

# МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ УПОРЯДОЧЕНИЯ УГЛЕРОДА В МАРТЕНСИТЕ СТАЛИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ВНЕШНЕГО НАПРЯЖЕНИЯ

## MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION OF CARBON ORDERING AT MARTENSITE LATTICE UNDER EXTERNAL STRESS

*П. В. Чирков, А. А. Мирзоев*  
*P. V. Chirkov, A. A. Mirzoev*

Южно-Уральский государственный университет  
South Ural State University

Методом молекулярной динамики с межчастичным потенциалом погруженного атома (EAM) проведено компьютерное моделирование перераспределения атомов углерода по подрешеткам под действием внешнего напряжения. Обнаружено, что при сжатии вдоль оси Oz происходит миграция атомов углерода, в результате чего происходит смена оси тетрагональности и формируется упорядоченное состояние вдоль оси Ox или Oy, причем выбор направления осуществляется случайным образом. С помощью моделирования получены концентрационные и температурные зависимости критического напряжения.

We applied molecular dynamics method with EAM interatomic potential to the carbon ordering problem. It was found migration interstices of carbon atoms from z octahedral occurs under external stress and the tetragonality direction changes from Oz axis to Ox or Oy ones. Dependences of critical stress on temperature and carbon content were obtained.

Согласно экспериментальным исследованиям [1] мартенситу стали присуща тетрагональная решетка, представляющая собой несколько растянутую вдоль одного направления ОЦК решетку  $\alpha$ -железа, а атомы углерода находятся в октаэдрических междуузлиях решетки. Для объяснения этого явления была предложена термодинамическая теория упорядочения в сплавах внедрения [2, 3], основанная на понятии параметра порядка при фазовых превращениях. В ОЦК решетке по направлению короткой диагонали октаэдра можно выделить три типа октапор ( $x$ ,  $y$  и  $z$ ), соответственно при попадании атома углерода в междуузлия определенного типа, происходит растяжение решетки вдоль этой оси. При нахождении атомов углерода в октапорах  $z$ -типа образуется тетрагональная решетка, такое состояние мы будем называть упорядоченным, когда атомы углерода поровну заполняют поры всех трех типов, наблюдается небольшое изотропное удлинение, это состояние назовем неупорядоченным. Согласно результатам указанной выше теории существует некоторая температура  $T_{crit}$ , ниже которой стабильна упорядоченная фаза, а выше – неупорядоченная, т. е. происходит фазовый переход порядок-беспорядок. Данные результаты были под-

тверждены компьютерным моделированием методом молекулярной динамики [4]

Очевидно, что на порядок углерода в мартенсите помимо температуры сильное влияние могут оказывать внешние напряжения, возникающие например при быстром охлаждении. Однако, в имеющиеся теоретических работах [2, 5] не было детального рассмотрения влияния напряжений, кроме того термодинамическая теория сама по себе не может предоставить данные о кинетике углерода в мартенсите. В связи с этим целесообразным выглядит использование моделирования, которое может предоставить больше информации о системе, нежели теоретическое исследование.

В данной работе для исследования динамики перераспределения углерода в подрешетках мартенсита был использован метод классической молекулярной динамики, реализованный в программном пакете LAMMPS [6]. Для описания межчастичного взаимодействия в системе Fe–C был использован набор межчастичных потенциалов погруженного атома для Fe–Fe, Fe–C и C–C, предложенный в работе [7], который, как было показано ранее [4], позволяет адекватно описать взаимодействие внедренных атомов углерода в ОЦК железе.

Все расчеты были проведены с термостатом и баростатом Нозье – Гувера [8, 9], при этом прикладываемое напряжение контролировалось вдоль каждой оси независимо, таким образом, делая возможным изменение размера и формы ячейки и диффузию атомов углерода по октапорам различного типа. Для исключения влияния эффектов, связанных с наличием свободных поверхностей использовались периодические граничные условия, шаг по времени равнялся 1 фс.

Стоит отметить, что потенциалы взаимодействия Fe–C и C–C в мартенсите Fe–C и карбидах железа существенно различаются, поэтому образование карбидов железа при моделировании не происходило, что позволило выявить диффузионное перераспределение углерода по подрешеткам не осложненное образованием карбидов и выходом углерода из решетки.

Для исследования влияния напряжений на тетрагональность мартенсита была использована следующая последовательность операций:

- начальная конфигурация представляла собой ОЦК решетку из 16 000 атомов железа, в которой углерод случайно распределялся по октапорам  $z$ -типа. При этом минимально возможное расстояние между ближайшими атомами углерода было выбрано равным параметру решетки  $a_0 = 2,866 \text{ \AA}$ ;

- далее проводилась структурная релаксация решетки (соответствующая основному состоянию при 0 К) методом минимизации энергии системы, в результате которой появлялась тетрагональность решетки вдоль оси  $z$ ;

- в течение последующих 20 нс производилась релаксация температуры и давления;

- на следующем этапе вдоль оси  $z$  прикладывалось постоянное сжимающее напряжение  $\sigma_z$ , тогда как вдоль двух оставшихся осей напряжение оставалось нулевым, при этом временной интервал моделирования составлял не менее 0,5 мкс (500 млн. шагов моделирования).

