



РФЯЦ-ВНИИТФ
РОСАТОМ

ЗНЧ | ЗАБАБАХИНСКИЕ
НАУЧНЫЕ ЧТЕНИЯ |
2025

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЧНОСТИ ОЦК СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА

Кичигин Роман Михайлович

П. В. Чирков, В. В. Дремов, А. В. Карavaев

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина»
г. Снежинск

20.05.2025



РТТН – Развитие Техники и Технологий и Научных исследований в области использования атомной энергии в РФ ФП-4. Разработка новых материалов и технологий для перспективных энергетических систем

Проект:

Создание вычислительных инструментов для предсказания упрочнения сталей

Участники:

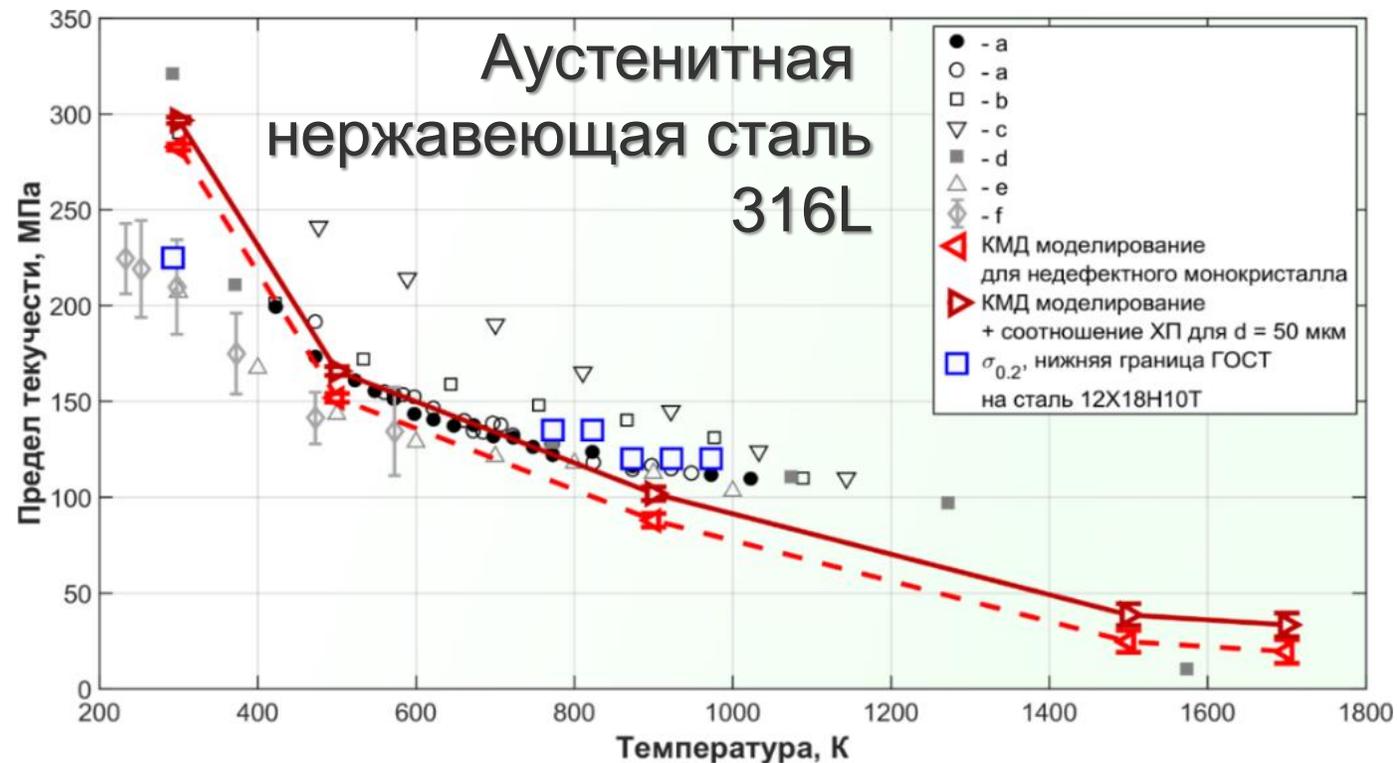
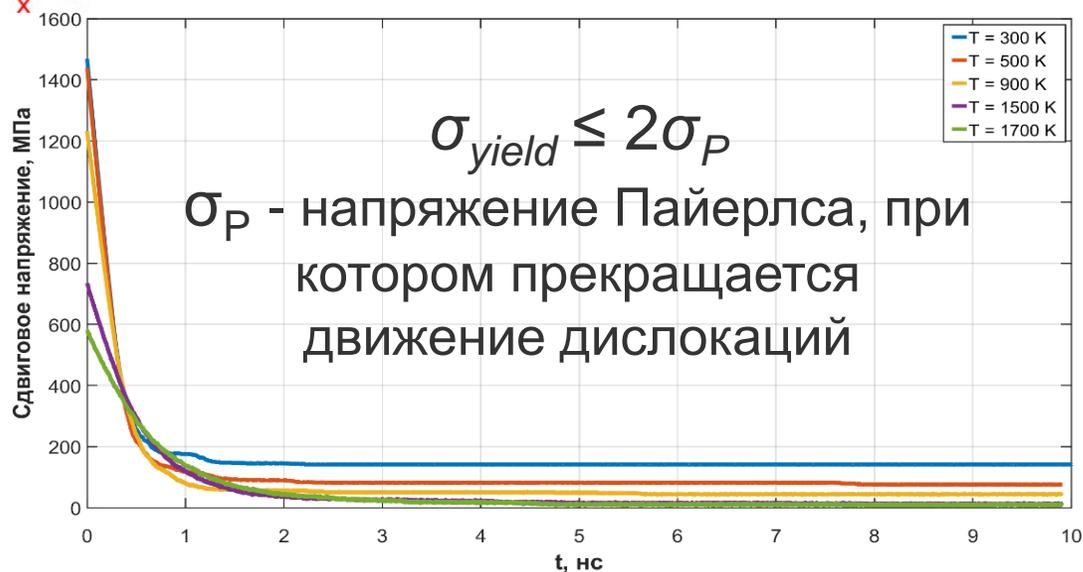
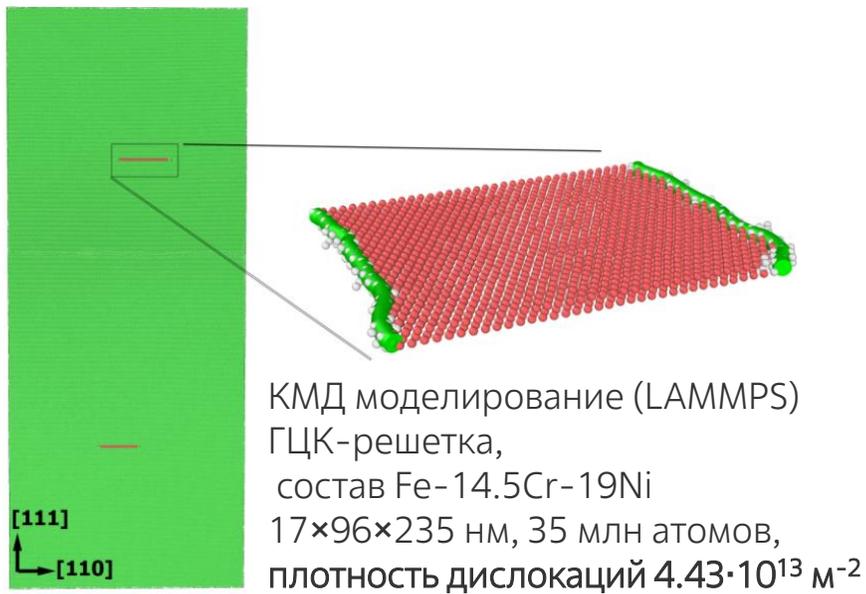
ВНИИА (г. Москва), МИФИ (г. Москва), Сколтех (г. Москва), ИРМ (г. Заречный),
ИФМ (г. Екатеринбург), ОИВТ (г. Москва), РФЯЦ-ВНИИТФ (г. Снежинск)

Проблема:

Деградация свойств конструкционных материалов при длительном реакторном облучении

Перспективные нераспухающие стали имеют ОЦК структуру и оказываются неустойчивыми к фазовому распаду

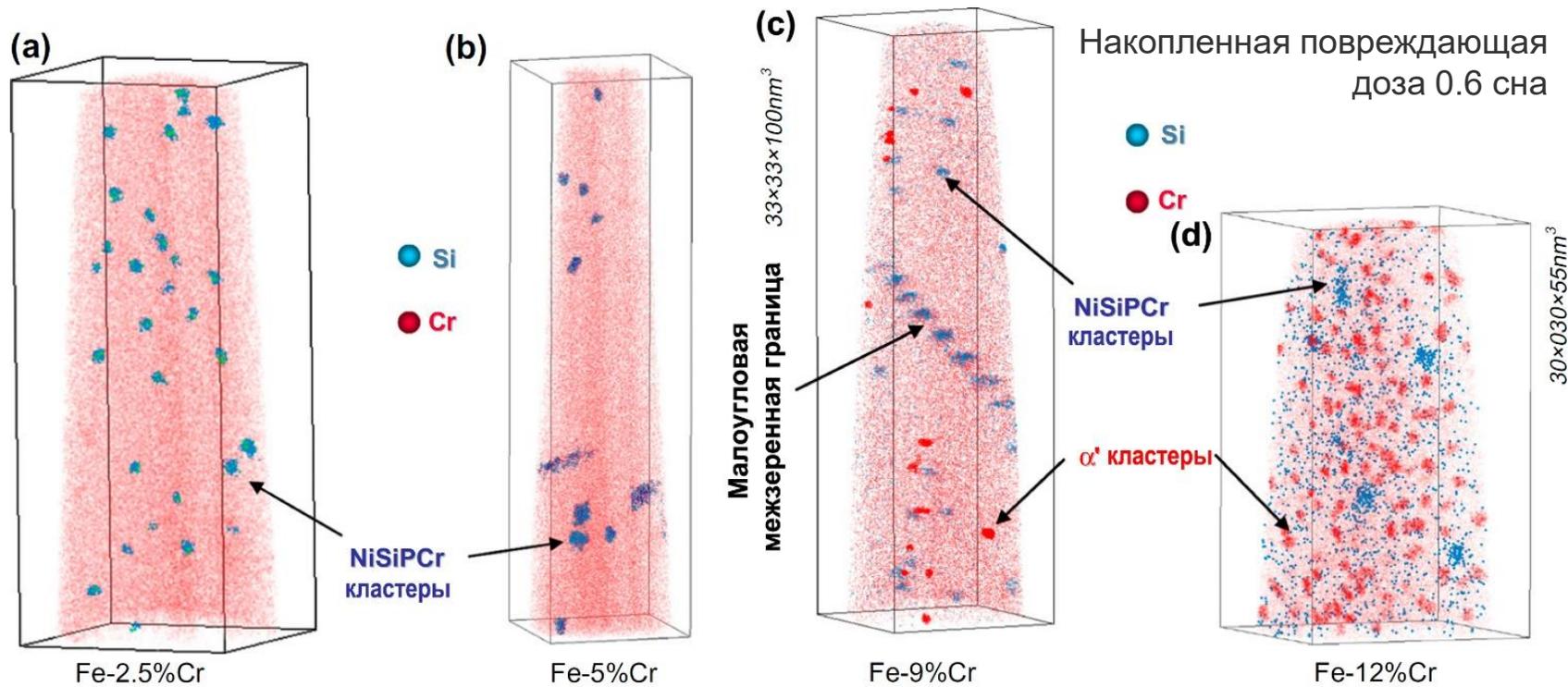
Метод релаксации сдвиговых напряжений



Эксперимент:

