

В.А. Андрианов¹⁾, К.А. Бедельбекова²⁾, А.Л. Ерзинкян^{1,)}, А.Л. Тригуб³⁾

**Исследование радиационных дефектов в металлических
Mo и Ta методом EXAFS**

¹⁾ НИИЯФ МГУ, Москва, Россия

²⁾ Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан

³⁾ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Мотивация

Mo и Ta

1. Конструкционные материалы атомной и термоядерной энергетики
2. Тугоплавкие металлы:
Mo: $A = 96$ а.е.м., $T_c(\text{Mo}) = 2620$ С,
Ta: $A = 181$ а.е.м., $T_c(\text{Ta}) = 3290$ С,
3. Коррозионностойкие материалы
4. Кристаллическая структура ОЦК

Экспериментальные методы

1. **Имплантация ионов ^{57}Fe** на ионном ускорителе в фольги Mo и Ta толщиной 20 мкм.
2. **Мессбауэровские исследования:**
 - а) традиционным методом пропускания.
 - б) Регистрацией электронов конверсии
3. **Рентгеновская дифракция.**
4. **Электронная микроскопия**
5. Изучение локализации атомов Fe методом **EXAFS**

Имплантация ионов ^{57}Fe в металлические Mo и Ta

$E(\text{Fe}) = 1 \text{ MeV}$, флюенс = $5 \cdot 10^{16}$ ионов/ cm^2 . SRIM-2008

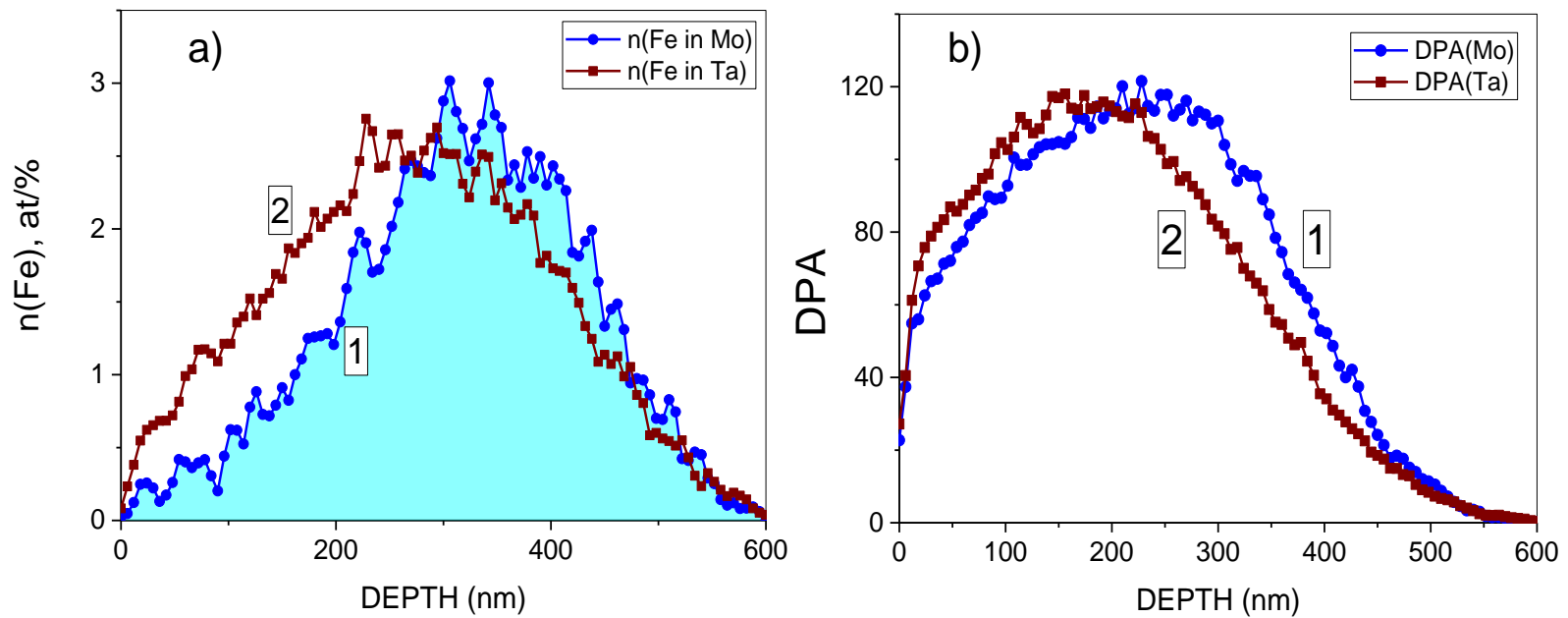
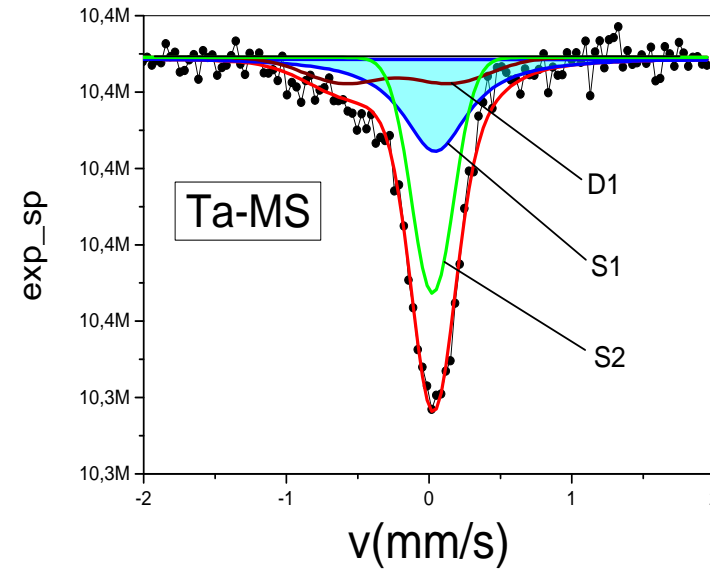
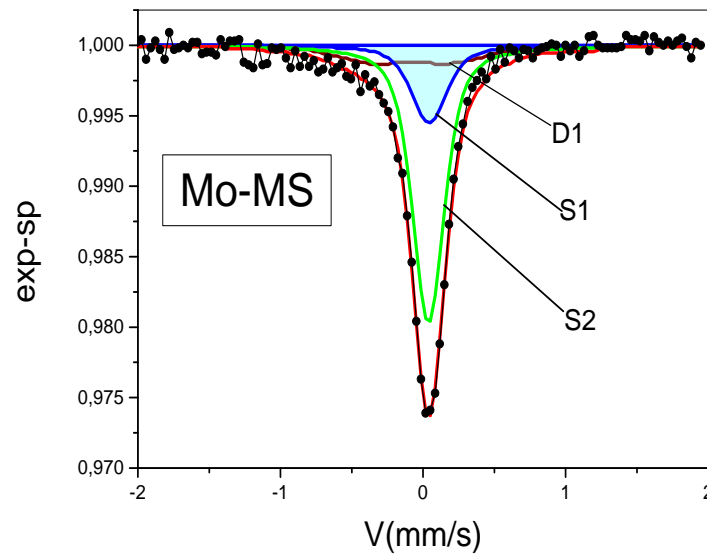


