

Projekt badawczy dotyczy jednego z kluczowych wyzwań stojących przed rozwojem energetyki jądrowej, czyli reaktorów opartych na fuzji jądrowej. W takich urządzeniach materiały konstrukcyjne będą bombardowane szybkimi neutronami, co prowadzi do powstawania atomów helu wewnątrz metalu. Hel nie rozpuszcza się w sieci krystalicznej, lecz gromadzi się w defektach struktury i tworzy mikroskopijne pęcherzyki. Z czasem takie pęcherzyki osłabiają spójność materiału, zwiększają ryzyko powstawania mikropęknięć oraz mają wpływ na procesy kruchości helowej i kształtowanie mechanicznej odpowiedzi materiału pod obciążeniem.

Aby zrozumieć te procesy, projekt wykorzystuje zaawansowane modelowanie atomistyczne. W jego ramach powstaną dwa nowe potencjały międzyatomowe, modele pozwalające komputerowo symulować zachowanie milionów atomów. Pierwszy z nich będzie rozszerzeniem istniejącego potencjału typu ADP, używanego do opisu stopów żelaza z chromem. Drugi, bardziej zaawansowany, zostanie opracowany metodami uczenia maszynowego (MLIP). Obydwa powstaną na podstawie dokładnych obliczeń kwantowych DFT, prowadzonych w ramach projektu oraz dzięki współpracy z dwoma ośrodkami naukowymi: ICAMS (Ruhr-Universität Bochum) i MatéIS (INSA Lyon).

Po opracowaniu potencjałów zostaną wykonane wielkoskalowe symulacje dynamiki molekularnej. Pozwolą one śledzić ruch atomów helu w napromieniowanym metalu, ich gromadzenie się przy defektach, tworzenie pęcherzyków oraz ich rolę w procesach kruchości helowej i w kształtowaniu mechanicznej odpowiedzi materiału pod obciążeniem. Symulacje obejmą m.in. oddziaływania helu z defektami radiacyjnymi powstałymi w wyniku kaskad zderzeń, z granicami ziaren i mikroszczelinami, czyli procesy typowe dla pracy w warunkach reaktora termojądrowego.

Kluczowym elementem projektu jest również weryfikacja komputerowych modeli za pomocą eksperymentów. Próbki stalowe zostaną napromieniowane dwiema różnymi metodami:

- w Instytucie Fizyki Jądrowej Czeskiej Akademii Nauk – poprzez kontrolowaną implantację jonów helu, a następnie jonów żelaza, co pozwoli odtworzyć warunki panujące w reaktorze;
- w CERN – przy użyciu wysokoenergetycznych impulsów protonów w ośrodku HiRadMat, które umożliwiają uzyskanie bardzo intensywnego uszkodzenia materiału.

Powstała mikrostruktura (pęcherzyki helu, dyslokacje, defekty radiacyjne) będzie analizowana z wykorzystaniem mikroskopii TEM. Dane eksperymentalne posłużą do sprawdzenia, czy modele komputerowe poprawnie przewidują zjawiska zachodzące w materiałach.

Projekt dostarczy pierwszych tak kompleksowych i zweryfikowanych modeli opisujących wpływ helu na mikrostrukturę i wytrzymałość stali stosowanych w energetyce jądrowej.