

## ПРОЧНОСТЬ И ПЛАСТИЧНОСТЬ

УДК 669.15-194.54:539.89

### АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФЕКТОВ УПАКОВКИ В ЦЕМЕНТИТЕ. ПЛОСКОСТИ, СОДЕРЖАЩИЕ ВЕКТОР [001]

© 2019 г. Л. Е. Карькина<sup>а</sup>,\*, И. Н. Карькин<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Институт физики металлов УрО РАН, С. Ковалевской, 18, Екатеринбург, 620108 Россия

\*e-mail: lidiakarkina@gmail.com

Поступила в редакцию 14.01.2019 г.

После доработки 16.04.2019 г.

Принята к публикации 08.05.2019 г.

Методом молекулярной динамики изучены  $\gamma$ -поверхности в (110), (120), (210), (130) и (310) плоскостях, содержащих вектор Бюргерса [001] полной дислокации в цементите. Выявлены векторы сдвига, отвечающие стабильным дефектам упаковки (ДУ), определена энергия этих ДУ. Оценена энергия нестабильных дефектов упаковки, характеризующих склонность материала к пластической релаксации. Установлено, что в плоскости (210) цементита существуют локальные минимумы с низкой энергией как стабильных, так и нестабильных дефектов упаковки, что предполагает возможность распространения протяженных ДУ. Показана возможность расщепления полной дислокации с вектором Бюргерса [001] на две частичные дислокации.

*Ключевые слова:* атомистическое моделирование, цементит, стабильные и нестабильные дефекты упаковки

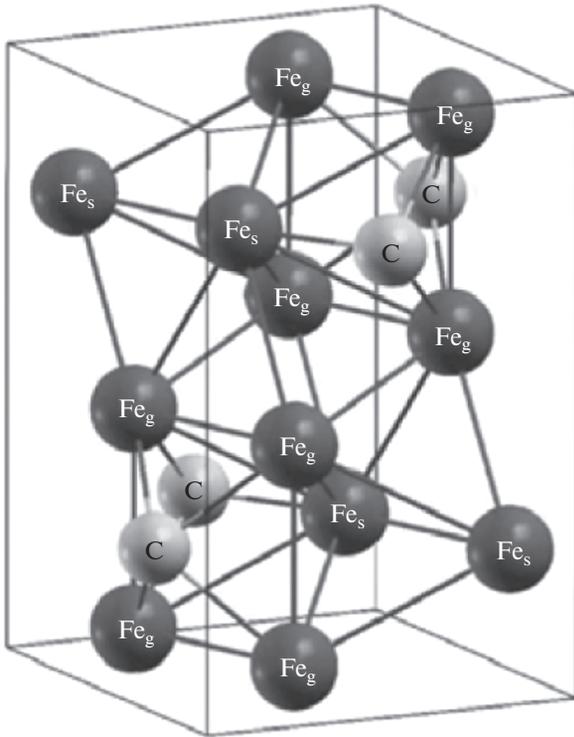
DOI: 10.1134/S0015323019100036

#### ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известно, что выделения пластинчатого или глобулярного цементита в феррите определяют высокие прочностные свойства сталей перлитного класса [1, 2]. Структура деформированного перлита является объектом интенсивного изучения, поскольку во многих случаях пластическая деформация сталей с перлитной структурой позволяет получить высокие значения прочности при сохранении пластичности материала. В настоящее время проведен большой объем экспериментальных исследований механических свойств перлитных сталей [3–9], свидетельствующих о том, что цементит может деформироваться не только при повышенных температурах, но и при комнатной температуре.

В наших работах [10–12] был предложен метод атомистического моделирования для теоретического изучения возможных мод деформации цементита. О типах дислокаций в цементите и их подвижности, расщеплении дислокаций в различных плоскостях скольжения цементита можно судить на основании исследования дефектов упаковки (ДУ), определения величины стабильных и нестабильных ДУ в различных сечениях наиболее плотно упакованных плоскостей цементита. В работах [2, 10–12] были изучены характеристики дефектов упаковки (вектор сдвига, энергия ДУ) для достаточно большого числа плоскостей

