

Структурні властивості стопів Zr – 12.5 % Nb та Zr – 25 % Nb з ГПУ та ОЦК ґратками: моделювання з перших принципів

В.О. Харченко^{1,2,*}, Д.О. Харченко¹, А.В. Дворниченко³

¹ Інститут прикладної фізики НАН України, вул. Петропавлівська, 58, 40030 Суми, Україна

² Інститут фізики Аугсбурзького університету, вул. Університетська, 1, 86153 Аугсбург, Німеччина

³ Сумський державний університет, вул. Римського-Корсакова, 2, 40007 Суми, Україна

(Одержано 14.02.2012, опубліковано online 04.06.2012)

Проведено моделювання з перших принципів електронної структури стопів Zr – 12.5 % Nb та Zr – 25 % Nb при нульовій температурі, використовуючи теорію функціоналу густини, метод лінеаризованих приєднаних плоских хвиль та наближення узагальненого градієнту. Досліджено структурні та енергетичні властивості стопів Zr – 12.5 % Nb та Zr – 25 % Nb у випадку ГПУ та ОЦК ґратки, що утворені шляхом уведення атома ніобію, як атома заміщення, до кристалу цирконію (або великої кількості атомів цирконію до кристалу ніобію). Визначено оптимальні значення параметрів ґратки вказаних структур та, у випадку ГПУ стопів, структурного співвідношення *с/a*. З'ясовано тип енергетично найбільш вигідної ґратки для кожної структури. Обчислено електронні густини, густини станів, енергетичні спектри та рентгенівські спектри поглинання для кожної структури із ГПУ та ОЦК ґратками.

Ключові слова: першопринципні розрахунки, гпу та оцк структури, стопи цирконій-ніобій.

PACS numbers: 61.50.Lt, 61.72.Bb, 71.15.Dx

1. ВСТУП

Проблема модернізації існуючих конструкційних матеріалів для активної зони атомних реакторів та створення нових матеріалів є однією з першостепенних задач, що мають місце у сучасній ядерній фізиці та енергетиці. Одним із головних елементів для матеріалів реакторної техніки є цирконій. Це пов'язано, у першу чергу, із тим, що цирконій характеризується малим перерізом захвату теплових нейтронів [1]. Тому, для виготовлення тепловиділяючих елементів ядерних реакторів використовують металічний цирконій, що не містить гафнію [1]. У якості найбільш звичаних матеріалів при виготовленні конструкційних елементів активної зони ядерних реакторів використовуються стопи цирконію з ніобієм [2]. Стопи Zr-Nb із невеликим відсотковим вмістом ніобію характеризуються добрим поєднанням ядерних, механічних та корозійних властивостей. Вони не схильні до зниження опору корозії під опроміненням і володіють більшою міцністю, зокрема більш високим опором повзучості [1, 2].

Збільшення відсоткового вмісту ніобію у стопі Zr-Nb призводить до погіршення властивостей стопів, що унеможливило їх використання у реакторній техніці. Зокрема це пов'язано із тим, що стопи Zr-Nb із підвищеним вмістом ніобію мають велику схильність до наводнення. У процесі експлуатації стопу в реакторі внаслідок корозійних процесів водень дифундує всередину стопу. При перевищенні концентрації водню у стопі границі розчинності він виділяється у вигляді крихкої гідридної фази. У зв'язку з цим не менш актуальною задачею є дослідження цирконієво-ніобієвих стопів із підвищеним вмістом ніобію.

Корозійна поведінка стопу Zr-Nb з відсотковим вмістом ніобію 0.02-20 % досліджувалася в роботі [3], де було встановлено, що зменшення об'ємної частки ОЦК(бс)-фази та концентрації ніобію в ГПУ(гср)-

фазі зменшує швидкість корозії стопу. Задача дослідження процесів утворення гідридної фази у стопах Zr-Nb, що містять 20 % та 40 % ніобію вирішувалась у роботах [4-6]. Для теоретичного дослідження та опису процесів утворення гідридної фази у стопі Zr-Nb із підвищеним вмістом ніобію в роботі [7] було застосовано теорію пласкої деформації.

Авторами роботи [8] вивчалися коефіцієнти дифузії атомів Zr та Nb в сплавах Zr-Nb із заниженим та підвищеним вмістом ніобію. Було визначено, що механізм за яким відбувається дифузія атомів Zr та Nb визначається специфікою динаміки ґратки та є моновакансійним. Дослідження крупнозернистого ОЦК стопу Zr-Nb із 19 % ніобію з метою встановлення коефіцієнтів дифузії атомів гафнію та ніобію проводилося в роботі [9], де визначено, що гафній дифундує швидше за ніобій. Теоретичні дослідження характеру впливу атому ніобію, як атому заміщення, та вакансії в ГПУ кристалі цирконію при нульовій температурі було проведено в роботі [10]. Було встановлено, що структура цирконій + вакансія буде енергетично менш вигідною ніж структура цирконій + атом ніобію.

