

КОМПЛЕКСНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И РАСЧЕТ ПОВРЕЖДАЮЩИХ ДОЗ (TiHfZrNbTa)B₂ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ ИОНАМИ КРИПТОНА И КСЕНОНА

Ә.Д. Сапар^{1), 2)}, И.А. Иванов¹⁾, В.В. Углов³⁾, Б.С. Аманжулов^{1), 2)},
А.С. Сейтбаев¹⁾, Ә.М. Темір¹⁾, Е.В. Бихерт¹⁾, Е.О. Унгарбаев¹⁾,
Д.А. Мустафин¹⁾, М.В. Колобердин¹⁾, М.В. Здоровец^{1), 2)}

¹⁾Институт ядерной физики, ул. Ибрагимова 1, Алматы 050032, Казахстан,
a.sapar@inp.kz, i.ivanov@inp.kz, amanzholovb96@gmail.com, seitbayevaibek@gmail.com,
adilet.temir@mail.ru, e.bikhert@inp.kz, ye1.7ung@gmail.com, d.mustafin@inp.kz,
koloberdin@inp.kz, mzdorovets@inp.kz

²⁾Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилева,
ул. Сатпаева 2, Астана 010008, Казахстан

³⁾Белорусский государственный университет,
пр. Независимости 4, Минск 220030, Беларусь, uglov@bsu.by

В работе представлены результаты комплексного исследования высокоэнтропийного диборида (TiHfZrNbTa)B₂, синтезированного методом искрового плазменного спекания (SPS). Проведен анализ элементного состава, фазового состояния, микроструктуры и морфологии поверхности. Установлено, что полученный материал обладает стабильной однофазной гексагональной структурой типа AlB₂, равномерным распределением компонентов и плотной однородной микроструктурой. Сравнение с классическими диборидами переходных металлов (TiB₂, ZrB₂, HfB₂, NbB₂, TaB₂) подтвердило высокую структурную стабильность ВЭБ. Дополнительно выполнено моделирование радиационных повреждений при облучении ионами Kr и Xe, что позволило оценить потенциальную радиационную стойкость исследуемого материала. Полученные результаты демонстрируют перспективность использования (TiHfZrNbTa)B₂ в ядерной энергетике и других экстремальных условиях эксплуатации.

Ключевые слова: боридные керамики; высокоэнтропийные керамики; радиационная стойкость; структурно-фазовое состояние; элементный состав; облучение ионами.

COMPREHENSIVE STUDY OF THE STRUCTURE AND RADIATION DAMAGE MODELING OF (TIHFZRNBTa)B₂ BY KRYPTON AND XENON ION IRRADIATION

A.D. Sapar^{1), 2)}, I.A. Ivanov¹⁾, V.V. Uglov³⁾, B.S. Amanzhulov^{1), 2)},
A.S. Seitbayev¹⁾, A.M. Temir¹⁾, Y.V. Bikhert¹⁾, Y.O. Ungarbayev¹⁾,
D.A. Mustafin¹⁾, M.V. Koloberdin¹⁾, M.V. Zdorovets¹⁾

¹⁾Institute of Nuclear Physics, 1 Ibragimov Str., 050032 Almaty, Kazakhstan,
a.sapar@inp.kz, i.ivanov@inp.kz, amanzholovb96@gmail.com, seitbayevaibek@gmail.com,
adilet.temir@mail.ru, e.bikhert@inp.kz, ye1.7ung@gmail.com, d.mustafin@inp.kz,
koloberdin@inp.kz, mzdorovets@inp.kz

²⁾L.N. Gumilyov Eurasian National University, 2 Satpayev Str., 010008 Astana, Kazakhstan

³⁾Belarusian State University, 4 Nezavisimosti Ave., 220030 Minsk, Belarus, uglov@bsu.by

This study presents a comprehensive investigation of the high-entropy diboride (TiHfZrNbTa)B₂ synthesized via spark plasma sintering (SPS). The elemental composition, phase structure, microstructure, and surface morphology were analyzed. The synthesized material exhibits a stable single-phase hexagonal AlB₂-type structure, uniform elemental distribution, and a dense, homogeneous microstructure. A comparative analysis with conventional transition metal diborides (TiB₂, ZrB₂, HfB₂, NbB₂, TaB₂) confirmed the superior structural stability of the high-entropy boride. Additionally, radiation damage modeling under Kr and Xe ion irradiation was performed to assess the potential radiation resistance of the material. The obtained results demonstrate the promising applicability of (TiHfZrNbTa)B₂ for use in nuclear energy systems and other extreme service environments.

Keywords: boride ceramics; high-entropy ceramics; radiation resistance; structural-phase state; elemental composition; ion irradiation.

Введение

Высокоэнтропийные дибориды (ВЭБ) объединяют в себе преимущества тугоплавких соединений — высокую температуру плавления, твердость и химическую стойкость [1, 2]. Кроме того, благодаря наличию бора, обладающего большим сечением захвата тепловых нейтронов, данные материалы рассматриваются как потенциальные кандидаты для использования в экстремальных условиях, включая ядерную энергетику и аэрокосмическую технику [2].

В состав ВЭБ входят по меньшей мере пять элементов в близких к эквипроцентным соотношениях. Такая конфигурация позволяет формировать устойчивые однофазные твердые растворы с высокой энтропией смешения, что оказывает существенное влияние на термодинамическую стабильность и физико-механические свойства материалов [3, 4].

Бор имеет довольно большие сечения захвата тепловых нейтронов [5]. Бористые стали, полимеры и новые материалы на основе бора с большим сечением захвата нейтронов и высокой устойчивостью к радиационным повреждениям изучаются и уже используются для контейнеров хранения и перевозки отработанного ядерного топлива, так как это позволит увеличить способность по перевозке и надежность конструкций [6]. Ti, Zr, Ta имеют быстрое падение наведенной радиоактивности до 10-50 лет, что важно для реакторов ядерного синтеза и для безопасной утилизации/переработки материалов [7].

Целью данной работы является комплексный анализ высокоэнтропийного диборида $(\text{TiHfZrNbTa})\text{B}_2$, включая исследование его элементного состава, фазового состояния, микроструктуры и морфологии поверхности, а также моделирование радиационных повреждений при облучении тяжелыми ионами криптона и ксенона с целью оценки радиационной стойкости материала для применения в условиях экстремальных нагрузок.

Материалы и методы

Образцы высокоэнтропийного диборида $(\text{TiHfZrNbTa})\text{B}_2$ и диборидов переходных металлов были синтезированы методом искрового плазменного спекания (SPS). Процесс обеспечивал быстрое уплотнение и контролируемую кристаллизацию порошков [8].

Для структурного и фазового анализа использовался рентгеновский дифрактометр Bruker D8 Advance Eco с использованием характеристического рентгеновского излучения $\text{CuK}\alpha$ с длиной волны $\lambda=0.154179$ нм. Морфологические характеристики и элементный состав были исследованы методом Растровой Электронной Микроскопии (РЭМ) на микроскопе Hitachi TM3030 с ускоряющим напряжением 15 кВ, а топография поверхности — методом атомно-силовой микроскопии (ACM) на системе Smart-SPM (AIST-NT). Анализ элементного состава проводился методом энергодисперсионного спектрального (ЭДС) анализа.

Результаты и обсуждение

1. Элементный состав и распределение

Энергодисперсионный анализ показал равномерное распределение всех пяти металлических компонентов в составе $(\text{TiHfZrNbTa})\text{B}_2$. Как видно из рис. 1, распределение близко к эквипроцентному, за исключением наблюдаемого локального дефицита Zr, возможно обусловленного различиями в кинетике диффузии на стадии спекания.

Обнаружено также высокое содержание бора с локальными скоплениями, что отражается в виде темных участков на РЭМ-изображениях.

В диборидах отдельных металлов элементный состав соответствует ожидаемому стехиометрическому соотношению, однако наблюдается незначительное присутствие оксидных и карбидных вторичных фаз (например, Nb_5C_6 , TaC , TiO_2), что может быть связано с остаточной реакцией с атмосферой при спекании [9].

