

АНАЛИЗ ТЕТРАГОНАЛЬНОСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЁТКИ МАРТЕНСИТА СПЛАВОВ Fe–C В МОДЕЛИ ЖЁСТКИХ АТОМОВ-ШАРОВ

Д.А. Мирзаев, К.Ю. Окишев, А.А. Мирзоев, И.В. Булдашев
Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Россия

Модель укладки твердых атомов-сфер использована в статье для выяснения ряда вопросов, затрагивающих мартенситное превращение в углеродистых сталях. Рассмотрена деформация, которая возникает, когда сферический атом углерода с радиусом $0,77 \text{ \AA}$ помещают в октаэдрическую пору z -подрешетки внедрения железа. Показано, что смещения атомов железа, лежащих на оси oz , оказываются столь значительными, что они блокируют от возможного заполнения две ближайшие следующие октаэдрические поры. Они будут деблокированы только в том случае, когда четыре атома углерода займут аналогичные поры на ребрах элементарной ячейки и вновь удалят атомы железа от заблокированных пор. Был сделан расчет количества атомов углерода в элементарной ячейке в зависимости от содержания углерода в стали. Оказалось, что количество атомов углерода в ячейке равно $0,5$ достигается при концентрации углерода $5,13 \text{ масс. \%}$. Следовательно, практически у всех закаленных конструкционных и инструментальных сталей в среднем не происходит заполнения даже одной октаэдрической поры в центре грани. В рамках данной модели рассчитаны параметры решетки a и c , которые сопоставлены с экспериментальными данными, полученными академиком Г.В. Курдюмовым. Показано их очень хорошее согласие для параметра c и менее точное – для параметра a , что, с нашей точки зрения, обусловлено отсутствием информации о коэффициенте Пуассона для процессов в атомном масштабе. Разработан метод определения параметров решетки идеального мартенсита, у которого все z -поры заняты атомами углерода.

Ключевые слова: тетрагональность, октаэдрические поры, атомы углерода, атомные радиусы.

Введение

Как известно [1, 2], при резком охлаждении аустенит углеродистых сталей превращается в неравновесную фазу – мартенсит по сдвиговому бездиффузионному механизму. При сдвигах атомных плоскостей аустенита, перестраивающих ГЦК решётку, углерод принудительно переносится из решетки γ -фазы в решетку мартенсита [3]. Поэтому его концентрации в обеих фазах оказываются одинаковыми и равными содержанию углерода в стали. При этом химический потенциал атомов углерода в аустените оказывается значительно меньшим, чем у мартенсита [4]. Если двухфазную смесь (аустенит + мартенсит) выдержать при комнатной температуре несколько лет, то обнаруживается, что концентрация углерода в аустените возрастает, а в мартенсите падает. Нагрев усиливает скорость этой реакции, но может приводить к выделению частиц цементита. В этом случае концентрация углерода в мартенсите резко снижается. Отметим, что концентрация угле-

рода в феррите при равновесии с цементитом для 300 K должна составлять $1,7 \cdot 10^{-7} \%$ по массе [5]. Кристаллографический тип атомной решетки мартенсита, наличие тетрагональности, а также зависимости параметров элементарной ячейки от содержания углерода были определены академиком Г.В. Курдюмовым ещё в 30-е годы XX века [6]. Тем не менее, строгая система укладки атомов железа и углерода в сталях не установлена. При обычных для сталей концентрациях углерода вероятность попадания в одну ОЦК-ячейку железа одновременно двух атомов углерода (по числу октапор) ничтожно мала. Но и вероятность попадания одного атома углерода в ячейку стали, содержащей предельную для сталей концентрацию 2 масс. \% углерода равна примерно $0,1$, т. е. 90% всех ячеек не содержат ни одного атома углерода, а остальные 10% ячеек имеют только один атом. Поэтому цель данной статьи изучить атомную структуру мартенсита сталей в простой модели несжимаемых шаров.

