

УДК 669.15-194.56:539.219.3

Канд. фіз.-мат. наук А. В. Недоля¹, д-р техн. наук В. Ю. Ольшанецький²¹ Запорізький національний університет, ² Запорізький національний технічний університет;
м. Запоріжжя

РОЗРАХУНКОВА ОЦІНКА ЕНЕРГЕТИЧНОГО СТАНУ НАНОКЛАСТЕРА АУСТЕНІТУ НА ОСНОВІ Fe-C

Методом класичної молекулярної динаміки розраховано енергетичний стан нанокластера аустеніту обраного розміру системи Fe-C. Розрахунки показують, що рух вуглецю як домішки впровадження є енергетично вигіднішим у напрямку поверхні в незавершену октапору і тому його треба розглядати як один з можливих механізмів реалізації висхідної та зернограничної дифузії і перерозподілу легувальних елементів на поверхні та межах зерен з утворенням нових фаз.

Ключові слова: аустеніт, нанокластер, дифузія, рухомість, молекулярна динаміка, октапора, поверхнева енергія.

Процеси дифузії в кристалах здійснюється за визначений час у певних напрямках і на фіксовані відстані. Напрямки масоперенесення атомів визначаються передусім симетрією кристалу та типом дифузійних процесів. При цьому швидкість дифузії залежить не тільки від зовнішніх чинників, але й від механізму дифузії та властивостей атомів і кристалічного середовища. Закони Фіка описують дифузію, яка виникає завдяки градієнтам концентрації або парціальних хімічних потенціалів. Наявність якихось нових факторів у процесі дифузії описується додатковими членами у рівняння дифузії. Для анізотропного середовища, яким є кристал, дифузійні рухи речовини в різних напрямках мають різну швидкість і коефіцієнт дифузії є тензором другого рангу [1]

$$J_i^k = -D_{ij}^k \nabla_j C^k + V_i^{Fk} C^k, \quad (1)$$

де J_i^k – потік атомів k -го сорту у i -му напрямку кристалічного простору, D_{ij}^k – коефіцієнт корельованої дифузії (самодифузії) атомів k -го сорту, який залежить від напрямку в кристалі, C^k – концентрація k -го компонента, V_i^{Fk} – швидкість дрейфу атомів k -го сорту під дією зовнішньої або внутрішньої сили F в i -му напрямку.

Для кристалів кубічної сингонії тензор коефіцієнта дифузії складається з діагональних компонентів і має вигляд:

$$D_{ij} = \begin{pmatrix} D_{11} & 0 & 0 \\ 0 & D_{22} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

при цьому $D_{11} = D_{22} = D_{33}$.

Залежність коефіцієнта дифузії від температури визначається законом Арреніуса

$$D = D_0 e^{-\frac{Q_a}{kT}}, \quad (3)$$

де $D_0 = \nu_0 \exp\left(\frac{\Delta S}{R}\right)$ – частотний фактор, ΔS – ентропія активації, R – газова стала, $\nu_0 \approx 10^{12} \text{ c}^{-1}$ – частота «теплових стрибків» атомів середовища, Q_a – енергія активації дифузії.

На значення D_0 та Q_a впливають зовнішні чинники, включаючи наявність дефектів. Величина енергії активації дифузії також залежить від механізму дифузії: міжвузлового, вакансійного, кільцевого руху атомів заміщення, а також атомів упродовження по окта- та тетрапорах. Серед механізмів дифузії міжвузловий механізм для атомів заміщення вимагає великих значень енергії активації (~ 9 eV) і є малоімовірним у щільноупакованих структурах, до яких можна віднести й ГЦК структуру, хоча можливість реалізації його у більш «крихких» структурах збільшується.

Існування дрейфу атомів впровадження (зокрема атомів вуглецю) обумовлено дією зовнішніх і внутрішніх факторів, які сприяють їх масоперенесенню (висхідну дифузію), наприклад, при обробленні поверхні силовим обкатуванням або струменями дробу, а також формуванням модульованої структури при мікророзшаруванні пересичених розчинів або впливом ефектів мікроліквації деяких розчинних елементів. Тому вивчення дії зовнішніх чинників, що впливають на процеси масоперенесення в металах та сплавах є актуальним завданням і дозволяє шляхом оброблення та модифікації поверхні та міжзернової межі змінити фізико-хімічні та механічні властивості матеріалів.

