

На правах рукописи

Ридный

Ридный Ярослав Максимович

**ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПРИМЕСЕЙ УГЛЕРОДА В ЖЕЛЕЗЕ:
АВ ИНИТЮ МОДЕЛИРОВАНИЕ**

01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Челябинск – 2019

Работа выполнена на кафедре физики наноразмерных систем ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (НИУ)».

Научный руководитель: Мирзоев Александр Аминулаевич, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физики наноразмерных систем ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (НИУ)»;

Официальные оппоненты: Мазуренко Владимир Владимирович – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой теоретической физики и прикладной математики ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина»;

Горностырёв Юрий Николаевич – доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией цветных сплавов, ФГБУН «Институт физики металлов имени М. Н. Михеева» УрО РАН.

Ведущая организация – ФГБУН «Институт металлургии» Уральского отделения РАН.

Защита состоится 18 декабря 2019 г., в 16.00 часов, на заседании диссертационного совета Д 212.298.04 при ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (НИУ)» по адресу: 454080, г. Челябинск, пр. Ленина, 76, ауд.1001

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (НИУ)», а также по адресу: <https://www.susu.ru/ru/dissertation/d-21229804/ridnyu-yaroslav-maksimovich>.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета. Факс: +7 315 267 91 23, e-mail: morozovsi@susu.ru

Автореферат разослан «_____» _____ 2019 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук, доцент



Морозов С.И.

Общая характеристика работы

Актуальность работы. На долю железа и его сплавов приходится более 90 процентов суммарного количества металлов, применяемых в технике, пластмассы и полимеры заменяют их не более чем на 6-7 %. Основными конструкционными материалами являются стали – железоуглеродистые сплавы, допированные различными примесями. Это связано с тем, что внедрение всего лишь 1 ат. % углерода радикально повышает прочность железа. Железо является полиморфным металлом [1, 2]: при нагревании выше 911 °С низкотемпературное α -железо с ОЦК-решеткой превращается в γ -железо с ГЦК-решеткой. Углерод растворяется в обеих фазах железа, так что при температурах выше 723–911 °С существует аустенит – раствор углерода в γ -Fe, ниже этого интервала возникает феррит – раствор углерода в α -Fe [2]. Растворимость углерода в γ -Fe довольно высока – до 2 масс. %. Напротив, α -железо растворяет очень мало углерода, максимально 0,025 масс. %. Причина высокой прочности сталей с указанными особенностями состоит в том, что если нагретый аустенит резко охладить, то содержащийся в стали углерод приводит к возникновению мартенситного превращения (т.н. «закалка» стали). Природа мартенситного перехода до сих пор остается дискуссионной, однако хорошо известно, что она имеет бездиффузионный, т.е. коллективный характер, и связана со взаимодействием и упорядочением растворенных в железе атомов углерода. Поэтому для прояснения физической картины явления закалки, необходимо достоверно знать природу и особенности взаимодействия и упорядочения атомов углерода в ОЦК- и ГЦК-железе. Изучение этого взаимодействия и упорядочения прямыми экспериментальными методами (включая изучение концентрационной зависимости активности углерода в железе) не привело к полному успеху, поэтому в настоящее время эту проблему пытаются решить методами компьютерного моделирования.

В ходе медленного охлаждения аустенита, он превращается в феррит, а избыток углерода сверх равновесной концентрации выделяется в виде карбида Fe_3C . Многочисленными экспериментами установлено, что наличие кремния повышает количество углерода растворённого в феррите, и понижает количество карбида Fe_3C [3]. Однако, причины этого до сих пор остаются неясными. Чтобы выяснить механизм данного явления, необходимо определить характер взаимодействия между атомами кремния и углерода в тройной системе Fe-Si-C. Это в свою очередь требует определения характеристик бинарных систем Fe-C и Fe-Si, таких, как равновесные параметры решетки, полная энергия системы, энергии растворения примесного компонента, величины магнитных моментов на атомах компонентов и средний магнитный момент системы.

Основной целью данной работы являлось изучение методами компьютерного моделирования взаимодействия атомов углерода в феррите, мартенсите и аустените, а также влияние на него примесей на примере кремния. Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Методами первопринципного моделирования провести расчеты электронной и атомной структуры железа, содержащих примесные атомы углерода и кремния для различных магнитных фаз сплава.
2. Вычислить энергию взаимодействия между атомами углерода на различных расстояниях в матрице ОЦК- и ГЦК-железа, а также энергии растворения атомов углерода в них.
3. Методом Монте-Карло с учётом найденных энергий взаимодействия пар С-С для различных координационных сфер, провести расчёты активности углерода в ОЦК- и ГЦК-железе для сравнения с экспериментом и проверки достоверности полученных результатов.
4. Провести оценку влияния легирующих примесей на характер взаимодействия углерод-углерод в железе на примере системы Fe-Si-C. Вычислить энергии взаимодействия между примесными атомами (С-С, Si-Si и Si-C) в ОЦК-железе.

Научная новизна работы сформулирована в виде следующих результатов и положений, которые выносятся на защиту:

1. Разработана методика первопринципного моделирования и рассчитаны энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе в парамагнитном состоянии. Аналогичное моделирование проведено также для двух антиферромагнитных структур, приводят к значительной ошибке.
2. Установлено, что на всех расстояниях взаимодействие между парами С-С в ГЦК-железе носит отталкивательный характер, причём наиболее сильное отталкивание наблюдается между атомами углерода располагающимися во второй координационной сфере. Далее третьей координационной сферы взаимодействие становится близким к нулю.
3. Методами первопринципного моделирования определены энергии С-С взаимодействия в тетрагональной решетке мартенсита. Показано, что учёт тетрагонального искажения изменяет энергии взаимодействия между атомами углерода до 10 % в сравнении с аналогичными величинами для ОЦК-железа. Результаты моделирования полностью подтверждают качественные выводы теории Зинера-Хачатуряна. Однако, обнаружено, что учтённый нами химический вклад во взаимодействие атомов углерода сопоставим с деформационным.

4. Разработана и реализована программа расчетов активности углерода в ГЦК- и ОЦК-решетках железа методом Монте-Карло. Проведено сравнение результатов моделирования для имеющихся в литературе наборов значений энергии С-С взаимодействий для разных координационных сфер с данными измерений активности углерода. Это позволило установить наиболее точные из указанных параметризации.
5. Впервые прямым компьютерным экспериментом на основе метода Монте-Карло показано, что одну и ту же кривую активности углерода в γ -железе можно получить, используя различные потенциалы взаимодействия между атомами углерода.
6. Примесь кремния существенно изменяет взаимодействие углерод-углеродной пары в матрице железа, если атомы углерода являются ближайшими соседями атома кремния. Природа воздействия кремния на взаимодействие углерод-углерод связана с изменением магнитных моментов на атомах сплава.

