

## РАДИАЦИОННАЯ СТОЙКОСТЬ СПЛАВА HfNbZrTi ПРИ НИЗКИХ И ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

В.В. Углов, М.О. Коваленко, И.В. Сафронов, И.В. Кондрусь  
*Белорусский государственный университет,  
пр. Независимости 4, Минск 220030, Беларусь, uglov@bsu.by, maksuskoval@tut.by,  
igor.safronov.junior@gmail.com, ilyakondrus01@gmail.com*

В работе методом молекулярной динамики исследовано влияние радиационного облучения на высокоэнтропийный сплав HfNbZrTi при температурах 300 и 973 К. Моделирование проводилось с энергией первично-выбитых атомов 7.6 кэВ и дозой 0.13 сна. Основные результаты показали, что сплав сохраняет объемно-центрированную кубическую структуру, однако, при 973 К формируются зародыши гексагональной плотноупакованной фазы с повышенным содержанием Hf и пониженным Nb и Zr, что говорит о склонности данного сплава к радиационно-индуцированной сегрегации. Анализ дефектов выявил случайное распределение вакансий и междоузельных атомов без образования пор или дислокационных петель при 300 и 973 К. Устойчивость сплава к радиационным повреждениям может быть связана с подавлением кластеризации дефектов, что делает его перспективным для применения в ядерной энергетике.

**Ключевые слова:** высокоэнтропийный сплав; молекулярная динамика; сегрегация; фаза; точечные дефекты; дислокационные петли.

## RADIATION RESISTANCE OF A HfNbZrTi ALLOY AT LOW AND HIGH TEMPERATURES

V.V. Uglov, M.O. Kovalenko, I.V. Safronov, I.V. Kondrus  
*Belarusian State University,  
4 Nezavisimosti Ave., 220030 Minsk, Belarus, uglov@bsu.by, maksuskoval@tut.by,  
igor.safronov.junior@gmail.com, ilyakondrus01@gmail.com*

By means of the molecular dynamics method the effect of radiation exposure on a HfNbZrTi high-entropy alloy at temperatures of 300 and 973 K was studied. The simulation was carried out with a primary knock-on atom energy of 7.6 keV and a dose of 0.13 dpa. The main results showed that the alloy retains its body-centered cubic structure; however, at 973 K, nuclei of an hexagonal close packed phase form with an increased Hf content and reduced Nb and Zr content, indicating the alloy's tendency toward radiation-induced segregation. Defect analysis revealed a random distribution of vacancies and interstitial atoms without the formation of voids or dislocation loops at 300 and 973 K. The alloy's resistance to radiation damage can be associated with the suppression of defect clustering, making it a promising candidate for applications in nuclear energy.

**Keywords:** high-entropy alloy; molecular dynamics; segregation; phase; point defects; dislocation loops.

### Введение

Высокоэнтропийные сплавы (ВЭС) представляют собой современный класс металлических материалов, содержащих не менее четырех-пяти элементов в эквивалентном или близком к эквивалентному соотношении [1], сохраняя при этом простую кристаллическую структуру. Благодаря уникальным свойствам, включая высокие прочность, твердость, пластичность [1], а также устойчивость к окислению, износу и радиации [1], эти сплавы, особенно с объемно-центрированной кубической (ОЦК)

решеткой и содержащие тугоплавкие элементы, в последние годы вызывают значительный научный и технологический интерес. Для понимания поведения ВЭС под облучением крайне необходимо знать возможные механизмы дефекто- и фазообразования. Атомистическое моделирование на основе молекулярной динамики (МД) позволяет выявить такие механизмы.

Целью данной работы являлось изучение методом МД отклика ВЭС HfNbZrTi с ОЦК решеткой на радиационные повреждения при 300 и 973 К.

## Результаты и их обсуждение

С помощью программы Atomsk был сгенерирован неупорядоченный твердый раствор замещения с ОЦК решеткой и эквивалентным составом HfNbZrTi (по 25 ат. %) в суперъячейке с 281216 атомами ( $18 \times 18 \times 18$  нм).

