

01

## ***Ab initio* моделирование энергии растворения и активности углерода в ГЦК-Fe**

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

Южно-Уральский государственный университет (Национальный исследовательский университет), Челябинск, Россия

E-mail: ridnyiim@susu.ru

(Поступила в Редакцию 5 сентября 2016 г.)

В окончательной редакции 22 декабря 2016 г.)

С использованием программного пакета WIEN2k проведено *ab initio* моделирование равновесной структуры и свойств ГЦК-железа с примесью углерода. Предложена методика, позволяющая провести моделирование магниторазупорядоченного состояния системы в рамках теории функционала плотности. В рамках данной методики проведен расчет величины энергии растворения углерода, которая составила 0.25 eV. Определены также энергии взаимодействия между атомами углерода, находящимися в первой, второй и третьей координационных сферах друг друга, которые составили  $E_1 = 0.06$  eV,  $E_2 = 0.1$  eV и  $E_3 = 0.005$  eV. Для проверки достоверности полученных значений энергий проведен расчет активности углерода методом Монте-Карло. Хорошее качественное согласие рассчитанной активности с экспериментальными данными указывает на достоверность полученных энергетических параметров.

Настоящая работа поддержана РФФ (грант № 16-19-10252).

DOI: 10.21883/FTT.2017.07.44583.342

### **1. Введение**

Благодаря высокой прочности стали остаются основными конструкционными материалами, несмотря на развитие производства пластмасс, керамики, композитов. Основой любой стали является твердый раствор углерода в железе. Прочностные свойства стали существенно зависят от структурных особенностей этого раствора, которые в свою очередь определяются характером взаимодействия между атомами углерода в решетке железа. Железо является полиморфным металлом [1,2]: при нагревании выше  $911^\circ\text{C}$  низкотемпературное  $\alpha$ -железо с ОЦК-решеткой превращается в  $\gamma$ -железо с ГЦК-решеткой.

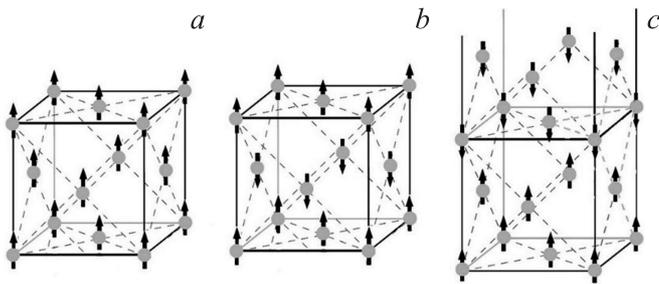
Обычно используются стали на основе низкотемпературной ОЦК-фазы железа. Морфология ее микроструктуры, имеющая решающее значение для всех практических приложений, образуется в процессе закалки в области высоких температур, где железо существует в ГЦК-фазе. Вопрос о взаимодействии между атомами углерода в аустените играет очень важную роль для физического металловедения. Во-первых, в условиях быстрого охлаждения аустенита, когда диффузия углерода подавлена, происходит бездиффузионное мартенситное превращение [2], при котором все атомы углерода принудительно переходят в решетку мартенсита, наследуя распределение материнской фазы. Во-вторых, растворимость углерода в цементите очень низка [2], что затрудняет экспериментальное изучение взаимодействия между атомами С в ОЦК-решетке. Растворимость же углерода в ГЦК-решетке аустенита значительно выше, что позволило достаточно надежно изучить кон-

центрационные зависимости ряда термодинамических характеристик.

К сожалению, энергии взаимодействия атомов растворенного вещества не могут быть непосредственно измерены в эксперименте. Поэтому они могут быть оценены с помощью термодинамических моделей [3,4] на основе фазовых диаграмм или данных о параметрах ближнего порядка [5–7] либо методами *ab initio* компьютерного моделирования [8].