Научная и практическая ценность диссертационной работы состоит в следующем. Развитый на основе теории функционала плотности подход закладывает научную основу понимания механизмов связи между атомами углерода в феррите, мартенсите и аустените, а также с примесными атомами. Результаты исследований, полученные с применением компьютерного моделирования, могут быть использованы для построения термодинамических моделей и расчета равновесных диаграмм состояния сплавов на основе системы Fe-C. Полученные данные о влиянии кремния на свойства ОЦК-железа системы Fe-C важны для разработки научных основ нового поколения бескарбидных бейнитных сталей.

Апробация работы Результаты работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях и семинарах: XVI International IUPAC Conference on High Temperature Materials Chemistry (г. Екатеринбург, 2018); 52 Школа ПИЯФ и Молодёжная конференция по физике конденсированного состояния (г. Санкт-Петербург, 2018); XVIII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества (г. Екатеринбург, 2017); VII Международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов» (г. Москва, 2017); Международная конференция «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах», посвященная 60-летию Института физики ДНЦ РАН и 110-летию Х.И. Амирханова (г. Махачкала, 2017); XIII Международная конференция «Забабахинские научные чтения» (г. Снежинск, 2017); 13-й Российский симпозиум фундаментальные основы атомистического мультимасштабного моделирования ФОАММ-2016 (г. Новый Афон, 2016); Международная зимняя

школа физиков-теоретиков «КОУРОВКА-XXXVI» (г. Екатеринбург, 2016); Школа-конференция молодых учёных «Неорганические соединения и функциональные материалы» ICFM-2015 (г. Новосибирск, 2015); XIII Российско-Китайский Симпозиум «Новые материалы и технологии» (г. Казань, 2015); Международная конференция посвящённая 80-летию члена-корреспондента РАН И.К. Камилова «Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах» (г. Челябинск, 2015); XIX Международная научная конференция молодых ученых и специалистов посвящённая 100-летию Ф.Л. Шапиро «ОМУС-2015» (г. Москва, 2015); XVIII Международная научная конференция молодых ученых и специалистов посвящённая 105-летию Николая Николаевича Боголюбова «ОМУС-2014» (г. Москва, 2014); V Международная конференция «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов» (г. Москва, 2013).

Часть разделов данной работы были выполнены в рамках реализации грантов РФФИ № 13-03-00138, № 14-03-00618-а и № 16-03-00486 А, гранта РНФ № 16-19-10252.

Материалы диссертации опубликованы в 26 печатных работах, в том числе 12 статей в журналах из списка ВАК, 4 публикаций в журналах, индексируемых Scopus и Web of Science.

Достоверность научных результатов

Достоверность полученных результатов обеспечивается использованием достаточно надежных и апробированных в мировой литературе теоретических методов и пакетов программ компьютерного моделирования. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с данными экспериментов и компьютерного моделирования, полученными другими авторами.

Личный вклад автора

В основу диссертации положены результаты научных исследований, выполненных автором в период 2011-2019 гг. Работа выполнена на кафедре физики наноразмерных систем физического факультета Южно-Уральского государственного университета. В получении всех представленных в диссертации результатов автор принимал непосредственное участие. Подготовка к публикации полученных данных проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был определяющим. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы.

Структура и объем диссертации Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, библиографии. Полный объем диссертации 129 страниц, работа содержит 50 формул, 44 рисунка, 29 таблиц и список литературы, включающий 130 наименований.

Содержание работы

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулирована цель и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения, кратко изложено содержание диссертации.

В первой главе приведен обзор публикаций, посвященных экспериментальному и теоретическому исследованию взаимодействий углерод-углерод в различных фазах железа, а также влиянию на это взаимодействие примесей замещения. Приведён обзор данных об энтальпии растворения и активности атомов углерода в ОЦК- и ГЦК-фазах железа. Дана оценка работ по определению энергетических характеристик взаимодействия атомов углерода в железе методами статистической физики и термодинамики, а также на основе косвенных данных мессбауэровской спектроскопии. Показано, что существующие аналитические методы (метод функций Грина) позволяют получить лишь качественные оценки, а методы CALPHAD-моделирования, основанные на приближении регулярных растворов, где учитывается лишь взаимодействие ближайших соседей, часто приводят к недостоверным результатам. Мессбауэровская спектроскопия позволяет определить только характеристики ближнего порядка, поэтому энергии взаимодействия углеродных пар определяются неоднозначно. Показано, что наиболее достоверным методом определения таких взаимодействий является атомистическое компьютерное моделирование на основе теории функционала электронной плотности (DFT). К настоящему времени существует несколько работ, посвященных изучению проблемы углерод-углеродного взаимодействия в железе методами DFT. Эти исследования проводились разными авторами для различных фаз и магнитных состояний железа, при этом использовались отличающиеся пакеты DFT-программ, с различной степенью вычислительной точности. Неудивительно, что полученные результаты отличались друг от друга, порой весьма существенно. Не последнюю роль в этом сыграло применение в большинстве расчетов псевдопотенциального приближения, когда из рассмотрения удаляют электроны атомного остова, заменяя их действие эффективным псевдопотенциалом. При рассмотрении атомов углерода в железе справедливость такого подхода может вызывать сомнение. Действительно, атомы С в решетке Fe являются примесями внедрения, поэтому атомы углерода и железа сильно сближаются, что может приводить к возмущению не только валентных, но и остовных электронов. В связи с этим делается вывод о необходимости проведения систематического изучения проблемы углерод-углеродных взаимодействий для всех существующих фаз железа с использованием одного и того же полнопотенциального метода первопринципного компьютерного моделирования (программный пакет WIEN2k).

Во второй главе описан использованный программный пакет моделирования WIEN2k и метод линейаризованных присоединенных плоских волн LAPW, который реализован в данном продукте. Отмечается, что LAPW является одним из наиболее точных методов расчета электронной структуры кристаллов в рамках теории функционала плотности. В данной главе представлены основы теории функционала плотности (DFT) и его наиболее распространенных приближений: приближение локальной плотности (LDA) и обобщенное градиентное приближение (GGA). Лучшие результаты в расчетах зонной структуры переходных металлов даёт функционал типа GGA, который позволяет точно описать порядок фазового перехода в ОЦК-железе. В настоящее время метод теории функционала плотности в виде GGA является основным расчётным методом первопринципного компьютерного моделирования. В данной работе используется полнопотенциальный метод, который в отличие от широко используемых методов псевдопотенциала, учитывает все электроны. Все эти условия реализуются в программном пакете WIEN2k.

Данный программный пакет позволяет с высокой точностью проводить расчет электронной структуры и полной энергии твердых тел, имеет широкий спектр рассчитываемых характеристик, регулярно обновляется и обладает качественной поддержкой пользователей. В главе изложена методика проведения расчетов и выбора параметров моделирования, которые влияют на точность и время сходимости расчетов. Делается вывод, что выбор оптимальных параметров и проведение объемной и структурной релаксации позволяет определить для основного состояния конкретной системы магнитные моменты компонентов, плотность электронных состояний, полную энергию системы и другие свойства материала.

