

## МОДЕЛИРОВАНИЕ РОСТА КЛАСТЕРОВ В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ СИСТЕМЫ ЖЕЛЕЗО-МЕДЬ В ПРОЦЕССЕ ТЕРМИЧЕСКОГО ОТЖИГА

© 2012 П.Е. Львов, Н.С. Крестина

Ульяновский государственный университет

Поступила в редакцию 20.11.2012

В статье разработана модель роста кластеров в сплавах на основе системы железо-медь. Результаты расчета с помощью разработанной модели позволили удовлетворительно описать экспериментальные данные по кинетике образования кластеров в процессе термического отжига и определить коэффициенты диффузии для температуры 500С.

Ключевые слова: кинетика, наноразмерные кластеры, диффузия.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Одной из основных проблем реакторного материаловедения является проблема создания радиационно-стойких сплавов для эксплуатации при достаточно высоких температурах (300-350С) и давлениях (10 – 16 МПа) [1]. Ряд сплавов, используемых при строительстве корпусов атомных реакторов типа ВВЭР, содержат в своем составе небольшие концентрации атомов меди (обычно несколько десятых атомных процента). Поскольку растворимость меди в альфа-железе весьма мала ( $\sim 10^{-4}$ at.%), то корпусные стали часто оказываются пересыщенными по атомам примеси, что приводит к выпадению частиц второй фазы как в процессе термического отжига, так и под облучением.

Характер изменения микроструктуры сталей под действием облучения имеет важную особенность [2]. В условиях облучения происходит резкое увеличение концентрации радиационных дефектов (вакансий и междоузлий), что приводит к заметному ускорению диффузии атомов примесей (в т.ч. и меди). Наличие радиационно-ускоренной диффузии обуславливает быстрый рост кластеров (преципитатов) в пересыщенном растворе. Радиационно-ускоренный рост кластеров в целом оказывается сходным с термическим отжигом при более высокой температуре [3], что делает возможным применение для описания кинетики роста частиц второй фазы одних и тех же моделей.

Образование кластеров меди в корпусных сталях является одной из основных причин их упрочнения [4]. Повышение прочности при образовании преципитатов сопровождается повы-

шением температуры хрупко-вязкого перехода и, как следствие, их охрупчиванием, которое обычно связывают с взаимодействием дислокаций с кластерами [5,6]. Охрупчивание корпусов атомных реакторов является одной из причин, существенно снижающих их эксплуатационные характеристики в аварийных режимах.

В подавляющем большинстве теоретических работ, посвященных моделированию образования кластеров в сплавах на основе системы железо-медь, кластеры считаются состоящими из в основном из атомов меди (см. например [7, 8]). В действительности кластеры, имеющие размеры порядка нескольких нанометров в значительной степени обогащены атомами железа, доля которых в кластерах, имеющих радиус менее 1nm [9,10] может составлять величину порядка 45-50%. Авторам удалось объяснить аналогичную особенность формирования наноразмерных кластеров для сплава железо-хром с помощью представления о зависимости энергии поверхностного натяжения от состава сопряженных фаз [11-13]. Данное представление, в отличие от традиционно применяемого для описания кластерных систем капиллярного приближения, приводит к наличию зависимости состава кластеров от их размера [12,13].

В данной работе ставится задача применения разработанной авторами модели [12,13] к расчету образования кластеров в сплавах на основе системы железо-медь с учетом наблюдаемой в экспериментах зависимости состава кластеров от их размера.

### 2. РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ФАЗ В БИНАРНЫХ СПЛАВАХ, СОДЕРЖАЩИХ НАНОРАЗМЕРНЫЕ КЛАСТЕРЫ

Рассмотрим бинарный сплав, состоящий из атомов железа и меди, которые будем обозначать латинскими буквами *A* и *B* соответственно. Бу-

Львов Павел Евгеньевич, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник НИТИ.

E-mail: LvovPE@sv.uven.ru

Крестина Наталья Сергеевна, аспирант, младший научный сотрудник НИТИ. E-mail: nata-kr80@mail.ru

дем считать, что атомы железа образуют  $\alpha$ -фазу, в которой растворены атомы меди. Пусть в данном сплаве образуются кластеры, которые будем относить к частицам  $\beta$ -фазы.