ОЦК-железо является ферромагнитным, и его моделирование не представляет проблем [9–11]. ГЦК-фаза железа стабильна в температурной области, лежащей выше точки Кюри, где наблюдается парамагнитное состояние. Реализация в современных вычислительных пакетах теории функционала плотности проводится с использованием приближения локальной спиновой плотности. В рамках такого приближения неколлинеарные магнитные конфигурации не могут быть рассмотрены, поэтому возникает важный вопрос: какая из моделей коллинеарного магнитного упорядочения лучше всего описывает физические свойства ГЦК-железа?

Основными магнитными состояниями, используемыми для моделирования парамагнитного ГЦК-железа, являются немагнитное (НМ), ферромагнитное высокоспиновое (ФМВС) и ферромагнитное низкоспиновое (ФМНС), антиферромагнитное однослойное (АФМ1) и антиферромагнитное двухслойное (АФМД). Эти магнитные состояния приведены на рис. 1. В НМ-состоянии железа магнитный момент равняется нулю. В ферромагнитном состоянии все спины атомов железа направлены в одну сторону. В антиферромагнитном состоянии чередуются слои: в однослойном — слой атомов железа со



**Рис. 1.** Магнитные состояния в ГЦК-железе: *a* — ферромагнитное, *b* — антиферромагнитное однослойное, *c* — антиферромагнитное двухслойное. Стрелками показаны направления спинов атомов железа.

спином вверх и слой со спином вниз, а в двухслойном — два слоя атомов железа со спином вверх и два со спином вниз.

Растворение углерода в ГЦК-железе представляет собой эндотермическую реакцию (протекает с поглощением тепла). Энергия этого процесса была вычислена экспериментально в работах [12–16], на основе анализа которых можно сделать вывод, что ее величина лежит в интервале от 0.36 до 0.48 eV. Некоторые авторы использовали НМ-состояния для моделирования парамагнитного состояния, поскольку считали, что в парамагнитном состоянии магнитный момент равняется нулю и его можно использовать для моделирования парамагнитного состояния [17,18]. Ферромагнитное состояние разделяется на два магнитных состояния с большим и маленьким спином: ФМВС и ФМНС. Существуют модели, в которых считается, что реальное парамагнитное ГЦК-железо является их смесью либо смесью ФМВС- и АФМД-состояний [19], но эти модели не подтверждены экспериментом.

Использование АФМД-состояния для описания парамагнитного состояния ГЦК-железа поддерживают авторы работ [20,21]. Медведева и др. в [21] получили что АФМД-состояние лежит ниже по энергии, чем НМ-, ФМНС-, ФМВС- и АФМ1-состояния, и поэтому является наиболее стабильным. В работе же [20] Бухвалов и др. проводили моделирование энергии растворения углерода в АФМД-состоянии ГЦК-железа и получили достаточно близкое к экспериментальному значение 0.55 eV. Однако ряд авторов [10,22] считает, что АФМ1-состояние также вполне удовлетворительно описывает свойства парамагнитного ГЦК-железа. В работе Хэрпера и др. [22] методом FLAPW было найдено, что основное состояние ГЦК-Fe является антиферромагнитным, причем обе антиферромагнитные структуры имеют близкие значения энергии, хотя АФМД-фаза имеет больший объем, значение которого лучше согласуется с данными эксперимента. Этот вывод поддерживают Хэпбурн с соавторами [10]. В своей работе они показали, что оба магнитных состояния (АФМД и АФМ1) подходят для описания парамагнитного ГЦК-

