

燃料包壳铬涂层中氧和氢扩散行为研究

龚恒风 严 俊 李思功 刘 洋 陈蒙腾 任啟森 薛佳祥 廖业宏

(中广核研究院有限公司 核燃料与材料研究所 深圳 518033)

摘要 在压水反应堆中, 锆合金包壳与水发生腐蚀化学反应, 会对包壳的机械性能产生不利影响, 从而限制燃料元件的使用寿命。为了减缓包壳氧化速率, 防止氢气燃爆风险的发生, 人们提出了事故容错燃料的概念设计。金属铬具有优异的抗腐蚀氧化性能, 作为包壳涂层已备受核电领域的广泛关注。目前, 铬涂层耐高温腐蚀氧化行为微观机理研究尚不清楚, 亟须开展相关研究。本文采用第一性原理方法从电子尺度探索了铬晶体中氧和氢的扩散机理。研究表明, 氧的最稳定占位是八面体间隙, 氢更倾向于占据四面体间隙。氢的溶解度远低于氧的溶解度。氧在间隙的溶解能为负值, 表明氧与近邻铬之间存在较强的相互吸引。进一步采用弹性带方法计算氧和氢的反应扩散路径和迁移能垒。氧沿着四面体间隙至八面体间隙的反应路径扩散, 迁移能垒为 0.18 eV, 而氢更容易沿着四面体间隙至第一近邻的四面体间隙的反应路径扩散, 迁移能垒为 0.79 eV。同时, 氧沿着四面体间隙至第一近邻八面体间隙的反应路径扩散, 迁移能垒为 0.65 eV。这表明氧倾向于沿着四面体间隙至八面体间隙的反应路径扩散。氢在铬中的迁移能垒为 0.17 eV。进一步结合阿伦尼乌斯扩散方程, 拟合出温度与扩散系数的变化关系, 为涂层高温腐蚀性能实验研究提供理论支持。

关键词 密度泛函理论, 溶解能, 反应路径, 迁移能垒

中图分类号 O469

DOI: 10.11889/j.0253-3219.2024.hjs.47.090603

The diffusion behavior of oxygen and hydrogen in Chromium coating on fuel cladding

GONG Hengfeng YAN Jun LI Sigong LIU Yang CHEN Mengteng REN Qisen

XUE Jiaxiang LIAO Yehong

(Nuclear Fuel and Materials Department, China Nuclear Power Technology Research Institute Co., Ltd, Shenzhen 518033, China)

Abstract [Background] In a pressurized water reactor, the corrosion chemical reaction between zirconium alloy cladding and water will adversely affect the mechanical properties of the cladding, thus limiting the service life of the fuel elements. In order to slow down the oxidation rate of the cladding and prevent the potential risk of hydrogen explosion, a conceptual design of accident tolerant fuel was proposed. Chromium metal has excellent corrosion and oxidation resistance, and has been widely used as cladding coatings in the field of nuclear power. At present, the micro-mechanism of corrosion and oxidation resistance of chromium coating at high temperature is not clear, so it is urgent to carry out relevant research. [Purpose] This study aims to investigate the diffusion behavior of oxygen and hydrogen in coating on fuel cladding. [Methods] The diffusion mechanism of oxygen and hydrogen in chromium crystals was investigated on the electronic scale by using the first principles method. The Arrhenius diffusion equation was employed to obtain the diffusion coefficients of O and H at different temperatures. In addition, the reaction-diffusion paths and migration energy barriers of oxygen and hydrogen were calculated by elastic band

国家重点基础研究发展计划(No.2017YFB07024001)资助

第一作者: 龚恒风, 女, 1984 年出生, 2013 年于兰州大学获博士学位, 研究领域为反应堆包壳和芯块模拟设计和微观表征分析, E-mail: gonghf887@163.com

收稿日期: 2023-10-24, 修回日期: 2024-05-08

Supported by the National Key Basic Research and Development Program (No.2017YFB07024001)