Вплив опромінення на процеси формування ОЦК фази у стопі Zr-Nb із 20-88 % ніобію експериментально вивчався у роботах [11-15]. Результати експериментальних досліджень при температурах ~ 700 К щодо структурних властивостей ГПУ- та ОЦК-фаз у стопі Zr-Nb при варіюванні відсоткового складу представлено в роботах [16-18].

У даній роботі будуть проведені розрахунки з визначення структурних та електронних властивостей стопів Zr-12.5 % Nb та Zr-25 % Nb у випадку ОЦК та ГПУ структур. Всі розрахунки буде проведено з використанням теорії функціоналу густини (DFT) [19, 20], методу лінеаризованих приєднаних плоских хвиль (FLAPW) та наближення узагальненого градієнту (GGA), що реалізовані в пакеті програм

* vasilij@ipfcentr.sumy.ua

WIEN2k [21]. Для кожної із досліджуваних структур буде проведено оптимізаційну процедуру, яка дозволить визначити оптимальні значення параметрів ґратки. Буде встановлено енергетично більш вигідний тип ґратки для кожної з досліджуваних структур. Будуть розраховані залежності електронної густини, густини станів, енергетичні та рентгенівські спектри поглинання.

2. МОДЕЛІ СТОПІВ Zr-Nb

За мету в даній роботі поставлено дослідження двох стопів Zr – 12.5 % Nb та Zr – 25 % Nb. Оскільки для цирконію при температурах до 863°C стійкою є β -фаза, що характеризується ГПУ структурою, а ніобій має ОЦК структуру, то очевидно, що й стопи Zr – x % Nb матимуть або ГПУ, або ОЦК структуру. Інтуїтивно можна очікувати, що при малих концентраціях ніобію x для стопу Zr – x % Nb стійкою буде ГПУ структура, а при великих – ОЦК. Окрім того, при високих температурах $T > 863$ °C стопи Zr – x % Nb із довільною концентрацією ніобію x матимуть ОЦК структуру, оскільки за таких температур і ніобій і цирконій характеризуються ОЦК структурами.

Оскільки цирконій та ніобій різняться на один електрон і ГПУ та ОЦК структури характеризуються щільною упаковкою, то для моделей стопів Zr – x % Nb логічно використати припущення про те, що атоми ніобію в ГПУ структурі цирконію, або атоми цирконію в ОЦК структурі ніобію будуть атомами заміщення. Дослідження суперкомірки з 48 атомів для ГПУ цирконію, що містить вакансію та атом ніобію у міжвузловому положенні поблизу вакансії показали, що в процесі релаксації атом ніобію займає положення вакансії [22]. Останнє підтверджує, що у стопі Zr – Nb атоми ніобію/цирконію будуть атомами заміщення. Моделі досліджуваних структур Zr – 12.5 % Nb та Zr – 25 % Nb із ГПУ (а) та ОЦК (б) структурами подано на рис.1. Тут зліва представлені ГПУ та ОЦК структури для модельного стопу Zr – 12.5 % Nb; справа – для стопу Zr – 25 % Nb.

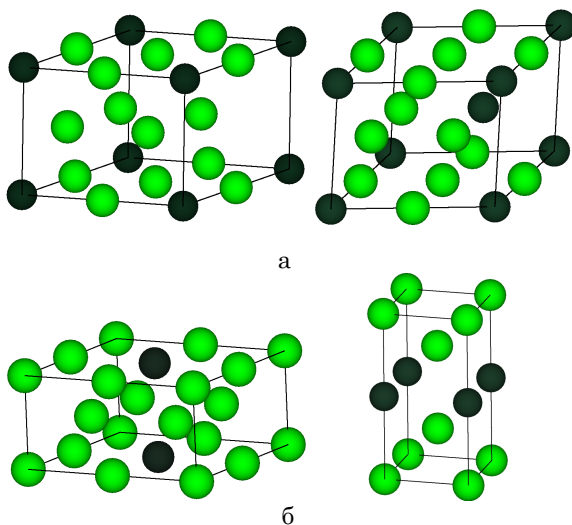


Рис. 1 – Моделі досліджуваних структур Zr – 12.5 % Nb (зліва) та Zr – 25 % Nb (справа) у випадку ГПУ структури (а) та ОЦК структури (б). Атоми цирконію позначено світлими кулями, атоми ніобію – темними

