

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ КЛАСТЕРОВ В СПЛАВАХ НА ОСНОВЕ Fe-Cr

© 2012 В.В. Светухин<sup>1</sup>, П.Е. Львов<sup>1</sup>, Э. Гаганидзе<sup>2</sup>, Н.С. Крестина<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ульяновский государственный университет

<sup>2</sup>Технологический институт Карлсруэ, институт Материаловедения, Германия

Поступила в редакцию 20.11.2012

Разработана модель радиационно-стимулированного образования частиц второй фазы в бинарных сплавах в условиях облучения. Модель применена для описания роста частиц второй фазы в сплавах Fe-XCr ( $X = 12, 14, 16, 20$  at.%), оценен коэффициент диффузии атомов хрома под облучением  $D_{Cr} = 1.4 \cdot 10^{-19} \text{ cm}^2/\text{s}$ , что почти на семь порядков выше, чем соответствующее значение обусловленное термическими процессами.

Ключевые слова: модель, радиационно-стимулированное образование частиц, сплав, термические процессы.

### 1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы существенно возрос интерес к исследованию различных свойств хромосодержащих сталей как одних из наиболее перспективных материалов атомной техники [1, 2]. Данный вид сталей, как правило, характеризуется высокой степенью устойчивости к радиационному набуханию при сохранении пластичности в условиях реакторного облучения. Данные свойства обычно связывают с образованием в них  $\alpha'$ -фазы, которая представляет собой кластеры, в основном состоящие из атомов хрома [3-5].

Важной особенностью  $\alpha'$ -фазы в сплавах на основе системы железо-хром является ее заметное обогащение атомами железа по сравнению с макроскопическими выделениями. Эта особенность наблюдалась экспериментально как в процессе термического отжига [5], так и под облучением [6] и может быть объяснено влиянием энергии межфазной границы на составы сосуществующих фаз [7, 8]. Это влияние становится особенно заметным в случае наноразмерных кластеров и может приводить к изменению составов фаз в несколько раз. С учетом данного обстоятельства удается построить модель [7] на

основе известных методов кинетики квазимолекулярных реакций (см. например, [9]), что позволило удовлетворительно описать кинетику образования кластеров в условиях термического отжига в сплаве Fe-20%Cr при температуре  $T = 773 \text{ K}$  [7].

При облучении сплавов в реакторах происходит многократное повышение концентрации радиационных дефектов [10, 11]. Если предположить, что процесс диффузии атомов сплава происходит по  $D_{Cr} = 1.4 \times 10^{-19} \text{ cm}^2/\text{s}$  вакансионному механизму, то можно ожидать резкого увеличения скорости диффузионных процессов (пропорционально концентрации вакансий), а соответственно и радиационно-стимулированного образования кластеров, которое наблюдалось экспериментально [6, 11].

В данной работе предполагается рассмотрение  $\alpha'$ -фазы в сплавах Fe-Cr в условиях облучения на основе разработанной модели образования и роста кластеров в условиях термического отжига [7]. Для решения этой задачи необходимо определить влияние радиационных дефектов, образующихся в условиях реакторного облучения, а также оценить изменение коэффициента диффузии и степени пересыщения твердого раствора под действием облучения.

### 2. ФАЗОВЫЙ СОСТАВ СПЛАВА FE-CR, СОДЕРЖАЩИЙ НАНОРАЗМЕРНЫЕ КЛАСТЕРЫ

Рассмотрим бинарный сплав Fe-Cr, в котором произошло образование кластеров. Пусть кластеры имеют сферическую форму и в общем случае могут содержать произвольное количество атомов хрома и железа. Для учета особенностей кристаллической решетки, а также установления

*Светухин Вячеслав Викторович, доктор физико-математических наук, профессор, директор Научно-исследовательского технологического института.*

*E-mail: sla-va@sv.uven.ru*

*Львов Павел Евгеньевич, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Научно-исследовательского технологического института.*

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

*Гаганидзе Эрмил, профессор, сотрудник института Материаловедения. E-mail: ermile.gaganidze@kit.edu*

*Крестина Наталья Сергеевна, аспирант, младший научный сотрудник Научно-исследовательского технологического института. E-mail: nata-kr80@mail.ru*

связи между радиусом кластера  $R$  и количеством атомов обоих сортов удобно пользоваться соотношениями, обычно применяемыми для анализа кластерных систем:

$$R = a(w + y)^{1/3}, a = \left(\frac{3v_0}{4\pi}\right)^{1/3};$$

$$N^S = b(w + y)^{2/3}. \quad (1)$$

Здесь  $v_0$  – объем, занимаемый одним атомом,  $b$  – параметр, зависящий от типа кристаллической решетки,  $w$  и  $y$  – количество атомов хрома и железа в кластере соответственно.

