

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

Д.В. Терентьева, Л.А. Святкин, Р.С. Лаптев
Национальный исследовательский Томский Политехнический университет

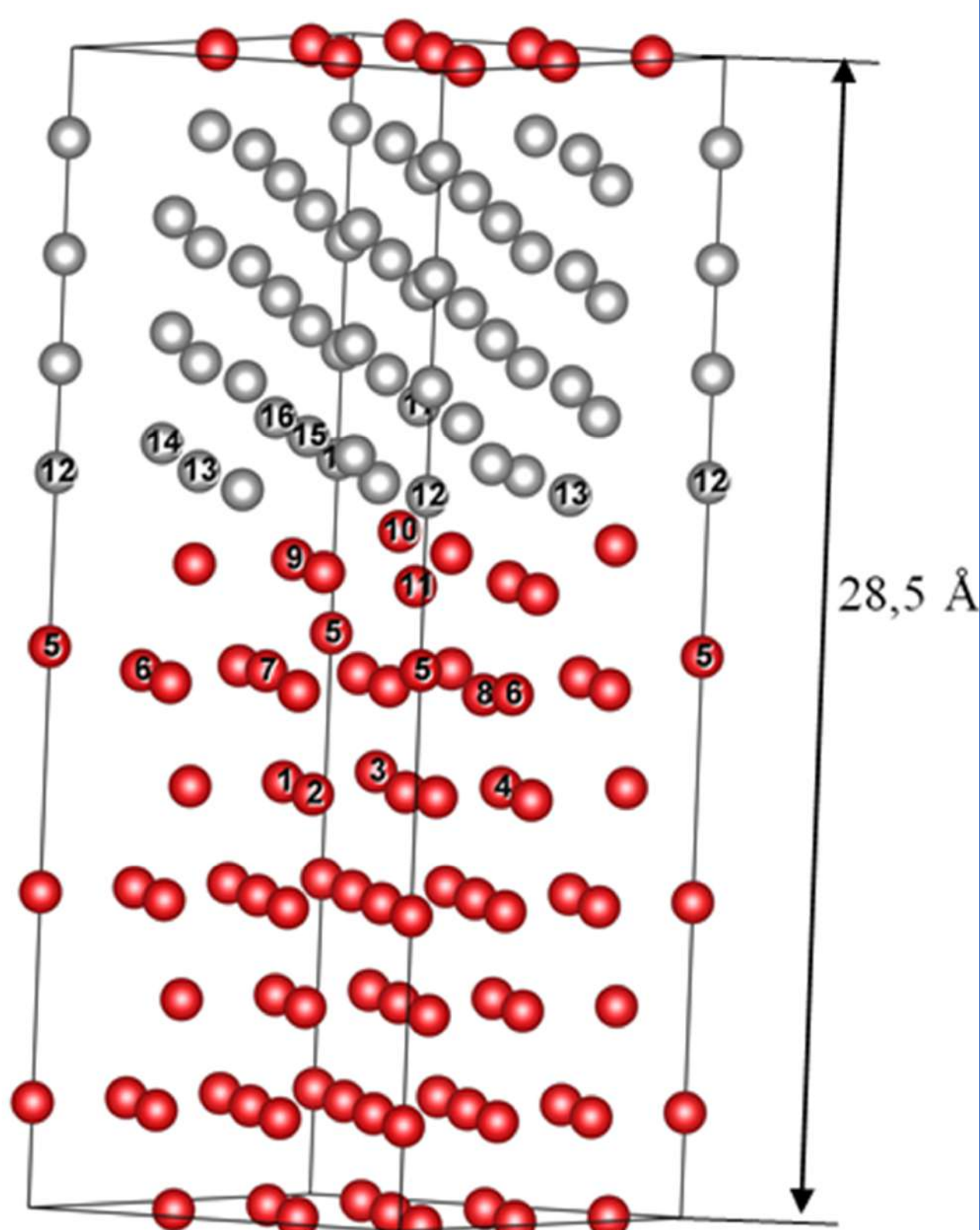
Введение

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 уменьшение срока их эксплуатации. Для решения проблемы влияния дефектов на механические свойства разрабатываются самовосстанавливающиеся покрытия на основе чередующихся мультислоев циркония и ниобия. В настоящей работе проведено исследование из первых принципов особенностей влияния границы раздела между металлическими слоями Zr/Nb на энергию образования гелий-вакансионного комплекса.