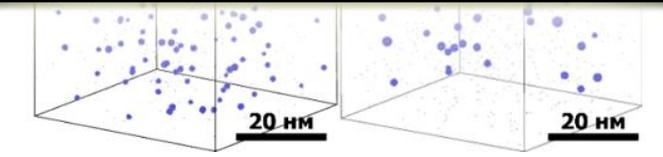
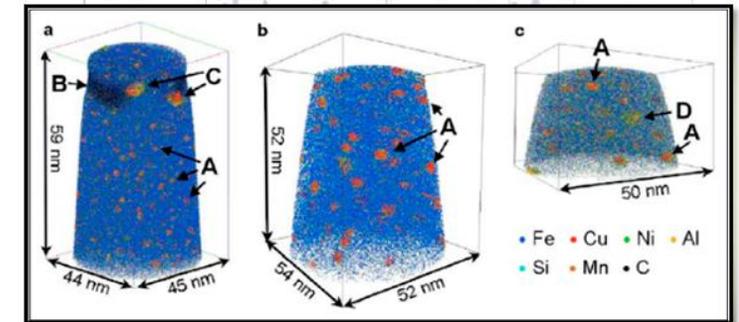
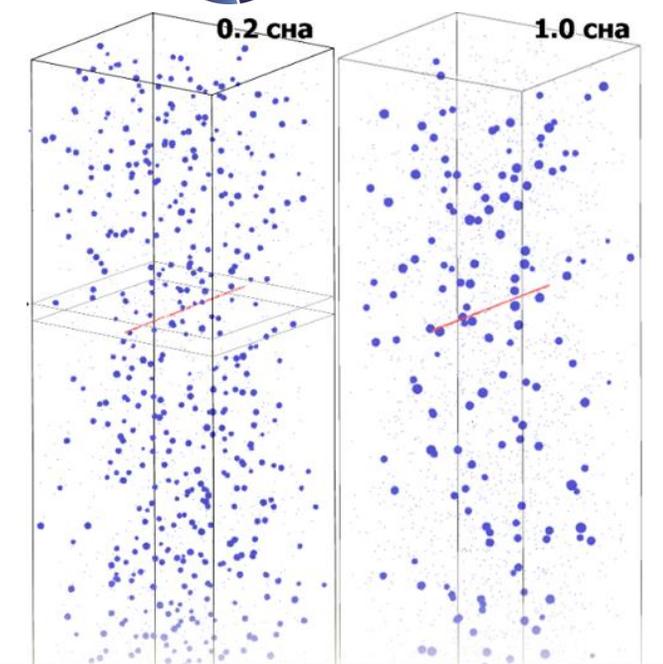
- a - Monteiro S.N. *et al. Mater. Res.* 2017. Vol. 20. P. 506–511.
- b - High-Temperature Characteristics of Stainless Steels, A Designers' Handbook Series N. 9004. American Iron and Steel Institute, 1972.
- c - 316/316L stainless steel product data bulletin. West Chester, OH: AK – 2016.
- d - Lu Y. *et al. Sci. Reports.* 2019. Vol. 9, № 1. P. 1–11.
- e - Smith D.L. *et al. ITER Documentation Series*, No. 29. Int. At. Energy Agency, Vienna. 1991.
- f - Xiong Y. *et al. J. Mater. Eng. Perform.* 2018. Vol. 27, P. 1232–1240.

Выделения вторичных фаз в ферритных сталях



Alloy	Fe	Cr	Si	P	Ni	C	V, N, O, S, Al, Ti
Fe-2.5%Cr	Bal.	2.55 ± 0.02	0.10 ± 0.01	0.019 ± 0.002	N.M. ^a	0.010 ± 0.001	N.M. ^a
Fe-5%Cr	Bal.	4.61 ± 0.02	0.059 ± 0.002	0.013 ± 0.001	0.034 ± 0.001	N.M. ^a	N.M. ^a
Fe-9%Cr	Bal.	9.16 ± 0.04	0.065 ± 0.003	0.013 ± 0.001	0.057 ± 0.003	N.M. ^a	N.M. ^a
Fe-12%Cr	Bal.	11.2 ± 0.04	0.18 ± 0.01	0.025 ± 0.002	0.07 ± 0.01	N.M. ^a	N.M. ^a

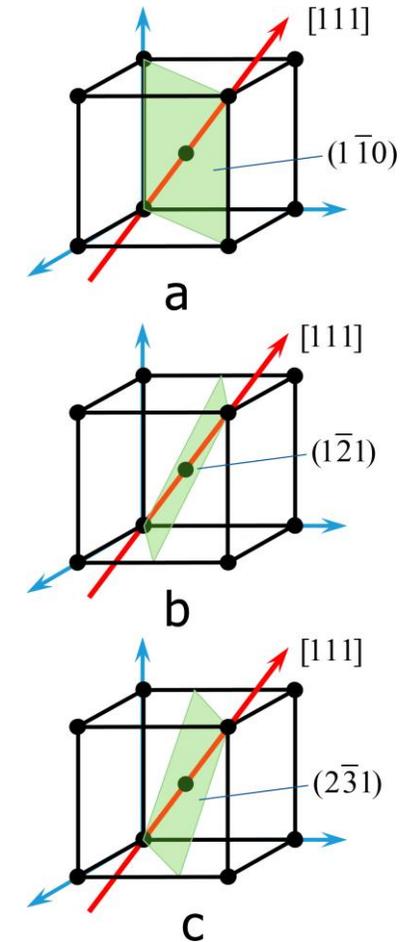
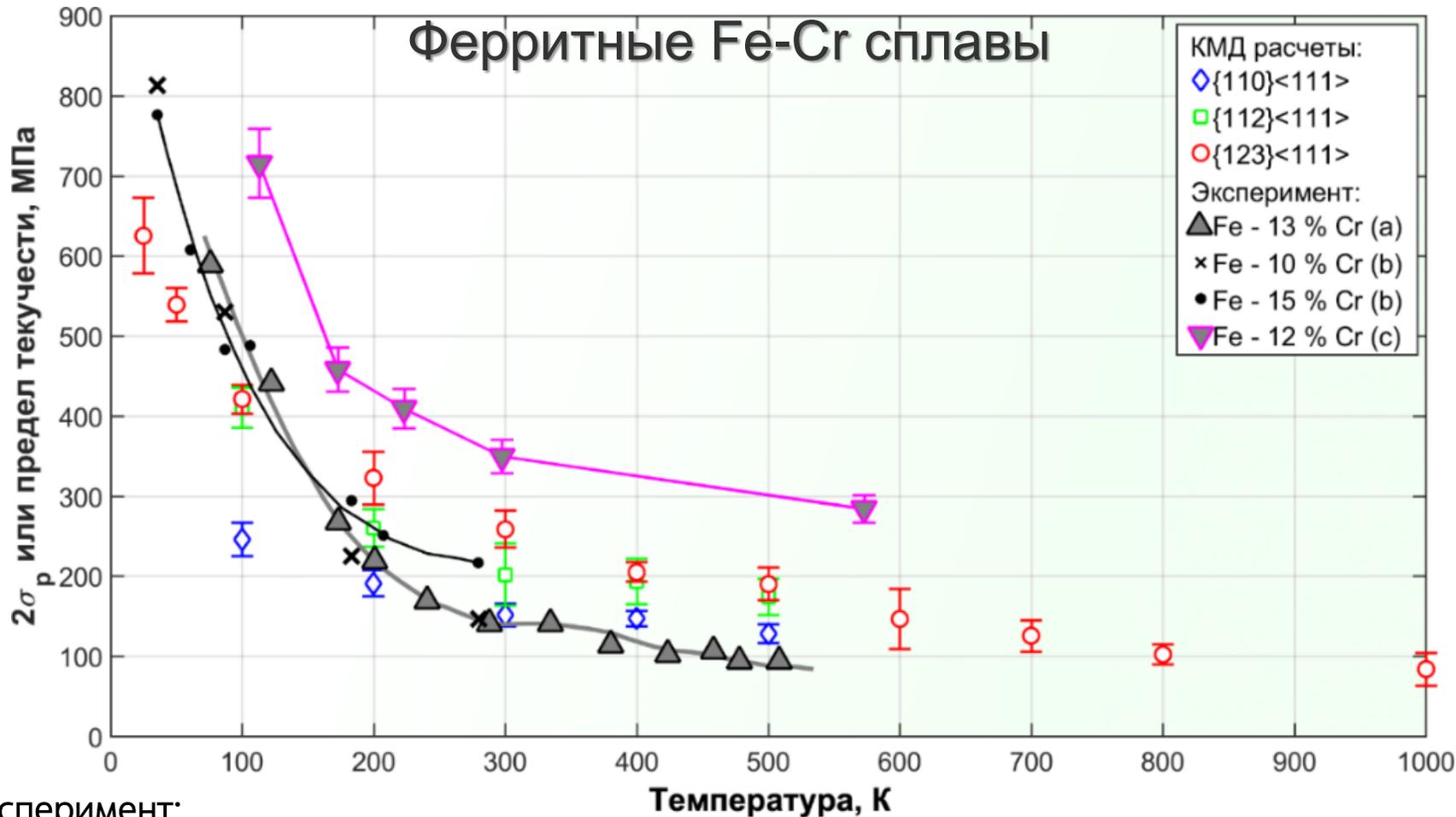
^a N.M.: за пределами чувствительности измерений.



АЗТ – томограммы облученных модельных Fe-Cr сплавов различным содержанием хрома. (V. Kuksenko *et al.*, *J. Nucl. Mater.* **432** (2013), pp. 160-165.)

Справа: Медные преципитаты в Fe-Cu сплавах – МД модели для разных доз и АЗТ – томограммы (в рамке – Isheim D. *et al.*, *Scr. Mater.* **55** (2006), pp. 35-40.)

КМД моделирование статических прочностных свойств сталей



Эксперимент:

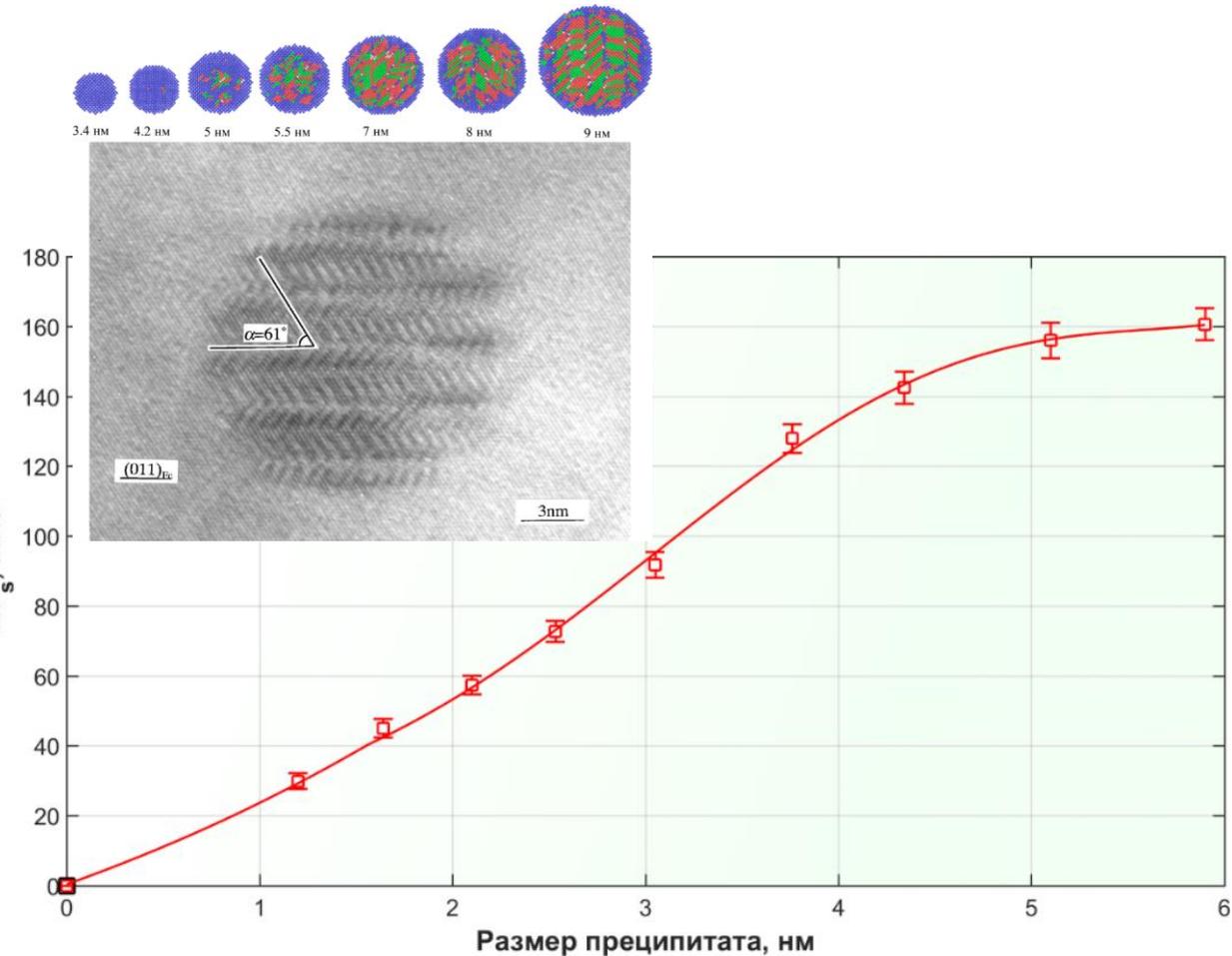
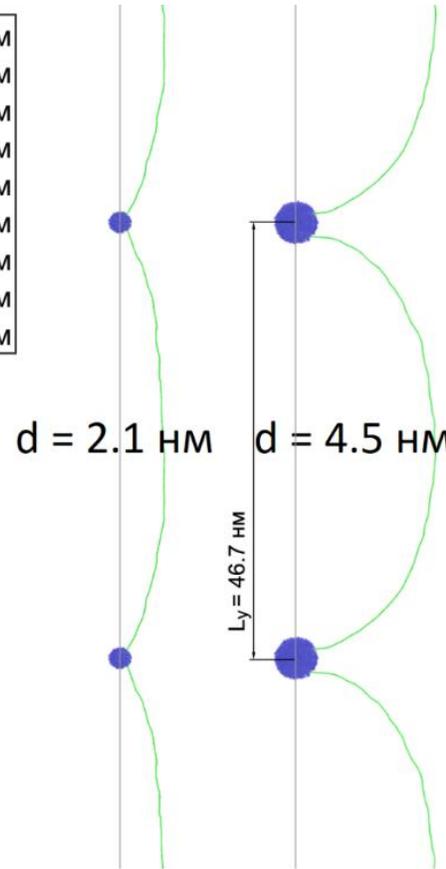
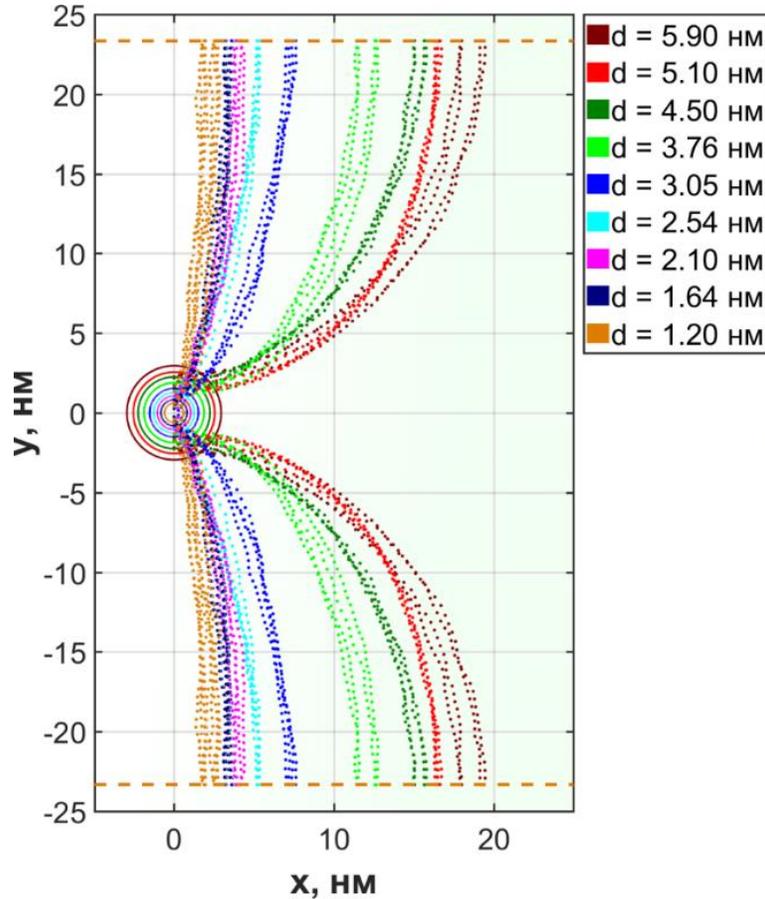
a - Suganuma K., Kayano H. *J. Nucl. Mater.* 1983. Vol. 118, P. 234–241.

b - Suganuma K., Kayano H., Yajima S. *J. Nucl. Mater.* 1982. Vol. 105, P. 23–35.

c - Konstantinović M.J. *et al. Phys. Status Solidi.* 2016. Vol. 213, P. 2988–2994.

МД расчет: Настоящая работа

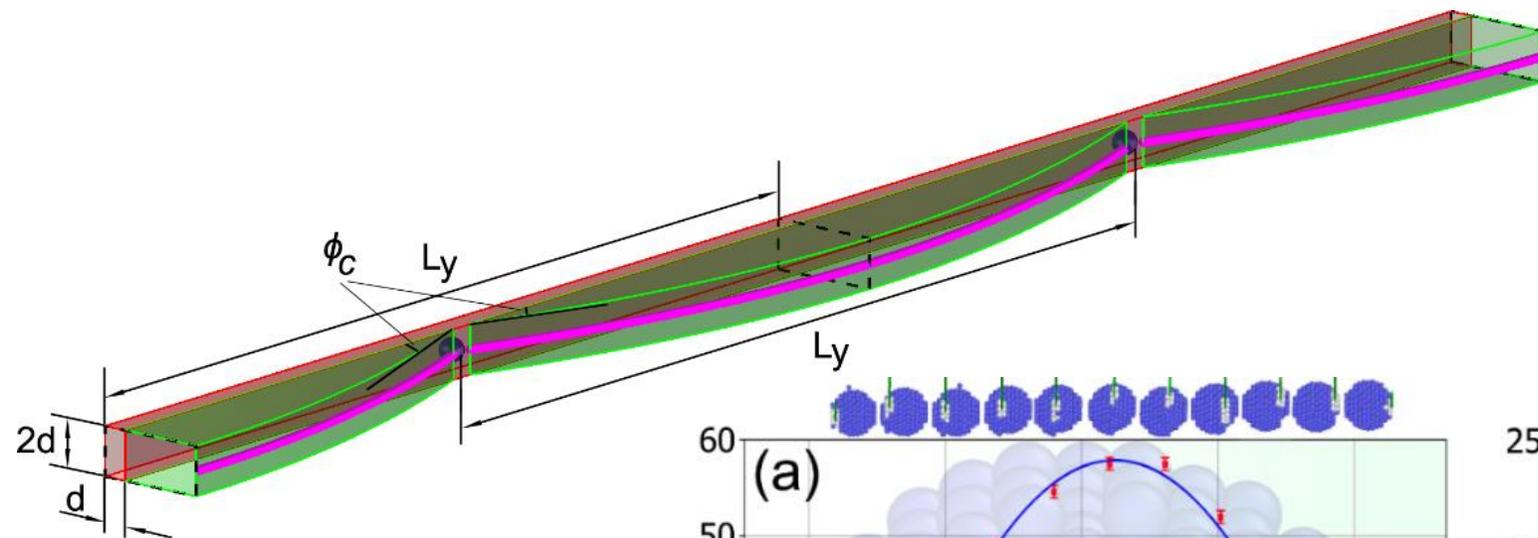
КМД моделирование упрочнения за счет выделения вторичных фаз



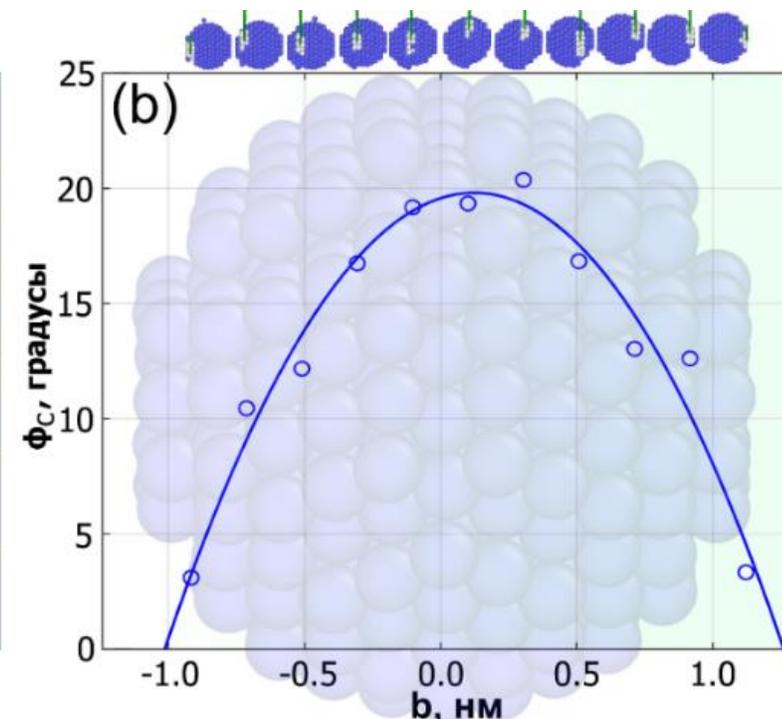
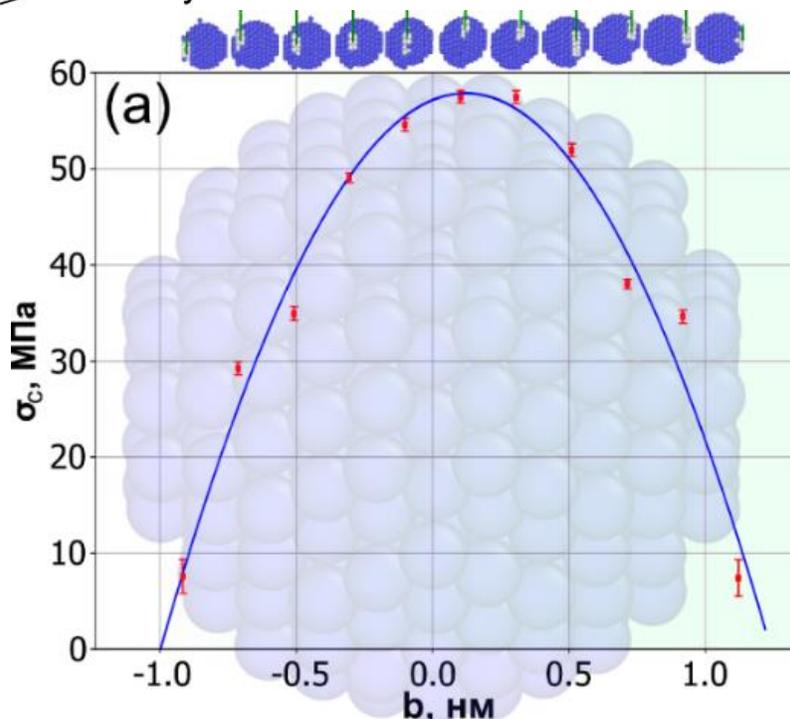
Положения дислокационных линий краевых дислокаций в системе скольжения $\{110\}\langle 111 \rangle$ на моменты окончания расчетов по определению критических сдвиговых напряжений для медных преципитатов различного размера

