

# ФІЗИКА ТВЕРДОГО ТІЛА, ЗБАГАЧЕННЯ КОРИСНИХ КОПАЛИН

УДК 538.9

Н.Ю. Філоненко<sup>1</sup>,  
О.С. Баскевич<sup>2</sup>, канд. фіз.-мат. наук,  
В.В. Соболев<sup>3</sup>, д-р техн. наук, проф.

1 – Державний заклад „Дніпропетровська медична академія“, м. Дніпропетровськ, Україна, e-mail: natph@mail.ru  
2 – Державний вищий навчальний заклад „Український державний хіміко-технологічний університет“, м. Дніпропетровськ, Україна, e-mail: abaskevich@ukr.net  
3 – Державний вищий навчальний заклад „Національний гірничий університет“, м. Дніпропетровськ, Україна, e-mail: valeriyasobolev@rambler.ru

## ВПЛИВ ВМІСТУ БОРУ НА ТИП ТВЕРДОГО РОЗЧИНУ В СПЛАВАХ НА ЗАЛІЗНІЙ ОСНОВІ

N.Yu. Filonenko<sup>1</sup>,  
O.S. Baskevych<sup>2</sup>, Cand. Sci. (Phys.-Math.),  
V.V. Sobolev<sup>3</sup>, Dr. Sci. (Tech.), Professor

1 – State Institution “Dnipropetrovsk Medical Academy”, Dnipropetrovsk, Ukraine, e-mail: natph@mail.ru  
2 – State Higher Educational Institution “Ukrainian State University of Chemical Engineering”, Dnipropetrovsk, Ukraine, e-mail: abaskevich@ukr.net  
3 – State Higher Educational Institution “National Mining University”, Dnipropetrovsk, Ukraine, e-mail: valeriyasobolev@rambler.ru

## EFFECT OF BORON CONTENT ON THE TYPE OF SOLID SOLUTION IN ALLOYS BASED ON IRON

**Мета.** Мета роботи полягала в дослідженні впливу вмісту бору на параметр кристалічної ґратки й встановленні фізичних властивостей фериту в сплавах системи Fe-B-C. На основі квантово-механічних уявлень проведено розрахунок енергії хімічного зв'язку між різними компонентами сплаву системи Fe-B-C, встановити ймовірність розміщення атомів бору у твердому розчині цих сплавів, та визначити, до якого типу твердого розчину бору (проникнення, заміщення) відносяться сплави системи Fe-B-C.

**Матеріали та методика.** У роботі використовували сплави із вмістом бору 0,0001–0,1 % (мас.) і вуглецю 0,005–0,5 % (мас.). Для дослідження властивостей отриманих сплавів використовували рентгеноструктурний і діаметричний аналізи.

**Результати.** Для визначення позиції атомів бору в кристалічній ґратці  $\alpha$ -заліза проведено квантово-механічні розрахунки й зроблено оцінку енергії хімічного зв'язку між атомами заліза, заліза та вуглецю, заліза та бору в різних його положеннях (проникнення і заміщення). Атоми бору в позиції проникнення в кристалічній ґратці  $\alpha$ -заліза мають більшу енергію зв'язку з атомами заліза в порівнянні з атомами вуглецю. Встановлено, що, якщо енергія зв'язку між атомами заліза й бору в позиції проникнення більша за енергію зв'язку між атомами заліза й вуглецю не менше, ніж на 10%, то у фериті можлива конкуренція між атомами бору та вуглецю.

**Наукова новизна.** Проведені аналізи показали, що існує екстремальна залежність зміни параметра кристалічної ґратки фериту та мікротвердості від вмісту бору для системи Fe-B-C. При збільшенні вмісту бору в сплаві від 0,0003 до 0,003% (мас.) параметр кристалічної ґратки фериту та мікротвердість зменшуються, а при вмісті бору в сплаві більше 0,003 % (мас.) – наведені параметри зростають.

**Практична значимість.** Встановлено, що бор може утворювати як повністю розчин одного типу (заміщення або проникнення) у  $\alpha$ -залізі, так і розчин, в якому частина атомів знаходиться у вузлах кристалічної ґратки, а частина проникає в міжвузля. Проведені дослідження показали, що можна керувати позицією бору та фізичними властивостями у твердому розчині  $\alpha$  – заліза сплавів системи Fe-B-C.

