

12,13

## Влияние флуктуаций состава на образование и рост кластеров в сплавах на основе системы железо–хром

© П.Е. Львов, В.В. Светухин

Ульяновский государственный университет,  
Ульяновск, Россия

E-mail: LvovPE@sv.uven.ru

(Поступила в Редакцию 14 февраля 2012 г.)

Разработана модель зарождения и роста частиц второй фазы в сплавах на основе Fe–Cr. Предполагается, что основными механизмами изменения распределения фаз в сплаве являются флуктуационное безактивационное зарождение кластеров, обогащенных хромом, и их последующий рост, обусловленный диффузией атомов хрома. Модель применена для описания кинетики роста частиц второй фазы в сплаве Fe–xCr ( $x = 14, 16, 18, 20$  at.%) при температуре  $T = 500^\circ\text{C}$ . Полученные значения коэффициента диффузии  $D_{\text{Cr}} = 3.12 \cdot 10^{-19}$  cm<sup>2</sup>/s и скорости флуктуационного зарождения (распада) кластеров  $\tau^{-1} = 0.868 \cdot 10^{-3}$  s<sup>-1</sup> согласуются с приведенными в литературе данными.

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.“.

### 1. Введение

Сплавы на основе системы железо–хром являются одним из наиболее перспективных материалов ядерной энергетики для использования при создании корпусов ядерных реакторов [1,2]. Особая устойчивость данных сплавов к условиям облучения во многом обусловлена характером распределения фаз, а именно образованием в них кластеров, обогащенных атомами хрома ( $\alpha'$ -фаза). Таким образом, моделирование образования и роста кластеров как в процессе термической обработки сплавов, так и в условиях облучения представляет значительный интерес для развития технологий создания конструкционных сплавов ядерной энергетики с заданными свойствами.

Основными методами моделирования роста частиц второй фазы в твердых растворах являются методы квазихимических реакций [3,4]. Данные модели базируются на предположении о стехиометричности кластеров, т.е. состав кластеров считается соответствующим составу макроскопических фаз. Вместе с тем в работах [5,6] на основе теории регулярных растворов было показано, что состав наноразмерных кластеров может в несколько раз отличаться от состава макроскопических фаз, что согласуется с характером распределения фаз, наблюдаемым в различных сплавах: Fe–1.4 at.% Cu [7,8], Fe–20 at.% Cr [9], Zr–1 at.% Nb [5]. В работе [6] была разработана модель, описывающая кинетику роста наноразмерных кластеров, которая учитывает отклонение состава кластеров от стехиометрии.

Одной из сложностей применения уравнений квазихимических реакций (или эквивалентного метода на основе уравнения Фоккера–Планка) является обоснование граничного условия, описывающего скорость образования зародышей. В ряде работ предполагается, что зародыши состоят из двух частиц [4], что требует обоснования

корректности использования соотношений для поверхностной энергии кластеров, состоящих из нескольких частиц. В некоторых работах скорость образования зародышей считается величиной постоянной [2] или прямо пропорциональной степени пересыщения [6]. При этом предполагается, что скорость зародышеобразования имеет аррениусовский характер зависимости от работы образования зародыша и температуры.

Вместе с тем наряду с традиционно используемыми моделями описания зародышеобразования может быть применен несколько иной подход, основанный на предположении о флуктуационном механизме образования зародышей, достаточно широко обсуждаемом в литературе (см., например, [10–15]). В работе [9], посвященной изучению свойств сплава Fe–20 at.% Cr, образцы были подвергнуты высокотемпературному отжигу, после чего было определено распределение атомов хрома в железе. Оказалось, что после отжига матрица содержит области в значительной мере обогащенные атомами хрома (более 40 at.%), а флуктуации состава хорошо описываются биномиальным распределением. Если учесть, что состав наноразмерных кластеров примерно соответствует  $\sim 50$  at.% Cr [6,9], то можно ожидать, что некоторые области сплава могут быть рассмотрены как зародыши новой фазы, существующие в сплаве благодаря флуктуациям состава.

