

# ВЛИЯНИЕ ЭНЕРГИЙ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ АТОМАМИ УГЛЕРОДА В ГЦК-ЖЕЛЕЗЕ НА КОНЦЕНТРАЦИОННУЮ ЗАВИСИМОСТЬ АКТИВНОСТИ УГЛЕРОДА

Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск

В программном пакете WIEN2k проведён расчёт из первых принципов энергий взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе. Они составили  $E_1 = 0,06$  эВ,  $E_2 = 0,1$  эВ и  $E_3 = 0,005$  эВ (энергии взаимодействия между атомами углерода, находящимися в первой, второй и третьей координационных сферах подрешётки ГЦК-железа). Для расчётов использовался полнопотенциальный метод линейных присоединённых плоских волн LAPW с учетом обобщенного градиентного приближения PBE-GGA в суперячейке из 32 атомов железа с периодическими граничными условиями. Это наиболее точный метод, используемый в рамках теории функционала плотности.

Для проверки достоверности найденных значений энергий на их основе методом Монте-Карло построена концентрационная зависимость активности углерода в ГЦК-железе. Показано хорошее качественное согласие кривой активности, полученной при использовании найденных значений энергий взаимодействия С–С, с экспериментальной кривой, что говорит о достоверности полученных параметров взаимодействия и адекватности использованной модели парамагнитного состояния. Использование данных о взаимодействии в третьей координационной сфере не влияет существенно на результаты расчета. Это объясняется очень низким значением энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе в третьей координационной сфере.

*Ключевые слова:* первопринципное моделирование; ГЦК-железо; примеси углерода; Монте-Карло; WIEN2k.

## Введение

Сплавы на основе системы железо–углерод, несмотря на развитие производства пластмасс, керамики, композитов, остаются основными конструкционными материалами. Железо является полиморфным металлом [1, 2]: при нагревании выше  $911$  °С низкотемпературное  $\alpha$ -железо с ОЦК решеткой превращается в  $\gamma$ -железо с ГЦК решеткой. Углерод растворяется в обеих фазах железа, так что при температурах выше  $723$ – $911$  °С существует аустенит – раствор углерода в  $\gamma$ -Fe, ниже этого интервала возникает феррит – раствор углерода в  $\alpha$ -Fe [2].

В условиях быстрого охлаждения аустенита, когда диффузия углерода подавлена, происходит бездиффузионное мартенситное превращение, при котором все атомы углерода переходят в решетку мартенсита, а последняя, хотя и похожа на решетку  $\alpha$ -железа, но имеет слабую тетрагональность [1–3]. Возникновение тетрагональности и бездиффузионный характер мартенситного ГЦК-ОЦК превращения был объяснен Бейном, который обратил внимание, что ГЦК решетку можно превратить в объемно-центрированный куб при небольшом сжатии вдоль оси  $OZ$  и растяжении в направлениях осей  $OX$  и  $OY$  (бейновская деформация). Октапоры ГЦК решетки вместе с располагающимися в них атомами углерода переходят только в октапоры типа «Z» решетки ОЦК-железа. При этом все атомы углерода растягивают решетку в

одном  $Z$ -направлении, и она из кубической превращается в тетрагональную. Хотя теория Бейна общепризнана, вопрос теоретического обоснования ее справедливости остается открытым.

В связи с этим, вопрос о характере взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-решетке железа, определяющим их упорядочение, является важнейшим для физического металловедения. К сожалению, энергии взаимодействия атомов растворенного вещества не могут быть непосредственно измерены в эксперименте. Они могут быть оценены, с помощью термодинамических моделей на основе фазовых диаграмм или измерений параметров ближнего порядка [4].

Долгое время наиболее чувствительной к особенностям распределения атомов углерода по октапорам считалась активность углерода в  $\gamma$ -фазе  $a_C^\gamma$  [5]. Вагнер с сотрудниками [6] показали, что при отсутствии взаимодействия между атомами углерода величина активности дается выражением

$$a_C^\gamma = \frac{x_C}{1 - \beta x_C}, \quad (1)$$

где  $x_C$  – доля атомов углерода в сплаве, а коэффициент  $\beta = 2$ . Однако результаты экспериментального изучения активности углерода в  $\gamma$ -железе, показали, что величина  $a_C^\gamma$  с увеличением содержания углерода возрастает сильнее, чем это предписывает формула (2). Было высказано предполо-

жение, что это обстоятельство связано с наличием отталкивания между ближайшими атомами углерода, что и приводит к уменьшению числа возможных мест их расположения.

