ПРЕВОД НА РЕЗЮМЕТАТА ОТ ПУБЛИКАЦИИТЕ

ЗА УЧАСТИЕ В КОНКУРСА ЗА ДОЦЕНТ
на
гл. ас. д-р Евгени Попов

1. Q. Xu, **E. Popov,** T. Troev, J. Zhang, Y. Dai, Positron lifetime calculation of vacancy clusters in tantalum containing hydrogen and helium, Journal of Nuclear Materials, Volume 506, Pages: 71-75, 2018.,
(Съответства на B1)

Abstract: Tantalum (Ta)-cladded tungsten (W) is predominantly used in a spallation target to obtain a high yield of neutrons. Investigation of changes in the mechanical properties and evolution of microstructures in Ta under irradiation of high-energy neutrons is essential to maintain the safety of the target of the spallation neutron source. In this study, the effects of helium (He) and hydrogen (H) on the positron lifetimes of vacancy clusters were examined. The calculation results indicate that the positron lifetime of perfect Ta is 118.3 ps and the positron lifetime is 216.5 ps when single vacancies exist. The positron lifetime increases with increase in the number of vacancies in the vacancy cluster. The positron lifetime of single vacancies decreases to 191.7 ps when the vacancy contains an H atom, whereas it decreases to 158.6 ps when the vacancy contains a He atom. This shows that the effect of He on positron lifetime change is larger than that of H.

Изчисляване на времето на живот на позитроните в клъстери от ваканции в тантал, съдържащ водород и хелий

Резюме: Волфрам (W), обвит в тантал (Ta), се използва предимно в мишени за спалация с цел постигане на висок добив на неутрони. Изследването на промените в механичните свойства и еволюцията на микроструктурата на тантала при облъчване с високоенергийни неутрони е от съществено значение за поддържане на безопасността на мишената в източника на неутрони, работещ на принципа на спалацията. В настоящото изследване е проучено влиянието на хелия (He) и водорода (H) върху времето на живот на позитроните в клъстери от ваканции. Резултатите от изчисленията показват, че времето на живот на позитроните в идеален кристал от Ta е 118,3 ps, а при наличие на единични ваканции то е 216,5 ps. Времето на живот на позитроните нараства с увеличаване на броя на ваканциите в клъстера. При единичните ваканции времето на живот на позитроните намалява до 191,7 ps, когато ваканцията съдържа водороден атом (H), и до 158,6 ps, когато съдържа хелиев атом (He). Това показва, че влиянието на He върху промяната във времето на живот на позитроните е по-силно от това на H.

2. Samir F. Samadov, Nguyen V.M. Trung, Alexander A. Donkov, Aleksey A. Sidorin, Oleg S. Orlov, Ertuğrul Demir, Oktay A. Samedov, Sakin H. Jabarov, Nguyen V. Tiep, **Evgeni P. Popov***, Matlab N. Mirzayev, Investigating the impact of gamma irradiation and temperature on vacancy formation and recombination in ZrB_2 ceramics using positron annihilation spectroscopy, Journal of Nuclear Materials, Volume 599, (2024), 155242
(Съответства на B2)

Abstract: In the presented work, the mechanism of evolution of defects in the crystalline structure after irradiation with 1500 kGy and 3000 kGy absorption dose at room temperature in a ^{60}Co gamma source was studied, using 43 nm sized ZrB_2 crystals. The crystals were characterized by a purity of 99.9%, a powder density of 0.23 g/cm3, a specific surface area of 80 to 120 m2/g, and a hexagonal P6/mmm spatial structure. The dose rate applied was 6.05 Gy/s, with 1.17 and 1.37 MeV

energy lines. The effect of particles resulting from the decay of ^{22}Na radioactive isotope β^+ with an activity of 10.5 μCi, as well as gamma quanta with an energy of 1.27 MeV, on the core and valence electrons and vacancies in the crystal structure was studied using Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy (PALS) and Doppler broadening analysis methods. Additionally, the changes in the S and W parameters, which characterize the distribution of defects within the volume of the ZrB_2 crystal, were studied using the Doppler broadening method. For unannealed material, the positron lifetime τ_1 component varied between 174±2 ps and 181±1 ps. After annealing, the positron lifetime component τ_2 was decreased from 290±3 ps to 226±3 ps, and the intensity component I_2 increased from 17.49% to 40% depending on the radiation dose. The calculated values of the positron lifetime τ for one boron vacancy from ABINIT and MIKA packages were found to be 172 ps and 145 ps, respectively. The material was observed to satisfy the necessary functional conditions at gamma doses not exceeding 3000 kGy.

Изследване на влиянието на гама-облъчването и температурата върху образуването и рекомбинацията на ваканции в ZrB_2 керамика чрез спектроскопия на позитронна анихилация

Резюме: В настоящата работа е изследван механизмът на еволюция на дефектите в кристалната структура след облъчване с погълнати дози от 1500 kGy и 3000 kGy при стайна температура с използване на ^{60}Co гама-източник и ZrB_2 кристали с размер 43 nm. Кристалите се характеризират с чистота 99,9%, плътност на праха 0,23 g/cm³, специфична повърхностна площ от 80 до 120 m²/g и хексагонална пространствена структура P6/mmm. Приложената мощност на дозата е 6,05 Gy/s, с енергийни линии от 1,17 и 1,37 MeV. Чрез методите на спектроскопия на времето на живот на позитронна анихилация (PALS) и анализ на доплеровото разширение е изследвано въздействието на частиците, получени при β^+ разпадането на радиоактивния изотоп 22Na (с активност 10,5 μCi), както и на гама-квантите с енергия 1,27 MeV, върху ядрените и валентните електрони и ваканциите в кристалната структура. Допълнително, чрез метода на доплеровото разширение са изследвани промените в параметрите S и W, характеризиращи разпределението на дефектите в обема на ZrB_2 кристала. При необработения (неотгрят) материал компонентът на времето на живот на позитроните τ_1 варира между 174±2 ps и 181±1 ps. След отгряване компонентът на времето на живот τ_2 намалява от 290±3 ps на 226±3 ps, а интензитетният компонент I_2 нараства от 17,49% на 40% в зависимост от радиационната доза. Изчислените стойности на времето на живот на позитроните τ за една ваканция на бор, получени чрез софтуерните пакети ABINIT и MIKA, са съответно 172 ps и 145 ps. Установено е, че материалът отговаря на необходимите експлоатационни изисквания при гама-дози, ненадвишаващи 3000 kGy.

3. Abiyev, A.S., Samadov, S.F., Mirzayev, M.N., Huseynov, E.M., Sidorin, A.A., Orlov, O.S., Samedov, O.A., Aliyev, Y.I., Huseynov, H.J., **Popov, E.**. Defect formation analysis in gamma-irradiated titanium nitride nanocrystals: predictions from positron annihilation studies, Journal of Nanoparticle Research, **26**, 156 (2024),
(Съответства на В3)

Abstract: The study investigates the effect of gamma radiation on defect formation in 20 nm titanium nitride (TiN) nanocrystals through positron annihilation lifetime (PALS) and Doppler broadening spectroscopy (DBS) studies. PALS studies were performed at atmospheric pressure, and DBS studies were performed under high vacuum conditions of 10−9 Torr. Gamma irradiation of the samples was performed in MRX-25 gamma device using 60Co isotope with 1.27 MeV energy at absorption doses of 50, 200, 900, and 3500 kGy. Two lifetime components were observed in the PALS results. Under the influence of gamma radiation, τ_1 increases from 170 to 179 ps, and τ_2 increases from 325 to 398 ps. As the radiation dose increases, the intensity corresponding to the short lifetime component I_1 increases (from 75.6 to 81.2%), and I_2 decreases (from 24.4 to 18.7%).

PALS calculations were performed using the MICA package and a lifetime of 171 ps was determined for the 1Ti vacancy. With the help of Doppler broadening spectroscopy, information about the change and type of defects in the TiN nanocrystal along the volume was behavior of by studying S and W parameters. The results showed that the functionality of the material is optimal at gamma radiation doses not exceeding 3000 kGy.