First author: GONG Hengfeng, female, born in 1984, graduated from Lanzhou University with a doctoral degree in 2013, focusing on nuclear claddings and fuels simulations design and microstructure analysis technique, E-mail: gonghf887@163.com

Received date: 2023-10-24, revised date: 2024-05-08

method. **[Results]** Simulation results show that oxygen occupies the most stable position in the octahedral interstitial site (OIS), and hydrogen tends to occupy the tetrahedral interstitial site (TIS). The oxygen atoms diffuses from the reaction path TIS to TIS with the diffusion energy barrier 0.79 eV whilst the oxygen atoms diffusion along the TIS to OIS reaction path has the diffusion energy barrier 0.65 eV. It suggests that there is a preferential diffusion pathway from TIS to OIS for oxygen atom due to its lower diffusion energy barrier. Notably, hydrogen demonstrates comparable diffusion energy barriers (0.17 eV) when moving along the reaction path from TIS to TIS and from TIS to OIS, respectively. The diffusion coefficients of oxygen and hydrogen increase linearly with the increase of temperature, respectively. And for, the diffusion coefficients of both oxygen atom and hydrogen atoms along the TIS to OIS reaction path are higher than that of TIS to TIS reaction path at the different temperatures. **[Conclusions]** The solubility of hydrogen is much lower than that of oxygen. The negative dissolution energy of oxygen in the interstitial site indicates that there is a strong mutual attraction between oxygen and the first nearest neighbor chromium. A fitted relationship established between temperature and diffusion coefficient in this study provides theoretical support for investigation coating corrosion properties at elevated temperatures.

Key words Density functional theory, Solution energy, Reaction coordinate, Migration energy barrier

由于包壳锆(Zirconium, Zr)合金的腐蚀现象限制了核反应堆燃料元件的安全性能范围和安全运行裕度,人们提出了一种耐事故的先进包壳概念设计,即在锆合金表面涂覆耐腐蚀性能优异的铬(Chromium, Cr)金属,从而解决包壳腐蚀性能差的问题^[1]。物理气相沉积(Physical Vapor Deposition, PVD)法是沉积Cr涂层的最佳选择。由于传统合金(例如:奥氏体不锈钢304,镍基合金600等)在反应堆中耐腐蚀主要依靠Cr元素,因此,铬在反应堆中并不是一个新元素。在1200℃高温条件下,涂层Cr表面会形成致密且稳定的氧化层^[2]。它能够有效阻挡氧(Oxygen, O)或氢(Hydrogen, H)扩散至Zr合金基体内加速腐蚀,从而降低整个燃料棒的机械性能。目前,工业规模水平的涂层锆合金全尺寸管材的生产制备技术已非常成熟,并且涂层锆合金包壳燃料棒反应堆服役考核正在进行中^[3-4]。

实验上关于铬高温氧化腐蚀实验已有大量研究^[5-8]。早期研究发现,温度达到950℃时,铬的蒸发速率和氧化速率将会达到平衡,并且铬抗氧化性开始变差^[5]。Tveten等^[6]研究发现,金属中的氢含量会减弱氧化物与基体金属的黏合力,同时提高其氧化速率。在冷却剂与铬界面、冷却剂与氧化铬界面位置的吸附氢的势垒都比较高,并且H在金属Cr中的溶解性通常极差。在与冷却剂相接触的氧化铬表面上,带有正电荷的氧空位不仅能够加速水的吸附和离解,而且还能阻碍氢分子的重组^[7-8]。另外,涂层上产生的贯穿型缺陷也能够强化腐蚀和吸附氢的能力^[7-8]。吴金龙等^[9]给出了关于近7年涂层Cr与基体Zr界面元素扩散行为的研究成果综述,重点总结了Cr涂层不同状态下界面结构及演变规律。张君松等^[10]通过真空退火试验给出了氧在锆合金基体中