Пусть кластеры имеют сферическую форму и в общем случае могут содержать произвольное количество атомов обоих сортов. Для описания геометрических характеристик кластеров будем пользоваться следующими соотношениями:

$$R = a(N_A^\beta + N_B^\beta)^{1/3}, a = \left(\frac{3v_0}{4\pi}\right)^{1/3}, \quad (1)$$

$$N^S = b(N_A^\beta + N_B^\beta)^{2/3}.$$

Здесь  $R$  – радиус кластера,  $v_0$  – объем, занимаемый одним атомом,  $N^S$  – количество атомов на поверхности кластера,  $b$  – параметр, зависящий от типа кристаллической решетки,  $N_A^\beta$ ,  $N_B^\beta$  – количество атомов железа или меди соответственно.

В работе [11] получено выражение для поверхностной энергии соответствующей плоской границе раздела между двумя фазами, образованными атомами сортов  $A$  и  $B$ . Обобщая полученные Беккером результаты на случай сферических выделений [12,13], можно получить соотношение для поверхностной энергии на границе раздела между кластером и матрицей:

$$G^S = \frac{z_S N^S}{z} \Omega (x_B^\beta - x_B^\alpha)^2, \quad (2)$$

где  $z$  – число ближайших соседей,  $z_S$  – среднее число связей между атомами  $\alpha$  и  $\beta$ -фаз, приходящихся на один атом кластера, определяемое типом кристаллической решетки кластера,

$\Omega = \frac{z}{2}(2H_{AB} - H_{AA} - H_{BB})$  – параметр квазихимического взаимодействия, определяемый через энтальпии парного взаимодействия между атомами сплава  $H_{ij}$ , ( $i, j = \{A, B\}$ ),  $x_B^\beta$  и  $x_B^\alpha$  – концентрации атомов меди в кластерах и матрице соответственно. Для концентраций выделившихся фаз справедливы соотношения:

$$x_B^\alpha = \frac{N_B^\alpha}{N_A^\alpha + N_B^\alpha}, x_B^\beta = \frac{N_B^\beta}{N_A^\beta + N_B^\beta}. \quad (3)$$

Как следует из формул (1) и (2) основной величиной определяемой особенностями кристаллической решетки является соотношение  $z_S b / z$ , которое, как показано в работе [13], слабо зависит от типа кристаллической решетки и оказывается равным  $1.318 \pm 0.004$  для ОЦК решетки и  $1.356 \pm 0.003$  для ГЦК решетки.

Проанализируем фазовое равновесие для описанного бинарного сплава на основе метода

Гиббса. Представим свободную энергию Гиббса сплава в виде суммы составляющих:

$$G = G^\alpha + G^\beta + G^S, \quad (4)$$

где  $G^i$  – энергия  $i$ -фазы ( $i = \{\alpha, \beta\}$ ), которая может быть определена с помощью теории регулярных растворов [14]:

$$G^i = \frac{z}{2} g_{AA}^i \frac{(N_A^i)^2}{N_A^i + N_B^i} + z g_{AB}^i \frac{N_A^i N_B^i}{N_A^i + N_B^i} + \frac{z}{2} g_{BB}^i \frac{(N_B^i)^2}{N_A^i + N_B^i} - kT \ln \left[ \frac{(N_A^i + N_B^i)!}{N_A^i! N_B^i!} \right] \quad (5)$$

Здесь введены обозначения:  $g_{mn}^i$  – энергия взаимодействия между атомами  $m$  и  $n$  в  $i$ -фазе ( $i = \{\alpha, \beta\}$ ;  $m, n = \{A, B\}$ ),  $z$  – количество ближайших соседей в кристаллической решетке.

Если рассматриваемая система находится в условиях термодинамического равновесия, то выполняется условие равенства химических потенциалов:

$$\mu_A^\alpha = \mu_A^\beta, \mu_B^\alpha = \mu_B^\beta$$

Рассчитывая химические потенциалы атомов, как свободную энергию, приходящуюся на один атом соответствующего сорта с помощью формул (1-5) может быть получена система уравнений, описывающая зависимость состава фаз от размера кластера [12]:

$$\frac{1 - x_B^\beta}{1 - x_B^\alpha} = \frac{X_A^\beta(T)}{X_A^\alpha(T)} \exp\left(-\frac{2z_S b a}{3z k T R} \Omega [x_B^\alpha - x_B^\beta] \cdot [x_B^\alpha + 2x_B^\beta]\right),$$

$$\frac{x_B^\alpha}{x_B^\beta} = \frac{X_B^\alpha(T)}{X_B^\beta(T)} \exp\left(\frac{2z_S b a}{3z k T R} \Omega [x_B^\alpha - x_B^\beta] \cdot [x_B^\alpha + 2x_B^\beta - 3]\right), \quad (6)$$

