

Н.Ю. Філоненко, І.М. Спиридонова

Утворення твердих розчинів впровадження-заміщення в бормістячих сплавах

Дніпропетровський національний університет
49050, м. Дніпропетровськ, вул. Гагаріна, 72

В роботі досліджували вплив добавок бору на зміну параметра решітки фериту сплавів системи Fe-B-C, Fe-B, Fe-C. Значення довжини та енергії зв'язку розраховували за методикою системи радіусів неполярних іонів. Отримано результати, згідно яким позиція бора впровадження-заміщення в твердому розчині α -заліза сплаву системи Fe-B-C залежить від вмісту бора в сплаві

Ключові слово: ферити, твердий розчин, α -залізо.

Стаття поступила до редакції 17.11.2008; прийнята до друку 15.06.2009.

Відомо, що в бормістячих сплавах утворюються тверді розчини впровадження або заміщення в залежності від умов отримання сплаву.

Питання про те, якого типу розчин утворює бор із залізом, є спірним дотепер. Дослідники, що проводили визначення внутрішнього тертя сплавів на основі заліза, легованих бором [1,2,3] прийшли до висновку, що бор, аналогічно вуглецю, утворює із залізом твердий розчин впровадження. Проте, результати рентгеноструктурних досліджень [4] свідчать про зменшення параметрів решітки α - та γ -заліза, що суперечить приведеному вище висновку. Ряд авторів [5-9], походячи із зіставлення даних внутрішнього тертя, рентгеноструктурного аналізу, енергії активації дифузії, а також з того, що по відношенню розмірів атомів розчинника і розчиненої речовини бор займає нейтральне положення між елементами, прийшли до висновку, що бор може утворювати як розчин заміщення, так і розчин впровадження в аустеніті та фериті.

Тому представляє інтерес до якого типу твердих розчинів (впровадження, заміщення) відноситься бормістячий сплав. У зв'язку з цим досліджували вплив добавок бору на зміну параметра решітки фериту сплавів системи Fe-B-C, Fe-B, Fe-C. Досліджуваними сплавами служили зразки з вмістом бору 0,0001-0,1% (ваг.) і вуглецю 0,005%-0,25% (ваг.).

Рентгеноструктурний аналіз проводили на установці ДРОН-3 в Fe-випромінюванні при напрузі $U = 35$ кВ і анодному струмі $I = 14$ мА, швидкості запису 4 град./хв. Для дослідження властивостей отриманих сплавів використовували дюраметричний аналіз. Довжину і енергію зв'язку параметра решіток для систем: Fe-B, Fe-C, Fe-B-C розраховували за

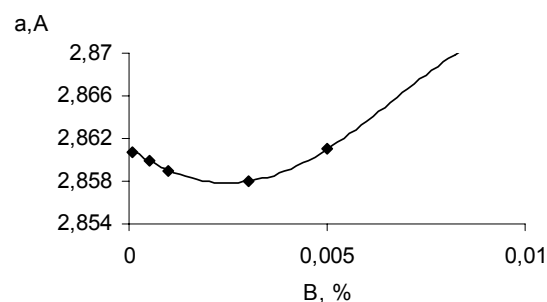


Рис. 1. Залежність зміни параметра решітки фериту від вмісту бора в сплаві.

методикою системи радіусів неполярних іонів [10,11].

На підставі результатів рентгеноструктурного аналізу отримали залежність зміни параметра грат фериту залежно від вмісту бора для систем Fe-B (рис. 1).

Як видно з рис. 1, при вмісті бора в сплаві 0,0003-0,003% (ваг.) параметр решітки фериту зменшується.

Результати дослідження залежності мікротвердості фериту від вмісту бора та вуглецю у бормістячому сплаві на основі заліза наведені на рис. 2.

Як видно з рис. 2, при малому вмісті бора (<0,003%) спостерігається зменшення мікротвердості. Із збільшенням вмісту бора в сплаві (>0,003%) мікротвердість фериту зростає.

Для знаходження d – середньої довжини зв'язку між атомами заліза і бора, були розраховані заряди атомів кожного реагенту, включаючи сферичну (Z_{min}) і направлену ($\Delta e/2$) компоненти, «направлену» зарядну густину – ρ . Для цього використовували

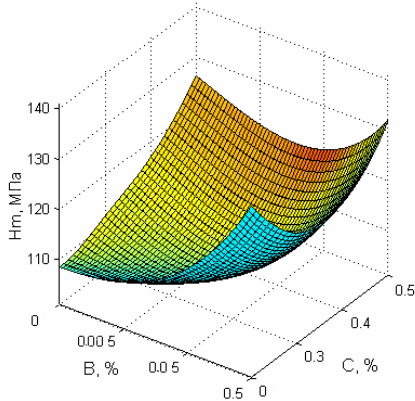


Рис. 2 Залежність мікротвердості фериту у бормістячому сплавi від вмісту вуглецю й бора.

