

Boroszilikát üvegek szerkezetvizsgálata neutrondiffrakcióval

Fábián Margit^{1,2}, Sváb Erzsébet¹

¹MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont, SZFKI
1525 Budapest, Pf. 49, +36-1-3922634

²MTA Energiatudományi Kutatóközpont,
1525 Budapest, Pf. 49.

A neutrondiffrakció széles körben alkalmazott módszer kondenzált anyagok atomi szerkezetének felderítésére. A vizsgált anyagok rendkívül széles kört ölelnek fel, így egykristályok, polikristályok, nanokristályok, tömbi méretű ipari szerkezetek, illetve amorf anyagok tanulmányozhatók. Jelen cikkben a neutrondiffrakciós módszer elméleti és kísérleti alapjait mutatjuk be amorf anyagokra. A rövid távú atomi rendeződés meghatározását urán-tartalmú boroszilikát üvegeken kapott eredményekkel illusztráljuk. Egyúttal bemutatjuk a Budapesti Kutatóreaktor mellett működő neutrondiffrakciós mérőhelyet is.

Bevezetés

Az amorf vagy más elnevezéssel üvegszerű anyagok hosszú távú rendezettséggel nem rendelkező szilárd fázisú anyagok. Különböző anyagcsaládok képezhetnek amorf szerkezetet, így pl. kovalens kötésű chalkogenidek, különféle oxidok vagy fémeket tartalmazó ötvözetek, ha előállításuk során a hűtés sebessége megfelelően gyors ($\approx 10^{10}$ K/sec). Gyakorlati alkalmazásuk igen sokrétű, ezért is fontos a szerkezetük minél pontosabb felderítése. A szerkezet jellemzésének legközvetlenebb módszere a szórás kísérlet, amiből a néhány atomtávolságra kiterjedő rövid távú korrelációkat jellemző paramétereket meg tudjuk határozni.

Az alkáli boroszilikát alapú üvegek egy nagyon fontos anyagcsaládhoz tartoznak, mivel a radioaktív hulladékok (UO₃ és Pu₂O₃) tárolására alkalmasnak bizonyultak, és jelenleg is intenzív kutatások folynak az optimális összetétel előállítására, vizsgálatára és alkalmazására. Az irodalomban rendkívül szerteágazó és sokféle atomot tartalmazó üveg-mátrixot ismertetnek, amelyek akár 20 féle komponens is tartalmaznak [1,2]. Ebbe a nemzetközileg is fontos kutatási irányzatba kapcsolódtunk be azzal a céllal, hogy viszonylag egyszerű összetételű üveg-mátrixot állítsunk elő, amelybe az adalékolt UO₃ mennyiség felülmúlja a jelenleg ismert maximális befogadását. Vizsgálni kívánjuk az urán beépülését a mátrix-üvegbe, az urán környezetét, valamint hatását az üveg stabilitására és a higroszkópikus tulajdonságaira. Az atomi szerkezet meghatározására neutron- és röntgendiffrakciós méréseket végeztünk, az adatok kiértékelésére a fordított Monte Carlo szimulációs módszert használtuk [3].

Ebben a cikkben az urántartalmú nátrium-boroszilikát üvegek tanulmányozásában elért eredményeinket kívánjuk bemutatni. Egyúttal részletesen ismertetjük a neutrondiffrakciós módszer alapjait és a Budapesti Kutatóreaktor mellett működő neutrondiffraktométert, amely a kísérleti munkánk háttéréül szolgált.

Szerkezeti függvény és eloszlásfüggvény neutrondiffrakciós mérésből

Az atomi szerkezet vizsgálatának alapvető módszere a szórás kísérlet. A neutron nyaláb szóródik a vizsgált objektumon, és a szórási spektrumot detektáljuk. A szórási folyamat alapösszefüggése szerint [4] a rugalmas koherens differenciális szórási hatáskeresztmetszet a $g(r)$ atomi párkorrelációs függvény Fourier-transzformáltja:

$$\frac{d\sigma_c(\mathbf{Q})}{d\Omega} = b^2 \int_V g(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{Q}\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (1)$$

ahol a $\mathbf{Q}=\mathbf{k}_0-\mathbf{k}$ szórásvektor a beeső és a $d\Omega$ térszögbe szórt hullámvektorok különbsége, míg $g(r)$ annak a valószínűségét adja meg, hogy az $r=0$ helyen lévő atomtól r távolságban találunk egy másik atomot. A b szórási amplitúdó az atomon koherensen szóródó sugárzás szórási hatáskeresztmetszetét jellemző paraméter, amely neutronszórás esetében nem függ a \mathbf{Q} szórásvektortól. Értéke rendszertelenül változik a különböző atomokra, és izotóponként is igen különböző értéket vehet fel [5].

Kristályos anyagokban a translációs szimmetria egyértelműen meghatározza az r_i atomi pozíciókat, és az eloszlásfüggvény jól lokalizált r_i körüli delta-függvények összege: $g(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)$. A translációs szimmetria

következtében a szerkezet felépíthető egy megfelelően megválasztott kristálytani egység, az elemi cella ismétlésével. A diffrakciós spektrumon éles csúcsok, a Bragg-reflexiók jelennek meg, amelyek helyéből és intenzitásából meghatározhatók az elemi cella paraméterei, és azon belül az atomok elhelyezkedését leíró koordináták.