где введено обозначение  $X_n^i(T)$  – концентрация атомов сорта  $n$  в  $i$ -фазе для макроскопических выделений (т.е. соответствующая пределу  $R \rightarrow \infty$ ). Данные уравнения были успешно применены для описания экспериментальных данных по зависимости фазового состава сплава Fe-Cr от радиуса кластера [12, 13].

С помощью системы уравнений (6) была рассчитана зависимость фазового состава сплава Fe-Cu в зависимости от размера частиц второй фазы (рис. 1 и 2). Параметр квазихимического взаимодействия был вычислен с помощью данных по расчету энтальпии смешения разупорядоченного твердого раствора [15,16]:  $\Delta H_{mix} = 0.548 eV$ . Как следует из рис. 1, расчетная зависимость состава кластеров от их размера удовлетворительно описывает экспериментальные данные [9,10]. При расчетах варьировались значения предельных концентраций  $X_{Cu}^\alpha$  и  $X_{Fe}^\beta$ , которые оказались равными  $10^{-4} \text{at}\%$  и  $97 \text{at}\%$  соответственно.

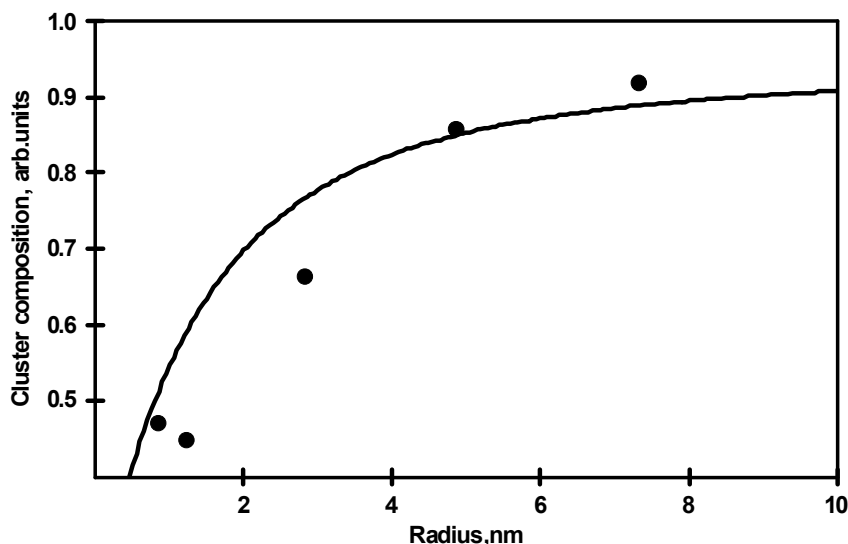


Рис. 1. Зависимость состава кластеров от их размера при температуре  $T = 500\text{C}$ : точки – эксперимент [8, 9], сплошная линия – расчет

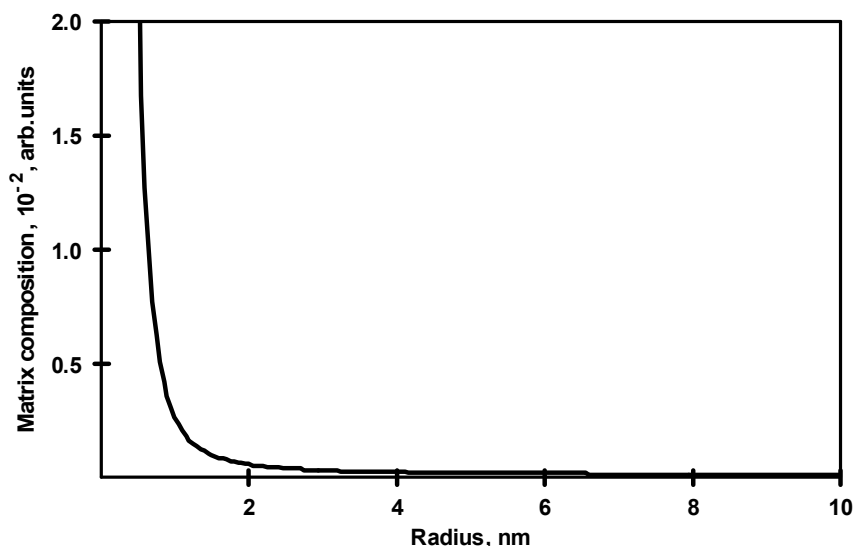


Рис. 2. Расчетная зависимость равновесной концентрации атомов меди в альфа-железе от радиуса кластеров при температуре  $T=500\text{C}$

Следует заметить, что полученное асимптотическое значение растворимости атомов меди в железе несколько отличается от традиционно приводимых в литературе значений, которые для температуры  $500\text{C}$  составляют  $5 - 7 \cdot 10^{-4} \text{ at. \%}$  [8]. Это может быть объяснено тем, что в процессе длительного отжига в сплавах присутствуют кластеры, которые повышают равновесную растворимость (это следует, например, из известного соотношения Гиббса-Томсона), т.е. наблюдаемая в экспериментах растворимость соответствует сплавам, в которых распад еще не закончился. Кроме того, для рассматриваемой системы могут существенное влияние оказывать упругие напряжения на границе между кластером и матрицей, которые в данной модели не учитываются.

### 3. КИНЕТИКА ОБРАЗОВАНИЯ И РОСТА НАНОРАЗМЕРНЫХ КЛАСТЕРОВ В СПЛАВЕ $\text{Fe-1.4at\%Cu}$

Рассмотрим процесс образования кластеров в сплаве  $\text{Fe-1.4at\%Cu}$ , находящегося при постоянной температуре  $T=500\text{C}$  на основе методов кинетики квазимолекулярных реакций.

Предположим, что в процессе термического отжига образуются кластеры. В соответствии с разработанной термодинамической моделью в бинарных сплавах равновесные концентрации фаз в присутствии наноразмерных кластеров сближаются, что достаточно хорошо видно на примере рассмотренного сплава  $\text{Fe-Cu}$ . В случае равенства составов обеих фаз энергия поверхностного натяжения оказывается равной нулю,

что означает возможность образования кластеров по безактивационному механизму. В случае малых концентраций примесей (как например, в случае меди в железе) наиболее вероятным представляется флуктуационный механизм образования кластеров малого размера (зародыши). Очевидно, что флуктуации должны быть исчезающе малы для концентраций равных равновесной концентрации примеси, поэтому скорость генерации зародышей в первом приближении может быть представлена в виде линейного разложения по степени пересыщения матрицы по атомам меди:

$$\left(\frac{dC(R_0, t)}{dt}\right)_{gen} \approx G(x_B(t) - x_B^\alpha),$$

где  $C(R_0, t)$  - концентрация зародышей в момент времени  $t$ ,  $x_B(t)$  - концентрация (неравновесная) атомов меди в матрице в момент времени  $t$ ,  $x_B^\alpha$  - равновесная концентрация меди в железе,  $R_0$  - радиус зародыша.

Предположим, что процесс роста кластеров обусловлен диффузионным механизмом атомов меди в кластере, тогда скорость изменения числа частиц меди, находящихся внутри кластера описывается с помощью известного соотношения [17]:

$$\frac{dN_B^\beta}{dt} = \frac{4\pi}{v_0} RD_B (x_B(t) - x_B^\alpha(R)), \quad (7)$$

где  $x_B^\alpha(R)$  - равновесная концентрация меди в альфа-железе над искривленной поверхностью кластера,  $D_B$  - коэффициент диффузии меди в альфа-железе.

Будем полагать, что количество железа в кластер определяется квазиравновесными условиями транспорта атомов матрицы через границу преципитата и зависит только от его размера. Это предположение справедливо, если диффузия железа внутрь преципитата происходит очень быстро по сравнению с присоединением атомов меди.

