

УДК 538.97

**ОСОБЕННОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ КОМПЛЕКСА ИЗ ВАКАНСИИ И СМЕЩЕННОГО АТОМА В
АЛЬФА ЦИРКОНИИ**

С.О. Огнев, Л.А. Святкин

Научный руководитель: к.т.н., Р.С. Лаптев

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

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

E-mail: soo1@tpu.ru

**FEATURES OF THE FORMATION OF THE COMPLEX OF VACANCY AND DISPLACED
ATOM IN ALPHA ZIRCONIUM**

S.O. Ognev, L.A. Svyatkin

Scientific Supervisor: Ph.D., R.S. Laptev

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

E-mail: soo1@tpu.ru

***Abstract.** We present the results of ab initio study of the formation of vacancies in the zirconium lattice due to the displacement of one atom from the equilibrium position to the interstitial sites of the ideal lattice. The six nonequivalent displacements were considered. An increase in the total lattice energy due to the formation of complex of vacancy and displaced atom in the lattice was established. It was shown that the atom displaced to the nearest interstitial sites are returned to the ideal lattice site. The displacement of a zirconium atom from the ideal lattice site to the nearest tetrahedral interstitial site requires almost 1.3 times as much energy as the octahedral interstitial site.*

Введение. Сплавы на основе циркония широко используют для изготовления оболочек теплоделяющих элементов в водо-водяных ядерных реакторах на тепловых нейтронах. В процессе эксплуатации эти сплавы подвергаются интенсивному радиационному воздействию, что приводит к образованию и миграции вакансий в цирконии [1, 2]. При этом вакансии не только сильно влияют на диффузионные свойства межузельных атомов и других дефектов (например, растворенных атомов), но также являются источником зарождения петель и пустот. Скопление вакансий в виде пустот или петель может привести к ухудшению механических и термических свойств материалов, таких как набухание, охрупчивание, упрочнение и снижение теплопроводности. Следовательно, детальное изучение процесса образования вакансионных дефектов необходимо для прогнозирования эксплуатационных свойств ядерных материалов [3]. Целью данной работы является выявление особенностей взаимодействия вакансии и смещенного из узла атома в решетке альфа циркония.

Метод и детали расчета. Расчеты из первых принципов были выполнены в рамках теории функционала электронной плотности с использованием оптимизированного сохраняющего норму псевдопотенциала Вандербиля [4]. Для описания обменных и корреляционных эффектов использовалось приближение обобщенного градиента (GGA) в форме Пердю, Берка и Эрнцхофа [5]. Работы выполнялись в пакете программ ABINIT. Расчетные ячейки представляли собой блок элементарных ячеек ГПУ решетки

циркония $3 \times 3 \times 2$. Была проведена оптимизация параметров решетки и релаксация положений всех атомов в расчетной ячейке системы цирконий-вакансия. Релаксация считалась завершенной при значении сил, действующих на атомы, менее $50 \text{ мэВ}/\text{Å}$. На каждой итерации самосогласования собственные значения гамильтониана рассчитывались в сетке k-точек $3 \times 3 \times 3$ всей зоны Бриллюэна. Энергия обрезания при разложении волновой функции по базису плоских волн, составила 820 эВ .

Результаты и обсуждения. В работе образование вакансии в решетке циркония моделировалось смещением одного атома из узла идеальной решетки в междуузлие. В работе было рассмотрено шесть различных положений смещенного атома циркония относительно вакансии (рисунок 1). В результате релаксации решетка циркония заметно изменялась под действием сил и напряжений от присутствия двух дефектов: вакансии и смещенного атома.

Энергия образования комплекса из вакансии и смещенного атома рассчитывалась по формуле:

$$\Delta E = E_{\text{Zr-vac}} - E_{\text{Zr}} \quad (1)$$

где E_{Zr} и $E_{\text{Zr+vac}}$ – полные энергии расчетных ячеек Zr_{36} при отсутствии и наличии комплекса из вакансии и смещенного атома, соответственно. Результаты расчетов представлены в таблице 1. Из таблицы видно, что для положения O3 энергия образования комплекса минимальна среди всех рассмотренных. Это, возможно обусловлено сильным смещением атомов циркония, окружающих это положение, в сторону вакансии в результате релаксации. Отметим, что в случаях O1 и T1 вакансия и смещенный атом рекомбинировали. Изменение полной энергии решетки циркония в процессе этой рекомбинации представлены на рисунке 2.