**Ключові слова:** *твердий розчин, параметр кристалічної ґратки фериту, енергія зв'язку*

**Вступ.** Відомо, що в борвмісних сплавах утворення твердих розчинів проникнення або заміщення

залежить від умов одержання сплаву. Проведені дослідження із визначення внутрішнього тертя сплавів на основі заліза, легованих бором, [1–3] показали, що бор, аналогічно до вуглецю, утворює із залізом твер-

дий розчин проникнення. Проте, результати рентгеноструктурних досліджень суперечать твердженню про те, що атом бору не здатний проникати в кристалічну ґратку  $\alpha$ - та  $\gamma$ -заліза, а здатний заміщати атом заліза [4]. Про це свідчать зменшення параметрів кристалічної ґратки  $\alpha$ - та  $\gamma$ -заліза. Ряд авторів [1–5], виходячи із порівняння даних внутрішнього тертя, рентгеноструктурного аналізу, енергії активації дифузії та принципу Юм-Розері встановили, що бор займає нейтральне положення між елементами й може утворювати як розчини заміщення, так і розчини проникнення в аустеніті та фериті.

**Мета роботи** полягає у визначенні, до якого типу твердих розчинів відноситься ферит сплавів, що містять бор, та розрахуванні енергії зв'язку в сплавах Fe-B-C між атомами: Fe-B, Fe-C, Fe-Fe. Дослідити зміну параметра кристалічної ґратки фериту та мікротвердості сплавів системи Fe-B-C, Fe-B, Fe-C від вмісту бору.

**Матеріали та методика.** Досліджували сплави із вмістом бору  $0,0001 \div 0,1\%$  (мас.) і вуглецю  $0,005 \div 0,5\%$  (мас.). Рентгеноструктурний аналіз проводили за допомогою рентгенівського дифрактометра ДРОН-3 у монохроматизованому Fe- $K_{\alpha}$  випромінюванні при напрузі  $U = 35$  кВ й анодному струмі  $I = 14$  мА. Для дослідження мікротвердості сплавів використовували дюрOMETричний аналіз за допомогою мікротвердоміра ПМТ-3.

**Експериментальні результати.** Проведений рентгеноструктурний аналіз показав, що існує екстремальна залежність параметра кристалічної ґратки фериту від вмісту бору для системи Fe-B-C (рис. 1). Як видно на рис. 1, при збільшенні вмісту бору в сплаві від  $0,0003$  до  $0,003\%$  (мас.) параметр кристалічної ґратки фериту зменшується, а при збільшенні вмісту бору в сплаві більше  $0,003\%$  (мас.) – параметр кристалічної ґратки зростає. Відомо, що позиція атомів легувального елемента в кристалічній ґратці  $\alpha$ -заліза впливає на мікротвердість фериту. Якщо атом займає позицію проникнення, то мікротвердість збільшується, а якщо позицію заміщення – то зменшується.

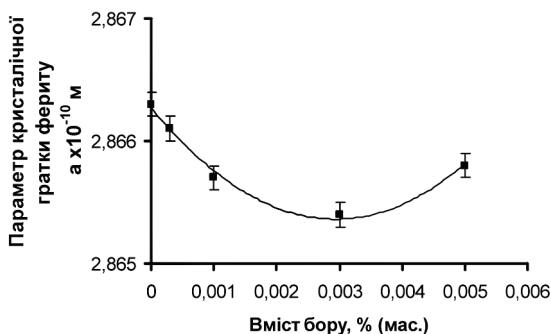


Рис. 1. Залежність зміни параметра кристалічної ґратки фериту від вмісту бору в сплаві

Результати дослідження залежності мікротвердості фериту від вмісту бору та вуглецю в сплаві, що містить бор на основі заліза, показали, що при малому вмісті бору  $< 0,003\%$  (мас.) спостерігається

зменшення мікротвердості, а при збільшенні вмісту бору в сплаві  $> 0,003\%$  (мас.) мікротвердість фериту зростає (рис. 2). Із наведених експериментальних даних видно, що позиція бору в кристалічній ґратці  $\alpha$ -заліза змінюється в певному концентраційному діапазоні вмісту бору в сплаві. Зміна розташування атомів бору в кристалічній ґратці  $\alpha$ -заліза призводить до зміни енергії зв'язку між атомами бору й заліза в кристалічній ґратці фериту в сплавах системи Fe-B-C. Оцінка енергії зв'язку між атомами Fe-Fe, Fe-C і Fe-B дозволяє встановити закономірності утворення сплавів системи Fe-B-C.

