

PACS numbers: 61.72.Cc, 61.72.J-, 61.72.Qq, 61.80.Az, 62.20.D-, 62.20.F-, 82.60.Nh

## Дослідження впливу композиції та температури відпалу на мікроструктуру та механічні властивості сплавів Fe–Cr–Al

В. О. Харченко<sup>\*,\*\*</sup>, Д. О. Харченко<sup>\*</sup>, О. М. Щокотова<sup>\*</sup>, Б. О. Лисенко<sup>\*</sup>,  
А. В. Дворниченко<sup>\*\*</sup>

<sup>\*</sup>Інститут прикладної фізики НАН України,  
вул. Петропавлівська, 58,  
40000 Суми, Україна

<sup>\*\*</sup>Сумський Державний Університет,  
вул. Римського-Корсакова, 2,  
40007 Суми, Україна

Розроблено узагальнений модель фазового поля для моделювання динаміки мікроструктурних перетворень у сплавах Fe–Cr–Al на основі заліза з урахуванням динаміки рівноважних точкових дефектів. Досліджено динаміку процесів формування та росту збагачених на Хром преципітатів  $\alpha'$ -фази під час довготривалого відпалу твердого розчину. Вивчено вплив концентрації легувальних елементів і температури відпалу на динамічні та статистичні характеристики зростаючих преципітатів. Показано скейлінгову динаміку середнього розміру преципітатів, їхньої кількості та універсальність розподілу за розмірами. У рамках нелінійної теорії пружності досліджено перерозподіл пружних напружень під час механічного навантаження у вигляді деформації зсуву. Проаналізовано вплив композиції та температури відпалу на механічні властивості сплаву.

**Ключові слова:** метод фазового поля, числове моделювання, преципітати

Corresponding author: Vasyl' Olehovych Kharchenko  
E-mail: [vasiliy.kharchenko@gmail.com](mailto:vasiliy.kharchenko@gmail.com)

<sup>\*</sup>*Institute of Applied Physics, N.A.S. of Ukraine*  
58 Petropavlivska Str., UA-40000 Sumy, Ukraine

<sup>\*\*</sup>*Sumy State University,*  
2 Rimskogo-Korsakova Str., UA-40007 Sumy, Ukraine

Citation: V. O. Kharchenko, D. O. Kharchenko, O. M. Schokotova, B. O. Lysenko, and A. V. Dvornychenko, An Influence of the Composition and Annealing Temperature onto Microstructure and Mechanical Properties of Fe–Cr–Al Alloys, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **46**, No. 9: 861–879 (2024) (in Ukrainian). DOI: [10.15407/mfint.46.09.0861](https://doi.org/10.15407/mfint.46.09.0861)

вторинних фаз, статистичні характеристики.

A generalized model of the phase field is developed for modelling the dynamics of microstructural transformations in iron-based Fe–Cr–Al alloys by taking into account the dynamics of equilibrium point defects. Dynamics of the processes of formation and growth of chromium-enriched precipitates of  $\alpha'$ -phase during long-term annealing of solid solution is studied. An influence of both the concentration of alloying elements and the annealing temperature on the dynamic and statistical characteristics of the growing precipitates is analysed. The scaling dynamics of the average size of precipitates, their number as well as the universality of size distribution are shown. A redistribution of elastic stresses under mechanical loading in the form of shear deformation is investigated within the framework of the nonlinear theory of elasticity. The influence of both the composition and the annealing temperature on the mechanical properties of the alloy is analysed.

**Key words:** phase-field method, numerical modelling, precipitates of secondary phases, statistical properties.

*(Отримано 11 березня 2024 р.; остаточн. варіант — 6 травня 2024 р.)*

## 1. ВСТУП

Стопи Fe–Cr–Al на основі заліза успішно використовуються в якості оболонок паливних елементів у атомних реакторах як альтернативні до цирконійових стопів. Розробка цих стопів для використання у атомній енергетиці в якості аварійно-стійких оболонок палива почалась у 1960-х роках. Це зумовлено їхньою високою стійкістю щодо окиснення за високої температури [1, 2], корозійною та радіаційною стійкістю, особливостями хемічної взаємодії між паливом і його оболонкою, хорошими механічними властивостями упродовж тривалого терміну використання їх в екстремальних умовах (під час опромінення) (див. обговорення в роботі [3]).

Упродовж останніх трьох десятиліть спостерігається зростаючий інтерес до стопів Fe–Cr–Al, зокрема задля використання їх у сучасних реакторах, в тому числі високотемпературних. Під час дослідження впливу легувальних елементів, зокрема Хрому й Алюмінію, на фізико-механічні властивості стопів Fe–Cr–Al експериментально було показано, що збільшення концентрації Хрому в цих стопах може приводити до поліпшення їхньої стійкості щодо корозії під час експлуатації їх у високотемпературних водяних реакторах, а також до підвищення опору щодо високотемпературного парового окиснення [4]. У той же час було встановлено, що збільшення вмісту Хрому приводить до потенційної крихкості цих стопів за робочих температур в інтервалі 288–320°C за рахунок утворення збагаченої на Хром  $\alpha'$ -фази [5–7]. Водночас збільшення концентрації Алюмінію у стопах посилює їхній опір щодо високотемператур-

ного окиснення, проте може підвищити температуру крихко-пластичного переходу [8]. Було показано, що додавання більше 6 ат.% Алюмінію є ефективним задля пониження стабільності преципітатів фази, тоді як подальше додавання Алюмінію приводить до збільшення межі розчинності Хрому в матриці заліза [5, 6, 9].

Істотний прогрес у вивченні властивостей стопів Fe–Cr–Al з різним вмістом легувальних елементів для використання їх у ядерних програмах був досягнутий за допомогою використання методів числового моделювання на різних рівнях опису у рамках загальної схеми багатомасштабного моделювання. Тут з використанням розрахунків з перших принципів було встановлено енергетичні характеристики атомного перемішування [10–12]. Застосування методів молекулярної динаміки дало змогу вивчити залежність модулів пружності від вмісту легувальних елементів [13]. Використання кінетичного Монте-Карло-підходу уможливило проаналізувати стабільність мікроструктури стопів Fe–Cr–Al за довгострокової експлуатації [5]. З використанням класичної теорії фазового поля було проаналізовано динаміку випадіння преципітатів  $\alpha'$ -фази (див., наприклад, [14, 15]). У роботі [16] було розроблено стратегію сумісного використання теоретичних та експериментальних підходів для дослідження стопів Fe–Cr–Al. Цей підхід самоузгодженим чином враховує результати розрахунків з перших принципів, експериментальних досліджень і метод CALPHAD, який застосовується для одержання фазової діаграми термодинамічної рівноваги за допомогою Гіббсової енергії [17]. Він є потужним інструментом для вибору легувальних елементів з метою оптимізації складу матеріалів для конкретних застосувань.

Нещодавній успішний прогрес у розумінні мікроструктурних перетворень у стопах Fe–Cr–Al і кінетики випадіння нанорозмірної  $\alpha'$ -фази залишає деякі відкриті питання, пов'язані з детальним описом еволюції мікроструктури за умов тривалого відпалу за фіксованої температури та прогнозуванням механічних властивостей цих стопів з різним вмістом легувальних елементів.

Метою даної роботи є дослідження впливу концентрації легувальних елементів і температури на фізико-механічні властивості стопів Fe–Cr–Al у рамках числового моделювання термічного оброблення твердого розчину. Для цього нами представлено узагальнений модель фазового поля з використанням підходу CALPHAD, враховуючи ефекти локального перегрупування рівноважних точкових дефектів і взаємодії атомної підсистеми з підсистемою дефектів. Основними завданнями є вивчення впливу легувальних елементів на кінетику фазового розшарування за різних температур відпалу, статистичні властивості зростаючих виділень  $\alpha'$ -фази та механічні властивості матеріалів за механічних навантажень.