Гипотеза о связи зародышеобразования с флуктуациями состава (плотности) является одним из основных положений теории фазовых переходов, базирующейся на теории самосогласованного поля Ландау [10]. Наиболее известной здесь является теория спинодального распада Кана–Хилларда [11–13], в которой процесс зародышеобразования обусловлен суперпозицией волн концентрации вещества, рассматриваемых с помощью функционала свободной энергии (функционала Ландау

или его модификаций). Данный метод, разработанный в 50-х годах прошлого века, продолжает оставаться одним из основных методов теории фазовых переходов (см., например, [14,15]). Вместе с тем его применение для анализа флуктуаций в твердых растворах является достаточно сложным, так как требует весьма детального представления о характере взаимодействия между компонентами раствора и зависимости свободной энергии системы от состава и параметров термодинамического равновесия (температуры, давления и т.д.).

В настоящей работе ставится задача проведения упрощенного анализа флуктуаций в бинарных сплавах (на примере сплава Fe–Cr) с помощью эмпирически установленного в работе [9] распределения вероятности образования флуктуаций состава (биномиального распределения). С помощью данного подхода предполагается дополнить разработанную ранее модель роста частиц второй фазы в сплаве Fe–Cr [6] и использовать ее для описания эволюции распределения фаз в сплавах на основе Fe–Cr в процессе термического отжига.

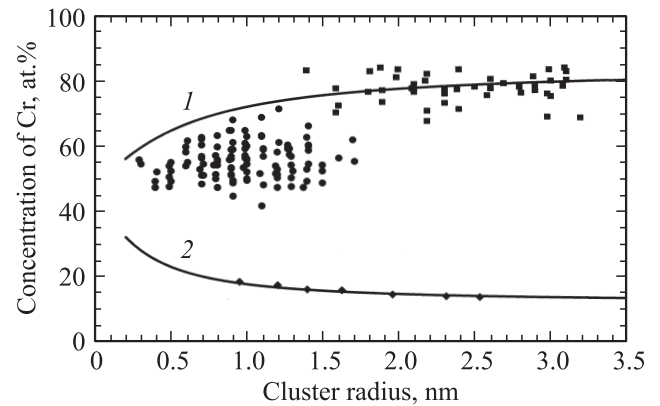
## 2. Соотношения для расчета фазового состава Fe–Cr в зависимости от размера кластеров

Для расчета фазового состава сплава Fe–Cr воспользуемся подходом, разработанным в работе [6]. Если предположить, что взаимодействие между компонентами сплава удовлетворяет приближению регулярных растворов, а кластеры имеют сферическую форму, то равновесные составы фаз в зависимости от радиуса кластера могут быть определены с помощью решения системы нелинейных уравнений [6]

$$\frac{1-x_{Cr}^{\alpha'}}{1-x_{Cr}^{\alpha}} = \frac{1-X_{Cr}^{\alpha'}}{1-X_{Cr}^{\alpha}} \exp\left(-\frac{2\eta\alpha}{3kTR} \Omega[x_{Cr}^{\alpha} - x_{Cr}^{\alpha'}][x_{Cr}^{\alpha} + 2x_{Cr}^{\alpha'}]\right),$$

$$\frac{x_{Cr}^{\alpha}}{x_{Cr}^{\alpha'}} = \frac{X_{Cr}^{\alpha}}{X_{Cr}^{\alpha'}} \exp\left(\frac{2\eta\alpha}{3kTR} \Omega[x_{Cr}^{\alpha} - x_{Cr}^{\alpha'}][x_{Cr}^{\alpha} + 2x_{Cr}^{\alpha'} - 3]\right), \quad (1)$$

где  $x_C^{\gamma}$  — концентрация атомов сорта  $C$  ( $C = \{Fe, Cr\}$ ) в фазе  $\gamma = \{\alpha, \alpha'\}$ ,  $X_C^{\gamma}(T)$  — равновесные составы фаз для макроскопических выделений,  $\Omega = \frac{\zeta}{2}(2E_{FeCr} - E_{FeFe} - E_{CrCr})$  — параметр квазихимического взаимодействия, выражаемый через энергии парного взаимодействия между ближайшими соседями  $E_{FeCr}$ ,  $E_{FeFe}$ ,  $E_{CrCr}$ ,  $k$  — постоянная Больцмана,  $T$  — температура,  $R$  — радиус кластера. В рассматриваемом случае решетки  $\alpha$ -железа (ОЦК) множитель  $\eta$  для крупных кластеров ( $\sim 10^4 - 10^5$  частиц) равен  $1.318 \pm 0.004$  [5], для небольших кластеров (27–100 частиц) множитель  $\eta$  приблизительно равен  $1.33 \pm 0.12$ .



