

УДК 538.91:548.4

**ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГЕЛИЯ С ВАКАНСИЕЙ В АЛЬФА-ЦИРКОНИИ:
РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ**

Д.В. Терентьева, 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: dvt17@tpu.ru

**FEATURES OF THE INTERACTION OF HELIUM WITH A VACANCY IN ALPHA-
ZIRCONIUM: FIRST PRINCIPLE CALCULATIONS**

D.V. Terentyeva, L.A. Svyatkin

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

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 interaction of a helium atom with a vacancy in the α -zirconium lattice at concentrations of helium atoms and vacancies of ~ 3 and 6 at.%. Formation energy of vacancy and vacancy-helium complex were calculated for both defect concentrations. It is established that the vacancy center is a metastable position for helium atom in zirconium lattice. The presence of hybridized antibonding states between the helium atom and the nearest zirconium atoms was revealed.*

Введение. Цирконий используется в атомной энергетике в качестве конструкционных материалов ядерных реакторов. Нейтронное облучение ускоряет процессы деградации конструкционных материалов и приводит к значительному уменьшению срока их эксплуатации. Накопление дефектов вследствие (n, α) и (n, p) реакций происходит в приповерхностном слое металлов. В результате этих реакций образуются газообразные примеси, что приводит к гелиевому охрупчиванию, радиационной ползучести, газовому набуханию материалов. Так как у материалов, находящихся под влиянием длительного облучения, изменяются его конструкционные свойства, существует необходимость в теоретическом исследовании влияния атома гелия на атомную и электронную структуры материала [1]. Целью данной работы является изучение особенностей взаимодействия атома гелия с вакансией в решетке α -циркония при концентрациях атомов гелия и вакансий ~ 3 и 6 ат. %.

Метод и детали расчета. В работе расчеты производились в рамках теории функционала электронной плотности методом проекционных присоединенных волн с обменно-корреляционный потенциалом GGA – PBE [2], выполненные в пакете программ ABINIT [3]. Была проведена оптимизация параметров решетки и релаксация положений всех атомов в расчетной ячейке системы цирконий-гелий-вакансия. Релаксация считалась завершённой при значении сил, действующих на атомы, менее 25 мэВ/Å. На каждой итерации самосогласования собственные значения гамильтониана рассчитывались в сетке k -точек $5 \times 5 \times 3$ и $5 \times 5 \times 5$ неприводимой части зоны Бриллюэна для концентраций атомов гелия и вакансий ~ 3 и 6 ат. %, соответственно. Энергия обрезания при разложении волновой функции по базису плоских

волн, составила 820 эВ. Расчетные суперячейки представляли собой блок элементарных ячеек ГПУ решетки циркония $3 \times 3 \times 2$ и $2 \times 2 \times 2$ для концентраций атомов гелия и вакансий ~ 3 и 6 ат.%, соответственно (рис. 1). Для удобства обсуждения результатов атомы циркония на рисунках пронумерованы.

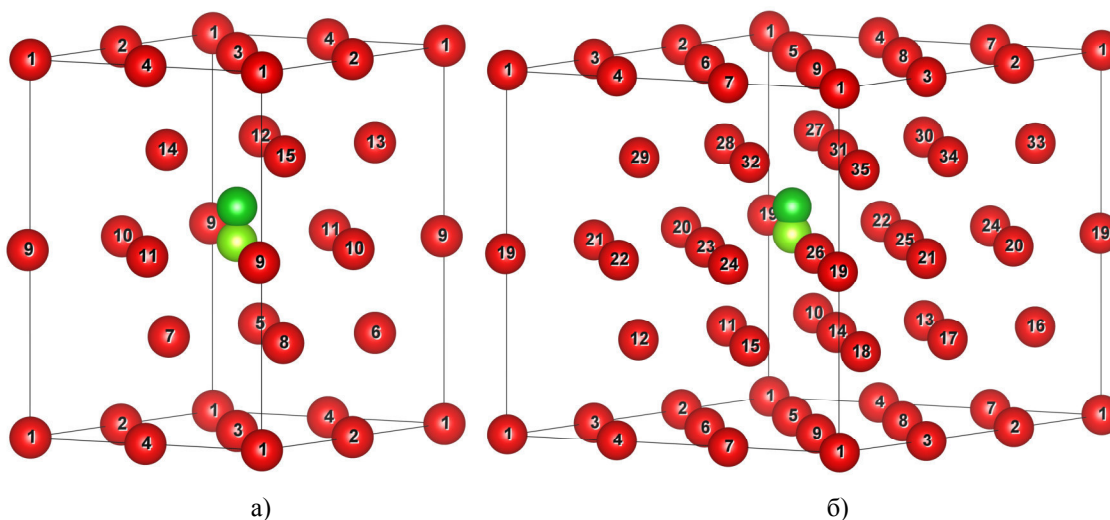


Рис. 1. а) Суперячейка, состоящая из 16 атомов циркония, б) суперячейка, состоящая из 36 атомов циркония. Ярко зеленым цветом показан атом, на месте которого создавалась вакансия, темно-зеленым – положение смещенного атома гелия из вакансии

Результаты и обсуждение. Для исследования влияния гелия и вакансии на энергетику их взаимодействия с цирконием были рассчитаны энергия внедрения атома гелия в решетку циркония:

$$E_i = E_{\text{He}} + E_{\text{Zr}} - E_{\text{Zr-He}}, \quad (1)$$

и энергия образования вакансии в решетке циркония:

$$E_f = E_{\text{Zr}} - \left(\frac{N-x}{N} E_{\text{Zr}} \right), \quad (2)$$

где E_{He} – полная энергия изолированного атома гелия, E_{Zr} – полная энергия N атомов чистого циркония, $E_{\text{Zr-He}}$ – полная энергия системы цирконий-гелий, x/N – концентрация вакансий (x и N – количество вакансий и узлов решетки в расчетной ячейке, соответственно).