Amorf anyagokon történő szórás esetén nem jelennek meg Bragg-reflexiók, ami arra utal, hogy ezeknek az anyagoknak a szerkezetéből hiányzik a translációs szimmetria. A szórási

kép viszonylag széles csúcsokat tartalmaz, amiből nem lehet az atomi pozíciókat egyértelműen meghatározni. Az atomok közötti néhány atomtávolságra kiterjedő korrelációkat a $g(r)$ függvény megadásával jellemezzük. Mivel az amorf anyagok szerkezete makroszkopikusan izotróp, ezért az atomi távolságvektorok irányfüggése kiátlagolódik. A koherens differenciális szórás hatáskeresztmetszet az alábbi alakú egydimenziós integrálra írható át [4]:

$$\frac{d\sigma_c(Q)}{d\Omega} = b^2 \left[1 + \frac{4\pi\rho_0}{Q} \int_0^\infty r[g(r) - 1] \sin Qr dr \right] \quad (2)$$

Itt Q skaláris mennyiség a Θ szórás szögtől, a λ hullámhossztól és a ρ_0 átlagos atomsűrűségtől függ,

$$Q = |\mathbf{Q}| = 4\pi \sin \Theta / \lambda .$$

Bevezetjük az $S(Q)$ szerkezeti függvényt, ami a differenciális szórás hatáskeresztmetszet $Q \rightarrow \infty$ -ben egyre normált alakja:

$$S(Q) = \frac{1}{b^2} \frac{d\sigma_c(Q)}{d\Omega} = 1 + \frac{4\pi\rho_0}{Q} \int_0^\infty r[g(r) - 1] \sin Qr dr. \quad (3)$$

Az amorf anyagok általában többféle atomot tartalmaznak, az ezek közötti szerkezeti korrelációt a $g_{ij}(r)$ parciális párkorrelációs függvényekkel jellemezhetjük, ami megadja, hogy valamely i -típusú atomtól r távolságban milyen valószínűséggel találunk j típusú atomot. Az n -féle atomból álló rendezetlen anyag szerkezetének leírásához $n(n+1)/2$ számú parciális párkorrelációs függvény ismerete szükséges. Egy szórás kísérlethez az átlagos atomi korrelációs függvényt lehet meghatározni, a parciális szerkezeti függvények meghatározásához több független mérés (pl. neutrondiffrakció izotóppal helyettesített mintákon, röntgendiffrakció, EXAFS) illetve modellszámítás alkalmazása szükséges. Munkánk során a fordított (reverse) Monte Carlo (RMC) módszert alkalmaztuk a szerkezet modellezésére, a diffrakciós kísérleti adatokra támaszkodva.

A vizsgált boroszilikát alapú üvegek és a kísérleti háttér

A vizsgált mátrix-üveg minták kémiai összetétele és jelölése az alábbi:

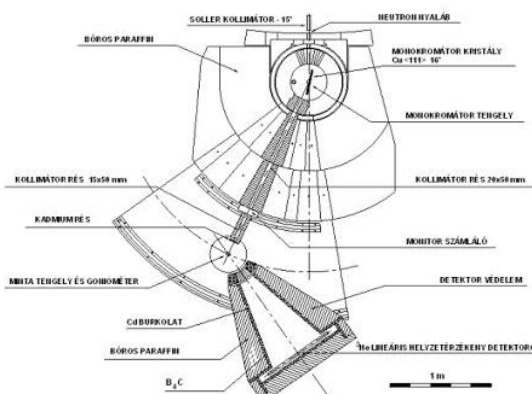
$(65-x)\text{SiO}_2 \cdot x\text{B}_2\text{O}_3 \cdot 25\text{Na}_2\text{O} \cdot 5\text{BaO} \cdot 5\text{ZrO}_2$, $x=5,10,15$ mol%, a továbbiakban a B5, B10, B15 jelölést alkalmazzuk;

$70s\% [(65-x)\text{SiO}_2 \cdot x\text{B}_2\text{O}_3 \cdot 25\text{Na}_2\text{O} \cdot 5\text{BaO} \cdot 5\text{ZrO}_2] + 30s\% \text{UO}_3$, $x=5,10,15$ mol%, a továbbiakban az UB5, UB10, UB15 jelölést alkalmazzuk.

Az üvegmintákat olvasztással állítottuk elő, a kiinduló anyagok SiO_2 , B_2O_3 , Na_2CO_3 , BaO , ZrO_2 és UO_3 oxidkeverékek voltak. A természetes bór nagy neutronabszorpciója miatt B-11 izotópban dúsított (99,6%) diborátot használtunk. Természetes uránt használtunk, ami radioaktív. Mintáink aktivitása ugyan kicsi, kb. 2,7 kBq/g, de fokozott figyelmet igényeltek. A minták olvasztására magas hőmérsékletű (1600°C-ig fűthető) KOII típusú elektromos felfűtésű kályhát használtunk, 1350-1450°C hőmérséklet tartományban. Az olvasztás platina tégelyben történt. Az olvadék szobahőmérsékletű acéllemeze került kiöntésre. Az öntecset porítottuk achátmozsárban. A mintákat exikátorban tároljuk, de több hónapnyi (most már évnnyi) idő

elteltével sem mutatnak higroszkópos jeleget. Mintáinkat félévente neutrondiffrakciós méréssel ellenőrizzük, minden eddigi esetben amorf jellegű spektrumot kaptunk, vagyis nem kristályosodtak át, ami stabil szerkezetre utal.

A vizsgált több-komponensű mintáink könnyű és nehéz atomokat egyaránt tartalmaznak, ezért indokolt volt a neutrondiffrakciós mérések mellett röntgendiffrakciós méréseket is végezni. A könnyű atomok környezetére (B, O, Si) a neutrondiffrakció ad pontosabb szerkezeti információt, míg a nehéz atomokra (Ba, Zr, U) a röntgendiffrakciós mérésekből nyerhetünk több információt. Méréseinket elsősorban a Budapesti Kutatóreaktor 9. tangenciális csatornája mellett működő 'PSD' neutrondiffraktométeren végeztük [6].



1. ábra: A Budapesti Kutatóreaktor mellett működő 'PSD' neutrondiffraktométer elrendezési rajza

A 2. ábra a reaktorcsarnok fotóját és a 'PSD' berendezést mutatja felülnézetből. A termikus neutron nyaláb megfelelő kollimáció és monokromatizálás után szóródik a vizsgált mintán. Lehetőség van a hullámhossz változtatására, a méréseinknél a leggyakrabban használt hullámhossz 1,07 Å volt. A mintán rugalmasan szóródott neutronokat, a diffrakciós spektrumot 120°-os szórás szögtartományban detektáljuk. Detektorként lineáris helyzetérzékeny detektorrendszert használunk, amely egy adott szögpozícióban 25°-os szögtartományt fed le. Ennek a modern mérés technikának az előnye a nagy detektálási határfok. A mérésvezérlést és az adatforgalmat egy célhardver és egy Eagle I/O kártyával bővített PC számítógép végzi.



2. ábra: A Budapesti Kutatóreaktor a termikus csatornája melletti mérőberendezésekkel. A 'PSD' neutrondiffraktométer fotóját mutatja a beillesztett kép.

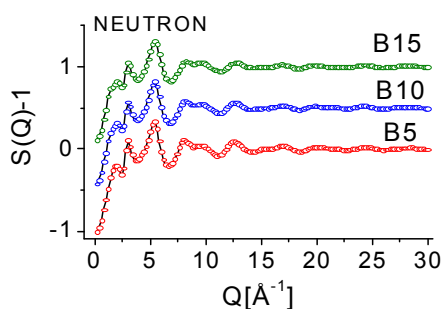
Mintáink egy részét megmértük a Los Alamos-i impulzus-neutronforrásnál működő 'NPDF' berendezésen is [7]. A repülési-idő technikánál a hullámhosszat változtatjuk a detektorok állandó szöghelyzete mellett. Ezek a mérések lehetővé teszik a mérési tartomány kiterjesztését nagy Q-tartományig, jellemzően $Q_{max}=30-50 \text{ \AA}^{-1}$ -ig. Ennek előnye, hogy a valós r -térben a $g(r)$ atomi párkorrelációs függvények számításánál jó felbontást kapunk, ugyanis a felbontás a $\Delta r=2\pi/Q_{max}$ összefüggés szerint változik. A 'PSD' és az 'NPDF' mérések adatainak összeillesztésével kiszámoltuk az $S(Q)$ szerkezeti függvényt. A röntgendiffrakciós méréseket a hamburgi Desy szinkrotronnál működő 'BW5' röntgendiffraktométeren végeztük [8], ahol a monokromatikus hullámhossz $\lambda_0=0,113 \text{ \AA}$ volt 109,5 keV energián; valamennyi mintát a $Q=0,5-25 \text{ \AA}^{-1}$ szórási tartományban mértük. A kétfajta diffrakciós mérés együttes kiértékelését az RMC szimulációs programba történő beépítéssel végeztük.

A szerkezet modellezése fordított Monte Carlo szimulációval

Több-komponensű minták esetén az egyes atompárokat jellemző $g_{ij}(r)$ parciális szerkezeti függvények meghatározásához a fordított Monte Carlo (RMC) módszert használjuk, amely rendezetlen kondenzált rendszerek diffrakciós spektrumainak értelmezésére széles körben alkalmazott eljárás [3]. Az RMC szimuláció során részecskéket mozgatunk egy szimulációs cellában, véletlenszerűen és időtől függetlenül úgy, hogy a rendszer jellemzőiből számolt szerkezeti függvény a kísérleti diffrakciós adatokkal a lehető legjobban egyezzen. A dobozban lévő részecskék háromdimenziós koordináta-rendszerben való elhelyezkedéseinek összességét tekintjük a részecskekonfigurációnak. A szimulációs dobozunk 5000 atomot tartalmazott. A szimulációs program felépítéséhez felhasználtuk a korábban lefuttatott egyszerűbb összetételű mintáink eredményeit [9,10]. A jó illeszkedés eléréséért kényszereket alkalmaztunk, az atomi távolságok megkötése mellett koordinációs kényszereket, ezeknek az adatoknak az ismerete előző munkáink eredménye [11]. A 3. ábra az RMC modellezéssel illesztett neutrondiffrakciós szerkezeti függvényeket mutatja be a B5, B10, B15 mátrix-üvegekre.