的扩散速率方程。严俊等^[11]采用高温蒸汽氧化设备开展氧化试验,研究不同铬涂层厚度对涂层锆合金高温蒸汽氧化行为的影响规律。理论模拟方面,Ratnayake等^[12]研究指出,当涂层出现裂纹、晶界和其他扩展型缺陷(如:界面开裂)时,它们可能成为H的迁移通道,从而降低涂层对基体的保护作用。通常认为,完整的Cr表面将会是氢吸收或渗透的有效势垒。当原子从Cr表面迁移至Cr晶体内部时,势垒高达160 kJ·mol⁻¹^[12]。一般情况下,Cr晶体内部的氢键合能是55 kJ·mol⁻¹,这表明金属铬的防护能力较强。但是,铬金属的晶界处的氢键合能范围是-15~-30 kJ·mol⁻¹或无定形区的氢键合能范围是-23~-23 kJ·mol⁻¹,它们比晶体内部的氢键合能小很多,并且是负值(放热反应),这表明缺陷可能成为氢吸附或渗透至基体的有效窗口^[12]。Cox和Wong^[13]提出,氢吸附行为主要是通过氧化膜中微米甚至纳米级的缺陷产生,并且这类缺陷会贯穿于金属-氧化物间的界面。

一般来说,冷却剂与包壳发生水腐蚀化学反应过程主要包括三个步骤:1)水与金属表面发生化学反应形成致密氧化物,同时释放出氢;2)氢通过不同的相或界面渗透至氧化物晶体内部;3)氢进一步扩散到达氧化层下面的金属基体。通常,水离解后比较容易在Cr表面产生氧。假如涂层包壳完整性被破坏,会存在一定的缺陷(如:裂纹,孔隙等),此时水解离产生的氧可能会渗透或扩散至氧化物层晶体内部,甚至扩散至未氧化的金属晶体内部。氧和氢的扩散将会对包壳耐腐蚀性能和力学性能产生一定影响。目前,水解离产生的氧和氢在Cr晶体内部扩散的微观机制尚不清楚。因此,本文采用第一性原理密度泛函理论方法研究氧和氢扩散微观行为,为涂

层包壳高温蒸汽氧化实验提供理论支持。

1 模拟方法

本文计算工作主要基于 MedeA & VASP 软件完成^[14]。采用投影缀加波 (Projector Augmented Wave, PAW) 和 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 广义梯度近似 (Generalized Gradient Approximation, GGA) 方法^[15-16]。模型扩胞为 $4 \times 4 \times 4$, 包含铬原子 128 个。能量截断半径为 500 eV, 收敛精度为 10^{-6} eV·atom⁻¹, 倒空间网格 K 点取 $3 \times 3 \times 3$ (Monkhorst-Pack Meshes), 晶格常数和原子位置完全弛豫, 直到每个原子上的力小于 0.02 eV·Å⁻¹。通过爬升微动弹性带方法 (Climbing-Image Nudged Elastic Band, CI-NEB) 将初始态和终末态用 5 个中间态连接起来, 从而搜索原子扩散路径, 获得相应迁移能垒。利用阿伦尼乌斯 (Arrhenius) 扩散方程拟合给出温度与扩散系数之间的函数关系曲线。

2 模拟结果和讨论

2.1 计算溶解能

铬为典型的体心立方 (bcc) 晶体结构, 其晶格常数为 2.88 Å^[14]。本文铬超胞弛豫优化后的晶格常数为 2.85 Å。通常, 氧占据的位置主要包括间隙位 (Interstitial Sites, IS) 和替位 (Substitutional Sites, SS)。对于 bcc 晶体结构而言, 间隙位主要包含四面体间隙位 (Tetrahedral Interstitial Site, TIS) 和八面体间隙位 (Octahedral Interstitial Site, OIS)。外来非本征原子占据晶胞的示意图如图 1 所示。四面体间隙位位于 4 个近邻 O 原子组成 (红色小球表示 O 或 H 原子) 的四面体中心, 八面体间隙位位于两个第一近邻和 4 个第二近邻 Cr 原子 (蓝色小球) 组成的八面体

中心。

通常, 间隙原子或替位原子在铬中的溶解能以分别表示为:

$$E_X^{\text{Sol}} = E(\text{NCr} + X) - E(\text{NCr}) - E_X^{\text{ref}} \quad (1)$$

$$E_X^{\text{Sol}} = E[(N-1)\text{Cr} + X] - \frac{N-1}{N} E(\text{NCr}) - E_X^{\text{ref}} \quad (2)$$

