

МАШИНОСТРОЕНИЕ И МАШИНОВЕДЕНИЕ MACHINE BUILDING AND MACHINE SCIENCE



УДК 669

<https://doi.org/10.23947/1992-5980-2020-20-1-51-60>

К вопросу о моделировании процесса зарождения мартенсита на кластерах ферромагнитной природы

Ю. В. Долгачев, В. Н. Пустовойт, И. О. Филоненко, И. В. Иванков

ФГБОУ ВО «Донской государственный технический университет» (г. Ростов-на-Дону, Российская Федерация)



Введение. Изучение магнитного состояния аустенита сталей позволило выявить механизм воздействия внешнего магнитного поля на сталь в процессе закалки. Предыдущие исследования установили положительное практическое влияние термической обработки в магнитном поле.

Цели работы: создать компьютерную модель магнитного состояния аустенита углеродистой стали; провести вычислительные эксперименты с системой спинов при различных значениях температуры и внешнего магнитного поля.

Материалы и методы. Использованы положения модели Изинга. Канонический ансамбль спинов моделировался методом Монте-Карло с использованием алгоритма Метрополиса.

Результаты исследования. Алгоритм реализовывался при начальных параметрах, подобранных с учетом экспериментальных данных о магнитном состоянии аустенита. Изучались неоднородности этого состояния без воздействия магнитного поля. Получены данные о размерах ферромагнитных кластеров в аустените при различных температурах. Отмечено, что наличие внешнего магнитного поля противодействует температурному разупорядочиванию спинов. Получены данные об увеличении размеров ферромагнитных кластеров при росте напряженности магнитного поля.

Обсуждение и заключения. Разработана двумерная компьютерная модель спинового состояния аустенита углеродистой стали. Вычислительные эксперименты при различных параметрах модели показали, что выше температуры Кюри существует ближний порядок в расположении спинов. С увеличением температуры системы размеры упорядоченных областей уменьшаются, а при наложении внешнего магнитного поля увеличиваются.

Ключевые слова: закалка, сталь, магнитное поле, мартенсит, мартенситное превращение, аустенит.

Для цитирования: К вопросу о моделировании процесса зарождения мартенсита на кластерах ферромагнитной природы / Ю. В. Долгачев, В. Н. Пустовойт, И. О. Филоненко, И. В. Иванков // Вестник Донского государственного технического университета. — 2020. — Т. 20, № 1. — С. 51–60. <https://doi.org/10.23947/1992-5980-2020-20-1-51-60>

© Долгачев Ю. В., Пустовойт В. Н., Филоненко И. О., Иванков И. В. 2020



On modeling the martensite nucleation on ferromagnetic clusters

Yu. V. Dolgachev, V. N. Pustovoyt, I. O. Filonenko, I. V. Ivankov

Don State Technical University (Rostov-on-Don, Russian Federation)

Introduction. The study of the austenite magnetic state in steels has provided the mechanism of the external magnetic field impact on steel under the hardening process. Previous studies have established a positive practical effect of heat treatment in a magnetic field. The work objectives were to create a computer model of the magnetic state of carbon steel austenite; to conduct computational experiments with a system of spins at various values of temperature and external magnetic field.

Materials and Methods. The positions of the Ising model were used. The canonical ensemble of spins was modeled by the Monte Carlo method using the Metropolis algorithm.

Results. The algorithm was implemented with the initial parameters selected through experimental data on the magnetic state of austenite. The inhomogeneity of this state without exposure to a magnetic field was studied. Data on the sizes of ferromagnetic clusters in austenite at various temperatures were obtained. It has been noted that the presence of an ex-

ternal magnetic field counteracts the temperature disordering of spins. Data on an increase in the size of ferromagnetic clusters under growing magnetic field strength were obtained.

Discussion and Conclusions. A two-dimensional computer model of the spin state of austenite of carbon steel has been developed. The computational experiments with various parameters of the model have shown that there is a short-range order in the arrangement of spins above the Curie temperature. With a rise of the temperature of the system, the sizes of ordered regions decrease; but when an external magnetic field is applied, they increase.

Keywords: quenching, steel, magnetic field, martensite, martensitic transformation, austenite.

For citation: Yu.V. Dolgachev, V.N. Pustovoit, I.O. Filonenko, I. V. Ivankov. On modeling the martensite nucleation on ferromagnetic clusters. Vestnik of DSTU, 2020, vol. 20, no. 1, pp. 51-60. <https://doi.org/10.23947/1992-5980-2020-20-1-51-60>

Введение. Изучается магнитное состояние аустенита сталей и влияние, которое может оказать на него внешнее постоянное магнитное поле. Предыдущие исследования показали, что термическая обработка в магнитном поле имеет положительное практическое значение [1–4], поэтому представляется актуальным изучение механизмов такого воздействия.

К. Зинер [5] указывал на необходимость учитывать роль магнитных превращений при рассмотрении мартенситных переходов в сплавах на основе железа. В расчете термодинамических характеристик мартенситного превращения он использовал два параметра — магнитную и немагнитную составляющие изменения свободной энергии чистого железа.

Ряд исследователей [6–8] обнаружили отклонение температурной зависимости обратной магнитной восприимчивости от линейного закона Кюри — Вейса в парамагнитной области некоторых сталей. При этом ход кривой удовлетворительно описывался функцией Ланжевена для суперпарамагнетиков. Такое изменение магнитных свойств аустенита сталей связано с самопроизвольными флуктуациями дальнего ферромагнитного порядка.