Анализ на образуването на дефекти в нанокристали от титанов нитрид, облъчени с гама-лъчение: прогнози въз основа на изследвания чрез анихилация на позитрони

Резюме: В настоящото изследване се разглежда влиянието на гама-лъчението върху образуването на дефекти в нанокристали от титанов нитрид (TiN) с размер 20 nm, като се използват методите за измерване на времето на живот при анихилация на позитрони (PALS) и спектроскопия на Доплерово разширение (DBS). Измерванията по метода PALS са проведени при атмосферно налягане, а тези по метода DBS – във вакуумна среда с налягане 10^{-9} Torr. Гама-облъчването на образците е извършено с помощта на гама-уредба MRX-25 и източник на изотоп ^{60}Co (енергия 1,27 MeV) при погълнати дози от 50, 200, 900 и 3500 kGy. В резултатите от PALS измерванията са установени два компонента на времето на живот. Под въздействието на гама-лъчението стойността на τ_1 нараства от 170 на 179 ps, а тази на τ_2 – от 325 на 398 ps. С увеличаване на дозата на облъчване интензитетът, съответстващ на компонента с кратко време на живот (I_1), се повишава (от 75,6 на 81,2%), докато интензитетът I_2 намалява (от 24,4 на 18,7%). Изчисленията по метода PALS са направени с помощта на софтуерния пакет MICA, като е определено време на живот от 171 ps за ваканция в титановата подрешетка (Ti-ваканция). Чрез спектроскопията на Доплерово разширение е получена информация за промените и вида на дефектите в обема на нанокристалите TiN въз основа на анализ на параметрите S и W. Резултатите показват, че материалът запазва оптимални функционални характеристики при дози на гама-облъчване, ненадвишаващи 3000 kGy.

4. D.Neov, L.Slavov, A.A. Donkov, M.N.Mirzayev, **E.Popov**, E.Demir, K.Siemek, N. Djourelov, V.A.Turchenko, Z.A.Sharipov, P.Horodek, A.I.Beskrovnyi, A.H.Valizade, O.A.Samedov, A.Vladescu, K.Krezhov, I.Felicia, Structural study of W2B obtained via me chanical alloying of W, B_4C, TiC and graphite before and after He ions irradiation, Nuclear Materials and Energy, Volume 31, June 2022, 101201,
(Съответства на В4)

Abstract: Elemental powders of W, B_4C, TiC and C (graphite) in percentage weight ratio of W-6 wt % B_4C–2 wt% TiC–1 wt% C are used as precursors in mechanical alloying process aimed at producing tungsten-based material. The composition of the obtained material is nearly single-phase W_2B (~98%) with small additions of WB and TiC (<2%), unveiled by XRD analysis. Irradiation with 2.5 MeV helium ions to a fluence of 5.0×10^{20} ion/cm^2 was performed and the induced radiation damage was assessed. The XRD data unveiled reduction in size of the grains from 300 nm to 260 nm upon the irradiation. It is observed that the irradiation had negligible effect on the W_2B phase content, while the WB phase content increased by 0.74% and TiC phase content decreased with 0.71% upon irradiation. Raman spectral analysis showed that not only graphite's carbon is affected by the irradiation, but also the titanium bonded carbon in TiC underwent changes, resulting in development of non-stoichiometric TiC. Positron annihilation spectroscopy is employed for investigating the presence of intrinsic defects and their evolution upon irradiation. Based on the analysis of all the obtained results, we contemplate that the detected WB phase most probably belongs to the grain boundaries of W_2B grains. The irradiation to a fluence of 5.0×10^{20} ion/cm^2 did not cause chemical interaction of tungsten boride phases with the carbon species of the material, which would have resulted in the appearance of new phases.

Структурно изследване на W_2B, получен чрез механично легиране на W, B_4C, TiC и графит, преди и след облъчване с хелиеви йони

Резюме: Елементарни прахове от W, B_4C, TiC и C (графит) със съотношение на тегловите проценти W – 6 тегл. % B_4C – 2 тегл. % TiC – 1 тегл. % C са използвани като изходни материали в процеса на механично легиране за получаване на материал на основата на волфрам. Съставът на получения материал е предимно еднофазен W_2B (~98%) с малки примеси от WB и TiC (<2%), установени чрез рентгенофазов анализ (XRD). Извършено е облъчване с хелиеви йони с енергия 2,5 MeV до флуенс 5,0 × 10^{20} йона/cm^2 и е оценено индуцираното радиационно увреждане. Данните от XRD анализа показват намаляване на размера на зърната от 300 nm на 260 nm след облъчването. Установено е, че облъчването има пренебрежим ефект върху съдържанието на фазата W_2B, докато съдържанието на фазата WB се увеличава с 0,74%, а това на фазата TiC намалява с 0,71%. Рамановият спектрален анализ показва, че облъчването влияе не само върху въглерода от графита, но и върху въглерода, свързан с титан в TiC, което води до образуване на нестехиометричен TiC. За изследване на наличието на собствени дефекти и тяхната еволюция при облъчване е използвана спектроскопия на позитронна анихилация. Въз основа на анализа на всички получени резултати се предполага, че установената фаза WB най-вероятно се намира по границите на зърната на W_2B. Облъчването до флуенс 5,0 × 10^{20} йона/cm^2 не предизвиква химично взаимодействие между фазите на волфрамовия борид и въглеродните компоненти на материала, което би довело до появата на нови фази.

5. Ertugrul Demir, **Evgeni Popov**, Matlab Mirzayev, Lyubomir Slavov, Dimitar Neov, Alexander Donkov, Krzysztof Siemek, Tatiana Vershinina, Ivaylo Genov, Anatolii Beskrovnyi, Vladimir Skuratov, Kiril Krezhov, Pawel Horodek, Fadahat Mamedov, Aygul Valizade, Ozlem Vural, Effects of swift heavy ions at different fluencies on WC-6Co hard metal alloy, International Journal of Refractory Metals and Hard Materials, Volume 106, August 2022, 105865,
(Съответства на B5)

Abstract: Tungsten carbide hard metal alloy with 6% by weight cobalt was studied before and after irradiation at different fluencies with 167 MeV ^{132}Xe ions. Raman spectroscopy, X-ray diffraction, neutron diffraction and positron lifetime spectroscopy were employed in order to assess the microstructural evolution in the material upon irradiation fluence increase. Analysis of the Raman spectrum for the pristine, non-irradiated material unveils that the surface is composed of a graphite-like phase and highly oxidized tungsten atoms spread in the carbon matrix. All characteristic peaks of tungsten carbide (WC) and possible cobalt phases are either missing or strongly overlapped in all Raman spectra. Bonding between tungsten and oxygen atoms broke upon irradiation and total deoxidation of the surface is detected for the two highest fluencies investigated at 5 × 10^{13} ions/cm^2 and 3,83 × 10^{14} ions/cm^2. Increasing the irradiation dose causes amorphization of the carbon phase on the surface accompanied by “up and down” trend of change in carbon cluster size. The Raman spectra analysis also unveils, that molecular nitrogen (N_2) from the atmosphere penetrates the carbon matrix upon irradiation. The results from the X-ray and neutron diffraction reveal that the main phase in the material is δ-WC and also give information about changes of the lattice parameters with increasing fluence. Reorganization of the induced point defects to dislocation defects as a function of the irradiation dose is discussed, but no phase transition of the main δ-WC phase is detected. Steady increase of compressive internal stress with increasing irradiation dose is noted by XRD. The tendency is not monotonic and the stress leans towards saturation at the highest fluence, with the highest value of −5.26 GPa. The Positron lifetime spectroscopy measurements show the presence of short lifetime component ranging from 170 ps to 190 ps, interpreted as small vacancy clusters. The intensities of the different positron lifetime components vary with the irradiation dose non-monotonically.

