

Features of the carbide phase degradation under heating and deformation

T. S. Skoblo, O. Yu. Klochko[†], V. N. Romanchenko, E. L. Belkin

[†]klochko.hntysh@gmail.com

Kharkiv Petro Vasylenko National Technical University of Agriculture, Kharkiv, 61002, Ukraine

The present work reflects the results of comprehensive studies of the carbide phase behavior (cementite) in cast irons, which are widely used as a forming tool in metallurgy. This structural component determines the stable operation of the tool in production. Due to the development of new scientific approaches, special methods of structure variability analysis are being developed. Such methods allow one to have a deep look into the processes that determine the nature of degradation phenomena, including those occurring in the carbide phase. In this work, we use the results of the new techniques, which made it possible to identify degradation processes occurring inside the massive inclusions of the carbide phase of chromium-nickel cast iron during deformations at high temperatures (400 – 600°C). Here we report the significant instability of the carbide phase revealed under such processing conditions. Basing on the optical-mathematical analysis of the obtained SEM microstructure images, we show that such a carbide phase degrades under the local deformations. At the first stage of deformation, the creation of local stresses is intensified, while the subgrain boundaries and individual defects are being formed. Such individual defects (dislocations) define the degree of carbon and iron diffusion which determines the formation of a number of new phases: ferrite with various carbon saturation values, bainite, carbides of nonstoichiometric composition (such as FeC and Fe_xC_y). We also analyze the paired and triple interactions between these new phases. The influence of localization of the deformations on easy sliding of dislocations is considered. As it occurs, this process is accompanied by a decrease in the dispersion of the formed new ferrite and carbide phases, as well as in their mutual interactions. However, we show that when dislocations slip, the new ones appear. As a result, energy dissipation occurs. The obtained qualitative and quantitative representation of the carbide phase degradation during heating and deformation can be used to develop new technological processes of the production and hardening of such a material with a specific purpose taken into account.

Keywords: cast iron, phases, degradation, dislocation, diffusion.

УДК: 669.1.017:51-74

Особенности деградации карбидной фазы при нагреве и деформации

Скобло Т. С., Клочко О. Ю.[†], Романченко В. Н., Белкин Е. Л.

Харьковский национальный технический университет сельского хозяйства имени Петра Василенко,
Харьков, 61002, Украина

Представленная работа отражает результаты комплексных исследований поведения карбидной фазы (цементита) в чугунах, которые широко используются в качестве формирующего инструмента в металлургии. Такая структурная составляющая определяет стабильную работу инструмента в условиях производства. В связи с развитием новых научных подходов в исследованиях, разрабатываются специальные методики анализа изменчивости структуры, которые позволяют глубоко заглянуть в процессы, определяющие характер деградационных явлений, в том числе и происходящих в карбидной фазе. В данной работе использованы результаты разработанных новых методик, позволивших выявить деградационные процессы, происходящие в массивных включениях карбидной фазы хромоникелевого чугуна при деформациях в условиях повышенных температур (400 – 600°C). Выявлена существенная нестабильность карбидной фазы при таких условиях обработки. На основе оптико-математического анализа, полученных SEM изображений микроструктур, показано, что такая карбидная фаза деградирует под действием локальных деформаций. На первом этапе деформации интенсифицируется создание локальных

напряжений, формирование границ субзерен и отдельных дефектов — дислокаций, которые определяют степень диффузии углерода и железа, формируя новые фазы — феррит, с разной степенью насыщенности углеродом, бейнит, карбиды нестехиометрического состава типа FeC и Fe_xC_y , а также выявлены их парные и тройные взаимодействия. Рассмотрено влияние локализации деформаций на легкое скольжение дислокаций, которое выявило, что этот процесс сопровождается уменьшением дисперсности формируемых новых фаз феррита и карбидов, а также их взаимодействий. Однако показано, что при скольжении дислокаций имеет место появление новых и диссипация энергии. Полученные качественные и количественные представления о деградации карбидной фазы при нагреве и деформации могут быть использованы для разработки новых технологических процессов производства и упрочнения такого материала с учетом конкретного назначения.

Ключевые слова: чугуны, фазы, деградация, дислокации, диффузия.