Будем считать, что образующиеся кластеры являются когерентными решетке матрицы, тогда энергия границы раздела в приближении регулярных растворов [12] имеет вид [7, 13]:

$$G^S = \frac{z_s b}{z} \Omega (w + y)^{2/3} (x_B^\alpha - x_B^\beta)^2, \quad (2)$$

где  $\Omega = \frac{z}{2}(2E_{AB} - E_{BB} - E_{AA})$  – параметр квази-

химического взаимодействия, выражаемый через энергии парного взаимодействия между атомами  $E_{AB}, E_{AA}, E_{BB}$ ,  $z_s$  – количество связей атомов кластера с атомами матрицы. В работах [7, 8] установлено, что соотношение параметров  $z_s b / z$  для объемно-центрированной кубической решетки имеет значение  $1.318 \pm 0.004$ .

Рассмотрение задачи об определении фазового состава бинарного сплава, в котором произошло образование кластеров, может быть проведено с помощью формул [7]:

$$\frac{1 - x_{Cr}^\beta}{1 - x_{Cr}^\alpha} = \frac{X_{Fe}^\beta(T)}{X_{Fe}^\alpha(T)} \exp\left(-\frac{2z_s b a}{3z k T R} \Omega [x_{Cr}^\alpha - x_{Cr}^\beta] \cdot [x_{Cr}^\alpha + 2x_{Cr}^\beta]\right), \quad (3)$$

$$\frac{x_{Cr}^\alpha}{x_{Cr}^\beta} = \frac{X_{Cr}^\alpha(T)}{X_{Cr}^\beta(T)} \exp\left(\frac{2z_s b a}{3z k T R} \Omega [x_{Cr}^\alpha - x_{Cr}^\beta] \cdot [x_{Cr}^\alpha + 2x_{Cr}^\beta - 3]\right),$$

где введено обозначение:  $X_n^i(T)$  – концентрация атомов сорта  $n$  ( $n = \{Fe, Cr\}$ ) в  $i$ -фазе для макроскопических выделений (т.е. соответствующая пределу  $R \rightarrow \infty$ ).

С помощью системы уравнений (3) удалось достаточно хорошо описать зависимость фазового состава для сплава Fe-Cr в зависимости от размера частиц второй фазы (рис. 1). Параметр квазихимического взаимодействия  $\Omega$  может быть определен с помощью результатов расчета энтальпии смешения  $\Delta H_{mix}$  бинарного разупорядоченного сплава Fe-Cr полученных в работе [14]:  $\Omega = 4\Delta H_{mix} \approx 0.4eV$ . При расчетах варьировались значения предельных концентраций  $X_{Cr}^\alpha$  и  $X_{Fe}^\beta$ , которые оказались равными 12 и 85at.%

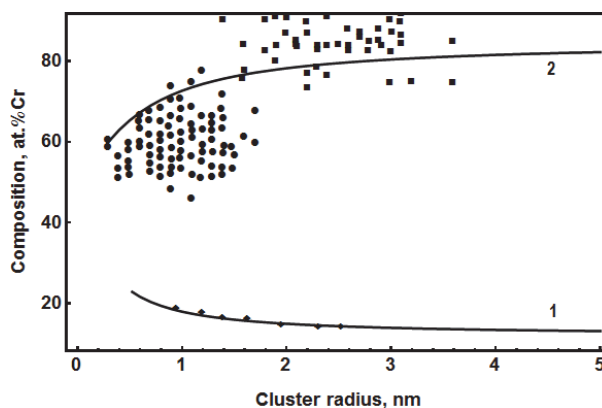


Рис. 1. Зависимость фазового состава сплава Fe-Cr от радиуса кластера при температуре 773К.

Сплошные линии результат моделирования: 1 – состав матрицы, 2 – состав кластеров. Точками отмечены экспериментальные данные [5]: ● – состав матрицы в зависимости от среднего радиуса кластеров (для разных продолжительностей отжига 50-1067 ч), ● – состав кластеров в зависимости от радиуса (после отжига в течение 50 часов); ■ – состав кластеров в зависимости от их радиуса (после отжига в течение 1067 часов)

соответственно. Полученный результат достаточно хорошо согласуется с экспериментальными данными по растворимости атомов хрома в альфа-железе и атомов железа в хrome, приводимыми другими авторами [5].

