ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ H и He НА АННИГИЛЯЦИЮ ПОЗИТРОНОВ В Zr и Nb

С.О. Огнев1), Д.В. Терентьева1), Л.А. Святкин1), Р.С. Лаптев1)

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

Многослойные наноразмерные покрытия (МНК) все чаще используются во многих отраслях промышленности. Системы из чередующихся слоев ГПУ/ОЦК металлов (в частности, Zr/Nb) обладают отличным потенциалом для создания радиационно-стойких композитов за счет наличия области стока для радиационных дефектов на некогерентных и полукогерентных границах раздела ГПУ/ОЦК слоев. Изучение из первых принципов характеристик электрон-позитронной аннигиляции позволяет получить фундаментальную информацию, необходимую для интерпретации экспериментальных исследований. В частности, необходимо понимание особенностей влияния примесей H и He на характеристики электрон-позитронной аннигиляции в решетках Zr и Nb. Целью данной работы является установление влияния примесных атомов H и He на параметры электрон-позитронной аннигиляции Zr и Nb.

Все расчеты проводились в рамках теории функционала электронной плотности методом проекционных присоединенных волн, реализованным в пакете программ ABINIT. Анализ результатов выявил повышение вероятности аннигиляции позитронов в области импульсов электронов, соответствующих энергиям от 5 до 8 кэВ для циркония и от 5 до 7 кэВ для ниобия для рассмотренных концентраций. Прослеживается большее влияние на импульсное распределение гелия, чем водорода. Добавление атомов водорода и гелия в ниобий и цирконий понижает вероятность аннигиляции позитронов на остовных электронах и увеличивает вероятность аннигиляции на валентных электронах.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-79-10343).