На правах рукописи

Чирков Павел Владимирович

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПЕРЕРАСПРЕДЕЛЕНИЯ УГЛЕРОДА В РЕШЕТКЕ МАРТЕНСИТА FE-C ПРИ ВЫДЕРЖКЕ И НАГРУЖЕНИИ

01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Челябинск – 2017

Работа выполнена на кафедре "Компьютерное моделирование и нанотехнологии ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (НИУ)».

Научный руководитель:	Мирзоев Александр Аминулаевич, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (НИУ)»;
Официальные оппоненты:	Дремов Владимир Владимирович, доктор физико-математических наук, Отделение физических и математических моделей, ФГУП «Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. Е.И. Забабхина», заместитель начальника ;
	Русаков Герман Михайлович, кандидат физико-математических наук, доцент, Лаборатория физического металловедения, ФГБУН «Институт физики металлов им. М.Н. Михеева» УрО РАН, старший научный сотрудник.
Ведущая организация –	ФГБУН «Институт металлургии» Уральского отделения РАН.

Защита состоится 20 декабря 2017 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/chirkov-pavel-vladimirovich.

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 «____» _____ 2017 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
кандидат физико-математических наук, доцент Морозов С.И.

Общая характеристика работы

Актуальность работы. Железо и его сплавы с углеродом (стали) являются важнейшими материалами современной техники [1]. Поэтому понятна заинтересованность инженеров в создании новых материалов на основе железа, обладающих улучшенными свойствами. Однако разработка новых перспективных материалов и технологий невозможна без понимания природы физико-химических свойств металлов и их сплавов на атомном уровне и процессов, происходящих в их объеме. Особое внимание исследователей привлекает к себе мартенситный переход, лежащий в основе закалки стали, протекающий при резком охлаждении ГЦК-фазы сплава железа с углеродом.

Экспериментальные исследования, впервые проведенные Г.В. Курдюмовым и др. [2], показали, что при мартенситном переходе происходит сдвиговая перестройка кристаллической решетки, в результате которой образуется особая тетрагональная структура, представляющая собой немного растянутую вдоль одной оси [001] и сжатую по осям [100] и [010] ОЦК-решетку железа. Для объяснения механизма образования тетрагональности мартенсита К. Зинером [3] была создана теория коллективного деформационного взаимодействия атомов углерода, развитая затем А.Г. Хачатуряном [4, 5], в основе которой лежит идея о выборочном заполнении атомами углерода одной из трех подсистем октаэдрических междоузлий кристаллической решетки. Ключевым параметром данной теории стала величина деформационного взаимодействия между внедренными в решетку атомами углерода $\lambda_2(0)$. В связи с широким практическим использованием легированных сталей особый интерес представляет изучение влияния содержания некоторых элементов на перераспределение углерода и значение параметра деформационного взаимодействия углерода.

Так как образование тетрагональности вызвано перераспределением атомов углерода, тогда должно быть справедливо и обратное — при сжатии образца, например, при действии внешних напряжений, должно происходить перераспределение углерода в кристаллической решетке. Исследованию данной проблемы посвящены работы М.А. Штремеля и соавторов [6, 7].

Общей проблемой упомянутых выше теоретических подходов является отсутствие описания процессов, происходящих в мартенсите на атомистическом уровне. Экспериментальные исследования мартенситного превращения является очень затратными и ограниченными в своих возможностях, поэтому оптимальным методом исследования упорядочения углерода является компьютерное моделирование. Метод молекулярной динамики (МД) как раз позволяет наблюдать на атомном уровне процессы, протекающие во времени и при конечной температуре. Однако ключевой проблемой МД-моделирования является определение сил межатомного взаимодействия. Обычно использу-

ется приближение парного потенциала, которое является недостаточным для описания металлических систем [8]. Расчет же энергий на основе теории функционала плотности (DFT) значительно ограничивает число рассматриваемых атомов (<1000) и время моделирования. Компромиссными с точки зрения точности и вычислительной сложности представляются хорошо зарекомендовавшие себя потенциалы на основе метода погруженного атома (EAM).

Основной целью данной работы являлось изучение методами компьютерного моделирования упорядочения углерода в мартенсите Fe-C в стадии двухфазного распада до начала карбидообразования. Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Разработать и реализовать методику МД моделирования тетрагонального искажения решетки мартенсита Fe-C, при различных содержаниях углерода.
2. Провести детальное молекулярно-динамические моделирование процессов перераспределения углерода для различных температур под влиянием внешних напряжений.

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

1. Разработана методика МД моделирования мартенсита Fe-C с использованием EAM потенциалов.
2. С помощью метода молекулярной динамики уточнено значение параметра деформационного взаимодействия атомов углерода в решетке железа $\lambda_2(0)$.
3. Впервые проведено атомистическое моделирование процесса отпуска мартенсита на стадии двухфазного распада, определена ориентация и геометрические размеры областей с повышенным содержанием углерода.
4. Предложен уточненный вариант теории К. Зинера для описания влияния внешних напряжений на упорядочение углерода в системе Fe-C. Выводы теории подтверждены молекулярно-динамическим моделированием. Впервые показано, что величина критического напряжения σ_{cr}, приводящего к переориентации оси тетрагональности, лежит в области практически достижимых значений. Показано также, что σ_{cr} линейно возрастает как функция содержания углерода в сплаве и линейно убывает с ростом температуры.
5. Впервые найдено,что легирование кремнием приводит к снижению величины параметра деформационного взаимодействия $\lambda_2(0)$ на ≈ 20 %, а также к уменьшению степени тетрагональности.

Научная и практическая ценность диссертационной работы состоит в следующем. Развитый на основе метода молекулярной динамики подход существенно детализирует понимание механизмов образования тетрагональности в мартенсите системы Fe-C, а также влияния на него внешних напряжений и примесей замещения. Предложенная методика может служить основой для компьютерного моделирования процессов упорядочения углерода на стадии двухфазного распада сталей, а результаты исследования могут быть использованы для уточненения теории такого упорядочения. В частности показано, что при описании влияния внешних напряжений на степень тетрагональности мартенсита в теории Зинера поиск экстремума свободной энергии необходимо дополнить анализом термодинамической устойчивости системы. Обнаруженный эффект переброса оси тетрагональности в кристалле мартенсита при действии внешних напряжений может быть важен для теории пластической деформации стали. Полученные данные о влиянии кремния на свойства мартенсита 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: XIII Международная конференция "Забабахинские научные чтения"(г. Снежинск, 2017), Международная научно-практическая конференция «Инновационные технологии в материаловедении и машиностроении» (г. Пермь, 2016); Международная конференция XVIII Харитоновские тематические научные чтения «Проблемы физики высоких плотностей энергии» (г. Саров, 2016); XIV Российская конференция «Строение и свойства металлов и шлаковых расплавов» (г. Екатеринбург, 2015); International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia (г. Нижний Новгород, 2015); XI Российской ежегодной конференции молодых научных сотрудников и аспирантов «Физико-химия и технология неорганических материалов» (г. Москва, 2014); International Conference on Martensitic Transformations-2014 (г. Бильбао, Испания, 2014); Всероссийская научная конференция студентов физиков и молодых ученых «ВНКСФ-19» (г. Архангельск, 2013); 10-ый Российский симпозиум «Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах» (г. Новый Афон, 2012).

Часть разделов данной работы были выполнены в рамках реализации грантов РФФИ № 14-03-00618-а и № 10-03-00295-а, гранта РНФ № 16-19-10252.

Публикации Материалы диссертации опубликованы в 21 печатной работе, в том числе 6 статей в журналах из списка ВАК, 5 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. Получен-

ные 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 2011-2017 гг. Работа выполнена в Южно-Уральском государственном университете на Физическом факультете на кафедре Компьютерного моделирования и нанотехнологий. В получении всех представленных в диссертации результатов автор принимал непосредственное участие. Подготовка к публикации полученных результатов 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 115 страниц, работа содержит 67 формул, 31 рисунков, 6 таблиц и список литературы, включающий 134 наименования.

