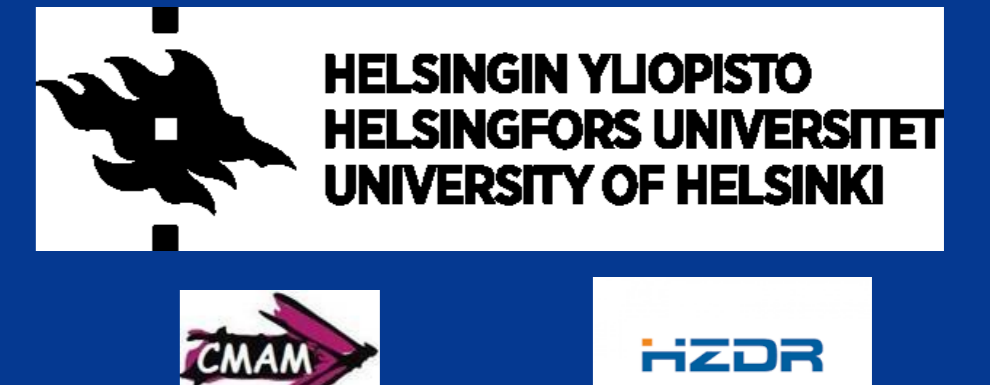


# Vpogled v kristalno strukturo materiala s pomočjo ionskih metod

S. Markelj<sup>1</sup>, E. Punzón-Quijorna<sup>1</sup>, M. Kelemen<sup>1</sup>, T. Schwarz-Selinger<sup>2</sup>, X. Jin<sup>3</sup>, E. Lu<sup>3</sup>, F. Djurabekova<sup>3</sup>, K. Nordlund<sup>3</sup>, J. Zavašnik<sup>1</sup>, A. Šestan<sup>1</sup>, M. L. Crespillo<sup>4</sup>, G. García López<sup>4</sup>, R. Heller<sup>5</sup>



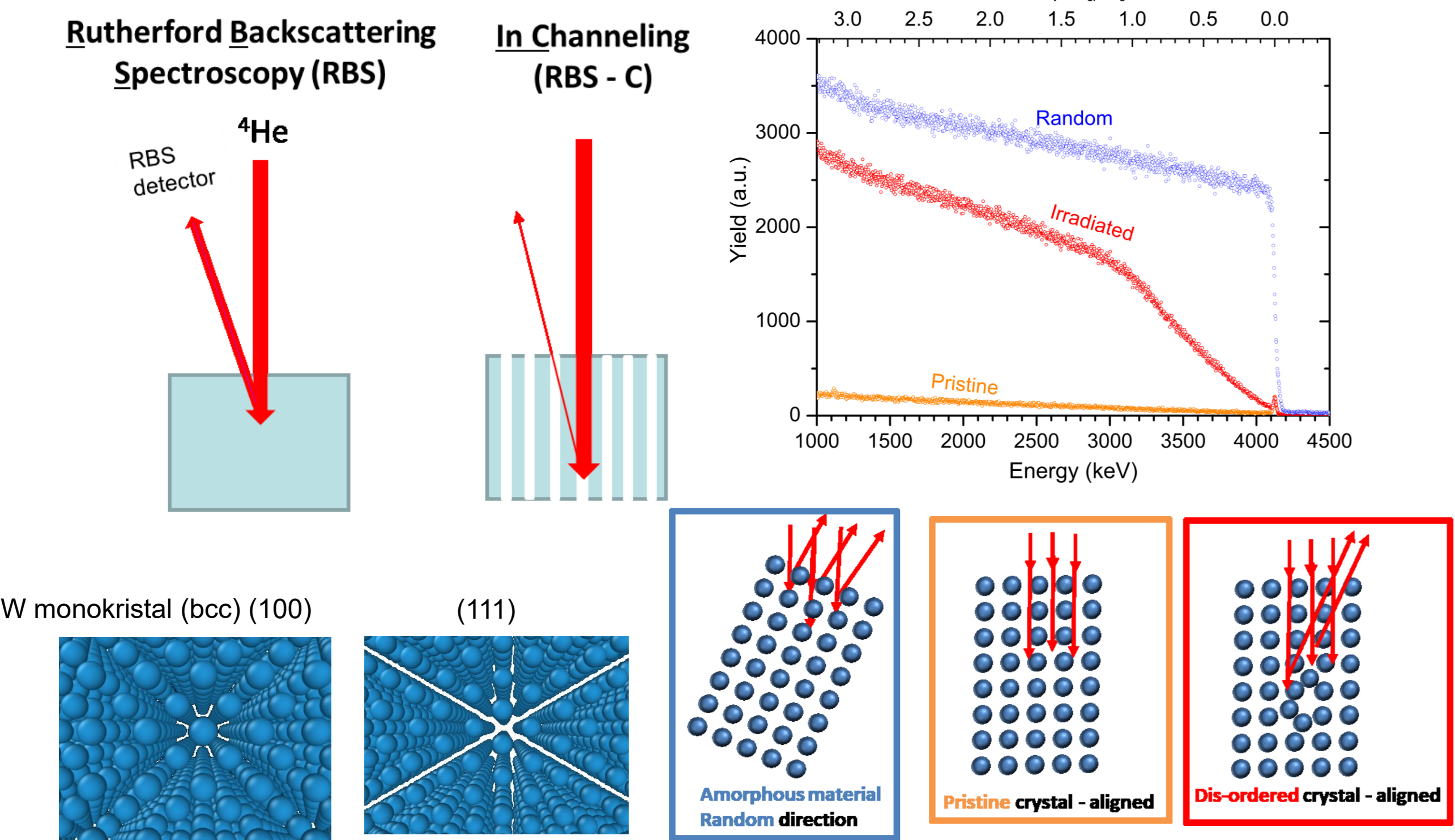
<sup>1</sup>Jožef Stefan Institute (JSI), Ljubljana, Slovenia, <sup>2</sup>Max-Planck-Institut für Plasmaphysik (IPP), Garching, <sup>3</sup>Department of Physics, University of Helsinki, Helsinki, Finland <sup>4</sup>Center for Micro Analysis of Materials (CMAM), Madrid, Spain <sup>5</sup>Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (HZDR), Rossendorf, Germany



