

УДК 539.216.2:620.198

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМОВ ПОЛИМОРФНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ТИПА $t\text{-ZrO}_2 \rightarrow c\text{-ZrO}_2$ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ОБЛУЧЕНИЯ ТЯЖЕЛЫМИ ИОНАМИ

Алин Махамбет

kazpost93@gmail.com

Докторант 3-го курса специальности "Ядерная физика"

ЕНУ им. Л.Н.Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

Научный руководитель – Козловский А.Л.

Как известно, одни из перспективных классов материалов – кандидатов в ядерной энергетике являются диэлектрические оксидные керамики (BeO , Al_2O_3 , ZrO_2 , MgAl_2O_4), интерес к которым обусловлен их физико-химическими свойствами, высокими показателями инертности к внешним воздействиям, а также показателями теплопроводности и высокой температурой плавления [1-4]. Все это делает эти классы керамик одними из кандидатных материалов для использования их в качестве основы инертных матриц ядерного топлива, которое является одним из альтернатив для замены стандартных твэлов, содержащих урановое топливо. Использование инертных матриц в безурановом топливе позволит существенно увеличить сроки эксплуатации и КПД таких твэлов, за счет исключения процессов накопления продуктов распада ядер урана, а также использованию плутония в качестве делящего элемента [5,6]. При этом одним из направлений применения подобных материалов является их использование в высокотемпературных ядерных реакторах, материалы которых должны выдерживать не только высокие рабочие температуры (700-1000 К), но и обладать высокой радиационной стойкостью [7,8].

Одним из кандидатных материалов для этих целей является керамика на основе ZrO_2 , которая обладает высокими показателями устойчивости к трещинообразованию, коэффициентом теплового расширения, а теплопроводящими свойствами.

Экспериментальная часть

В качестве исследуемых объектов были выбраны поликристаллические керамики ZrO_2 производства Dongguan Mingrui Ceramic Tech. Co. Ltd. (Dongguan city, Guangdong, China). Плотность керамик, согласно паспорту производителя составляет $5,66 \text{ г/см}^3$. В исходном состоянии фазовый состав керамик представляет смесь двух фаз: доминирующую тетрагональную фазу и примесную кубическую, содержание которой не превышает 20 %.

Для определения механизмов полиморфных превращений под действием облучения, исследуемые образцы были подвергнуты облучению тяжелыми ионами Xe^{22+} с энергиями 160 МэВ, 200 МэВ и 230 МэВ. Дозы облучения составили 10^{13} , 5×10^{13} и 10^{14} ион/см² для всех трех выбранных энергий ионов. Облучение проводилось на ускорителе тяжелых ионов ДЦ-60, расположенного в Астанинском филиале Института ядерной физики МЭ РК (г. Нур-Султан, Казахстан).

Результаты и обсуждение

Результаты изменения фазового состава керамик в результате внешних воздействий и отражающих полиморфные превращения типа $t\text{-ZrO}_2 \rightarrow c\text{-ZrO}_2$ представлены на рисунке 1. Общий вид полиморфных превращений характеризуется двумя этапами. Первый этап характерен для доз облучения 10^{13} ион/см² и выражается в резком изменении соотношения тетрагональной и кубической фаз в составе керамик, с доминированием кубической фазы $c\text{-ZrO}_2$. Второй этап характерен для доз облучения $5 \times 10^{13} - 10^{14}$ ион/см² и выражается в малом изменении фазового состава и продолжающимся вытеснением тетрагональной фазы и доминированием кубической фазы. При этом увеличение энергии налетающих ионов приводит к увеличению скорости полиморфных превращений, выражающейся в увеличении вклада кубической фазы, а в случае энергии ионов 230 МэВ, наблюдалось полное вытеснение тетрагональной фазы при дозе 5×10^{13} ион/см². Такой характер полиморфных превращений в первую очередь связан с тепловыми эффектами, возникающими в процессе облучения.