У роботі брала участь студентка 5 курсу Запорізького національного університету Т.С. Саушкіна

Дослідження термічної нестабільності аустеніту в модельних сплавах системи Fe-Ni-C показало, що в залежності від температури короточасного нагрівання в інтервалі 20°–1000 °С з подальшим гартуванням, значення параметра ґратки аустеніту немонотонно змінювалось [2]. При цьому суттєва відмінність рухомості атомів вуглецю як домішки впровадження по відношенню до заліза і нікелю (рис. 1), пов'язана з дифузією атомів співвідношенням

$$U_{ij}^n = \frac{D_{ij}^n}{kT}, \quad (4)$$

де U_{ij}^n – рухомість атому n -го сорту. Це приводить до переважної реалізації фазових переходів на межі зерен та поверхні (рис. 2).

Подібні явища виникають у сталях У8 та У10 при силовому обкатуванні поверхні спеціальних зразків циліндричної форми [3].

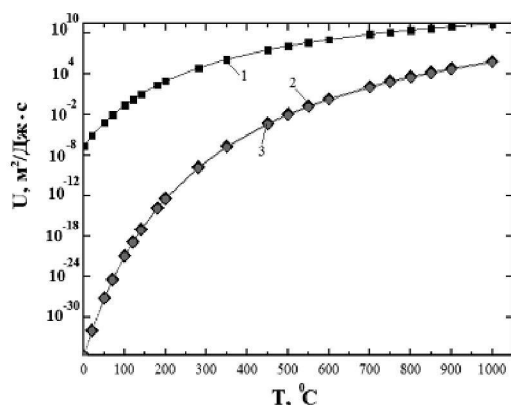


Рис. 1. Рухомість атомів компонентів (за Енштейном) в залежності від температури: 1 – C, 2 – Fe, 3 – Ni

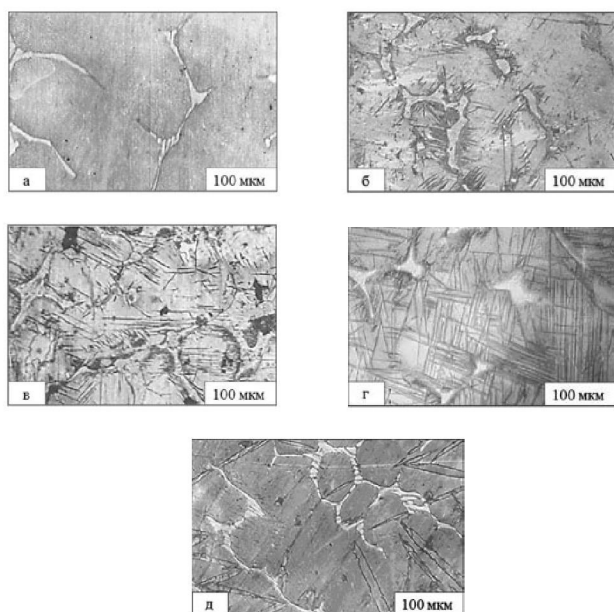


Рис. 2. Мікроструктура сплаву 145Н10 після короточасного нагрівання до температур: а – 20 °С; б – 500 °С; в – 600 °С; г – 700 °С; д – 950 °С та гартування у воду

Зовнішні чинники, що відповідають за дрейф атомів, можуть приводити до локального перерозподілу легувальних елементів, їх суттєвого накопичення в певних зонах, утворення нових фаз (кристалітів та кластерів нанометрових розмірів).

Розрахунки нанокластера аустеніту

Враховуючи помітний вплив на рух атомів у поверхневому шарі зовнішньої межі поділу і поверхневої енергії, були проведені розрахунки методом молекулярної динаміки [4, 5] енергії подібного кластера, що мав розмір $9 \times 9 \times 9$ елементарних ґраток ГЦК ($\sim 3,3 \times 3,3 \times 3,3$ нм), системи Fe-C (рис. 3). Об'єм кристалічного кластера (V) становив $34,01 \text{ нм}^3$, а площа всієї поверхні (S) – $62,99 \text{ нм}^2$. Частка атомів у приповерхневому шарі (1 нм) була пропорційною $1/D \sim S/V = 1,85 \text{ нм}^{-1}$ ($D = 0,54 \text{ нм}$). Розмір кристалічного кластера обирався таким, щоб, з одного боку, перевищував критичні розміри, при яких зберігається симетрія нанокристалічного матеріалу (три координаційні сфери), що для Fe₇ становить близько 0,5 нм [6], з іншого боку – був зручним для розрахунків. Атомний склад кластера Fe₇ відповідав 1,45 мас. % C (233 атоми із загальної кількості 3663), інше – залізо.