KONFOR, Poster 41

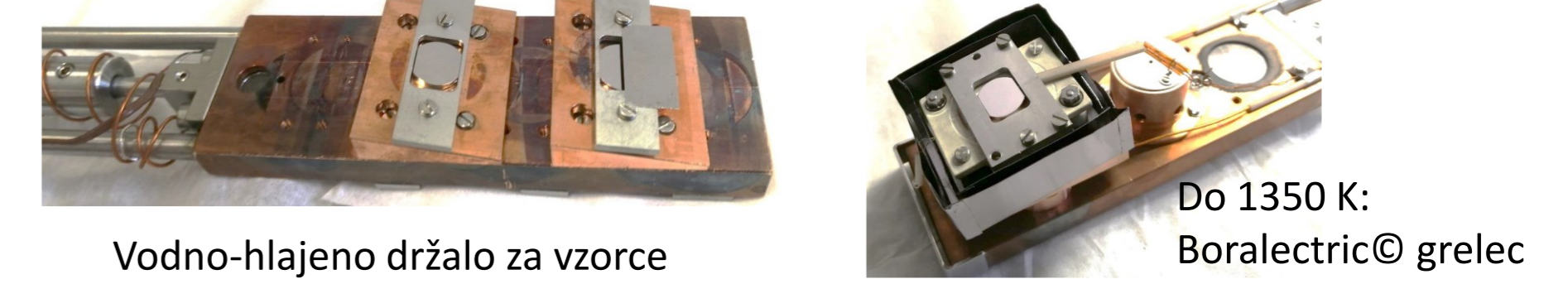
## Uvod

Ionska metoda Rutherfordovova spektroskopija povratno sipanih delcev v konfiguraciji kanaliziranja (RBS-C) je dobro uveljavljena metoda za raziskovanje kristalne strukture v monokristalih. Še posebej pa je uporabna za preučevanje napak v kristalni rešetki in razvoja teh napak, ki jih povzročajo obsevanje z visokoenergijskimi ioni ali nevtroni. Za kvantifikacijo napak se meri sprememba v pridelku povratno sipanih lahkih ionov (<sup>4</sup>He) vzdolž določene kristalografske smeri [1].

