УДК 538.931

Разработка потенциалов для описания межатомных взаимодействий в стали Гадфильда для молекулярно-динамического моделирования

Г. М. Полетаев¹, В. В. Коваленко²

¹ Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Россия, 656038, Алтайский край, Барнаул, пр. Ленина, 46

² Сибирский государственный индустриальный университет, Россия, 654006, Новокузнецк, ул. Кирова, 42

Аннотация. В работе разработан набор потенциалов для описания межатомных взаимодействий в многокомпонентной системе $\gamma\text{Fe-Mn-C}$, в частности в стали Гадфильда, где аустенит является основным компонентом. Для описания взаимодействий Fe-Fe в аустените предлагается использовать ЕАМ потенциал Лау. Для всех остальных взаимодействий разработаны потенциалы Морзе, параметры которых найдены по различным экспериментальным характеристикам, в частности, энергии растворения и энергии миграции соответствующей примеси в кристалле ГЦК железа, радиусам атомов, их электроотрицательности, энергии связи примесных атомов друг с другом в кристалле аустенита и др. Найденные потенциалы предназначены для моделирования атомной структуры и процессов, происходящих на атомном уровне в стали Гадфильда, с использованием относительно больших расчетных ячеек методом молекулярной динамики.

Ключевые слова: молекулярная динамика, межатомный потенциал, сталь Гадфильда, примесь.

✉ Геннадий Полетаев, e-mail: gmpoletaev@mail.ru

Development of Potentials for Description of Interatomic Interactions in Hadfield Steel for Molecular Dynamic Simulation

Gennady M. Poletaev¹, Victor V. Kovalenko²

¹ Polzunov Altai State Technical University (Prospect Lenina, 46, Barnaul, 656038, Russian Federation)

² Siberian State Industrial University (Kirov Str., 42, Novokuznetsk, 654006, Russian Federation)

Summary. Hadfield steel, due to its excellent work hardening ability, has great practical value and a long history of research into its unique properties. At the same time, today there are very few works devoted to modeling its atomic structure and the processes occurring in it under conditions of deformation at the atomic level, which is due, in particular, to the complexity of modeling such multicomponent systems. At the same time, computer modeling can help answer a number of questions concerning the mechanisms and regularities of the deformation behavior of this steel, in particular, those related to the peculiarities of the interaction of dislocations with each other, twins, grain boundaries, and other defects. In the work, a set of potentials has been developed to describe interatomic interactions in the $\gamma\text{Fe-Mn-C}$ multicomponent system, in particular, in Hadfield steel, where austenite is the main component. To describe the Fe-Fe interactions in austenite, it is proposed to use the Lau EAM potential. For all other interactions, Morse potentials were developed, the parameters of which were found from various experimental characteristics, in particular, the energy of dissolution and migration energy of the corresponding impurity in the FCC iron crystal, the radii of the atoms, their electronegativity, the binding energies of impurity atoms with each other in the austenite crystal, etc. The found potentials are intended for modeling the atomic structure and processes occurring at the atomic level in Hadfield steel using relatively large computational cells by the molecular dynamics method. It should, of course, be borne in mind that in such complex multicomponent systems as $\gamma\text{Fe-Mn-C}$, the bonds of impurity atoms depend, among other things, on the relative position of neighboring atoms of different types in the austenite lattice space. However, taking this into account strictly in our case, when the system consists of three components, will lead to a significant complication of calculations, which will not allow carrying out molecular dynamics modeling using relatively large computational cells.

Keywords: molecular dynamics, interatomic potential, Hadfield steel, impurity.

✉ Gennady Poletaev, e-mail: gmpoletaev@mail.ru

ВВЕДЕНИЕ

Сталь Гадфильда, благодаря ее превосходной способности к деформационному упрочнению [1, 2], имеет большое практическое значение и долгую историю исследования ее уникальных свойств. Вместе с тем, на сегодняшний день существует очень мало работ, посвященных моделированию ее атомной структуры и процессов, происходящих в ней, в условиях деформации на атомном уровне, что обусловлено, в частности, сложностью моделирования подобных многокомпонентных систем. В то же время компьютерное моделирование может помочь ответить на ряд вопросов, касающихся механизмов и закономерностей деформационного поведения этой стали, в частности, связанных с особенностями взаимодействия дислокаций с двойниками и границами зерен.