Для моделирования взаимодействий в ОЦК- и ГЦК-железе использовались суперячейки из 54 и 32 атомов железа. Все вычисления проводились с использованием $N_k = 64$ и $N_k = 343$ - точек в зоне Бриллюэна, для ОЦК- и ГЦК-железа соответственно. В качестве обменно-корреляционного функционала было использовано приближение PBE-GGA. Радиус МТ-сферы $R_{mt}(Fe) = 2,0$ а.е., $R_{mt}(Si) = 2,0$ а.е. и $R_{mt}(C) = 1,2$ а.е. для атомов железа, кремния и углерода, соответственно. Критерий ограничения базиса плоских волн $K_{max} = 5$ а.е.⁻¹, энергия разделения валентных орбиталей от основного состояния $E_{cut} = -7,0$ Рб.

В третьей главе методами первопринципного компьютерного моделирования изучается энергия растворения углерода, а также энергии взаимодействия пар углерод-углерод в различных координационных сферах в ОЦК- и ОЦТ-решетках железа. Энергия взаимодействия между атомами углерода в ОЦК-железе оценивалась по формуле:

$$\Delta E(C - C) = E(Fe_{54}C_2) - 2 * E(Fe_{54}C) + E(Fe_{54}), \quad (1)$$

где $E(Fe_{54})$, $E(Fe_{54}C)$, $E(Fe_{54}C_2)$ – энергии отрелаксированных суперячеек ОЦК-железа, состоящих из 54 атомов железа и, соответственно, не содержащих примесей внедрения, содержащих один и два примесных атома углерода. Возможные расположения атомов углерода в решетке внедрения ОЦК-железа приведены на рис. 1. При этом первый атом всегда расположен в нулевой поре, а положения второго атома показаны на рисунке пронумерованными пустыми квадратами. Рассчитанные нами энергии взаимодействия между атомами углерода в ОЦК-феррите приведены в таблице 1 и сопоставлены с другими имеющимися в литературе данными. Из анализа таблицы 1 видно, что наблюдается довольно сильное расхождение между параметрами термодинамических CALPHAD-расчетов и результатами первопринципного моделирования. Это связано, как мы увидим далее, с тем обстоятельством, что взаимодействие между парой примесных атомов меняет свой знак при увеличении расстояния между ними. Термодинамический же анализ проводится в приближении взаимодействия ближайших соседей, что делает данную величину усредненной и существенно меняет ее значение.

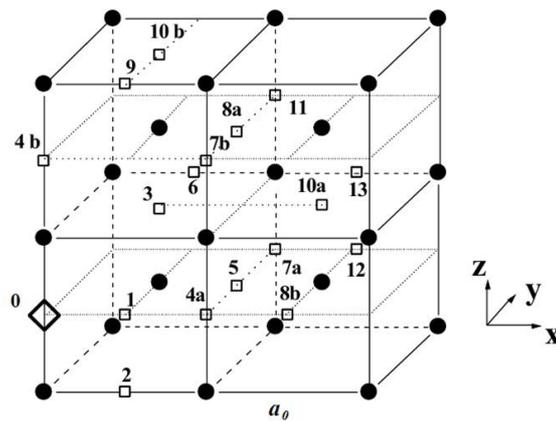


Рис. 1. Возможные расположения атомов углерода в ОЦК-железе. Чёрные круги атомы железа, квадраты атомы углерода. Отчёт идёт от атома номер ноль

До наших расчетов поведение углерода в ОЦК-железе было рассмотрено методами первопринципного моделирования в единственной работе Оцуко [11], где использовалось псевдопотенциальное приближение. Проведенное в таблице 2 сопоставление данных, позволяет заключить, что значения энергий взаимодействия пар углерод-углерод на различных расстояниях и возникающая при этом степень тетрагональности решетки, полученные нами, качественно согласуются с результатами работы [11]. Отметим, однако, что для положений 1,2,5,6,8а в работе [11] было получено значение тетрагональности, меньше 1 (0,981), что противоречит экспериментальным данным. В настоящей работе для указанных конфигураций получено значение тетрагональности чуть больше единицы (1,011), что легко объяснимо в рамках теории Зинера, поскольку в данном случае атомы располагаются в октапорах,

Таблица 1

Энергии взаимодействия между атомами углерода в кубическом ОЦК-железе, эВ

Номер КС	1	2	3	4a	4b	5	6	7a	7b	8a	11
Термодинамический анализ											
[4]	-1,18	-0,23	-0,31	-0,18	1,33	0,07	-0,05	-0,06	-0,02	0,11	0,02
[5-7]	0-11,2	>0	-0,11	>0	>0	-0,07	-	-	-	-	-
Компьютерное моделирование (псевдопотенциальный метод)											
128 ат. [8]	-	0,65	0,09	0,09	1,67	-0,13	-	-	-0,14	-	-0,16
128 ат. [9]	1,95	0,96	0,34	0,25	1,9	-0,07	-0,02	-0,03	0,1	0,05	0,02
128 ат. [10]	1,91	0,82	0,23	0,02	1,52	0,06	0,07	0,02	0,11	0,02	-
Компьютерное моделирование (полнопотенциальный метод)											
54 ат. (Дан- ная работа)	1,78	0,66	0,12	-0,13	2,89	-0,14	-0,1	-0,08	0	0,03	-0,19

принадлежащих подрешеткам разных типов. Это позволяет считать, что полученные нами значения параметров взаимодействия существенно уточняют данные работы Оцуко.

Таблица 2

Сравнение рассчитанных энергий взаимодействия между атомами углерода в тетрагональном ОЦК-железе (в скобках приведена степень тетрагональности) с аналогичными данными для кубической решетки и данными работы [11], эВ

Номер КС	Данная работа		Оцуко [11]
	Куб.	Тетр.	Тетр.
1	1,78	1,8 (1,011)	1,374 (0,981)
2	0,66	0,68 (1,011)	0,226 (0,981)
3	0,12	-0,01 (1,039)	-0,39 (1,036)
4a	-0,13	-0,25 (1,038)	-0,642 (1,036)
4b	2,89	1,65 (1,095)	1,206 (1,09)
5	-0,14	-0,12 (1,007)	-0,558 (0,981)
6	-0,1	-0,08 (1,011)	-0,53 (0,981)
7a	-0,08	-0,25 (1,044)	-0,67 (1,036)
7b	0	-0,16 (1,042)	-0,586 (1,036)
8a	0,03	0,05 (1,011)	-0,39 (0,981)
11	-0,19	-0,32 (1,042)	-0,726 (1,036)

Наиболее важные результаты настоящей главы состоят в следующем. Во-первых, с помощью наиболее точного полнопотенциального метода первопринципного моделирования подтверждено, что знак взаимодействия между атомами углерода, находящимися в ближайшем соседстве, является положительным, а не отрицательным, как принимается в термодинамических CALPHAD-моделях. Во-вторых, энергия взаимодействия между углеродны-

ми парами в ОЦК- и ОЦТ-решетках спадает довольно медленно при их удалении друг от друга, в связи с чем взаимодействие между парами углерод-углерод находящимися во 2, 3, 4 и 5 координационных сферах оказывается также значительным. Поэтому учет более дальних взаимодействий между атомами углерода является важной, хотя и чрезвычайно сложной задачей CALPHAD-моделирования ОЦК-сталей. Причина столь резкого расхождения результатов первопринципного моделирования с данными термодинамического анализа связана с малой растворимостью углерода в ОЦК-железе (менее 0,1 ат. %). При столь низкой концентрации пары углерод-углерод в среднем находятся на больших расстояниях, поэтому взаимодействие между ними практически не влияет на поведение фазовых диаграмм и кривую активности углерода в области ОЦК-фазы. По этой причине при построении CALPHAD-моделей выбор параметра взаимодействия для ближних соседей С-С определялся из соображений подгонки фазовых диаграмм в области жидкой фазы с высоким содержанием углерода.