Зависимость критического сдвигового напряжения для краевых дислокаций в системе скольжения $\{110\}\langle 111 \rangle$, останавливаемых медными преципитатами разных размеров

КМД моделирование упрочнения за счет выделения вторичных фаз

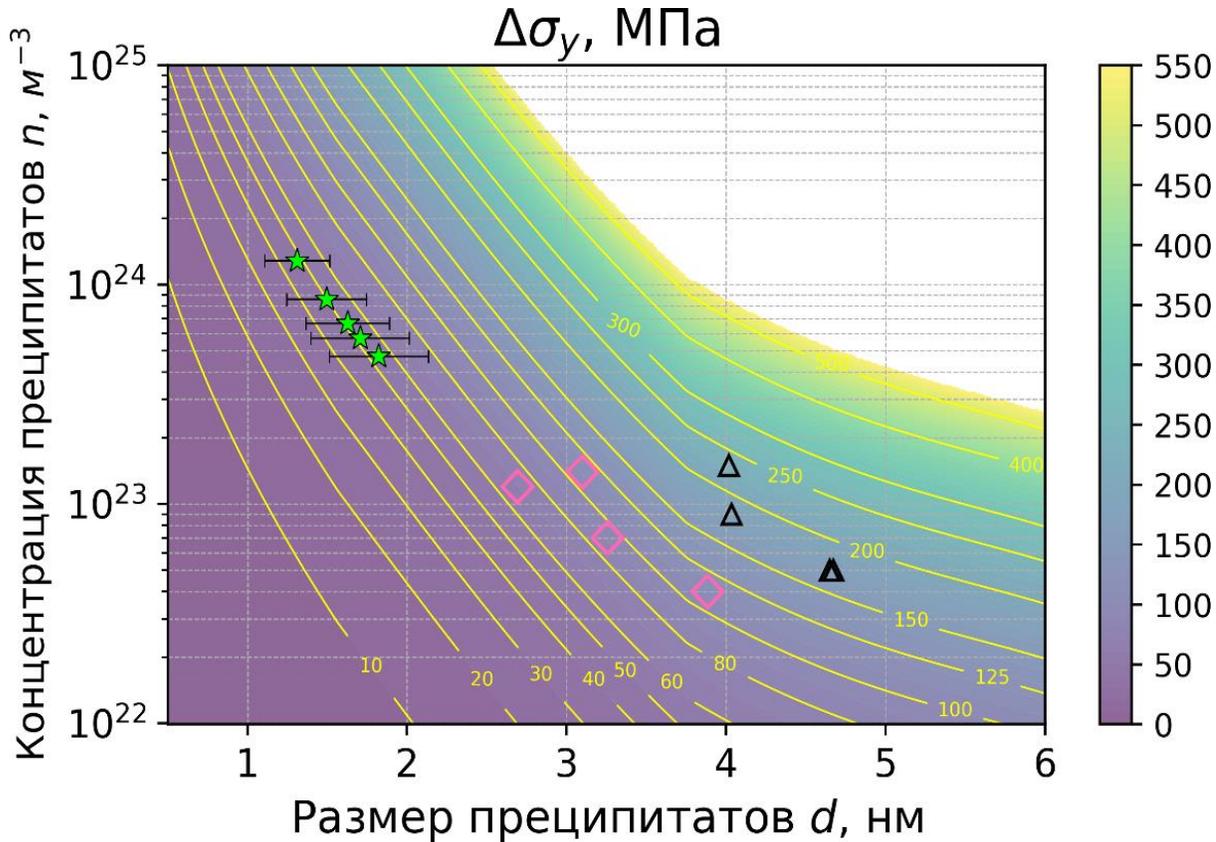


Объем “заметаемый” остановленной на преципитате дислокацией = эффективная концентрация преципитатов



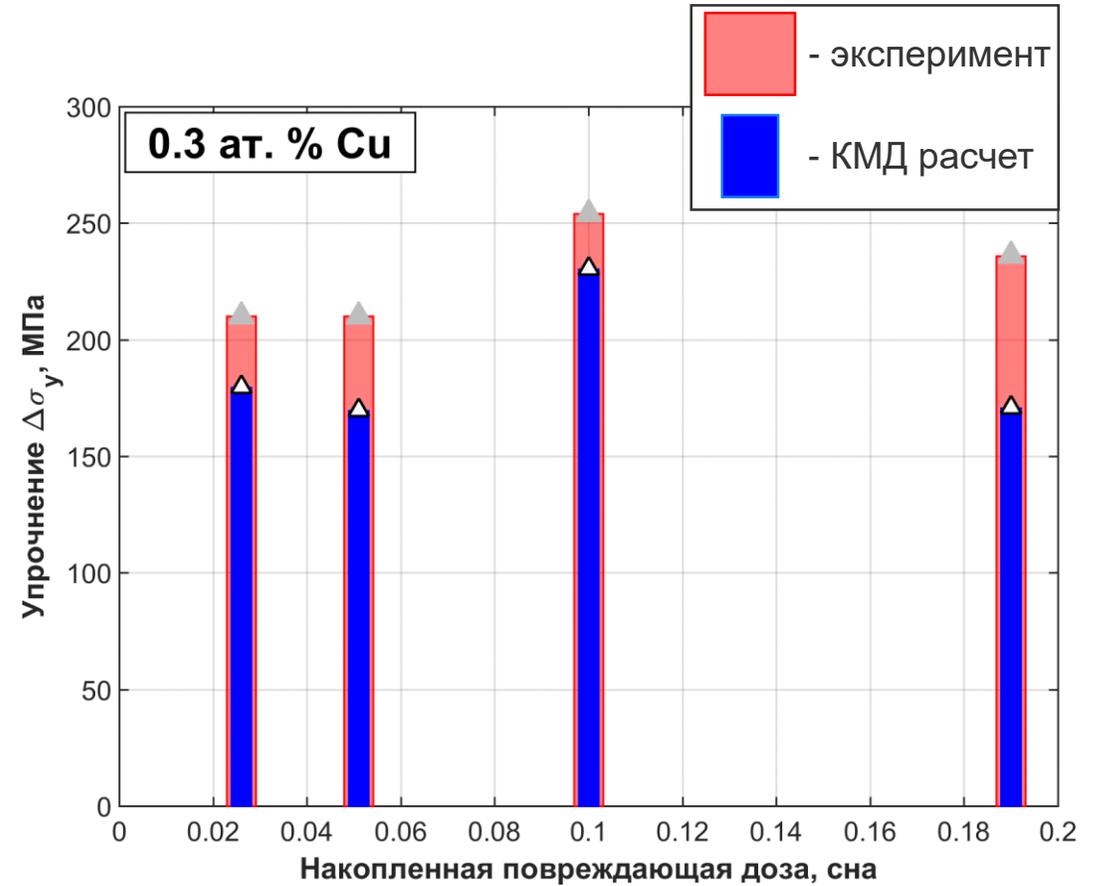
Расчет “силы” закрепления дислокации преципитатом в зависимости от положения преципитата относительно плоскости скольжения

КМД моделирование упрочнения за счет выделения вторичных фаз меди



Эксперимент:

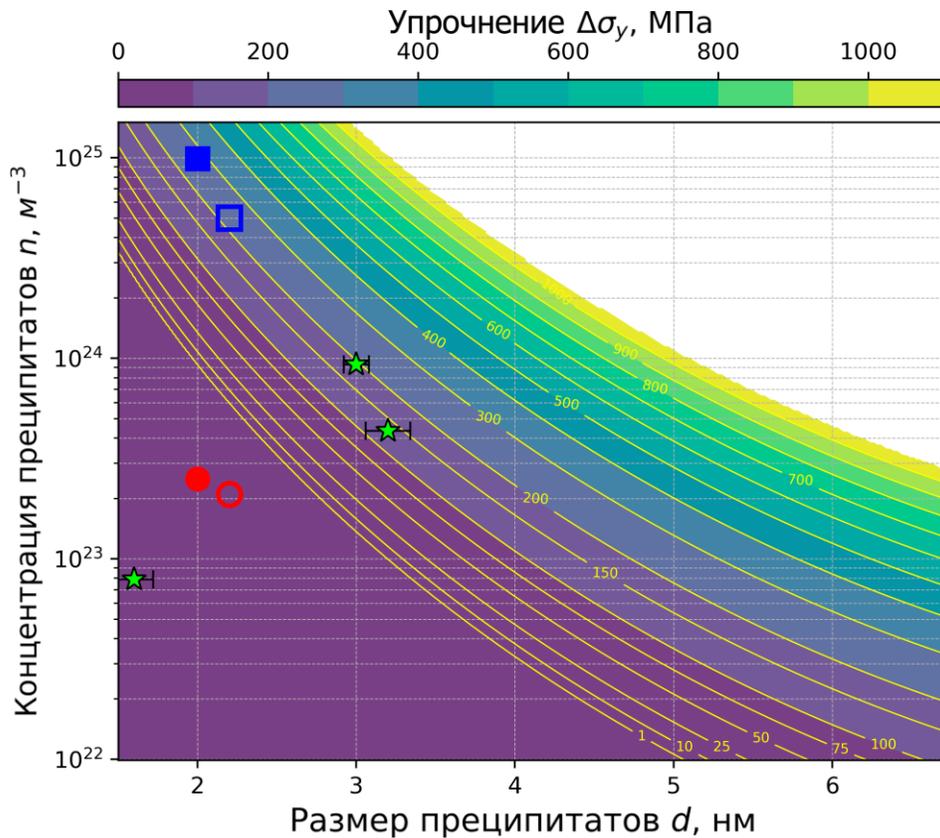
Европейский проект PERFECT (Prediction of Irradiation Damage Effects on Reactor Components)
 Bergner F. et al. *J. Nucl. Mater.* 2010. Vol. 399, P. 129–136.
 Meslin E. et al. *J. Nucl. Mater.*, 2010. Vol. 399, P. 137–145.