**Рис. 1.** Зависимость фазового состава сплава Fe–Cr от радиуса кластеров при температуре 500°C. 1 — состав кластеров, 2 — состав матрицы. Для сравнения представлены результаты экспериментального определения фазового состава кластеров [9]: для кривой 1 приведены точки, полученные после отжига в течение 50 (кружки) и 1067 h (квадраты); для кривой 2 — точки, полученные в процессе термического отжига в течение 50–1067 h.

Для сферических кластеров справедлива связь между количеством частиц в кластере  $n$  и его радиусом  $R$

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

где  $v_0$  — объем, приходящийся на один атом.

На рис. 1 представлены результаты расчета фазового состава сплава в зависимости от размера кластеров при температуре  $T = 500^\circ\text{C}$ . При расчетах предполагалось, что параметр квазихимического взаимодействия может быть выражен с помощью энтальпии смешения разупорядоченного сплава  $\Omega = 4\Delta H_{\text{mix}} \approx 0.4 \text{ eV}$  [2]. Фазовые составы макроскопических фаз были приняты равными  $X_{Cr}^{\alpha} = 0.12$ ,  $X_{Cr}^{\alpha'} = 0.85$ . Как следует из рисунка, равновесные составы фаз при наличии в сплаве наноразмерных кластеров сближаются по мере уменьшения их размеров.

Важно заметить, что в основу вывода формул (1) было положено выражение для энергии межфазной границы, полученное Беккером [16], в соответствии с которым энергия поверхностного натяжения  $\sigma \sim \Omega(x_{Cr}^{\alpha} - x_{Cr}^{\alpha'})^2$ . Это означает, что при сближении составов фаз поверхностная энергия убывает, соответственно барьер образования критического зародыша резко уменьшается. В том случае, если высота барьера окажется меньше величины  $kT$ , можно будет говорить фактически о безактивационном механизме зарождения новой фазы, когда образование кластеров любого размера является энергетически выгодным. В этом случае можно ожидать, что вероятность образования зародышей в основном обусловлена флуктуационным отклонением состава сплава от среднего значения.

### 3. Флуктуации состава сплава на основе системы железо–хром: образование зародышей

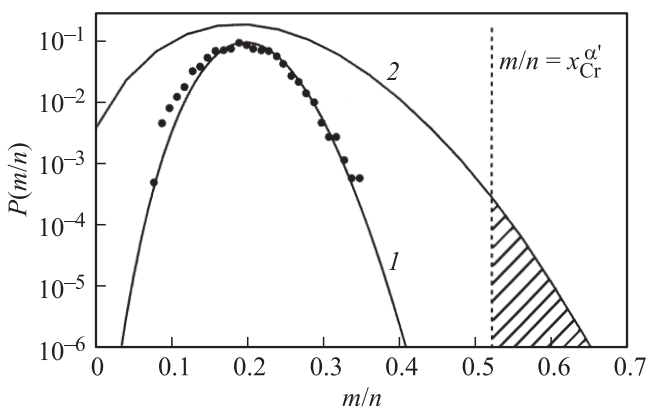
В работе [9], посвященной изучению распределения фаз в сплаве Fe–20 at.% Cr в процессе термического отжига, установлено, что в гомогенизированном сплаве имеются значительные отклонения состава от среднего значения, а функция распределения состава хорошо описывается биномиальным распределением. Рассчитаем вероятность образования наноразмерных кластеров в бинарном сплаве, образование которых обусловлено флуктуациями состава, подчиняющимися биномиальному распределению.

