

УДК 669.112.227.1:538.915

**ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ  
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ И МАГНИТНЫХ ЭФФЕКТОВ  
В ТРОЙНЫХ СИСТЕМАХ Fe–X–C (X = Si, P, S, Cr, Mn)**

© 2019 г. А. А. Мирзоев<sup>а,\*</sup>, Я. М. Ридный<sup>а</sup>, А. В. Верховых<sup>а</sup><sup>а</sup> Южно-уральский государственный университет, пр. Ленина, 76, Челябинск, 454080 Россия

\*e-mail: mirzoevaa@susu.ru

Поступила в редакцию 30.07.2018

После доработки 04.08.2018

Принята к публикации 11.08.2018

В программном пакете WIEN2k проведено первопринципное моделирование равновесной структуры и свойств тройных систем Fe–X–C (X = Si, P, S, Cr, Mn). Расчеты проводились методом линейаризованных присоединенных плоских волн (FLAPW), с учетом обобщенного градиентного приближения (PBE-GGA). Эти методы являются наиболее точными в рамках теории функционала плотности. В работе проведен анализ магнитной структуры Fe–X–C сплавов и взаимодействия между углеродом и примесными атомами на различных расстояниях. Между примесными атомами кремния, фосфора, хрома и атомами углерода наблюдается отталкивание во всех трех координационных сферах, что приводит к значительному повышению энергии растворения указанных примесей. Аналогичное отталкивание для первых двух координационных сфер наблюдается и для взаимодействия атомов серы и углерода, однако в третьем окружении между атомами возникает небольшое притяжение. При взаимодействии углерода с марганцем для первых двух окружений наблюдается притяжение, при этом энергии растворения, как марганца, так и углерода, понижаются.

*Ключевые слова:* первопринципное моделирование, ОЦК-железо, примеси углерода, WIEN2k.

DOI: 10.1134/S0235010619010134

#### ВВЕДЕНИЕ

Углерод является одним из самых распространенных атомов внедрения в сплавах на основе железа. Его добавляют в сталь для улучшения ее прочности и твердости за счет упрочнения твердого раствора или выделения карбидной фазы, а также путем цементации поверхностных слоев повышаются механические свойства сталей [1]. Помимо углерода в сталях присутствует ряд других легирующих элементов, которые добавляют для улучшения характеристик сталей.

Атомы легирующих элементов вызывают локальные искажения решетки, химические и электронные эффекты, которые изменяют энергию атомов углерода, что существенно влияет на растворимость последнего [2–4]. Ввиду малой массы и размера атома углерода, по сравнению с другими легирующими элементами, очень сложно экспериментально идентифицировать его распределение в сталях на атомном уровне. Особенно сложно это сделать для ферритных сталей, поскольку в ОЦК-железе растворимость углерода чрезвычайно мала. По этой причине вопросы о распределении атомов углерода в стали и влияния на него примесей во многом остаются открытыми.

Согласно экспериментальным данным, представленным Сайтоши [2] марганец и хром практически не изменяют предел растворимости углерода в ОЦК-железе, тогда как фосфор и кремний увеличивают его. На границах зерен углерод выталкивает серу,

что говорит об отталкивающем взаимодействии между ними [5]. Причины такого поведения по-прежнему остаются неясными.

Также хорошо известно, что микросегрегация углерода является более серьезной в высоколегированных сталях, что подтверждается [3]. Однако физический механизм этого явления не был предложен. Поэтому было бы желательным выяснить на атомистическом уровне характер взаимодействия между растворенными веществами и углеродом в  $\alpha$ -Fe, что могло бы обеспечить лучшее понимание кинетики фазовых превращений, а также ряда важных механических и физических свойств ферритных сталей. Поэтому в данной работе проведен расчет энергий взаимодействия между примесными атомами и атомом углеродом на различных расстояниях между ними, а также и энергии растворения углерода в присутствии примесей.

