为三层,外层主要包含 Ni₃Te₂ 和 Cr₃Te₄,中间层和内层包含 Ni₃Te₂, M₆C 碳化物,富 Fe 基体相和以及少量的 Cr₃Te₄ 和 MnTe。细晶样品的外层更厚,而内层为不连续的岛状分布;而粗晶的外层较薄,内层连续分布,且有针状 M₆C 碳化物向基体内部延伸,同时 Te 沿晶扩散的深度也比细晶样品要深。对两组样品进行拉伸测试后发现,细晶样品力学性能的降幅较低。上述现象说明,细晶材料更抗碲脆。基于热力学和动力学扩散数据分析发现,细晶材料中高密度晶界提供了 Ni 和 Cr 外扩散通道,促进了外层腐蚀产物的形成,对 Te 的内扩散起到阻遏作用,进而抑制了内层腐蚀产物的形成和 Te 的沿晶扩散,起到了抗碲脆的效果。

A03-P14

离子辐照核与电子能损间耦合作用机理

刘鹏,刘泳,王雪林

山东大学

离子辐照核与电子能损作用过程及其诱导辐照效应,是离子与固体相互作用、材料辐照效应等领域一个基础科学问题。对该问题的系统研究与理论阐述,是明晰各类传统与新型、结构与功能材料在辐照环境下微观损伤与宏观性能演变机制的基础。目前,实验上基于 RBS/channeling、TEM 及 XRD 等结构表征技术,理论上基于 disorder accumulation、inelastic thermal spike 等物理模型及 DL_POLY 等分子动力学模拟,离子辐照核能损与电子能损过程,所分别诱导损伤效应的物理机制已较为清晰。本工作主要采用低能与高能离子辐照晶体材料,以上述实验技术与理论模型为基础,分析核能损诱导离位损伤、电子能损诱导热峰响应、以及两者间耦合诱导损伤演变行为等;通过对核核间弹性碰撞、核与电子间非弹性碰撞诱导晶格温度演变等辐照基本作用过程的讨论,分析核能损与电子能损间产生显著耦合作用的机理,即电子能损所沉积能量将通过电子-电子、电子-声子耦合,诱导晶格热振动加剧,局域温度升高:(1)如若电子能损较低,热峰响应强度较弱,局域温度升高不足以超过熔点,因而不足以诱导熔融相形成,此时核能损产生的离位损伤发生再结晶,损伤降低;(2)核能损产生的离位损伤,将散射电子与声子从而使材料热导率降低,还将降低电子-声子平均自由程从而使电子-声子耦合系数增加,离位损伤如同“种子”,有效提升材料在电子能损作用下热峰响应强度,此时温度升高更为显著,损伤增加。

关键词:离子辐照;能损过程;耦合机理;损伤演变

A03-P15

注 C+H₂⁺离子的单晶 6H-SiC 退火后的表面形貌和微观组织研究

叶超¹,周韦²,冉广¹,冯琦杰²

1.厦门大学

2.中国工程物理研究院核物理与化学研究所

SiC 因其具有低的热膨胀系数, 稳定的化学性质, 低的热中子吸收截面, 良好的抗辐照性能, 常作为核反应堆的燃料包壳和结构材料。但其服役环境苛刻, 不仅遭受中子辐照产生位移损伤, 而且还遭受高温作用等。本研究采用 GIXRD, SEM 和 TEM 观察了注 C^+ 和 H_2^+ 离子并退火后的偏离 $[0001]$ 轴 4° 取向的单晶 6H-SiC 的表面形貌和截面微观组织。研究表明, 退火后单注 C^+ 离子的样品表面出现了裂纹, 而在单注 H_2^+ 离子的样品表面则呈圆簇形分布的气泡, 且退火温度影响注 C^+ 离子 SiC 的裂纹形核位置。900°C 退火时裂纹从表面形核后向内部扩展, 归因于高碳浓度和高辐照损伤造成的迟滞效应。而在 1200°C 退火时, 裂纹从入射的碳浓度峰值处形核后向两侧扩展, 归因于高温退火消除了高碳浓度和高辐照损伤造成的迟滞效应, 并且作为本征元素 C 间隙原子快速与辐照诱导形成的空位复合, 加速重结晶进程。与注单一离子不同, 在 C^+ 和 H_2^+ 联合注入的样品表面观察到气泡和剥落, 且其分布与形态特征比仅注 H_2^+ 离子的样品情况杂乱, 这归因于辐照损伤超过 1dpa 时 SiC 发生非晶化, 而在退火过程中, 辐照层 SiC 发生重结晶形成了随机分布的柱状晶体, 其晶界作为氢和空位迁移通道, 在退火过程中影响了表面气泡和剥落的尺寸和分布特征。同时, 本研究对比分析了辐照退火样品的截面微观组织特征, 深入讨论了相应机制并提出了模型。

关键词: 碳化硅; 离子辐照; 表面形貌; 微观结构; 燃料包壳

A03-P16

Mn 对含 Cu 钢析出强化过程的影响

李彤, 刘文庆

上海大学宝山校区微结构重点实验室

将 Fe-Cu 和 Fe-Cu-Mn 两种钢在 900°C 固溶 2h 后水淬, 在 450°C 时效不同的时间, 测量它们的显微硬度和拉伸性能, 用原子探针层析技术(APT)观察两种钢中富 Cu 相的析出规律, 研究 Mn 影响力学性能的机理。结果显示, Fe-Cu-Mn 钢达到硬度峰值所需时间比 Fe-Cu 钢短; 时效峰值处较淬火态的屈服强度、抗拉强度的增量均低于 Fe-Cu 钢, 延伸率明显提高。APT 结果显示, 时效早期, Fe-Cu-Mn 钢中富 Cu 相数量密度高于 Fe-Cu 钢; 时效中后期, Fe-Cu-Mn 钢中富 Cu 相尺寸明显大于 Fe-Cu 钢, 数量密度明显低于 Fe-Cu 钢, 这表明 Mn 元素的添加提高了富 Cu 相的形核率, 加快了富 Cu 相的长大速度, 从而缩短了析出强化的进程。

关键词: 时效; 析出强化; 富 Cu 相; Mn 元素

A03-P17

化学势对锆表面初始氧化的影响

谢耀平¹, 张海辉¹, 姚美意¹, 许竞翔², 张金龙¹, 胡丽娟¹

1.上海大学

2.上海海洋大学

锆合金是核燃料包壳材料, 提高锆合金耐腐蚀性能是核材料研究领域的重要课题, 锆合金腐蚀机理的研究至关重要。锆合金腐蚀初始氧化行为对整个腐蚀过程有着重要意义, 我们利用密度泛函理论揭示了微观吸附性质与宏观初始氧化之间的关系。为了反应实际情况下 Zr 表面的初始氧化, 我们结合第一性原理计算和热力学计算得到了不同化学势下氧原子在锆表面的吸附性质, 经过系统分析, 可以从热力学上解释了室温富氧条件下锆棱柱面比起基面氧化速度更快。锆合金实际服役环境通常很复杂, 由于服役环境不同, 氧化化学势也通常不一样。探索如何预测不同化学势下的锆表面性质对进一步研究锆的耐腐蚀性能也有着重要意义, 而表面吸附是锆表面最基本的化学性质。因此, 我们系统研究了化学势、覆盖度等因素对锆表面吸附性质的影响, 揭示了不同化学势下 Zr 表面的吸附性质, 探讨了锆表面微观表面吸附性质与宏观的初始氧化规律的关联。本研究工作为进一步采用集成计算方法揭示锆合金腐蚀机理和预测不同化学环境中的锆合金耐腐蚀性能打下了基础。

A03-P18

事故容错热导率增强型 UO_2/Mo 核燃料芯块的 SPS 制备与热物理性能研究

程亮¹, 张鹏程¹, 高瑞¹, 杨振亮¹, 李冰清¹, 褚明福¹, 刘彤², 黄华伟², 刘朋闯¹, 严彪杰¹

1.中国工程物理研究院材料研究所

2.中广核研究院有限公司

UO_2/Mo 核燃料为当前事故容错核燃料的候选燃料体系。应用放电等离子体烧结技术, 制备了含不同体积分数钼 (2%、5%、10%、15%) 的 UO_2/Mo 燃料芯块, 实现了钼在 UO_2 基体中的连续网状分布。采用激光共聚焦显微镜 (LSCM)、聚焦离子束显微镜 (FIB)、高分辨透射电子显微镜 (HRTEM) 等对 UO_2/Mo 核燃料样品进行微观结构表征; 激光导热系数测量

仪和热膨胀仪对样品的热物理性能进行测试。结果表明， UO_2/Mo 相界面未发现 $U_xMo_yO_z$ 相，相界面存在约 20nm 的扩散层；添加钼可显著提高 UO_2 的热导率，相较于纯 UO_2 提高 38%~48% (400°C-600°C)，同时钼的添加可以有效降低 UO_2 的热膨胀系数，相较于纯 UO_2 降低 4%~15%。随钼添加量的增加， UO_2 基体出现微裂纹，微裂纹程度随钼含量增加而增强，一定程度制约了 UO_2 热物理性能的提升空间。研究结果对分析 UO_2/Mo 燃料体系在反应堆中的应用设计和前景具有重要意义。
关键词：事故容错核燃料；二氧化铀；钼；放电等离子体烧结；热物理性能

A03-P19

多晶钨表面的氦离子束辐照肿胀研究

蒙萱，赵江涛

兰州大学核科学与技术学院

钨基材料由于具有高熔点，抗热负荷以及低溅射率和低氦同位素滞留量等优点被选为国际热核实验堆(ITER)偏滤器的候选材料。在聚变堆运行过程中，钨材料不仅要经受长时间、高通量的中子、氦同位素和氦离子等的辐照。这不但影响了钨材料的力学性能，而且离子溅射剥落的碎片进入等离子体环境，会减弱等离子体稳定性。因此，壁材料中氦离子的行为，尤其是它的沉积和释放行为，及其与材料辐照损伤的相互关系是核材料研究领域的重要课题之一。本论文采用离子注入和透射电子显微镜观测的方法对氦泡在金属钨表面的行为进行了实验研究，为聚变堆第一壁材料的研发提供一定的实验依据。本研究采用电解抛光的方法制备制备高纯钨样品，利用低能(18 keV)强流(10~100 μAcm^{-2})氦离子束辐照以模拟反应堆中的辐射场情况，采用 AFM 跟扫描电镜对不同注入条件的钨样品进行观察表征，分析 W 材料表面肿胀等微观结构形成与注入条件的相关性。

A03-P20

注氦纯铝拉伸过程中裂纹尖端区域氦泡的演变

陈浩¹，王刚¹，程扬名²，彭剑超³，梁雪³，胡丽娟¹，刘文庆¹

1.上海大学材料科学与工程学院材料研究所

2.中国科学院上海微系统与信息技术研究所

3.上海大学微结构重点实验室

金属以及合金中的氦泡是一种典型的辐照缺陷，在成核生长过程中呈现复杂的演变特征，而以往少有关于应力条件下氦泡动态演变行为的研究。本工作将抛光后的高纯铝在 450 °C 进行氦离子注入，注入能量为 500 keV，注入剂量为 3×10^{20} ions/m²，利用聚焦离子束技术切制微拉伸样品，在透射电子显微镜中进行原位拉伸试验，探究裂纹形成过程中氦泡的动态演变行为和机理。结果表明：拉伸变形前，距样品表面一定的深度范围内分布有数量密集的氦泡。拉伸过程中，随着裂纹的形成并扩展，其尖端区域氦泡的尺寸明显增大，而氦泡的密度显著下降，这是由于高度集中的应力引起了氦原子与空位的扩散，促进了氦泡的合并长大。长大过程中，氦泡的尺寸最终会达到稳定值，而后进一步的拉伸导致氦泡逐渐变形。此外，在裂纹尖端区域，部分合并形成的氦泡的形状从椭球形逐渐转变为球形，归因于表面能的驱动下氦原子以表面扩散的方式引起氦泡形态的改变。
关键词：氦泡；原位拉伸；应力；扩散；长大

A03-P21

晶体塑性有限元在多晶锆辐照硬化模拟中的应用

夏圣旭，朱雪燕

北京应用物理与计算数学

辐照硬化是核材料常见的一种辐照损伤形式。燃料棒锆包壳受辐照后内部生成的位错环对位错的滑移起阻碍作用，从而导致屈服应力和流动应力的提高。而早期应力水平的提高是以晚期材料延展性下降为代价的，因此辐照硬化的分析计算对于评估核材料的服役性能具有重要的意义。本报告采用晶体塑性有限元模型对受辐照后多晶锆进行了模拟：首先利用单晶锆的实验数据对锆的相关形变参数进行了标定，然后利用晶粒生成网格结构对多晶锆的大变形进行计算模拟，通过使用 DBH (Dispersed Barrier Hardening) 模型修正滑移系的临界

关键词：锆、辐照硬化、包壳、晶体塑性有限元

A03-P22

Nb 含量对 Zr-0.2Cu-xNb 合金显微组织的影响

王杰亿，李强，连奥杰，梁雪，彭剑超

对 Zr-0.2Cu-xNb ($x=0.2, 0.5, 1.0, 2.5$) 合金进行真空 β 相油淬、冷轧变形及 580°C/5 h 退火处理, 利用透射电子显微镜和扫描电子显微镜研究了 Nb 含量对合金显微组织的影响。结果显示, 随着 Nb 含量的增加, Zr-0.2Cu-xNb 合金中第二相的数量逐渐增多, 平均尺寸逐渐增大, 合金再结晶程度降低。当 Nb 含量低于其在 α -Zr 中的最大固溶度(0.6 wt%)时, 合金中第二相主要是 100~350 nm 大小的 Zr₂Cu 相; 在 Zr-0.2Cu-0.2Nb 合金中, 部分 Nb 和杂质元素 Fe 形成密排六方结构的 Zr(Nb, Fe)₂ 相, 致使 α -Zr 中 Nb 元素的固溶含量更低; Zr-0.2Cu-0.5Nb 合金中的 Nb 添加量虽然低于其在 α -Zr 中的最大固溶含量, 但合金中仍有少量 β -Nb 第二相析出。当 Nb 含量高于其在 α -Zr 中的最大固溶度时(Zr-0.2Cu-1.0Nb 和 Zr-0.2Cu-2.5Nb 合金), 合金中形成了尺寸较大的三角形、长棒状等不规则形状的 β -Zr 第二相, 此时微量的杂质 Fe、Cr 元素偏聚在 β -Zr 中; 除此之外, 在合金中还观察到了尺寸较小的 β -Nb 第二相, 而只有少量的 Cu 以 Zr₂Cu 第二相形式析出, 说明 Nb 含量的增多会抑制 Cu 的析出。

关键词: 锆合金; 显微组织; 第二相; 透射电子显微镜

A03-P23

离子束辐照 Fe、Ni 基金属玻璃的损伤研究

梅显秀, 张小楠, 王友年

大连理工大学

聚变装置中材料的辐照损伤问题是阻碍核聚变装置成功运行的因素之一。聚变堆中的高能中子辐照、He 粒子、质子等等等离子体辐照以及高热负荷, 会引起材料肿胀、起泡、氦滞留、脆化、开裂等恶化行为, 影响聚变堆的运行。因而需要寻找合适的耐辐照材料。由于金属玻璃具有短程有序、长程无序的亚稳态结构, 这种固有的无序结构以及其中存在的大量的自由体积, 金属玻璃被认为是能够抵抗辐照损伤的, 有可能成为耐辐照候选材料。我们课题组采用高能 He 离子以及质子辐照来模拟中子辐照环境, He 离子与质子也是聚变堆中等离子体辐照环境中的粒子; 同时我们采用具有瞬态高热负荷的强流脉冲离子束来模拟聚变环境中的热辐照, 通过这些模拟辐照手段来考量金属玻璃 Fe₈₀Si_{7.43}B_{12.57}、Ni₆₂Ta₃₈ 的耐辐照性能, 以金属 W 作为参考, 评估金属玻璃应用于聚变环境中的可能性。

300keV 的 He²⁺辐照后, Fe 基金属玻璃在剂量达到 4×10^{17} ions/cm² 时发生晶化, 随着剂量的增加, 其出现 β -Mn 型相 \rightarrow α -Fe 相和四方结构的 Fe₂B 相 \rightarrow 立方结构的 Fe₃B 相和 β -Mn 型相的晶化序列; 剂量达到 1.6×10^{18} ions/cm² 时, Ni 基金属玻璃中出现了 u-NiTa 相和 Ni₂Ta 相纳米晶。两种金属玻璃在剂量为 1×10^{18} ions/cm² 时依然保持表面平整, 而金属 W 的表面发生了起皮剥落。金属玻璃的抗 He²⁺辐照性能好于金属。

250keV 的 H⁺辐照后, 剂量达到 1×10^{18} ions/cm² 时 Fe、Ni 基金属玻璃均主要保持非晶态, 表面形貌没有明显的辐照损伤迹象。金属 W 在剂量达到 1×10^{18} ions/cm² 时表面出现了起泡损伤, 泡盖厚度约为 H⁺在金属 W 中的离子射程。Fe、Ni 基金属玻璃耐 H⁺辐照性好于金属 W, 其中 Ni 基金属玻璃优于 Fe 基金属玻璃。

能量密度为 0.32J/cm², 脉冲次数为 300 次的 HIPIB 辐照后, Fe 基和 Ni 基金属玻璃仍然保持非晶结构, 其表面出现大量的圆形孔洞及少量的“凸点”, 没有出现裂纹等辐照损伤。而在 100 次辐照后钨表面就出现了裂纹。Fe、Ni 基金属玻璃对强流脉冲离子束辐照时产生强的热应力的缓冲能力比金属钨好。

通过高能 He 离子、质子以及强流脉冲离子束辐照, 可以得出 Fe、Ni 基金属玻璃较传统耐辐照材料金属 W 有着更好的耐辐照性能。

关键词: 离子辐照; 金属玻璃; 辐照损伤

A03-P24

表面纳米化对单晶 (111) 钨中氦行为的影响

马玉田¹, 刘俊标¹, 韩立¹, 田利丰², 王学聪²

1.中国科学院电工研究所

2.中国科学院理化技术研究所

钨作为托卡马克装置最有前途的面对等离子体材料之一, 然而在聚变等离子体环境中高通量氦粒子轰击下, 会导致钨起泡及脆化问题, 这是制约钨作为等离子体材料应用的重要方面。采用单晶钨及其表面纳米化是提高钨抗氦辐照性能的方法之一。本文选用单晶 (111) 钨, 采用氦离子显微镜的超高精度的纳米加工能力在钨表面构建纳米结构图形, 实现钨表面纳米化。在此基础上采用氦离子显微镜的离子注入能力对进行氦辐照实验, 并借助氦离子显微镜对单晶 (111) 钨表面进行辐照

前后微观形貌分析。实验结果表明，表面纳米化抑制了氢泡在单晶（111）钨中的形成，提高了抗氢脆能力。

关键词：托卡马克；单晶钨；氦离子显微镜；表面纳米化

A03-P25

不同冷速金属铀的氢腐蚀行为差异及影响因素研究

纪和菲，史鹏，汪小琳

中国工程物理研究院材料研究所

金属铀在核工业中具有重要应用，其化学性质非常活泼，极易被环境气氛（如氧气、氢气和水汽）腐蚀，其中铀的氢腐蚀产物 UH_3 粉末在氧化环境中产生放射性污染且可能自燃，铀氢腐蚀具有点蚀特性，腐蚀坑会破坏材料表面完整性，导致材料力学性能的降低。因此，开展铀氢相互作用机制的研究对工程上解决铀氢腐蚀问题具有重要意义，但目前国内外研究人员对铀氢相互作用机制及其影响因素尚未达成共识。本研究工作从组织结构和应力分布对铀氢腐蚀的影响角度出发，开展不同冷速金属铀的组织结构与氢腐蚀行为相关性研究，获得不同组织结构和应力状态金属铀的氢腐蚀影响机制。

将金属铀样片（尺寸 $5 \times 3 \times 2.5 \text{mm}^3$ ）在 γ 相温区热处理 1h 后分别进行水淬和随炉冷却处理，利用 SEM、XRD、EBSD、RSND 等对样品组织结构和应力分布进行分析表征。两种状态样品在相同条件下：100kPa H_2 气氛，温度 100°C 进行氢化反应，之后对反应样品进行分析表征，获得相关结论如下：

（1）冷却速率不同导致材料组织结构和应力分布具有显著差异。在冷却过程中，材料内部会产生较大内应力。对于水淬试样，主要通过材料内部短时间内迅速产生大量亚晶粒和孪生变形来释放内应力；对于炉冷试样，冷却时间充分使得材料内部主要通过滑移方式释放应力，但水淬试样中的残余应力仍大于炉冷试样；

（2）氢化试验结果表明铀氢反应为一级反应，此外，两种试样的氢腐蚀行为具有很大不同，主要表现在：水淬试样形核点少，氢消耗速率慢，反应倾向于材料内部，即每个腐蚀坑具有较大的容深比；炉冷试样形核点较多，且形核速率较快，氢消耗速率相对较快，氢化区域趋于在表面向周围扩张，每个腐蚀坑的容深比较小。水淬试样腐蚀坑周围的形变孪晶上出现密集的氢化形核点，而炉冷试样则未出现这一现象，这些都与材料的组织结构和应力分布密切相关；

（3）水淬试样内部较大的拉应力和大量亚晶粒结构的协同作用导致氢腐蚀易向着材料内部延伸，其中亚结构界面为反应提供位点和扩散通道，拉应力促进腐蚀的发生，形成了深度/直径比值较大的腐蚀坑，这对材料性能的危害更加严重；由于形成氢化物体积膨胀，较深腐蚀坑内体积膨胀仍然会产生较大应力，若应力不能及时释放则会作用到周围基体上，当作用在形变孪晶上时，由于氢化形核也易发生在孪晶部位，则孪晶和应力的协同作用会导致数目较多、较密集的氢化形核点的产生。

关键词：铀；氢腐蚀；组织结构；应力；协同作用

A03-P26

前处理工艺对金属铍阳极氧化膜性能的影响

李文鹏¹，张锐²，何世雄¹，熊雪峰¹

1.中国工程物理研究院材料研究所

2.中国航天科技集团公司第九研究院十六研究所

为满足金属铍的电绝缘性能和防腐蚀性性能等要求，本文采用碱性电解液体系，通过阳极氧化的方法在金属铍表面制备了阳极氧化膜。通过金相显微形貌分析（OM）、点滴实验、热震考核及电绝缘性能检测等方法，考察了前处理工艺对阳极氧化膜性能的影响，研究表明：与未进行前处理的阳极氧化工艺相比，采用弱碱除油结合铬酸除膜的前处理工艺，阳极氧化后可以获得光整致密、结合力良好且表面无机械划痕的膜层，同时，膜层绝缘电阻提高了 4~5 倍（ $\geq 400 \text{M}\Omega/250\text{V}$ ），且表现出更优异的耐 CuSO_4 溶液腐蚀的能力（ $> 15 \text{min}$ ）。

关键词：铍；前处理工艺；阳极氧化

A03-P27

一种可用于中子-伽马射线分辨的有机塑料闪烁体的制备及性能研究

陈妹帆，樊龙，方瑜，罗炫，张庆军，杨瑞慧，黄传群

中国工程物理研究院激光聚变研究中心

通过原位聚合的方式，制备得到以聚甲基苯乙烯（PVT）为基质，不同浓度（1 wt%、3 wt%、5 wt%、10 wt%、15 wt%、20 wt%、25 wt%）的 2, 5-二苯基噁唑（PPO）为闪烁物质、9, 10-二苯基蒽（DPA）为第二闪烁物质的塑料闪烁体。利用瞬态荧光分析仪、单光子技术以及辐射源激发配合光电转换器等测试设备对有机塑料闪烁体的闪烁性能进行了分析表征。结果

表明, 有机塑料闪烁体的荧光衰减时间均在纳秒量级。随着 PPO 含量增加, 闪烁体的光产额下降, 原因在于随着浓度增加, 闪烁物质之间会发生聚集导致荧光猝灭效应增加。3 wt% PPO 含量的有机塑料闪烁体光产额与商用 BC-408 有机塑料闪烁体的光产额相当。20 wt% PPO 含量的有机塑料闪烁体已初步实现中子-伽马射线的分辨。

