

А. С. Шірінян*, Ю. С. Білогородський, О. М. Кріт

Інститут прикладної фізики НАН України, Суми, Україна

*Відповідальний автор: aramshirinyan@ukr.net

ФАЗОВА СТАБІЛЬНІСТЬ СФЕРИЧНИХ НАНОЧАСТИНОК ЗАЛІЗА ПІД РАДІАЦІЙНИМ НАСИЧЕННЯМ ВАКАНСІЯМИ

Запропоновано новий термодинамічний підхід до фазової стабільності нанорозмірного матеріалу під дією опромінення з урахуванням вільної енергії Гіббса фазоутворення та зародження нової фази. Визначено вплив дисперсності порошку та насичення вакансіями на радіаційну стійкість і фазові зміни сферичних наночастинок заліза при опроміненні. У роботі показано можливість радіаційно-індукованого α -Fe \rightarrow γ -Fe поліморфного переходу, а також визначено зони радіаційної стабільності наночастинок заліза. Показано, що конкуренція між енергією накопичених вакансій у частинці, об'ємною енергією фазового перетворення та поверхневою енергією частинки відповідає за специфічну поведінку опроміненого нанокристалічного заліза.

Ключові слова: опромінення, радіаційна стабільність, насичення вакансіями, наночастинка заліза, фазовий перехід, термодинаміка, енергія Гіббса.

A. S. Shirinyan*, Yu. S. Bilogorodsky, O. M. Krit

Institute of Applied Physics, National Academy of Sciences of Ukraine, Sumy, Ukraine

*Corresponding author: aramshirinyan@ukr.net

PHASE STABILITY OF SPHERICAL FERRUM NANOPARTICLES UNDER RADIATION SATURATION WITH VACANCIES

A new thermodynamic approach for phase stability of a nanoscale material under irradiation taking into account Gibbs free energy of phase formation and nucleation is proposed. The influence of powder dispersion and vacancy saturation on the radiation stability and phase changes of spherical Ferrum nanoparticles during irradiation is determined. The paper shows the possibility of a radiation-induced α -Fe \rightarrow γ -Fe polymorphic transition, and also defines the radiation stability zones of Ferrum nanoparticles. It is shown that the competition between the energy of the accumulated vacancies in the particle, the bulk energy of the phase transformation, and the surface energy of the particle is responsible for the specific behavior of irradiated nanocrystalline Ferrum.

Keywords: irradiation, radiation stability, vacancy saturation, Ferrum nanoparticle, phase transition, thermodynamics, Gibbs energy.

REFERENCES

1. A. Meldrum, L.A. Boatner, R.C. Ewing. Nanocrystalline Zirconia Can Be Amorphized by Ion Irradiation. *Phys. Rev. Lett.* **88** (2001) 025503.
2. K.E. Sickafus et al. Radiation damage effects in cubic-stabilized zirconia irradiated with 72 MeV I⁺ ions. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **141** (1998) 358.
3. T.D. Shen. Radiation Tolerance in a Nanostructure: Is smaller better? *Nucl. Inst. Meth. Phys. Res. B* **266** (2008) 921.
4. J. Hohl et al. Thermodynamic stabilization of nanocrystalline aluminium. *J. Mater. Sci.* **56** (2021) 14611.
5. P.K. Suri et al. Ion irradiation induced phase transformation in gold nanocrystalline films. *Scientific Reports* **10** (2020) 17864.
6. L.T. Belkacemi et al. Radiation-induced bcc-fcc phase transformation in a Fe-3%Ni alloy. *Acta Materialia* **161** (2018) 61.
7. A. Kozlovskiy, D. Shlimas, M. Zdorovets. Investigation of the effect of ionizing radiation on the structural and conductive characteristics of Ni nanostructures. *Vacuum* **163** (2019) 103.
8. Q. Wan et al. Grain size dependence of the radiation tolerances of nano-amorphous Ti-Si-N composite coatings. *Applied Surface Science* **466** (2019) 179.
9. R.A. Andrievski. Nanostructures under extremes. *Phys. Uspekhi* **57**(10) (2014) 945.
10. A. Bhattacharya, S.J. Zinkle. Cavity Swelling in Irradiated Materials. In: *Comprehensive Nuclear Materials*. 2nd ed. Vol. 1 (Oxford: Elsevier, 2020) p. 406.
11. A.D. Brailsford, R. Bullough. The rate theory of swelling due to void growth in irradiated metals. *J. Nucl. Mater.* **44** (1972) 121.

12. M. Rose, A.G. Balogh, H. Hahn. Instability of irradiation induced defects in nanostructured materials. [Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B 127- 128 \(1997\) 119.](#)
13. A.S. Shirinyan et al. Size-dependent hysteresis and phase formation kinetics during temperature cycling of metal nanopowders. [J. Phys.: Condens. Matter 23 \(2011\) 245301.](#)
14. M. Doyama, J.S. Koehler. The relation between the formation energy of a vacancy and the nearest neighbor interactions in pure metals and liquid metals. [Acta Metall. 24\(9\) \(1976\) 871.](#)
15. N. Saunders, A.P. Miodownik. *CALPHAD: Calculation of Phase Diagrams: a Comprehensive Guide* (New York: Elsevier Science Inc, 1998) 479 p.
16. J.W. Christian. *Theory of Transformation in Metals and Alloys*. 1st ed. (New York: Pergamon Press, 1965) 1200 p.
17. N. Mejai et al. Depth-dependent phase change in Gd₂O₃ epitaxial layers under ion irradiation. [Applied Physics Letters 107\(13\) \(2015\) 131903.](#)

Надійшла/Received 12.11.2022