

合肥研究院研究生因公出国（境）事后公示表

姓 名	徐白川	部 门	等离子体所十二室		
学 号	SA20168146	在读学位	硕士	出访国家 (或地区)	德国
公示日期	自 2023年6月26日 至 2023年6月30日				
计划出访任务	线上会议，无需出境				
计划日程	2023.5.29——2023.5.31，参见 MoD-PMI 会议，并做口头报告				
计划往返路线	线上会议，无需出境				
邀请单位介绍	Christian Linsmeier, Forschungszentrum Julich GmbH				
费用来源	须列出哪类经费（如：自然科学基金课题支付） Y85GZ1J561				
预算经费支出	国际旅费	交通费	住宿费	伙食费	其他
	\	\	\	\	1516 元
实际费用来源及支	<input type="checkbox"/> 课题组 1516 元 <input type="checkbox"/> 学校 _____ <input type="checkbox"/> 国外资助单位 _____ <input type="checkbox"/> 其他资助单位 _____				

付金额					
实际开始日期	2023 年 5 月 29 日	实际结束日期	2023 年 5 月 31 日		
实际往返路线	线上会议, 无需出境				
实际经费支出	国际旅费	交通费	住宿费	伙食费	其他
	\	\	\	\	1516
<p>实际出访单位名称及主要日程安排:</p> <p>出访单位: MoD-PMI 会议</p> <p>日程安排: 2023.5.29-2023.5.30, 参加 MoD-PMI 会议, 听取参会者的报告</p> <p>2023.5.31, 参加 IFASM 会议, 并做题为 “Synergistic influence of dislocations and helium cluster on hydrogen atom in tungsten” 的口头报告。</p>					
出访总结					

出访主要学习、工作、生活内容、取得成果等（体裁不限，1500 字以上，可另附页）

由于没能在会议开始之前拿到前往德国的签证，因此原计划是取消本次参会。但在举办方的帮助下，我成功通过线上方式参加了本次会议，并完成了口头汇报。按照原计划，我本应该是会议第一天的最后一位汇报者。但考虑到我的形式改为了线上，我的汇报时间也改到了会议第三天的最后一位。我汇报的主题是“Synergistic influence of dislocations and helium cluster on hydrogen atom in tungsten”。我的汇报课题是通过分子动力学方法探究了钨在辐照条件下，位错与氦团簇同时对氢原子渗透滞留行为的影响。根据氦原子的数量，我们将研究对象分为小尺寸氦团簇与大尺寸氦泡。第一部分，我介绍了氦原子在位错核心的聚集以及氦泡的生长模式。在螺位错核心，氦泡优先沿着伯氏矢量方向生长，随后沿着垂直于位错线的平面生长。在刃位错核心，氦泡优先朝向拉伸区域方向生长，随后沿着伯氏矢量方向生长。整体来看，氦泡在位错核心的长大过程是上述两个步骤的循环往复。第二部分，我介绍了氦团簇与位错对氢原子的协同影响。捕获强度随氦团簇尺寸的增大而增强，随与位错核心距离的增加而降低，随已捕获氢原子数量的增加而降低。最终我们还观察到氢原子在位错核心附近聚集的动力学行为。在口头报告结束后，回答了参会同行的问题，并共同讨论了这一特殊现象的微观机理。

会议的第一天，来自 IAEA 的 Heinola 博士介绍了近些年来 IAEA 在氢过饱和和缺陷稳定性领域的研究成果，他汇报的主题是“Outcomes of IAEA Technical Meeting on the Effects of Hydrogen Supersaturation and Defect Stabilization in Nuclear Fusion Materials”。最终通过模拟与

实验结合的方法总结了不同辐照条件下缺陷的稳定情况以及氢达到过饱和所需要的外界条件。为我对氢渗透滞留行为与辐照损伤缺陷特性的研究提供全新的视野。

也是在会议的第一天，来自加拿大麦吉尔大学的宋博士介绍了其课题组在辐照材料中空位型位错环的相关研究，汇报主题为“Vacancy Loops in Irradiated Metals: Hydrogen-dislocation Junction interaction, Vacancy Loop Formation, and Loop Unfaulting Mechanism”。由于我之前进行过间隙性位错环与氢或氦原子相互作用的研究，因此该汇报深深吸引了我的注意。他们课题组通过 OKMC 与实验结合的方式，探究了空位型位错环在辐照条件下的形成机理以及主要存在形式。通过研究氢与空位型位错环的相互作用来解释实验中观察到的交割与扭折现象，该过程会影响后者的扩散行为。

还是在同一天，来自法国的 Landeiro Dos Reis 博士介绍了他们课题组通过原子尺度模拟与弹性理论来对位错与点缺陷相互作用的系统深入的研究，汇报题目为“Interaction between point-defects and dislocations”。他们分别选取了铁，铝和氧化镁在内的多种辐照材料作为研究对象，分别研究其中位错与点缺陷的相互作用。我曾使用分子静力学方法对钨中位错与点缺陷的相互作用进行过相对系统的研究。但他们则是还将研究工具拓展到密度泛函理论与量子力学机器学习上来进行研究。为我对后续研究工作提供全新的思路。

在会议的第二天，来自芬兰赫尔辛基大学的 Djurabekova 博士介绍了他们课题组通过机器学习方法拟合聚变材料原子间势函数的研究，汇报题

题为“Machine-Learning Interatomic Potentials for Atomistic Simulations of Materials for Fusion Applications”。由于我最近正在自学机器学习来研究高熵合金中缺陷特性，因此这个报告引起了我的浓厚兴趣。他们用机器学习的方式分别拟合与测试多种复杂合金的原子间势函数，并用来进行各种特性的研究。值得注意的是，相比较于传统经验势函数的拟合，机器学习势函数会大大降低其中的时间与计算成本，并且还能保证一定的准确性。

在同一天，另一位来自法国的 Grigorev 博士介绍他们用从头计算-机器学习方法研究位错与点缺陷相互作用的成果，汇报题目为“Simulation of interaction of point defects with dislocations using hybrid ab initio-machine learning methods”。在我的硕士课题调研期间，我曾阅读过 Grigorev 博士的相关文献，并对他的研究领域产生浓厚的兴趣。他用了一种全新的研究方法——从头计算-机器学习，这种方法可以一边计算出输入数据，一边通过机器学习来生成输出数据。不仅确保了计算结果的准确性，还大大节省了时间成本。因此这也是一种值得深入研究的计算方法。

通过此次会议，我学到了很多全新的知识与研究方法。对于文献中出现的相关疑惑，我通过此次会议的交流得到了解答，这些都将成为我科研道路上的宝贵财富。

公示情况:

签字:

日期: