

УДК 621.039.531.001.57

## МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ КЛАСТЕРООБРАЗОВАНИЯ ХРОМА В СПЛАВЕ FeCr МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

© 2013 Д.Я. Вострецов

Ульяновский государственный университет

Поступила в редакцию 26.11.2013

В данной работе было проведено моделирование процесса образования кластеров хрома в сплаве Fe-20%Cr методом Монте - Карло. В результате получена кинетическая зависимость образования кластеров при температуре 773К и определен коэффициент диффузии хрома в железе.

Ключевые слова: моделирование, кластеры хрома, метод Монте - Карло.

### ВВЕДЕНИЕ

Компьютерное моделирование процессов распада и образования кластеров в настоящее время является стандартным подходом для решения сложных задач в физике твердого тела [1-8]. Метод Монте Карло позволяет проводить моделирование на атомистком уровне для систем с большим количеством частиц. Для этого требуется высокая точность вычислений и достаточно полное описание всех взаимодействий в рассматриваемой системе. Только в этом случае возможно получение модельных данных, которые адекватно описывают фундаментальные свойства материалов. Обычно для описания взаимодействий атомов в таких моделях для металлов используют многотельные потенциалы, построенные на основе метода погруженного атома [10] или аппроксимации второго момента [15].

Объект исследований - сплав Fe – Cr является основой феррито-мартенситных высоко-хромистых сталей, которые, обладая хорошими термическими, механическими свойствами, высокой радиационной стойкостью, широко применяются в ядерной энергетике. Такие стали эксплуатируются в условиях высоких температур и испытывают сильные радиационные повреждения. Поэтому задача кластерообразования атомов хрома в сплаве Fe – Cr является актуальной.

### МЕТОД МОДЕЛИРОВАНИЯ

В данной работе было проведено моделирование методом Монте-Карло процесса образования кластеров хрома в альфа-железе. При моделировании для железа был использован многотельный потенциал типа Финниса-Синклера из работы Аккланда, Менделева и др. [11], который

получен из потенциала, предложенного в работе [16], модификацией функции внедрения. Этот потенциал считается на сегодняшний день одним из самых удачных и широко используется различными исследователями. Для хрома мы использовали потенциал Валлениуса и др. [12].

Многотельный потенциал взаимодействия имеет вид [10,15]:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} V_{ij}(r_{ij}) + F \left( \sum_{j \neq i} \rho_{ij}(r_{ij}) \right), \quad (1)$$

где  $i, j$  – позиции для взаимодействующих атомов  $A$  и  $B$ ,  $V$  – парный потенциал взаимодействия,  $F$  – функция внедрения,  $\rho$  – электронная плотность.

Парный потенциал для взаимодействия атомов железа и хрома вычисляется по формуле [9]:

$$V_{AB}(x, r) = h(x) \frac{1}{2} [V_{AA}(r) + V_{BB}(r)], \quad (2)$$

где  $h(x)$  – полином четвертого порядка. Коэффициенты данного полинома представлены в табл. 1 [9].

Для вычисления энергий взаимодействия был использован метод нормализации электронных плотностей, описанный в работе [9].

В данной работе при расчете потенциалов учитываются атомы окружения до 5-й координационной сферы включительно.

Алгоритм проведения моделирования следующий:

1. Задается начальная конфигурация атомов. В решетке железа создается сферический кластер с необходимыми параметрами. В качестве решетки используется трехмерная матрица, в которой индексы соответствуют координатам атомов, а значения – типу. Например,  $A[x,y,z]=1$  – атом железа,  $B[x,y,z]=2$  – атом хрома.

2. Рассчитывается общее количество скачков атомов для заданной решетки при заданной температуре и времени. Время моделирования рассматриваемой системы определяется следующим образом. Вероятность перемещения атома опре-

Вострецов Дмитрий Ярославович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Научно-исследовательского технологического института. E-mail: Dimka97@mail.ru

**Таблица 1.** Значения коэффициентов полинома 4-го порядка  $h(x)$

$h_0$	$h_1$	$h_2$	$h_3$	$h_4$
0.883644	-0.059302	0.644634	-1.342524	0.918932

деляется из выражения:

$$P = A \cdot \exp\left(-\frac{E_a - E_b}{kT}\right), \quad (3)$$

где  $P$  – вероятность перескока,  $E_a, E_b$  – энергии соответствующих состояний атома,  $k$  – постоянная Больцмана,  $T$  – температура в К.