Роботу організовано таким чином. У розділі 2 наведено форма-

лізм, який використовується для моделювання методом фазового поля. У третьому розділі наведено результати числового моделювання. Тут окремо досліджується еволюція середнього розміру преципітатів, їхньої кількості, об'ємної частки та концентрації Хрому, а також проводиться аналіз механічних властивостей під час моделювання зовнішніх навантажень для стопів з різною концентрацією елементів за різних температур відпалу. Основні висновки роботи подано в останньому розділі.

## 2. УЗАГАЛЬНЕНИЙ МОДЕЛЬ ФАЗОВОГО ПОЛЯ

Для побудови узагальненого моделю фазового поля для систем Fe–Cr–Al з урахуванням динаміки рівноважних точкових дефектів уведемо в розгляд концентрації елементів Fe, Cr і Al, визначені як  $x_\mu = N_\mu/N$  з  $\mu = \{\text{Fe}, \text{Cr}, \text{Al}\}$ , де  $N_\mu$  — кількість атомів сорту  $\mu$ ,  $N$  — загальна кількість атомів, і використаємо закон збереження маси  $\sum_\mu x_\mu = 1$ . Концентрації точкових дефектів  $c_d$  з  $d = \{i, v\}$  (міжвузлових атомів ( $i$ ) і вакансій ( $v$ )) визначимо у такий самий спосіб. Ці концентрації далі будемо розглядати як неперервні поля, які еволюціонують у просторі  $\mathbf{r}$  і часі  $t$ :  $x_\mu = x_\mu(\mathbf{r}, t)$ ,  $c_d = c_d(\mathbf{r}, t)$ .

### 2.1. Функціонал Гіббсової енергії та рівняння еволюції

У загальному вигляді функціонал повної Гіббсової енергії для класу досліджуваних систем може бути поданий у такому вигляді:

$$G = \frac{1}{V_m} \int_V [G_{ch}(\{x_\mu\}, \{c_d\}) + G_v(\{\nabla x_\mu\}, \{\nabla c_d\})] d\mathbf{r}, \quad (1)$$

де доданок  $G_{ch}$  пов'язаний з хемічною Гіббсовою енергією, що залежить від концентрацій елементів стопу та точкових дефектів;  $G_v$  визначає градієнтну частину;  $V_m$  — молярний об'єм; інтегрування проводиться по всьому об'єму  $V$ .

Густину вільної енергії  $G_{ch}$  можна подати у вигляді суми двох доданків, які описують атомну та дефектну підсистеми наступним чином:  $G_{ch} = G_a + G_d$ . Молярна Гіббсова енергія атомної підсистеми  $G_a$  визначається як  $G_a = G_a^{ref} + G_a^{id} + G_a^{ex}$ . Тут  $G_a^{ref} = \sum_\mu G_\mu^0 x_\mu$  — Гіббсова енергія, яка визначається потенціалами  $G_\mu^0$  із використанням методу CALPHAD [17]. Доданок  $G_a^{id} = RT \sum_\mu x_\mu \ln x_\mu$  задає ентропійний внесок, пов'язаний з випадковим перемішуванням атомів, де  $R$  — універсальна газова стала,  $T$  — абсолютна температура. Скла-

дова  $G^{ex} = \sum_{\mu \neq \nu} x_{\mu} x_{\nu} L_{\mu, \nu}$  задає відхил від ідеальности та визначається залежними від температури коефіцієнтами взаємодії  $L_{\mu\nu} = L_{\mu\nu}(T)$ .

Гіббсову енергію  $G_d$  для підсистеми точкових дефектів  $d = \{i, v\}$  можна записати таким чином:  $G_d = \sum_d G_d^f + G_d^{id} + G_d^{int}$ . Тут  $G_d^f$  — енергія формування дефекту, яка визначається через енергії формування  $G_d^{f, \mu}$  дефектів у чистих матеріалах і середні концентрації атомів у стопі як  $G_d^f = \sum_{\mu} G_d^{f, \mu} \bar{x}_{\mu}$ , де  $\bar{x}_{\mu}$  відноситься до номінальної концентрації  $\mu$ . Відповідний ентропійний внесок має вигляд  $G_d^{id} = RTc_d \ln c_d$ . Енергії взаємодії між дефектами й атомами  $G_d^{int}$  визначаються у такий спосіб:  $G_d^{int} = c_d \sum_{\mu} x_{\mu} G_{d-\mu}^{int}$ , де для енергій взаємодії дефект–атом використовуємо визначення [18]

$$G_{d-\mu}^{int} = (G_{coh}^{\mu} + G_d^{f, \mu}) / Z ;$$

тут  $G_{coh}^{\mu}$  позначає відповідну енергію когезії,  $Z$  — координаційне число.

Комбінуючи всі наведені вище вирази, густину Гіббсової вільної енергії  $G_{ch}$  для стопу Fe–Cr–Al з урахуванням точкових дефектів представимо у такому вигляді:

$$\begin{aligned} G_{ch}(x_{Fe}, x_{Cr}, x_{Al}, c_v, c_i) = & G_{Fe}^0 x_{Fe} + G_{Cr}^0 x_{Cr} + G_{Al}^0 x_{Al} + \\ & + G_v^f c_v + G_i^f c_i + \\ & + RT[x_{Fe} \ln x_{Fe} + x_{Cr} \ln x_{Cr} + x_{Al} \ln x_{Al} + \\ & + c_v \ln c_v + c_i \ln c_i] + \\ & + x_{Fe} x_{Cr} L_{Fe, Cr} + x_{Fe} x_{Al} L_{Fe, Al} + \\ & + x_{Cr} x_{Al} L_{Cr, Al} + \\ & + c_v [x_{Fe} G_{v-Fe}^{int} + x_{Cr} G_{v-Cr}^{int} + x_{Al} G_{v-Al}^{int}] + \\ & + c_i [x_{Fe} G_{i-Fe}^{int} + x_{Cr} G_{i-Cr}^{int} + x_{Al} G_{i-Al}^{int}]. \end{aligned} \quad (2)$$

Градентна частина вільної енергії  $G_v$  має стандартний вигляд:  $G_v = \sum_{\mu} (k_{\mu} / 2)(\nabla x_{\mu})^2 + \sum_d (k_d / 2)(\nabla c_d)^2$ . Енергетичні константи  $\{k_{\mu}\}$  визначаються відповідно до Хіллардового підходу [19]. Будемо вважати, що  $k_{\mu} = k$ , де  $k = L_{Fe, Cr} a^2 / 6$ ,  $a = \sum_{\mu} a_{\mu} x_{\mu}$ ,  $a_{\mu}$  — параметер ґратниці для чистих металів. З метою уникнення негативного ґраденту енергії та забезпечення неупорядкованости системи для констант  $k_i$  і  $k_v$  застосуємо формалізм, розглянутий у роботах [20, 21], і

визначимо їх як  $k_d = k_v = k_i$ .