Образующиеся в процессе термического отжига наблюдаются кластеры радиусом от 0.3 до 10nm [9, 10, 18]. Такие кластеры содержат от нескольких десятков до нескольких сотен тысяч атомов, поэтому для эффективного применения методов кинетики молекулярных реакций необходимо перейти от переменной  $N_B^\beta$  к переменной  $r$ , которая определяется соотношением

$$N_B^\beta = \left(\frac{r}{a}\right)^3. \quad (8)$$

Новая переменная  $r$  - имеет смысл радиуса, который имел бы кластер, полностью состоящий из атомов меди. Выполняя данную замену пере-

менных в выражении (7) с учетом зависимости радиуса кластера  $R(r)$  от переменной  $r$  и концентрации атомов меди в кластере  $x_B^\beta(r)$ :

$$R(r) = \frac{r}{(x_B^\beta(r))^{1/3}} \quad (9)$$

может быть получено выражение для скорости изменения величины  $r$ :

$$\frac{dr}{dt} = \frac{D_{Cu}}{r(x_B^\beta(r))^{1/3}} (x_B(t) - x_B^\alpha(r)). \quad (10)$$

С учетом сделанных предположений о механизмах зарождения и роста кластеров может быть записано уравнение, для скорости изменения концентрации зародышей  $C(r_0, t)$ , характеризующих параметров:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(r_0, t)}{\partial t} = & G(x_B(t) - x_B^\alpha) - k(r_0)C(r_0, t)x_B(t) + \\ & + g(r + \delta r)C(r + \delta r, t), \end{aligned} \quad (11)$$

где введен параметр генерации  $G$ , определяющий скорость зарождения и распада зародышей размера  $r_0$ . Авторами [9, 10] сделана оценка критического размера кластера, которое оказалось равным  $R_0 = 0,33 \text{ нм}$  (т.е. кластер занимает объем в пределах 1-2 координационных сфер). Пересчет значения  $R_0$  с помощью формулы (10) приводит к значению  $r_0 = 0,25 \text{ нм}$ .

Вероятность увеличения размера кластера от  $r$  на  $r + \delta r$  за время  $\delta t$  может быть получена из формулы (12):

$$k(r) = \left(\frac{1}{\delta t}\right)_{grow} = \frac{D_{Cu}}{r \delta r (x_B^\beta(r))^{1/3}}, \quad (12)$$

и для перехода от  $r$  к  $r - \delta r$

$$g(r) = \left(\frac{1}{\delta t}\right)_{dem} = k(r)x_B^\alpha(r). \quad (13)$$

Скорость изменения концентрации кластеров  $C(r, t)$ , характеризующих переменной  $r$ , может быть определена с помощью кинетического уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(r, t)}{\partial t} = & k(r - \delta r)C(r - \delta r, t)x_{Cu}^\alpha + g(r + \delta r)C(r + \delta r, t) - \\ & - (k(r)x_B(t) + g(r))C(r, t). \end{aligned} \quad (14)$$

Уравнения (11) и (14) следует решать совместно с законом сохранения числа частиц в системе:

$$C_B^{tot} = \frac{x_B(t)}{v_0} + \sum_r \left(\frac{r}{a}\right)^3 C(r, t). \quad (15)$$

#### 4. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ОБРАЗОВАНИЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ КЛАСТЕРОВ В СПЛАВЕ Fe-Cu

Проведем моделирование процесса образования кластеров в сплаве Fe-1.4at%Cu в процессе термического отжига в соответствии с разработанной моделью и уравнениями (10-15).

Результаты расчета изменения среднего размера кластеров и их концентрации  $C_p(t) = \sum_r C(r,t)$

в процессе термического отжига при температуре  $T=500\text{C}$  приведены на рис. 3 и 4. Как следует из рисунков, результаты расчетов достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными, приведенными в работах [9, 10]. При расчетах были определены: коэффициент диффузии атомов меди  $D_{Cu}$  и коэффициент  $G$ , описываю-

щий скорость образования зародышей при температуре 500C. Полученные значения равны:  $D_{Cu} = 3.12 \cdot 10^{-19} \text{m}^2 / \text{s}$  и  $G = 7.2 \cdot 10^{-6} \text{s}^{-1}$ . Полученное значение коэффициента диффузии при температуре 500C согласуется с расчетным значением коэффициента диффузии меди в сплаве Fe-1.1at%Cu-1.4at%Ni, который составляет  $2.0 \cdot 10^{-19} \text{m}^2 / \text{s}$  [8].