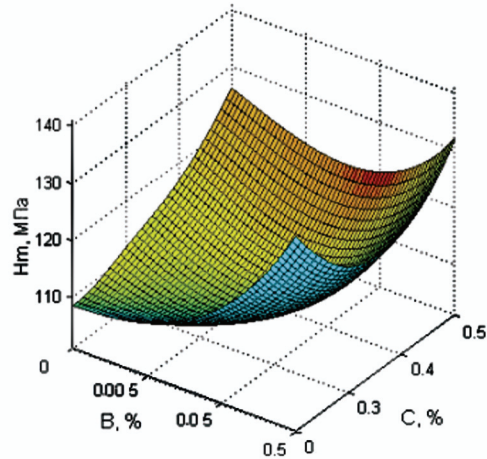


Рис. 2. Залежність мікротвердості фериту в борвмісному сплаві від вмісту вуглецю й бору

Для оцінки енергії зв'язку Fe-B, Fe-C, Fe-Fe використовували квантово-механічні розрахунки енергії зв'язку [6–8]. Для цього необхідно розв'язати ряд задач про:

- рух електрона в полі двох кулонівських центрів;
- розрахунок електрон-електронної взаємодії;
- вплив заряду, що проникає, на стійкість хімічних зв'язків.

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

$$E = E_0 + W_1 + W_2, \quad (1)$$

де  $E_0$  – енергія взаємодії часток при розв'язку двоцентрової задачі;  $W_1$  – збурення, що виникає при розв'язку двоцентрової задачі;  $W_2$  – збурення, що виникає під час проникнення заряду в кристалічну ґратку фериту.

Рівняння Шредингера для електрона, що знаходиться в полі двох кулонівських центрів, містить оператор потенціальної енергії [6–8]

$$\Delta\psi + 2[E + U(r_1, r_2)]\psi = 0,$$

де  $r_1$   $r_2$  – відстань від електрона до першого й другого атомів. Тоді рівняння Шредингера в еліпсоїдальних координатах має вигляд [6, 7]

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

де  $\psi$  – хвильова функція;  $R$  – відстань між атомами.

Рівняння (1) має розв'язок, якщо запропонований потенціал  $U(\lambda, \mu, \varphi)$  представити у вигляді суми кулонівського  $U_{кул}$  та коливального потенціалу  $U_{кол}$  [6, 7]

$$U_{кул}(\lambda, \mu, \varphi) = \frac{2}{R} \left[ \frac{Z_1}{\lambda + \mu} + \frac{Z_2}{\lambda - \mu} \right];$$

$$U_{кол}(\lambda, \mu, \varphi) = \frac{R^2 \omega^2}{8} (\lambda^2 + \mu^2),$$

де  $\omega$  – частота основних коливань атомів.

Розрахунок енергії зв'язку проводили за формулою [6–8]

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

де  $H_0$  – гамільтоніан двоцентрової задачі;  $\psi_{k,\Lambda,n}$  – хвильова функція у квантових станах  $k, \Lambda, n$ .

Енергія зв'язку в основному стані [6, 7]

$$E_{\frac{1}{2},0,0} = \frac{4 \left[ \frac{1}{2}(a - Z^+) + e^{4a} \cdot E_i(-4a) \cdot (a^2 - a \cdot Z^+ - \frac{1}{4}a) \right]}{R^2 \left[ \frac{1}{2a} - \frac{4}{3}a \cdot e^{4a} \cdot E_i(-4a) \right]},$$

де  $Z^\pm = Z_1 + Z_2$ ,  $Z_1, Z_2$  – заряди атомів,  $a = 0,5 + \sqrt{(Z_1 + Z_2)R + \gamma \omega^2 \Delta R}$ ;  $\Delta R$  – динамічні зміщення атомів з положення.