Рис. 1. a) Концентрация имплантированных атомов ^{57}Fe в матрицах Mo и Ta (кривые 1 и 2). b) Параметр DPA как функция глубины для Mo и Ta (кривые 3 и 4). Расчеты по программе SRIM; энергия смещения для атомов Mo $E_d(\text{Mo})=60 \text{ eV}$ и для Ta $E_d(\text{Ta})=90 \text{ eV}$.

Эффект Мессбауэра, МС и КЭМС



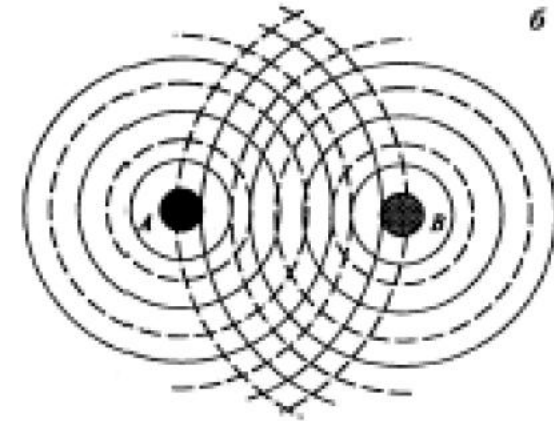
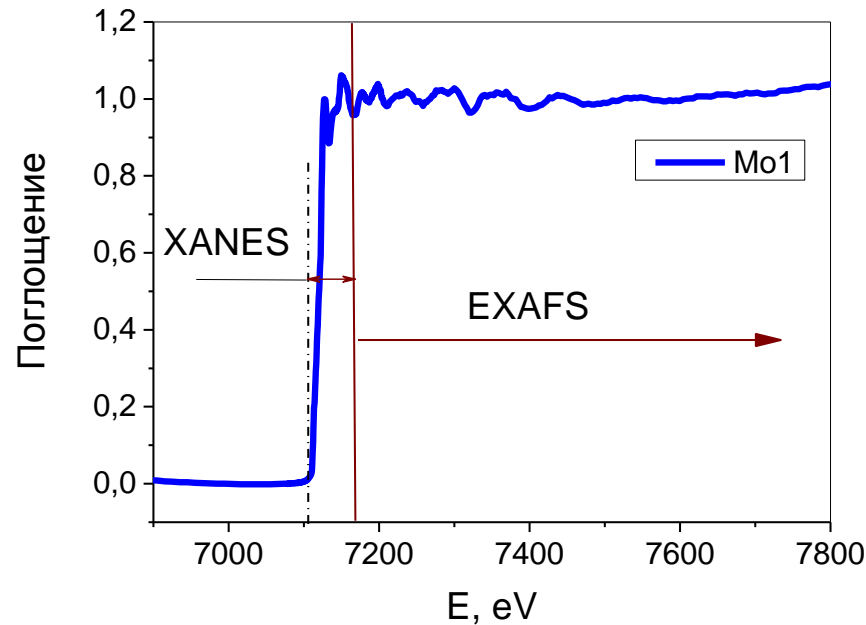
Mo –Синглет -89%

Ta – Синглет - 83%

Вывод из Мессбауэровских данных и рентгеновской дифракции:

ОЦК кристаллическая решетка сохраняется

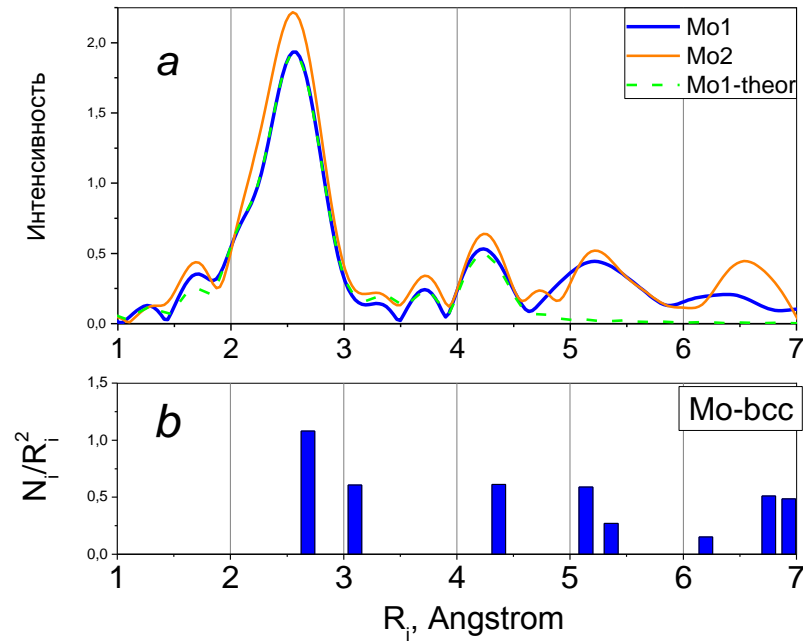
EXAFS = Extended X-ray Absorption Fine Structure



$$\chi(k) = \sum_j \frac{S(k)N_j}{kr_j^2} |f_j(k, \pi)| \sin(2kr_j + \varphi_j(k)) e^{-2\sigma_j^2 k^2} e^{-2r_j/\lambda(k)}$$

\mathbf{k} – волновое число фотоэлектрона, $\mathbf{k}=\mathbf{p}/\hbar$, N_j - число атомов в j -ой координационной сфере, r_j - радиуса i -ой сферы, $f_j(\mathbf{k}, \pi)$ и $\lambda(\mathbf{k})$ – амплитуда рассеяния и длина свободного пробега электрона,

