

轻、重离子辐照烧绿石 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 导致的非晶结构变化

焦绪丽, 张 建*, 谢秋荣, 付上朝, 吴采宇,

曹留烜, 郭奇勋

(厦门大学能源学院, 福建 厦门 361102)

摘要: 采用标准固相反应烧结法制备烧绿石结构的 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 。在室温下, 用 800 keV Kr^{2+} 和 200 keV He^+ 进行辐照。辐照后的样品采用掠入式 X 射线衍射 (GIXRD) 表征。结果表明: 用 800 keV Kr^{2+} 辐照样品时, 辐照剂量达到 $2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ (相应 dpa (displacement per atom) 为 0.4) 时, 样品出现非晶化转变, 并且随着剂量的增加, 非晶化转变量不断增加, 增加至一定值后不再变化, 未出现完全的非晶化转变; 用 200 keV He^+ 进行辐照时, 即使辐照剂量增加至 $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ (dpa 为 1.25), 样品也没有出现非晶化转变。通过分子动力学模拟对结果进行分析, 发现: 重离子辐照时, 样品在较小范围内产生较多的缺陷, 且电子能损较低, 样品温度升高幅度较小, 缺陷复合率低, 易导致非晶化转变; 而轻离子辐照时结果相反。

关键词: 烧绿石; 非晶化转变; 离子辐照; 分子动力学; 弗伦克尔缺陷对

中图分类号: TL 11

文献标志码: A

随着我国核能的不断发展, 将产生越来越多的核废料, 其中的锕系核素通常具有长半衰期和高放射性^[1]。如何处理这些高放射性核废料是发展核能过程中必须解决的问题。目前, 国际公认的切实可行的方法是进行深地质处理, 即将高放射性核废料固化后, 择址深地质掩埋^[2]。 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 作为钛酸盐的一种, 因其化学稳定性好、浸出率低等优点, 成为固化铀的重要候选材料^[3, 4]。

烧绿石结构 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 属于空间群 $Fd-3m$ (No.227), 是萤石结构 MO_2 的衍生物, M 位置处有两种阳离子, 其中, 较大半径的 Lu^{3+} 位于 16d 位置处, 配位数为 8, 处于 8 个氧离子组成的立方体内, 较小半径的 Ti^{4+} 位于 16c 位置处, 配位数为 6, 处在 6 个氧离子构成的六面体内, 氧离子缺失 1/8, 以氧空位的形式表现出来, 氧离子和氧空位构成简单立方结构。

烧绿石结构 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 中, 阳离子、氧离子、氧空位有序存在^[5, 6]。

收稿日期: 2018-03-29 **录用日期:** 2018-05-04

基金项目: 国家自然科学基金 (11205128 和 11227804), 福建省自然科学基金 (2017J01007)

*通信作者: zhangjian@xmu.edu.cn (张建); qxguo@xmu.edu.cn (郭奇勋)

固化体会长期被核废料中高放射性核素 α 衰变时产生的反冲核辐照，一旦固化体出现辐照损伤，尤其是出现非晶化转变化，就会使其化学稳定性降低、浸出率提高^[7]。因此，作为潜在核废料陶瓷固化体的 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 的抗辐照性能被广泛研究。目前，关于 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 的辐照研究主要集中在重离子辐照引起的非晶化转变^[8]，以及轻离子辐照引起的肿胀^[9, 10]这两方面，并未就轻、重离子辐照 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 导致的不同损伤结果进行研究。所以，本文着重比较 200 keV He^+ 和 800 keV Kr^{2+} 辐照 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 时导致非晶化转变的难易程度，并从缺陷产生浓度和复合率分析了轻、重离子辐照出现不同非晶化转变结果的原因。

1. 实验

1.1 实验方法

1.1.1 样品制备

烧绿石采用标准的固相反应烧结法^[9]制备：以 Lu_2O_3 和 TiO_2 为原料，混合后球磨 4 h，将混合后的样品进行压片，在 1 300 °C 的高温炉（型号 KSL-1800X）中烧结 24 h，此时样品密度为理论密度的 85%。将第一次烧结的样品重新研磨压制，在 1 450 °C 下烧结 48 h，得到样品，测得密度为 7.038 g/cm³，为理论密度的 95.66%^[8]。最后将再次烧结的样品进行切割，并将样品表面抛光至如镜面。

1.1.2 离子辐照和 SRIM 模拟

采用美国静电公司（NEC）400 kV 离子注入机进行离子辐照实验，辐照温度为室温，离子通量为 10^{11} - 10^{13} cm⁻² s⁻¹，辐照离子为 800 keV Kr^{2+} 和 200 keV He^+ 。

运用 SRIM（stopping range of ion in matters）软件模拟计算 800 keV Kr^{2+} 和 200 keV He^+ 分别入射到 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 后，产生的点缺陷的个数和深度，以及电子能损与核能损的比值 (R_{ENSP})，计算时所有原子离位能均设置为 40 eV，靶材的密度为 7.328 g/cm³。

1.1.3 掠入式 X 射线衍射（GIXRD）表征

对样品辐照区进行 GIXRD 表征，使用 α -2 θ 扫描模式，其中 α 设置为 0.5°，以保证观察到的只有辐照层，入射 X 射线为 Cu K α ，扫描步长为 0.02°，每步停留时间为 2~4 s，观察一个样品所用的时间大约是 3 h^[11]。

1.2 分子动力学模拟

1.2.1 势函数

使用 LAMMPS 软件包进行分子动力学模拟。势函数采用长程库伦势和短程 Buckingham

势。Buckingham 势的截断距离为 2.0 nm（即当两个原子的距离大于 2.0 nm，其 Buckingham 势为 0），当两原子的距离小于 2.0 nm 时，表达式为

$$S_{ij} = A \times e^{-\frac{r_{ij}}{\rho}} - \frac{C}{r_{ij}^6}$$

式中 r_{ij} 为 i 和 j 的两个原子之间的距离， A 为排斥势能项大小修正参数， ρ 为排斥势能项变化率修正参数， C 为吸引势能项大小修正参数， A ， ρ ， C 的值见表 1。

表 1 烧绿石 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 的短程 Buckingham 势中的参数^[12]

Tab_1 Short-range Buckingham potential parameters for pyrochlore $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$

种类	A/eV	ρ/nm	$C/(\text{eV}\cdot\text{nm})$
$\text{O}^{2-}-\text{O}^{2-}$	9547.96	0.021 92	3.20
$\text{Lu}^{3+}-\text{O}^{2-}$	1618.8	0.033 849	1.927
$\text{Ti}^{4+}-\text{O}^{2-}$	2131.04	0.030 38	0

1.2.2 模拟盒子设置

采用的模拟盒子包含 5 632 个离子，其中，有 1 024 个 Lu^{3+} ，1 024 个 Ti^{4+} 和 3 584 个 O^{2-} ，即 $4 \times 4 \times 4$ 个晶胞。边界为周期性边界，在等温等压系综（即 NPT 系综：原子个数、模拟盒子所受压强以及所处环境的温度均是恒定值）下平衡状态^[13]。

1.2.3 点缺陷引入和判定

在本文中，通过在烧绿石中引入弗伦克尔缺陷对来模拟离子的辐照损伤^[14]：首先，随机选择一个原子，然后将该原子随机选择一个方向，放在距离原来位置 0.4 nm 的位置上。在此选择 0.4 nm 是为了防止间隙原子和空位的距离太近，在弛豫时发生复合。为保证模拟盒子的稳定性，需检测在距离间隙原子 0.15 nm 以内是否有其他原子的存在，如果有，则将此间隙原子放回原来位置，重新随机选择位置放置，不断重复此过程，直到此间隙原子 0.15 nm 以内区域不存在其他原子为止^[14]。

为了表征此材料的结构演变，需计算最后保留的弗伦克尔缺陷对的数量。在本文中，间隙原子和空位的判断，是通过将引入缺陷并弛豫后的结构同原有的完美烧绿石结构进行位置比对。其中，所有原子的坐标均采用相对位置坐标（即最大值为 1，进行归一化处理）。对于阳离子，若在阳离子的位置 0.1 nm 以内没有发现阳离子，则可以判定在此位置存在阳离子空位；若在此位置范围内存在两个即以上阳离子，则判定此处存在阳离子间隙原子。对于阴离子，若在其位置 0.07 nm 以内没有发现阴离子，则可判定在此位置存在阴离子空位；若

在此位置范围内有两个及以上阴离子，则判定在此处存在阴离子间隙原子。

1.2.4 非晶化转变的判断依据

通过比较当前状态与非晶态下的原子平均势能和密度，来判断样品是否发生非晶化转变^[14]。在 LAMMPS 中，可以发现，烧绿石的非晶化转变温度为 7 500 K。所以，在本模拟中，通过将模拟盒子加热到 8 000 K 并在此温度下保持 100 ps，然后以 2×10^{13} K/s 的速率将模拟盒子的温度从 8 000 K 降低至 300 K 以获得非晶态。快速的淬火可以阻止原子充分的弛豫，保证将更多的缺陷保存在模拟盒子中，从而获得非晶态。

2. 结果和讨论

2.1 XRD 表征结果

所制备样品的 XRD 谱图如图 1 所示，可以看出，样品中主要有两类衍射峰：萤石峰（P (222)，P (400)，P (440)）和超结构峰（P (111)，P (113)，P (133)，P (115)），与烧绿石结构的衍射峰完全一致，没有其他杂质峰，证明合成的样品为烧绿石 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 。

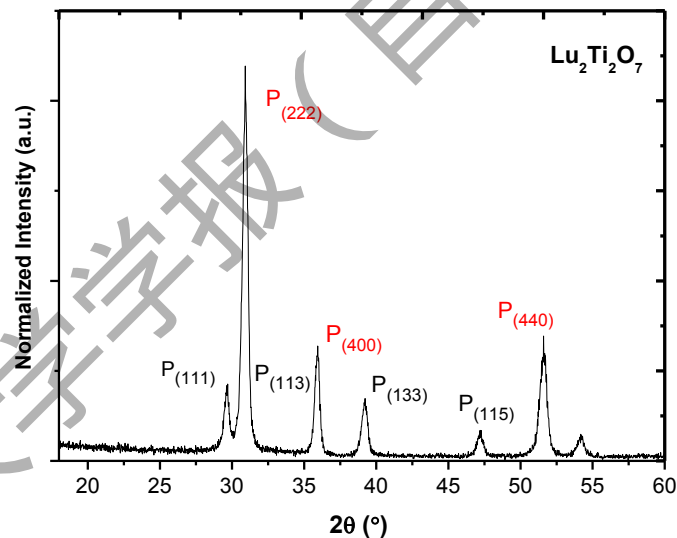


图 1 样品的 XRD 谱图

Fig. 1 XRD pattern of sample

图 2 是在室温下用 800 keV Kr^{2+} 和 200 keV He^+ 在不同剂量下辐照 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 得到的 GIXRD 谱图。如果在原始烧绿石结构的主衍射峰左侧出现一组衍射峰（F (111)，F (200)，F (220)），则可以判定有肿胀的萤石相生成。通过图 2 (a) 可以发现：在 800 keV Kr^{2+} 辐照下，当辐照剂量达到 $2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ (dpa (displacement per atom) 为 0.04) 时，部分有序烧绿石结构的 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 发生相变转化为无序萤石相；当辐照剂量为 $2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ (dpa 为 0.4) 时，

样品开始出现非晶相，且非晶相的比例约为 40%；当辐照剂量为 $2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ (dpa 为 4) 时，非晶相的比例约为 80%。且随着辐照剂量的增加，非晶相的比例始终到达不了 100%，其原因是生成了纳米晶^[8, 15]。从图 2 (b) 可以发现，在用 200 keV He⁺对烧绿石 Lu₂Ti₂O₇进行辐照时，即使剂量达到 $2.0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ (dpa 为 1.25)，样品也未出现非晶化转变现象，只是观察到部分烧绿石结构转变为萤石相。

