

МТК-54 (2025)

ЛОКАЛИЗАЦИЯ ИОНОВ Fe ПРИ ИМПЛАНТАЦИИ В КРИСТАЛЛ $Zr(Y)O_2$, ДАННЫЕ XANES

***В.А. Андрианов^{1*)}, А.Л. Ерзинкян¹⁾, А.А. Буш²⁾,
П.А. Федин³⁾, К.Е. Прянишников³⁾, Т.В. Кулевой³⁾, А.Л. Тригуб³⁾***

¹⁾ НИИЯФ МГУ, Москва, Россия

²⁾ МИРЭА, Москва, Россия

³⁾ НИЦ “Курчатовский институт”, Москва, Россия

^{*)} e-mail: andrva22@mail.ru

Введение

Синхротронные методы XANES и EXAFS используются для определения валентности и координации атомов в различных материалах, в том числе подвергнутых воздействию ионизирующего излучения. В настоящей работе эти методы были применены для изучения локализации ионов Fe при имплантации в кристалл Zr(Y)O_2 . Двоокись циркония является перспективным материалом атомной промышленности благодаря высокой температуре плавления 2715°C , высокой твердости и устойчивости к нейтронному облучению. Стабилизированная иттрием двоокись циркония имеет кубическую структуру, высокую концентрацию стехиометрических вакансий кислорода, и соответственно, подвижность ионов кислорода при повышенных температурах.

При имплантации Fe следует учитывать различную валентность атомов Zr (4+) и атомов Fe (2+ и 3+). Кроме того, при имплантации образуется высокая концентрация атомных вакансий, что может способствовать формированию различных координаций атомов Fe.

Имплантация ионами Fe проводилась на ускорителе ТИПр, входящем в ЦКП «КАМИКС» в НИЦ «Курчатовский институт»; энергия ионов 5.6 МэВ и флюенс 10^{15} ионов/см². Согласно расчетам по программе SRIM ионы Fe имплантированы в поверхностный слой толщиной 2.5 мкм с максимальной концентрацией около 0.02 ат. %.

В докладе будут представлены спектры XANES в области K-края атомов Fe, измеренные на Синхротронном источнике НИЦ «Курчатовский институт». Будут рассмотрены данные, полученные как непосредственно после имплантации, так и после отжига образцов на воздухе при температурах 300°C.

Сравнение с литературными данными показывает, что имплантированные атомы Fe имеют валентность 2+, которая отличается от стандартной валентности 3+, которая типична для соединений, полученных методом сплавления. По-видимому, валентность Fe²⁺ связана с локализацией дополнительных вакансий в процессе имплантации.

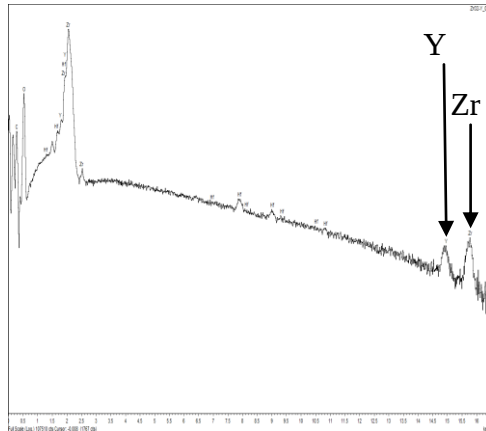
Работа выполнена по плану научных исследований НИИЯФ МГУ.

Образец: Пластина 10*10 мм толщиной 0.5 мм

**Эл. Микроскоп:
Флуоресцентный анализ**

ZrYO_2 Y/(Zr+Y)=18.5 %

$\text{Zr}_{0.815}\text{Y}_{0.185}\text{O}_{2-x}$



Рентгеновская дифракция.

