

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИИ УГЛЕРОДА В МАРТЕНСИТЕ СТАЛИ

А.А. Мирзоев, П.В. Чирков

Методом молекулярной динамики проведено моделирование диффузии углерода в мартенсите стали. Получены зависимости коэффициента диффузии от температуры и содержания углерода в сплаве.

Ключевые слова: сталь, мартенсит, метод молекулярной динамики, диффузия.

Мартенситное превращение протекает при резком охлаждении аустенита системы железо-углерод и является основой закалки стали, так как именно оно связано с повышением твердости и прочности. Исследование кристаллической решетки мартенсита, впервые проведенное Г.В. Курдюмовым и др. [1], показало, что мартенситу присуща тетрагональная решетка, которую следует рассматривать как несколько растянутую вдоль одно-

го направления решетку α -железа (ОЦК). Параметры решетки мартенсита a и c при комнатной температуре оказались линейно зависящими от концентрации углерода.

Для объяснения тетрагональности мартенсита была создана термодинамическая теория [2–4], основанная на рассмотрении свободной энергии как функции параметра порядка, который зависит от расположения атомов углерода по октаэдрическим подрешеткам. Данная теория смогла показать, что при определенных условиях термодинамически стабильно заполнение атомами углерода октапор одного типа.

Однако для более глубокого понимания механизма мартенситного перехода необходимо знание кинетики углерода в сплаве. В работах [5, 6] экспериментально были определены зависимости коэффициента диффузии от температуры для феррита с концентрацией углерода $\approx 1,5$ ат. %. Для большего содержания углерода в литературе данные отсутствуют.

В данной работе представлены результаты моделирования диффузии углерода в мартенсите методом молекулярной динамики, выполненные в программном пакете LAMMPS [7] с использованием межчастичного потенциала погруженного атома (EAM) [8]. Ранее [9, 10] было показано, что такой подход позволяет адекватно описать взаимодействие внедренных атомов углерода в ОЦК железе.

Все расчеты были проведены с термостатом и баростатом Нозье-Гувера [11, 12], при этом прикладываемое напряжение контролировалось вдоль каждой оси независимо. Для исключения влияния эффектов, связанных с наличием свободных поверхностей использовались периодические граничные условия, шаг по времени равнялся 1 фс. Начальная конфигурация представляла собой ОЦК решетку из 16000 атомов железа, в которой углерод случайно распределялся по октаэдрическим междуузлиям. При этом минимально возможное расстояние между ближайшими атомами углерода было выбрано равным параметру решетки $a_0=2,866$ Å, т.к. согласно данным *ab initio* расчетов [13] атомы углерода в ОЦК решетке железа на малых расстояниях испытывают отталкивание.

На рис. 1 представлена временная зависимость среднего квадрата смещения атомов углерода от начального положения (сплошная линия), а также результат линейной аппроксимации методом наименьших квадратов (пунктир). Стоит отметить, что при расчете перемещения углерода периодические граничные условия не должны учитываться, т.к. это окажет влияние на итоговый результат. Из рисунка видно, что начиная со времени 50 нс происходит линейный рост среднего квадрата смещения $\langle r^2 \rangle$, при этом угловой коэффициент прямой связан с коэффициентом диффузии D согласно выражению:

$$D = \frac{1}{6} \frac{\langle r^2 \rangle}{t}.$$

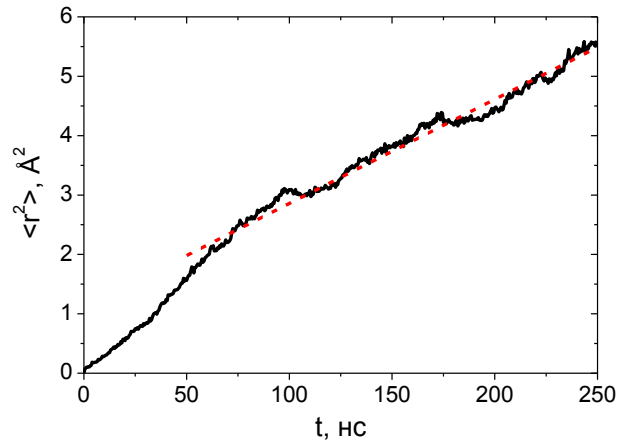


Рис. 1. Средний квадрат перемещения атомов углерода от времени (сплошная линия) и линейная аппроксимация (пунктир) полученных результатов

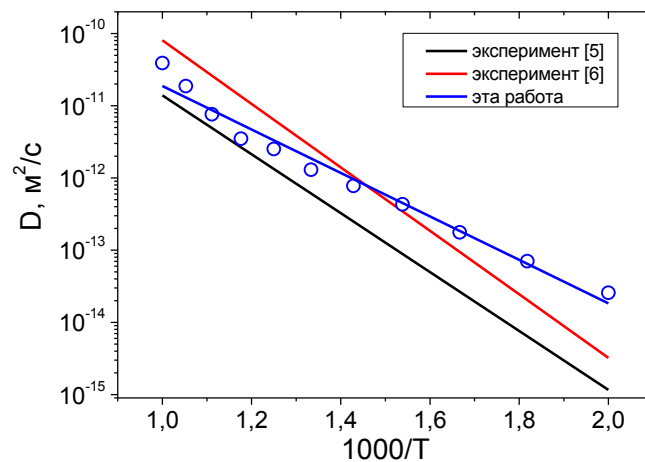


Рис. 2. Зависимости диффузии от обратной температуры

В проведенных расчетах погрешность определения углового коэффициента лежала в интервале $20 \div 30 \%$.