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 тетрагональности мартенсита Fe-C. Отмечается, что Г.В. Курдюмову [2] с соавторами впервые удалось определить зависимости параметров решетки от концентрации углерода. Тетрагональное искажение решетки Fe-C мартенсита связано с тем, что октапоры в ОЦК-Fe сплюснуты вдоль одного из трех направлений ребер ячейки, и при внедрении атома углерода происходит расширение только вдоль одной оси, поэтому следует различать октапоры типа X, Y или Z, а также соответствующие подрешетки атомов внедрения.

В главе также описывается термодинамическая теория упорядочения в твердых растворах внедрения, представленная в работах К. Зинера и А.Г. Хачатуряна [3, 9]. Данная теория очень похожа на модель эффективного поля в теории ферромагнетизма. В ней предполагается, что атомы углерода, попавшие в z-октапоры, создают эффективное растягивающее напряжение вдоль этой оси, которое заставляет остальные атомы также располагаться в z-порах. В основе теории лежит понятие параметра порядка, который имеет

вид:

$$\eta = \frac{n_C^z - \frac{1}{3}n_C}{\frac{2}{3}n_C}, \tag{1}$$

где n_C — общее число атомов углерода, а n_C^z — число атомов, находящихся в z-октапорах. Когда углерод равномерно распределен между подрешетками внедрения $\left(n_C^x = n_C^y = n_C^z = \frac{1}{3}n_C\right)$, то $\eta = 0$, что соответствует разупорядоченному состоянию мартенсита. При заполнении же атомами углерода только октапор Z типа, т.е. $n_C^z = n_C$, выражение 1 показывает наличие порядка с $\eta = 1$.

Далее записывается выражение для свободной энергии системы $F(\eta, c, T)$ как функции концентрации c, температуры T, а также параметра порядка η. Тогда равновесное распределение углерода достигается при минимуме свободной энергии, из равенства нулю производной по параметру порядка, откуда можно получить выражение для определения η:

$$-\frac{kT}{c\lambda_2(0)} = \frac{\eta}{\ln\frac{1+2\eta}{1-\eta}}, \tag{2}$$

где $\lambda_2(0)$ представляет собой параметр деформационного взаимодействия атомов углерода. Из данного выражения следует, что для стали с определенным содержанием углерода при температурах выше критической:

$$T_{\text{cr}} = 0,36\frac{c\lambda_2(0)}{k_B} \tag{3}$$

стабильным является неупорядоченное состояние $\eta = 0$ с кубической решеткой, а при более низких температурах стабильной становится фаза с тетрагональным состоянием.

Определив из выражения (2) значение параметра порядка η при заданных c и T, можно получить [10] зависимости параметров решетки от содержания углерода при некоторой температуре:

$$a = b = a_0\left[1 + (2L_{xx} + L_{zz})\cdot c - \frac{1}{3}c\eta\left(L_{zz} - L_{xx}\right)\right], \tag{4}$$

$$c = a_0\left[1 + (2L_{xx} + L_{zz})\cdot c + \frac{2}{3}c\eta\left(L_{zz} - L_{xx}\right)\right], \tag{5}$$

где величины L_{xx} и L_{zz} есть компоненты тензора концентрационного расширения [9], a_0 — параметр недеформированной ОЦК-решетки железа.

Таким образом, представленная теория Зинера-Хачатуряна обосновывает появление тетрагональности мартенсита при конечных температурах,

а также предсказывает возникновение разупорядочения углерода и появление мартенсита с кубической решеткой. Основным параметром данной теории является величина параметра деформационного взаимодействия углерода $\lambda_2(0)$. Отмечается существенный разброс результатов расчета параметра деформационного взаимодействия углерода $\lambda_2(0)$ от $2,73$ [10] до $9,5$ эВ/атом [11], полученных в работах А.Г. Хачатуряна и других авторов.

Отмечено, что хотя теория Зинера-Хачатуряна и объяснила механизм образования тетрагонального искажения решетки и его сохранение при комнатных температурах, атомистическое описание перераспределения углерода в решетке мартенсита до сих пор отсутствует. Делается вывод, что компьютерное моделирование методом молекулярной динамики является оптимальным для исследования мартенситного превращения в системе Fe-C. В заключение формулируются цель и задачи диссертации.

Во второй главе описаны инструменты и методики моделирования, применявшиеся при выполнения диссертационного исследования. Представлены основы метода молекулярной динамики (МД), описан используемый в работе программный пакет LAMMPS. Особое внимание уделяется проблеме определения межатомного потенциала межчастичного взаимодействия. Отмечается, что приближение парного потенциала плохо воспроизводит основные характеристики сплавов на основе железа, поэтому предлагается использование потенциалов погруженного атома (EAM), в которых учитывается вклад электронной подсистемы. Было рассмотрено несколько [12–14] существующих наборов потенциалов для системы Fe-C, отмечается особая важность использования данных первопринципного моделирования при разработке потенциалов. Также найдено, что не все рассмотренные потенциалы корректно воспроизводят данные о взаимодействии пары атомов углерода, внедренных в ОЦК-железо. Кроме того, некоторые из предложенных потенциалов не в состоянии корректно описать экспериментальную зависимость степени тетрагональности мартенсита от сождержания углерода. С учетом вышеизложенного определяется, что для дальнейших расчетов оптимальным выбором является потенциал, предложенный в работе T. Lau [12].

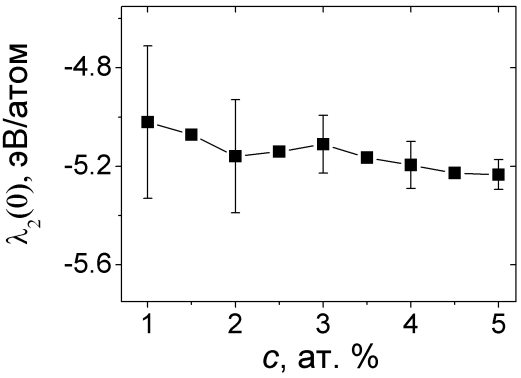

Рис. 1. Значения параметра деформационного взаимодействия $\lambda_2(0)$ для различного содержания углерода.

В третьей главе изучается динамика перераспределения углерода в мартенсите Fe-C с помощью МД моделирования.

В параграфе 3.1 приведен расчет основного параметра теории упорядочения Зинера-Хачатуряна — энергии деформационного взаимодействия $\lambda_2(0)$ с помощью формулы, вытекающей из выражения для свободной энергии $F(\eta, c, T)$ при температуре 0 К и последовательном рассмотрении упорядоченного состояния с $\eta = 1$ и энергией системы E_z и неупорядоченного ($\eta = 0$ с энергией E_{xyz}):

$$\lambda_2(0) = 3 \cdot \frac{E_z - E_{xyz}}{Nc^2}, \tag{6}$$

где N — число атомов железа в рассматриваемой системе, а c — содержание углерода. Расчет энергий E_{xyz} и E_z производился методом минимизации энергии суперячейки, представляющей собой ОЦК-решетку железа, которая содержала 30x30x30 трансляций элементарной ячейки. Наряду со структурной оптимизацией проводилась релаксация объема путем изменения размеров суперячейки вдоль каждого направления независимым образом, таким образом допуская появление тетрагональности. При вычислении E_{z} атомы углерода случайно распределялись по октапорам Z-типа , а для расчета E_{xyz} по всем трем подрешеткам x, y и z так, чтобы $n_{\mathrm{C}}^x = n_{\mathrm{C}}^y = n_{\mathrm{C}}^z = n_{\mathrm{C}}/3$.

Указанные энергии усреднялись по 100 случайным конфигурациям, значения параметра $\lambda_2(0)$ при различных концентрациях углерода представлены на рис. 1. Суперячейка содержала 54 000 атмов железа в ОЦК-решетке, нами тестировались системы и большего размера, но указанного числа частиц достаточно для достижения необходимой точности. Из рисунка видно, что значения параметра деформационного взаимодействия слабо зависят от концентрации, что согласуется с теорией Зинера-Хачатуряна, где данный параметр является постоянной величиной. Полученное значение $\lambda_2(0) = -5,2$ эВ/атом вполне согласуется со значением $-6,38$ А. Удянского [11], полученным на основе данных первопринципного моделирования.