### 3. МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ОБРАЗОВАНИЯ КЛАСТЕРОВ В СПЛАВЕ FE-CR В ПРОЦЕССЕ ТЕРМИЧЕСКОГО ОТЖИГА

Рассмотрим пересыщенный твердый раствор Fe-Cr, содержащий  $X_{Cr}^{tot}$  атомов хрома, находящийся при постоянной температуре  $T$ . Пусть в процессе распада данного твердого раствора в процессе термического отжига образуются кластеры сферические кластеры. Состав кластеров будем считать квазиравновесным, т.е. в каждый момент времени состав кластеров определяется их радиусом в соответствии с рис.1. Такое предположение является справедливым, если диффузия железа внутрь кластеров осуществляется заметно быстрее, чем происходит присоединение атомов хрома к кластерам.

Предположим, что рост кластеров связан с диффузионным присоединением атомов хрома к кластерам, тогда количество атомов хрома в кластерах может быть определено с помощью известного соотношения [15]:

$$\frac{dw}{dt} = \frac{4\pi D_{Cr} R}{v_0} (x_{Cr}(t) - x_{Cr}^\alpha(R)), \quad (4)$$

где  $x_{Cr}(t)$  – концентрация атомов хрома в мат-

рице в момент времени  $t$ ,  $x_{Cr}^\alpha(R)$  – равновесная концентрация атомов хрома в альфа-железе над искривленной поверхностью кластера, определяемая с помощью (3),  $D_{Cr}$  – коэффициент диффузии хрома в альфа-железе при рассматриваемой температуре  $T$ .

Поскольку при моделировании необходимо одновременно рассматривать кластеры, количество атомов в которых может изменяться в достаточно широких пределах, целесообразно перейти от числа атомов хрома в преципитатах  $w$  к величине  $r$ , определяемой соотношением:

$$w = \left(\frac{r}{a}\right)^3. \quad (5)$$

Новая переменная  $r$  имеет тот же порядок, что и радиус кластера  $R$ , и соответствует эффективному радиусу, который имел бы кластер, состоящий только из атомов хрома. Поскольку, в соответствии со сделанными предположениями, состав кластеров зависит только от их размера, то связь между параметром  $r$  и радиусом  $R$  может быть определена с помощью формулы:

$$R = \frac{r}{(x_{Cr}^\alpha)^{1/3}}. \quad (6)$$

Подстановка уравнения (6) в (5) приводит к следующему соотношению для скорости изменения величины  $r$ :

$$\frac{dr}{dt} = \frac{D_{Cr}}{r(x_{Cr}^\alpha)^{1/3}} (x_{Cr}(t) - x_{Cr}^\alpha(r)). \quad (7)$$

При этом равновесные составы фаз  $x_{Cr}^{\alpha'}(r)$  и  $x_{Cr}^\alpha(r)$ , выраженные в атомных долях, могут быть установлены с помощью рис. 1 и системы уравнений (3) и (6).

Обозначим  $C(r, t)$  концентрацию кластеров, характеризуемых параметром  $r$  в момент времени  $t$ . Предположим, что в процессе отжига образуются зародыши, характеризуемые значением  $r = r_0$ , при этом скорость изменения концентрации зародышей может быть описана формулой:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(r_0, t)}{\partial t} = & G(x_{Cr}(t) - x_{Cr}^\alpha(r_0)) - k(r_0)C(r_0, t)x_{Cr}^\alpha(t) + \\ & + g(r_0 + \delta r)C(r_0 + \delta r, t), \end{aligned} \quad (8)$$

где введен параметр генерации  $G$ , определяющий скорость зарождения и распада критических зародышей размера  $r_0$ , и введен шаг  $\delta r$  изменения параметра  $r$  для рассматриваемого ансамбля кластеров,  $k(r)$  и  $g(r)$  – кинетические коэффициенты характеризующие вероятность изменения параметра  $r$  в единицу времени.

Скорость изменения концентрации кластеров  $C(r, t)$ , характеризуемых параметром  $r$ ,

может быть определена с помощью кинетического уравнения:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C(r, t)}{\partial t} = & k(r - \delta r)C(r - \delta r, t)x_{Cr}^\alpha(t) + g(r + \delta r)C(r + \delta r, t) - \\ & - (k(r)x_{Cr}^\alpha(t) + g(r))C(r, t). \end{aligned} \quad (9)$$

Кинетические коэффициенты  $k(r)$  и  $g(r)$  могут быть легко определены с помощью уравнений (3), (6), (7):

$$\begin{aligned} k(r) = & \frac{D_{Cr}}{r\delta r(x_{Cr}^\alpha(r))^{1/3}}; \\ g(r) = & k(r)x_{Cr}^\alpha(r). \end{aligned} \quad (10)$$

Уравнения (18) и (19) следует решать совместно с законом сохранения числа частиц в системе:

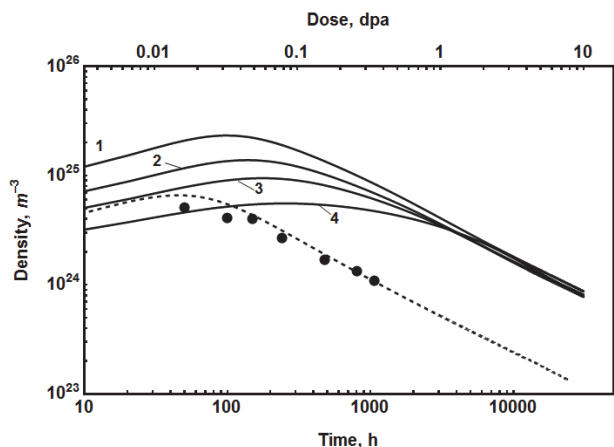
$$X_{Cr}^{tot} = x_{Cr}(t) + \sum_r \left(\frac{r}{a}\right)^3 C(r, t). \quad (11)$$

Одним из основных параметров разработанной модели является коэффициент диффузии атомов хрома в альфа-железе. Как следует из литературных данных [16] значение коэффициента диффузии сильно зависит от магнитного состояния сплава. При высоких температурах (выше температуры Кюри) сплав находится в парамагнитном состоянии, при низких температурах сплав переходит в ферромагнитное состояние, для которого коэффициент диффузии в значительной степени зависит от степени намагниченности сплава. В работе [16] экспериментально была определена зависимость коэффициента диффузии атомов хрома в сплаве Fe-Cr, находящегося в ферромагнитном состоянии:

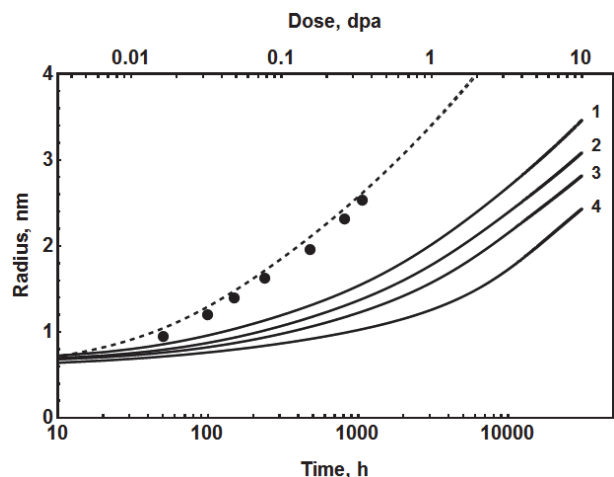
$$D_{Cr} = 37.3 \exp\left[-\frac{267.4 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} [1 + ps^2]}{RT}\right] \text{ cm}^2 / \text{ s}, \quad (12)$$

где  $s$  – параметр равный отношению намагниченности сплава при температурах  $T$  и 0, К,  $p = 0.133$ . Для температуры 773К значение  $ps^2$  оказывается равным 0.091, что приводит к значению коэффициента диффузии при данной температуре равному  $7.0 \times 10^{-19} \text{ cm}^2 / \text{ s}$ .

Применение разработанной модели для описания кинетики зарождения и роста  $\alpha'$ -фазы в сплаве Fe-20at%Cr при температуре 773К приводит к удовлетворительному описанию экспериментальных данных [5] по зависимости концентрации кластеров (рис. 2) и их среднего радиуса (рис. 3) от времени отжига. При описании экспериментальных данных было определено соответствующее значение скорости зародышеобразования  $G = 1.0 \times 10^{-7} \text{ s}^{-1}$ . Коэффициент диффузии считался равным представленному выше значе-



**Рис. 2.** Зависимость концентрации кластеров от времени отжига или продолжительности облучения (повреждающей дозы): Точки – экспериментальные данные для Fe-20at%Cr при 773К [5]. Пунктирная линия результаты – расчета для Fe-20at%Cr при 773К. Сплошные линии – результаты моделирования для сплавов Fe-XCr под облучением: 1 – X = 20at%, 2 – X=16at%, 3 – X = 14at%, 4 – X = 12at%

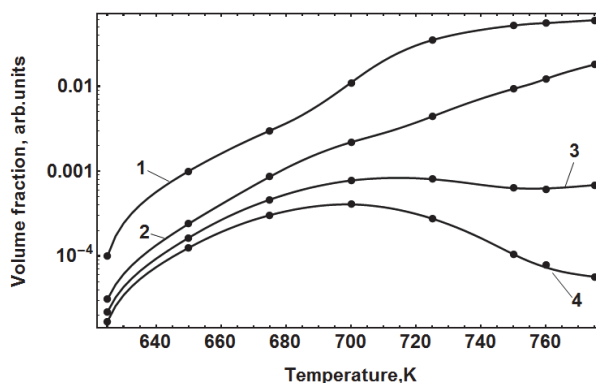


**Рис. 3.** Зависимость среднего радиуса кластеров от времени отжига или продолжительности облучения (повреждающей дозы): Точки – экспериментальные данные для Fe-20at%Cr при 773К [5]. Пунктирная линия результаты – расчета для Fe-20at%Cr при 773К. Сплошные линии – результаты моделирования для сплавов Fe-XCr под облучением: 1 – X = 20at%, 2 – X=16at%, 3 – X = 14at%, 4 – X = 12at%

нию, вычисленному с помощью формулы (12).