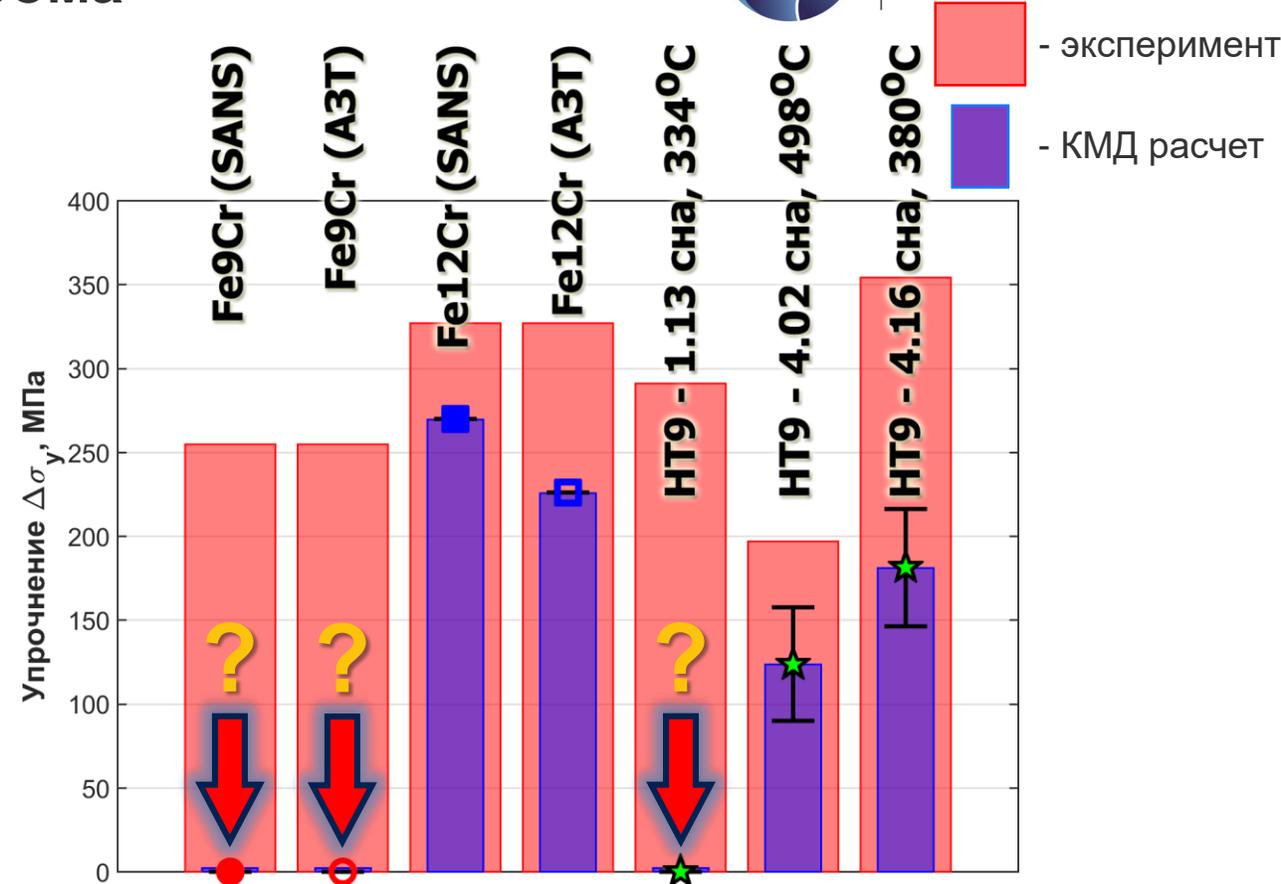
Упрочнение за счёт выделения медных precipитатов

Karavaev A.V. et al., *Comp. Mater. Sci.*, 2023. Vol. 229, P. 112383

КМД моделирование упрочнения за счет выделения вторичных фаз хрома



Нейтронная доза, температура облучения	Средний радиус, нм	Объемная концентрация, $\times 10^{23} \text{ м}^{-3}$
1.13 сна, 334°C	0.8 ± 0.06	0.79
4.16 сна, 380°C	1.5 ± 0.04	9.32
4.02 сна, 498°C	1.6 ± 0.07	4.35



Экспериментальные данные по параметрам хромовых α' precipitates, полученные с помощью атомно-зондовой томографии в облученных образцах стали HT9:

H. Yan et al. J. Nucl. Mater., 557 (2021) p. 153252 Экспериментальные

данные по модельным Fe-Cr сплавам:

F. Bergner et al., J. Nucl. Mater. 448 (2014) pp. 96–102



РОССИЙСКАЯ ФЕДЕРАЦИЯ



RU2022662968

ФЕДЕРАЛЬНАЯ СЛУЖБА
ПО ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНОЙ СОБСТВЕННОСТИ
ГОСУДАРСТВЕННАЯ РЕГИСТРАЦИЯ ПРОГРАММЫ ДЛЯ ЭВМ

Номер регистрации (свидетельства):
2022662968
Дата регистрации: 08.07.2022
Номер и дата поступления заявки:
2022662412 01.07.2022
Дата публикации и номер бюллетеня:
08.07.2022 Бюл. № 7
Контактные реквизиты:
нет

Автор(ы):
Дремов Владимир Владимирович (RU),
Янилкин Алексей Витальевич (RU),
Савин Дмитрий Иванович (RU),
Чирков Павел Владимирович (RU),
Шапеев Александр Васильевич (RU),
Костюченко Татьяна Сергеевна (RU),
Мешков Евгений Александрович (RU),
Покаташкин Павел Александрович (RU),
Дьячков Сергей Александрович (RU),
Караваев Алексей Валентинович (RU),
Кичигин Роман Михайлович (RU)
Правообладатель(и):
Российская Федерация, от имени которой
выступает Государственная корпорация по
атомной энергии «Росатом» (RU)

Название программы для ЭВМ:
Программное средство для расчета образования фазовых выделений и упрочнения

Реферат:
Программа для ЭВМ предназначена для расчета характеристик когерентных вторичных фаз и упрочнения при реакторном облучении. Программа обеспечивает выполнение следующих функций: многомасштабное моделирование эволюции атомной структуры многокомпонентных систем; возможен учет баллистического перемешивания, влияния кластеров междоузлий и колебательной энтропии; расчет характеристик когерентных вторичных фаз, образующихся при моделировании облучения; расчет упрочнения от образовавшихся когерентных вторичных фаз. Тип ЭВМ: IBM PC-совмест. ПК. ОС: Linux с версией ядра не меньше 4.9.

Computational Materials Science 229 (2023) 112383

Contents lists available at ScienceDirect

Computational Materials Science

journal homepage: www.elsevier.com/locate/commsci



ELSEVIER



Full length article

Atomistic simulation of hardening in bcc iron-based alloys caused by nanoprecipitates

A.V. Karavaev ^{a,b,*}, P.V. Chirkov ^a, R.M. Kichigin ^{a,b}, V.V. Dremov ^a

^a Federal State Unitary Enterprise "Russian Federal Nuclear Center - Zababakhin All-Russian Research Institute of Technical Physics", Snezhinsk, Chelyabinsk Region 456770, Russia

^b Snezhinsk Physics and Technology Institute, National Nuclear Research University "MEPhI" (Moscow Engineering Physics Institute), Snezhinsk, Chelyabinsk Region 456770, Russia

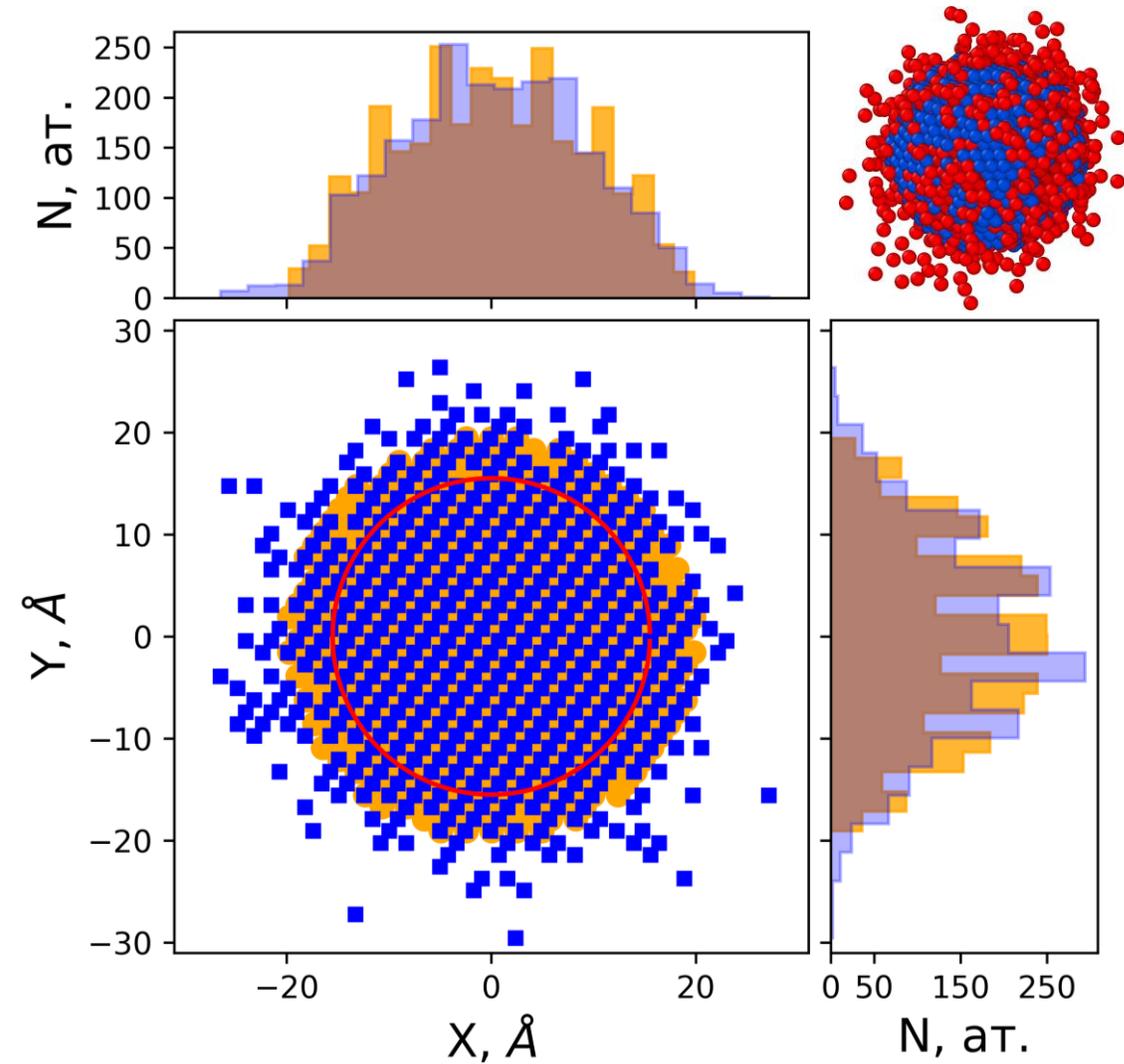
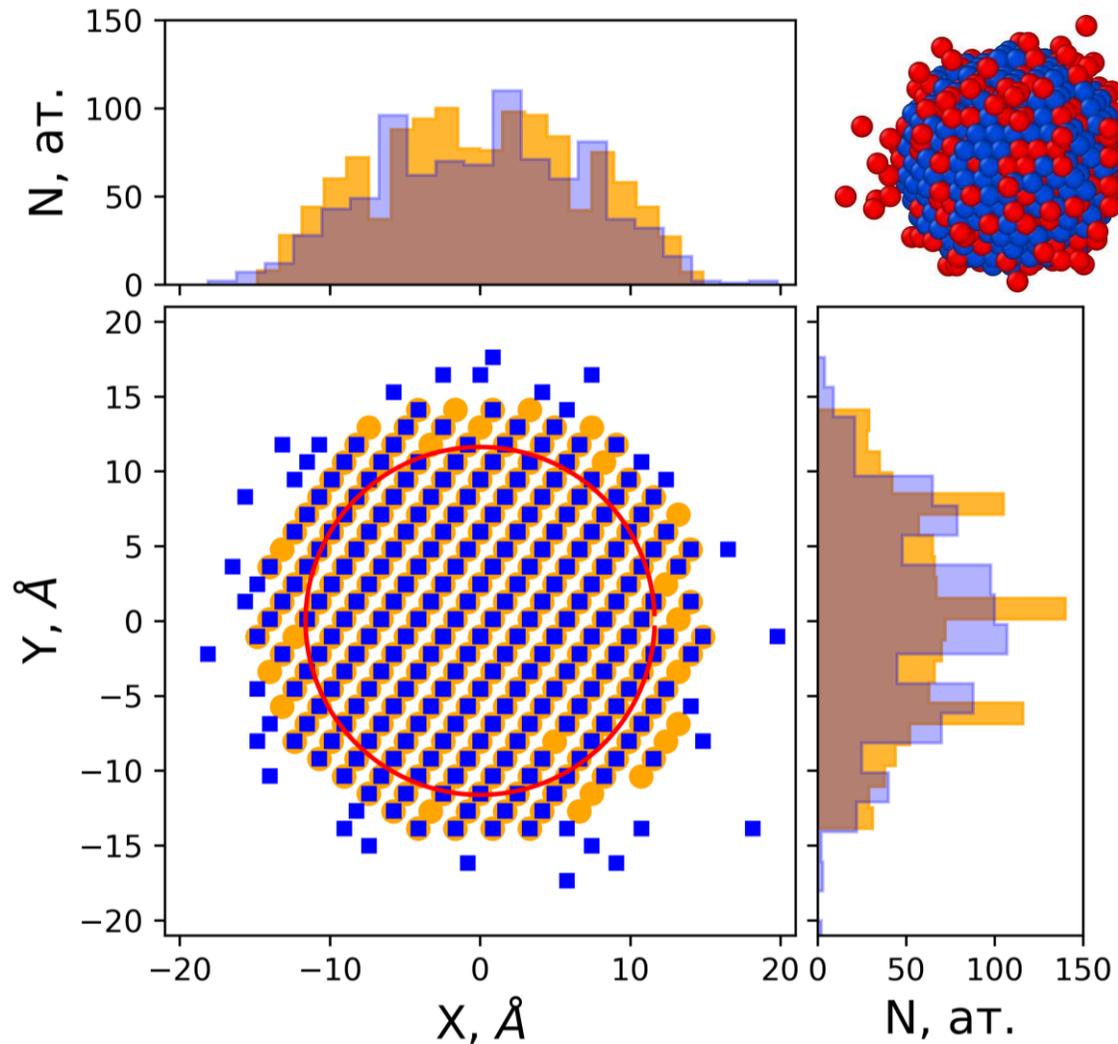
ARTICLE INFO