Розрахунок електрон-електронних взаємодій проводимо за формулою [6, 7]

$$E_{e-e} = \frac{4}{R \left[ \frac{1}{2a} - \frac{4}{3}a \cdot e^{4a} \cdot E_i(-4a) \right]^2}.$$

$$\cdot \left[ \left( \frac{3}{40a^2} + \frac{1}{20a^2} \right) \cdot (C + \ln 2a) + e^{8a} E_i^2(-8a) \left( \frac{3}{40a^2} + \frac{11}{20a} + \frac{7}{5} + \frac{8a}{15} \right) + e^{4a} E_i^2(-8a) \frac{4a^2}{15} + e^{4a} E_i^2(-4a) \left( -\frac{3}{20a^2} + \frac{1}{2a} - \frac{1}{5} \right) + \frac{1}{8a} - \frac{1}{10} \right].$$

Збурення  $W_1$ , що виникає під час розв'язку двоцентрової задачі, подано у виді

$$W_1 = (a + Z^+) \left[ \frac{1}{a} + \frac{2}{3} + \left( 4 + \frac{8a}{3} \right) e^{4a} E_i(-4a) \right] - \left[ -\frac{\Lambda^2 - 1}{4} \left[ \frac{11}{6} + \frac{2a}{3} + \left( 2 + 8a + \frac{8a^2}{3} \right) e^{4a} E_i(-4a) \right] - \frac{1}{6} - \frac{4}{15} a^2 e^{4a} E_i(-4a) \right] \cdot \frac{1}{R \left[ \frac{1}{2a} - \frac{4}{3}a \cdot e^{4a} \cdot E_i(-4a) \right]^2}.$$

Вплив атома, що проникає в кристалічну ґратку, розглянемо з точки зору впливу кулонівського центру на окремо вибраний хімічний зв'язок, як деяке збурення [6]

$$W_2 = \frac{2Z_3}{R} \sum_{p=0}^{\infty} \sum_{m=-p}^p (-1)^m (2p+1) \frac{(p-|m|)!}{(p+|m|)!} \times P_p^{|m|}(\lambda_<) Q_p^{|m|}(\lambda_>) P_p^{|m|}(\mu_3) Q_p^{|m|}(\mu_3) e^{im(\varphi - \varphi_3)}, \quad (2)$$

де  $\lambda_2 = \frac{r_1 + r_2}{R}$ ;  $\mu_2 = \frac{r_1 - r_2}{R}$ ;  $\lambda_{> / <}$  – більша або менша

з величин;  $P_p^{|m|}(\lambda_<)$  і  $Q_p^{|m|}(\lambda_>)$  – приєднані функції Лежандра I і II роду;  $Z_3$  – величина заряду, що проникає в кристалічну ґратку.

З урахуванням виразу (2),  $W_2$  набуває виду

$$W_2 = \sum_{i=1}^N \frac{4aZ_i}{R \left[ \frac{1}{2a} - \frac{4}{3}a \cdot e^{4a} E_i(-4a) \right]} \left\{ Q_i^2(\lambda_3) \left[ \frac{2}{3} e^{4a} E_i(-4a) - \frac{1}{4a^2} \right] - \frac{1}{8a^2 e^{2a(\lambda_3-1)}} [P_2^2(\lambda_3) P_2^2(\mu_3) - 1] \times \right. \\ \times \left[ e^{2a(\lambda_3+1)} E_i(-2a(\lambda_3+1)) - e^{2a(\lambda_3-1)} E_i(-2a(\lambda_3-1)) \right] - Q_2(\lambda_3) P_2(\mu_3) \left[ \frac{2}{3} e^{4a} E_i(-4a) + \right. \\ \left. + (\lambda_3^2 - 1) e^{2a(\lambda_3-1)} E_i(-2a(\lambda_3-1)) + e^{-2a(\lambda_3-1)} \left( \frac{1}{2a} - \frac{1}{4a^2} - \frac{\lambda_3}{2a} \right) + \frac{1}{4a^2} \right] + \\ \left. + Q_0(\lambda_3) P_2(\lambda_3) P_2(\mu_3) \left[ (\lambda_3^2 - 1) e^{2a(\lambda_3+1)} E_i(-2a(\lambda_3+1)) - \left( \frac{1}{2a} - \frac{1}{4a^2} - \frac{\lambda_3}{2a} \right) \right] e^{-2a(\lambda_3-1)} \times \right. \\ \left. \times P_2(\lambda_3) P_2(\mu_3) \cdot \left[ e^{4a} E_i(\lambda_3+1) E_i(-2a(\lambda_3+1)) + \frac{1}{2a} e^{-2a(\lambda_3-1)} \right] \right\}.$$

