

**ВЛИЯНИЕ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА НА ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ГЕЛИЙ-ВАКАНСИОННОГО
КОМПЛЕКСА С МЕТАЛЛИЧЕСКИМИ СЛОЯМИ ZR/NB**Д.В. Терентьева

Научный руководитель: к.ф.-м.н., Л.А. Святкин

Национальный исследовательский Томский Политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: dvt17@tpu.ru**INFLUENCE OF THE INTERFACE ON THE INTERACTION OF HELIUM-VACANCY COMPLEX
WITH METAL LAYERS OF ZR/NB**D.V. Terentyeva

Scientific Supervisor: Ph.D., L.A. Svyatkin

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: dvt17@tpu.ru

***Abstract.** The first-principle calculations have been performed to investigate the influence of helium-vacancy complex on the interaction energy with zirconium and niobium. The results of calculations of vacancy formation energy and helium-vacancy complex formation energy for HCP-Zr and BCC-Nb were presented. It is established that vacancies and helium atoms occupy positions in first two Nb and Zr layers which are close to interface. It is shown that the greater number of metal layers in system has, the greater value of formation energy is.*

Введение. Сплавы на основе циркония широко применяются в атомной энергетике в качестве конструкционных материалов ядерных реакторов. В ходе эксплуатации, в этих сплавах накапливаются различные дефекты, в том числе вакансии и атомы гелия. В результате чего происходит деградация свойств конструкционных материалов и уменьшение срока их эксплуатации. Накопление дефектов происходит в приповерхностном слое металлов в результате (n, α) ядерных реакций, что приводит к гелиевому охрупчиванию и газовому распуханию материалов. Поэтому особый интерес представляет разработка многослойных самовосстанавливающихся покрытий, заметно замедляющих процесс накопления гелия в конструкционных материалах. Одним из таких многослойных покрытий является покрытие из чередующихся слоев циркония и ниобия, которые благодаря структурному несоответствию решеток имеют определенную область скопления дефектов. В работе [1] было проведено теоретическое исследование и показано, что дефекты скапливаются вблизи границы раздела многослойных покрытий Zr/Nb. Целью настоящего исследования явилось изучение из первых принципов особенностей влияния границы раздела между металлическими слоями Zr/Nb на энергию образования гелий-вакансионного комплекса.

Метод и детали расчета. В работе расчеты производились в рамках теории функционала электронной плотности методом оптимизированного сохраняющего норму псевдопотенциала Вандербиля [2] с обменно-корреляционный потенциалом GGA – PBE [3], выполненные в пакете программ ABINIT [4]. Была проведена оптимизация параметров решетки и релаксация положений всех атомов в расчетной ячейке системы цирконий-ниобий-гелий. Релаксация считалась завершенной при значении сил, действующих на атомы, менее 50 мэВ/Å. На каждой итерации самосогласования

собственные значения гамильтониана рассчитывались на сетке k-точек $3 \times 3 \times 1$ по всей зоне Бриллюэна. Энергия обрезания при разложении волновой функции по базису плоских волн составила 410 эВ. На рис. 1. Представлены расчетные ячейки слоистой структуры Zr/Nb с различным количеством слоев: а) 4 слоя циркония и 9 слоев ниобия, б) 7 слоев циркония и 10 слоев ниобия. Для удобства анализа и обсуждения результатов атомы, вместо которых размещались вакансии или гелий-вакансионный комплекс, пронумерованы.

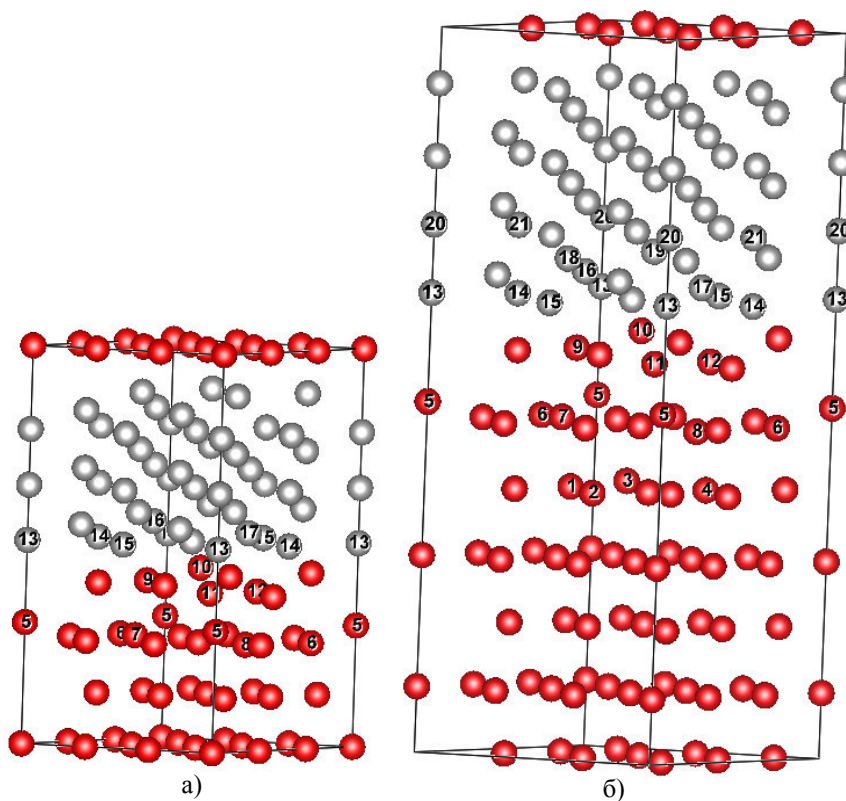


Рис. 1. Расчетные ячейки металлических слоев Zr/Nb: а) $Zr_{36}Nb_{36}$, б) $Zr_{63}Nb_{40}$. Серым цветом показаны атомы ниобия, красным – атомы циркония