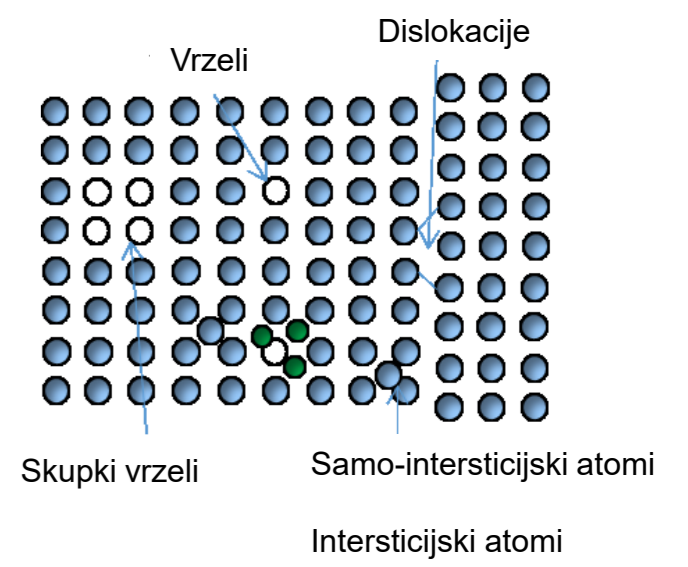


## Priprava vzorcev in kreacija poškodb

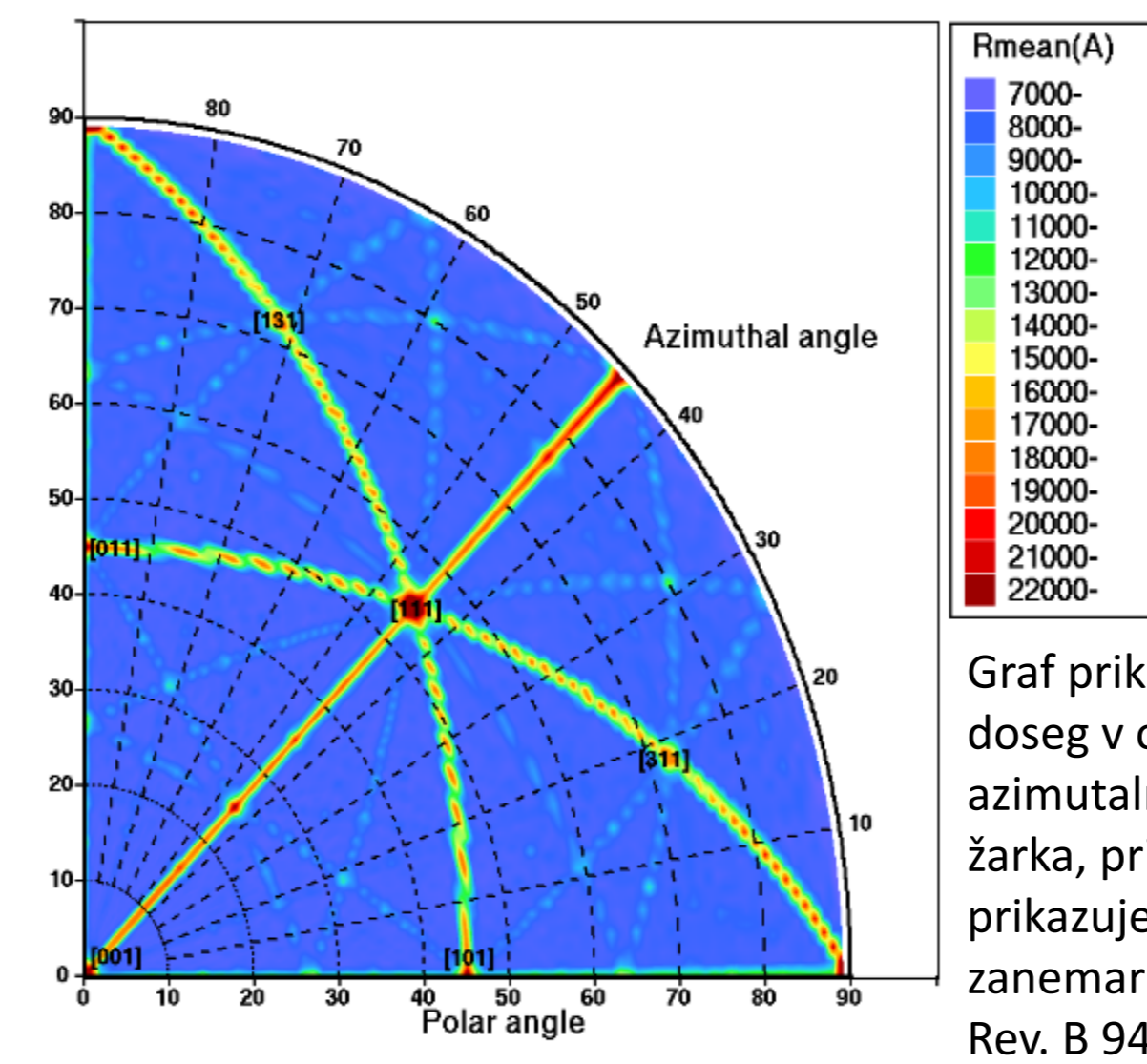
- W (111) in W(100) monokristali (Surface Preparation Laboratory B.V.) polirani in pregreti na 2350 K za 5 min v UHV.
- Defekte smo ustvarili z obsevanjem z 10.8 MeV W<sup>3+</sup> ioni. Vzorec je bil nagnjen za 7° in obrnjen za 11°, da bi se zmanjšalo kanaliziranje.



Vzorci	Pričakovan tip poškodb po [2]
78f	"Zelo poškodovan standard": 0.2 dpa, 290K
78g	"vrzeli": 0.02 dpa, 290 K
78c	"Majhni skupki vrzeli": 0.02 dpa, 800 K
78b	"Veliki skupki vrzeli": 0.2 dpa, 800 K