Эксперименты [9, 10] доказали существование ближнего порядка спинов (т. н. «роев») выше температуры Кюри с помощью магнитной дифракции нейтронов.

Постоянное магнитное поле в процессе закалочного охлаждения воздействует на области с упорядоченным расположением спинов в аустените и на их взаимодействие. В результате инициируется зарождение мартенситных кристаллов на ферромагнитных кластерах.

Материалы и методы. На данный момент существует только один точный и подробный метод экспериментальных исследований «роев» спинов — магнитная дифракция нейтронов. В данной работе магнитное состояние аустенита углеродистой стали изучено посредством вычислительного эксперимента. Применены положения модели Изинга [11–13]. Методом Монте-Карло [14–16] смоделирован канонический ансамбль¹ спинов, использование которого позволяет моделировать поведение системы спинов при постоянной температуре. Для получения произвольного неравномерного распределения вероятности задействован алгоритм Метрополиса [17] — частный случай процедуры выборки по значимости, когда некоторые возможные выборки отбрасываются.

Модель Изинга используется для моделирования фазовых переходов в магнитных веществах или бинарных сплавах. Эта решеточная модель учитывает взаимодействия между ближайшими узлами. Спины представляются магнитными моментами атомов в узлах решетки, которые взаимодействуют друг с другом и внешним магнитным полем (при его наличии).

Модель Изинга базируется на следующих упрощениях:

- не учитывается кинетическая энергия узлов решетки;
- при вычислении энергии взаимодействия спинов учитываются только ближайшие соседи;
- предусмотрены только два возможных состояния спинов (положительное \uparrow или отрицательное \downarrow направление вдоль оси z).

¹ Канонический ансамбль — статистический ансамбль, отвечающий особой физической системе. Она обменивается энергией с окружающей средой (термостатом), находясь с ней в тепловом равновесии, но не обменивается веществом, поскольку отделена от термостата непроницаемой для частиц перегородкой. Для сокращенного описания такой системы используют два параметра: число частиц N и средняя энергия E [13].

Как показано в [18], изучение классической двумерной модели Изинга позволяет выявить общие закономерности поведения магнитных систем вблизи температуры фазового перехода, даже несмотря на принятые упрощения.

При использовании модели Изинга изучались такие макроскопические характеристики системы, как средняя энергия $\langle E \rangle$, средняя намагниченность $\langle M \rangle$, удельная теплоемкость C и магнитная восприимчивость χ . При вычислениях средних значений по всем конфигурациям системы учитывался период до достижения системой состояния релаксации, который исключался из подсчетов².

Результаты исследования. Опишем полную энергию системы двумерных спинов в модели Изинга с учетом возможного магнитного поля h :

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - h \sum_{i=1}^N s_i.$$

Здесь J — константа обменной связи, которая характеризует силу взаимодействия соседних спинов. N — число всех спинов; $\langle i, j \rangle$ означает суммирование по всем ближайшим парам спинов. С каждым i -м узлом решетки связано число s_i . Оно характеризует направление магнитного момента и может принимать значения либо $+1$ (если спин ориентирован в положительном направлении оси z), либо -1 (если спин ориентирован в отрицательном направлении оси z).

Если значение константы обменного взаимодействия больше нуля, то однонаправленное состояние двух соседних спинов энергетически выгоднее, т. е. состояние с наименьшей полной энергией является ферромагнитным. В ином случае более предпочтительным будет состояние, когда соседние спины антипараллельны друг другу (антиферромагнитное состояние).

Наложение внешнего магнитного поля вдоль оси z прибавляет или отнимает дополнительную внутреннюю энергию спинов соответственно их направлению по оси z .

В дальнейших рассуждениях о термодинамических характеристиках системы энергии J и h будут измеряться в единицах температуры. Это удобно при рассмотрении взаимодействия между спинами, т. к. при нагревании системы связи между ними ослабевают.

Найдем соотношение, связывающее удельную теплоемкость C и флуктуации энергии системы в каноническом ансамбле:

$$C = \frac{1}{T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2).$$

Намагниченность M системы вычислялась сложением всех значений s_{ij} в данной конфигурации. Затем вычислялась средняя намагниченность $\langle M \rangle$ по всем конфигурациям системы.

Магнитная восприимчивость χ при данной температуре:

$$\chi = \frac{1}{T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2).$$

Возможные конфигурации системы спинов будут определяться значениями 2^N спиновых чисел s . Применяя алгоритм Метрополиса, можно сгенерировать спиновые конфигурации S с вероятностью $w(S)$, а затем усреднить искомые величины по всем конфигурациям. Рассматривались конфигурации, отличающиеся между собой переворотом одного спина. Принятие решения о перевороте того или иного спина (т. е. о принятии пробной конфигурации S_p) зависело от соотношения весовых функций:

$$r = \frac{w(S_p)}{w(S)} = e^{-\frac{E_{S_p}}{T}} \cdot e^{\frac{E_S}{T}},$$

где E_s и E_{S_p} — энергии систем с конфигурациями спинов S и S_p соответственно.

Спин s_{ij} переворачивался и принималась новая конфигурация, если $r > 1$ или $r < 1$, но больше, чем случайное число, сгенерированное с учетом равномерного распределения на отрезке от 0 до 1. В противном случае спин оставался неизменным. На одном шаге Монте-Карло предпринимается число попыток переворота, равное числу спинов системы N .