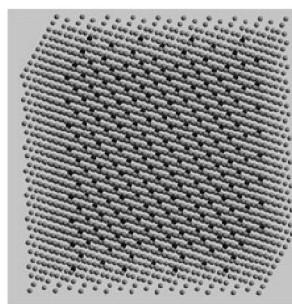


Рис. 3. Вигляд кластера Fe-C зверху (3663 атоми, з них 233 атоми вуглецю (чорний колір))

Враховуючи особливості руху вуглецю як домішки впровадження, що реалізується при русі крізь октапори (тетрапори) [7, 8], його поверхневу та хімічну активність [9, 10] (а також здатність утворювати навіть поверхневу плівку), проведено порівняльні розрахунки енергії системи при русі вуглецю з центральної октапори кристалу до поверхневої октапори та в глибину кластера. Було обрано систему з рівномірним розташуванням атомів вуглецю в октапорах ГЦК ґратки (приблизно один атом вуглецю на 3 центральні октапори), для виключення їх несиметричного впливу на енергетичний стан системи. Рух атома вуглецю здійснювався за схемою: центральна октапора ГЦК кристалу → поверхнева (або внутрішня бокова) октапора на середині ребра кристалу у площині (200). Цей альтернативний рух відбувається в напрямках (типу $\langle 011 \rangle$) відповідно до симетрії кристалу (рис. 4).

Розрахунки проведені з перших принципів із врахуванням потенціалів атомів та впливу потенціалу взаємодії Ленарда-Джонса

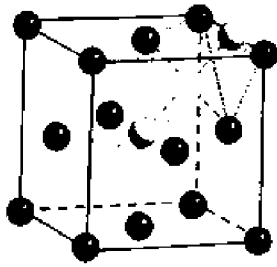


Рис. 4. Схема руху атома вуглецю (світлі сфери) з центральної октапори до поверхневої октапори (стрілками) ГЦК заліза (Fe – темні сфери). Пунктирна область відповідає максимальним значенням енергії

$$U_{WV}(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \sum_{i \neq j} \left[\frac{A}{r_{i,j}^{12}} - \frac{B}{r_{i,j}^6} \right] \quad (5)$$

стандартним методом молекулярної механіки, що передбачає чисельний розв'язок системи ньютонівських рівнянь руху атомів, які відповідають модельній кристалічній ґратці

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i(t)}{dt^2} = - \frac{\partial U(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)}{\partial \vec{r}_i} + \vec{F}_i^{ex}, \quad (6)$$

де $U = \sum_i U_i$ – потенційна енергія системи (i – тип

внеску у потенційну енергію); $\vec{F}_i^{ex}$ – сила, що визначає взаємодію з молекулами середовища; r_i, r_j – координати

атомів, що взаємодіють $r_{i,j} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$; A, B – константи,

що визначають глибину потенційної ями та розташування її мінімуму.

Для чисельного інтегрування динамічних рівнянь використовували схему кінцево-різницевої апроксимації, в якій похибка апроксимації другої похідної $d^2 \vec{r}_i / dt^2$ реалізується за різницевою схемою другого порядку:

$$\frac{\vec{r}_i(t + \Delta t) - 2\vec{r}_i(t) + \vec{r}_i(t - \Delta t)}{\Delta t^2} = \vec{F}_i(t) \quad (7)$$

(схемою Верле).

Внутрішні координати системи перераховували в декартові та навпаки за допомогою алгоритму Ейрінга [11]. Такий підхід дозволив з достатньою точністю замінити громіздкий квантово-механічний підхід за методом Хартрі-Фока, що успішно використовується для подібних кристалічних кластерних ГЦК систем [12].