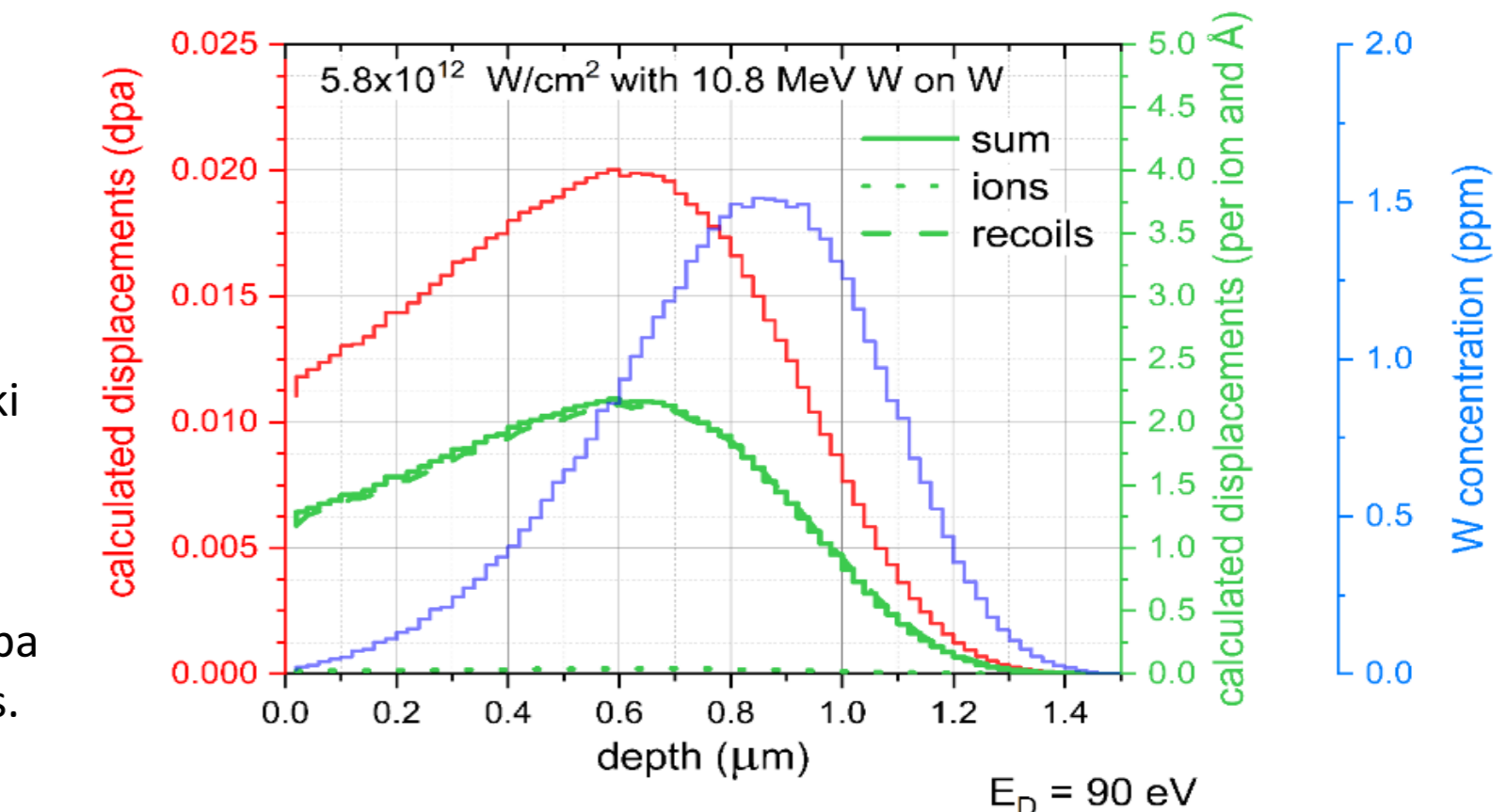


Povprečen doseg 10 MeV W ionov glede na vpadni kot



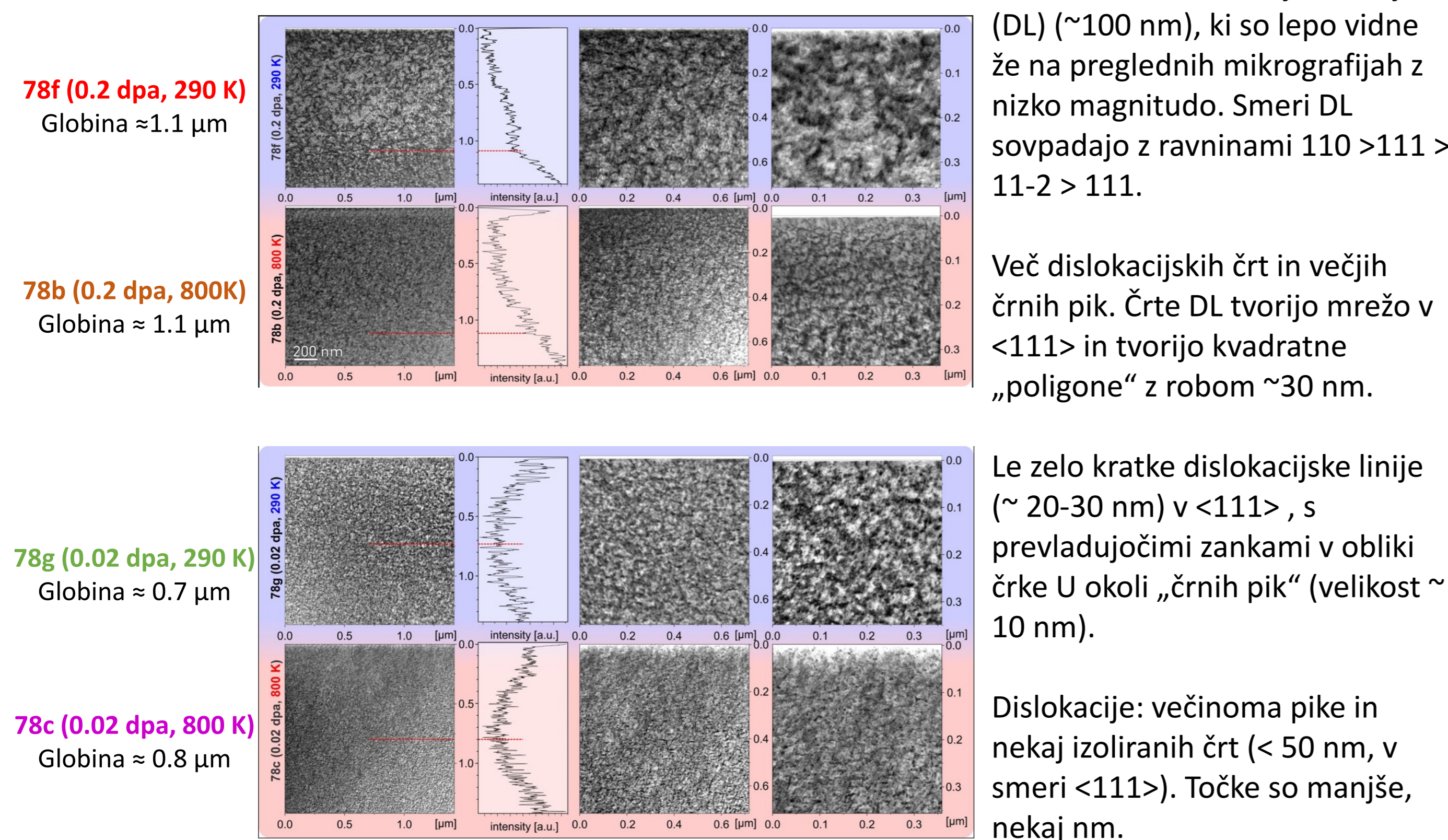
Graf prikazuje povprečni projicirani ionski doseg v odvisnosti od polarne in azimutalne vstopnega kota ionskega žarka, pri čemer rdeča in oranžna barva prikazujeta močno kanaliziranje, modra pa zanemarljivo. Izračun je narejen po [Phys. Rev. B 94, 214109 (2016)].