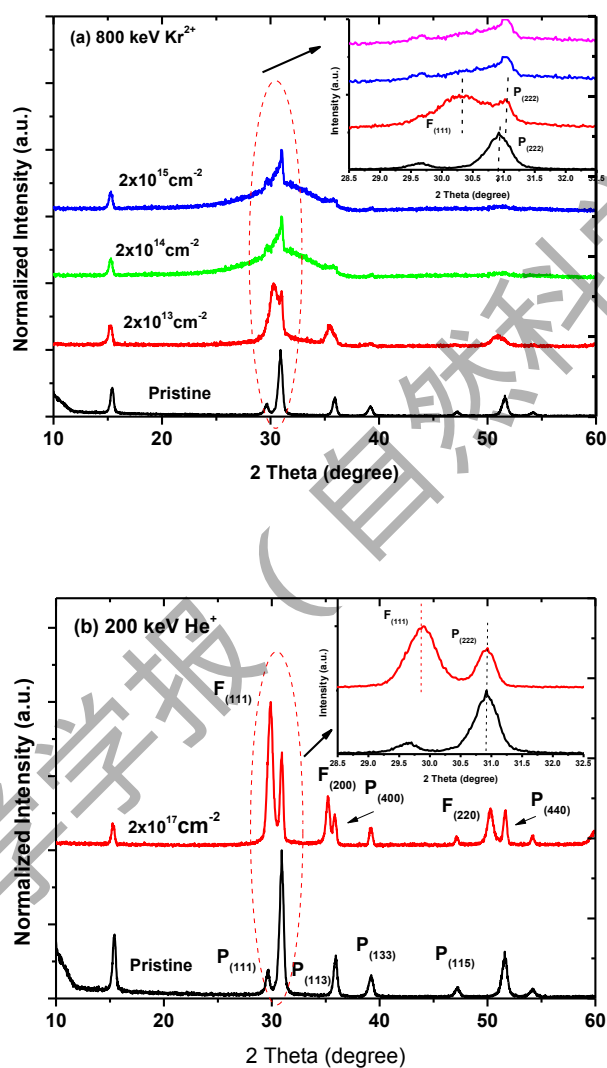


图 2 样品 Lu₂Ti₂O₇ 辐照前后的 GIXRD 谱图

Fig. 2 GIXRD patterns of pristine Lu₂Ti₂O₇ pellets and Lu₂Ti₂O₇ after irradiated

GIXRD 的结果表明，用 Kr²⁺离子进行辐照时，首先会发生部分有序烧绿石相转化为无序萤石相，然后当辐照剂量达到 $2 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ (dpa 为 0.4) 时，开始发生非晶化转变，且随着剂量的不断增加，非晶态比例也越来越高，增加至一定值后，非晶态比例不再变化。然而，用 200 keV He⁺离子进行辐照时，即使辐照剂量达到 $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-2}$ (dpa 为 1.25) 也只引起从

有序烧绿石结构到部分无序萤石结构的相变，未发生非晶化转变。

2.2 分子动力学模拟结果讨论

通过引入弗伦克尔缺陷对可以模拟离子辐照缺陷累积的过程。在本文中，使用 LAMMPS 模拟了原子的平均能量以及模拟体系的密度随着弗伦克尔缺陷对浓度的变化，并计算了在非晶态下原子的平均势能和 5 632 个原子的模拟盒子的密度，分别为 -34.376 eV 和 6.812 g/cm^3 ，结果如图 3 所示。可以看出，当模拟盒子内弗伦克尔缺陷对的浓度达到 25% 后，原子平均势能达到了 -34.376 eV ，且随着弗伦克尔缺陷对浓度的继续增加，原子平均势能基本不变。在弗伦克尔缺陷对浓度为 27% 时，模拟盒子的密度为 6.812 g/cm^3 ，而且随着弗伦克尔缺陷对浓度的增加，模拟盒子密度也基本不变。所以，当弗伦克尔缺陷对的浓度达到 25%~27% 时，有序烧绿石 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 将转变成非晶态。由上述结果可知，在离子辐照的过程中，将产生弗伦克尔缺陷对并且不断累积，当超过非晶化转变所需的临界浓度时，就会发生非晶化转变。