Следует заметить, что соответствие экспериментальных данных и расчетных зависимостей при выбранном на основе экспериментальных данных коэффициенте диффузии является подтверждением корректности построенной модели. Кроме того, данное обстоятельство свидетельствует о возможности использования разработанной модели для определения коэффициента диффузии на основе анализа экспериментальных данных о росте частиц второй фазы [7].

Особенный интерес с точки зрения материа-



**Рис. 4.** Зависимость объемной доли  $\alpha'$  - фазы в сплавах Fe-XCr от температуры отжига в течение 5000 часов:

1 - 20at.%Cr, 2 - 16at.%, 3 - 14at.%, 4 - 13 at.%; точки – результат моделирования, сплошные линии – аппроксимация с помощью кубического сплайна

ловедения представляет выявление условий соответствующих наиболее эффективному образованию частиц второй фазы. Поиск таких условий может быть проведен с помощью построения модельных кривых изохронного отжига для сплавов содержащих различные концентрации атомов хрома. На рис. 4 приведены результаты расчета зависимости объемной доли  $\alpha'$  - фазы для нескольких сплавов на основе системы Fe-Cr в процессе термического отжига в течение 10000 часов. Как следует, из рисунка при снижении концентрации хрома область наиболее эффективного образования кластеров смещается в область более низких температур.

#### 4. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕДЕНИЯ СПЛАВА Fe-Cr ПОД ДЕЙСТВИЕМ ОБЛУЧЕНИЯ

##### 4.1. Радиационно-ускоренная диффузия в сплаве Fe-Cr

Одним из основных факторов приводящих к образованию кластеров под действием облучения является радиационно-ускоренная диффузия. Обычно предполагается, что радиационно-ускоренная диффузия обусловлена заметным (многократным) повышением концентрации вакансий под облучением, при этом коэффициент диффузии оказывается равным:

$$D_{Cr}^* = \frac{D_{Cr} C_V^*}{C_V^e},$$

где  $C_V^*$ ,  $C_V^e$  – концентрации вакансий в условиях облучения и термодинамического равновесия соответственно,  $D_{Cr}$  – коэффициент диффузии атомов хрома в железе в условиях термодинамического равновесия. Поскольку эксплуатация корпусных материалов атомных реакторов обычно

проводится при температурах 573 – 623K , то соответствующий коэффициент диффузии атомов хрома следует определять с учетом ферромагнитного состояния сплава по формуле (12).

Расчет коэффициента диффузии при температуре 573K приводит к значению  $2.2 \times 10^{-26} \text{ cm}^2 / \text{ s}$ . Диффузия атомов хрома в железе в течение 10000 часов будет характеризоваться диффузионной длиной менее периода решетки, что позволяет сделать предположение об отсутствии обогащенных хромом кластеров в процессе термического отжига при данной температуре.

Проведем оценку радиационно-ускоренной диффузии атомов хрома в альфа-железе. Уравнения описывающие баланс поглощения радиационных дефектов стоками, а также процессов их генерации и рекомбинации может быть записано в виде:

$$G_I - k_{VI} C_V^* C_I^* - k_I (C_I^* - C_I^{e*}) = 0$$

$$G_V - k_{VI} C_V^* C_I^* - k_V (C_V^* - C_V^{e*}) = 0, \quad (13)$$

где  $G_{I,V}$  – скорость генерации вакансий и междоузлий в условиях облучения,  $k_{VI}$  – скорость рекомбинации вакансий и междоузлий,  $k_{I,V}$  – мощность стоков, поглощающих вакансии и междоузлия,  $C_{I,V}^{e*}$  – равновесное значение концентрации вакансий и междоузлий в условиях облучения. В качестве стоков радиационных дефектов чаще всего выступают дислокации, поэтому мощность стоков обычно выражается через плотность дислокаций  $\rho$ , коэффициент диффузии соответствующего дефекта  $D_{I,V}$ , и поглощающей способности стока  $z_A$ :  $k_A = z_A D_A \rho$ .