В параграфе 3.2 приведены результаты молекулярно-динамического моделирования упорядочения углерода. Для этого исследуемая система рассматривалась в NPT ансамбле на протяжении $0,5$–1 мкс (500–1000 млн. шагов). Характер изменения рассчитанных параметров решетки после выдержки при $T = 500$ К в диапазоне концентраций углерода 1−5 ат. % изображен на рис. 2 а), где представлены данные МД моделирования и результаты упорядочения теории Зинера-Хачатуряна. При содержании углерода до $2,75$ ат. % получен кубический мартенсит в котором $a = b = c$, а доли атомов C, находящихся в октапорах типов X, Y, Z, также равны. При концентрации $3,2$ ат. % начинается резкий подъем параметра c и снижение a, т.е. октапоры типа Z становятся предпочтительными для заполнения, что указывает на наличие перехода беспорядок-порядок. Из рис. 2 а) видно также, что результаты моделирования хорошо согласуются теоретическими кривыми, рассчитаными на основе выражений (4, 5).

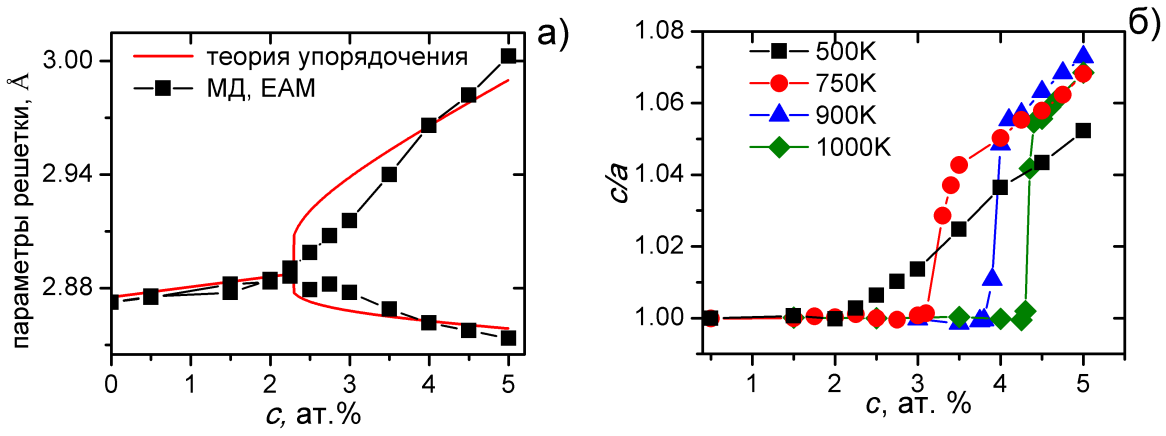

Рис. 2. Сравнение концентрационных зависимостей параметров решетки мартенсита при температуре 500 К для результатов теории упорядочения и моделирования (а). Степень тетрагональности мартенсита c/a в зависимости от концентрации углерода для различных температур полученные из МД-расчетов(б).

Результаты для аналогичных расчетов с разными значениями параметров T и c представлены на рис. 2 б), где изображены концентрационные зависимости степени тетрагональности (отношение параметров решетки c/a). Для всех кривых в области небольших концентраций наблюдается мартенсит с кубической решеткой, затем по мере увеличения содержания углерода для всех температур наблюдается скачок c/a от 1 до некоторого значения, что связано с переходом атомами углерода из неупорядочного состояния в упорядоченное с заполнением только одной z-подрешетки. Причем видно, что характер кривой для 500 К несколько отличается от других отсутствием области резкого подъема степени тетрагональности. Данный факт, по-видимому, связан с ограниченным временем моделирования. Диффузия при $T = 500$ К углерода замедляется настолько, что система не успевает прийти в разупорядоченное состояние из начального упорядоченного. Это указывает на ограничение возможностей нашей методики в области более низких температур, где приходится резко увеличивать число шагов моделирования.

По зависимостям представленными на рис. 2 можно определить критические концентрации углерода c_{cr}, при которых происходит переход порядок-беспорядок в мартенсите для заданной температуры. Затем при использовании полученного из теории Зинера-Хачатуряна выражения (3) можно рассчитать параметр деформационного взаимодействия. Для всех четырех температур значения этого параметра оказались $\lambda_2(0) = 5,6 \pm 0,1$ эВ/атом, что немного отличается от величины, полученной в предыдущем разделе методом минимизации энергии, это обусловлено, по нашему мнению, влиянием ближнего порядка в расположении атомов углерода на энергию E_z.

Итак, полученные результаты атомистического моделирования полностью подтверждают теорию упорядочения Зинера-Хачатуряна, согласно кото-

рой с ростом температуры должно наблюдаться перераспределение углерода и упорядоченное состояние с тетрагональной решеткой сменяется неупорядоченным с кубической структурой.

В параграфе 3.3 описывается моделирование кластеризации углерода в решетке мартенсита при повышенных температурах. Найдено что, атомы углерода после выдержки при значительных температурах (750–1000 K) образуют упорядоченные состояния в виде плоскоских областей с направлением (102) относительно решетки железа. Данная картина представлена на рис. 3, где изображены атомы углерода, а кристаллическая решетка железа не показана для наглядности. При более низких температурах из-за снижения скорости диффузии изучение процессов кластеризации становится затруднительным. Как видно из рис. 3 в процессе кластреообразования возникают узкие плоские области, в которых углерод почти отсутствует (области A), а также части решетки с повышенным содержанием углерода (B). Результаты проведенного моделирования согласуются с данными экспериментов [15–18], где наблюдалась аналогичная картина кластеризации углерода. В работах [17, 18] наблюдалось образование кластеров углерода вдоль плоскостей с ориентацией (102), в то время как в работах [15, 16] плоскости имеют индекс (103).

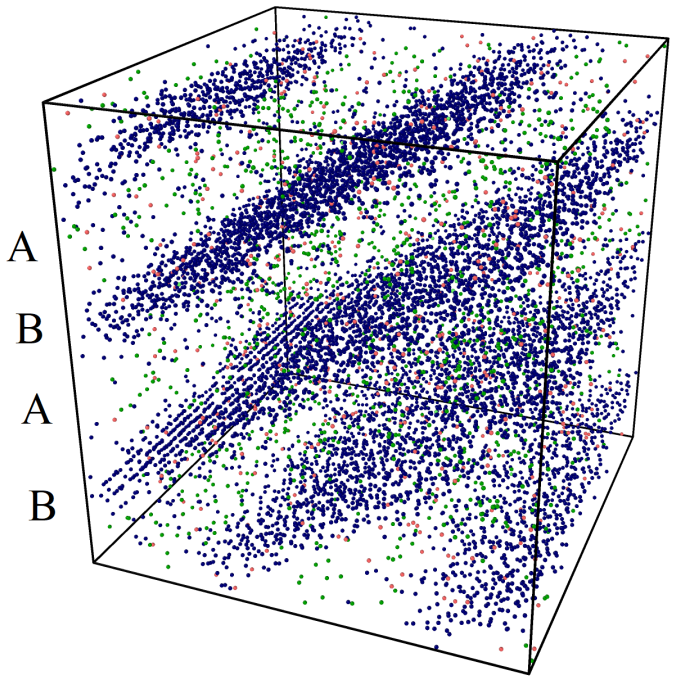

Рис. 3. Внешний вид кластеров, образующихся во время выдержки при повышенных температурах. Изображены только атомы углерода, кристаллическая решетка не показана.

Содержание углерода при всех моделированиях было равным $4,5$ ат. %, температура в системе поддерживалась постоянной. Были проведены расче-

ты для различных размеров суперячейки, содержащих вплоть до 500 тыс. атомов железа с размером ребра куба ≈ 2 нм. Согласно результатам, толщина плоских областей содержащих углерод оказалось постоянной (≈ 20 Å) и независящей от размера ячейки, а толщина зоны с пониженным содержанием углерода составляла 30 Å. При среднем содержании C $4,5$ ат. %, концентрация углерода внутри слоев со скоплениями углерода увеличивалась до ≈ 10 ат. %. Отметим, что подобная фаза наблюдалась в ряде экспериментов, как натурных работах [19] и модельных [20].