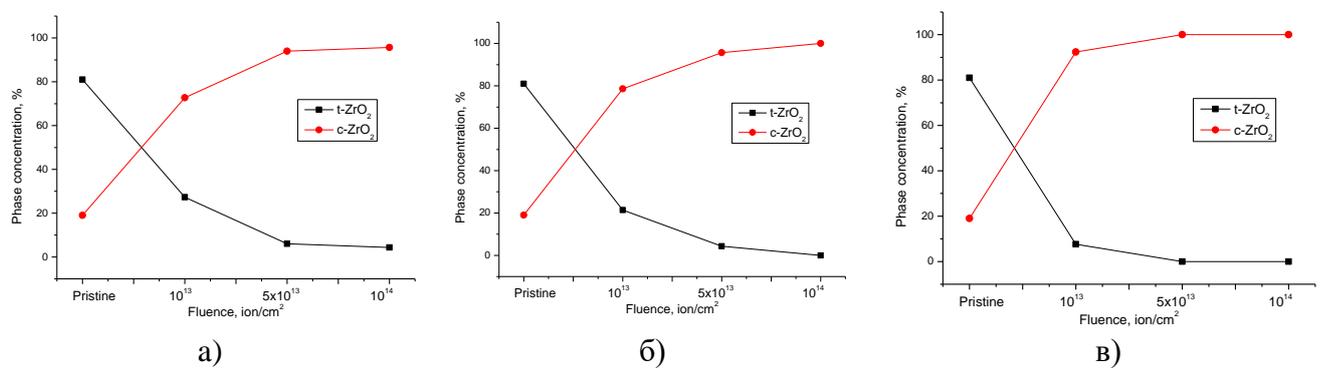


Рисунок 1 - Диаграммы изменения фазового состава керамик в результате облучения при различных энергиях ионов: а) 160 МэВ; б) 200 МэВ; в) 230 МэВ

Согласно теории термических пиков, каждый ион вдоль траектории своего движения в материале создает локальную область, температура которой может превышать несколько тысяч градусов в течение очень малого промежутка времени (10^{-13-15} с). Второй фактор, влияющий на скорость полиморфных превращений заключается в дозе облучения, увеличение которой приводит к увеличению плотности перекрытия подобных локальных областей, что приводит к переходу от изолированных эффектов нагрева к коллективному. Как известно, кинетическая энергия налетающих ионов переходит в тепловую, которая в свою очередь способна образовать первично выбитые атомы, а также внести существенный вклад в изменение электронной плотности в керамики. Формирование перекрытия дефектных областей может привести к возникновению анизотропии электронной плотности, которая в свою очередь может сохраняться достаточно длительное время в диэлектриках. Облучение тяжелыми ионами Xe^{22+} приводит к изменению величины ширины запрещенной зоны, а также появлению дополнительных полос поглощения, что свидетельствует об изменении электронной плотности в результате облучения. Согласно расчетным данным, величина атомных смещений при облучении заданными параметрами составляет не более 0.005 нм, что свидетельствует о том, что основное влияние на изменение фазового состава оказывают электронные потери ионов и последующие тепловые эффекты, приводящие к перестройке кристаллической структуры. Стоит также отметить, что в случае энергий ионов 160 и 200 МэВ, даже максимальная доза в данном эксперименте 10^{14} ион/см² не приводит к полному полиморфному превращению $t\text{-ZrO}_2 \rightarrow c\text{-ZrO}_2$, с сохранением небольшой примеси тетрагональной фазы, содержание которой составляет не более 5 %.

Заключение

В ходе проведенных исследований установлено, что увеличение энергии налетающих ионов приводит к ускорению процессов полиморфных превращений, а в случае энергии ионов 230 МэВ полное полиморфное превращение происходит при дозе облучения 5×10^{13} . Полиморфные

превращения приводит к набуханию кристаллической решетки, при этом в случае полного полиморфного превращения процесс набухания замедляется. Анализ прочностных свойств показал, что формирование более стабильной кубической фазы при больших дозах облучения приводит к замедлению процессов снижения твердости и набухания.

Список литературы

- 1 Zinkle S. J., Was G. S. Materials challenges in nuclear energy // *Acta Materialia*. – 2013. – Vol. 61, №. 3. – P. 735-758.
- 2 Zhang Y., Bai X. M. Ceramic materials for nuclear energy applications // *JOM*. – 2019. – Vol. 71, №. 12. – P. 4806-4807.
- 3 Allen T. R. et al. Materials challenges for generation IV nuclear energy systems // *Nuclear Technology*. – 2008. – Vol. 162, №. 3. – P. 342-357.
- 4 Was G. S. et al. Materials for future nuclear energy systems // *Journal of Nuclear Materials*. – 2019. – Vol. 527. – P. 151837.
- 5 Aoki T., Sagara H., Han C. Y. Material attractiveness evaluation of inert matrix fuel for nuclear security and non-proliferation // *Annals of Nuclear Energy*. – 2019. – Vol. 126. – P. 427-433.
- 6 Yu T. et al. A study on the burn-up characteristics of inert matrix fuels // *Progress in Nuclear Energy*. – 2015. – Vol. 78. – P. 341-345.
- 7 Frieß F., Liebert W. Inert-matrix fuel for transmutation: Selected mid-and long-term effects on reprocessing, fuel fabrication and inventory sent to final disposal // *Progress in Nuclear Energy*. – 2022. – Vol. 145. – P. 104106.
- 8 Zhang J. et al. Modelling of effective irradiation swelling for inert matrix fuels // *Nuclear Engineering and Technology*. – 2021. – Vol. 53, №. 8. – P. 2616-2628.