关键词: 有机塑料闪烁体; 光产额; 中子; 伽马射线; 2,5-二苯基噁唑

A03-P28

基于 DIC 方法研究弧半径对石墨构件失效的影响

张灿, 高彦涛

中国科学院上海应用物理研究所

为了减少熔盐浸渗, 熔盐堆使用超细颗粒石墨为堆芯反射体和慢化体材料。超细颗粒石墨具有断裂韧性较低的特点, 为了减少石墨构件的应力集中, 采用数字图像相关技术 (DIC) 研究了不同弧半径石墨构件对使用载荷的影响。结果表明, 弧半径从 0 到 20mm 之间, 石墨构件失效载荷随弧度半径增加而增加, 其中弧度半径 5mm 以上, 石墨失效载荷趋于稳定, 且石墨失效主要发生在弧度端部。采用数字图像相关技术, 研究石墨构件应变图, 结果表明, 石墨构件弯曲失效主要不是因为拉伸失效或压缩失效, 而是弧度端部应力集中造成的。因此, 适当提高堆芯石墨构件弧度半径, 有利于消除弧度端部应力集中, 提高石墨堆芯的结构稳定性。

关键词: 核石墨, 熔盐堆, DIC, 应力集中

A03-P29

氢在钨空位团簇中聚集行为的第一原理研究

任庆远, 李宇浩, 周洪波

北京航空航天大学

钨被认为是未来聚变堆最有希望全面应用的壁材料。但在聚变服役条件下, 钨基壁材料将遭受低能大束流的氢等离子体辐照, 诱发材料表面的氢致起泡现象, 产生钨杂质引起等离子体熄灭, 直接导致聚变反应无法进行。因此, 揭示钨中氢泡形成机理并给出控制氢致起泡的有效方法已成聚变堆金属材料的研究热点之一。现有研究表明, 材料中空位、晶界、位错等缺陷是材料中氢泡形成的主要区域, 空位型缺陷对氢具有强烈的捕获作用。目前, 已对氢在钨单空位中的溶解、扩散和聚集行为进行了系统研究, 单个氢在空位中的溶解能远低于本征钨, 室温下单空位可捕获 6 个氢原子。但是, 实际情况下材料中的空位型缺陷大多为空位团簇而非单空位。因此, 弄清氢在空位团簇中的聚集行为对于揭示氢泡的形成机理至关重要。

我们采用第一原理方法系统研究了氢在钨空位团簇中的溶解和聚集行为。研究发现, 与单空位相比, 空位团簇对氢具有更强的捕陷作用, 且其捕陷能力将随团簇尺寸的增大而增强。例如, 单个氢原子在 9 空位团簇中的捕陷能是 1.8 eV, 比其在单空位中的捕陷能高 ~ 53 %, 这与空位中氢-钨之间的相互作用密切相关。通过原子结构和态密度分析发现, 氢与空位团簇周围的钨原子具有很强的相互作用, 且钨原子失配数越高氢-钨相互作用越强, 氢捕陷能越高; 而空位团簇越大, 空位周围钨原子失配数越高。通过研究多个氢在空位团簇中的聚集行为发现, 初期进入空位团簇中的氢原子呈层状排布, 随着氢原子数的增多, 空位中将形成类氢分子。例如, 当 9 空位团簇捕获 42 个氢原子时, 氢原子呈三层嵌套式笼状结构; 后续进入空位的氢原子将与原有氢原子形成类氢分子。当形成类氢分子时, 氢-氢结合能将随空位团簇的增大而升高。9 空位团簇中类氢分子的氢-氢结合能为 0.95 eV, 这远高于其在单空位中结合能。因此, 氢在空位团簇中的行为与单空位存在显著区别。这些研究结果将为理解钨中氢致起泡机理提供重要参考。

关键词: 氢; 钨; 空位团簇; 类氢分子; 氢致起泡

A03-P30

Structural responses of metallic glasses under neutron irradiation

杨亮, 李明飞

南京航空航天大学

Seeking nuclear materials that possess a high resistance to particle irradiation damage is a long-standing issue. In this work, structural responses of neutron irradiation in metallic glasses (MGs) have been investigated by making a series of experimental measurements, coupled with simulations in ZrCu amorphous alloys. It is found that MGs have some specific structural responses to neutron irradiation. Although neutron irradiation can induce transient vacancy-like defects in MGs, they are fully annihilated after structural relaxation by rearrangement of free volumes. In addition, the rearrangement of free volumes depends strongly on

constituent elements. In particular, the change in free volumes occurs around the Zr atoms, rather than the Cu centers. This implies that there is a feasible strategy for identifying glassy materials with high structural stability against neutron irradiation by tailoring the microstructures, the systems, or the compositions in alloys. This work will shed light on the development of materials with high irradiation resistance.

关键词: Nuclear material; Metallic glass; Microstructure; Irradiation effect; Free volume; Molecular dynamics

A03-P31

Zr-1.0Fe-1.0Nb 合金在 400°C/10.3MPa 过热蒸汽中的腐蚀行为

连奥杰, 马帅, 王杰亿, 李强, 彭剑超, 梁雪

上海大学微结构重点实验室

锆合金是水冷核反应堆中燃料元件的包壳材料。锆合金的耐腐蚀性能, 晶粒长大行为, 力学性能等都受到第二相的影响。本工作利用高分辨透射电镜等先进的分析手段研究了第二相对锆合金耐腐蚀性能的影响。Zr-1.0Fe-1.0Nb 合金经 β 相油淬、冷轧变形及 580°C/5h 退火处理, 在静态高压釜中进行 400°C/10.3MPa 的过热蒸汽腐蚀试验, 利用带 EDS 的 TEM 以及 HRTEM 对合金基体以及腐蚀生成的氧化膜显微组织进行分析。结果表明: 合金中主要存在正交的 Zr_3Fe 和密排六方的 $Zr(Nb, Fe)_2$ 。 $Zr(Nb, Fe)_2$ 在氧化过程中, 会先转变成非晶组织, 非晶会进一步氧化转化为 $m-Nb_2O_5$ 和 $m-Fe_2O_3$ 相纳米晶态氧化物, 最后流失到腐蚀介质中; $Zr(Nb, Fe)_2$ 第二相氧化后的 Fe、Nb 元素容易发生流失, 且流失速度 $Nb > Fe$, 合金元素的流失会在氧化膜中留下大量缺陷, 会促进氧化膜演化而不利于合金的耐腐蚀性能。

关键词: 锆合金第二相; 晶体结构; 显微组织

A03-P32

第二相对哈氏合金夏比冲击功的影响

张伟, 朱伟, 彭艳华, 吴璐, 潘荣剑, 周云, 吴拥军

中国核动力研究设计院第一研究所

哈氏合金, 由于其良好的抗腐蚀性能和耐高温性能, 被广泛应用于化工、航空航天和核能领域, 也是熔盐堆重要的候选结构材料之一。然而, 早期的研究表明, 哈氏合金经固溶处理后, 仍会残余大量的第二相, 这些第二相可能会随着哈氏合金的形变加工而变形, 加剧哈氏合金板材的各向异性, 从而恶化其使用性能。

为研究第二相对哈氏合金板材机械性能的影响, 本文采用示波冲击机分别完成了沿板材的 RD 和 ND 方向开“V”型缺口的冲击试样的夏比冲击韧性试验, 获得了相应的冲击功, 同时, 结合光学显微镜(OM)、扫描电子显微镜(SEM)和能谱分析(EDS)等手段对冲击试样的金相组织、断口形貌、初生相的类型和分布进行了观察和分析。结果表明: 固溶处理后哈氏合金中的第二相主要是一种固溶了少量 Cr、Si、Fe 元素的富 Ni-Mo 相; 沿板材 RD 方向开“V”型缺口的 2#试样的夏比冲击功为 225J, 几乎为沿板材 ND 方向开“V”型缺口的 1#试样的 2 倍, 其原因与第二相在哈氏合金板材中的层片状分布情况有关。此外, 本文还基于重构第二相在哈氏合金中的形态和分布, 探讨了冲击试验中第二相对裂纹扩展途径的作用机制。

关键词: 哈氏合金; 第二相; 各向异性; 夏比冲击韧性试验; 裂纹扩展

A03-P33

FeAl 层表面 $\alpha-Al_2O_3$ 膜制备及动力学研究

胡立¹, 张桂凯², 唐涛^{1,2}

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

用“基体渗铝+选择性氧化”法制备的以 FeAl 为过渡层的 Al_2O_3 阻氙涂层体系 (FeAl/ Al_2O_3 阻氙涂层) 是当前涉氙工程防氙渗透包容技术的首选。 Al_2O_3 膜是决定 FeAl/ Al_2O_3 阻氙涂层最终服役行为的关键所在, 而众多相结构中 α 相的阻氙性能最优, 其氙渗透降低因子能达到 1000。

采用“室温熔盐镀铝+热处理+选择性氧化”复合工艺在 21-6-9 不锈钢基体上制备 FeAl/ $\alpha-Al_2O_3$ 阻氙层, 研究不同氧分压的影响, 利用 SEM、xrd、反射光谱、XPS、EDS 对涂层结构与性能进行表征, TGA 进行氧化动力学分析。结果表明: 在电镀参数为 10mA/cm², 100min, 热处理参数为 750°C、4h 条件下生成成分渐变、冶金结合优异、无缝隙与裂纹的 100 μ m 左右的 FeAl 过渡层。在 980°C、1h 条件下, 不同氧分压氧化条件下都能获得 $\alpha-Al_2O_3$, 但过高氧分压下生成铁的氧化物。氧化铝层厚度为 500-700nm, 且随氧分压升高先降低后升高, 在 1kpa 处达到最低。低氧分压下, 氧化铝在表面分布不均, 但随着

氧分压增大,其分布趋于均匀。不同氧分压的氧化动力学曲线分为两段:氧化初期为直线型,第二段为抛物线型,氧化净增量随氧分压增大而减小。提出了氧化铝膜的岛状生长方式,即最初氧化铝以岛状聚集生长,之后横向生长覆盖整个表面,覆盖完整个表面后在厚度方向继续增长。通过比较,在 980℃条件下,较低的氧分压(10pa-1kpa)有利于 α -Al₂O₃ 膜的生成,该工作对制备 FeAl/ α -Al₂O₃ 阻氚层的工艺起指导作用。

关键词: FeAl/Al₂O₃ 涂层; 氧化行为; FeAl 合金; 阻氚涂层

A03-P34

纳米 VC 析出相与晶界对微合金化钢拉伸性能的影响

林保全^{1,2}, 胡丽娟^{1,2}, 李智^{1,2}, 梁婉怡^{1,2}, 董海英^{1,2}

1.上海大学材料研究所

2.上海大学微结构重点实验室

V 是微合金化钢中重要的微合金化元素,20 世纪初在很多钢种中添加质量分数为 0.1%~0.2%的 V 以提高钢的强度和淬透性。添加碳化物形成元素 V 的微合金化钢,在时效过程中会析出纳米 VC 析出相,通过纳米 VC 的析出可有效提高钢的强度。实验研究发现 VC 析出相的尺寸对材料强度及冲击功有不同的影响。尺寸越小,材料屈服强度越大,但冲击功却降低,对钢的拉伸性能产生不利影响。与 VC 相关的仿真主要是以热处理时效的形成过程,对 VC 直接影响材料拉伸性能的多尺度仿真较少。

本文采用有限元(FEM)法以微合金化钢中的纳米 VC 析出相为研究对象,通过改变纳米 VC 析出相尺寸、晶粒尺寸、晶界宽度以及外界加载量来研究 VC 析出相对微合金化钢拉伸性能的影响。结果表明:(1)纳米 VC 析出相的心部强度最大,塑性最小;晶界处塑性最大,但应力最小。纳米 VC 析出相对基体强化存在临界值,当平均尺寸达到 12nm 左右时,基体塑性良好,基体强度也处于较高的水平。(2)晶界对提高基体的塑性有一定的作用,晶界宽度越大,其变形能力越好,基体塑性越好。(3)纳米 VC 析出相的晶界在改善基体塑性和强度方面的作用有限。

关键词: 微合金化钢; 析出相; 拉伸性能; 有限元

A03-P35

预渗氢对 Zr-4 合金在 360℃/LiOH 水溶液中耐腐蚀性能的影响

徐诗彤^{1,2}, 姚美意^{1,2}, 黄娇^{1,2}, 毛亚婧¹, 梁雪², 张金龙^{1,2}, 周邦新^{1,2}

1.上海大学材料研究所

2.上海大学微结构重点实验室

核反应堆运行时,锆合金包壳的腐蚀和吸氢相伴发生,被锆合金吸收后的氢不但会影响锆合金的力学性能,同时对锆合金的耐腐蚀性能也会产生一定的影响,但其影响机理还不清楚,所以本文开展了预渗氢影响锆合金耐腐蚀性能的研究工作。

采用气相渗氢法或电解渗氢法对 Zr-4 (Zr-1.3Sn-0.2Fe-0.2Cr, wt.%) 合金样品进行渗氢,制备了低氢(20~120 wppm)和高氢(120~250 wppm)样品。将渗氢和未渗氢的样品一同放入高压釜中进行 360℃/18.6 MPa/0.01 M LiOH 条件下的腐蚀试验。采用 HRSEM 观察氧化膜断面、内表面和外表面形貌;用卷曲法测量氧化膜内应力;采用 SIMS 测定 Zr-4 样品氧化膜中 Li⁺浓度沿深度方向的分布。研究表明:三种氢含量样品在 LiOH 水溶液中腐蚀时均发生明显的腐蚀转折,转折后的腐蚀速率差别较大,样品中的氢含量越高,耐腐蚀性能越好。与未渗氢样品相比,渗氢样品的氧化膜更加致密,O/M 界面的起伏程度更小,氧化膜显微组织的演化更慢。渗氢样品氧化膜中的压应力水平较低,且随氧化膜厚度增加而下降的趋势更平缓,同时氧化膜中的 Li⁺浓度更低,且沿氧化膜深度方向上 Li⁺浓度下降得更快。这说明合金中的氢可抑制 Li⁺的扩散、降低氧化膜中的应力水平,延缓氧化膜中空位扩散凝聚形成孔隙、孔隙连通发展成为微裂纹的过程,从而提高了 Zr-4 合金的耐腐蚀性能。

关键词: 锆合金, 渗氢, 腐蚀, 显微组织, 氧化膜

A03-P36

Nb 对 Fe22Cr5Al3Mo 合金在 500℃过热蒸汽中腐蚀行为的影响

钱月^{1,2}, 孙蓉蓉^{1,2}, 张文怀^{1,2}, 黄娇^{1,2}, 姚美意^{1,2}, 梁雪², 张金龙^{1,2}, 周邦新^{1,2}

1.上海大学材料研究所

2.上海大学微结构重点实验室

2011 年日本福岛核事故的发生,暴露了 Zr 合金包壳材料在抵抗严重事故工况下性能的不足,由此提出了发展事故容错燃料(Accident Tolerant Fuel, ATF)的远景规划。FeCrAl 合金因具有适中的热中子吸收截面、与 UO₂ 的相容性好、良好的导热性能和抗高温氧化性能等优点,被认为是比较有发展前景的 ATF 包壳材料。Nb、Mo、Zr 等合金元素对 FeCrAl 合金的

服役性能有影响,本文主要研究 Nb 含量对 FeCrAl-xNb 合金在高温蒸汽氧化环境下耐腐蚀性能的影响规律及其机理,为 ATF 包壳材料的成分设计与优化提供依据和指导。

本文以商用 APMT 合金(Fe22Cr5Al3Mo, 质量分数%)的成分为参考,添加不同含量的 Nb 制备成 Fe22Cr5Al3Mo-xNb ($x=0, 0.5, 1.0, 2.0$) 合金。用静态高压釜腐蚀实验研究了 4 种合金在 500°C/10.3 MPa 过热蒸汽中的腐蚀行为。利用 XRD、TEM、SEM 对腐蚀前后的样品进行物相和显微组织的分析,其中氧化膜观察的 TEM 样品采用 FIB 制备。研究表明:(1) 添加 Nb 合金可以细化 Fe22Cr5Al3Mo 合金的晶粒。(2) 在 500°C/10.3 MPa 过热蒸汽中腐蚀 500 h 后的氧化膜都很薄,4 种合金腐蚀形成的氧化膜均发生不同程度的剥落;氧化膜主要由 Cr 和 Fe 的氧化物组成,没有检测到 Al 的氧化物。(3) 在含 Nb 的合金腐蚀样品表面检测到了含 Nb 的非晶氧化物;含 Nb 合金的腐蚀样品氧化物的晶粒明显小于不含 Nb 的样品。从氧化膜显微组织结果演化的角度探讨了 Nb 影响 FeCrAl 合金耐腐蚀性能的机理。

关键词: FeCrAl 合金, Nb, 腐蚀, 氧化膜, 显微组织

A03-P37

β -Nb 第二相合金在 400°C 过热蒸汽中的腐蚀行为

瞿忱¹, 姚美意^{1,2}, 黄娇^{1,2}, 陈兵^{1,2}, 梁雪², 彭剑超², 张金龙^{1,2}, 周邦新^{1,2}

1.上海大学材料研究所

2.上海大学微结构重点实验室

锆合金是水冷核反应堆中用作核燃料包壳的一种重要结构材料,腐蚀是影响锆合金使用寿命的主要因素之一。锆合金腐蚀时,在其表面生成一层具有保护作用的氧化膜,锆合金中的第二相粒子在氧化膜的包裹下再发生腐蚀。 α -Zr 基体和第二相粒子独自氧化的同时又相互影响,各自的稳定腐蚀产物构成了锆合金氧化膜的最终状态。 β -Nb 是 Zr-Nb 系合金中的主要第二相,因此,研究 β -Nb 第二相粒子自身的氧化行为对探究 Nb 影响锆合金的腐蚀机理有重要的参考价值。

根据锆合金中 β -Nb 第二相的成分和结构,熔炼制备了 2 种 β -Nb 型第二相合金,分别是 90Nb-10Zr (wt.%) 和 50Nb-50Zr 合金,以研究不同 Nb/Zr 比对 β -Nb 型第二相合金腐蚀行为的影响。用静态高压釜腐蚀实验研究了这两种合金在 400°C/10.3MPa 过热蒸汽中的腐蚀行为。利用 XRD、SEM 和带有 EDS 的 HRTEM 对腐蚀前后的 β -Nb 第二相合金进行物相分析和腐蚀生成的氧化膜显微组织分析。研究表明:90Nb-10Zr 合金先氧化成亚稳态的 t -Nb₄O₅、 t -NbO₂、 hcp -Nb₂O₅ 和非晶,最终氧化成由稳态的 m -Nb₂O₅ 和非晶态氧化物组成的混合氧化物;50Nb-50Zr 合金首先氧化成晶态的含 Nb 和 Zr 氧化物,随后晶态氧化物转变成非晶态的氧化物,随着腐蚀的进行,非晶态氧化物又转变成亚稳态的 t -Nb₄O₅ 和 t -ZrO₂,最终转变成由 m -ZrO₂、 m -Nb₂O₅、 m -(Zr, Nb)O₂ 和 o -ZrO₂ 组成的混合氧化物。50Nb-50Zr 合金的氧化速率大于 90Nb-10Zr 合金。以上结果说明不同 Nb/Zr 比的 β -Nb 型第二相合金的氧化过程和氧化快慢是有差别的,这种差别会影响锆合金氧化膜中的应力水平以及氧化膜显微组织结构的演化,从而影响锆合金的耐腐蚀性能。

关键词: 锆合金; β -Nb 型第二相合金; 腐蚀行为; 氧化膜; 显微组织

A03-P38

研究堆辐照工艺管用 LT21 铝合金的拉伸性能研究

钟巍华, 佟振峰, 宁广胜, 赵迎超, 梁瑞鹏, 杨文

中国原子能科学研究院

LT21 铝合金是我国第一座重水研究堆-101 堆的辐照工艺管、孔道等堆内结构用材。目前 101 堆正在做退役处理,利用当前试验技术对其辐照工艺管 LT21 铝合金进行力学性能再认识,对于现役研究堆部件老化状态评估和材料改进都具有重要意义。本文开展了 101 堆用辐照工艺管材 LT21 铝合金的拉伸性能测试,利用 SEM 观察了拉伸后断口形貌,得到了 LT21 铝合金管材的拉伸性能数据和失效机理。

关键词: 研究堆; 辐照工艺管; LT21; 铝合金; 拉伸

A03-P39

690 合金中三晶交界及晶界类型对碳化物析出的影响

李慧, 刘锡荣, 夏爽, 刘文庆

上海大学

镍基 690 合金广泛应用于压水堆核电站蒸汽发生器传热管材料,晶界处碳化物的析出是影响其耐晶间腐蚀与晶间应力腐蚀的主要原因。本工作利用 HRTEM、SEM 和 EBSD 技术研究了经过晶界工程处理的镍基 690 合金在 715°C-1000°C 时效不

同时间后不同类型的三晶交界附近三个晶界上碳化物的析出形貌，并对碳化物的平均尺寸进行了统计分析。结果表明：在 715℃时效时，碳化物在不同类型晶界处析出的形貌有明显差异，临近晶界的类型对碳化物的尺寸也有影响，临近晶界的 Σ 值越高，在三晶交界处的第三条晶界上析出的碳化物越大，反之亦然。当时效温度提高后，由于不同类型晶界的界面能差异降低，在不同类型晶界上析出碳化物的形貌差别减少。当时效温度相同时，时效温度越高，晶界处碳化物的尺寸越大。当时效温度提高至 1000℃，可以 HRTEM 观察到碳化物的溶解与再析出。根据实验结果，讨论了晶界类型、三晶交界类型、时效温度等因素对碳化物析出长大机制的影响规律。

关键词：碳化物，晶界类型，三晶交界，晶界工程，690 合金

A03-P40

离子辐照导致的 Lu₂Ti₂O₇ 烧绿石结构陶瓷材料微观结构演化行为

张建，谢秋荣，焦绪丽，付上朝，吴采宇

厦门大学能院学院

烧绿石结构 Lu₂Ti₂O₇ 陶瓷材料因其优异的物理化学性能，可作为高放射性核废物和锕系元素（钷）的重要候选材料之一。本文选取 Lu₂Ti₂O₇ 为标准样品，系统地研究了其在不同离子辐照条件下的微观结构演化，从而更好地理解这类陶瓷材料的辐照性能。主要基于以下三个方面对离子辐照行为进行了研究：（1）剂量效应，室温下利用 600 或 800 keV Kr₃₊ 辐照多晶烧绿石 Lu₂Ti₂O₇ 样品，发现样品低剂量下出现晶格微观肿胀和有序到无序的部分晶体转变现象，之后增加剂量，样品开始非晶，但是高剂量下辐照生成晶粒为 10 纳米左右的纳米晶，从而强化了材料的抗辐照性能，使样品不能完全非晶；（2）温度效应，室温和 723 K 下用 600 keV Kr₃₊ 辐照烧绿石 Lu₂Ti₂O₇ 样品后，发现样品在室温下生成非晶和纳米晶粒，而在高温下发生有序到无序晶体转变，生成无序立方萤石结构相；（3）离子质量谱效应，室温下用 800 keV Kr²⁺，400 keV N^{e+} 和 200 keV He⁺ 辐照样品，发现 Kr 和 Ne 辐照后样品先发生有序到无序转变，然后部分非晶转变，而 He 离子辐照只能使样品发生有序到无序转变，生成无序立方萤石相，不能使样品非晶。

A03-P41

辐照条件与轧制方向对钨中氦热脱附行为影响研究

侯鹏飞，傅青伟，程龙，袁悦，吕广宏

北京航空航天大学

在核聚变的氦-氦环境下，作为面对等离子体材料（PFM）的钨材料将受到高束流密度等离子体的辐照，时刻暴露于聚变反应生成的各类氢同位素及氦中引起复杂的等离子体与材料相互作用过程（PWI）。氢同位素在钨中的扩散、捕获和滞留等行为是 PWI 相关问题的关键，关乎聚变反应等离子体状态以及装置运行等至关重要的问题。热脱附谱分析是目前研究氢同位素与钨材料中空位等缺陷的结合状态、氢同位素元素滞留量以及表征材料的缺陷密度及类型的主要研究手段。

