ОСОБЕННОСТИ ПОВЕДЕНИЯ ВОДОРОДА В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СЛОЯХ Zr/Nb:

РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

С.О. Огнев1), Л.А. Святкин1), И.П. Чернов1)

1)Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Россия

Сплавы на основе циркония широко используют в качестве конструкционных материалов в водо-водяных реакторах на тепловых нейтронах. В процессе эксплуатации эти сплавы подвергаются интенсивному воздействию со стороны водорода, что приводит к их водородному охрупчиванию и, как следствие, снижению срока службы изделий. Для увеличения срока эксплуатации материалов на поверхность изделий наносят специальные защитные покрытия, одним из перспективных среди которых является покрытие, имеющее слоистую структуру из чередующихся слоев циркония и ниобия. Целью данной работы является выявление влияния границы раздела между металлическими слоями Zr/Nb на энергию связи водорода в ниобии и цирконии.

Все расчеты выполнялись в рамках теории функционала электронной плотности методом оптимизированного сохраняющего норму псевдопотенциала Вандербильта, реализованным в пакете программ ABINIT. В работе рассчитаны значения энергии связи водорода в окта- и тетраэдрических междоузлиях ОЦК решетки ниобия и ГПУ решетки циркония. В решетках обоих металлов атому водорода энергетически более выгодно размещаться в тетраэдрических междоузлиях. Показано, что энергия связи водорода в цирконии выше, чем в ниобии. Установлено, что энергия связи водорода вблизи границы раздела между металлическими слоями Zr/Nb заметно выше чем вдали от нее. Так после миграции водорода на границу раздела из центра слоя Nb максимальное значение энергии связи водорода с металлом увеличивается в ~ 2 раза, а из центра слоя Zr – увеличивается в ~ 2,25 раз.