



Ідентифікатор подання: 112

Тип: Секційна доповідь

Фазова поведінка нанокристалічного заліза під дією опромінення за невисоких температур

вівторок, 27 травня 2025 р. 13:15 (20 хвилин)

У реакторних металах можуть відбуватись процеси аморфізації та інших фазових переходів першого роду. Такі зміни впливають на енергетичний стан матеріалу, що робить дослідження фазових рівноваг у наномасштабних металах під дією опромінення важливим завданням фундаментального і прикладного характеру. Оскільки процеси фазових змін залежать від розміру системи, наномасштабні кристалічні метали є ідеальними для їх вивчення.

Метою цього дослідження є аналіз того, як накопичення дефектів, викликаних радіаційним опроміненням, впливає на еволюцію дефектів і фазову поведінку в нанокристалічному залізі за невисоких температур, на формування та стабілізацію об'ємно-центрованої кубічної (ОЦК) і гранецентрованої кубічної (ГЦК) структур під опроміненням.

Методологія дослідження. Ми застосовуємо термодинамічний підхід Гіббса для різних фаз для нанозерен або наночастинок заліза, з урахуванням радіаційно індукованих дефектів, і використовуємо теорію хімічної кінетики для моделювання утворення, дифузії та анігіляції дефектів.

Результати. Вперше було теоретично обґрунтовано вплив розмірного ефекту на радіаційну стабільність ОЦК фази при великих швидкостях генерації дефектів і низьких дозах опромінення та визначено, як опромінення впливає на фазову стабільність наночастинок заліза розміром 2–10 нм у температурному діапазоні 400–500 К. Було побудовано діаграми «розмір–температура» та «розмір–енергія», які встановлюють залежні від розміру області фазової стабільності, фазових переходів в нанокристалічному залізі й впливу опромінення.

В рамках теоретичного опису нами обґрунтовано важливість врахування умови нестационарності в описі кінетики радіаційних дефектів і дано якісне пояснення отриманих в експериментах залежностей концентрації радіаційних дефектів від дисперсності нанокристалічного матеріалу [1].

В наночастинках малих розмірів фаза α -Fe (ОЦК) стає нестабільною і змінюється на ГЦК структуру, тоді як фаза γ -Fe (ГЦК) залишається стабільною, що пояснюється домінуючим впливом поверхневих енергій фаз. В наночастинках більших розмірів, навпаки, фаза α -Fe є стабільною, а γ -Fe — нестабільною, що обумовлено домінуванням внеску об'ємної густини енергії.

Виявлено, що в результаті опромінення наночастинок заліза при швидкості генерації дефектів $K_v=10$ – 3 зна/с і дозах більше 1 зна формується проміжна область шириною близько 4 нм на фазовій діаграмі «розмір–температура», де фаза α -Fe стає стабільною при опроміненні, а γ -Fe стабілізується без опромінення. Стабільність ОЦК фази підтримується лише за наявності опромінення. Ця проміжна область звужується із підвищенням температури й повністю зникає приблизно при 520 К. За низьких температур (нижче 400 К) дослідження потребує уточнення, оскільки використання результатів теорії хімічних швидкостей та термодинаміки Гіббса при цьому стає некоректним [2].

Дослідження проводяться у рамках НДР Лабораторії композиційних матеріалів атомно-водневої енергетики Інституту прикладної фізики НАН України (РК 0125U000276) під керівництвом д.ф.-м.н. Арама Шіріняна.

1. Yu.S. Bilogorodskyy, A.S. Shirinyan, O.M. Krit «Influence of Irradiation on the Evolution of Radiation Defects in Nanocrystalline FCC Metals: The Case of Ni» Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, 563, 165674, 2025.
2. A.S. Shirinyan, Yu.S. Bilogorodskyy. «Effect of radiation-induced vacancy saturation on the first-order phase transformation in nanoparticles: insights from a model» Beilstein Journal of Nanotechnology, 15, p. 1453–1472, 2024.

Author: Пан БЛОГОРОДСЬКИЙ, Юрій (Інститут прикладної фізики НАН України)

Співавтори: Д-р. ШІРІНЯН, Арам (Інститут прикладної фізики НАН України); Пан ШІРІНЯН, Артур (Інститут прикладної фізики НАН України); Пан КРИТ, Олексій (Інститут прикладної фізики НАН України)

Доповідач: Пан БЛЮГОРОДСЬКИЙ, Юрій (Інститут прикладної фізики НАН України)

Тип засідання: Радіаційна фізика та реакторне матеріалознавство

Класифікація за напрямком: Радіаційна фізика та реакторне матеріалознавство