



Введение

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 полуккогерентных 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 в решетках Zr и Nb.

Метод и детали расчета

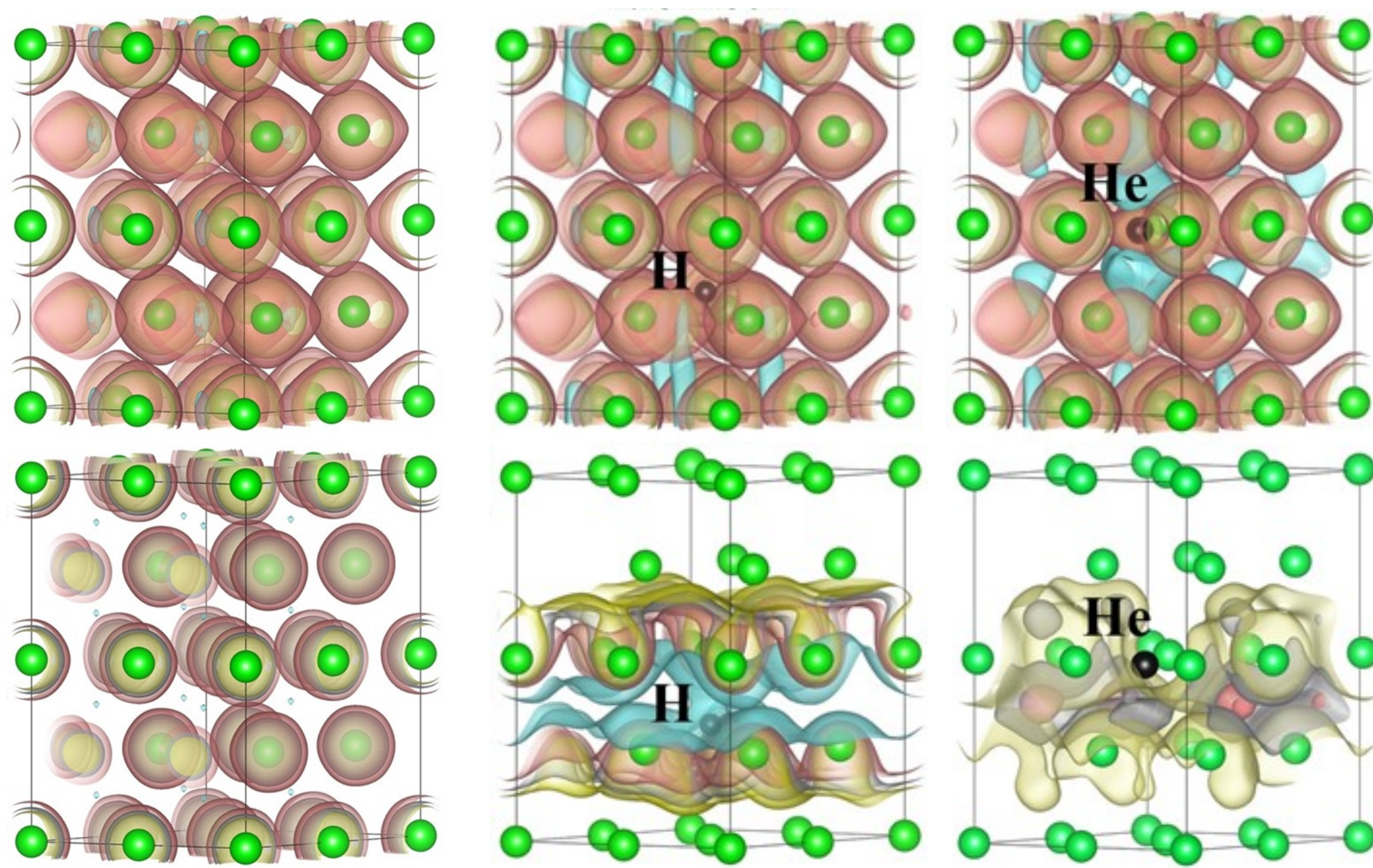
Все расчеты выполнялись в рамках теории функционала электронной плотности методом проекционных присоединенных волн, реализованном в пакете программ ABINIT. Для описания обменных и корреляционных эффектов использовалось приближение обобщенного градиента в форме Пердю-Бурке-Эрнцерхофа.

Для расчета распределения позитронов и среднего времени их жизни в объеме слоев циркония и ниобия использовались расчетные суперячейки из 16 атомов ниобия или циркония с одним атомом примеси водорода или гелия. Релаксация решетки считалась завершённой при значении сил, действующих на атомы, менее 50 мэВ/Å. На каждой итерации самосогласования собственные значения гамильтониана рассчитывались по сетке 5×5×5 k-точек всей зоны Бриллюэна для суперячейки из 16 атомов циркония или ниобия. Энергия обрезания при разложении волновой функции по базису плоских волн, составила 410 эВ.