скольжения, содержащих вектор Бюргерса [100] и [010] полных дислокаций в цементите. Полученные данные были использованы в [13, 14] для анализа механизмов перестройки дислокаций на межфазной границе феррит/цементит. Мы предполагали, что деформация перлитной колонии осуществляется последовательными этапами движения дислокаций как в ферритной, так и в цементитной фазах, с закономерной перестройкой дислокаций на межфазных границах при передаче деформации из одной фазы в другую. В [13] были рассмотрены реакции перестройки дислокаций на межфазной границе Fe/Fe<sub>3</sub>C с учетом ориентационных соотношений (ОС) Багаряцкого и Исайчева между ферритом и цементитом, которые реализуются для тонкопластинчатого перлита. В [14] – реакции перестройки дислокаций с учетом ОС Питча–Петча, которые реализуются для крупнопластинчатого перлита. В работе [14] было показано, что значительное число линий пересечения плоскостей скольжения и межфазной границы в крупнопластинчатом перлите имеют индексы  $\langle hk0 \rangle$ . Это означает, что возможными плоскостями скольжения в цементите могут быть плоскости, содержащие вектор Бюргерса [001] цементита. До настоящего времени не проводилось атомистическое моделирование обобщенных дефектов упаковки в плоскостях цементита такого типа, предполагая, что они не являются плотно упакованными. Однако, чтобы



**Рис. 1.** Элементарная ячейка цементита, в которой восемь атомов железа находятся в общей (g) позиции  $Fe_g$ , а четыре в особой (special) позиции  $Fe_s$ . Четыре эквивалентных атома углерода расположены в призматических позициях.

сделать обоснованными подобные выводы, необходимо провести расчеты для указанных выше плоскостей.

В настоящей работе с использованием метода молекулярной динамики (МД) мы продолжаем исследование дефектов упаковки в цементите, начатое в работах [10–12]. Детально изучена структура  $\gamma$ -поверхностей, стабильные и нестабильные дефекты упаковки в различных сечениях (110), (210), (120), (130) и (310) плоскостей, содержащих вектор Бюргерса [001] полной дислокации цементита. Вместе с уже изученными системами такое исследование дает достаточно полное представление о структуре и подвижности дислокаций различного типа в цементите.

## МЕТОДИКА РАСЧЕТА

При расчетах методом молекулярной динамики был использован потенциал, приведенный в [15]. Взаимодействие Fe–Fe задается  $N$ -частичным ЕАМ потенциалом, построенным в схеме “погруженного атома” [16]. Для описания взаимодействия пар атомов Fe–C и C–C использован парный потенциал Джонсона [17], обсуждение возможности использования потенциала даны в

[18]. Выбранный потенциал межатомного взаимодействия дает минимум энергии решетки цементита с параметрами решетки  $A0 = 4.393 \text{ \AA}$ ,  $B0 = 5.074 \text{ \AA}$ ,  $C0 = 6.345 \text{ \AA}$ , которые совпадают с их экспериментальными значениями в пределах 1–6%. Изученные в настоящей работе плоскости имеют тип  $(lk0)$ . В каждой из этих плоскостей выбирались два взаимно перпендикулярных вектора [001] и  $[-k0]$ , которые вместе с нормалью к плоскости  $(lk0)$ , определяемой как векторное произведение первого вектора на второй, задают базис для построения модельного кристаллита. Величины трансляции вдоль трех выбранных базисных векторов имеют вид:  $C0$ ,  $\sqrt{(A0*k)^2 + (B0*t)^2}$ ,  $1/\sqrt{(l/A0)^2 + (k/B0)^2}$ . Модельный кристаллит содержал  $10 \times 10$  элементарных ячеек в плоскости дефекта и 20 элементарных ячеек в направлении, перпендикулярном плоскости ДУ и состоял из атомов двух сортов (Fe и C), упорядоченных в соответствии со сверхструктурой  $Fe_3C$ . Элементарная ячейка цементита содержит 12 атомов Fe ( $Fe(g)$  и  $Fe(s)$ ) и 4 атома C, см. рис. 1. При образовании планарного дефекта верхняя половина кристаллита, выше плоскости залегания дефекта, сдвигалась относительно нижней на вектор сдвига, принадлежащий этой плоскости. В плоскостях  $(lk0)$  вектор сдвига равен  $f_{(lk0)} = x[001] + y[-k0]$ . Для каждой пары значений  $(x, y)$  вычислялась энергия кристаллита с дефектом, характеризуемым вектором  $f$ . Энергия поверхностных дефектов вычислялась как разность между энергией кристаллита с дефектом и кристаллита без дефекта, отнесенная к площади элементарной ячейки. Полученные таким образом значения энергий в пределах элементарной ячейки на рассматриваемых плоскостях образуют  $\gamma$ -поверхность. В точке локального минимума проводилась релаксация кристаллита с дефектом упаковки, и определялось значение его энергии с учетом смещений атомной решетки вблизи плоскости дефекта упаковки.