Рассмотрим бинарный сплав, состоящий из атомов железа и хрома. Разобьем объем сплава на области, содержащие  $n$  атомов (железа или хрома), тогда вероятность того, что среди них окажется  $m$  атомов хрома равна

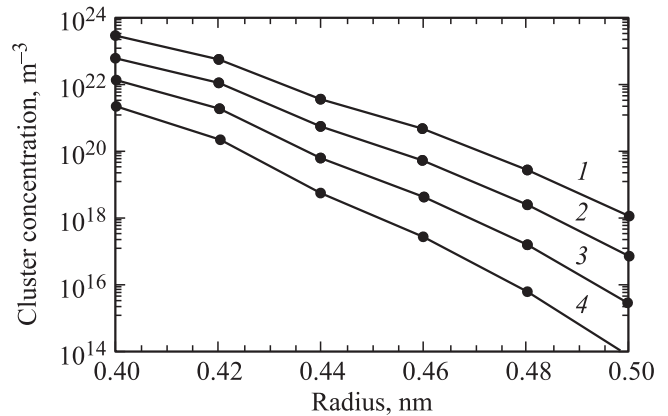
$$P(x_{Cr}^\alpha, m) = \frac{n!}{m!(n-m)!} (x_{Cr}^\alpha)^m (1-x_{Cr}^\alpha)^{n-m}, \quad (2)$$

где  $x_{Cr}^\alpha$  — концентрация атомов хрома в матрице. Локальная концентрация атомов хрома, обусловленная флуктуациями состава, может быть определена как  $m/n$ . На рис. 2 сопоставлены экспериментальная [9] и расчетная функции распределения локальной концентрации для  $n = 100$ . Как следует из рис. 2, кривая 1 и экспериментальные точки достаточно хорошо согласуются между собой.

Дисперсия функции распределения по составу оказывается равной  $S = \sqrt{\langle (\frac{m}{n})^2 \rangle - \langle \frac{m}{n} \rangle^2} = \sqrt{\frac{x_{Cr}^\alpha(1-x_{Cr}^\alpha)}{n}}$ . При этом, очевидно, существуют области, в которых концентрация атомов хрома может достигать заметных значений. Данные области, характеризующиеся повышен-



**Рис. 2.** Функция распределения сплава по составу. 1 — расчет с помощью формулы (2) при  $x_{Cr}^\alpha = 0.2$  и  $n = 100$ , точки — экспериментальные данные при  $x_{Cr}^\alpha = 0.2$ ,  $n = 100$  [9], 2 — расчет с помощью формулы (2) при  $x_{Cr}^\alpha = 0.2$  и  $n = 27$ . Заштрихованная область соответствует образованию кластеров, состоящих из 27 атомов.



**Рис. 3.** Зависимость концентрации кластеров от их радиуса для различных исходных составов сплава. 1 — Fe–20 at.% Cr, 2 — Fe–18 at.% Cr, 3 — Fe–16 at.% Cr, 4 — Fe–14 at.% Cr.

ной концентрацией атомов хрома, будем связывать с образованием зародышей  $\alpha'$ -фазы при условии, что концентрация атомов хрома в них выше, чем равновесное значение состава кластера соответствующего размера. Согласно классической теории флуктуаций [17], дисперсия распределения (2) будет возрастать при уменьшении размера рассматриваемой области (по закону  $S \sim n^{-1/2}$ ), соответственно будет увеличиваться и вероятность образования зародышей.

Будем полагать, что в области, содержащей  $n$  частиц, образуется кластер радиуса  $R = an^{1/3}$ , если состав в данной области окажется больше, чем равновесный состав кластера  $\frac{m}{n} \geq x_{Cr}^{\alpha'}$ . Таким образом, вероятность образования кластера радиуса  $R$  может быть определена с помощью выражения

$$f(x_{Cr}^\alpha, x_{Cr}^{\alpha'}, R) = \sum_{nx_{Cr}^{\alpha'} \leq m \leq n} \frac{n!}{m!(n-m)!} (x_{Cr}^\alpha)^m (1-x_{Cr}^\alpha)^{n-m},$$

$$n = \left(\frac{R}{a}\right)^3. \quad (3)$$

На рис. 2 кривая 2 соответствует биномиальному распределению для  $n = 27$ ,<sup>1</sup> т.е. области сплава в пределах первой и второй координационной сфер ОЦК-решетки ( $R \approx 0.4$  nm). Как следует из рисунка, в гомогенизированном сплаве Fe–20 at.% Cr присутствуют кластеры малого размера, удовлетворяющие условию равновесия. Заштрихованная область соответствует вероятности образования зародышей  $\alpha'$ -фазы.