本实验采用热脱附谱方法，通过精确控制样品恒速升温，直至不同种类和状态的气体滞留元素在升温过程中陆续脱附释放，从而得到脱附强度-温度曲线。热脱附谱可揭示材料中的缺陷数量及类型，定量分析氢同位素在钨中的渗透、扩散、溶解和释放等行为。

实验样品选取两种轧制方向（TD 和 RD）的商业钨，在北航直线等离子体装置 STEP 上开展氦等在离体辐照实验后，利用 HiTDS 高分辨热脱附谱仪测量钨中氦的热脱附谱，研究辐照条件和材料微结构对氦捕获与滞留的影响。

氦的热脱附结果表明：纯氦在 $\sim 1 \times 10^{22}$ D/m²s，60 eV，470-580 K 条件下辐照至最高 2×10^{26} D/m² 剂量，氦在钨中的捕获类型为空位团簇捕获，脱附主峰在 800-820 K。辐照剂量增大导致氦的注入量和捕获量升高，且超过 $\sim 10^{26}$ D/m² 剂量时由于大量微米级气泡的产生使得氦脱附强度和滞留跳跃式升高。温度的增大一方面增强氦的扩散另一方面使去捕获行为发生，最终会导致氦滞留先升高后降低并在 450 K 附近达到极大值。RD 面在近表面的晶界面密度较大且晶界结构垂直于表面，因此 RD 钨在低温和中、低剂量时对氦致起泡的抗性相对较强，氦的捕获滞留小于或接近于 TD 面，而在高温高剂量时氦有充足能量和时间扩散至更深处，导致氦捕获滞留增大并超过 TD 面。

本实验针对不同辐照条件和轧制方向钨中氦的热脱附行为，给出了氦捕获滞留行为随辐照条件与材料状态的关系，本结果为进一步理解等离子体与钨材料相互作用提供了实验支持。

关键词：辐照条件；轧制方向；热脱附谱；捕获；滞留

A03-P42

固溶态 Cu 原子对 ZrO₂ 断裂功影响的第一性原理研究

袁蓉^{1,2}, 钱一辰^{1,2}, 谢耀平^{1,2}

1.上海大学材料研究所

2.上海大学微结构重点实验室

锆合金是核电站中核燃料的包壳材料,其寿命主要由耐水侧腐蚀性能决定。在锆合金中添加微量合金元素就能引起其耐腐蚀性能发生显著的变化。本文主要采用第一性原理方法研究添加元素 Cu 对 ZrO₂ 氧化膜穿晶断裂的影响。研究表明, ZrO₂ 在 (11-21), (11-20) 和 (1010) 三个低密勒指数的断裂功分别为 6.98 eV、3.14 eV 和 6.34 eV。Cu 固溶态原子会使得沿着三个晶面的断裂功分别减少 0.78 eV、0.97 eV 和 1.83 eV,这说明 Cu 的存在使 ZrO₂ 晶体发生穿晶断裂比纯 ZrO₂ 更容易。我们进一步研究了 2 GP 压力下 Cu 对 ZrO₂ 穿晶断裂的影响情况,发现 Cu 依然使其穿晶断裂相对纯 ZrO₂ 容易。ZrO₂ 断裂功的计算结果对研究氧化膜的微裂纹扩展有参考价值,对理解 Cu 对锆合金的耐腐蚀性能的影响有一定的意义。

关键词: 锆合金; 耐腐蚀性能; 穿晶断裂; 断裂功; 第一性原理

A03-P43

Hastelloy N 合金中 He 泡和位错环在多种离子辐照条件下的演化行为研究

刘继召^{1,2}, 黄鹤飞¹, 高杰¹, 李燕^{1,2}

1.中国科学院上海应用物理研究所

2.上海科技大学

熔盐反应堆是六种第四代裂变反应堆型之一,具有很高的安全性和经济性,近年来在世界范围内广受关注。Hastelloy N 合金以其优异的耐氟化物熔盐腐蚀性能,被认为是最优的熔盐堆用候选结构材料,然而其抗中子辐照损伤性能有待研究。Hastelloy N 合金在熔盐堆内服役过程中,离位损伤和核嬗变反应产生的氦同时存在,二者相互作用,将加速其性能劣化。本研究中 Hastelloy N 合金样品在 650°C 下开展了如下四个条件的辐照实验: (I) He⁺ 离子辐照; (II) 预辐照 He⁺ 离子,后辐照 Xe²⁶⁺ 离子; (III) 预辐照 Xe²⁶⁺ 离子,后辐照 He⁺ 离子; (IV) Xe²⁶⁺ 离子辐照。上述实验中 He⁺ 离子和 Xe²⁶⁺ 离子的能量分别为 400 keV 和 7 MeV,辐照剂量则分别为 3×10¹⁶ ions/cm² 和 3 dpa。

分别采用透射电镜和纳米压痕仪对辐照前后合金样品的微观结构演变和硬化情况进行了表征与测试。结果表明,在单 He⁺ 和 Xe²⁶⁺ 离子束辐照的样品中,合金内部分别形成了大量的纳米级氦泡和位错环,且两个样品均出现了一定程度的硬化。在 He⁺ 离子预辐照, Xe²⁶⁺ 离子后辐照的样品中,He 泡和位错环的尺寸较单束辐照而言均发生了长大,且辐照损伤区硬化程度大于单束辐照后的综合硬化值。而在 Xe²⁶⁺ 离子预辐照, He⁺ 离子后辐照的样品中,两种缺陷的尺寸及样品的硬化程度与单束辐照下的结果相近。本论文中讨论了不同离子辐照顺序造成的合金损伤行为演变及存在的协同损伤机制。

A03-P44

不同温度下国产 15-15Ti 不锈钢的拉伸塑性失稳行为

刘健, 佟振峰*, 鱼滨涛, 宁广胜, 杨文

中国原子能科学研究院 反应堆工程部, 北京 102413

冷加工的 15-15Ti 奥氏体不锈钢,是一种快堆包壳的有力候选材料。考虑到快堆包壳的工作温度在 400~700°C 左右,为指导快堆包壳相关工程设计和安全考量,需要对材料的塑性失稳行为进行研究。本文对 20%冷加工的国产 15-15Ti 不锈钢材料在 RT~700°C 范围内进行了一系列单向拉伸试验,考察温度对不锈钢拉伸行为及塑性失稳的影响;并结合 SEM 与 TEM 微观表征,分析不同温度下材料组织与拉伸性能及塑性失稳行为之间的关系。结果表明:材料的总伸长率随温度升高先降低后升高;而材料的均匀延伸率在 500~700°C 高温范围内有较为特殊的规律,这一特性与动态应变时效行为有关。根据塑性失稳判据,得到材料塑性失稳应变与塑性失稳应力与温度之间的关系,并发现材料颈缩后的平均硬化速率与塑性失稳应力呈现正相关。结合 TEM 分析,发现室温下材料的变形组织存在大量形变孪晶,而高温时变形组织则以位错结构为主,温度对材料的塑性行为具有重要的影响。

关键词: 15-15Ti 不锈钢, 拉伸行为, 塑性失稳, 温度

A03-P45

放电等离子体烧结制备惰性基弥散燃料及其高温热物理性能研究

杨振亮¹, 高瑞¹, 李冰清¹, 刘徐徐¹, 钟毅¹, 黄华伟², 马赵丹丹², 刘彤²

1.中国工程物理研究院材料研究所

2.中广核研究院有限公司

惰性基弥散燃料是一种通过将燃料核心弥散封装在致密的惰性陶瓷基体中来显著提高燃料组件在事故工况下本质安全性能的新型核燃料。该燃料利用惰性陶瓷基体材料在耐高温、抗氧化、抗辐照、热传导等方面的优良特性来大幅改善燃料芯块在高温辐照环境中的稳定性,同时通过将燃料核心整体镶嵌在惰性陶瓷基体内部来实现对放射性物质的隔离与容留,进一步提高燃料的安全性能。本研究采用放电等离子体烧结工艺制备了含碳化硅无燃料区和三结构各向同性 (Tri-structural Isotropic, TRISO) 多层包覆球形燃料核心的惰性基弥散燃料芯块,并对芯块的显微结构以及高温热物理性能进行了研究。结果表明:采用该工艺制备的惰性基弥散燃料中碳化硅基体的致密度达到 95%以上,TRISO 颗粒保持了良好的结构完整性,颗粒球形度较好,未见明显变形和破损情况,并且均匀的分散于致密的碳化硅基体中。本研究所制备的惰性基弥散燃料芯块在室温至 1800°C 范围内均体现了优异的热传导性能,热导率值与碳化硅材料相近,相对于传统的二氧化铀燃料芯块提高了近一个数量级。惰性基弥散燃料芯块同样体现了良好的高温结构稳定性,在室温至 1800°C 范围内,其热膨胀系数仅为二氧化铀燃料芯块的二分之一。以上研究为惰性基弥散燃料事故容错性能的评估提供了重要的理论和实验依据。

关键词:惰性基弥散燃料;放电等离子体烧结;高温热物理性能

A03-P46

Zr-4 合金晶界与第二相颗粒的相互作用

刘承泽,李阁平

中国科学院金属研究所

Zr-4 合金具有良好的腐蚀性能和力学性能,是目前应用最为广泛的压水堆核燃料包壳材料。Zr-4 合金中的纳米尺寸第二相 (含 Fe、Cr 的 Laves 相) 与合金的腐蚀性能及力学性能息息相关。本研究针对退火服役态 Zr-4 合金,利用 TEM 技术研究了 Laves 结构第二相与 Zr 晶界的交互作用机制。研究发现,晶界与第二相的相互作用会产生局部应变,与此同时,第二相会受到沿晶界迁移方向的钉扎力。在特定情况下,这种钉扎力会作为第二相塑性变形的驱动力,导致第二相发生塑性变形,从而在第二相内部产生亚结构,例如层错、孪晶等,甚至导致第二相晶体结构类型的改变。

关键词:锆合金;晶界;第二相

A03-P47

重离子损伤对钨中氦滞留及起泡的影响

王诗维¹,朱秀丽¹,程龙¹,郭望果¹,刘秘¹,徐川²,袁悦¹,付恩刚²,曹兴忠³,吕广宏¹

1.北京航空航天大学

2.北京大学

3.中科院高能物理研究所

聚变堆中的关键材料问题是实现可控核聚变面临的重要问题之一。其中,高能中子和低能氦/氢等离子体的辐照是核聚变堆中第一壁材料失效的最主要原因。金属钨由于其高熔点,低溅射率和低氦滞留量被认为是最有希望的第一壁材料。中子辐照产生大量的缺陷 (空位,位错,空洞等),这些缺陷不仅影响壁材料的服役性能,同时影响材料中氢同位素的行为,所以壁材料的中子辐照及氢同位素的协同作用的研究是十分必要的。本文通过重离子辐照模拟中子辐照以研究辐照损伤对钨中氦行为的影响。

本文以商业轧制钨为实验材料,对其进行抛光和去应力退火。利用北大重离子加速器对样品进行重离子预辐照 (1 MeV/Cu, 1 dpa)。慢束正电子多普勒展宽谱 (PA-DBS) 结果表明重离子预辐照在钨表层引入了大量空位型缺陷。利用北航直线等离子体装置 (STEP) 对两组损伤钨和无损伤钨样品进行低能 (40 eV) 高束流 ($1\sim 2\times 10^{22}$ D/m²) 氦等离子体辐照,辐照剂量分别为 0.1×10^{27} D/m² (低剂量) 和 2.2×10^{27} D/m² (高剂量)。扫描电镜 (SEM) 观察发现,低剂量氦等离子体辐照下,未损伤钨表面有大量的氦泡,氦泡数量随着辐照剂量的增加而显著增加,且高剂量下伴有泡破裂现象。而对于损伤钨,其表面氦泡数量相比于无损伤钨明显减少,高剂量下氦泡破裂的情况也明显减少。热脱附谱 (TDS) 结果表明,损伤钨中氦滞留量相比于无损伤有所增加,并且增加幅度在高剂量下更加显著。损伤钨中氦泡数量减少和总氦滞留量增加应该与预辐照产生的大量空位型缺陷有关。一方面,空位型缺陷增加使得氦泡形核点增加,从而每个形核点附近的氦浓度被显著分散,导致氦浓度缺少达不到起泡阈值。另一方面,表面缺陷的增加会促进氦向体内的扩散,间接地增加了起泡阈值。此外,也正是由于氦捕获位 (缺陷) 增加和氦向体内扩散增强,所以损伤样的总滞留量比未损伤样中的滞留显著增加。具体的细节和讨论将会在会议中呈现。

关键词:中子辐照;氦等离子体辐照;起泡;滞留

A03-P48

表面处理对 Al-B₄C 中子吸收板复合材料在硼酸溶液中耐腐蚀性能的影响

张露露¹, 朱鹏¹, 韦江涛², 马云涛², 克磊², 夏爽¹, 白琴¹, 周邦新¹

1. 上海大学材料研究所

2. 江苏镇江华核装备有限公司

Al-B₄C 中子吸收材料是由 B₄C 陶瓷颗粒弥散在 Al 基体中构成的复合材料, 作为功能材料以板材的形式嵌入乏燃料水池贮存格架中。Al-B₄C 中子吸收板的耐腐蚀性能对材料的使用寿命有很大影响, 成为评价材料性能的重要指标之一。因此, 采用表面处理的方法提高 Al-B₄C 中子吸收板的耐腐蚀性能具有重要意义。

本工作研究由粉末冶金制备的 Al-31wt% B₄C 中子吸收板经表面处理后在硼酸溶液中的耐腐蚀性能。将未处理原始板、酸洗板和钝化板三种不同表面状态的板材分别在硼离子浓度为 2700 ppm 的 40 °C 硼酸溶液和 2500 ppm 的 90 °C 硼酸溶液中进行均匀腐蚀, 腐蚀时间为 1440 h。通过分析样品重量和厚度的变化、硼酸溶液电导率的变化, 判断样品的腐蚀情况; 利用扫描电子显微镜 (SEM)、能谱仪 (EDS) 和激光拉曼光谱对样品表面形貌、成分和物质组成进行表征; 采用聚焦离子束技术 (FIB) 和透射电子显微镜 (TEM) 分析氧化膜的结构和成分, 探究氧化膜的形成机理。

结果表明: 两种腐蚀环境中, 未经表面处理板的溶液电导率比酸洗板和钝化板的高, 说明样品经表面处理后, 生成的表面膜层减缓了金属离子向硼酸溶液中溶出。显微分析表明, 钝化后形成的表面膜层具有更强的保护性。由 TEM 分析可知, 腐蚀产生的氧化膜主要由靠近 Al 基体的内层氧化膜和靠近硼酸溶液的外层氧化膜构成。内层氧化膜为非晶结构, 嵌有晶体颗粒, 铝和氧的原子百分比接近 1:2.5; 外层氧化膜呈条状生长, 为 Al(OH)₃·nH₂O 结晶水合物。综上所述, 表面处理工艺提高了 Al-B₄C 中子吸收板的耐腐蚀性能, 钝化处理后的板材耐腐蚀性能更佳。

关键词: 中子吸收材料; Al-B₄C; 表面处理; 硼酸腐蚀; 氧化膜

A03-P49

初生碳化物对 Hastelloy N 合金晶界特征分布的影响

刘冰玉¹, 于耀¹, 夏爽¹, 蒋力², 李志军², 白琴¹, 周邦新¹

1. 上海大学材料研究所

2. 中国科学院上海应用物理研究所

Hastelloy N 合金由于其耐高温、耐熔盐腐蚀的特点, 被用作熔盐堆 (Molten Salt Reactor, MSR) 的结构材料。但裂变产物 Te 会沿晶界向材料内部扩散导致晶间脆性开裂 (intergranular brittle fracture), 明显降低合金性能。1984 年 Watnabe 提出了“晶界设计与控制”的概念, 并于上世纪 90 年代形成了“晶界工程 (grain boundary engineering, GBE)”领域。晶界工程技术通过合适的形变及退火工艺, 控制晶界特征分布 (grain boundary character distribution, GBCD) 和晶界网络连通性从而提高低层错能面心立方金属材料的低 Σ CSL (CSL 是“coincidence site lattice”的缩写, 即重位点阵。低 Σ 是指 $\Sigma \leq 29$) 晶界比例, 从而提高材料与晶界有关的诸多性能。Hastelloy N 合金属于低层错能面心立方金属材料, 因此有希望通过晶界工程提高其抗 Te 致晶界脆性的能力。

Hastelloy N 合金中由于 Mo 含量高, 在显微组织中大量的初生碳化物沿轧向呈串状分布。本工作通过调整合金预处理温度和变换冷轧方向控制初生碳化物的分布状态, 打破原始组织中碳化物沿轧向大量串状分布的特点, 获得更加细小和弥散的初生碳化物颗粒组织。运用扫描电子显微镜 (SEM) 和电子背散射衍射 (EBSD) 技术, 研究了初生碳化物的分布状态对 Hastelloy N 合金经晶界工程处理后形成的晶界特征分布的影响。结果表明: 当晶界工程处理工艺 (5% 室温拉伸变形后在 1177 °C 下退火 30 min) 相同时, Hastelloy N 合金原始显微组织中初生碳化物颗粒分布越细小和弥散, 颗粒物促进再结晶形核 (particle stimulated nucleus, PSN) 现象就越少, 且对再结晶过程中晶界迁移的阻碍越弱。实验结果进一步表明, Hastelloy N 合金原始组织中初生碳化物分布越弥散, 颗粒越细小, 经晶界工程处理后合金的低 Σ CSL 晶界比例越高 (70% 以上), 同时形成大尺寸的“互有 $\Sigma 3^n$ 取向关系的晶粒团簇” (n 为 1, 2, 3)。

关键词: Hastelloy N 合金; 晶界工程; 初生碳化物; 颗粒物促进再结晶形核

A03-P50

ATF 包壳材料 ODS-FeCrAl 合金的研究

李静, 吴飒建, 熊良银, 刘实

中国科学院金属研究所

2011年日本福岛的核泄漏事件暴露了核反应堆中服役的 Zr 合金包壳的短板和缺点, 刺激和促进了对事故容错燃料包壳材料的研发速度和进度。氧化物弥散强化 (Oxide dispersion strengthened, ODS) FeCrAl 合金由于具有优异的高温力学性能、高温抗腐蚀性能和良好的抗辐照肿胀能力, 被认为是近期最有希望实现的新型燃料包壳材料。

在此背景下, 本实验组分别采用常规机械合金化法和新型内氧化法制备研发了 Cr 含量分别为 12%、14%、16%和 20%, Al 含量为 4.5%~6%的 ODS-FeCrAl 合金, 采用不同的工艺手段完成了合金棒材和管材的加工, 并从材料的显微组织、力学性能、抗腐蚀性能和热物性等四个角度出发考察不同制备参数对 ODS 合金性能的影响。由机械合金化法制备的 ODS-FeCrAl 合金, 其氧化物弥散相 Y-Al-O 颗粒的平均尺寸最大为 34nm, 从而使得合金棒材在室温下屈服强度达到 990MPa, 拉伸强度达到 1012MPa, 延伸率为 9%。力学强度随着温度增加而降低, 但是在 700℃时拉伸强度仍能保持在 250MPa 左右; 管材 1000℃时, 拉伸和屈服强度分别保持在 46.6 和 58.7MPa, 表明该类合金具有良好的力学性能。与机械合金化法相比, 内氧化法制备 (已申请国家专利) 的 ODS-FeCrAl 合金具有与其相当的力学性能, 并且实现了大批量 ODS 合金的生产, 在缩短工期、降低生产成本的前提下, 有效实现了氧含量在合金中的控制, 消除了碳、氮等杂质对合金性能的影响。通过对该方法制备的 ODS 合金分别进行 1200℃/0.1MPa/8h 高温水蒸气腐蚀、360℃/18.6MPa/2400h/静态纯水腐蚀、360℃/18.6MPa/2400h/动态水腐蚀试验, 证明了 ODS-FeCrAl 合金具有非常好的抗腐蚀性能。内氧化法制备的 ODS-FeCrAl 合金将在近期内向订货方提供 20kg 棒材和 15kg 管材。

A03-P51

氦氖混合等离子体辐照下锻造钨表面形貌与氦滞留行为

王婷¹, 袁悦¹, A.Kreter², 程龙¹, 吕广宏¹

1.物理科学与核能工程学院, 北京航空航天大学, 北京, 100191, 中国

2.德国于利希研究所, 于利希, 52425, 德国

ITER 装置在运行过程中, 偏滤器面对等离子体材料及部件将经受极端辐照条件, 为了降低偏滤器部位的高热负荷, 充入辐射冷却杂质氦、氩、氮等为有效方式之一, 而冷却杂质会对偏滤器钨材料表面的辐照环境产生影响。因此, 研究辐射冷却杂质对偏滤器钨材料带来的影响非常必要。

本实验采用锻造钨样品, 其辐照表面垂直于晶粒拉长的方向。辐照实验前, 对样品进行表面研磨和机械抛光处理, 随后在 1000℃的真空环境中退火两小时以除气和去除机械抛光过程中产生的残余应力。在德国直线等离子体辐照实验平台 PSI-2 上对样品进行低能 (40eV) 高束流 ($1 \times 10^{22} \text{D/m}^2$) 的纯 D 和 D-10%Ne 混合辐照实验, 辐照温度为 450K, 实验过程中保证 D 的辐照剂量相同 ($1 \times 10^{26} \text{D/m}^2$)。辐照后利用扫描电镜 (SEM)、热脱附谱测试 (TDS) 和核反应分析技术 (NRA) 等多种分析测试手段, 重点研究了氦掺杂对钨表面形貌和氦滞留行为的影响。

实验结果表明, 纯 D 辐照下, 样品表面起泡现象严重, 主要以小尺寸、较高的圆顶型泡和大尺寸、较扁的平台型泡为主。与纯 D 辐照相比, 10%Ne 掺杂时, 表面气泡处有显著的裂纹和气泡盖的刻蚀, 这可能是由于氦原子外层电子较多, 电离后有小部分高价态的离子 (如 Ne^{2+}) 加速后能量大于氦对钨的溅射阈值 (40eV), 对表面造成了一定的损伤。NRA 结果表明, 10%Ne 的掺杂导致近表面 ($<1 \mu\text{m}$) D 浓度降低, 原因可能是样品表面气泡的破裂为 D 的释放提供了扩散通道并增加了 D 的有效复合面积。然而亚表面 ($>1 \mu\text{m}$) D 浓度却极大地增加, 结合 TDS 结果分析, 在 D-Ne 等离子体辐照的协同作用下, 氦会引发材料内部产生额外的缺陷, 导致更高温度下出现额外的 D 脱附峰, 同时氦增强 D 向体内的扩散, 更多的 D 被材料内部的本征缺陷和辐照缺陷捕获, D 在体内的滞留量增加。本工作重点研究了 10%Ne 的掺杂对锻造钨材料表面形貌和氦滞留行为的影响, 为评估氦杂质引入对偏滤器钨材料产生的可能影响提供一定参考价值。

关键词: 氦滞留; 氦; 钨; 等离子体-材料相互作用

A03-P52

高热负荷对钨及氧化镧掺杂钨氦等离子体辐照效应的影响

郭望果¹, 袁悦¹, 曲世联², 程龙¹, 吕广宏¹

1.北京航空航天大学物理科学与核能工程学院

2.清华大学材料科学与工程学院

钨基材料是聚变堆面对等离子体材料的最佳选择, 其中氧化镧掺杂钨作为一种成熟的商业化生产的先进钨基材料, 在中子、等离子体以及热辐照条件下都表现了优异的性能。高热负荷作用可导致钨及氧化镧掺杂钨发生再结晶及熔化等损伤行为, 而且两种材料组织结构演化存在较大差异[1], 因此研究高热负荷作用所引起的组织结构变化对其氦辐照效应的影响具有重要意义。

轧制钨及氧化镧掺杂钨样品经 23MW m^{-2} 高热负荷作用处理, 获得再结晶及熔化再凝固样品。将轧制态、再结晶态、熔

化再凝固态钨及氧化钨掺杂钨材料分别在直线等离子体装置 Pilot-PSI 及 PSI-2 上进行氙等离子体辐照,辐照束流为 $10^{22} - 10^{24} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$, 剂量为 $5 \times 10^{25} - 1 \times 10^{26} \text{ m}^{-2}$ 。