Настоящая работа посвящена поиску потенциалов для описания межатомных взаимодействий в стали Гадфильда для их последующего применения в молекулярно-динамическом моделировании. Сталь Гадфильда представляет собой многокомпонентную систему и, помимо классических железа, марганца и углерода, может содержать некоторые другие легирующие элементы [1, 3]. Для описания межатомных взаимодействий даже в трехкомпонентной системе необходимо, как минимум, задание шести потенциалов для связей Fe-Fe, Fe-Mn, Mn-Mn, Fe-C, Mn-C, C-C.

Работ, где в рамках одного подхода предлагаются потенциалы для всех данных связей, к сожалению очень мало. Можно выделить три работы по этой теме.

Под первой работой понимается не одна статья, а серия статей Ли и Баскеса с соавторами, которые разработали модифицированные ЕАМ потенциалы с учетом двух координационных сфер и анизотропии электронных облаков (2N MEAM потенциалы). В [4] предлагаются потенциалы для ОЦК металлов, в том числе для Fe, в [5] – потенциал для связи C-C, в [6] – 2N MEAM потенциалы для системы Fe-C, в [7] – для системы Fe-Mn, и, наконец, в [8] – все потенциалы для системы Fe-Mn-C.

Несмотря на хорошее физическое обоснование, потенциалы Ли [4 – 8] имеют два недостатка. Во-первых, данные потенциалы сравнительно очень громоздки (они включают, как минимум, 11 параметров и необходимость дополнительных расчетов взаимной ориентации атомов, по которой, в свою очередь, рассчитываются функции экранировки электронных облаков) и сильно замедляют расчет компьютерного эксперимента, что критично для моделей, включающих большое количество атомов. Во-вторых, одновременно со строгим учетом множества факторов, влияющих на межатомные взаимодействия, 2N MEAM потенциалы Ли учитывают взаимодействие только атомов не дальше 2-й координационной сферы. В нашей работе [9] было показано, что этого недостаточно. В ГЦК решетке во второй координационной сфере находится всего 6 атомов (на расстоянии $\sqrt{3/2}a$, где a – параметр решетки), тогда как в третьей – 24 атома (на расстоянии $\sqrt{2}a$, т.е. всего на $0,19a$ дальше 2-й координационной сферы). Согласно расчетам, проведенным в [9], одна только третья координационная сфера вносит вклад в расчет энергии атома около 20% в зависимости от металла, а вторая – даже меньше, около 15%.

Вторая работа, на которую мы обратили внимание, – это статья Ксе с соавторами [10], где предлагается набор парных потенциалов Морзе для описания всех искомых взаимодействий, кроме связи Fe-Mn. Однако они не подходят для моделирования стали Гадфильда, поскольку подобраны для карбидов Mn_7C_3 и Fe_7C_3 . Например, даже при использовании одного потенциала для связи Fe-Fe из [10] (основного при моделировании матрицы в стали) не удавалось получить удовлетворительные результаты для базовых характеристик ГЦК железа (параметр решетки, энергия сублимации, модуль всестороннего сжатия).

Также неудачными для нашей модели оказались потенциалы из работы [11] из-за неадекватного описания свойств аустенита. В [11] предложен набор парных потенциалов в виде кубических полиномов для всех искомых связей, кроме Mn-Mn и C-C. Связь Fe-Fe в данном случае создавалась для ОЦК железа и не подходит для ГЦК кристалла.

ВЫБОР ПОТЕНЦИАЛА ДЛЯ ОПИСАНИЯ МЕЖАТОМНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В АУСТЕНИТЕ

Ввиду вышесказанного, нами было принято решение самостоятельно подобрать потенциалы для системы $\gamma\text{Fe-Mn-C}$, которые должны удовлетворять двум важным критериям: 1) не быть математически громоздкими, чтобы с их помощью можно было моделировать большие расчетные ячейки (включающие $10^5 - 10^6$ атомов); 2) удовлетворительно описывать известные экспериментальные характеристики системы $\gamma\text{Fe-Mn-C}$.

Потенциал для описания связей Fe-Fe является базовым в системе $\gamma\text{Fe-Mn-C}$. За основу было решено взять один из известных и апробированных ЕАМ потенциалов, хорошо описывающих свойства аустенита. Большинство известных потенциалов для железа созданы для описания его ОЦК модификации, ГЦК фаза в большинстве случаев рассматривается как вторичная. Из-за этого далеко не все известные потенциалы хорошо описывают аустенит. По этой причине мы, например, отказались от известного ЕАМ потенциала Акланда и Менделева [12, 13].