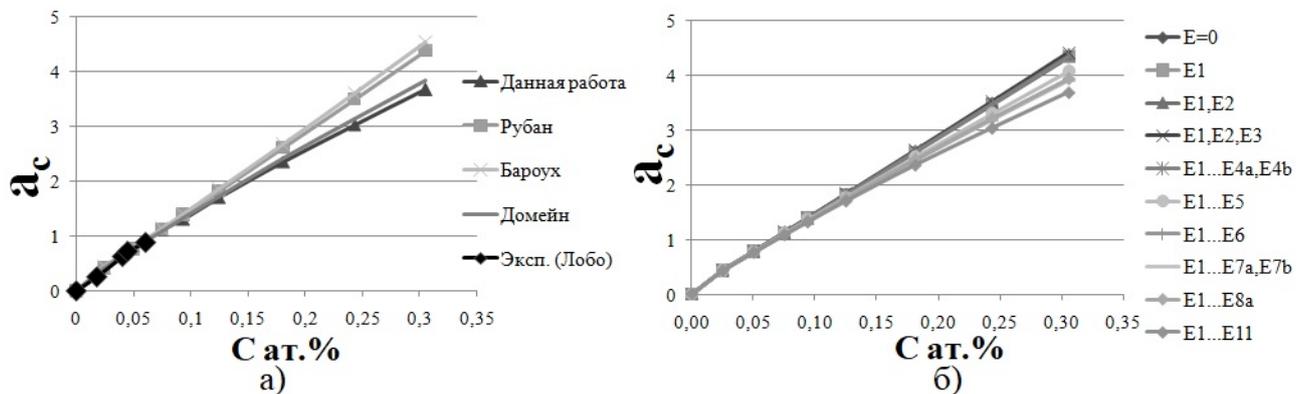


Рис. 2. Зависимость активности углерода в ОЦК-железе от концентрации при $T = 1000$ К. Кривые были получены методом Монте-Карло с использованием данных из таблицы 1. а) Сравнение с работами других авторов. б) Данная работа ($E=0$ это кривая получена для случая, когда взаимодействие между атомами углерода для всех координационных сфер равно нулю)

В настоящее время в мировой литературе существует несколько различных параметризаций для энергий взаимодействия углерод-углерод в ОЦК-железе, которые существенно отличаются друг от друга. Чтобы сравнить их между собой методом Монте-Карло, проведен расчет кривой активности углерода, который был сопоставлен с имеющимися экспериментальными данными [12]. К сожалению, как и ожидалось, любой набор энергий взаимодействия приводит к хорошему согласию с экспериментом [12] (рис. 2), поскольку растворимость углерода в ОЦК-железе мала. Поэтому, чтобы выяснить особенности различных параметризаций, пришлось распространить кривую активности на более широкий диапазон концентраций углерода, концентраций, не достижимых в реальном ОЦК-железе. В этом расширенном диапазоне

концентраций уже видно, что параметризации взаимодействия, полученные в работах [8–10], приводят к различным кривым активности (рис. 2). Наиболее сильно результаты нашего моделирования расходятся с данными работы Рубана [9]. Мы связали наблюдаемое различие с дальнедействующим характером С-С взаимодействий в ОЦК-железе. В работе Рубана использовалась суперячейка из 128 атомов, что позволило автору точно определять взаимодействия для всех 11 координационных сфер. Высокая точность пакета WIEN2k ограничила наши возможности ячейкой из 54 атомов. В силу этого энергии взаимодействий между атомами углерода в 5 и далее координационных сферах могли содержать ошибки, связанные с влиянием периодических граничных условий. Чтобы подтвердить данное предположение, мы рассмотрели влияние на кривую активности числа координационных сфер, в пределах которых учитывается взаимодействие углерод-углерод. Из рисунка 2 видно, что при ограничении радиуса взаимодействия между парами углерод-углерод до 5 координационной сферы наши результаты совпадают с данными Рубана, однако при учете взаимодействий в 5-11 координационных сферах кривая начинает существенно отклоняться вниз. Таким образом, мы установили причину расхождений и выяснили, что рассчитанные нами энергии С-С в ОЦК-железе содержат определенные погрешности на расстояниях, превышающих 5 координационную сферу.

В четвертой главе методами первопринципного компьютерного моделирования изучается энергия растворения углерода, а также энергии взаимодействия пар углерод-углерод в различных координационных сферах ГЦК-решётки железа. Отмечено, что в отличие от ОЦК-растворов железо-углерод, данные об активности углерода в ГЦК-решетке являются важным источником информации об энергиях взаимодействия между парами С-С. Используемая в работе методика моделирования активности углерода методом Монте-Карло позволила изучить влияние параметров взаимодействия углерод-углерод на различных расстояниях на ход концентрационной зависимости активности. Было показано, что увеличение взаимодействия между парами углерод-углерод, как в первой, так и во второй координационных сферах приводит к существенному подъему кривой активности, а уменьшение - к смещению вниз. При этом влияние взаимодействий между парами, удаленными на большее расстояние, оказывает незначительный эффект на ход кривой активности. Это обстоятельство дает научное обоснование высказанному в работе [13] предположению, что расчет активности углерода при учете взаимодействий в двух координационных сферах (E1 и E2) приводит к тому же результату, что и расчет в приближении только ближайших соседей с эффективным параметром ε_0 , равным

$$\varepsilon_0 = (z_1 * E1 + z_2 * E2)/z_1, \quad (2)$$

где z_1 и z_2 – число соседей в первой и второй координационных сферах. Для проверки данного соотношения мы провели ряд расчетов методом Монте-Карло с различными наборами параметров E_1 и E_2 , которые при подстановке в (2) приводят к одному и тому же значению $\varepsilon_0 \approx 0,087$ эВ. Результаты расчета, приведенные на рис. 3, показывают, что соотношение (2) не является абсолютно точным, но достаточно надежно позволяет определить эквивалентные наборы E_1 и E_2 , приводящие к согласию с экспериментальной кривой активности углерода в железе.