На рис. 3 приведены зависимости концентрации кластеров, образовавшихся вследствие флуктуаций, от их радиуса для различных составов сплава. При этом состав кластеров выбирался в соответствии с расчетами,

<sup>1</sup> Заметим, что ввиду дискретности биномиального распределения площади под кривыми на рисунке для различных значений  $n$  отличаются друг от друга, условие нормировки вероятности при этом выполняются.

проведенными по формулам (1) (см. кривую  $I$  на рис. 1). Очевидно, что образование кластеров вследствие флуктуаций состава сплава резко уменьшается при увеличении размера кластеров. Как следует из рисунка, подавляющее большинство образующихся кластеров ( $\sim 99.9\%$ ) соответствует размерам  $0.40\text{--}0.44\text{ nm}$ .

Практический интерес для последующего применения в расчете кинетики роста частиц второй фазы представляет зависимость концентрации кластеров, образовавшихся вследствие флуктуаций, от состава сплава. Данную зависимость, построенную для кластеров размером  $0.40 \leq R \leq 0.44\text{ nm}$  при температуре  $T = 500^\circ\text{C}$  с помощью формул (1) и (3), удается достаточно хорошо аппроксимировать функцией

$$f(x_{\text{Cr}}^\alpha) = \exp[-30.319 + 180.071x_{\text{Cr}}^\alpha - 292.848(x_{\text{Cr}}^\alpha)^2] m^{-3}. \quad (4)$$

#### 4. Кинетика зарождения и роста кластеров в сплавах на основе системы Fe–Cr при температуре $T = 500^\circ\text{C}$

Рассмотрим кинетику зарождения и роста частиц второй фазы в сплавах на основе системы Fe–Cr при температуре  $500^\circ\text{C}$ . При построении кинетической модели будем опираться на методы кинетики квазихимических реакций, а также следующие приближения.

Во-первых, будем полагать, что зародыши второй фазы возникают вследствие флуктуаций состава, удовлетворяющих биномиальному распределению. Принимая, что радиус зародышей  $R_0$  соответствует  $0.40\text{ nm}$ , а их концентрация описывается формулой (4), можно определить скорость образования зародышей в виде

$$\frac{dC(m_0, t)}{dt} = \frac{f(x_{\text{Cr}}^\alpha) - f(x_{\text{Cr}}^{\alpha e})}{\tau}, \quad (5)$$

где  $f(x_{\text{Cr}}^\alpha)$  — значение концентрации зародышей, образовавшихся в процессе флуктуаций состава в пересыщенном растворе, содержащем концентрацию атомов хрома (выраженную в относительных единицах), равную  $x_{\text{Cr}}^\alpha$ ;  $f(x_{\text{Cr}}^{\alpha e})$  — концентрация зародышей, соответствующая термодинамическому равновесию при данной температуре,  $\tau$  — характерное время возникновения флуктуаций. По всей видимости, численное значение параметра  $\tau$  должно определяться скоростью диффузии атомов примеси.

Во-вторых, скорость роста зародышей и кластеров будем считать обусловленной диффузией атомов хрома. Тогда для среднего значения числа атомов  $m$  справедливым является известное соотношение

$$\frac{dm}{dt} = \frac{4\pi D_{\text{Cr}}}{v_0} R (x_{\text{Cr}}^\alpha(t) - x_{\text{Cr}}^{\alpha e}(m)), \quad (6)$$

где  $D_{\text{Cr}}$  — коэффициент диффузии атомов хрома в  $\alpha$ -железе,  $x_{\text{Cr}}^{\alpha e}(m)$  — равновесная концентрация ато-

мов хрома над поверхностью кластера радиуса  $R(m) = a \left( \frac{m}{x_{\text{Cr}}^\alpha(m)} \right)^{1/3}$ , определенная с помощью системы уравнений (1). Поскольку, как показано выше, кластеры состоят как из атомов хрома, так и атомов железа, данное приближение справедливо, если присоединение атомов железа к кластеру осуществляется гораздо быстрее, чем присоединение атомов хрома.