Методика расчета

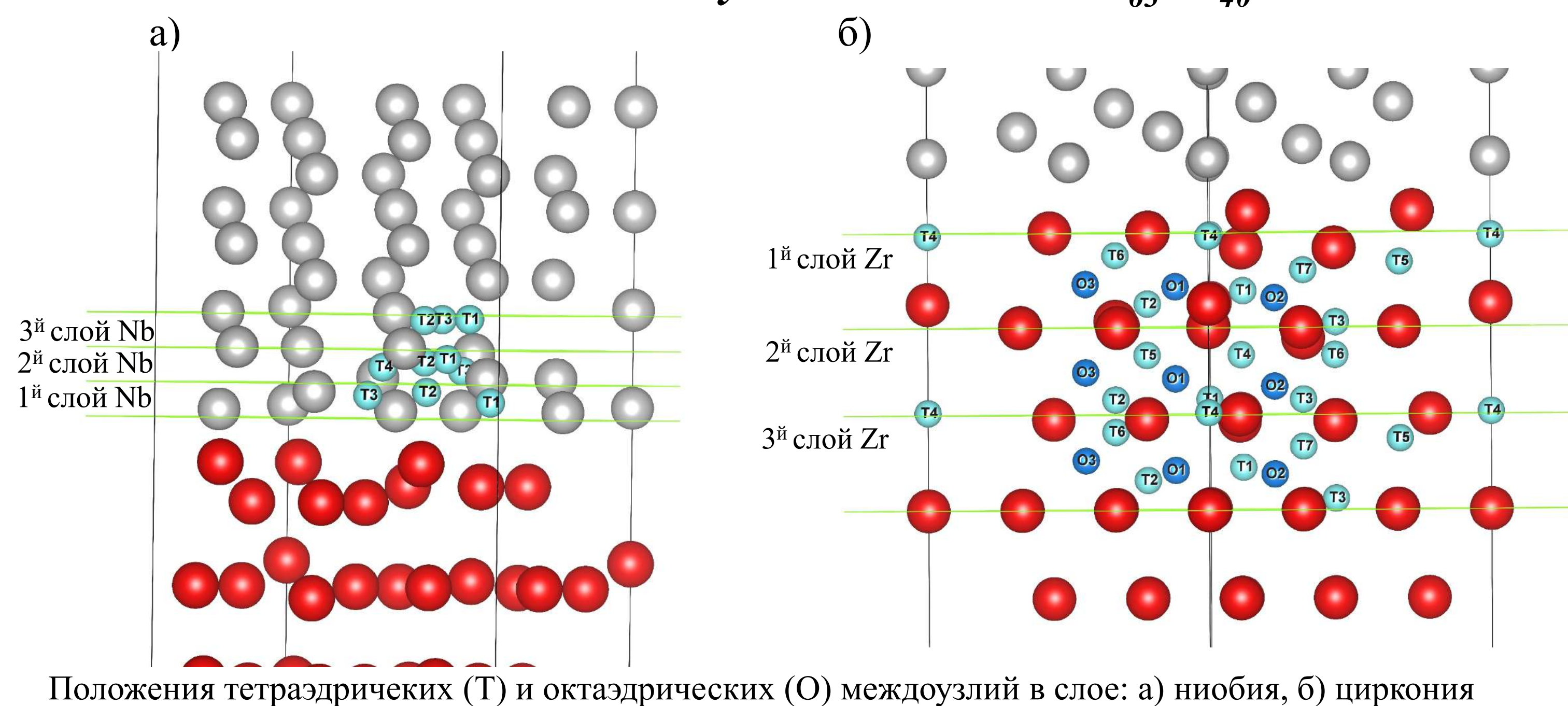
В работе все расчеты производились в рамках теории функционала электронной плотности методом оптимизированного сохраняющего норму псевдопотенциала Вандербилта, реализованным в пакете программ ABINIT. Для описания обменных и корреляционных эффектов использовалось приближение обобщенного градиента в форме Пердью-Бурке-Эрнцера. Релаксация атомов металлов проводилась в ближайших к границе раздела трех атомных слоях циркония и пяти атомных слоях ниобия.