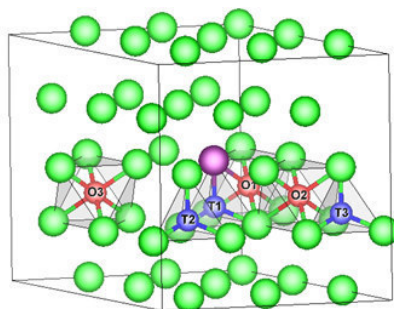


Рис. 1. Рассмотренные положения смещенного атома циркония. Синим цветом показаны тетраэдрические междуузлия идеальной решетки циркония, красным – октаэдрические. Зеленым цветом показаны атомы циркония, фиолетовым – место образования вакансии

Таблица 1

Энергия образования вакансии в решетке циркония

Междуузлие, занимаемое смещенным атомом	Расстояние от смещенного атома до вакансии, Å	Энергия образования вакансии, эВ.	
		Текущий расчет	Другие работы
O2	4,056	5,499	2,069 [6] 2,05 [7]
O3	4,729	2,419	
T2	3,814	5,617	
T3	5,724	5,967	

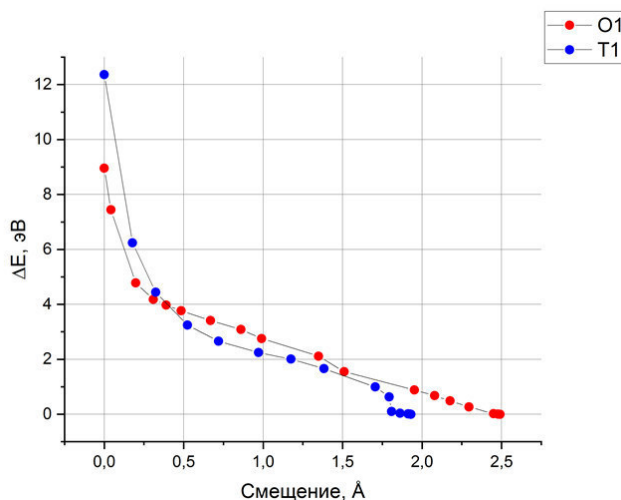


Рис. 2. Изменение полной энергии системы при смещении атома из междоузлия в вакансию в результате релаксации

Заключение. В работе были рассчитаны энергии образования вакансии в решетке циркония в случае наличия смещенного атома, которые лежат в промежутке от 2,4 до 6,0 эВ, что существенно превосходит данные, имеющиеся в литературе. Причина существенного отличия заключается в наличии больших напряжений и сил, действующих на атомы решетки за счет сравнительно небольшого размера расчетной суперячейки. Смещение атома циркония из узла идеальной решетки в ближайшее тетраэдрическое междоузлие требует энергии практически в 1,3 раза больше, чем в октаэдрическое.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. César González, Roberto Iglesias. Migration mechanisms of helium in copper and tungsten // The Journal of Materials Science. – 2014. – Vol. 49. – P. 8127–8139.
2. Cao J.L, Geng W.T. Migration of helium-pair in metals // The Journal of Nuclear Science. – 2016. – Vol. 478. – P. 13–25.
3. Zhang P., Li Y., Zhao J. Materials selection for nuclear applications in view of divacancy energies by comprehensive first-principles calculations // The Journal of Nuclear Science. – 2020. – Vol. 538. – P. 152253.
4. Hamann D.R. Optimized norm-conserving Vanderbilt pseudopotentials // Phys. Rev. B – 2013. – Vol. 88. – № 8. – P. 085117(1-10).
5. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol. 77. – № 18. – P. 3865-3868.
6. L.A. Svyatkin, D.V. Terenteva, R.S. Laptev Influence of vacancy on helium interaction with α -Zirconium // Journal of Physics: Conference Series. - 2021. - №1989
7. Wimmer E., Christensen M., Wolf W., Howland W.H., Kammenzind B., Smith R.W. Hydrogen in zirconium: Atomistic simulations of diffusion and interaction with defects using a new embedded atom method potential // Journal of Nuclear Materials. – 2020. – Vol. 532. – P. 152055.