Коэффициент  $A$  вычисляется по формуле:

$$A = \frac{D\Delta t}{8a^2}, \quad (4)$$

где  $D$  – коэффициент диффузии,  $a$  – длина скачка,  $\Delta t$  – промежуток времени, для которого рассчитывается вероятность перемещения атома. При этом величина  $\Delta t$  задается таким образом, чтобы вероятность (3) была меньше единицы (оптимальное значение для максимальной вероятности в системе 0.5 – 0.7).

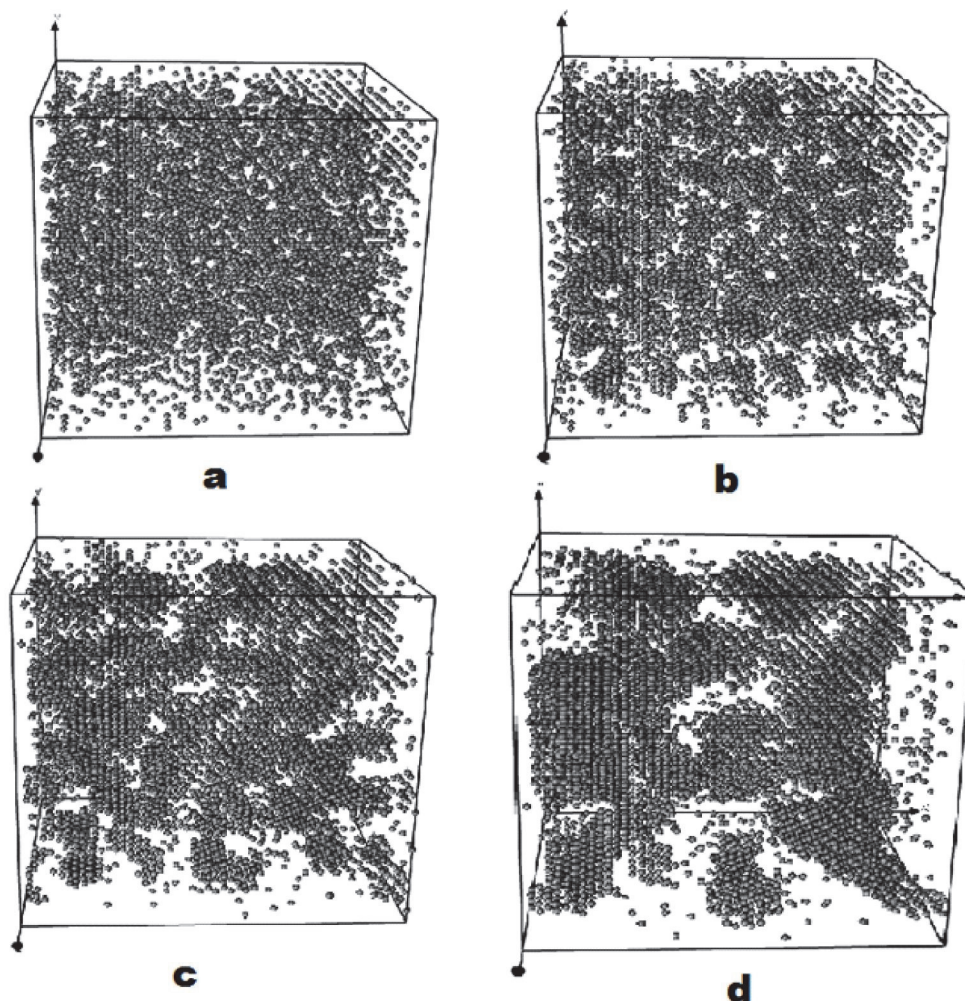
3. Далее проводится моделирование скачков атомов. Для этого перебираются координаты рас-

сматриваемых атомов необходимое число раз. Для рассматриваемых атомов разыгрывается направление скачка в пределах первой координатной сферы. Для решетки типа ОЦК это 8 возможных направлений.