Keywords:
Hardening
Secondary phase precipitates
bcc Iron-based alloys
Atomistic simulations

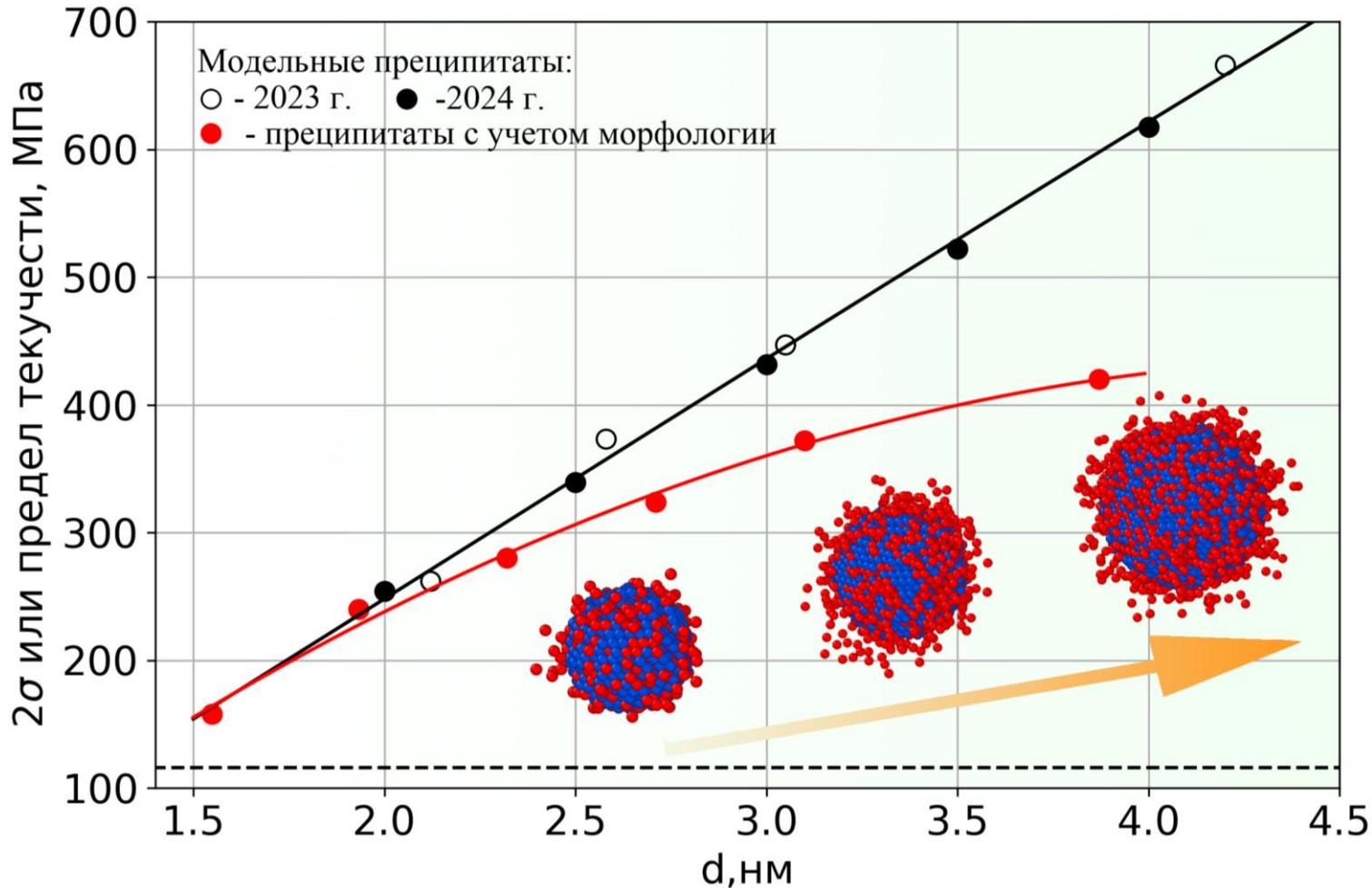
ABSTRACT

The paper presents results of atomistic simulations of hardening in model bcc iron-based alloys due to secondary phase precipitates formation. The simulations are based on shear stress relaxation technique and experimental data on morphology of precipitates. Atomistic methods were developed to reproduce the shear strength of bcc iron-based materials. The large-scale atomistic simulations were carried out for model binary alloys: Fe-Cr imitating low-carbon ferritic and ferritic-martensitic steels and Fe-Cu imitating low-carbon bainitic steel. A representative set of atomic structures is compiled with account for the chemical composition and concentration and size of secondary phase, comparable with those in steels of the considered classes and available experimental data on radiation and thermal induced precipitation. Obtained results on hardening were verified against experimental data and the dispersed barrier hardening model.

Морфология реально наблюдаемых в экспериментах преципитатов

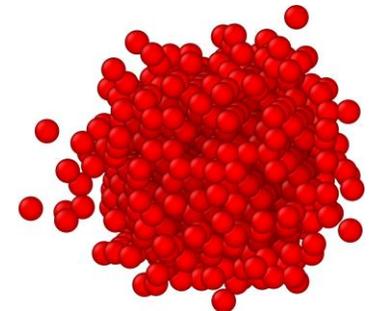
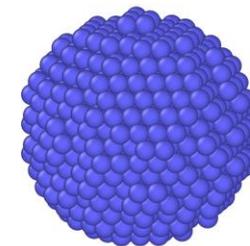


КМД моделирование с “реальными” преципитатами



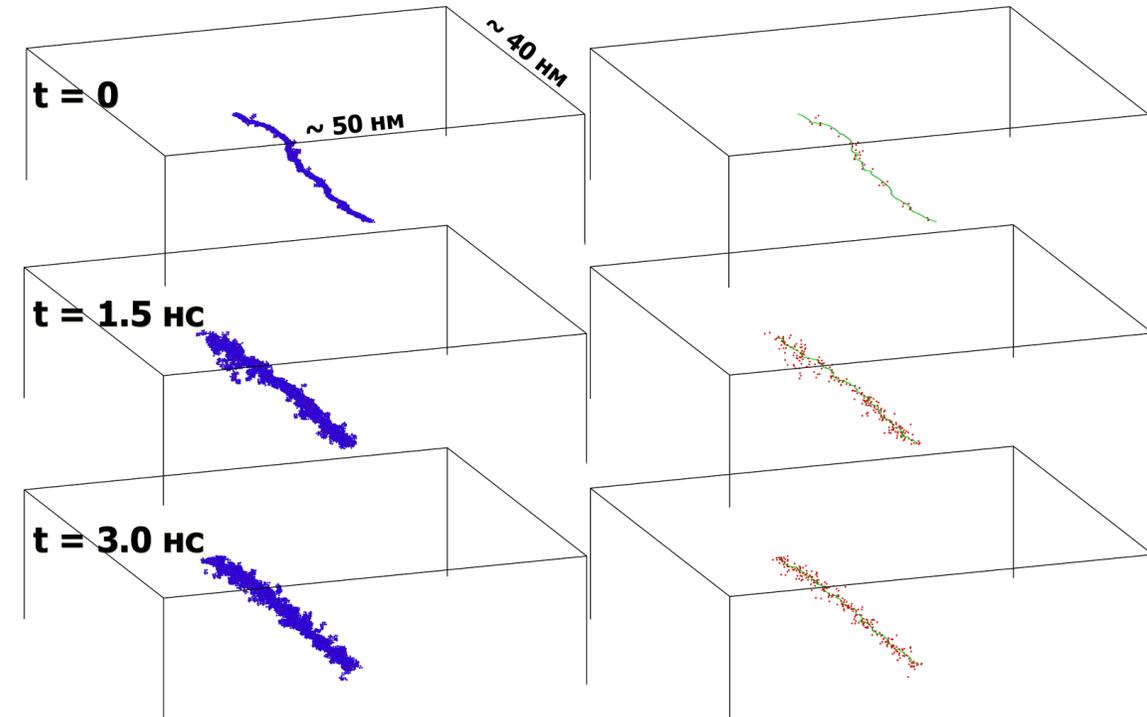
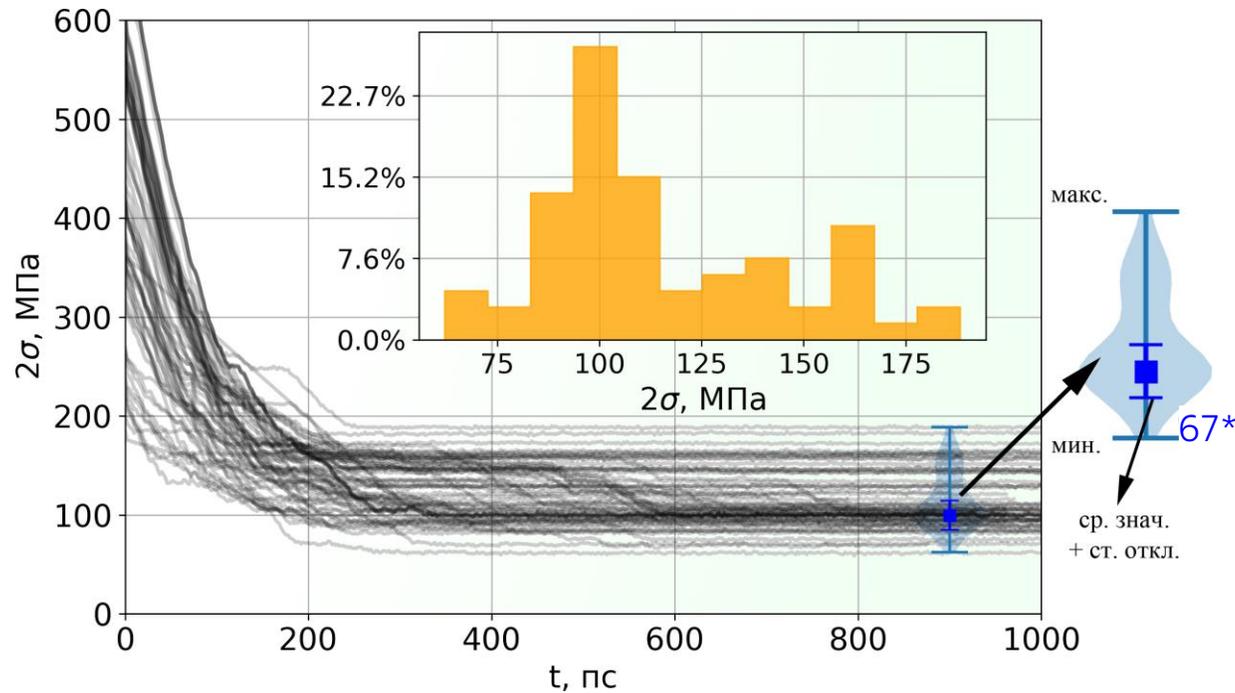
Зависимость предела текучести для краевых дислокаций в системе скольжения $\{110\}\langle 111\rangle$, останавливаемых хромовыми преципитатами разных размеров при размере моделируемой системы в направлении дислокаций $L_y \approx 46.7$ нм

Система размером 50.2 x 46.7 x 243 нм,
 $\approx 48 \cdot 10^6$ атомов



Модельный хромовый преципитат и с учетом морфологии 1200 и 1044 атомов

Расчет критических напряжений с учетом примесей внедрения (углерода)



Типичные временные зависимости сдвиговых напряжений в сплаве Fe-0.15 ат. % С с равномерно распределенными атомами углерода для системы скольжения $\{100\}\langle 111 \rangle$ при нормальных условиях.