Результаты и выводы. В настоящей работе были рассчитаны энергии образования вакансии E_{vac} и гелий-вакансионного комплекса E_{He-vac} в металлах по формулам

$$E_{vac} = E_{Zr_{m-x}-Nb_{n-y}} + xE_{Zr} + yE_{Nb} - E_{Zr_m-Nb_n}, \quad (1)$$

$$E_{He-vac} = E_{Zr_{m-x}-Nb_{n-y}-He} + xE_{Zr} + yE_{Nb} - E_{He} - E_{Zr_m-Nb_n}, \quad (2)$$

где E_{He} – полная энергия изолированного атома гелия, $E_{Zr_m-Nb_n}$ – полная энергия m атомов циркония и n атомов ниобия в многослойной структуре, E_{Zr} и E_{Nb} – полная энергия, приходящаяся на один атом циркония и ниобия, соответственно, в решетке чистого металла, $E_{Zr_{m-x}-Nb_{n-y}}$ – полная энергия системы цирконий-ниобий с вакансией, x и y – количество вакансий в расчетной ячейке в цирконии и ниобии, соответственно, $E_{Zr_{m-x}-Nb_{n-y}-He}$ – полная энергия гелий-вакансионного комплекса системы цирконий-ниобий.

В таблице 1 представлены рассчитанные в настоящей работе значения энергии образования вакансии и гелий-вакансионного комплекса для энергетически наиболее устойчивых их положений из всех рассмотренных в пленочных структурах. Полученные в работе значения энергии образования

вакансии в чистом цирконии (2,106 эВ) и ниобии (2,670 эВ) находятся в хорошем согласии с данными работы [1] (в цирконии – 2,010 эВ, в ниобии – 2,880 эВ).

Таблица 1

Энергия образования вакансии и энергия образования гелий-вакансионного комплекса в слоистых структурах $Zr_{36}Nb_{36}$ и $Zr_{63}Nb_{40}$. Номер слоя отсчитывается от границы раздела. В скобочках указаны номера атомов в расчетной ячейке, соответствующие энергетически наиболее выгодному положению вакансии и гелий-вакансионного комплекса по слоям

Слой	Энергия образования вакансии, эВ				Энергия образования гелий-вакансионного комплекса, эВ			
	$Zr_{36-m}Nb_{36-n}$		$Zr_{63-m}Nb_{40-n}$		$Zr_{36-m}Nb_{36-n}He$		$Zr_{63-m}Nb_{40-n}He$	
	в Zr	в Nb	в Zr	в Nb	в Zr	в Nb	в Zr	в Nb
1	0,995 (10)	1,613 (12)	1,074 (10)	0,532 (12)	2,676	3,405	2,796	2,434
2	1,085 (6)	1,531 (17)	0,980 (7)	1,317 (14)	2,672	4,801	2,627	2,794
3	-	-	1,705 (4)	2,883 (17)	-	-	2,911	4,177

Анализ результатов, представленных в таблице 1, показал, что значение энергии образования вакансии преимущественно увеличивается по мере удаления от границы раздела между металлическими слоями Zr/Nb. Из таблицы 1 видно, что увеличение толщины металлических слоев Zr/Nb приводит к заметному уменьшению энергии образования вакансии в первом слое в ниобии (на ~ 1,1 эВ). Во всех остальных рассмотренных в работе случаях изменение энергии образования вакансии с увеличением количества слоев Zr/Nb составляет ~ 0,1 – 0,2 эВ. Из таблицы 1 также видно, что энергия образования гелий-вакансионного комплекса при увеличении количества слоев Zr/Nb изменяется в первом и втором слоях циркония на величину менее 0,12 эВ и уменьшается в ниобии на величину ~ 1 эВ в первом слое и на величину ~ 2 эВ во втором слое. Установлено, что значение энергии образования гелий-вакансионного комплекса в третьем слое ниобия по сравнению с первым ниже на величину ~ 1,8 эВ. В цирконии наименьшее значение энергии образования комплекса наблюдается во втором слое. Таким образом, вблизи границы раздела между металлическими слоями Zr/Nb вакансии и гелий-вакансионному комплексу энергетически наиболее выгодно образовываться в первом слое ниобия и первых двух слоях циркония.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Sen H., Polcar T. Vacancy-interface-helium interaction in Zr-Nb multi-layer system: A first-principles study // Journal of Nuclear Materials. – 2019. – Vol. 518. – pp. 11–20.
2. Hamann D.R. Optimized norm-conserving Vanderbilt pseudopotentials // Phys. Rev. B – 2013. – Vol. 88. – № 8. – P. 085117(1-10).
3. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol. 77. – № 18. – P. 3865-3868.
4. ABINIT – abinit [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.abinit.org> – 27.01.20.