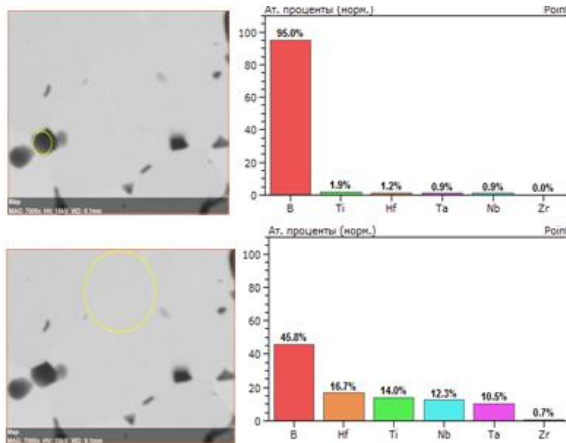


Рис. 1. Энергодисперсионный анализ $(\text{TiHfZrNbTa})\text{B}_2$. Зафиксировано равномерное распределение металлов; локальные флуктуации по Zr

2. Структурно-фазовое состояние

Анализ рентгенограмм высокоэнтропийного диборида (рис. 2) показал наличие гексагональной фазы типа AlB_2 с характерными дифракционными пиками. Дополнительные фазы не обнаружены, что указывает на успешное формирование однофазного высокоэнтропийного твердого раствора [2]. Аналогичная гексагональная структура зафиксирована и в диборидах TiB_2 , ZrB_2 , HfB_2 , NbB_2 и TaB_2 .

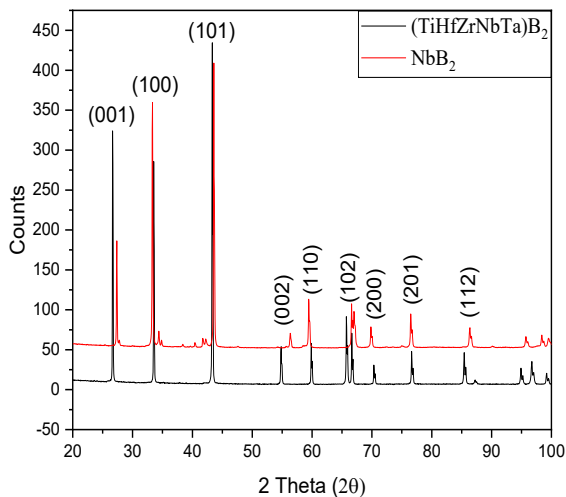


Рис. 2. Рентгенограмма высокоэнтропийного диборида $(\text{TiHfZrNbTa})\text{B}_2$. Обнаружена одна гексагональная фаза типа AlB_2 без дополнительных вторичных фаз

3. Микроструктура поверхности

РЭМ-изображения поверхности ВЭБ выявили поликристаллическую структу-

ру с высокой степенью однородности и плотной упаковкой зерен. Поверхность характеризуется невысокой шероховатостью. В случае диборидов отдельных металлов структура также однородна, однако наблюдается меньшая плотность упаковки и наличие участков с измененной морфологией — свидетельство возможного локального перегрева или образования вторичных фаз [10].

4. Расчет повреждающих доз и радиационных эффектов

В дополнение к экспериментальному исследованию необлученных образцов проведено моделирование радиационных повреждений с использованием программы SRIM-2013 в режиме полного каскада. Рассмотрены сценарии облучения тяжелыми ионами криптона и ксенона с флюенсом 1×10^{15} ионов/см² (рис.3).

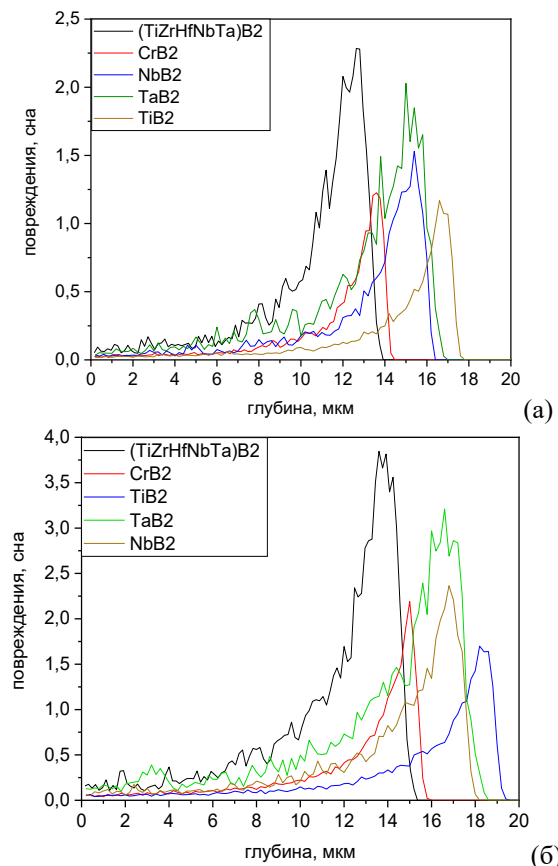


Рис. 3. Расчет повреждающих доз для ионов: а) Kr и б) Xe.