Сравнение (рис. 2) результатов моделирования зависимости коэффициента диффузии от температуры с доступными экспериментальными данными [5, 6] для феррита ($c \approx 1,5$ ат. %) показывает, что расчетные данные также демонстрируют экспоненциальную зависимость согласно уравнению Аррениуса:

$$D = D_0 e^{\frac{E_a}{k_B T}},$$

где E_a - энергия активации диффузии, k_B - постоянная Больцмана, T - температура, D_0 - коэффициент. Однако полученное значение энергии актива-

ции 0,62 эВ несколько отличается от величин 0,83 [5] и 0,71 эВ [6] полученных из эксперимента. Известно, что значение E_a примерно равно энергетическому барьеру при миграции атома углерода из одной октапоры в соседнюю, который согласно данным [13] моделирования из первых принципов составляет 0,9 эВ, а используемый в данной работе потенциал межчастичного взаимодействия дает значение 0,63 эВ.

Зависимость коэффициента диффузии от концентрации углерода c при $T = 500$ К представлена на рис. 3. При увеличении c происходит значительное замедление диффузии, что вызвано сокращением среднего расстояния между атомами углерода, а значит, и более сильным взаимодействием между ними.

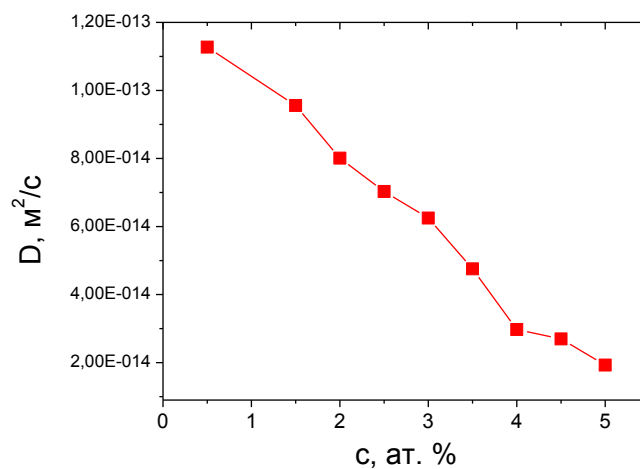


Рис. 3. Коэффициент диффузии как функция концентрации углерода

Итак, в данной работе методом молекулярной динамики были рассчитаны концентрационные и температурные зависимости коэффициента диффузии углерода в железе. Полученные результаты демонстрируют удовлетворительное согласие с экспериментальными данными, наблюдаемые различия обусловлены как погрешностями расчета, так и особенностями используемого потенциала. Также было найдено, что при увеличении содержания углерода в сплаве происходит значительное уменьшение коэффициента диффузии.

Библиографический список

1. Курдюмов, Г.В. Кристаллическая решётка мартенсита. Механизм А-М превращения и поведение углерода в мартенсита / Г.В. Курдюмов // ФММ. – 1976. - Т. 42, №. 3 – С. 527–545.
2. Zener, C. Theory of Strain Interaction of Solute Atoms / C. Zener // Phys. Rev. - 1948. - Vol. 74, №. 6. - Pp. 639–647.

3. Хачатурян, А.Г. Теория фазовых превращений и структура твердых растворов / А.Г. Хачатурян. – М.: Наука, 1974. – 384 с.
4. Хачатурян, А.Г. Углерод в мартенсите стали. Несовершенство кристаллического строения и мартенситные превращения / А.Г. Хачатурян. – М: Наука, 1972. – 238 с.
5. Da Silva, J.R.G., McLellan, R.B., Diffusion of carbon and nitrogen in BCC iron / J.R.G. Da Silva, R.B. McLellan // Materials Science and Engineering. – 1976. – V. 26, Pp. 83–87.
6. Brandes, E.A., Smithells metals reference book / E.A. Brandes – London: Butterworths, 1983. – 1025 p.
7. Plimton, S. Fast Parallel Algorithm for Short Range Molecular Dynamics / S. Plimton // Journal of Computational Physics. – 1995. – V. 117, № 1. – Pp. 1–19.
8. Lau, T. Many-Body Potential for Point Defect Clusters in Fe-C Alloys / T. Lau, C.J.F. Forst // Phys. Rev. Lett. – 2007. – V. 98, № 21. – 215501.
9. Чирков, П.В. Investigation of the Process of Martensite Tetrahedral Distortion Formation by Molecular Dynamics / П.В. Чирков, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2014. – Т. 14, № 2. – С. 54–58.
10. Чирков, П.В. Влияние внешних напряжений на тетрагональность мартенсита углеродистых сталей / П.В. Чирков, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2016. – Т. 16, № 1. – С. 13–22.
11. Hoover, W.G. Canonical Dynamics: Equilibrium Phase-Space Distributions / W.G. Hoover // Phys. Rev. A. – 1985. – V. 31, № 3. – Pp. 1695–1697.
12. Nose, S. Constant-Temperature Molecular Dynamics / S. Nose // J. Phys.: Condens. Matter. – 1990. - V. 2 - P. 115–119.
13. Domain, C. Ab initio Study of Foreign Interstitial Atom (C, N) Interactions with Intrinsic Point Defects in α -Fe. / Domain C., Becquart C.S., Foct J. // Phys. Rev. B. - 2004. - Т. 69., № 14. – 144112.

[К содержанию](#)