Следует заметить, что методы кинетики квази-молекулярных реакций применялись также другими авторами для моделирования образования кластеров в сплавах на основе системы железо-медь [7,8]. Однако в данных работах не учитывается зависимость состава кластеров от их размера, что приводит к заметному отклонению расчетных зависимостей от экспериментальных данных на ранних стадиях отжига, когда преобладают кластеры, характеризующиеся радиусом менее 2nm.

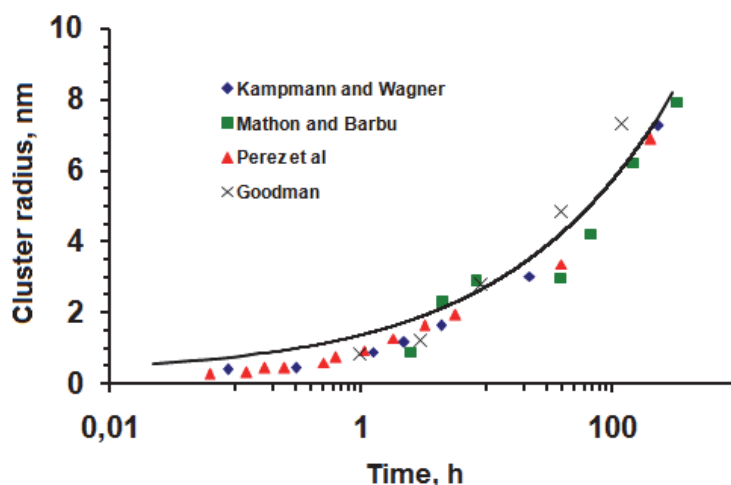


Рис. 3. Зависимость среднего радиуса кластеров в сплаве Fe-1.4at%Cu от времени отжига: сплошные линии – результат расчета; точки – эксперимент (Goodman – [13,14], Mathon and Barbu [19], Perez et al [16], Kampmann and Wagner [18])

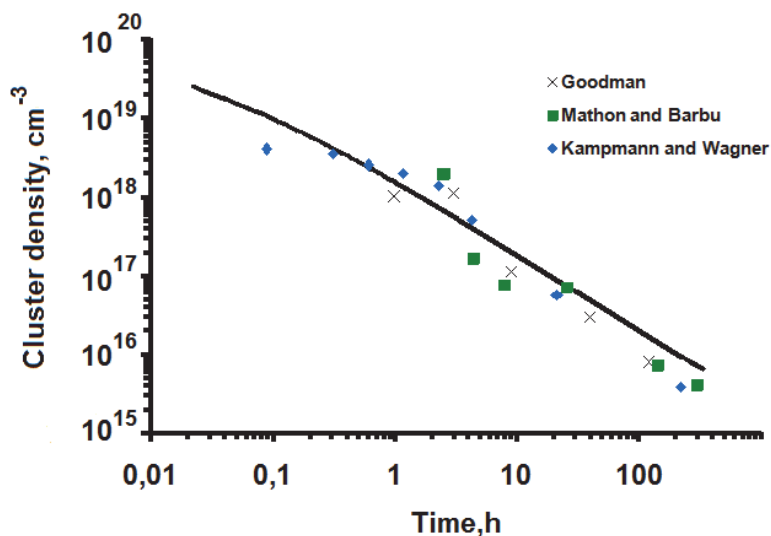
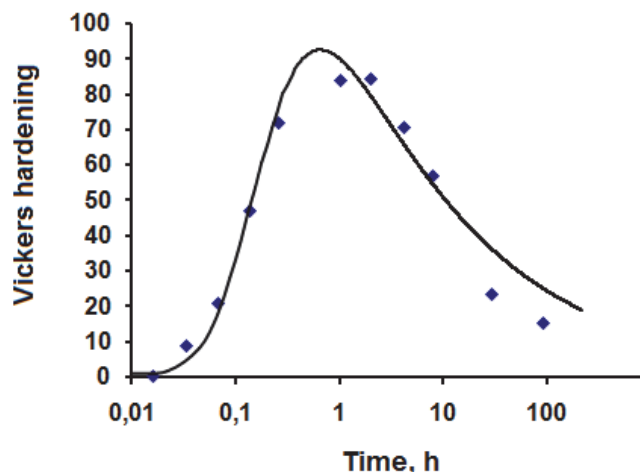


Рис. 4. Зависимость концентрации кластеров в сплаве Fe-1.4at%Cu от времени отжига: сплошные линии – результат расчета; точки – эксперимент (Goodman – [13, 14], Mathon and Barbu [19], Kampman and Wagner [18])