Темкиным и Шварцманом [7], а затем Кауфманом [4] была разработана модель блокировки, в которой выдвинуто предположение, что каждый атом С блокирует, т. е. делает недоступным для заполнения другими атомами углерода, некоторое число  $m$  октапоров, ближайших к нему. В этом варианте:

$$\ln a_C^{\gamma} = \ln \frac{x_C}{1 - (m+1)x_C}. \quad (2)$$

Позднее Л.А. Большовым [8] была разработана более общая теория, учитывающая энергии взаимодействия пар атомов углерода не только в первой, но и последующих координационных сферах.

Важные данные о распределении углерода были получены на данных экспериментов по ядерному гамма-резонансу (ЯГР) [9–13]. Обзор существующих данных о распределении углерода в аустените был сделан В.Г. Гаврилюком [9] и В.М. Надутовым [10].

Авторы работ [11–12] сочли, что данная методика недостаточно точна, и приняли решение проводить расчёты подгонкой кривых активности под экспериментальные кривые. Энергии взаимодействия подгонялись при помощи метода Монте-Карло под экспериментальную кривую температурной зависимости активности углерода в гамма-железе от концентрации углерода. Получено, что энергии взаимодействия между атомами углерода составляют  $E_1 = 0,036$  эВ и  $E_2 = 0,075$  эВ [12] и  $E_1 = 0,115$  эВ и  $E_2 = 0,169$  эВ [11] ( $E_1$  и  $E_2$  – энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе находящихся в первой и во второй координационных сферах). Из этих данных видно, что используя разные энергии взаимодействия можно получить согласие с экспериментальными данными по активности.

Поскольку все рассмотренные и сильно различающиеся модели позволяют довольно точно описать активность углерода в аустените или данных мёсбауэровских спектров, можно заключить, одной активности недостаточно, чтобы провести детальную реконструкцию распределения углерода в ГЦК-железе. Поэтому в последнее годы все большее внимание уделяется методам первопринципного компьютерного моделирования, главным достоинством которых является отсутствие каких-либо входных данных, влияющих на достоверность результатов, при использовании минимального количества подгоночных параметров. Нами уже были вычислены энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе в работе [14], но затем они были уточнены в работе [15].

Целью данной работы является проведение первопринципных расчетов энергий взаимодействия между атомами углерода в парамагнитном

$\gamma$ -Fe, а затем на их основе, используя метод Монте-Карло, получить концентрационную зависимость активности углерода в гамма-железе при различных температурах. По результатам сравнения полученных кривых с данными эксперимента можно оценить достоверность данных первопринципного расчёта [15].

### Методика

В данной работе расчёты проводились из первых принципов полнопотенциальным методом LAPW, с учетом обобщенного градиентного приближения PBE-GGA в программном пакете WIEN2k [16]. Это наиболее точный метод используемый в рамках теории функционала плотности. В нашей модели с помощью программы BINAR [17] были получены 16 различных неэквивалентных магнитных конфигураций (рис. 1), из которых были выбраны 5 наиболее низколежащих по энергии. Потом с помощью усреднения по статистическому ансамблю вычислялись энергетические параметры. Более подробно параметры, методика и модель парамагнитного состояния обсуждены в нашей предыдущей работе [18].

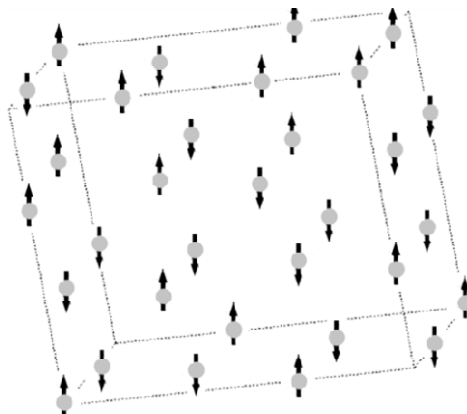


Рис. 1. Магнитная конфигурация суперячейки из 32 атомов железа, использованная для моделирования парамагнитного состояния в ГЦК-железе, обладающая наименьшей энергией. Стрелочками показаны спины атомов железа

Расчёт активности углерода в ГЦК-железе проводился по формуле

$$a_C = a_{conf} \exp(\Delta G/kT), \quad (3)$$

где  $a_C$  – активность углерода в ГЦК-железе,  $a_{conf}$  – конфигурационная часть активности и  $\exp(\Delta G/kT)$  – неконфигурационная часть. Для расчета неконфигурационной части использовались 2 набора данных из работ [11, 12]. При этом, в зависимости от используемого набора, возникали различия во величине неконфигурационного множителя порядка 10–20 %. Нами были взяты данные из работы [11], потому что в них при вычислении экспоненты напрямую использовались экспериментальные данные об активности [19].