Распределение плотностей

Zr ZrH^T ZrHe^{FCC}

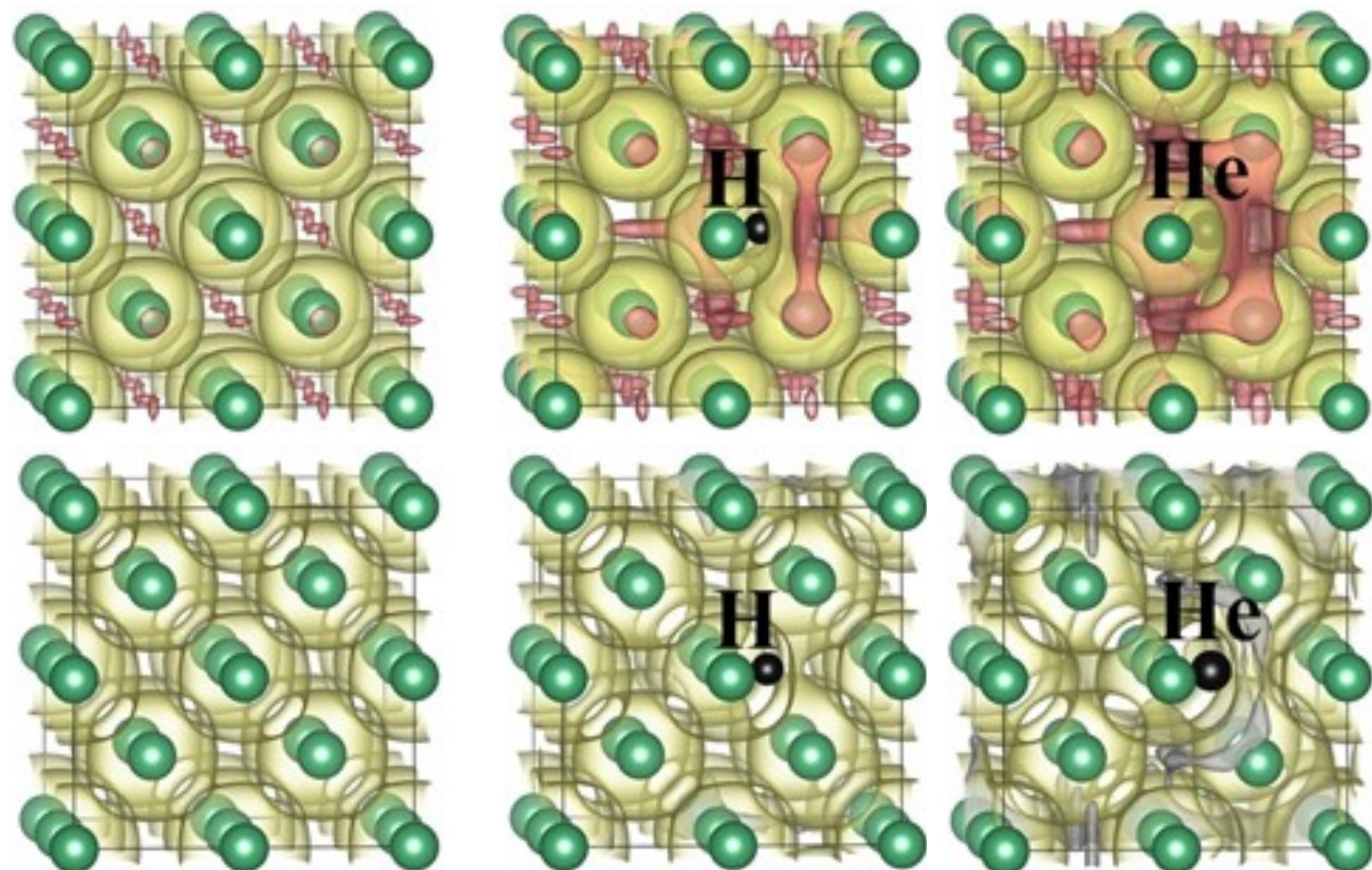
**Электронная
плотность**



**Позитронная
плотность**

