свойства точечных дефектов и радиационная стойкость CoCrFeNi и Hfnbtizr сплавов

И.В. Сафронов1\*, В.В. Углов1,2, С.В. Злоцкий1,

Н.А. Степанюк1, Д.В. Есипенко1

1) БГУ, Минск, Беларусь

2) НИЯУ МИФИ, Москва, Россия

\*fiz.safronov@mail.ru

В работе проведены расчеты энергии образования точечных дефектов в однофазных CoCrFeNi (ГЦК) и HfNbTiZr (ОЦК) сплавах методом молекулярной статики. В исходных структурах учитывалось наличие химического ближнего порядка, а вычисление энергетической характеристики осуществлялось через предварительно смоделированные химические потенциалы. Выявлено, что распределения энергии образования как вакансий, так и междоузельных атомов для HfNbTiZr сплава охватывают существенно больший диапазон энергий, чем для CoCrFeNi сплава: (-2,6; 4,6) против (0,74; 2,2) эВ для вакансий и (0,08; 8,1) против (4,2; 6,5) эВ для междоузельных атомов в наиболее стабильных гантельных конфигурациях. Обнаружено, что для HfNbTiZr сплава характерны отрицательные значения энергии образования вакансий Ti, что означает возникновение термодинамической движущей силы в системе, направленной на уменьшение ее свободной энергии через повышение концентрации вакансий. Последнее предполагает, что HfNbTiZr сплав может быть подвержен большему радиационному распуханию, чем CoCrFeNi сплав. Однако, данный вывод нуждается в дальнейшем исследовании миграционных барьеров в рассматриваемых сплавах. Касательно распределений энергии образования междоузельных атомов, в работе продемонстрировано, что наименьшие значения данной величины свойственны <110> Nb-Nb и Nb-Ti гантельным парам в HfNbTiZr сплаве, а в CoCrFeNi сплаве для <100> Co-Cr и Ni-Cr гантельных пар, что подразумевает наличие в этих сплавах соответствующих предпочтительных диффузионных путей. Работа выполнена в рамках проекта БРФФИ № Т20ПТИ-009 (BITBLR2020019).