Для двумерного случая выбраны тороидальные краевые условия: решетка представляется кольцом, в котором спины, находящиеся на правой границе исходной квадратной решетки, взаимодействуют со спинами, находящимися на левой границе. Аналогичное кольцевое взаимодействие предусмотрено для верхней и нижней границ. Это обеспечивает одинаковое число взаимодействий для всех спинов. Взаимодействие любого спина с соседями может быть рассмотрено как взаимодействие с одним спином, величина которого равна сумме величин четырех соседних спинов (она может равняться 0, ± 2 или ± 4). В двумерном случае минимально возможное значение изменения энергии при опрокидывании рассматриваемого (центрального) спина составляет $4J$.

Алгоритм и начальные параметры реализации модели магнитного состояния аустенита. Структура алгоритма и основные функции, разработанные при его реализации, выполнены в математическом пакете с учетом рекомендаций [19].

Модель была реализована путем последовательного выполнения перечисленных ниже операций.

² Далее по тексту, если речь идет о конфигурациях системы, подразумеваются конфигурации после достижения системой состояния релаксации.

1. Задание начальных условий: числа спинов системы N , константы обменного взаимодействия J , напряженности внешнего магнитного поля h , температуры T , числа шагов метода Монте-Карло N_t (аналог времени).

2. Выполнение функции, создающей начальную конфигурацию системы с учетом заданных N, J, h .

3. Вычисление мгновенных конфигураций системы на каждый шаг N_t с учетом N, J, h и начального состояния системы.

4. Визуализация:

— мгновенных конфигураций системы в интересующие моменты,

— зависимости мгновенной энергии системы от времени,

— зависимости мгновенной намагниченности системы от времени.

Наблюдая конфигурации спинов, можно оценить текущее магнитное состояние системы. Изучение указанных зависимостей от времени позволяет оценить необходимое время релаксации системы τ для учета его в последующих вычислениях.

5. Вычисление средней энергии системы $\langle E \rangle$, удельной теплоемкости C , магнитной восприимчивости χ и средней намагниченности $\langle M \rangle$.

6. Вычисление параметров, характеризующих размеры ферромагнитно-упорядоченных областей: средний размер, максимальный размер, минимальный размер, среднеквадратичное отклонение по размерам. (Вычисление идет по набору спиновых конфигураций.)

Алгоритм реализован при начальных параметрах, подобранных с учетом экспериментальных данных о магнитном состоянии аустенита [8, 20]. Температура точки Кюри железоуглеродистого аустенита стали У8 составляет ~ 180 К, т. е. если бы удалось сохранить решетку аустенита до этой температуры, то ниже точки Кюри аустенит получил бы ферромагнитные свойства. Константа обменного взаимодействия двумерной модели подбиралась таким образом, чтобы система испытывала магнитный фазовый переход при данной температуре. Значение константы обменного взаимодействия для двумерного случая не совпадает с реальным значением этой константы для железоуглеродистого сплава. Однако в рамках двумерной модели подобраны следующие параметры: $N = 625$, $J = 0,78$, $h = 0$, $N_t = 2500$. Благодаря этому при моделировании в интервале температур, включающих область точки Кюри аустенита, наблюдались эффекты, полностью аналогичные эффектам реальной системы, испытывающей фазовый магнитный переход из парамагнитного состояния в ферромагнитное, а именно:

— максимумы удельной теплоемкости и магнитной восприимчивости в точке Кюри,

— резкое уменьшение средней намагниченности при фазовом переходе,

— расхождение между кривой намагниченности и кривыми удельной теплоемкости и магнитной восприимчивости при переходе в ферромагнитное состояние (рис. 1).

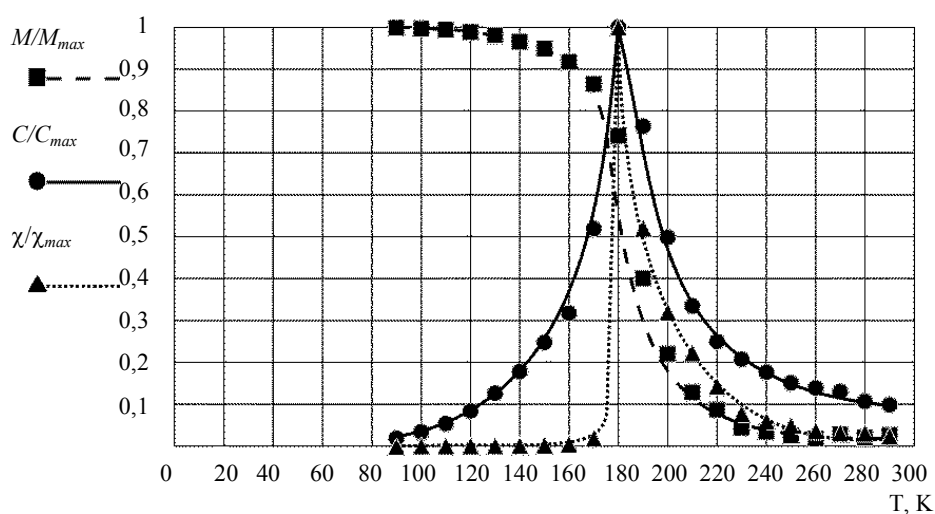


Рис. 1. Поведение свойств стали У8 около ферромагнитной точки Кюри аустенита по итогам вычислительных экспериментов

На рис. 1 видно, что намагниченность не падает до нуля в точке Кюри. Остатки «аномалий» выше точки Кюри неоднократно наблюдались экспериментально [6–10, 19]. Л. Д. Ландау [12] и другие исследователи [6, 8, 9, 19] объясняли это флуктуациями порядка при $T > \Theta$. Флуктуации самопроизвольной намагниченности должны особенно резко сказываться вблизи точки Кюри, ибо в самой точке Кюри они стремятся к бесконечности.