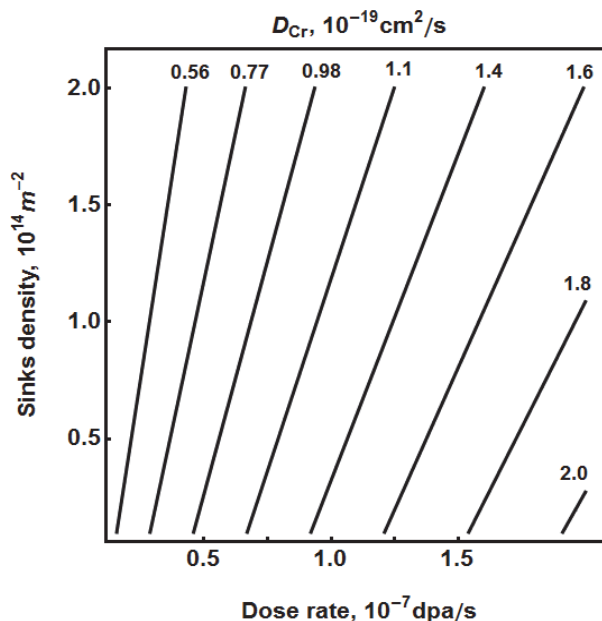
Результаты расчета радиационно-ускоренной диффузии атомов хрома проведенные с помощью формул (13) и параметров приведенных в табл. 1

**Таблица 1.** Параметры используемые для оценки радиационно-стимулированного коэффициента диффузии атомов хрома в железе при температуре 573К

Параметр	Значение
Коэффициент диффузии междоузлий [14], $D_i$	$1.52 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 / \text{ s}$
Коэффициент диффузии вакансий [14], $D_V$	$1.85 \cdot 10^{-16} \text{ m}^2 / \text{ s}$
Равновесная концентрация вакансий [14], $C_V^e$	$7.62 \cdot 10^{-14}$
Скорость рекомбинации [14], $k_{VI}$	$9.31 \cdot 10^{11} \text{ s}^{-1}$
Плотность дислокаций, $\rho$	$10^{13} - 10^{14} \text{ m}^{-2}$
Поглощающая способность междоузлий стоками, $z_i$	1.2
Поглощающая способность вакансий стоками, $z_V$	1.0
Мощность стоков вакансий, $k_V$ .	
$k_V = z_V D_V \rho$	$0.371 \text{ s}^{-1}$
Мощность стоков междоузлий, $k_I$ .	
$k_I = z_i D_i \rho$	$3.65 \cdot 10^6 \text{ s}^{-1}$
Каскадная эффективность, $\eta$	0.25
Скорость смещений, $G_A$	$10^{-8} - 10^{-7} \text{ dpa/s}$

при температуре 573K приведен на рис. 5. Представленные на рисунке значения коэффициента диффузии необходимо сравнить с соответствующим термическим значением полученным по формуле (13). Данное сравнение показывает, что коэффициент диффузии в условиях облучения оказывается почти на семь порядков больше, чем соответствующее термическое значение ( $D_{Cr} = 2.2 \times 10^{-26} \text{ cm}^2 / \text{ s}$ ).

Заметим, что коэффициент диффузии атомов хрома в условиях облучения оказывается величи-



**Рис. 5.** Зависимость коэффициента диффузии атомов хрома в альфа-железе под облучением от плотности стоков и эффективной скорости смещений. Отложенные на сплошных линиях численные значения соответствуют коэффициенту диффузии при заданной скорости смещений  $G_A$  и плотности стоков  $\rho$



ной одного порядка с коэффициентом диффузии атомов хрома в процессе термического отжига при температуре 773 К. Так как данный термический отжиг сопровождается выделением альфа-штрих фазы, то можно ожидать, что облучение при температуре 573К также будет сопровождаться образованием обогащенных хромом кластеров.

Наряду с изменением коэффициента диффузии ввиду резкого увеличения концентрации радиационных дефектов можно было бы ожидать и некоторого изменения диаграммы фазового равновесия вследствие смещения химических потенциалов под действием облучения. К сожалению, приводимые в литературе экспериментальные данные о фазовом составе сплавов в условиях облучения не позволяют количественно оценить величину смещения фазового равновесия. В связи с этим, в дальнейшем будем полагать, что диаграмма фазового равновесия под облучением не изменяется.

#### 4.2. Моделирование кинетики образования кластеров в условиях облучения

С учетом сделанных предположений о характере радиационно-стимулированных процессов, разработанный выше подход может быть применен и для анализа образования кластеров в условиях облучения. Основную сложность применения разработанного подхода представляет отсутствие в литературе надежных кривых фазового равновесия при низких температурах 573-773К для исследуемого сплава Fe-Cr. Кривые фазового равновесия для сплава Fe-Cr, приводимые в различных работах (см. например [4, 17, 18]) могут заметно отличаться друг от друга. В данной работе были использованы результаты расчетов равновесной концентрации хрома в альфа-железе полученные [14]:  $X_{Cr}^{\alpha} \approx 7.7at.\%$ . Равновесный состав альфа-штрих фазы предполагался равным:  $X_{Cr}^{\alpha'} = 83at.\%$ .