Обратим внимание, что ОЦК-решётка железа состоит из двух примитивных кубических решёток, вставленных друг в друга и сдвинутых на половину пространственной диагонали. Поэтому на ячейку ОЦК-решётки приходится два атома железа. Точно так же z -подрешётка октапор является объёмно-центрированной тетрагональной (в присутствии атомов углерода), и в свою очередь состоит из двух примитивных тетрагональных подрешёток, которые условно обозначены А и В. Первая из них образована порами типа A_1 , A_2 и др., расположенными, как показано на рисунке, в центрах граней ячеек решётки железа. Вторая подрешётка В образована порами, лежащими на серединах рёбер: B_1 , B_2 и др. Учтём, что пора, расположенная в центре грани, принадлежит ячейке на 1/2 часть, тогда как пора на середине ребра на 1/4 часть. При заполнении всех этих пор атомами углерода: $\frac{1}{2} \cdot 2 + \frac{1}{4} \cdot 4 = 2$ получается 2 атома углерода на ячейку.

Допустим, что образец стали содержит N_{Fe} атомов железа и n_C атомов углерода, тогда атомная доля углерода в мартенсите

$$x_C = \frac{n_C}{N_{Fe} + n_C}$$

и, соответственно,

$$a = a_0 - 0,013 p_C. \quad (2)$$

Приняв, что количество атомов железа в элементарной ячейке $N_{Fe} = 2$, найдем среднее количество атомов углерода в этой ячейке

$$n_C^{яч} = 2 \cdot \frac{x_C}{1 - x_C}. \quad (3)$$

Этот результат можно получить иначе. Отношение n_C/N_{Fe} можно рассматривать как вероятность заполнения произвольной октапоры в подрешётках А или В атомами углерода. Тогда выражение (2) представляет математическое ожидание количества атомов углерода в элементарной ячейке. Если бы атомы углерода равномерно заполняли все существующие октапоры, то рассмотренная деформация оказалась бы одинаковой по всем трем осям, и решетка твердого раствора осталась бы кубической. Однако появление хотя бы одного атома углерода в подрешетке z облегчает внедрение в соседнее междуузлия z следующего атома С, тот следующих и т. д. В итоге проявляется преимущественное за-

полнение пор z атомами углерода, а решетка становится тетрагональной. С учётом принадлежности двух пор каждой ячейке усредненный параметр «с» тетрагональной решетки следует описать формулой

$$c = a_0 \left(1 + 2e_1 \frac{x_C}{1 - x_C} \right). \quad (4)$$

Поскольку растяжение в направлении oz приводит к упругому сокращению размеров в поперечных направлениях, то в выражение для второго параметра ячейки

$$a = a_0 \left(1 - \nu e_1 \cdot 2 \frac{x_C}{1 - x_C} \right) \quad (5)$$

включена поперечная пуассоновская деформация. Она равна $(-\nu e_1) = -0,12$, если принять коэффициент Пуассона ν равным 0,29 [7]. Однако для системы локальных центров деформации величина ν в принципе может отличаться от этого значения. Но, к сожалению, теоретические работы в этом направлении ещё только начаты [11].

В формулах (4), (5) параметры решетки мартенсита заданы в зависимости от атомной доли углерода. Обычно концентрацию углерода предпочитают выражать через массовые проценты p_C . Связь этих величин следующая [12]:

$$x_C = \frac{\frac{p_C}{A_C}}{\frac{p_C}{A_C} + \frac{100 - p_C}{A_{Fe}}}, \quad (6a)$$

где A_C и $n_C^{яч} = 2 \frac{x_C}{1 - x_C}$ – атомные массы углерода и железа, а тогда

$$\begin{aligned} \frac{x_C}{1 - x_C} &= \frac{p_C A_{Fe}}{(100 - p_C) A_C} \approx \\ &\approx \frac{p_C A_{Fe}}{100 A_C} = 0,0465 p_C, \end{aligned} \quad (6b)$$

причём приближённое равенство относится к случаям, когда концентрация $\frac{c}{a} = 1 + 0,046 p_C$ мала (менее 1,5 %). После подстановки выражения (6) в (4) и (5) найдём теоретические зависимости параметров тетрагональной решетки мартенсита от концентрации углерода p_C в модели твердых сфер:

$$\begin{aligned} c &= a_0 (1 + 2 \cdot 0,0465 \cdot 0,405 p_C) = \\ &= a_0 (1 + 0,0377 p_C); \end{aligned} \quad (7)$$

$$a = a_0(1 - 0,0113p_C); \quad (8)$$

$$\frac{c}{a} \cong 1 + 0,0493p_C. \quad (9)$$

Изучение кристаллической решетки мартенсита, впервые проведенное советскими учеными Г.В. Курдюмовым, Н.Я. Селяковым, Н.Т. Гудцовым [6, 10], показало, что мартенситу присуща тетрагональная решетка, которую следует рассматривать как несколько растянутую вдоль *oz* решетку α -железа. Экспериментально определённые параметры решетки мартенсита *a* и *c* линейно зависят от концентрации углерода [6, 7]:

$$c = a_0 + 0,116p_C = 2,866(1 + 0,0405p_C), \text{ \AA}; \quad (10)$$

$$a = a_0 - 0,013p_C = 2,866(1 - 0,00453p_C), \text{ \AA}, \quad (11)$$

а для степени тетрагональности решётки *c/a* справедлива формула

$$\frac{c}{a} = 1 + 0,046p_C. \quad (12)$$

Согласие рассчитанных по модели твердых сфер параметров решетки мартенсита (7)–(9) с экспериментальными результатами Г.В. Курдюмова следует признать весьма удовлетворительной. Наибольшее расхождение дают формулы (8) и (11) для параметра *a*. Расхождение обусловлено, на наш взгляд, неточной оценкой величины *v* в рассматриваемой ситуации. Если, например, принять $v = 0,11$, то возникло бы почти идеаль-

ное согласие данных теории и эксперимента для *a*, *c* и *c/a*.

Теперь обсудим степень заполнения атомами углерода элементарной ячейки мартенсита в зависимости от содержания углерода. С использованием формулы (3) было рассчитано среднее количество атомов углерода в ячейке (см. таблицу). Учтено, что заполнение одним атомом углерода верхней октапоры A_1 (см. рисунок) даёт $n_C^{\text{яч}} = 0,5$, поскольку пора принадлежит одновременно двум ячейкам – верхней и нижней на рисунке. Согласно таблице, такому значению $n_C^{\text{яч}}$ соответствует концентрация углерода 5,13 масс. %. Следовательно, при увеличении концентрации углерода от 0 до 5 масс. % происходит постепенное заполнение октапор типа А (см. рисунок) атомами углерода во всех элементарных ячейках.

По существу, к этому интервалу концентраций (до 5 масс. %) относятся все конструкционные и инструментальные стали, у которых, как известно [13], содержание углерода не превышает 2 масс. %.

Мы отмечали выше, что при введении атома углерода в октапору A_1 атом железа 1 сместится вверх на $r_C - \frac{h}{2} = 0,578 \text{ \AA}$. На такое же расстояние сместится вниз атом железа 2, который раньше находился в центре ячейки. Расстояние между этими атомами железа после их смещения составит

$$2r_{\text{Fe}} + 2r_C = 4,022 \text{ \AA}.$$

Зависимость среднего количества атомов углерода в элементарной ячейке мартенсита $n_C^{\text{яч}}$ от концентрации углерода в стали

p_C , масс. %	x_C , атомная доля	$n_C^{\text{яч}} = 2 \frac{x_C}{1 - x_C}$
17,79	0,5	2
15,06	0,452	1,6496
12,6	0,4	1,3333
11,8	0,382	1,2362
9,71	0,3333	1,000
	0,268	0,732
6,73	0,25	0,6667
5,13	0,2	0,500
4	0,146	0,342
2	0,086	0,1900
1	0,0446	0,0933
0,82	0,037	0,0768
0,526	0,024	0,049
0,2	0,009	0,0182