#### МЕТОДИКА

В данной работе расчеты проводились первопринципным полнопотенциальным методом линейризованных присоединенных плоских волн (FLAPW), с учетом обобщенного градиентного приближения (PBE-GGA) в программном пакете WIEN2k [6]. Это наиболее точный метод, используемый в рамках теории функционала плотности. В качестве модели системы была выбрана суперячейка, которая состояла из 54 узлов ОЦК-решетки, заполненных 53 атомами железа и 1 атомом примеси замещения, а также внедренным атомом углерода. Основные параметры моделирования были определены в работах [7,8] и составили:  $R_{mt}K_{max} = 6$  (для систем без углерода  $R_{mt}K_{max} = 10$ ), радиусы МТ-сфер –  $R_{mt}(Fe) = 2.00$  а.е.,  $R_{mt}(X) = 2.00$  а.е.,  $R_{mt}(C) = 1.20$  а.е.,  $E_{cut} = -7$  Рб,  $G_{max} = 20$  Рб<sup>0.5</sup>. Для интегрирования в обратном пространстве и вычисления электронной плотности использовалась схема Монхорста–Пака с сеткой  $4 \cdot 4 \cdot 4$   $k$ -точек в зоне Бриллюэна. Для ферромагнитного  $\alpha$ -железа был определен равновесный параметр решетки и магнитный момент 2.835 Å и 2.23  $\mu_B$ /атом, что хорошо согласуется с экспериментальными значениями 2.86 Å и 2.2  $\mu_B$ /атом, соответственно [10]. Данные параметры моделирования обеспечили точность расчета энергии системы в 0.01 эВ. Критерием сходимости во всех расчётах было достижение точности расчета полной энергии системы, заряда и силы взаимодействия между двумя атомами не менее  $10^{-4}$  Рб,  $10^{-3}$  е и 1 мРб/а.е., соответственно.

Энтальпия растворения углерода в смесь железа с примесью замещения ( $X = Si, P, S, Cr, Mn$ ) оценивалась по формуле:

$$\Delta H(C) = E(Fe53XC) - E(Fe53X) - (1/4) \cdot E(C4),$$

где  $E(Fe53XC)$  – энергия оптимизированной суперячейки, состоящей из 53 атомов железа, одного атома примеси замещения и одного атома углерода, находящегося в октапоре,  $E(Fe53X)$  – энергия оптимизированной суперячейки, состоящей из 53 атомов железа и одного атома примеси замещения,  $E(C4)$  – энергия суперячейки состоящей из 4 атомов углерода.

Энергии связи примеси замещения и углерода была вычислена по следующей формуле:

$$E(X-C) = [E(Fe53XC) - E(Fe54C)] - [E(Fe53X) - E(Fe54)],$$

где  $E(Fe54C)$  – энергии оптимизированных суперячеек, содержащих один атом углерода в октаэдрической поре ОЦК-железа,  $E(Fe54)$  – энергия суперячейки, состоящей из 54 атомов железа. Отрицательное значение энергии связи указывает на благоприятное и привлекательное взаимодействие между дефектами, тогда как положительная энергия связи относится к неблагоприятному и отталкивающему взаимодействию. Данные условные обозначения будут использоваться для изучения и объяснения всех взаимодействий в различных конфигурациях, обсуждаемых ниже.

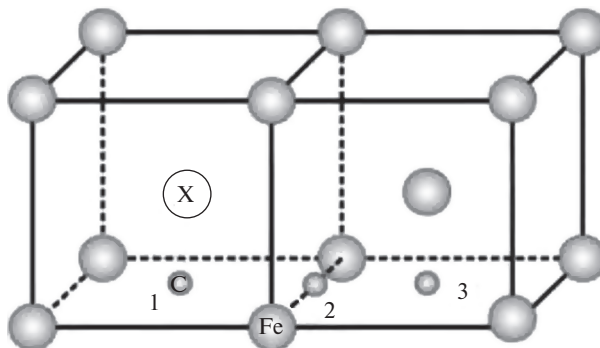


Рис. 1. Конфигурации X–C в ОЦК-железе. Атом углерода занимает октаэдрические позиции 1–3, которые соответствуют первым трем координационным сферам относительно примеси замещения X (X = Si, P, S, Cr, Mn).