сукупність рівнянь, що описують зміну радіусу неполярного іона (R_i^z) залежно від заряду (z) і атомного радіуса (R_i^0):

$$\lg R_{nB}^{zB} = \lg R_{nB}^0 + (z_{\min B} + \Delta e / 2) \lg \alpha_B \quad (1)$$

$$\lg R_{nA}^{zA} = \lg R_{nA}^0 - (z_{\min A} + \Delta e / 2) \lg \alpha_A \quad (2)$$

$$d = R_{nA}^{zA} + R_{nB}^{zB} \quad (3)$$

В результаті розрахунку отримали співвідношення для d-довжини зв'язку:

$$d = 0,332 - 1,603z_A - 1,613z_B \quad (4)$$

та для енергії зв'язку:

$$Q = 249,07 + 131,39z_A + 164,43z_B \quad (5)$$

Коефіцієнт кореляції дорівнював $r = 0,98$.

розраховано по отриманим залежностям (4, 5) наведені в табл. 1

Як видно з результатів розрахунку, наведених в табл.1, енергія зв'язку максимальна між атомами заліза і бора для твердих розчинів заміщення.

Результати розрахунку довжини та енергії зв'язку Fe-B у фериті залежно від вмісту вуглецю і бора в сплаві наведено в табл. 2.

Як видно з табл. 2, із збільшенням вмісту бора і вуглецю в α -розчині заліза довжина зв'язку зменшується.

На підставі результатів рентгеноструктурного аналізу та розрахункових даних довжини і енергії зв'язку можна визначити положення атомів бору в решітці фериту (рис. 3) при малій концентрації бора ($\leq 0,003$ % (ваг.)). Якщо атоми заліза зміщуються на величину $0,008 \text{ \AA}$ (рис. 3 а) в першій координаційній сфері, то атом бору займає позицію заміщення атома заліза. Крім того, якщо в ґратах α -заліза утворюється бівакансія, то можливе впровадження атома бора в октаедричну пору (рис. 3 с).

Відомо, що легуючі елементи, які входять в твердий розчин, зміцнюють метал, деформуючи його кристалічну решітку. У разі утворення розчину заміщення кристалічні решітки можуть стискатися або розширяться залежно від співвідношення розмірів атома елемента, що розчиняється та атома матриці.

Відношення атомного радіуса бора до атомного радіуса заліза складає приблизно $0,75$, а розмір пор в решітці α -заліза значно менше і, тому, впровадження бору в такі пори при концентрації $\leq 0,0003$ % повинно викликати змінення кристалічної решітки, яке експериментально не спостерігається.

Табл. 1

Заряди елементів, довжина та енергія зв'язку Fe-Fe, Fe-C, Fe-B, B-C

Зв'язок	Заряди, e		Довжина зв'язку, \AA	Q кДж/моль	Q* кДж/моль
	z_A	z_B			
Fe-Fe	+0,0075	+0,0075	2,67	78,2	75,2 [7]
Fe-C	-1,398	+1,023	2,12	151,4	153,4 [8]
Fe-B (заміщ.)	-1,325	+0,693	2,37	163,2	-
FeB(впровад.)	-1,023	+0,380	2,03	148,3	-
B-C	+1,247	-1,984	1,56	89,0	-

Q* - енергія зв'язку за літературними даними.

Табл. 2

Довжина зв'язку Fe-B у фериті залежно від вмісту вуглецю і бора в сплаві

Вміст, % (ваг.)		Довжина зв'язку, \AA
C	B	
0,1	0,003	2,83
0,1	0,05	2,80
0,25	0,003	2,79
0,25	0,05	2,78
0,5	0,003	2,75
0,5	0,5	2,73

