

В.В. УГЛОВ<sup>1,2\*</sup>, В.А. СКУРАТОВ<sup>3</sup>, И.А. ИВАНОВ<sup>4</sup>, И.В. САФРОНОВ<sup>1</sup>,  
К. ДЖИН<sup>5</sup>, А.Е. КУРАХМЕДОВ<sup>4</sup>, Б.С. АМАНЖУЛОВ<sup>4</sup>,  
М.В. КОЛОБЕРДИН<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

<sup>2</sup>Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Москва, Россия

<sup>3</sup>Объединённый институт ядерных исследований, Дубна, Россия

<sup>4</sup>Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан

<sup>5</sup>Пекинский 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  $1 \times 10^{17}$  и  $5 \times 10^{17}$  см<sup>-2</sup> 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  $\sim 2$  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(a)).

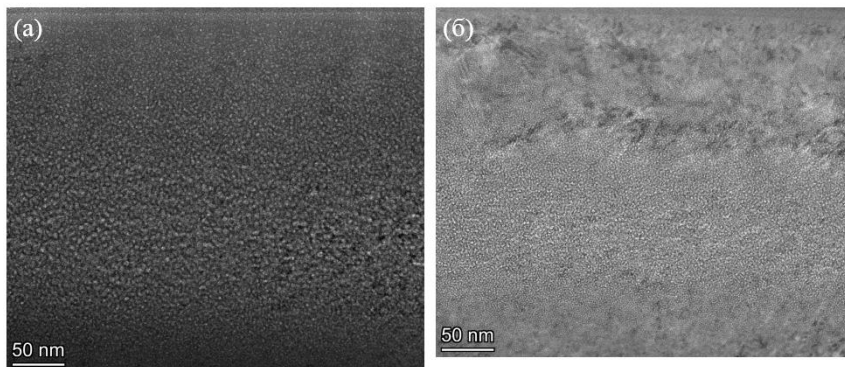


Рисунок 1 – Светлопольные ПЭМ-изображения (режим дефокусировки) поперечных сечений сплавов HfNbTiZr (а) и V-4Cr-4Ti (б), облученных ионами He с энергией 40 кэВ при 300 К до флюенса  $5 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$

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  $1 \times 10^{17}$  и  $5 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$  соответственно (рис. 2(б)). В то время как 5-кратное увеличение флюенса (с  $1 \times 10^{17}$  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.

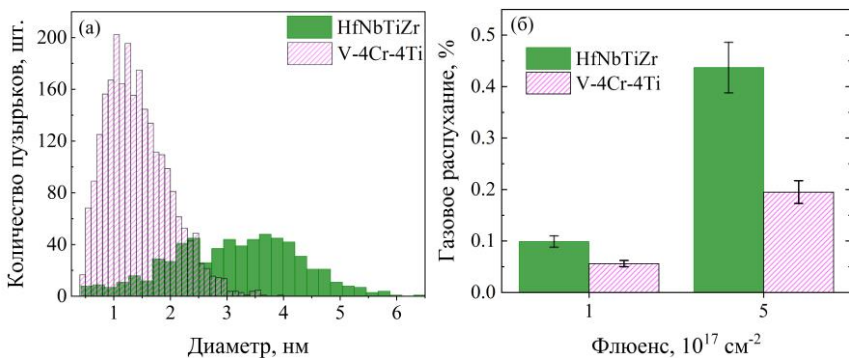


Рисунок 2 – Характеристики радиационного распухания: распределения пузырьков He по размерам в сплавах HfNbTiZr и V-4Cr-4Ti при флюенсе  $5 \times 10^{17} \text{ см}^{-2}$  (а); гистограммы газового распухания от флюенса (б)

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.

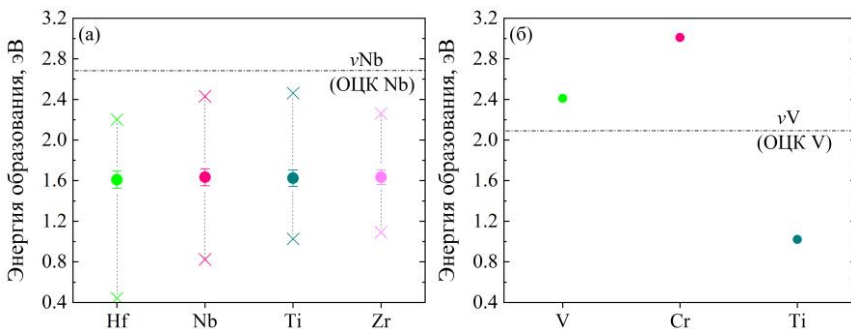


Рисунок 3 – Энергия образования вакансий для сплавов HfNbTiZr (а) и V-4Cr-4Ti (б). Для сравнения приведены данные для референтных чистых Nb и V [9]. Данные для V-4Cr-4Ti (б) взяты из [6]. На рисунке (а) показаны диапазоны и средние значения  $E_f(v)$

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)