Моделирование радиационных повреждений при 300 и 973 К в сплаве проводилось методом МД с помощью программы LAMMPS. Межатомное взаимодействие описывались с помощью потенциалов MEAM и Циглера-Бирсака-Литтмарка. Моделирование радиационных повреждений происходило циклически, когда случайным образом выбирался атом мишени и ему сообщалась энергия 7.6 кэВ. Стадии столкновений, рекомбинации и отжига описывались с адаптивным временным шагом с использованием NVE ансамбля в течение 1 пс и NPT ансамбля в течение 100 пс соответственно. Электронные потери учитывались через электронную тормозную способность. Достигнутая повреждающая доза составила 0.13 сна (около 650 каскадов).

Количественные анализы структурно-фазового состояния, точечных дефектов и дислокаций проводились с помощью программы OVITO.

Облучение гомогенных твердых растворов может приводить к фазовым превращениям, в частности, контролируемых радиационно-индуцированной сегрегацией (РИС) [2]. Сложный композиционный состав сплава HfNbZrTi предполагает рассмотрение этого вопроса. На рисунке 1 показаны различные структурные типы, появившиеся в ОЦК сплаве HfNbZrTi после радиационных повреждений 0.13 сна при 300 и 973 К. Обнаружено, что среди идентифицируемых новых структурных типов преобладает гексагональный плотноупакованный (ГПУ). Также было выявлено, что при 973 К по сравнению с 300 К объемная доля структурного типа ГПУ выше почти в 3 раза (4.5 против 1.7 % соответственно), а процессы кластеризации ускорены, что отражено на вставках рисунка 1.

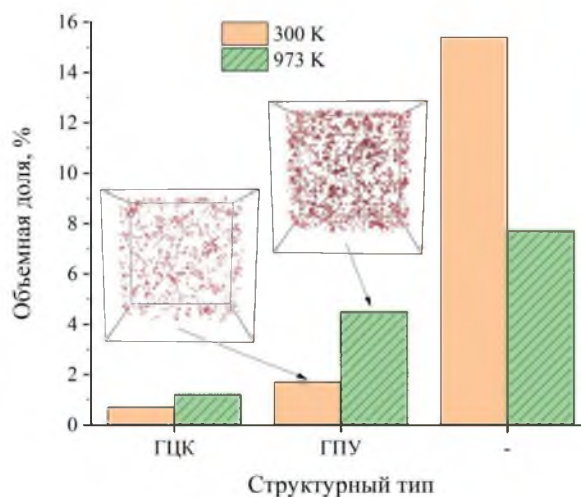


Рис. 1. Объемная доля отличных от ОЦК структурных типов в HfNbZrTi при температурах облучения 300 и 973 К и повреждающей дозе 0.13 сна. На вставках показаны срезы толщиной 4 нм для структурного типа ГПУ

Согласно расчетным данным, зародыши фазы ГПУ обогащены Hf (37 ат. %) и обеднены Nb и Zr (по 19-20 ат. %). Возможным механизмом зарождения фазы ГПУ при повышенных температурах в HfNbZrTi может быть РИС на возникающие в процессе радиационных повреждений стоки (структурные неоднородности). Повышенная диффузионная подвижность точечных дефектов при 973 К способствует более активному перераспределению атомов, что может приводить к формированию зародышей фазы ГПУ благодаря изменению локального композиционного состава. Наряду с этим, активной восстанавливаются области химического разупорядочения после нарушения ближнего порядка в каскадных областях, в связи с чем при 973 К наблюдается меньшая доля неидентифицируемого «-» структурного типа, чем при 300 К (7.7 против 15.4 % на рис. 1). Таким образом, ВЭС HfNbZrTi при повышенных температурах имеет склонность к РИС, что было установлено ранее экспериментально [3].

Для исследования дефектообразования в HfNbZrTi были выделены отдельно вакансионная и междоузельная подсистемы после радиационных повреждений 0.13 сна при 300 и 973 К (рис. 2). Концентрация точечных дефектов составила 0.8 и

0.6 % при 300 и 973 К соответственно. Несмотря на повышенное в 2-3 раза дефектообразование в HfNbZrTi по сравнению с ГЦК сплавами Ni-Co-Fe-Cr при схожих условиях облучения [4, 5], сплав HfNbZrTi свойственно сильное ингибирование кластеризации точечных дефектов. Из рисунка 2 видно, что точечные дефекты распределены случайно и не имеют высокой концентрации в локальных областях, особенно при 973 К, вследствие повышения эффективности диффузионной рекомбинации. Это обуславливает отсутствие крупных скоплений в виде пор или дислокационных петель вакансионного или междоузельного типов в HfNbZrTi при 300 и 973 К (рис. 2) по сравнению с ГЦК сплавами Ni-Co-Fe-Cr [4, 5].