Рівняння еволюції полів концентрацій для системи зі збереженою динамікою записуються за допомогою введення Онсагерових коефіцієнтів у стандартний спосіб. Беручи до уваги закон збереження маси та визначаючи концентрацію Феруму як основного елементу:  $x_{\text{Fe}} = 1 - x_{\text{Cr}} - x_{\text{Al}}$ , динаміку всієї системи будемо визначати рівняннями типу Кана–Хіллєрда [19, 22]:

$$\begin{aligned}\partial_t x_{\text{Cr}} &= \nabla \cdot \left[ M_{\text{Cr,Cr}} \nabla \frac{\delta G}{\delta x_{\text{Cr}}} + M_{\text{Cr,Al}} \nabla \frac{\delta G}{\delta x_{\text{Al}}} \right], \\ \partial_t x_{\text{Al}} &= \nabla \cdot \left[ M_{\text{Al,Al}} \nabla \frac{\delta G}{\delta x_{\text{Al}}} + M_{\text{Cr,Al}} \nabla \frac{\delta G}{\delta x_{\text{Cr}}} \right], \\ \partial_t c_v &= \nabla \cdot L_v \nabla \frac{\delta G}{\delta c_v}, \\ \partial_t c_i &= \nabla \cdot L_i \nabla \frac{\delta G}{\delta c_i}.\end{aligned}\tag{3}$$

Коефіцієнти мобільності  $M_{\text{Cr,Cr}}$ ,  $M_{\text{Al,Al}}$ ,  $M_{\text{Cr,Al}}$  мають такий вигляд [15, 23–25]:

$$\begin{aligned}M_{\text{Cr,Cr}} &= x_{\text{Cr}} [(1 - x_{\text{Cr}})^2 M_{\text{Cr}} + x_{\text{Cr}} x_{\text{Al}} M_{\text{Al}} + x_{\text{Cr}} x_{\text{Fe}} M_{\text{Fe}}], \\ M_{\text{Al,Al}} &= x_{\text{Al}} [(1 - x_{\text{Al}})^2 M_{\text{Al}} + x_{\text{Al}} x_{\text{Fe}} M_{\text{Fe}} + x_{\text{Al}} x_{\text{Cr}} M_{\text{Cr}}], \\ M_{\text{Cr,Al}} &= x_{\text{Cr}} x_{\text{Al}} [x_{\text{Fe}} M_{\text{Fe}} - (1 - x_{\text{Cr}}) M_{\text{Cr}} - (1 - x_{\text{Al}}) M_{\text{Al}}],\end{aligned}\tag{4}$$

де  $M_{\text{Fe}}$ ,  $M_{\text{Al}}$  і  $M_{\text{Cr}}$  — відповідні рухливості для чистих елементів, які визначаються стандартним чином:  $M_{\mu} = D_{\mu}/(RT)$ ,  $D_{\mu}$  — відповідний коефіцієнт дифузії атомів. Рухливість для вакансій і міжвузлових атомів вибираємо стандартним чином:  $L_d = D_d c_d/(RT)$ , де  $D_d$  — відповідний коефіцієнт дифузії точкових дефектів. Система рівнянь (3) з концентраційнозалежними рухливостями (4) є основою для дослідження локального перерозподілу концентрацій елементів стопу та дослідження статистичних властивостей преципітатів  $\alpha'$ -фази за термічного оброблення.

## 2.2. Модель динаміки пружних полів під час навантажень

Для дослідження еволюції пружних полів у відпаленому стопі Fe–Cr–Al за наявності зовнішнього механічного навантаження використовуємо підхід, обговорений у роботах [26–29]. У рамках цього підходу до Гіббсової вільної енергії (1) вводиться пружна складова  $G_{el}(x_{\mu}, u)$ , яку зумовлено невідповідністю параметрів ґратниці згід-

но з Веґардовим законом;  $\mathbf{u} = (u_x, u_y)$  — вектор пружних зміщень, який визначає компоненти пружної деформації:  $e_1 = \partial_x u_x + \partial_y u_y$ ,  $e_2 = \partial_x u_x - \partial_y u_y$ ,  $e_3 = \partial_x u_y + \partial_y u_x$ . Густина пружної енергії

$$G_{el} = \frac{1}{2} K e_1^2 + \Phi(e_2, e_3) + \alpha e_1 x_\mu \quad (5)$$

визначається за допомогою пружної енергії дилатації ( $K$  — об'ємний модуль) і пружної енергії зсуву

$$\Phi(e_2, e_3) = \frac{\nu}{2\pi^2} [1 - \cos \pi(e_2 + e_3) \cos \pi(e_2 - e_3)], \quad (6)$$

де  $\nu$  — модуль зсуву. У випадку малих деформацій ( $|e_{2,3}| \ll 1$ ) згідно з лінійною теорією пружності густина пружної енергії  $G_{el}$  набуває стандартного вигляду:  $G_{el} = [K e_1^2 + \nu_0 (e_2^2 + e_3^2)] / 2$ , де  $\nu_0$  визначається через звичайні модулі пружності  $C_{ii}$  у ізотропному випадку [30]. Останній доданок у рівнянні (5) представляє зв'язок між полем деформації та полем концентрації з параметром  $\alpha > 0$ . У загальному випадку можна вважати, що пружні модулі  $K$  та  $\nu$  залежать від локальної концентрації речовини:  $K = \sum K_\mu x_\mu$ ,  $\nu = \sum \nu_\mu x_\mu$  і визначені через пружні модулі  $K_\mu$ ,  $\nu_\mu$  для чистих матеріалів.

Еволюція вектора пружних зміщень  $\mathbf{u}$  визначається з рівняння швидкості пружного поля  $\mathbf{v} = \partial \mathbf{u} / \partial t$  таким чином [30]:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = \eta_0 \nabla^2 \mathbf{v} + \nabla \cdot \bar{\sigma}, \quad (7)$$

де  $\rho$  — густина,  $\eta_0$  — зсувна в'язкість. Тензор пружних напружень задовольняє умові  $\nabla \cdot \bar{\sigma} = -\delta G / \delta \mathbf{u}$ .

### 2.3. Умови моделювання й обмеження

Для чисельного дослідження процесу фазового розшарування під час відпалу за вихідну мікроструктуру відповідного стопу візьмемо твердий розчин з рівномірно розподіленими полями концентрації всіх компонентів, включаючи точкові дефекти. В якості початкових конфігурацій ми використовуємо:  $\langle x_\mu(0) \rangle = \bar{x}_\mu$ ,  $\langle c_d(0) \rangle = c_d^{eq}$ ;  $\langle (x_\mu(0) - \bar{x}_\mu)^2 \rangle = 10^{-3} \bar{x}_\mu$ ,  $\langle (c_d(0) - c_d^{eq})^2 \rangle = 10^{-3} c_d^{eq}$ , де  $c_d^{eq}$  — рівноважна концентрація відповідних точкових дефектів. Процедуру чисельного моделювання реалізовано на квадратній ґратниці  $L \times L$  лінійного розміру  $L = N \Delta x$  з  $N = 128$  вузлами в кожному напрямку та ефектив-

ним параметром розрахункової ґратниці  $\Delta x = 1$  із використанням спектрального Фур'є-методу [31–34] з періодичними крайовими умовами. Для зручності проводимо знерозмірнення системи рівнянь (4) шляхом уведення безрозмірного часу  $t' = t\ell^2 / D_{Al}$  та безрозмірної віддалі  $\mathbf{r}' = \mathbf{r}/\ell$ ,  $\ell = a$ . Інтегрування рівнянь (4) за часом  $t'$  проводиться з кроком  $\Delta t' = 10^{-3}$ .