Четвертая глава посвящена исследованию влиянию внешних напряжений на порядок углерода в мартенсите Fe-C.

В параграфе 4.1 проведен термодинамический анализ упорядочения углерода в кристалле мартенсита, заключенном в упругую матрицу, которая в реальности, например, может являться остаточным аустенитом. Рассчитанное Хачатуряном значение $\lambda_2(0) = 2,73$ эВ/атом определяет, что для комнатной температуры тетрагональный мартенсит должен наблюдаться при концентрации углерода, превышающей $2,6$ ат. %. В действительности при концентрации от $1,1$ ат. % и выше на дифрактограммах наблюдаются размытые максимумы, которые, согласно статистическому анализу М.А. Штремеля [21], можно интерпретировать как дифракцию на смеси кубического и тетрагонального мартенсита. Чтобы дать теоретическую основу причин появления тетрагональности при более низком содержании углерода, А.Г. Хачатурян предложил [5, 10] модернизированный вариант теории упорядочения, основанный на допущении, что процессы перераспределения углерода происходят в уже сформированной структуре, что вызывает упругое сопротивление со стороны окружающих кристаллов, описываемое полем упругих напряжений. С учетом вышеизложенных предположений Хачатурян пришел к выводу, что наличие упругой среды вокруг кристалла аустенита должно приводить к исчезновению фазового перехода порядок-беспорядок, повышению параметра дальнего порядка, а также к сохранению тетрагональности при любых температурах (рис. 4а).

Однако, в данной работе отмечается, что условие равенства нулю производной недостаточно для определения минимума свободной энергии $F(\eta, c, T)$ и нахождения равновесных значений параметра порядка η. Дополнительно необходимо выполнение условия устойчивости решения:

$$\Delta F = F(\eta, \sigma, T) - F(0, \sigma, T) \leq 0, \tag{7}$$

причем границы устойчивости определяются в этом соотношении равенством. Совместное удовлетворение при решении уравнения Зинера этих двух условий позволило определить граничные значения температуры и напряжения, при которых произойдет скачкообразное изменение η (рис. 4б). На основе приведенных результатов можно сделать вывод, что "хвосты"параметра упо-

рядочения, вопреки мнению А.Г. Хачатуряна [5, 10], при $T > T_{crit}$ не возникают.

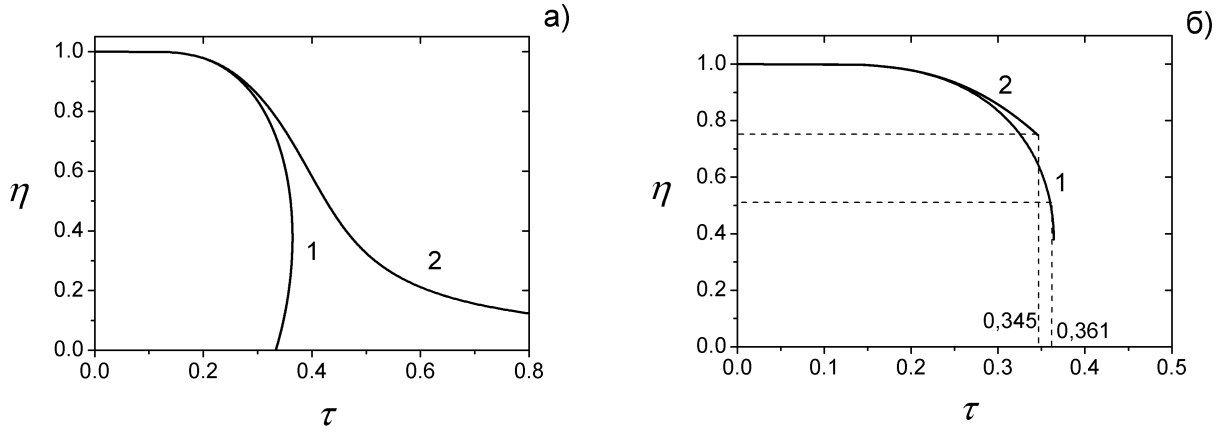

Рис. 4. Зависимость параметра порядка η от безразмерной температуры и концентрации $\tau = \frac{kT}{\lambda_2(0)c}$ без учета устойчивости тетрагнональной фазы, согласно теории Хачатуряна [10] (а) и с ее учетом (б): 1 — для свободного кристалла мартенсита ; 2 — для кристалла, заключенного в матрицу.

Тогда характер концентрационной зависимости тетрагональности мартенсита, в особенности для интервала концентрации от $1,1$ до $2,6$ ат. % C, можно объяснить не с помощью рассмотрения влияния упругой матрицы на перераспределение углерода по подрешеткам, а опираясь на полученные в данной работе, уточненную величину параметра $\lambda_2(0) = 5,6$ эВ/атом. Действительно, при таком значении энергии деформационного взаимодействия следует, что при $T = 293$ K критическая концентрация углерода, разделяющая области кубического и тетрагонального мартенсита, согласно выражению (3) равна $\approx 1,3$ ат. % .

В параграфе 4.2 рассматривалось действие одноосных напряжений, приложенных вдоль оси тетрагональности Oz, на основе теории Зинера-Хачатуряна. При этом учитывается, что при деформации решетки, вызванной перераспределением атомов углерода, будет совершаться работа против внешнего напряжения, что увеличивает энергию системы. Далее, использовав условие экстремума для свободной энергии, было получено уравнение, аналогичное выражению (2), для параметра порядка с учетом внешнего напряжения σ:

$$\frac{\lambda_2(0)\,c}{kT}\eta_{ext} + \frac{\beta_0\sigma}{2kT} - \ln\frac{1+2\eta_{ext}}{1-\eta_{ext}} = 0, \tag{8}$$

где параметр β_0 отражает изменение объема элементарной решётки сплава при упорядочении атомов углерода, значения $\sigma < 0$ соответствуют сжатию,

а $\sigma > 0$ растяжения образца. Решение данного уравнения определяет зависимость $\eta(\sigma)$ как для случая минимума, так и максимума свободной энергии упорядоченного состояния. Поэтому функцию $\eta_{ext}(\sigma, c, T)$ будем называть "экстремальной а соответствующие графики зависимости при будем называть "экстремальными кривыми.

Полученные из уравнения (8) зависимости $\eta = \eta_{ext}(\sigma, c, T)$ не обязательно обеспечат наименьшее значение свободной энергии упорядоченного состояния по сравнению с неупорядоченным при $\eta = 0$. Следовательно, необходим анализ устойчивости тетрагональной структуры, условие которой можно отразить неравенством (7). Заменив знак на равенство и выполнив очевидные преобразования было получено выражение:

$$\frac{\beta_0 \sigma}{2kT} = \ln \frac{1 + 2\eta_{eq}}{1 - \eta_{eq}} + \frac{\ln (1 - \eta_{eq})^2 (1 + 2\eta_{eq})}{\eta_{eq}}. \tag{9}$$

Поэтому для нахождения минимума свободной энергии $F(c, \sigma, T, \eta)$ необходимо совместное численное решение уравнений (8, 9).Было найдено, что, при рассмотрении случая постоянных температур и фиксированного содержания углерода, при действии сжимающего напряжения функция $\eta = \eta_{ext}(\sigma, c, T)$ является равновесной только до определенного значения σ_{cr}, по достижению которого параметр порядка скачкообразно уменьшается до нуля. Значение σ_{cr} является точкой относительной устойчивости и представляет собой пересечение кривых (8, 9), как это показано на рис. 4.

Таким образом полученные оценки для критического напряжения, при котором должно происходить разупорядочение углерода, значительно отличаются от предыдущих результатов М.А. Штремеля [6], в которых значение σ_{cr} было отнесено к точкам абсолютной устойчивости, и представляются реально достижимым на практике значениям. Отметим, что в случае увеличения растягивающих напржений праметр η непрерывно возрастает и при $\sigma \to \infty$ стремиться к значению $\eta = 1$.