Это расстояние представляет новый параметр решетки c . Нижний край атома 2 будет находиться на расстоянии $\frac{a_{\alpha}}{2} + r_{\text{C}} - \frac{h}{2} = 2,011 \text{ \AA}$ от центра ячейки, т. е. он опускается ниже точки A_2 . Следовательно, атом 2 заблокирует от возможного заполнения атомом углерода октапору A_2 . Межатомное расстояние вдоль линии A_1 - A_2 увеличивается до $4,022 \text{ \AA}$, тогда как длины ребер бывшей ячейки α -железа остаются неизменными (за исключением эффектов когерентного сопряжения соседних атомных рядов). Таким образом, введение атома углерода в центр грани ($n_{\text{C}}^{\text{яч}} = 0,5$) делает возможным заполнение октапор на ребрах в рассматриваемой ячейке лишь при превышении средним количеством атомов углерода на ячейку величины $0,5$, т. е. это заполнение станет возможным при не реальной для сталей концентрации углерода, превышающей $5,13 \text{ масс. \% C}$. Если четыре атома углерода попадут в октапоры, расположенные на ребрах ячейки, то количество заполненных пор в ячейке вырастет всего лишь на единицу, потому что каждая пора на ребре принадлежит ячейке на $1/4$ часть. Когда это заполнение произойдет, тогда длины ребер 3-7, 4-8, 5-9 и 6-10 также увеличатся до размера $4,022 \text{ \AA}$. Произойдет разблокирование пор типа A_2 и станет возможным заполнение последней нижней поры атомом углерода, что добавит еще $1/2$ атома углерода на ячейку. Но это осуществится при предельной концентрации углерода $17,7 \text{ масс. \%}$. На этом образование идеальной мартенситной ячейки (у которой все октапоры подрешетки z полностью заполнены) завершится. Но если концентрация углерода в мартенсите меньше, чем $5,13 \text{ масс. \% C}$, как это обычно бывает у сталей, то процесс заполнения пор должен остановиться на заполнении пор типа A_1 . По существу, это означает, что расстояние 1-2 вдоль тройки атомов Fe-C-Fe возрастает до $4,022 \text{ \AA}$, тогда как ребра 3-7, 4-8, 5-9 и 6-10 сохраняют прежний размер $2,866 \text{ \AA}$, т. е. элементарные ячейки мартенсита еще не сформированы за исключением отдельных случайных флуктуаций, где ячейка содержит 2 атома углерода. Причём чем ниже содержание углерода в стали, тем меньше возникает этих группировок, создающих локальную тетрагональность. Сразу возникает вопрос, почему же при дифракции рентгеновых лучей на образцах стали наблю-

даются максимумы интенсивности, соответствующие тетрагональной решетке? Возможны, по крайней мере, два ответа. Первый, что дифракция на ОЦК-решетке железа, в которую соответственно атомной концентрации углерода вкраплены ориентированные вдоль oz тройки атомов Fe-C-Fe, создает такую именно дифракционную картину, но с уширенными максимумами. И чтобы разобраться в этой ситуации необходимо разработать соответствующую теорию дифракции от таких объектов. Но может быть и второй ответ: при наличии таких троек атомов Fe-C-Fe, ориентированных вдоль oz , возникают сильные искажения, потому что ряды с увеличенным межатомным расстоянием обязаны быть когерентно сопряженными с соседними рядами атомов чистого железа. Возможно, что пространственная решетка реагирует на эти искажения следующим образом: она просто увеличивает во всех ячейках, свободных от углерода, параметр решетки c на величину Δc , пропорциональную атомной доли углерода. Тем самым уменьшаются величины искажений у сопряженных атомных z -рядов, содержащих углерод и свободных от него. По-видимому, именно энергетика этого эффекта лежит в основе теории Зинера – Хачатуряна [14, 15].

Следующий важный вопрос, какие параметры решетки будут наблюдаться у идеального мартенсита, в элементарной ячейке которого атомы углерода заполнили все z -октаэдрические поры. Дальнейшие расчёты будут сделаны в двух несколько отличающихся вариантах.

1. Параметры решётки увеличиваются линейно с возрастанием величины $x_{\text{C}}/(1-x_{\text{C}})$. Из точной формулы (6б) видно, что при использовании очень высоких концентраций углерода величину p_{C} в формулах (7)–(12) необходимо заменить на $p_{\text{C}}/(1-0,01 p_{\text{C}})$. А во-вторых, при предельном значении $x_{\text{C}} = 1/2$ выполняются равенства

$$\frac{p_{\text{C}}}{100 - p_{\text{C}}} = \frac{A_{\text{C}}}{A_{\text{Fe}}} = \frac{12,01}{55,845} = 0,215,$$

а $p_{\text{C}} = 17,7 \text{ масс. \%}$. Подставив это значение в уточнённые формулы (10) и (11), найдем на основе результатов Курдюмова: $c = 5,362 \text{ \AA}$, $a = 2,587 \text{ \AA}$. Наше моделирование приводит к следующим величинам: $c = 5,190$; $a = 2,065 \text{ \AA}$.