Розрахунки проводили для системи, в якій атоми вуглецю здійснювали рух у двох дзеркально протилежних напрямках: 1) у напрямку поверхні (октапори на поверхні); 2) вглиб (октапори на половині бокового ребра ґратки). При розрахунках вважали, що вуглець при своєму дифузійному русі залишався у твердому розчині.

Розрахунки енергії системи були проведені для поверхневого шару, а також для другого, третього та четвертого від поверхні шарів. Внаслідок того, що розрахунки мали якісний характер, параметр кристалічної ґратки аустеніту для зручності приймався рівним $a_\gamma = 0,36$ нм.

При розрахунку визначався приріст енергії кластера, що приходить на один атом системи, порівняна з енергією системи, коли атом вуглецю знаходиться в центральній октапорі:

$$\Delta U = U_{OP} - U_L, \quad (8)$$

де U_{OP} – енергія, що припадає на один атом системи, коли атом вуглецю впроваджений у центральну октапору ГЦК ґратки заліза, U_L – поточна енергія на один атом системи, при русі атома вуглецю в площині (200) у напрямках $\langle 011 \rangle$, тобто при зміні довжини траєкторії (L). Такий енергетичний параметр обрано для мінімізації похибок розрахунків абсолютних значень енергії системи.

Результати розрахунків показують, що при русі атома вуглецю з центральної октапори приповерхневої ГЦК ґратки заліза (аустеніт) у площині (200) (по діагоналі) у напрямку $\langle 011 \rangle$ до поверхневої октапори, виявляється максимум приросту внутрішньої енергії на довжині траєкторії L (проекції діагонального руху атома вуглецю на вісь X , що відповідає 0,9–1,0 ангстрем), яка складає 197 Дж/моль порівняно з енергетичним станом у центральній октапорі (рис. 5, крива 1).

Подальший рух атома вуглецю на поверхню (положення виходу діагональної октапори на поверхню) приводить до помітного зменшення внутрішньої енергії в кластері порівняно зі станом атома вуглецю у центральній октапорі на 170 Дж/моль (на один атом системи з 3663 атомів), тобто на 87 % менше. Такі результати

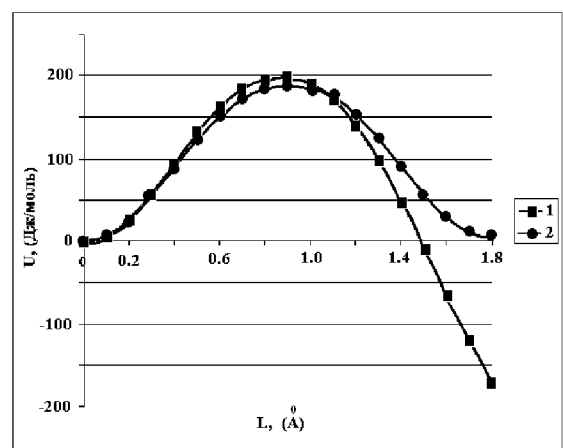


Рис. 5. Зміна внутрішньої енергії в кластері в результаті руху атома вуглецю з центральної ($X = 0$) до діагональної октапори ($X = 1,8$): 1 – на поверхню, 2 – вглиб кристаліту

можна пояснити впливом поверхневих ефектів (наприклад, наявністю поверхневої енергії, яка пов'язана з міжмолекулярною взаємодією). Стан атомів (молекул) на поверхні (на межі поділу фаз) відрізняється від стану в об'ємі фаз внаслідок некомпенсованості силових полів атомів на поверхні поділу. Відомо, що поверхневі площини кристалів з малими індексами мають меншу поверхневу енергію, бо мають більшу ретикулярну густину атомів [13]. Тому збільшення кількості атомів у поверхневому шарі твердого розчину приводить до зменшення поверхневої енергії системи, тобто є енергетично вигідним. Але ситуація змінюється, якщо атоми виділяються з поверхні твердого розчину і утворюють окрему частинку, наприклад графіт. У цьому випадку для збільшення поверхні необхідно витратити додаткову енергію. Цим і можна пояснити виділення додаткових фаз (карбідів, графіту) при термічній або механічній обробці сплавів.