В параграфе 4.3 проведено молекулярно-динамическое моделирование действия одноосных напряжений на кристалл мартенсита Fe-C. Рассматривалось два случая. Первый — действие сжатия вдоль оси тетрагональности Oz и второй — растягивающее напряжение относительно оси, перпендикулярной направлению тетрагональности (Ox).

Влияние сжимающего напряжения на расположение углерода в подрешетках мартенсита показано на рис. 6, где изображены временные зависимости относительных количеств атомов углерода, находящихся в октапорах определенного типа. В зависимости от величины приложенного напряжения можно выделить следующие процессы. При относительно небольшом сжатии в 200 МПа (рис. 6 а) вследствие прикладываемого напряжения происходит сжатие решетки вдоль оси тетрагональности, которое вызывает переход ато-

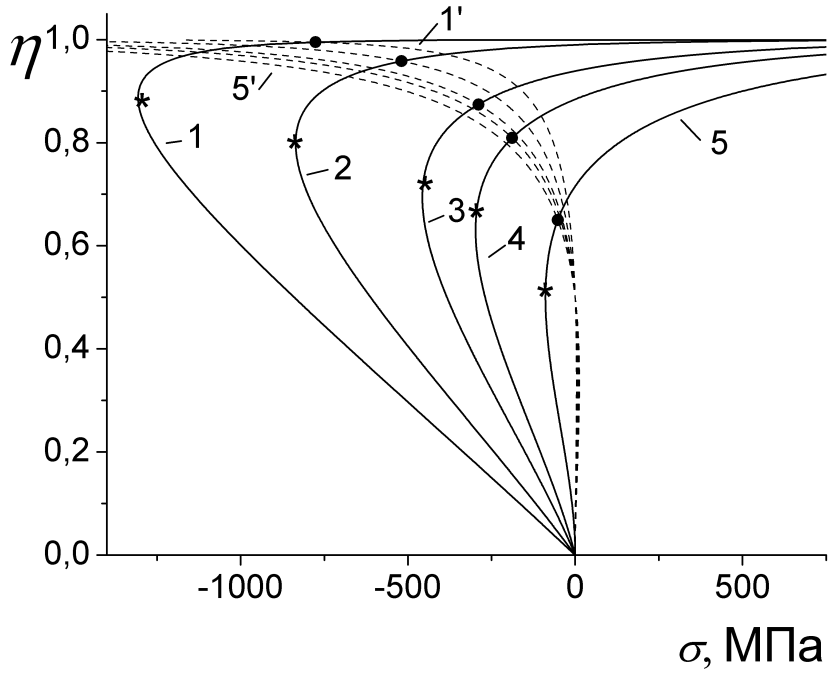

Рис. 5. Характер влияния напряжений на экстремальную (1–5) и равновесную (1'–5') степени порядка для температур 1 — 300 К, 2 — 500 К, 3 — 700 К, 4 — 800 К, 5 — 958 К. Точки абсолютной устойчивости отмечены звездами, относительной устойчивости — кругами.

мов углерода из z-октапор в междоузлия x- и y-типа. При действии большего по модулю напряжения (рис. 6 а) на начальном этапе подрешетки x и y заполняются одинаково ($n_{\mathrm{C}}^{x} = n_{\mathrm{C}}^{y}$). Однако, начиная с некоторого долевого заполнения $\approx 0,2$, одна из подрешеток продолжает заполняться, тогда как заполнение второй начинает медленно снижаться. Подрешетка с растущим заполнением поглощает все атомы углерода уходящие из z-подрешетки и вскоре вдоль данного направления в решетке возникает тетрагональность. После этого, доля атомов углерода в двух остальных подрешетках падает менее чем до $0,1$, и переброс оси тетрагональности завершается. Причем можно выделить два процесса протекающих одновременно — быстрое мартенситоподобное разрушение упорядоченного состояние относительно оси Oz и медленное диффузионное формирование нового порядка относительное другой оси.

В случае действия растягивающего напряжения σ_x наблюдается аналогичный сжатию процесс переориентации оси тетрагонального искажения решетки. Однако, в данном случае в отличие от предыдущего выбор оси нового упорядоченного неслучаен, а определяется направлением приложенного напряжения, что, очевидно, вызвано увеличением размеров октаэдрических междоузлий x-подрешетки.

Рис. 7 обобщает картину данного явления при различной величине внешних напряжений. Здесь представлены относительного числа атомов углерода

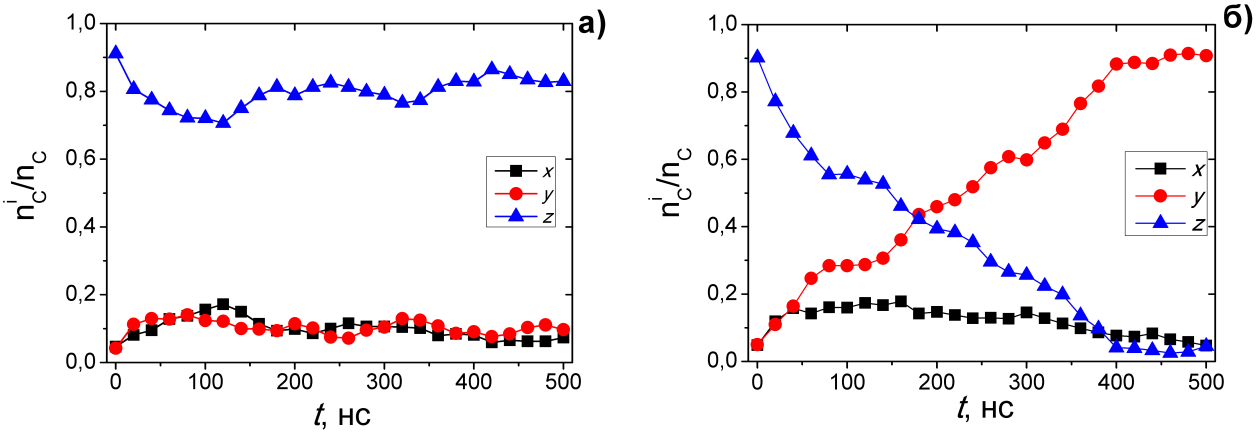

Рис. 6. Зависимости относительного числа атомов углерода находящихся в октапорах определенного типа при значениях внешнего сжимающего напряжения σ_z 200 (а) и 400 (б) МПа.

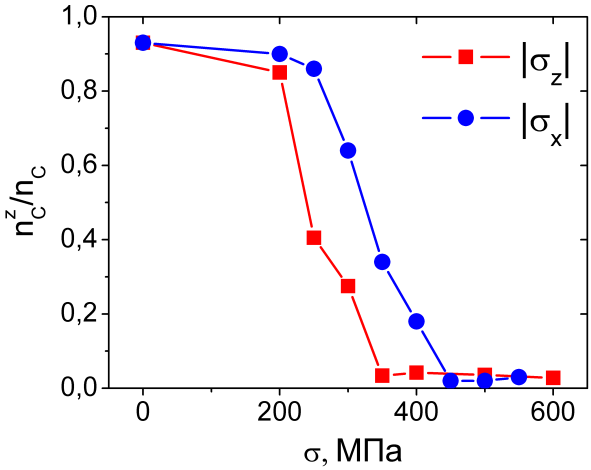

Рис. 7. Зависимости относительного числа атомов углерода находящихся в октапорах определенного типа, которое осталось в конце моделирования после приложения внешних сжимающих и растягивающих напряжений.

в z-порах, оставшихся в конце расчета при постоянном напряжение. Из рисунка видно, что при малых σ перескок порядка не происходит, однако по мере увеличения по модулю прикладываемого сжимающего напряжения происходит уменьшение величины и, по достижению определенного значения σ_{cr}, будет наблюдаться смена оси с максимальной заселенностью углеродом, а n станет близко к нулю. Величина критического напряжения рассчитывалась как середина интервала, где происходит изменение заселенности z-подрешетки. Погрешность определялась шириной этого интервала или флуктуацией давления для данного размера суперячейки (90 МПа).

