

ВЛИЯНИЕ АТОМОВ ГЕЛИЯ НА ПОВЕДЕНИЕ ПАР ФРЕНКЕЛЯ ПРИ МАЛЫХ РАССТОЯНИЯХ РАЗЛЕТА

Введение. Радиационное повреждение металлов является фактором первостепенной важности при разработке и эксплуатации ядерных и термоядерных реакторов. Особенностью ТЯР является наличие в материалах ТЯР чрезвычайно большой концентрации изотопов водорода (термоядерное топливо) и гелия (продукт термоядерной реакции и распада трития). Атомы гелия и водорода внедряются в материал, и, взаимодействуя с радиационными дефектами, изменяют характер повреждения [1-6]. В представленной работе проведено исследование ряда процессов, характерных для приповерхностной области вольфрама, приводящих к повышению её повреждаемости за счет блокировки процессов рекомбинации дефектов атомами гелия. Рассмотрены три случая: рекомбинация пары в массиве, рекомбинация пары около поверхности и рекомбинация пары около поверхности в присутствии атомов двух атомов гелия. В каждом случае рассмотрено несколько десятков начальных конфигураций атомов, в которых расстояние между вакансией и междоузельным атомом вольфрама мало и достаточно для спонтанной рекомбинации, что соответствует допороговым смещениям. Расчеты выполнены методом DFT. Расчетная супер-ячейка содержит 128 атомов W (768 электронов) с периодическими оптимизируемыми граничными условиями.

Рекомбинация пары Френкеля в массиве вольфрама. Начальной конфигурацией, которая наиболее благоприятна для блокировки рекомбинации, является близкое расположение пары He2 к вакансии и максимальное удаление междоузельного атома W от вакансии. Расчеты показали, что даже в этом случае (при данном размере суперячейки) рекомбинация проходит до конца в результате цепочки замещений. Первоначально пара He2 захватывается вакансией, но затем вытесняется из неё ближайшим атомом W в результате цепочки замещений атомов W, провоцируемыми междоузельным атомом W. В случае одного атома He, рекомбинация происходит легче. Рекомбинация в объеме W проходит из всех доступных положений междоузельного атома I_w . Из этих результатов следует, что объем спонтанной рекомбинации генетически связанных

вакансий и собственных междоузельных атомов W превышает объём расчетной супер-ячейки, а наличие примесей в виде He2 (тем более He1) в таком объеме в массиве вольфрама не препятствует спонтанной рекомбинации. Действительно, в работе [7] в рамках другого метода получена оценка $\Omega_{rec} \approx 200\omega_0$ (ω_0 – атомный объём для вольфрама), что вдвое превышает объем супер-ячейки.

Рекомбинация пары Френкеля вблизи поверхности (100). В этом варианте атомов гелия нет. Междоузельный атом образует краудион, как и в объеме металла. При релаксации междоузельного атома I_W возникает конкуренция двух стоков: вакансии и поверхности. Конечный вариант зависит от начального расположения атома I_W и расположения вакансии и линии образующегося краудиона. В первом приближении, если I_W образуется под вакансией (или в одном слое с вакансией), то создается краудион, один из атомов которого рекомбинирует с вакансией. На рис. 1а показано стрелками смещения атомов W принадлежащих краудиону, при которых атом, ближайший к вакансии, уходит из цепочки и переходит в вакансию. Если же I_W располагается выше вакансии, то создает краудион, который выходит по цепочке замещений на поверхность, создавая адсорбированный атом W (рис. 1б). Вакансия при этом выживает.

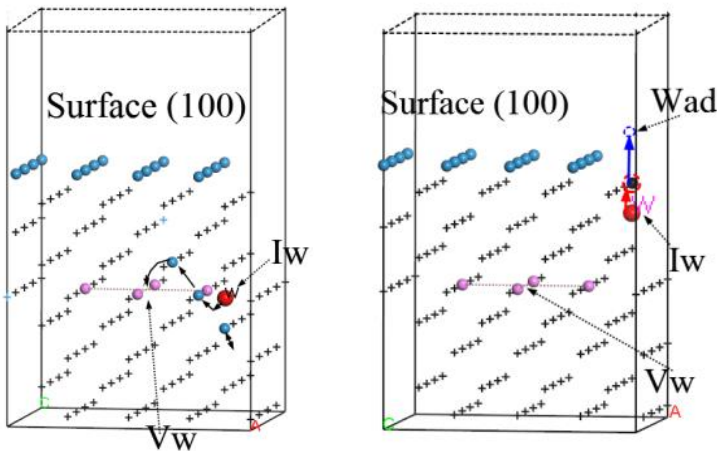


Рис. 1. Релаксация в процессе оптимизация конфигурации вольфрама после образования пары Френкеля вблизи поверхности (100). Гелиевых атомов нет. а – вариант с рекомбинацией вакансии и атома W за счет последовательных замещений; б – вариант, при котором атом W создает краудион, который выходит по цепочке замещений на поверхность, создавая адсорбированный атом W.

Таким образом, в приповерхностных слоях объем спонтанной рекомбинации пар Френкеля уменьшается, по сравнению с массивом вольфрама, даже без наличия примесных атомов гелия, то есть выживание вакансий вблизи поверхности более вероятно.