Из всех рассмотренных нами потенциалов для описания связи Fe-Fe в аустените лучше всего для наших целей подошли потенциалы, предложенные Лау с соавторами [14]. Это классические ЕАМ потенциалы, где энергия i -го атома рассчитывается как сумма парной и многочастичной составляющих:

$$E_{\alpha,i} = -A_{\alpha} \sqrt{\sum_{j \neq i} \rho_{\beta\alpha}(r_{ij})} + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} \phi_{\beta\alpha}(r_{ij})$$

$$\rho_{\beta\alpha}(r_{ij}) = t_1(r - r_{c,\rho})^2 + t_2(r - r_{c,\rho})^3, \quad r \leq r_{c,\rho} \quad (1)$$

$$\phi_{\beta\alpha}(r_{ij}) = (r - r_{c,\phi})^2(k_1 + k_2r + k_3r^2), \quad r \leq r_{c,\phi}$$

Мы обратили внимание на этот потенциал в первую очередь потому, что он был детально апробирован в работе [15] при описании структурных, энергетических и упругих характеристик аустенита. Полученные значения удовлетворительно согласуются с экспериментом: параметр решетки при 0 К – 3.573 Å, энергия сублимации (на атом) – 4.228 эВ, модуль всестороннего сжатия – 156.7 ГПа. Кроме того, при апробации нами было получено хорошее согласие с коэффициентом теплового расширения – $16 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$.

ПОДБОР ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ Fe-C, C-C, Fe-Mn, Mn-Mn, Mn-C В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ АУСТЕНИТА

Для всех остальных пяти связей в рассматриваемой системе было принято решение строить парные потенциалы Морзе, которые будут удовлетворительно описывать известные характеристики. Потенциал Морзе является парным, однако часто используется в молекулярно-динамических вычислениях, в том числе и при описании межатомных взаимодействий в металлах. Парные потенциалы сравнительно часто используются различными исследователями для описания межатомных взаимодействий в системах металл-примесь [10, 16–21]. Процедура расчета сил с помощью многочастичных и парных потенциалов в компьютерной программе отличается принципиально, в связи с чем последние выигрывают в скорости, но проигрывают в физической обоснованности. Однако, учитывая погрешности экспериментальных данных, по которым подбираются потенциалы

для описания примесей в металлах (например, табл. 1), использование более простых и более быстрых парных потенциалов в данном случае имеет смысл.

Потенциал Морзе определяет энергию взаимодействия пары атомов, находящихся на расстоянии r друг от друга:

$$\varphi(r) = D\beta e^{-\alpha r}(\beta e^{-\alpha r} - 2). \quad (2)$$

При определении параметров потенциала Морзе для связи Fe-C мы опирались на уже известные потенциалы из работ [14] и [22], корректируя их так, чтобы получилось хорошее согласие с данными эксперимента и первопринципных расчетов по энергии растворения углерода в ГЦК железе E_{sol} , отличию энергий примеси углерода в октаэдрической и тетраэдрической пустотах решетки ΔE_{OT} , энергии миграции атома углерода в ГЦК железе E_m , энергии связи с вакансией E_{bv} (табл. 1). Помимо этого также учитывался радиус атомов Fe и C.

Таблица 1. Энергетические характеристики примеси углерода в ГЦК железе
Table 1. Energy characteristics of carbon impurities in FCC iron

	Модель Model	Экспериментальные данные или <i>ab initio</i> расчеты Experimental data or ab initio calculations	Потенциалы из [22] Potentials from [22]	Потенциалы из [14] Potentials from [14]
E_{sol} , eV/atom	0.38	0.25 – 0.48 [23, 24] (эксп., <i>ab initio</i>)	1.01	0.78
ΔE_{OT} , eV	1.36	1.48 [25] (<i>ab initio</i>)	1.03	1.12
E_m , eV	1.20	1.40 – 1.53 [26, 27] (эксп.)	0.33	0.86
E_{bv} , [eV]	0.41	0.37 – 0.41 [28] (эксп.)	0.50	0.54

Для описания взаимодействия атомов углерода друг с другом в решетке аустенита C-C мы трансформировали потенциалы из [16, 22] в потенциалы Морзе. Обоснование, приведенное в этих работах, нам показалось достаточно аргументированным.

При поиске параметров для Mn-Mn мы ориентировались на радиус атомов Mn, энергию сублимации и модуль упругости металлического Mn [29]. Равновесное расстояние для связи Fe-Mn рассчитывалось как сумма радиусов атомов Fe и Mn [29]. Модуль упругости – как среднее модулей для Fe и Mn. Глубина потенциальной ямы, т.е. параметр D в формуле (2), определялась по величине энергии смещения Mn в ГЦК Fe, взятой из [30], где она была рассчитана из первых принципов. Для концентрации 13 % wt. Mn энергия смещения Fe и Mn, согласно [30], составляет -0.0182 эВ/атом. Знак минус говорит о том, что смещение энергетически выгодно, а сравнительно малое значение – о том, что тенденция к упорядочению атомной структуры сплава очень слабая. Параметр D потенциала подбирался таким образом, чтобы точно получалось это значение.