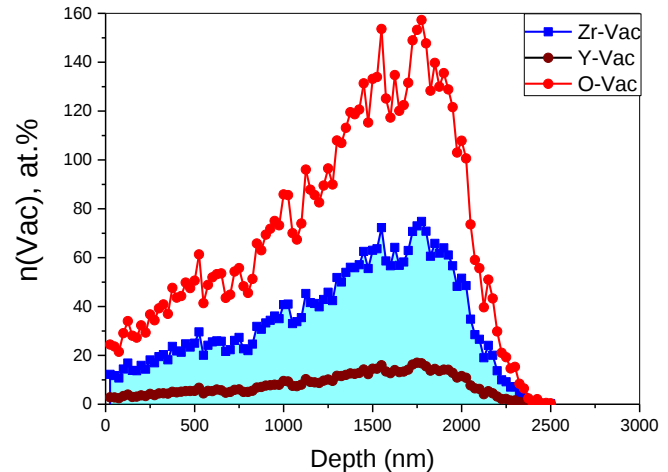
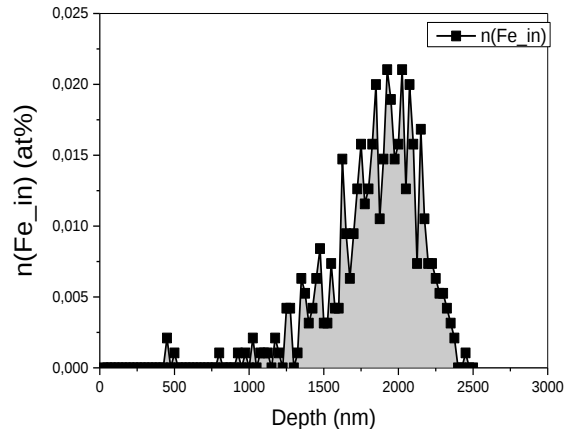
Кубическая элементарная ячейки с параметром $a=5.143(1)\text{\AA}$.

Пространственная группа Fm-3m.

Флюорит



Облучение: Имплантация ионов Fe на импульсном ускорителе ТИПр в ЦКП «КАМИКС» в НИЦ “Курчатовский институт”. Энергия ионов 5.6 МэВ и флюенс 10^{15} ионов/см². (Ионный ток $I = 25$ мкА/см², длительность импульса - 475 мс, период повторения импульсов - 1 с, заряд ионов 2+)



Расчет по программе SRIM. $E_d(\text{Zr})=E_d(\text{Y})=50$ eV. $E_d(\text{O})=25$ эВ; Флюенс = 10^{15} ионов/см²