Блокировка рекомбинации пары Френкеля вблизи поверхности (100) в присутствии пары атомов He2. На рис. 2 представлена начальная конфигурация вакансии и атома вольфрама, соответствующая рис. 1а, но вблизи вакансии введены два атома гелия. Эти два атома гелия практически сразу захватываются в вакансию после начала расчета. Комплекс (Vw+He2), находящийся вблизи поверхности, оказывается более устойчивым к рекомбинации пары Френкеля, по сравнению с обычной вакансией в том же положении (рис.2а), при релаксации. Атом I_w создает краудион, выходящий на поверхность. В результате рекомбинации нет, а один атом W по цепочке замещений выходит на поверхность (рис. 2). Таким образом, объем спонтанной рекомбинации пар Френкеля в приповерхностных слоях при наличии примесных атомов гелия, заполняющих вакансию, уменьшается в еще большей степени.

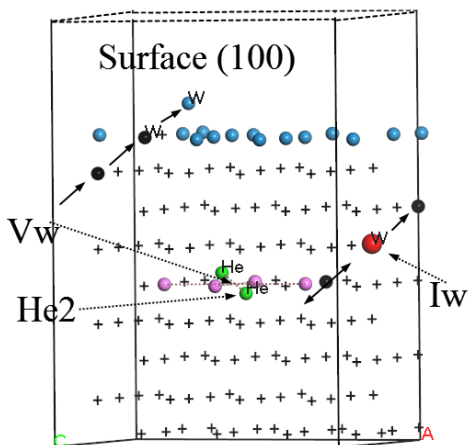


Рис. 2. Блокировка рекомбинации пары Френкеля в объеме вольфрама, граничащем с поверхностью (100), при наличии пары атомов He2 вблизи вакансии. Конечная стадия оптимизации. Стрелками указаны перемещения атомов W по линии краудиона. Виден выход краудиона с другой стороны из-за периодичности граничных условий суперячейки.

В варианте начальной конфигурации, соответствующей рис. 1b, при введении двух атомов гелия вблизи вакансии (рис. 3a) образуется краудион, который выходит на поверхность под меньшим углом, чем в рис. 1b. При этом один атом W выталкивается краудионом на поверхность, образуя адсорбированный атом, но в другой ячейке. Рекомбинации генетически связанной пары не происходит. Более того, вблизи поверхности образуется, ещё одна вакансия. Наличие комплекса (V+He2) и приповерхностной вакансии и адсорбированных атомов W хорошо видно из рис.3b, на котором изображена изоповерхность электронной плотности для конечной стадии оптимизации структуры (рис.3a). Электронная плотность внутри замкнутых полостей меньше, чем снаружи.

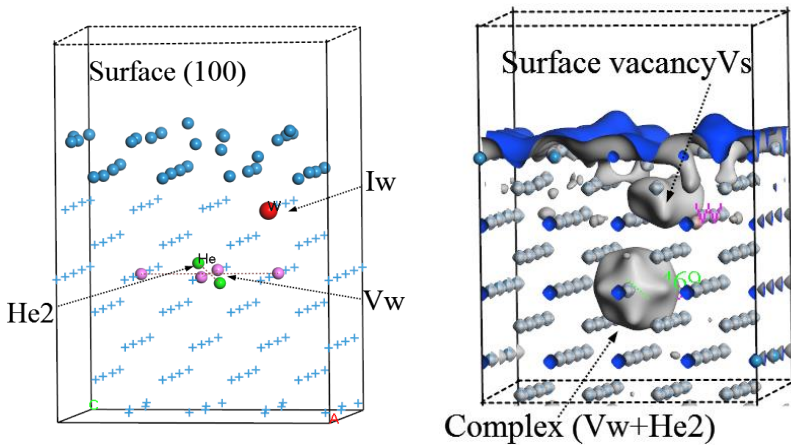


Рис.3. а - блокировка рекомбинации пары Френкеля в объеме вольфрама, граничащем с поверхностью (100), при наличии пары атомов He2 вблизи вакансии, выход краудиона на поверхность с образованием приповерхностной вакансии и адсорбированных атомов. Конечная стадия оптимизации. b – визуализация распределения электронной плотности для рис.3a

Выводы: В приповерхностных слоях вольфрама при наличии примеси гелия объем спонтанной рекомбинации генетически связанных вакансий и собственных междоузельных атомов W значительно уменьшается, т.е. вероятным становится выживание пар, которые в отсутствии гелия спонтанно рекомбинировали на большем расстоянии. Это облегчает допороговое образование дефектов. Более того, присутствие гелия вблизи

первичной пары может провоцировать образование дополнительной вакансии после выхода междоузельного атома вольфрама на поверхность.

Список литературы

1. K. Nordlund, St.J. Zinkle and others// J. Nuc. Mat. 2018, Vol. 512, P. 450-479
2. W. Zhang, F. Luo and others// J. Nucl. Mat. 2016, Vol. 479, P. 302-306
3. N. Fernandez, Y. Ferro and D. Kato// Acta Mat. 2015, Vol. 94 P. 307–318
4. G. D. Temmerman and others // Plasma Phys. Cont. Fus., 2018. Vol. 60, no. 4, P. 044018
5. G.-H. Lu, and others // Nucl. Fusion, 2014. Vol. 54, no. 8, P. 086001
6. K. Schmid and others // Phys. Scr. 2017, Vol.170, P. 014037
7. M. P. Biget, R. Rizk, A. Bessis// Solid State Com. 1975. Vol. 16, Is.7, P. 949-952