Последний из необходимых шести потенциал для связи Mn-C подбирался нами с учетом потенциалов, предложенных в работах [5, 7, 10], радиусов атомов Mn и C [29], а также энергии связи атома Mn с C в ГЦК Fe. Параметры потенциалов подбирались таким образом, чтобы точно воспроизвести полученное экспериментально в [31] значение энергии связи атомов Mn и C в решетке ГЦК Fe – 0.35 эВ. Эта энергия кажется очень большой и сопоставимой, например, с энергией связи атома углерода с вакансией в железе. Но, если обратить внимание на разность электроотрицательностей атомов Mn и C по сравнению с Fe и C, 1.00 и 0.72 соответственно [29], то станет понятной такая крепкая связь, которая сравнима по крепости, наверное, со связью Al-C, для которой разность электроотрицательностей близка к связи Mn-C и составляет 0.94 [29].

При расчете энергии связи атома С с атомом Мн в ГЦК решетке Fe атом углерода вводился в ближайшее к атому Мн октаэдрическое междоузлие, как показано на рис. 1.

Известно, что в ГЦК, ГПУ и ОЦК решетках металлов примесные атомы легких элементов (таких как С, N, О и др.), согласно многочисленным исследованиям, занимают октаэдрические пустоты [32].

Рис. 1. Положение атомов Мн и С в кристаллической решетке ГЦК Fe.

Положение атомов показано без учета структурной релаксации

Fig. 1. Position of Mn and C atoms in the crystal lattice of FCC Fe.

The positions of the atoms are shown without taking into account structural relaxation

ПАРАМЕТРЫ ПОТЕНЦИАЛОВ

В табл. 2 приведены полученные параметры потенциалов Морзе. На рис. 2 изображены графики найденных потенциалов. В табл. 2 также приведены параметры для связи Fe-Fe, найденные по полученным с помощью потенциала из [14] значениям параметра решетки γ -Fe, энергии сублимации и модуля всестороннего сжатия. Потенциал Морзе для связи Fe-Fe является более простым аналогом ЕАМ потенциала Лау [14] и также хорошо описывает указанные выше характеристики, включая тепловое расширение. Он может заменять более ресурсоемкий потенциал Лау [14], например, в моделях с большим количеством атомов и при длительных компьютерных экспериментах, требующих больших мощностей.

Все потенциалы Морзе найдены для радиуса обреза 4.7 Å, т.е. при учете трех первых координационных сфер в ГЦК Fe. Учет большего числа, например, пяти сфер, как мы делали, например, в [9, 20, 21], ведет к существенному замедлению скорости счета по сравнению с учетом трех сфер, при сравнительно небольшом повышении точности.

Таблица 2. Параметры потенциалов Морзе для связей в системе γ Fe-Mn-C

Table 2. Parameters of Morse potential for bonds in the γ Fe-Mn-C system

	Fe-Fe	Fe-C	C-C	Mn-Mn	Mn-Fe	Mn-C
$\alpha, \text{\AA}^{-1}$	1.28462	1.82	1.97	1.32131	1.30598	1.87
β	35.87811	41	50	39.79182	38.03002	43
D, eV	0.43344	0.41	0.65	0.37264	0.4126	0.777

Рис. 2. Потенциалы Морзе для связей в системе $\gamma\text{Fe-Mn-C}$
 Fig. 2. Morse potentials for bonds in the $\gamma\text{Fe-Mn-C}$ system

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе разработан набор потенциалов для описания межатомных взаимодействий в многокомпонентной системе $\gamma\text{Fe-Mn-C}$, в частности в стали Гадфильда, где аустенит является основным компонентом. Для описания взаимодействий Fe-Fe в аустените предлагается использовать EAM потенциал Лау. Для всех остальных взаимодействий разработаны потенциалы Морзе, параметры которых найдены по различным экспериментальным характеристикам, в частности, энергии растворения и энергии миграции соответствующей примеси в кристалле ГЦК железа, радиусам атомов, их электроотрицательности, энергии связи примесных атомов друг с другом в кристалле аустенита и др. Найденные потенциалы предназначены для моделирования атомной структуры и процессов, происходящих на атомном уровне в стали Гадфилда, с использованием относительно больших расчетных ячеек методом молекулярной динамики.