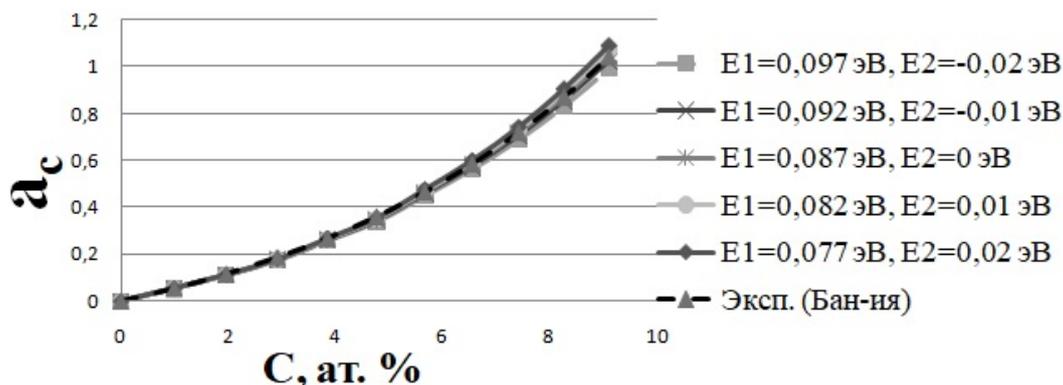


Рис. 3. Зависимость активности углерода в ГЦК-железе от концентрации при $T=1423$ К. Кривые получены для различных наборов энергий взаимодействия между атомами углерода в первой и второй координационной сфере (E_1 и E_2), удовлетворяющих условию $\varepsilon_0=0,087$ эВ

Таким образом удастся показать, что задача определения параметров взаимодействия атомов углерода по экспериментальным данным об активности имеет множество решений, т.е. является математически некорректно поставленной. Именно это обстоятельство многие годы приводило к противоречиям результатов, получаемых различными группами авторов. Наиболее точные результаты удастся получить с привлечением дополнительных данных о распределении углерода по данным мёссбауэровских спектров [13–15], однако и этот подход не позволяет получить однозначные результаты. Не удивительно, что для изучения углерод-углеродного взаимодействия в ГЦК-железе все большее внимание уделяется методам первопринципного компьютерного моделирования (*ab initio modelling*), позволяющим обеспечить требуемую однозначность и точность определения энергий данного взаимодействия на различных расстояниях. Однако проведение такого моделирования сталкивается с серьезной проблемой: ГЦК-железо – парамагнитно, а DFT-расчеты могут проводиться только для однородного магнитного порядка. В течение долгого времени проблему пытались обойти, используя для приближенного описания парамагнитного ГЦК-железа суперячейки с однородным и нулевым средним магнитным моментом. К их числу относятся суперячейки с нулевыми магнитными моментами на атомах Fe, и суперячейки с различным анти-

ферромагнитным упорядочением. Однако подобные приближения оказались негодными для расчетов углерод-углеродного взаимодействия. Они приводили к возникновению притяжения между ближайшими атомами углерода, что противоречит всем существующим данным, как термодинамического анализа, так и мессбауровских экспериментов. Стало понятно, что для решения проблемы нужен новый подход к моделированию магнитного беспорядка в парамагнитной ГЦК-фазе. В работе Пономарёвой [16] для этой цели был использован метод специальных квазинеупорядоченных структур (SQS) [19]. Каждая из SQS представляет собой случайно сгенерированную магнитную конфигурацию с полным магнитным моментом, равным нулю. При использовании данного подхода энергия взаимодействия ближайших атомов углерода оказалась положительной, что качественно согласовалось с данными CALPHAD-моделей. Поэтому данный подход был использован и в настоящей работе. Для нахождения энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе использовалась формула:

$$\Delta E(C - C) = E(Fe_{32}C_2) - 2 * E(Fe_{32}C) + E(Fe_{32}), \quad (3)$$

где $E(Fe_{32})$, $E(Fe_{32}C)$, $E(Fe_{32}C_2)$ – энергии отрелаксированных суперячеек ГЦК-железа, состоящих из 32 атомов железа и, соответственно, не содержащих примесей внедрения, содержащих один и два примесных атома углерода. Первый атом помещался в октапору, находящуюся в начале координат (позиция 0 на рис. 4). Второй атом последовательно помещался в первую, вторую и третью координационную сферу относительно первого (позиции 1, 2, 3 на рис. 4). Отметим, что найденную в нашем случае энергию взаимодействия во второй и третьей координационных сферах необходимо разделить пополам. Это связано с тем, что при расчете используются периодические граничные условия, а эти позиции (рис. 4), находятся на равном удалении от атома углерода в начале координат и его периодического повторения, возникающего при периодической трансляции ячейки. В силу этого, рассчитанная энергия оказывается равна удвоенной энергии взаимодействия между изолированной парой атомов углерода.

В таблице 3 данные об энергии взаимодействия атомов углерода в ГЦК-железе, находящихся в различных координационных сферах, получены методами *ab initio* моделирования и сопоставляются с данными других работ (мы оставили только основные работы).

Как следует из таблицы 3, данные С-С взаимодействия, полученные нами близки, ранее полученным [13, 14], отталкивание между атомами углерода во второй координационной сфере сильнее чем в первой. Данные работы [16] позволяют нам рассмотреть вопрос о том, как влияет учет дальнедействующего взаимодействия между примесями углерода на термодинамические свойства твердого раствора. Действительно, взаимодействие между приме-

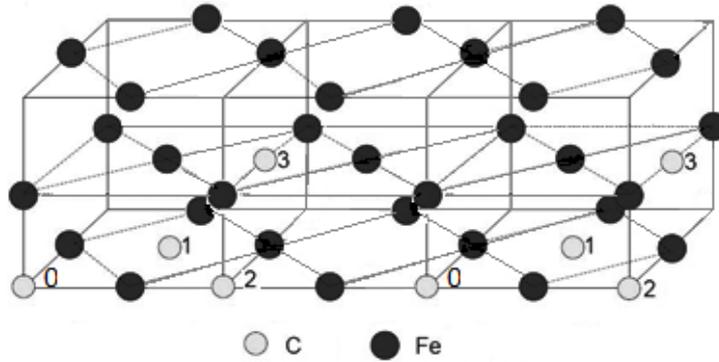


Рис. 4. Расположения атомов углерода в суперячейке из 32 атомов железа, с учётом периодических граничных условий. Новая суперячейка начинается от второго атома номер ноль. Атомы железа чёрным цветом, а углерода светлым

Таблица 3

Значения энергий взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе, эВ

Статья	Эффективный параметр ϵ_0	Координационная сфера			
		1	2	3	4
Ода [13]	0,0735	0,036	0,075	–	–
Маклеллан [17]	0,087	0,087	–	–	–
Блантер [14]	0,1995	0,115	0,169	–	–
Хэпбурн [18]	0,0225	0,034	–0,023	–	–
Пономарёва [16]	0,265	0,18	0,17	–0,004	0,004
Данная работа	0,11	0,06	0,1	0,005	–

сями углерода носит упругий, а значит, дальнедействующий характер. Это взаимодействие убывает с ростом радиуса рассматриваемой координационной сферы, но одновременно с этим растёт и число атомов в ней. Поэтому данный вопрос является существенным для дальнейшего обсуждения. Используя прямой расчёт концентрационной зависимости активности углерода в ГЦК-железе по данным таблицы 3, проведено сравнение результатов для различных параметризаций взаимодействия углерод-углерод, полученных как термодинамическими, так и *ab initio* методами (рис. 5).