Алгоритм вычисления конфигурационной части  $a_{conf}$  в деталях описан в работах [11, 12, 20]. Идея метода заключается в следующем. Для каждого члена статистического ансамбля при моделировании генерируется лишь часть суммы, виртуальный ввод одного атома углерода при фиксированной позиции других. Эта сумма усредняется, используя обычную Монте-Карло процедуру. Выражение для  $a_{conf}$ ,

$$a_{conf} = \frac{M(N_C + 1)}{\sum_{i=1}^M \left[ \sum_{j=1}^{\mu} \exp(-\Delta E_j / k_B T) \right]}, \quad (4)$$

где суммирование по  $j$  выполняется по всем пустым октаэдрическим междоузлиям и по числу шагов  $i$  ( $i = 1, 2, \dots, M$ ), используемых в расчете методом Монте-Карло;  $\Delta E_j$  – это изменение в энергии системы, когда вводится один виртуальный атом углерода;  $\mu = N_{Fe} - N_C$  число междоузлий в кристалле.

## Результаты

Для нахождения энергии взаимодействия между атомами углерода из энергии системы с двумя атомами углерода вычитается энергия двух суперячеек, содержащих одиночные атомы углерода, и суммируется с энергией беспримесной суперячейки ГЦК-железа:

$$\Delta E = E(Fe_{32}C_2) - 2E(Fe_{32}C) + E(Fe_{32}), \quad (5)$$

где  $E(Fe_{32}C_2)$  – энергия релаксированной суперячейки, состоящей из 32 атомов железа и двух атомов углерода, находящихся в октапорах, причем первый атом находится в октапоре, помещенной в начале координат (позиция 0 на рис. 2), а второй атом последовательно помещался в первую, вторую и третью координационную сферу

относительно первого (позиции 1, 2, 3 на рис. 2). Отметим, что найденную в нашем случае энергию взаимодействия во второй и третьей координационных сферах необходимо разделить пополам. Это связано с тем, при расчете используются периодические граничные условия, и эти позиции (см. рис. 2), находятся на равном удалении от атома углерода в начале координат и его периодическим повторением возникающем при периодической трансляции ячейки. Энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе представлены в таблице.

Из таблицы видно, что наблюдается качественное согласие с результатами Монте-Карло моделировании в работе [11]. Отталкивание во второй координационной сфере вдвое больше чем в первой. Чтобы подтвердить работоспособность нашей модели и точность рассчитанных энергий взаимодействия в данной работе сопоставляется кривая активности полученная используя энергии взаимодействия из нашей работы, с экспериментальными данными по активности атомов углерода в ГЦК-железе.

Использовалась система  $12 \times 12 \times 12$  элементарных ячеек ГЦК решётки железа [11]. Число шагов Монте-Карло составило 5000. Детальное описание методики и выбора моделирования приведено в нашей работе [15].

Сравнение активности, полученной при использовании энергий взаимодействия, полученных в нашей работе, с экспериментальной кривой активности, представлено на рис. 3. Нами проведены расчёты при  $T = 1173, 1273, 1373, 1423, 1573$  К, но представлен график только при температуре 1423 К. Решено было ограничиться только одним графиком, потому что в них не было никаких качественных отличий.

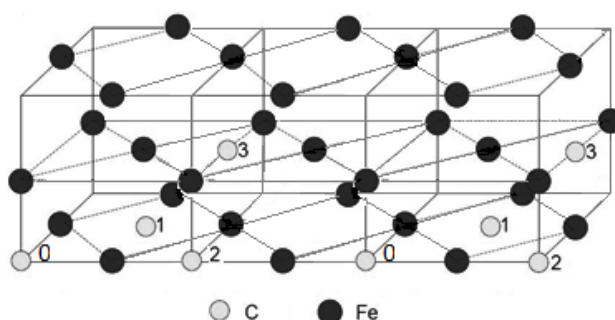


Рис. 2. Расположения атомов углерода в суперячейке из 32 атомов железа, с учётом периодических граничных условий. Новая суперячейка начинается от второго атома номер ноль. Атомы железа обозначены чёрным цветом, а углерода – серым

### Энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе

Номер координационной сферы	Энергия, эВ
1	0,06
2	0,1
3	0,005

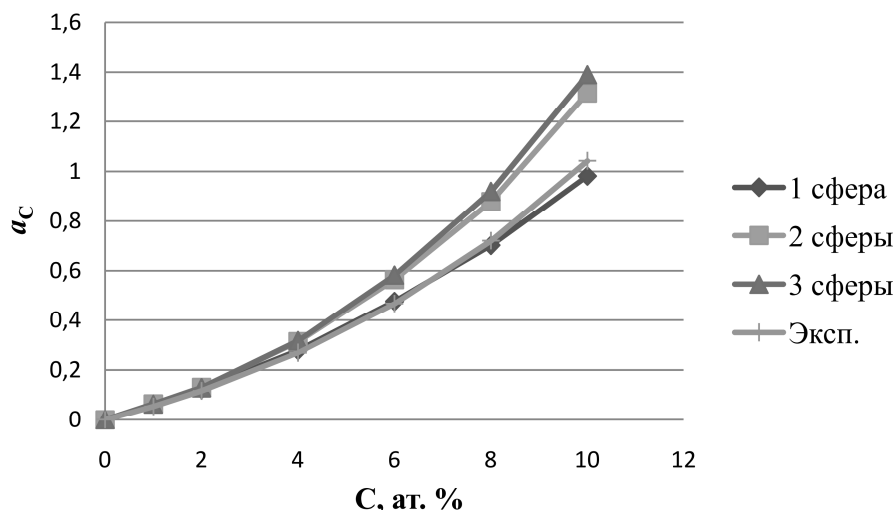


Рис. 3. Зависимость активности углерода в ГЦК-железе от концентрации при  $T = 1423$  К. Кривые активности получены, используя разное количество учитываемых координационных сфер

Из рис. 3 видно, что наилучшее согласие наблюдается, когда в расчётах использовалась только энергия взаимодействия атомов углерода в первой координационной сфере. Это случайное совпадение открывает нам возможность использования таких расчётов, для быстрых упрощенных расчётов, когда скорость расчётов важнее точности. Не стоит думать, что увеличение числа используемых координационных сфер ухудшает результат, потому что это случайное совпадение.

Когда кривые активности получались при использовании большего количества координационных сфер, согласие несколько ухудшилось, однако по-прежнему оставалось удовлетворительным. Это говорит о достоверности энергий взаимодействия между атомами углерода в парамагнитном ГЦК-железе, полученных в нашей работе, а также о работоспособности нашей модели. Кривые активно-

сти, полученные при использовании энергий взаимодействия двух и трёх координационных сфер между атомами углерода, практически не отличаются. Использование данных взаимодействия в третьей координационной сфере не влияет существенно на результаты расчета. Это объясняется очень низким значением энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе  $E_3 = 0,005$  эВ. Вычисление энергий взаимодействия в следующих координационных сферах невозможно провести в нашей суперячейке. Такие расчёты проведены Пономарёвой [21], показано, что энергия в третьей и последующих координационных сферах близка к нулю, что не повлияет на кривую активности.

Представляется интересным изучить влияние характера взаимодействия С-С на концентрационную зависимость активности углерода. Для этого проведены расчеты указанной зависимости при

