

PACS numbers: 81.40.Ef, 62.20.Qr

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ КАРБИДА ЖЕЛЕЗА НА НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА СПЛАВОВ ЖЕЛЕЗА

*Г.А. Бакай, М.П. Братущак, А.С. Кузема*

Сумский национальный аграрный университет,  
ул. Кирова, 160, 40021, Сумы, Украина  
E-mail: [admin@sau.sumy.ua](mailto:admin@sau.sumy.ua)

*Приведены результаты исследований влияния карбида железа на некоторые свойства железа. Показано, что при увеличении энергии связи электронов в атомах железа, на границе раздела между атомами железа и молекулами карбида, происходит повышение прочности компонента железа в указанном выше сплаве.*

**Ключевые слова:** *КАРБИД ЖЕЛЕЗА, ГРАФИТ, ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ, СВОБОДНЫЕ ЭЛЕКТРОНЫ, ДИФфуЗИОННЫЙ ТОК, КОНЦЕНТРАЦИЯ, ПРОЧНОСТЬ.*

*(Одержано 10.11.2009, у відредагованій формі – 20.11.2009)*

Неотъемлемой и важной составной частью процесса создания материалов с заданными параметрами является исследование их свойств и возможности повышения качественных характеристик этих материалов.

В сплавах железа с углеродом в зависимости от физико-химических условий осуществляется взаимодействие атомов железа и углерода. В результате таких взаимодействий углерод образует с железом следующие фазы: жидкие растворы, твердые растворы, химические соединения  $Fe_3C$  и графит [1-3].

При установлении контакта между  $Fe$  и  $Fe_3C$ , позволяющего переходить свободным электронам (электронам проводимости) через поверхность раздела, в пограничных слоях по обе стороны от поверхности раздела концентрация свободных электронов будет отличаться от концентрации свободных электронов в объемной части контактирующих компонентов сплава, при отсутствии такого контакта.

Воспользовавшись известным соотношением, были определены энергии Ферми на атом для  $Fe$  и  $Fe_3C$  [4-6].

$$E_f = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}}, \quad (1)$$

где  $E_f$  – энергия Ферми,  $\hbar$  – постоянная Планка,  $n$  – концентрация свободных электронов  $m$  – масса электрона.

Для железа энергия Ферми  $E_f(Fe) = 17,787 \cdot 10^{-19}$  Дж, и для карбида соответственно  $E_f(Fe_3C) = 12,972 \cdot 10^{-19}$  Дж.

На рис. 1 схематически показано заполнение энергетических уровней, работу выхода и энергию Ферми электронов проводимости металла  $Fe$  и цементита  $Fe_3C$  до возникновения диффузионного контакта между ними

(рис. 1а) и после сближения, когда становится возможной диффузия электронов (рис. 1б).

Электроны проводимости, образовавшиеся из углерода химического соединения  $Fe_3C$ , на рис. 1 не показаны, так как их энергии имеют более отрицательное значение по сравнению с уровнями электронов, образованных из атомов железа. Они в диффузии в пограничных слоях не участвуют.

Поэтому, отсчёт энергии Ферми в  $Fe$  и  $Fe_3C$  начинают с одинаковых уровней энергии электронов, образованных свободными электронами железа. В связи с этим при вычислении плотности свободных электронов на одну молекулу  $Fe_3C$ , учитывают электроны только атомов железа.

С учетом вышеизложенного энергия Ферми, на одну молекулу, будет равна:  $E_f(Fe_3C) = 10,71 \cdot 10^{-19}$  Дж.

Если в сплаве  $Fe-C$  углерод присутствует в количестве, превышающем предельную растворимость его в железе при данной температуре, то чаще всего образуется структура, состоящая из твердого раствора на основе матрицы из  $Fe$  и выделившихся частиц химического соединения  $Fe_3C$ . На границе между атомами металла  $Fe$  и молекулами карбида  $Fe_3C$  происходит диффузия электронов проводимости.