A mátrix-üvegek szerkezete

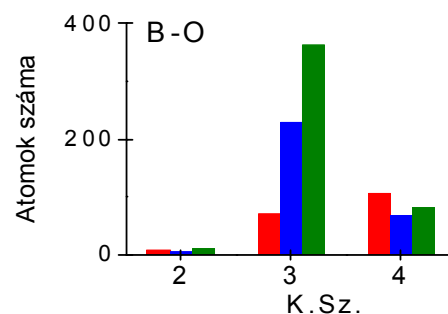
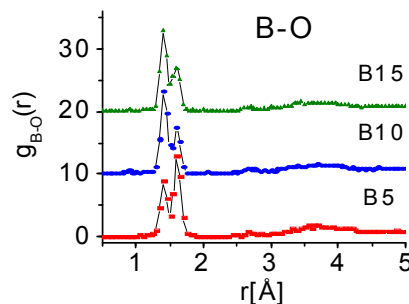
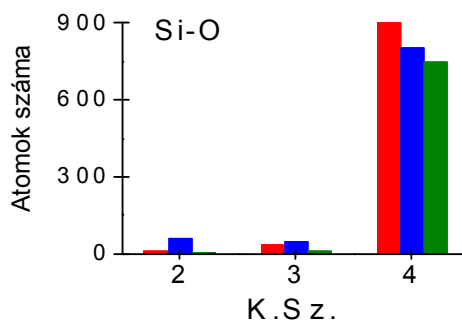
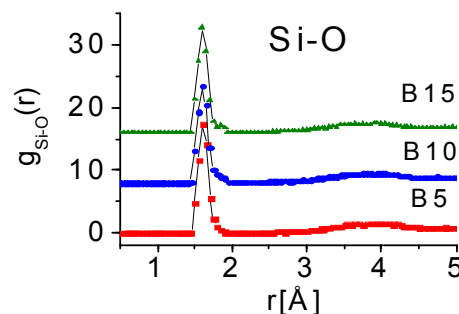
Az RMC modellezéssel illesztett neutrondiffrakciós szerkezeti függvényeket mutatja be a mátrix-üvegekre a 3. ábra.



3. ábra: A mátrix-üvegek kísérleti és RMC szimulációval illesztett neutrondiffrakciós szerkezeti függvényei. Az üres karika a kísérleti görbét jelzi, míg a vonal az RMC-t.

Az RMC program által generált szerkezeti függvények jó egyezést mutatnak a kísérleti spektrumokkal, ugyanakkor azt is megfigyelhetjük, hogy a minták szerkezeti függvényei hasonló jellegűek. Ez arra utal, hogy a szerkezet lényeges elemei nem változnak a vizsgált koncentráció tartományban.

Az RMC szimulációs módszerrel meghatároztuk az atompárok parciális eloszlásfüggvényeit és a koordinációs számeloszlásokat. Az alapszerkezetet felépítő Si és B üvegalkotó atomok környezetére kapott eredményeket mutatjuk be a 4. ábrán.

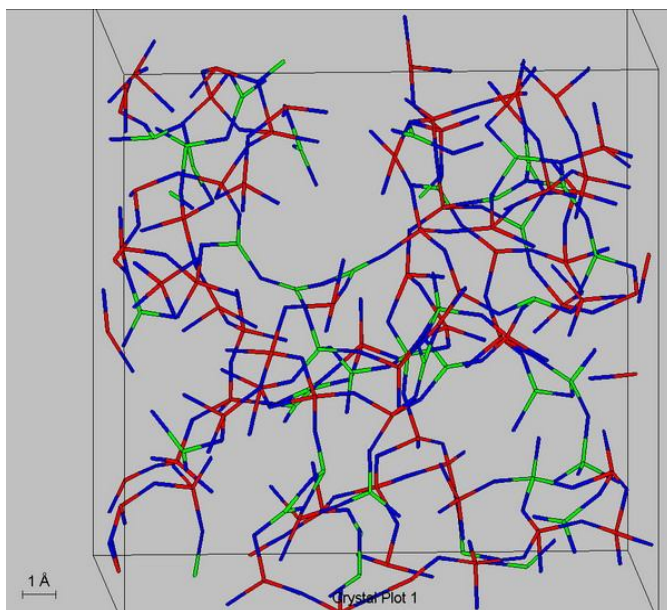


4. ábra: A Si-O és B-O parciális párkorrelációs függvények és koordinációs számeloszlások (K.S.z.) RMC modellezéssel számolva a B5 (piros), B10 (kék) és B15 (zöld) mátrix-üveg mintákra.