Кристаллическая структура Флюорита.
(a). Кубическая. (b). Тетрагональная

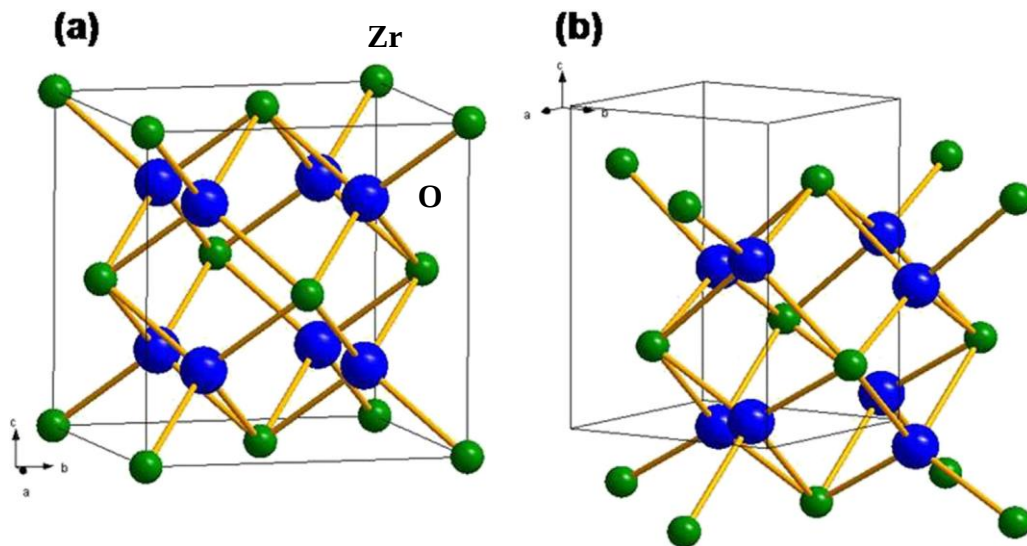
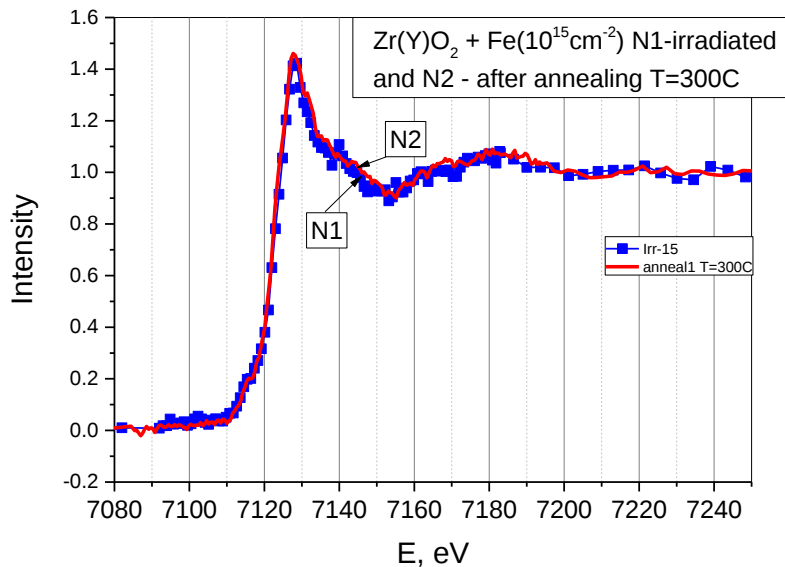


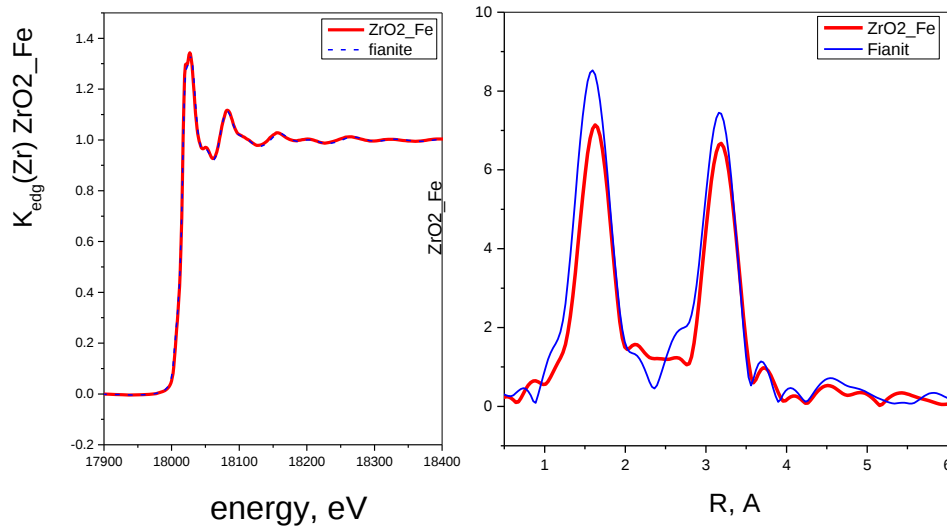
Таблица. Этапы работы

№	Воздействие на образец	Цвет образца	
1	Исходный	Бесцветный, прозрачный	
2	Облучение, ионы Fe. $F=10^{15}\text{см}^{-2}$	Розовый, прозрачный	
3	XANES-1 $K_{\text{край}}(\text{Fe})$ XANES $K_{\text{край}}(\text{Zr})$	Розовый, прозрачный	
4	Отжиг $T=300\text{ C}$ Воздух, $t=3$ часа	Бесцветный, прозрачный	
5	XANES-2 $K_{\text{край}}(\text{Fe})$	Бесцветный, прозрачный	
6	Отжиг $T=900\text{ C}$ аргон	Бесцветный	