Сравнение результатов теории упорядочения с рассчитанными с помощью моделирования зависимостями от температуры показано на рис. 8а), при этом содержание углерода равнялось $c = 0,045$. На рис. 8 б) представлены зависимости σ_{cr} от концентрации углерода при $= 500$ K. Теоретические

зависимости на указанных выше рисунках получены численным решением условия равновесия 9 и уравнения для экстремальной степени порядка 8 при заданных значениях T и c.

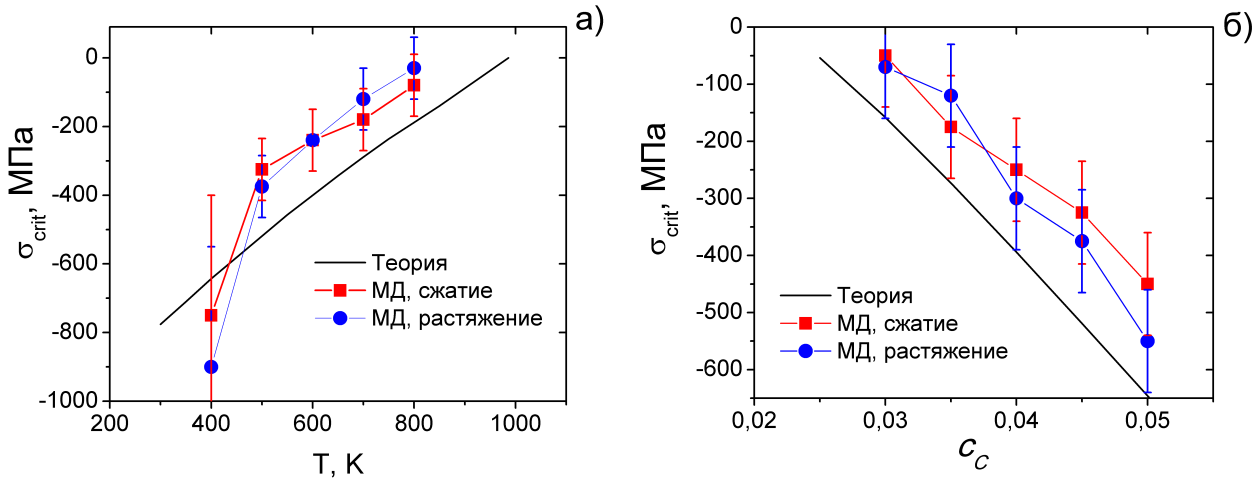

Рис. 8. Зависимости критического напряжения от температуры (а) и содержания углерода (б), полученные из теории упорядочения и молекулярно-динамического моделирования.

Итак, получено качественное согласие между результатами термодинамического анализа и данными молекулярно-динамического моделирования. Стоит отметить, что результаты моделирования для 400 K имеют меньшую точность из-за низкой скорости перескока атомов углерода при данной температуре, а дальнейшее увеличение времени счета оказывалось затруднительным. Как видно из рис. 8, результаты модельного эксперимента завышены относительно теории на некоторую величину. Вероятно это связано с тем, что при теоретическом анализе критическое значение определялось по обращению в ноль параметра порядка (равновесный критерий), тогда как при моделировании оно определялось точкой переброса оси тетрагональности (неравновесный критерий).

В **пятой главе** представлено исследование влияния примесей замещения на примере кремния на упорядочение углерода в мартенсите, что представляется важным в следствии широкого применения в настоящее время высококремнистых стале [22, 23].

В параграфе 5.1 описывается генерация межчастичных потенциалов погруженного атома для мартенсита системы Fe-Si-C, которые корректно воспроизводят данные первопринципного моделирования энергии взаимодействия между атомами кремния и углерода, находящимися на различных расстояниях в решетке α-железа.

В параграфе 5.2 приводится расчет коэффициентов диффузии углерода в феррите железа, а также показано, что добавление кремния приводит к замедлению диффузии. Моделирование степени тетрагональности мартенсита кремнистых сталей, проведенное методом молекулярной динамики поз-

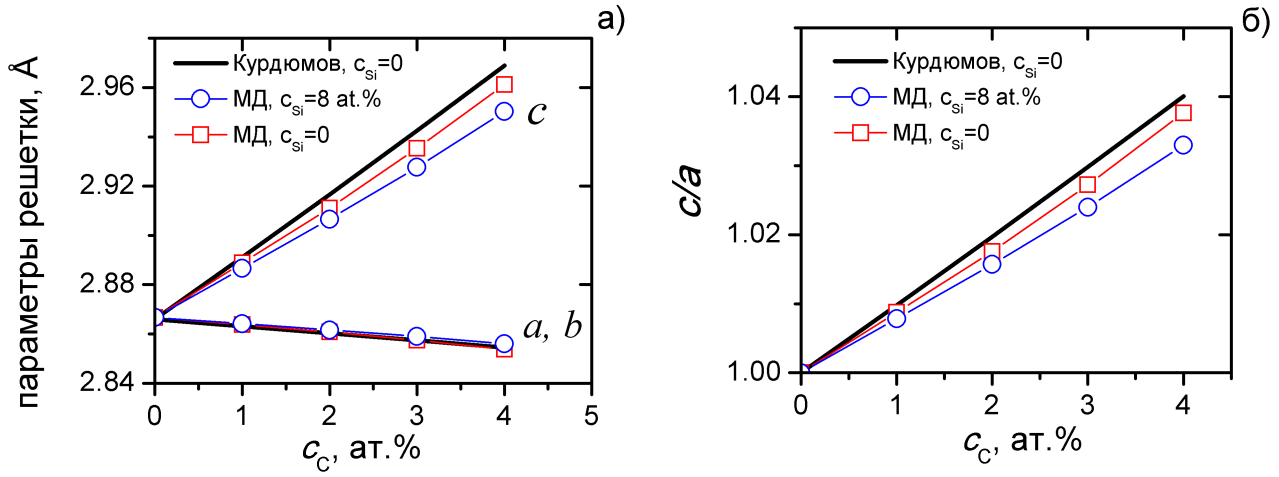

Рис. 9. Зависимости параметров решетки (а) и степени тетрагональности (б) от концентрации углерода. Представлены данные экспериментальные данные Г.В. Курдюмова и полученные моделированием с помощью EAM потенциалов для содержания кремния 0 и 8 ат. %.

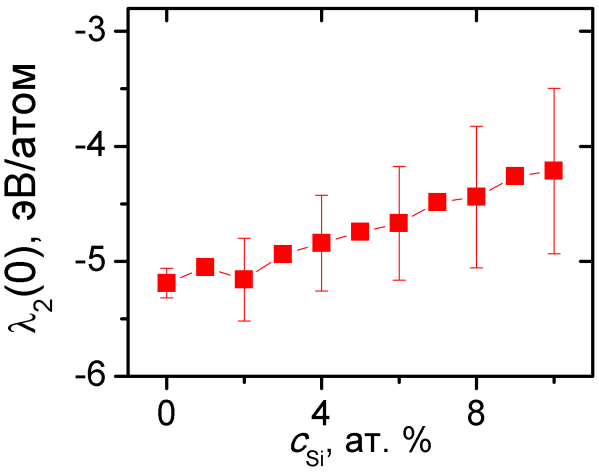

Рис. 10. Зависимость параметра деформационного взаимодействия от концентрации кремния.

волило установить, что добавки кремния в заметно уменьшают параметр c и слабо увеличивают параметр a (рис. 9). Отношение c/a понижается относительно классической кривой Курдюмова при всех содержаниях углерода. С использованием теории Зинера-Хачатуряна проведен расчет зависимости параметра деформационного взаимодействия атомов углерода в тройном растворе Fe-C-Si от содержания кремния. Увеличение концентрации Si в пределах до 10 ат. % приводит к монотонному увеличению параметра $\lambda_2(0)$ от $-5,2$ до $-4,2$ эВ/атом (рис. 10). Таким образом содержание кремния в стали, в соответствии с выражением (3), должно уменьшать критическую концентрацию углерода, для которой при комнатной температуре возникает тетрагональный мартенсит.