По данным формулам были рассчитаны энергии образования вакансии, которые составили около 2,1 эВ, что согласуется с результатами работы [4], а также энергии образования гелий-вакансионного комплекса. Последняя упомянутая энергия была рассчитана для обеих суперячеек для положений атома гелия в вакансии и над ней (см. рис. 1). Значения энергий образования гелий-вакансионного комплекса, при расположении гелия в вакансии, составили 1,248 эВ и 1,388 эВ для концентраций дефектов 3 и 6 ат.%, соответственно, соответственно. Для случая расположения атома гелия над вакансией, полученные значения энергий образования гелий-вакансионного комплекса составили 1,251 эВ и 1,305 эВ для концентраций дефектов 3 и 6 ат.%, соответственно.

В работе были построены плотности электронных состояний для чистого циркония, циркония с вакансией, а также для системы цирконий-гелий-вакансия (Zr-He-vac). Результаты расчетов представлены на рис. 2. Из анализа рис. 2 видно, что присутствие в решетке циркония вакансии очень слабо влияет на вид ПЭС. Установлено, что состояние атома гелия сдвигаются с -12 эВ до -14 эВ при смещении атома гелия из вакансии в область над ней. Перекрытие ПЭС гелия и металла в области

энергий от -1 до 0 эВ свидетельствует о гибридизации занятых состояний циркония с незанятым в атомарном гелии 2s состоянием, которое образует довольно широкую зону вблизи уровня Ферми системы Zr-He-vac и проникает в область занятых состояний циркония. Однако степень этой гибридизации невелика из-за низкой плотности занятых 2s состояний гелия. Выявлено, что по характеру взаимодействия между атомом гелия и ближайшими к нему атомами циркония это состояние является антисвязывающим. Данные выводы характерны для обеих рассмотренных концентраций дефектов.

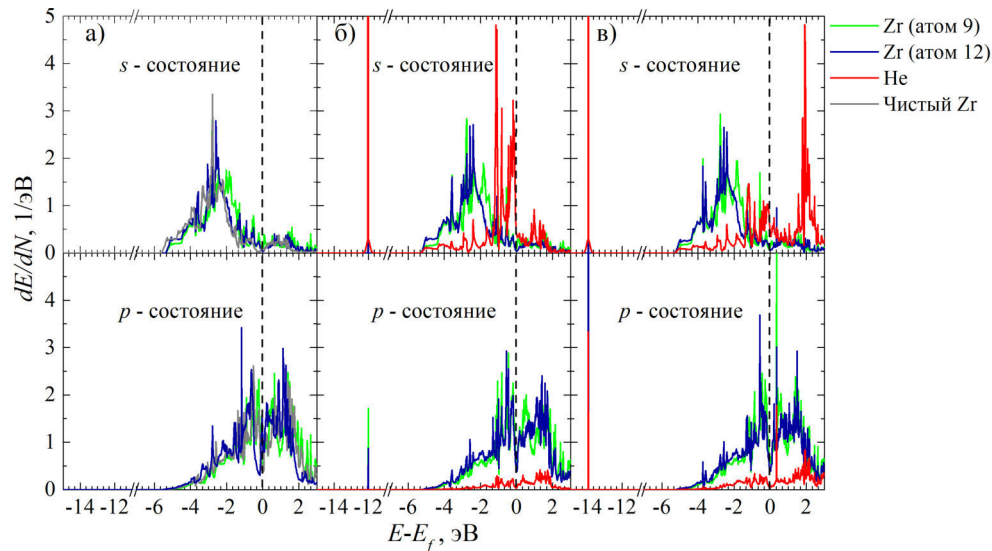


Рис. 2. Парциальная ПЭС а) циркония с вакансией, в) системы Zr-He-vac (гелий в вакансии), г) системы Zr-He-vac (гелий в области над вакансией) для концентраций атомов гелия и вакансий ~ 6 ат.%. Черной пунктирной линией обозначен уровень Ферми. Нумерация атомов соответствует нумерации на рис. 1

Заключение. В работе проведено первопринципное исследование особенностей взаимодействия атома гелия с вакансией в решетке α -циркония при концентрациях атомов гелия и вакансий ~ 3 и 6 ат.%. Установлено, что атому гелия энергетически более выгодно располагаться в области над вакансией, чем в центре вакансии. Выявлено наличие гибридизованных антисвязывающих состояний между атомом гелия и ближайших к нему атомов циркония.

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

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Неклюдов И.М., Толстолицкая Г.Д. Гелий и водород в конструкционных материалах. ВАНТ. Сер.: Физ. радиац. поврежд. и радиац. материаловед. – 2003. – № 3. – С. 3-14.
2. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol. 77., № 18. – P. 3865-3868.
3. ABINIT – abinit [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.abinit.org>. (дата обращения: 25.02.2021)
4. Zeng, J., Zhang H., Zhou X., Liang J., Sheng L., Peng S. First-Principles Study of the Structural Stability and Electronic and Elastic Properties of Helium in α -Zirconium // Advances in Condensed Matter Physics. – 2014. – Vol. 2014. – P. 929750(1)-929750(8).