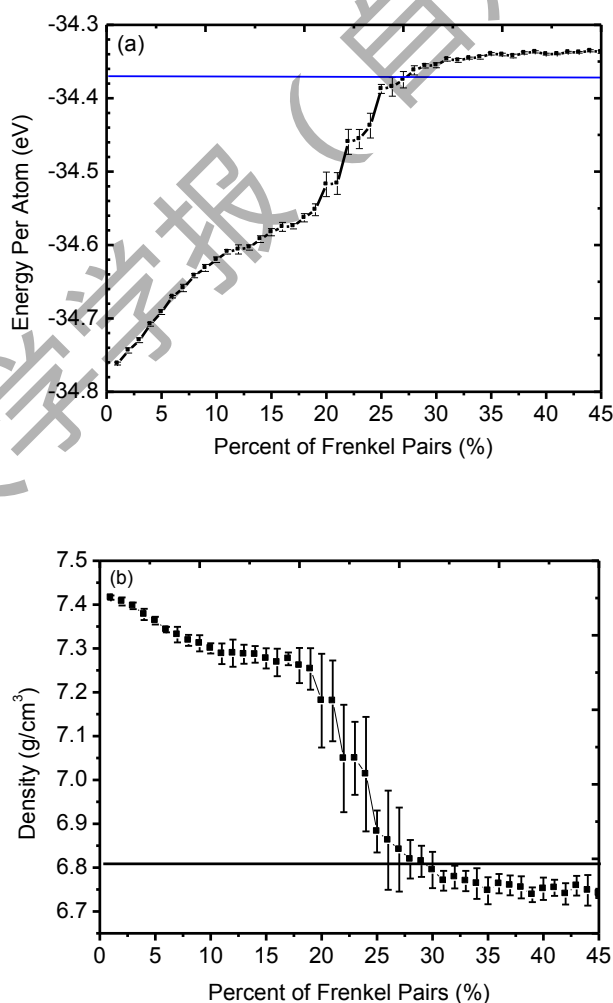
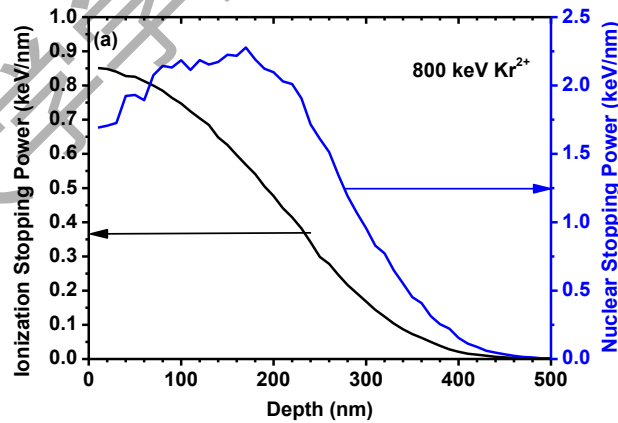


图3 Lu₂Ti₂O₇体系内原子平均能量 (a) 和体系密度 (b) 与引入的弗伦克尔缺陷对的关系图

Fig.3 shows the energy per atom (a) and the density (b) of the simulation box consisting of Lu₂Ti₂O₇ as a function of percent of Frenkel pairs

因此,在不考虑空位和间隙原子复合的情况下,当 He⁺和 Kr²⁺辐照产生的弗伦克尔缺陷对浓度均达到 30%左右时,样品就会发生非晶化转变。SRIM 模拟的空位和穿透深度的结果表明,一个 800 keV Kr²⁺在约 243 nm 的深度内产生了 5 057 个空位,而 200 keV He⁺在约 594 nm 深度内产生了 76 个空位。粗略计算可得出,一个 Kr²⁺离子辐照,产生的空位浓度大约为 20.81 nm⁻¹,而轻离子 He⁺约为 0.13 nm⁻¹,即 Kr²⁺产生的空位浓度为 He⁺的空位浓度的 160 倍。可见,由重离子引起的空位密度远高于由轻离子引起的空位密度,实验结果表明, Kr²⁺辐照时,当辐照剂量达到 2×10¹⁴ cm⁻² (dpa 为 0.4) 时,样品发生非晶化转变,在不考虑缺陷复合差异的情况下,在采用 3×10¹⁶ cm⁻² (dpa 为 0.19) 的 He⁺辐照时,样品将产生与 2×10¹⁴ cm⁻² Kr²⁺辐照相同的缺陷浓度。然而,即使 He⁺辐照剂量达到 2×10¹⁷ cm⁻² (dpa 为 1.25),样品仍不会出现非晶化转变。