железа. По данным этой работы энергия растворения углерода в АФМ1-состоянии составила 0.263 eV, а в АФМД-состоянии — 0.323 eV, что неплохо согласуется с экспериментальными значениями (в работе использована суперъячейка из 256 атомов). Следует, однако, отметить, что данный вывод базируется на расчетах, использующих метод псевдопотенциала. Основной недостаток такого моделирования состоит в том, что его результаты существенно зависят от выбора используемого псевдопотенциала, осуществляемого подгонкой к существующим экспериментальным данным. Если разброс имеющихся данных велик, то выбор потенциала становится затруднительным и предсказательная точность метода снижается. Полнопотенциальные методы расчета лишены этого недостатка, поскольку в них все базисные орбитали — как валентные, так и остовные — определяются самосогласованным решением уравнений Кона–Шэма. Также необходимо учесть, что в АФМ1- и АФМД-состояниях наблюдается тетрагональное искажение решетки, т.е. тетрагональная ГЦК-фаза имеет более низкую энергию, чем кубическая. В связи с этим в настоящей работе расчет энергий растворения атомов углерода в ГЦК-железе и взаимодействия между ними проведен для наиболее известных существующих упорядоченных магнитных состояний в ГЦК-железе, а также в схеме отбора магнитнеупорядоченных структур (MSM) [23]. Сравнение полученных результатов позволит определить оптимальный подход для расчета энергетических параметров углерода в парамагнитной фазе ГЦК-железа.

## 2. Методика расчета

2.1. Параметры моделирования. Расчеты проводились *ab initio* полнопотенциальным методом LAPW с учетом обобщенного градиентного приближения PBE–GGA в программном пакете WIEN2k, обеспечивающем высокую точность расчета полной энергии при минимальном количестве подгоночных параметров. Это наиболее точный метод, используемый в рамках теории функционала плотности [24]. Для интегрирования в обратном пространстве и вычисления электронной плотности использовалась схема Монхорста–Пака [25] с сеткой  $4 \times 4 \times 4$  *k*-точек в зоне Бриллюэна для оптимизации геометрических параметров и сеткой из  $7 \times 7 \times 7$  *k*-точек при проведении расчетов, что обеспечивает точность расчета энергии системы в 0.01 eV. Основные параметры моделирования следующие [26]:  $R_{\text{MT}}K_{\text{max}} = 6$  (для систем без углерода  $R_{\text{MT}}K_{\text{max}} = 10$ ), радиусы muffin-tin сфер  $R_{\text{MT}}(\text{Fe}) = 2.00$  a.u.,  $R_{\text{MT}}(\text{C}) = 1.20$  a.u.

2.2. Расчет в различных упорядоченных магнитных состояниях. Расчеты проводились в суперъячейке из 32 атомов железа. Соответствующий магнитный порядок задавался искусственно в качестве начального условия. В НМ-состоянии магнитные моменты атомов железа задавались равными нулю. При

расчете в ферромагнитном состоянии все магнитные моменты атомов железа ориентировались вдоль одного направления. В АФМ1-состоянии искусственно чередовались слои атомов железа со спином вверх и со спином вниз. Аналогично в АФМД-состоянии чередовались два слоя атомов железа со спином вниз и два слоя атомов железа со спином вверх. Для всех типов магнитного порядка проводилась объемная минимизация параметра решетки, а затем атомно-силовая релаксация конфигурации системы, при которой исходный магнитный порядок сохранялся. Различные магнитные моменты атомов железа в ФМНС- и ФМВС-состояниях, как и ожидалось, были получены вследствие изменения объема системы. При вычислении энергии растворения использовались конфигурации после релаксации, соответствующие минимальной энергии. Полученные при этом равновесные значения параметров решетки находятся в хорошем согласии с данными работ [9,10,20–22]. Отметим, что магнитная структура может реализоваться как в кубических решетках (НМ, ФМВС, ФМНС, АФМ1, АФМД), так и в тетрагональных решетках (АФМ1-т, АФМД-т), причем тетрагональные состояния являются более низколежащими по энергии. Поэтому в настоящей работе помимо всех наиболее известных магнитных кубических состояний для описания парамагнитного состояния ГЦК-железа использовалось также антиферромагнитное двухслойное тетрагональное состояние АФМД-т, для которого объемная оптимизация проводилась.

