

## **О ВЛИЯНИИ УГЛЕРОДА НА МАРТЕНСИТНОЕ ПРЕВРАЩЕНИЕ В СПЛАВАХ ЖЕЛЕЗА С ПОЗИЦИЙ ДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ**

Кащенко Н.М.<sup>1</sup>, Кащенко М.П.<sup>1,2</sup>, Чащина В.Г.<sup>1,2</sup>

<sup>1)</sup> Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

<sup>2)</sup> Уральский государственный лесотехнический университет, г. Екатеринбург, Россия

E-mail: [mpk46@mail.ru](mailto:mpk46@mail.ru)

## **INFLUENCE OF CARBON ON MARTENSITIC TRANSFORMATIONS IN IRON ALLOYS FROM THE POSITION OF DYNAMIC THEORY**

Kashchenko N.M.<sup>1</sup>, Kashchenko M.P.<sup>1,2</sup>, Chashchina V.G.<sup>1,2</sup>

<sup>1)</sup> Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

<sup>2)</sup> Ural State Forest Engineering University, Yekaterinburg, Russia

A rapid decrease in the temperature of the start of martensitic transformation with an increase in the carbon concentration is interpreted as a result of strong scattering of collectivized s - electrons by ion clusters surrounding the implanted carbon atom.

Хорошо известно, что содержание углерода, образующего сплав внедрения в сплавах железа, оказывает сильное влияние на протекание (при охлаждении) мартенситного превращения (МП), приводя к образованию кристаллов мартенсита с объемноцентрированной тетрагональной (ОЦТ) решеткой, сосуществующих с остаточным аустенитом, имевшим в исходном состоянии объемноцентрированную кубическую (ОЦК) решетку [1]. Помимо тетрагональности, удовлетворительно объясняемой распределением внедренного углерода [1], имеет место быстрое снижение температуры  $M_s$  начала МП при увеличении концентрации углерода. Эта зависимость получает естественное объяснение в рамках динамической теории МП, интерпретирующей температуру  $M_s$  как оптимальную для поддержания неравновесными d-электронами волнового процесса, управляющего ростом кристалла мартенсита [2]. Занимая преимущественно октаэдрические междоузлия, углерод (за счет перекрытия волновых функций р-типа с волновыми функциями d-типа ионов железа) становится центром кластера из 6 ионов железа, обеспечивающего сильное затухание коллективизированных s-электронов, требуемое для заполнения (в ходе процессов s-d рассеяния) активных в генерации фононов состояний d-электронов. Эта качественная схема хорошо согласуется с наблюдаемым эффектом нарастания критического размера зерна  $D_c$  аустенита при росте содержания углерода [3, 4]. В связи с этим представляется целесообразным выполнение расчетов зонной структуры сплава внедрения для различных концентраций углерода с анализом изменений в распределении состояний d-электронов.

*Авторы выражают признательность Министерству науки и высшего образования России за поддержку при исполнении государственного задания № 075-00243-20-*

01 от 26.08.2020 в рамках темы FEUG-2020-0013 "Экологические аспекты рационального природопользования".

1. G. V. Kurdyumov, L. M. Utevskiy, and R. I. Entin, Transformations in Iron and Steel. Moscow, Nauka (1977) 236 p. [in Russian]
2. M. P. Kashchenko and V. G. Chashchina, Phys.Usp. 54 (4), 331–349 (2011).
3. M. P. Kashchenko and V. G. Chashchina, Phys. Mesomech. 13, 195–202 (2010).
4. M. P. Kashchenko, N. M. Kashchenko, Chashchina V.G, Phys. Met. Metallogr. 122 (1), 47–53 (2021).

## АЛГОРИТМ ДЛЯ ПОИСКА КВАЗИДВУМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ С УСТОЙЧИВЫМ ФЕРРОМАГНЕТИЗМОМ

Кашин И. В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Кафедра Теоретической физики и прикладной математики, Уральский федеральный университет, ул. Мира 19, 620002 Екатеринбург, Россия.

E-mail: [i.v.kashin@urfu.ru](mailto:i.v.kashin@urfu.ru)

## ALGORITHM OF SEARCHING THE STABLE FERROMAGNETIC QUASI- TWO-DIMENSIONAL MATERIALS

Kashin I. V.<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Theoretical Physics and Applied Mathematics Department, Ural Federal University, Mira Street 19, 620002 Ekaterinburg, Russia.

Here we suggest a theoretical approach designed to seek an optimized electronic structure of quasi-two-dimensional material by means of ferromagnetic ordering stability. Corresponding tight-binding Hamiltonian is treated using Green's functions formalism in order to estimate Curie temperature value.

Сегодня квазидвумерные материалы привлекают к себе всё больше внимания исследователей - не только в силу уникальности многих демонстрируемых ими свойств, но и из-за значительно более гибких возможностей их контроля путём внешних макроскопических воздействий. Особое место здесь занимают магнитные материалы - обладатели обширных перспектив для прикладного применения в области построения логических устройств и модулей памяти нового поколения [1-2].

Однако одна из ключевых проблем заключается в том, что магнетизм в таких материалах в подавляющем большинстве случаев является продуктом компенсаторного действия нескольких качественно различных микроскопических механизмов. Это резко усложняет как их теоретическое описание, так и условия их экспериментального синтеза.

Исходя из этого и формулируется основная цель данной работы - разработка и применение оригинальной численной схемы для поиска кристаллической и