Следует, конечно, иметь в виду, что в таких сложных многокомпонентных системах, как $\gamma\text{Fe-Mn-C}$, связи примесных атомов зависят, помимо прочего, от взаимного расположения в пространстве решетки аустенита соседних атомов разного сорта. Однако строгий учет этого в нашем случае, когда система состоит из трех компонентов, приведет к существенному усложнению вычислений, что не позволит проводить молекулярно-динамическое моделирование с использованием сравнительно больших расчетных ячеек.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (FZMM-2020-0002).

This work was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (FZMM-2020-0002).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chen C., Zhang F. C., Wang F., Liu H., Yu B. D. Effect of N+Cr alloying on the microstructures and tensile properties of Hadfield steel // *Materials Science and Engineering A*, 2017, vol. 679, pp. 95-103. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2016.09.106>
2. Zhang F. C., Lv B., Wang T. S., Zheng C. L., Zhang M., Luo H. H., Liu H., Xu A. Y. Explosion hardening of Hadfield steel crossing // *Materials Science and Technology*, 2010, vol. 26, iss. 2, pp. 223-229. <https://doi.org/10.1179/174328408X363263>
3. Chen C., Lv B., Ma H., Sun D., Zhang F. Wear behavior and the corresponding work hardening characteristics of Hadfield steel // *Tribology International*, 2018, vol. 121, pp. 389-399. <http://dx.doi.org/10.1016/j.triboint.2018.01.044>
4. Lee B. J., Baskes M. I., Kim H., Cho Y. K. Second nearest-neighbor modified embedded atom method potentials for BCC transition metals // *Physical Review B*, 2001, vol. 64, iss. 18, 184102. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.64.184102>
5. Lee B. J., Lee J. W. A modified embedded atom method interatomic potential for carbon // *Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry*, 2005, vol. 29, iss. 1, pp. 7-16. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2005.02.003>
6. Lee B. J. A modified embedded atom method interatomic potential for the Fe-C system // *Acta Materialia*, 2006, vol. 54, iss. 3, pp. 701-711. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2005.09.034>
7. Kim Y. M., Shin Y. H., Lee B. J. Modified embedded-atom method interatomic potentials for pure Mn and the Fe-Mn system // *Acta Materialia*, 2009, vol. 57, iss. 2, pp. 474-482. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2008.09.031>
8. Aslam I., Baskes M. I., Dickel D. E., Adibi S., Li B., Rhee H., Asle Zaem M., Horstemeyer M. F. Thermodynamic and kinetic behavior of low-alloy steels: An atomic level study using an Fe-Mn-Si-C modified embedded atom method (MEAM) potential // *Materialia*, 2019, vol. 8, 100473. <https://doi.org/10.1016/j.mtla.2019.100473>
9. Полетаев Г. М., Старостенков М. Д., Зоря И. В. Потенциалы Морзе для ГЦК металлов при учете взаимодействия пяти координационных сфер // *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*. 2017. Т. 14, № 1. С. 70-75.
10. Xie J. Y., Chen N. X., Shen J., Teng L., Seetharaman S. Atomistic study on the structure and thermodynamic properties of Cr_7C_3 , Mn_7C_3 , Fe_7C_3 // *Acta Materialia*, 2005, vol. 53, iss. 9, pp. 2727-2732. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2005.02.039>
11. Numakura H., Yotsui G., Koiwa M. Calculation of the strength of Snoek relaxation in dilute ternary B.C.C. alloys // *Acta Metallurgica et Materialia*, 1995, vol. 43, iss. 2, pp. 705-714. [https://doi.org/10.1016/0956-7151\(94\)00262-G](https://doi.org/10.1016/0956-7151(94)00262-G)
12. Mendeleev M. I., Han S., Srolovitz D. J., Ackland G. J., Sun D. Y., Asta M. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron // *Philosophical Magazine*, 2003, vol. 83, iss. 35, pp. 3977-3994. <https://doi.org/10.1080/14786430310001613264>
13. Ackland G. J., Mendeleev M. I., Srolovitz D. J., Han S., Barashev A. V. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α -iron // *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2004, vol. 16, iss. 27, S2629. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/16/27/003>
14. Lau T. T., Forst C. J., Lin X., Gale J. D., Yip S., Van Vliet K. J. Many-body potential for point defect clusters in Fe-C alloys // *Physical Review Letters*, 2007, vol. 98, iss. 21, 215501. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.98.215501>
15. Oila A., Bull S. J. Atomistic simulation of Fe-C austenite // *Computational Materials Science*, 2009, vol. 45, iss. 2, pp. 235-239. <https://doi.org/10.1016/J.COMMATSCI.2008.09.013>
16. Ruda M., Farkas D., Abriata J. Interatomic potentials for carbon interstitials in metals and intermetallics // *Scripta Materialia*, 2002, vol. 46, iss. 5, pp. 349-355. [https://doi.org/10.1016/S1359-6462\(01\)01250-7](https://doi.org/10.1016/S1359-6462(01)01250-7)
17. Vashishta P., Kalia R. K., Nakano A., Rino J. P. Interaction potentials for alumina and molecular dynamics simulations of amorphous and liquid alumina // *Journal of Applied Physics*, 2008, vol. 103, iss. 8, 083504. <https://doi.org/10.1063/1.2901171>
18. Liu S. J., Shi S. Q., Huang H., Woo C. H. Interatomic potentials and atomistic calculations of some metal hydride systems // *Journal of Alloys and Compounds*, 2002, vol. 330-332, pp. 64-69. <https://doi.org/10.1016/S0925-8388%2801%2901451-7>
19. San Miguel M. A., Sanz J. F. Molecular-dynamics simulations of liquid aluminum oxide // *Physical Review B*, 1998, vol. 58, pp. 2369-2371. <https://doi.org/10.1103/PHYSREVB.58.2369>
20. Poletaev G. M., Zorya I. V., Rakitin R. Y., Iliina M. A. Interatomic potentials for describing impurity atoms of light elements in FCC metals // *Materials Physics and Mechanics*, 2019, vol. 42, no. 4, pp. 380-388. (In Russian). http://dx.doi.org/10.18720/MPM.4242019_2
21. Полетаев Г. М., Кулабухова Н. А., Старостенков М. Д. Потенциалы межатомного взаимодействия в системах Pd-H и Ni-H // *Химическая физика и мезоскопия*. 2011. Т. 13, № 3. С. 411-418.
22. Ruda M., Farkas D., Garcia G. Atomistic simulations in the Fe-C system // *Computational Materials Science*, 2009, vol. 45, iss. 2, pp. 550-560. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.11.020>