Izračun porazdelitve poškodb v materialu s SRIM programom



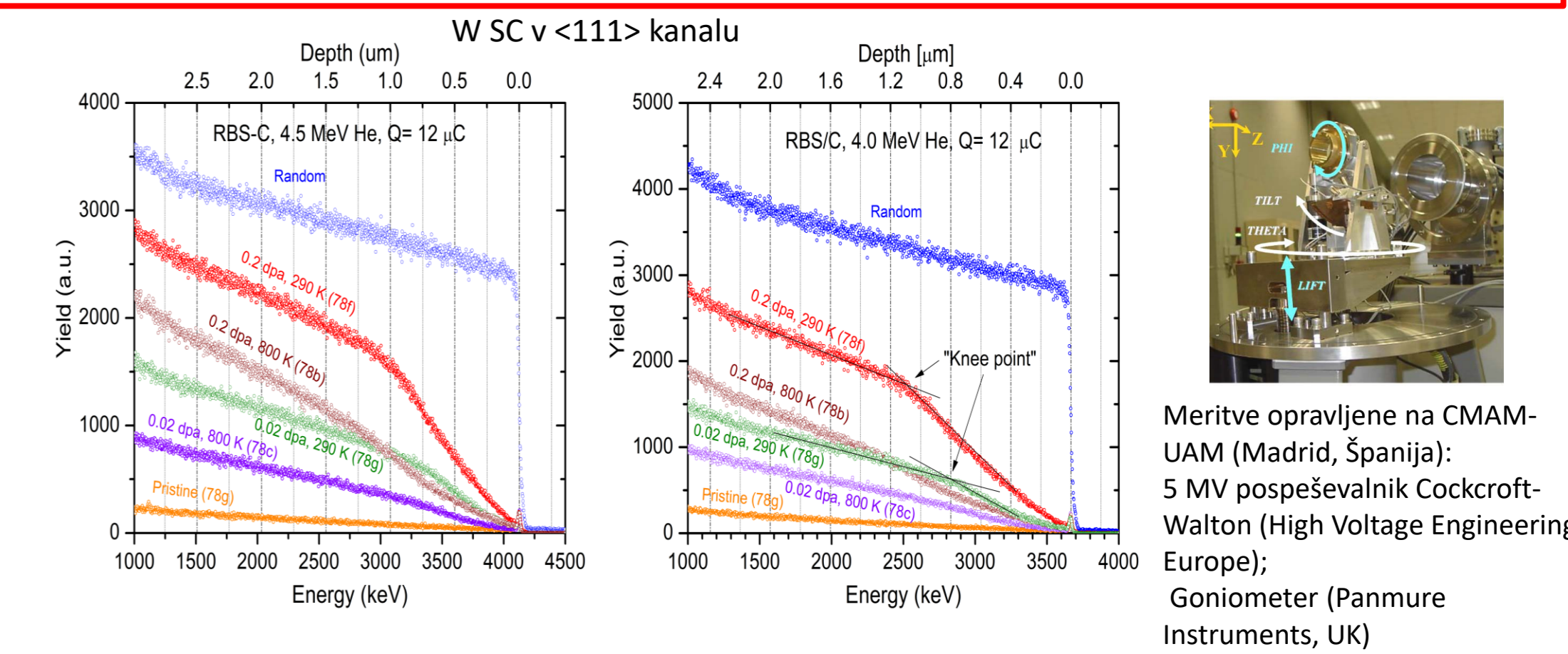
## Rezultati

### Presevna elektronska mikroskopija (TEM)

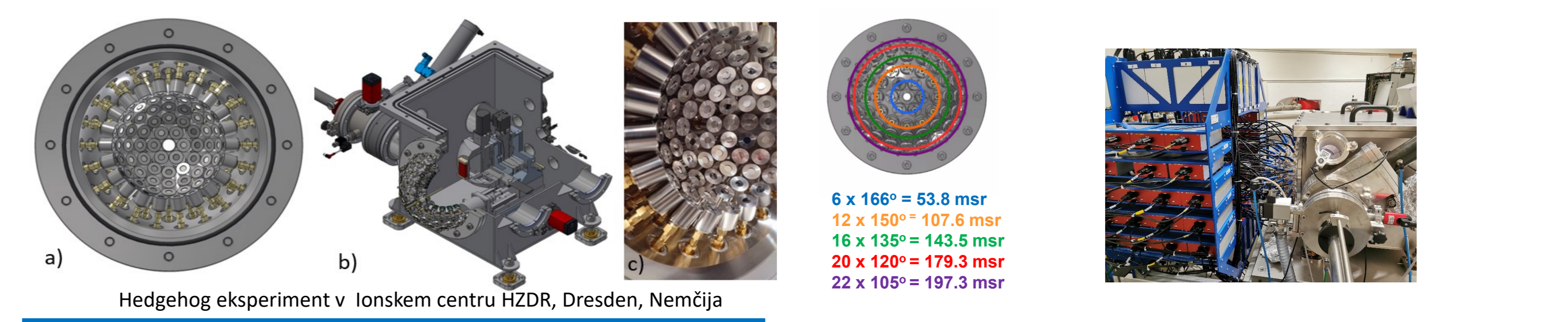


### Rutherfordova spektroskopija povratno sipanih delcev v kanaliziranem načinu (RBS-C)

- Multi-energijska RBS-C analiza vzdolž <111> smeri
- Meritev pri štirih energijah <sup>4</sup>He žarka: 4.5, 4.0, 3.5, in 3.0 MeV