通过扫描电镜 (SEM) 观察其表面形貌变化,并使用热脱附仪 (TDS) 比较不同样品氙的脱附图谱。轧制态及再结晶态氧化钨掺杂钨的表面起泡形貌特征与纯钨类似。Pilot-PSI 装置由于其束流高($10^{24} \text{ m}^{-2}\text{s}^{-1}$), 产生的氙泡尺寸小而面密度大。熔化再凝固材料表面以粗大的柱状晶为主, 其表面起泡形态类似于再结晶材料, 但数量有所减少。

氙滞留方面, 再结晶态氧化钨掺杂钨滞留量最高, 可能是由于氧化钨形成的较多界面提供了氙的捕获位。熔化再凝固的钨样品滞留量相对于再结晶较低, 主要是熔融凝固的柱状晶界面及缺陷更少; 同时氧化钨掺杂钨样品相对于纯钨样品多出了一个高温峰, 经过 TEM 与 EDX 分析, 我们确认了这个高温峰是由热负荷下氧化钨分解的钨纳米晶粒贡献的。本结果对于评估钨基材料在热-等离子体双重辐照下的服役行为具有重要参考作用。

A03-P53

富嬗变元素析出相对钨中氢行为的影响研究

岳方雅, 李宇浩, 周洪波, 吕广宏

北京市海淀区北京航空航天大学

钨基材料被认为是未来聚变堆中拟全面使用的壁材料。但在严苛的聚变服役条件下, 钨材料将遭受高能中子 (14.1 MeV) 辐照, 发生嬗变反应, 产生铯、钷、钷等嬗变元素。更重要的是, 在进一步中子辐照下, 嬗变元素浓度远小于其在钨中溶解极限时就会聚集形成富嬗变元素析出相。例如: 钨中铯会辐照诱导析出形成 σ 相 (W: Re=1:1) 和 χ 相 (W: Re=1:3)。富铯析出相会显著改变钨材料的微观结构, 导致材料发生辐照硬化和脆化等, 进而影响钨基材料的服役行为。现有研究表明, 富铯析出相对钨中氢行为具有显著影响, 但其机理尚不明晰, 亟需进一步研究。

我们采用第一原理计算方法系统研究了富铯 σ 析出相对 W 中氢溶解和聚集行为的影响。氢在 σ 相中间隙位置的溶解能范围为 0.47 eV-1.63 eV, σ 相中约有 77% 的间隙位置的氢溶解能比其在本征钨低, 且在最稳定位置的溶解能比本征钨中低~50%, 这表明富铯 σ 相对钨中氢溶解具有显著促进作用。空位型缺陷是钨中氢主要的聚集区域。 σ 相中铯空位和钨空位的形成能分别为 2.18 eV 和 2.05 eV, 比本征钨中空位形成能低 ~33%, 因此 σ 相中更容易形成空位。我们进一步研究了氢与 σ 相中铯/钨单空位的相互作用。单个氢在铯和钨单空位中的捕陷能分别为 -0.72 eV 和 -0.56 eV。空位中氢捕获能将随着氢原子个数的增加而逐渐升高, 铯/钨单空位中第 8 个氢原子的捕获能恰好都大于零, 表明 σ 相中单空位仅能捕获 7 个氢原子, 这弱于本征钨中空位的氢捕获能力。综上所述, 虽然 σ 相中单空位氢捕获能力比本征钨中弱, 但是氢在 σ 相中间隙位置的溶解能和 σ 相中空位形成能都比本征钨低很多。因此, 富嬗变元素析出相的存在极有可能促进氢在钨中的滞留, 成为钨中氢的聚集区域。

关键词: 富嬗变元素析出相; 氢; 钨; 溶解; 聚集

A03-P54

中低放核废水水泥固化体的水化和无机盐赋存状态研究

郑召^{1,2}, 李玉香^{1,2}, 马雪^{1,2}

1.西南科技大学材料学院

2.环境友好能源材料国家重点实验室

采用水泥固化法对模拟核废液(主要核素为 ^{137}Cs , ^{90}Sr , 主要含钠盐(质量分数>15%))进行固化并在普通硅酸盐水泥中掺入矿渣、粉煤灰等矿物掺合料, 研究掺合料对固化体水化特性和固化体中无机盐赋存状态的影响。采用 SEM, XRD, FT-IR 及 AAS 对核废物固化体的微观结构、物相组成及离子浸出率进行了表征与分析。结果表明: 引入矿物掺合料能降低水泥固化体中无机盐的浸出率, 尤其掺入矿粉使无机盐的浸出率降至 82.5%; 粉煤灰的掺入降低了固化体的水化放热, 延缓了水化进程; 核废液中无机盐浓度越高, 固化体的水化也越缓慢, 水化产物的生成受到抑制; 废液中大部分无机盐以沉淀形式存在于硬化水泥石的孔隙中或滞留在水泥水化产物中; 矿物掺合料引入大量 SiO_2 , 使得水泥石中 $\text{Ca}(\text{OH})_2$ 相基本消失, C-S-H 凝胶的含量大幅度提高, Ca^{2+} 的浸出率降低, 固化体的耐浸泡性提高; 同时, 部分 Na^+ 进入 C-S-H 凝胶的层间位置从而提高盐的包容量; 核废液中 Na^+ 的浓度会影响固化体中 Ca^{2+} 的浸出率, 从而影响固化体的长期稳定性。

关键词: 水泥固化; 无机盐; 浸出率; 水化放热; 包容量

A03-P55

机加工对奥氏体不锈钢应力腐蚀敏感性的影响研究

武焕春, 李成涛, 方可伟, 薛飞, 张国栋
苏州热工研究院有限公司

奥氏体不锈钢是核电站设备重要的结构材料, 应力腐蚀是其主要的失效形式之一, 而材料表面冷加工会加速应力腐蚀裂的萌生。核电站常用构件在制造与装配过程中进行的表面机械加工、表面处理均会影响材料表层的微观结构、金属物理特性和界面反应, 从而影响材料在核电站高温高压水环境中的应力腐蚀行为。本研究利用慢应变速率试验机 (Slow Strain Rate Test, SSRT) 对铣削加工后的 304L 和 316L 奥氏体不锈钢样品在 300℃ 的高温高压水环境下进行应力腐蚀敏感性评价。研究表明: 两种不锈钢样品在经过铣削加工后, 样品表面形成了一层 100μm 左右的变质层, 其中最外层为 3μm 左右的纳米晶层。SSRT 试验结果表明, 不同工艺机加工后的样品应力腐蚀敏感性均明显增加, 由抛光后样品的敏感性不足 10% 增加到机加工后的 20-30%。断口分析发现, 机加工样品的断口呈解离开裂, 而抛光后样品为韧性断裂。进一步观察发现, 机加工样品的裂纹起源于机加工变质层, 变质层中的纳米晶层出现大量沿晶开裂, 并由此导致整个样品的断裂。综合分析可知, 在 SSRT 试验过程中, 由于变质层晶体缺陷严重, 力学性能恶化, 导致裂纹萌生抗力下降, 应力腐蚀敏感性增加, 特别是纳米晶层的存在, 为沿晶应力腐蚀开裂提供了便利。

关键词: 奥氏体不锈钢; 机加工; 变质层; 高温高压水; 应力腐蚀

A03-P56

重离子辐照引起的钠硼硅酸盐玻璃机械性能变化的组分相关性研究

律鹏, 陈亮, 张冰焄, 袁伟, 段丙皇, 赵彦, 王铁山
兰州大学

硼硅酸盐玻璃被认为是目前最有希望应用于高放废物地质处置的候选固化体材料。服役期间的玻璃固化体将遭受来自高放废物中放射性核素的长时间、大剂量的辐照损伤, 导致固化体机械性能降低, 加剧包容在其中的放射性核素向周围环境扩散、危及生态系统和生物圈的安全。而研究表明该类型玻璃的抗辐照性能主要由其基础组分--钠、硼、硅决定; 另一方面, 根据硼硅酸盐玻璃三元网络结构模型, 玻璃的网络结构由硅硼比 K、钠硼比 R 直接决定。

本工作中, 样品组分是通过控制了 K 值不变而 R 值以此减小制备的。实验上采用 8 MeV Au³⁺模拟固化体服役期间的辐射场, 借助纳米压痕仪、拉曼光谱仪研究了不同组分的三元 Na₂O-B₂O₃-SiO₂ 玻璃 (简记为 NBS 玻璃) 的辐照导致的机械性能和微观结构的变化。

研究发现: 三种样品的平均硬度值和约化杨氏模量值均随辐照注量的增加而降低, 且变化量具有组分关联性; 然而经平均硬度和约化杨氏模量衡量的样品韧性在辐照后基本不发生变化。该结果还表明 R 值小的三元钠硼硅酸盐玻璃样品在相同重离子辐照下的机械性能越不容易受影响。根据现有结果和文献调研, 我们推断、样品硬度和模量下降的原因可能与辐照导致的相分离、聚合度降低、体积膨胀等因素有关。

关键词: 钠硼硅酸盐玻璃; 重离子辐照; 硬度; 模量; 组分相关性

A03-P57

最终退火温度对 SZA-6 锆合金包壳管材耐腐蚀性能的影响

杨忠波¹, 廖京京¹, 邱绍宇¹, 程竹青¹, 刘鸿¹, 吴宗佩¹, 邱军¹, 王练², 高博²

1. 中国核动力研究设计院 反应堆燃料及材料重点实验室

2. 国核宝钛铝业股份公司

用高压釜腐蚀实验研究了 480℃、510℃ 及 560℃ 最终退火的 SZA-6 锆合金 (Zr-0.5Sn-0.5Nb-0.3Fe-0.015Si) 成品包壳管材试样在 360℃/18.6MPa 纯水和 360℃/18.6 MPa/0.01 mol/L LiOH 水溶液中的耐腐蚀性能, 用 EBSD、TEM 和 SEM 分析了合金腐蚀前后的显微组织。结果表明, 在两种水化学介质中分别腐蚀 500 d 后, 三种 SZA-6 合金试样腐蚀增重均低于 Zr-4 合金; 长期腐蚀后, SZA6 合金试样在纯水中的腐蚀增重相差不大, 但在 LiOH 水溶液中的腐蚀增重会随最终退火温度的增加而明显增加; 随着最终退火温度的提高, 合金管材中大于 15° 的大角度晶界及再结晶程度增加, 第二相均呈细小、弥散、均匀分布, 平均直径约 120nm, 虽然第二相的尺寸分布相接近, 但第二相中的 Nb/Fe 比值增大; 合金长期腐蚀增重的高低与氧化膜平行裂纹的多少以及氧化膜/基体界面处的氧化膜生长不均匀程度呈对应关系; 提高最终退火温度, 将促使合金形成细小均匀的再结晶晶粒, 进而对合金的耐腐蚀性能有利, 但同时降低了 αZr 基体中 Nb 的固溶含量, 这又将不利于合金的耐腐蚀性能, 合金在两种水化学介质中的耐腐蚀性能与其再结晶程度及第二相中的 Nb 含量相关。

关键词: Zr-0.5Sn-0.5Nb-0.3Fe-0.015Si 合金包壳管材; 最终退火温度; 腐蚀; 显微组织; 氧化膜

A03-P58

大晶粒二氧化铀芯块的制备技术研究

高瑞¹, 杨振亮¹, 李冰清¹, 刘徐徐¹, 钟毅¹, 刘彤², 黄华伟², 马赵丹丹²

- 1.中国工程物理研究院材料研究所
- 2.中广核研究院有限公司

事故容错燃料 (Accident Tolerant Fuel, ATF) 是在 2011 年福岛核事故之后新提出的概念, 其具体是指与目前的燃料体系相比, 能够在较长时间内抵抗冷却剂丧失事故, 同时还能保持或提高其在正常工况下性能的燃料系统。大晶粒二氧化铀芯块是 ATF 重要的材料体系。晶粒尺寸的增大可以减少热传导在晶界处的损耗, 从而提高芯块热导率。同时, 大晶粒二氧化铀芯块具有相对于现有芯块更强的裂变气体释放能力。因此大晶粒二氧化铀燃料能够提高燃料系统在事故工况下的抵抗能力, 从而提升燃料的安全性。

本文采用添加烧结助剂, 通过其在高温烧结过程中与二氧化铀的扩散活化过程, 提高燃料芯块的晶粒尺度。实验结果表明, 该方法制备得到了平均晶粒尺寸超过 100 μm 的大晶粒 UO_2 芯块, 相对于标准芯块晶粒尺寸提高了一个数量级。该芯块预期具有优异的事故容错性能。

关键词: 事故容错燃料; 大晶粒; 二氧化铀; 热导率; 裂变气体释放

A03-P59

Ti35 合金在含氟离子的硝酸中电化学腐蚀研究

徐建平^{1,2}, 苏航标¹, 郭荻子¹, 王晓¹, 赵永庆¹, 许并社²

- 1.西北有色金属研究院
- 2.太原理工大学新材料工程技术研究中心

Ti35 合金具有优良的耐腐蚀性能, 可在沸腾状态下高浓度的氧化性酸介质中进行长期工作, 是商业后处理理想的设备用材。本文采用电化学测试系统测试了 Ti35 合金在含有不同氟离子浓度的 6M 硝酸溶液中的开路电位 (OCP)、极化曲线、电化学阻抗谱 (EIS), 探讨了氟离子浓度对 Ti35 合金耐蚀性能的影响。结果表明: 氟离子加入能够降低 Ti35 合金的耐蚀性。随着氟离子含量的增加, Ti35 合金的 OCP 中腐蚀电位负移; 极化曲线中, 氟离子浓度为 0-10ppm 时, 腐蚀电流密度变化 4.64%, 氟离子浓度大于 50ppm 后, 腐蚀电流密度呈线性增加, 极化电阻呈降低趋势; EIS 曲线中相位角角度降低, 宽度变窄。电化学测试结果综合表明: 影响合金耐蚀性的氟离子浓度临界点约为 50ppm, 氟离子浓度小于 50ppm, 合金耐蚀性变化不大, 氟离子浓度大于 50ppm 后合金耐蚀性急剧下降。作者应用混合电位理论解释了氟离子浓度对合金耐蚀性的影响, 同时解释了 Ti35 合金耐蚀性下降是由于氟离子取代合金表面生成的氧化膜中的氧离子, 导致合金表面氧化膜被破坏。

关键词: Ti35 合金; 后处理; 氟离子; 电化学; 腐蚀

A03-P60

连续网状结构 Ti_2AlC 增强 UO_2 复合材料的热物理性能

李冰清, 杨振亮, 高瑞, 褚明福, 钟毅, 刘徐徐, 王志毅, 黄奇奇, 段丽美
中国工程物理研究院材料研究所

UO_2 作为核燃料芯块材料广泛应用于商业压水堆中。然而 UO_2 的热导率很低, 容易在芯块内部引发严重的热应力, 甚至引起芯块破裂、失效等严重后果。 Ti_2AlC 具有高熔点、优异的抗辐照性能、良好高温热导率以及与 UO_2 良好的热膨胀匹配性, 是一种很有前景的 UO_2 增强相。本研究采用放电等离子体烧结 (SPS) 制备出连续网状结构 Ti_2AlC 增强 UO_2 复合材料, 研究了 $\text{Ti}_2\text{AlC}/\text{UO}_2$ 复合材料的高温热物理性能及 SPS 烧结机制。研究表明, 采用 SPS 烧结可在较低的烧结温度和较短的保温时间下实现 $\text{Ti}_2\text{AlC}/\text{UO}_2$ 复合材料的致密化烧结, 并且可显著抑制 Ti_2AlC 与 UO_2 的界面反应。 $\text{Ti}_2\text{AlC}/\text{UO}_2$ 复合材料的高温热导率较 UO_2 显著提升。在室温-1200 $^\circ\text{C}$ 的测试温度范围内, $\text{Ti}_2\text{AlC}/\text{UO}_2$ 与 UO_2 的热膨胀系数相近。

关键词: Ti_2AlC ; SPS 烧结; UO_2 ; 热导率

A03-P61

氩等离子体辐照对钨再结晶行为及抗热冲击性能的影响

祝屹达¹, 袁悦¹, 郭望果¹, 程龙¹, 练友运², 吕广宏¹

- 1.北京航空航天大学物理科学与核能工程学院
- 2.核工业西南物理研究院

钨的熔点高、热导率好且氢滞留量低，是聚变堆面向等离子体的重要备选材料之一。然而在服役过程中，钨将长时间持续的承受氦等离子体辐照和高热辐照，长时间的热辐照将引起钨的再结晶，从而导致强度和韧性降低，抗热冲击性能弱化。同时，氦等离子体辐照对钨的微观结构及组织演化有影响，并会影响钨的再结晶行为及其关联的抗热冲击性能。因此，研究等离子体辐照作用对钨再结晶行为及抗热冲击性能的影响规律及机理很有意义。本实验主要研究氦等离子体辐照对钨再结晶行为的影响，并利用高能电子束模拟瞬态热负荷条件对再结晶钨进行循环热冲击测试，以期评估氦等离子体辐照对钨材料抗热冲击性能的影响。

本文使用商业轧制钨样品（纯度>99.95%，形变量约为80%），对表面进行机械研磨和电解抛光。使用北航直线等离子装置STEP对样品进行氦等离子体辐照，束流密度为，辐照剂量为，辐照温度为300℃，氦离子入射能量为60 eV。随后使用真空退火炉将辐照样品和空白样品在1200℃下保温一小时。保温后通过背散射电子成像观察样品表面再结晶情况，统计发现空白样品表面约80%区域发生再结晶，氦辐照样品表面约20%区域发生再结晶，即氦等离子体辐照有效的降低了同等退火条件钨的再结晶比例。

随后在 高能电子束实验平台 EMS-60 上模拟边界局域模 (ELMs) 的热冲击条件，对以上两组再结晶后的样品进行不同功率的热冲击测试，功率密度 0.6-1.2 GW/m²，脉冲时间 1 ms，脉冲间隔 2 s，脉冲次数 300，获取两组样品的开裂阈值并做对比，从而评估氦辐照抑制钨再结晶对其抗热冲击性能的影响。具体实验结果将在本次会议中展出。

关键词：氦；等离子体；钨；热冲击

A03-P62

辐照对 U₃Si₂-Al 弥散型燃料元件芯体中反应层的影响研究

何文，伍晓勇，吴璐，潘荣剑，温榜，朱伟

中国核动力研究设计院第一研究所

反应堆运行时，U₃Si₂-Al 低浓弥散性燃料元件中芯体与基体之间发生界面反应，形成反应层，对燃料元件的热/力学性能造成显著影响。采用带屏蔽的金相显微镜 (OM)、扫描电镜 (SEM) 和能谱仪 (EDS) 对辐照后 U₃Si₂-Al 弥散型燃料芯体中的反应层进行了观察，统计了反应层的厚度、分析了反应层的成分，并获得了其随燃耗深度增加的变化规律。结果表明：当裂变密度从 2.34×10²⁷ 增加至 3.74×10²⁷ f/m³，反应层的厚度从 1.2μm 增加至 3.8μm，反应层的成分可用 U(Si, Al)_X 表示，其中 X 的值从 4.1 增加至 6.2。

关键词：U₃Si₂-Al；弥散型燃料元件；燃耗深度；反应层；显微组织

A03-P63

第一性原理研究 3C-SiC 中 He 原子自捕获行为

赵尚泉¹，冉广¹，邓辉球²，高飞³

1. 厦门大学能源学院，福建省厦门市，361102

2. 湖南大学材料科学与工程学院，湖南省长沙市，410082

3. 美国密西根大学核工程与放射科学系，美国，安娜堡，48109

SiC 因其具有低的热膨胀系数，稳定的化学性质，低的热中子吸收截面，良好的抗辐照性能，在核能领域常作为裂变堆的燃料包壳以及聚变堆的结构材料。在服役过程中 SiC 材料将遭受 He 原子与位移损伤作用，引起其机械性能下降。这些 He 原子包括中子辐照引起的嬗变反应产生的 He 以及聚变反应产生的 He。因此，研究 He 原子在 SiC 材料中的演变行为有利于加深理解其对 SiC 性能的影响。虽然在 SiC 等非金属材料方面，关于 He 与自间隙原子、空位之间的相互作用已有大量研究，但对于 He 原子的自捕获行为则依然需要更研究与理解。而大量的实验与理论模拟发现了 He 在金属材料(如 Fe、W、Mo、Ni 等)中存在较强的引力并能引发 He 的自捕获行为。本研究采用 DFT 系统地研究了 SiC 体系中 C 四面体间隙位 (T_C) 和 Si 四面体间隙位 (T_{Si}) 分别容纳 1 个以及多个 He 原子情况下的 He_n 团簇形成能以及结合能，分析得知 SiC 间隙位中 He 原子间存在微弱的引力，且 He_n 团簇间的结合能随 He 原子数的增多而近似线性增大。然而基态情况下即使由几十个 He 原子组成的 He_n 团簇也不会引发自捕获行为。由第一性原理分子动力学模拟得知，1000K 条件下 T_C 间隙位中 He 难以跃过迁移势垒进入 T_{Si} 间隙位中，He_n 团簇内的 He 原子在各自的 T_{Si}、T_C 间隙位内往复振荡而不发生汇聚。1800K 情况下，团簇中某些结合能较弱的 T_C 间隙位中 He 将进入 T_{Si} 间隙位而形成更为紧凑的团簇，但不至于将晶格原子 C/Si 挤出晶格位置而形成弗兰克尔缺陷对。研究表明 3C-SiC 材料在正常服役温度下不至于发生 He 原子的自捕获行为。

关键词：第一性原理；SiC；He；自捕获

A03-P64

各向异性应变下 H 在 W 中扩散行为的模拟研究

张雪松, 许珂, 牛亮亮, 张颖, 吕广宏

北京航空航天大学

钨(W)具有高熔点、低物理溅射率、不与氢(H)发生化学刻蚀以及低H滞留等优点,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(PFM)。然而,在聚变反应中,PFM不断受到来自等离子体的各种粒子(氢及其同位素,氦,中子)的轰击、瞬态高能沉积或热冲击等,这些作用将造成PFM的辐照效应和损伤,导致材料中缺陷的产生、迁移和聚集。在辐照条件下,PFM中存在着大量的非均匀应变区域,比如,大量H在金属中聚集成泡可产生高达数十个吉帕(GPa)的氢压;高热冲击会导致PFM局部区域产生明显的形变等等。研究在非均匀应变下H及其同位素在W中的扩散机制,可以为W中非均匀应变区域中H的扩散聚集行为提供重要的参考。

本文对在各向异性应变下W中H的扩散行为进行了系统的模拟研究。单个H原子占据本征W的四面体间隙位最稳定,H原子会等概率地朝着周围的各个四面体间隙随机迁移。但是在W中施加[001]方向的单轴应变时,我们发现H在W中会形成两种不等价的H扩散方式。本文首先利用第一原理计算方法(DFT)计算了单轴应变(-2.5%-2.5%)下两种扩散路径的扩散能垒。计算表明,当W晶体处于单轴压缩状态时,沿着应变方向的扩散路径的能垒降低,而垂直于应变方向的扩散路径的能垒升高;而当W晶体处于单轴拉伸状态时,两种扩散路径的能垒增减发生转变。其次,以DFT计算的扩散能垒为输入参数,利用自主编写的面向对象动力学蒙特卡罗程序(OKMC),研究了在单轴应变下H在W中的扩散行为,模拟时间尺度为微秒量级。OKMC的计算结果表明:在一定温度下,相比于无应变时,在单轴拉伸条件下H在W中沿[001]方向的扩散被抑制,H被限制在(001)面上的循环封闭的路径中扩散;在单轴压缩条件下H在W中[001]方向的扩散被促进,而在(001)面上的扩散被抑制。进一步确定了在温度范围为400-1800K时,在单轴应变下H在W中的扩散系数。发现随着温度的上升,应变对扩散系数的影响随之下降。通过比较一系列的扩散系数,发现在大多数情况下,相比于无应变的情况,各向异性应变会降低H的扩散系数。以上结果为研究H在W中的滞留和聚集提供了参考。