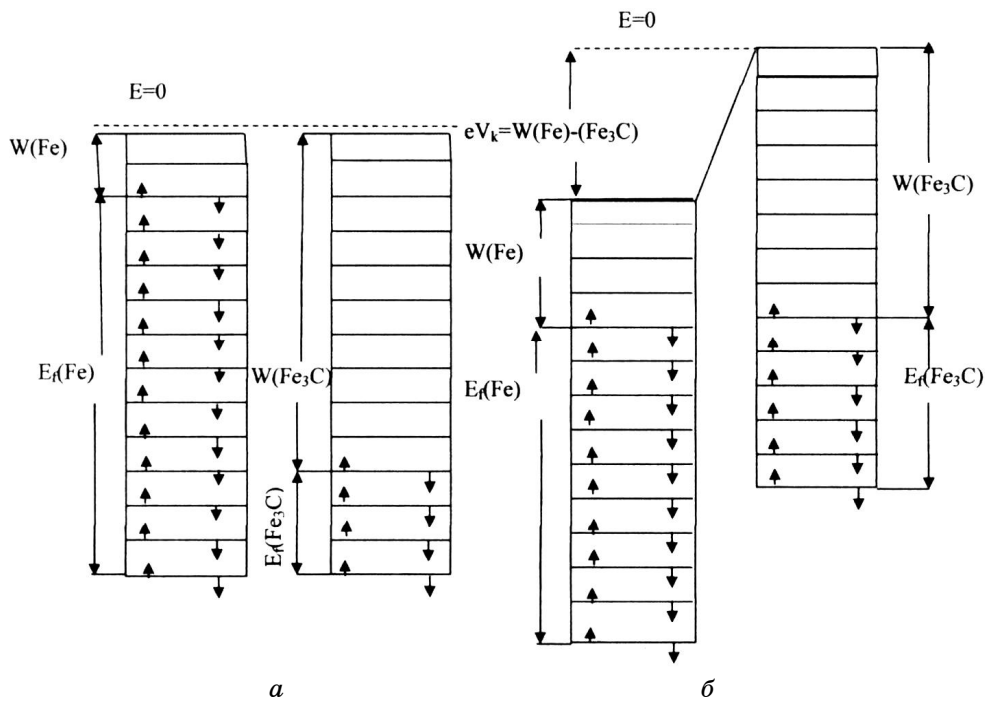


Рис. 1 – Схема условного расположения электронов, работы выхода и уровни энергии Ферми в  $Fe$  и  $Fe_3C$ : а – до соединения, б – после соединения

Необходимо заметить, что нижние уровни энергии электронов проводимости (см. рис. 1), образованные из атомов  $Fe$ , составляющих матрицу твердого раствора углерода  $C$  в железе и электронов проводимости, образованных из атомов  $Fe$ , входящих в молекулу  $Fe_3C$ , совпадают. По мере образования химического соединения  $Fe_3C$  в сплаве

железа и, следовательно, сближения атомов Fe и молекул Fe<sub>3</sub>C протекает диффузионный ток электронов проводимости из пограничного слоя железа в пограничный слой карбида Fe<sub>3</sub>C. Диффузионный ток протекает до тех пор, пока уровни энергии электронов Fe, понижаясь, а уровни энергий электронов молекул Fe<sub>3</sub>C, поднимаясь, не сравняют уровни Ферми  $E_f$  в обоих компонентах (рис. 16). После этого, диффузионный ток прекратится и на границе между железом Fe и карбидом железа образуется контактная разность потенциалов.

В кристалле работа выхода электрона определяется энергией необходимой для поднятия электрона с уровня Ферми на уровень вблизи поверхности кристалла, где уровень энергии принимается равным нулю.

При диффузии электронов проводимости через границу раздела Fe - Fe<sub>3</sub>C уровень энергии Ферми в железе уменьшается на величину, определяемую половиной контактной разности потенциалов.

На такую же величину увеличивается уровень энергии Ферми в карбиде железа (рис. 16).