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ТРОЙНОЙ СИСТЕМЫ Fe–X–C (X = Si, P, S, Cr, Mn)

При исследовании взаимодействия углерода с примесями замещения X (X = Si, P, S, Cr, Mn) в ОЦК-решетке железа были рассмотрены первые три окружения для X, когда атом углерода постепенно удаляется от атома примеси, последовательно занимая октаэдрические позиции 1–3 (рис. 1). Для каждого случая размещения пары X–C была выполнена объемная и структурная оптимизация системы. В табл. 1 представлены магнитные моменты на атомах железа, примеси замещения и углерода, а также расстояние между атомами C–X и объем многогранника Вороного приходящийся на один атом примеси.

Таблица 1

Значения магнитных моментов атомов железа (для Fe указан средний магнитный момент на атомах железа ближайших к X–C), примеси X (X = Si, P, S, Cr, Mn) и углерода в ОЦК-железе (M(X)). Расстояние X–C в Å. Объем многогранника Вороного (V) приходящийся на 1 атом примеси в Å<sup>3</sup>

X	Позиция	M(Fe), $\mu_B$	M(C), $\mu_B$	M(X), $\mu_B$	Расстояние X–C, Å	V(C), Å <sup>3</sup>	V(X), Å <sup>3</sup>
Mn	1	2.22	–0.08	0.84	1.780	7.04	10.41
	2	2.19	–0.09	1.71	1.975	7.03	11.30
	3	2.12	–0.10	1.20	3.225	6.95	11.62
Cr	1	2.19	–0.05	–0.73	1.823	7.05	10.35
	2	2.16	–0.07	–1.46	2.071	7.03	11.30
	3	2.14	–0.10	–1.62	3.231	6.92	11.64
P	1	2.15	–0.08	–0.05	1.792	7.19	9.99
	2	2.12	–0.10	–0.08	2.600	7.64	11.37
	3	2.03	–0.10	–0.07	3.286	6.94	11.51
Si	1	2.14	–0.07	–0.07	1.840	6.94	10.33
	2	2.12	–0.07	–0.08	2.170	7.09	11.37
	3	2.06	–0.09	–0.09	3.240	6.90	11.64
S	1	2.17	–0.09	–0.01	1.794	7.53	9.71
	2	2.19	–0.11	–0.01	2.711	7.90	11.46
	3	2.09	–0.10	0.02	3.401	6.97	11.74

Из данных представленных в табл. 1 можно увидеть, что магнитный момент на атоме углерода в присутствии примеси довольно сильно варьируется от значения  $-0.05$  до  $-0.11 \mu_B$ . Минимальное значение магнитного момента на атоме углерода соответствует системе легированной хромом, для случая когда расстояние Cr—C минимально. Полученные значения находятся в согласии с результатом  $-0.07 \mu_B$ , представленным в работе [10]. Для случая, когда C и примесь замещения находятся в первом окружении относительно друг друга наименьшее расстояние между ними соответствует примеси Mn. Отметим, что при этом магнитные моменты на C и Mn антипараллельны друг другу, в отличие от серы, фосфора, кремния и хрома.

Примеси замещения (S, P, Cr, Si), магнитные моменты которых параллельны моменту на атоме C, отодвигают от себя атом углерода при расположении в его втором окружении. Максимальное расстояние между углеродом и примесью замещения наблюдается в случае S. Возможно, что именно для взаимодействия серы и углерода более ярко выражен дальнедействующий упругий эффект. Необходимо отметить, что в 3-ем окружении относительно углерода только для серы наблюдается изменение направления магнитного момента с отрицательного значения на положительное.