23. Gustafson P. A thermodynamic evaluation of the Fe-C System // *Scandinavian Journal of Metallurgy*, 1985, vol. 14, pp. 259-267.
24. Ридный Я. М., Мирзоев А. А., Мирзаев Д. А. Ab initio моделирование энергии растворения и активности углерода в ГЦК-Fe // *Физика твердого тела*. 2017. Т. 59, № 7. С. 1255-1260.
25. Jiang D. E., Carter E. A. Carbon dissolution and diffusion in ferrite and austenite from first principles // *Physical Review B*, 2003, vol. 67, 214103. <https://doi.org/10.1103/PHYSREVB.67.214103>
26. Askall J. Tracer diffusion data for metals, alloys and simple oxides. New York: Plenum Press, 1970. 107 p. <https://doi.org/10.1007/978-1-4684-6075-9>
27. Brandes E. A., Brook G. B. *Smithells metals reference book*. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1992. 1794 p.
28. Slane J. A., Wolverton C., Gibala R. Carbon-vacancy interactions in austenitic alloys // *Materials Science and Engineering A*, 2004, vol. 370, iss. 1, pp. 67-72. <http://dx.doi.org/10.1016/j.msea.2003.08.073>
29. CRC Handbook of Chemistry and Physics (Internet Version 2005). Edit by DR Lide. Boca Raton: CRC Press, 2005.
30. Мирзоев А. А., Ялалов М. М., Мирзаев Д. А. Энергия смешения и магнитное состояние компонентов сплавов Fe-Mn по результатам первопринципных расчетов в основном состоянии // *Физика металлов и металловедение*. 2006. Т. 101, № 4. С. 371-378.
31. Massardier V., Merlin J., Le Patezour E., Soler M. Mn-C interaction in Fe-C-Mn steels: study by thermoelectric power and internal friction // *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2005, vol. 36, pp. 1745-1755. <http://dx.doi.org/10.1007/s11661-005-0039-x>
32. Goldschmidt H. J. *Interstitial Alloys*. London: Butterworths, 1967. 640 p.