2.3. Методика расчета неупорядоченного парамагнитного состояния. Температурный диапазон существования ГЦК-железа лежит выше 1000 К, но используемая в рамках программного пакета WIEN2k теория функционала плотности позволяет провести моделирование только основного состояния системы при 0 К. При объемной минимизации по энергии нами было получено, что происходит образование упорядоченных магнитных структур, которые не позволяют учесть наличие магнитного беспорядка. Кроме того, в высокотемпературной парамагнитной фазе возникают различные локальные магнитные структуры (локальные флуктуации магнитного порядка). Если атом углерода попадает в области с разным магнитным порядком, он может обладать различной энергией растворения, а средняя энергия по сплаву будет представлять собой усредненное значение по таким локальным параметрам (влияние локальных флуктуаций магнитного порядка). Для учета указанных эффектов в настоящей работе предложена модель парамагнитного состояния, основанная на схеме отбора MSM-структур. Близкая схема использована ранее в работе Пономарёвой и др. [8].

Для учета эффектов температурного расширения при моделировании проводилась атомно-силовая релаксация системы, без объемной минимизации. При этом использовались экспериментальные значения параметров решетки, взятые из экспериментальной работы Онинка [27] для  $T = 1400$  К:  $a = 3.667$  Å для чистого ГЦК-Fe,

$a = 3.687$  Å для системы из 32 атомов железа и растворенного атома углерода и  $a = 3.707$  Å для системы из 32 атомов железа и двух растворенных атомов углерода.

Различные неэквивалентные магнитные конфигурации были получены с помощью программы BINAR [28]. В основе алгоритма программы BINAR лежит анализ степени неупорядоченности множества случайных конфигураций, полученных „вбрасыванием“ атомов железа со спином вверх в подрешетку атомов железа со спином вниз с использованием генератора случайных чисел (в нашей суперъячейке из 32 атомов 16 атомов со спином вверх и 16 со спином вниз). После этого производится отбраковка конфигураций, не соответствующих критерию неупорядоченности. В качестве такого критерия используется величина суммы квадратов отклонений числа разнородных пар атомов (первый сорт атомов — атомы железа со спином вверх, второй сорт — атомы железа со спином вниз) во второй координационной сфере для рассматриваемой конфигурации от статистических средних значений для полностью неупорядоченной бинарной смеси (критерий согласия Пирсона  $\chi^2$ ). В результате определялись магнитные конфигурации, в наибольшей степени соответствующие неупорядоченной ориентации атомных магнитных моментов по узлам суперъячейки и обеспечивающие равенство нулю полного магнитного момента ячейки.

В настоящей работе, как и в предыдущей [29], с помощью программы BINAR [28] было получено 16 различных неэквивалентных магнитных конфигураций. По известной разности полной энергии  $n$ -й конфигурации системы и энергии системы в наинизшем основном состоянии была вычислена каноническая статистическая сумма  $S$

$$S = \sum_{n=1}^5 \exp(-(E_n - E_0)/kT),$$

где  $E_0$  — энергия основного состояния,  $E_n$  — энергия системы в  $n$ -м энергетическом состоянии,  $k$  — коэффициент Больцмана,  $T = 1400$  К (средняя температура существования ГЦК-фазы железа).

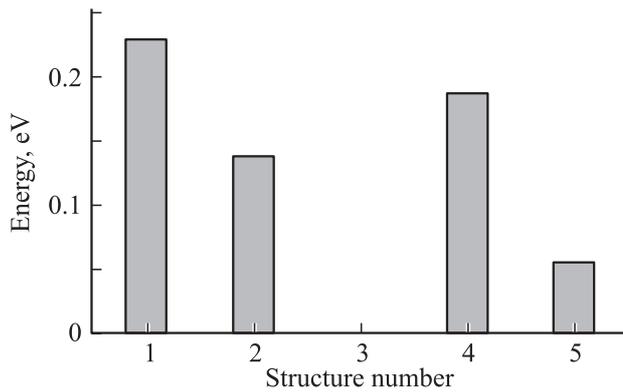
Из отношения вклада в статистическую сумму от данной конфигурации  $S_n$  ко всей статистической сумме была вычислена вероятность существования магнитного состояния

$$P_n = \frac{S_n}{S}.$$

Это позволяет вычислить усредненное по магнитным конфигурациям значение полной энергии суперъячейки ГЦК-матрицы железа, содержащей один или два внедренных атома углерода, по формуле

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n P_n.$$

Для расчетов выбиралось пять лежащих ниже остальных по энергии магнитных конфигураций (рис. 2). Магнитные конфигурации низкоэнергетических состояний



**Рис. 2.** Зависимость энергии системы от номера конфигурации. Энергии систем указаны относительно энергии самой низкой конфигурации.