1. Введение

В течение последних лет на основе экспериментальных и теоретических исследований авторы работ [1–6] изучали изменчивость структурного состояния карбидной фазы железоуглеродистых сплавов при их производстве и эксплуатации. Это особенно важно, поскольку ряд изделий, изготовленных из металлопроката, широко используют в машиностроительном и металлургическом производствах, которые эксплуатируются в условиях высоких давлений и повышенной температуры. Их эксплуатационная стойкость определяется уровнем развития напряжений, рабочей средой и стабильностью структуры металла на основе протекания процессов диффузии, определяемой плотностью и подвижностью дислокаций. В работах [7–9] анализируется деградация структуры и свойств металла необходимых для изделий, связанных с эксплуатацией труб различного назначения, а также изделий для железнодорожного транспорта. В работах [10,11] проведен анализ металла прокатных валков из литых легированных высокоуглеродистых сплавов, которые используют при производстве горячекатаного металла в различных клетях сортовых и листовых станов. При этом они испытывают отличающиеся удельные давления на рабочей поверхности. Это способствует деградации карбидной фазы, а затем ее распаду, повреждаемости, дроблению и разрушению. Степень деградации такой фазы в значительной мере определяет период наработки инструмента между переточками, их число и общий показатель эксплуатационной стойкости.

В работе [12] рассмотрена проблема самоорганизации системы металл-углерод при динамических равновесных условиях на примере железо-углерод. Такие процессы авторы изучали при разложении металлорганических соединений, при которых формировались твердые структурные образования из паровой фазы системы металл-углерод. По данным авторов это происходит вследствие различной подвижности атомов металла и углерода в условиях повышенной температуры, давления, скорости потока в материале и других явлений.

Известно, что методы формирования неравновесных структур характерны для полупроводников и металлов, с которыми не формируются устойчивые карбиды. В тоже время исследованиями [13] выявлено ряд компонентов, которые могут способствовать различному растворению углерода в процессе плавки отличающихся материалов,

однако в условиях кристаллизации они его выделяют при $T < 1000$ К, что способствует процессу саморегуляции структуры.

Целью данной работы явилось изучение процессов деградации карбидной фазы в условиях воздействия давлений и температуры, что может служить обоснованием для создания новых технологий производства и упрочнения изделий.

2. Объекты и методы исследований

Исследования данной работы посвящены хромоникелевому чугуны, содержащему, %: 2.8 С, 0.9 Cr, 4.3 Ni с формированием при кристаллизации массивных включений карбидов (цементита). Они базировались на оценке изменчивости дислокационной структуры и ее влиянии на развитие диффузионных процессов в карбидной фазе чугуна. Для реализации поставленной цели использовали специальное моделирование процесса (создавали локальную деформацию сжатием при $t \leq 600^\circ\text{C}$). Оценку структурных изменений проводили с использованием вакуумного (0.4 Па) травления в специальной камере с выявлением дислокационной структуры по ямкам травления. Выявленную структуру анализировали сканирующим электронным микроскопом (SEM) JEOL JSM-6390LV, а также исследовали оптико-математическим методом, основанном на гидродинамических аналогиях [1,14], для выявления изменчивости фаз и их взаимодействий, сопровождающихся развитием диффузионных процессов.

Структурные изменения при таком подходе исследований описывали результатами изменчивости диффузионных процессов, связанных с дислокационной структурой, учитывающей влияние локальных деформаций, их скольжение и диссипацию энергии. Оценку производили, согласно расположению вычисляемых значений, на изображении металлографической структуры в цифровом формате *.pgm*, поделенном на фрагменты, в конечно-разностном представлении, образующих матрицу размером 3×3 пикселя, по методике, изложенной в работе [14]. Уровень напряжений существенно определяет развитие диффузионных процессов, связанных с дислокационной структурой. Поэтому, при оценке использовали критерии, описывающие изменения плотности дислокационной структуры, ее дисперсности [1]. Для этого рассматривали энергетические параметры, такие как функции мощности диссипации энергии (1) и

напряжений (2), выражаемых через произведение и разность операторов дивергенции $D(x, y)$ и Лапласа $L(x, y)$ в точке на металлографическом изображении (x и y — координаты рассматриваемой точки).

$$M = D(x, y) \cdot L(x, y), \quad (1)$$

$$S = D(x, y) - L(x, y) \quad (2)$$

Первый множитель в выражении (1), описывает меру несжимаемости (плотности фрагмента изображения, зоны уплотнения и разряжения), второй множитель — рассеяние энергии, характеризующий диффузию химических элементов.

