

3. félévi beszámoló

Ódor Éva (odoreva94@gmail.com)

Anyagtudomány és szilárdtestfizika program

Témavezető: Dr. Ribárik Gábor

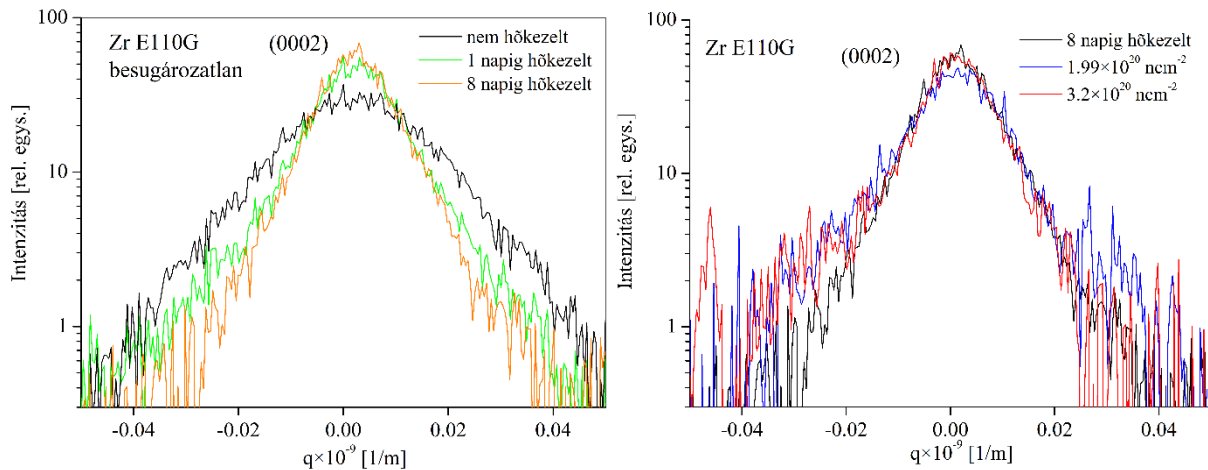
A dolgozat témája: Feszültség-deformáció, illetve vonalprofilok modellezése 3D-s periodikus mikroszerkezetek esetén FFT alapú módszerrel

Bevezetés

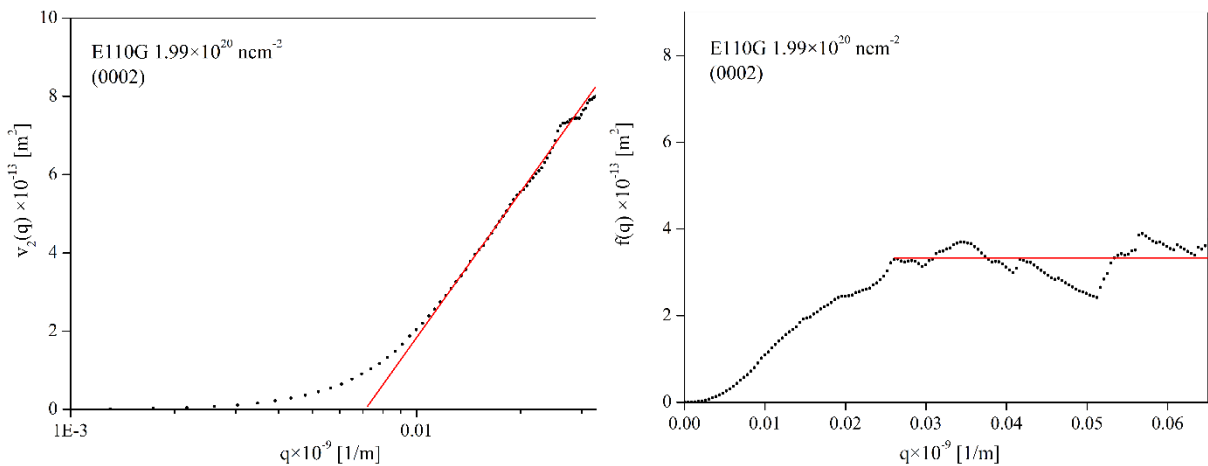
A cirkónium ötvözetek kicsi termikusneutron-abszorpciós hatáskeresztmetszetük mellett a magas hőmérsékletű szilárdsági tulajdonságai is elfogadhatóak, és jó a korrózióállóságuk a magas hőmérsékletű vizes közegben. Ennek köszönhetően a nukleáris reaktorok elengedhetetlen anyagai, mint a fűtőelemek burkolata. A Zr alapú szerkezeti anyagok esetén a besugárzás okozta hatások közül a legfontosabbak a méretváltozások, melyek erősen befolyásolják az élettartamot. A méretváltozásokat alapvetően a sugárkárosodás miatt megjelenő ponthibák megjelenése okozza az anyagban. A neutronbesugárzás vakancia-intersticiális párok sokaságát kelti az anyagban, mely ponthibák különböző kristálytani síkokon klaszterekbe rendeződve vakancia vagy intersticiális típusú diszlokációhurkokat képeznek. A besugárzás hatására kétféle hurok keletkezhet. Az első csoportba az ún. $\langle a \rangle$ típusú hurkok tartoznak, melyek a prizmatikus síkban fekszenek, Burgers-vektoruk pedig a hurok síkjára merőleges. A másik típust a bazális síkon elhelyezkedő $\langle c \rangle$ típusú hurkok alkotják, melyek Burgers-vektora az elemi cella $\langle c \rangle$ irányába mutat. A besugárzás során végbemenő mikroszerkezeti változásokat leggyakrabban elektronmikroszkópos képalkotással figyelik meg. Emellett azonban a röntgendiffrakciós vonalprofil analízis is kiváló lehetőséget nyújt a besugárzott anyagok vizsgálatára, segítségével meghatározhatjuk a keletkező diszlokációhurkok mennyiségét.