Влияние на бързи тежки йони при различни флуенси върху твърдосплавен материал WC-6Co

Резюме: Изследван е твърдосплавен материал от волфрамов карбид с 6 тегловни процента кобалт преди и след облъчване с йони ^{132}Xe (енергия 167 MeV) при различни флуенси. За оценка на микроструктурните изменения в материала при увеличаване на флуенса на облъчване са използвани Раманова спектроскопия, рентгенова дифракция, неутронна дифракция и спектроскопия на времето на живот на позитрони. Анализът на Рамановия спектър на изходния, необлъчен материал разкрива, че повърхността се състои от графитоподобна фаза и силно окислени волфрамови атоми, разпределени във въглеродната матрица. Всички характерни пикове на волфрамовия карбид (WC) и на възможните кобалтови фази липсват или са силно застъпени във всички Раманови спектри. При облъчването връзките между волфрамовите и кислородните атоми се разрушават, като се наблюдава пълно деоксидиране на повърхността при двете най-високи изследвани флуенси: 5×10^{13} йона/cm² и $3{,}83 \times 10^{14}$ йона/cm². Увеличаването на дозата на облъчване води до аморфизация на въглеродната фаза на повърхността, придружена от тенденция за промяна на размера на въглеродните клъстери тип „нагоре-надолу“. Анализът на Рамановите спектри също така разкрива, че молекулярен азот (N_2) от атмосферата прониква във въглеродната матрица по време на облъчването. Резултатите от рентгеновата и неутронната дифракция показват, че основната фаза в материала е δ-WC, и предоставят информация за промените в параметрите на кристалната решетка с увеличаване на флуенса. Обсъжда се преобразуването на индуцираните точкови дефекти в дислокационни дефекти в зависимост от дозата на облъчване, но не е установено фазово превръщане на основната фаза δ-WC. Чрез рентгенова дифракция (XRD) се отчита постепенно нарастване на вътрешните напрежения на натиск с увеличаване на дозата на облъчване. Тази тенденция не е монотонна, като напрежението клони към насищане при най-високия флуенс, достигайки максимална стойност от -5,26 GPa. Измерванията чрез спектроскопия на времето на живот на позитрони показват наличие на компонента с кратко време на живот в диапазона 170–190 ps, интерпретирана като малки ваканционни клъстери. Интензитетите на различните компоненти на времето на живот на позитроните варират немонотонно в зависимост от дозата на облъчване.

6. Matlab N Mirzayev, Alexander A Donkov, **Evgeni Popov**, Ertugrul Demir, Sakin H Jabarov, Levan S Chkhartishvili, Samuel A Adeojo, Aleksandr S Doroshkevich, Alexey A Sidorin, Asif G Asadov, Thabsile T Thabethe, Mayeen U Khandaker, Sultan Alamri, Hamid Osman, Alex V Trukhanov, Sergei V Trukhanov, Modeling and X-ray Analysis of Defect Nanoclusters Formation in B_4C under Ion Irradiation, Nanomaterials, 2022, 12(15), 2644,
(Съответства на B6)

Abstract: In the presented work, B_4C was irradiated with xenon swift heavy ions at the energy of 167 MeV. The irradiation of the substrate was done at room temperature to a fluence of 3.83×10^{14} ions/cm^2. The samples were then analyzed with the X-ray diffraction technique to study the structural modification, as it can probe the region of penetration of xenon atoms due to the low atomic number of the two elements involved in the material under study. The nano-cluster formation under ion irradiation was observed. Positron lifetime (PLT) calculations of the secondary point defects forming nanoclusters and introduced into the B_4C substrate by hydrogen and helium implantation were also carried out with the Multigrid instead of the K-spAce (MIKA) simulation package. The X-ray diffraction results confirmed that the sample was B_4C and it had a rhombohedral crystal structure. The X-ray diffraction indicated an increase in the lattice parameter due to the Swift heavy ion (SHI) irradiation. In B_{12}-CCC, the difference between τ with the saturation of H or He in the defect is nearly 20 ps. Under the same conditions with $B_{11}C$-CBC, there is approximately twice the value for the same deviation.

Моделиране и рентгенов анализ на образуването на дефектни наноклъстери в B_4C при йонно облъчване

Резюме: В представената работа материалът B_4C е облъчен с бързи тежки йони на ксенон с енергия 167 MeV. Облъчването на подложката е извършено при стайна температура до флуенс от 3,83 × 10^{14} йона/cm^2. След това пробите са анализирани чрез метода на рентгеновата дифракция за изследване на структурните изменения, тъй като този метод позволява да се анализира областта на проникване на ксеноновите атоми предвид ниските атомни номера на двата елемента, изграждащи изследвания материал. Наблюдавано е образуване на наноклъстери в резултат на йонното облъчване. Извършени са и изчисления на времето на живот на позитроните (PLT) за вторичните точкови дефекти, образуващи наноклъстери и въведени в подложката от B_4C чрез имплантиране на водород и хелий, като е използван симулационният пакет MIKA (Multigrid вместо K-spAce). Резултатите от рентгеновата дифракция потвърждават, че пробата представлява B_4C с ромбоедрична кристална структура. Данните от рентгеновата дифракция показват увеличение на параметъра на кристалната решетка вследствие на облъчването с бързи тежки йони (SHI). При структурата B_{12}-CCC разликата във времето на живот (τ) при насищане на дефекта с H или He е близо 20 ps. При същите условия, но за структурата $B_{11}C$-CBC, стойността на това отклонение е приблизително двойно по-голяма.

7. **E. Popov**, P. Staykov, K. Berovski, S. Peneva, N. Djourelov and T. Troev; Positron Momentum Calculation of Defects in α-Fe and Fe-Cr Containing Hydrogen and Helium; Journal of Physics: Conference Series 516 (2014) 012034.
(Съответства на B7)

Abstract: Lattice defects that contain hydrogen and helium in Fe and Fe-Cr have been studied by positron model calculations using Density Functional Theory (DFT) in its Local Density Approximation (LDA) implementation. It was found that the value of positron lifetime for perfect Fe lattice is 101.6 ps. and for mono vacancy is 176.6 ps. which a close to the experimental values. The calculated values of Positron Life-Time (PLT) for Fe-2.5% wt Cr is 104.7 ps., for Fe-5% wt Cr is 127.6 ps., for Fe-8% wt Cr is 128.9 ps. and for Fe-9% Cr is 128.2 ps. A correlation between the positron lifetime and H and He atom concentration has been established. The model calculations for PLT and Coincidence-Doppler-Broadening (CDB) for Fe-Cr containing vacations in the presence of different numbers of hydrogen and helium atoms will be presented.

Изчисляване на импулса на позитрони при дефекти в α-Fe и Fe-Cr, съдържащи водород и хелий

Резюме: Дефектите в кристалната решетка на Fe и Fe-Cr, съдържащи водород и хелий, са изследвани чрез моделни изчисления за позитрони, използващи теорията на функционала на плътността (DFT) в нейната реализация чрез приближението на локалната плътност (LDA). Установено е, че времето на живот на позитрона в идеална решетка на Fe е 101,6 ps, а при моновакансия – 176,6 ps, което е близо до експерименталните стойности. Изчислените стойности за времето на живот на позитрона (PLT) са: 104,7 ps за Fe-2,5 тегл.% Cr; 127,6 ps за Fe-5 тегл.% Cr; 128,9 ps за Fe-8 тегл.% Cr и 128,2 ps за Fe-9% Cr. Установена е зависимост между времето на живот на позитрона и концентрацията на водородни и хелиеви атоми. Представени са моделни изчисления за PLT и съвпадащо доплерово разширение (CDB) при Fe-Cr с ваканции в присъствието на различен брой водородни и хелиеви атоми.

8. **E.P. Popov**, A.N. Chernikov, A.I. Beskrovnyi, J. Waliszewski, M.N. Mirzayev, Cryostat for cooling samples in the study of low-temperature structural and magnetic phase transitions by neutron diffraction, Journal of Physics: Conference Series 1492 (1), 012054, 2020.

(Съответства на В8)

Abstract: A vertical cryostat was developed built around a Sumitomo RDK-101D cold head. The cryostat is intended for investigating the structure and phase transformations of different materials via neutron diffraction experiments on samples under high vacuum of up to 10^{-5} mbar. A working temperature of the sample close to 2 K was reached. The drift diameter of the head is 54 mm, making it possible to cool samples with a height of 55 mm and 15 mm in diameter. Test measurements were conducted and illustrative spectra were recorded on the example of a sample of $HoFeO_3$. The cryostat was designed and manufactured at the Frank Laboratory of Neutron Physics of the Joint Institute for Nuclear Research.