Результаты, представленные на рис. 5, показывают, что все модели с эффективным параметром ϵ_0 , близким по величине к значению 0,087 эВ, хорошо согласуются с экспериментом и данными Маклеллана [20], а для моделей с большим значением согласие ухудшается. Обе параметризации углеродных взаимодействий, полученных по данным *ab initio* расчетов, дают худшее согласие с экспериментальной кривой, чем модельные термодинамические (рис. 4). С одной стороны, это объясняется отсутствием подгоночных параметров при квантово-механическом расчете, но с другой стороны свидетельствует о необходимости их уточнения. Видно также, что кривая активно-

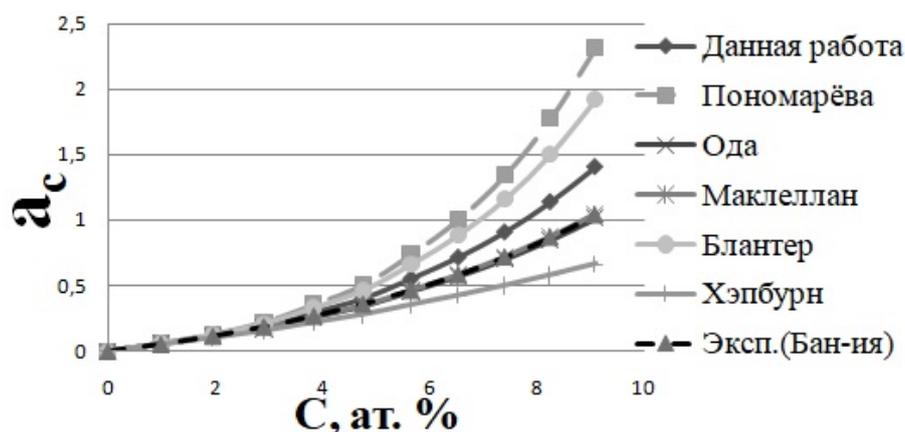


Рис. 5. Зависимость активности углерода в ГЦК-железе от концентрации при $T=1423$ К. Кривые получены методом Монте-Карло при использовании данных таблицы 3

сти в аустените, полученная из наших данных по энергиям взаимодействия, ближе к экспериментальной кривой, чем кривая, полученная из данных [16].

В пятой главе исследовалось влияние примесей замещения на примере кремния на упорядочение углерода в ОЦК-железе. Для определения энергий взаимодействия между атомами углерода в ОЦК-железе в присутствии кремния применялась формула:

$$E(C-C) = E(Fe_{53}SiC_2) - E(Fe_{53}SiC(1)) - E(Fe_{53}SiC(X)) + E(Fe_{53}Si), \quad (4)$$

где $E(Fe_{53}SiC_2)$ – энергия отрелаксированной суперячейки, состоящей из 53 атомов железа, одного атома кремния и двух атомов углерода, $E(Fe_{53}SiC(1))$ – энергия отрелаксированной суперячейки, состоящей из 53 атомов железа, одного атома кремния и одного атома углерода находящегося в первой координационной сфере атома кремния, $E(Fe_{53}SiC(X))$ – X может принимать значения от одного до пяти в зависимости от расположения второго атома углерода относительно кремния.

Мы ограничились 11 позицией, потому что для следующих координационных сфер в рассчитанные значения начинают давать вклад взаимодействия с атомами углерода, находящимися в других ячейках. Нумерация позиций такая же как на рис. 6. Значения энергий взаимодействия между атомами углерода в ОЦК-железе, в присутствии кремния и без него приведены в таблице 4.

Из таблицы 4 видно, что кремний существенно изменяет взаимодействие между атомами углерода, если атомы углерода являются ближайшими соседями кремния. Для объяснения этого эффекта мы обратились к расчёту магнитных моментов атомов в системе Fe-Si-C и обнаружили, что природа воздействия кремния на взаимодействие углерод-углерод связана с изменением магнитных моментов на атомах железа.

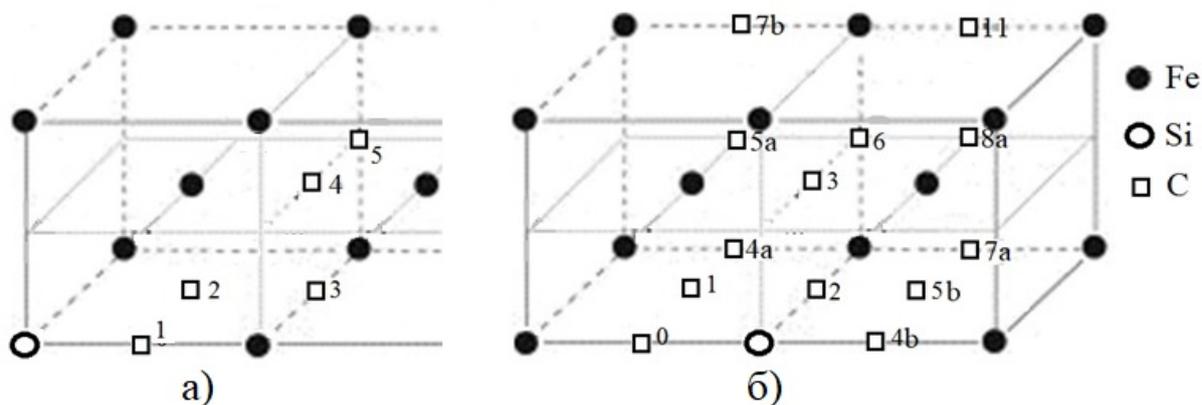


Рис. 6. Чёрные кружки атомы железа, белые кружки атомы кремния, белые квадраты возможные расположения атомов углерода. Цифрами обозначены различные конфигурации атомов. Атом номер ноль зафиксирован. а) Система $E(Fe_{53}SiC(X))$. б) Система $E(Fe_{53}SiC_2)$

Таблица 4

Значения энергий взаимодействия между атомами углерода в ОЦК-железе, в присутствии кремния и без него, эВ

Номер позиции	С кремнием	Без кремния
1	0,97	1,78
2	0,54	0,66
3	0,07	0,12
4a	-0,12	-0,13
5a	-0,14	-0,14
5b	-0,13	-0,14
6	-0,14	-0,1
7a	-0,05	-0,08
7b	-0,06	0
8a	0,01	0,03
11	-0,17	-0,19

Закключение и основные результаты работы. Выполненная диссертационная работа посвящена систематическому изучению взаимодействия атомных пар углерод-углерод в феррите, мартенсите и аустените на атомном уровне методом первопринципного компьютерного моделирования.

Основные результаты работы:

1. Показано, что для точного расчета активности углерода в ОЦК-железе достаточно учета взаимодействия между атомами углерода в первых 4 координационных сферах (КС). Методами первопринципного моделирования указанные параметры взаимодействия в ОЦК-железе рассчитаны с высокой точностью. Получено, что учёт тетрагонального искажения существенно влияет на энергии взаимодействия между атомами углерода в ОЦК-железе. Результаты моделирования полностью подтвержда-

ют качественные выводы теории Зинера-Хачатуряна. Однако обнаружено, что химический вклад во взаимодействие атомов С сопоставим с деформационным.