关键词: 钨; 氢; 应变; 扩散

A03-P65

高热导率 UO₂ 燃料芯块基本性能研究

马赵丹丹, 严岩, 黄华伟, 薛佳祥, 刘彤, 李锐

中广核研究院

在UO₂基体中添加高热导率的第二相,获得高热导、中子经济性好的增强型UO₂燃料芯块,已成为当前事故容错燃料的研究热点。本文对掺杂第二相的UO₂芯块进行中子经济性分析,研究不同添加物及其含量对燃料中子经济性的影响,结果表明,通过提高复合燃料富集度可以达到和传统UO₂燃料相同的中子经济性。针对制备的UO₂-10vol.%BeO和UO₂-10vol.%SiC燃料芯块进行热导率、热膨胀系数、微观组织等分析测试,发现添加第二相后的两种复合燃料芯块热导率在不同温度下都有较大提升,主要归因于高热导率的第二相形成了有利于热传导的微结构通道。

关键词: UO₂燃料; 高热导率; 第二相添加物; 中子经济性;

A03-P66

浅析 n 值与核级锆合金带材冲压成型关系

徐滨¹, 王彝¹, 胡旭坤¹, 岳强¹, 张鹏飞¹, 毛建中²

1.国核宝钛铝业股份公司

2.湖南大学

格架作为反应堆内燃料组件的框架,具有对燃料包壳起到固定夹持作用,同时保证一回路充分循环。目前国内核级锆合金带材还处于研制阶段,其尺寸精度和理化性能已经与进口带材相当,但冲压成型依然是目前研制中需要突破的难点。本文通过采用相同牌号核级锆合金经过不同加工工艺进行带材制备,对带材力学性能与冲压成型的关系进行研究,发现了在一定范围内,随着n值的提高,冲压成型效果越好,同时给出了Zr-4合金冲带材冲压成型较好的n值区间。

关键词: 核级锆合金带材; n值; 冲压成形

A03-P67

外应变下双相不锈钢铁素体相分解动力学研究

李永胜, 朱礼慧, 刘成威
南京理工大学

Fe-Cr 基合金是双相不锈钢的主要组成, 在高温、辐射等复杂环境下, 铁素体发生相分解, 形成纳米尺度的富 Fe 相和富 Cr 相, 而应变和辐照会加速相分解, 进而使合金的热老化加快, 合金发生脆性时效的风险加大。而外应变下的合金时效显微组织及其动力学研究缺乏, 通过定量模拟研究该合金系的相分解与温度、成分和应变的关系, 获得系统的相分解动力学行为, 对合金服役下组织性能研究有参考价值。

研究了外应变下不同温度、成分的 Fe-Cr 合金三维相场模拟组织, 通过在相场自由能中加入外应变, 系统研究 Fe-Cr 合金以及 Fe-Cr-Al 合金富 Cr 纳米尺度 α' 相的初始分离速率、分离机制和粗化动力学行为。三维原子探针(3DAPT)和透射电子显微镜(TEM)实验与三维相场模拟的数据对比表明, 表明模拟与实验数据具有相似的演化规律, 据此修正模拟参数, 进行外应变下三维量化模拟研究。研究结果表明: 随着温度的升高, 外加应变会更明显加快早期相分离的速率, 且压应变对相分解速率和组织取向影响显著。

关键词: Fe-Cr 合金; 相场模拟; 相分解; 动力学; TEM; APT

A03-P68

涂层锆合金包壳管在模拟 LOCA 工况下氧化行为研究

李思功, 李锐, 黄恒, 刘彤
中广核研究院有限公司

事故容错燃料包壳材料研制目标之一是提高核燃料包壳管抵御事故工况的能力。Cr 金属具有优异的耐高温蒸汽氧化性能且熔点较高, 本文利用物理气相沉积(PVD)工艺在锆合金包壳管表面制备一层致密的 Cr 涂层以提高锆合金包壳管在事故工况下的生存能力。采用综合热分析设备模拟 LOCA 环境研究 Cr 涂层锆合金在该环境下的氧化行为。采用 SEM 对氧化后的样品进行微观分析, 实验结果表明, PVD 工艺制备的 Cr 涂层锆合金可显著提高燃料包壳管抵御事故工况的能力。

关键词: 事故容错燃料; 物理气相沉积; LOCA

A03-P69

SiC/SiC 复合材料包壳研究及相关问题探讨

薛佳祥, 李思功, 李锐, 陈蒙腾, 王诗槐, 刘彤
中广核研究院有限公司

碳化硅(SiC)材料包壳作为事故容错燃料(ATF)的重要方向, 其优异的综合性能决定了其作为燃料包壳的革命性前景, 使用 SiC/SiC 复合材料包壳有望满足更高的核燃料运行温度和实现极致安全。本文对 SiC 包壳进行燃料性能分析, 计算结果表明, SiC 包壳在 LOCA 和 RIA 事故下具有明显的抵御事故能力。通过对 SiC 包壳的结构设计和制备工艺研究, 实现了实验室级的米级薄壁管材制备和基本性能考核评价。在此基础上, 本文提出了 SiC 包壳在走向应用之前存在的问题和面临的挑战。

关键词: SiC/SiC; 燃料包壳; 事故容错; 性能评价

A03-P70

管内 SiC/Al₂O₃ 复合阻氚涂层螺旋波等离子体制备技术研究

金成刚¹, 吴雪梅¹, 诸葛兰剑^{1,2}
1. 苏州大学物理科学与技术学院
2. 苏州大学分析测试中心

阻氚涂层是聚变堆产氚包层和氚工厂技术发展中的关键科学与技术之一, 也是包层和氚工厂功能得以实现及达到氚放射性安全环境标准的重要保障。考虑到未来氚管道和容器储氚容器中存在异形不锈钢部件的问题, 管内阻氚涂层等离子体制备技术成为未来解决工程制备问题的重要研究方向。

本文采用强磁场螺旋波等离子体技术在 316L 不锈钢管内壁上沉积 0.2-5 μ m 厚度的 Al₂O₃ 薄膜, 实验时所用的反应源为铝有机源和 O₂ 气源。316L 不锈钢管内表面沉积 SiC 材料, Ar/Si 有机源为气源, 最大沉积速率可达 3nm/s, 高沉积速率与螺旋波等离子体的高密度、较低离子能量有关。XPS 结果显示样品中没有 Si-Si, C-C 成分的存在, Si、C 化学计量比接近 1:1 的高质量 SiC 材料。

另外, 研究了复合涂层与基体间结合力, 抗电化学腐蚀性能以及耐摩擦磨损性能。借助气体驱动渗透设备(GDP)与热

脱附谱仪 (TDS), 对涂覆在不锈钢基体表面的复合涂层的氡渗透系数进行测试, 对其阻氡性能进行验证。利用电子束焊枪对 SiC/Al₂O₃ 复合涂层表面循环加热和辐照, 测试涂层在基台 400℃ 下, 循环加热和辐照后的涂层剥离开裂情况。

A03-P71

温度对钨氧化钇热轧板的再结晶动力学影响

谷牧, 王康, 咎祥, 罗来马, 刘家琴, 吴玉程
合肥工业大学

钨由于其高熔点, 优异的机械强度, 低溅射产率和高热导性而被认为是未来核聚变反应堆中等离子体材料最有希望的候选材料。其在聚变堆装置中将直接承受 5-20MV/m² 的稳定热负荷和温度梯度, 严苛的服役条件下会使材料发生回复, 再结晶和晶粒粗化, 导致机械性能降低、形成裂纹、材料侵蚀等结果, 进而影响聚变装置的安全性。为了减少再结晶的影响, 采用弥散强化来提高钨的热稳定性, 细小的氧化钇颗粒能有效的提高材料的热稳定性和机械性能, 富集杂质元素, 净化晶界, 减少气体析出和空隙。W-2vol. % Y₂O₃ 采用湿化学法和粉末冶金法制备, 热轧至 50% 变形量。通过在 1250℃、1300℃ 和 1350℃ 下等温退火实验研究材料的热稳定性, 并使用维氏硬度量化的再结晶期间的机械性能变化, 结合经典动力学模型简要描述了回复与再结晶, 引入孕育时间来更好的描述退火期间的机械性能变化。研究结果表明, 在相同退火温度下与相同变形量的纯钨相比, 氧化钇颗粒的引入可大大延缓再结晶的速度, 较低的退火温度下, 存在明显的回复阶段; 在 JAMK 模型中引入孕育时间可更准确的预测再结晶过程。同时再结晶前期速度较低, 后期有所提高。此外, 温度对钨氧化钇再结晶影响较明显, 温度越高, 再结晶速度越快, 温度达到 1350℃ 时, 基本观察不到回复阶段。

关键词: 钨; 氧化钇增强; 再结晶; 硬度

A03-P72

Nb 含量对锆合金中 Zr(Fe,Cr)₂ 型第二相氧化行为的影响

黄娇, 姚美意, 梁雪, 胡鹏飞, 张金龙, 周邦新
上海大学

锆合金由于具有特殊的核性能、适中的力学性能等优点, 被广泛用于压水堆核燃料包壳材料, 其在高温高压水中的腐蚀和吸氢是限制锆合金包壳服役寿命的关键因素。合金化是改善锆合金耐腐蚀性能的有效手段, 而合金元素 Fe 和 Cr 在 α -Zr 中的固溶度很低, 在锆合金中主要以第二相形式析出, 第二相在锆合金氧化过程中的作用还没有统一的认识。本文利用 HRTEM 研究了 Zr-0.75Sn-0.35Fe-0.15Cr-xNb (wt%) 合金中析出的第二相类型随着 Nb 含量变化的情况, 并研究了这些合金在 360℃/18.6 MPa/0.01 M LiOH 水溶液中腐蚀后, 不同 Nb 含量的第二相进入氧化膜后合金元素的分布情况。研究发现随着 Nb 含量的增加, 锆合金中的第二相种类和结构都发生了变化, 由 fcc-Zr(Fe, Cr)₂ 转变为 hcp-Zr(Fe, Cr, Nb)₂; 锆合金中的 Zr(Fe, Cr)₂ 第二相包裹进入氧化膜后, 氧化过程中 Fe 和 Cr 主要向氧化膜外表面扩散, 并且 Fe 的扩散比 Cr 快; Zr(Fe, Cr)₂ 第二相中含有 Nb 时可以抑制第二相中的 Fe 在氧化过程中向外表面的扩散, 并且随着 Nb 含量的增加, 这种抑制作用越明显。从 Nb 与 Fe 合金元素交互作用的角度探讨了 Nb 对锆合金耐腐蚀性能的影响机理。

关键词: 锆合金; 腐蚀; 第二相; 氧化膜; 显微组织

A03-P73

低能高注量氦辐照下 Al_{1.5}CrFeNi 高熵合金辐照偏析行为研究

孙森, 汪渊
四川大学

常规辐照条件下的材料会产生大量的空位型点缺陷和间隙型点缺陷, 而这些点缺陷加速了材料中元素的扩散, 导致材料的辐照偏析。然而在低能高注量离子辐照下, 由于表面溅射效应加强使空位型缺陷显著增加, 这会聚变反应堆中材料辐照偏析 (RIS) 行为带来更多的不确定性。最近有研究发现, 高熵合金在常规剂量辐照下表现出优良的抗辐照偏析性能。因此本文通过等离子体表面相互作用设备 (PSI) 对 Al_{1.5}CrFeNi 高熵合金 (HEA) 薄膜进行氦辐照, 辐照能量为 80eV, 注量范围从 6×10^{18} 到 1.8×10^{21} cm⁻², 对其辐照偏析 (RIS) 行为进行研究。利用掠入角扫描 X 射线衍射仪 (GIXRD), 透射电子显微镜 (TEM) 和扫描透射电子显微镜-附能量色散谱仪 (STEM-EDS), 详细地研究了高熵合金薄膜的微结构演变及其元素含量分布变化。结果表明, 低能高注量氦辐照使高熵合金薄膜的辐照偏析显著增强。这种辐照偏析增强主要是由于表面溅射导致, 使得被辐照的 Al_{1.5}CrFeNi 高熵合金薄膜的表面形成了大量过剩空位型缺陷, 空位型缺陷与合金元素的相互作用不但显著扩大了辐照偏析的影响区域, 而且决定了高熵合金薄膜辐照偏析的趋势。而空位型缺陷与合金元素的相互作用主要受合

金元素的原子尺寸影响，大尺寸原子扩散得更快，而小尺寸的原子扩散得更慢。

关键词：辐照偏析；低能高剂量辐照；耐辐照偏析；高熵合金薄膜

A03-P74

激光热冲击与氦离子辐照协同作用对 W-Y₂O₃ 复合材料显微组织演变规律影响

姚刚，罗来马，咎祥，朱晓勇，吴玉程

合肥工业大学

通过湿化学法和轧制工艺制备了轧制比为 50% 的 W-2vol% Y₂O₃ 复合材料，选择相同轧制比的商业纯钨作为参比样品。对两种材料进行 1100℃，1h 退火处理，以消除材料内部存在的本征缺陷。研究材料在激光热冲击与氦离子辐照下的损伤行为，通过 XRD，FE-SEM，FIB，FE-TEM 对材料损伤行为进行表征。结果显示：W-Y₂O₃ 复合材料相对于纯钨材料抵抗激光热冲击性能更优异，通过对氦离子辐照后表面形貌分析，进一步表明热冲击导致开裂以沿晶开裂为主，此外钨基体辐照损伤与织构取向密切相关。与增加界面密度提高材料抵抗辐照损伤能力相比织构取向对氦离子辐照损伤的抵抗能力更强。在钨基体，fuzz 结构与 Y₂O₃ 颗粒内均发现氦泡存在，并且氦泡形状相比于球形大都以多边形形式存在。

关键词：W-2vol% Y₂O₃ 复合材料；液相法；激光热负荷；离子辐照；显微组织

A03-P75

裂变产物 Sb、Se 对熔盐堆用合金组织和性能的影响

韩汾汾，蔡帅涛，贾彦彦，周兴泰

中国科学院上海应用物理研究所

熔盐堆中金属裂变产物的行为是熔盐堆设计中需要着重考虑的一个问题。已有研究表明裂变产物 Te 会导致合金产生晶间脆性，缩短堆用合金的服役寿命。因此近年来 Te 导致的沿晶开裂问题获得了研究者的重点关注，然而第五、六主族的元素 Sb、Se，也有强烈降低晶界结合力的作用，且更高功率的熔盐堆也将会产生更大质量的裂变产物，因此有必要评估和研究 Sb、Se 对堆用合金组织和性能的影响，为熔盐堆的安全服役运行提供指导意义。

本报告研究了 Sb、Se 对熔盐堆用 Ni-16Mo-7Cr 系高温合金 (GH3535) 组织和性能的影响。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、第一性原理计算等分析方法，观察 Sb、Se 腐蚀后的合金产物组成、微观形貌、拉伸性能以及分析机理，结果表明：(1) 随着 Sb 含量和保温时间的增加，合金表面的腐蚀产物类型变化不大，外表层是 Ni₃Sb₂ 相，内层是富 Cr、Mo、Fe、Sb 层，主要仍是以 Ni₃Sb₂ 产物为主；外反应层厚度只有在较大 Sb 含量和较长保温时间条件下，才有明显增加。当 Sb 含量 ≤ 2mg/cm² 时，Sb 对合金的拉伸性能几乎无影响，但高于 2mg/cm²，合金的拉伸强度明显降低，随保温时间增加，降低的幅度更大。分析认为 Sb 极易与 Ni 发生反应，大量的 Sb 已在合金表面被消耗，造成 Sb 扩散入晶界的含量降低，而第一性原理计算 Sb 降低晶界结合力的程度稍弱于 Te 元素，因此需要大量的 Sb 才能对合金性能产生损伤。

(2) 随着 Se 含量和保温时间的增加，合金外表面的腐蚀产物主要有 NiSe₂，Cr₃Se₄，MoSe₂ 等，而合金内表面晶粒内部生成大量的条状 Cr₃Se₄ 和块状的 MoSe₂；Se 没有明显的沿晶扩散特征；Se 含量对合金的拉伸性能影响不大，但随着保温时间的增加，Se 显著降低合金的拉伸性能。分析认为富 Se 的化合物生成，导致合金在拉应力作用下，会发生裂纹萌生和开裂，造成抗拉强度降低；Se 沿晶界扩散的势垒要高于 Te 元素，这说明 Ni、Mo 等合金元素对 Se 的吸附作用要大于 Te，造成 Se 对合金晶界开裂的影响较小。

关键词：Sb；Se；熔盐堆；Ni-16Mo-7Cr 系高温合金

A03-P76

事故容错燃料候选材料技术研究评估及展望

朱思阳，江小川，贺楷

中国核电工程有限公司

2011 年日本福岛核事故发生之后，为限制和减轻严重事故情况下放射性的大规模释放的后果，事故容错燃料 (ATF) 逐渐成为国际核能界的研究热点。目前事故容错燃料的候选材料技术主要分为包壳材料 (锆合金涂层、先进不锈钢、碳化硅等) 和燃料材料 (增强型二氧化铀、高铀密度燃料、全陶瓷微封装芯块技术等)。本文对比分析了各事故容错燃料候选材料技术的优劣势、研发难度以及目前国内外的研发现状等情况，并根据我国的研发能力、核能发展需求，结合国际事故容错燃料研发规划，给出了适合我国国情的事事故容错燃料候选材料技术发展路线图建议。

关键词：ATF；包壳材料；燃料材料；路线图

A03-P77

离子辐照碳化硅的非晶化机制及力学行为的研究

李健健, 黄鹤飞, 黄庆, 雷冠虹, 闫隆, 林俊

中国科学院上海应用物理研究所

由于碳化硅及其复合材料的高温力学性能、高温化学惰性、低感生放射性和强抗腐蚀能力, 尤其是低中子俘获界面等特性, 使之成为先进反应堆的备选材料。而辐照导致的非晶化是碳化硅作为核材料安全服役面临的关键问题之一。本文开展了Xe离子对SiC晶体的辐照实验, 然后利用拉曼散射光谱、XRD、TEM和纳米压痕仪分别研究SiC辐照后的非晶化的演化与力学性能的变化。研究发现在低辐照剂量下SiC的晶格损伤体现在晶格发生膨胀性应变上, 缺陷的类型主要以点缺陷或点缺陷团簇为主。当剂量达到0.6 dpa时, 样品出现同核键(Si-Si, C-C键), 并伴随非晶化区域出现。级联碰撞产生的同核键区域可能是非晶化的起端。样品辐照层在2 dpa时完全非晶化, 导致的肿胀率大约20-25%。辐照对SiC微结构的损伤导致了力学性能的改变。在低剂量的条件下, 辐照样品的硬度明显的超过了空白样品的, 这是由于缺陷(空位, 团簇等)的钉扎效应所导致的。当样品注入区域完全非晶化的时候, 硬度下降40%左右。辐照样品的硬度是共价键效应和钉扎作用的共同结果, SiC在开始出现非晶化的时候(0.6 dpa), 共价键效应和钉扎作用两者达到平衡。首先把评价合金材料辐照后硬度变化的Nix-Gao模型引入到SiC研究之中。

A03-P78

离子束辐照导致纳米晶碳化硅非晶化的研究

艾文思¹, 张利民¹, Weilin Jiang², 陈亮¹, 王铁山¹

1.兰州大学核科学与技术学院

2.美国西北太平洋国家实验室

纳米晶碳化硅(nc-SiC)比单晶SiC可能具有增强的抗辐照能力, 有可能作为一种新的结构材料被应用到未来的核能系统中。本工作分别使用5 MeV Xe、60 keV C和18 keV He离子在室温下对三种平均晶粒尺寸分别为2.7 nm、6.0 nm和19.7 nm的nc-SiC薄膜及单晶SiC薄膜进行辐照, 然后利用Raman光谱技术研究了离子辐照导致薄膜的非晶化过程。

Raman光谱结果显示随着离子辐照剂量的增大, nc-SiC及单晶SiC表征Si-C振动的特征峰强度逐渐减弱, 而与同核Si-Si和C-C键相关的振动峰强度逐渐增强, 直至薄膜辐照层被完全非晶化, 光谱形状不再发生明显变化。使用Raman光谱中Si-C振动峰的相对强度来表征受辐照薄膜的相对结构无序度, 发现: (1) 对于三种离子辐照, nc-SiC的非晶化剂量随着晶粒尺寸的增大而增加, 但都明显小于单晶SiC的非晶化剂量。对于我们研究的生长在非晶SiC基体中的SiC晶粒, 辐照过程中非晶基体向晶粒内部的外延生长可能是导致SiC晶粒快速非晶化的主要原因。(2) 在相同的原子移位剂量(dpa)下, Xe、C和He离子辐照造成nc-SiC的结构无序度相差不大, 它们导致nc-SiC薄膜非晶化的速率几乎相同。这可能与质量较轻的离子使用了较大的辐照束流强度以及高能Xe离子的电子能量沉积对辐照缺陷的恢复作用有关。

我们的研究结果表明对于不同质量的离子辐照, nc-SiC的抗辐照能力随着晶粒尺寸的增大而增强, 单晶SiC相比nc-SiC具有更强的抗辐照能力。研究结果将为nc-SiC材料在未来核能系统中的应用提供重要的理论和实验依据。

关键词: 纳米晶SiC; 离子束辐照; Raman光谱

A03-P79

聚合物辅助沉降法制备高球型度Li₂TiO₃增殖体

芦伟, 汪卫华, 储德林, 江海燕, 浦文婧, 邓海飞, 祁俊力

中国人民解放军陆军炮兵防空兵学院

目前, 聚变堆固态氚增殖包层中采用的氚增殖材料为锂基陶瓷, 主要有钛酸锂(Li₂TiO₃)、正硅酸锂(Li₄SiO₄)、铝酸锂(LiAlO₂)和锆酸锂(Li₈ZrO₆)等。其中Li₂TiO₃具有化学性质稳定, 机械强度大, 携锂量较高等优点, 成为首选材料之一。基于目前固态包层的设计和氚提取工艺, 增殖材料需要首先制成具有一定形状的增殖体。球形增殖体由于具有较大的比表面积, 小球间有更多的通道, 有利于氚的扩散和释放, 且装卸方便及容易回收等特点, 因而在目前聚变堆设计中应用最为广泛。但是由于增殖体小球较高的性能要求, 目前其制作工艺和流程还不完备, 还处于探索阶段。本文采用一种新型的高球型度陶瓷小球的制备方法——聚合物辅助沉降法, 以微米级陶瓷粉体为原料, 在配制陶瓷浆料时添加有机单体, 在粘性液体中采用沉降法得到球形的陶瓷浆料液滴, 液滴含有的有机单体在沉降过程中受热聚合使液滴转化为小球预体制, 最后通过烧结得到高球型度的陶瓷小球。通过优化工艺流程和小球预体制烧结制度, 制备的小球具有较高的抗压载荷(>18N)和球型

度(0.95~1.02),均匀的粒径(0.8~1.2mm)和孔隙率(15~20%)。该方法主要特色在于小球预制体制备条件温和(50~110℃),在沉降过程中同时完成成球和固化两个过程,简化了预制体的净化和转移工艺,同时得到的产物球型度高、粒径均匀、密实度和机械强度高,便于工业化生产。

关键词: Li₂TiO₃; 氚增殖; 包层; 聚合物; 沉降; 陶瓷小球

A03-P80

韧脆转变区和上平台区辐照对冲击断裂行为的影响

周子扬, 佟振峰, 张长义, 林虎, 连军彦, 杨文

中国原子能科学研究院

反应堆压力容器(RPV)是核电站不可更换的关键部件,RPV材料的性能是决定电站运行安全性和经济性重要因素。利用冲击断裂行为表征的韧脆转变温度是目前用于评估RPV辐照脆化状态的关键指标,因此研究辐照对RPV冲击断裂行为的影响具有重要意义。本文针对辐照前后的RPV钢开展了不同温度下的冲击实验,获得了冲击实验数据,得到了辐照前后的韧-脆转变温度,并对比了辐照前后不同温度的示波曲线,分析了韧脆转变区和上平台区中辐照对冲击断裂行为的影响。研究表明在韧脆转变温度区,辐照后材料的裂纹形成功以及扩展功均有所降低。而在上平台区,辐照后样品裂纹扩展功也有所降低,而裂纹形成功却有所升高;裂纹形成功由弹性变形功和塑性变形功共同组成,辐照后塑性变形功增大是导致裂纹形成功增大的主要原因,分析认为这是由于辐照产生了基体损伤及析出相,可阻碍位错运动,造成位错钉扎,造成了辐照硬化所致。