напоминают суперъячейку АФМД-структуры, в каждой плоскости которой в среднем у двух атомов из восьми магнитные моменты перевернуты относительно ориентации остальных атомов. В высокоэнергетических же состояниях магнитные конфигурации полностью разупорядочены. Вероятность существования остальных конфигураций была меньше 3%, и их учет не повлиял на конечные результаты, поэтому с целью оптимизации расчетов в дальнейшем они не учитывались.

Для тестирования методики был проведен расчет энергии растворения углерода в парамагнитном состоянии ГЦК-железа (табл. 1), величина которой оказалась равной  $0.25 \pm 0.03$  eV.

**Таблица 1.** Энергия растворения углерода в ГЦК-железе в различных магнитных конфигурациях

Номер конфигурации	Вероятность, %	Энергия растворения, eV
1	6	-0.08
2	14	0.24
3	44	0.3
4	9	0.19
5	27	0.29
$\langle E \rangle$	100	$0.25 \pm 0.03$

**2.4. Методика расчета активности углерода в ГЦК-железе.** Для моделирования активности углерода в ГЦК-железе мы использовали хорошо известный метод, предложенный в [30] и использованный для расчетов активности углерода в железе в работах [5,6]. Расчет активности углерода в ГЦК-железе проводился по формуле

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

где  $a_C$  — активность углерода в ГЦК-железе,  $a_{\text{conf}}$  — конфигурационная часть активности, а  $\exp(\Delta G/kT)$  —

ее неконфигурационная часть. Для расчета последней использовались два набора данных из работ [5,6]. При этом в зависимости от используемого набора возникали различия в величине неконфигурационного множителя порядка 10–20%. Нами был взят набор из работы [5], потому что в ней при вычислении экспоненты напрямую использовались экспериментальные данные об активности [31].

Алгоритм вычисления конфигурационной части  $a_{\text{conf}}$  детально описан в работах [5,6,30]. 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 при использовании обычной процедуры Монте-Карло. Выражение для  $a_{\text{conf}}$  имеет вид

$$a_{\text{conf}} = M(N_C + 1) / \left\{ \sum_{i=1}^M \left[ \sum_j^{\mu} \exp(-\Delta E_j/kT) \right] \right\},$$

где выполняется суммирование по  $j$  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 энергии системы, когда вводится один виртуальный атом углерода;  $\mu = N_{\text{Fe}} - N_C$  — число междоузлий в кристалле.

### 3. Результаты

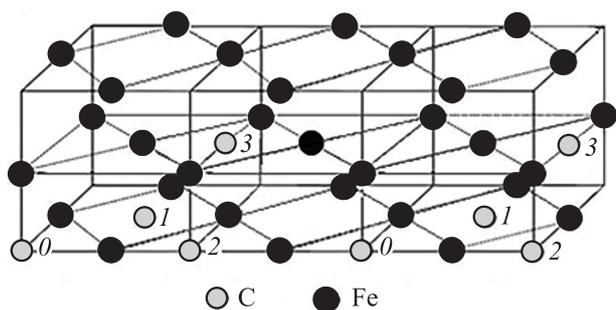
Для определения энергии растворения углерода относительно фазы графита использовалась формула

$$\Delta H = E_{\text{Fe}_{32}\text{C}} - E_{\text{Fe}_{32}} - E_C,$$

где  $E_{\text{Fe}_{32}\text{C}}$  — энергии суперъячейки после релаксации, состоящей из 32 атомов железа и одного атома углерода, находящегося в октапоре,  $E_{\text{Fe}_{32}}$  — энергия суперъячейки, состоящей из 32 атомов железа, а  $E_C$  — энергия одного атома углерода в решетке графита. Параметры структуры графита были взяты из работы [9] ( $a = 2.462$  Å,  $c = 6.656$  Å,  $\alpha = 90^\circ$ ,  $\beta = 90^\circ$ ,  $\gamma = 120^\circ$ ). Значения энергий растворения углерода в различных магнитных фазах ГЦК-железа представлены в табл. 2.

