

Autors: Aleksejs Gopejenko

Nosaukums: Itrijs un skābekļa nogulsņējumu fcc-Fe kristālrežģī modelēšana no pirmajiem principiem

Anotācija:

Izkliedēto oksīdu stiprinātie (Oxides Dispersed Strengthened, ODS) tēraudi tiek uzskatīti par perspektīviem materiāliem nākotnes kodolsintēzes reaktoriem. Oksīdu tēraudu izmantošana ļauj palielināt reaktora darba temperatūru par 100°C, kas ievērojami uzlabo tā efektivitāti. Kā itrija oksīda daļiņu izmēri, tā arī telpiskais sadalījums, kas var ietvert, piemēram, titāna atomus, kas dabiski izplatās tēraudos, ietekmē ODS metālu mehāniskās īpašības un to izturību pret starojumu. Tomēr oksīdu daļiņu veidošanās mehānismi ODS tēraudos vēl nav pilnībā noskaidroti.

Detalizēta defekta modelēšana ar skaldnes centrētu kubisko (face centred cubic, fcc) Fe režģi tika veikta, izmantojot blīvuma funkcionāla teorijas projicēto paplašināto viļņu (Density Functional Theory Projector Augmented Wave, DFT PAW) metodi, kas ieviesta VASP datora programmā. Šajā darbā ir veiktas atsevišķas vakances, O un Y piemaisījumu aprēķini. Mijiedarbība starp vakanci, O un Y ir aprēķināta kopā ar saites enerģijas novērtējumu starp šiem defektiem. Mijiedarbība starp vairākiem defektiem ir arī aprēķināta. Migrācijas barjeras ir novērtētas, izmantojot kustinošas elastīgās joslas (Nudged Elastic Band, NEB) metodi. Sakarā ar to, ka tēraudos ir nelielās koncentrācijās Ti piemaisījumi, kas var veidot gan TiO, gan YTiO nogulsnes, tika veikti arī papildu pirmo principu aprēķini attiecīgajos modeļos. Veikto aprēķinu rezultāti atklāj galvenos faktorus, kas veicina ODS tēraudu veidošanos.

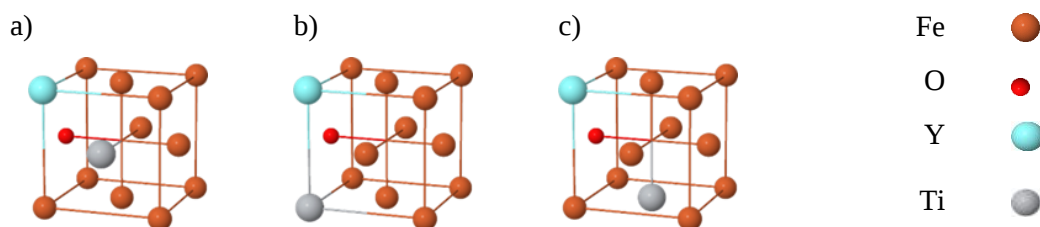
Šis promocijas darbs ir pirmais sistematizēts pētījums par starpatomu mijiedarbību ODS nanoklasteros, sintezētos fcc-Fe režģī. Izvēlēta pieeja *ab initio* aprēķiniem, kas veikti fcc-Fe režģī, tika pārbaudīta pēc tādiem pamatparametriem kā režģa konstante, elastības modulis, kohēzijas enerģija, kā arī V_{Fe} vakances veidošanās enerģija. Aprēķinu rezultāti ir labi saskaņoti gan ar eksperimentālajiem datiem, gan ar citiem teorētiskajiem pētījumiem. Tas nozīmē, ka šajā darbā izmantotās metodes ļauj iegūt ticamus rezultātus.

DFT PAW metode tika izmantota, lai veiktu fcc-Fe režģa pamatīpašību lielā mēroga aprēķinus un atsevišķas vakances, O, Ti un Y piemaisījumu ietekmi uz šīm īpašībām. Tadām aprēķinātām fcc-Fe režģa telpiskām īpašībām, kā režģa konstante, elastības modulis un kohēzijas enerģija, ir labā kvalitatīvā saskaņā. Novērtēta atsevišķo defektu veidošanās enerģija, kā arī vakances veidošanās enerģija. Pēdējais rezultāts labi saskaņojas ar citu modelēšanu rezultātiem. Ir konstatēts, ka, lai sasniegtu ticamus rezultātus, ir vajadzīga supersūna ar $4 \times 4 \times 4$ paplašinājumu, 800eV nogriešanas enerģija un k-punktu kopas izmēri $7 \times 7 \times 7$.

Tika veikta modelēšana piemaisījumu pāriem fcc-Fe režģī: $Y_{Fe}-Y_{Fe}$, $Y_{Fe}-V_{Fe}$, $Y_{Fe}-O_{Fe}$, $Y_{Fe}-O_{Oct}$, $Ti_{Fe}-Ti_{Fe}$, $Ti_{Fe}-V_{Fe}$, $Ti_{Fe}-O_{Fe}$, $Ti_{Fe}-O_{Oct}$, $O_{Fe}-O_{Fe}$, $V_{Fe}-V_{Fe}$, and $O-V_{Fe}$, kas atrodas dažādos savstarpējos

attālumos. Tam sekoja sarežģītāko konfigurāciju, tādu, ka trīs vai četras V_{Fe} , vai itrija piemaisījuma atoms ar divām vai trijām V_{Fe} vakancēm, aprēķini.

Tika veikti arī trīs piemaisījumu atomu $\text{Y}_{\text{Fe}}\text{--O}_{\text{Fe}}\text{--Y}_{\text{Fe}}$, $\text{Y}_{\text{Fe}}\text{--O}_{\text{oct}}\text{--Y}_{\text{Fe}}$, $\text{Ti}_{\text{Fe}}\text{--O}_{\text{Fe}}\text{--Ti}_{\text{Fe}}$, $\text{Ti}_{\text{Fe}}\text{--O}_{\text{oct}}\text{--Ti}_{\text{Fe}}$, $\text{Y}_{\text{Fe}}\text{--O}_{\text{Fe}}\text{--Ti}_{\text{Fe}}$ (1. attēls), $\text{Y}_{\text{Fe}}\text{--O}_{\text{oct}}\text{--Ti}_{\text{Fe}}$ konfigurāciju lielā mēroga aprēķini, tomēr neiekļaujot V_{Fe} vakances.



1. attēls. Y_{Fe} un Ti_{Fe} atomu modeļi kā 1NN (a), 2NN (b) un 3NN (c) kaimiņi, kamēr O_{Fe} ir 1NN attālumā no abiem Y_{Fe} un Ti_{Fe} atomiem.

Izmantojot NEB metodi tika aprēķinātas migrācijas enerģijas un trajektorijas itrija atomam, kuram ir lielākais diametrs no visiem šajā pētījumā izskatītiem atomiem, kā ideālajā, tā arī *fcc*-Fe režģī ar defektiem. Šajā promocijas darbā iegūti rezultāti ir svarīgs solis itrija oksīda daļiņu nogulsnešanas modelēšanā, kas ir nepieciešama ODS tēraudu veidošanās mehānisma noskaidrošanai.

Aprēķinu rezultāti ir sistematizēti un nodoti mūsu partneriem IAM-AWP (KIT), Karlsrūē, lai izveidotu datu bāzi par mijiedarbību starp dzelzs režģa defektiem, kas ļautu izmantot šos rezultātus kā pamatu ODS tēraudu veidošanās turpmākai *ab initio* kā arī turpmākai kinētiskajai Monte-Karlo modelēšanai