

МАТЕРІАЛОЗНАВСТВО

УДК 669.017.07

Ткаченко Ф.К.¹, Ткаченко К.И.², Гаврилова В.Г.³

АНАЛИЗ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА В МЕТАЛЛАХ IV-ПЕРИОДА

На основе анализа уравнения Шредингера выполнено расчетно-аналитическое исследование параметров, характеризующих состояние электронного газа элементов IV-периода: Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni и Cu, широко используемых при создании современных металлургических материалов различного назначения.

Ключевые слова: электронный газ, элементы IV-периода, уравнение Шредингера, энергия Ферми.

Ткаченко Ф.К., Ткаченко К.И., Гаврилова В.Г. Аналіз параметрів електронного газу в металах IV-періоду. На підставі аналізу рівняння Шредингера виконане розрахунково-аналітичне дослідження параметрів, що характеризують стан електронного газу елементів IV-періоду: Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni та Cu, які широко використовуються під час створення сучасних металургійних матеріалів різного призначення.

Ключові слова: електронний газ, елементи IV-періоду, рівняння Шредингера, енергія Фермі.

Tkachenko F.K., Tkachenko K.I., Gavrilova V.G. The analysis of electron gas parameters of IV-th period metals. The computational-analytical investigation of electron gas state parameters based on Shredinger's r equation was accomplished for IV-th period metals: Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni and Cu, widely used for creation of up-to-date metallurgical materials of various applications.

Keywords: electron gas, for IV-th period metals, Shredinger's equation, Fermi's energy.

Постановка проблемы. Анализ основных параметров электронного газа элементов IV-периода: Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni и Cu, применяемых в системе легирования необходим для создания современных сталей и сплавов.

Анализ последних исследований и публикаций. В настоящее время научно-прикладные проблемы материаловедения решаются на основе закономерностей, базирующихся на данных эмпирического характера. Между тем, в работах многих отечественных и зарубежных ученых: Я. Френкеля, Юм-Розери, Л. Паулинга, Л. Брюэра, Ж. Фриделя, В. Григоровича и др., актуальные задачи металлофизики рассматриваются с позиций современной квантовой электронной теории. При этом природа наблюдаемых в металлах и сплавах видов межатомного взаимодействия, а также физических эффектов анализируется на основе фундаментальных атомных характеристик.

Цель статьи – выполнение оценочных расчетов характеристик электронного газа металлов: Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni и Cu, определяющих уровень межатомного взаимодействия и физических свойств.

Изложение основного материала. Металлические элементы IV- периода в твердом состоянии имеют кристаллическое строение с периодически расположенными катионами, характеризующимися электронной конфигурацией аргона $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$. Промежутки между катионами заполнены электронным газом, отдельные частицы которого, в соответствии с правилом Паули, распределяются по энергетическим уровням в пределах объема кристалла.

Состояние отдельного электрона при отсутствии взаимодействия между его соседями

¹ д-р. техн. наук, профессор, Приазовский государственный технический университет, г. Мариуполь

² канд. техн. наук, ассистент, Приазовский государственный технический университет, г. Мариуполь

³ канд. техн. наук, доцент, Приазовский государственный технический университет, г. Мариуполь

$$K = \left(\frac{6,13}{r_s / a_0} \right)^5 \cdot 10 \text{ дин/см}^2.$$

Подставив в это выражение проведенные в таблице значения $r_s=1,18 \cdot 10^{-8}$ см и $a_0=0,8529 \cdot 10^{-8}$ см, получаем $K_{Fe}=2 \cdot 10^{12}$ дин/см², что хорошо согласуется с экспериментальным значением (1,683 дин/см²) [1].

В колонке 11 приведены результаты расчетов давления электронного газа в исследуемых металлах. Как видно из данных таблицы, наиболее высокое давление $\sim 12 \cdot 10^5$ атм. наблюдается у Cr, Co и Ni. Весьма низкое значение $P \cong 3,6 \cdot 10^5$ ат характерно для Mn. Значение этого показателя для железа составляет $\sim 10,6 \cdot 10^5$ атм.

Выводы

1. В рамках квантовой теории свободных электронов выполнены оценочные расчеты основных параметров электронного газа 3d- переходных металлов: Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni и Cu.
2. Установлено, что уровень энергии Ферми железа составляет $E_F=11,1$ эВ; элементы: Ti, V, Cr, Co и Ni имеют $E_F \geq 11,1$ эВ, а элементы: Mn и Cu характеризуются $E_F < 11,1$ эВ.
3. Полученные результаты рекомендуется использовать при обосновании выбора системы легирования стали.

Список использованных источников:

1. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела./ Ч. Киттель.– М.: Наука, 1978. –791с.
2. Ашкрофт Н. Физика твердого тела./ Н. Ашкрофт, Н. Мермин.– М.: Мир, 1979. –399с.
3. Григорович В.К. Электронное строение и термодинамика сплавов железа/ В.К. Григорович – М.: Наука, 1970.– 291с.
4. Займан Дж Принципы теории твердого тела/ Дж. Займан. –М.: Мир, 1966. –416с.

Рецензент: А.П. Чейлях
д-р техн. наук, проф., ПГТУ

Статья поступила 20.04.2010

УДК 621.78:669.14.018.295

Ткаченко І.Ф.¹, Уніят М.А.²

ВПЛИВ УМОВ НАГРІВАННЯ НА СТРУКТУРУ ТА ТВЕРДІСТЬ НИЗЬКОЛЕГОВАНИХ ЛИСТОВИХ СТАЛЕЙ

Вивчено фазово-структурний стан сталей 09Г2С і 10ХСНД після ізотермічної витримки при температурах двофазної області з подальшим охолодженням у воді. Показано, що структура сталі 09Г2С, на відмінну від сталі 10ХСНД, найбільш суттєво змінюється після витримки при досліджених температурах протягом 8 годин. Встановлено складний характер залежності твердості сталі 09Г2С від температури витримки, що узгоджується зі змінами мікроструктури.

Ключові слова: низьколеговані листові сталі, мікроструктура, твердість.

Ткаченко И.Ф., Уніят М.А. Влияние условий нагрева на структуру и твердость низколегированных листовых сталей. Изучено фазово-структурное состояние сталей 09Г2С и 10ХСНД после изотермической выдержки при температурах двухфазной области с дальнейшим охлаждением в воде. Показано, что структура стали 09Г2С, в отличие от стали 10ХСНД, наиболее существенно изменяется после выдержки при исследуемых температурах в течение 8 часов. Установлен сложный характер зависимости твердости стали 09Г2С от температуры

¹ д-р техн. наук, профессор, Приазовський державний технічний університет, г. Маріуполь

² аспірант, Приазовський державний технічний університет, г. Маріуполь