**Таблица 2.** Энергия растворения углерода в ГЦК-железе в различных магнитных состояниях (в eV)

Состояние	Данные других авторов	Наст. раб.
НМ	0.145 [17]	0.18
ФМНС	—	-1.25
ФМВС	-0.17 [9]	-0.11
АФМ1	—	-0.33
АФМ1-т	0.263 [10]	—
АФМД	—	0.34
АФМД-т	0.323 [10], 0.55 [20]	0.47
Парамагнитное	0.2 [8]	0.25
Эксперимент	0.36–0.48 [12–16]	—



**Рис. 3.** Расположение атомов углерода в суперъячейке из 32 атомов железа с учетом периодических граничных условий. Новая суперъячейка начинается от второго атома номер 0.

На основе анализа этой таблицы можно сделать вывод, что используемый набор параметров моделирования обеспечивает неплохое совпадение результатов с данными других авторов при описании основных магнитных фаз (немагнитной, ферромагнитной и антиферромагнитной) для ГЦК-решетки железа. Поэтому неудивительно, что наши результаты хорошо воспроизводят литературные данные для магнитных структур АФМД-т и MSM, используемых для описания парамагнитной фазы железа. Видно, что наилучшее согласие с экспериментом достигается при использовании для моделирования коллинеарной магнитной структуры АФМД-т и неупорядоченной структуры, полученной методом MSM. Поэтому расчеты энергии взаимодействия между парой атомов углерода, растворенных в парамагнитной фазе железа, были проведены именно для этих моделей, что делает возможным их дальнейшее сопоставление.

Для нахождения энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе использовалась формула

$$\Delta E = E_{\text{Fe}_{32}\text{C}_2} - 2E_{\text{Fe}_{32}\text{C}} + E_{\text{Fe}_{32}},$$

где  $E_{\text{Fe}_{32}\text{C}_2}$  — энергия суперъячейки после релаксации, состоящей из 32 атомов железа и двух атомов углерода, находящихся в октапорах. Первый атом помещался в октапору, находящуюся в начале координат (позиция 0 на рис. 3), а второй атом последовательно помещался в первую, вторую и третью координационные сферы относительно первого (позиции 1, 2, 3 на рис. 3). Отметим, что найденную в нашем случае энергию взаимодействия во второй и третьей координационных сферах необходимо разделить пополам. Это связано с тем, что при расчете используются периодические граничные условия, а эти позиции (рис. 3) находятся на равном удалении от атома углерода в начале координат и его периодического повторения, возникающего при периодической трансляции ячейки. В силу этого рассчитанная энергия оказывается равна удвоенной энергии взаимодействия между изолированной парой атомов углерода.

Энергии взаимодействия между атомами углерода для первых двух координационных сфер в ГЦК-железе можно оценить косвенным путем на основе экспериментальных исследований [3–7]. Многочисленные термодинамические расчеты [3,4], основанные на различных модельных представлениях о взаимодействии между атомами углерода, приводят к сильно различающимся результатам. Однако все они указывают на достаточно сильный отталкивательный характер этого взаимодействия в ближайших координационных сферах. Наиболее точные значения энергий взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе получены на основе моделирования методом Монте-Карло мессбауэровских спектров ГЦК-сплавов Fe–C [5–7]. Все указанные литературные данные о значениях энергии взаимодействия между атомами углерода, а также результаты, полученные в настоящей работе, представлены в табл. 3.