式中: $E(\text{NCr} + X)$ 和 $E(\text{NCr})$ 分别为 Cr 包含和不包含单个间隙 X 原子时的体系总能量。一般情况下, 溶解能为正值, 属于吸热反应; 溶解能为负值, 属于放热反应。 E_X^{ref} 为 X 的参考能量 (本文中 O 为 -4.36 eV, H 为 -3.40 eV)。 $E[(N-1)\text{Cr} + X]$ 表示晶胞中含有替位原子时体系的总能量。根据式 (1) 和 (2) 计算获得 O 和 H 在 Cr 晶体中的溶解能, 如表 1 所示。通过对比分析可知, O 原子倾向于占位八面体间隙位 (OIS), 其溶解能为 -1.38 eV, 属于放热反应。 H 原子 (H) 倾向于占位四面体间隙位置 (TIS), 其溶解能为 0.50 eV, 属于吸热反应。考虑到 O 原子和 H 原子在 Cr 晶格的替位溶解能比较高, 因此, O 原子和 H 原子不易取代 Cr 原子形成替位占据。本文中仅考虑 O 和 H 原子在间隙占位的情况。

表 1 铬中氧和氢的 TIS、OIS 和 SS 占位溶解能 (eV)
Table 1 The solution energy of oxygen and hydrogen in the Cr supercell at the TIS, OIS and SS, respectively (eV)

X 原子 (O 原子或 H 原子) X atom (O atom or H atom)	TIS	OIS	SS
氧 O	-0.83	-1.38	1.71
氢 H	0.50	0.77	10.43

为了探究 X (X 代表 O 原子或 H 原子) 在 Cr 中不同间隙位的相对稳定性, 将 X 的溶解能分为结构贡献 (Mechanical Contribution, MC) 和电子贡献 (Electronic Contribution, EC)。其中, MC 是由于 X 原子的嵌入导致原本完美的 Cr 晶格发生畸变, 进而导致体系总能量的上升, 可以通过对比畸变和完美

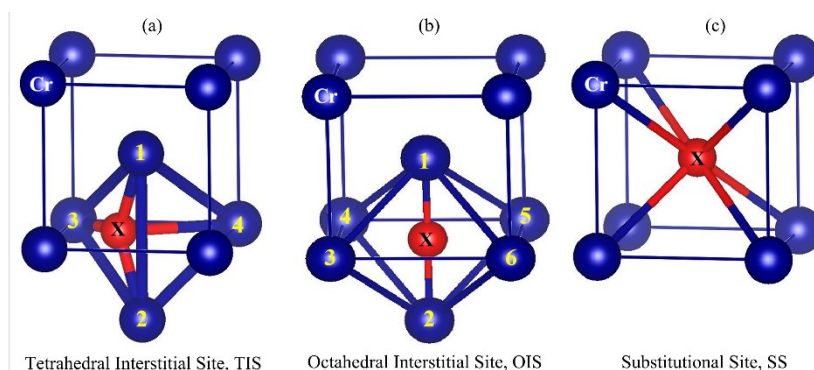


图 1 铬晶胞中元素 X (X : 表示 O 或 H 原子) 可能的占位位置

(a) 四面体间隙位, (b) 八面体间隙位, (c) 替位。红色小球表示 O 或 H 原子 (彩图见网络版)

Fig.1 The possible occupied sites for X element (X : O atom or H atom) in Cr primitive cell (a) TIS, (b) OIS, (c) SS. The blue ball means Cr atom, red ball means O or H atom (color online)