На основе проведенного анализа выявленных фаз после вакуумного травления цементита под действием локальных напряжений выполнен расчет корреляционных связей между составляющими дисперсностей, оцененных при помощи функций мощности диссипации энергии и напряжений. Такие расчеты базировались на оценках средних показателей нейтральности, однородности распределения фаз (в вертикальном и горизонтальном направлении — анизотропии кристаллизации [15]), соотношении изменчивости условных цветов [1]. При сканировании фрагментов изображения заданного размера, отдельно выявляли феррит, бейнит, карбиды, а также двойные и тройные их взаимосвязи.

Для описания фаз и их взаимодействий, связанных с изменчивостью диффузионных процессов, 256 оттенков (условных цветов) изображения в формате *.pgm* разбивали на 16 интервалов, которыми характеризовали, как формирование единичных фаз, так и их сочетаний.

В данном исследовании каждой условной группе соответствует следующий интервал цветов [16]: 0–1 (цвета 0–16) — графит; 2–9 (цвета 17–145) — 2-я группа фаз феррита (F): α -фаза с различным типом совершенства кристаллических решеток, различающиеся химическим составом; 10 (цвета 147–164) — 3-я группа фаз — бейнит (B); 11–16 (цвета 165–255) — 4-я группа карбидных фаз (Cb), где входящие в интервал от 11 до 15 — фазы типа FeC , Fe_xC_y и 16 — принадлежит цементиту.

Поскольку неповрежденная дефектами матричная фаза цементита самостоятельно не проявлялась, в расчетах ее не учитывали.

3. Результаты и обсуждение

Для оценки деградационных явлений, происходящих в карбидной фазе при эксплуатации в рабочем слое прокатных валков, моделировали и сопоставляли два процесса, которые в нем происходят.

Согласно первому, при температурах 450–500°C в цементите отмечается локализация деформаций, которая сопровождается появлением дислокационных стенок, формирующих субзерна, а затем вокруг них, возникают новые дефекты. Одновременно проявляются и отдельные фигуры травления внутри карбидных зерен. На втором этапе при деформации в области температуры 600°C отмечается легкое скольжение дислокаций, которое может способствовать диссипации энергии [17]. При этом, как и в первом случае, скольжение может сопровождаться появлением новых дефектов [18,19].

Оба процесса являются очень сложными, поскольку касаются не только формирования дефектов кристаллического строения карбидной фазы, определяющей твердость и износостойкость металла изделий, но и развитие диффузионных процессов, снижающих стабильность ее в эксплуатации. Анализ SEM изображений и оценка их оптико-математическим методом с использованием комплексного подхода выявили, что в результате скольжений дислокаций формируются и дополнительные напряжения.

Выявленная методом вакуумного травления дислокационная структура при $t = 450 - 500^\circ C$ в виде ямок травления проявлялась в форме квадратов, треугольников и неправильной конфигурации, что может быть связано с температурой и временем травления, кристаллографическим состоянием анализируемой поверхности, интенсивностью диффузионных процессов в массивных включениях цементита, состоящих из зерен отличающихся кристаллографической ориентацией, а также локальной неоднородностью состава. Исходя из ранее выполненных исследований [20] предположили, что и в данном случае основными диффундирующими компонентами, декорирующими отличающуюся форму, распределение и тип дефектов, будут углерод и железо. Была сделана попытка оценить влияние локальных деформаций на степень упрочнения по увеличению плотности точечных дефектов измерениями микротвердости, однако это оказалось неэффективным из-за того, что отпечаток сопровождался созданием дополнительной пластической деформации. Это вызывало появление новых дефектов и фаз как внутри, так и по границам отпечатка индентора.