Заключение и основные результаты работы. Выполненная диссертационная работа посвящена систематическому изучению процессов упорядочения углерода в мартенсите системы Fe-C на стадии двухфазного распада (до начала выделения карбидов) на атомном уровне методом молекулярной динамики.

Основные результаты работы:

1. Разработана методика молекулярно-динамического моделирования упорядочения углерода в мартенсите железа на стадии двухфазного распада с использованием потенциалов межчастичного взаимодействия погруженного атома (EAM) как для случая свободного кристалла, так и в случае действия одноосных растягивающих и сжимающих напряжений. Впервые проведено молекулярно-динамическое моделирование кинетики перераспределения атомов углерода по трем октаэдрическим подрешеткам внедрения при изотермической выдержке мартенсита системы Fe-C.
2. В ходе моделирования наблюдалось перераспределение углерода по октаэдрическим междоузлиям, принадлежащим различным подрешеткам (x, $,y$, z). Результаты моделирования показали, что при определенных значениях температуры и концентрации углерода упорядоченное состояние мартенсита с тетрагональной решеткой испытывает фазовый переход второго рода (порядок-беспорядок) в состояние с кубической решеткой. Наблюдаемые процессы полностью согласуются с феноменологической теорией упорядочения Зинера-Хачатуряна.
3. Методом молекулярно-динамического моделирования проведен расчет параметра деформационного взаимодействия углерода в решетке мартенсита $\lambda_2(0)$. Полученные результаты $5,2$; $5,6$ эВ/атом вполне согласуются между собой и отличаются от значения $2,73$ эВ/атом, предложенного А.Г. Хачатуряном [4, 24].
4. Проведено уточнение влияния внешнего одноосного сжимающего напряжения вдоль оси тетрагональности на упорядочение углерода в мартенсите Fe-C в рамках термодинамической теории Зинера. Показано, что для определения равновесных значений η, соответствующих минимуму свободной энергии, условие равенства нулю производной недостаточно, необходимо совместное выполнение условия устойчивости. Согласно проведенному анализу оценка для критического напряжения, при котором происходит скачкообразное уменьшение параметра порядка до нуля, получилась в несколько раз меньше по сравнению с результатами М.А. Штремеля [6, 7, 25].
5. Для проверки предложенной теории проведено МД-моделирование, которое показало, что при действии сжимающего напряжения вдоль оси тетрагональности сначала происходит уменьшение заполняемости

z-подрешетки. При дальнейшем росте прикладываемого напряжения выше критического значения наблюдается скачкообразное уменьшение числа атомов углерода, находящихся в октапорах z-типа, до нуля, а затем формируется упорядоченное состояние вдоль оси, перпендикулярной первоначальному направлению тетрагональности. При увеличении температуры и фиксированном содержании углерода происходит уменьшение модуля критического сжимающего напряжения, в то время как с ростом концентрации углерода наблюдается уменьшение σ_{cr}. Полученная при компьютерном моделировании зависимость критического напряжения для переброса оси тетрагональности согласуется с результатами уточненной теории К. Зинера.

6. Выполнен анализ влияния примесей кремния на свойства мартенсита системы Fe-Si-C. Для этого предложен набор межчастичных потенциалов для системы Fe-Si-C, корректно воспроизводящий энергии взаимодействия атома Si с внедренным в решетку железа атомом C на различных расстояниях. Показано, что с ростом содержания кремния до 8 ат. % наблюдается уменьшение степени тетрагональности мартенсита, а также происходит снижение параметра $\lambda_2(0)$ на ≈ 20 % до значения $-4,2$ эВ/атом.

Список публикаций автора в изданиях, рекомендованных ВАК:

1. *Чирков, П. В.,* Межчастичный потенциал в системе железо-углерод и проблема мартенситного перехода. / П. В. Чирков, А. А. Мирзоев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Математика. Механика. Физика. — 2013. — Т.5. — №1. — С. 114–117.

2. *Chirkov, P. V.,* Investigation of the process of martensite tetrahedral distortion formation by molecular dynamics. / P. V. Chirkov, A. A. Mirzoev, D. A. Mirzaev // Bulletin of the South Ural State University. Series: Metallurgy. — 2014. — Т.14. — №2. — С. 54–58.

3. *Чирков, П. В.,* Тетрагональность и распределение атомов углерода в мартенсите Fe-C на основе молекулярно-динамического моделирования. / П. В. Чирков, А. А. Мирзоев, Д. А. Мирзаев // Физика Металлов и Металловедение. — 2016. — Т.117. — №1. — С. 1–8.

(*Chirkov, P. V.,* Tetragonality and the distribution of carbon atoms in the Fe–C martensite: molecular dynamics simulation. / P. V. Chirkov, A. A. Mirzoev,

D. A. Mirzaev // The Physics of Metals and Metallography. — 2016. — Т.117. — №1. — С. 34–41.)

4. *Чиков, П. В.,* Влияние внешних напряжений на тетрагональность мартенсита углеродистых сталей. / П. В. Чирков, А. А. Мирзоев, Д. А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия: Металлургия. — 2016. — Т.16. — №1. — С. 20–26.

5. *Мирзаев, Д. А.,* Отпуск мартенсита в ходе быстрого нагрева. / Д. А. Мирзаев, А. А. Мирзоев, П. В. Чирков // Вестник ЮУрГУ. Серия:: Математика. Механика. Физика. — 2016. — Т.8. — №1. — С. 61–65.

6. *Чирков, П. В.,* Роль напряжения и температуры в z-упорядочении атомов углерода в решетке мартенсита. / П. В. Чирков, А. А. Мирзоев, Д. А. Мирзаев // Физика Металлов и Металловедение. — 2016. — Т.117. — №11. — С. 1181–1187.

(*Chirkov, P. V.,* Role of stresses and temperature in the z-ordering of carbon atoms in the martensite lattice. / P. V. Chirkov, A. A. Mirzoev, D. A. Mirzaev // The Physics of Metals and Metallography. — 2016. — Т.117. — №11. — С. 1181–1187.)

Список публикаций автора в изданиях, индексируемых в Scopus и Web of Science:

1. *Chirkov, P. V.,* Molecular-dynamics simulations of carbon ordering in bcc Fe and its impact on martensite transition. / P. V. Chirkov, A. A. Mirzoev, D. A. Mirzaev // Materials Today Proceedings. — 2015. — Т.S2. — С. 553–556.

2. *Chirkov, P. V.,* On the theory of tetragonality of martensite crystals surrounded with elastic matrix. / P. V. Chirkov, A. A. Mirzoev, D. A. Mirzaev // Materials Science Forum. — 2016. — Т.843. — С. 195–200.

3. *Mirzaev, D. A.,* Ordering of carbon atoms in free martensite crystals and when enclosed in elastic matrix. / D. A. Mirzaev, A. A. Mirzoev, P. V. Chirkov // Metallurgical and Materials Transactions A. — 2016. — Т.47. — №2 — С. 637–640.

Список публикаций автора в других печатных изданиях:

1. *Чирков, П. В.,* Молекулярно-динамическое моделирование мартенсита железо-углеродных сплавов. / П. В. Чирков, А. А. Мирзоев // Тезисы докладов 10-го российского симпозиума "Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах". — 2012. — С. 8.

2. *Чирков, П. В.,* Межчастичный потенциал в системе железо-углерод и проблема мартенситного перехода. / П. В. Чирков, А. А. Мирзоев // Материалы Всероссийской научной конференции студентов физиков и молодых ученых (ВНКСФ-19). — 2013. — С. 149–150.

3. *Chirkov, P. V.,* Molecular-dynamic simulations of carbon ordering in bcc-Fe and its impact on the martensite transition. / P. V. Chirkov, A. A. Mirzoev, D. .A Mirzaev // TInternational Conference on Martensitic Transformations-2014, Abstract book. — 2014. — С. 93.

4. *Чирков, П. В.,* Расчет параметров мартенситного перехода методами атомистического моделирования. / П. В. Чирков, А. А. Мирзоев // Сборник материалов XI Российской ежегодной конференции молодых научных сотрудников и аспирантов "Физико-химия и технология неорганических материалов"(с международным участием). — 2014. — С. 183–185.