Під час моделювання механічних навантажень будемо вимірювати час в одиницях  $\tau = (\rho / v_{Cr})^{1/2} a \frac{\pi}{6}$ , де  $\tau$  — мікроскопічний час порядку  $10^{-12}$  с із поперечною швидкістю звуку  $(v_{Cr}/\rho)^{1/2}$ . Відповідно до роботи [27], покладемо  $\eta_0' = \eta_0/v_{Cr} = 1$  і використаємо перенормовані пружні зміщення  $\mathbf{u}' = a^{-1}\mathbf{u}$  та швидкість  $\mathbf{v}' = a^{-1}\tau\mathbf{v}$ . Тоді компоненти напруження  $\nu$  вимірюються в одиницях  $v_{Cr}$ . Для безрозмірного параметра зв'язку покладемо  $\alpha/v_{Cr} = 0,5$ . Відпалені стопи Fe–Cr–Al будемо піддавати механічним навантаженням у вигляді деформації зсуву  $\gamma = \dot{\gamma}t$  з постійною швидкістю, виміряною в одиницях  $\tau^{-1}$ . У якості крайових умов для вектора пружних зміщень  $\mathbf{u}$  оберемо  $u_x = u_y = 0$  знизу й  $u_x = \gamma N$  і  $u_y = 0$  зверху з періодичними умовами з боків. Початкові умови оберемо такими:  $\mathbf{u} = \mathbf{v} = \mathbf{0}$ .

Ми розглянемо чотири конфігурації твердого розчину Fe–Cr–Al, які будемо піддавати термічному обробленню за різних температур з метою дослідження динаміки утворення та зростання  $\alpha'$ -фази й аналізу впливу легувальних елементів і температури відпалу на основні статистичні властивості мікроструктури стопу та механічні властивості за зовнішніх навантажень.

Під час проведення числового моделювання будемо використовувати низку термодинамічних і пружних констант, наведених у табл. 1.

ТАБЛИЦЯ 1. Константи та параметри, які використано у моделюванні.

TABLE 1. Material parameters used in simulations.

Параметер	Розмірність	Значення	Посилання
$G_{Fe}^0$	Дж/моль	$1225,7 + 123,1T - 23,51T\ln(T)$ $-0,439752 \times 10^{-2}T^2$ $-0,589269 \times 10^{-7}T^3 + 77358,5/T$	[17]
$G_{Cr}^0$	Дж/моль	$-8856,9 + 157,48 - 26,9T\ln(T)$ $0,189435 \times 10^{-2}T^2$ $-0,147721 \times 10^{-5}T^3 + 139250/T$	[17]



Продовження ТАБЛИЦІ 1.

Continuation of TABLE 1.

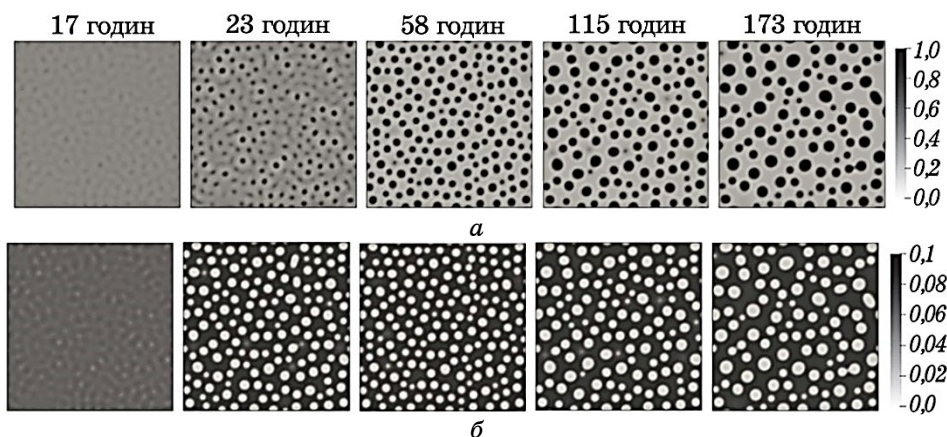
Параметер	Розмірність	Значення	Посилання
$G_{Al}^0$	Дж/моль	$-1193,24 + 218,23T$ $-38,584T \ln(T) + 0,0185T^2$ $-0,576 \times 10^{-5}T^3 + 74092/T$	[17]
$L_{Fe,Cr}$	Дж/моль	$20500 - 9,68T$	[17]
$L_{Cr,Al}$	Дж/моль	$-54900 + 10T$	[17]
$L_{Fe,Al}$	Дж/моль	$-122452,9 + 31,6455T$	[17]
$k_d$	Дж/м	$6,91 \times 10^{-9}$	[21]
$E_{i,Fe}^f$	еВ	3,52	[35]
$E_{v,Fe}^f$	еВ	1,4	[36]
$G_{Fe}^{coh}$	Дж/моль	413000	[37]
$G_{Cr}^{coh}$	Дж/моль	395000	[37]
$E_{i,Cr}^f$	еВ	3,356	[38]
$E_{v,Cr}^f$	еВ	1,36	[39]
$D_{Fe}$	м <sup>2</sup> /с	$2,8 \times 10^{-4} \exp(-251000/(RT))$	[40]
$D_{Cr}$	м <sup>2</sup> /с	$3,7 \times 10^{-3} \exp(-267000/(RT))$	[40]
$D_{Al}$	м <sup>2</sup> /с	$5,2 \times 10^{-4} \exp(-246000/(RT))$	[40]
$D_v$	м <sup>2</sup> /с	$3,84 \times 10^{-4} \exp(-300000/(RT))$	[21]
$D_i$	м <sup>2</sup> /с	$2,05 \times 10^{-4} \exp(-280000/(RT))$	[21]
$K_{Fe}, K_{Cr}, K_{Al}$	ГПа	170, 160, 76	
$v_{Fe}, v_{Cr}, v_{Al}$	ГПа	82, 115, 26	
$\rho_{Fe}, \rho_{Cr}, \rho_{Al}$	г/см <sup>3</sup>	7,87, 7,15, 2,70	

### 3. РЕЗУЛЬТАТИ ЧИСЛОВОГО МОДЕЛЮВАННЯ

#### 3.1. Випадіння преципітатів під час відпалювання твердого розчину

У якості тестового зразка розглянемо твердий розчин Fe–30% Cr–5% Al, який піддаємо термічному обробленню за температури  $T = 710$  К. Типовий сценарій процесу фазового розшарування показано на рис. 1. Тут концентрації обох елементів нанесено відтінками сірого кольору від білого (нуля) до чорного (максимальне значення концентрації відповідного елемента: 0,1 для Алюмінію та 1,0 для Хрому).

З рисунка видно, що з плином часу з гомогенного розподілу (тве-



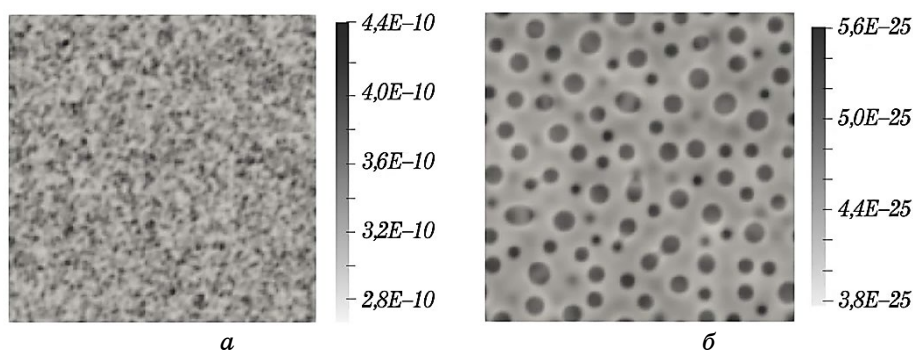
**Рис. 1.** Ілюстрації поля концентрації  $\text{Cr}(\mathbf{r})$  (а) і  $\text{Al}(\mathbf{r})$  (б) за відпалювання твердого розчину Fe–30% Cr–5% Al за температури  $T = 710$  К.