Оптико-математическим анализом оценили формирование различных фаз и их сочетаний при отличающихся условиях обработки. При более низкой температуре травления отмечали формирование границ субзерен и вблизи их повышенную плотность дефектов с одной стороны, что в общем отражало локальную деформацию и торможение такой стенкой их движение и взаимодействие. По другую сторону такой стенки также отмечается изменчивость карбидной фазы, которая проявляется в деградации цементита, но заметно в меньшей степени, поскольку в таком субзерне выявляются лишь карбиды нестехиометрического состава (интервалы условных цветов 11 и 12), ~ 18%, типа FeC и Fe_xC_y (Рис. S1 и Табл. S1, дополнительный материал) и, в гораздо меньшей мере, парное взаимодействие карбидов Fe_xC_y (интервалы 12 и 13) — 5.6%. В этой зоне проявляются и самостоятельно сформированные карбиды (интервалы 11 и 12). При этом фигуры травления декорируются графитом, ферритом и карбидом Fe_xC_y , а также их парными взаимодействиями. Точечные дефекты декорируются как самостоятельно выделившимися фазами феррита, бейнита (интервалы 8, 9 и 10), так и их соединениями с FeC .

Анализ описания единичной дислокации показал, что ее в большей мере декорируют карбиды с повышенной концентрацией углерода (интервалы 12–14) типа Fe_xC_y и эти фазы также выделяются внутри дефектов и вокруг них (Рис. S2, Табл. S2, дополнительный материал).

Пластическая деформация при повышенной температуре, может как увеличивать число дефектов, так и

уменьшить их долю за счет взаимодействия и способствовать диссипации энергии. Исходя из этого, рассмотрели изменчивость структурообразования при деформации ($t = 600^\circ\text{C}$) в процессе вакуумного травления (Рис. 1, Табл. S4, дополнительный материал). При этом выявили, что наибольшая доля новых фаз — карбидов нестехиометрического состава достигает ~57%. Это позволяет заключить, что пластическая деформация, при максимальной температуре эксплуатации валков, существенно увеличивает склонность карбидной фазы к деградации. Повышение стойкости такого инструмента можно достичь соответствующей корректировкой системы его охлаждения на стане.

Исследуемый процесс обработки сопровождался изменением формы ямок травления, одновременно отмечали скольжение дислокаций с образованием полос и их взаимодействий между собой. Это способствовало уменьшению их плотности распределения. Одновременно в процессе легкого скольжения дислокаций, их след характеризовался появлением новых дефектов и фаз. Скольжение происходило дискретно, что формировало новые дефекты по границам полос и сопровождалось появлением рельефа в зонах полей напряжений при таком характере движения. Формируемые деформационные зоны от дискретного перемещения дислокаций также сопровождаются повышением плотности дислокаций и изменчивостью структуры. Они состоят из небольшой доли единичных фаз — феррита, бейнита (суммарно 6.25%), а также их взаимодействий с FeC (до 51.7%). В зонах между этими дискретными полосами отмечается иная картина (Рис. S3, Табл. S3, дополнительный материал): суммарная доля единичного карбида нестехиометрического состава, а также парных и тройных взаимодействий карбидов достигает 96%, что отражает полную степень деградации цементита (анализируемой фазы в конкретной зоне).

В зоне отдельно расположенных дефектов (Рис. S4, дополнительный материал), цифровую обработку проводили, заранее обозначив цвета фаз и их взаимодействия. Анализировали единичные ямки травления.

Установлено, что они декорируются графитом (черный цвет); сочетанием феррита, цементита и нестехиометрическим карбидом (зеленый цвет); а также цементитом (красный) и сочетанием феррита, бейнита, цементита (синий). Диффузионное движение внутри следа скольжения дислокации происходило вследствие термических скачков. С повышением температуры и временем травления дислокационная ямка увеличивалась в размерах, Рис. 2b,d, вокруг нее возникало поле напряжений, внутри ямки были зафиксированы диффузионные потоки (от турбулентных до ламинарных), а также формирование новых фаз.

Для описания влияния локальной деформации и характера диссипации энергии использовали сопоставительный анализ изменчивости степени дисперсности фаз, формируемых в цементите при локальной деформации. Из Табл. 1 видно, что значения их показателей определяются не только локальной деформацией и скольжением дислокаций, но и анизотропией структуры.