Az $r_{\text{Si-O}}=1,60\pm 0,01$ Å távolság, valamint a koordinációs számokra (K.Sz.) kapott 3,9; 3,7; 3,9 atom értékek a tetraéderez SiO_4 kialakulásának valószínűségét mutatják, amit alátámaszt a Si-Si stabilan kialakuló 3,0 Å távolsága is. Ezek az értékek az előzőleg vizsgált amorf SiO_2 és $70\text{SiO}_2\cdot 30\text{Na}_2\text{O}$ munkáink eredményével teljes összhangban vannak [10]. A B-O elsőszomszéd távolságra kapott két érték közül az egyik, az irodalomban közölt $1,40\pm 0,01$ Å távolságnak felel meg, a második $1,60\pm 0,01$ Å távolságot mi állapítottuk meg az irodalomban elsőként. A B atom 3,5; 3,1; 3,15 értékű átlagos koordinációs számait meghatározva és eloszlásukat figyelembe véve megállapíthatjuk, hogy trigonális BO_3 ($^{[3]}\text{B}$) és tetraéderez BO_4 ($^{[4]}\text{B}$) egységek alakulnak ki.

A második $r_{\text{B-O}}=1,60$ Å távolság értéke pontosan megegyezik az $r_{\text{Si-O}}=1,60$ Å távolsággal, ami azt a szemléletes szerkezeti képet sugallja, hogy négyes koordinátságú BO_4 és SiO_4 szerkezeti egységek kapcsolódnak össze.

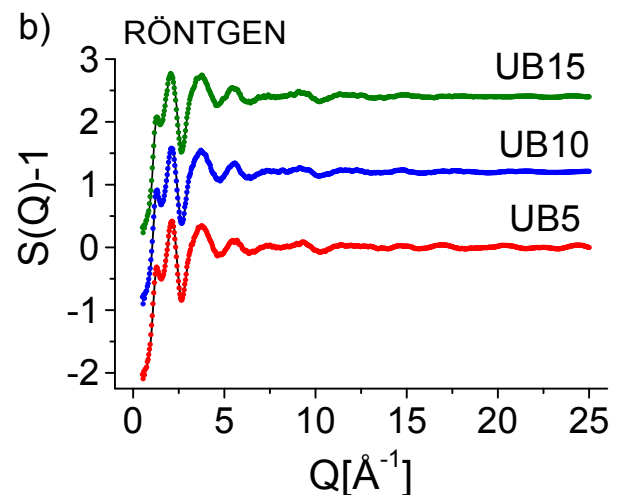
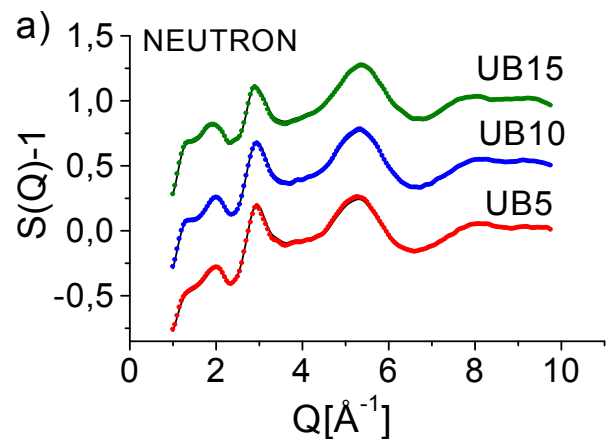
Az első 1,40 Å csúcsot feltehetően a 3-koordinációjú $^{[3]}\text{B}$ egységek alkotják, míg a második 1,60 Å csúcsot vegyesen $^{[3]}\text{B}$ és $^{[4]}\text{B}$ egységek alkotják. Ebből arra következtetünk, hogy a szerkezet felépítésében kevert állapot jelenik meg, ahol a szerkezetépítő egységek a $^{[3]}\text{B-O-}^{[4]}\text{Si}$ és $^{[4]}\text{B-O-}^{[4]}\text{Si}$ vegyes láncokat alkotnak. A szerkezeti egységek egymáshoz való kapcsolódása látható az 5. ábrán, 500 atomra vonatkoztatva (az ábrázoló program korlátai miatt). A SiO_4 tetraéderez egységek kialakulása mellett megfigyelhető a trigonális BO_3 -ra és a tetraéderez BO_4 -re jellemző egységek kialakulása, az így kialakuló üregek biztosítják a nagy radioaktív magok stabil beépülését.



5. ábra: A B15 minta szerkezeti ábrázolása a Si-B-O kötések megjelenítve, ahol a Si (piros), B (zöld) és O (kék).