**Fig. 1.** Snapshots of the concentration field of  $\text{Cr}(\mathbf{r})$  (а) and  $\text{Al}(\mathbf{r})$  (б) during annealing of a solid solution Fe–30% Cr–5% Al at a temperature  $T = 710$  К.

рдого розчину) починають виділятися збагачені та збіднені на концентрацію домішок області. У результаті вже після 23 годин відпалювання виділяються преципітати  $\alpha'$ -фази, збагачені на концентрацію Хрому (чорні області на рис. 1, а). Водночас Алюміній рівномірно розподіляється у матриці (поза преципітатами). Під час цієї стадії нуклеації (до 58 годин) всі утворені преципітати характеризуються майже однаковими розмірами. За подальшого відпалювання відбувається перехід до стадії визрівання, коли утворені преципітати починають взаємодіяти один з одним. Ці ефекти приводять до того, що загальна кількість преципітатів починає зменшуватися за рахунок того, що малі виділення (з розміром, меншим за критичний) розчиняються. Водночас великі преципітати забирають матеріял з матриці та продовжують збільшуватися у розмірах за сценарієм Оствальдового дозрівання.

Знімки просторового розподілу концентрацій вакансій і міжвузлових атомів після відпалу твердого розчину протягом 230 годин показано на рис. 2. Можна побачити, що вакансії квазіоднорідно розподілені по всьому стопу, тоді як міжвузлові атоми здебільшого зосереджені у невеликих преципітатах й у великих поблизу межі поділу фаз. У той же час міжвузлові атоми не кластеризуються поблизу межі поділу фаз у матричній фазі.

Далі проаналізуємо вплив легувальних елементів і температури відпалу на динаміку випадіння преципітатів хрому та їхні статистичні характеристики. Для цього ми розглядаємо шість різних систем з характеристиками, наведеними в табл. 2.



**Рис. 2.** Ілюстрації просторового розподілу полів концентрацій вакансій (*a*) і міжвузлових атомів (*б*) у відпаленому стопі Fe–30% Cr–5% Al за температури  $T = 710$  K упродовж  $t = 230$  годин.

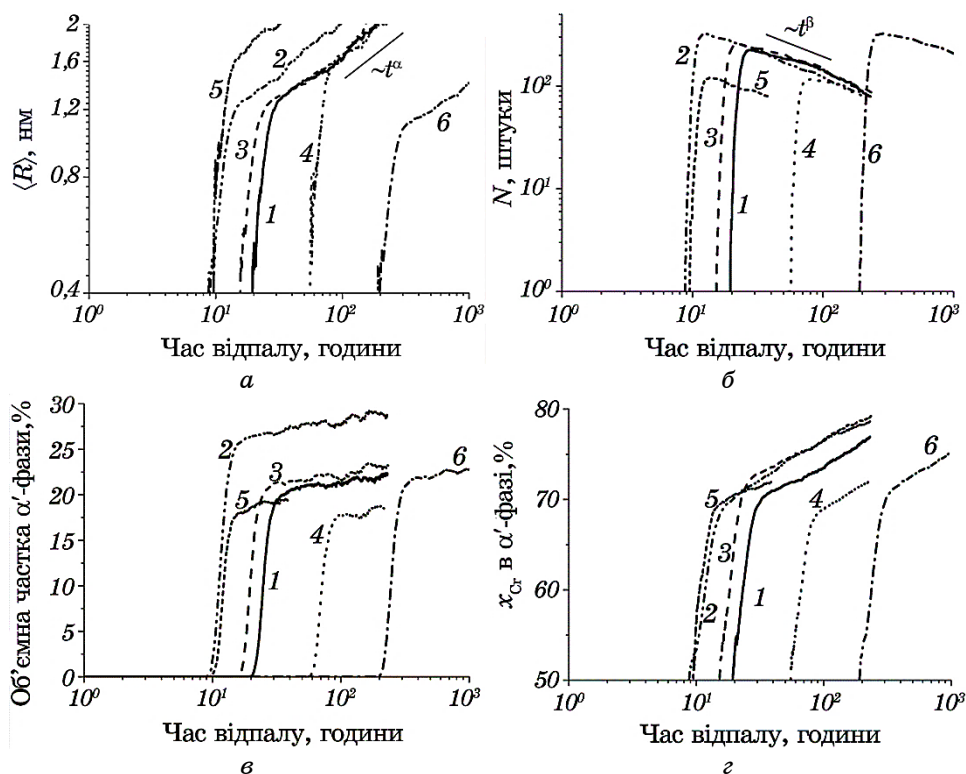
**Fig. 2.** Snapshots of the spatial distribution of the concentration fields of vacancies (*a*) and interstitial atoms (*b*) in an annealed Fe–30% Cr–5% Al alloy at a temperature  $T = 710$  K during  $t = 230$  hours.

**ТАБЛИЦЯ 2.** Концентрація легувальних елементів, температура та загальний час відпалу досліджуваних систем.

**TABLE 2.** Content of alloying elements, annealing temperature, and total annealing time of considered systems.

Номер системи	Концентрація Хрому, %	Концентрація Алюмінію, %	Температура відпалу, K	Загальний час відпалу, години
1	30	5	710	230
2	35	5	710	230
3	30	7	710	230
4	30	2	710	230
5	30	5	750	39
6	30	5	670	4288

Результати стосовно еволюції середнього розміру  $\langle R \rangle$  преципітатів  $\alpha'$ -фази, їхньої кількості  $N$ , об'ємної частки преципітатів і концентрації Хрому в  $\alpha'$ -фазі під час відпалювання наведено на рис. 3. Номер кривої на рис. 3 відповідає номеру системи в табл. 2. Слід зазначити, що в рамках використаного «скалювання» безрозмірного часу фізичний час (в годинах) залежить як від концентрації легувальних елементів через визначення ефективного параметра ґратниці  $\ell$ , так і від температури осадження, яка визначає коефіцієнти дифузії. Тому проведення моделювання до фіксованого безрозмірного



**Рис. 3.** Еволюція (а) середнього розміру  $\langle R \rangle$  преципітатів  $\alpha'$ -фази, (б) їхньої кількості  $N$ , (в) об'ємної частки преципітатів і (г) концентрації Хрому в  $\alpha'$ -фазі під час відпалювання твердих розчинів з різною концентрацією за різних температур (номери визначають тип системи з табл. 2).

**Fig. 3.** Evolution of (a) average size  $\langle R \rangle$  of  $\alpha'$ -phase precipitates, (б) their number  $N$ , (в) volume fraction of precipitates, and (г) chromium concentration within the  $\alpha'$ -phase at annealing of solid solutions of different concentrations at different temperatures (numbers define the system type in Table 2).

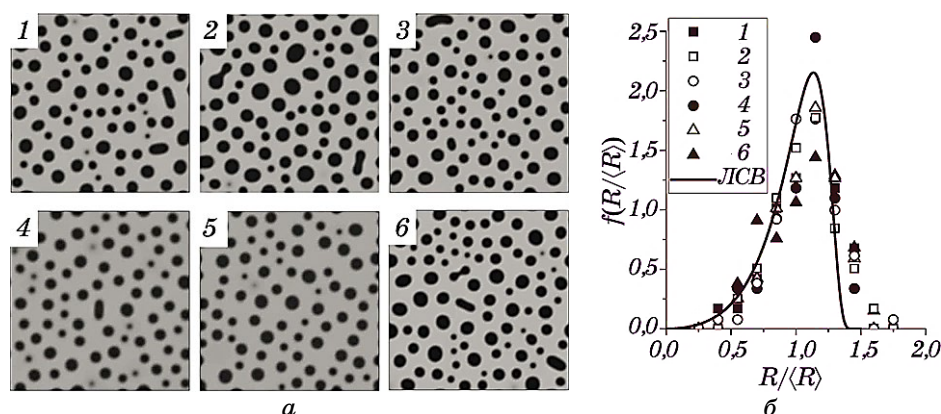
часу для всіх шістьох систем з табл. 2 уможливило подати результати для різного фізичного часу відпалювання.