На рис. 2 схематически изображена температурная зависимость параметра ближнего порядка σ из [19].

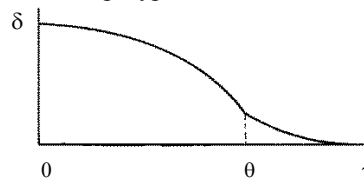


Рис. 2. Температурная зависимость параметра олистного магнитного порядка [19]

Вблизи температуры Кюри σ резко уменьшается, а при $T > \Theta$ асимптотически стремится к нулю. Такая «нерезкость» температуры Кюри с точки зрения ближнего порядка предопределяет следующее явление: все аномалии ферромагнетиков имеют крутой максимум в точке Кюри, однако при $T > \Theta$ не должны сразу идти в ноль, а лишь постепенно убывают в соответствии с постепенным разрушением порядка на близких расстояниях.

Как показано в [19], энергия обменного взаимодействия часто обуславливает силы, заметно действующие именно на близких расстояниях. Поэтому термодинамически равновесное состояние ферромагнетика должно определяться ближним порядком между спинами. Это частный случай общей задачи кооперативного поведения взаимодействующих атомов (например, при фазовом переходе первого рода).

Ферромагнетизм во многом квантовое явление [15]. Тем не менее даже в рамках классического статистического подхода теория с учетом порядка на близких расстояниях, безусловно, полезна в иллюстративном и качественном отношении [15, 19].

Л. С. Стилбанс учел «магнитный порядок» на близких расстояниях в схеме Изинга [21] и теоретически объяснил «остатки» аномалии теплоемкости при температурах выше точки Кюри. Аномальная теплоемкость обусловлена необходимостью разрушения порядка на близких расстояниях, который частично сохраняется и выше точки Кюри.

Этот метод развивал С. В. Вонсовский [22–24]. Он теоретически показал различия между ферромагнитной и парамагнитной точками Кюри. Итоги его работ доказывают, что парамагнитная восприимчивость вблизи точки Кюри имеет конечное значение, а не стремится к бесконечности, как это следует из теории без учета ближнего порядка.

Такой большой интерес к упрощенной Изинговой модели объясняется тем, что обращение к ней позволяет разрешить принципиальные трудности, возникающие при теоретической трактовке фазовых переходов второго рода.

Анализ областей с ближним ферромагнитным порядком в аустените с помощью вычислительного эксперимента. В данном разделе изучаются неоднородности магнитного состояния аустенита без внешнего воздействия магнитным полем.

Для визуализации мгновенной спиновой конфигурации системы в выбранные моменты спины представлены белыми и черными квадратами. Белые квадраты — спины, ориентированные в положительном направлении оси z (например, под действием обменных сил и (или) приложенного внешнего магнитного поля). Черные квадраты — спины, ориентированные в отрицательном направлении оси z (рис. 3).

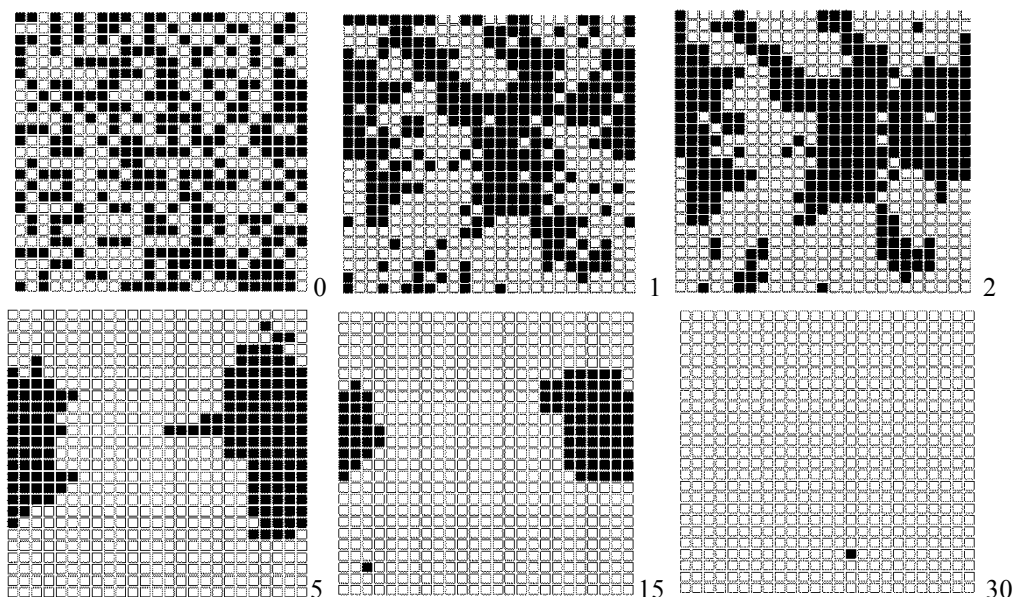


Рис. 3. Мгновенные конфигурации системы в выбранные моменты ($T = 100$ К, $h = 0$)

На рис. 3 представлены визуализации системы при температуре 100 К (т. е. ниже точки Кюри) без действия магнитного поля в различные моменты. Ниже приводится интерпретация этих конфигураций.