Влияние напряжения на расположение углерода в подрешетках мартенсита показано на рис. 1, где изображены временные зависимости относительные количества атомов углерода (при температуре 500 К и  $\sigma_z = 400 \text{ МПа}$ ), находящиеся в октапорах определенного типа. Видно, что вследствие прикладываемого напряжения происходит сжатие решетки вдоль оси тетрагональности, которое вызывает переход атомов углерода из  $z$ -октапор в междуузлия  $x$ - и  $y$ -типа.

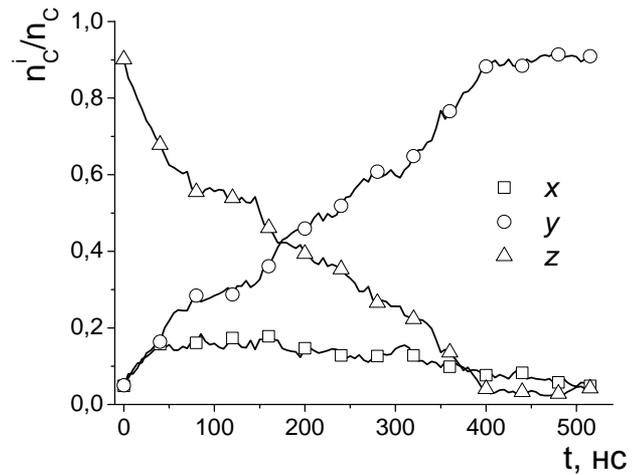


Рис. 1. Зависимости относительного числа атомов углерода находящихся в октапорах определенного типа, которые иллюстрируют процесс смены оси тетрагональности в результате приложения внешнего напряжения

На начальном этапе подрешетки  $x$  и  $y$  заполняются одинаково ( $n_C^x = n_C^y$ ). Однако, начиная с долевого заполнения примерно  $n_C^i/n_C$ , заселенность одной из подрешеток продолжает увеличиваться, 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 формирование упорядоченного состояния завершается.

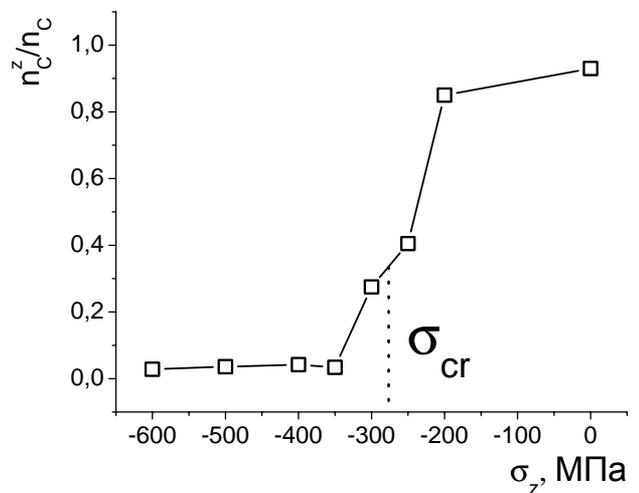


Рис. 2. Зависимость от прикладываемого напряжения относительного количества атомов углерода, оставшихся в  $z$ -подрешетке

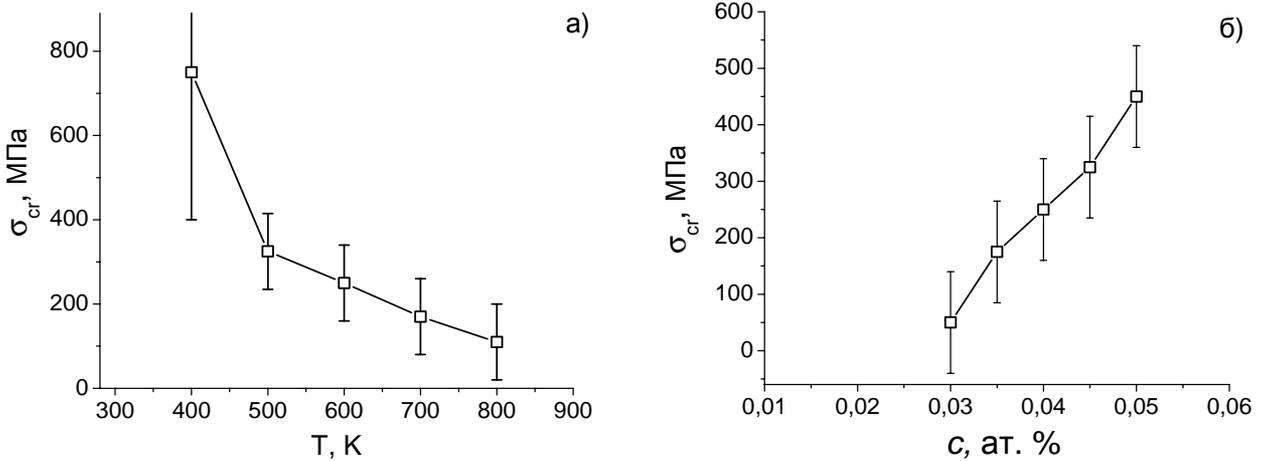


Рис. 3. Зависимости критического напряжения от температуры (а) и содержания углерода