Выявленное влияние этого фактора может быть использовано при разработке новых технологических процессов модифицирования, легирования, изменения скорости кристаллизации для повышения стойкости формирующего металл инструмента. Независимо от формируемого типа фаз и их сочетаний показано, что в поперечном направлении степень дисперсности ниже, чем в вертикальном и это характерно, как для единичных фаз, так и их двойных и тройных взаимодействий. При этом наибольшая доля выявленных фаз характерна для единичных — феррита (F) и карбидов (Cb), а также их взаимодействий. Кроме того, средняя дисперсность вновь формируемых фаз при скольжении дислокаций повышается в 1.5 раза.

Для более достоверной оценки коэффициент связи изменчивости степени дисперсности (показатель нейтральности), определяли через значения функций напряжений и мощности диссипации энергии. Данный показатель характеризует отклонение системы от стабильного состояния в процессе деформации (Табл. S5, дополнительный материал).

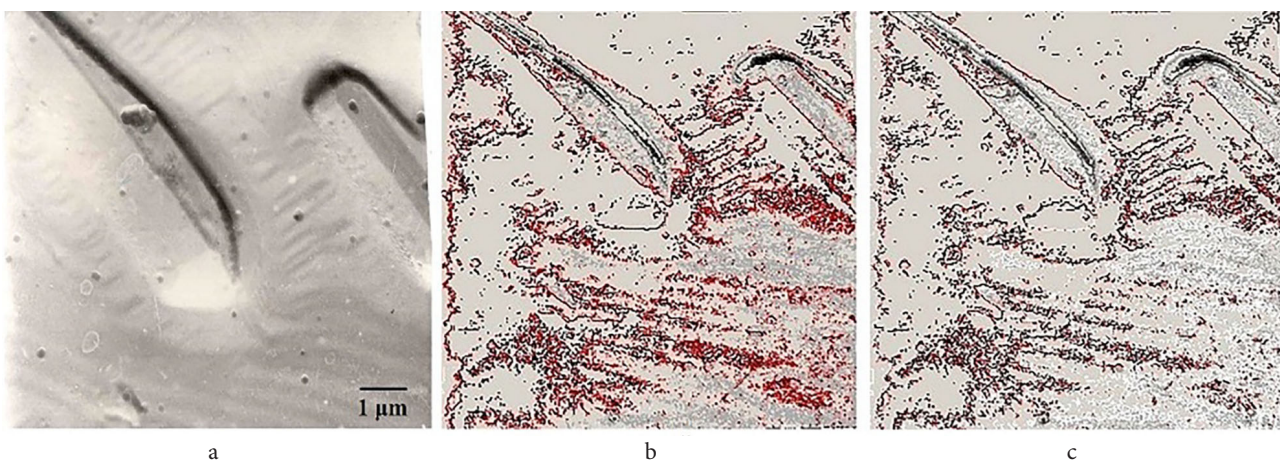


Рис. 1. (Color online) Распределение показаний изменчивости фаз, SEM фотография микроструктуры, $\times 10000$ (a); функций: напряжений (S) (b) и мощности диссипации энергии (M) при скольжении дислокаций (c).

Fig. 1. (Color online) Distribution of phase variability: SEM microstructure image, $\times 10000$ (a). Distribution of functions variability: stresses (S) (b), energy dissipation power (M) during dislocations sliding (c).