2. Рассчитаны энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе для парамагнитного и антиферромагнитного состояний. Взаимодействие носит характер отталкивания, причём наиболее сильное отталкивание наблюдается между атомами углерода расположенными во второй координационной сфере. После третьей координационной сферы взаимодействие становится близким к нулю.
3. Показано, что одну и ту же кривую активности углерода в железе можно получить, используя различные потенциалы взаимодействия между атомами углерода.
4. Показано, что атомы кремния в ОЦК-железе испытывают сильное взаимное отталкивание в первых двух координационных сферах, которое является спадающим. Далее третьей координационной сферы отталкивание атомов становится близким к нулю.
5. Показано, что атомы углерода и кремния на расстоянии двух координационных сфер имеют отталкивательное взаимодействие, причём во второй координационной сфере отталкивание сильнее чем в первой. В третьей и последующих сферах наблюдается очень слабое взаимодействие, которое по мере увеличения расстояния между атомами стремится к нулю.
6. Кремний существенно изменяет взаимодействие между атомами углерода, если они являются ближайшими соседями кремния. Природа воздействия кремния на взаимодействие углерод-углерод связана с изменением магнитных моментов на атомах сплава.

Список публикаций автора в изданиях, рекомендованных ВАК:

1. *Ридный, Я. М.* Ab-initio моделирование влияния ближнего окружения примесей углерода на энергию их растворения в ГЦК-железе / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев, Д. А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математика. Механика. Физика. — 2013. — Т. 5. — № 2. — С. 108–116.

2. *Ридный, Я. М.* Ab-initio моделирование энергии растворения атома углерода в парамагнитном ГЦК-железе / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев, Д. А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математика. Механика. Физика. — 2014. — Т. 6. — № 3. — С. 86–91.

3. *Ридный, Я. М.* Расчёт из первых принципов энергий взаимодействия между атомами углерода в антиферромагнитном двухслойном ГЦК-железе / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев, Д. А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математика. Механика. Физика. — 2014. — Т. 6. — № 4. — С. 51–58.

4. *Ридный, Я. М.* Примеси углерода в парамагнитном ГЦК-железе: ab-initio моделирование энергетических параметров / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев, Д. А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математика. Механика. Физика. — 2015. — Т. 7. — № 2. — С. 56–63.

5. *Ридный, Я. М.* Влияние энергий взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе на концентрационную зависимость активности углерода / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев, Д. А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Металлургия. — 2016. — Т. 16. — № 3. — С. 24–31.

6. *Ридный, Я. М.* Определение оптимальных параметров моделирования для максимально точных расчётов энергий в ОЦК-железе / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев, Д. А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математика. Механика. Физика. — 2016. — Т. 8. — № 4. — С. 63–69.

7. *Ридный, Я. М.* Ab initio моделирование энергии растворения и активности углерода в ГЦК-Fe / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев, Д. А. Мирзаев // Физика твёрдого тела. — 2017. — Т. 59. — № 7. — С. 1255–1260.
(*Ridnyi, Ya. M.* Ab Initio Simulation of Dissolution Energy and Carbon Activity in fcc Fe / Ya. M. Ridnyi, A. A. Mirzoev, D. A. Mirzaev // Physics of the Solid State. — 2017. — Т. 59. — № 7. — С. 1279–1284.)

8. *Ридный, Я. М.* Примеси кремния в ОЦК-железе: ab-initio моделирование свойств и энергетических параметров / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев, Д. А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Металлургия. — 2017. — Т. 17. — № 3. — С. 46–53.

9. *Ридный, Я. М.* Первопринципное компьютерное моделирование энергетических параметров и магнитных эффектов в тройной системе Fe-Si-C / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев, Д. А. Мирзаев // Известия вузов. Физика. — 2018. — Т. 61. — № 2. — С. 34–38.

(*Ridnyi, Ya. M.* Computer simulation of energy parameters and magnetic effects in Fe-Si-C ternary alloys / Ya. M. Ridnyi, A. A. Mirzoev, D. A. Mirzaev // Russian Physics Journal. — 2018. — Т. 61. — № 2. — С. 242–247.)

10. *Ридный, Я. М.* Взаимодействие между атомами углерода и активность углерода в ГЦК-железе: термодинамические теории и компьютерное моделирование / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев, В. М. Счастливцев, Д. А. Мирзаев // Физика Металлов и Metallovedenie. — 2018. — Т. 119. — № 3. — С. 264–270.

(*Ridnyi, Ya. M.* Interaction between carbon atoms and activity of carbon in fcc iron: thermodynamic theories and computer simulation / Ya. M. Ridnyi, A. A. Mirzoev, V. M. Schastlivtsev, D. A. Mirzaev // Physics of Metals and Metallography. — 2018. — Т. 119. — № 3 — С. 251–257.)

11. *Ридный, Я. М.* Первопринципное компьютерное моделирование взаимодействия атомов углерода на различных расстояниях в ОЦК- и ОЦТ-решетках феррита и мартенсита / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев, В. М. Счастливцев, Д. А. Мирзаев // Физика Металлов и Metallovedenie. — 2018. — Т. 119. — № 6. — С. 611–617.

(*Ridnyi, Ya. M.* Ab initio computer simulation interaction of carbon atoms at different distances in the bcc and bct lattice ferrite and martensite / Ya. M. Ridnyi, A. A. Mirzoev, V. M. Schastlivtsev, D. A. Mirzaev // Physics of Metals and Metallography. — 2018. — Т. 119. — № 6. — С. 576–581.)

12. *Ридный, Я. М.* Монте-карло моделирование активности углерода в ОЦК-железе / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев, Д. А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Металлургия. — 2018. — Т. 18. — № 4. — С. 28–33.

Список публикаций автора в других печатных изданиях:

1. *Ридный, Я. М.* Первопринципное моделирование энергии растворения углерода в различных магнитных состояниях ГЦК-железа / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев // Сборник тезисов V международной конференции «Деформация и разрушение материалов и наноматериалов». — 2013. — С. 885–887.

2. *Ридный, Я. М.* Первопринципное моделирование энергии растворения азота в ГЦК решётке железа / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев // Сборник тезисов XVIII международной конференции «ОМУС-14»: Тезисы докладов. — 2014. — С. 268–270.

3. *Ридный, Я. М.* Определение оптимальной магнитной конфигурации для моделирования свойств парамагнитного ГЦК-железа / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев // Сборник аннотаций докладов XIX международной конференции «ОМУС-15». — 2015. — С. 32.

4. *Ридный, Я. М.* Ab-initio моделирование энергий взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев // Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах: Тезисы докладов. — 2015. — С. 110.

5. *Ridnyi, Ya. M.* Calculation of interaction energy between carbon atoms in FCC iron / Ya. M. Ridnyi, A. A. Mirzoev // XIII Российско-Китайский Симпозиум «Новые материалы и технологии». — 2015. — С. 586–587.