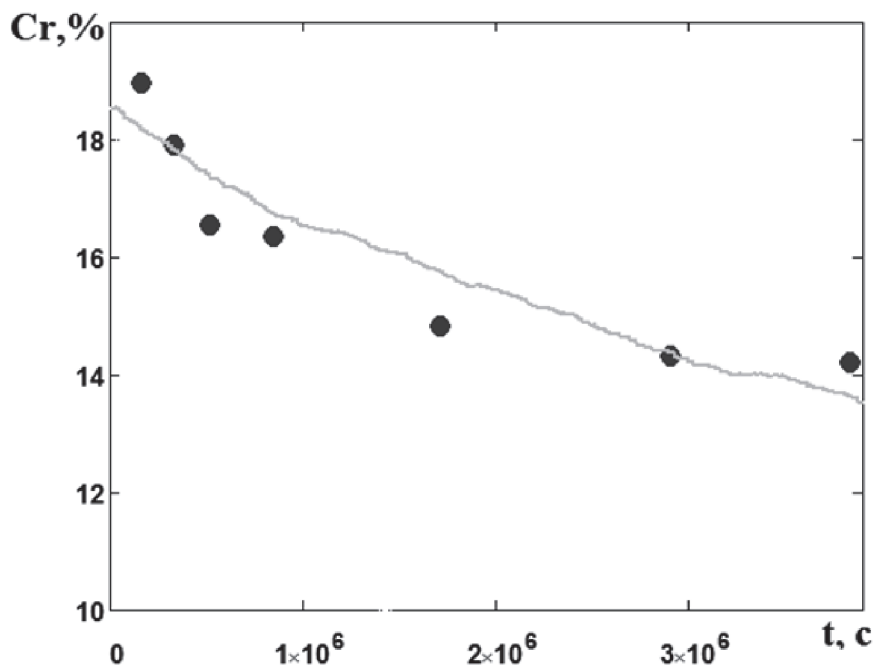
4. Для розыгрыша вероятности перемещения атома определяются энергии рассматриваемого атома до и после перемещения. Вероятность определяется из выражения (3). Если розыгрыш вероятности удачный для перемещения, то атомы меняются местам. Пункты 3 и 4 повторяются необходимое число раз до достижения заданного времени моделирования.

### РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

На рис. 1 показан пример процесса образования кластеров хрома в альфа железе при различных временах моделирования. На рис. 2 показана зависимость содержания хрома в матрице же-



**Рис. 1.** Процесс образования кластеров хрома: а – начальное распределение, б, с, d – в процессе моделирования при различных временах



**Рис. 2.** Зависимость содержания хрома в матрице железа от времени при температуре 773К. Линии – результат моделирования. Точки – экспериментальные данные [13]

леза в процессе кластеризации от времени при температуре 773К. Начальная концентрация хрома в матрице железа – 20%. При моделировании методом наименьших квадратов был подобран коэффициент диффузии для хрома в железе, величина которого составила  $3.347 \cdot 10^{-19} \text{ см}^2 / \text{с}$ . На участке времени до  $4 \cdot 10^6 \text{ с}$  наблюдается хорошее согласование с экспериментальными данными из работы [13]. В работе [14] коэффициент диффузии для хрома в железе равен:

$$D_{Cr} = 37.3_{-140}^{+224} \cdot \exp \left[ -\frac{(321781 \pm 529.8K) \left[ 1 + (0.133 \pm 0.005)s^2 \right]}{T} \right] \text{ см}^2 / \text{с}$$

где  $s$  – величина спонтанной намагниченности сплава, температурная зависимость которой установлена авторами [14]. Данная зависимость приводит к значениям коэффициента диффузии  $(2.1 - 27.5) \cdot 10^{-19} \text{ см}^2 / \text{с}$  при температуре  $T = 773 \text{ К}$ . Таким образом, коэффициент диффузии, полученный при моделировании, также хорошо согласуется с данными других авторов.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе было проведено моделирование методом Монте-Карло процесса кластеризации хрома в сплаве Fe-20%Cr при температуре 773 К. Для расчетов использован многотельный потенциал межчастичного взаимодействия. Получена зависимость содержания хрома в матрице сплава Fe-20%Cr от времени при температуре 773К. Полученные результаты хорошо согласуются с известными экспериментальными данными для

сплава такого же состава при температуре 773 К. Подобранный при моделировании коэффициент диффузии для хрома в железе равен величине  $3.347 \cdot 10^{-19} \text{ см}^2 / \text{с}$ , что также хорошо согласуется с данными других авторов.

