

УДК 64.70Кб

ВПЛИВ ЕНЕРГІЇ ЗВ'ЯЗКУ НА УТВОРЕННЯ ФАЗ, ЩО МІСТЯТЬ БОР У СПЛАВАХ СИСТЕМИ Fe-B-C

Н. Ю. Філоненко*, вик., О. Ю. Береза**, д. ф.-м. н.,
О. С. Баскевич***, к. ф.-м. н., О. О.Хорольський*, вик.

*Дніпропетровська державна медична академія

**Дніпропетровський державний аграрний університет

***Державний вищий навчальний заклад "Український державний хіміко-технологічний університет"

Вступ

Відомо, що наявність домішок бору впливає на фазові перетворення в сплавах на основі заліза [1-4]. Бор є горючим елементом, який сегрегує на границі зерен, утворюючи надлишкові фази, що підвищують крихкість сплавів [1-4]. Автори роботи [5] вказують, що бор впливає на дифузію карбону, частково витісняючи його з границі зерен. У роботі [2, 4] показано, що в структурі сталей аустенітного класу, що містять бор і церій, відбувається утворення багатофазних включень, які розташовуються по межах аустенітних зерен. Автор вказаної роботи [2] висуває припущення про те, що включення можуть складатися з декількох фаз, що містять бор. Однак, більш детальні відомості про фазовий склад та фактори, які впливають на фазовий склад і будову багатофазних включень в сплавах системи Fe-B-C з малим вмістом бору відсутні.

У зв'язку з цим в даній роботі було досліджено фазовий склад сплавів системи Fe-B-C та вплив енергії зв'язку на утворення фаз в цих сплавах.

Методика експерименту

Досліджували сплави з вмістом бору 0,0001-0,2 % (мас.) і карбону 0,1-0,5 % (мас.). Складові шихти мали такий вміст основного елемента: залізо карбонільне з вмістом заліза 99,99 %, феробор ФБ-0 з вмістом бору 22,0 %, графіт електродний ЕУО з вмістом карбону 99,96 % (мас.). Плавку зразків виконували в печі Тамана в алундових тиглях в атмосфері аргону.

Фазовий склад сплавів визначали методом мікрорентгеноспектрального аналізу на мікроскопі JSM – 6490 та оптичному мікроскопі «Неофот - 21». Температури фазових перетворень встановлювали методом диференційного термічного аналізу. Рентгеноструктурний аналіз проводили за допомогою рентгенівського дифрактометра ДРОН-3 у монохроматизованному Fe- K_{α} випромінюванні при напрузі $U = 35$ кВ і анодному струмі $I = 20$ мА. Для дослідження фізичних властивостей отриманих сплавів використовували діюраметричний аналіз за допомогою мікротвердоміра ПМТ-3 при навантаженні 1Н та витримці під навантаженням не менше 10 секунд. Для визначення особливостей утворення багатофазних включень сплави, які досліджували, піддавали методу пошарового шліфування. Для фіксації фазового складу сплавів системи Fe-B-C, та визначення фазових перетворень було проведено нагрів при температурах 1023 К, 1115 К, 1183 К та 1243 К та послідує охолодження сплавів зі швидкістю 100 К/с.

Результати експерименту та їх обговорення

Результати дослідження сплавів системи Fe-B-C із вмістом карбону 0,1-0,15 % (мас.) і бору 0,0001-0,001 % (мас.) показали, що основними складовими мікроструктури є зерна фериту і дрібнодисперсних включень бориду заліза Fe₂B, розташованих по границях феритних зерен (рис. 1, а).

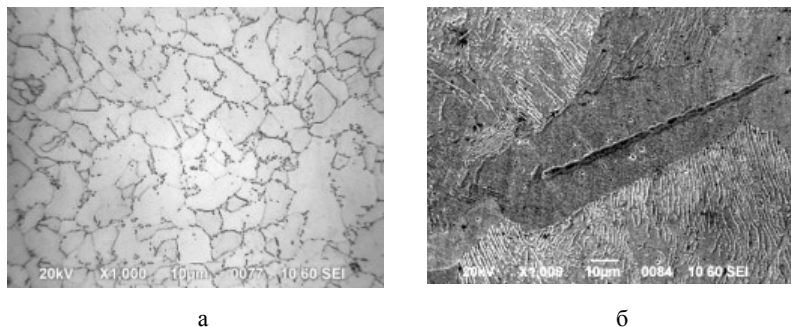


Рис. 1. Мікроструктура сплавів, що містять бор при температурі 300 К із вмістом бору 0,005 % (мас.) та карбону 0,1 % (мас.) (а) і бору 0,08 % (мас.) та карбону 0,5 % (мас.) (б), x1000.