Значення довжини та енергії зв'язку, що

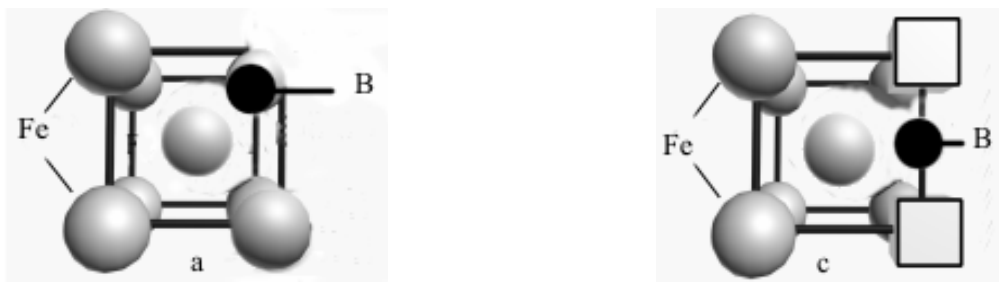


Рис. 3. Положення атомів бору у фериті відповідно до розрахункових даних.

При концентрації добавки бору 0,0003-0,003% (ваг.) атоми бору займають позицію заміщення в твердому α -розчині, внаслідок чого спостерігається зменшення параметра решітки (рис. 1). При кількості $\geq 0,003\%$ (ваг.) бору, атоми розміщуються не тільки у вузлах решітки, але й впроваджуються в решітку заліза, досить сильно збільшуючи її параметр, що супроводжується зростом мікротвердості.

Таким чином, в залежності від вмісту бору в сплаві він займає позицію впровадження-заміщення з співвідношенням об'ємів впровадження та заміщення.

твердому розчині α -заліза сплаву системи Fe-B-C залежить від вмісту бору в сплаві.

2. При вмісті бору в сплаві 0,0003-0,003% (ваг.) атоми бору займають позицію заміщення в твердому розчині α - заліза, внаслідок чого спостерігається зменшення параметра решітки та мікротвердості.
3. При кількості бору $\geq 0,003\%$ (ваг.) атоми розміщуються не тільки у вузлах решітки, але і впроваджуються в решітку фериту, що узгоджується з розрахунковими даними.

Висновки

1. Позиція бору впровадження-заміщення в

Філоненко Н.Ю. – мол. науковий співробітник;
Спиридонова І.М. – докт. хім. наук, професор.

- [1] С.А. Головин, М.А. Криштал, А.Н. Слободов. Электронно-микроскопическое исследования выделения фаз из пересыщенного твердого раствора // *Металловедение и обработка металлов*, **3**, сс. 53-54 (1970).
- [2] Ф.Н. Тавадзе. *Внутреннее трение в металлах и сплавах*. Наука, М. 350 с. (1966).
- [3] Р.М. Strocchi, В.А. Melandri, А. Tammba. Comments on the condition of boron in α -iron // *Nuovo Cim*, **51**(1), pp. 342-348 (1967).
- [4] А.М. Нестеренко, А.Б. Сычко. Размерно-геометрические аспекты легирования стали бором и медью // *МИТОМ*, **5**, сс. 61-63 (2004).
- [5] М.А. Криштал. *Механизм диффузии в железных сплавах*. М., Metallurgia. 398 с. (1972).
- [6] Х. Дж. Гольдшмит. *Сплавы внедрения*. М., Мир, **1**, 423 с. (1971).
- [7] R.M. Goldhoff, J.W. Spretnak. Boron segregation and temperature embrittlement of ferrites steel // *J. Metals*, **9**(10), pp. 745-751 (1957).
- [8] I. Haiashil, T. Sugeon. Nature of boron in α -iron. Diffusion of boron in alloys // *Acta Met.*, **18**, pp. 693-697 (1970).
- [9] Wendang Wang, Sanhong Zhany, Henlie He. Diffusion of boron in alloys // *Acta Met.*, **43**, pp.1693-1699 (1995).
- [10] Э.В. Приходько. *Металлохимия многокомпонентных систем*. М., Metallurgia. 320 с. (1995).
- [11] Н.А. Свидунович, В.П. Глыбин, Л.К. Свирко. *Взаимодействие компонентов в сплавах*. М., Metallurgia. 156 с. (1998).

N.Yu. Filonenko, I.M. Spiridonova

Formation of solid solutions of introduction-substitution is in boron alloys

Dnipropetrovsk National University 72, Gagarin Str., 49050, Dnipropetrovsk

The boron addition effect on lattice parameter change of the ferrite for Fe-B-C, Fe-B, Fe-C systems are investigated in this work. The bond length and binding energy are calculated by procedure for radius of nonpolar ions system. According obtaining results the position of interstitial-substitutional for boron in solid solution of α -Fe alloy for Fe-B-C system depend on boron content in it.