Из графика зависимости энергии поверхностного дефекта от величины сдвига, параллельного вектору Бюргерса полных или частичных дислокаций, осуществляющих пластическую деформацию, можно получить значения энергии нестабильных дефектов упаковки  $\gamma_{us}$  (максимальное значение энергии ДУ вдоль выбранного направления сдвига), которые характеризуют легкость преодоления сопротивления решетки при движении рассматриваемой дислокации.

## РЕЗУЛЬТАТЫ АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Анализ расположения атомов Fe и C показывает, что на длине трансляции вдоль нормали к рассматриваемым плоскостям находится 12 сече-

**Таблица 1.** Межплоскостные расстояния для различных сечений плоскостей (110), (210), (120), (310) и (130) цемента. Указано заполнение атомами Fe и С ближайших к данному сечению плоскостей

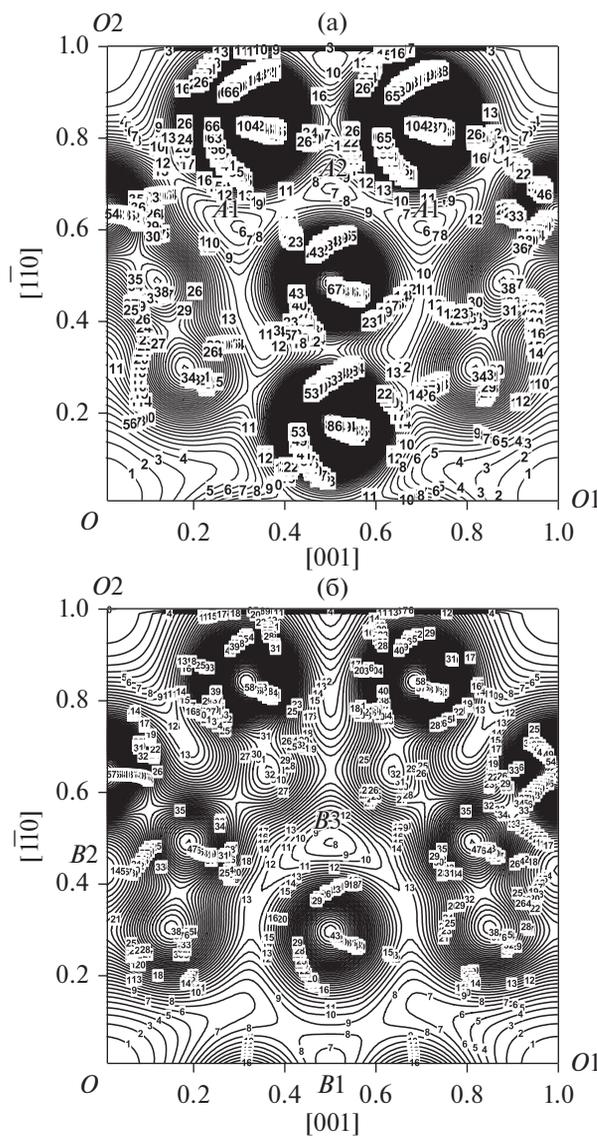
Тип сечения	Плоскости				
	$d(110), \text{Å}$	$d(210), \text{Å}$	$d(120), \text{Å}$	$d(310), \text{Å}$	$d(130), \text{Å}$
I, I'	<b>0.843</b> (Fe–Fe)	0.036 (Fe–Fe)	<b>0.382</b> (Fe–Fe)	<b>0.450</b> (C–C)	0.126 (C–C)
II, II'	0.103 (Fe–Fe)	0.236 (Fe–Fe)	0.182 (Fe–C)	0.020 (C–Fe)	0.011 (C–Fe)
III, III'	0.163 (Fe–Fe)	0.067 (Fe–Fe)	0.044 (C–C)	0.003 (Fe–Fe)	0.150 (Fe–Fe)
IV, IV'	0.309 (Fe–C)	0.224 (Fe–C)	0.138 (C–Fe)	0.343 (Fe–C)	0.060 (Fe–C)
V, V'	<b>0.465</b> (C–C)	0.048 (C–Fe)	0.141 (Fe–Fe)	0.055 (C–Fe)	0.019 (C–Fe)
VI, VI'	0.172 (C–Fe)	<b>0.395</b> (Fe–C)	<b>0.365</b> (Fe–Fe)	0.003 (Fe–Fe)	0.150 (Fe–Fe)
VII	0.053 (Fe–Fe)	<b>0.040</b> (C–C)	0.075 (Fe–Fe)	0.110 (Fe–Fe)	<b>0.672</b> (Fe–Fe)