Криостат за охлаждане на образци при изследване на нискотемпературни структурни и магнитни фазови преходи чрез неутронна дифракция

Резюме: Разработен е вертикален криостат, базиран на охлаждаща глава Sumitomo RDK-101D. Криостатът е предназначен за изследване на структурата и фазовите превръщания на различни материали чрез експерименти с неутронна дифракция при условия на висок вакуум (до 10^{-5} mbar). Постигната е работна температура на образеца, близка до 2 K. Диаметърът на работната зона на главата е 54 mm, което позволява охлаждането на образци с височина 55 mm и диаметър 15 mm. Проведени са тестови измервания и са регистрирани илюстративни спектри с използване на образец от $HoFeO_3$. Криостатът е проектиран и изработен в Лабораторията по неутронна физика „Франк“ към Обединения институт за ядрени изследвания.

9. Mirzayev, M.N., Abiyev, A.S., Samedov, O.A., Demir E., **Popov, E.P**., Samadov, S.F., Structural evolution of zirconium diboride under gamma irradiation and thermal annealing, Journal of Alloys and Compounds, 2024, 1005, 175970,
(Съответства на Г1)

Abstract: Understanding the thermal properties and enhancing the performance of zirconium diboride (ZrB_2) under extreme conditions is crucial, especially given its role as a burnable absorber in nuclear fuel pellets and its potential applications in accident-tolerant fuels. This study explores the structural alterations of ZrB_2 crystals induced by gamma irradiation and subsequent thermal annealing. ZrB_2 crystals were exposed to absorption doses of 300 kGy, 1000 kGy, 1500 kGy, and 3000 kGy using a ^{60}Co gamma source, followed by thermal treatment at 1173 K under vacuum conditions. Also, Monte Carlo simulations were utilized to analyze the energy deposition and distribution of gamma quanta within the material during irradiation, highlighting Compton effects up to 0.23 MeV. X-ray diffraction analysis elucidated the impact of gamma radiation on ZrB_2 crystal lattice parameters, space group, and volume expansion coefficient. Post-irradiation analysis revealed a maximum degree of amorphization and investigated mechanisms governing lattice parameter expansion. Thermal annealing at 1173 K significantly enhanced crystallinity, reducing amorphization to 0.2 % at an absorption dose of 3000 kGy and facilitating the restoration of the crystal's columnar structure. This comprehensive investigation provides insights into the intricate interplay between gamma irradiation, thermal processing, and resulting structural changes in ZrB_2 nanocrystals, essential for applications in radiation-exposed environments.

Структурна еволюция на циркониевия диборид при гама-облъчване и термично отгряване

Резюме: Разбирането на термичните свойства и подобряването на експлоатационните характеристики на циркониевия диборид (ZrB_2) в екстремни условия е от решаващо значение, особено предвид ролята му на изгарящ абсорбер в таблетките ядрено гориво и

потенциалното му приложение в устойчиви на аварии горива. Настоящото изследване разглежда структурните изменения в кристалите на ZrB_2, предизвикани от гама-облъчване и последващо термично отгряване. Кристалите на ZrB_2 са подложени на погълнати дози от 300 kGy, 1000 kGy, 1500 kGy и 3000 kGy с използване на гама-източник с ^{60}Co, последвано от термична обработка при 1173 K във вакуум. Освен това са използвани симулации по метода на Монте Карло за анализ на отлагането на енергия и разпределението на гама-квантите в материала по време на облъчването, като се акцентира върху ефектите на Комптън при енергии до 0,23 MeV. Рентгеноструктурният анализ изяснява влиянието на гама-лъчението върху параметрите на кристалната решетка, пространствената група и коефициента на обемно разширение на ZrB_2. Анализът след облъчването разкрива максимална степен на аморфизация и изследва механизмите, определящи разширението на параметрите на решетката. Термичното отгряване при 1173 K значително подобрява кристалността, като намалява аморфизацията до 0,2% при погълнатата доза от 3000 kGy и способства за възстановяването на колонната структура на кристала. Това цялостно изследване дава представа за сложните взаимодействия между гама-облъчването, термичната обработка и произтичащите структурни промени в нанокристалите на ZrB_2, което е от съществено значение за приложения в среда с радиационно въздействие.

10. S.F. Samadov, A.S. Abiyev, A.G. Asadov, N.V.M. Trung, A.A. Sidorin, O.A. Samedov, **E.P. Popov**, E. Demir, T. Vershinina, Y.I. Aliyev, K.M. Hasanov, M.N. Mirzayev, Investigating the crystal structure of ZrB_2 under varied conditions of temperature, pressure, and swift heavy ion irradiation, Ceramics International, Volume 50, Issue 2, Part B, 15 January 2024, Pages 3727-3732,
(Съответства на Г2)

Abstract: The influence of temperature, pressure, and swift heavy ions on the structural characteristics of a nano-sized zirconium diboride crystal (43 nm) was investigated using X-ray diffraction and Small-Angle X-ray Scattering/Wide-Angle X-ray Scattering (SAXS/WAXS) powder diffraction methods. Within the temperature range of 300–773 K, alterations in lattice parameters, lattice volume, coefficient of thermal expansion, and the kinetics of water molecule absorption on the active surface of the zirconium diboride crystal were comprehensively analyzed. Furthermore, the mechanism responsible for the structural degradation of absorbed water molecules was elucidated. The degree of amorphization in the ZrB_2 nano crystal reached its maximum when subjected to irradiation by fast $^{132}Xe^{26+}$ ions with an energy of 167 MeV, at fluences of up to 3.0×10^{14} ions/cm^2. Additionally, the expansion mechanism of lattice parameters and the kinetics of the phase transformation process under the influence of swift heavy ions were studied. Notably, pressure variations did not induce a phase transition within the lattice structure. However, when exposed to an 8.0 GPa pressure, the lattice underwent substantial maximum contraction, reducing by up to 20.5 Å^3.

Изследване на кристалната структура на ZrB2 при различни условия на температура, налягане и облъчване с бързи тежки йони

Резюме: Изследвано е влиянието на температурата, налягането и бързите тежки йони върху структурните характеристики на нанокристал от циркониев диборид (43 nm) чрез методите на рентгеновата дифракция и праховата дифракция с малък и голям ъгъл на разсейване (SAXS/WAXS). В температурния диапазон 300–773 K са анализирани подробно промените в параметрите на кристалната решетка, обема на решетката, коефициента на топлинно разширение и кинетиката на абсорбция на водни молекули върху активната повърхност на кристала от циркониев диборид. Освен това е изяснен механизмът, отговорен за структурната деградация на абсорбираните водни молекули. Степента на аморфизация на нанокристала ZrB_2 достига своя максимум при облъчване с бързи йони $^{132}Xe^{26+}$ с енергия 167

MeV и флуенс до 3,0 × 10^{14} йона/cm^2. Допълнително са проучени механизмът на разширяване на параметрите на решетката и кинетиката на процеса на фазов преход под въздействието на бързи тежки йони. Важно е да се отбележи, че промените в налягането не предизвикват фазов преход в структурата на решетката. Въпреки това, при налягане от 8,0 GPa, решетката претърпява значително максимално свиване, намалявайки обема си с до 20,5 $Å^3$.

11. M.N. Mirzayev, K.M. Hasanov, A.C. Parau, E. Demir, A.S. Abiyev, Tamer Karaman, S.H. Jabarov, M. Dinu, **E.P. Popov**, A. Vladescu (Dragomir), Effect of the C/N ratio modification on the corrosion behavior and performance of carbonitride coatings prepared by cathodic arc deposition, Journal of Materials Research and Technology, Volume 27, November–December 2023, Pages 1724-1738,
(Съответства на Г3)

Abstract: This study focuses on investigating carbonitride coatings, specifically CNTi-(Zr, ZrNb, and ZrSi), as promising candidates for enhancing the durability and efficiency of Ti_6Al4V materials used in nuclear fusion technology. X-ray diffraction analysis identified distinct phases, including TiN, ZrN, ZrC, and TiC. The corrosion studies showed complete degradation of the TiN, ZrC, and ZrN phases in the TiZrCN coating after tests, while the TiC phase exhibited relative stability. The surface morphologies and elemental mapping analysis demonstrated the loss of homogeneity in element distribution after corrosion process. The addition of Si and Nb elements into TiZrCN significantly influenced the coatings' corrosion behavior, with breakaway corrosion observed in CNTi- (Zr and ZrSi) coatings and localized corrosion in CNTi-(ZrNb) coatings. Notably, the CNTi-(ZrSi) coating formed an oxide phase in the presence of NaCl, whereas the CNTi-(ZrNb) coating exhibited continuous resistance and a low corrosion rate. Irradiation was carried out for the generation of active isotopes, showing that no radioactive isotopes were formed in any of the investigated samples.