Urán-tartalmú boroszilikát üvegek szerkezete

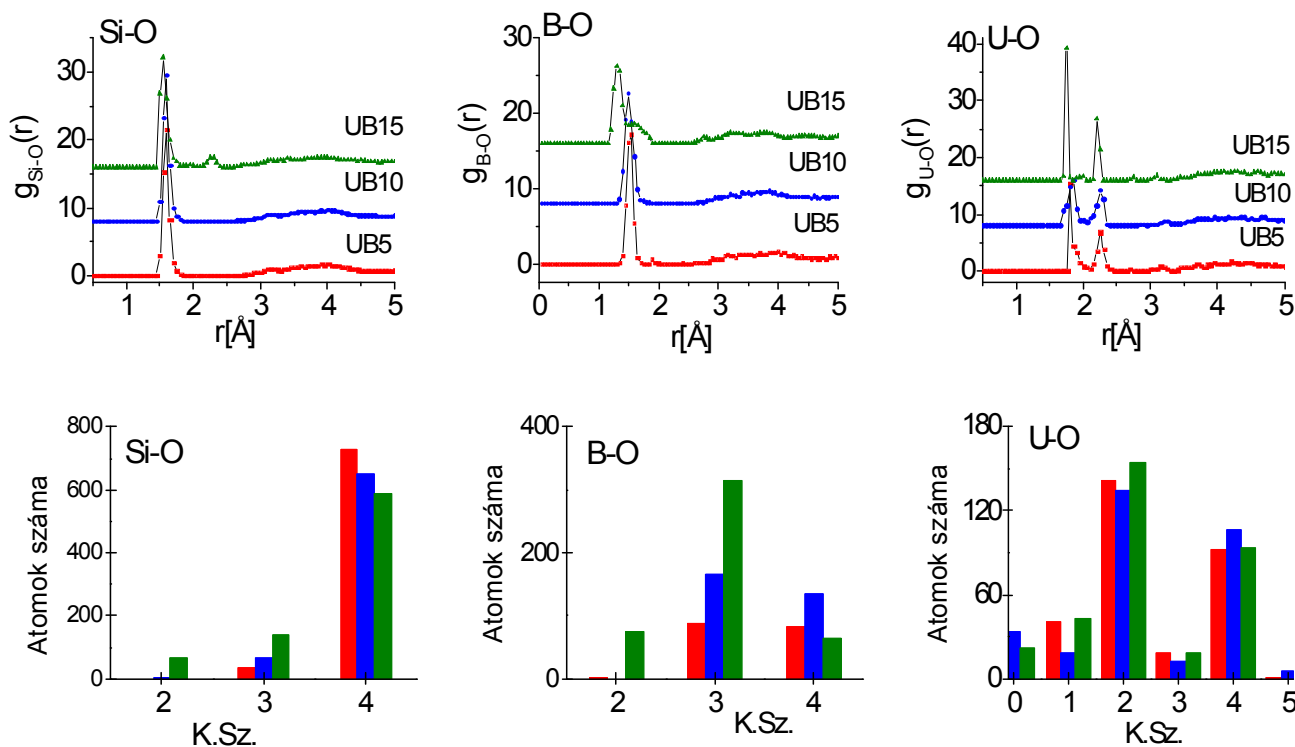
Az RMC modellezéssel illesztett neutron- és röntgendiffrakciós szerkezeti függvényeket mutatja be az urán-tartalmú üvegekre a 6. ábra.



6. ábra: Az urán-tartalmú boroszilikát üvegek kísérleti és RMC szimulációval illesztett a) neutron- és b) röntgendiffrakciós szerkezeti függvényei. Az üres karika a kísérleti görbét jelzi, míg a vonal az RMC-t.

Az urán-tartalmú boroszilikát minták szerkezeti függvényei nagy hasonlóságot mutatnak a mátrix-üvegek szerkezeti függvényeivel, ami arra utal, hogy az UO_3 bevitelével az üvegszerkezet lényeges elemei nem változnak. Az RMC modellezésből nyert parciális párkorrelációs függvényeket mutatja be a 7. ábra. A Si-O ($1,60\pm 0,01$ Å) és a B-O ($1,35/1,55\pm 0,1$ Å) elsőszomszéd távolságok nagyon jó egyezést mutatnak a mátrix-üvegnél kapott eredményekkel.

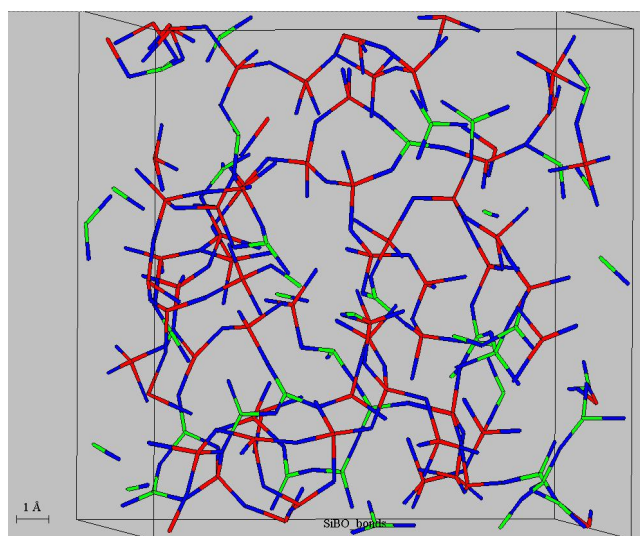
Mindhárom minta esetén az U-O parciális függvényre nagyon élesen felhasadó két csúcsot kapunk; a kisebb távolságnál kialakuló nagyobb intenzitású maximum 1,8; 1,84; $1,75\pm 0,1$ Å értékeknél, míg a második csúcs 2,24; $2,2\pm 0,1$ Å távolságnál az UB5, UB10, UB15 sorrendnek megfelelően. Irodalmi adatok alapján [12,13] az urán-tartalmú kristályos anyagokban uranil ion $[\text{UO}_2]^{2+}$ formálódik U-O_{axiális} 1,8 Å távolsággal, ami jó egyezést mutat a mi eredményünkkel. A második csúcs igen stabil és szimmetrikus, ami megfeleltethető az uranil ion U-O_{ekvatoriális} távolságának, jellegzetesen 2,2-2,24 Å értékeknél. Az RMC-vel számolt átlagos koordinációs számokra: K.Sz._{Si-O} = 3,95; 3,90; 3,64 és K.Sz._{B-O} = 3,47; 3,45; 3,1 értékeket kapunk, ami igen jól egyezik a mátrix-üvegnél kapott Si, B atomok oxigén koordinátságával.