На рис. 2 представлены зависимости относительного числа атомов углерода в  $z$ -порах, оставшихся в конце расчета с постоянным напряжением, от величины прикладываемого напряжения. Видно, что при малых значениях  $\sigma_z$  перескок порядка не происходит, однако по мере увеличения по модулю прикладываемого сжимающего напряжения происходит уменьшение величины  $n_C^z/n_C$  и, по достижению определенного критического значения  $\sigma_{cr}$ , будет наблюдаться смена оси с максимальной заселенностью углеродом, а  $n_C^z/n_C$  станет близко к нулю. Время моделирования составляло от 0,5 мкс для значений напряжений, при которых смена оси тетрагональности происходит аналогично рис. 1, и достигало 1,5 мкс для напряжений близких к  $\sigma_{cr}$ , когда процесс перескока замедляется и даже не был завершен для некоторых расчетов, когда  $n_C^z/n_C = 0,3 \div 0,4$ . Величина  $\sigma_{cr}$  рассчитывалась как середина интервала, где происходит изменение напряжения. Погрешность определялась шириной этого интервала или флуктуацией давления для данного размера суперячейки (90 МПа).

Аналогичные расчеты были проведены для различных концентраций при  $T = 500$  К и при разных температурах ( $c_C = 4,5$  ат. %), что позволило определить, как зависит критическое напряжение от этих параметров (рис. 3 а, б). При низких температурах требуется большее по модулю напряжение для изменения ориентации тетрагональности в решетке мартенсита, что связано с замедлением диффузии углерода. Для малых концентраций углерода значение критического напряжения приближается к нулевому значению.

Это объясняется тем фактом [3], что при заданной температуре ниже определенного значения содержания углерода существует область, где стабильным является кубическое состояние, с равномерным заполнением подрешеток атомами углерода. Исследование влияния напряжений на данное состояние не являлось предметом данного исследования. Стоит отметить, что результаты моделирования для 400 К имеют меньшую точность из-за низкой скорости перескока атомов углерода при данной температуре, в то время как увеличение времени счета оказывалось затруднительным.

Итак, в данной работе с использованием метода молекулярной динамики исследовался мартенсит системы железо-углерод, а также влияние внешних напряжений на расположение углерода в кристаллической решетке и связанную с ним ориентацию оси тетрагональности. Было получено, что при сжатии происходит перераспределение углерода по окаэдрическим междоузлиям различного типа. При достижении определенного значения сжимающего напряжения весь углерод мигрирует из подрешетки с направлением первоначальной тетрагональности, при этом вдоль другой, свободной от напряжения оси, происходит формирование упорядоченного состояния. Также были рассчитаны зависимости этого критического напряжения от температуры в системе и концентрации углерода.

### Список литературы

1. Курдюмов Г. В. Кристаллическая решётка мартенсита. Механизм А-М превращения и поведение углерода в мартенсите // ФММ. 1976. Т. 42, № 3 С. 527–545.

2. Zener C. Theory of strain interaction of solute atoms // *Phys. Rev.* 1948. Vol. 74, № 6. P. 639–647.
3. Хачатурян А. Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов. М.: Наука 1974.
4. Чирков П. В., Мирзоев А. А., Мирзаев Д. А. Тетрагональность и распределение атомов углерода в мартенсите Fe–C на основе молекулярно-динамического моделирования // *ФММ.* 2016. Т. 117. № 1. С. 1–8.
5. Штремель М. А. Влияние напряжений на порядок в растворах внедрения // *ФММ.* 1972. Т. 34, № 4. С. 699–708.
6. Plimton S. Fast parallel algorithm for short range molecular dynamics // *Journal of Computational Physics.* 1995. Vol. 117, №. 1. P. 1–19.
7. Lau T., Forst C. J. F. Many-body potential for point defect clusters in Fe–C alloys // *Phys. Rev. Lett.* 2007. Vol. 98, № 21.
8. Hoover, W. G. Canonical Dynamics: Equilibrium Phase-Space Distributions // *Phys. Rev. A.* 1985. Vol. 31, №. 3. P. 1695–1697.
9. Nose S. Constant-Temperature Molecular Dynamics // *J. Phys.: Condens. Matter.* 1990. Vol. 2 P. 115–119.