**Рис. 5.** Зависимость упрочнения сплава Fe-1.4at%Cu от времени отжига при температуре 500С: точки – эксперимент [16], сплошная линия – расчет, проведенный в данной работе для кластеров  $R > 0.8\text{nm}$

Одним из основных приложений по расчету кинетики роста кластеров является прогнозирование прочностных свойств материалов. Одной из наиболее известных моделей упрочнения сплавов кластерами является модель Орована [1], в основу которой положено предположение о том, что кластеры препятствуют движению дислокаций и тем самым приводят к упрочнению материалов и изменению температуры хрупко-вязкого перехода. В соответствии с данной моделью упрочнение сплава описывается соотношением:

$$\Delta H_V \sim \sqrt{\langle R \rangle C_p},$$

где  $\Delta H_V$  – изменение микротвердости сплава по Викерсу,  $\langle R \rangle$  – средний размер кластеров,  $C_p$  – концентрация кластеров, непроницаемых для дислокаций.

В данной работе был проведен расчет упрочнения сплава Fe-1.4at%Cu в зависимости от времени отжига в соответствии с моделью Орована для кластеров с радиусом больше 0.8nm. На рис. 5 представлены результаты расчета упрочнения в сплаве Fe-1.4at%Cu отжженного при температуре 500С. Как следует из рисунка, полученные расчетные зависимости удовлетворительно описывают экспериментальные данные по упрочнению сплава на основе системы Fe-Cu в процессе термического отжига.

## ВЫВОДЫ

1. Разработанная авторами модель фазового равновесия сплавов, содержащих кластеры, позволила рассчитать зависимость фазового состава сплава железо-медь от размера выделений. Модель позволила удовлетворительно описать экспериментальные данные по зависимости состава кластеров от их размера. Результаты расчета, указывают, что наноразмерные кластеры в

сплаве Fe-Cu содержат в 10-20 раз больше атомов железа, чем макроскопические фазовые выделения, что согласуется с экспериментальными данными других авторов.

2. На основе методов кинетики молекулярных реакций разработана модель зарождения и роста кластеров в сплаве железо-медь в процессе термического отжига. Для определения кинетических коэффициентов были использованы результаты термодинамических расчетов фазового состава сплава от размера кластеров.

Модель позволила достаточно хорошо описать изменение при термическом отжиге основных характеристик распределения фаз сплава Fe-1.4at%Cu: средний размер кластеров, их состав и концентрацию, функцию распределения кластеров по размерам. Расчетные зависимости достаточно хорошо описывают экспериментальные данные других авторов. При расчетах определен коэффициент диффузии атомов меди для трех различных температур 500С, который составил  $D_{Cu} = 3.12 \cdot 10^{-19} \text{m}^2/\text{s}$ , который согласуется с результатами приводимыми другими авторами.

3. С помощью проведенных расчетов и модели Орована удалось удовлетворительно описать экспериментальные данные по упрочнению сплава Fe-1.34at%Cu в процессе термического отжига при температуре 500С.

*Работа выполнена при поддержке гранта Работы выполнена при поддержке грантов РФФИ №12-02-97033-р\_поволжье\_a и ФЦП “Научные и научно-педагогические кадры инновационной России” на 2009-2013 годы”.*

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бескоровайный Н.М., Калинин Б.А., Платонов П.А., Чернов И.И. Конструкционные материалы ядерных реакторов М.: Энергоатомиздат, 1995. 704 с.