— В момент времени 0 система находится в исходном состоянии, которое инициировано с помощью генератора случайных значений (полностью разупорядоченное состояние).

— Переход к моменту 1 означает, что каждый спин системы ($N = 625$) был рассмотрен для принятия решения о его перевороте согласно описанным выше условиям.

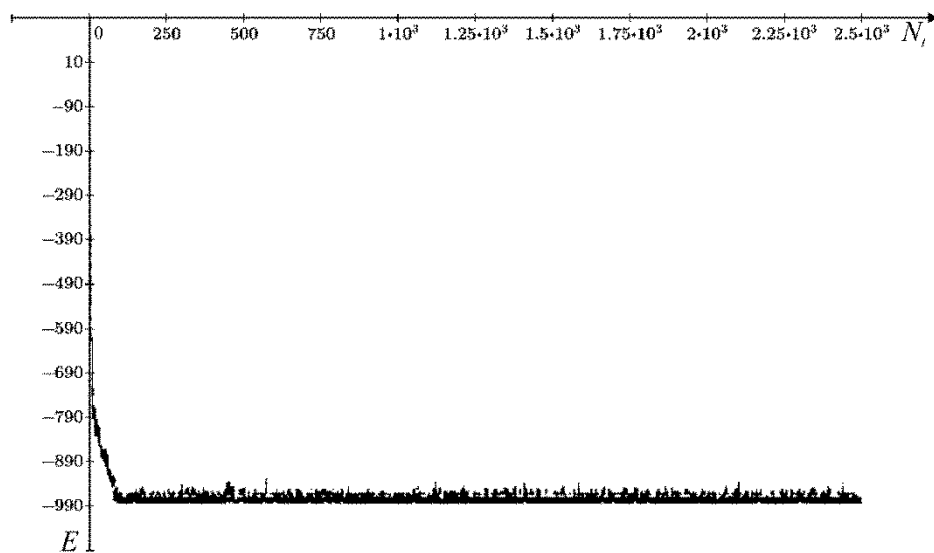
— К третьему шагу каждый спин был трижды рассмотрен на предмет переворота.

— Последующие моменты показывают, что система стремится к состоянию с ферромагнитным порядком.

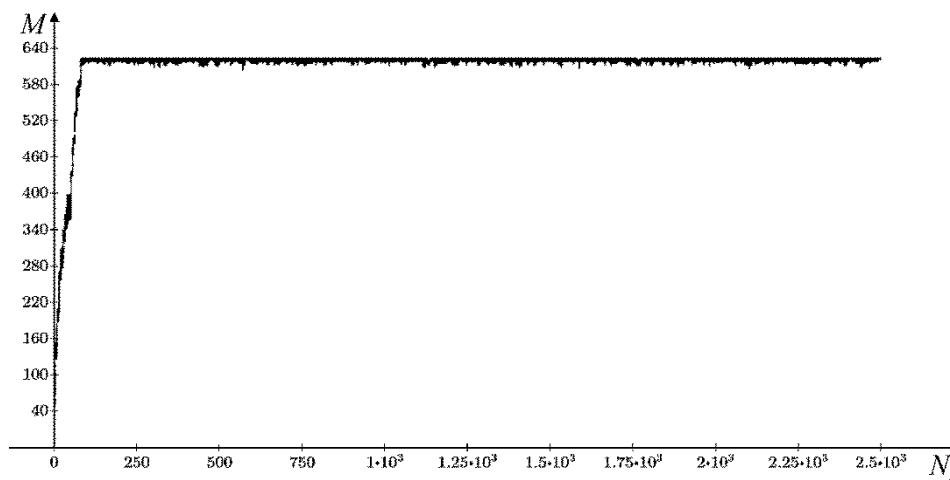
— На 30-м шаге фиксируется полностью упорядоченное состояние (за исключением одного спина). Подобная картина (с небольшими флуктуациями $1 \div 3$ спинов) наблюдается во все последующие моменты. Всего шагов $N_t = 2500$. Следовательно, система пришла в устойчивое состояние (т. е. стадия релаксации завершена ранее 30-го шага).

Надо заметить, что описанная картина характерна для текущей генерации модели с заданными условиями. При формировании модели используется генератор случайных чисел, поэтому результаты пересчета будут отличаться в деталях, но качественно модель всегда ведет себя подобным образом при одинаковых начальных условиях.

Рассмотрим графики зависимости мгновенных значений энергии (рис. 4 а) и магнитного момента (рис. 4 б) системы от времени.



а)



б)

Рис. 4. Зависимость мгновенных значений полной энергии системы (а) и магнитного момента (б) от времени

Из рис. 4 видно, что система быстро стремится к состоянию равновесия (процесс релаксации). После перехода системы в состояние равновесия отмечаются лишь небольшие флуктуации. При достижении равновесия для данной температуры по конфигурациям системы статистически вычислялись макропараметры (средняя энергия, намагниченность, магнитная восприимчивость, удельная теплоемкость). Для этого по соответствующим графикам оценивалось отношение времени релаксации статической системы к состоянию равновесия. Отсекались начальные конфигурации системы в течение 400 шагов (16 % от всего времени вычисления), что с запасом перекрывало стадию релаксации системы, которая не превышала 150 шагов (рис. 4).