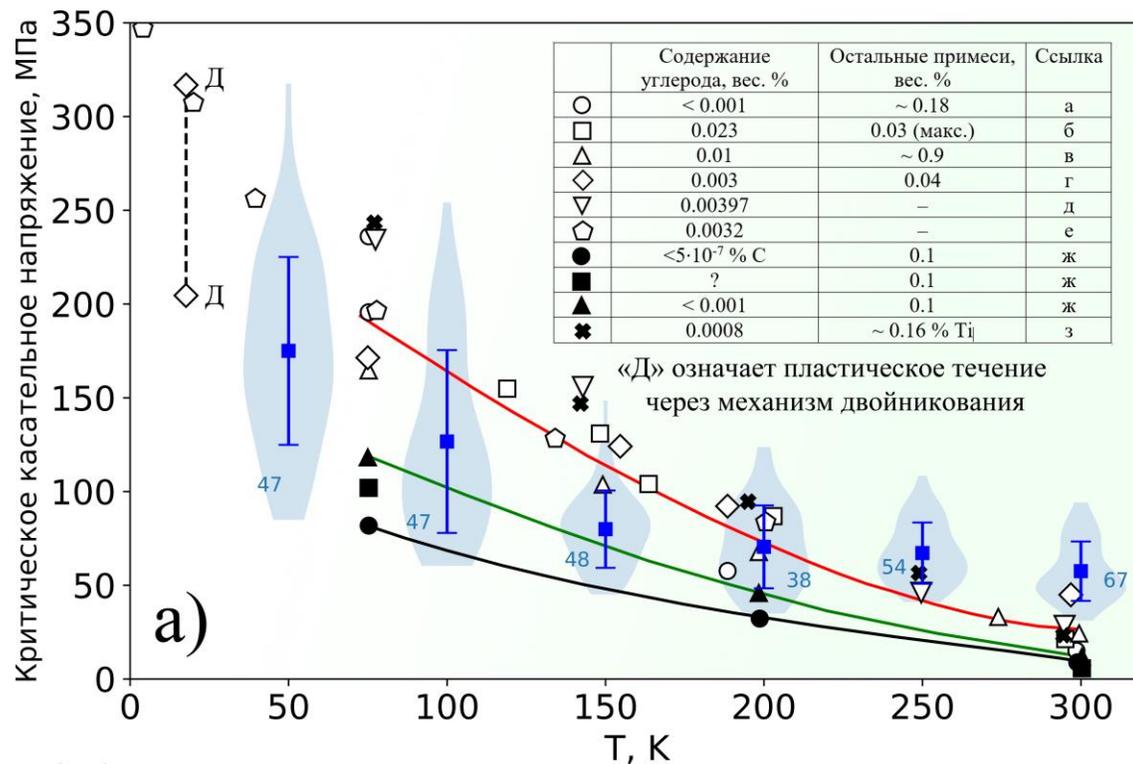
Прямое КМД моделирование декорирования краевой дислокации в ОЦК железе, принадлежащей системе скольжения $\{100\}\langle 111 \rangle$, углеродом – формирование атмосферы Коттрела. Моделирование при $T \approx 0.52 T_{пл}$

* Число показывает количество независимых расчетов

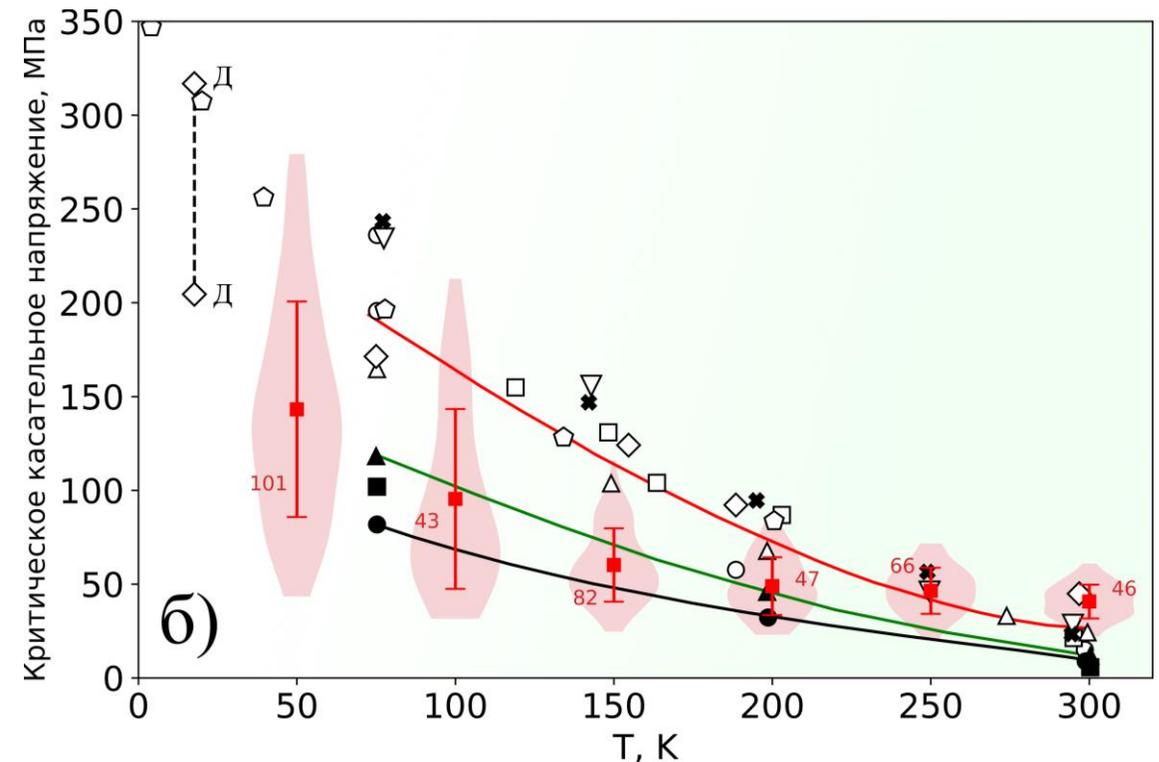
Критические напряжения при различных температурах и содержаниях углерода



Fe-0.15 ат.%C = Fe-0.0323 вес. % C



Fe-0.10 ат.%C = Fe-0.0215 вес. % C



а) Jaoul B., Gonzalez D. // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1961. – Vol. 9. – P. 16.

б) Stein R. P., Brick R. M. // *Transactions of the American Society for Metals*. – 1954. – Vol. 46. – P. 1406.

в) Cox J. J., Horne G. T., Mehl R. F. // *Transactions of the American Society for Metals*. – 1957. – Vol. 49. – P. 18.

г) Allen N. P., Hopkins B. E., McLennan J. E. // *Proceedings of Royal Scientific Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. – 1956. – Vol. 234. – P. 221.

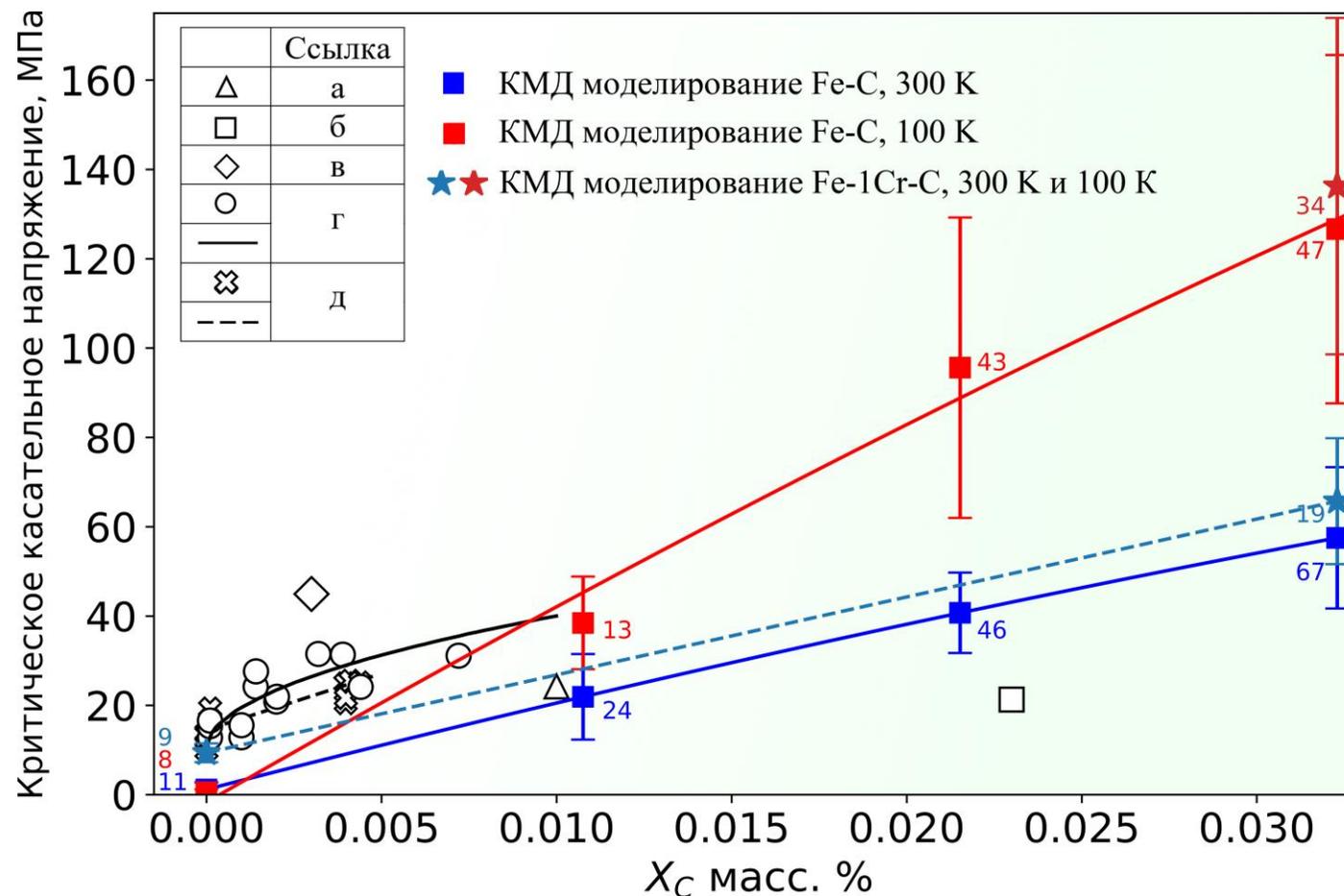
д) Quesnel D. J., Sato A., Meshii M. // *Materials Science and Engineering*. – 1975. – Vol. 18. – P. 199.