EXAFS – Fe in Mo

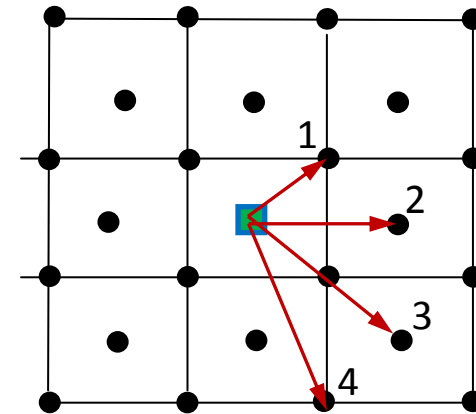


Атомы в i -ой координационной сфере Fe	$R_i, \text{Å}$	Число атомов в i -ой координационной сфере Fe, N_i	N_{th}	$\Delta N_i = Vac.$
$i=1, Mo$	2.70	5.8	8	1.9
$i=1, Fe$	2.59	0.3		
$i=2, Mo$	3.08	4.6	6	1.4
$i=3, Mo$	4.43	8.7	2	3.3

Рис. 5. Спектры EXAFS для атомов Fe, имплантированных в Mo.

а) экспериментальные данные Mo-1 (облученный) и Mo-2 (облученный и отожженный 700°C), и расчетная кривая Mo-1-theor.

б) Распределение атомов по координационным сферам для идеальной ОЦК решетки Mo ($a=3.14\text{Å}$).



Вывод: Fe в Mo занимает позиции замещения.

Концентрация вакансий ≈ 24 ат.%

EXAFS – Fe in Ta

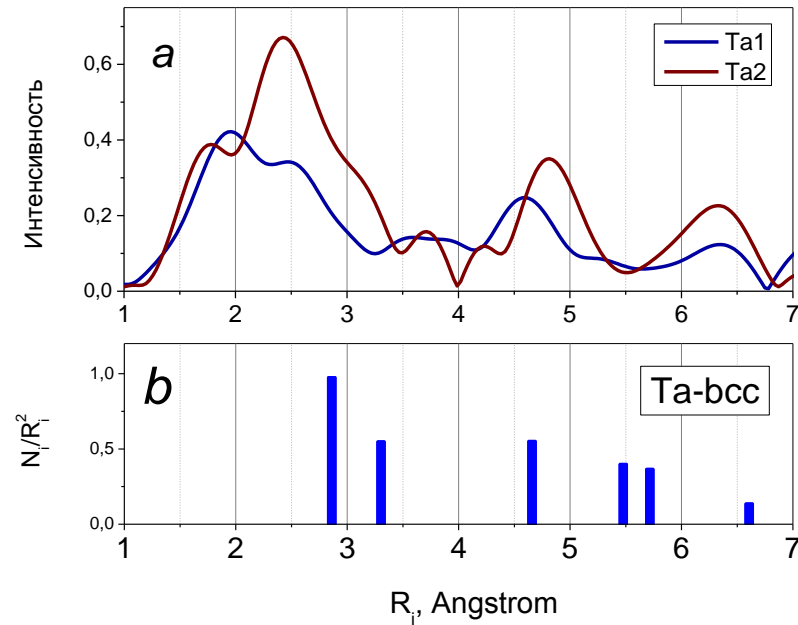


Рис. 6. Спектры EXAFS для атомов Fe, имплантированных в Ta.

a) экспериментальные данные Ta-1 и Ta-2.

b) Распределение атомов по координационным сферам для идеальной ОЦК решетки Ta ($a = 3.304 \text{ \AA}$).

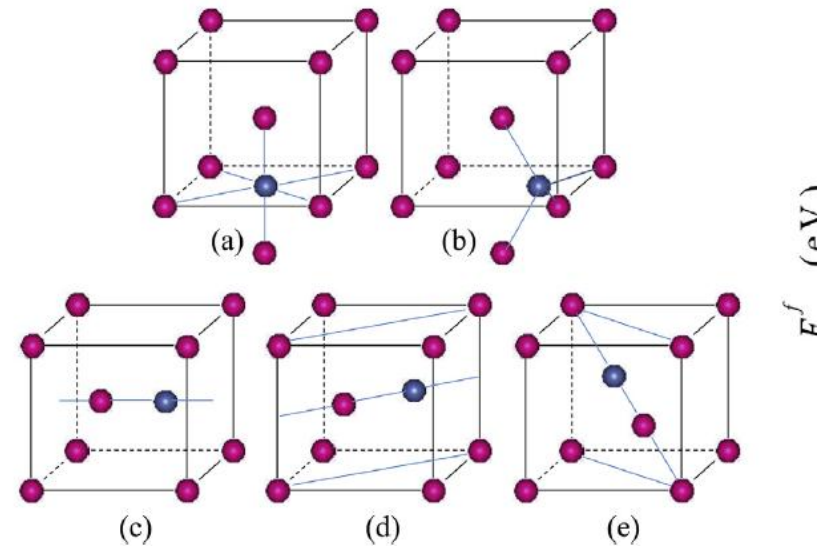
Модельные расчеты спектров EXAFS для Fe в Ta

