

УДК 669.187.26: 669.14.017

### ВПЛИВ МІКРОЛЕГУЮЧИХ ЕЛЕМЕНТІВ НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ЕЛЕКТРОННОГО ГАЗУ В ЗАЛІЗІ

к.т.н., ас.Ткаченко К.І., асп. Мірошніченко В.І.

Приазовський державний технічний університет (м. Маріуполь)

Рівень міжатомної взаємодії в твердому розчині визначає його властивості, зокрема -температурно-концентраційні умови його стабільності, температуру рекристалізації, схильність до руйнування та ін. Встановлення енергії міжатомної взаємодії в металах та, особливо, в їх твердих розчинах, суто на теоретичній основі або безпосередньо експериментальним шляхом в наш час практично неможливо.

Метою роботи є кількісна оцінка параметрів електронного газу в Fe та Ti, V, Nb, Zr, Al, а також в подвійних розведених твердих розчинах вказаних металів в Fe. Параметри електронного газу характеризують енергію вільних електронів в металі, яка визначає сили відштовхування в кристалічній ґратці. Дослідження проводили шляхом чисельних розрахунків середньої енергії електронного газу  $E^{\text{CP}}$  та енергії Фермі  $E_f$  для чистих металів та відповідних твердих розчинів. Розрахунки вказаних параметрів для чистих металів проводили з використанням відомих формул квантово-механічної теорії металів [1]. Важливим питанням при цьому є встановлення числа колективізованих електронів на атом металу. Відповідні розрахунки були виконані за розробленою методикою з застосуванням літературних даних про здатність до стискування. Характеристики електронного газу досліджених твердих розчинів визначали методами теорії ідеальних розчинів, враховуючи те, що енергія Фермі має властивості хімічного потенціалу.

Результати розрахунків, виконаних з використанням довідникових даних [2] наведені в таблиці 1. Як можна бачити, метали Fe, V та Nb мають практично однакові найвищі значення  $E_f \approx 10,3$  еВ. Близькі найнижчі значення  $E_f \approx 7,4$  та  $7,8$  еВ відповідають Zr та Al, в той час як Ti має проміжне значення  $E_f \approx 8,6$  еВ. Середня енергія електронного газу в розрахунку на грам-атом  $E_{\text{Me}}^{\text{CP}}$  серед досліджених металів зменшується від  $\sim 1700$  кДж/г-ат до  $\sim 640$  кДж/г-ат в наступній послідовності: Nb, V, Fe, Ti, Zr та Al. У зв'язку з цим оцінювали

Таблиця 1

#### Параметри електронного газу в залізі, мікролегуючих елементах та їх розчинах Fe+5 %Me

Показник	Елементи					
	Fe	Ti	V	Nb	Zr	Al
$E_f$ , еВ	10,44	8,56	10,24	10,42	7,81	7,36
$E_{\text{Me}}^{\text{CP}}$ , кДж/г-ат	1086	1039	1243	1686	1038	642
$E_{\text{Fe+5%Me}}^{\text{CP}}$ , кДж/г-ат	1086	1084	1094	1116	1084	1064
$\eta = dE^{\text{CP}}/dx$	0	-40	160	600	-40	-440

ступінь впливу елементів: Ti, V, Nb, Zr і Al на рівні кінетичної енергії електронів в залізі при розчиненні в ньому одного з елементів вказаного ряду. В таблиці наведені значення  $E^{CP}$ , розраховані для бінарних твердих розчинів Fe+5 %Me. Порівняння отриманих результатів показує, що елементи Ti і Zr незначно, однаковою мірою, з ~1086 до ~1084 кДж/г-ат, знижують рівень кінетичної енергії електронного газу в Fe. Більш суттєво, приблизно на 22 кДж/г-ат, знижує цю величину Al. Такий вплив повинен сприяти підвищенню стабільності розчинів. Згідно даним таблиці, V та Nb збільшують кінетичну енергію електронів в залізі на ~8 та ~30 кДж/г-ат відповідно. В цьому випадку, вочевидь, можливо послаблення міжатомних зв'язків і зниження стабільності твердих розчинів. Характер та інтенсивність впливу досліджених елементів на енергію електронного газу в твердих розчинах зручно характеризувати параметром  $\eta = dE^{CP}/dx$ . Як видно, елементам Ti, Zr та Al відповідають значення  $\eta$ , які свідчать про збільшення енергії міжатомного зв'язку при розчиненні цих елементів в залізі, особливо під впливом алюмінію. В той же час, при введенні ніобію та ванадію слід очікувати підвищення  $E^{CP}$ , що відповідає зниженню енергії міжатомного зв'язку, особливо під впливом ніобію.

#### Висновки

1. Розрахунковим шляхом визначені чисельні значення енергетичних параметрів електронного газу в Fe та мікролегуєуючих елементах Ti, V, Nb, Zr, Al.
2. Встановлено, що для вказаних елементів рівень енергії Фермі змінюється від ~10 eВ у Ti, V і Nb до ~8 eВ у Ti, Zr і Al; середня енергія електронного газу має максимальне значення ~1700 кДж/г-ат для Nb і мінімальне ~640 кДж/г-ат для Al.
3. Встановлено, що елементи Ti, Zr і Al слабо знижують, а V і Nb істотно підвищують кінетичну енергію електронного газу в твердих розчинах на основі заліза.

#### ВИКОРИСТАНІ ДЖЕРЕЛА

1. Займан Дж. Принципы теории твердого тела. М.: Мир. -1966. – 415 с.
2. <http://www.nist.gov/srd/>.