通过对比轻、重离子辐照的过程,发现它们的能损分布存在极大差异。图 4 为 SRIM 计算的电子能损与核能损比值 (ratio of electronic-to-nuclear stop power, R_{ENSP})结果^[16],对于 800 keV Kr²⁺和 200 keV He⁺,电子能损所占的比例完全不同,且差距极大。



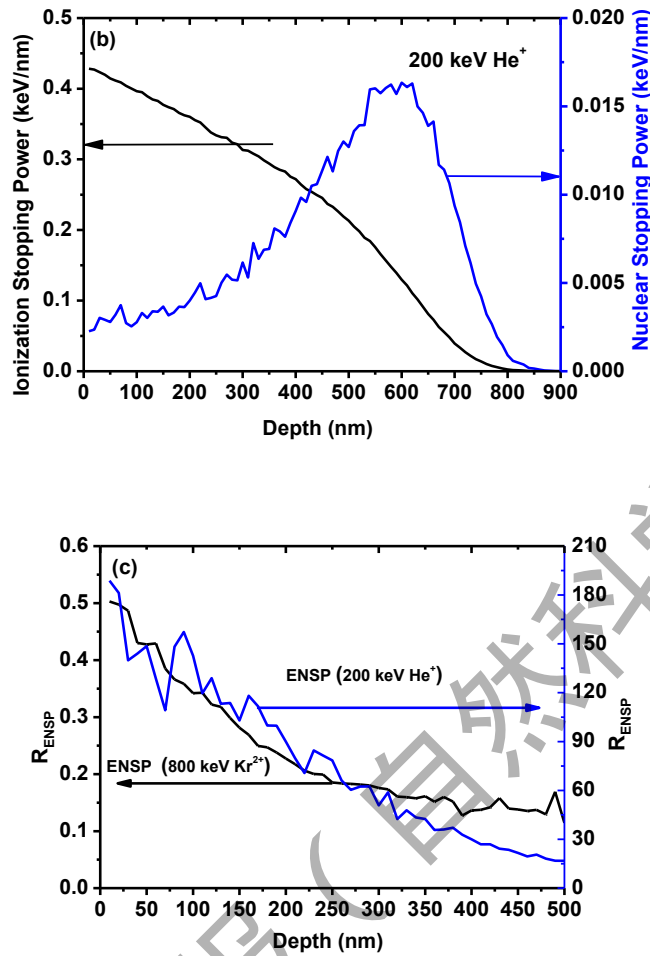


图 4 不同离子辐照烧绿石 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 后 R_{ENSP} 的计算结果

Fig. 4 The corresponding R_{ENSP} results for 800 keV Kr^{2+} and 200 keV He^+ in pyrochlore $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$

图 4 (a) 和 (b) 分别表示不同离子辐照样品的电子能损和核能损值。对于 Kr^{2+} 辐照，在深度为 200 nm 附近，核能损出现最大值为 2.25 keV/nm，在样品表面电子能损出现最大值为 0.85 keV/nm；对于 He^+ 辐照，核能损在 600 nm 处出现最大值为 0.016 keV/nm，电子能损在样品表面达最大值为 0.425 keV/nm。图 4 (c) 为 800 keV Kr^{2+} 和 200 keV He^+ 辐照样品的 R_{ENSP} ，表明 200 keV He^+ 离子辐照样品的 R_{ENSP} 显著大于 800 keV Kr^{2+} 辐照时的。采用 200 keV He^+ 辐照时， R_{ENSP} 在样品表面附近达到最大值为 190，并且随着深度的增加 R_{ENSP} 不断减小，在 300 nm 深度处减小至 60，在 500 nm 处减小至 20 左右。而采用 800 keV Kr^{2+} 辐照时， R_{ENSP} 在整个计算的深度范围内始终远小于 1。这表明采用 800 keV Kr^{2+} 辐照时，入射离子的能量绝大部分是转变为原子核能损，只有少部分是转变为电子能损；而用 200 keV He^+ 辐照时，入射离子的能量更多转变为电子能损，小部分转变为原子核能损。