2. В ряде работ в неявной форме авторы предполагали, что параметры решётки мар-

тенсита при заполнении её углеродом возрастают пропорционально x_C во всём интервале её изменений вплоть до предельного значения $x_C = 1/2$. Связь p_C и x_C определена уравнением (6а), которое можно преобразовать к виду

$$\begin{aligned} x_C &= \frac{p_C}{p_C \left(1 - \frac{A_C}{A_{Fe}}\right) + 100 \frac{A_C}{A_{Fe}}} = \\ &= \frac{p_C}{21,5(1 + 0,0365 p_C)} = \\ &= 0,0465 \frac{p_C}{1 + 0,0365 p_C}. \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь нелинейность функции $x_C(p_C)$ обусловлена не изменением параметра решетки. Она возникла в результате пересчета концентраций от атомной доли x_C к массовым процентам p_C . Далее допустим, что какой-либо параметр решётки, например, c , согласно данным эксперимента изменяется по закону $c = a_0(1 + \beta p_C)$, где β – опытный коэффициент. Представим его величину в виде произведения $\beta = 0,0465\beta_1$, где $\beta_1 = \frac{\beta}{0,0465}$. Тогда при точной записи:

$$c = a_0 \left(1 + \beta_1 \cdot 0,0465 \frac{p_C}{1 + 0,00365 p_C}\right). \quad (14)$$

Но экспериментаторы при измерениях в интервале реально низких концентраций углерода и построении линейного графика не могут учесть малого слагаемого в знаменателе (14). Поэтому при расчете параметра идеальной решетки в формулу для параметра нужно добавить знаменатель $(1 + 0,00365 p_C)$, который при $p_C = 17,7$ масс. % будет равен 1,64605. Но так как $1,64605/0,0465 = 2 \cdot 17,7$, то, следовательно, получим

$$c = a_0 \left(1 + \frac{\beta_1}{2}\right). \quad (15)$$

Используя этот метод, найдем по данным Г.В. Курдюмова (10), (11) $c = 4,1140 \text{ \AA}$, $a = 2,726 \text{ \AA}$. Результаты (7), (8) нашего моделирования приводят к немного отличным значениям: $c = 4,027 \text{ \AA}$ и $a = 2,518 \text{ \AA}$. Значения c согласуются хорошо, а различия в величине a обусловлены неопределенностью значения коэффициента Пуассона при переносе воздействия деформации на атомный масштаб. Хотя

авторы статьи отдают предпочтение первому варианту расчёта параметра идеального мартенсита, но не отвергают второй. Как видно из оценок, они приводят к разным значениям параметров решетки идеального мартенсита. Разрешить эту проблему выбора можно с помощью первопринципного моделирования решётки мартенсита.

Выводы

1. Проведено моделирование тетрагональной структуры мартенсита в закаленной стали на основе модели укладки твердых сфер, представляющих атомы железа и углерода.

2. Важнейшему для проведения закалки сталей и чугунов интервалу концентрации углерода от 0,2 до 2 масс. % С соответствует относительно невысокая степень осреднённого заполнения атомами углерода произвольной элементарной ячейки z -подрешётки октаэдрических пор от 0,018 до 0,19 атомов С/эл. яч. при максимальном заполнении 2 ат. С/яч.

3. При помещении атома углерода в z -октапору он раздвигает ближайшие к нему атомы железа вдоль oz на расстояние 1,116 Å, так что они блокируют от последующего заполнения углеродом две ближайшие, расположенные на этой же оси поры. Возникающая структура мартенсита представляет тройки атомов Fe–C–Fe, ориентированные вдоль oz и хаотически распределённые по решётке железа.

4. Модель укладки жёстких шаров позволяет довольно точно вычислить параметр c решётки мартенсита и его концентрационную зависимость. Расчёты параметра a дали меньшую точность, вероятно потому, что при переходе к процессам атомного масштаба коэффициент Пуассона изменяет своё значение.

Настоящая работа поддержана грантом
Российского научного фонда № 16-19-10252.

Литература

1. Счастливцев, В.М. Структура термически обработанной стали / В.М. Счастливцев, Д.А. Мирзаев, И.Л. Яковлева. – М.: Металлургия, 1994. – 288 с.

2. Влияние скорости охлаждения на положение мартенситных точек. Углеродистые стали / Д.А. Мирзаев, М.М. Штейнберг, Т.Н. Пономарева, В.М. Счастливцев // ФММ. – 1979. – Т. 47, вып. 1. – С. 125–135.

3. Классен-Неклюдова, М.В. Механическое

двойникование кристаллов / М.В. Классен-Неклюдова. – Изд-во АН СССР, 1960. – 221 с.

4. Метастабильное равновесие тетрагонального бейнитного феррита и аустенита сталей с бескарбидным бейнитом / Д.А. Мирзаев, А.А. Мирзоев, И.В. Булдашев, К.Ю. Окишев // Вестник Магнитогорского государственного технического университета им. Г.И. Носова. – 2017. – Т. 15, № 1. – С. 27–36.