Влияние на модификацията на съотношението C/N върху корозионното поведение и експлоатационните характеристики на карбонитридни покрития, получени чрез катодно-дъгово отлагане

Резюме: Настоящото изследване е фокусирано върху карбонитридни покрития, по-конкретно CNTi-(Zr, ZrNb и ZrSi), като перспективни материали за повишаване на дълготрайността и ефективността на сплавта Ti_6Al_4V, използвана в технологиите за ядрен синтез. Чрез рентгенофазов анализ бяха идентифицирани отделни фази, включително TiN, ZrN, ZrC и TiC. Корозионните изпитвания показаха пълно разрушаване на фазите TiN, ZrC и ZrN в покритието TiZrCN, докато фазата TiC демонстрира относителна стабилност. Анализът на повърхностната морфология и елементното разпределение разкри загуба на хомогенност в разпределението на елементите след корозионния процес. Добавянето на Si и Nb към TiZrCN оказа значително влияние върху корозионното поведение на покритията, като при CNTi-(Zr и ZrSi) се наблюдаваше ускорена корозия (тип „breakaway“), а при CNTi-(ZrNb) – локализирана корозия. Важно е да се отбележи, че при покритието CNTi-(ZrSi) в присъствието на NaCl се образува оксидна фаза, докато покритието CNTi-(ZrNb) демонстрира устойчивост и ниска скорост на корозия. Проведено бе облъчване с цел генериране на активни изотопи, като резултатите показаха, че в нито една от изследваните проби не са се образували радиоактивни изотопи.

12. A. Vladescu (Dragomir), M.N. Mirzayev, A.S. Abiyev, A.G. Asadov, E. Demir, K.M. Hasanov, R.S. Isayev, A.S. Doroshkevich, S.H. Jabarov, Sv. Lyubchyk, S. Lyubchyk, **E.P. Popov**, Effect of Si and Nb additions on carbonitride coatings under proton irradiation: A comprehensive analysis of structural, mechanical, corrosion, and neutron activation properties, Nuclear Materials and Energy, Volume 35, June 2023, 101457,

(Съответства на Г4)

Abstract: In the present study, understoichiometric TiZrCN, TiZrNbCN, and TiZrSiCN coatings were produced using the cathodic arc technique with a C/N ratio of approximately 0.5 to investigate their potential use in nuclear technology. The coatings were evaluated for their corrosion resistance in 3.5 % NaCl and neutron activation. The effect of adding Si and Nb to the quaternary TiZrCN system was also investigated. The results showed that the addition of Si (∼4.64 at.%) to the matrix of TiZrCN improved their electrochemical properties in NaCl solution, the protective efficiency was 92%, while the Nb addition (∼5.5 at%) lead to the decrease in corrosion resistance by 1.39 times comparing with TiZrCN. Furthermore, after fast neutron irradiation at a nominal power of 1450 kW, none of the coatings were activated, indicating good radiation resistance. It was determined from the structural analysis that the Ti_6Al_4V substrate before corrosion consists of hexagonal and cubic space groups with different lattice parameters. By adding Si and Nb, a small amount of ZrO_2 and Si_3N_4 was detected along with the main phases in the TiZrCN structure.

Влияние на добавките на Si и Nb върху карбонитридни покрития при облъчване с протони: всеобхватен анализ на структурните, механичните и корозионните свойства, както и на характеристиките, свързани с неутронна активация

Резюме: В настоящото изследване, с цел проучване на потенциалното им приложение в ядрените технологии, чрез метода на катодната дъга са получени подстехиометрични покрития от типа TiZrCN, TiZrNbCN и TiZrSiCN със съотношение C/N приблизително 0,5. Покритията са оценени по отношение на тяхната корозионна устойчивост в 3,5% разтвор на NaCl и склонността към неутронна активация. Изследвано е и влиянието на добавянето на Si и Nb към четирикомпонентната система TiZrCN. Резултатите показват, че добавянето на Si (∼4,64 ат. %) към матрицата на TiZrCN подобрява електрохимичните свойства в разтвор на NaCl, като защитната ефективност достига 92%, докато добавянето на Nb (∼5,5 ат. %) води до намаляване на корозионната устойчивост 1,39 пъти в сравнение с TiZrCN. Освен това, след облъчване с бързи неутрони при номинална мощност от 1450 kW, не се наблюдава активация на никое от покритията, което свидетелства за добра радиационна устойчивост. Структурният анализ установява, че преди корозионното въздействие подложката от Ti_6Al_4V се характеризира с наличие на хексагонални и кубични пространствени групи с различни параметри на кристалната решетка. При добавянето на Si и Nb, наред с основните фази в структурата на TiZrCN, са установени и малки количества ZrO_2 и Si_3N_4.

13. Nabiyev A.A., Ivankov O.I.. Azhibekov A.K., Elmekawy A.H.A., **Popov E.**, Samadov S.F., Trung N.V.M., Mutali A.K., Sidorin A.A., Orlov O.S., Kuklin A.I., High-dose gamma irradiation effects on HDPE/SiO_2 nanocomposite films: Structure, crystallinity, defects, radiation endurance, dispersion, and interfacial behavior, Polymer Degradation and Stability, Volume 245, 2026, 111851,
(Съответства на Г5)

Abstract: This paper presents the findings of a study on the effects of gamma radiation on the structural and thermal characteristics of high-density polyethylene nanocomposite films. These thin films consist of a combination of high-density polyethylene (HDPE) and nano-SiO_2 particles prepared by hydrostatic thermal pressing a mixture of HDPE powder and nano-SiO_2 in various volume concentrations (ω = 1 %, 5 %, 10 %, and 20 %). Radiation-induced defects and microstructural changes in HDPE nanocomposite films containing embedded nano-SiO_2 particles were investigated under high-dose gamma irradiation (100–500 kGy). DBAS analysis revealed that SiO_2 nanoparticles effectively suppress radiation-induced defect formation and positronium formation across most doses through void-filling and interfacial positron trapping mechanisms. Defect evolution showed a transition from chain scission-dominated behavior (increasing defects up

to 300 kGy) to crosslinking dominance at 500 kGy, with SiO_2 significantly mitigating both processes. However, at the critical dose of 300 kGy, where crystallinity (66.2 %) and structural reorganization peak, anomalous defect behavior was observed for 1 % and 20 % SiO_2 loadings, attributed to insufficient structural constraint and interfacial stress concentration, respectively. Electron momentum distribution (EMD) analysis confirmed carbonyl group (C = O) formation during oxidative degradation. Optimal radiation resistance was achieved with 5–10 vol% SiO_2 at doses up to 300 kGy, consistent with SAXS and WAXS findings.
These results provide fundamental insights into radiation resistance mechanisms and support the design of HDPE/SiO2 nanocomposites for use in high-dose radiation environments.