При закалке стали У8 мартенситное превращение начинается при температуре ~ 500 К. Интересно исследовать поведение модели вблизи этой температуры, т. к. при закалке в магнитном поле именно здесь проявляется действие поля, инициирующее фазовый переход. Естественно, при данной температуре устойчивым будет парамагнитное состояние аустенита, что и показала модель. Однако в спиновом состоянии аустенита наблюдаются нанобласти с ближним порядком в расположении спинов [9], которые играют существенную роль при воздействии внешнего магнитного поля [8] (воздействие поля проявляется во влиянии на размеры и устойчивость таких областей, но они существуют и без внешнего поля).

Для получения наиболее достоверных статистических данных о ферромагнитно-упорядоченных областях в аустените моделировалась система с максимально возможным (по техническим ограничениям оперативной памяти и быстродействия процессора) числом ($N = 10000$) спинов при температурах от 100 до 500 К. Другие начальные условия остались прежними.

На рис. 5 представлены результаты измерения упорядоченных областей в аустените. Размер определялся по количеству атомов, приходящихся на горизонтальные и вертикальные сечения упорядоченной области: \bar{L} — средний размер, Max — максимальный, Min — минимальный, σ — среднеквадратичное отклонение.

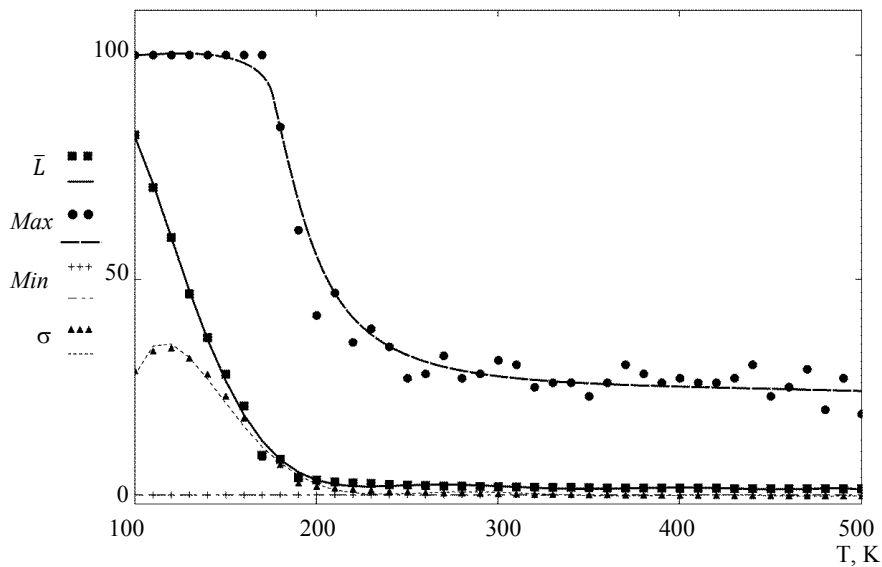


Рис. 5. Зависимость от температуры размеров областей с ферромагнитным порядком в аустените

Согласно полученным данным, флуктуации ближнего магнитного порядка в стали У8 сохраняются до температур около 500 К, когда при закалке стали начинается мартенситное превращение. При этом максимальные размеры таких областей в аустените при температуре 500 К могут достигать 20 атомов в сечении ($\sim 7,2$ нм). Максимальный размер при температурах в области точки Кюри и ниже ограничен условиями модели и не превышает 100 атомов (т. е. максимального поперечного размера моделируемой области). Наблюдаемые колебания на кривой максимального размера кластера связаны с использованием в модели генератора случайных чисел.

В теории Вейса учитывается только порядок на дальних расстояниях [19], который определяется разностью количества спинов, противоположно направленных по всему домену, независимо от их детального взаимного расположения. При этом получается, что ближний порядок просто приравнивается к дальнему, т. е. числа ближайших соседей разной ориентации у любого спина предполагаются пропорциональными полным числам разнонаправленных спинов в домене. Таким образом, локальная намагниченность ближайших соседей у каждого спина равна намагниченности, рассчитанной по всему кристаллу. В реальном кристалле наблюдается другая картина: параллельные спины под действием обменных сил стремятся объединяться в отдельные «рои» [9, 19],

подобно атомам газа при его конденсации или образованию флуктуаций в неидеальном газе. Как видно из рис. 5, при низких температурах эти флуктуации очень велики. При высоких температурах более обоснованно приближение, не учитывающее ближний порядок. Однако и в этом случае имеются еще флуктуации параллельных спинов в малых объемах, вызываемые силами обмена и приводящие к отличной от нуля локальной намагниченности в отсутствие результирующего магнитного момента во всем объеме (т. е. в отсутствие дальнего порядка).

Таким образом, модель предсказывает существование областей с ближним магнитным порядком в аустените стали У8 перед мартенситным превращением. В этих областях, с большой долей вероятности, и возникают зародыши мартенсита. Кластеры с ферромагнитным упорядочением могут накладываться на дефекты кристаллической решетки и области неустойчивости кристаллической решетки [4], возникающие перед фазовым переходом. В этом случае вероятность зарождения мартенсита особенно высока.

Добавление внешнего магнитного поля в модель магнитного состояния аустенита. Наличие внешнего магнитного поля противодействует температурному разупорядочиванию спинов. На рис. 6 приведены зависимости параметров кластеров в аустените с ближним порядком (параметры те же, что и на рис. 5) от напряженности внешнего магнитного поля для стали У8 при температуре 500 К.