- W (111) monokristali: Obsevani z W ioni.
- Odziv signala induciranih strukturnih poškodb v odvisnosti od energije primarnega žarka daje pomembne informacije o razširjenosti napak (nepovezane ali razširjene napake) [1,3].

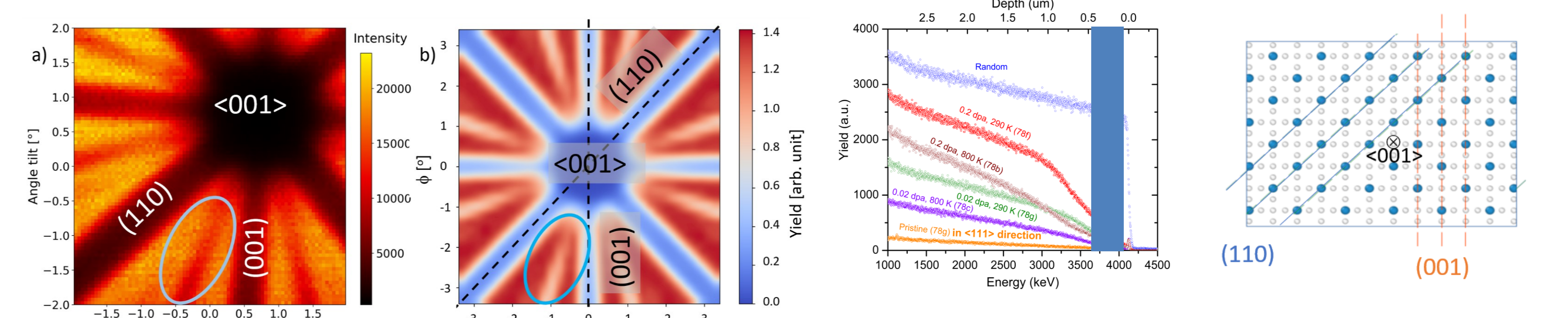


### 2D mape RBS-C pridelka merjeni na Hedgehog eksperimentu.

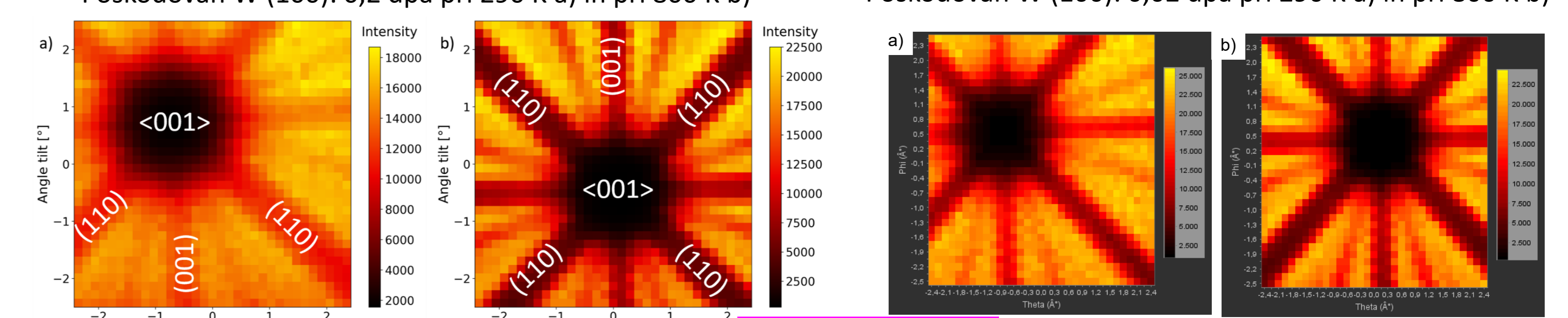


W (100) monokristali: Obsevani z W ioni.