С учетом сделанных предположений функция распределения кластеров по размерам  $C(m, t)$  удовлетворяет следующей системе уравнений:

$$\frac{dC(m_0, t)}{dt} = \frac{f(x_{\text{Cr}}^\alpha(t)) - f(x_{\text{Cr}}^{\alpha e})}{\tau} - k(m_0)C(m_0, t)x_{\text{Cr}}^\alpha(t) + g(m_0 + \delta m)C(m_0 + \delta m, t),$$

$$\begin{aligned} \frac{dC(m, t)}{dt} &= k(m - \delta m)x_{\text{Cr}}^\alpha(t)C(m - \delta m, t) \\ &+ g(m + \delta m)C(m + \delta m, t) - (x_{\text{Cr}}^\alpha(t)k(m) + g(m))C(m, t), \\ x_{\text{Cr}}^\alpha(t) + \sum_{m \geq m_0} mC(m, t) &= x_{\text{Cr}}^{\text{tot}}, \end{aligned} \quad (7)$$

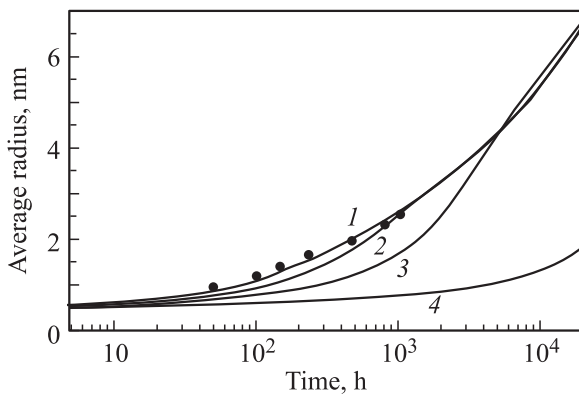
где кинетические коэффициенты  $k(m)$  и  $g(m)$  описывают скорость присоединения и выброса из кластера  $\delta m$  частиц хрома,  $x_{\text{Cr}}^{\text{tot}}$  — доля атомов хрома в сплаве. Общий вид кинетических коэффициентов может быть получен из соотношения (6)

$$\begin{aligned} k(m) &= \frac{4\pi D_{\text{Cr}} R(m)}{\delta m v_0}, \\ g(m) &= k(m)x_{\text{Cr}}^{\alpha e}(m). \end{aligned} \quad (8)$$

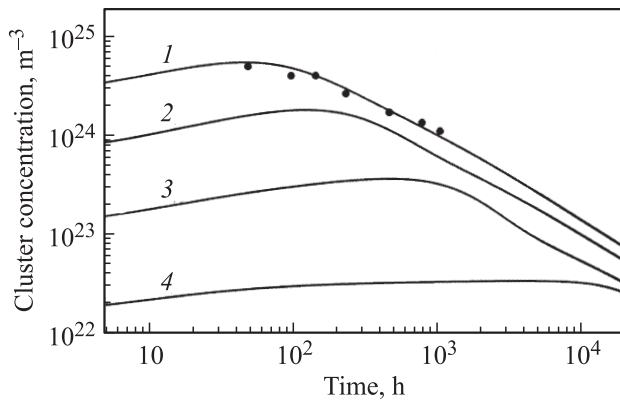
Результаты расчета зарождения и роста частиц второй фазы, полученные с помощью формул (1), (4), (5), (7), (8) для температуры  $T = 500^\circ\text{C}$  приведены на рис. 4 и 5. При расчетах варьировались значения параметров  $\tau$  и  $D_{\text{Cr}}$  так, чтобы наилучшим образом описать экспериментальные данные [9] по изменению среднего радиуса кластеров и их концентрации для сплава Fe–20 at.% Cr. Как следует из рисунков, результаты расчета удовлетворительно описывают экспериментальные данные, при этом варьируемые параметры имели следующие значения:  $D_{\text{Cr}} = 3.12 \cdot 10^{-19}\text{ cm}^2/\text{s}$ ,  $\tau^{-1} = 0.866 \cdot 10^{-3}\text{ s}^{-1}$ .