У якості критерію формування збагачених на Хром преципітатів  $\alpha'$ -фази будемо вважати те, що локальна концентрація Хрому  $x_{Cr}(\mathbf{r})$  перевищує критичне значення 0,5. Спершу розглянемо еволюцію середнього лінійного розміру преципітатів  $\langle R \rangle$  та їхньої кількості  $N$ , поданих на рис. 3, а, б відповідно. Преципітати починають формуватися після певного інкубаційного часу. З порівняння кривих випливає, що збільшення як концентрації легувальних елементів, так і температури відпалу пришвидшує процеси формування преципітатів. На етапах формування їхній розмір і кількість стрімко зрос-

тають з часом відпалювання. На стадії визрівання процеси взаємочину преципітатів уповільнюють динаміку зростання середнього розміру; їхня кількість зменшується з часом. Така динаміка середнього розміру та кількості виділень нової фази є характерною для сценарію Оствальдового визрівання. На цій стадії, незалежно від концентрації легувальних елементів і температури відпалу, реалізуються скейлінгові закони  $\langle R(t) \rangle \propto t^\alpha$  та  $N(t) \propto t^\beta$  з показниками  $\alpha \cong 1/3$ ,  $\beta \cong -1$ , що є характерними для теорії Ліфшиця–Сльозова–Вагнера [41, 42]. Тут збільшення концентрації Хрому приводить до збільшення розмірів преципітатів за тих самих часів відпалювання (пор. криві 1 і 2 на рис. 3, а), тоді як варіація концентрації Алюмінію не впливає істотно на розмір виділень (пор. криві 1 і 3 та 4 на рис. 3, а). Разом з тим концентрація обох легувальних елементів істотно не впливає на кількість преципітатів за довгострокового відпалу (пор. криві 1 і 2, 3, 4 на рис. 3, б). Підвищення температури відпалу приводить до формування меншої кількості преципітатів із більшим розміром (пор. криві 1 і 5, 6 на рис. 3, а, б). Дані, одержані для середнього розміру преципітатів та їхньої кількості («перескальованої» в одиницях  $\text{см}^{-3}$ ) для досліджуваного стопу добре співвідносяться з експериментальними та числовими даними [14, 15, 43, 44].

На рисунку 3, в, г наведено еволюцію об'ємної частки преципітатів  $\alpha'$ -фази та концентрації Хрому в них відповідно. Слід зазначити, що збільшення концентрації легувальних елементів приводить до збільшення обох цих характеристик (пор. криві 1 і 2 та 3 і 4 на рис. 3, в, г). Підвищення температури відпалу приводить до такого ж ефекту (пор. криві 1, 5, 6 на рис. 3, в, г). Одержані результати щодо впливу легувальних елементів і температури відпалу добре узгоджуються з результатами попередніх досліджень [14, 15]. Упродовж довготривалого осадження близько 70–80% Хрому зосереджено в  $\alpha'$ -фазі, тоді як об'ємна частка преципітатів становить близько 20–25% залежно від номінального складу та температури. Одержані дані добре співвідносяться з експериментальними спостереженнями та результатами числового моделювання [14, 15, 44].

Наприкінці розділу проаналізуємо розподіл преципітатів за розмірами для всіх шістьох систем з табл. 2 за довгострокового відпалу відповідного твердого розчину за обраної температури. Ілюстрації просторового розподілу преципітатів  $\alpha'$ -фази для всіх досліджуваних систем наприкінці часу відпалу на стадії визрівання (з табл. 2) наведено на рис. 4, а. Розподіли преципітатів за розмірами відносно середнього розміру подано на рис. 4, б відповідними маркерами. Видно, що, незалежно від концентрації легувальних елементів і температури відпалу, розподіл залишається універсальним. Суцільною кривою наведено розподіл Ліфшиця–Сльозова–Вагнера [41, 42], який добре описує одержані числові дані. Отже, додаткове введення



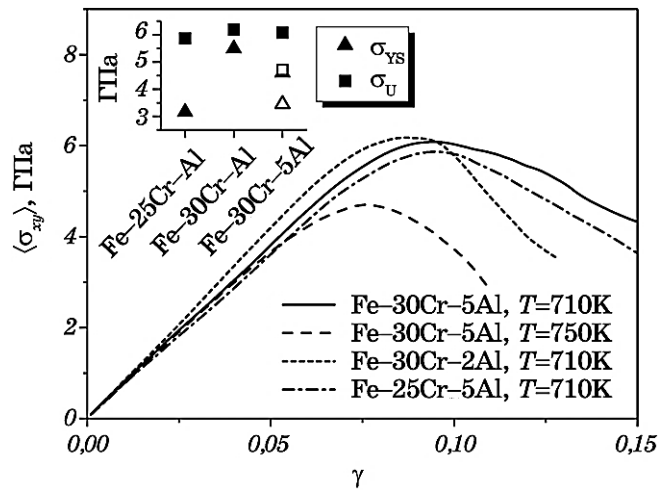
**Рис. 4.** Ілюстрації поля концентрації  $\text{Cr}(\mathbf{r})$  у відтінках сірого кольору від білого (0.0) до чорного (1.0) у відпалених стопах з різною концентрацією за різних температур (номери визначають тип системи з табл. 2).

**Fig. 4.** Snapshots of the concentration field of  $\text{Cr}(\mathbf{r})$  in grey scale from white colour (0.0) to black one (1.0) in annealed alloys of different concentrations at different temperatures (numbers define the system type in Table 2).

Хрому або Алюмінію не змінює універсальності розподілу виділень за розмірами на стадії визрівання за різних температур.

### 3.2. Деформація та механічні властивості

Для оцінки впливу температури, вмісту Хрому й Алюмінію на механічні властивості стопів Fe–Cr–Al було виконано моделювання зовнішнього механічного навантаження у вигляді зсуву за сталої швидкості у  $10^9 \text{ s}^{-1}$ . Деформаційні криві зсуву для розглядуваних зразків наведено на рис. 5. Тут подано залежності усереднених значень зсувних напружень  $\langle \sigma_{xy} \rangle$  від прикладеної деформації  $\gamma$ . З одержаних деформаційних кривих було визначено межі плинності  $\sigma_{YS}$  та міцності  $\sigma_U$ , значення яких відображено на вставці до рисунку. Межа плинності визначалась як 0,2% пластичної деформації; межа міцності відповідає максимальним значенням напружень до руйнування зразка. Аналіза одержаних результатів показує, що механічні властивості набувають нижчих значень за вищої температури, що узгоджується із загальними тенденціями експериментальних досліджень і результатів моделювання (див., наприклад, роботи [45–47]). Також для розглядуваних зразків встановлено зростання меж плинності та міцності з підвищенням вмісту Хрому та пониженням вмісту Алюмінію. Одержані результати узгоджуються з даними експериментальних і теоретичних досліджень [46, 48–52]. Слід відмітити, що істотний вплив на механічні властивості мають