Ефекти от гама-облъчване с високи дози върху нанокомпозитни филми от HDPE/SiO_2: структура, кристалност, дефекти, радиационна устойчивост, дисперсия и поведение на границата на раздела фази

Резюме: В настоящата статия са представени резултатите от изследване на ефектите на гама-лъчението върху структурните и термичните характеристики на нанокомпозитни филми от полиетилен с висока плътност (HDPE). Тези тънки филми се състоят от комбинация на HDPE и наночастици SiO_2, получена чрез хидростатично термично пресоване на смес от HDPE на прах и нано-SiO_2 при различни обемни концентрации (ω = 1%, 5%, 10% и 20%). Изследвани са индуцираните от радиацията дефекти и микроструктурните промени в нанокомпозитните филми от HDPE, съдържащи вградени наночастици SiO_2, при облъчване с високи дози гама-лъчение (100–500 kGy). Анализът чрез спектроскопия на анихилация на позитрони (DBAS) разкри, че наночастиците SiO_2 ефективно потискат образуването на радиационно индуцирани дефекти и позитроний при повечето дози, благодарение на механизми като запълване на кухини и улавяне на позитрони на границата на раздела фази. Еволюцията на дефектите показва преход от поведение, доминирано от разкъсване на веригите (увеличаване на дефектите до 300 kGy), към доминиране на омрежването при 500 kGy, като SiO_2 значително смекчава и двата процеса. Въпреки това, при критичната доза от 300 kGy, където кристалността (66,2%) и структурната реорганизация достигат своя максимум, е наблюдавано аномално поведение на дефектите при съдържание на SiO_2 от 1% и 20%, което се дължи съответно на недостатъчно структурно ограничаване и концентрация на напреженията на границата на раздела фази. Анализът на разпределението на импулса на електроните (EMD) потвърди образуването на карбонилни групи (C=O) по време на окислителната деградация. Оптимална радиационна устойчивост е постигната при съдържание на SiO_2 от 5–10 об.% и дози до 300 kGy, което съответства на резултатите от методите SAXS и WAXS.
Тези резултати дават фундаментална представа за механизмите на радиационна устойчивост и подпомагат проектирането на нанокомпозити HDPE/SiO_2 за приложение в среди с високи нива на радиация.

14. E. Demir, M.N. Mirzayev, **E.P. Popov**, P. Horodek, I.G. Genov, K. Siemek, D.M. Mirzayeva, V.A. Turchenko, M. Bulavin, A.I. Beskrovnyi, A.H. Valizade, H.V. Akhundzada, Effects of high-energetic $3He^+$ ionirradiation on tungsten-basedcomposites, Vacuum, Volume 184, February 2021, 109934.,
(Съответства на Г6)

Abstract: The interaction of plasma and its encompassing materials with one another is one of the principle designing issues of fusion reactors. Tungsten is considered one of the primary candidate materials in fusion applications due to its superior properties. In this work, we doped vanadium carbide powders to the tungsten matrix to enhance the properties of tungsten alloys. Tungsten-based composites, which irradiated with 2.5 MeV $^3He^+$ ions at room temperature, were analyzed by atomic force microscopy (AFM) in order to obtain surface morpohologies after irradiation. Helium ion

irradiated tungsten-based composites were studied by using XRD, neutron diffraction technique, raman spectroscopy, and positron annihilation spectroscopy to reveal the microstructural changes. XRD and ND analyses clarified the changes in the crystal structures of the tungsten-based materials after He ion irradiation. The simulation of radiation damage and the calculation of displacements per atom (DPA) was also determined by the SRIM code. SRIM showed that the maximum helium concentration in the specimens takes place in the depth range of 58–65 nm. The crystallite size of tungsten-based composites slightly increased after helium ion irradiation. AFM results revealed that the maximum size of bubbles on the surface of tungsten-based composites shape under 100 nm. Positron annihilation spectroscopy studies of the specimens have been discussed before and after 3He+ ion irradiation.

Ефекти от облъчването с високоенергийни $^{3}He^{+}$ йони върху композити на основата на волфрам

Резюме: Взаимодействието между плазмата и материалите, с които тя контактува, е един от основните инженерни проблеми при термоядрените реактори. Волфрамът се счита за един от най-перспективните материали за приложения в термоядрения синтез поради своите отлични свойства. В настоящата работа към волфрамовата матрица са добавени прахове от ванадиев карбид с цел подобряване на свойствата на волфрамовите сплави. Композитите на основата на волфрам, облъчени с $^{3}He^{+}$ йони с енергия 2,5 MeV при стайна температура, са анализирани чрез атомно-силова микроскопия (AFM) за установяване на повърхностната морфология след облъчването. За изследване на микроструктурните промени в облъчените с хелиеви йони композити са използвани рентгенова дифракция (XRD), неутронна дифракция, Раманова спектроскопия и спектроскопия на позитронна анихилация. Анализите чрез XRD и неутронна дифракция изясниха промените в кристалната структура на материалите на основата на волфрам след облъчването с хелиеви йони. Симулацията на радиационните увреждания и изчисляването на броя измествания на атом (DPA) са извършени с помощта на софтуерния код SRIM. Резултатите от SRIM показват, че максималната концентрация на хелий в образците се наблюдава в диапазона на дълбочина 58–65 nm. Размерът на кристалитите в композитите на основата на волфрам леко се увеличава след облъчването с хелиеви йони. Резултатите от AFM показват, че максималният размер на образуваните по повърхността на композитите мехурчета е под 100 nm. Обсъдени са резултатите от изследванията на образците чрез спектроскопия на позитронна анихилация преди и след облъчването с $^{3}He^{+}$ йони.

15. A.V. Maletskyi, T.E. Konstantinova, G.K. Volkova, D.R. Belichko, A.S. Doroshkevich, **E. Popov**, N. Cornei, B. Jasinska, Zh.V. Mezentseva, A.A. Tatarinova, M.N. Mirzayev, L.H. Khiem, I. Ristić, V. Teofilović, R. Balvanović, High hydrostatic pressure influence on the properties and tendency to agglomeration of ZrO_2 grains of the Al_2O_3 – YSZ composite ceramics system, Ceramics International, Volume 49, Issue 10, 15 May 2023, Pages 16044-16052,
(Съответства на Г7)

Abstract: The results of studying the influence of high hydrostatic pressure (HHP) on the structure formation and properties of composite ceramics of the Al_2O_3-ZrO_2 + 3mol% Y_2O_3 (YSZ) system, based on the metastable Al_2O_3 phase, are presented in this work. The phase composition of the powders, the structure, physical and mechanical properties of the Al_2O_3 - YSZ ceramics were studied taking into account the YSZ concentration and the pressing pressure. We have found that various crystallization processes occur during the sintering of ceramics and two types of structure are realized: aggregate-hardened and disperse-hardened, depending on the HHP value. It is shown that the processing of compacts under HHP conditions at 600–700 MPa prevents the formation of agglomerates of YSZ grains in the intergranular space of Al_2O_3, and the maximum values of

physical and mechanical characteristics are achieved at concentrations of 10 and 15% YSZ and HHP values of 700 Mpa.

Влияние на високото хидростатично налягане върху свойствата и склонността към агломерация на зърната от ZrO_2 в композитната керамична система Al_2O_3 – YSZ

Резюме: В настоящата работа са представени резултати от изследване на влиянието на високото хидростатично налягане (ВХН) върху структурообразуването и свойствата на композитна керамика от системата Al_2O_3-ZrO_2 + 3 mol% Y_2O_3 (YSZ), базирана на метастабилна фаза на Al_2O_3. Изследвани са фазовият състав на праховете, както и структурата и физико-механичните свойства на керамиката Al_2O3 – YSZ, като е отчетено влиянието на концентрацията на YSZ и налягането на пресоване. Установено е, че по време на синтероването на керамиката протичат различни процеси на кристализация и се формират два типа структура – с агрегатно и с дисперсно упрочняване, в зависимост от стойността на ВХН. Показано е, че обработката на пресовките при условия на ВХН от 600–700 MPa предотвратява образуването на агломерати от YSZ зърна в междузърнестото пространство на Al_2O_3, а максимални стойности на физико-механичните характеристики се постигат при концентрации на YSZ от 10 и 15% и стойности на ВХН от 700 MPa.