REFERENCES

1. Chen C., Zhang F. C., Wang F., Liu H., Yu B. D. Effect of N+Cr alloying on the microstructures and tensile properties of Hadfield steel. *Materials Science and Engineering A*, 2017, vol. 679, pp. 95-103. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2016.09.106>
2. Zhang F. C., Lv B., Wang T. S., Zheng C. L., Zhang M., Luo H. H., Liu H., Xu A. Y. Explosion hardening of Hadfield steel crossing. *Materials Science and Technology*, 2010, vol. 26, iss. 2, pp. 223-229. <https://doi.org/10.1179/174328408X363263>
3. Chen C., Lv B., Ma H., Sun D., Zhang F. Wear behavior and the corresponding work hardening characteristics of Hadfield steel. *Tribology International*, 2018, vol. 121, pp. 389-399. <http://dx.doi.org/10.1016/j.triboint.2018.01.044>
4. Lee B. J., Baskes M. I., Kim H., Cho Y. K. Second nearest-neighbor modified embedded atom method potentials for BCC transition metals. *Physical Review B*, 2001, vol. 64, iss. 18, Article no. 184102. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.64.184102>
5. Lee B. J., Lee J. W. A modified embedded atom method interatomic potential for carbon. *Computer Coupling of Phase Diagrams and Thermochemistry*, 2005, vol. 29, iss. 1, pp. 7-16. <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2005.02.003>
6. Lee B. J. A modified embedded-atom method interatomic potential for the Fe-C system. *Acta Materialia*, 2006, vol. 54, iss. 3, pp. 701-711. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2005.09.034>
7. Kim Y. M., Shin Y. H., Lee B. J. Modified embedded-atom method interatomic potentials for pure Mn and the Fe-Mn system. *Acta Materialia*, 2009, vol. 57, iss. 2, pp. 474-482. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2008.09.031>
8. Aslam I., Baskes M. I., Dickel D. E., Adibi S., Li B., Rhee H., Asle Zaeem M., Horstemeyer M. F. Thermodynamic and kinetic behavior of low-alloy steels: An atomic level study using an Fe-Mn-Si-C modified embedded atom method (MEAM) potential. *Materialia*, 2019, vol. 8, Article no. 100473. <https://doi.org/10.1016/j.mtla.2019.100473>
9. Poletaev G. M., Starostenkov M. D., Zorya I. V. Potentsialy Morze dlya GTSK metallov pri uchete vzaimodeystviya pyati koordinatsionnykh sfer [Morse potentials for FCC metals taking into account the interaction of the five coordination spheres]. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia* [Basic Problems of Material Science], 2017, vol. 14, no. 1, pp. 70-75. (In Russian).
10. Xie J. Y., Chen N. X., Shen J., Teng L., Seetharaman S. Atomistic study on the structure and thermodynamic properties of Cr₇C₃, Mn₇C₃, Fe₇C₃. *Acta Materialia*, 2005, vol. 53, iss. 9, pp. 2727-2732. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2005.02.039>
11. Numakura H., Yotsui G., Koiwa M. Calculation of the strength of Snoek relaxation in dilute ternary B.C.C. alloys. *Acta Metallurgica et Materialia*, 1995, vol. 43, iss. 2, pp. 705-714. [https://doi.org/10.1016/0956-7151\(94\)00262-G](https://doi.org/10.1016/0956-7151(94)00262-G)
12. Mendelev M. I., Han S., Srolovitz D. J., Ackland G. J., Sun D. Y., Asta M. Development of new interatomic potentials appropriate for crystalline and liquid iron. *Philosophical Magazine*, 2003, vol. 83, iss. 35, pp. 3977-3994. <https://doi.org/10.1080/14786430310001613264>
13. Ackland G. J., Mendelev M. I., Srolovitz D. J., Han S., Barashev A. V. Development of an interatomic potential for phosphorus impurities in α -iron. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2004, vol. 16, iss. 27, S2629. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/16/27/003>