При вмісті у сплаві карбону 0,2 % (мас.) та бору 0,002-0,004 % (мас.) мікроструктура сплавів змінюється і складається з фериту та бороцементиту Fe₃(CB). Зі збільшенням вмісту карбону понад 0,4 % (мас.) і бору до 0,02 % (мас.) мікроструктура сплавів складається із зерен твердого розчину α-заліза з включеннями бориду Fe₂B та бороцементиту Fe₃(CB) по границях зерен перліту (рис. 1, б). При вмісті карбону понад 0,4 % та бору 0,2 % (мас.) спостерігається утворення евтектики Fe+Fe₂₃(CB)₆ по границях і в об'ємі перлітних зерен. Крім того, по границях зерен колишнього аустеніту, і в об'ємі зерен перліту сплавів із вмістом карбону 0,3-0,5 % (мас.) та бору 0,01-0,1 % (мас.) встановлено утворення багатофазних включень (рис. 1, б).

Відомо, що утворення фаз у сплаві пов'язано з енергією зв'язку між компонентами, які її утворюють. Враховуючи результати досліджень фазового складу та механізму фазових перетворень в сплавах системи Fe-B-C, викликає зацікавленість оцінка енергії зв'язку між атомами Fe-Fe, Fe-C і Fe-B і те, як вона впливає на утворення фаз, що містять бор. Для оцінки енергії зв'язку Fe-B, Fe-C та Fe-Fe використовували квантово-механічні розрахунки енергії зв'язку [6-8].

Загальну енергію окремого хімічного зв'язку можна розрахувати за виразом [6-8]:

$$E = E_1 + E_{e-e} + E_{кул} + W_1 + W_2, \quad (1)$$

де E_1 - енергія взаємодії часток при розв'язку двоцентрової задачі, E_{e-e} - енергія електрон-електронної взаємодії, $E_{кул}$ - кулонівська енергія, W_1 - збудження, що виникає при розв'язку двоцентрової задачі, W_2 - збудження, яке

виникає під час проникнення заряду в кристалічну ґратку фази.

Рівняння Шредингера для електрона, що знаходиться в полі двох кулонівських центрів було представлено в еліптичних координатах [6-8]:

$$\left\{ \frac{4}{R^2(\lambda^2 - \mu^2)} \left[\frac{\partial}{\partial \lambda} (\lambda^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \lambda} + \frac{\partial}{\partial \lambda} (1 - \mu^2) \frac{\partial}{\partial \lambda} + \frac{\lambda^2 - \mu^2}{(\lambda^2 - 1)(1 - \mu^2)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \right\} \psi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(\lambda, \mu)] \psi = 0, \quad (2)$$

де $\lambda = \frac{r_1 + r_2}{R}$, $\mu = \frac{r_1 - r_2}{R}$, r_1, r_2 – відстань від електрона до першого і до

другого атома, R – відстань між атомами 1 і 2, ψ – хвильова функція.

Рівняння (1) має розв'язок, якщо запропонований потенціал $U(\lambda, \mu, \varphi)$ надати у вигляді суми кулонівського потенціалу $U_{кул}$ та коливального $U_{кол}$ [6-8]:

$$U_{кул}(\lambda, \mu, \varphi) = \frac{2}{R} \left[\frac{Z_1}{\lambda + \mu} + \frac{Z_2}{\lambda - \mu} \right], U_{кол}(\lambda, \mu, \varphi) = \frac{R^2 \omega^2}{8} (\lambda^2 + \mu^2) \quad (3)$$

де ω — частота основних коливань атомів.

Розрахунок енергії зв'язку проводили за формулою:

$$E_{k,\Lambda,n} = \frac{\langle \psi_{k,\Lambda,n} | H_0 | \psi_{k,\Lambda,n}^* \rangle}{\langle \psi_{k,\Lambda,n} | \psi_{k,\Lambda,n}^* \rangle}, \quad (4)$$

де H_0 — гамільтоніан двоцентрової задачі, $\psi_{k,\Lambda,n}$ - хвильова функція з квантовими станами k, Λ, n .