### Izmerjena a) in simulirana b) 2D mapa RBS pridelka v načinu kanaliziranja



Poškodovan W (100): 0,2 dpa pri 290 K a) in pri 800 K b) Poškodovan W (100): 0,02 dpa pri 290 K a) in pri 800 K b)

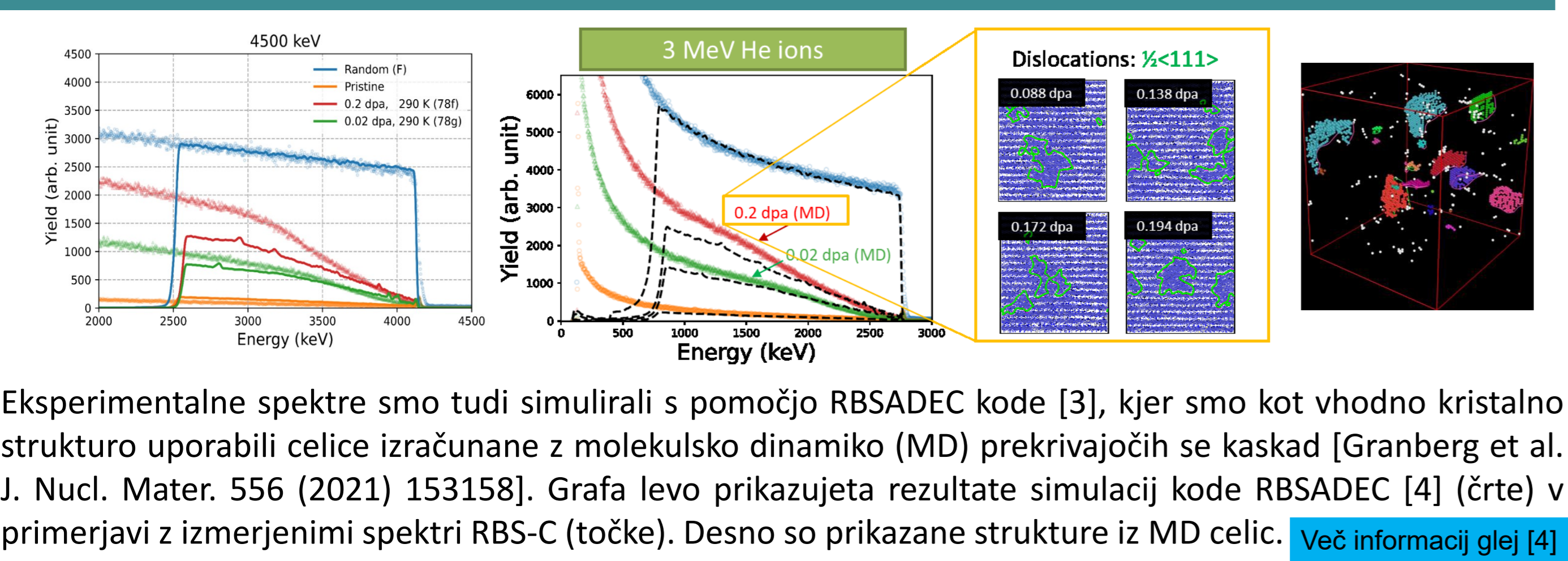


Za več informacij glej [5]

## Zaključek

Izmerili smo pridelke povratno sipanih ionov v monokristalu volframa W(100) ter jih primerjali s simulacijami in dobili zelo dobro ujemanje. V namen preučevanja napak v kristalni rešetki smo izmerili tudi spektre ter pridelke povratno sipanih ionov v monokristalih W(111) in W(100), ki so bili predhodno obsevani z 10,8 MeV ioni volframa pri dveh različnih dozah in temperaturah. Napake povzročene z obsevanjem z W ioni smo preučevali s kombinacijo eksperimentalnih in simulacijskih metod. Izkaže se da je metoda primerjave izmerjenih RBS-C spektrov s simuliranimi način, ki omogoča direktno validacijo najnovejših modelov in simulacij.