Оцінимо критичний розмір кубічних зародків, які, як варіант, утворюються за певних температур із сублімованої парової фази. При утворенні будь-якого зародкового нанокластера енергія системи (E) змінюється відповідно до співвідношення

$$\Delta E = 6(nv)^{2/3} \cdot \sigma - nkT \cdot \ln Z, \quad (9)$$

де перший член відповідає витратам енергії при створенні поверхні кубічного нанокластера (тут: n – кількість атомів у кластері; v – атомний об'єм; σ – питома поверхнева енергія), а другий – термодинамічний вииграш, що припадає на один атом нової фази. При цьому цей вииграш відповідає рушійній силі, яка пов'язана з парціальним хімічним потенціалом парової і кластерної фаз рівністю

$$\frac{1}{v} [\mu(P_{кр}) - \mu(P_{пар})] = \kappa T \ln \frac{P_{кл}}{P_{пар}} = kT \ln Z. \quad (10)$$

Тут $P_{кр}$ – кристало-поверхневий тиск Вульфа для кластера, а $P_{пар}$ – тиск пари, що оточує нанокластер.

Оскільки кристалічний зародок нанокластера критичного розміру відповідає умові нестійкої рівноваги із сублімованим паровим оточенням, то для визначення цього розміру h (h – половина ребра a куба) достатньо максимізувати вираз

$$\frac{d\Delta E}{dn} = 0 = 4(nv)^{-1/3} \cdot v - kT \ln Z. \quad (11)$$

Далі, оскільки $(nv)^{1/3} = 2h$, маємо шуканий критичний розмір нанокластера

$$h = \frac{2\sigma v}{kT \ln Z}. \quad (12)$$

Реальний зародок найменшого розміру відповідає порозу латентного інтервалу розмірів [14] і складає вираз

$$h_{пор} = \frac{3\sigma v}{kT \ln Z}. \quad (13)$$

Дійсно, якщо $\Delta E = 0$, то при $2h = a$ маємо

$$6a^2\sigma = a^3 \frac{1}{v} kT \ln Z. \quad (14)$$

І остаточно (після скорочення на a^2) отримуємо (13).

Що стосується розглянутого в розрахунках випадку, то після руху атома вуглецю з центральної октапори в напрямку поверхні внаслідок зовнішнього впливу (або в результаті накопичення енергії коливань на один атом), виникають умови, коли атому вуглецю, який подолавши дифузійний бар'єр (максимум на рис. 5, крива 1), енергетично вигідніше рухатися у напрямку поверхні, ніж повернутися в попереднє чи альтернативне положення в центральній октапорі. Тобто на випадкові рухи дифундуючого атома вуглецю, як домішки впровадження, накладаються умови дрейфу через поверхневі ефекти, що змушують атоми вуглецю накопичуватися в поверхні чи на границях зерен, при цьому залишаючись у твердому розчині.

Розрахунки руху атома вуглецю в протилежному напрямку (у глиб кристалу) показують, що суттєвої різниці між внутрішньою енергією системи між центральною та діагональною октапорою не виявлено (рис. 5, крива 2). Це вказує на переважно випадковий (дифузійний) характер руху атома вуглецю в ГЦК ґратці углиб твердого розчину.

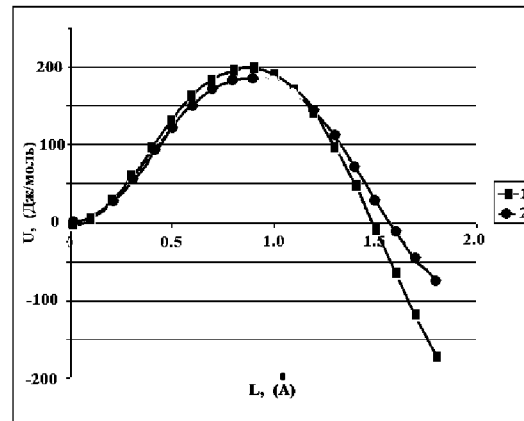


Рис. 6. Зміна внутрішньої енергії кристалу при русі атома вуглецю з центральної ($X = 0$) до діагональної октапори ($X = 1,8$) в напрямку поверхні: 1 – поверхневий шар, 2 – другий шар від поверхні

Подібна тенденція впливу поверхневих енергетичних факторів зберігається також і для наступних шарів ГЦК ґратки: існує енергетична перевага при русі в напрямку поверхні, хоча ця перевага менша ніж для поверхневого шару ГЦК кристалу (рис. 6, крива 2) і становить 39 % від енергії в центральній октапорі (майже вдвічі менша).