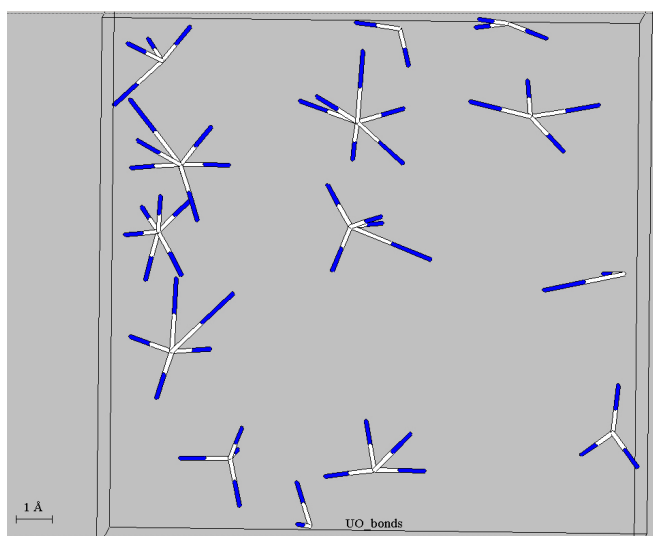
7. ábra: Parciális párkorrelációs függvények és a koordinációs számeloszlások az urán-tartalmú boroszilikát üvegekre: UB5 (piros), UB10 (kék) és az UB15 (zöld).

Ezen értékekből azt a következtetést vonjuk le, hogy az urán tartalmú üvegek alapszerkezetét is ¹¹B és ¹⁰B koordinációjú B atomok vegyes trigonális és tetraéderes ¹¹B-O-Si és ¹⁰B-O-Si környezetek alkotják, amit a 8a. ábrán szemléltetünk. Az uránatom környezetére a koordinációs számokból következtethetünk. A $K.Sz.U-O = 5,39; 5,55; 4,93$ értékeket kaptuk. Irodalmi adatok alapján azt tudjuk, hogy az U(VI),

U(V) és U(IV) koordináltsággal vesz részt vegyületeiben, a kapott eredményeink egyezők az irodalmi adatokkal (8b. ábra). Azt mondhatjuk, hogy a rövidebb 1,84 Å távolságnál az U atom 2 O atomot koordinál axiális pozícióban, a magasabb értéknél kialakuló 2,24 Å lévő távolság 3, többségében 4 oxigén atomot von magához az ekvatoriális pozíció kialakításában.



(a)

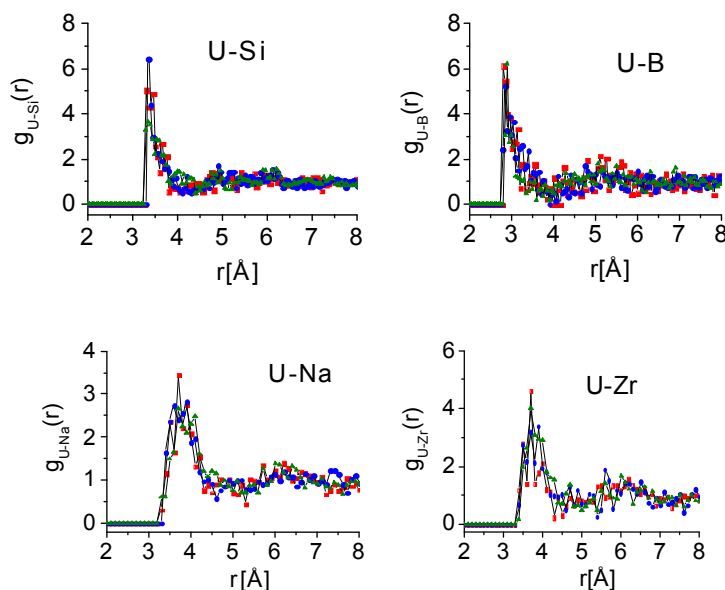


(b)

8. ábra: Az UB10 minta a) Si-B-O kötések szerkezeti ábrázolása, ahol a Si (piros), B (zöld) és O (kék); b) az U atom környezete, ahol az U (fehér) és az O (kék).

