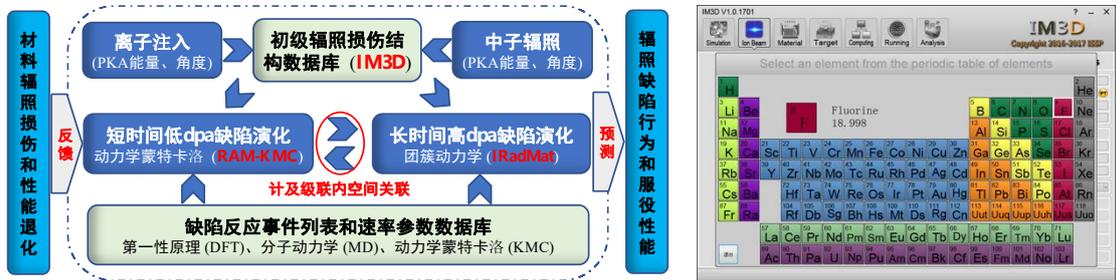


# 计算软件（离子/中子初级辐照损伤的 MC 开源软件及缺陷演化团簇动力学程序）

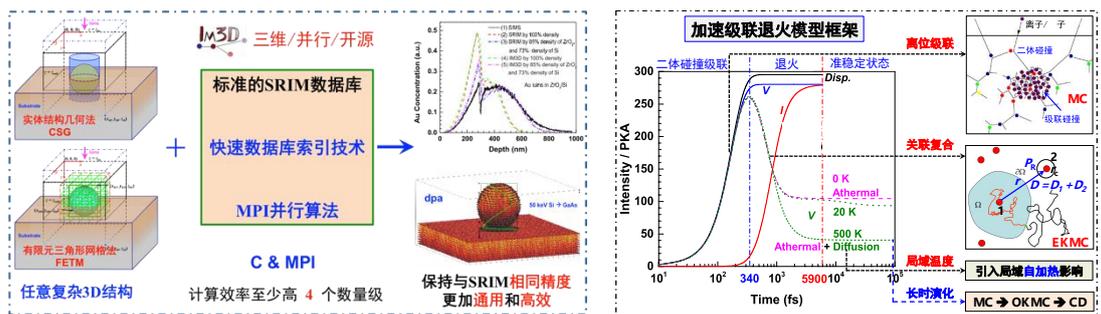
## 项目背景：

面向核能/宇航/核探测等领域对高抗辐照材料的重大战略需求，自主发展离子/中子初级辐照损伤的蒙特卡洛(MC)自主开源软件(IM3D)和缺陷演化的团簇动力学程序(IRadMat)，以构建全链条的材料辐照效应多尺度高效模拟平台，开展热负荷、高能粒子辐照等多场耦合下先进核能和半导体材料性能退化/失效机理及加固方案设计的理论研究。

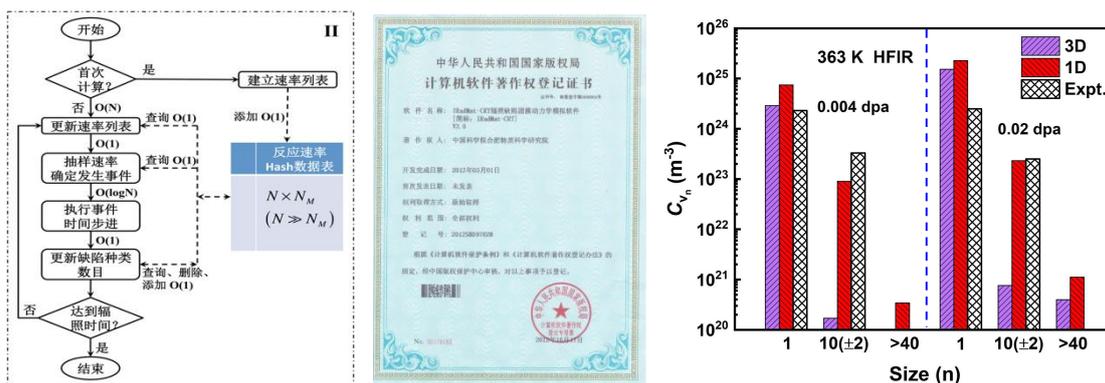


## 主要技术指标：

1) 离子/中子初级辐照损伤的蒙特卡洛 (MC) 自主开源软件 (IM3D)：IM3D (<http://theory.iissp.ac.cn/IM3D>) 是国内首个用于复杂材料离子/中子初级辐照损伤模拟的蒙特卡洛自主开源软件，极大地突破了原有计算方法对复杂三维结构体系和同步级联退火物理过程的模拟能力和效率，可快速模拟高能离子/中子辐照下任意复杂结构材料中与能量损失相关的各种动力学现象（离位损伤、表面溅射、无定型化和电子/声子能量沉积等）以及初级缺陷（离子、间隙/替位/溅射原子和空位等）的三维空间分布。其准确性与分子动力学参考结果一致，但计算效率高>4个量级，且不受原子间势的限制。现已被国内外 140 余家研究机构下载使用，并已作为中物院等应用单位中子辐照损伤模拟的国产化定向编制软件，解决了 OECD 国际组织对我国敏感单位相关涉核软件禁运的“卡脖子”问题。



2) 缺陷演化的团簇动力学程序 (IRadMat): 基于速率理论、扩散理论和粗粒化加速算法 (F-P/分组), 在平均场框架下成功将协同辐照、多元缺陷、空间效应 (空间分辨和关联)、团簇 1D 运动和微结构饱和吸收等耦合到确定性团簇动力学 (CD) 中, 发展了空间依赖的多元缺陷长时演化的 CD 模型 (IRadMat)。可快速模拟介观缺陷 (团簇) 在材料中的产生、扩散、反应和积聚等动力学行为及其浓度随时/空间和尺寸分布。为定量探究高剂量辐照下材料长时间损伤演化提供了高效的研究手段, 真正实现了材料辐照损伤/氢氦效应的模拟及其与实验的定量对应。



### 应用领域:

- 1) 材料辐照效应的基础科学软件及顺序多尺度模拟平台研发推广;
- 2) 核能 (核裂变/核聚变) 材料辐照损伤及力/热性能评估;
- 3) 宇航半导体器件辐射失效机理分析及加固方案设计。

### 市场前景:

相关成果将发挥基础引领和大数据支撑等重要作用, 形成新材料设计的理论方案, 减少大量的实验试错工作, 为缩短材料研发周期和降低材料设计成本起到关键作用, 有效推动先进材料、核聚变能和宇航半导体等产业的发展。

IM3D 和 IRadMat 等软件、材料性质数据库、模型耦合框架及高效计算方法上都具有自主知识产权, 国产化科研软件/平台的产业化潜力巨大。这不仅会提升我国材料辐照理论方法/模型的自研能力, 带来直接的社会经济效益, 也降低涉核软件的国际技术壁垒, 减少国际软件购买份额。