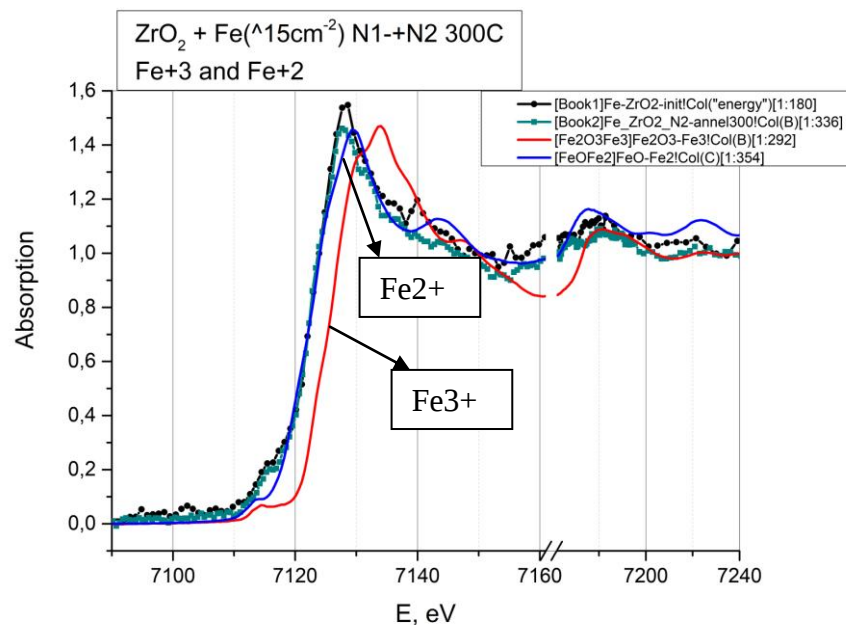
**XANES спектры. НИЦ «Курчатовский институт»,
станция СТМ, флуоресцентный метод.**



XANES and EXAFS on $K_{\text{Edg}}(\text{Zr})$ in $\text{Zr}_{0.815}\text{Y}_{0.185}\text{O}_2$



Сравнение спектров XANES с литературными данными для Fe^{+3} (Fe_2O_3) и Fe^{+2} (FeO)



Заключение

Проведена имплантация ионов Fe в пластину оксида циркония $Zr_{0.815}Y_{0.185}O_2$ стабилизированного иттрием. Энергия ионов 5.6 МэВ, флюенс 10^{15} см^{-2} . Глубина имплантации и концентрация первичных дефектов рассчитаны по программе SRIM. Содержание иттрия в пластине определено флуоресцентным методом на электронном микроскопе. Методом рентгеновской дифракции определены параметры кристаллической структуры типа флюорита: $a=5.143(1)\text{\AA}$.

Спектры XANES в области K-края ионов Fe были измерены непосредственно после имплантации в $Zr_{0.815}Y_{0.185}O_2$ и после отжига на воздухе при температуре $T=300 \text{ C}$. Измерения выполнены на синхротронном источнике НИЦ «Курчатовский институт» на станции СТМ флуоресцентным методом. Измеренные спектры XANES практически совпадают. Это означает, что атомы Fe локализованы в устойчивых кислородных координациях.

Сравнение с литературными данными показывает, что имплантированные атомы Fe имеют валентность $2+$, которая отличается от стандартной валентности $3+$, которая типична для соединений, полученных методом сплавления. По-видимому, валентность Fe^{2+} связана с локализацией дополнительных вакансий в процессе имплантации.