А. Фазы: α -Fe, Fe₂Ta, Fe₇Ta₈

Б. Позиции Fe в облученном Ta:

1. Замещения
2. Замещения с 1 NN вакансией/
3. Замещения с 2NN вакансией (3 вар.)
4. Внедрения – (Fe-Ta) гантель
5. Кластеры Fe-Fe в позициях замещения

Позиции внедрения в ОЦК решетке



Релаксация (деформация) решетки вблизи атомов Fe в Ta

Радиусы атомов: $R(\text{Fe}) = 1.22 \text{ \AA}$, $R(\text{Mo}) = 1.36 \text{ \AA}$, и $R(\text{Ta}) = 1.43 \text{ \AA}$

Расчеты координат атомов для различных положений Fe в Ta методом теории функционала электронной плотности.

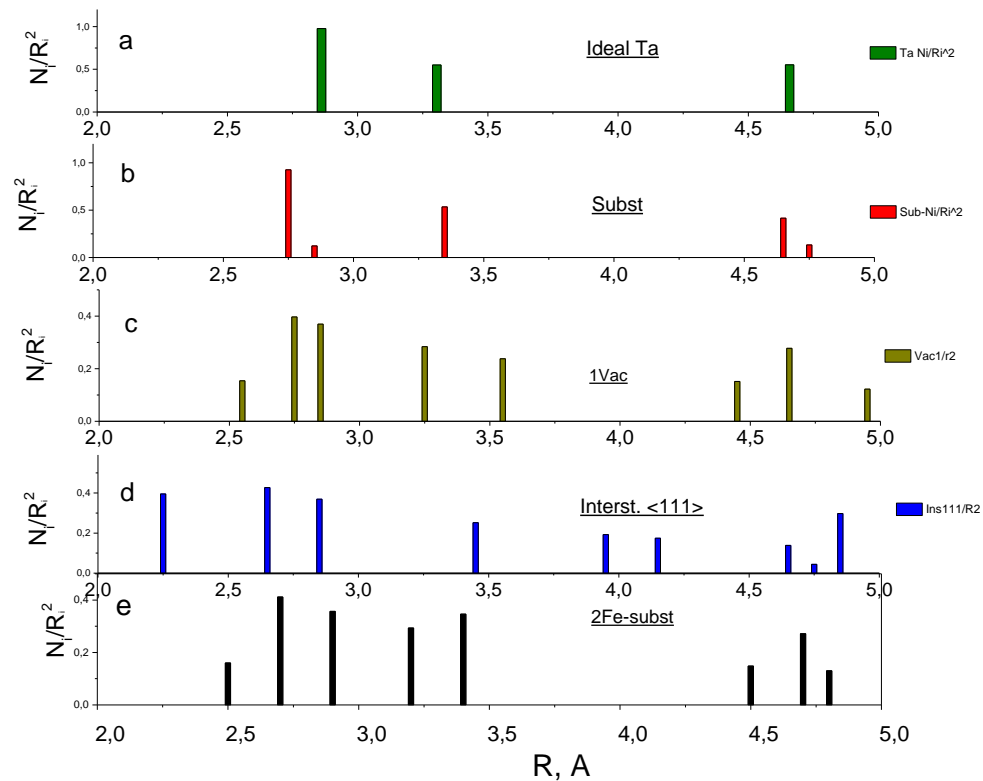


Рис. 8. Положения атомов Ta вокруг атома Fe для различных типов дефектов с учетом релаксации кристаллической решетки.