Розглянемо докладніше моделі ГПУ структур, які мають конфігурацію АВА (див. рис. 1а). У випадку 12.5 % Nb ГПУ - кристал цирконію, має у площині А у положенні (0, 0, 0) атом заміщення Nb. Для ГПУ структури з 25 % Nb додатково у площині В у положенні (1/3, 2/3, 1/2) міститься атом ніобію. Дані ГПУ структури належать до просторової групи $187P6m2$ та мають по чотири нееквівалентних атома, що задають кількість операцій симетрії. Стоп Zr – 12.5 % Nb характеризується одним атомом ніобію, та трьома нееквівалентними атомами цирконію: Zr_1 , Zr_2 та Zr_3 . Так, у площині А, що має атоми ніобію, знаходяться атоми Zr_1 , які мають по два зв'язки r_1 з атомами Nb. Атоми Zr_2 лежать у площині В й також мають по два зв'язки r_2 з атомами Nb, однак має місце співвідношення $r_2 > r_1$. Атоми Zr_3 також знаходяться у площині В, але не мають атомів ніобію як найближчих сусідів. ГПУ структура Zr – 25 % Nb характеризується двома нееквівалентними атомами ніобію та двома нееквівалентними атомами цирконію (по одному у кожній площині).

Тепер розглянемо моделі ОЦК структур Zr – 12.5 % Nb та Zr – 25 % Nb, що подані на рис. 1б зліва та справа, відповідно. У випадку 12.5 % Nb для ефективних параметрів ґратки маємо: $(2a, 2a, a)$, і тоді атом ніобію займає ефективне положення $(1/2, 1/2, 0)$. Для ОЦК структури, що має 25 % Nb, ефективні параметри ґратки: $(a, a, 2a)$ і атом ніобію знаходиться у положенні $(0, 0, 1/2)$. Обидві структури належать до $123P4mmm$ групи симетрії і характеризуються одним нееквівалентним атомом ніобію. Стоп Zr – 12.5 % Nb складається з трьох нееквівалентних атомів цирконію Zr_1 , Zr_2 та Zr_3 , що знаходяться на відстанях $a\sqrt{3}/2$, a та $a\sqrt{2}$, відповідно, від атому ніобію; тоді як стоп із 25 % Nb має лише два нееквівалентних атоми цирконію Zr_1 та Zr_2 .

3. МЕТОДИКА РОЗРАХУНКІВ

Згідно з наближенням Борна-Оппенгеймера, яке застосовується у більшості розрахунків з електронної структури, ядра, що входять до складу досліджуваної системи, вважаються нерухомими. Тоді, електростатичний потенціал V , що створюється ядрами, є зовнішнім для електронів. Стационарний стан електронів дається хвильовою функцією $\Psi(r_1, \dots, r_N)$ що є розв'язком рівняння Шредингера: $H\Psi \equiv [\hat{T} + \hat{V} + \hat{U}]\Psi = E\Psi$. Тут H – гамільтоніан електронної підсистеми, N – кількість електронів, U визначає електрон-електронну взаємодію. Головна відмінність одночасткової задачі від задачі багатьох тіл полягає у наявності доданку U . На сьогодні існує велика кількість методів розв'язку багаточастинкового рівняння Шредингера, що засновані на розкладі хвильової функції з використанням визначника Слеттера [23]. Найпростішим з них є метод Хартрі-Фока, на базі якого розвинуто низку сучасних методів [24]. Загальною проблемою для них є значна обчислювальна трудомісткість, через що застосування методу Хартрі-Фока та похідних від нього обмежуються не дуже великими системами. Метод теорії функціоналу густини у значній мірі розв'язує проблему розрахунку багаточастинкових систем шляхом зведення задачі

про систему багатьох тіл із потенціалом електрон-електронної взаємодії U до одночастинкової задачі, де доданок U відсутній.

Формалізм теорії функціоналу густини будується на уведенні густини частинок за виразом

$$n(\mathbf{r}) = N \int d^3\mathbf{r}_2 \dots \int d^3\mathbf{r}_N \Psi^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N).$$

Хохенберг та Кон показали, що цей вираз може бути обернено [19]: за відомої густини частинок в основному стані $n_0(\mathbf{r})$ можна знайти відповідну хвильову функцію основного стану $\Psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$. Таким чином Ψ_0 це єдиний функціонал від $n_0(\mathbf{r})$, а, отже, всі спостережені фізичні величини також є функціоналами n_0 .