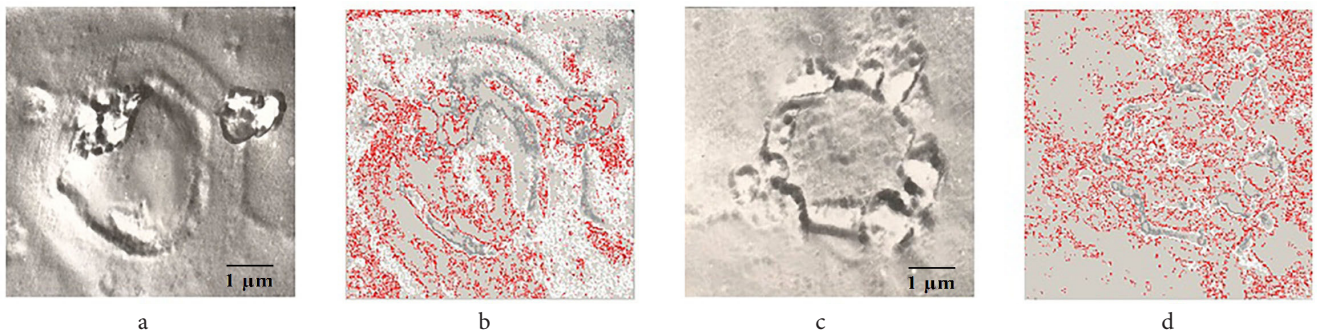


Рис. 2. (Color online) Металлографические изображения единичных дислокаций: SEM изображения, $\times 10000$ (a), (c); распределение функции напряжений (S), при значениях $|L(x, y)| \geq 255$ (b), (d). Вакуумное травление при: 450°C и времени обработки 30 мин (a); 600°C и времени 30 мин (c).

Fig. 2. (Color online) Metallographic images of single dislocations: SEM images, $\times 10000$ (a), (c); distribution of stress function (S), for $|L(x, y)| \geq 255$ (b), (d). Vacuum etching at: 450°C and processing time 30 min (a); 600°C and processing time 30 min (c).

Табл. 1. Дисперсность фаз при изменчивости дислокационной структуры, мкм.

Table 1. Dispersion of phases with variability of dislocation structure, μm .

Оцениваемые области Regions assessed	Направление оценки Direction of assessment	Выявленные фазы и их сочетания Identified phases and their combinations						
		F	B	Cb	F+B	F+Cb	Cb+B	F+B+Cb
Повышенная плотность дислокаций у границы субзерна Increased dislocation density at the subgrain boundary	Горизонтальное Horizontal	22.64	2.25	16.10	2.56	5.1	3.21	2.67
	Вертикальное Vertical	20.82	2.11	14.68	2.38	4.62	3.0	2.48
Скольжение дислокаций Dislocation slip	Горизонтальное Horizontal	30.02	2.29	30.31	2.81	4.87	3.0	2.32
	Вертикальное Vertical	28.0	2.03	26.73	2.62	4.73	2.8	2.23

Поэтому учитывали и анизотропию при диффузионных процессах. Оценку проводили расчетами с использованием дифференциального оператора Лапласа при горизонтальном и вертикальном направлениях (L и L_{90°). Определяли его средние значения (L_{mean}), а также третью и четвертую производные (L_3 и L_4). Степень дисперсности оценивали по изменчивости значения дивергенции (D). Такой подход позволил получить наиболее полную информацию о состоянии анализируемого изображения структуры. Выявлено (см. Табл. S5, дополнительный материал), что коэффициент изменчивости степени дисперсности для функции напряжений возрастает на 4.1% при скольжении дислокаций, а функции диссипации энергии — на 5.5%, что свидетельствует о релаксации напряжений на 34%.

Для выяснения характера таких изменений в сочетаниях фаз, которые могут сопровождаться растворимостью точечных выделений, а также последующим появлением новых, провели специальный анализ (Табл. S6, дополнительный материал). Из приведенных данных видно, что заметные показатели характерны только для тройных взаимосвязей. При этом для локальной деформации это взаимодействие в большей мере характерно для карбидных фаз, а при скольжении дислокаций — для бейнитной. На Рис. 1 ранее были приведены результаты оптико-математического анализа такой изменчивости фаз.

4. Заключение

В результате выполненных комплексных исследований выявлен характер нестабильности структуры карбидной фазы цементита. При деформации в условиях повышенных температур, наблюдаемая нестабильность определяется диффузией углерода и железа, связанных с дислокационной структурой и ее изменчивостью. Это приводит к деградации цементита — формированию в нем новых фаз феррита с разной степенью насыщенности углеродом, бейнита и карбидов нестехиометрического состава типа FeC , Fe_xC_y , что снижает эксплуатационную стойкость изделий.

Выполненные количественные и структурные оценки изменчивости карбидной фазы в условиях пластической деформации и нагрева базировались на разработке оригинальных методик авторов, используемых при исследованиях, а также производственного опыта по изготовлению и эксплуатации прокатных валков.