Erős korreláció figyelhető meg az U atom és a Si, B-üvegalakító, valamint a Na módosító és a Zr stabilizáló atomok között, amire a másodsomszéd távolságoknál

karakterisztikus eloszlást mutató U-Si, U-B, U-Na és az U-Zr parciális atomi párkorrelációs függvények utalnak (lásd 9. ábra).



9. ábra: Éles másodsomszéd távolságokat kapunk az U atom és az üvegalkotó (Si, B), a módosító (Na) és a stabilizáló (Zr) atomok között, az UB5 (piros), UB10 (kék) és az UB15 (zöld) mintákra.

Zárszó

Előállítottunk olyan több-komponensű mátrix-üveget, amely alkalmas lehet a radioaktív magok stabil befogadására. Meghatároztuk az 5-komponensű mátrix-üveg szerkezetét jellemző legfontosabb atomi elsőszomszéd távolságokat és a koordinációs számeloszlásokat. Megállapítottuk, hogy a mátrix-üveg szerkezeti felépítésében elsősorban a tetraédres koordinált $(\text{SiO}_4)^+$ egységek játszanak fontos szerepet, míg a bór 3-as és 4-es koordinált oxigén környezetben helyezkedik el. A bór egy része beépül a Si-alapú hálószerkezetbe és $^3\text{B-O-}^4\text{Si}$, illetve $^4\text{B-O-}^4\text{Si}$ vegyes láncok alakulnak ki.

Előállítottuk és vizsgáltuk a 6-komponensű urán tartalmú üvegsorozatot, amely az eddig ismert legnagyobb mennyiségben képes UO_3 -t befogadni. A neutron- és röntgendiffrakciós mérések kiértékelése során azt kaptuk, hogy nagyon stabil, amorf rendszer jön létre. Az urán tartalmú minták alapszerkezetének a felépítését tetraédres

SiO_4 egységek és vegyes trigonális BO_3 és tetraédres BO_4 egységek teszik lehetővé.

Az üveg alapszerkezete nem változik az uránatom bevitelével. Az U-O atomi parciális korrelációs függvény két elsőszomszéd távolságnál mutat éles eloszlást. A karakterisztikus másodsomszéd távolságok kialakulása nagyfokú szerkezeti stabilitásra utal, ahol az U atom O atomon keresztül kapcsolódik közvetlenül az üvegeképző-, módosító- és stabilizáló Si, B, Na, Zr atomokhoz. Az U atom átlagosan 5,6 O atomot koordinál. Ezek az eredmények arra engednek következtetni, hogy az uránatomok az alapszerkezetbe épülnek be és részt vesznek a szerkezet felépítésében, így stabilizálva a rendszert. Vizsgálataink alapján feltételezhető, hogy a boroszilikát üvegek a bemutatott összetétellel radioaktív hulladékok potenciális tároló anyagaként használhatók, jelentős gazdasági és környezeti megoldásokat kínálva a nagy aktivitású radioaktív hulladékok biztonságos tárolására.

Irodalomjegyzék

- [1] K.S. Chun, S.S. Kim, C.H. Kang: *Journal of Nuclear Materials* 2001, 298, 150.
- [2] M.I. Ojovan, E.W. Lee: *Metallurgical and Materials Transactions A* 2011, 42A, 837.
- [3] R.L. McGreevy, L. Pusztai: *Mol. Simul.* 1988, 1, 359.
- [4] G.E. Bacon: *Neutron diffraction*; Clarendon Press Oxford, 1975.
- [5] Special Feature section. In: *Neutron News* 3(3) (1992) 29.
- [6] E. Sváb, Gy. Mészáros, F. Deák: *Materials Science Forum* 1996, 228, 247.
- [7] Th. Proffen, S.J.L. Billinge, T. Egami, D. Louca: *Zeitschrift für Kristallographie* 2003, 18, 132.
- [8] H. Poulsen, J. Neuefeind, H.B. Neumann, J.R. Schneider, M.D. Zeidler: *J. Non-Cryst. Solids* 1995, 188, 63.
- [9] M. Fábián, E. Sváb, Gy. Mészáros, L. Kőszegi, L. Temleitner, E. Veress: *Zeitschrift für Kristallographie Suppl.* 2006, 23, 461.
- [10] M. Fábián, P. Jován, E. Sváb, Gy. Mészáros, T. Proffen, E. Veress: *J. Phys.: Condens. Matter* 2007, 19, 335209.
- [11] M. Fábián, E. Sváb, Th. Proffen, E. Veress: *J. Non-Cryst. Solids* 2010, 356, 441.
- [12] S. Siegel, H. Hoekstra, E. Sherry: *Acta Cryst.* 1966, 20, 292.
- [13] G.K. Liu, H.Z. Zhuang, J.V. Beitz, C.W. Williams, V.S. Vikhnin: *Physics of the Solid State* 2002, 44, 8.