Відомо, що функціонали $T[n]$ й $U[n]$ однакові для всіх систем, а $V[n]$, очевидно, залежить від конкретної досліджуваної системи. Для заданої системи вигляд V є відомим, а отже можна мінімізувати функціонал

$$E[n] = T[n] + U[n] + \int V(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \quad (1)$$

відносно розподілу густини частинок $n(\mathbf{r})$ за умови відомих виразів для $T[n]$ та $U[n]$. Результатом мінімізації функціоналу (1) є густина частинок у основному стані n_0 , а разом із нею й всі спостережені в основному стані величини. Варіаційна задача знаходження мінімуму функціоналу енергії $E[n]$ вперше була розв'язана за допомогою методу множників Лагранжа, Коном та Шемом [25]. Розв'язок рівнянь Ко-на-Шема для допоміжної системи, з якої виключена електрон-електронна взаємодія дає орбіталі, за якими відтворюється електронна густина $n(\mathbf{r})$ вихідної багаточастинкової системи.

Розрахунки структурних та електронних властивостей досліджуваних стопів Zr – 12.5 % Nb та Zr – 25 % Nb проводилися в рамках теорії функціоналу густини (DFT) [19] з використанням методу приєднаних лінеаризованих плоских хвиль (LAPW), апроксимації узагальненого градієнта (GGA) з параметризацією (PBE) [20], що реалізовані у пакеті програм Wien2k [21]. Даний метод самоузгодженим чином включає основні й валентні електрони та є широко вживаним при проведенні розрахунків щодо зонної структури твердих тіл [21]. При проведенні розрахунків радіуси MT (muffin-tin) сфер були обрані 2.1 атомних одиниць як для атомів цирконію, так і для атомів ніобію. Число базисних функцій $R_{MT} k_{max} = 7$, де R_{MT} – мінімальний радіус MT сфери, а k_{max} – найбільше значення модуля вектора оберненої ґратки. Розвинення за сферичними гармоніками всередині атомних сфер проводилося до $l_{max} = 10$. Інтегрування по зоні Брилюена проводилося з використанням 1000 k -точок. Критерієм припинення ітераційної процедури було обрано збіжність розрахунків до 0.0001 Ryd та 0.001 e⁻¹ для повної енергії кристалу та заряду кристалу, відповідно.

4. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ОБГОВОРЕННЯ

Для проведення розрахунків властивостей модельних стопів Zr – 12.5 % Nb та Zr – 25 % Nb було проведено оптимізаційну процедуру для визначення

параметрів ґратки та, у випадку ГПУ структур, структурного співвідношення c/a , що вимірюється експериментально. У випадку ОЦК стопів оптимізаційна процедура проводилась у стандартний спосіб: варіювався об'єм елементарної комірки та знаходився мінімум залежності повної енергії кристалу від об'єму, що й відповідає оптимальному значенню параметра ґратки. Результати оптимізаційної процедури, як залежність повної енергії кристалу, відрахованої від мінімального значення від об'єму елементарної комірки подано на рис. 2.

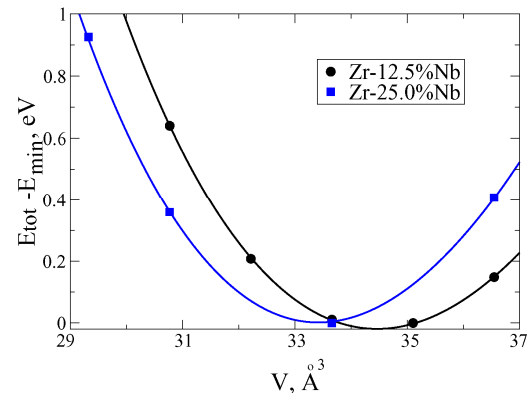


Рис. 2 – Залежність повної енергії (відрахованої від мінімального значення) від об'єму елементарної комірки для ОЦК стопів

У випадку ГПУ структур оптимізаційна процедура ускладнюється тим, що потрібно знайти глобальний мінімум повної енергії, як функції двох величин, а саме об'єму елементарної комірки та структурного співвідношення c/a . Дана задача розв'язувалася у наступний спосіб. Для кожного кристалу фіксувалося значення структурного співвідношення, з використанням якого знаходився мінімум повної енергії від об'єму елементарної комірки, як й для ОЦК стопів. Змінюючи значення структурного співвідношення отримувалася залежність повної енергії від структурного співвідношення, мінімум якої й визначає оптимальне співвідношення c/a для кожної структури. Результати подано на рис. 3а.