Az aktuális félévben elvégzett kutatások ismertetése

Ebben a félévben elsősorban kísérleti munkát végeztem, melynek során az MTA EK Budapesti Kutatóreaktorban neutronokkal besugárzott Zr mintákon végeztem röntgendiffrakciós méréseket. A besugárzott próbatestek a Paksi Atomerőműben is használt E110 és E110G kódjelű ötvözetekből készült Zr csövekből készültek, melyeket a reaktorban 1675,5 óráig besugároztak különböző neutron fluxus mellett. Ezt kiegészítendő a besugározatlan kiindulási állapotú mintadarabokon is végeztem diffrakciós méréseket, valamint hőkezeléseket. A mért vonalprofilokat korlátozott momentumok módszerével értékeltem ki [1]. Ezzel a módszerrel már a momentum görbék alakjából is következtetni tudunk a mikroszerkezet tulajdonságaira, valamint kvantitatívan is megkaphatjuk a mikroszerkezet paramétereit, mint a diszlokációsűrűség vagy az effektív levágási sugár. Példaként az 1. ábrán az E110G ötvözet esetén mért (0002) reflexiók, a 2. ábrán a $1.99 \times 10^{20} \text{ ncm}^{-2}$ fluenssel besugárzott E110G minta (0002) reflexiójához tartozó másod- és negyedrendű korlátozott momentum görbéi láthatók.



1. ábra. A besugározatlan és különböző mértékben hőkezelt, valamint a 8 napig hőkezelt és a két különböző mértékig besugárzott E110G ötvözetből készült mintán mérte (0002) röntgenprofilok.



2. ábra. Az $1.99 \times 10^{20} \text{ ncm}^{-2}$ fluenssel besugárzott E110G minta (0002) reflexiójára kapott másod- és negyedrendű momentum görbék.

Az egyes minták különböző reflexiói esetén kapott diszlokációsűrűség értékeket az 1. és 2. táblázatban tüntettem fel. Mind az E110 mind az E110G ötvözetekből egy $1.99 \times 10^{20} \text{ ncm}^{-2}$ és egy $3.2 \times 10^{20} \text{ ncm}^{-2}$ neutronfluent kapott próbatestet vizsgáltam, valamint egy-egy olyan mintát, amely nem volt besugározva. Az E110G ötvözet kiindulási anyagán hőkezelést is végeztünk annak érdekében, hogy a besugárzás során a mintákat ért hőhatás és a sugárkárosodás hatását el tudjuk különíteni. Kezdetben (a besugározatlan minták esetén) az anyagban a cső gyártása során keletkező diszlokációk vannak, melyek nem prizmatikus hurkok, hanem mozgóképes diszlokációk. Az eredmények alapján az látható, hogy már a hőkezelés hatására jelentősen lecsökken a diszlokációsűrűség. A besugárzott minták esetén a hőhatás mellett a besugárzás miatt létrejövő vakanciák és intersticiális atomok jelenléte is hozzájárulhat a diszlokációsűrűség kezdeti csökkenéséhez a diszlokációmászás elősegítése révén. A kisebb neutronfluent kapott minta diszlokációsűrűsége nagyobb, mint a 8 napig hőkezelt mintáé, ami a diszlokációhurkok megjelenésére utal. A nagyobb fluenssel besugárzott minta esetén kisebb diszlokációsűrűséget kaptunk, mely tendenciát már korábban is megfigyeltek [2]. Ennek oka lehet, hogy az Ostwald-éréshez hasonló folyamat során a kisebb diszlokációhurkok eltűnnek, és nagyobb hurkokká olvadnak össze.