На рис. 4 и 5 приведены также зависимости для концентрации и среднего размера кластеров, образующихся в процессе термического отжига в течение  $20\,000\text{ h}$ , для сплавов, содержащих 14, 16, 18 at.% Cr. Как следует из рисунков, характер роста частиц второй фазы в целом аналогичен наблюдаемому для сплава Fe–20 at.% Cr и соответствует известному из литературы механизму коалесценции [18].

Сравним полученное значение коэффициента диффузии с литературными данными. В соответствии с работой [19] на процесс низкотемпературной диффузии значительное влияние оказывает переход сплава в



**Рис. 4.** Зависимость среднего радиуса кластера от времени отжига при температуре  $T = 500^\circ\text{C}$ . Сплошные линии — результат моделирования: 1 — Fe-20 at.% Cr, 2 — Fe-18 at.% Cr, 3 — Fe-16 at.% Cr, 4 — Fe-14 at.% Cr. Точки — экспериментальные данные для сплава Fe-20 at.% Cr [9].



**Рис. 5.** Зависимость концентрации кластеров от времени отжига при температуре  $T = 500^\circ\text{C}$ . Сплошные линии — результат моделирования: 1 — Fe-20 at.% Cr, 2 — Fe-18 at.% Cr, 3 — Fe-16 at.% Cr, 4 — Fe-14 at.% Cr. Точки — экспериментальные данные для сплава Fe-20 at.% Cr [9].

ферромагнитное состояние, коэффициент диффузии для которого оказывается равным

$$D_{\text{Cr}} = 37.3_{-14.0}^{+22.4} \times \exp\left[-\frac{(32178.1 \pm 529.8 \text{ K})[1 + (0.133 \pm 0.005)s^2]}{T}\right] \text{ cm}^2/\text{s},$$

где  $s$  — величина спонтанной намагниченности сплава, температурная зависимость которой установлена авторами [19]. Данная зависимость приводит к значениям коэффициента диффузии  $(2.1-27.5) \cdot 10^{-19} \text{ cm}^2/\text{s}$  при температуре  $T = 500^\circ\text{C}$ . Таким образом, коэффициент диффузии, полученный при моделировании роста частиц второй фазы, согласуется со значениями, найденными в работе [19].

Интересно также сравнить полученное значение параметра  $\tau$  с данными других моделей. Это время может быть оценено с помощью модели диффузионного раство-

рения частиц второй фазы, рассмотренной в работе [20]. В соответствии с рассмотренной в данной работе моделью изменение радиуса кластера  $R(t)$  в зависимости от времени может быть определено с помощью приближенного соотношения

$$\frac{R(t)}{R_0} = 1 - \frac{kD_{\text{Cr}}t}{2R_0^2} - \frac{k}{R_0} \sqrt{\frac{D_{\text{Cr}}t}{\pi}}, \quad k = 2 \frac{C_s - C_m}{C_p - C_m}, \quad (9)$$

где  $R_0$  — начальный радиус кластера,  $C_s, C_p, C_m$  — составы сплава у поверхности кластера, внутри кластера и в матрице соответственно. В рамках разработанной выше модели величины  $C_s, C_p, C_m$  могут быть выражены с помощью формул  $C_s = x_{\text{Cr}}^{\alpha e}/v_0$ ,  $C_m = x_{\text{Cr}}^{\alpha}(t)/v_0$ ,  $C_p = x_{\text{Cr}}^{\alpha'}/v_0$ . В соответствии со сделанными предположениями можно принять  $R_0 = 0.44 \text{ nm}$  и  $R(\tau) = 0.4 \text{ nm}$ . Тогда, полагая, что приведенные в формуле (9) величины равны:  $D_{\text{Cr}} = 3.12 \cdot 10^{-19} \text{ cm}^2/\text{s}$ ,  $x_{\text{Cr}}^{\alpha e} = 0.62$ ,  $x_{\text{Cr}}^{\alpha'} = 0.25$ ,  $x_{\text{Cr}}^{\alpha}(t) = 0.2$ , находим  $\tau^{-1} = 0.866 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ , что согласуется со значением, полученным выше исходя из анализа кинетики зарождения и роста частиц  $\alpha'$ -фазы ( $\tau^{-1} = 0.868 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ ).