Cr 晶格的能量之差得到;而 EC 则代表了 X 与近邻 Cr 原子之间电子相互作用对体系能量的影响,可以通过从溶解能中减去 MC 而计算得到。计算结果表明,O 原子在 TIS 处的 MC 和 EC 分别为 -5.19 eV 和 4.36 eV,而其在 OIS 处的 MC 和 EC 分别为 -5.74 eV 和 4.36 eV,如表 2 所示。这表明 MC 是 O 原子倾向于占据 OIS,而非 TIS 的主要原因。同理,H 原子在 TIS 处的 MC 和 EC 分别为 -2.89 eV 和 3.39 eV,而其在 OIS 处的 MC 和 EC 分别为 -2.62 eV 和 3.39 eV,如表 2 所示。这表明 MC 是 H 原子倾向于占据 TIS,而非 OIS 的主要原因。通过原子结构分析发现,对于 O 原子在 TIS 的情况,弛豫之前第一近邻的 Cr-O 和弛豫之后的 Cr-O 键长分别为 1.61 Å 和 1.69 Å;而对

于 O 原子在 OIS 的情况,弛豫之前第一近邻的 Cr-O 键长和弛豫之后的 Cr-O 键长分别为 1.43 Å 和 1.21 Å。显然,O 原子在 OIS 处将导致 Cr 晶格发生更显著的晶格畸变,产生更高的畸变能。同样,对于 H 原子在 TIS 的情况,弛豫之前第一近邻的 Cr-H 和弛豫之后的 Cr-H 键长分别为 1.61 Å 和 1.67 Å;而对于 H 原子在 OIS 的情况,弛豫之前第一近邻的 Cr-H 键长和弛豫之后的 Cr-H 键长分别为 1.72 Å 和 1.59 Å。因此,H 原子在 OIS 处也会导致 Cr 晶格发生更显著的晶格畸变,产生更高的畸变能。此外,O 和 H 原子在间隙位的 EC 始终为正值,表明 O 和 H 原子与 Cr 原子间都存在较弱的电子相互作用。

表 2 X 原子(O 原子或 H 原子)在 Cr 间隙位置的溶解能(eV)以及对应的结构贡献(MC)、电子贡献(EC)、晶格中弛豫前(BR)和弛豫后(AR)第一近邻 Cr 和 X 原子间距离(Å)

Table 2 The solution energy is comprised of mechanical contribution (MC) and electronic contribution (EC). The Cr-X first neighbor distance (Å) before relaxation and after relaxation are calculated, respectively

位置 Sites	溶解能 Solution energy	机械贡献 Mechanical contribution (MC)	电子贡献 Electronic contribution (EC)	铬晶格弛豫前键长 Cr-X distance (BR)	铬晶格弛豫后键长 Cr-X distance (AR)
TIS (O)	-0.83	-5.19	4.36	1.61	1.69
OIS (O)	-1.38	-5.74	4.36	1.43	1.21
TIS (H)	0.50	-2.89	3.39	1.61	1.67
OIS (H)	0.77	-2.62	3.39	1.72	1.59

2.2 计算扩散系数

氧和氢在材料中的扩散将会对材料的性能起着至关重要的作用。基于前面计算结果,得知 O 原子倾向于占据 Cr 晶格的 OIS,而 H 原子更容易占据 Cr 晶格的 TIS。那么,O 原子在 Cr 中可能的扩散路径为:1)四面体间隙位扩散至第一近邻的四面体间隙位(如:TIS→TIS);2)四面体间隙位先扩散至第一近邻八面体间隙位,再扩散至第一近邻四面体间隙位(TIS→OIS→TIS)。本文分别计算了 O 原子在铬超胞中的扩散路径和迁移能垒。其中,O 原子通过 TIS→TIS 的迁移能垒为 0.79 eV(图 2)。同时,O 原子通过 TIS→OIS→TIS 的迁移能垒为 0.65 eV(图 3)。这表明 TIS→OIS→TIS 扩散路径是 O 原子在 Cr 晶格中扩散的最优选择。图 4 和图 5 给出了 Cr 中 H 原子的扩散路径和对应的迁移能垒。其中,H 原子分别通过 TIS→TIS 迁移路径和 TIS→OIS→TIS 迁移路径的迁移能垒均约为 0.17 eV。这表明 TIS→TIS 和 TIS→OIS→TIS 均为 Cr 晶格中 H 原子的最佳扩散路径。通过对比迁移能垒可知,H 原子更容易在 Cr 晶格中进行快速扩散迁移。