Zr E110	ρ [10^{14} m^{-2}]			
	(0002) reflexió		(10 $\bar{1}1$) reflexió	
	M2	M4	M2	M4
besugározatlan	23	23	36	39
$1.99 \times 10^{20} \text{ ncm}^{-2}$	8.5	8.1	23	21
$3.2 \times 10^{20} \text{ ncm}^{-2}$	6.7	6.5	15	12

1. táblázat. Az E110 jelű ötvözet esetén a másod- (M2) ill. negyedrendű (M4) korlátozott momentumokból kapott diszlokációsűrűség értékek.

Zr E110G	ρ [10^{14} m^{-2}]			
	(0002) reflexió		(10 $\bar{1}1$) reflexió	
	M2	M4	M2	M4
besugározatlan	29	26	30	29
hőkezelt 1 napig	16	15	22	21
hőkezelt 8 napig	9	8.6	12	12
$1.99 \times 10^{20} \text{ ncm}^{-2}$	14	13	29	26
$3.2 \times 10^{20} \text{ ncm}^{-2}$	6.8	6.5	15	11

2. táblázat. Az E110G jelű ötvözet esetén a másod- (M2) ill. negyedrendű (M4) korlátozott momentumokból kapott diszlokációsűrűség értékek.

További terveim között szerepel, hogy FFT alapú módszerrel numerikusan modellezek olyan vonalprofilokat, melyek közvetlenül összehasonlíthatók a Zr ötvözetek esetén mért profilokkal. Az FFT alapú algoritmussal működő szoftver számára, melynek fejlesztésén korábban dolgoztam, előállíthatók olyan bemenetek, melyek különböző diszlokációeloszlásokat írnak le. Ezáltal modellezhetők a gyártás során az anyagba kerülő mozgóképes diszlokációk és a besugárzás által keltett diszlokációhurkok is, valamint numerikusan számolhatók az ezeket tartalmazó anyaghoz tartozó vonalprofilok. A kísérleti munkát illetően a továbbiakban protonbesugárzott Zr mintákon is tervezek diffrakciós méréseket végezni, hasonlóan a most vizsgált neutronbesugárzott mintákhoz.

Publikációk

A félév során végzett munkámból az alábbi cikk jelent meg a Fizika Szemle 2018. decemberi számában:

Groma István, Szenthe Ildikó, Ribárik Gábor, Ódor Éva, Jóni Bertalan, Zilahi Gyula, Dankházi Zoltán: Atomreaktorokban használható cirkóniumötvözetek mikroszerkezetének meghatározása röntgenvonalfil-analízissel

A korábbi munkámból készült alábbi kézirat jelenleg elbírálás alatt áll az Acta Materialia c. folyóiratnál:

Zhenbo Zhang, Éva Ódor, Diana Farkas, Bertalan Jóni, Gábor Ribárik, Géza Tichy, S. H. Nandam, Yulia Ivanisenko, Michael Preuss, Tamás Ungár: Dislocations in grain boundaries

Tanulmányi tevékenység az aktuális félévben

Tárgy kódja	Tárgy neve	Kredit
FIZ/1/037E	Amorf fémötvözetek	6
FIZ/OKT/4	Oktatási tevékenység	4
FIZ/KUT-S3	Irányított kutatómunka	18

Oktatási tevékenység az aktuális félévben

Ebben a félévben klasszikus fizika laboratóriumot vezettem heti 4 órában.

Hivatkozások

- [1] I. Groma: *X-ray line broadening due to an inhomogeneous dislocation distribution*. Physical Review B 57 (1998) 7535.
- [2] T. Seymour, P. Frankel, L. Balogh, T. Ungár, S. P. Thompson, D. Jädernäs, J. Romero, L. Hallstadius, M. R. Daymond, G. Ribárik, M. Preuss: *Evolution of dislocation structure in neutron irradiated Zircaloy-2 studied by synchrotron X-ray diffraction peak profile analysis*. Acta Mat. 126 (2017) 102–113.