关键词: RPV; 韧脆转变区; 上平台区; 辐照性能; 裂纹形成功; 塑性扩展功

A03-P81

高温离子束辐照导致无定形碳化硅的晶化研究

潘成龙, 张利民, 陈亮, 艾文思, 王铁山

兰州大学核科学与技术学院

碳化硅(SiC)作为先进的核结构材料,在反应堆中应用会受到高温离子辐照的影响。本工作使用3 MeV Kr离子分别辐照了由脉冲激光沉积法制备的和由离子预辐照单晶SiC导致的无定形SiC薄膜,薄膜厚度约为1.5 μm。Kr离子的辐照温度分别为500、550、700和900 K,离子辐照剂量为 6×10^{15} ions/cm²。使用Raman光谱对辐照后的薄膜进行了分析,结果发现当Kr离子辐照温度为550 K时,在离子预辐照无定形SiC薄膜中观察到了晶化现象,而原生无定形SiC薄膜在更高的700 K温度下才观察到晶化现象的发生。两种无定形薄膜的晶化程度均随辐照温度的增加而增大。在相同的辐照温度下,预辐照无定形薄膜的晶化程度比原生无定形薄膜的高,表明原生无定形薄膜具有更为复杂的非晶网状结构。研究结果对于SiC材料在未来反应堆中的应用可能具有重要意义。

关键词: 碳化硅; 离子辐照; 晶化; Raman光谱

A03-P82

钒合金中析出相形成机理以及析出相/基底界面调控的第一性原理研究

张兴明¹, 王亮¹, 邓磊¹, 汤剑锋¹, 邓辉球², 胡望宇²

1.湖南农业大学

2.湖南大学

钒合金由于其聚变堆环境优异的高温力学性能以及抗辐照特性,使得其成为了聚变堆材料中潜在的第一壁结构材料。钒合金优异的力学性能需要析出相在基体相中均匀析出分布,从而阻碍位错运动强化晶体结构。通过研究溶质、空位、杂质(C or O)之间的结合特性,同时结合研究得到的杂质原子C和O在溶质-空位缺陷对附近的扩散特性,我们得到了钒合金中析出相的形成机理。结果表明析出相形成过程中首先Ti元素与临近的空位结合形成Ti-Vac缺陷对,进而吸引附近的O或者C杂质而形成Ti-Vac-O缺陷团簇,从而长大形成条状的析出相。

最近的实验发现钒合金中的析出相为具有NaCl类型的TiO,并且与基底相的取向关系为:[001]TiO//[001]V,(110)TiO//[100]V。基于此我们构建了TiO析出相/V基底相的界面结构。同时,利用第一性原理研究了合金元素(Ti, Cr, 和Y)在界面处的形成热和溶解能等来分析合金元素在界面处的溶解和偏聚等热力学特性,从而对于析出相的粗化长大等有了更为深入的认识。结果表明Cr和Y优先溶解于V基底相中,而Ti则主要在界面处偏聚。一旦在界面处存在空位,Y则会偏聚于界面附近,这取决于空位可以释放大尺寸Y原子周围的弹性应变。

前期的实验表明,为了降低钒合金的活性,减少辐照后嬗变产生元素放射性的几率,钒合金中只有少量几种类型元素Cr、

Ti、Ta、Al 等可加入，这使得析出相的形成有可能为 MC (M=Cr, Ti, Ta, Zr)。为此我们考虑了析出相为不同成分时，析出相/基底界面的界面形成能以及界面错配率。通过计算不同拉伸以及剪切情况下析出相/基底的异质结构的应力应变曲线，从而得到最优的界面结构。利用得到的模拟结果，希望可以为设计新一代的具有优异力学性能的钒合金提供理论指导。

A03-P83

M5 钼合金包壳材料在堆内的氢化与氧化行为

钱进, 郭一帆, 卞伟, 褚凤敏, 郭丽娜

中国原子能科学研究院

AFA3G 核燃料组件采用 M5 钼合金作为包壳材料, 广泛的应用于我国商业压水堆核电站。钼合金包壳材料在服役期间的腐蚀与氢化性能是制约提高核燃料组件燃耗的重要因素, 为评价 M5 钼合金包壳材料在较高燃耗下的实际服役性能, 在中国原子能科学研究院燃料与材料检验设施(303 热室)上开展了 AFA3G 燃料棒辐照后检验, 并利用金相检验手段观察分析了 M5 包壳材料的氢化与氧化行为。分析结果表明: 在 45GWd/tU 的燃耗下, M5 包壳材料水侧腐蚀正常, 形成致密氧化膜, 最大氧化膜厚度为 11.5 μm ; 包壳内壁与芯块间隙较小的部位存在氧化膜, 也为致密结构, 厚度约 8 μm , 分析认为内壁氧化膜来源于包壳与芯块相互作用; 包壳基体存在氢化物, 从燃料棒底端到顶端, 氢化物形貌逐渐由短粒状过渡到长条状, 取向基本正常, 最大氢含量约 115 $\mu\text{g/g}$ 。

关键词: M5 钼合金; 核燃料组件; 辐照后检验; 氢化物; 金相检验

A03-P84

小样品拉伸测试结果的可靠性评估

刘海亭, 马佳伟, 唐懿, 沈耀

上海交通大学

小型拉伸测试广泛应用于核科学与核工业领域, 如材料的辐照损伤行为、在役反应堆压力容器寿命评估和新材料的力学性能测试等。受制于加工精度、加工质量和样品装卡等因素, 小样品的测试结果可靠性低于常规的标准拉伸样品, 因此有必要对小样品测试结果进行可靠性评估。通常情况下, 标准样品测试结果可靠性可以通过测试结果的重复性来评估; 但由于小样品测试中待测样品数量较少, 难以使用测试结果的重复性进行评估, 因此需要通过其他手段评估小样品测试结果的可靠性。对于连续屈服的金属材料和处于硬化阶段的非连续屈服金属材料, 在达到最大拉伸载荷(颈缩点)之前, 样品标距区域内部处于均匀变形状态。如果样品在达到最大拉伸载荷之前出现明显的应变集中现象, 说明测试结果显著受到了加工或装卡等因素的影响。因此, 可以通过检测小样品标距区域内应变集中程度与载荷变化的对应关系, 评估小样品测试结果的可靠性。本文采用国产低活化钢 CLF-1 制备平行段尺寸为 $2\times 1\times 0.1\text{ mm}^3$ 的小拉伸样品, 采用特殊卡具对样品进行拉伸测试, 并通过数字图像相关(DIC)技术获取样品内部的应变分布; 同时制备等比例的大样品, 将其测试结果作为参照。结果表明, 在达到最大拉伸载荷之前, 如果小样品的标距区域呈现较为均匀的应变分布, 则小样品的测试结果与大样品保持一致, 测试结果可靠; 反之, 如果标距区域在变形过程中伴随较为明显的应变集中, 则小样品的测试结果与大样品发生显著偏离, 测试结果不可靠。因此, 通过 DIC 技术表征小样品标距区域的应变集中程度, 可以有效评估被测样品数量不足时测试结果的可靠性, 避免了传统重复性检测对样品数量的要求。

关键词: 小样品; 拉伸测试; 可靠性; 数字图像相关(DIC); 应变分布

A03-P85

两种改性 310S 奥氏体钢在不同温度下的 Ar 离子辐照对比研究

沈震宇¹, 张伟平¹, 唐睿², 魏雅霞¹, 龙云翔¹, 陈成¹, 周雄¹, 郭立平¹, 邱水²

1. 武汉大学

2. 中国核动力研究设计院

超临界水冷堆(SCWRs)是第四代反应堆堆型之一, 具有热效率高和结构简单等优点。奥氏体不锈钢由于具有良好的抗高温蠕变性能和腐蚀/氧化抗性, 被认为是超临界水冷堆主要的结构材料候选之一。现有评估显示, 310S 不锈钢可以满足超临界水堆中结构材料抵抗腐蚀、氧化、应力腐蚀开裂和蠕变的要求, 然而辐照肿胀对于该材料仍然是一个问题。在本研究中, 针对两种使用不同元素改性的 310S 不锈钢, SC-1(添加锆)和 SC-2(添加铌、钽和钨), 在相同的温度(分别为 290 $^{\circ}\text{C}$ 和 550 $^{\circ}\text{C}$)和剂量(峰值剂量分别 5, 15, 30dpa)条件下进行 120keV 氩离子辐照, 用透射电镜观察辐照析出和气泡, 比较两种元素添加方案的差异。

在 290℃ 下的辐照结果表明，添加的锆元素更有利于点缺陷的复合，而其他三种元素更能促进泡的成核，使得 SC-1 中观察到的泡密度和尺寸均较 SC-2 更小。当辐照温度由 290℃ 提高到 550℃，两种材料中泡的演化对温度变化做出了不同的反应，并出现了含不同元素成分的析出物。在 SC-1 样品中，温度上升后泡的密度下降而尺寸极大地上升，并观察到了富集镍的析出物。而在 SC-2 样品中泡的密度和尺寸均少量增长，同时观察到了铈和钽的析出。实验结果表明，较高温度下锆元素的主要作用由促进点缺陷复合转变为促进泡的泡的长大。铈和钽的析出可降低溶质原子对空位的捕获速率，同时提高空位的扩散速率，增强了泡的形核和长大。不同改性元素在不同温度下影响缺陷演化的可能机制在文中进行了讨论。

关键词：离子辐照；奥氏体不锈钢；气泡；辐照析出

A03-P86

基于 4-乙烯基吡啶锌的配位-共价杂化多孔材料

黄亚文，张全丽，刘剑桥，熊杨，刘丽莉

西南科技大学

铀资源是核工业持续发展的基础资源，是我国核能发展的战略资源，在核能不断发展的背景下，核燃料铀的保障问题日渐突显。近几十年来，为了解决核裂变资源日渐枯竭的现状，海水提铀技术受到了普遍关注。由于高效、快捷等特点，吸附成为人们重点关注的海水提铀技术。常见的吸附材料有无机类吸附剂和聚合物基吸附材料，在无机类吸附材料中金属有机骨架材料（MOFs）尤其受到关注，但 MOFs 材料的制备条件苛刻（通常需要高温水热，反应时间长），同时有机结构可调控性较差。本文在 MOFs 基础上提出了一种新的构建策略（配位-共价聚合策略），即先配位再共价聚合，可在相对温和条件下（<100℃，常压）构建具有共价-配位杂化骨架结构的多孔吸附材料。由于其配位和多孔结构，该材料具有铀吸附能力，吸附量为 88.62mg/g，并具有铀吸附变色效应。配位-共价聚合策略不仅具有良好的骨架结构调控能力，极大地拓展多孔配位聚合物的结构和功能，同时借助于配位结构单元的自组装效应还可获得新的多孔结构，有助于结构与吸附性能研究。更重要的是，配位-共价聚合策略与当前的聚合物吸附材料具有更好的兼容性，可原位制备复合体系，这为后续的新型复合体系研究奠定了基础。

关键词：多孔材料；杂化材料；吸附；铀

A03-P87

钨基 PFM 辐照损伤的评价体系构建探讨

王波¹，吕广宏²

1.北京工业大学

2.北京航空航天大学

钨基 PFM 的辐照损伤包括起泡、裂纹、刻蚀、熔融、起丝等。关于这些损伤对 PFM 的服役寿命产生的独立或协同影响，目前一直没有形成一个直接的对应关系。不仅无法通过损伤对寿命进行量化评价，而且各种损伤之间的定性比较也做不到。其根本原因在于，目前始终没有一个可测量且与 PFM 服役寿命直接相关参量。

PFM 的基本任务是阻挡等离子体，保护 PFC 基体并传导热量。因此，PFM 最基本的“失效判据”就是它是否还能继续阻挡等离子体并导出热量。此外，氢同位素的滞留渗透、尘粒产率等辐照效应如达到了严重影响装置运行的程度，则也可当作一种 PFM 失效判据考虑。根据不同的失效判据，可给出不同的寿命分类

$$L_{PFM} = \text{Min}(L_T, L_R, L_D, \dots)$$

式中， L_{PFM} 为 PFM 的寿命； L_T 表示因辐照损伤造成 PFM 基本任务失效的寿命， L_R 表示由于氢滞留渗透严重而引起失效的寿命， L_D 表示因尘粒产率严重而引起失效的寿命。因此，PFM 的寿命 L_{PFM} 将由各种失效寿命中的最短寿命决定。

依据不同的失效判据，可以给出相应的 PFM 寿命评估的直接参量，再根据辐照效应研究结果，建立各个直接参量受 PFM 本征参量和辐照条件参量的量化影响关系。利用这个关系，将可计算出给定钨基 PFM 在给定服役条件下的寿命。

本报告先重点讨论辐照损伤寿命 L_T 。 L_T 的直接参量就是“厚度”。根据基本任务，只要 PFM 层还剩余足以阻挡等离子体流的厚度，且导热能力足够，则仍可完成其服役功能。因此，起泡、裂纹、刻蚀等辐照损伤对 PFM 寿命的影响都可归结为对于“厚度损失”的影响。

$$L_T = a D/d_{(x,y,z,\dots,m,n,k,\dots)}$$

其中， a 为比例系数； D 是 PFM 厚度； x,y,z,\dots 代表着 PFM 的本征参量，如结构、组织、成分等材料本身特征的相关参量；而 m,n,k,\dots 表示边界等离子体的粒子成分、束流密度、热流密度等各种辐照条件参数。因而 $d_{(x,y,z,\dots,m,n,k,\dots)}$ 就是厚度损失速率，是 PFM 本征参量和辐照条件参量的函数。

“质量损失速率”等价于“厚度损失速率”，在实验研究中更便于测量。利用“质量（厚度）损失速率”这一直接参量作为衡量依据，可以对不同类型的损伤对寿命的影响程度进行定量比较，从而把握新型 PFM 的研发方向。通过大量的各种 PFM 辐照损伤的研究，逐步建立辐照损伤数据库，并完善 $d(x,y,z,\dots,m,n,k,\dots)$ 函数关系，则可初步实现 PFM 的辐照损伤寿命评价。

A03-P88

FeCrAl 合金中 Al 的含量对辐照析出和位错环的影响

周雄，郭立平，张伟平，沈震宇，魏雅霞，龙云翔，陈成，陈一恒，李芳

武汉大学物理科学与技术学院

FeCrAl 铁素体不锈钢因其具有出色的抗高温氧化性能和良好的力学性能，尤其在事故高温下，同钴合金包壳相比具有更好的耐事故性能，已成为 ATF 包壳技术方案中最具工程应用前景的材料之一。FeCrAl 铁素体不锈钢的抗辐照性能是其能否成为核级材料的关键。有研究表明，FeCrAl 铁素体钢的辐照行为与传统的 FeCr 铁素体钢相似。在中子辐照下有伯氏矢量为 $a/2\langle 111 \rangle$ 或 $a\langle 100 \rangle$ 的位错环的形成以及富 Cr 的 α' 相的析出，这些辐照诱发形成和增强的微观结构特征，会导致 FeCrAl 铁素体不锈钢的硬化和脆化。而元素 Al 的添加，对合金的辐照行为有显著影响。

为系统研究 Al 的影响，我们设计并制备了 4 种不同 Al 含量的样品 Fe-12Cr-2Al、Fe-12Cr-4Al、Fe-12Cr-6Al 和 Fe-12Cr-8Al，并在 330°C 下进 Ar 离子辐照，Ar 离子能量为 100KeV，峰值辐照剂量 1、5、10 和 20 dpa。用透射电子显微镜研究了辐照下显微组织的变化。我们发现在所有剂量下和所有样品中均产生了高密度的位错环，四种材料中位错环的尺寸均随着辐照剂量的增大而逐渐增大，密度随着辐照剂量的增大而降低；在相同辐照剂量下，四种材料中位错环的尺寸随着 Al 含量的增加而增大，密度随着 Al 含量的增加而降低；在高剂量下，四种 FeCrAl 铁素体不锈钢中的析出相主要为富 Cr 的 α' 相，随着 Al 含量的增加，析出相的尺寸和密度均有所下降，说明 Al 的存在对 FeCrAl 铁素体不锈钢中 Cr 的辐照析出有一定的抑制作用，但却促进了位错环的长大。

关键词：FeCrAl 铁素体不锈钢；位错环；辐照偏析

A03-P89

微量 Si 对 Zr-Sn-Nb-Fe-Cu 合金腐蚀和力学性能的影响

曾奇锋¹，石慧岗²，陈芙梁¹，李九霄²，陈磊¹，吕维洁²

1.上海核工程研究设计院有限公司

2.上海交通大学材料学院

锆合金由于综合性能优异，被广泛用作核反应堆的包壳材料及其它结构材料。近年来，核反应堆燃料朝着延长循环长度、提高换料燃耗的方向发展，从而对关键核心部件——燃料元件包壳材料用锆合金的性能提出了更高的要求，这需要不断开发耐腐蚀、抗吸氢同时力学性能优良的锆合金材料。

利用真空自耗电弧炉熔炼了两种 Zr-Sn-Nb-Fe-Cu 合金，分别含有 80ppm 和 150ppm 的 Si，均采用 550°C 低温退火和 β 水淬两种热处理工艺制备成片状试样。通过静态高温高压釜腐蚀试验评价两种合金（ZIRLO 合金作对比标样）在 360 °C/18.6 MPa 纯水和 360 °C/18.6 MPa/0.01mol/L LiOH 水中的耐腐蚀和吸氢性能，用扫描和透射电子显微镜以及万能材料试验机分析和测试两种合金的显微组织和力学性能，以研究微量合金元素 Si 和热处理工艺对 Zr-Sn-Nb-Fe-Cu 合金性能的影响。

结果表明，经 550°C 低温退火，两种合金的晶粒均为等轴晶，第二相粒子在基体内部和晶界处同时析出，呈随机分布； β 水淬样品呈现出马氏体板条结构，板条间均匀分布着细小的第二相。纯水和含 Li 水中腐蚀 300 天后，两种锆合金的耐腐蚀性能均优于对比的 ZIRLO 合金，且随着 Si 含量提高，耐腐蚀性能提高，同时 550°C 低温退火样品的耐腐蚀性能优于 β 水淬样品。也就是说，含 150ppm Si 的 550°C 低温退火样品的耐腐蚀性能最好，相较 ZIRLO 合金，其在纯水和含锂水中的耐腐蚀性能分别提高 34.5% 和 48.2%。另外，合金的吸氢量随着 Si 含量的增加而降低，而相对 550°C 低温退火样品， β 水淬样品的吸氢量较低。室温和高温（385°C）拉伸试验结果表明，随着 Si 含量增加，合金的强度增加，延伸率降低；相比于 550°C 低温退火样品， β 水淬样品表现出较高的拉伸强度和较低的延伸率。

关键词：微量 Si；锆合金；耐腐蚀性能；吸氢性能；力学性能

A03-P90

Inconel 690/321 不锈钢异种金属焊接接头组织与性能研究

伍建文

中国核动力研究设计院

我国自主研发的某型号小堆中的 Inconel 690/ 321 不锈钢异种金属焊接接头, 在多层多道焊接中可能出现裂纹、未焊透、未熔合等缺陷, 伴随出现劣化组织, 导致接头性能降低。针对以上问题: 本文通过金相组织分析、化学成分分析、显微硬度测试的研究方法, 开展了异种金属焊接接头组织与性能研究。结果表明: 各区域均为正常的焊接组织, 无明显的焊接缺陷, 劣化区中有 TiC, 但接头硬度整体偏低, 塑性良好; 多层多道焊过程中, 后道层对前道层焊缝区的回火作用, 改善了组织, 性能未受明显影响。

关键词: 异种金属焊接; 环形焊接接头; 金相组织; 性能

A03-P91

碳化硅晶须增强钛硅碳复合材料的制备及其性能研究

周小兵, 荆雷, 黄庆

中国科学院宁波材料技术与工程研究所

采用异相凝聚法在碳化硅晶须 (SiC_w) 表面实现了钛硅碳 (Ti_3SiC_2 , TSC) 粉体的原位包覆, 制备出分散均匀的 SiC_w/TSC 复合材料。通过放电等离子烧结工艺的调控, 在 1350°C , 35MPa 压力的烧结条件下, 获得相对密度约为 98.79% 的 $10\text{wt.}\%\text{SiC}_w/\text{TSC}$ 复相陶瓷。对复相陶瓷的物相及微观结构分析结果表明, SiC_w 与 TSC 界面无明显反应, 无气孔存在。高热导率、高强度 SiC 晶须的引入可提高复相陶瓷室温热导率和弯曲强度, 当 SiC_w 含量为 $10\text{wt.}\%$ 时, SiC_w/TSC 复合材料的热导率达到 40.3 W/mk , 相对于纯 TSC (32.4 W/mk), 热导率提升了约 23.5%; $10\text{wt.}\%\text{SiC}_w/\text{TSC}$ 复合材料室温三点抗弯强度可达 $635.6\pm 43.8\text{MPa}$, 在 800°C 和 1000°C 的高温下, 复相陶瓷的三点抗弯强度可达 384 MPa 和 193.5 MPa , 是同等条件下纯 TSC 强度的两倍, 这为该复合材料在高温及事故容错型核燃料包壳管及核聚变堆流道插件的应用提供了有利的实验支撑。

A03-P92

铝中氦泡随温度演化的原位 TEM 研究

路超, 张厚亮, 赵雅文, 曾荣光, 孟宪东

中国工程物理研究院材料研究所

由于 α 衰变、自辐照等效应的影响, 涉核材料内部在材料老化过程中会形成大量的氦。氦积聚成氦泡, 会进一步影响相关工程材料的物理性质及机械性能, 对工程应用产生重大影响。而理解相关的影响机制是非常重要的课题。从原子层面理解氦泡对材料各方面性能影响的一种方式就是原位高分辨 TEM 表征, 它可以获得在应力、温度、气氛等条件下氦泡对材料原子结构的影响, 具有很高的精度与准确性。

本文中我们对含氦铝薄膜进行了原位加热 TEM 实验研究。首先, 我们采取磁控溅射包覆氦的方式制备了含氦的铝薄膜, 进行了薄膜的相关结构及氦泡形态表征, 以及热脱附实验, 结果表明这种包覆的方式可以很好控制氦泡的含量及形态。其次, 通过改进了原位加热 TEM 样品的制备工艺, 在相应的原位 TEM 加热芯片上制备了高质量含氦铝薄膜的 TEM 样品, 简化了制备流程, 增加了样品加工效率。最后, 我们首次对包覆法制备的含氦铝薄膜进行了原位加热 TEM 实验研究, 根据热脱附实验结果设定加热温度从室温逐渐到 500°C 。原位 TEM 实验结果表明, 随着温度的增长氦泡尺寸从 2 nm 逐渐长大到百纳米; 氦泡随温度增加而逐渐长大的过程是一种氦泡沟联、合并的过程, 可以原位观测到氦泡与氦泡之间逐渐形成明显的沟道; 长大的氦泡并非规则的圆形形态, 而是有明显的与铝相结构有关的几何外形, 表明氦泡在长大过程中并非均匀往外扩展, 而是受到铝晶格结构的影响; 在薄膜的边缘区域, 氦泡伴随着长大有明显的破裂与释放现象。该研究对于理解氦泡对含氦材料热力学性能影响的微观机制具有重要意义。

A03-P93

辐照缺陷形成对钨中氦渗透行为影响的研究

刘凤¹, 周海山², 付恩刚³, 曹兴忠⁴, 罗广南²

1. 南京理工大学

2. 中国科学院等离子体物理研究所

3. 北京大学

4. 中国科学院高能物理研究所

DEMO 及未来聚变堆设计中多采用金属钨作为第一壁材料。在热壁模式运行时, 边界等离子体中的氢同位素 (氘、氚, 简称氦) 将渗透穿过钨壁进入包层模块, 造成冷却剂污染和氦漏失。尤其在高通量 14.1 MeV 聚变中子辐照下, 钨材料中将形成各种缺陷 (位错环、空洞、He 泡等) 累积; 缺陷与氢作用将影响氢渗透行为。目前各缺陷对钨中氢渗透行为的影响及