Nb NbH^T NbHe^T

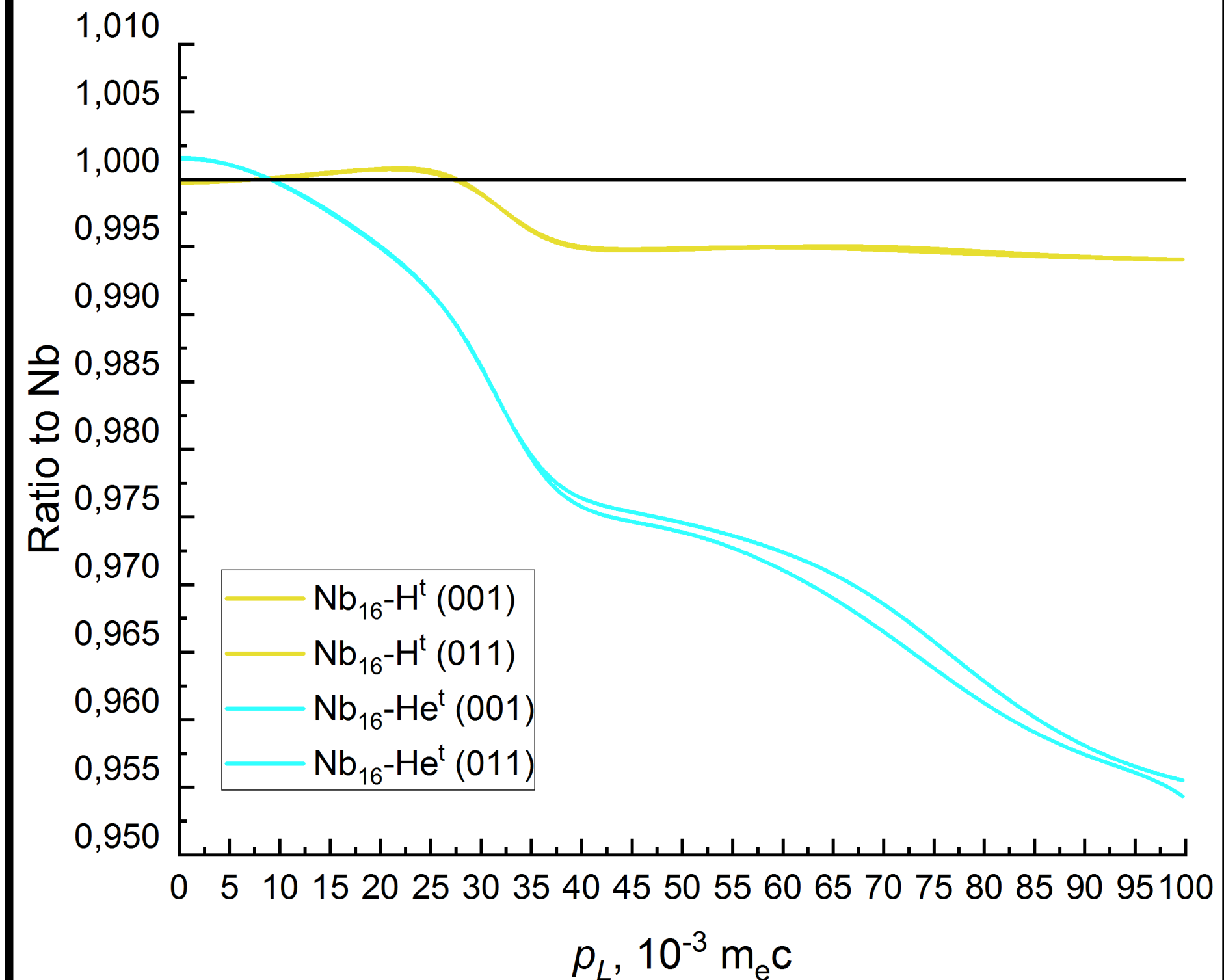
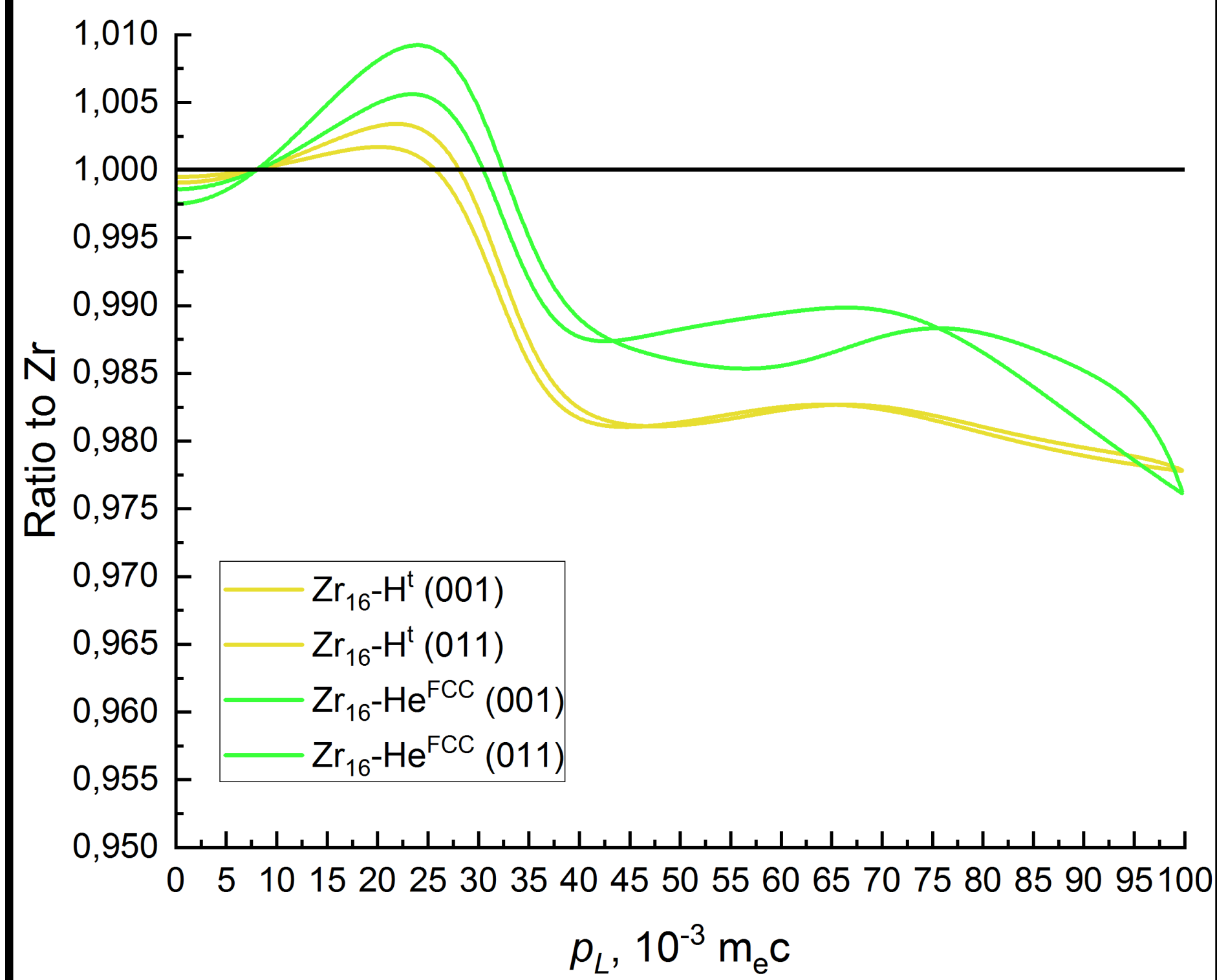
**Электронная
плотность**



