

В.В. УГЛОВ^{1,2*}, В.А. СКУРАТОВ³, И.А. ИВАНОВ⁴, И.В. САФРОНОВ¹,
К. ДЖИН⁵, А.Е. КУРАХМЕДОВ⁴, Б.С. АМАНЖУЛОВ⁴,
М.В. КОЛОБЕРДИН⁴

¹Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

²Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

³Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия

⁴Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан

⁵Пекинский технологический институт, Пекин, Китай

*uglov@bsu.by

ВСЕГДА ЛИ ЭФФЕКТИВНА СТРАТЕГИЯ МНОГОКОМПОНЕНТНОГО КОНЦЕНТРИРОВАННОГО СПЛАВА В ПОДАВЛЕНИИ РАДИАЦИОННОГО РАСПУХАНИЯ: СРАВНЕНИЕ HfNbTiZr И V-4Cr-4Ti

В настоящее время одними из перспективных материалов для ядерных применений, в том числе в установках термоядерного синтеза, являются многокомпонентные концентрированные сплавы (МКС) [1]. Сегодня активно исследуются МКС на основе тугоплавких элементов как наиболее подходящие для высокотемпературных применений [2]. Одними из наиболее изученных МКС являются сплавы с объемно-центрированной кубической (ОЦК) решеткой на основе Hf-Nb-Ta-Ti-Zr [2]. Для сплава HfNbTiZr плохо изученным вопросом является его радиационная стойкость. Цель настоящей работы заключалась в исследовании радиационного распухания HfNbTiZr в сравнении с общепринятым малораспухаемым V-4Cr-4Ti, облученных ионами He.

Объемные сплавы HfNbTiZr и V-4Cr-4Ti были синтезированы из чистых металлов методом левитационной плавки [3, 4]. Образцы сплавов облучались ионами He с энергией 40 кэВ до флюенсов 1×10^{17} и 5×10^{17} см⁻² при 300 К. Для микроструктурного анализа образцов применялась просвечивающая электронная микроскопия (ПЭМ). Для количественной оценки характеристик радиационного распухания по ПЭМ-изображениям использовалась программа ImageJ. Энергетические характеристики дефектов вычислялись в пакете LAMMPS, используя модель квазислучайной структуры сплава. Межатомное взаимодействие для HfNbTiZr описывалось с помощью MEAM потенциала [5], в то время как данные для V-4Cr-4Ti брались из литературы [6].

Рисунок 1 демонстрирует распределения пузырьков He в поперечном сечении сплавов HfNbTiZr и V-4Cr-4Ti, облученных при 300 К до флюенса

$5 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$. Обнаружено, что в HfNbTiZr сформировались пузырьки He больше по размеру, чем в V-4Cr-4Ti. Исходя из количественного анализа ПЭМ-изображений в области максимальной концентрации пузырей (выборка в квадрате размером $105 \times 105 \text{ нм}$), установлено, что для HfNbTiZr свойственно в ~ 2 раза более широкое распределение пузырьков по размерам, чем для V-4Cr-4Ti, при этом средний диаметр составил $3,1 \pm 1,1$ против $1,4 \pm 0,6 \text{ нм}$ при флюенсе $5 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$ (рис. 2(а)).

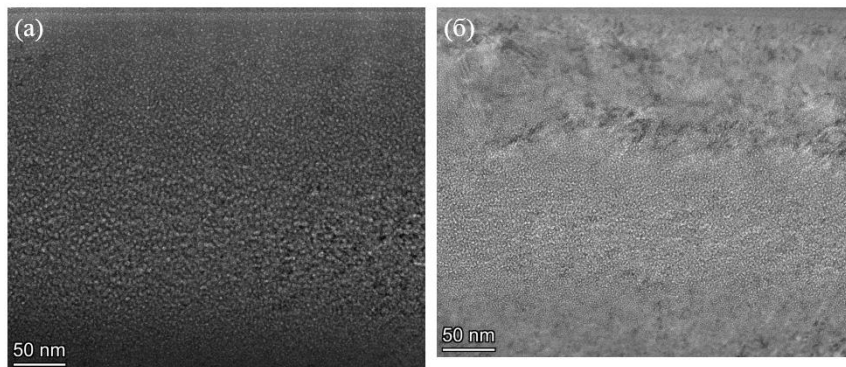


Рисунок 1 – Светлопольные ПЭМ-изображения (режим дефокусировки) поперечных сечений сплавов HfNbTiZr (а) и V-4Cr-4Ti (б), облученных ионами He с энергией 40 кэВ при 300 К до флюенса $5 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$

Обнаружено, что сплав HfNbTiZr более подвержен радиационному распуханию, чем V-4Cr-4Ti при заданных условиях облучения (рис. 2(б)). Так, газовое распухание для HfNbTiZr и V-4Cr-4Ti составило $0,10 \pm 0,01$ против $0,056 \pm 0,006 \%$ и $0,44 \pm 0,05$ против $0,19 \pm 0,02 \%$ при флюенсах 1×10^{17} и $5 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$ соответственно (рис. 2(б)). В то время как 5-кратное увеличение флюенса (с 1×10^{17} до $5 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$) привело к 3,5-кратному повышению газового распухания в сплаве V-4Cr-4Ti, то для HfNbTiZr это уже 4,4-кратное повышение. Последнее может указывать на интенсификацию радиационного распухания в сплаве HfNbTiZr по сравнению с V-4Cr-4Ti с повышением флюенса.