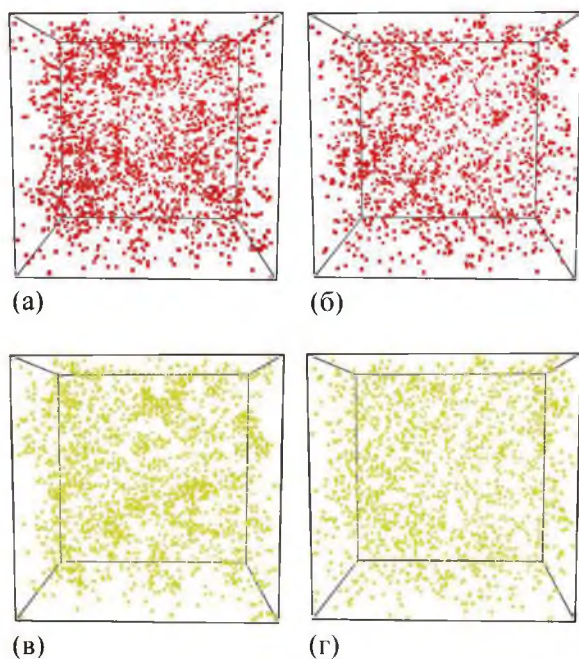


Рис. 2. Вакансионная (а), (б) и междоузельная (в), (г) подсистемы в HfNbZrTi при температурах облучения 300 (а), (в) и 973 К (б), (г) и повреждающей дозе 0.13 сна

Таким образом, затрудненная кластеризация точечных дефектов, влияющая на формирование дефектной структуры, может обуславливать повышенную радиационную стойкость сплава HfNbZrTi.

## Заключение

Исследование радиационной стойкости при температурах облучения 300 и 973 К и повреждающей дозе 0.13 сна ОЦК ВЭС HfNbZrTi методом МД выявило образование зародышей фазы ГПУ, обогащенной Hf (37 ат. %) и обедненной Nb и Zr (по 19–20 ат. %), с объемной долей 4.5 % при повышенной температуре и, в то же время, отсутствие пор и дислокационных петель при низких и высоких температурах. Одним из механизмов зарождения фазы ГПУ при 973 К в HfNbZrTi может быть РИС. В свою очередь, ингибирование кластеризации дефектов рассматривается как возможный механизм повышенной радиационной стойкости HfNbZrTi.

Работа выполнена при поддержке Государственной программы научных исследований “Энергетические и ядерные процессы и технологии”.

## Библиографические ссылки

1. Chen J. A review on fundamental of high entropy alloys with promising high-temperature properties. *Journal of Alloys and Compounds* 2018; 760: 15-30.
2. Was G.S. Fundamentals of Radiation Materials Science: Metals and Alloys. Berlin, Heidelberg: Springer; 2007. 827 p.
3. Углов В.В., Коваленко М.О., Кондрусь И.В. Фазовая стабильность высокоэнтропийных сплавов HfNbZrTi и NiCoFeCrMn после высокотемпературной имплантации ионов гелия. В кн.: Воробьева М.С., гл. ред. Труды VII международного Крейнделевского семинара «Плазменная эмиссионная электроника» (31 июля – 6 авг. 2023 г.), с. Максимиха. Улан-Удэ: БНЦ СО РАН; 2023. С. 183-189.
4. Levo E., Granberg F., Fridlund C., Nordlund K. Radiation damage buildup and dislocation evolution in Ni and equiatomic multicomponent Ni-based alloys. *Journal of Nuclear Materials* 2017; 490: 323-332.
5. Levo E., Granberg C., Nordlund K. Temperature effect on irradiation damage in equiatomic multicomponent alloys. *Computational materials science* 2021; 197: 110571-12.