进一步,我们计算了 Cr 晶格中 O 和 H 原子的扩散系数。基于阿伦尼乌斯(Arrhenius)扩散方程,O

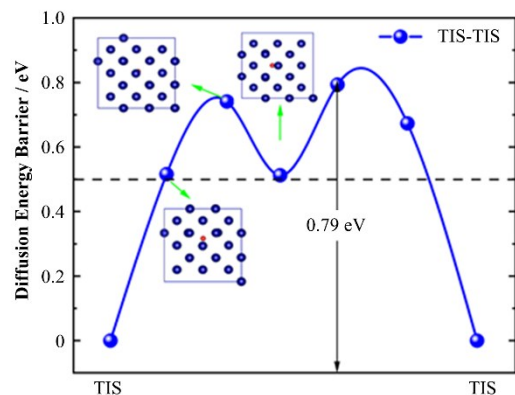


图 2 Cr 晶格中氧沿着 TIS→TIS 反应路径扩散及相应的迁移能垒

Fig.2 The oxygen diffusion along the TIS→TIS reaction coordinate and the corresponding migration energy barrier

和 H 原子的扩散系数可写成:

$$D = D_0 \exp(-E_m/k_B T) \quad (3)$$

式中: D_0 和 E_m 分别为扩散前置因子和迁移能垒值; k_B 为玻尔兹曼常数; T 为温度。对于 bcc 结构的金属 Cr 而言,扩散前置因子可以表示为:

$$D_0 = \frac{1}{6} a^2 \nu \quad (4)$$

式中: a 为金属 Cr 的晶格常数; ν 为扩散的尝试频率。根据 Zener-Wert 模型,间隙原子扩散的尝试频率可

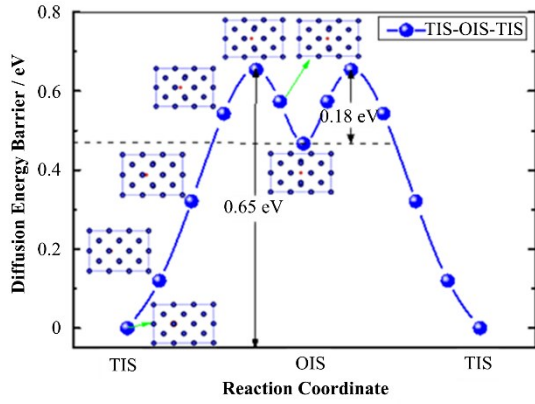


图3 Cr 晶格中氧沿着TIS→OIS→TIS反应路径扩散及相应的迁移能垒

Fig.3 Oxygen diffusion along the TIS→OIS→TIS reaction coordinate and the corresponding migration energy barrier

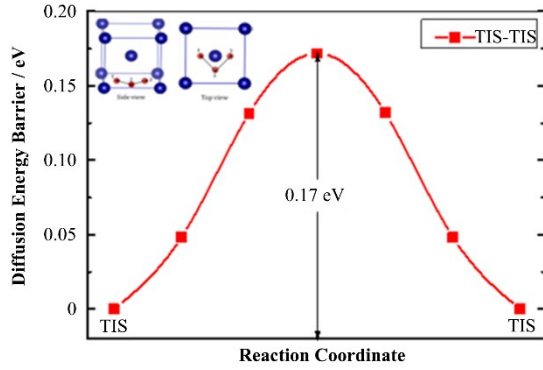


图4 Cr 晶格中氢沿着TIS→TIS反应路径扩散及相应的迁移能垒

Fig.4 Hydrogen diffusion along the TIS→TIS reaction coordinate and the corresponding migration energy barrier

