

РАСЧЕТ ЭНТАЛЬПИИ РАСТВОРЕНИЯ ПРИМЕСИ УГЛЕРОДА В ПАРАМАГНИТНЫХ Fe-Mn СПЛАВАХ

Пономарева А.В., Мухамедов Б.О., Абрикосов И.А.*

МИСиС, Москва, Россия

**alenaponomareva@yahoo.com*

В рамках теории функционала электронной плотности (PAW-VASP) выполнен расчет энтальпии растворения примеси углерода в гцк парамагнитных Fe-Mn сплавах. Для расчета использована предложенная нами ранее схема, которая позволяет учитывать тепловые магнитные флуктуации в парамагнитной матрице с точечными дефектами, адаптированная для материалов не только с магнитным, но и атомным беспорядком. Показано, что в сплаве, содержащем марганец, энергия растворения углерода становится ниже относительно растворения в чистом парамагнитном гамма-железе. Уменьшение энергии растворения углерода в сплавах с Mn, полученное теоретически, качественно согласуется с экспериментом. В работе проведен анализ возможных факторов, приводящих к увеличению растворимости углерода в сплавах, содержащих марганец.