16. Samadov, S. F., Ismayılova, N., **Popov, E.**, Tuyen, L. A., Trung, N. V. M., Samedov, O. A., Sidorin, A. A., Orlov, O. S., Jabarov, S., Hue, P. T., Hue, N. T. N., Tiep, N. V., Quang Hung, N., & Mirzayev, M. N. (2026). Gamma-irradiation-induced defects and thermally driven recovery in ZrB_2. Materials Chemistry and Physics, 353, 132107.,
(Съответства на Г8)

Abstract: This study investigates the reaction of ZrB_2 ceramics to high-dose gamma irradiation and subsequent thermal treatment in terms of defect formation and recovery mechanisms, which are important for harsh reactor environments. ZrB_2 powders were irradiated with ^{60}Co gamma rays at a total absorbed dose in the range of 1500–3000 kGy, and then annealed at 1173 K. Surface and near-surface analyses (SEM, TEM/HRTEM, FTIR) indicate the formation of a thin oxygen-rich layer and moderate particle coarsening after irradiation; after annealing, partial removal of hydroxyl/oxide-related features and relaxation of microstrain are observed. Positron-based DB/EMD measurements show that irradiation leads to an increase in vacancy-type defects (V_B, V_{Zr}, and their clusters), while after thermal treatment these defects decrease toward the reference state, which is consistent with thermally assisted defect recombination. First-principles (TCDFT/DFT) calculations confirm these trends: in defective structures, shifts in the Fermi level and weakening of Zr^{4d}–B^{2p} hybridization are observed, while changes in the elastic constants are only moderate. Overall, the results show that ZrB_2 exhibits noticeable defect resilience within the investigated gamma dose range, and post-irradiation annealing can partially reduce the induced damage. These findings are informative for the initial selection of materials, but they cannot be considered as a comparative ranking with existing first-wall candidates; application-oriented final conclusions require direct comparative studies under the same conditions.

Дефекти, индуцирани от гама-облъчване, и термично възстановяване в ZrB_2

Резюме: Настоящото изследване разглежда реакцията на керамика от ZrB_2 спрямо гама-облъчване с висока доза и последваща термична обработка по отношение на образуването на дефекти и механизмите за възстановяване – аспекти, важни за експлоатация в тежките условия на ядрен реактор. Прахообразни проби от ZrB_2 бяха облъчени с гама-лъчи от източник на ^{60}Co при обща погълнатата доза в диапазона 1500–3000 kGy, след което бяха подложени на отгряване при 1173 K. Анализите на повърхността и приповърхностния слой (SEM, TEM/HRTEM, FTIR) показват образуване на тънък, богат на кислород слой и умерено

нарастване на размера на частиците след облъчването; след отгряването се наблюдава частично отстраняване на характеристики, свързани с хидроксилни групи или оксиди, както и релаксация на микродеформациите. Измерванията чрез позитронна спектроскопия (DB/EMD) показват, че облъчването води до увеличаване на дефектите от ваканционен тип (V_B, V_{Zr} и техните клъстери), докато след термичната обработка броят на тези дефекти намалява, приближавайки се към изходното състояние, което съответства на процеса на термично стимулирана рекомбинация на дефекти. Изчисленията, базирани на първи принципи (TCDFT/DFT), потвърждават тези тенденции: в структури с дефекти се наблюдават изместване на нивото на Ферми и отслабване на хибридизацията между орбиталите Zr^{4d} и B^{2p}, докато промените в еластичните константи са незначителни. Като цяло резултатите показват, че ZrB_2 демонстрира значителна устойчивост към образуване на дефекти в изследвания диапазон на гама-дозите, а отгряването след облъчване може частично да намали индуцираните увреждания. Тези данни са полезни за първоначалния подбор на материали, но не могат да се разглеждат като сравнителна класация спрямо съществуващите кандидати за материали за първата стена на реактора; окончателните заключения, ориентирани към практическото приложение, изискват провеждането на преки сравнителни изследвания при идентични условия.

17. Luu T.A., Trung N.V.M., Van T.N., Turek M., Drozdziel A., Pyszniak K., Sidorin A.A., Donkov A.A., Orlov O.S., Ly N.L., Pham H.T., Nguyen H.T.N., Phuc T.V., Hoang L.V., Le L.T., Mitrofanov S.V., Ismayilova N., Jabarov S.H., Kirilkin N., Abiyev A.S., Tuan P.L., Vershinina T., **Popov E. P.**, Samadov S.F., Mirzayev M.N., Van N.T.T., Tran N., Tran P.D., Hung N.Q.. Ion implantation-driven defect engineering in $BiVO_4$ thin films for catalytic applications, Ceramics International, Volume 52, Issue 9, Part B, April 2026, Pages 12572-12588,
(Съответства на Г9)

Abstract: Designing and controlling structural defects in semiconductor photocatalysts using ion implantation remains a challenging issue. This work explores the evolution of point and complex defects in 100 keV P^+-implanted $BiVO_4$ thin films using slow-positron beam (SPB) measurements combined with theoretical calculations. Variable-energy (0.1–14 keV) Doppler broadening (VEDB) and electron momentum distribution (VEEMD) analyses, together with two-component density functional theory (TC-DFT) calculations, are employed to characterize defect evolution. Complementary techniques, including SRIM simulations, Rutherford backscattering spectrometry (RBS), high-resolution transmission electron microscopy (HR-TEM), energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDX), scanning electron microscopy (SEM), X-ray diffraction (XRD), and Raman spectroscopy, are used to further assess the defective structures. The results indicate that a competitive formation of point defects occurs in P^+-implanted $BiVO_4$ thin films, including oxygen, bismuth, and vanadium vacancies (V_O, V_{Bi}, and V_V), oxygen substitution by phosphorus (P_O), along with more complex defects such as $V_{Bi} + P_O$ and $V_V + P_O$. The evolution of those defects proceeds differently across different depth regions (0–30, 30–117, and 117–225 nm) and at different implanted fluences (10^{13}–10^{15} ions.cm−2) in the BiVO4 thin film. Comprehensive analyses using SPB, photoluminescence (PL), and ultraviolet–visible (UV–Vis) techniques together with DFT calculations reveal that P^+-induced V_O, V_{Bi} и $V_{Bi} + P_O$ defects positively modulate the electronic structure and optical properties of $BiVO_4$ thin films, thereby offering a promising strategy to improve their photocatalytic performance. This study provides new insights into defect engineering and control in thin-film materials via ion implantation.

Инженерство на дефекти чрез йонна имплантация в тънки слоеве от $BiVO_4$ за каталитични приложения

Резюме: Проектирането и контролирането на структурни дефекти в полупроводникови фотокатализатори чрез йонна имплантация остава предизвикателство. Настоящата работа изследва еволюцията на точкови и сложни дефекти в тънки слоеве от $BiVO_4$, имплантирани с P^+ йони (енергия 100 keV), като се използват измервания със сноп от бавни позитрони (SPB) в съчетание с теоретични изчисления. За характеризиране на еволюцията на дефектите са приложени анализи на доплеровото разширение (VEDB) и разпределението на електронния импулс (VEEMD) при променлива енергия (0,1–14 keV), както и изчисления по метода на функционала на плътността с два компонента (TC-DFT). За допълнителна оценка на дефектните структури са използвани комплементарни методи, включващи SRIM симулации, спектрометрия на обратно разсейване на Ръдърфорд (RBS), трансмисионна електронна микроскопия с висока разделителна способност (HR-TEM), енергийно-дисперсионна рентгенова спектроскопия (EDX), сканираща електронна микроскопия (SEM), рентгенова дифракция (XRD) и Раманова спектроскопия. Резултатите показват, че в имплантираните с P^+ тънки слоеве от $BiVO_4$ протича конкурентно образуване на точкови дефекти, включващи ваканции на кислород, бисмут и ванадий (V_O, V_{Bi} и V_V) и заместване на кислород с фосфор (P_O), както и по-сложни дефекти като $V_{Bi} + P_O$ и $V_V + P_O$. Еволюцията на тези дефекти протича по различен начин в различните зони по дълбочина (0–30, 30–117 и 117–225 nm) и при различни флуенси на имплантация (10^{13}–10^{15} йона/cm²) в тънкия слой от BiVO4. Комплексните анализи, използващи SPB, фотолуминесценция (PL) и ултравиолетова-видима (UV–Vis) спектроскопия, заедно с DFT изчисления, разкриват, че индуцираните от P^+ йони дефекти (V_O, V_{Bi} и $V_{Bi} + P_O$) благоприятно модулират електронната структура и оптичните свойства на тънките слоеве от $BiVO_4$, като по този начин предлагат обещаваща стратегия за подобряване на тяхната фотокаталитична ефективност. Това изследване предоставя нови насоки за инженерството и контрола на дефекти в материали под формата на тънки слоеве чрез йонна имплантация.