Расчетная ячейка



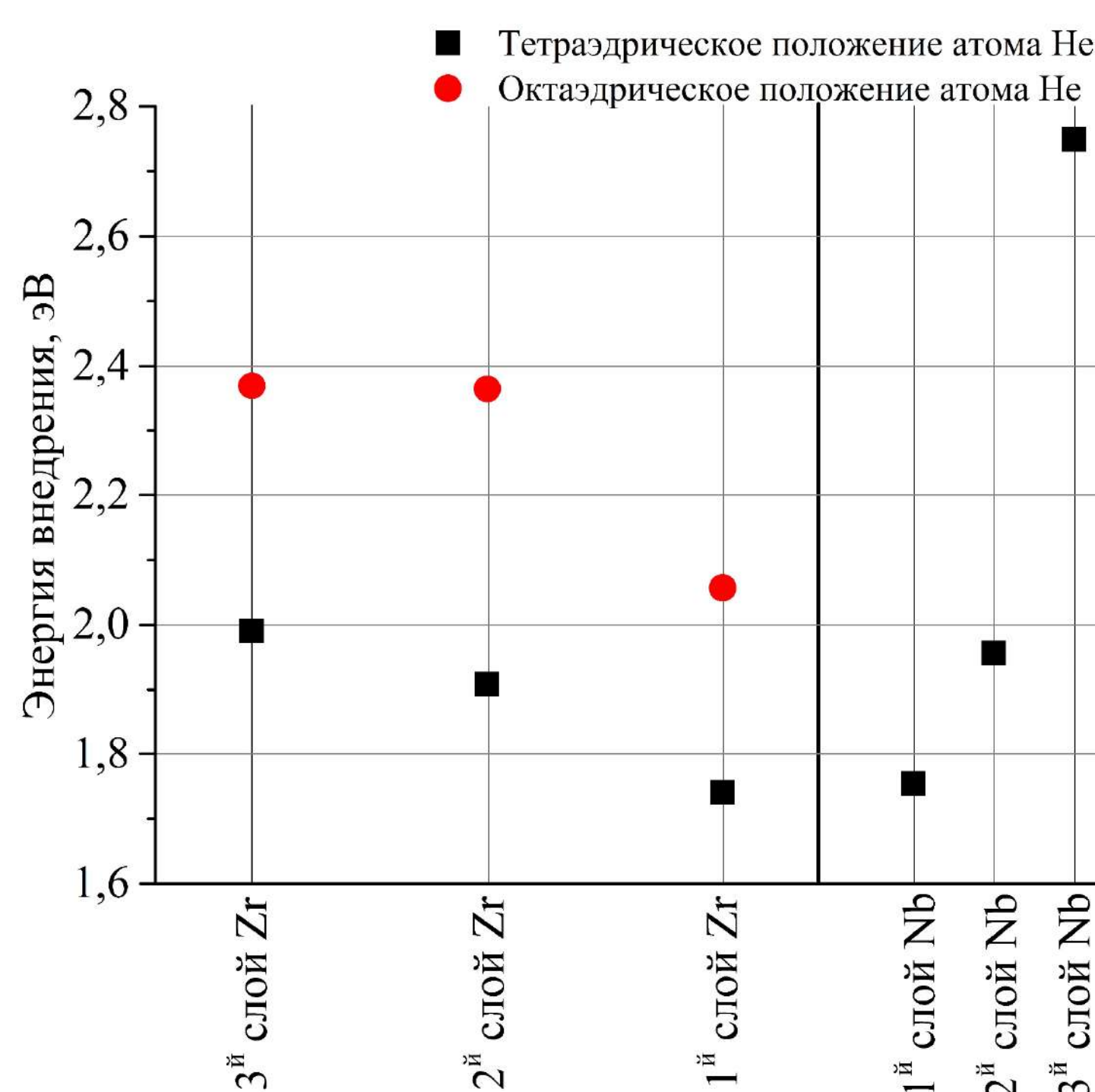
Серым цветом показаны атомы ниобия, красным – циркония. Цифрами отмечены атомы, где образовывались вакансии.