Використовуючи оптимальне структурне співвідношення проводилась стандартна оптимізаційна процедура з визначення оптимального об'єму елементарної комірки, що відповідає значенню параметра ґратки згідно визначення об'єму $V_{\text{opt}} = (c/a)a^3 \sin(2\pi/3)$. Тут замість повної енергії досліджувалась зміна тиску всередині кристалу при зміні об'єму елементарної комірки: елементарна комірка має оптимальний об'єм при нульовому тиску. Результати представлено на рис. 3б. Оптимальні значення параметра ґратки та, у випадку ГПУ структур, структурного співвідношення подано у таблиці 1. Тут відомі експериментальні значення для параметра ґратки ОЦК стопів Zr-Nb при температурах порядку 700 К [16] подано в останньому рядку. Видно, що отримані теоретично значення параметра ґратки ОЦК стопів дещо менші за експериментальні. Це виглядає природним, оскільки всі розрахунки проводились при нульовій температурі, а підвищення температури кристалу призводить до розширення елементарної комірки і, відповідно, до збільшення значення параметра ґратки.

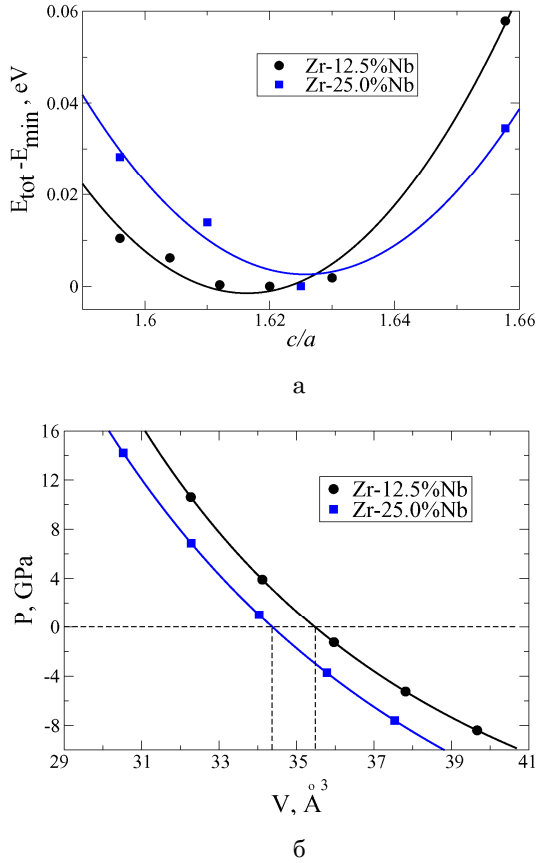


Рис. 3 – Залежність повної енергії (відрахованої від мінімального значення) від структурного співвідношення c/a (а) та залежність тиску всередині кристалу від об'єму елементарної комірки (б) для ГПУ стопів

Таблиця 1 – Оптимальні значення параметра ґратки (ангстрєми) та, у випадку ГПУ структур, структурного співвідношення для досліджуваних структур. Експериментальні дані a_{exp} (ангстрєми)

	12.5 % bcc	25 % bcc	12.5 % hcp	25 % hcp
a	3.534	3.186	3.498	3.145
c/a		1.617		1.626
a_{exp}	3.553		3.515	

Із проведених розрахунків порівнюючи значення повних енергій на елементарну комірку із оптимальними значеннями параметрів ґратки знаходимо, що при концентрації ніобію 12.5 % стоп Zr – Nb матиме з більшою імовірністю ГПУ структуру, а при концентрації ніобію 25 % енергетично більш вигідною буде ОЦК структура.

Використовуючи отримані оптимальні значення параметрів ґратки проводилися розрахунки електронної густини для чотирьох досліджуваних структур. Результати представлено на рис.4.

Розрахунки повної густини станів (DOS) для досліджуваних стопів Zr – 12.5 % Nb та Zr – 25 Nb, що мають енергетично більш вигідні ГПУ та ОЦК структури, відповідно, використовуючи оптимальні значення для параметрів ґратки подано на рис. 5. На рис. 5а, 5б суцільні криві відповідають стопам із ГПУ структурою, натомість штрихові криві – стопам із ОЦК структурою.