作用机理尚缺乏深入分析。

本实验利用北京大学 2x1.7 串列加速器提供的 Au^{3+} 离子 (6MeV) 束在室温对钨进行 2×10^{14} , 6×10^{15} ions/cm² 两种剂量辐照。然后对辐照钨在 1073K 进行退火处理以促进钨中空洞的形成 (重点研究空洞对氢渗透行为的影响)。之后采用正电子湮没多普勒展宽谱 (PA-DBS)、透射电镜 (TEM) 手段分析了辐照缺陷。最后采用气相驱动渗透 (GDP) 装置系统研究了辐照钨中的氘渗透行为。

SRIM 模拟指出, 不同剂量辐照在钨的浅表层峰值深度约 250-400nm 处引入了 1dpa、30dpa 的辐照损伤。PA-DBS 结果表明辐照钨中 S 参数增大, 说明在浅表层形成了空位型缺陷; 而高剂量(30dpa)较低剂量(1dpa)钨样品的 S 参数增大不明显, 可能与辐照缺陷随剂量增加趋于饱和有关。聚焦离子束切割出的纵切剖面样品 TEM 观察指出, 辐照层内形成了大量尺度小于 1nm 的空洞; 与 PA-DBS 结果指出的辐照钨中大型空位团簇的形成相吻合。

GDP 渗透行为分析的主要结论有: (1) 各辐照钨的 GDP 实验中, 均有渗透通量与驱动气体压强的平方根成正比, 说明 D 在辐照钨中的渗透仍主要受 D 原子在材料中的扩散过程控制; (2) 仅在首轮渗透过程中, D 在辐照钨中的扩散系数较未辐照钨降低, 且辐照剂量越高, 扩散系数下降越明显; 在第二轮及后续渗透过程当中, D 在辐照钨中的扩散系数与未辐照钨中相当, 表明辐照空洞 (不可逆氢捕获缺陷) 已不再起作用; (3) 在实验 700-1000K 温区, D 在辐照钨中的渗透系数与未辐照钨中的值相当, 表明辐照空洞形成并未影响稳态 D 渗透通量。深入分析可知, 渗透系数是氢渗透达到稳态时测定, 此时空洞捕获的氢与晶格位点中的氢已达局域热力学平衡, 不会影响氢在材料中的扩散截面, 因此不会对渗透系数 (即稳态渗透通量) 产生影响。

本研究可以为聚变中子辐照下的第一壁钨中氘行为预测提供参考。

关键词: 金属钨; 氢同位素渗透; 辐照损伤; 聚变堆材料

A03-P94

BCC 铁中氢原子聚集行为的分子动力学模拟

魏雅霞¹, 郭立平¹, 高宁²

1. 武汉大学

2. 中国科学院近代物理研究所

在聚变反应堆和散裂中子源中, 嬗变产生的大量氢原子对核心部件的辐照缺陷和性能可能产生的影响目前还不明晰。已经发现, 裂变堆中从水环境进入堆内构件的高浓度氢可对辐照肿胀和位错环产生影响。由于实验手段在空间和时间尺度的限制, 我们难以直接观测到氢原子在材料中的扩散、聚集以及和其他点缺陷的相互作用的演化过程。因此利用计算模拟的方法能够帮助我们更好的理解这些微观尺度的辐照缺陷演化机制。本工作以 bcc 铁为研究对象, 应用分子动力学方法, 分别在完美晶格以及在空位团簇中持续增加氢原子个数, 观察此过程中氢原子的行为变化。

使用 *Ashwin Ramasubramaniam* 等提供的势函数进行模拟。模拟结果发现, 氢原子的行为随着氢原子的密度变化而发生变化。在完美晶格中, 少量的氢原子之间的相互作用非常弱, 呈现比较分散的扩散状态, 这也与其他研究者的结论保持一致; 然而随着氢原子密度增加, 氢原子之间的相互作用增强, 聚集在一定的区域内, 但并未形成氢的团簇。这些聚集的氢原子扩散速率大大降低并且绝大部分不再处于四面体间隙位置。在空位团簇中, 可容纳的氢原子数达到饱和后就不再捕获氢原子, 即使在团簇中添加过饱和的氢原子也会被挤出到团簇外的间隙位而难以将周围的铁原子推出间隙位, 因此认为产生冲出位错环的可能性极低。在团簇捕获氢原子数达到饱和后继续增添氢原子的过程中, 越来越多的氢原子被挤到近邻铁原子周围, 这些氢原子将铁原子逐渐向空位方向推动, 使铁原子最终进入团簇内部与空位复合。

关键词: 分子动力学; 高密度氢; 聚集

A03-P95

温度对钨表面氢溅射行为影响的分子动力学研究

李响, 许珂, 郝剑楠, 孟庆玲, 王丽芳, 舒小林, 金硕

北京航空航天大学物理科学与核能工程学院

钨材料具有高熔点、高热导率、不与氢发生化学反应、氢滞留低、良好的抗中子辐照等优点, 被视为未来核聚变反应堆托卡马克装置中最有前景的面对等离子体材料。在聚变环境下, 面对等离子体材料会受到高束流、低能氢原子的强烈轰击, 使得壁材料表面发生严重的溅射及各种辐照损伤, 最终影响等离子体的稳定性、缩短壁材料的使用寿命。因此研究不同温度下, 氢入射对于钨表面溅射行为的影响具有重要意义。

本文使用分子动力学方法研究了温度对钨表面氢溅射行为的影响。分别计算了 300K、600K、933K 和 1200K 四种不同

温度下,不同能量氢(300-1000eV)注入钨{100}表面的溅射率。发现温度相同时,钨表面的溅射率随入射氢能量的升高而升高,且氢在钨中的平均深度分布值增加。当氢的入射能量相同时,钨表面的溅射率随着温度升高而升高,而氢在钨中的平均深度分布值减少。

A03-P96

钨/复合中间层/钢热等静压焊接接头界面组织与性能

王纪超¹,黄建军¹,高翔^{1,2},王万景²,李强²,刘松林²,罗广南²,李建刚^{1,2}

1.深圳大学新能源中心

2.中国科学院等离子体物理研究所

CFETR 水冷陶瓷增殖包层第一壁由面向等离子体材料钨和结构材料低活化铁素体/马氏体钢构成,钨和钢需以冶金结合以获得较好的连接质量和传热效率。但是,钨/钢热物理性能例如熔点和热膨胀系数差异较大,同时二者易生成弱化接头相,很难直接连接。因此钨/钢连接是包层制备的关键技术之一。

采用扩散连接技术,在钨/钢之间添加中间层有望解决这两项技术问题,常用的中间层材料有钛[1,2]、钒、铌,镍等金属,这些单层金属可以有效缓解界面残余应力,但是会与母材反应生成脆化相。为减少脆性相对焊接接头的影响,进一步提高钨/钢连接质量,采用镍/钛/镍,钛/镍,铜/镍三种复合中间层,开展了钨/复合中间层/钢热等静压连接工艺试验,并对焊接接头的组织和性能进行了分析。实验结果表明,采用三种复合中间层均可以实现钨/钢连接。镍/钛/镍,钛/镍复合中间层完全隔绝了铁和钨元素扩散以及钛与钢之间的冶金反应。但镍/钛界面会出现复杂的 Ti-Ni 体系中间相,新相的出现严重弱化了接头连接强度。当采用铜/镍复合中间层时,完全避免了界面脆性相的出现,同时由于铜屈服强度较低,易变形缓释应力,接头最终以塑性方式失效。对钨/复合中间层/钢进行了焊后热处理,钨/镍/钛/镍/钢以及钨/钛/镍/钢接头在冷却时界面处发生断裂,而钨/铜/镍/钢接头保持结构完整。

综上所述,采用铜/镍复合中间层可以完全避免脆性相生成,有效缓解界面残余应力,从而获得连接质量较好的钨/钢接头。

关键词:CFETR;水冷包层第一壁;钨和钢;扩散连接

A03-P97

纳米多孔铜的辐照损伤行为及对拉曼因子影响的研究

付恩刚^{1,2},胡召一^{1,2},王晶³,吕昭平³

1.北京大学物理学院,北京,100871

2.北京大学核物理与核技术国家重点实验室,北京,100871

3.北京科技大学新金属材料国家重点实验室,北京,100083

纳米多孔金属(金、银、铜)凭借其巨大的比表面积、可调的孔隙度、良好的热稳定性与简单的制备过程,在表面增强拉曼(surface enhanced Raman scattering, SERS)光谱领域有着广阔的应用前景。其中,纳米多孔铜凭借其低廉的价格,更是受到了广泛的关注与研究。然而相比于纳米多孔金和银,纳米多孔铜较小的 SERS 因子是其主要的限制因素。众多研究表明,提升 SERS 效应的关键在表面,而离子辐照被广泛证实是一种有效的表面改性方法,因此离子辐照在改良 SERS 基底方面具有很大的潜力。

本实验通过氢氟酸化学腐蚀铜铝非晶前驱体的方法制备出结构均匀的纳米多孔铜基底,选用罗丹明 6G 为探针分子来检测纳米多孔铜基底的 SERS 性能。同时,我们采取自(铜)离子辐照的方法,来调控纳米多孔铜基底的表面形貌与微观结构。拉曼结果表明,铜离子辐照后的纳米多孔铜基底的 SERS 因子可显著提高数倍。我们通过进一步的 SEM 与 TEM 分析发现,由于离子辐照的溅射效应,铜离子辐照后的纳米多孔铜骨架表面相比于辐照前会变得粗糙,且伴随着细小的铜颗粒附着,而这些粗糙的骨架表面正是 SERS 效应中的“热点”区域,因此铜离子辐照可通过调控纳米多孔铜的表面微观结构来显著增强其 SERS 因子。此外,离子辐照表面改性的方法也极具潜力应用于其他 SERS 基底。

关键词:纳米多孔铜;表面增强拉曼;离子辐照;骨架表面;粗糙

A03-P98

离子辐照引起纳米孪晶铜退孪晶机制的研究

付恩刚¹,杜进隆^{1,2},M.M. Li³,M. Kirk³

1.北京大学物理学院,北京,100871

2.北京大学核物理与核技术国家重点实验室,北京,100871

3.美国阿贡国家实验室,伊利诺伊州,美国,60439

由于纳米孪晶金属中的孪晶界能够增强材料耐辐照性能，因此纳米孪晶金属的辐照效应近年来获得了广泛研究。然而，由于孪晶结构在离子辐照条件下不稳定，纳米孪晶材料在辐照下会表现出退孪晶现象。退孪晶现象在材料的力学变形中已经被广泛研究，其退孪晶过程是通过共格孪晶界 (coherent twin boundaries (CTBs)) 或者非共格孪晶界 (incoherent twin boundaries (ITBs)) 在应力下发生迁移完成。由于辐照引起的应力是辐照缺陷附近的局部应力，这和力学变形引起的宏观整体应力不同，因此辐照导致的退孪晶机制和力学变形引起的退孪晶机制很可能不同。

本文通过磁控溅射的方式在单晶硅基片上制备了纳米孪晶铜薄膜，通过原位 Kr 离子辐照观察了离子辐照引起的具有不同孪晶层厚度的非共格孪晶界的迁移行为和退孪晶机制。基于非共格孪晶界的微观结构的不同和其辐照条件下迁移行为的不同，我们定义了两种类型的非共格孪晶界，即固定非共格孪晶界 (fixed-ITBs) 和自由非共格孪晶界 (free ITBs)。结果表明，固定非共格孪晶界在辐照条件下保持稳定，而自由非共格孪晶界在辐照条件下发生迁移，且其迁移行为和孪晶层厚度有关。此外，我们也观察到共格孪晶界迁移引起的退孪晶现象，进一步研究表明，辐照引起的自由非共格孪晶界作为共格孪晶界的一部分并发生迁移是导致共格孪晶界迁移的原因。自由孪晶界迁移是辐照引起退孪晶的真实原因。本文研究的辐照引起孪晶界迁移的机制，将为辐照引起纳米孪晶铜中退孪晶的机制提供更进一步的理解。

关键词：共格和非共格孪晶界；离子辐照；纳米孪晶；退孪晶

A03-P99

Cu/V 多层膜电学性能及离子辐照对电学性能影响机制的研究

付恩刚^{1,2}，王佩佩^{1,2}，王兴军³，徐川^{1,2}

1. 北京大学物理学院，北京，100871

2. 北京大学核物理与核技术国家重点实验室，北京，100871

3. 北京大学区域光纤通信网与新型光通信系统国家重点实验室，北京，100871

本文旨在通过电学性能的角度研究 Cu/V 多层膜材料的辐照损伤机理。实验采用磁控溅射方法，在表面镀有 SiO₂ 薄膜的 Si(100) 单晶基底上制备不同界面密度的 Cu/V 多层膜样品。并利用四探针法测量辐照前后实验样品的电阻率。利用透射电子显微镜获得辐照前后样品的微观结构。实验表明相同界面密度下，由于声子散射作用，多层膜电阻率随温度升高而升高；相同温度下，多层膜电阻率随界面密度增大而增大；辐照后多层膜电阻率相较原始样品均增大。

对于辐照前的多层膜电阻率，其主要影响因素为界面散射以及晶界散射。界面密度较小时，晶界散射起主导因素，界面密度较大时，界面散射起主导因素。综合利用 F-S 模型、M-S 模型、两种散射在多层膜中不同的串、并联机制以及在不同界面密度下所占比重不同，我们得到了 Cu/V 多层膜电阻率与单层膜厚的具体函数关系式。

对于辐照后的多层膜电阻率，除辐照前的影响因素外，主要有辐照引起缺陷的影响以及界面的影响。辐照后产生的缺陷增加了电子散射，从而使得多层膜电阻率增加。而界面在辐照后多层膜的电阻率的影响机制中发挥双重作用，不仅可以吸收辐照引起的缺陷从而降低电阻率，本身亦是一种面缺陷影响电阻率。辐照后界面粗糙度变大，增强了电子非弹性散射，从而使得电阻率增大。结合以上因素，我们对辐照前多层膜电阻率模型进行修正，得出辐照后的 Cu/V 多层膜电阻率与单层膜厚的具体函数关系式。本文的研究，为从电学性能角度研究材料耐辐照性能提供了基础。

关键词：Cu/V 多层膜；电阻率；离子辐照；界面；晶界

A03-P100

高束流氘等离子体辐照下化学气相沉积钨中氘滞留与起泡行为研究

尹皓，程龙，袁悦，吕广宏

北京航空航天大学

商业聚变电站的最终实现依赖于材料问题与氘自持问题的解决。在磁约束聚变装置偏滤器部件附近，壁材料将持续受到束流密度高达 $10^{22} \sim 10^{24} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ 的氢同位素等离子体轰击。等离子体轰击下氢同位素将进入材料内部并被缺陷捕获，减少了氘回收量，降低了氘的循环效率，从而对装置氘自持产生重大影响。探索如何降低壁材料中氢同位素的滞留量，对维持聚变装置氘自持具有重要意义。

晶界的结构和性质影响着金属材料的物理和化学性质，并对氢行为具有重要影响。本研究从调控晶界特征进而改变材料微结构的角度出发，采用具有不同晶界密度与晶粒尺寸的钨材料开展高束流密度氘等离子体辐照实验，探索晶界参数与氢同位素行为之间的关系。

本文采用化学气相沉积钨 (CVD 钨，高、低两种晶界密度) 和轧制钨，开展氘等离子体辐照实验，辐照参数为：样品温度 513 K，束流 $1.2 \times 10^{24} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ，剂量 $2 \times 10^{26} \text{ m}^{-2}$ 。观察表面形貌发现，轧制钨表面氢致起泡现象明显，在晶内、晶间形成

数十微米尺寸的鼓泡结构；低晶界密度 CVD 钨表面仅有极少量的鼓泡结构；高晶界密度 CVD 钨表面可观察到亚微米尺寸鼓泡结构。由热脱附谱获得的氘滞留和捕获信息可知，相较于轧制钨，低晶界密度 CVD 钨的滞留量明显减少，而高晶界密度 CVD 钨的滞留量显著增加。

结合两种晶界密度 CVD 钨中氘滞留行为，我们认为 CVD 钨中存在的垂直于表面的晶界以及适中的晶界密度，是其滞留量低于轧制钨的主要原因。我们将开展进一步实验，优化晶界参数进而降低氘同位素滞留量，为未来聚变装置中壁材料的设计与研发提供实验参考。

关键词：辐照；氘等离子体；化学气相沉积；晶界密度

A03-P101

基于离子注入技术直接制备氮掺杂的石墨烯

付恩刚^{1,2}, 赵云彪^{1,2}, 赵子强^{1,2}, 王绪³

1.北京大学物理学院, 北京, 100871

2.北京大学核物理与核技术国家重点实验室, 北京, 100871

3.中国工程物理研究院材料研究所, 江油, 621908

石墨烯是一种新型的二维材料, 由于其在机械, 光学, 电学和化学等方面优异的特性, 因此在学术界和工业界备受瞩目。由于本征石墨烯具备零带隙的特点, 限制了其在纳米电子学方面的应用潜力, 因此打开本征石墨烯的带隙具有十分重要的意义。氮掺杂石墨烯可以有效打开石墨烯带隙, 并拓宽石墨烯的应用。目前, 氮掺杂石墨烯的制备方法层出不穷, 但是仍有诸如氮掺杂难以调控, 实验条件复杂, 掺杂不稳定等问题亟待解决。

本工作结合离子注入技术和固态碳源方法, 以非晶碳化硅(a-SiC)为碳源, 将 40 keV 的氮离子注入到多层膜衬底(Ni/Cu/a-SiC/SiO₂/Si)中, 在退火过程中氮原子和碳原子共偏析到样品表面, 并在样品表面直接生长出高质量的氮掺杂石墨烯。本工作发现在石墨烯生长过程中铜(Cu)膜的厚度和多层膜结构(Ni/Cu/a-SiC)是成功制备氮掺杂石墨烯的关键。另一方面 Ni/Cu 薄膜在退火过程中会形成带有浓度梯度的铜镍(Cu-Ni)合金可以进一步促进氮原子和碳原子的共偏析。与其他制备氮掺杂石墨烯方法相比, 离子注入方法能量可控, 剂量可调, 采用这种制备工艺不受气体温度等影响, 制备条件更加容易控制。此外, 离子注入方法与现代半导体技术更加兼容, 有助于推动石墨烯在电子领域的应用以及拓展到其他二维材料掺杂研究。

关键词：离子注入；氮掺杂石墨烯；多层膜衬底；铜镍合金

A03-P102

消除基底效应的纳米压痕测量硬度的新方法

付恩刚^{1,2}, 邱远航^{1,2}, 白泉³, 王佩佩^{1,2}, 王兴军⁴

1.北京大学物理学院, 北京, 100871

2.北京大学核物理与核技术国家重点实验室, 北京, 100871

3.核工业西南物理研究院, 成都, 610041

4.北京大学区域光纤通信网与新型光通信系统国家重点实验室, 北京, 100871

纳米压痕由于能在很小的局部区域对材料进行力学测试, 且具有制样简单, 对测试样品损伤小等特点, 而被广泛应用于材料的微观力学性能表征。利用连续刚度模式(Continuous stiffness mode)可以得到样品的硬度/模量的深度分布信息, 因此纳米压痕测试也被应用于基底上的薄膜层以及核材料的辐照层等不均匀体系的力学性能表征。然而在实际测试过程中, 诸多与材料相关的效应, 如压痕尺寸效应, 基底效应, 压入凸起(Pile-up)等因素会对纳米压痕测量引入不同程度的误差。本文提出了一种在软膜硬基底体系中通过消除基底效应, 从而获得薄膜准确硬度的方法。实验上利用磁控溅射在单晶 Si(100)基底上制备了单层膜厚分别为 50 nm, 20 nm, 10 nm 的 Cu/Nb 多层膜。纳米压痕结果表明 Cu/Nb 多层膜的硬度测量同时受到压痕尺寸效应与基底效应的影响而呈现硬度随深度变化的趋势。有限元模拟与原子力显微实验结果表明在纳米压痕测试过程中, 随着压头压入深度的增加, 底部较硬的 Si 基底会阻挡 Cu/Nb 多层膜向下塑性流动的通道, 最终导致 Cu/Nb 多层膜表面压入凸起(pile-up)区域的形成, 压入凸起(Pile-up)区域面积的低估最终引起纳米压痕测量结果的误差。通过结合本文提出的消除基底效应的方法, 以及修正的 Nix-Gao 模型, 我们消除了基底效应与压痕尺寸效应对纳米压痕测试的影响。修正后 Cu/Nb 多层膜的硬度曲线不随深度变化, 从而得到了较为准确的薄膜硬度值。结果显示修正前后硬度值的最大误差为 14%。本文的实验结果以及模拟结果对于类似的软膜硬基底体系的纳米压痕测量具有指导意义。

关键词：纳米压痕；多层膜；压痕尺寸效应；基底效应；

A03-P103

氮和空位对钨中氦行为影响的第一性原理研究

张宁宁, 张玉娟, 葛昌纯

北京科技大学

采用第一性原理计算方法系统研究了氮(N)元素和空位(Vac)对钨(W)中氦(He)溶解, 捕获和扩散行为的影响。研究发现, 由于He在空位缺陷位可以保持其自身的电子结构, 所以He在W中的空位缺陷位最为稳定。相比于八面体间隙位, He在四面体间隙位更为稳定。空位缺陷可以作为He的捕获中心, 捕获的He原子数多于6个。当W中引入N原子后, 由于N与He之间的吸引作用, N的存在显著降低了He在W中的溶解能; He-N距离是2.11 Å时, He在W中的间隙位的溶解能最小—5.95eV; He-N之间的距离小于4.5 Å时, He在W中的溶解能会随着距离的增加会增加, 并趋于一个稳定值—6.41eV, 既He在纯W中的四面体间隙位的溶解能。当W中存在空位缺陷(Vac)时, N与He之间的作用变为排斥力, 导致He原子不仅不在占据空位中心, 而且He在空位中的溶解能也增加。这种情况下, N-Vac作为He原子的捕获中心, 最多可以捕获5个He原子; 但是, 相比于Vac的捕获能力下降。通过电荷分析发现, 这主要是因为N的存在引起了体系中局域电荷密度的重新分布。引入N原子之后, He向空位扩散的扩散势垒降低。这从动力学上表明, N的存在将有利于WHe的聚集成泡。

A03-P104

钨中过渡金属溶质扩散行为理论模拟研究

孔祥山, 刘长松

中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所

材料制备以及使用中的大量材料性质和现象, 如材料延展性, 成分偏析, 相变, 蠕变, 疲劳和断裂等, 都受到合金元素扩散行为的影响和控制。目前, 在Fe, Al, Mg等体系中都已建立完备的溶质扩散数据库, 并尝试根据诸如主晶格中杂质的尺寸, 化合价或溶解度等因素阐明溶质扩散系数的趋势。不幸的是, 目前, 人们对合金元素扩散行为还远未理解, 尚未建立扩散速率与周期表中溶质位置间关联规律。本文我们利用过渡态理论方法研究了钨基合金中过渡金属溶质原子扩散行为, 结合Fe, Al, Mg, Ni, Co等体系中的研究成果尝试将合金元素扩散行为与周期表中溶质的位置相关联, 并揭示相关规律背后的物理机制。主要研究结果如下:

1、计算获得了过渡金属元素在钨中扩散相关量的数据库, 包含钨中过渡金属溶质形成能, 溶解度, 溶质-空位/间隙结合能, 溶质扩散激活能垒, 指数前因子, 以及扩散系数, 并从原子和电子层次理解影响这些量的各种物理和化学因素。该数据库的建立对于新的钨基合金的开发和设计至关重要。比如研究发现元素周期表中前面的过渡金属元素Ti, Zr, Nb, Hf等溶质在钨中具有高扩散系数和较低固溶度, 具有高晶界偏析趋势, 进而固定晶界运动, 有利于纳米晶钨稳定性。

2、对于以空位为媒介的溶质扩散, 溶质原子的连续跳跃不是随机而是相互关联的, 这是因为溶质原子和空位交换后具有很大的几率重新交换回来。因此在扩散方程中引入关联因子来表征该关联效应。在强关联体系中, 关联效应会显著降低溶质原子扩散系数。我们研究发现关联效应的强弱与体系中溶质-空位交换能密切相关。若交换能小于体系本征空位扩散能垒, 则关联效应强。反之, 则关联效应若可以忽略。