Розрахунок енергії зв'язку показав, що найбільша енергія зв'язку відповідає зв'язку між атомами заліза і бору (рис. 2).

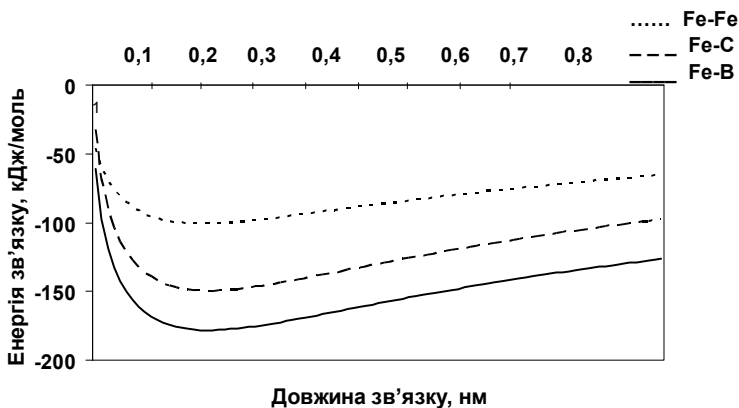


Рис. 2. Залежність енергії зв'язку від довжини зв'язку

Отже, вірогідність утворення бориду заліза Fe_2B в сплаві системи Fe-B-C більша, ніж вірогідність утворення карбідів заліза і більша, ніж вірогідність утворення фаз, що містять і бор, і карбон $Fe_3(CB)$ і $Fe_{23}(CB)_6$.

Крім того, якщо врахувати, що енергія зв'язку між атомами заліза і бору більша енергії зв'язку між атомами заліза і карбону менше ніж на 10%, то у твердому розчині можлива конкуренція між атомами бору і карбону.

Висновки

1. Визначено фазовий склад сплавів системи Fe-B-C з малим вмістом бору. Показано, що при вмісті бору до 0,1 % (мас.) в сплавах, що містять бор, утворюються багатофазні включення.

2. Результати розрахунків показали, що найбільша енергія зв'язку існує між атомами заліза та бору. Таким чином, в сплавах системи Fe-B-C, що містять бор, багатофазні включення утворюються шляхом послідовних фазових перетворень, які підтверджуються результатами розрахунків.

3. Присутність бороцементиту $Fe_3(CB)$ і кубічного борокарбїду $Fe_{23}(CB)_6$ у структурі багатофазного включення дає можливість висунути припущення, що зони сегрегації бору та карбону співпадають.

Список использованных источников

1. Дергач Т. А. Влияние бора на микроструктуру и свойства труб из низкоуглеродистой аустенитной хромоникелевой стали / Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение. (88). 2005, – №5, С. 80-85.
2. Н. П. Лякишев, Ю. Л. Плинер, С. И. Лапто Борсодержащие стали и сплавы. М.: “Металлургия”. 1986, – 235 с.
3. Гольдштейн Я.Е., Мизин В.Г. Модифицирование и микролегирование чугуна и стали / М: Metallurgiya. 1986. – 270 с.
4. Парусов В.В., Парусов О.В., Сычков А.Б. Прокат из борсодержащих сталей для высокопрочных крепежных изделий. Монография. Днепропетровск. Арт-пресс. 2010.
5. Бокштейн С. З. Диффузия и структура металлов / М.: Metallurgiya. – 1973.-205 с.
6. И.И. Франтов, С.А. Голованенко, А.В. Назаров, С.М. Хромов Влияние углерода и бора на фазовые превращения низколегированной стали // М.:Металлургия. Качественные стали и сплавы. 1978, – №3, с.20-21.
7. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции / М.: Главная редакция физико-математической литературы,. 1976, – 320 с. .
8. Г.Г. Пивняк, В.В. Соболев, А.С. Баскевич. Устойчивость углеродосодержащих фаз в углях при прохождении слабого электрического поля / *Доп. НАН України*. – 2012. – №2. – С. 107–113.
9. V. Sobolev, N. Bilan, A. Fillipov, A. Baskevich Electric stimulation of reaction in coal // *Technical and Geoinformational system in mining*. – Taylor&Francis Group, London: CRC Press: 2011. – P. 125–129.
10. V.Lucco Borlera, G. Pradelli Equilibri allo stato solido nel sistema ferroboro-carbonio // *La metallurgia Italiana*, 1967.-n 11.- p. 907-916.