a - Для идеального Ta;

b – позиция замещения Fe в Ta;

c- позиция замещения с 1 вакансией;

d - позиция внедрения: гантель Fe-Ta вдоль направления $\langle 111 \rangle$

e – Кластер Fe-Fe в позициях замещения

Разложение экспериментальных EXAFS спектров на компоненты

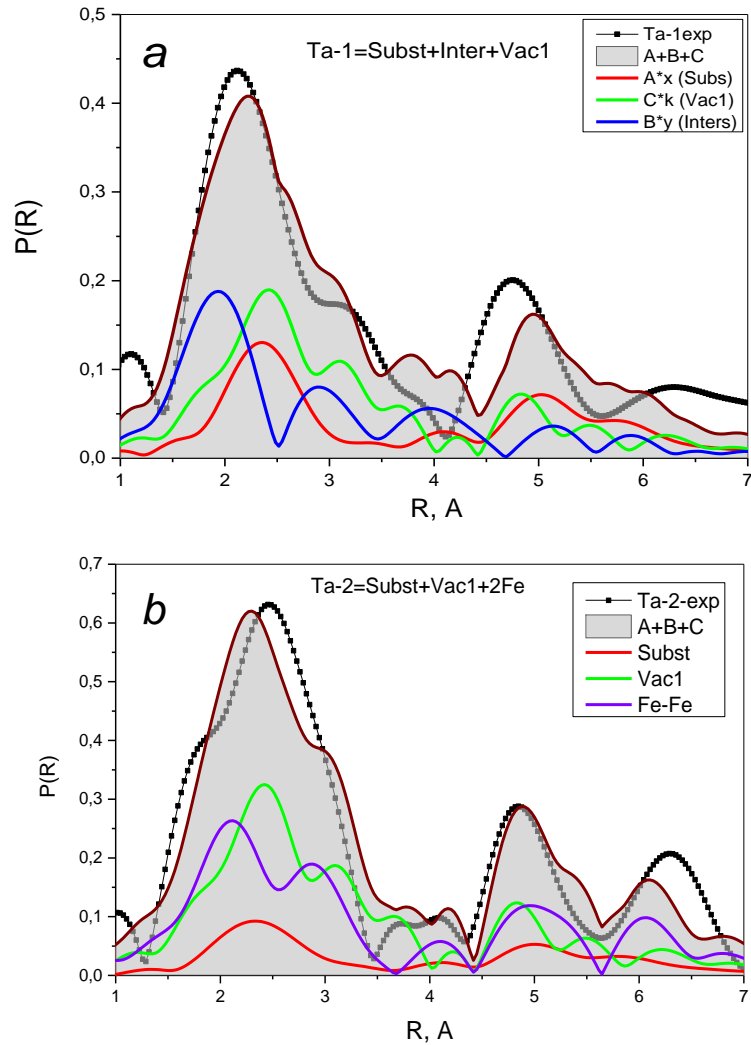


Рис. 9. Разложение экспериментальных спектров EXAFS на 3 расчетных подспектра.

- а) Спектр Та-1 непосредственно после облучения;
- б) Спектр Та-2 после облучения и отжига при 700°C.
- Черные квадраты, соединенные линией – экспериментальные данные;
- Красная кривая – Fe в позициях замещения;
- Зеленая кривая – 1 вакансия вблизи Fe в позициях замещения;
- Синяя кривая - Fe в позициях внедрения вдоль диагонали $\langle 111 \rangle$;
- Фиолетовая линия -2-а соседних атомов Fe в позициях замещения;
- Коричневая кривая – суммарная расчетная кривая.

Заключение

Локализация имплантированных атомов ^{57}Fe в матрицах Мо и Та изучена методом Мессбауэровской спектроскопии и методом EXAFS в области К-края Fe. Оба метода дают согласованные результаты. В Мо атомы Fe преимущественно локализуются в позициях замещения. Анализ спектров EXAFS показывает, что концентрации вакансий вблизи атомов ^{57}Fe в Мо составляет около 24 ат.%.

В матрице Та атомы Fe имеют более сложную локализацию. В мессбауэровских спектрах это проявляется в сильном уширении линий. Для анализа экспериментальных данных EXAFS были проведены расчеты модельных спектров для типичных атомных конфигураций Fe в матрице Та, возникающих в результате облучения. Показано, что атомы Fe локализуются в Та в нескольких позициях.

Для исходного облученного образца атомы Fe находятся в позициях замещения, внедрения и позициях замещения с вакансией в ближайшем окружении. После отжига образца при $T=700^\circ\text{C}$ локализация Fe в матрице Та изменяется: Позиции внедрения исчезают. Сохраняются позиции замещения и позиции вблизи вакансии. Кроме того, образуются кластеры из 2-х соседних атомов Fe. Таким образом, продемонстрировано, что метод EXAFS позволяет более точно определить конфигурации дефектов, которые возникают при облучении

Спасибо за внимание