Положение атома гелия в междоузлиях системы $Zr_{63}Nb_{40}$



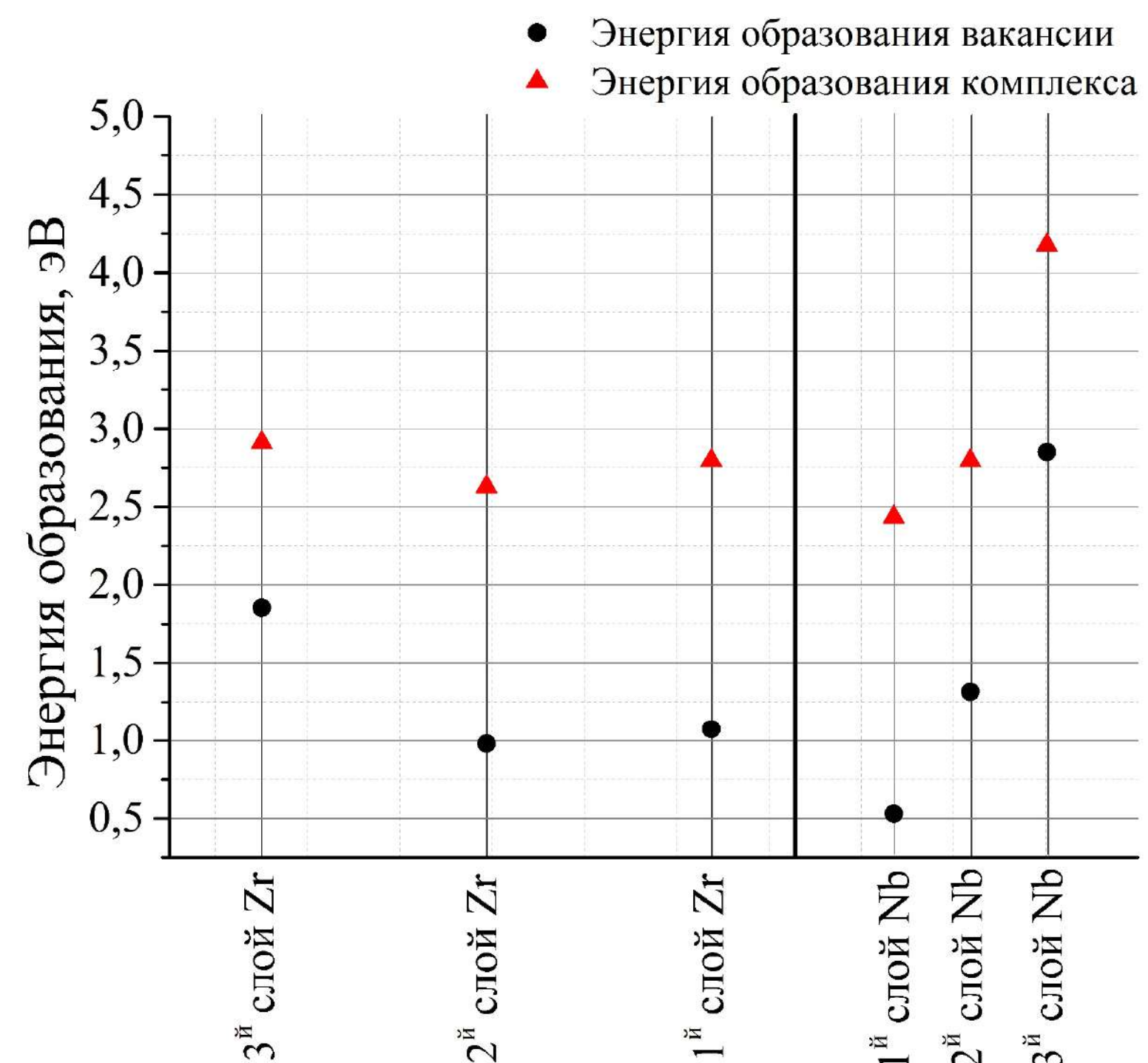
Положения тетраэдрических (Т) и октаэдрических (О) междоузлий в слое: а) ниобия, б) циркония

Энергия внедрения атома гелия в междоузлие



Энергия внедрения атома гелия в слои циркония и ниобия, ближайшие к границе раздела слоистой структуры $Zr_{63}Nb_{40}$. Черная вертикальная линия указывает положение границы раздела

Энергии образования вакансии и гелий-вакансионного комплекса



Энергия образования вакансии и гелий-вакансионного комплекса вблизи границы раздела слоистой структуры $Zr_{63}Nb_{40}$. Черная вертикальная линия указывает положение границы раздела

Вывод

В настоящей работе рассмотрены различные варианты положения атома гелия в тетраэдрических междоузлиях в решетке ниобия и в тетра- и октаэдрических междоузлиях в решетке циркония. Установлено, что атому гелия энергетически наиболее выгодно располагаться в тетраэдрических междоузлиях как в цирконии, так и в ниобии, вблизи границы раздела. При отдалении от границы раздела в объеме циркония и ниобия наблюдается увеличение энергии внедрения гелия.

В рассмотренной системе, исходя из соображений симметрии, были выбраны всевозможные положения атомов циркония, в которых образовывались вакансии, и куда впоследствии помещался атом гелия. Установлен рост энергии образования вакансии и энергии образования гелий-вакансионного комплекса при отдалении от границы раздела. По результатам расчетов также установлен факт более вероятного образования дефектов вблизи границы раздела между металлическими слоями.