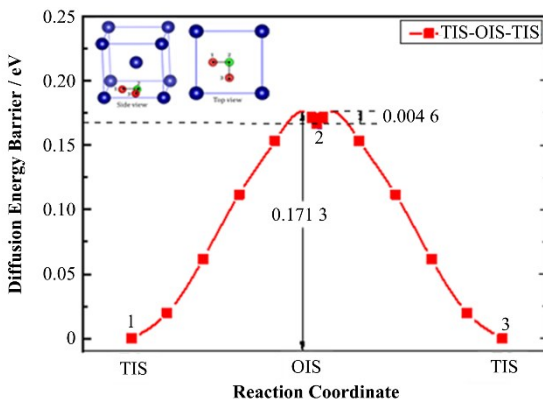


图5 Cr 晶格中氢沿着TIS→OIS→TIS反应路径扩散及相应的迁移能垒

Fig.5 Hydrogen diffusion along the TIS→OIS→TIS reaction coordinate and the corresponding migration energy barrier

以近似为：

$$v = \sqrt{2E_m / ma^2} \quad (5)$$

式中： m 为元素质量。

基于上述公式,计算得到Cr晶格中O和H原子的扩散系数表达式,分别为:

$$D_0 = 1.57 \times 10^{-21} \exp(-0.18 \times 1.60 \times 10^{-19} / k_B T) \quad (6)$$

$$D_0 = 2.99 \times 10^{-21} \exp(-0.65 \times 1.60 \times 10^{-19} / k_B T) \quad (7)$$

$$D_H = 1.53 \times 10^{-21} \exp(-0.17 \times 1.60 \times 10^{-19} / k_B T) \quad (8)$$

图6给出了不同温度条件下O和H原子在Cr中的扩散系数。研究表明,随着温度的升高,O和H原子的扩散系数也随着增大,并且O和H原子的扩散系数在高温范围差异变小。O原子沿着TIS→OIS→TIS扩散路径的扩散系数明显高于沿着TIS→TIS路径的扩散系数,这与其较低的迁移能垒比较相符。

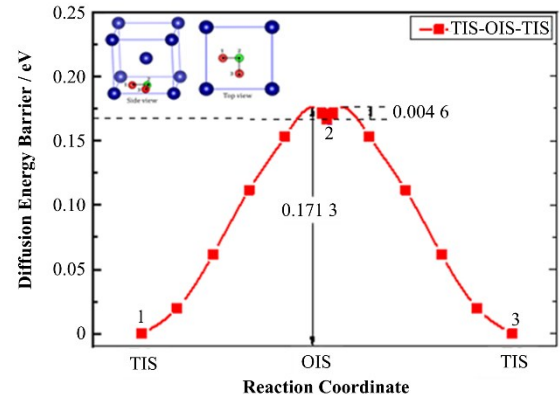


图6 O和H原子在Cr中的扩散系数随温度的变化关系
Fig.6 Variation of the diffusion coefficient with temperature for the oxygen atom and hydrogen atom in the Cr crystal

3 结语

本文采用第一性原理密度泛函方法研究金属铬中O和H的溶解和扩散微观行为。氢在Cr晶格中的溶解度远低于氧,更容易发生扩散。利用阿伦尼乌斯(Arrhenius)扩散方程,获得O和H在不同温度时的扩散系数,为高温蒸汽氧化实验与涂层厚度评估分析提供理论参考。在涂层铬的高温蒸汽氧化实验中观察到几个微米致密的氧化物层形成,这将会阻碍O和H的进一步渗透和扩散。但是,在事故工况下,涂层包壳出现氧化层剥落等现象,将会引起O和H在涂层内的扩散行为。进一步,考虑到晶界是O和H扩散的快速通道,接下来的工作将主要研究O和H在涂层Cr晶界处的扩散动力学微观过程。

