

Modelowanie segregacji helu w granicach ziaren w stopach Fe-Cr wykorzystywanych w reaktorach syntezy termojądrowej.

Popularnonaukowe streszczenie projektu badawczego

Gwałtowny wzrost liczebności ludzi na Ziemi jest przyczyną nieustannie zwiększającego się zapotrzebowania na energię elektryczną. W celu jej zapewnienia wykorzystuje się liczne zjawiska fizyczne i chemiczne, takie jak choćby reakcje redukcji i utlenienia w ogniach galwanicznych, efekt fotowoltaiczny w panelach słonecznych, czy zjawiska indukcji elektromagnetycznej w prądnicach. Zwiększanie wydajności obecnych elektrowni oraz tworzenie licznych, nowych źródeł energii, bezspornie jest istotną domeną wielu badaczy. Niemniej jednak, jeżeli chcemy zażegnać problem niedoboru energii na wiele pokoleń w przód, to musimy skorzystać z energii wywodzącej się z einsteinowskiego równania: $E = mc^2$, gdzie m – jest masą spoczynkową, a c^2 – jest kwadratem prędkości światła. Od połowy zeszłego wieku ludzkość z powodzeniem wykorzystuje w elektrowniach rozszczepienia ciężkich jąder, gdzie około 0,09% pierwotnej masy przekształca się w energię. Kolejnym krokiem, na miarę XXI wieku, jest wykorzystanie lekkich pierwiastków w reakcji termojądrowej, która od początku naszego istnienia dostarcza nam solarnej energii. Synteza termonuklearna, przekształcająca nawet ok. 1% masy w energię, jest przedmiotem badań od kilkudziesięciu lat, lecz w dalszym ciągu nie zaowocowała działającym reaktorem fuzyjnym. Zarówno fizycy jak i inżynierowie materiałowi mają wiele pracy przed sobą.

Reaktor termojądrowy będzie wykonany z szeregu materiałów, które będą narażone na takie czynniki jak podwyższona temperatura, korozja helowa i wodorowa, czy napromieniowanie wysokoenergetycznymi neutronami. Szczególną uwagę należy zwrócić na segregację helu na granicach ziaren, bowiem ten proces prowadzi do powstania nanometrycznych pęcherzy helowych, co skutkuje kruchością oraz znacznym skróceniem żywotności takiego materiału. Empiryczne badanie tych procesów jest niezwykle trudne ze względu na skalę atomową, w której zachodzi kinetyka tych reakcji, jak również ze względu na obecność nieuchwytnego dla większości metod helu.

W projekcie ITER (*ang. International Thermonuclear Experimental Reactor* - międzynarodowy eksperymentalny reaktor termojądrowy) planuje się wykonać znaczną liczbę elementów reaktora z różnych stali. Projektowanie materiałów do takich zastosowań jest możliwe jedynie na drodze dogłębnej wiedzy podstawowej o procesach zachodzących w strukturze krystalicznej. Z tego powodu głównym **celem projektu** jest określenie wpływu obecności defektów radiacyjnych oraz składu chemicznego na proces segregacji atomów helu na granicach ziaren w stopach Fe-Cr. Prowadzone badania teoretyczne szczególną uwagę zwrócą na stopy o zawartości chromu do 10 % atomowych, co będzie dobrym modelem tak zwanych stali EUROFER. Dodatkowo w projekcie zostały sformułowane trzy cele specjalne: 1) rozwinięcie własnego programu do symulacji atomistycznego kinetycznego Monte Carlo (*ang. Atomistic Kinetic Monte Carlo – AKMC*); 2) określenie jak oddziałują defekty punktowe z granicami ziaren; 3) zbadanie wpływu lokalnego środowiska na właściwości granic ziaren.

Aby tego dokonać, będą przeprowadzone obliczenia oparte na chemii kwantowej, a dokładnie na teorii funkcjonału gęstości. Wyniki tych obliczeń posłużą do określenia właściwości charakteryzujących różne defekty struktury krystalicznej, jak również do dopracowania rozwijanego kodu AKMC. Zaś symulacje Monte Carlo pozwolą na zbadanie procesów kinetycznych zachodzących w materiale oraz pozwolą na badanie stopów w szerokim zakresie składu chemicznego.

Badania zaplanowane w tym projekcie wykraczają poza wyniki uzyskane przez innych badaczy, dzięki czemu istnieje bardzo duża szansa na opublikowaniu powstałych wyników w czasopiśmie z listy filadelfijskiej takich jak: *Journal of Nuclear Materials*, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, *Physical Review B*, *Physica Status Solidi*, czy *Acta Materialia*.