2. Barashev A.V., Golubov S.I., Bacon D.J., Flewitt P.E.J., Lewis T.A. Copper precipitation in Fe-Cu alloys under electron and neutron irradiation // *Acta Materialia*. 2004. Vol.52. P.877-886.
3. *Barbu A., Mathon M.H., Maury F., Belliard J.F., Beuneu, B. and de Novion C.H.* A comparison of the effect of electron irradiation and of thermal aging on the hardness of FeCu binary alloys // *Journal of Nuclear Materials*. 1998. Vol. 257. P.206-211.
4. *Morita K., Ishino S., Tobita T., Chimi Y., Ishikawa N., Iwase A.* Use of high energy ions for the mechanistic study of irradiation induced embrittlement in pressure vessel steels using Fe-Cu model alloys// *Journal of Nuclear Materials*. 2002. Vol.304. P.153-160.
5. *Bacon D.J., Osetsyki Yu.N.* Hardening due to copper precipitates in  $\alpha$ -iron studied by atomic scale modeling // *Journal of Nuclear Materials*. 2004. Vol.329-333. P.1233-1237.
6. *Hyde J.M., English C.A.* An Analysis of the Structure of Irradiation induced Cu-enriched Clusters in Low and High Nickel Welds // *Mat. Res. Soc. Symp.* 2001. Vol.650. P. R6.6.1-R6.6.12.
7. *Mathon M.H., Barbu A., Dunsteter F., Maury F., Lorenzelli N., de Novion.* Experimental study and modeling of copper precipitation under electron irradiation in dilute Fe-Cu binary alloys // *Journal of Nuclear Materials*. 1997. Vol.245 P.224-237.
8. *Soisson F., Fu C.C.* Cu-precipitation kinetics in  $\alpha$ -Fe from atomistic simulations: vacancy-trapping effects and Cu-cluster mobility// *Physical Review B*. 2007. Vol.76. ID. 214102.
9. An FIM-Atom probe study of precipitation of copper from iron-1.4at.pct copper. Part I: field ion microscopy / *S.R. Goodman, S.S. Brenner, J.R. Low jr* // *Metallurgical transactions*, 1973. Vol.4. P.2363-2369.
10. An FIM-Atom probe study of precipitation of copper from iron-1.4at.pct copper. Part II: atom probe analyses / *S.R. Goodman, S.S. Brenner, J.R. Low jr* // *Metallurgical transactions*. 1973. Vol.4. P. 2371-2378.
11. *Becker R.* Die Keimbildung bei der Ausscheidung in metallischen Mischkristallen // *Annalen der Physik*. 1938. Vol.32. №5. P.128-140.
12. *Svetukhin V.V., Lvov P.E., Tikhonchev M.Yu., Gaganidze E., Detloff C.* Kinetics and thermodynamics of Cr nanocluster formation in Fe-Cr system // *Journal of Nuclear Materials*. 2011, Vol.415. P.205-209.
13. *Львов П.Е., Светухин В.В.* Термодинамика фазового равновесия бинарных сплавов, содержащих наноразмерные преципитаты // *Физика твердого тела*. 2011. Vol.53, №2. С.394-399.
14. *Свеллин Р.* Термодинамика твердого состояния М. *Металлургия*, 1968. 316с.
15. *Vincent E., Becquart C.S., Pareige C., Pareige P., Domain C.* Precipitation of the FeCu system: A critical review of atomic kinetic Monte Carlo simulations // *Journal of Nuclear Materials*. 2008. Vol.373. P.387-401.
16. *Le Bouar Y. and Soisson F.* Kinetic pathways from embedded-atom-method potentials: Influence of the activation barriers // *Physical review B*. 2002, Vol.65. ID.094103.
17. *Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* *Физическая кинетика* М. Наука, 1976. 528с.
18. Low-temperature solubility of copper in iron: experimental study using thermoelectric power, small angle x-ray scattering and tomographic atom probe / *M. Perez, F. Perrard, V. Massardier, X. Kleber, A. Deschamps, H. de Monestrol, P. Pareige and G. Covarel* // *Philosophical magazine*. 2005. Vol.85, №20. P.2197-2210.
19. *Christien F., Barbu A.* Modelling of copper precipitation in iron during thermal aging and irradiation // *Journal of Nuclear Materials*. 2004. Vol.324. P.90-96.

## SIMULATION OF CLUSTER GROWTH IN IRON-COPPER BASED ALLOYS AT THERMAL AGEING

© 2012 P.E. Lvov, N.S. Krestina

Ulyanovsk State University

In this work we have developed the model of cluster growth in iron-copper based alloys. The simulation results based on the developed model allowed to describe the experimental results of the cluster growth kinetics during thermal ageing and to determine the diffusion coefficients for different temperatures 500C. Key words: kinetics, nanosized clusters, diffusion.

---

*Pavel Lvov, Candidate of Physics and Mathematics, Senior Research Fellow at the Technological institute.*

*E-mail: LvovPE@sv.uven.ru*

*Natalya Krestina, Post-Graduate Student, Associate Research Fellow at the Technological Institute.*

*E-mail: nata-kr80@mail.ru*