作者贡献声明 龚恒风负责论文构思,数据管理和写作;严俊、李思功、刘洋负责形式分析;陈蒙腾负责

提供资源;任啟森、薛佳祥、廖业宏负责项目管理。

参考文献

- Coleman C E, Hardie D. The hydrogen embrittlement of α -zirconium—a review[J]. *Journal of the Less Common Metals*, 1966, **11**(3): 168 – 185. DOI: 10.1016/0022-5088(66)90003-8.
- Motta A T, Capolungo L, Chen L Q, *et al.* Hydrogen in zirconium alloys: a review[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2019, **518**: 440 – 460. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2019.02.042.
- Terrani K A. Accident tolerant fuel cladding development: Promise, status, and challenges[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2018, **501**: 13 – 30. DOI: 10.1016/j.jnucmat.2017.12.043.
- Yang-Hyun K, Jae-Ho Y, Jeong-Yong P, *et al.* KAERI's development of LWR accident-tolerant fuel[J]. *Nuclear Technology*, 2014, **186**(2): 295 – 304. DOI: 10.13182/NT13-89.
- Gulbransen E A, Andrew K F. Kinetics of the oxidation of chromium[J]. *Journal of the Electrochemical Society*, 1957, **104**(6): 334. DOI: 10.1149/1.2428576.
- Tveten B, Hultquist G, Norby T. Hydrogen in chromium: influence on the high-temperature oxidation kinetics in O_2 , oxide-growth mechanisms, and scale adherence[J]. *Oxidation of Metals*, 1999, **52**(314): 221 – 233. DOI: 10.1023/A:1018866505708.
- Krejčí J, Kabátová J, Manoch F, *et al.* Development and testing of multicomponent fuel cladding with enhanced accidental performance[J]. *Nuclear Engineering and Technology*, 2020, **52**(3): 597 – 609. DOI: 10.1016/j.net.2019.08.015.
- Tang C, Grosse M, Steinhilber M, *et al.* Oxidation and quench behavior of cold spraying Cr-coated Zircaloy fuel cladding under severe accident scenarios[C]. *Top Fuel 2019*, Seattle, WA, Sept. 22-27, 2019.
- 吴金龙, 栾佰峰, 周虹伶, 等. 锆合金包壳Cr涂层界面元素扩散行为研究进展[J]. *表面技术*, 2024, **53**(10): 16 – 27. DOI: 10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2024.10.002.
- WU Jinlong, LUAN Baifeng, ZHOU Hongling, *et al.* Research progress regarding interfacial element diffusion behavior of chromium coating on zirconium alloy cladding[J]. *Surface Technology*, 2024, **53**(10): 16 – 27. DOI: 10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2024.10.002.
- 张君松, 吴军, 廖京京, 等. 锆合金氧化膜及基体中氧的扩散[J]. *原子能科学技术*, 2024, **58**(1): 175 – 180. DOI: 10.7538/yzk.2023.youxian.0116.
- ZHANG Junsong, WU Jun, LIAO Jingjing, *et al.* Oxygen diffusion in oxide film and matrix of zirconium alloys[J]. *Atomic Energy Science and Technology*, 2024, **58**(1): 175 – 180. DOI: 10.7538/yzk.2023.youxian.0116.
- 严俊, 高思宇, 杨钟毓, 等. 涂层厚度对Cr涂层锆合金包壳高温蒸汽氧化动力学及微观机制的影响[J]. *表面技术*, 2024, **53**(12): 147 – 157, 251. DOI: 10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2024.12.012.
- YAN Jun, GAO Siyu, YANG Zhongyu, *et al.* Influence of coating thickness on high-temperature steam oxidation kinetics and mechanisms of Cr-coated Zr alloy cladding [J]. *Surface Technology*, 2024, **53**(12): 147 – 157, 251. DOI: 10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2024.12.012.
- Ratnayake R, Mader E. Hydrogen pickup and permeability for coated cladding technologies[R]. *Technical Report*, 2020: 1–124.
- Cox B, Wong Y M. Hydrogen uptake micro-mechanism for Zr alloys[J]. *Journal of Nuclear Materials*, 1999, **270** (1): 134 – 146.
- MedeA: Materials exploration and design analysis. *Materials design*[Z]. Inc., San Diego, CA, USA, 2020.
- Kresse G, Furthmüller J. Efficiency of Ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set[J]. *Computational Materials Science*, 1996, **6**(1): 15 – 50. DOI: 10.1016/0927-0256(96)00008-0.
- Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple[J]. *Physical Review Letters*, 1996, **77**(18): 3865 – 3868. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865.