ний. В табл. 1 даны межплоскостные расстояния для различных сечений рассмотренных плоскостей цемента, указан также сорт атомов, которые расположены на ближайших к данному сечению плоскостях. Во всех плоскостях существуют сечения I и I' (аналогично II и II' и т.д., VI и VI'), которые являются симметричными относительно замены  $X \rightarrow -X$ . Каждая такая пара сечений характеризуется одинаковым межплоскостным расстоянием, распределением атомов, и отличается только симметрией  $\gamma$ -поверхности. Из табл. 1 видно, что межплоскостные расстояния для различных сечений могут отличаться более, чем на порядок. Это существенно сказывается на значениях энергий обобщенных дефектов упаковки. Для очень близко расположенных плоскостей значения энергии ДУ столь велики, что вряд ли могут быть реализованы экспериментально. В дальнейшем рассмотрим только те сечения, которые имеют сравнительно низкие энергии ДУ.

**Дефекты упаковки в плоскости (110) цемента.** Существует семь не эквивалентных по энергии сечений в плоскости (110). В табл. 1 жирным шрифтом выделены два сечения I и V, для которых расстояние между атомными плоскостями достаточно велико. Для сечения V ближайшие плоскости образованы только атомами углерода. Суммарное же расстояние между ближайшими плоскостями, содержащими только атомы Fe, т.е. между плоскостями IV и VI, равно 0.946 Å, что существенно больше межплоскостного расстояния Fe–Fe для группы близко расположенных плоскостей II, III, VII. Подобная неравномерность в распределении межплоскостных расстояний определяет и различие в значениях поверхностных дефектов для различных сечений.

На рис. 2 представлены изоэнергетические контурные карты значений энергий обобщенных ДУ ( $\gamma$ -поверхности) для сечений I и IV (отметим, что для сечений IV, V, VI  $\gamma$ -поверхности близки). Линиями обозначены уровни постоянной энергии ДУ. Векторы **OO1**, **OO2** являются векторами трансляции. Точками **A1–A2**, **B1–B3** помечены положения локальных минимумов на  $\gamma$ -поверхности

в сечениях I, IV плоскости (110) цемента. В табл. 2 приведены значения энергий дефектов упаковки в этих точках и значения энергий нестабиль-



**Рис. 2.**  $\gamma$ -поверхности в плоскостях (110) цемента (результаты МД моделирования) в сечениях I (а) и IV (б).

**Таблица 2.** Энергии  $\gamma$  и сдвиги, соответствующие стабильным дефектам упаковки после релаксации, и значения энергии нестабильных ДУ  $\gamma_{us}$  в плоскостях (110), (210), (120) и (310) цемента

Плоскость	Точки	$\gamma$ , Дж/м <sup>2</sup>	$\Delta x/C0$	$\Delta y/d\langle 110 \rangle$	$\gamma_{us}$ , Дж/м <sup>2</sup>
(110), сечение I	A1	1.5	0.3	0.61	17.8
	A2	1.5	0.5	0.69	17.0
(110), сечение IV	B1	1.3	0.5	0.0	18.0
	B2	1.8	0.0	0.43	20.4
	B3	1.3	0.5	0.50	25.6
Плоскость	Точки	$\gamma$ , Дж/м <sup>2</sup>	$\Delta x/C0$	$\Delta y/d\langle 120 \rangle$	$\gamma_{us}$ , Дж/м <sup>2</sup>
(210), сечение VII	D1	0.96	0.0	0.25	3.8
	<b>D2</b>	<b>0.31</b>	0.0	0.68	6.4
	<b>D3</b>	<b>0.60</b>	0.15	0.55	5.4
	<b>D4</b>	<b>0.56</b>	0.18	0.82	4.0
	D5	1.18	0.50	0.71	9.5
	D6	0.81	0.50	0.0	13.5
Плоскость	Точки	$\gamma$ , Дж/м <sup>2</sup>	$\Delta x/C0$	$\Delta y/d\langle 210 \rangle$	$\gamma_{us}$ , Дж/м <sup>2</sup>
(120), сечение I	E1	0.88	0.14	0.73	4.5
	<b>E2</b>	<b>0.76</b>	0.19	0.23	5.5
	E3	1.92	0.50	0.0	12.5
	<b>E4</b>	<b>0.70</b>	0.0	0.44	7.2
	E5	1.42	0.34	0.57	11.0
Плоскость	Точки	$\gamma$ , Дж/м <sup>2</sup>	$\Delta x/C0$	$\Delta y/d\langle 130 \rangle$	$\gamma_{us}$ , Дж/м <sup>2</sup>
(310), сечение I	F1	1.42	0.50	0.11	5.1
	F6	0.91	0.0	0.78	15.0