Из табл. 3 видно, что в соответствии с нашими расчетами атомы углерода отталкиваются в первой и второй координационных сферах, причем во второй координационной сфере сильнее, чем в первой, что согласуется с данными [3–7]. В работе же [8], в которой также использовался MSM-метод [23], наблюдается обратное. Это отличие, вероятно, связано с тем, что нами использовался полнопотенциальный пакет WIEN2k, тогда как в [8] применялся псевдопотенциальный пакет VASP. Чтобы окончательно убедиться в адекватности полученных нами значений энергий взаимодействия, был проведен расчет активности углерода в ГЦК-железе. Применялся метод, описанный в подразделе 2.4, причем для расчета использовались как набор энергий взаимодействия углерод–углерод, полученный нами, так и данные [8]. Результаты моделирования приведены на рис. 4, из которого видно, что активность, полученная по нашим данным, значительно лучше совпадает с активностью, установленной экспериментально

**Таблица 3.** Энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе (в eV)

Номер координационной сферы			Лит. ссылка
1	2	3	
-0.01	-0.015	0.035	Наст. раб. (АФМД-т) Наст. раб. (MSM)
0.06	0.1	0.005	
0.6	—	—	[3]
0.08	—	—	[4]
0.115	0.169	—	[5]
0.036	0.075	—	[6]
0.1	—	—	[7] (модель 1)
0–0.075	> 0.045	—	[7] (модель 2)
-0.015–0.045	> 0.08	—	[7] (модель 3)
0.18	0.17	-0.004	[8]

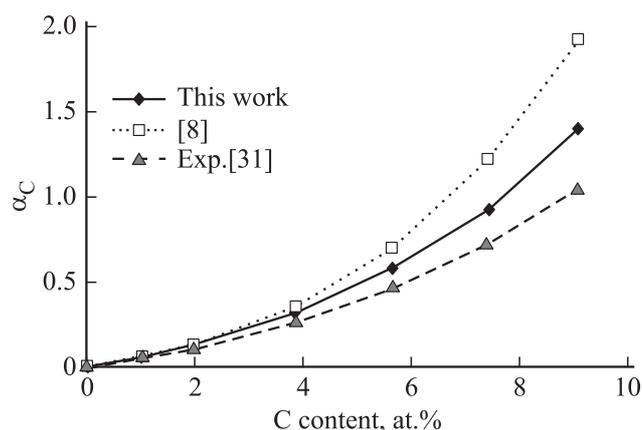


Рис. 4. Сравнение кривых активности, полученных при компьютерном моделировании методами Монте-Карло, с экспериментальными (при  $T = 1423$  К).

в [31], чем при использовании данных [8]. Подобные расчеты проводились для температур  $T = 1173, 1273, 1373, 1423, 1573$  К, и для всего диапазона лучшее согласие наблюдалось при использовании наших данных.

#### 4. Заключение

В работе методом *ab initio* моделирования получены значения энергии растворения атома углерода и энергии взаимодействия растворенных в парамагнитном ГЦК-железе пар атомов углерода, расположенных в первой, второй и третьей координационных сферах относительно друг друга. Показано, что АФМД-состояние недостаточно точно описывает парамагнитное ГЦК-железо. Наиболее сильное отталкивание наблюдается между атомами углерода, располагающимися во второй координационной сфере. Полученные нами значения энергии взаимодействия между атомами углерода существенно отличаются от значений, используемых в большинстве термодинамических моделей, однако достаточно близки к результатам *ab initio* моделирования в работе Пономарёвой и др. [8]. Для проверки достоверности полученных значений энергий проведен расчет активности углерода методом Монте-Карло. Хорошее качественное согласие рассчитанной активности с экспериментальными данными свидетельствует о достоверности полученных энергетических параметров.

Таким образом, использованная нами методика расчета парамагнитного состояния позволяет получить адекватные энергии растворения атомов углерода, энергетические характеристики взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе, что подтверждается качественным согласием расчетов активности углерода в аустените с данными эксперимента.