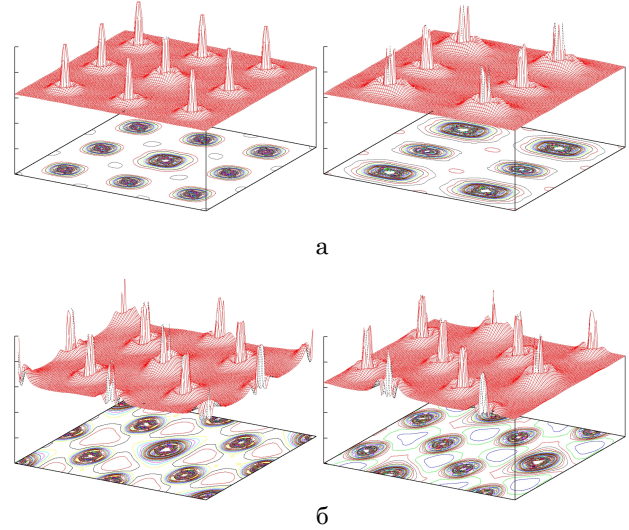


Рис. 4 – Електронні густини для структур Zr – 12.5 % Nb (зліва) та Zr – 25 % Nb (справа) у випадку ОЦК структури (а) та ГПУ структури (б) у площинах, існування атомів ніобію: для структур Zr – 12.5 % Nb (зліва) це площина (0, 0, 0); для ОЦК структури Zr – 25 % Nb (рис. а, справа) площина (1, 0, 0); для ГПУ структури Zr – 25 % Nb (рис. б справа) площина (0, 0, 2). Тут у площині (0, 0, 0) електронна густина топологічно ідентична до густини для ГПУ структури Zr – 12.5 % Nb (рис. б, зліва).

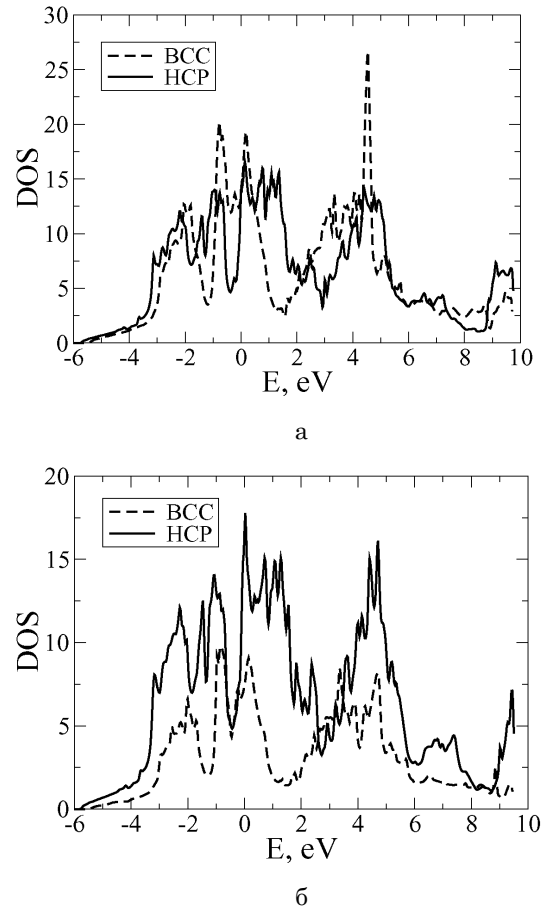


Рис. 5 – Залежність густини станів (DOS) від енергії, відрахованої від енергії Фермі, для: а) стопу Zr – 12.5 % Nb; б) стопу Zr – 25 % Nb за умови ГПУ (суцільна крива) та ОЦК (штрихова крива) структури

Видно, що для стопу Zr – 12.5 % Nb амплітуда основних піків на залежності густини станів більша для ОЦК структури (рис.5а), у той час як для стопу Zr – 25 % Nb ситуація протилежна: густина станів для ГПУ структури набуває більших значень, ніж для ОЦК структури (див. рис. 5б). Даний результат підтверджує те, що досліджуваний стоп Zr – 12.5 % Nb характеризується ГПУ ґраткою, а стоп Zr – 25 % Nb має ОЦК структуру.

Отримані залежності дозволяють обчислити енергетичні спектри, які для ГПУ стопу Zr – 12.5 % Nb та ОЦК стопу Zr – 25 % Nb представлені на рис. 6а та рис. 6б, відповідно. Як впливає з порівняння поведінки густини станів на рис. 5 та спектрів на рис. 6, перетин „павутин” в k -точках на рис. 6 відповідає пікам повної густини станів на даних енергетичних рівнях, відрахованих від рівня Фермі.