ных ДУ, характеризующих способность дислокации к скольжению в данной плоскости. Расчет показал, что значения энергий ДУ очень высоки, в том числе с учетом релаксации (см. табл. 2). Скорее всего, скольжения частичных или полных дислокаций в плоскости (110) цемента невозможно.

**Дефекты упаковки в плоскости (210) цемента.** В табл. 1 жирным шрифтом выделены два сечения VI и VII, для которых расстояние между атомными плоскостями Fe–Fe достаточно велико. Для сечения VII ближайшие плоскости образованы только атомами углерода. Суммарное же расстояние между ближайшими плоскостями, содержащими только атомы Fe, т.е. между плоскостями VI и VI', равно 0.865 Å, что существенно больше межплоскостного расстояния Fe–Fe для других сечений. Расчет показал, что в сечении VI энергии обобщенных ДУ имеют очень высокие значения, в том числе в точках локальных минимумов после релаксации энергии ДУ изменяются в пределах 0.9–2.6 Дж/м<sup>2</sup>.

Скорее всего, скольжения частичных или полных дислокаций в этом сечении плоскости (210) невозможен. Точками D1–D6 помечены положения локальных минимумов на  $\gamma$ -поверхностях в

сечении VII плоскости (210) цемента (рис. 3). Можно отметить существование в рассматриваемом сечении большого числа локальных минимумов. В табл. 2 приведены значения энергий дефектов упаковки в точках и значения соответствующих им энергий нестабильных ДУ в сечении VII. В этом сечении обнаружено 3 вектора сдвига **O2D4** = 0.18[–121], **O2D2** = 0.32[–120], **O2D3** = 0.15[–361] (см. табл. 2), для которых энергии ДУ изменяются в пределах 0.31–0.60 Дж/м<sup>2</sup>, что сопоставимо с низкими значениями, полученными для наиболее плотно упакованных плоскостей цемента [10–12]. Для этих частичных сдвигов не слишком велики также значения энергий нестабильных ДУ. Таким образом, можно ожидать скольжения частичных дислокаций указанных выше типов в сечении VII плоскости (210).

**Дефекты упаковки в плоскостях (120) цемента.** В табл. 1 для плоскости (120) жирным шрифтом выделены два сечения I и VI, для которых межплоскостные расстояния сравнительно большие. Однако расчет показал, что для сечения VI все значения энергии ДУ очень велики, более 6 Дж/м<sup>2</sup>. Существенно ниже значения для сечения I, для которого показана  $\gamma$ -поверхность на рис. 4. Точ-

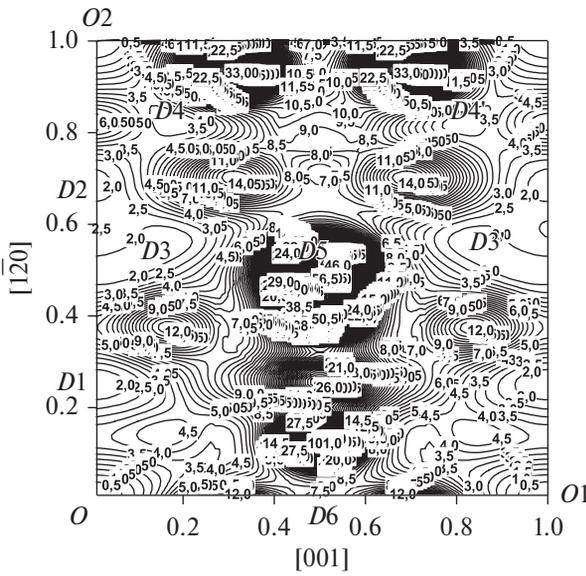


Рис. 3.  $\gamma$ -поверхность в плоскости (210) цементита в сечении VII.