## 5. Заключение

Разработана модель зарождения и роста частиц второй фазы в сплавах на основе бинарной системы Fe-Cr, которая позволила удовлетворительно описать кинетику изменения распределения фаз в процессе термического отжига (для сплава Fe-20 at.% Cr при температуре  $T = 500^\circ\text{C}$ ). Полученные при расчетах значения коэффициента диффузии хрома в железе ( $D_{\text{Cr}} = 3.12 \cdot 10^{-19} \text{ cm}^2/\text{s}$ ) и скорости зародышеобразования ( $\tau^{-1} = 0.868 \cdot 10^{-3} \text{ s}^{-1}$ ) согласуются с литературными данными.

С помощью разработанной модели и полученных параметров был проведен расчет роста частиц  $\alpha'$ -фазы в некоторых других сплавах Fe- $x$ Cr ( $x = 14, 16, 18 \text{ at.}\%$  Cr). Как показывают расчеты, характер роста частиц второй фазы в данных сплавах в целом аналогичен сплаву Fe-20 at.% Cr, а основным механизмом роста является коалесценция.

Проведенные расчеты позволяют сформулировать ряд предположений о возможном характере протекания образования частиц второй фазы в бинарных сплавах.

1. Зарождение частиц второй фазы происходит, если состав в флуктуационной области превышает значение состава равновесного кластера соответствующего размера.

2. Обогащение кластеров атомами матрицы заметно уменьшает энергию границы раздела между кластером и матрицей, поэтому вероятным является образование кластеров по безактивационному механизму. Скорость флуктуационного зарождения главным образом обусловлена составом сплава и скоростью диффузионных процессов.

**Список литературы**

- [1] L. Malerba, A. Caro, J. Wallenius. *J. Nucl. Mater.* **382**, 112 (2008).
- [2] G. Bonny, D. Terentyev, L. Malerba, D. Van Neck. *Phys. Rev. B* **79**, 104 207 (2009).
- [3] A. Barashev, S. Golubov, D. Bacon, P. Flewitt, T. Lewis. *Acta Mater.* **52**, 877 (2004).
- [4] M.H. Mathon, A. Barbu, F. Dunsteter, F. Maury, N. Lorenzelli, C.H. de Novion. *J. Nucl. Mater.* **245**, 224 (1997).
- [5] П.Е. Львов, В.В. Светухин, А.В. Обухов. *ФТТ* **53**, 394 (2011).
- [6] V. Svetukhin, P. L'vov, E. Gaganidze, M. Tikhonchev, C. Dethloff. *J. Nucl. Mater.* **415**, 205 (2011).
- [7] S.R. Goodman, S.S. Brenner, J.R. Low, jr. *Met. Trans.* **4**, 2363 (1973).
- [8] S.R. Goodman, S.S. Brenner, J.R. Low, jr. *Met. Trans.* **4**, 2371 (1973).
- [9] S. Novy, P. Pareige, C. Pareige. *J. Nucl. Mater.* **384**, 96 (2009).
- [10] В.П. Скрипов, А.В. Скрипов. *УФН* **128**, 193 (1979).
- [11] J.W. Cahn, J.E. Hilliard. *J. Chem. Phys.* **28**, 258 (1958).
- [12] J.W. Cahn. *J. Chem. Phys.* **30**, 1121 (1959).
- [13] J.W. Cahn, J.E. Hilliard. *J. Chem. Phys.* **31**, 688 (1959).
- [14] D. Zhou, A.-C. Shi, P. Zhang. *J. Chem. Phys.* **129**, 154 901 (2008).
- [15] M.K. Mitra, M. Muthukumar. *J. Chem. Phys.* **132**, 184 908 (2010).
- [16] R. Becker. *Ann. Physik*, **32**, 128 (1938).
- [17] Л. Ландау, Е. Лифшиц. *Статистическая физика*. Наука, М. (1976). Ч. 1. 584 с.
- [18] Е.М. Лифшиц, П.Л. Питаевский. *Физическая кинетика*. Наука, М. (1976). 528 с.
- [19] C.G. Lee, Y. Iijima, T. Hiratani, K. Hirano. *Mater. Trans. JIM* **31**, 255 (1990).
- [20] H.B. Aaron, G.R. Kotler. *Met. Trans.* **2**, 393 (1971).