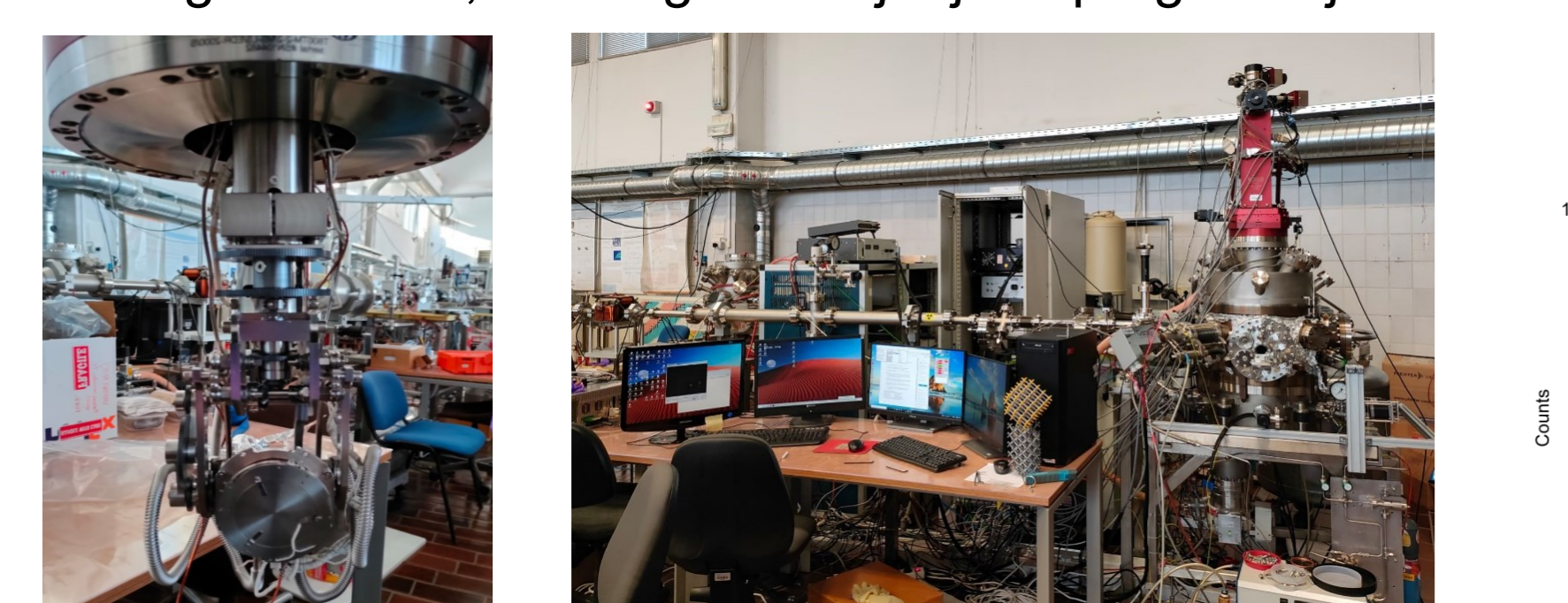
### RBSADEC simulacija z vhodno strukturo dobljeno s pomočjo izračunov Molekulske Dinamike (MD)



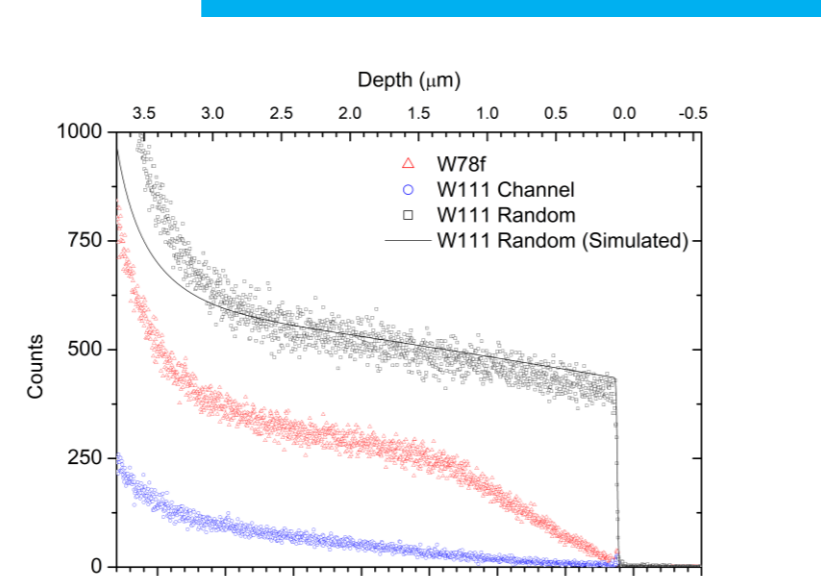
Eksplozivne spektre smo tudi simulirali s pomočjo RBSADEC kode [3], kjer smo kot vhodno kristalno strukturo uporabili celice izračunane z molekulske dinamiko (MD) prekrivajočih se kaskad [Granberg et al. J. Nucl. Mater. 556 (2021) 153158]. Grafa levo prikazujeta rezultate simulacij kode RBSADEC [4] (črte) v primerjavi z izmerjenimi spektri RBS-C (točke). Desno so prikazane strukture iz MD celic. Več informacij glej [4]

### RBS-C metoda na IJS, F2 pospeševalnik

6-osni goniometer, ki omogoča hlajenje in pregrevanje vzorcev



### Iščemo doktorskega študenta/ko



Raziskave potekajo v okviru fuzijskih raziskav. Volfram bo namreč material, ki bo izpostavljen plazmi v bodočih fuzijskih reaktorjih, vendar pa bo njegova kristalna rešetka v prihodnjem jedrskem okolju močno spremenjena zaradi napak, ki jih bodo povzročili nevtroni z energijo 14 MeV, ki izhajajo iz D-T fuzijske reakcije. Nastale napake bodo vplivale na fizikalne lastnosti materiala, zato je pomembno da jih razumemo.

## Reference

- [1] Feldman et al., Academic Press, San Diego, (1982), pp. 88–116.
- [2] Hu et al., J. Nucl. Mater. 556, (2021) 153175.
- [3] Zhang et al., Phys. Rev. E 94, (2016) 043319.
- [4] Markelj et al., Acta Materialia 263 (2024) 119499.
- [5] Markelj et al., Nucl. Mater. Energ. 39 (2024) 101630.



This work has been carried out within the framework of the EUROfusion Consortium, funded by the European Union via the Euratom Research and Training Programme (Grant Agreement No 101052200 – EUROfusion). Views and opinions expressed are however those of the author(s) only and do not necessarily reflect those of the European Union or the European Commission. Neither the European Union nor the European Commission can be held responsible for them.