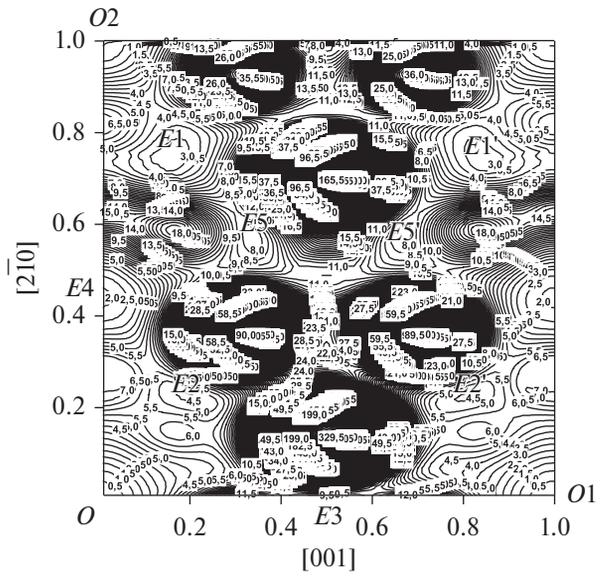


Рис. 4.  $\gamma$ -поверхность в плоскости (120) цементита в сечении I.

ками  $E1-E5$  обозначены положения локальных минимумов. В табл. 2 представлены значения энергий ДУ ( $\gamma$ ) после релаксации, векторов сдвига и энергий нестабильных ДУ ( $\gamma_{us}$ ) в точках  $E1-E5$  сечения I плоскости (120). В таблице выделены 2 точки  $E2$  и  $E4$ , для которых энергии ДУ имеют сравнительно низкие значения  $0.76$  и  $0.70$  Дж/м<sup>2</sup>. Можно отметить, что в этих точках достаточно низкие значения энергии нестабильных ДУ, равные  $5.5$  и  $7.5$  Дж/м<sup>2</sup>. Векторы сдвига  $OE2 \sim 0.2 [2-11]$  и  $OE4 = 0.4 [2-10]$  могут создавать полосу дефектов упаковки при движении в сечении I плоскости (120).

мумов, точки  $F1-F6$  на рис. 6. Значения энергий стабильных и нестабильных ДУ для всех точек локальных минимумов достаточно велики. Наиболее низкие значения, для точек  $F1$  и  $F6$ , даны в табл. 2.

### ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ АТОМИСТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

С использованием метода молекулярной динамики детально рассмотрена структура планар-

**Дефекты упаковки в плоскостях (130) цементита.** В плоскости (130) можно было ожидать единственное сечение VII со сравнительно низкими значениями энергии ДУ (см. табл. 1), т. к. межплоскостное расстояние в этом сечении имеет достаточно большое значение. На рис.5 представлена  $\gamma$ -поверхности для этого сечения в плоскости (130). На  $\gamma$ -поверхности существует 7 локальных минимумов  $H1-H7$ . Для точки  $H1$  характерно даже довольно низкое значение энергии нестабильного ДУ  $\gamma_{us} = 5.0$  Дж/м<sup>2</sup>. К сожалению, полученные в результате релаксации значения для энергии ДУ во всех локальных минимумах изменяются в пределах  $1.06-1.83$  Дж/м<sup>2</sup>. Эти значения очень высоки, чтобы подобные сдвиги были реализованы на практике. Таким образом, ни расщепление полных дислокаций, ни скольжение частичных дислокаций в плоскости (130) невозможны.

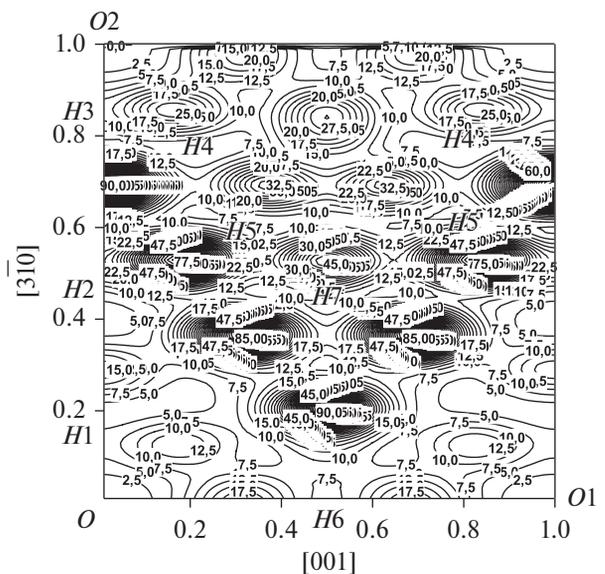


Рис. 5.  $\gamma$ -поверхность в плоскости (130) цементита в сечении VII.