Враховуючи наявність максимуму приросту енергії при русі атома вуглецю з октаедричного міжвузля, яка відіграє роль дифузійного бар'єру, наявність впливу поверхневих факторів є необхідною, але не достатньою умовою для накопичення вуглецю в поверхневому шарі. Таким додатковим фактором можна вважати температуру, деформацію, поверхневу обробку тощо, які дозволять вуглецю подолати дифузійний бар'єр.

З іншого боку, при реалізації такого процесу, поверхневий шар сплаву, де накопичився в незавершених октапорах вуглець, також деформується внаслідок невідповідності розміру октапори розміру атома вуглецю. Це приводить до виникнення розтягнутої поверхневої області, куди за аналогією з пружно вигнутим кристалом [15] можуть рухатися атоми впровадження з більш стиснених областей кристалу, реалізуючи процес висхідної дифузії. За таких умов міжвузловий механізм руху атомів у щільно упакованих структурах стає більш вірогідним і по суті єдиним (бо вакансії утримують атоми впровадження).

Подібний механізм реалізується і в протилежному напрямку, коли атоми вуглецю адсорбуються на поверхні заліза (площини (002) та (111)), утворюючи моношар з високою концентрацією вуглецю, який, переміщуючись з атомами заліза, утворює твердий розчин внаслідок поверхневої активності атомів вуглецю, що можуть рухатися вздовж поверхні [16].

Висновки

1. Методом класичної молекулярної динаміки з перших принципів розраховано енергетичний стан ГЦК кластера розміром $9a_x \times 9a_y \times 9a_z$, що є аналогом наноструктурного γ -твердого розчину сплаву системи Fe-C, наприклад, відповідного за розміром блоку мозаїки.

2. Встановлено, що на відміну від традиційного підходу до механізму дифузії вуглецю, як домішки впровадження в ГЦК залізі, який реалізується через випадкові стрибки між октаедричними міжвузлями, в такому кластері енергетично вигідним є рух атомів вуглецю в напрямку поверхні в незавершену поверхневу октапору. Такий ефект, пов'язаний із впливом поверхневих факторів, що відіграють роль дрейфових складових в процес дифузії, приводить до накопичення у поверхні розчиненого у твердому розчині вуглецю і зменшення поверхневої енергії системи. Енергетична перевага при русі в напрямку поверхні зберігається для декількох кристалічних шарів кластера.

3. Розрахунки вказують на існування дифузійного бар'єру при русі вуглецю з центральної октапори ГЦК ґратки до зовнішньої, що виходить на вільну поверхню. Це пояснює необхідність додаткового зовнішнього впливу для його подолання (термічна або механічна обробка тощо), або часового фактору для спонтанного руху атома вуглецю (старіння).

4. Розрахунки вказують, що внаслідок впливу цих факторів енергетично вигідним є розшарування Fe-C кластера аустеніту з утворенням поверхневого шару,

який є пересиченим вуглецем, та внутрішньої області, що збіднена цим елементом і де переважно реалізується випадковий фактор дифузійного руху атомів упродовження. Така ж тенденція може зберігатися при наноструктурованому подрібненні γ -твердого розчину іншими методами, приводячи до концентраційної нестабільності подібних кристалітів.

5. Енергетичну перевагу поверхні для руху атомів впровадження в таких системах можна розглядати як один із чинників механізму реалізації висхідної дифузії і перерозподілу легувальних елементів на поверхні кристалів з утворенням нових фаз.