При рассмотрении системы P—C и S—C во втором окружении объемная оптимизация системы приводит к увеличению параметра решетки и как следствие к увеличению расстояния и объема многогранника Вороного. Для примесей P, Si наблюдается постепенное уменьшение магнитного момента с увеличением расстояния X—C. Значение магнитного момента хрома практически в два раза уменьшается от значения  $-0.73$  для первой координационной сферы (находится в согласии с  $-0.66 \mu_B$  [11]) до  $-1.46 \mu_B$  (для второй координационной сферы). Вероятно, что данный эффект связан с увеличением объема многогранника Вороного, приходящегося на один атом хрома (с  $10.35$  до  $11.30 \text{ \AA}^3$ ). Аналогичная ситуация наблюдается и для марганца во втором окружении (с  $0.84$  до  $1.71 \mu_B$ ). Происходит резкий скачок магнитного момента, при этом объем многогранника Вороного, приходящийся на атом марганца также значительно увеличивается. Согласно работе [11] при концентрации марганца менее 10% (в нашем случае около 2%) ориентация магнитного момента сильно зависит от окружающей матрицы и может значительно меняться, что мы и наблюдаем. Данный характер изменения магнитного момента для атома марганца согласуется с результатами Медведевой [12], где магнитные моменты были равны  $0.63$ ,  $1.70$  и  $1.50 \mu_B$ , соответственно, для первого, второго и третьего окружения.

Энергетические характеристики взаимодействия примесей X—C представлены в табл. 2. Энергии растворения примесей в чистой структуре ОЦК-железа были равны: для углерода в октапоре  $0.85 \text{ эВ}$  ( $0.63$ – $0.98$  [13],  $0.74 \text{ эВ}$  [14],  $0.82 \text{ эВ}$  [15]); для фосфора  $-1.66 \text{ эВ}$  ( $-1.62$ ,  $-1.83$ ,  $-1.71 \text{ эВ}$  [16]); для марганца  $0.15 \text{ эВ}$  ( $0.16 \text{ эВ}$  [17]); для хрома  $-0.15 \text{ эВ}$  ( $-0.12 \text{ эВ}$  [18],  $-0.20 \text{ эВ}$  [19]); для кремния  $-1.19 \text{ эВ}$  ( $-1.20$  [20]).

Анализируя данные табл. 2 видно, что для фосфора наблюдается отталкивание для всех трех позиций и повышение энергии растворения фосфора (с  $-1.66$  до  $-0.77 \text{ эВ}$ ). Самое сильное отталкивание наблюдается для второго окружения. Данный характер взаимодействия согласуется с экспериментальными результатами [25]. Аналогичная ситуация в случае взаимодействия серы с углеродом. Также для первых двух окружений наблюдается отталкивание между данными примесями, а вот в третьем окружении магнитный момент серы меняется и появляется небольшое притяжение.

При взаимодействии углерода с марганцем для первых двух окружений наблюдается притяжение, при этом энергии растворения, как марганца, так и углерода понижаются, что указывает на увеличение растворимости углерода в железе. Полученные энергии связи находятся в хорошем согласии как с теоретическими работами [10, 12, 21, 24], так и с экспериментальными значениями ( $-0.14$ ... $-0.46 \text{ эВ}$  [26, 27]). Энергии взаимодействия между атомами углерода и кремния полученные в данной работе хорошо согла-

Таблица 2

Значения энергии растворения углерода в присутствии примеси замещения X, энергия растворения примеси X, энергии связи C–X (X = Si, P, S, Cr, Mn)