**Дефекты упаковки в плоскостях (310) цементита.** В плоскости (310), в наиболее плотно упакованном сечении I, существует 6 локальных мини-

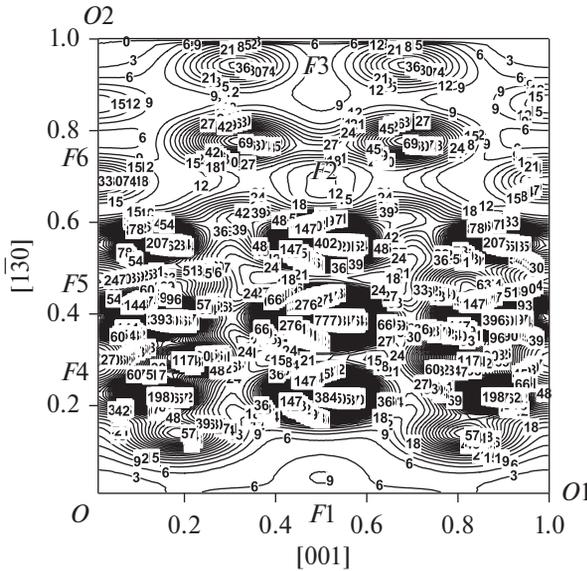


Рис. 6.  $\gamma$ -поверхность в плоскости (310) цементита в сечении I.

ных дефектов и построены  $\gamma$ -поверхности, характеризующие величину энергии дефектов упаковки в зависимости от вектора сдвига в различных сечениях плоскостей (110), (210), (120), (310) и (130) цементита. Можно отметить, что во всех изученных плоскостях в наиболее плотно упакованных сечениях существует локальный минимум, соответствующий сдвигу  $1/2[001]$ . Это означает возможность расщепления полной дислокации с вектором Бюргера  $[001]$  на две частичные  $[001] = 1/2[001] + \text{ДУ} + 1/2[001]$ , связанные полосою дефекта упаковки. Значение энергии ДУ достаточно высоко (наименьшее значение получено для плоскости (210):  $\gamma = 0.81 \text{ Дж/м}^2$ ), однако ядро полной дислокации является растянутым, что может существенно понизить ее упругую энергию. Таким образом, наряду с движением в цементите полной расщепленной дислокации с вектором Бюргера  $[010]$  и не расщепленной дислокации с вектором Бюргера  $[100]$ , возможно также скольжение полной дислокации с вектором Бюргера  $[001]$ , имеющей широкое размытое ядро в плоскости (210) цементита, сечение VII.

Сечение VII плоскости (210) цементита оказалось самым богатым для низкоэнергетических частичных сдвигов:  $\mathbf{b}_{p1} = 0.18[-121]$ ,  $\mathbf{b}_{p2} = 0.32[-120]$ ,  $\mathbf{b}_{p3} = 0.15[-361]$  (см. табл. 2). Энергии ДУ, соответствующие этим сдвигам, изменяются в пределах  $\gamma_{(210)} = 0.3\text{--}0.6 \text{ Дж/м}^2$ , что сопоставимо с энергией ДУ наиболее плотно упакованной плоскости (001) цементита, для которой значения энергии ДУ  $\gamma_{(001)} = 0.46\text{--}0.59 \text{ Дж/м}^2$ . Для этих же плоскостей получены сравнительно низкие значения энергий нестабильных дефектов упаковки, рав-

ные  $\gamma_{\text{ис}} = 4.0\text{--}6.4 \text{ Дж/м}^2$ . Низкие значения энергий стабильных и нестабильных ДУ позволяют предположить возможность скольжения в плоскости (210) цементита частичных дислокаций с векторами Бюргера  $\mathbf{b}_{p1}$ ,  $\mathbf{b}_{p2}$ ,  $\mathbf{b}_{p3}$  и формирование протяженных дефектов упаковки в этой плоскости.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом молекулярной динамики изучены  $\gamma$ -поверхности в плоскостях (110), (210), (120), (130) и (310) цементита. Выявлены векторы сдвига, отвечающие стабильным дефектам упаковки, определена энергия этих ДУ. Оценена энергия нестабильных ДУ, характеризующих склонность материала к пластической релаксации.

