УДК 539; 537.8

Взаимодействие атомов железа и углерода в системе «Fe - C (графит)» в литейных сплавах

Студенты гр. 641251 Рогов И.С., гр. 631251 Прохоров И.В.
Научный руководитель – Вальтер А.И.
Тульский государственный университет
Россия, Тула

Природа полиморфизма железа является до настоящего времени сложной проблемой, несмотря на большую изученность двойных металлических систем «железо - элемент». Механизм физико-химического взаимодействия легирующих элементов с железом остается по многим параметрам не ясным, особенно в области атомно-электронного взаимодействия элементов в условиях сильного отклонения от равновесия.

Современная теория динамических систем, а также физика неравновесных состояний позволяет по-новому взглянуть на процессы, происходящие в металлических системах на атомно-электронном уровне.

Атом углерода характеризуется электронной конфигурацией $1s^2 2s^2 2p^2$, существует несколько полиморфных модификаций углерода. Между атомами углерода в графите действуют сильные ковалентные связи, атомы располагаются в углах правильных шестиугольников, расстояние между центрами атомов равно 1,415 Å. В ковалентных связях заняты три валентные электроны каждого атома, четвертые валентные электроны коллективизированы и это придает графиту высокую электропроводность, непрозрачность. Оценку энергетического взаимодействия элементов в системе «Fe - C (графит)» проводили на основе расчета энергии электронных уровней атомов железа и углерода по следующим соотношениям:

$$E_n = -\frac{1}{2} m \vartheta^2; \qquad (1)$$

Эту величину можно выразить также через *R*- радиус атома (иона), подставив соотношение $\vartheta^2 = \frac{k_0 z e^2}{m R_n}$ в выражение $E = -\left(\frac{1}{2}\right) m \vartheta^2$, что дает:

$$E_n = -\frac{K_0 e^2}{2R_n} = -K_0 \frac{e^2}{2R}; \qquad (2)$$

Энергии электронных уровней атомов железа и углерода в металлической системе «Fe – C» (графит) выразим также через *R* - радиусы ионов в виде суммы энергий электронных уровней атомов. Для двухкомпонентной системы уравнение (2) принимает следующий вид:

$$E = E_{n_1} + E_{n_2} = -K_0 \frac{e^2}{2R_1} - K_0 \frac{e^2}{2R_2} = -K_0 \frac{e^2}{2}\left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right); \qquad (3)$$

где R_1, R_2 - радиусы атомов (ионов) компонентов, составляющих сплав; K_o - постоянная Больцмана; e - заряд электрона.

Уравнение (3) позволяет рассчитать энергию электронных уровней взаимодействующих атомов в металлической системе и на основе этого определить температуру сплава, так как энергия системы эквивалентна ее температуре.

Исходя из условия известных межатомных расстояний в графите (1,415 Å), можно определить ковалентный радиус атома углерода, который будет равен 0,7075 Å. Исследование электронного строения сплавов системы «Fe-C (графит)» позволило построить диаграмму, которая представлена на рис.1. Как видно из рис.1, линия ликвидус **ABD** имеет минимум в точке **B**. Точке **B** соответствует температура 1428 ^oC и концентрация 2,012 % (вес.).

На линии ликвидус **AB** атомы углерода находятся в ионизированном состоянии; при концентрации углерода $1{,}2 \cdot 10^{-4}$, 0,026, 0,134, 0,168 % (вес) атомы углерода находятся в состоянии ионизации $C^{я.}$ (ядро), $C^{я.о.}$ (ядерное облако), C^{6+}, C^{5+}. С повышением концентрации до 0,56, 0,69, 0,85 % атомы углерода переходят в состояние ионизации C^{4+}, C^{3+}, C^{2+}. Далее, с увеличением концентрации до 1,07, 1,3, 1,5, 1,7, 1,9 % ионизация атомов углерода уменьшается до уровня C^{1+}, $C^{0,76+}$, $C^{0,54+}$, $C^{0,.33+}$, $C^{0,12+}$. При концентрации 2,012 % и температуре 1428 ^oC атомы углерода находятся в расплаве в состоянии ионизации C^0 (нулевая ионизация). Атомы железа в области сталей, на линии ликвидус **AB**, не ионизированы и находятся в состоянии Fe^0, т.е. имеют нулевую ионизацию. Межатомное взаимодействие осуществляется за счет перекрытия электронных оболочек атомов железа и углерода. С увеличением концентрации углерода более 2,012 % (вес.) на линии ликвидус **BD** происходит ионизация атомов железа до уровня Fe^{1+}, Fe^{2+}, Fe^{3+}, Fe^{4+} при содержании углерода

2,78, 3,28, 4,07, 4,27 %. При дальнейшем повышении концентрации до 4,75, 5,03, 5,24, 5,71, 6,60, 6,67 % (вес.) ионизация атомов железа растет до уровня Fe^{5+}, Fe^{6+}, Fe^{7+}, Fe^{8+}, Fe^{9+}, Fe^{10+}.