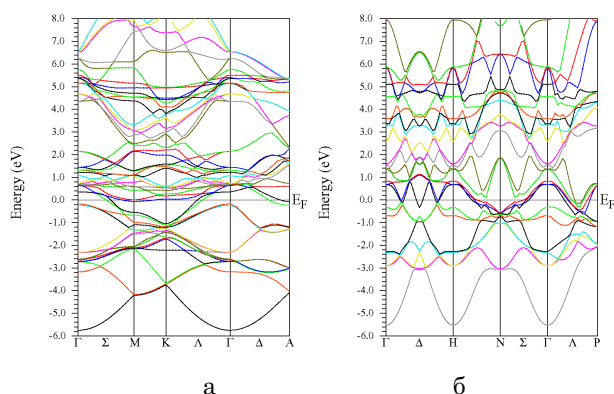


Рис. 6 – Енергетичні спектри для структур: а) ГПУ Zr – 12.5 % Nb, б) ОЦК Zr – 25 % Nb

Залежності рентгенівських спектрів поглинання для стопів Zr – 12.5 % Nb та Zr – 25 % Nb з ОЦК та ГПУ ґратками представлені на рис. 7. З рисунка видно, що у випадку ОЦК структур, незалежно від відсоткового вмісту ніобію, залежності рентгенівських спектрів поглинання характеризуються двома піками (один на малих енергіях, другий – на великих). ГПУ структури характеризуються двома піками на малих енергіях та один – на великих. Останнє може бути явно використано для валідації отриманих теоретичних результатів.

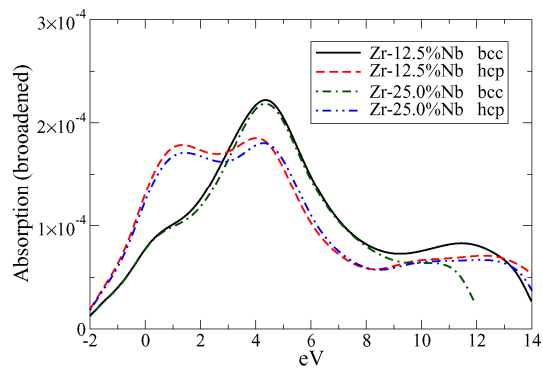


Рис. 7 – Залежності рентгенівських спектрів поглинання на краю лінії поглинання.

5. ВИСНОВКИ

Проведено моделювання з перших принципів електронної структури стопів Zr – 12.5 % Nb та Zr – 25 % Nb, що утворені шляхом уведення атома ніобію, як атома заміщення, до кристалу цирконію (або великої кількості атомів цирконію до кристалу ніобію), при нульовій температурі, використовуючи теорію функціоналу густини, метод лінеаризованих приєднаних плоских хвиль та наближення узагальненого градієнту. Проведено оптимізаційні процедури з визначення оптимальних значень параметрів ґратки вказаних структур та, у випадку ГПУ стопів, структурного співвідношення c/a . З'ясовано, що при 12.5 % Nb більш імовірною структурою буде ГПУ, тоді як при 25 % Nb енергетично більш вигідною буде ОЦК структура. Досліджено структурні та енергетичні властивості стопів Zr – 12.5 % Nb та Zr – 25 % Nb у випадку ГПУ та ОЦК ґратки. Обчислено електронні густини, густини станів, енергетичні спектри та рентгенівські спектри поглинання для кожної структури із ГПУ та ОЦК ґратками. Отримані результати шляхом числового моделювання добре узгоджуються з експериментальними даними.

Properties of Zr – 12.5 % Nb and Zr – 25 % Nb Alloys with hcp and bcc Lattices: *ab-initio* Modeling

V.O. Kharchenko^{1,2}, D.O. Kharchenko¹, A.V. Dvornichenko³

¹ Institute of Applied Physics, 58, Petropavlovskaya Str., 40030 Sumy, Ukraine

² Institute of Physics University of Augsburg, 1, Universitet Str., 86153 Augsburg, Germany

³ Sumy State University, 2, Rimsky Korsakov Str., 40007 Sumy, Ukraine

Ab-initio calculations of the electronic structure for Zr – 12.5 % Nb and Zr – 25 % Nb alloys are done using density functional theory, method of linearized augmented plane-wave approximation and generalized gradient approximation. The structural and energetic properties, such as the electron densities, densities of states, energetically and X-ray spectra in the case of the hcp and bcc lattices are calculated. Optimal values for the lattice constants are found. The most favorable structure for each studied alloy is defined.

Keywords: Ab-initio calculations, Hcp and bcc structures, Zirconium-niobium alloys.