3、过渡金属溶质在不同金属溶剂中的扩散行为可以分为两类: 在具有较小金属半径的溶剂中, 溶质元素扩散行为与溶质金属半径正相关; 而在具有较大金属半径的溶剂中, 溶质元素扩散行为与其d电子填充数密切相关。该规律可以通过溶质原子可压缩性及其弛豫行为解释。

关键词: 钨合金; 过渡金属扩散

A03-P105

离子辐照对金属玻璃力学性能的影响机制研究

付恩刚^{1,2}, 梁艳霞^{1,2}, 邱远航^{1,2}, 徐川^{1,2}, 王佩佩^{1,2}

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

金属玻璃(Metallic glass, MG)又称为非晶态合金, 是一种具有优异力学性能的结构材料。然而室温下由剪切带的扩展而导致的低延展性一直是限制其工业应用的重要因素。离子辐照作为一种有效的材料改性手段, 可以将能量非均匀地沉积到材料内部。入射离子通过级联碰撞可以在材料内部形成大量移位原子, 并在金属玻璃内部产生额外自由体积(Free Volume, FV)

并促进材料内部原子的迁移与纳米晶形核过程。

本文研究了 3 MeV Au 离子辐照对金属玻璃 $\text{Ni}_{50}\text{Nb}_{10}\text{Zr}_{15}\text{Ti}_{15}\text{Pt}_{7.5}\text{Cu}_{2.5}$ 的影响。X 射线衍射分析与正电子湮灭结果显示辐照后的样品仍然保持非晶状态。综合分析正电子湮灭多普勒展宽谱与纳米压痕的实验结果,发现在低辐照剂量 ($1 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$) 下样品内部自由体积含量增加,同时辐照样品硬度值显著减小。当辐照剂量继续增加时 ($1 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$, $1 \times 10^{16} \text{cm}^{-2}$), 被辐照样品的自由体积含量与硬度值逐渐恢复到初始样品的水平。我们认为在低辐照剂量下, 载能离子引起的级联碰撞将破坏原有的非晶内部短程序, 并引入大量自由体积, 从而导致辐照软化现象; 当辐照剂量进一步增加时, 辐照增强扩散效应将促进局域有序结构的形成, 这个过程将导致自由体积的湮灭, 并使体系内部的自由体积含量与硬度逐渐回复。结果表明金属玻璃具有与传统晶体材料不同的辐照响应行为与较好的抗辐照性能, 具有作为核结构材料的潜力。同时实验结果表明离子辐照是一种调节金属玻璃表面结构与性能的有效方法。

关键词: 金属玻璃; 离子辐照; 纳米压痕; 自由体积

A03-P106

二维过渡金属碳化物 MXene 对核素吸附行为的理论研究

张玉娟¹, 石伟群², 葛昌纯¹, 柴之芳²

- 1.北京科技大学
- 2.中国科学院高能物理研究所

二维过渡金属碳化物或碳氮化物, 即 MXene, 是由美国 Drexel University 的 Y.Gogotsi 教授等人在 2011 年发现的一种新型二维结构材料。化学通式用 $\text{M}_{n+1}\text{X}_n\text{T}_z$ 表示, 其中 M 指过渡族金属 (如 Ti、Zr、Hf、V、Nb、Ta、Cr、Sc 等), X 指 C 或 N, n 一般为 1~3, T 指表面基团 (如 O^{2-} 、 OH^- 、 F^- 、 NH_3 、 NH_4^+ 等)。目前, MXene 主要通过 HF 酸或盐酸和氟化物的混合溶液将 MAX 相中结合较弱的 A 位元素 (如 Al 原子) 抽出而得到。它具有高比表面积、高电导率的特点, 组分灵活可调, 最小纳米层厚可控, 已在储能、吸附、传感器、导电填充剂等领域展现出巨大的潜力。

基于类石墨烯 MXene 材料具有大的比表面积以及丰富活性位点, 我们将其拓宽应用于放射性核素吸附分离方面。开展了一系列的相关研究工作, 模拟了过渡金属与碳化学计量比为 3:2 和 2:1 的 MXene 材料 ($\text{Ti}_3\text{C}_2\text{T}_x$, V_2CT_x , 其中 T 为功能化基团) 二维层状材料的电子结构与键合性质。研究了碳化钒、碳化钛层状材料对六价铀离子的吸附性能。模拟分析出铀酰以双齿内配位形式较稳定的吸附在羟基化的碳化钛 (钒) 层状材料上。通过分析吸附结构的态密度、差分电荷等, 发现在吸附过程中化学键作用以及氢键起着主要作用。考虑了阴离子 OH^- , Cl^- , NO_3^- 等对铀酰吸附的影响, 研究了铀酰吸附的溶剂化效应, 发现各种阴离子和水溶液对于铀酰在碳化钛 (钒) 层状材料上的吸附的影响非常小。研究发现, 碳化钛 (钒) 具有较大的理论吸附容量, 是一类在核素的吸附和固定的应用方面非常具有前景的二维材料。

A03-P107

Nb/MgO 薄膜中界面应力梯度消除辐照缺陷机制的研究

付恩刚^{1,2}, 吴早明^{1,2}, 杜进隆^{1,2}, 张建³

- 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.厦门大学能源学院核能研究所

界面能够作为陷阱捕获辐照引入的 He 离子和辐照引起缺陷, 因此, 理解界面在增强材料耐辐照性能方面的作用和机理对设计高耐辐照材料具有重要的意义。本文使用 He 离子同时辐照块体 Nb 片和生长在 MgO(100)基片上的 Nb 薄膜, 并研究界面对辐照损伤的影响。结果表明, 在块体 Nb 片和 Nb 薄膜中, 辐照引起的 He 泡密度随深度的分布不同。在 Nb/MgO 薄膜样品中, He 泡的密度分布的峰值低于其在块体 Nb 片中, 且其峰值对应的深度大于在块体 Nb 片样品中。Nb/MgO 界面的微观结构研究结果表明, Nb/MgO 界面引起的晶格应力导致在 Nb 薄膜中 Nb/MgO 界面附近存在应力梯度, 该应力梯度的存在促使辐照引入的 He 原子扩散系数不同。该研究将界面应力梯度和界面捕获辐照缺陷的能力结合起来, 并从机制上理解了二者之间的相互关系, 对于理解界面增强材料耐辐照性能具有重要的意义。

关键词: 半共格界面; 离子辐照; 氦泡分布; 应力梯度

A03-P108

等离子体辐照注入氦纳米气泡降低辐照损伤钨中氚的俘获

付恩刚^{1,2}, 百泉³, 郑鹏飞³, 许敏³, G.R. Tynan^{3,4,5}, 赵云彪^{1,2}

- 1.北京大学物理学院，北京，100871
- 2.北京大学核物理与核技术国家重点实验室，北京，100871
- 3.西南物理研究所，成都，610041
- 4.加利福尼亚大学圣迭戈分校能源研究中心，圣地亚哥，CA 92093
- 5.加利福尼亚大学圣迭戈分校机械和航空航天工程系，圣地亚哥，CA 92093

研究发现通过等离子体注入到商业 ITER 级钨 (W) 中形成的氦纳米气泡层可以作为扩散阻挡层抑制氘 (D) 的扩散从而显著降低 D 的滞留^[1]。在本研究中，我们证明这种现象在经过移位损伤效应后的样品中依旧发生。首先我们通过 He 等离子体辐照 (样品温度: 643 K, 离子束流: 100 eV, $10^{22} \text{ m}^{-2} \text{ s}^{-1}$, 剂量: 10^{25} m^{-2}) 预处理 ITER 级 W 的样品, 并在其表面形成一层约 1.5 nm 厚的氦纳米气泡层。然后对样品进行 5 MeV 的 Cu 离子室温辐照, 损伤峰处于离样品距离表面 860 nm 处, 其值为 0.001 到 0.1 dpa。作为比较, 未经 He 等离子体辐照预处理的样品也进行了相同的 5 MeV 的 Cu 离子辐照。随后以上所有样品在 373 K 下进行 D 等离子体辐照, 剂量为 10^{24} m^{-2} 。本研究通过透射电子显微镜 (TEM) 研究样品中 He 纳米气泡的尺寸和气泡层厚度, 通过核反应分析 (NRA) 来分析在样品中从表面到 2.5 μm 深度范围内 D 的分布情况和滞留量。NRA 结果显示, 在峰值 dpa 为 0.001 至 0.1 dpa 的范围内, 与未经 He 等离子体辐照预处理相比, He 等离子体辐照预处理样品中的 D 滞留量降低了 47.7% 至 57.3%。上述结果表明在钨基面向等离子体表面组件中, 等离子体注入的 He 纳米气泡层在经历辐照损伤后, 依旧保留降低 D 扩散和滞留的特性。

关键词: 等离子体辐照; 氦泡; Cu 离子辐照; 氘扩散与聚集

A03-P109

450°C 下 Ti₃SiC₂ 的 LBE 初期腐蚀性能研究

芮恒, 朱卉平, 牛风雷, 赵云淦, 张瑜, 杨安霞, 周婷
华北电力大学 (北京)

铅铋共晶合金 (LBE) 由于具有熔点低 (123.5°C)、沸点高 (1670°C)、导热性良好且化学性质稳定等优良特性, 已成为铅冷快堆 (LFR) 及加速器驱动的次临界反应堆 (ADS) 重要的冷却剂候选材料。研究表明, LBE 对结构材料具有严重的腐蚀作用, 可造成高温段管道溶穿以及低温段的管道堵塞, 并导致传热恶化。因此, 具有良好的抗 LBE 腐蚀性能是材料应用于 LFR 或 ADS 的前提条件。MAX 相材料作为一种耐高温、抗腐蚀、导热性及可塑性好的金属陶瓷材料, 被认为是快堆燃料包壳和表面涂层的重要候选材料之一。目前针对该类材料抗辐照性能的相关研究已广泛展开, 但针对其在 LBE 中的腐蚀行为研究十分有限。浸润在 LBE 中的 MAX 相材料受腐蚀作用会在表面形成一定厚度的氧化膜, 该氧化膜不仅使材料表面形貌与结构发生改变, 还会对材料在 LBE 中的润湿性能产生不利影响, 进而导致材料导热性能的退化。目前, 国内外对 MAX 相材料在 LBE 中的腐蚀现象研究较少, 针对材料腐蚀后表面润湿性能的研究仍为空白。

本论文针对短期 LBE 腐蚀下 MAX 相材料表面结构及润湿性能开展实验研究。实验以典型的 MAX 相材料 Ti₃SiC₂ 为研究对象, 在 450°C、饱和氧浓度下的 LBE 中开展腐蚀实验。为研究材料表面腐蚀初期的结构形貌与浸润性变化特征, 分别进行 100h、300h、500h 的短期腐蚀实验。采用扫描电子显微镜 (SEM) 对腐蚀样品的表面和截面形貌及成分分布进行了分析。此外, 采用五点拟合法测定了空白样品及不同条件下的腐蚀样品在 200°C 至 350°C 温度下与 LBE 的接触角随温度的变化信息, 从而得到样品表面腐蚀前后的润湿性变化信息。实验结果表明, 100 小时的腐蚀样品表面已有腐蚀层出现, 且随着腐蚀时间的增长, 样品表面腐蚀层厚度有所增加; 此外, 腐蚀对材料表面浸润性造成一定影响, 具体内容将在论文中做详细讨论。

关键词: MAX 相; LBE 腐蚀; 润湿性

A03-P110

速率方程并行化实现及其应用

吴石, 贺新福, 王东杰, 贾丽霞, 曹晗, 豆艳坤, 杨文
中国原子能科学研究院

热老化或辐照条件下, 材料内部显微组织的演化行为是一个多尺度的时空问题。如何选取一种行之有效的方法来描述多尺度时空中缺陷、溶质的演化, 成为材料热老化及辐照损伤行为研究的重点与难点。半个世纪以来, 速率理论一直是辐照损伤模拟计算的强有力工具, 和分子动力学/动力学蒙特卡罗等方法相比, 速率理论具有计算效率高、无时空束缚的明显优势。然而, 材料中关于聚类动力学的速率方程具有明显的缺点, 即在模拟大规模尺寸缺陷演化过程中, 确定性模拟受到积分方程数目的限制, 严重影响了计算效率, 目前只能采用分组等近似求解方法解决此类问题。本文提出采用高效的并行方法处理大

尺寸的集群问题，极大提高了计算效率和计算精度，并利用材料热老化下缺陷的演化行为进行了对比验证，结果证明速率方程的并行求解是解决材料辐照损伤中多时空尺度缺陷演化过程行之有效的方法。

A03-P111

核级 FeCrAl 合金包壳材料原位性能修复技术

黄孝山，张新房

北京科技大学冶金与生态工程学院 北京 100083

作为核动力反应堆堆芯的核心部件，核燃料元件性能对核反应堆运行的安全性与经济性有着直接联系。但在事故工况下(如日本福岛核事故、压水堆失水事故等)，目前唯一商用的包壳材料锆合金包壳在高温下与水发生剧烈反应，产生大量热量和爆炸性氢气，导致堆芯熔化和发生氢气爆炸等灾难性的后果。研究表明：铁素体 FeCrAl 合金在高温水蒸汽氧化过程中会在表面生成致密稳定的氧化物，能够防止合金被进一步氧化，因其适量 Cr、Al 的 FeCrAl 合金的抗高温氧化能力远远优于 Zr-2、304SS 合金等其他包壳材料，所以其具有极强的抗氧化性，且在正常运行工况下以及事故工况下具有优良的力学性能，因此被列为耐事故包壳的候选材料之一。但 FeCrAl 合金在反应堆运行工况热时效和辐照条件下性能会不断退化，发生严重的老化脆化现象，表现为硬度增加，韧性下降，材料发生脆性断裂的概率增大，直接威胁核电站的安全运行。诸多研究表明，引发 FeCrAl 合金包壳材料失效的根本原因在于材料中不断析出及粗化的 α' 析出相导致了脆化问题。如何控制有害析出相的数量、尺寸及种类是从根本上解决包壳材料老化脆化损伤的核心问题。尽管常规高温热处理手段可以将有害析出相重新溶解到基体中，但是由于核反应堆的特殊性，“非原位的固溶热处理”对发生老化脆化的包壳材料性能的修复基本不具有现场可操作性。

提出利用“析出相和基体电学性能差异”这一新观点对已发生老化脆化的包壳材料进行“原位”性能修复、再生。研究发现：经处理后，铁素体 FeCrAl 合金调幅分解产生的 α' 相重新溶入基体，使老化态维氏硬度值大幅度降低。老化脆化的包壳材料经处理后，材料的强度降低，材料韧性得到极大恢复。

通过系统探讨包壳材料中析出相的形成过程及其尺寸、数量和类型的演变规律，明确老化脆化材料性能修复、再生的机理。该研究有望为候选核电部件的延寿提供一种新方法和新思路，从而降低核电部件的运行成本，推动国产核电关键部件的可靠性和安全性。

A03-P112

321/690 异种金属焊接接头的腐蚀疲劳行为研究

孙永铎¹，汪家梅²，芦丽莉¹，王理¹，邱绍宇¹

1.中国核动力研究设计院反应堆燃料及材料重点实验室，成都，610213

2.上海交通大学，上海，200240

采用1/2紧凑拉伸(Compact tension, CT)试样，研究了690镍基合金与321不锈钢异种金属焊接件的焊缝区在同一温度下溶解氧和溶解氢对690合金焊接接头的裂纹扩展速率的影响规律以及在相同含氧量的情况下应力强度因子对690合金焊接接头的腐蚀疲劳裂纹扩展速率的影响规律，从而理解应力强度因子和溶解氧在促使腐蚀疲劳裂纹扩展中所起到的作用和作用机理。结果表明，含氧和含氢两种水环境中，裂纹扩展速率均随应力强度因子K的升高而升高，并且焊接接头在含氢环境中具有较高的开裂敏感性。研究结果一方面可以解决工程实际应用中690合金腐蚀疲劳裂纹扩展的实际问题，另一方面又可以得到环境加速应力腐蚀疲劳开裂的因素(应力、溶解氧)在该过程中扮演的角色，为国家未来核电选材和预测使用中的设备材料的寿命提供重要的数据支持。

关键词：异种金属焊接接头；腐蚀疲劳；1/2CT 试样；裂纹扩展速率

仅发表论文

A03-PO-01

析出团簇对 17-4PH 马氏体不锈钢阀杆材料热老化效应的影响

白冰，张长义，张佩佩，杨文

中国原子能科学研究院

核电站的阀门阀杆等关键部件常用材料 17-4PH 沉淀硬化马氏体不锈钢，在 300℃左右的高温环境下，会随着服役时间

的延长发生热老化脆化，具体表现为韧脆转变温度升高，上平台能量降低和硬度增加，从而提高阀杆因外力而脆断的风险，对反应堆的安全运行构成潜在威胁，目前在海外核电站已发生了类似案例。因此，该材料的热老化脆化机制研究十分必要。本文针对反应堆上实际服役多年的，已出现明显热老化脆化的 17-4PH 马氏体不锈钢样品，利用小角中子散射和三维原子探针等先进表征手段，研究不锈钢内团簇析出情况。结果表明，相较于未老化样品，热老化后不锈钢中较大团簇（~7nm）尺寸增大，~1nm 左右的团簇体积分数增大明显，说明该材料在高温下长时间服役后，大尺寸纳米析出物保持长大趋势，小尺寸纳米析出物不断析出。结合三维原子探针的结果，这类纳米团簇主要是 Ni、Mn 等元素在富-Cu 团簇处偏析，主要表现为 Cu 芯，Ni-Mn 壳的形式。

关键词：17-4PH 马氏体不锈钢；小角中子散射；纳米析出物；热老化脆化

A03-PO-02

等离子喷涂制备 FeCrAl 涂层的 ATF 锆包壳性能研究

李锐，刘彤

中广核研究院

事故容错燃料(ATF)是新一代先进核燃料的革新方向，涂层锆合金包壳是近期内最有希望实现工业应用的候选材料。FeCrAl 因其具有卓越的耐腐蚀性能以及良好的辐照性能，作为锆合金的涂覆材料受到广泛关注，探索其涂覆工艺、分析其显微组织结构以及高温蒸汽氧化性能乃是开展相关堆外研究工作的关键。本文介绍了中广核研究院在涂层锆合金包壳领域的最新成果，通过等离子喷涂技术制备出锆合金表面的 FeCrAl 保护层；通过 SEM 与 XRD 分析了涂层的显微结构、化学成分分布等；通过高温蒸汽氧化增重数据检测了涂层耐蚀性能，研究其机理并提出工艺改进方案。

关键词：事故容错燃料；等离子喷涂；FeCrAl 涂层；显微结构；高温蒸汽氧化性能

A03-PO-03

基于分子动力学方法研究 BCC-Fe 材料中氦泡硬化

贾丽霞，贺新福，吴石，王东杰，曹晗，豆艳坤，杨文

中国原子能科学研究院

铁素体/马氏体钢是未来先进堆型的候选结构材料。在服役过程中，由于中子嬗变反应会在材料内引入氦。氦在材料内不溶，且易于空位等结合形成氦泡。氦泡在材料内存在会影响材料的服役性能，如通过阻碍位错运动引起材料硬化。本文利用分子动力学方法对 BCC-Fe 材料内刃型位错与氦泡相互作用进行研究。研究表明：刃型位错以切过机制通过氦泡，并在氦泡的两侧均留下长度为 b 的台阶；研究中考虑了模拟温度、缺陷尺寸和氦泡中 He/V 比例对位错切过氦泡所需临界剪切应力值的影响；临界剪切应力值随着温度升高而降低，随着缺陷尺寸的增加而增加。本文中所考虑的 He/V 比例对临界剪切应力影响较弱。基于分子动力学模拟结果预估的氦泡硬化强度因子在可接受范围，且与实验结果基于弥散障碍强化模型得到的硬化强度因子基本吻合。

关键词：铁素体/马氏体钢；辐照硬化；氦泡；分子动力学；硬化强度因子

A03-PO-04

RAFM 钢中氦气的渗透与去除

陆光达，向鑫

中国工程物理研究院材料研究所

中国磁约束聚变工程实验堆（CFETR）是关系到我国未来能源安全、正在重点组织立项的重大科技项目。RAFM 钢（Reduced Activation Ferritic/Martensitic steels）是氦增殖包层使用的结构材料，氦在 RAFM 钢中的溶解、扩散、渗透特性，关系到包层的结构安全、氦回收与燃料循环以及环境安全，是聚变堆工程设计必须的数据。本工作选择国产 RAFM 钢之一的 CLAM 钢，在 573K~873K 温度区间进行了气体驱动的氦、氦渗透实验研究，得出了氦、氦迁移的相关参数，探索了钢中溶解氦的真空热释放去除，所得主要成果如下：

(1) 得出了氦在 CLAM 钢中的溶解度 S_D 、扩散系数 D_D 和渗透率 F_D 表达式分别为：

$$S_D(\text{mol/m}^3\text{Pa}^{0.5})=2.64\times 10^{-1}\exp(-22447/RT) \quad (1)$$

$$D_D(\text{m}^2/\text{s})=1.38\times 10^{-7}\exp(-17271/RT) \quad (2)$$

$$F_D(\text{mol/m.s.Pa}^{0.5})=3.64\times 10^{-8}\exp(-39718/RT) \quad (3)$$

(2) 得出了氙在 CLAM 钢中的渗透率表达式 F_T ，推导出了氙的扩散系数 D_T 、溶解度表达式 S_T 分别为：

$$F_T (\text{mol/m.s.Pa}^{1/2})=2.57 \times 10^{-8} \exp(-38639/RT) \quad (4)$$

$$D_T (\text{m}^2/\text{s})=1.17 \times 10^{-7} \exp(-22011/RT) \quad (5)$$

$$S_T (\text{mol/m}^3.\text{Pa}^{1/2})=2.2 \times 10^{-1} \exp(-38639/RT) \quad (6)$$

(3) 氙的热释放是 RAFM 钢中氙的回收与去除的最重要、快速的方法。理论研究表明，真空热释放条件下，RAFM 钢中氙的浓度 $C(x,t)$ 随时间的变化方式由下式给出：

$$C(x,t)=4C_0/\pi \sum (2n+1)^{-1} \sin[(2n+1)\pi x/d] \exp[-\pi^2 (2n+1)^2 Dt/d^2] \quad (n=0 \sim \infty) \quad (7)$$

式中 Dt/d^2 是材料中氙去除率的特征参数 (D -扩散系数, t -时间, d -钢厚度)。

实验测得 RAFM 钢中氙的真空热释放随时间的变化与理论预测结果符合得很好。

关键词：RAFM 钢；氙；渗透；去除

A03-PO-05

改性聚硅烷的释氙闪烁性能研究

浦文婧，芦伟，汪卫华，祁俊力，邓海飞

陆军炮兵防空兵学院

氙是氢的放射性同位素，主要来源于重水反应堆、聚变堆、氙工艺研究设施、燃料后处理厂等核设施，最重要的用途是与氙进行聚变反应。然而，由于氙具有放射性，且非常容易被有机体吸收，如果泄漏到环境中将会对人体的健康造成伤害，因此氙的环境监测越来越受到重视。环境中氙的含量可以通过追踪其 β 衰变产生的电子来监测。闪烁体是氙检测器中的核心材料。传统的闪烁体材料体系存在着耐用性和环境适应性问题，高分子闪烁体体系整体表现突出，但是耐高温辐射性能较差。本文以耐高温的聚硅烷体系为高分子体系，制备在高温、辐射条件下有抗降解能力，具有更强的环境适应性的新型材料；与此同时，我们利用聚硅烷是 σ 共轭结构的线型高分子材料，具有独特的光电性能，兼具晶体闪烁体和塑料闪烁体的性能优势，通过对聚硅烷进行相应分子链段的改性，制备出具有较高的发光效率的氙检测材料。

本文从聚甲基硅烷 (PMS) 的电子辐照效应入手，通过理论计算初步探讨引入基团对材料的结构影响及与光量子产率之间的关系，为后续设计合理实验提供计算和理论基础。同时，探索接枝改性聚硅烷闪烁体应用于示氙检测领域，将为未来聚变装置中液态壁的运行提供可靠的监测手段，可能在示范堆和商业堆中获得广泛的应用。

关键词：聚硅烷；释氙性能；闪烁体； β 衰变