14. Lau T. T., Forst C. J., Lin X., Gale J. D., Yip S., Van Vliet K. J. Many-body potential for point defect clusters in Fe-C alloys. *Physical Review Letters*, 2007, vol. 98, iss. 21, 215501. <https://doi.org/10.1103/physrevlett.98.215501>
15. Oila A., Bull S. J. Atomistic simulation of Fe-C austenite. *Computational Materials Science*, 2009, vol. 45, iss. 2, pp. 235-239. <https://doi.org/10.1016/J.COMMATSCI.2008.09.013>
16. Ruda M., Farkas D., Abriata J. Interatomic potentials for carbon interstitials in metals and intermetallics. *Scripta Materialia*, 2002, vol. 46, iss. 5, pp. 349-355. [https://doi.org/10.1016/S1359-6462\(01\)01250-7](https://doi.org/10.1016/S1359-6462(01)01250-7)
17. Vashishta P., Kalia R. K., Nakano A., Rino J. P. Interaction potentials for alumina and molecular dynamics simulations of amorphous and liquid alumina. *Journal of Applied Physics*, 2008, vol. 103, iss. 8, 083504. <https://doi.org/10.1063/1.2901171>
18. Liu S. J., Shi S. Q., Huang H., Woo C. H. Interatomic potentials and atomistic calculations of some metal hydride systems. *Journal of Alloys and Compounds*, 2002, vol. 330-332, pp. 64-69. [https://doi.org/10.1016/S0925-8388\(01\)01451-7](https://doi.org/10.1016/S0925-8388(01)01451-7)
19. San Miguel M. A., Sanz J. F. Molecular-dynamics simulations of liquid aluminum oxide. *Physical Review B*, 1998, vol. 58, pp. 2369-2371. <https://doi.org/10.1103/PHYSREVB.58.2369>
20. Poletaev G. M., Zorya I. V., Rakitin R. Y., Iliina M. A. Interatomic potentials for describing impurity atoms of light elements in FCC metals. *Materials Physics and Mechanics*, 2019, vol. 42, no. 4, pp. 380-388. (In Russian). http://dx.doi.org/10.18720/MPM.4242019_2
21. Poletaev G. M., Kulabukhova N. A., Starostenkov M. D. Potentsialy mezhatomnogo vzaimodeystviya v sistemakh Pd-H i Ni-H [Interatomic interaction potentials in Pd-H and Ni-H systems]. *Khimicheskaya fizika i mezoskopiya* [Chemical Physics and Mesoscopy], 2011, vol. 13, no. 3, pp. 411-418. (In Russian).
22. Ruda M., Farkas D., Garcia G. Atomistic simulations in the Fe-C system. *Computational Materials Science*, 2009, vol. 45, iss. 2, pp. 550-560. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.11.020>
23. Gustafson P. A thermodynamic evaluation of the Fe-C System. *Scandinavian Journal of Metallurgy*, 1985, vol. 14, pp. 259-267.
24. Ridnyi Y. M., Mirzoev A. A., Mirzaev D. A. Ab initio simulation of dissolution energy and carbon activity in FCC Fe. *Physics of the Solid State*, 2017, vol. 59, pp. 1279-1284. (In Russian). <https://doi.org/10.1134/S1063783417070204>
25. Jiang D. E., Carter E. A. Carbon dissolution and diffusion in ferrite and austenite from first principles. *Physical Review B*, 2003, vol. 67, 214103. <https://doi.org/10.1103/PHYSREVB.67.214103>
26. Askil J. *Tracer diffusion data for metals, alloys and simple oxides*. New York: Plenum Press, 1970. 107 p. <https://doi.org/10.1007/978-1-4684-6075-9>
27. Brandes E. A., Brook G. B. *Smithells metals reference book*. Oxford: Butterworth-Heinemann, 1992. 1794 p.
28. Slane J. A., Wolverton C., Gibala R. Carbon-vacancy interactions in austenitic alloys. *Materials Science and Engineering A*, 2004, vol. 370, iss. 1, pp. 67-72. <http://dx.doi.org/10.1016/j.msea.2003.08.073>
29. *CRC Handbook of Chemistry and Physics* (Internet Version 2005). Edit by DR Lide. Boca Raton: CRC Press, 2005.
30. Mirzoev A. A., Yalalov M. M., Mirzaev D. A. Energy of mixing and magnetic state of components of Fe-Mn alloys: a first-principles calculation for the ground state. *The Physics of Metals and Metallography*, 2006, vol. 101, no. 4, pp. 341-348. (In Russian). <https://doi.org/10.1134/S0031918X06040065>
31. Massardier V., Merlin J., Le Patezour E., Soler M. Mn-C interaction in Fe-C-Mn steels: study by thermoelectric power and internal friction. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2005, vol. 36, pp. 1745-1755. <http://dx.doi.org/10.1007/s11661-005-0039-x>
32. Goldschmidt H. J. *Interstitial Alloys*. London: Butterworths, 1967. 640 p.

Поступила 20.09.2021; после доработки 05.10.2021; принята к опубликованию 06.10.2021
Received 20 September 2021; received in revised form 05 October 2021; accepted 06 October 2021

Полетаев Геннадий Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой высшей математики и математического моделирования, АлтГТУ, Барнаул, Российская Федерация, e-mail: gmpoletaev@mail.ru

Gennady M. Poletaev, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor, Head of the Department of Higher Mathematics and Mathematical Modeling, Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russian Federation, e-mail: gmpoletaev@mail.ru

Коваленко Виктор Викторович, доктор физико-математических наук, профессор, СибГИУ, Новокузнецк, Российская Федерация

Viktor V. Kovalenko, Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Russian Federation