X	№	Энергия растворения C, эВ	Энергия растворения X, эВ	Энергия связи, эВ
S	1	1.15	–0.43	0.35
	2	1.17	–0.41	0.37
	3	0.79	–0.79	–0.01
Mn	1	0.66	0.02	–0.13(–0.1[12], –0.08[10], –0.12[21])
	2	0.79	0.14	–0.01 (0.08[10], –0.05 [21])
	3	0.88	0.24	0.08 (0.15[10], 0.05 [21])
Cr	1	1.07	0.13	0.28 (0.28 [22], 0.30 [10])
	2	1.05	0.11	0.26 (0.22 [22], 0.26 [10])
	3	0.92	–0.02	0.12 (0.08 [22], 0.10 [10])
P	1	1.21	–1.25	0.41
	2	1.70	–0.77	0.90
	3	0.83	–1.64	0.03
Si	1	1.39 (1.35 [23])	–0.70	0.55 (0.50 [21], 0.478 [24])
	2	1.66 (1.60 [23])	–0.42	0.81 (0.79 [21], 0.75 [24])
	3	0.88 (0.90 [23])	–1.20	0.04 (0.01 [21], –0.021 [24])

суются с другими теоретическими данными [21, 24]. При этом энергии растворения кремния и углерода повышаются, таким образом, кремний уменьшает растворимость углерода в железе. Аналогичная ситуация наблюдается для случая взаимодействия углерода с хромом, что также согласуется с другими данными [10, 22].

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом в заключении можно сказать:

1) Магнитный момент на атоме углерода в ОЦК железе существенно зависит от типа легирующей примеси и может принимать значения от  $-0.05$  до  $-0.11 \mu_B$ . Минимальное значение магнитного момента на атоме углерода наблюдается при легировании хромом, когда атомы Cr и C являются ближайшими соседями, а максимальное значение магнитного момента – при легировании серой.