#### Список литературы

- [1] Я.С. Уманский, Ю.А. Скаков, А.Н. Иванов, Л.Н. Расторгуев. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. Металлургия, М. (1982). 632 с.
- [2] Г.В. Курдюмов, Л.М. Утевский, Р.И. Энтин. Превращения в железе и стали. Наука, М. (1977). 236 с.
- [3] Б.М. Могутнов, Н.А. Томилин, Л.А. Шварцман. Термодинамика сплавов железа. Металлургия, М. (1984). 208 с.
- [4] R.B. Mclellan. Acta Met. **35**, 2151 (1987).
- [5] M.S. Blanter. J. Alloys Compd. **291**, 167 (1999).
- [6] A.L. Sozinov, A.G. Balanyuk, V.G. Gavriljuk. Acta Mater. **45**, 225 (1997).
- [7] A.G. Balanyuk, V.N. Bugaev, V.M. Nadutov, A.L. Sozinov. Phys. Status Solidi B **207**, 3 (1998).
- [8] А.В. Пономарёва, Ю.Н. Горностырёв, И.А. Абрикосов. ЖЭТФ **147**, 4, 827 (2015).
- [9] D.E. Jiang, E.A. Carter. Phys. Rev. B **67**, 214103 (2003).
- [10] D.J. Hepburn, D. Ferguson, S. Gardner, G.J. Ackland. Phys. Rev. B **88**, 024115 (2013).
- [11] C. Domain, C.S. Becquart, J. Foct. Phys. Rev. B **69**, 144112 (2004).
- [12] P. Gustafson. Scand. J. Met. **14**, 259 (1985).
- [13] Б.М. Могутнов, И.А. Томилин, Л.А. Шварцман. Термодинамика сплавов железа. Металлургия, М. (1984). 206 с.
- [14] A. Lobo, G.H. Geiger. Met. Trans. A **7**, 1359 (1976).
- [15] G.J. Shiflet, J.R. Bradley, H.I. Aaronson. Met. Trans. A **15**, 1287 (1984).
- [16] J. Chipman. Met. Trans. **3**, 55 (1972).
- [17] J.A. Slane, C. Wolverton, R. Gibala. Met. Mater. Trans. A **35**, 2239 (2004).
- [18] N.I. Medvedeva, M.S. Park, D.C.V. Aken, J.E. Medvedeva. J. Alloys Compd. **582**, 475 (2014).
- [19] M. Acet, H. Zahres, E.F. Wassermann, W. Pepperhoff. Phys. Rev. B **49**, 6012 (1994).
- [20] D.W. Boukhvalov, Y.N. Gornostyrev, M.I. Katsnelson, A.I. Lichtenstein. Phys. Rev. Lett. **99**, 247205 (2007).
- [21] N.I. Medvedeva, D.V. Aken, J.E. Medvedeva. J. Phys. Condens. Matter. **22**, 316002 (2010).
- [22] H.C. Herper, E. Hoffmann, P. Entel. Phys. Rev. B **60**, 3839 (1999).
- [23] B. Alling, T. Marten, I.A. Abrikosov. Phys. Rev. B **82**, 184430 (2010).
- [24] S. Cottenier. Density functional theory and the family of (L)APW-methods: a step-by-step introduction. (2004). 65 p.
- [25] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. Phys. Rev. B **13**, 5188 (1976).
- [26] Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев. Вестн. ЮУрГУ. Сер. Математика. Механика. Физика **5**, 2, 108 (2013).
- [27] M. Onink, C.M. Brakman, F.D. Tichelaar, E.J. Mittemeijer, S. van der Zwaag, J.H. Root, N.B. Konyer. Scripta Met. Mater. **29**, 1011 (1993).
- [28] Р.З. Деянов, Н.Н. Еремин, В.С. Урусов. ODSS (Ordered-Disordered-Solid-Solution). Ver.1.-binar Программа расчета неупорядоченных сверхъячеек для моделирования твердых растворов замещения. М. (2006–2007). 48 с.
- [29] Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев. Вестн. ЮУрГУ. Сер. Математика. Механика. Физика **6**, 3, 86 (2014).
- [30] E. Murch, R.J. Thorn. Acta Met. **27**, 201 (1979).
- [31] S. Ban-ya, J.F. Elliott, J. Chipman. Met. Trans. **1**, 1313 (1970).