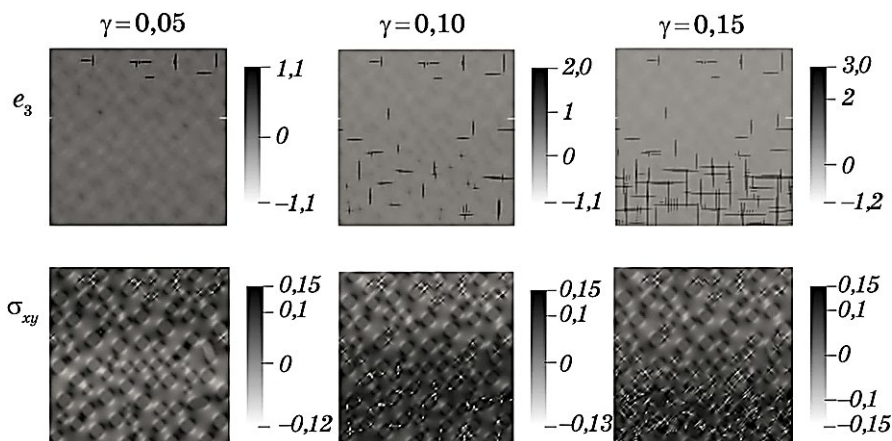
**Рис. 5.** Діаграми зсуву для зразків стопу Fe–30% Cr–5% Al. Відповідні значення меж плинності та міцності наведено на вставці. Заповнені маркери відповідають зразкам за температури у 710 К, пусті маркери — за температури у 750 К.

**Fig. 5.** Stress–strain curves for shear deformation of Fe–30% Cr–5% Al alloy samples. The corresponding values of the yield and ultimate strength are shown within the inset. Closed markers correspond to temperature of 710 K, open markers—of 750 K.

також умови проведення експерименту, розмір зразків, середній розмір зерна, швидкість деформації й інші чинники. Детальна аналіза залежностей на рис. 5 уможливорює визначити, що пониження температури від 750 К до 710 К приводить до поліпшення механічних властивостей стопу. Зокрема, відбувається зростання межі плинності на 33,5% і зростання межі міцності на 42,4%. Водночас підвищення вмісту Хрому з 25% до 30% (із 5% Алюмінію) веде до зростання меж плинності та міцності на 45,8% і 3,5% відповідно. З підвищенням вмісту Алюмінію від 2% до 5% (із 30% Хрому), навпаки, спостерігається пониження значень меж плинності та міцності на 19,1% та 1,8% відповідно.

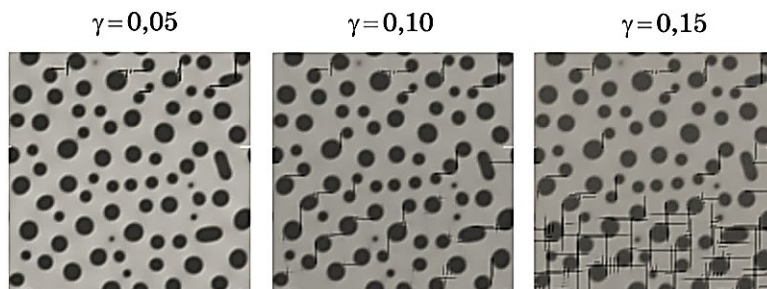
На рисунку 6 подано еволюцію пружних полів у стопі Fe–30% Cr–5% Al за температури  $T = 710$  К. Наведені знімки відповідають точкам  $\gamma = 0,05, 0,1, 0,15$  на деформаційній кривій (суцільна крива на рис. 5). Знімки розподілів пружних деформацій  $\epsilon_3$  демонструють формування ліній проковзування у зразку в процесі пластичної деформації. Очевидно, що зі збільшенням значення прикладеної деформації  $\gamma$  зростає кількість ліній проковзування.

Слід відмітити, що у місцях розташування ліній проковзування деформації набувають своїх максимальних значень, які, відповід-



**Рис. 6.** Розподіл полів пружних деформацій  $e_3$  та зсувних напружень  $\sigma_{xy}$  у процесі зсувної деформації стопу Fe–30% Cr–5% Al.

**Fig. 6.** Distributions of fields of elastic deformations  $e_3$  and shear stresses  $\sigma_{xy}$  during shear loading of Fe–30% Cr–5% Al alloy.



**Рис. 7.** Розподіл ліній проковзування у стопі Fe–30% Cr–5% Al ( $T = 710$  K) за зсувної деформації.

**Fig. 7.** Distribution of slips in the alloy Fe–30% Cr–5% Al ( $T = 710$  K) under shear deformation.

но, підвищуються зі зростанням  $\gamma$ . Розподіли  $\sigma_{xy}$  на рис. 6 ілюструють еволюцію поля зсувних напружень, середні значення яких демонструються відповідною діаграмою зсуву (суцільна крива на рис. 5). Значення компоненти напружень  $\sigma_{xy}$  подано в одиницях  $\nu_{Cr}$ . Слід відмітити, що напруження набувають максимальних за модулем значень у місцях розташування дислокаційних ядер, де мають місце найбільші зміщення атомів. На місцезнаходження дислокаційних ядер вказують крайові точки ліній проковзування.

Сумісний розподіл ліній проковзування та преципітатів у зразку стопу наведено на рис. 7. Очевидно, що здебільшого лінії проковзу-



вання розташовуються у матричній фазі, а їхні крайові точки локалізуються на міжфазних межах.

#### 4. ВИСНОВКИ

Розроблено модель фазового поля для дослідження динаміки мікроструктурних перетворень і еволюції дефектної структури під час термічного оброблення систем Fe–Cr–Al. Досліджено кінетичні та статистичні властивості еволюції мікроструктури та дефектної структури у стопах з різним вмістом легувальних елементів і за різних температур відпалу. Проаналізовано вплив легувальних елементів і температури відпалу на механічні властивості стопів.

У рамках процедури числового моделювання досліджено динаміку формування та росту преципітатів збагаченої на Хром  $\alpha'$ -фази, еволюцію їхньої кількості, середнього розміру, об'ємної частки преципітатів і концентрації Хрому у них. Проаналізовано просторове упорядкування точкових дефектів за відпалу. Показано, що на стадії визрівання середній розмір преципітатів та їхня кількість еволюціонують за степеневим законом із показниками, що відповідають теорії Ліфшиця–Сльозова–Вагнера. Виявлено, що збільшення концентрації Хрому й Алюмінію ініціює процеси фазового розшарування, зменшуючи інкубаційний час для розвитку концентраційних хвиль, та приводить до збільшення лінійного розміру преципітатів і їхньої об'ємної частки. Збільшення Хрому у стопі приводить до істотного збільшення його концентрації в  $\alpha'$ -фазі. Встановлено, що відпал за підвищених температур приводить до зменшення кількості преципітатів і збільшення їхнього розміру. Виявлено, розподіл преципітатів хрому за розмірами залишається універсальним зі зміною концентрації легувальних елементів і температури відпалу та задовольняє розподілу Ліфшиця–Сльозова–Вагнера. Дослідженням кінетики рівноважних точкових дефектів показано, що під час відпалу твердого розчину вакансії здебільшого рівномірно розподіляються в об'ємі, а міжвузлові атоми здебільшого локалізовані в малих преципітатах  $\alpha'$ -фази та всередині великих виділень поблизу межі поділу фаз з великою кривиною. Показано, що пониження температури, підвищення концентрації Хрому та пониження концентрації Алюмінію приводять до зростання опору стопу Fe–Cr–Al щодо пластичної деформації та зміцнення матеріалу.