2) Все легирующие примеси, за исключением Mn, отталкивают от себя углерод. Наиболее сильное отталкивание (0.9 и 0.81 эВ) наблюдается для примесей фосфора и кремния, более слабое (0.35 и 0.28 эВ) – для примесей серы и хрома. Наличие отталкивания проявляет себя в увеличении энергии растворения углерода в указанных сплавах. Взаимодействие же атомов углерода с марганцем для первых двух окружений носит характер притяжения. При этом энергии растворения, как марганца, так и углерода, понижаются, что приводит к увеличению растворимости углерода в железе, растворения углерода повышаются, что уменьшает растворимость углерода в железе.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 16-19-10252.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Abbaschian R., Reed-Hill R. E. Physical metallurgy principles // Cengage Learning. 2008. 328 p.
2. Saitoh H., Ushioda K., Yoshinaga N., Yamada W. Influence of substitutional atoms on the solubility limit of carbon in bcc iron // Scr. Mater. 2011. **65**. № 10. P. 887–890.
3. Zhu R. F., Lu Y. P., Wei T. C–Mn segregation and its effect on phase transformation and deformation in Fe–Mn–C alloys // Sci. China, Ser. E 1997. **40**. № 6. P. 567–573.
4. Garruchet S., Perez M. Modelling the carbon Snoek peak in ferrite: coupling molecular dynamics and kinetic Monte-Carlo simulations // Comput. Mater. Sci. 2008. **43**. P. 286–292.
5. Suzuki S., Tani S., Abiko K., Kimura H. Site competition between sulfur and carbon at grain boundaries and their effects on the grain boundary cohesion in iron // Metall. Trans. A. 1991. **18**. № 6. P. 1109–1115.
6. Schwarz K., Blaha P., Madsen G. K. H. Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material sciences // Comp. Phys. Comm. 2002. **147**. P. 71–76.
7. Ридный Я. М., Мирзоев А. А., Мирзаев Д. А. Определение оптимальных параметров моделирования для максимально точных расчетов энергий в ОЦК-железе // Вестник ЮУрГУ. “Мат. Мех. Физ.”. 2016. **8**. № 4. С. 63–69.
8. Ридный Я. М., Мирзоев А. А., Мирзаев Д. А. Примеси кремния в ОЦК-железе: ab-initio моделирование свойств и энергетических параметров // Вестник ЮУрГУ. “Металлургия”. 2017. **17**. № 3. С. 6–9.
9. Kittel C., McEuen P. Introduction to solid state physics. New York : Wiley. 1996. **8**. P. 323–324.
10. Liu P., Xing W., Cheng X. et al. Effects of dilute substitutional solutes on interstitial carbon in  $\alpha$ -Fe: Interactions and associated carbon diffusion from first-principles calculations // Physical Review B. 2014. **90**. № 2. 024103.
11. Mirzoev A. A., Yalalov M. M., Mirzaev D. A. Energy of mixing and magnetic state of components of Fe–Mn alloys: A first-principles calculation for the ground state // The Physics of Metals and Metallography. 2006. **101**. № 4. P. 341–348.
12. Medvedeva N. I., Van Aken D. C., Medvedeva J. E. The effect of carbon distribution on the manganese magnetic moment in bcc Fe–Mn alloy // J. Physics: Cond. Matter. 2011. **23**. № 32. 326003.
13. Schlirrmann E., Schmidt T., Tillmann F. Carburisation equilibria of alpha-iron with methane-hydrogen mixtures in the 600–800°C range and their // Giesserei-Forschung. 1967. **19**. № 1. P. 35–41.
14. Jiang D. E., Carter E. A. Carbon dissolution and diffusion in ferrite and austenite from first principles // Physical Review B. 2003. **67**. № 21. 214103.
15. Hatcher N., Madsen G. K. H., Drautz R. DFT-based tight-binding modeling of iron-carbon // Physical Review B. 2012. **86**. № 15. 155115.
16. Ko W.-S., Kim N. J., Lee B.-J. Atomistic modeling of an impurity element and a metal-impurity system: pure P and Fe–P system // J. Physics: Cond. Matter. 2012. **24**. № 22. 225002.
17. Gorbatov O. I., Okatov S. V., Gornostyrev Yu. N., Korzhavyi P. A., Ruban V. Effect of magnetism on the solubility of 3d elements in bcc iron: Results of first-principle investigations // The Physics of Metals and Metallography. 2013. **114**. № 8. P. 642–653.
18. Olsson P., Domain C., Wallenius J. Ab initio study of Cr interactions with point defects in bcc Fe // Physical Review B. 2007. **75**. 014110.
19. Soulairol R., Fu C. C., Barreteau C. Structure and magnetism of bulk Fe and Cr: from plane waves to LCAO methods // J. Physics: Cond. Matter. 2010. **22**. № 29. 295502.
20. Schlesinger M. E., Xiang Q. Enthalpies of mixing in Fe–C–Si melts // J. alloys and compounds. 2001. **321**. № 2. P. 242–247.
21. Bakaev A., Terentyev D., Bonny G., Klaver T. P. C., Olsson P., Neck D. V. Interaction of minor alloying elements of high-Cr ferritic steels with lattice defects: An ab initio study // J. Nuclear Materials. 2014. **444**. № 1–3. P. 237–246.
22. Sandberg N., Henriksson K. O. E., Wallenius J. Carbon impurity dissolution and migration in bcc Fe–Cr: First-principles calculations // Physical Review B. 2008. **78**. № 9. 094110.

23. Sampath S., Rementeria R., Huang X., Poplawsky J.D., Garcia-Mateo C., Caballero F.G., Janisch R. The role of silicon, vacancies, and strain in carbon distribution in low temperature bainite // *J. Alloys and Compounds*. 2016. **673**. P. 289–294.
24. Simonovic D., Ande C.K., Duff A.I., Syahputra F., Sluiter M.H.F. Diffusion of carbon in bcc Fe in the presence of Si // *Physical Review B*. 2010. **81**. 054116.
25. Suzuki S., Obata M., Abiko K., Kimura H. Effect of carbon on the grain boundary segregation of phosphorus in  $\alpha$ -iron // *Scripta metallurgica*. 1983. **17**. № 11. P. 1325–1328.
26. Massardier V., Merlin J., Patezour E.L., Soler M. Mn–C interaction in Fe–C–Mn steels: Study by thermoelectric power and internal friction // *Metall. and Mat. Trans. A*. 2005. **36**. № 7. P. 1745–1755.
27. Abe H., Suzuki T., Okada S. Decomposition of Mn–C dipoles during quench-ageing in low-carbon aluminium-killed steels // *Trans. of the Japan institute of metals*. 1984. **25**. № 4. P. 215–225.