6. *Ридный, Я. М.* Расчёт из первых принципов энергий взаимодействия между атомами углерода в ОЦК-железе / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев // Школа-конференция молодых учёных «Неорганические соединения и функциональные материалы» ICFM-2015: Программа и сборник тезисов докладов. — 2015. — С. 123–124.

7. *Ридный, Я. М.* Модель парамагнитного состояния в ГЦК-железе используемая для расчёта энергетических параметров / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев // Международная зимняя школа физиков-теоретиков «КОУРОВКА-XXXVI»: Тезисы докладов. — 2016. — С. 43.

8. *Ридный, Я. М.* Модель парамагнитного состояния в ГЦК-железе используемая для расчёта энергетических параметров углерода / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев // 13-й Российский симпозиум Фундаментальные основы атомистического мультимасштабного моделирования: Тезисы докладов. — 2016. — С. 11.

9. *Ридный, Я. М.* Первопринципное компьютерное моделирование взаимодействий атомов в тройной системе Fe-Si-C / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев // XIII «Забабахинские научные чтения»: Тезисы. — 2017. — С. 338–339.

10. *Ридный, Я. М.* Первопринципное моделирование взаимодействий атомов в тройной системе Fe-Si-C / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев // Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах: Сборник трудов. — 2017. — С. 42.

11. *Ридный, Я. М.* Ab initio компьютерное моделирование тройной системы Fe-Si-C / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев, Д. А. Мирзаев // VII Международная конференция "Деформация и разрушение материалов и наноматериалов": Сборник материалов. — 2017. — С. 874–875.

12. *Ридный, Я. М.* Ab initio моделирование взаимодействий атомов углерода и кремния в тройной системе Fe-Si-C / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев // XVIII Всероссийская школа-семинар по проблемам физики конденсированного состояния вещества. Тезисы докладов. — 2017. — С. 133.

13. *Ридный, Я. М.* Ab initio моделирование влияния кремния на взаимодействие между атомами углерода в ОЦК-железе / Я. М. Ридный, А. А. Мирзоев // 52 Школа ПИЯФ и Молодёжная конференция по физике конденсированного состояния. — 2018. — С. 209.

14. *Ridnyi, Ya. M.* Carbon-substitutional interaction in BCC iron / Ya. M. Ridnyi, A. V. Verkhovikh, A. A. Mirzoev, D. A. Mirzaev // XVI International IUPAC Conference on High Temperature Materials Chemistry. Book of abstracts. — 2018. — С. 55.

Библиографический список

1. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия / Я.С. Уманский, Ю.А. Скаков, А.Н. Иванов, Л.Н. Расторгуев. — М.: Металлургия, 1982. — Р. 632.
2. *Курдюмов, Г.В.* Превращения в железе и стали / Г.В. Курдюмов, Л.М. Утевский, Р.И. Энтин. — М.: Наука, 1977. — Р. 236.
3. *Bhadeshia, H.K.D.H.* Bainite in Steels. Transformations, Microstructure and Properties. Second Edition. / H.K.D.H. Bhadeshia. — 2001. — Р. 454.
4. *Khachaturyan, A.G.* Theory of structural transformations in solids / A.G. Khachaturyan. — Moscow, USSR, 1983. — Р. 574.
5. *Fisher, J.C.* Elastic interaction of interstitial atoms in body-centered cubic crystals / J.C. Fisher // *Acta Metallurgica*. — 1958. — Vol. 6, no. 1. — Pp. 13–18.
6. *Mou, Y.* The carbon-carbon interaction energy in alpha Fe-C alloys / Y. Mou, H.I. Aaronson // *Acta Metallurgica*. — 1989. — Vol. 37, no. 3. — Pp. 757–765.

7. *Cottrell, A.H.* Chemical Bonding in Transition Metal Carbides / A.H. Cottrell. — Institute of Materials, London, 1995. — P. 97.
8. *Domain, C.* Ab initio study of foreign interstitial atom (C, N) interactions with intrinsic point defects in α -Fe / C. Domain, C.S. Becquart, J. Foct // *Physical Review B*. — 2004. — Vol. 69. — P. 144112.
9. *Ruban, A.V.* Self-trapping of carbon atoms in α -Fe during the martensitic transformation: A qualitative picture from ab initio calculations / A.V. Ruban // *Physical Review B*. — 2014. — Vol. 90. — P. 144106.
10. Interaction between vacancies and interstitial solutes (C, N, and O) in α -Fe: From electronic structure to thermodynamic / C. Barouh, T. Schuler, C. Fu, M. Nastar // *Physical Review B*. — 2014. — Vol. 90. — P. 054112.
11. First-principles Calculation of Effects of Carbon on Tetragonality and Magnetic Moment in Fe-C System / H. Ohtsuka, V.A. Dinh, T. Ohno et al. // *ISIJ International*. — 2015. — Vol. 55, no. 11. — Pp. 2483–2491.
12. *Lobo, J.A.* Thermodynamics and Solubility of Carbon in Ferrite and Ferritic Fe-Mo Alloys / J.A. Lobo, G.H. Geiger // *Metallurgical Transactions A*. — 1976. — Vol. 7A. — Pp. 1347–1357.
13. *Oda, K.* Local interactions in carbon-carbon and carbon-M (M: Al, Mn, Ni) atomic pairs in FCC gamma-iron / K. Oda, H Fujimura, H. Ino // *Journal Physical: Condensed Matter*. — 1994. — Vol. 6. — Pp. 679–692.
14. *Blanter, M.S.* Strain-induced interaction of dissolved atoms in γ -Fe / M.S. Blanter // *Journal of Alloys and Compounds*. — 1999. — Vol. 291. — Pp. 167–174.
15. *Надутов, В.М.* Межатомное взаимодействие и распределение атомов внедрения в железо-азотистых и железо-углеродистых сплавах / В.М. Надутов. — Автореферат дис. д-ра физ.-мат. наук, 1996. — P. 55.
16. *Пономарёва, А.В.* Энергия взаимодействия примесей углерода в парамагнитном γ -железе / А.В. Пономарёва, Ю.Н. Горностырёв, И.А. Абрикосов // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. — 2015. — Vol. 147, no. 4. — Pp. 827–836.
17. *Alex, K.* The application of kirkwood expansions to binary interstitial solutions / K. Alex, R.B. McLellan // *Acta Metallurgica*. — 1971. — Vol. 19, Iss. 5. — Pp. 439–443.

18. First-principles study of helium, carbon, and nitrogen in austenite, dilute austenitic iron alloys, and nickel / D.J. Hepburn, D. Ferguson, S. Gardner, G.J. Ackland // *Physical Review B*. — 2013. — Vol. 88. — P. 024115.
19. Special quasirandom structures / A. Zunger, S.-H. Wei, L.G. Ferreira, J.E. Bernard // *Physical Review Letters*. — 1990. — Vol. 65, no. 3. — Pp. 353–356.
20. *Alex, K.* A statistical mechanical calculation of the thermodynamic properties of interstitial solid solutions involving second nearest neighbor interactions / K. Alex, R.B. Mclellan // *Acta Metallurgica*. — 1972. — Vol. 20, no. 1. — Pp. 11–18.