Эти значения указывают на значительную степень потенциальных радиа-

ционных повреждений, которая близка к критическим значениям, при которых в керамических материалах могут происходить аморфизация, дефектообразование, изменение фазового состояния или деградация механических свойств [10]. При этом, ожидается, что пик повреждений и основная концентрация дефектов в $(\text{TiHfZrNbTa})\text{B}_2$ будет на меньшей глубине, чем в диборидах.

Исходное структурное состояние материала $(\text{TiHfZrNbTa})\text{B}_2$, подтвержденное как однородное и однофазное, послужит в качестве эталона для оценки степени и характера изменений после облучения. Полученные расчетные данные будут использованы при последующем сравнительном анализе экспериментальных результатов по морфологии, фазам и механическим свойствам после ионного воздействия.

Заключение

Проведенное исследование показало, что ВЭБ $(\text{TiHfZrNbTa})\text{B}_2$, полученный методом искрового плазменного спекания, обладает однородной микроструктурой, стабильной однофазной гексагональной решеткой AlB_2 -типа и близким к эквИАтомному распределением компонентов. Микроструктура плотная, а морфология поверхности демонстрирует высокую степень упорядоченности.

Представленные результаты составляют основу для последующего анализа радиационной стойкости данных материалов при облучении тяжелыми ионами (Kr, Xe), и формированию рекомендаций по перспективности ВЭБ, таких как $(\text{TiHfZrNbTa})\text{B}_2$, в ядерной технике и других условиях с высокой радиационной и тепловой нагрузкой.

Данное исследование финансировалось Комитетом науки Министерства науки и высшего образования Республи-

ки Казахстан (грант № AP23489645 «Структурно-фазовое состояние высокоэнтروпийных боридных керамик, облученных высокоэнергетическими ионами до больших повреждающих доз»).

Библиографические ссылки

1. Gild J., Zhang Y., Harrington T., Jiang S., Hu T., Quinn M.C., et al. High-entropy metal diborides: A new class of high-entropy materials and a new type of ultrahigh temperature ceramics. *Scientific Reports* 2016; 6 (1): 37946.
2. Zhang R.Z., Reece M.J. Review of high entropy ceramics: Design, synthesis, structure and properties. *Journal of Materials Chemistry A* 2019; 39: 22148-22162.
3. Yeh J.W., Chen S.K., Lin S.J., Gan J.Y., Chin T.S., Shun T., et al. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principal elements: Novel alloy design concepts and outcomes. *Advanced Engineering Materials* 2004; 6 (5): 299-303.
4. Miracle D.B., Senkov O.N. A critical review of high entropy alloys and related concepts. *Acta Materialia* 2017; 122: 448-511.
5. Чернов И. И., Углов В. В., Калинин Б. А., Стальцов М. С., Тенишев А. В., Черенда Н. Н. Конструкционные и функциональные материалы ядерных энергетических установок. - Минск: Вышэйшая школа, 2021. 239 с.
6. Qi Z., Yang Z., Li J., Guo Y., Yang G., Yu Y., Zhang J. The Advancement of Neutron-Shielding Materials for the Transportation and Storage of Spent Nuclear Fuel. *Materials* 2022; 15 (9): 3255.
7. Ayyagari A., Salloom R., Muskeri S., Mukherjee S. Low activation high entropy alloys for next generation nuclear applications. *Materialia* 2018; 4: 99-103.
8. Qi Z., Yang Z., Li J., Guo Y., Yang G., Yu Y., Zhang J. The Advancement of Neutron-Shielding Materials for the Transportation and Storage of Spent Nuclear Fuel. *Materials* 2022; 15 (9): 3255.
9. Filipovic S., Obradovic N., Hilmas G.E., Fahrenholtz W.G., Brenner D.W., Maria J.-P., Wolfe D.E., Zurek E., Campilongo X., Curtarolo S. A Super-hard high entropy boride containing Hf, Mo, Ti, V, and W. *Journal of the American Ceramic Society* 2024; 107 (7): 4430-4440.
10. Feng L., Fahrenholtz W. G., Brenner D. W. High-Entropy Ultra-High-Temperature Borides and Carbides: A New Class of Materials for Extreme Environments. *Annual Review of Materials Research* 2021; 51 (1): 165-185.