**Позитронная
плотность**

Светло-зеленые шарики – атомы циркония, темно-зеленые шарики – ниобия, черные шарики – водорода или гелия. Изоповерхности соответствующие электронной плотности 0,02 эл./Бор³ выделены голубым цветом, 0,03 эл./Бор³ – красным, 0,05 эл./Бор³ – жёлтым. Изоповерхности соответствующие позитронной плотности 0,1·10⁻³ поз./Бор³ выделены жёлтым цветом, 0,15·10⁻³ поз./Бор³ – серым, 0,25·10⁻³ поз./Бор³ – красным, 1·10⁻³ поз./Бор³ – голубым. Черные линии – границы расчетной суперячейки.

**Допплеровское уширение аннигиляционной
линии**



Зависимость вероятности аннигиляции позитронов в цирконии и ниобии в присутствии примеси водорода или гелия, отнесенной к соответствующей вероятности для чистых металлов, от импульса электронов.

Время жизни

Система	Время жизни, пс	Система	Время жизни, пс
Zr	168,5	Nb	130,7
Zr-H ^T	162,4	Nb-H ^T	129,8
Zr-He ^{FCC}	171,1	Nb-He ^T	131,2

Результаты расчетов времени жизни позитронов в слоях циркония и ниобия в присутствии примеси водорода или гелия с концентрацией ~ 6 ат.%. T - тетраэдрическое междуузлие, FCC - ГЦК пустота между атомами Zr в базальной плоскости ГПУ решетки.

Выводы

В работе изучено из первых принципов влияние атомов водорода и гелия на распределение позитронной плотности и времени жизни позитронов в цирконии и ниобии. Получено, что при растворении водорода или внедрении гелия происходит расширение областей с пониженной электронной плотностью, в которых наблюдается повышение позитронной плотности. Установлено, что при внедрении гелия происходит повышение времени жизни позитрона, а при растворении водорода — понижение за счет формирования химической связи водород-металл. 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.