Наиболее подробными экспериментальными данными по определению характеристик второй фазы альфа-штрих фазы под облучением являются результаты работы [6], полученные методом томографического атомного зондирования (ТАР - tomographic atom probe). В данной работе после облучения сплава Fe-12at%Cr до повреждающей дозы 0.6дра были обнаружены кластеры характеризующиеся средним радиусом  $(1.1 \pm 0.2)$  нм, концентрацией  $(5.0 \pm 0.5) \times 10^{24}, m^{-3}$ , составом  $(58.5 \pm 1.1)at.\%$ , концентрация атомов хрома в матрице при этом составила  $(8.24 \pm 0.05)at.\%$ .

С помощью разработанной модели был проведен расчет кинетики выделения частиц второй фазы при температуре  $T = 573K$ , в условиях облучения. Скорость смещений атомов под облуче-

нием принималась равной  $0.9 \times 10^{-7} dpa / s$ . Расчет зависимости фазового состава от размера кластеров проводился с помощью уравнений (3), а зависимостей среднего радиуса кластеров, их концентрации и состава с помощью уравнений (8-11). Расчет проводился так, чтобы удовлетворить экспериментальным данным полученным в работе [6] для сплава Fe-12at%Cr. При этом варьировались коэффициент диффузии  $D_{Cr}^*$  и скорость зарождения кластеров минимального размера  $G$ . Полученные при подборе значения оказались равными  $D_{Cr}^* = 1.4 \times 10^{-19} cm^2 / s$  и  $G^* = 5.4 \times 10^{-8} s^{-1}$ . Полученное значение коэффициента диффузии атомов хрома под облучением хорошо согласуется с расчетными данными для коэффициента диффузии полученных в п. 4.1.

На рис. 2 и 3 представлены результаты расчета среднего радиуса и концентрации кластеров в зависимости от дозы вплоть до 10 дра для сплавов содержащих различные концентрации атомов хрома. Как следует из рисунков характер роста  $\alpha'$ -фазы в условиях отжига при температуре 773 К и под действием облучения при температуре 573К являются сходными. Основным механизмом роста частиц второй фазы как в условиях отжига, так и облучения является коалесценция.

### ВЫВОДЫ

Таким образом, в настоящей работе получены следующие основные результаты:

1. Анализ образования  $\alpha'$ -фазы в сплаве Fe-Cr в условиях термического отжига и облучения может быть проведен на основании разработанного в данной работе подхода и представлении о термическом и радиационно-ускоренном механизмах диффузии.

2. Под действием реакторного облучения происходит существенное ускорение диффузионных процессов по сравнению с условиями термодинамического равновесия. Данное ускорение обусловлено повышенным значением концентрации радиационных дефектов в условиях облучения. При анализе генерационно-рекомбинационных процессов радиационных дефектов были получены оценки коэффициента диффузии в условиях облучения, при этом коэффициент диффузии оказался на семь порядков выше, чем соответствующее термическое значение.

3. Разработана модель радиационно-ускоренного образования и роста кластеров в сплаве Fe-Cr в процессе облучения. Результаты расчета согласуются с экспериментальными данными других авторов для повреждающей дозы 0.6 дра. При расчетах был получен коэффициент диффузии атомов хрома в условиях облучения, который оказался равным  $D_{Cr}^* = 1.4 \times 10^{-19} cm^2 / s$ . Дан-

ное значение хорошо согласуются с оценкой коэффициента диффузии полученного в данной работе при анализе генерационно-рекомбинационных процессов радиационных дефектов в условиях облучения.

Как следует, из расчетов характер выделения частиц второй фазы при температуре 773 К и в условиях облучения при 573 К и скорости смещения  $0.9 \times 10^{-7} \text{ dpa} / \text{s}$  оказывается сходным благодаря тому, что коэффициенты диффузии для этих условий оказываются величинами одного порядка.

*Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ №12-02-97033-р\_Поволжье\_а и ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 гг."*

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Effect of Cr on the mechanical properties and microstructure of Fe-Cr model alloys after n-irradiation / *M. Matijasevich, A. Almazouzi* // Journal of Nuclear Materials. 2008. V.377. P.147-154.
- Multiscale modelling of radiation damage and phase transformations: The challenge of FeCr alloys / *L. Malerba, A. Caro, J. Wallenius* // Journal of Nuclear Materials. 2008. V.382. P.112-125.
- Identification and characterization of Cr-rich precipitates in FeCr alloys: An atomistic study / *G. Bonny, D. Terentyev, L. Malerba* // Computer Materials Science. 2008. V.42. P.107-112.
- Modelling of Radiation Damage in Fe-Cr Alloys / *L. Malerba, D.A. Terentyev, G. Bonny, A.V. Barashev, C. Bjorkas, N. Juslin, K. Nordlund, C. Domain, P.Olsson, N.Sandberg, J. Wallenius* // Journal of ASTM International. 2007. V.4. №6. JAI100692. 19 p.
- Atomic scale analysis and phase separation understanding in a thermally aged Fe-20 at.%Cr alloy / *S. Novy, P. Pareige, C. Pareige* // Journal of Nuclear Materials. 2009. V.384. P.96-102.
- Effect of neutron-irradiation on the microstructure of a Fe-12at.%Cr alloy / *V.Kuksenko, C. Pareige, C. Genevois, F. Cuwilly, M. Roussel, P. Pareige* // Journal of Nuclear Materials. 2011. V.415. P.61-66.
- Kinetics and thermodynamics of Cr nanocluster formation in Fe-Cr system / *V. Svetukhin, P. Lvov, M. Tikonchev, E. Gaganidze, C. Detloff* // Journal of Nuclear Materials. 2011. V.415. P.205-209.
- Термодинамика фазового равновесия бинарных сплавов, содержащих наноразмерные преципитаты / *П.Е. Львов, В.В. Светухин, А.В. Обухов* // Физика твердого тела. 2011. Т.53. №2. С.394-399.
- Slezov V.V.* Kinetics of First-order Phase Transitions. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. 2009. 415 p.
- On the formation of mixed vacancy-copper clusters in neutron-irradiated Fe-Cu alloys / *U. Bikenheuer, A.Ulbricht, F. Bergner, A. Gokhman* // Journal of Physics: Conference Series. - 2010. - V.247. - 012011.
- A SANS investigation of the irradiation-enhanced  $\alpha'$ -phases separation in 7-12 Cr martensitic steels / *M.H. Mathon, Y. Carlan, G. Geoffroy, X. Averty, A. Alamo, C.H. Novion* // Journal of Nuclear Materials. 2003. V.312. P.236-248.
- Свеллин Р.А.* Термодинамика твердого состояния. М.: Металлургия. 1968. 316 с.
- Becker R.* Die Keimbildung bei der Ausscheidung in metallischen Mischkristallen // Annalen der Physik. 1938. V.32. № 5. P.128-140.
- New contribution to the thermodynamics of Fe-Cr alloys as base for ferritic steels / *G. Bonny, D. Terentyev, and L. Malerba* // Journal of Phase Equilibria and Diffusion. 2010. V.31. P.439-444.
- Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Статистическая физика. М.: Наука. Часть 1. 584 с.
- Diffusion of chromium in  $\alpha$ -iron / *C.-C. Lee, Y. Iijima, T. Hiratani, K. Hirano* // Materials Transactions, JIM. 1990. V.31. P.255-261.
- Inden, G., Schön C.* Thermodynamic self-consistency issues related to the Cluster Variation Method: The case of the BCC Cr-Fe (Chromium-Iron) system // Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry. 2008. V.32. P.661-668.
- Magnetism and thermodynamics of defect-free Fe-Cr alloys / *T. Klaver, R. Drautz, M. Finnis* // Physical Review B. 2006. V.74. 075415.

### SIMULATION OF CLUSTERS FORMATION IN ALLOYS BASED ON Fe-Cr

© 2012 V.V. Svetukhin<sup>1</sup>, P.E. Lvov<sup>1</sup>, E. Gaganidze<sup>2</sup>, N.S. Krestina<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Ulyanovsk State University

<sup>2</sup>Karlsruher Institut für Technologie, Institut für Materialforschung II, Karlsruhe, Germany

A model of radiation-stimulated formation of second phase particles in binary alloys under irradiation is developed. The model is used to describe the growth of second phase particles in the alloys Fe-XCr (X = 12,14,16,20 at.%), estimate the diffusion coefficient of chromium under irradiation, which is almost seven orders of magnitude higher than the corresponding value due to thermal processes.

Key words: model, radiation-stimulated formation, alloy, thermal processes.

*Vyacheslav Svetukhin, Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Director of the Re-search Institute.*

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

*Pavel Lvov, Candidate of Physics and Mathematics, Senior Fellow at the Research Institute of the Ulyanovsk State University. E-mail: LvovPE@sv.uven.ru*

*Ermil Gaganidze, Professor of Materials Science Institute of Karlsruhe. E-mail: ermil.gaganidze@kit.edu*

*Natalia Krestina, Graduate Student, Associate Research Fellow at the Research Institute. E-mail: nata-kr80@mail.ru*