ОСОБЕННОСТИ ФОРМИРОВАНИЯ ГЕЛИЙ-ВАКАНСИОННОГО КОМПЛЕКСА НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ СЛОЯХ Zr/Nb:

РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Д.В. Терентьева1), Л.А. Святкин1), И.П. Чернов1)

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

В ходе эксплуатации ядерных реакторов в циркониевых сплавах накапливается гелий, образующийся в активной зоне реактора в результате (n, α) ядерных реакций, что приводит к изменению механических свойств конструкционных материалов и уменьшению срока их эксплуатации. Особый интерес для решения этой проблемы представляет разработка самовосстанавливающихся покрытий, заметно замедляющих процесс накопления гелия в конструкционных материалах. Одними из них являются покрытия, состоящие из наложенных друг на друга слоев циркония и ниобия /1/. В настоящей работе проведено теоретическое исследование влияния границы раздела между металлическими слоями Zr/Nb на энергию образования гелий-вакансионного комплекса.

В работе расчеты производились в рамках теории функционала электронной плотности методом оптимизированного сохраняющего норму псевдопотенциала Вандербильта, реализованным в пакете программ ABINIT. Установлено, что вакансиям и гелий-вакансионным комплексам энергетически наиболее выгоднее скапливаться на границе раздела в первых двух атомных слоях циркония или ниобия. Выявлено, что энергия образования гелий-вакансионного комплекса на границе раздела между металлическими слоями Zr/Nb энергетически выгоднее в ниобии (~ 2,5 эВ), чем в цирконии (~ 2,7 эВ).

ЛИТЕРАТУРА

1. H.S. Sen, T. Polcar // Journal of Nuclear Materials, Vol. 518, p. 11-20.