### Ab initio Computer Simulation Parameters and Magnetic Energy Effects in Ternary Systems Fe–X–C (X = Si, P, S, Cr, Mn)

A. A. Mirzoev<sup>1</sup>, Ya. M. Ridnyi<sup>1</sup>, A. V. Verkhovyykh<sup>1</sup>

<sup>1</sup>South Ural State University, Lenina av., 76, Cheliabinsk, 454080 Russia

Using the WIEN2k package we simulate equilibrium structures and properties of the ternary systems Fe–X–C (X = Si, P, S, Cr, Mn). Modeling is performed using one of the most precise methods of density functional theory: full-potential linearized augmented plane-wave method (FLAPW) with the generalized gradient approximation (PBE-GGA) for exchange-correlation potential. We analyze the magnetic structure of Fe–X–C alloys and the interactions between carbon and impurity atoms at different distances. We find that in all three coordination shells Si, P, and Cr have a repulsive interaction with C atoms. The same behavior is observed for S in the first two coordination shells, though in the third coordination environment S slightly attracts carbon atoms. In case of Mn we find that the interaction between C and Mn, located in the first two coordination shells, is attractive, which decreases the dissolution energies of both C and Mn.

*Keywords:* ab initio modeling, bcc iron, carbon impurities, WIEN2k

#### REFERENCES

1. Abbaschian R., Reed-Hill R. E. *Physical metallurgy principles* // Cengage Learning. 2008. 328 p.
2. Saitoh H., Ushioda K., Yoshinaga N., Yamada W. Influence of substitutional atoms on the solubility limit of carbon in bcc iron // *Scr. Mater*. 2011. **65**. № 10. P. 887–890.
3. Zhu R.F., Lu Y.P., Wei T. C–Mn segregation and its effect on phase transformation and deformation in Fe–Mn–C alloys // *Sci. China, Ser. E* 1997. **40**. № 6. P. 567–573.
4. Garruchet S., Perez M. Modelling the carbon Snoek peak in ferrite: coupling molecular dynamics and kinetic monte-carlo simulations // *Comput. Mater. Sci*. 2008. **43**. P. 286–292.
5. Suzuki S., Tanii S., Abiko K., Kimura H. Site competition between sulfur and carbon at grain boundaries and their effects on the grain boundary cohesion in iron // *Metall. Trans. A*. 1991. **18**. № 6. P. 1109–1115.
6. Schwarz K., Blaha P., Madsen G.K.H. Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material sciences // *Comp. Phys. Comm*. 2002. **147**. P. 71–76.
7. Ridnyi Ya.M., Mirzoev A.A., Mirzaev D.A. Determining the optimal modeling parameters for maximum precise calculations of energy in BCC-iron. [*Opredeleniye optimal'nykh parametrov modelirovaniya dlya maksimal'no tochnykh raschetov energiy v OTSK-zheleze*] // *Bulletin of South Ural State University. Series of "Mathematics. Mechanics. Physics"*. 2016. **8**. № 4. P. 63–69. [In Rus.].
8. Ridnyi Ya.M., Mirzoev A.A., Mirzaev D.A. A silicon impurity in BCC-iron: ab initio simulation of properties and energy parameters [*Primesi kremniya v OTSK-zheleze: ab-initio modelirovaniye svoystv i energeticheskikh parametrov*] // *Bulletin of South Ural State University. Series of "Metallurgy"*. 2017. **17**. № 3. P. 6–9. [In Rus.].