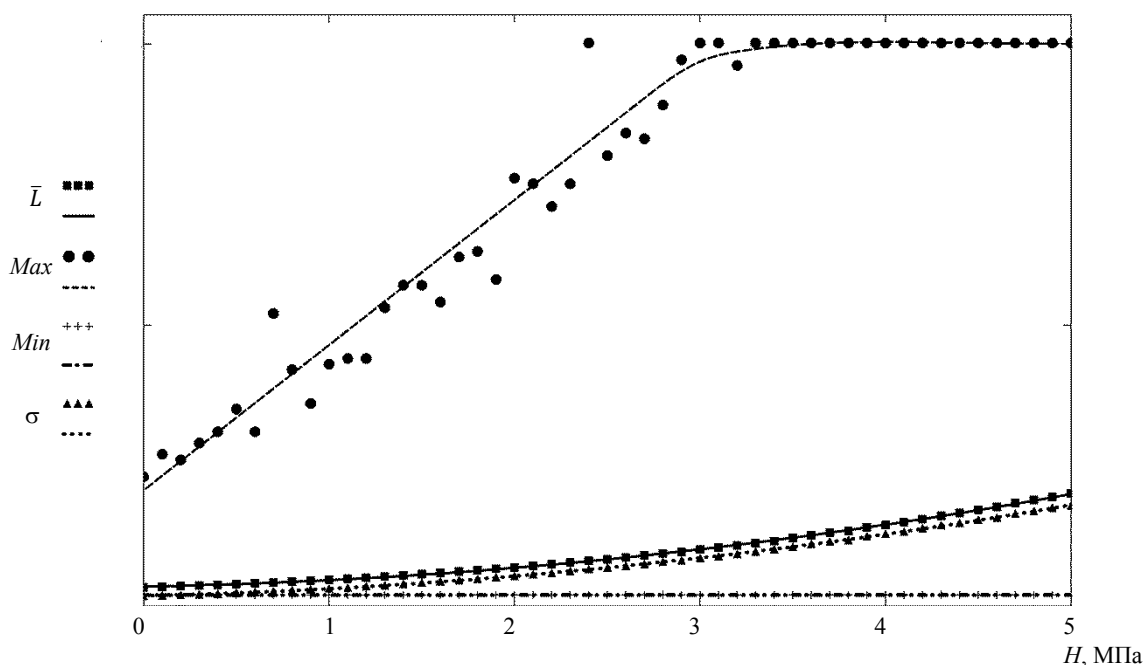


Рис. 6. Зависимость размеров областей с ферромагнитным порядком в аустените от напряженности внешнего магнитного поля при температуре 500 К

Как видно из рис. 6, с увеличением напряженности магнитного поля размеры кластеров растут вплоть до состояния полного магнитного упорядочивания при большой напряженности магнитного поля. Таким образом, при закалке в магнитном поле расширяются области с ближним порядком. При этом вероятность зарождения мартенсита выше, а число мест зарождения больше.

Обсуждение и заключение. Разработана двумерная компьютерная модель спинового состояния аустенита углеродистой стали У8. Вычислительные эксперименты при различных параметрах модели показали, что выше температуры Кюри существует ближний порядок в расположении спинов. С увеличением температуры системы размеры упорядоченных областей уменьшаются, однако даже при температуре начала мартенситного превращения (500 К) возможны флуктуации ближнего порядка максимальным размером ~ 7 нм. При наложении внешнего магнитного поля и усилении его напряженности увеличиваются размеры кластеров с ферромагнитным упорядочением. С помощью представленной модели в будущих работах предполагается более подробно исследовать влияние магнитного поля на характеристики рои спинов, их количество, время жизни и особенности взаимодействия.