Энергия связи на атом в металле определяется валентными электронами и представляет собой разность между энергией свободного атома, когда энергия взаимодействия между атомами исчезающе мала, и средней энергией атома в твердом теле.

Проведенные расчеты показали, что вследствие перемещения электронов проводимости, при выравнивании уровней энергии Ферми из Fe в Fe<sub>3</sub>C, в пограничном слое карбида железа энергия связи уменьшилась на  $1,44 \cdot 10^{-19}$  Дж. Несмотря на это уменьшение, энергия связи карбида остается значительно больше, чем в железе за счет ковалентности связи атомов.

Используя диаграмму состояния Fe-FeC [1] можно определить массу углерода, которая переходит в твердый раствор и массу углерода, которая выделяется в виде химического соединения Fe<sub>3</sub>C. Так как в карбиде железа углерода содержится 6,67 %, то при меньшей концентрации углерода в расплаве железа, углерод накапливается до нужной концентрации легче всего в пространстве на границе между зернами монокристалла железа.

## **ВЫВОДЫ**

Выполненные исследования показывают, что наличие соединения Fe<sub>3</sub>C, в сплаве железа с углеродом, обеспечивает увеличение прочности этого сплава, за счет увеличения энергии связи атомов железа в нем. Это может способствовать повышению износоустойчивости изделий изготовленных из стали и чугуна.

### **ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ КАРБІДУ ЗАЛІЗА НА ДЕЯКІ ВЛАСТИВОСТІ СПЛАВІВ ЗАЛІЗА**

*Г.А. Бакай, М.П. Братушак, О.С. Кузема*

Сумський національний аграрний університет,  
вул. Кірова, 160, 40021, Суми, Україна  
E-mail: [admin@sau.sumy.ua](mailto:admin@sau.sumy.ua)

*Наведені результати досліджень впливу карбиду заліза на деякі властивості заліза. Показано, що при збільшенні енергії зв'язки електронів в атомах заліза,*

на границі розділу між атомами заліза та молекулами карбїду, відбувається підвищення міцності компонента заліза в зазначеному вище сплавї.

**Ключові слова:** КАРБІД ЗАЛІЗА, ГРАФІТ, ЕНЕРГІЯ ЗВ'ЯЗКУ, ВІЛЬНІ ЕЛЕКТРОНИ, ДИФУЗІЙНИЙ СТРУМ, КОНЦЕНТРАЦІЯ, МІЦНІСТЬ.

#### STUDY OF THE INFLUENCE OF IRON CARBIDE ON SOME PROPERTIES OF ALLOYS OF IRON

**G.A. Bakaу, M.P. Bratuschak, O.S. Kuzema**

Sumy National Agrarian University,  
60, Kirova Str., 40021 Sumy, Ukraine  
E-mail: [admin@sau.sumu.ua](mailto:admin@sau.sumu.ua)

*The results of researches of influence of carbide of iron on some properties of iron are resulted. It is shown that at multiplying energy of connection of electrons in the atoms of iron, on the border of section between the atoms of iron and molecules of carbide, there is an increase of durability of component of iron in the alloy indicated higher.*

**Keywords:** CARBIDE OF IRON, RULES, ENERGY OF CONNECTION, LONE ELECTRONS, DIFFUSIVE CURRENT, CONCENTRATION, DURABILITY.

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРЫ

1. Ю.М. Лахтин, В.П. Леонтьева, *Материаловедение*, (М.: Машиностроение: 1990).
2. В.П. Иванов, *Технология и оборудование восстановления деталей машин*, (Минск: Техноперспектива: 2007).
3. Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела*, (М.: Наука: 1978).
4. Г.А. Бакай, В.С. Марцинковский, *Вісник СНАУ* **1(16)**, 13 (2007).
5. Г.В. Москвитин *Методы упрочнения поверхностей деталей машин*, (М.: Каскад: 2008).
6. V.A. Levchenko, S.A. Khanmamedov, *CPS. Moscow MDNTP* **25**, 66 (2008).