在离子辐照过程中，核能损是指入射离子与靶材原子核相互作用，把能量传递给靶材原

子核的能量损失，该过程会导致该原子核动能增大，可能脱离原来位置，生成缺陷；电子能损则是指入射离子与靶材中原子核外的电子发生非弹性碰撞时所消耗的能量，此能量最终会以热能的方式体现，会导致样品的温度升高。总之，重离子辐照会产生更多的缺陷，但是被辐照区域温度升高幅度较小；而轻离子辐照时则与之相反。

为此，模拟计算了温度对弗伦克尔缺陷的复合率的影响，结果如图 5 所示。图 5 为保留下来的弗伦克尔缺陷对的个数和温度之间的关系，初始条件中将弗伦克尔缺陷对的浓度设定为 20% (1 126 个间隙和 1 126 个空位)，在不同温度下弛豫 100 ps，再将温度缓慢调整为室温。由于此模拟盒子的熔点约为 7 500 K，所以将弛豫温度设置在 300~5 500 K 之间。从模拟结果可以发现，温度较高时，缺陷复合率较大，这是由于温度较高时点缺陷的扩散增强，导致更多的缺陷复合。

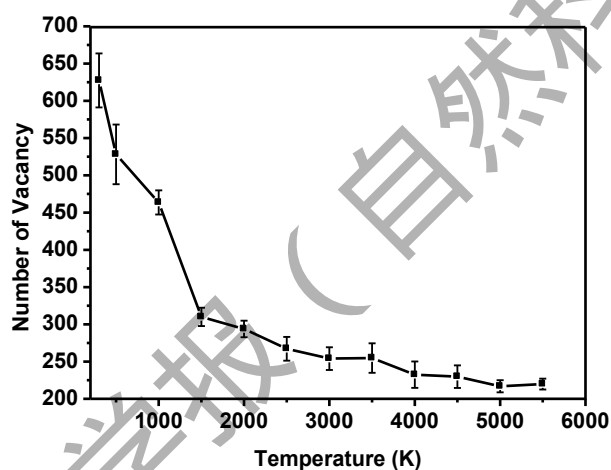


图 5 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 体系内保存下来的空位的个数与温度之间的关系

Fig. 5 The relationship between number of vacancy and the relaxing temperature in $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$

3. 结论

800 keV Kr^{2+} 辐照烧绿石结构的 $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ 时，会在较小的范围内产生较多的缺陷，且较低电子能损使得温度升高幅度较小，缺陷复合率较低，较多的缺陷被保留下来，导致自由能超过非晶态的自由能，最终会发生非晶化转变；而采用 200 keV He^+ 辐照时，在较大的范围内产生较少的缺陷，且温度较高，缺陷复合率较高，点缺陷存活率比较低，样品不易出现非晶化转变。由此，可以进一步推测，在室温下用 He^+ 辐照时，可能存在一个温度点，使得缺陷复合率和缺陷生成率相同，实际辐照区域温度超过临界非晶化转变温度，样品不会发生非晶化转变。

参考文献:

- [1] HERBST A M, HOPLEY G W. Nuclear energy now: why the time has come for the world's most misunderstood energy source[M]. Canada: John Wiley & Sons, 2007: 35-61.
- [2] 董晓囡, 张建, 郭奇勋, 等. Kr 离子辐照磷灰石陶瓷材料 $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6\text{F}_x\text{Cl}_{2-x}$ ($x=0,0.5,1.0,1.5$ 和 2.0) 导致的非晶相变[J]. 厦门大学学报(自然科学版), 2018, 57(1): 38-43.
- [3] HART K P. Retention of actinides in natural pyrochlores and zirconolites : *Radiochimica Acta* [J]. *Radiochimica Acta*, 1994, 66-67(s1):469-474.
- [4] SICKAFUS K E, MINERVINI L, GRIMES R W, et al. Radiation tolerance of complex oxides [J]. *Science*, 2000, 289(5480):748-751.
- [5] CHAKOUMAKOS B C. Systematics of the pyrochlore structure type, ideal $\text{A}_2\text{B}_2\text{X}_6\text{Y}$ [J]. *Journal of Solid State Chemistry*, 1984, 53(1):120-129.
- [6] LIAN J, CHEN J, WANG L M, et al.. Radiation-induced amorphization of rare-earth titanate pyrochlores [J]. *Physical Review B*, 2003, 68(13):134107.
- [7] LUMPKIN G R, EWING R C. Alpha-decay damage in minerals of the pyrochlore group [J]. *Physics & Chemistry of Minerals*, 1988, 16(1):2-20.
- [8] XIE Q R, ZHANG J, DONG X N, et al. Heavy ion irradiation-induced microstructural evolution in pyrochlore $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ at room temperature and 723 K [J]. *Journal of Solid State Chemistry*, 2015, 231:159-162.
- [9] ZHANG J, WANG Y Q, TANG M, et al. Helium irradiation induced micro-swelling and phase separation in pyrochlore $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ [J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2015, 342:179-183.
- [10] LI Y H, UBERUAGA B P, JIANG C, et al. Role of antisite disorder on preamorphization swelling in titanate pyrochlores [J]. *Phys Rev Lett*, 2012, 108(19):195504.
- [11] XIE Q R, ZHANG J, YIN D M, et al. Krypton ion irradiation-induced amorphization and nano-crystal formation in pyrochlore $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ at room temperature [J]. *Chinese Physics B*, 2015, 24(12):126103.
- [12] MINERVINI L, GRIMES R W, SICKAFUS K E. Disorder in pyrochlore oxides [J]. *Journal of the American Ceramic Society*, 2000, 83(8):1873-1878.
- [13] SOULIE A, MENUT D, CROCOMBETTE J P, et al. X-ray diffraction study of the $\text{Y}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ pyrochlore disordering sequence under irradiation [J]. *Journal of Nuclear Materials*, 2016, 480:314-322.
- [14] DEVANATHAN R, WEBER W J, GALE J D. Radiation tolerance of ceramics: insights from atomistic simulation of damage accumulation in pyrochlores [J]. *Energy & Environmental Science*, 2010, 3(10):1551-1559.
- [15] WEN J, SUN C, DHOLABHAI P P, et al. Temperature dependence of the radiation tolerance of nanocrystalline pyrochlores $\text{A}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ ($\text{A} = \text{Gd}, \text{Ho}$ and Lu) [J]. *Acta Materialia*, 2016, 110:175-184.
- [16] 谢秋荣, 张建, 董晓囡, 等. 正交结构 Gd_2TiO_5 陶瓷材料的轻重离子辐照效应比较 [J]. 厦门大学学报(自然科学版), 2017, 56(1):53-58.

Radiation Effects of Light and Heavy Ion Irradiation on Amorphous Structure in Pyrochlore $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$

JIAO Xuli, ZHANG Jian*, XIE Qiurong, FU Shangchao, WU Caiyu,

CAO Liuxuan, GUO Qixun

(College of Energy, Xiamen University, Xiamen 361102, China)

Abstract: The pyrochlore structure of $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ was prepared by standard solid-state reaction sintering method. Pyrochlore pellets of $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ were irradiated with 800 keV heavy Kr^{2+} and 200 keV light He^+ at room temperature. The microstructural evolution induced by different ion irradiation was observed using grazing incidence X-ray diffraction (GIXRD). The results showed that the phase transition of pyrochlore from ordered to partial amorphous was achieved under 800 keV Kr^{2+} irradiation with the fluence of $2 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ (the corresponding dpa (displacement per atom) was 0.4). The percent of amorphization kept increasing with the increasing of the fluence, until it reached a certain value, but no complete amorphous transition was observed. However, a defected fluorite phase transformation was observed in the pyrochlore $\text{Lu}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ under 200 keV He^+ irradiation. No amorphous transition was observed even under 200 keV He^+ with a higher fluence of $2.0 \times 10^{17} \text{cm}^{-2}$ (dpa was 1.25). Then molecular dynamics simulation was performed to interpret the above observation. The simulation results showed that when the sample was irradiated by heavy ions, more defects generated in a smaller range, the electron energy loss was lower, the temperature of the sample increased less, the recombination rate of defect was lower and the amorphous transitions occurred easily, while for the light ion irradiation, the results exhibited conversely.

Key words: pyrochlore; amorphous transition; ion irradiation; molecular dynamics; Frenkel defect pairs