Розрахунок енергії зв'язку за виразом (1) у твердому розчині на основі  $\alpha$ -заліза показав, що найбільша енергія зв'язку відповідає зв'язку між іонами заліза й бору в позиції заміщення (рис. 3). Отримані результати узгоджуються з результатами, наведеними в роботі [7].

З аналізу результатів розрахунку енергії зв'язку між атомами вуглецю й заліза, бору й заліза видно, що для атоми вуглецю, більш вірогідно, будуть розташовуватися в оточенні атомів заліза, ніж атомів бору. Атоми бору в позиції проникнення в кристалічній ґратці  $\alpha$ -заліза мають більшу енергію зв'язку з

атомами заліза, ніж з атомами вуглецю. Дія атомів бору в позиції проникнення у твердому розчині на основі  $\alpha$ -заліза на атоми вуглецю сприяє утворенню навколо атомів бору зон, збіднених на вуглець. У твердому розчині в положенні проникнення бор, як і вуглець, присутній у вигляді позитивно заряджених іонів. Між ними діють сили електричного відштовхування, у результаті чого бор витісняє вуглець, підвищуючи його термодинамічну активність.

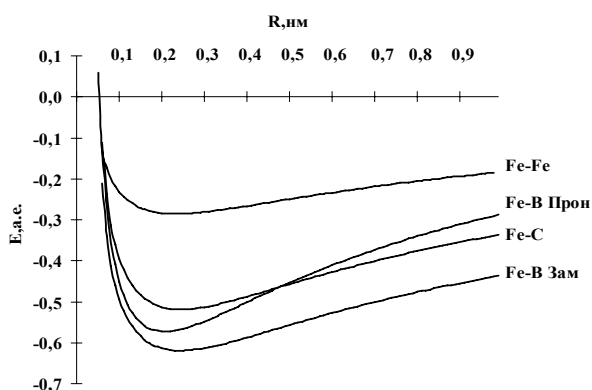


Рис. 3. Залежність енергії зв'язку від довжини зв'язку

Відношення атомного радіусу бору до атомного радіусу заліза становить приблизно 0,7, а розмір пор у кристалічній ґратці  $\alpha$ -заліза є значно меншим [4], і тому проникнення атомів бору в такі пори, при концентрації 0,0003% (мас.), має викликати значну зміну кристалічної ґратки (рис. 1).

Аналіз одержаних результатів показує, що при концентрації добавки бору 0,0003–0,003% (мас.) атоми бору займають позицію заміщення у твердому розчині на основі  $\alpha$ -заліза, у результаті чого спостерігається зменшення параметра кристалічної ґратки (рис. 1). При кількості 0,003% (мас.) атоми бору розміщуються не тільки у вузлах кристалічної ґратки, але й проникають у ґратку заліза, значно збільшуючи її параметр, що супроводжується зростанням мікротвердості (рис. 2).

Виходячи з одержаних результатів дослідження, можна зробити висновок, що бор може в  $\alpha$ -залізі утворювати як розчин заміщення, так і розчин проникнення. При цьому бор може утворювати як розчини одного типу, так і розчини, в яких частина атомів знаходиться у вузлах кристалічної ґратки, а частина проникає в міжвузловини.

**Висновки.** Позиція бору проникнення-заміщення у твердому розчині сплаву на основі  $\alpha$ -заліза системи Fe-B-C залежить від вмісту бору в сплаві. При вмісті бору в сплаві 0,0003–0,003% (мас.) атоми бору займають позицію заміщення у твердому розчині на основі  $\alpha$ -заліза, унаслідок чого спостерігається зменшення параметра кристалічної ґратки та мікротвердості. При кількості бору  $\geq 0,003\%$  (мас.) атоми розміщуються не тільки у вузлах кристалічної ґратки, але й проникають у кристалічну ґратку фериту, що узгоджується з розрахунковими даними.