5. Могутнов, Б.М. Термодинамика железоуглеродистых сплавов / Б.М. Могутнов, И.А. Томилин, Л.А. Шварцман. – М.: Металлургия, 1972. – 328 с.

6. Курдюмов, Г.В. Превращения в железе и стали / Г.В. Курдюмов, Л.М. Утевский, Р.И. Энтин. – М.: Наука, 1977. – 237 с.

7. Штремель, М.А. Прочность сплавов. Часть II. Деформация / М.А. Штремель. – М.: МиСИС, 1997. – 527 с.

8. Штремель, М.А. Прочность сплавов. Часть I. Дефекты решетки / М.А. Штремель. – М.: МиСИС, 1999. – 384 с.

9. Бернштейн, М.Л. Отпуск стали /

М.Л. Бернштейн, Л.М. Капуткина, С.Д. Прокошкин. – М.: МиСИС, 1997. – 326 с.

10. Селяков Н.Я., Гудцов Н.Т., Курдюмов Г.В. // Сообщения Ленинградского физико-технического института, 1918–1926. – Л., 1926. – С. 73–78.

11. Епишин, А.И. Экстремальные значения коэффициента Пуассона кубических кристаллов / А.И. Епишин, Д.С. Лисовенко // Журнал технической физики. – 2016. – Т. 86. – С. 74–82.

12. Уманский, Я.С. Рентгенография металлов и полупроводников / Я.С. Уманский. – М.: Металлургия, 1969. – 496 с.

13. Гуляев, А.П. Металловедение / А.П. Гуляев. – М.: Альянс, 2011. – 650 с.

14. Хачатурян, А.Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов / А.Г. Хачатурян. – М.: Наука, 1974. – 384 с.

15. Термодинамический анализ возникновения тетрагонального бейнита в сталях / Д.А. Мирзаев, А.А. Мирзоев, И.В. Булдашев, К.Ю. Окишев // Физика металлов и металловедение. – 2017. – Т. 118, № 6. – С. 547–553.

Мирзаев Джалал Аминлович, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры компьютерного моделирования и нанотехнологий, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск; mirzaevda@susu.ru.

Окишев Константин Юрьевич, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры материаловедения и физико-химии материалов, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск; okishevki@susu.ru.

Мирзоев Александр Аминлаевич, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры компьютерного моделирования и нанотехнологий, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск; mirzoevaa@susu.ru.

Булдашев Иван Владимирович, аспирант кафедры материаловедения и физико-химии материалов, Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск; buldashev.ivan@mail.ru.

Поступила в редакцию 13 октября 2018 г.

ANALYSIS OF THE TETRAGONALITY OF THE CRYSTAL LATTICE OF MARTENSITE OF Fe–C ALLOYS IN THE HARD-SPHERE MODEL

D.A. Mirzaev, mirzaevda@susu.ru,
K.Yu. Okishev, okishevki@susu.ru,
A.A. Mirzoev, mirzoevaa@susu.ru,
I.V. Buldashev, buldashev.ivan@mail.ru

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

The model of packaging solid atoms-spheres was used in the article to clarify a number of issues affecting martensitic transformation in carbon steels. The deformation that occurs when a spherical carbon atom with a radius of 0.77 Å is placed in the octahedral pore of the z -sublattice of iron incorporation is considered. It is shown that the displacements of iron atoms lying on the oz axis are so significant that they block the next two octahedral pores from possible filling. They will be released only when four carbon atoms occupy similar pores on the edges of the unit cell and again remove iron atoms from the blocked pores. The calculation was made of the number of carbon atoms in the unit cell, depending on the carbon content in the steel. It turned out that the number of carbon atoms in the cell equal to 0.5 is achieved at a carbon concentration of 5.13 wt. %. Consequently, almost all hardened structural and tool steels on average do not fill even one octahedral pore in the center of the face. Within the framework of this model, the lattice parameters a and c are calculated, which are compared with the experimental data obtained by academician G.V. Kurdymov. Their very good agreement is shown for parameter c and less accurate for parameter a , which, from our point of view, is due to the lack of information about the Poisson ratio for processes on the atomic scale. A method has been developed for determining the lattice parameters of an ideal martensite, in which all z -pores are occupied by carbon atoms.

Keywords: tetragonality, octahedral pores, carbon atoms, atomic radii.