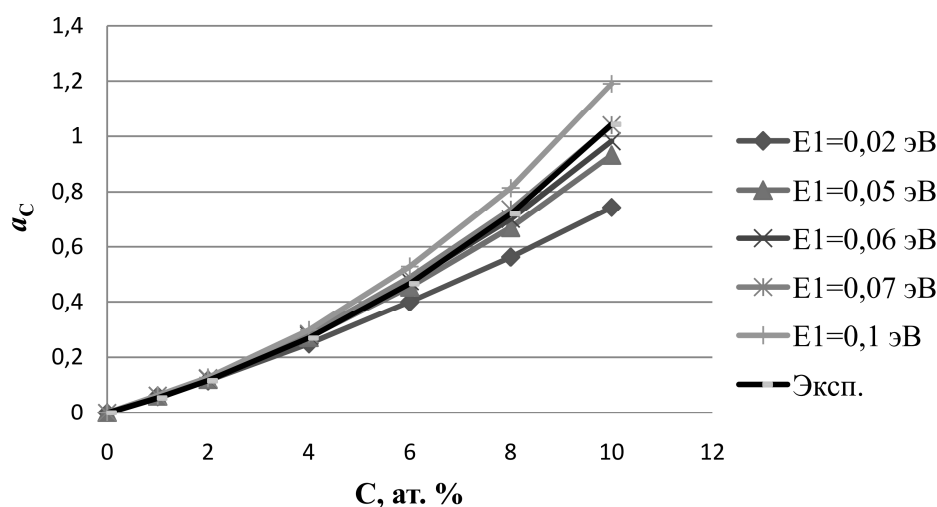


Рис. 4. Зависимость активности углерода в ГЦК-железе от концентрации при  $T = 1423$  К. Кривые получены используя разные энергии взаимодействия между атомами углерода в первой координационной сфере

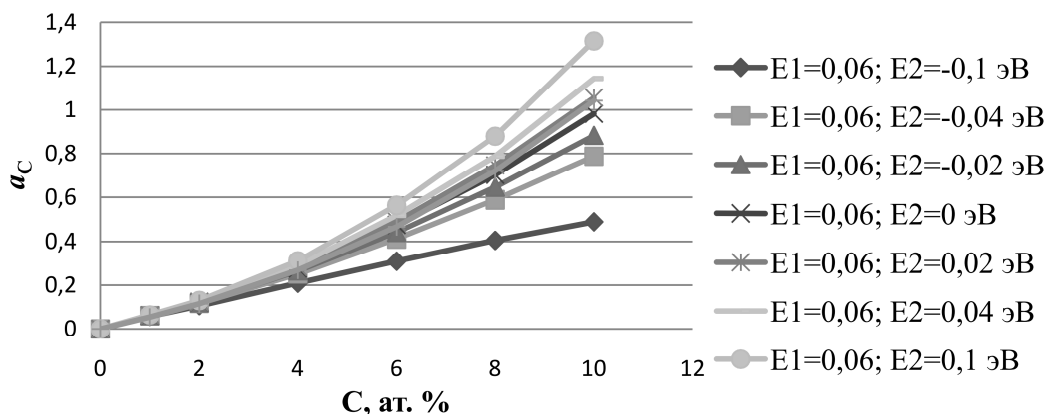


Рис. 5. Зависимость активности углерода в ГЦК-железе от концентрации при  $T = 1423$  К. Кривые получены используя разные энергии взаимодействия между атомами углерода во второй координационной сфере (энергия в первой координационной сфере  $E_1 = 0,06$  эВ)

варьировании взаимодействий в различных координационных сферах. Расчеты проводились в широком диапазоне температур ( $T = 1173, 1273, 1373, 1423, 1573$  К), но поскольку качественных отличий в результатах не наблюдалось, далее представлены данные только для температуры 1423 К.

На рис. 4 проанализировано влияние на активность величины энергии отталкивания в первой координационной сфере, пренебрегая взаимодействиями между более удаленными атомами. Видно, что при увеличении энергии взаимодействия кривая активности смещается вверх.

Затем мы изучили влияние на активность величины и знака взаимодействия между атомами углерода во второй координационной сфере при фиксированном значении отталкивания в первой сфере (рис. 5). Аналогично проводились расчеты с варьированием энергии взаимодействия в третьей координационной сфере, при фиксированных значениях взаимодействий в первых двух сферах. Оказалось, что влияние взаимодействия в третьей координационной сфере оказалось незначительным.

#### Заключение

В данной работе методом первопринципного моделирования получены значения энергии взаимодействия растворенных в парамагнитном ГЦК-железе пар атомов углерода, расположенных в первой, второй и третьей координационных сферах относительно друг друга. Для проверки достоверности значений энергий взаимодействия между атомами углерода в парамагнитном ГЦК-железе, проведён расчёт методом Монте-Карло активности углерода. Показано хорошее качественное согласие полученной кривой активности с экспериментальными данными, что говорит о достоверности данных. Учёт третьей координационной сферы между атомами углерода в ГЦК-железе практически не повлиял на активность углерода. Расчеты методом Монте-Карло с модельными параметрами взаимодействий показали, что усиление отталки-

вательного взаимодействия между атомами углерода в любой координационной сфере приводит к сдвигу кривой концентрационной зависимости активности углерода вверх, тогда как усиление притягивающего взаимодействия сдвигает кривую вниз. Это свидетельствует о возможности воспроизведения экспериментальной кривой активности для нескольких отличающихся наборов параметров взаимодействия.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 16-19-10252.