18. Samadov S.F., Nasrabadi M.N., Ismayılova N.A., Trung N.V.M., Rizi S.H., Luu, A. Tuyen, Samedov O.A., Jabarov S.H., **Popov E.P.**, Abiyev A.S.. Interface-mediated He^+ irradiation tolerance of W-Ni heavy alloys for fusion plasma-facing components: Defect absorption and phase stability, International Journal of Refractory Metals and Hard Materials, Volume 138, August 2026, 107767,
(Съответства на Г10)

Abstract: Wsingle bondNi heavy alloys were evaluated for radiation tolerance under 2.5 MeV He^+ irradiation (3.3×10 (Boisse et al., 2014)^4–1.1×10^{17} ions/cm^2) using a multiscale approach that combines molecular dynamics (MD), density functional theory (DFT), X-ray diffraction (XRD), and Raman spectroscopy. The MD results (LAMMPS, MEAM+ZBL; SRIM-based PKA conditions) indicate that most ballistic displacements recombine within ∼30 ps and that the residual concentration of stable Frenkel pairs in the bcc-W matrix remains low, implying limited permanent damage under typical collision scenarios. DFT calculations confirm the metallic character of the tetragonal Ni4W phase (finite DOS at EF) and show defect-dependent variations in electronic and mechanical properties: Ni vacancies are the most energetically favorable point defects, and ductility is preserved for the investigated vacancy configurations ($\nu \approx 0.40$; high B/G). Rietveld-refined XRD results demonstrate that only bcc α-W and tetragonal Ni_4W phases are present before and after irradiation, with no evidence of carbide formation. Changes in lattice parameters are minor in α-W but more pronounced and non-monotonic in Ni_4W, consistent with phase-selective defect accumulation and swelling at W/Ni_4W interfaces. With increasing fluence, Raman spectra exhibit band broadening and weak peak shifts, indicating disorder-induced scattering rather than the emergence of new oxide modes. Overall, the results reveal that He^+-induced defects are mainly localized in the Ni_4W phase and at interphase boundaries, emphasizing the critical role of phase composition and interface architecture in optimizing W single bond Ni alloys.

Устойчивост на облъчване с He^+ йони при тежки сплави от типа W–Ni, предназначени за компоненти в контакт с плазмата при термоядрен синтез: абсорбция на дефекти и фазова стабилност

Резюме: Тежките сплави W–Ni бяха изследвани по отношение на тяхната устойчивост на облъчване с He+ йони (с енергия 2,5 MeV и флуенс в диапазона $3,3 \times 10^{14}$ – $1,1 \times 10^{17}$ йона/cm^2) чрез многомащабен подход, съчетаващ молекулярна динамика (MD), теория на функционала на плътността (DFT), рентгенова дифракция (XRD) и Раманова спектроскопия. Резултатите от MD симулациите (използващи LAMMPS, MEAM+ZBL и условия за първични избити атоми – PKA, базирани на SRIM) показват, че повечето балистични измествания се рекомбинират в рамките на ~30 ps, а остатъчната концентрация на стабилни двойки на Френкел в bcc-W матрицата остава ниска, което предполага ограничени трайни увреждания при типични сценарии на сблъсък. Изчисленията по метода DFT потвърждават металния характер на тетрагоналната фаза Ni_4W (ненулева плътност на състоянията при нивото на Ферми – DOS при EF) и разкриват зависими от дефектите изменения в електронните и механичните свойства: ваканциите в Ni са енергетично най-благоприятните точкови дефекти, а пластичността се запазва при изследваните конфигурации на ваканции ($\nu \approx 0,40$; високо съотношение B/G). Резултатите от XRD, анализирани чрез метода на Риетвелд, показват наличието единствено на фазите bcc α-W и тетрагонална Ni_4W както преди, така и след облъчването, без данни за образуване на карбиди. Промените в параметрите на кристалната решетка са незначителни при α-W, но по-силно изразени и немонотонни при Ni_4W, което съответства на селективно спрямо фазата натрупване на дефекти и набъбване по границите на раздела между фазите W и Ni_4W. С увеличаване на флуенса в Рамановите спектри се наблюдават разширяване на ивиците и леки отмествания на пиковете, което е показателно за разсейване, породено от структурно разстройство, а не за поява на нови оксидни моди. Като цяло, резултатите разкриват, че индуцираните от He^+ йони дефекти са локализирани главно във фазата Ni_4W и по междуфазовите граници, което подчертава критичното значение на фазовия състав и архитектурата на границите на раздела за оптимизирането на сплавите W–Ni.

19. Mirzayev, Matlab N., Atilgan A., Samadov S.F., Buyuk B., Kamislioglu M., Isayeva S., Mauyey B., Nesipbay A.J., Lyubchik A., Demir E., Kaminski G., Mirzayeva D.M., Doroshkevich A.S., Ashraf G.A., **Popov E. P.**. Interfacial interactions and free volume in multicomponent titanium-based carbon-nitrides coatings, Ceramics International, Volume 52, Issue 9, Part B, April 2026, Pages 12826-12835,
(Съответства на Г11)

Abstract: In this study, a comprehensive experimental and theoretical investigation was performed on five multicomponent TiXCN-based coatings (X = Si, Nb, Zr, ZrNb, and ZrSi) synthesized by cathodic arc deposition. The defect structure, free-volume characteristics, surface morphology, optical topography, and chemical bonding states of coatings deposited on Ti_6Al_4V substrates were systematically examined. Positron Annihilation Lifetime Spectroscopy (PALS) revealed distinct positron lifetime components ($\tau_1 \approx 0.17–0.18$ ns and $\tau_2 \approx 0.63–0.80$ ns), indicating variations in intergranular free volume and vacancy-type defect populations depending on elemental composition. Density functional theory (DFT)–based calculations suggest the coexistence of face-centered cubic and trigonal structural configurations within the TiXCN matrix, providing insight into the experimentally observed positron trapping behavior. Raman spectroscopy identified characteristic acoustic and optical phonon modes associated with Ti–C and Ti–N bonding, where systematic peak shifts and bandwidth variations reflect alloying-induced lattice strain and chemical disorder. Surface analyses using scanning electron microscopy and optical profilometry revealed pronounced compositional effects on pinhole morphology and roughness, with Zr-containing coatings exhibiting deeper and wider surface defects. The combined experimental–theoretical

approach establishes a clear correlation between interfacial interactions, free-volume evolution, lattice dynamics, and surface morphology in multicomponent TiCN coatings, offering guidance for the rational design of advanced protective coating systems.

Междуфазови взаимодействия и свободен обем в многокомпонентни покрития от титанови карбонитриди

Резюме: В настоящото изследване е проведено цялостно експериментално и теоретично проучване на пет многокомпонентни покрития на основата на TiXCN (където X = Si, Nb, Zr, ZrNb и ZrSi), синтезирани чрез катодно-дъгово отлагане. Систематично са изследвани дефектната структура, характеристиките на свободния обем, морфологията на повърхността, оптичната топография и състоянието на химичните връзки в покритията, отложени върху подложки от Ti_6Al_4V. Чрез спектроскопия на времето на живот при анихилация на позитрони (PALS) са установени характерни компоненти на времето на живот на позитроните ($\tau_1 \approx$ 0,17–0,18 ns и $\tau_2 \approx$ 0,63–0,80 ns), което показва различия в междузърнестия свободен обем и популациите от дефекти от ваканционен тип в зависимост от елементния състав. Изчисления, базирани на теорията на функционала на плътността (DFT), предполагат съществуването на кубични стентоцентрирани и тригонални структурни конфигурации в матрицата на TiXCN, което дава представа за експериментално наблюдаваното поведение на улавяне на позитрони. Чрез Раманова спектроскопия са идентифицирани характерни акустични и оптични фононни моди, свързани с връзките Ti–C и Ti–N, като системните отмествания на пиковете и промените в широчината им отразяват деформациите на кристалната решетка и химичното разстройство, породени от легирането. Анализите на повърхността, извършени чрез сканираща електронна микроскопия и оптична профилометрия, разкриват значително влияние на състава върху морфологията на микропорите и грапавостта, като съдържащите Zr покрития проявяват по-дълбоки и по-широки повърхностни дефекти. Комбинираният експериментално-теоретичен подход установява ясна корелация между взаимодействията на границите на фазите, еволюцията на свободния обем, динамиката на решетката и морфологията на повърхността при многокомпонентните TiCN покрития, предоставяйки насоки за рационалното проектиране на усъвършенствани системи от защитни покрития.