Одержані результати можуть бути використані для прогнозування зміни властивостей матеріалів за різного вмісту легувальних елементів і будуть корисними як базові дані для оптимізації мікроструктури оболонок тепловиділювальних елементів.

Роботу виконано за підтримки Міністерства освіти і науки України (проект № 0124U000551).

## ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА—REFERENCES

1. E. A. Gulbransen and K. F. Andrew, *J. Electrochem. Soc.*, **106**: 294 (1959).
2. C. Wukusick and J. Collins, *Mater. Res. Std.*, **4**: 6376 (1964).
3. Y. Yamamoto, B. Pint, K. Terrani, K. Field, Y. Yang, and L. Snead, *J. Nucl. Mater.*, **467**: 703 (2015).
4. F. Stott, G. Wood, and J. Stringer, *Oxid. Met.*, **44**: 113 (1995).
5. J. Ejenstam, M. Thuvander, P. Olsson, F. Rave, and P. Szakalos, *J. Nucl. Mater.*, **457**: 291 (2015).
6. S. Kobayashi and T. Takasugi, *Scr. Mater.*, **63**: 1104 (2010).
7. M. Mathon, Y. De Carlan, G. Geoffroy, X. Averty, A. Alamo, and C. De Novion, *J. Nucl. Mater.*, **312**: 236 (2003).
8. H. Qu, Y. Lang, C. Yao, H. Chen, and C. Yang, *Mater. Sci. Eng.: A*, **562**: 9 (2013).
9. W. Li, S. Lu, Q.-M. Hu, H. Mao, B. Johansson, and L. Vitos, *Comput. Mater. Sci.*, **74**: 101 (2013).
10. G. Kresse and J. Furthmuller, *Phys. Rev. B*, **54**: 11169 (1996).
11. G. Kresse and J. Hafner, *Phys. Rev. B*, **47**: 558 (1993).
12. G. Kresse and J. Hafner, *J. Phys.: Condens. Matter*, **6**: 8245 (1994).
13. H. Dai, M. Yu, Y. Dong, W. Setyawan, N. Gao, and X. Wang, *Metals*, **12**: 558 (2022).
14. S. Chen, Y. Li, S. Shi, and S. Jin, *J. Nanomater.*, **2019**: 6862390 (2019).
15. J. Lee, K. Park, and K. Chang, *Metals*, **11**: 4 (2020).
16. K. Chang, F. Meng, F. Ge, G. Zhao, S. Du, and F. Huang, *J. Nucl. Mater.*, **516**: 63 (2019).
17. A. T. Dinsdale, *Calphad*, **15**: 317 (1991).
18. G. S. Was, *Fundamentals of Radiation Materials Science: Metals and Alloys* (Springer: 2016).
19. J. E. Hilliard, *Phase Transformation* (Metals Park, Ohio: Am. Soc. for Metals: 1970), pp.497–539.
20. L. Liang, Z.-G. Mei, Y. S. Kim, M. Anitescu, and A. M. Yacout, *Comput. Mater. Sci.*, **145**: 86 (2018).
21. Z. Yan, S. Shi, Y. Li, J. Chen, and S. Maqbool, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **22**: 3611 (2020).
22. J. W. Cahn, *Acta Metall.*, **10**: 179 (1962).
23. C. Huang, M. O. de La Cruz, and B. Swift, *Macromolecules*, **28**: 7996 (1995).
24. K. Wu, J. Morral, and Y. Wang, *Acta Mater.*, **49**: 3401 (2001).
25. K. Wu, J. Morral, and Y. Wang, *Acta Mater.*, **52**: 1917 (2004).
26. A. Onuki, *Phase Transition Dynamics* (Cambridge: Cambridge University Press: 2002).
27. A. Onuki, *Phys. Rev. E*, **68**: 061502 (2003).
28. A. Minami and A. Onuki, *Phys. Rev. B*, **70**: 184114 (2004).
29. A. Onuki, A. Furukawa, and A. Minami, *Pramana J. Phys.*, **64**: 661 (2005).
30. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Theory of Elasticity* (New York: Pergamon: 1973).
31. S. B. Biner, *Programming Phase-Field Modeling* (Springer: 2017).
32. C. Canuto, M. Y. Hussaini, A. Quarteroni, and T. A. Zang, *Spectral Methods in Fluid Dynamics* (Berlin–Heidelberg: Springer-Verlag: 1988).
33. L. Q. Chen and J. Shen, *Comput. Phys. Commun.*, **108**: 147 (1998).

34. J. Zhu, L.-Q. Chen, J. Shen, and V. Tikare, *Phys. Rev. E*, **60**: 3564 (1999).
35. D. Terentyev, P. Olsson, T. Klaver, and L. Malerba, *Comput. Mater. Sci.*, **43**: 1183 (2008).
36. S. Kim and W. Buyers, *J. Phys. F: Metal Phys.*, **8**: L103 (1978).
37. Ch. Kittel and P. McEuen, *Introduction to Solid State Physics* (John Wiley & Sons: 2018).
38. D. Terentyev, S. Hafez Haghighat, and R. Schaublin, *J. Appl. Phys.*, **107**: 061806 (2010).
39. V. Ogorodnikov, A. Rakitskii, and Y. I. Rogovoi, *Powder Metall. Met. Ceram.*, **27**: 55 (1988).
40. S. Nagasaki, *Metals Data Book* (Tokyo: Japan Institute of Metals: 2004).
41. I. M. Lifshitz and V. V. Slyozov, *J. Phys. Chem. Solids*, **19**: 35 (1961).
42. C. Wagner, *Z. Elektrochem*, **65**: 581 (1961).
43. S. Messoloras, B. Pike, R. Stewart, and C. Windsor, *Met. Sci.*, **18**: 311 (1984).
44. Z. Yang, Z. X. Wang, C. H. Xia, M. H. Ouyang, J. C. Peng, H. W. Zhang, and X. S. Xiao, *Mater. Sci. Eng.: A*, **772**: 138714 (2020).
45. G. Pastore, K. A. Gamble, and J. D. Hales, *Modeling Benchmark for FeCrAl Cladding in the IAEA CRP ACTOF: FeCrAl-C35M Material Models and Benchmark Cases Specifications* (Idaho Falls: Idaho National Lab.: 2017).
46. K. G. Field, M. A. Snead, Y. Yamamoto, and K. A. Terrani, *Handbook on the Material Properties of FeCrAl Alloys for Nuclear Power Production Applications* (Oak Ridge National Lab.: 2017).
47. Y. He, J. Liu, S. Qiu, Z. Deng, Y. Yang, and A. McLean, *Mater. Sci. Eng.: A*, **726**: 56 (2018).
48. M. N. Gussev, K. G. Field, E. Cakmak, and Y. Yamamoto, *Mechanical Behavior and Structure of Advanced Fe-Cr-Al Alloy Weldments. Proceedings of the 18th International Conference on Environmental Degradation of Materials in Nuclear Power Systems-Water Reactors* (Springer International Publishing: 2019), pp. 1417-1430.
49. Y. Zhang, H. Sun, H. Wang, X. Wang, X. An, and K. He, *Mater. Sci. Eng.: A*, **826**: 142003 (2021).
50. Y. Yano, T. Tanno, S. Ohtsuka, T. Kaito, and S. Ukai, *Mater. Trans.*, **62**: 1239 (2021).
51. Y. Yamamoto, B. A. Pint, K. A. Terrani, K. G. Field, Y. Yang, and L. L. Snead, *J. Nucl. Mater.*, **467**: 703 (2015).
52. H. Zhang, J. Ma, Z. Gao, F. Guo, S. Xu, G. Hou, and G. Zheng, *Materials*, **15**: 3718 (2022).