Список літератури

1. Старк Дж. П. Диффузия в твердых телах. – М. : Энергия, 1980. – 234 с.
2. Бондарь В. И. Старение аустенита никелевой стали / Бондарь В. И., Данильченко В. Е., Недоля А. В. // ФММ. – 1993. – Т. 76. – Вып. 3. – С. 145–151.
3. Исследование контактной выносливости сталей различной теплоустойчивости / [Михайлов П.А., Вильчек А.И., Ольшанецкий В.Е., Банас И.П.] // ФХММ, 1971. – № 2. – С. 3–8.
4. Каплан И. Г. Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий / Каплан И. Г. – М. : Наука, 1982. – 312 с.
5. Норманн Г. Э. Метод классической молекулярной динамики: вклад в основания статистической физики / Норманн Г. Э., Стегайлов В. В. // Вісник Харківського національного університету. – 2009. – № 870, Хімія. – Вип. 17 (40). – С. 11–51.
6. Андриевский Р. А. Размерные эффекты в нанокристаллических материалах. I. Особенности структуры. Термодинамика. Фазовые равновесия. Кинетические явления / Р. А. Андриевский, М. А. Глезер // ФММ. – 1999. – Т. 88, № 1. – С. 50–73.
7. Курдюмов Г. В. Превращение в железе и стали / Курдюмов Г. В., Утевский Л. М., Энтин Р. И. – М., Наука, 1977. – 236 с.
8. Лысак Л. И. Физические основы термической обработки стали / Лысак Л. И., Николин Б. И. – К. : Техніка, 1975. – 304 с.
9. Чуканов А. Н. Влияние поверхностной активности углерода на микроструктуру и эффекты неупругости в сплавах Fe-C / Чуканов А. Н., Яковлева А. А. // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2012. – Т. 14, № 2. – С. 256–261.
10. Нечаев Ю. С. Распределение углерода в сталях / Нечаев Ю. С. // Успехи физических наук. – 2011. – Т. 181. – № 5. – С. 484–490.
11. Frenkel D. Understanding molecular simulation / Frenkel D., Smit B. – San Diego-London-Boston-N.Y.-Sydney-Tokio-Toronto : Academic Press, 1996.
12. Исследование методом молекулярной динамики адатомов Si и C и кластеров SiC на поверхности кремния / [Харламов В. С., Трушин Ю. В., Журкин Е. Е. и др.] // Журнал технической физики. – 2008. – Т. 78. – Вып. 11. – С. 104–118.
13. Миссол В. Поверхностная энергия раздела фаз в металлах / Миссол В. ; пер. с польск. – М. : Металлургия, 1978. – 176 с.
14. Ольшанецкий В. Е. Об использовании парциальных химических потенциалов компонентов термодинамических

- систем при описании фазовых равновесий / Ольшанецкий В. Е. // Нові матеріали і технології в металургії та машинобудуванні. – 2008. – № 2. – С. 34–39.
15. Гегузин Я. Е. Восходящая диффузия и диффузионное последствие / Гегузин Я. Е. // Успехи физических наук. – 1986. – Т. 149. – Вып. 1. – С. 149–159.
16. Мутигуллин И. В. Влияние степени покрытия углеродом на возможность формирования твердого раствора внедрения в подповерхностном слое железа (001) и (111) / Мутигуллин И. В., Бажанов Д. И., Илюшин А. С. // ФТТ. – 2011. – Т. 53. – Вып. 3. – С. 558–563.

Одержано 21.11.2013

Недоля А.В., Ольшанецкий В.Е. Расчетная оценка энергетического состояния нанокластера аустенита на основе Fe-C

Методом классической молекулярной динамики рассчитано энергетическое состояние нанокластера аустенита выбранного размера системы Fe-C. Расчеты показали, что движение углерода как примеси внедрения энергетически выгоднее в направлении поверхности в незавершенную октапору и поэтому его необходимо рассматривать как один из возможных механизмов реализации восходящей и зернограничной диффузии и перераспределения легирующих элементов на поверхности и границах зерен с образованием новых фаз.

Ключевые слова: аустенит, нанокластер, диффузия, подвижность, молекулярная динамика, октапора, поверхностная энергия.

Nedolia A., Ol'shanetskii V. The estimated energy value of the nanocluster austenite based on Fe-C

By classical molecular dynamics method the energy of selected size austenite nanocluster of Fe-C was calculated. Results show that the movement of carbon as an interstitial impurity is more favorable towards the surface in incomplete octahedral sites. This is one of possible mechanisms of realization of ascending and grain boundary diffusion and redistribution of alloying elements on surface and grain boundaries with the formation of new phases.

Key words: austenite, nanocluster, diffusion, mobility, molecular dynamics, octahedral state, the surface energy.