5. *Чирков, П. В.,* Взаимодействие атомов углерода в мартенсите системы железо-углерод. / П. В. Чирков, А. А. Мирзоев // Наука ЮУрГУ. Материалы 66-й научной конференции. — 2014. — С. 290–295.

6. *Чирков, П. В.,* Thermodynamics of iron carbon martensite from molecular dynamics. / П. В. Чирков, А. А. Мирзоев // International Conference on Chemical Thermodynamics in Russia: Abstracts.. — 2015. — С. 40.

7. *Чирков, П. В.,* Молекулярно-динамическое моделирование образования тетрагональности мартенсита Fe-C. / П. В. Чирков, А. А. Мирзоев, Д. А. Мирзаев // Труды XIV Российской конференции "Строение и свойства металлов и шлаковых расплавов". — 2015. — С. 301–302.

8. *Чирков, П. В.,* Моделирование методом молекулярной динамики процесса упорядочения атомов углерода в ОЦК-Fe. / П. В. Чирков, А. А. Мирзоев // Наука ЮУрГУ. Материалы 67-й научной конференции.

— 2016. — С. 183–185.

9. *Чирков, П. В.,* Молекулярно-динамическое моделирование упорядочения углерода в мартенсите стали под действием внешнего напряжения. / П. В. Чирков, А. А. Мирзоев // Тезисы международной конференции XVIII Харитоновские тематические научные чтения "Проблемы физики высоких плотностей энергии". — 2016. — С. 131–133.

10. *Чирков, П. В.,* Компьютерное моделирование диффузии углерода в мартенсите стали. / П. В. Чирков, А. А. Мирзоев // Наука ЮУрГУ. Материалы 68-й научной конференции. — 2016. — С. 107–112.

11. *Чирков, П. В.,* Атомистическое моделирование упорядочения углерода в мартенсите стали под действием внешних напряжений. / П. В. Чирков, А. А. Мирзоев, Д. А. Мирзаев // Материалы 3-й международной научно-практической конференции "Инновационные технологии в материаловедении и машиностроении". — 2016. — С. 162–165.

12. *Чирков, П. В.,* Исследование методом молекулярной динамики влияния внешнего напряжения на упорядочение углерода в мартенсите. / П. В. Чирков, А. А. Мирзоев, Д. А. Мирзаев // Материалы XIII Международной конференции "Забабахинские научные чтения". — 2017. — С. 162–165.

Библиографический список

1. *Krauss, George.* Steels: processing, structure, and performance / George Krauss. — Asm International, 2015.

2. *Kurdumoff, G. V.* X-ray studies of the structure of quenched carbon steel / G.V. Kurdumoff, E.G. Kaminsky // *Nature.* — 1928. — Vol. 122. — Pp. 475–476.

3. *Zener, C.* Theory of strain interaction of solute atoms / C. Zener // *Physical Review.* — 1948. — Vol. 74, no. 6. — P. 639.

4. *Хачатурян, А.Г.* К теории упорядочения атомов углерода в кристалле мартенсита / А.Г. Хачатурян, Г.А. Шаталов // *Физика Металлов и Металловедение.* — 1971. — Vol. 32, no. 1-С. — Pp. 5–13.

5. *Хачатурян, А.Г.* Углерод в мартенсите стали. Несовершенства кристаллического строения и мартенситные превращения / А.Г. Хачатурян. — Наука, 1971.

6. *Штремель, М.А.* Кинетика растворов упорядочения / М.А. Штремель, Ф.Ф. Сатдарова // *Физика Металлов и Металловедение.* — 1971. — Vol. 13, no. 4. — Pp. 1003–1011.

7. *Штремель, М.А.* Влияние напряжений на порядок в твердых растворах / М.А. Штремель, Ф.Ф. Сатдарова // *Физика Металлов и Металловедение.* — 1972. — Vol. 34, no. 4-6. — Pp. 699–708.

8. *Yip, Sidney.* Handbook of Materials Modeling / Sidney Yip. — Springer Science & Business Media, 2007.

9. *Khachaturyan, A.G.* Theory of structural transformations in solids / A.G. Khachaturyan. — Courier Corporation, 2013.

10. *Хачатурян, А.Г.* Теория фазовых превращений и структура твердых растворов / А.Г. Хачатурян. — ФМЛ, 1974.

11. Orientational ordering of interstitial atoms and martensite formation in dilute fe-based solid solutions / A. Udyansky, J. Von Pezold, A. Dick, J. Neugebauer // *Physical Review B.* — 2011. — Vol. 83, no. 18. — P. 184112.

12. Many-body potential for point defect clusters in Fe-C alloys / T.T. Lau, C.J. Först, X. Lin et al. // *Physical Review Letters.* — 2007. — Vol. 98, no. 21. — P. 215501.

13. Atomistic modeling of an Fe system with a small concentration of C / C.S. Becquart, J.M. Raulot, G. Bencteux et al. // *Computational Materials Science.* — 2007. — Vol. 40, no. 1. — Pp. 119–129.

14. *Henriksson, K.O.E.* Simulations of cementite: An analytical potential for the Fe-C system / K.O.E. Henriksson, K. Nordlund // *Physical Review B.* — 2009. — Vol. 79, no. 14. — P. 144107.

15. *Усиков, М.П.* Электронно-дифракционное исследование начальных стадий распада углеродистого мартенсита / М.П. Усиков, В.И. Иконников, Л.М. Утевский // *Физика Металлов и Металловедение.* — 1975. — Vol. 40, no. 5. — Pp. 1026–1031.

16. *Усиков, М.П.* Структурные превращения при низком отпуске углеродистого мартенсита / М.П. Усиков, А.Г. Хачатурян // *Физика Металлов и Металловедение.* — 1977. — Vol. 43, no. 3. — Pp. 554–561.

17. *Sandvik, B.P.J.* Direct observations of carbon clusters in a high-carbon martensitic steel / B.P.J. Sandvik, C.M. Wayman // *Metallography.* — 1983. — Vol. 16, no. 4. — Pp. 429–447.

18. Crystallographic study of the tempering of martensitic carbon steel by electron microscopy and diffraction / S. Nagakura, Y. Hirotsu, M. Kusunoki et al. // *Metallurgical and Materials Transactions A.* — 1983. — Vol. 14, no. 6. — Pp. 1025–1031.

19. *Olson, G.B.* Martensite, a tribute to morris cohen, asm international: Tech. rep. / G.B. Olson, W.S. Owen: ISBN 0-87170-434-X, 1992.

20. Molecular dynamics study of the ordering of carbon in highly supersaturated α-Fe / C.W. Sinclair, M. Perez, R.G.A. Veiga, A. Weck // *Physical Review B.* — 2010. — Vol. 81, no. 22. — P. 224204.

21. *Штремель, М.А.* Рентгеноструктурный анализ поликристаллов углеродистого мартенсита / М.А. Штремель, Л.М. Капуткина // *Физика Металлов и Металловедение.* — 1971. — Vol. 32, no. 4-6. — P. 991.

22. *Bhadeshia, H.K.D.H.* Bainite in silicon steels: new composition–property approach part 1 / H.K.D.H. Bhadeshia, D.V. Edmonds // *Metal Science.* — 1983. — Vol. 17, no. 9. — Pp. 411–419.

23. *Bhadeshia, H.K.D.H.* Bainite in steels / H.K.D.H. Bhadeshia, Institute Of Materials. — Institute of Materials London, 1992.

24. *Kurdjumov, G.V.* Nature of axial ratio anomalies of the martensite lattice and mechanism of diffusionless γ? α transformation / G.V. Kurdjumov, A.G. Khachaturyan // *Acta Metallurgica.* — 1975. — Vol. 23, no. 9. — Pp. 1077–1088.

25. Деформация решетки α-железа при внедрении углерода / М.А. Штремель, Л.М. Капуткина, С.Д. Прокошин, Ю.А. Крупин // *Физика Металлов и Металловедение.* — 1983. — Vol. 57, no. 6. — Pp. 1222–1225.