References

1. Schastlivtsev V.M., Mirzaev D.A., Yakovleva I.L. *Struktura termicheski obrabotannoy stali* [The Structure of Heat-Treated Steel]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1994. 288 p.
2. Mirzaev D.A., Shteynberg M.M., Ponomareva T.N., Schastlivtsev V.M. [Influence of Cooling Rate on the Position of Martensitic Points. Carbon Steel]. *FMM*, 1979, vol. 47, iss. 1, pp. 125–135. (in Russ.)
3. Klassen-Neklyudova M.V. *Mekhanicheskoe dvoynikovanie kristallov* [Mechanical Twinning of Crystals]. AN SSSR Publ., 1960. 221 p.
4. Mirzaev D.A., Mirzoev A.A., Buldashev I.V., Okishev K.Yu. [Metastable Equilibrium of Tetragonal Bainitic Ferrite and Audtenite in Carbide-Free Bainitic Steels]. *Vestnik Magnitogorskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta im. G.I. Nosova*, 2017, vol. 15, no. 1, pp. 27–36. (in Russ.) DOI: 10.18503/1995-2732-2017-15-1-27-36
5. Mogutnov B.M., Tomilin I.A., Shvartsman L.A. *Termodinamika zhelezo-uglerodistykh splavov* [Thermodynamics of Iron-Carbon Alloys]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1972. 328 p.
6. Kurdymov G.V., Utevskiy L.M., Entin R.I. *Prevrashcheniya v zheleze i stali* [Transformations in Iron and Steel]. Moscow, Nauka Publ., 1977. 237 p.
7. Shtremel' M.A. *Prochnost' splavov. Chast' II. Deformatsiya* [Alloy Strength. Part II. Deformation]. Moscow, MiSIS Publ., 1997. 527 p.
8. Shtremel' M.A. *Prochnost' splavov. Chast' I. Defekty reshetki* [Alloy Strength. Part I. Defects of the Lattice]. Moscow, MiSIS Publ., 1999. 384 p.
9. Bernshteyn M.L., Kaputkina L.M., Prokoshkin S.D. *Otpusk stali* [Tempering]. Moscow, MiSIS Publ., 1997. 326 p.

10. Selyakov N.Ya., Gudtsov N.T., Kurdyumov G.V. *Reports of the Phys. Techn. Inst. in Leningrad, 1918–1926*. Leningrad, 1926, pp. 73–78. (in Russ.)
11. Epishin A.I., Lisovenko D.S. Extreme Values of the Poisson's Ratio of Cubic Crystals. *Technical Physics*, 2016, vol. 61, iss. 10, pp. 1516–1524. DOI: 10.1134/S1063784216100121
12. Umanskiy Ya.S. *Rentgenografiya metallov i poluprovodnikov* [X-Ray of Metals and Semiconductors]. Moscow, Metallurgiya Publ., 1969. 496 p.
13. Gulyaev A.P. *Metallovedenie* [Metal Science]. Moscow, Al'yans Publ., 2011. 650 p.
14. Khachaturyan A.G. *Teoriya fazovykh prevrashcheniy i struktura tverdykh rastvorov* [Theory of Phase Transformations and the Structure of Solid Solutions]. Moscow, Nauka Publ., 1974. 384 p.
15. Mirzaev D.A., Mirzoev A.A., Buldashev I.V., Okishev K.Yu. Thermodynamic Analysis of the Formation of Tetragonal Bainite in Steels. *Physics of Metals and Metallography*, 2017, vol. 118, iss. 6, pp. 517–523. DOI: 10.1134/S0031918X17060060

Received 13 October 2018

ОБРАЗЕЦ ЦИТИРОВАНИЯ

Анализ тетрагональности кристаллической решётки мартенсита сплавов Fe–C в модели жёстких атомов-шаров / Д.А. Мирзаев, К.Ю. Окишев, А.А. Мирзоев, И.В. Булдашев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2018. – Т. 18, № 4. – С. 46–54. DOI: 10.14529/met180405

FOR CITATION

Mirzaev D.A., Okishev K.Yu., Mirzoev A.A., Buldashev I.V. Analysis of the Tetragonality of the Crystal Lattice of Martensite of Fe–C Alloys in the Hard-Sphere Model. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Metallurgy*, 2018, vol. 18, no. 4, pp. 46–54. (in Russ.) DOI: 10.14529/met180405