Выявлена возможность расщепления ядра дислокации  $[001]$  на две частичные в наиболее плотно упакованных сечениях всех рассмотренных плоскостей.

Установлено, что в плоскости (210) цементита существует три локальных минимума с низкой энергией как стабильных, так и нестабильных дефектов упаковки.

Работа выполнена в рамках государственного задания по темам “Давление” № АААА-А18-118020190104-3 и “Структура” № АААА-А18-118020190116-6.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Счастливцев В.М., Мирзаев Д.А., Яковлева И.Л., Окишев К.Ю., Табатчикова Т.И., Хлебникова Ю.В. Перлит в углеродистых сталях // Екатеринбург. 2006. 310 с.
2. Цементит в углеродистых сталях (коллективная монография), Екатеринбург: УМЦ УПИ, 2017. 379 с.
3. Koreeda A., Shimizu K. Dislocations in cementite // Phil. Mag. 1968. V. 17. P. 1083–1086.
4. Inoue A., Ogura T., Masumoto T. Deformation and fracture behaviours of cementite // Trans. JIM. 1976. V. 17. P. 663–672.
5. Inoue A., Ogura T., Masumoto T. Dislocation structure of cementite in cold-rolled carbon steels // J. Japan Inst. Metals. 1973. V. 37. P. 875–882.
6. Inoue A., Ogura T., Masumoto T. Microstructures of Deformation and Fracture of Cementite in Pearlitic Carbon Steels Strained at Various Temperatures // Met. Trans. 1977. V. 8A. P. 1689–1695.
7. Яковлева И.Л., Карькина Л.Е., Зубкова Т.А., Табатчикова Т.И. Влияние холодной пластической деформации на структуру зернистого перлита в углеродистых сталях // ФММ. 2011. Т. 112. С. 105–112.
8. Keh A.S. Imperfections and plastic deformation of cementite in steel // Acta Met. 1963. V. 11. P. 1101–1103.
9. Inoue A., Ogura T., Masumoto T. Burgers vectors of dislocations in cementite crystal // Scripta Met. 1977. V. 11. P. 1–5.

10. Карькина Л.Е., Карькин И.Н., Кузнецов А.Р. Атомистическое моделирование дефектов упаковки в плоскостях (001), (010) и (100) цементита // ФММ. 2014. Т. 115. С. 91–104.
11. Карькина Л.Е., Карькин И.Н., Зубкова Т.А. Атомистическое моделирование дефектов упаковки в цементите. Плоскости, содержащие вектор [100] // ФММ. 2014. Т. 115. С. 867–882.
12. Карькина Л.Е., Карькин И.Н. Атомистическое моделирование дефектов упаковки в цементите. Плоскости, содержащие вектор [010] // ФММ. 2014. Т. 115. С. 883–896.
13. Karkina L.E., Karkin I.N., Kabanova I.G. and Kuznetsov A.R. Crystallographic analysis of slip transfer mechanisms across the ferrite/cementite interface in carbon steels with fine lamellar structure // J. Appl. Cryst. 2015. V. 48. P. 97–106.
14. Карькина Л.Е., Кabanова И.Г., Карькин И.Н. Передача деформации через межфазную границу феррит/цементит в углеродистых сталях с крупнопластинчатым перлитом // ФММ. 2018. Т. 119. С. 1173–1178.
15. Rosato V. Comparative behavior of carbon in bcc and fcc iron // Acta Metall. 1989. V. 37. P. 2759–2763.
16. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded atom method: derivation and application to impurities, surfaces and other defects in metals // Phys. Rev. 1984 V. 29B. № 12. P. 6443–6453.
17. Johnson R.A., Dienes G.J., Damask A.C. Calculation of the energy and migration characteristics of carbon and nitrogen in  $\alpha$ -iron and vanadium // Acta Metall. 1964. V. 12. P. 1215–1224.
18. Levchenko E.V., Evteev A.V., Belova I.V., Murch G.E. Molecular dynamics simulation and theoretical analysis of carbon diffusion in cementite // Acta Mater. 2009. V. 57. P. 846–853.