*Работа выполнена при поддержке Минобрнауки в рамках государственного задания на 2012-2014 гг.*

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. MD simulation of atomic displacement cascades in Fe-10 at.%Cr binary alloy / M. Tikhonchev, V. Svetukhin, A. Kadochkin, E. Gaganidze // Journal of Nuclear Materials 395 (2009). Pp. 50–57.
2. Моделирование процессов первичной радиационной повреждаемости сплава Fe-1.8at.%Ni методом молекулярной динамики / М. Ю. Тихончев, В. В. Светухин, Д. В. Козлов, В. Н. Голованов // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. 2010. №3 (15). С. 143 – 155.
3. Kinetics and thermodynamics of Cr nanocluster formation in Fe-Cr system / V. Svetukhin, P. Lvov, E. Gaganidze, M. Tikhonchev, C. Dethloff // Journal of Nuclear Materials. 2011. 415. Pp. 205 – 209.
4. Светухин В.В., Тихончев М.Ю. Моделирование взаимодействия каскадов атомных смещений с обогащенными хромом преципитатами в сплаве FeCr // Известия ВУЗов: Поволжский регион. Физико-математические науки. 2012. №4. С. 162 – 173.
5. MD simulation of atomic displacement cascades near chromium-rich clusters in FeCr alloy / M. Tikhonchev, V. Svetukhin, E. Gaganidze // Journal of Nuclear Materials, 442 (2013) S618–S623.
6. Modeling of chromium nanoclusters growth under neutron irradiation / V. Svetukhin, P. Lvov, M. Tikhonchev, E. Gaganidze, N. Krestina // Journal of

- Nuclear Materials, 442 (2013) S624–S627
7. Львов П.Е., Светухин В.В. Термодинамика фазового равновесия многокомпонентных твердых растворов, содержащих наноразмерные выделения второй фазы // Физика твердого тела. 2013. Т. 55. Вып. 11. С. 2256–2261.
  8. Моделирование образования кластеров в сплавах на основе Fe–Cr в процессе термического отжига и под облучением / В.В. Светухин., П.Е. Львов, Е. Gaganidze, Н.С. Крестина // Вопросы материаловедения. 2013. № 1(73). С. 230–2408.
  9. Caro A., Crowson D.A., and Caro M. Classical Many-Body Potential for Concentrated Alloys and the Inversion of Order in Iron-Chromium Alloys // PHYSICAL REVIEW LETTERS, 95, 075702, 2005.
  10. Daw M.S., Baskes M.I. // Phys. Rev. B 29, 6443 (1984).
  11. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in  $\alpha$ -iron / G.J. Ackland, M.I. Mendeleev, D.J. Srolovitz, S. Han and A.V. Barashev // J. Phys.: Condens. Matter 16 (2004) S2629–S264.
  12. Modeling of chromium precipitation in Fe-Cr alloys / J. Wallenius, P. Olsson, C. Lagerstedt, N. Sandberg, R. Chakarova, and V. Pontikis // PHYSICAL REVIEW B 69, 094103, 2004.
  13. Atomic scale analysis and phase separation understanding in a thermally aged Fe–20 at.%Cr alloy / S. Nozuy, P. Pareige, C. Pareige // Journal of Nuclear Materials. 2009. V.384. P.96–102.
  14. Lee C.G., Iijima Y., Hiratani T., Hirano K. // Mater. Trans. JIM 31, 255 (1990).
  15. Finnis M.F., Sinclair J.E. // Philos. Mag., A 50, 45 (1984).
  16. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron // M.I. Mendeleev, S. Han, D.J. Srolovitz, G.J. Ackland, D.Y. Sun, M. Asta // Philos. Mag., V. 83, N. 35 (2003), pp. 3977–3994.

### MODELING OF THE KINETICS OF CHROMIUM CLUSTER FORMATION IN FeCr ALLOY BY MONTE CARLO METHOD

© 2013 D.Y. Vostretsov

Ulyanovsk State University

In this paper, a simulation of the formation of chromium clusters in the alloy Fe- 20 % Cr by Monte - Carlo Method was performed. The result is a kinetic dependence of cluster formation at temperature 773K and determined the diffusion coefficient of chromium in iron.

Key words: simulation, chromium clusters, Monte - Carlo Method.

This work was supported by the Ministry of Education in the framework of public task for 2012-2014.