

Volframin hilavirheiden tutkiminen laskennallisesti

Fuusioenergia tarjoaa tehokkaan vaihtoehdon tulevaisuuden energiantuotannolle, mutta sen toteuttaminen käytännössä on yhä haasteellista. Korkean sulamispisteen ja hyvän lämmönjohtavuuden ansiosta volframilla on keskeinen rooli fuusioreaktorien materiaalikehityksessä. Fuusioreaktorin sisällä on jatkuva ioni- ja neutronisäteily, mikä aiheuttaa säteilyvaurioita kontaktimateriaaleissa. Yksinkertaisimmillaan säteily saa aikaan pistevirheitä. Vakanssi on pistevirhe, joka muodostuu hila-atomin syrjäytyessä alkuperäiseltä paikaltaan jättäen jälkeensä tyhjän aukon. Jos syrjäytetty hila-atomi jää hilarakenteen väliin, sitä kutsutaan välisija-atomiksi.

Laskennallisia menetelmiä käytetään volframin tutkimisessa kokeellisten menetelmien ohella. Tässä tutkimuksessa hyödynnetään objektikohtaista kineettistä Monte Carlo -menetelmää (OKMC). OKMC-menetelmän avulla voidaan tarkastella systeemin aikaevoluutiota, edellyttäen, että mahdolliset tapahtumat ja niiden todennäköisyydet on määritetty etukäteen. Menetelmä mahdollistaa pidempien aikaskaalojen simulaatiot, mikä vastaa paremmin todellisia olosuhteita fuusioreaktorin sisällä. Todellisilla materiaaleilla ei kuitenkaan ole täydellisiä kiderakenteita, vaan ne sisältävät epäpuhtauksia ja rae-rajvoja, jotka voivat absorboida tai kiinnittää pistevirheitä. Jotta simulaatiot vastaisivat kokeellisia tuloksia, täytyy edellä mainitut ominaisuudet lisätä simulaatioon erikseen. Hiili on volframin tyypillinen epäpuhtaus, minkä vuoksi se valikoitui tässä tutkimuksessa tarkasteltavaksi epäpuhtaudeksi.

Tässä seminaariesitelmässä esitellään tuloksia, jotka on tuotettu Helsingin yliopiston kiihdytinlaboratoriossa kesällä 2025. Simulaatioiden perusteella tutkitaan, miten lämpötila ja hiilikonsentraatio vaikuttavat volframissa muodostuvien vakanssien määrään säteilytyksen alla. Tulokset osoittavat, että suurempi hiilikonsentraatio lisää vakanssien määrää, kun tarkastellaan systeemejä samassa lämpötilassa. Lisäksi havaitaan, että lämpötilan noustessa vakanssikonsentraatio laskee. Tulokset ovat yhteneviä aikaisempien tutkimusten kanssa, ja osoittavat epäpuhtauksien merkityksen volframin säteilykestävyyden tarkastelussa. Laskennalliset menetelmät kasvattavat merkitystään fuusiorelevanttien materiaalien tutkimuksessa kustannustehokkuutensa ja turvallisuutensa ansiosta.