Численное моделирование транспорта и накопления водорода в многослойных металлических мембранах в условиях повреждающего нейтронного облучения [[1]](#footnote-1)\*)

Суслин С.В., Демидов Д.Н., Ананьев С.С.

НИЦ «Курчатовский институт» Suslin\_SV@nrcki.ru

В докладе описано дальнейшее развитие расчетного кода [1] для моделирования влияния радиационной повреждаемости металлов (а именно образования радиационных вакансий) на кинетические характеристики водорода — эффективный коэффициент диффузии, поток через стенку вакуумной камеры и его накопление в материале для термоядерных и гибридных (синтез-деление) реакторов на основе токамака [напр. 2]. Модель была дополнена для учета изотопного эффекта, учета наличия дислокаций и границ зерен в металлической мембране, а также учета границ между материалами в случае многослойных металлических мембран. Был проведен расчет проникающего потока водорода (для различных изотопов) и его накопления в конструкционных и обращенных к плазме материалах в условиях, характерных для термоядерных и гибридных (синтез-деление) реакторов на основе токамака. На текущем этапе были использованы приближения для моделирования материалов и их комбинаций: хром-циркониевая бронза моделировалась чистой медью, стали моделировались ОЦК-фазой железа. Также моделировался вольфрам, который является кандидатным материалом для обращенных к плазме элементов.

В работе показано, что различные изотопы водорода одинаково удерживаются ловушками в металле в случае гармонического приближения для определения коэффициентов диффузии изотопов. В Fe в температурной области T <600 К наблюдается резкое повышение концентрации удерживаемого в ловушках водорода, а при T <350 К она превышает концентрацию свободного водорода. Данная особенность объясняется накоплением вакансий под действием повреждающего нейтронного облучения при низких температурах, а также снижением возможности водорода покинуть ловушку вследствие низкой температуры. В области T > 1100К в W концентрация удерживаемого водорода на 6‒7 порядков меньше концентрации свободного водорода, что объясняется высокой энергией образования вакансии в W, по сравнению с Fe и Cu, а также активным процессом диссоциации комплексов типа «вакансия-атом водорода». В промежуточной области температур T ∈ [1000К, 1100К] в Cu наблюдается заметное повышение концентрации удерживаемого водорода по сравнению с W. В этом слое до 1% водорода находится в связанном с вакансиями состоянии. Такое повышение концентрации удерживаемого водорода происходит вследствие низкой энергии образования вакансии в меди (что создаёт большое количество ловушек для водорода при наличии повреждающего нейтронного облучения), а также относительно высокой энергии связи комплексов «вакансия-атом водорода».

Были получены оценки характерных проникающих потоков водорода через различные внутрикамерные элементы установки и оценено накопление изотопов водорода в них для условий установки ДЕМО-ТИН [2]. Работа частично поддержана Российским научным фондом (№ 18-72-10162).

Литература

1. Ананьев С.С., Демидов Д.Н., Суслин С.В. «Транспорт водорода и его накопление в вакансиях в процессе повреждающего нейтронного облучения в ОЦК-металлах Fe и W» // ВАНТ. Сер. Термоядерный синтез, 2020.‒ Т. 43, вып. 2, С. 13-24 DOI: 10.21517/0202-3822-2020-43-2-13-24
2. B.V. Kuteev, E.A. Azizov, P.N. Alexeev, V.V. Ignatiev,S.A. Subbotin and V.F. Tsibulskiy «Development of DEMO-FNS tokamak forfusion and hybrid technologies» // Nucl. Fusion 55 (2015) 073035 (8pp) doi:10.1088/0029-5515/55/7/073035
1. \*) [DOI – тезисы на английском](../en/AO-Suslin_e.docx) [↑](#footnote-ref-1)