Полученные результаты исследований могут быть использованы для повышения стабильности карбидной фазы путем дополнительного легирования, модифицирования, разработки новых технологических параметров и процессов литья, методов термоупрочнения, в том числе и высококонцентрированными источниками энергии, учитывающие условия эксплуатации изделий, а также путем использования оптимальной системы охлаждения валков на стане.

Дополнительный материал / Supplementary material.
 Электронная версия статьи содержит дополнительный материал, доступный безвозмездно на сайте журнала (lettersonmaterials.com). / The online version of this paper contains supplementary material available free of charge at the journal's Web site (lettersonmaterials.com).

Литература / References

1. T.S. Skoblo, O.Yu. Klochko et al. Theoretical and experimental framework for prediction of structure formation and high-carbon doped alloys properties). *Disa plus* (2019) 278 p. (in Russian) [Т. С. Скобло, О. Ю. Ключко и др. Теоретические и экспериментальные основы прогнозирования структурообразования, свойств высокоуглеродистых легированных сплавов. *Х.: Діса плюс* (2019) 278 с.]
2. T.S. Skoblo et al. Industrial laboratory diagnostics of materials. *78* (6), 35 (2012). (in Russian) [Т. С. Скобло и др. Заводская лаборатория. Диагностика материалов. *78* (6), 35 (2012).]
3. T.S. Skoblo et al. *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.* 40 (2), 255 (2018). (in Russian) [Т. С. Скобло и др. *МФИНТ.* 40 (2), 255 (2018).] [Crossref](#)
4. M.A. Guitar et al. *J. of Materials Engineering and Performance.* 27, 3877 (2018). [Crossref](#)
5. U. Pranav Nayak et al. *Metals.* 10 (1), 30 (2020). [Crossref](#)
6. V.G. Gavriljuk. *Materials Science and Engineering A.* 345 (1-2), 81 (2003). [Crossref](#)
7. K.M. Yamaleev, V.A. Sandakov. *Petroleum Engineering,* 6 (2), 97 (2008). (in Russian) [К.М. Ямалеев, В.А. Сандаков. *Нефтегазовое дело,* 6 (2), 97 (2008).]
8. V.E. Gromov et al. *Journal of Metastable and Nanocrystalline Materials.* 30, 39 (2018). [Crossref](#)
9. J. Takahashi. *IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering.* 219, 012007 (2017). [Crossref](#)
10. C.R.S. da Silva et al. *Materials Science and Technology.* 21 (5), 565 (2013). [Crossref](#)
11. T.S. Skoblo et al. *High Carbon Alloy Rolling Rolls* (Ed. by T.S. Skoblo). Moscow, Metallurgy (1994) 336 p. (in Russian) [Т.С. Скобло и др. *Прокатные валки из высокоуглеродистых сплавов* (Под ред. Т.С. Скобло). Москва, Металлургия (1994) 336 с.]
12. G.A. Domrachev et al. *Physics of the solid state.* 46 (10), 1901 (2004). (in Russian) [Г. А. Домрачев и др. *ФТТ.* 46 (10), 1901 (2004).]
13. A.I. Lazarev et al. *Crystallography.* 41 (5), 798 (1996). (in Russian) [А. И. Лазарев и др. *Кристаллография.* 41 (5), 798 (1996).]
14. T.S. Skoblo et al. *Lett. Mater.* 10 (2), 129 (2020). (in Russian) [Т.С. Скобло и др. *Письма о материалах.* 10 (2), 129 (2020).] [Crossref](#)
15. Patent UA № 137100, 10.10.2019. (in Ukrainian) [Пат. Украины № 137100, 10.10.2019.]
16. T.S. Skoblo et al. *Steel in Translation.* 42 (3), 261 (2012). [Crossref](#)
17. R.W.K. Honeycombe: *The plastic deformation of metals.* 2nd ed. Edward Arnold (Publ.) Ltd., Maidenhead (1984) 483 p.
18. A. Mussi et al. *Philosophical Magazine.* 96 (17), 1773 (2016). [Crossref](#)
19. J. Kim et al. *Computational Materials Science.* 173, 109375 (2020). [Crossref](#)
20. T.S. Skoblo et al. *Physicochemical mechanics of materials.* 56 (3), 57 (2020). (in Russian) [Т.С. Скобло и др. *Физико-химическая механика материалов.* 56 (3), 57 (2020).]