#### Литература

1. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия / Я.С. Уманский, Ю.А. Скаков, А.Н. Иванов, Л.Н. Рассторгуев. – М.: Металлургия, 1982. – 632 с.
2. Курдюмов, Г.В. Превращения в железе и стали / Г.В. Курдюмов, Л.М. Утевский, Р.И. Энтин. – М.: Наука, 1977. – 236 с.
3. Хачатурян, А.Г. Углерод в мартенсите стали. Несовершенства кристаллического строения и мартенситные превращения / А.Г. Хачатурян. – М.: Наука, 1971. – С. 34–45.
4. Kaufman, L. Thermodynamics of bainite reaction / L. Kaufman, S.V. Radcliffe, M. Cohen // *Decomposition of Austenite by Diffusional Processes*. – AIME, New York: Interscience Publ., 1962. – P. 313–352.
5. Могутов, Б.М. Термодинамика железоуглеродистых сплавов / Б.М. Могутов, Н.А. Томили, Л.А. Шварцман. – М.: Металлургия, 1972. – С. 328.
6. Dünwald, H. Thermodynamische Untersuchungen zum System Eisen–Kohlenstoff–Sauerstoff / H. Dünwald, C. Wagner // *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie*. – 1931. – Vol. 199, no. 1. – P. 321–346. DOI: 10.1002/zaac.19311990132
7. Темкин, М.И. Активность углерода в аустените / М.И. Темкин, Л.А. Шварцман // *Журнал физической химии*. – 1949. – № 6. – С. 755–760.

8. Большой, Л.А. Изучение ближнего порядка в аустенитной системе Fe–C методами статистической теории и Монте-Карло / Л.А. Большой, В.Н. Сулов // *Физика металлов и металловедение*. – 2004. – Т. 98, № 6. – С. 3–7.

9. Гаврилюк, В.Г. Распределение углерода в стали / В.Г. Гаврилюк. – Киев: Наукова Думка, 1987. – 208 с.

10. Надутов, В.М. Межатомное взаимодействие и распределение атомов внедрения в железо-азотистых и железо-углеродистых сплавах: автореферат дис. ... д-ра физ.-мат. наук / В.М. Надутов. – Киев: ИМФ НАН Украины им. Г.В. Курдюмова, 1996. – 55 с.

11. Blanter, M.S. Interaction of interstitial carbon atoms in austenite / M.S. Blanter // *Journal of Alloys and Compounds*. – 1999. – Vol. 291. – P. 167–174. DOI: 10.1007/BF02474886

12. Sozinov, A.L. C–C interaction in iron-base austenite and interpretation of mossbauer spectra / A.L. Sozinov, A.G. Balanyuk, V.G. Gavriljuk // *Acta metalurgica*. – 1997. – Vol. 45, no. 1. – P. 225–232. DOI: 10.1016/S1359-6454(96)00138-3

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 of Physics: Condensed Matter*. – 1994. – Vol. 6, no. 3. – P. 679–692. DOI: 10.1088/0953-8984/6/3/008

14. 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.

15. Ридный, Я.М. Расчёт активности угле-

рода в ГЦК-железе методом Монте-Карло / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев // *Наука ЮУрГУ: материалы 68-й науч. конф. Секции естественных наук*. – Челябинск: Издат. центр ЮУрГУ, 2016. – С. 93–98.

16. Schwarz, K. Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material science / K. Schwarz, P. Blaha, G.K.H. Madsen // *Computer Physics Communications*. – 2002. – Vol. 147. – P. 71–76. DOI: 10.1016/S0010-4655(02)00206-0

17. ODS (Ordered-Disordered-Solid-Solution) Ver.1.–binar Программа расчета неупорядоченных сверхъёчек для моделирования твердых растворов замещения / Р.З. Деянов, Н.Н. Еремин, В.С. Урусов. – М., 2006–2007.

18. 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.

19. Ban-ya, S. Thermodynamic of Austenitic Fe–C Alloys / S. Ban-ya, J.F. Elliott, J. Chipman // *Metallurgical Transactions*. – 1970. – Vol. 1. – P. 1313–1320. DOI: 10.1007/BF02900248

20. Murch, G.E. Computer simulation of the carbon activity in austenite / G.E. Murch, R.J. Thorn // *Acta Metalurgica*. – 1979. – Vol. 27. – P. 201–204. DOI: 10.1016/0001-6160(79)90097-X

21. Пономарёва, А.В. Энергия взаимодействия примесей углерода в парамагнитном  $\gamma$ -железе / А.В. Пономарёва, Ю.Н. Горностырёв, И.А. Абрикосов // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 2015. – Т. 147, № 3. – P. 827–836. DOI: 10.1134/S1063776115020193

**Ридный Ярослав Максимович**, аспирант кафедры общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск; ridnyim@susu.ru.