Структурные свойства сплавов Zr – 12.5 % Nb и Zr – 25 % Nb с ГПУ и ОЦК решетками: моделирование из первых принципов

В.О. Харченко^{1,2}, Д.О. Харченко¹, А.В. Дворниченко³

¹ Институт прикладной физики НАН Украины, ул. Петропавловская, 58, 40030 Сумы, Украина

² Институт физики Аугсбургского университета, ул. Университетская, 1, 86153 Аугсбург, Германия

³ Сумский государственный университет, ул. Римского-Корсакова, 2, 40007 Сумы, Украина

Проведено моделирование из первых принципов электронной структуры сплавов Zr – 12.5 % Nb и Zr – 25 % Nb при нулевой температуре, используя теорию функционала плотности, метод линейаризованных присоединенных плоских волн и приближение обобщенного градиента. Исследованы структурные и энергетические свойства сплавов Zr – 12.5 % Nb и Zr – 25 % Nb в случае ГПУ и ОЦК решеток, образованных путем введения атома ниобия, как атома замещения, в кристалл циркония (или большого количества атомов циркония в кристалл ниобия). Определены оптимальные значения параметров решетки указанных структур и, в случае ГПУ сплавов, структурного соотношения c/a . Установлен тип энергетически наиболее выгодной решетки для каждой структуры. Рассчитаны электронные плотности, плотности состояний, энергетические спектры и рентгеновские спектры поглощения для каждой из исследуемых структур с ОЦК и ГПУ решетками.

Ключевые слова: расчеты из первых принципов, ГПУ и ОЦК структуры, циркониево-ниобиевые сплавы.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Д. Дуглас, *Металловедение циркония*. (Москва: Атомиздат: 1975).
2. G.K. Dey, S. Banerjee, P. Mukhopadhyay, *J. Phys. C* **4**, 327 (1984).
3. V.F. Urbanic, M. Griffiths, *ASTM STP* **1354**, 641 (2000).
4. В.Н. Воводин, И.М. Неклюдов, *Эволюция структурно-фазового состояния и радиационная стойкость конструкционных материалов*, (Киев: Наукова думка: 2006).
5. G.K. Dey, S. Banerjee, *J Nucl Mater.* **125**, 219 (1984).
6. P.E.J. Felwitt, P.J. Ash., A.G. Crocker, *Acta Metall.* **24**, 669 (1976).
7. D. Srivastava, S. Neogy, G.K. Dey, S. Banerjee, S. Ranganathan, *Mater. Sci Eng. A* **397**, 138 (2005).
8. C. Herzig, U. Kohler, S.V. Divinski, *J. Appl. Phys.* **85**, 8119 (1999).
9. H. Zou, G.M. Hood, R.J. Schultz, et al., *J. Nucl. Mater.* **230**, 36 (1996).
10. В. Харченко, *Металлофиз. новейшие технол.* **33**, N5, 577 (2011).
11. O.T. Woo, G.M. McDougall, R.M. Hutcheon, et al, in: G.P. Sabol, G.D. Moan (Eds.), *ASTM STP* **1354**, 709 (2000).
12. C.D. Cann, C.B. So, R.C. Styles, C.E. Coleman, *J. Nucl. Mater.* **205**, 267 (1993).
13. S. Banerjee, S.J. Vijayakar, R. Krishnan, *J. Nucl. Mater.* **62**, 229 (1976).
14. O.T. Woo, G.M. McDougall, R.M. Hutcheon, C.E. Coleman in: *Symposium on Microstructure of Irradiated Materials*, 189 (1995).
15. Y.S. Kim, K.S. Im, Y.M. Cheong, S.B. Ahn, *J. Nucl. Mater.* **346**, 120 (2005).
16. G.M. Benites, A. Fernandez Guillermet, G.J. Cuello, J. Campo, *J. Alloys Comp.* **299**, 183 (2000).
17. G.M. Benites, A. Fernandez Guillermet, *J. Alloys Comp.* **302**, 192 (2000).
18. G. Aurelio, A. Fernandez Guillermet, G.J. Cuello, J. Campo, *J. Alloys Comp.* **335**, 132 (2002).
19. P. Hohenberg, W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864 (1964).
20. J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
21. P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, *Wien2k, An Augmented Plane Wave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties* (Vienna: Vienna University of Technology: 2001).
22. X.K. Xin, W.S. Lai, B.X. Liu, *J. Nucl. Mater.* **393**, 197 (2009).
23. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика*. (Москва: Наука: 1989).
24. Д. Хартри. *Расчёты атомных структур* (Москва: ИИЛ: 1960).
25. W. Kohn, L.J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133 (1965).