Библиографический список

1. Пустовойт, В. Н. Технология бездеформационной закалки в магнитном поле тонкостенных деталей кольцевой формы / В. Н. Пустовойт, Ю. В. Долгачев // Вестник Донского государственного технического университета. — 2011. — Т. 11, № 7 (58). — С. 1064–1071.
2. Сверхпластичность стали в температурном интервале Мд-Мн как стимул для «внутренней» магнитной правки / В. Н. Пустовойт, А. В. Бровер, М. Г. Магомедов, Ю. В. Долгачев // Известия высших учебных заведений. Северо-Кавказский регион. Технические науки. — 2006. — № 56. — С. 42–46.
3. Pustovoit, V. N. Distortion-free heat treatment of thin rods in magnetic field / V. N. Pustovoit, Y. V. Dolgachev // Materials Performance and Characterization. — 2019. — Vol. 8 (2). — P. 320–324. DOI: <https://doi.org/10.1520/MPC20170159>.
4. Пустовойт, В. Н. Зарождение мартенсита в условиях сверхпластичности аустенита и воздействия внешнего магнитного поля / В. Н. Пустовойт, Ю. В. Долгачев // Известия Волгоградского государственного технического университета. — 2016. — № 2 (181). — С. 114–120.
5. Zener, C. Impact of Magnetism upon Metallurgy / C. Zener // JOM. — 1955. — Vol. 7 (5). — P. 619–630. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF03377550>.
6. Voronchikhin, L. D. Anomalous superparamagnetism of the γ phase of the Fe-Cr-Ni alloy / L. D. Voronchikhin, L. N. Romashev, I. G. Fakidov // Soviet Physics-Solid State. — 1975. — Vol. 16 (9). — P. 1708–1711.
7. Ромашев, Л. Н. Изменение магнитных свойств стали вблизи мартенситной точки / Л. Н. Ромашев, Л. Д. Ворончихин, И. Г. Факидов // Физика металлов и металловедение. — 1973. — Т. 36, № 2. — С. 291.
8. Pustovoit, V. N. Ferromagnetically ordered clusters in austenite as the areas of martensite formation / V. N. Pustovoit, Y. V. Dolgachev // Emerging Materials Research. — 2017. — Vol. 6, no. 2. — P. 249–253. DOI: <https://doi.org/10.1680/jemmr.17.00042>.
9. Spooner, S. Spin correlations in iron / S. Spooner, B. L. Averbach // Physical Review. — 1966. — Vol. 142 (2). — P. 291–299. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.142.291>.
10. Bozorth, R. M. Magnetic Properties of Metals and Alloys / R. M. Bozorth. — Cleveland : American Society for Metals, 1959. — 349 p.
11. Ising, E. Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus / E. Ising // Zeitschrift für Physik. — 1925. — Vol. 31 (1). — P. 253–258. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF02980577>.
12. Landau, L. D. Statistical Physics. Vol. 5 / L. D. Landau, E. M. Lifshitz. — Oxford : Elsevier, 2013. — 544 p.
13. Hill, T. L. An Introduction to Statistical Thermodynamics / T. L. Hill. — New York : Courier Corporation, 1986. — 508 p.
14. Binder, K. Monte Carlo Methods in Statistical Physics / K. Binder. — Berlin : Springer Science & Business Media, 2012. — 416 p.
15. Dyson, F. J. Phase Transitions in Quantum Spin Systems with Isotropic and Nonisotropic Interactions / F. J. Dyson, E. H. Lieb, B. Simon // Journal of Statistical Physics. — 1978. — Vol. 18 (4). — P. 335–383. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-662-10018-9_12.
16. Creutz, M. Microcanonical cluster Monte Carlo simulation / M. Creutz // Physical Review Letters. — 1992. — Vol. 69 (7). — P. 1002–1005. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.69.1002>.
17. Beichl, I. The metropolis algorithm / I. Beichl, F. Sullivan // Computing in Science & Engineering. — 2000. — Vol. 2 (1). — P. 65–69. DOI: <https://doi.org/10.1109/5992.814660>.
18. Вонсовский, С. В. Магнетизм / С. В. Вонсовский. — Москва : Наука, 1971. — 305 с.
19. Поршнева, С. В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете MATLAB / С. В. Поршнева. — Санкт-Петербург : Лань, 2011. — 726 с.
20. Pustovoit, V. N. Features of martensitic transformation in steel during quenching in a constant magnetic field / V. N. Pustovoit, Y. V. Dolgachev, L. P. Arefeva // Materials Science Forum. — 2019. — Vol. 946. — P. 304–308. DOI: <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.946.304>.
21. Стильбанс, Л. С. Ближний и дальний порядок в ферромагнитных телах / Л. С. Стильбанс // Журнал экспериментальной и теоретической физики. — 1939. — Т. 9. — С. 432.
22. Вонсовский, С. В. О ферромагнитной и парамагнитной точках Кюри ферромагнетиков / С. В. Вонсовский // Доклады Академии наук СССР. — 1940. — Т. 27, № 5. — С. 550–553.
23. Вонсовский, С. В. Ферромагнетизм как проблема упорядочения / С. В. Вонсовский // Известия Академии наук СССР. — Серия физическая. — 1947. — Т. 11, № 5. — С. 485–486.
24. Вонсовский, С. В. Ферромагнетизм / С. В. Вонсовский, Я. С. Шур. — Москва ; Ленинград : ОГИЗ, 1948. — 816 с.

Поступила в редакцию 26.12.2019
Запланирована в номер 19.02.2020

Об авторах

Долгачев Юрий Вячеславович, доцент кафедры «Физическое и прикладное материаловедение» ФГБОУ ВО «Донской государственной технической университет» (344000, РФ, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1), кандидат технических наук, доцент, [ResearcherID: B-2328-2016](#), [ORCID: https://orcid.org/0000-0002-8558-1136](#), yuridol@mail.ru.

Пустовойт Виктор Николаевич, профессор кафедры «Физическое и прикладное материаловедение» ФГБОУ ВО «Донской государственной технической университет» (344000, РФ, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1), доктор технических наук, профессор, [ResearcherID: A-6050-2016](#), [ORCID: https://orcid.org/0000-0001-6999-3520](#), fipm-dstu@mail.ru.

Филоненко Ирина Олеговна, студентка кафедры «Физическое и прикладное материаловедение» ФГБОУ ВО «Донской государственной технической университет» (344000, РФ, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1), [ORCID: https://orcid.org/0000-0002-0572-5030](#), 89896231497i@gmail.ru.

Иванков Иван Вениаминович, студент кафедры «Физическое и прикладное материаловедение» ФГБОУ ВО «Донской государственной технической университет» (344000, РФ, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1), [ORCID: https://orcid.org/0000-0001-6466-412X](#), vanya.ivankov.99@mail.ru.

Заявленный вклад соавторов

Ю. В. Долгачев — формирование основной концепции, целей и задач исследования, проведение расчетов, подготовка текста, формулирование выводов; В. Н. Пустовойт — научное руководство, анализ результатов исследований, доработка текста, корректировка выводов; И. О. Филоненко — реализация алгоритма модели в среде программирования, подготовка расчетов; И. В. Иванков — доработка и корректировка модели в среде программирования, участие в подготовке расчетов.

Все авторы прочитали и одобрили окончательный вариант рукописи.