**Мирзоев Александр Аминулаевич**, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск; mirzoevaa@susu.ru.

**Мирзаев Джалал Аминулович**, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры физического металловедения и физики твёрдого тела, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск; mirzaevda@susu.ru.

Поступила в редакцию 7 мая 2016 г.

## INFLUENCE OF INTERACTION ENERGIES BETWEEN CARBON ATOMS IN FCC IRON ON CONCENTRATION DEPENDENCE OF CARBON ACTIVITY

Ya.M. Ridnyi, ridnyiim@susu.ru,  
A.A. Mirzoev, mirzoevaa@susu.ru,  
D.A. Mirzaev, mirzaevda@susu.ru

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

The first-principle simulation of the interaction energies of carbon atoms in FCC iron was carried out using the software package WIEN2k. They amounted to  $E_1 = 0.06$  eV,  $E_2 = 0.1$  eV and  $E_3 = 0.005$  eV (interaction energies between carbon atoms located on the first, second and third spheres of coordination of interstitial sublattice of FCC iron). The full potential linear augmented plane-wave (LAPW) method within the generalized gradient approximation PBE-GGA in the supercell of 32 iron atoms with periodic boundary conditions was used in the investigation. This is the most powerful technique in the framework of Density Functional Theory.

In order to check the reliability of found energy values, the concentration dependence of carbon activity in FCC iron was built using Monte-Carlo simulation. The good qualitative agreement of activity curve obtained with our interaction energies with the experimental one indicates the reliability of C–C interaction energy and performance of our model of paramagnetic state. Accounting of data on interaction on the third sphere of coordination does not significantly affect the calculation results. This is due to a very low value of the interaction energy of carbon atoms in FCC-iron on the third sphere of coordination.

*Keywords:* first-principle simulation; FCC iron; carbon impurity; Monte-Carlo; WIEN2k.

### References

1. Umanskiy Ya.S., Skakov Yu.A., Ivanov A.N., Rastorguev L.N. *Kristallografiya, rentgenografiya i elektronnaya mikroskopiya* [Crystallography, X-Ray Analysis and Electron Microscopy]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1982. 632 p.
2. Kurdyumov G.V., Utevskiy L.M., Entin R.I. *Prevrashcheniya v zheleze i stali* [Transformations in Iron and Steel]. Moscow, Nauka Publ., 1977. 236 p.
3. Khachatryan A.G. [Carbon in Steel Martensite]. *Nesovershenstva kristallicheskogo stroeniya i martensitnye prevrashcheniya* [Imperfections of Crystal Structure and Martensitic Transformations]. Moscow, Nauka Publ., 1971, pp. 34–45. (in Russ.).
4. Kaufman L.R., Radcliffe S.V., Cohen M. Thermodynamics of the Bainite Reaction. *Decomposition of Austenite by Diffusional Processes*. AIME, New York, Interscience Publ., 1962, pp. 313–352.
5. Mogutnov B.M., Tomilin N.A., Shvartsman L.A. *Termodinamika zhelezouglerodistykh splavov* [Thermodynamics of Iron–Carbon Alloys]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1972. 328 p.
6. Dünwald H., Wagner C. Thermodynamische Untersuchungen zum System Eisen–Kohlenstoff–Sauerstoff. *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie*, 1931, vol. 199, no. 1, pp. 321–346. DOI: 10.1002/zaac.19311990132
7. Temkin M.I., Shvartsman L.A. *Zhurnal fizicheskoy khimii*, 1949, no. 6, pp. 755–760. (in Russ.).
8. Bol'shov L.A., Suslov V.N. Statistical and Monte Carlo Studies of Short-Range Order in the Austenite of the Fe–C System. *Physics of Metals and Metallography*, 2004, vol. 98, no. 6, pp. 547–550.
9. Gavriljuk V.G. *Raspredelenie ugleroda v stali* [Carbon Distribution in Steel]. Kiev, Naukova dumka Publ., 1987. 208 p.
10. Nadutov V.M. *Mezhatomnoe vzaimodeystvie i raspredelenie atomov vnedreniya v zhelezo-azotistykh i zhelezo-uglerodistykh splavakh*. Dokt. diss. [Interatomic Interaction and Distribution of Interstitial Atoms in Iron–Nitrogen and Iron–Carbon Alloys. Doct. Diss.]. Kiev, 1996.
11. Blanter M.S. Interaction of Interstitial Carbon Atoms in Austenite. *Journal of Alloys and Compounds*, 1999, vol. 291, pp. 167–174. DOI: 10.1007/BF02474886
12. Sozinov A.L., Balanyuk A.G., Gavriljuk V.G. C–C Interaction in Iron-Base Austenite and Interpretation of Mössbauer Spectra. *Acta Materialia*, 1997, vol. 45, no. 1, pp. 225–232. DOI: 10.1016/S1359-6454(96)00138-3
13. Oda K., Fujimura H., Ino H. Local Interactions in Carbon-Carbon and Carbon-M (M: Al, Mn, Ni) Atomic Pairs in FCC  $\gamma$ -Iron. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 1994, vol. 6, no. 3, pp. 679–692. DOI: 10.1088/0953-8984/6/3/008