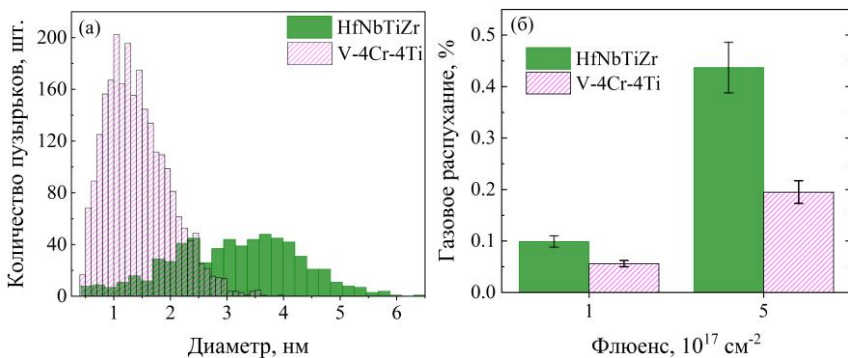


Рисунок 2 – Характеристики радиационного распухания: распределения пузырьков He по размерам в сплавах HfNbTiZr и V-4Cr-4Ti при флюенсе $5 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$ (а); гистограммы газового распухания от флюенса (б)

Известно, что вакансии (v) играют особую роль в стабилизации гелий-вакансионных комплексов ($\text{He}_n v_m$) [7]. На рисунке 3 приведены энергии образования вакансий ($E_f(v)$) для сплавов HfNbTiZr и V-4Cr-4Ti. Как видно, $E_f(v)$ для HfNbTiZr ниже не только, чем в референтном ОЦК Nb (2,68 эВ), но и большинства значений в V-4Cr-4Ti (V является растворителем с концентрацией ~ 92 ат.%). В связи с чем, равновесная концентрация v в HfNbTiZr будет выше, чем в V-4Cr-4Ti. Предполагается, что более высокая энергия связи $\text{He}_n v_m$ комплексов в HfNbTiZr может быть причиной более интенсивной коалесценции пузырьков He по сравнению с V-4Cr-4Ti. В то время как в разбавленных сплавах ванадия энергетически выгодно существование множества малых $\text{He}_n v_m$ кластеров [8].

Первопринципные расчеты в [10] показали, что низкие $E_f(v)$ в сплаве NbTiZr по сравнению с его составляющими элементами является следствием эффекта сильной локальной дисторсии решетки (ЛДР). Результаты наших вычислений, основанные на MEAM межатомном потенциале [5], показывают схожую тенденцию для HfNbTiZr. Авторы работы [10] отмечали положительную роль эффекта ЛДР в NbTiZr при повышенных температурах вследствие увеличения концентрации вакансионного пересыщения и, таким образом, снижения термодинамического стимула для развития вакансионного распухания.

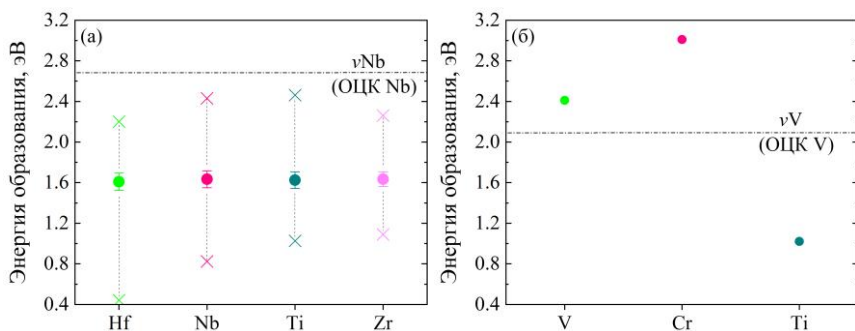


Рисунок 3 – Энергия образования вакансий для сплавов HfNbTiZr (а) и V-4Cr-4Ti (б). Для сравнения приведены данные для референтных чистых Nb и V [9]. Данные для V-4Cr-4Ti (б) взяты из [6]. На рисунке (а) показаны диапазоны и средние значения $E_f(v)$

На основании полученных и литературных данных предсказывается негативная роль эффекта ЛДР для HfNbTiZr в подавлении радиационного распухания при пониженных температурах.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан (грант № AP19579188), а также Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований и Министерства образования Республики Беларусь (грант № T22MB-009). Авторы благодарны высокопроизводительному вычислительному центру НИЯУ МИФИ за предоставление ресурсов.

Литература

- [1] E. Pickering, A. Carruther, P. Barron, et al., Entropy 23, 98 (2021)
- [2] O. Senkov, D. Miracle, K. Chaput, et al., J. Mater. Res. 33, 3092 (2018)
- [3] D. Li, N. Jia, H. Huang, et al., J. Nucl. Mater. 552, 153023 (2021)
- [4] N. Jia, Y. Li, H. Huang, et al., J. Nucl. Mater. 550, 152937 (2021)
- [5] X. Huang, L. Liu, X. Duan, et al., Mater. Des. 202, 109560 (2021)
- [6] J. Fu, X. Li, B. Johansson, et al., J. Alloys Compd. 705, 369 (2017)
- [7] P. Zhang, J. Zhao, Y. Qin, et al., J. Nucl. Mater. 419, 1 (2011)
- [8] P. Zhang, J. Zhao, T. Zou, et al., J. Chen, Tungsten 3, 38 (2021)
- [9] P. Zhang, Y. Li, J. Zhao, J. Nucl. Mater. 538, 152253 (2020)
- [10] T. Shi, Z. Su, J. Li, et al., Acta Mater. 229, 117806 (2022)