### Список літератури / References

1. Научные и технологические основы микролегирования стали / [В.Л. Пилушенко, В.А. Вихлевщук, А.М. Поживанов и др.] – М.: Металлургия, 1994. – 384 с.

Pilyushenko, V.L., Vihlevschuk, V.A. and Pozhivanov, A.M., (1994), "Scientific and technological bases of microalloying steel", Metallurgiya, Moscow, 384 p.

2. Гаврилова В.Г. О типе растворения бора в аустените и его взаимодействие с дислокациями / В.Г. Гаврилова, И.Ф. Ткаченко, А.В. Белосточный // Металлознавство та термічна обробка металів. – 1999. – №4. – С. 56–58.

Gavrilova, V.G., Tkachenko, I.F. and Belostochny, A.V. (1999), "About the type of dissolved boron in the austenite and its interaction with dislocations", Metalloznavstvo ta termichna obrobka metaliv, no.4, pp. 56–58.

3. Парусов В.В. Прокат из борсодержащих сталей для высокопрочных крепежных изделий / В.В. Парусов, О.В. Парусов, А.Б. Сычков – Днепропетровск: Арт-Пресс, 2010. – 160 с.

Parusov, V.V., Parusov, O.V. and Sychkov, A.B. (2010), Prokat is borsoderzhashchikh staley dlya vysokoprochnykh krepazhnykh izdeliy [Rolled Metal of Boron Steels for High-Strength Hardware], Art-Press, Dnepropetrovsk, Ukraine.

4. Нестеренко А.М. Размерно-геометрические аспекты легирования стали бором и медью / А.М. Нестеренко, А.Б. Сычко // Металловедение и термическая обработка металлов. – 2004. – №5. – С. 61–63.

Nesterenko, A.M. and Sychko, A.B. (2004), "Volume-geometric factor of the doping steel with boron and cooper", Metallovedenie i termicheskaya obrabotka metallov, no.5, pp. 61–63.

5. Філоненко Н.Ю. Утворення твердих розчинів впровадження-заміщення в борвмісних сплавах / Н.Ю. Філоненко, І.М. Спиридонова // Фізика та хімія твердого тіла. – 2009. – Т.10. – №3. – С. 609–612.

Filonenko, N.Yu. and Spiridonova I.M. (2009), "Formation of solid solution and substitution of boron alloys steel", Fizyka i khimia tverdoho tila, Vol.10, no. 3, pp. 609–612.

6. Пивняк Г.Г. Устойчивость углеродосодержащих фаз в углях при прохождении слабого электрического поля / Г.Г. Пивняк, В.В. Соболев, А.С. Баскевич // Доп. НАН України. – 2012. – №2. – С. 107–113.

Pivnyak, G.G., Sobolev, V.V. and Baskevich, A.S. (2012), "Stability of carbon-bearing phase in coal on the passage of weak electric current", Reports Academy of Science of Ukraine, no.2, pp. 107–113.

7. Sobolev, V., Bilan, N., Fillipov A. and Baskevich, A. (2011), "Electric stimulation of reaction in coal", Technical and Geoinformational system in mining. – Taylor&Francis Group, London: CRC Press, pp. 125–129.

8. Устойчивость наноструктуры каменного угля при воздействии электрического тока / В.В. Соболев,

А.С. Баскевич, Н.В. Билан, А.О. Филиппов // Науковий вісник Національного гірничого університету. – Дніпропетровськ, 2011. – №6 (126). – С. 80–84.

Sobolev, V.V., Baskevich, A.S., Bilan, N.V. and Filippov, A.O. (2011), "Resistance of the coal nanostructure to the electric current influence", *Naukovyi visnyk Natsionalnoho hirnychoho universytetu*, no.6 (126), pp. 80–84.

**Цель.** Цель работы заключалась в исследовании влияния содержания бора на параметр кристаллической решетки и физические свойства феррита в сплавах системы Fe-B-C. На основе квантово-механических представлений провести расчет энергии химической связи между различными компонентами сплава системы Fe-B-C и определить вероятность размещения атомов бора в твердом растворе этих сплавов, установить, к какому типу твердого раствора бора (внедрение, замещение) относятся сплавы системы Fe-B-C.