е) Kuramoto E., Aono Y., Kitajima K., // *Scripta Metallurgica*. – 1979. – Vol. 13. – P. 1039

ж) Stein D. F., Low Jr. J. R., Seybolt A. U. // *Acta Metallurgica*. – 1966. – Vol. 14. – P.1183.

з) Spitzig W., Keh A. // *Materials Science English*. – 1973. – Vol. 12. – P.191.

Критические напряжения при различных температурах и содержаниях углерода



а) Cox J. J., Horne G. T., Mehl R. F. // *Transactions of the American Society for Metals*. – 1957. – Vol. 49. – P. 18.

б) Stein R. P., Brick R. M. // *Transactions of the American Society for Metals*. – 1954. – Vol. 46. – P. 1406.

в) Allen N. P., Hopkins B. E., McLennan J. E. // *Proceedings of Royal Scientific Society A*. – 1956. – Vol. 234. – P. 221.

г) Queyreau S., Monnet G., Devincere B. // *International Journal of Plasticity*. – 2009. – Vol. 25. – P. 361.

д) Stein D. F., Low Jr. J. R., Seybolt A. U. // *Acta Metallurgica*. – 1966. – Vol. 14. – P.1183.

Заключение



В работе для определения статических прочностных характеристик сталей использован молекулярно-динамический метод моделирования, основанный на крупномасштабном атомистическом моделировании релаксации сдвиговых напряжений в специально сконструированных МД образцах с внедренными дислокациями в различных системах скольжения.

Предлагаемый подход позволяет оценивать напряжение, при котором происходит остановка дислокаций, то есть оценивать напряжение Пайерлса и рассчитывать оценку квазистатического предела текучести.

В работе продемонстрировано применение данного метода расчёта предела текучести в рамках КМД моделирования к ферритно-мартенситным и перлитным сталям, подвергнутым радиационному облучению с выделением вторичных фаз (преципитатов). Рассматривались как модельные преципитаты когерентные с основной ОЦК матрицей полностью состоящие из легирующего элемента, так и преципитаты максимально приближенные по морфологии к реально наблюдаемым в экспериментах.

Продemonстрировано применение данного подхода для КМД расчёта предела текучести ферритных сталей с учетом реального содержания и распределения углерода в сплаве. Выполнено сравнение с экспериментальными данными по концентрационным и температурным зависимостям предела текучести.

Спасибо за внимание

Кичигин Роман Михайлович

научный сотрудник
отделения прикладной математики и теоретической физики
ФГУП «РФЯЦ–ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина»

20.05.2025

Дополнительные слайды





Молекулярное моделирование: программа LAMMPS

Визуализация: программа OVITO (PTM, DXA)

Используемые потенциалы:

Для системы FeNiCr: EAM, **G. Bonny, et al.** // *Model. Sim. Mater. Sci. Eng.*, – 2011. – Vol. 19. – P. 085008

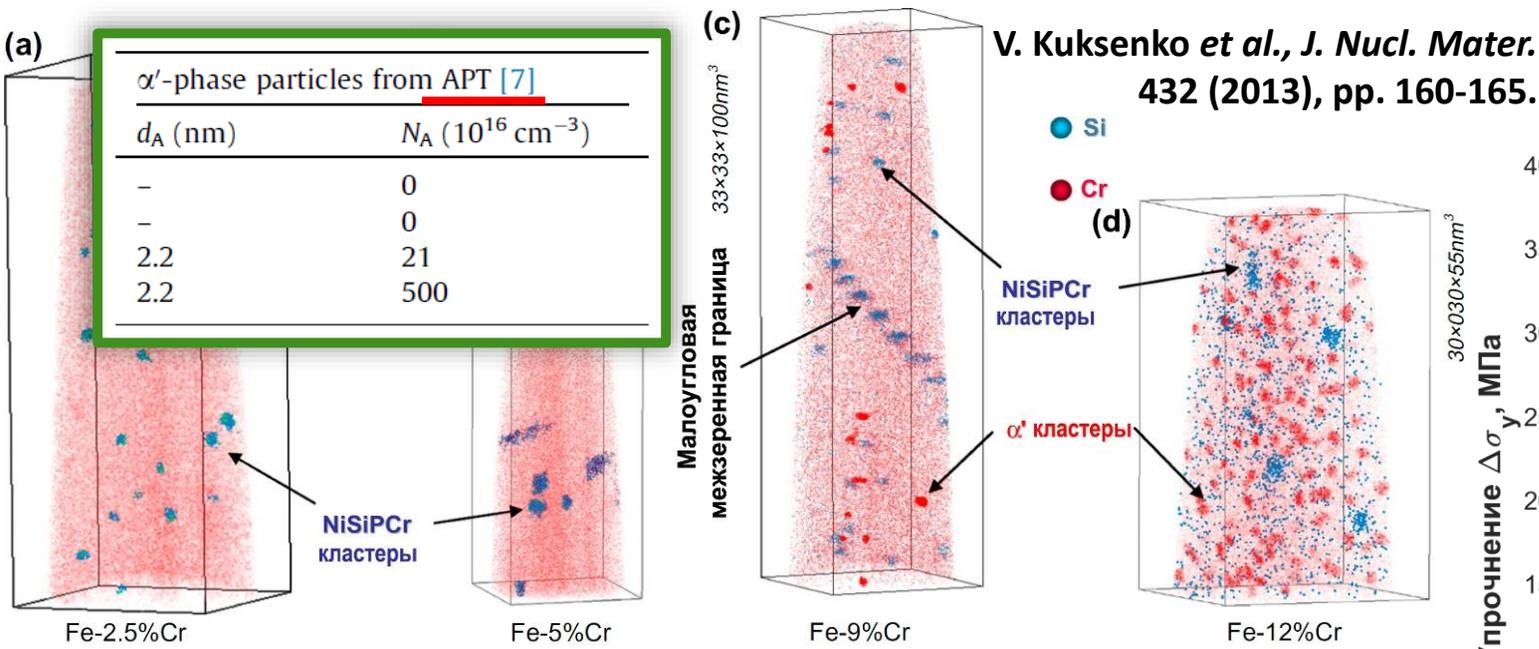
Для системы FeCu: EAM, **Pasianot R. C., Malerba L.** // *Journal of Nuclear Materials* – 2007. – Vol. 360. – P. 118

Для системы FeCr: EAM, **G. Bonny, et al.** // *Philosophical Magazine* – 2011. – Vol. 91. – P. 1724–1746

Для системы FeCCr: EAM, **G. Bonny, et al.** // *Computational Materials Science*. – 2022 –vol. 221 – P. 11533

В потенциалах FeCr и FeCCr описание межатомного взаимодействия Fe-Fe, Fe-Cr и Cr-Cr совпадают.

КМД моделирование упрочнения за счет дислокационных петель



Alloy	Fe	Cr	Si	P	Ni	C	V, N, O, S, Al, Ti
Fe-2.5%Cr	Bal.	2.55 ± 0.02	0.10 ± 0.01	0.019 ± 0.002	N.M. ^a	0.010 ± 0.001	N.M. ^a
Fe-5%Cr	Bal.	4.61 ± 0.02	0.059 ± 0.002	0.013 ± 0.001	0.034 ± 0.001	N.M. ^a	N.M. ^a
Fe-9%Cr	Bal.	9.16 ± 0.04	0.065 ± 0.003	0.013 ± 0.001	0.057 ± 0.003	N.M. ^a	N.M. ^a
Fe-12%Cr	Bal.	11.2 ± 0.04	0.18 ± 0.01	0.025 ± 0.002	0.07 ± 0.01	N.M. ^a	N.M. ^a

^a N.M.: за пределами чувствительности измерений.

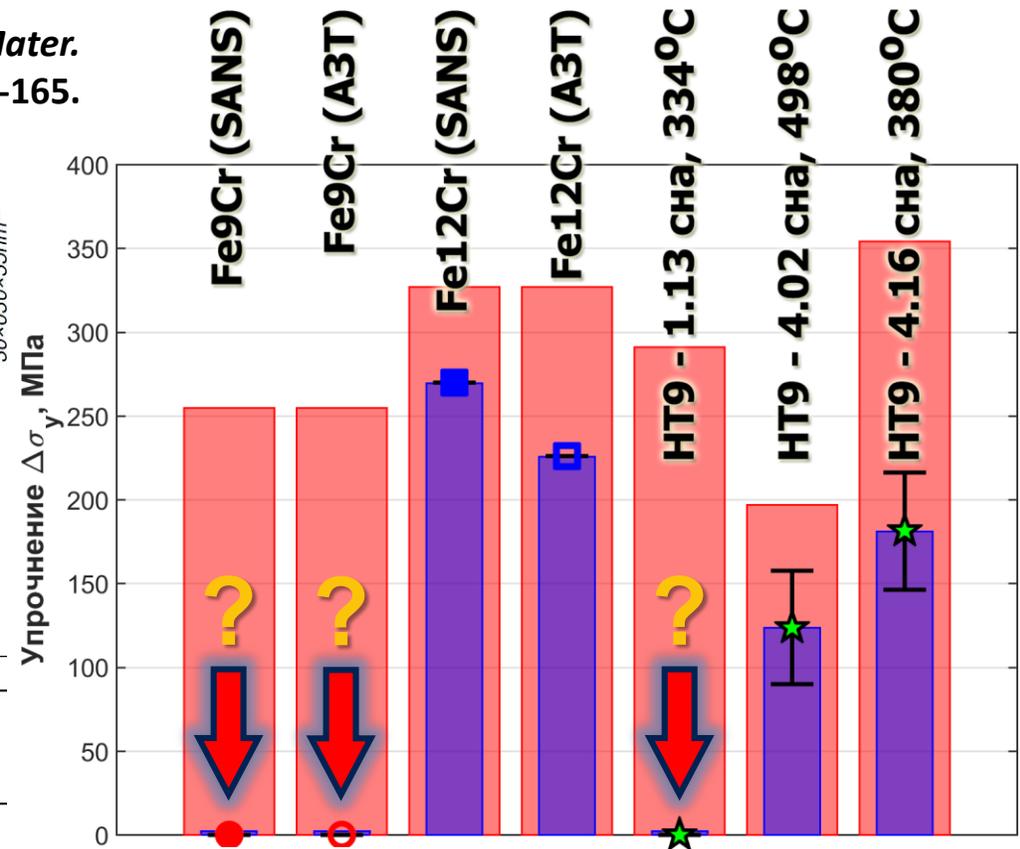


Table 3

Specification of the Fe-Cr model alloys investigated, reported values of yield stress increase and reported characteristics of the distribution of irradiation-induced nanoscale features (reference data set). The neutron exposure is 0.6 dpa in each case.

Alloy specification			α' -phase particles from SANS ^a		Dislocation loops from TEM ^b		NiSiPCr-rich clusters from APT ^c	
Cr (wt%)	μ (GPa)	$\Delta\sigma_y$ (MPa)	d_A (nm)	N_A (10^{16} cm^{-3})	d_L (nm)	N_L (10^{16} cm^{-3})	d_C (nm)	N_C (10^{16} cm^{-3})
2.4	83.0	277	-	0	13.2	0.44	3.6	13
4.6	81.5	283	-	0	8.2	0.52	4.4	13
8.4	84.4	255	2.0	25	6.5	0.13	3.3	24
11.6	85.2	327	2.0	990	7.4	0.18	3.2	11

F. Bergner et al.,
J. Nucl. Mater. 448
(2014) pp. 96–102