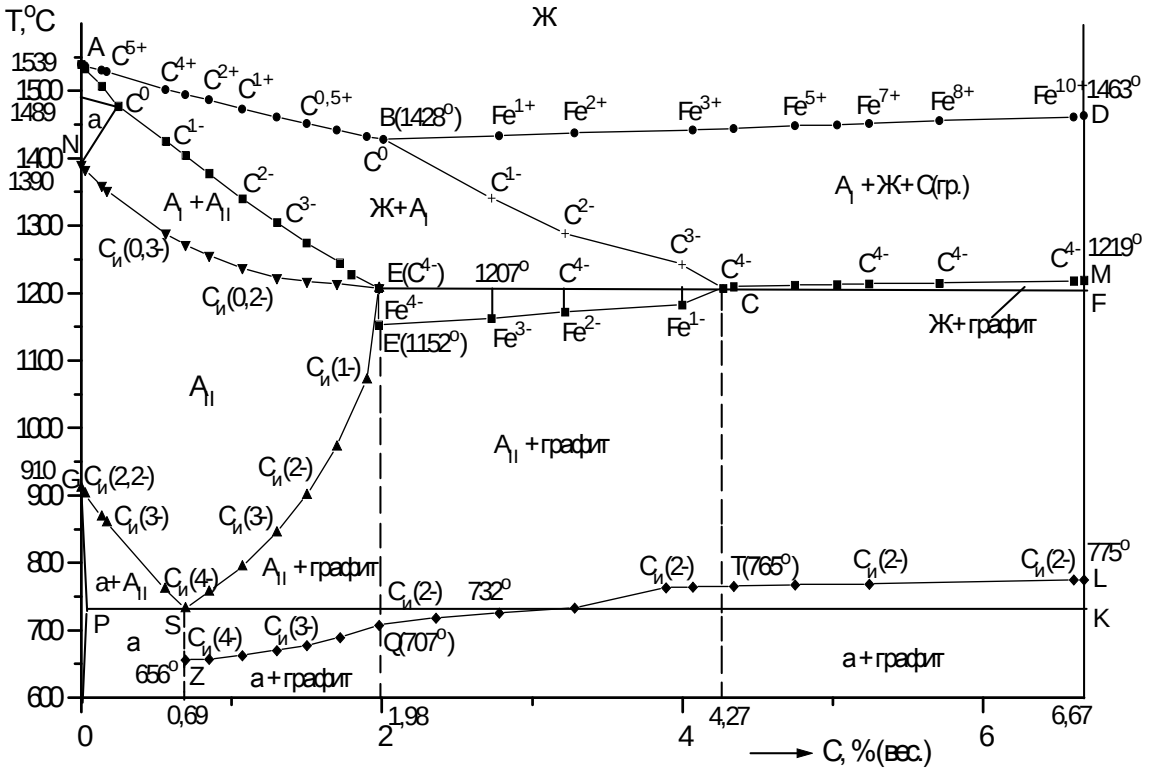

Рис.1. Диаграмма состояния сплавов «Fe - C (графит)» с ионными связями атомов углерода в графите на линии ZQTL

Минимум температуры в точке **B** (1428 °C) при концентрации 2,012 % (вес.) углерода можно объяснить различным межатомным взаимодействием элементов в области сталей и в области чугунов.

С изменением радиуса атома происходит также изменение энергии электронных уровней взаимодействующих атомов и, соответственно, температуры сплава.

УДК 621. 179

Изучение способов производства поршней

Магистрант Сошенко А.А.
Научный руководитель – Довнар Г.В.
Научный консультант – Арабей А.В.
Белорусский национальный технический университет
г. Минск

В конструкции поршня принято выделять следующие элементы: головку 1 и юбку 2. Головка включает днище 3, огневой (жаровой) 4 и уплотняющий 5 пояса. Юбка поршня состоит из бобышек и направляющей части (рисунок 1).

Сложная конфигурация поршня, быстро меняющиеся по величине и направлению тепловые потоки, воздействующие на его элементы, приводят к неравномерному распределению температур по его объему и, как следствие, к значительным переменным по времени локальным термическим напряжениям и деформациям рисунок 2.

Для изготовления поршней в настоящее время в основном используют алюминиевые сплавы, реже серый или ковкий чугун, а также композиционные материалы.