**Материалы и методика.** В работе использовали сплавы с содержанием бора 0,0001–0,1% (мас.) и углерода 0,005–0,5 % (мас.). Для исследования свойств полученных сплавов использовали рентгеноструктурный и дюриметрический анализы.

**Результаты.** Для определения позиции атомов бора в кристаллической решетке  $\alpha$ -железа с помощью квантово-механических расчетов провели оценку энергии химической связи между атомами железа, железа и углерода, железа и бора в различных его положениях (внедрения и замещения). Атомы бора в позиции внедрения в кристаллической решетке  $\alpha$ -железа имеют большую энергию связи с атомами железа, чем атомы углерода. Установлено, что, если энергия связи между атомами железа и бора в позиции внедрения больше энергии связи между атомами железа и углерода не менее чем на 10%, то в феррите возможна конкуренция между атомами бора и углерода.

**Научная новизна.** Проведенные анализы показали, что существует экстремальная зависимость изменения параметра кристаллической решетки феррита и микротвердости от содержания бора для системы Fe-B-C. При увеличении содержания бора в сплаве от 0,0003 до 0,003 % (мас.) параметр кристаллической решетки феррита и микротвердость уменьшаются, а при увеличении содержания бора в сплаве более 0,003 % (мас.) – приведенные параметры возрастают.

**Практическая значимость.** Установлено, что бор может образовывать как полностью раствор одного типа (замещения или внедрения) в  $\alpha$ -железе, так и раствор, в котором часть атомов находится в узлах кристаллической решетки, а часть внедряется в междоузлия. Проведенные исследования показали, что воз-

можно управлять позицией бора и физическими свойствами в твердом растворе  $\alpha$ -железа системы Fe-B-C.

**Ключевые слова:** *твердый раствор, параметр решетки феррита, энергии связи*

**Purpose.** To analyze the effect of boron content on the parameter of ferrite crystal lattice and on the physical properties of Fe-B-C system alloys. To compute the energy of a chemical bound between various components of a Fe-B-C system alloy on the basis of quantum-mechanical representation and to establish the probability of boron atoms array in a solid solution of these alloys. To establish the type of a solid solution (penetration or substitution) for Fe-B-C system alloys.

**Methodology.** We considered the alloys with boron content of 0.0001–0.1% (w.) and with carbon content of 0.005–0.5% (w.). To study the properties of obtained alloys we used X-ray and durametric analyses.

**Findings.** To locate the boron atoms position in a crystal lattice of  $\alpha$ -iron we estimated the energy of chemical bound between iron atoms, iron and carbon atoms, iron and boron atoms for its different positions (penetration and substitution) by means of quantum-mechanical calculations. From the analysis of the results of calculation for binding energy between carbon and iron atoms, boron and iron atoms, it follows, that probability of carbon atom array in surroundings of iron atoms is more, than boron atoms. Besides, when it was considered that if the binding energy between iron and boron atoms in penetrating position is at least 10% higher than binding energy between iron and carbon atoms, the competition between boron and carbon atoms in ferrite can appear.

**Originality.** The performed X-ray and durametric analyses show, that there is an extreme dependence for the change of parameter of ferrite crystal lattice and for the microhardness on the boron content for Fe-B-C system. Under boron content of 0.0003–0.003 % (w.) in alloy the parameter of ferrite crystal lattice and microhardness decreases. As the boron content increases over >0.003% (w.) the above parameters increase too.

**Practical value.** We established, that boron can generate both: the solution of the only type entirely (substitution or penetration) in  $\alpha$ -iron and the solution, in which some of atoms are located in the sites of crystal lattice, and some of atoms penetrate in-between the lattice sites. The performed studies of boron position in a solid solution of  $\alpha$ -iron enable us to control the physical properties of alloys for Fe-B-C system.

**Keywords:** *solid solution, ferrite lattice parameters, binding energy*

*Рекомендовано до публікації докт. техн. наук О.В. Солодянкиним. Дата надходження рукопису 02.07.12.*