9. Kittel C., McEuen P. Introduction to solid state physics. New York : Wiley. 1996. **8**. P. 323–324.
10. Liu P., Xing W., Cheng X. et al. Effects of dilute substitutional solutes on interstitial carbon in  $\alpha$ -Fe: Interactions and associated carbon diffusion from first-principles calculations // Physical Review B. 2014. **90**. № 2. 024103.
11. Mirzoev A.A., Yalalov M.M., Mirzaev D.A. Energy of mixing and magnetic state of components of Fe-Mn alloys: A first-principles calculation for the ground state // The Physics of Metals and Metallography. 2006. **101**. № 4. P. 341–348.
12. Medvedeva N.I., Van Aken D.C., Medvedeva J.E. The effect of carbon distribution on the manganese magnetic moment in bcc Fe-Mn alloy // J. Physics: Cond. Matter. 2011. **23**. № 32. 326003.
13. Schlirrmann E., Schmidt T., Tillmann F. Carburisation equilibria of alpha-iron with methane-hydrogen mixtures in the 600–800°C range and their // Giesserei-Forschung. 1967. **19**. № 1. P. 35–41.
14. Jiang D.E., Carter E.A. Carbon dissolution and diffusion in ferrite and austenite from first principles // Physical Review B. 2003. **67**. № 21. 214103.
15. Hatcher N., Madsen G.K.H., Drautz R. DFT-based tight-binding modeling of iron-carbon // Physical Review B. 2012. **86**. № 15. 155115.
16. Ko W.-S., Kim N.J., Lee B.-J. Atomistic modeling of an impurity element and a metal-impurity system: pure P and Fe-P system // J. Physics: Cond. Matter. 2012. **24**. № 22. 225002.
17. Gorbатов O.I., Okatov S.V., Gornostyrev Yu.N., Korzhavyi P.A., Ruban V. Effect of magnetism on the solubility of 3d elements in bcc iron: Results of first-principle investigations // The Physics of Metals and Metallography. 2013. **114**. № 8. P. 642–653.
18. Olsson P., Domain C., Wallenius J. Ab initio study of cr interactions with point defects in bcc Fe // Physical Review B. 2007. **75**. 014110.
19. Soulaïrol R., Fu C.C., Barreateau C. Structure and magnetism of bulk Fe and Cr: from plane waves to LCAO methods // J. Physics: Cond. Matter. 2010. **22**. № 29. 295502.
20. Schlesinger M.E., Xiang Q. Enthalpies of mixing in Fe-C-Si melts // J. alloys and compounds. 2001. **321**. № 2. P. 242–247.
21. Bakaev A., Terentyev D., Bonny G. Klaver T.P.C., Olsson P., Neck D.V. Interaction of minor alloying elements of high-Cr ferritic steels with lattice defects: An ab initio study // J. Nuclear Materials. 2014. **444**. № 1–3. P. 237–246.
22. Sandberg N., Henriksson K.O.E., Wallenius J. Carbon impurity dissolution and migration in bcc Fe-Cr: First-principles calculations // Physical Review B. 2008. **78**. № 9. 094110.
23. Sampath S., Rementeria R., Huang X., Poplawsky J.D., Garcia-Mateo C., Caballero F.G., Janisch R. The role of silicon, vacancies, and strain in carbon distribution in low temperature bainite // J. Alloys and Compounds. 2016. **673**. P. 289–294.
24. Simonovic D., Ande C.K., Duff A.I., Syahputra F., Sluiter M.H.F. Diffusion of carbon in bcc Fe in the presence of Si // Physical Review B. 2010. **81**. 054116.
25. Suzuki S., Obata M., Abiko K., Kimura H. Effect of carbon on the grain boundary segregation of phosphorus in  $\alpha$ -iron // Scripta metallurgica. 1983. **17**. № 11. P. 1325–1328.
26. Massardier V., Merlin J., Patezour E.L., Soler M. Mn-C interaction in Fe-C-Mn steels: Study by thermoelectric power and internal friction // Metall. and Mat. Trans. A. 2005. **36**. № 7. P. 1745–1755.
27. Abe H., Suzuki T., Okada S. Decomposition of Mn-C dipoles during quench-ageing in low-carbon aluminium-killed steels // Trans. of the Japan institute of metals. 1984. **25**. № 4. P. 215–225.