14. Ridnyy Ya.M., Mirzoev A.A., Mirzaev D.A. A Carbon Impurity in Paramagnetic FCC Iron: Ab initio Simulation of Energy Parameters. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Mathematics. Mechanics. Physics*, 2015, vol. 7, no. 2, pp. 56–63.
15. Ridnyy Ya.M., Mirzoev A.A. [Calculation of Carbon Activity in the Fcc Iron Using Monte-Carlo Method]. *Nauka YuUrGU: Materialy 68-y nauchnoy konferentsii. Sektsii estestvennykh nauk* [Science in the South Ural State University: Materials of the 68th Scientific Conference. Sections of Natural Science]. Chelyabinsk, South Ural St. Univ. Publ., 2016. (in Russ.)
16. Schwarz K., Blaha P., Madsen G.K.H. Electronic Structure Calculations of Solids Using the WIEN2k Package for Material Science. *Computer Physics Communications*, 2002, vol. 147, pp. 71–76. DOI: 10.1016/S0010-4655(02)00206-0
17. Deyanov R.Z., Eremin N.N., Urusov V.S. *ODSS (Ordered-Disordered-Solid-Solution). Ver. 1–binar. Programma rascheta neuporyadochennykh sverkhycheeek dlya modelirovaniya tverdykh rastvorov zameshcheniya* [Software for Calculation of Disordered Supercells for Simulation of Substitutional Solid Solutions]. Moscow, 2006–2007. Available at: <http://cryst.geol.msu.ru/odss/binar.pdf> (accessed 7 April 2016).
18. Ridnyy Ya.M., Mirzoev A.A., Mirzaev D.A. [Ab-initio Simulation of Influence of Short-Range Ordering of Carbon Impurities on the Energy of Their Dissolution in the FCC-Iron]. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Mathematics. Mechanics. Physics*, 2014, vol. 6, no. 3, pp. 86–91. (in Russ.)
19. Ban-ya S., Elliott J.F., Chipman J. Thermodynamic of Austenitic Fe–C Alloys. *Metallurgical Transactions*, 1970, vol. 1, no. 5, pp. 1313–1320. DOI: 10.1007/BF02900248
20. Murch G.E., Thorn R.J. Computer Simulation of the Carbon Activity in Austenite. *Acta Metallurgica*, 1979, vol. 27, no. 2, pp. 201–204. DOI: 10.1016/0001-6160(79)90097-X
21. Ponomareva A.V., Gornostyrev Yu.N., Abrikosov I.A. Energy of Interaction Between Carbon Impurities in Paramagnetic  $\gamma$ -Iron. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2015, vol. 120, no. 4, pp. 716–724. DOI: 10.1134/S1063776115020193

Received 7 May 2016

---

#### ОБРАЗЕЦ ЦИТИРОВАНИЯ

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. DOI: 10.14529/met160304

#### FOR CITATION

Ridnyi Ya.M., Mirzoev A.A., Mirzaev D.A. Influence of Interaction Energies Between Carbon Atoms in FCC Iron on Concentration Dependence of Carbon Activity. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Metallurgy*, 2016, vol. 16, no. 3, pp. 24–31. (in Russ.) DOI: 10.14529/met160304

---