

УДК 539.22.23;541.412

**В. И. Бутенко**, д-р техн. наук, профессор,**И. В. Садовая**, инженер

Донской государственный технический университет

Тел.: + 7-863-2-738-385; +7-928-600-57-61; E-mail: [butenkowiktor@yandex.ru](mailto:butenkowiktor@yandex.ru)

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МИКРОЧАСТИЦ В МОДИФИЦИРОВАННОМ МАТЕРИАЛЕ ПОВЕРХНОСТНОГО СЛОЯ ДЕТАЛИ

*Выполнено аналитическое исследование энергетического взаимодействия микрочастиц модифицированного слоя на поверхности детали, определившее их закономерности и доказавшее соответствие удельной накопленной энергии деформации материала поверхностного слоя величине удельной энергии адгезии микрочастиц, зависящей от внешних воздействий на деталь в процессе её обработки и эксплуатации. Определены обоснованные подходы к выбору компонентов для модифицирования материала поверхностного слоя детали с учётом их технологической совместимости.*

**Ключевые слова:** микрочастицы, деталь, поверхностный слой, взаимодействие, энергия, технологическая совместимость.

**V. I. Butenko, I.V. Sadovaya**

## ENERGY INTERACTION OF MICROPARTICLES IN MODIFIED MATERIAL OF THE SURFACE LAYER OF THE PART

*An analytical study of the energy interaction of the microparticles of the modified layer on the surface of the part was carried out which determined their regularities and proved the correspondence of the specific accumulated energy of deformation of the material of the surface layer to the specific energy of adhesion of microparticles which depends on external charges on the part. Reasonable approaches to the selection of components for modifying the material of the surface layer of the part are determined taking into account their technological compatibility.*

**Keywords:** microparticles, detail, surface layer, interaction, energy, technological compatibility.

### 1. Введение

В работе [1] получена формула определения плотности внутренней энергии материала, которая позволяет в общем оценивать склонность материала к накоплению повреждаемостей. Использование её открывает возможности в установлении функциональной связи технологической совместимости модифицирующих элементов материала поверхностного слоя детали с его энергетическим состоянием, а также выявить связи компонентов внутри него при создании многокомпонентных функциональных слоёв или покрытий. Результаты выполненных исследований, представленные в работе [2], свидетельствуют о том, что в сложных модифицированных слоях материала поверхностного слоя деталей или созданных на их поверхностях многокомпонентных функциональных слоях взаимодействие микрочастиц складывается из суммы различных связей, обусловленных химическими, молекулярными, электрическими и другими взаимодействиями. При этом под микрочастицами понимаются отдельные химические соединения (например, карбид железа  $Fe_3C$ ) или их структурные объединения (комплексы) наноразмерной величины в виде зёрен, кластеров и т.д. Их энергетическое взаимодействие во многом определяет эффективность создания того или иного модифицированного или многокомпонентного функционального слоя на поверхности детали с учётом конкретных условий её эксплуатации.

## 2. Основное содержание и результаты работы

В общем случае совместное действие микрочастиц определяет величину потенциальной энергии  $\mathcal{E}_\Sigma$ , которая при наличии ван-дер-ваальсовых сил может быть представлена следующим выражением [3]:

$$\mathcal{E}_\Sigma = -\frac{A}{r^6} + B\varepsilon_\Sigma^{-cr}, \quad (1)$$

где  $A$  – коэффициент, зависящий от ориентационного, поляризационного или дисперсионного эффектов; принимает соответствующие значения через дипольный момент, температуру и другие параметры вещества [1, 3];  $B$  и  $c$  – некоторые константы, характеризующие физико-механические свойства вещества;  $\varepsilon_\Sigma$  – элементарная энергия микрочастицы, определяемая в зависимости по зависимостям, полученным в работе [1];  $r$  – расстояние между микрочастицами.

В выражении (1) первое слагаемое – потенциал ван-дер-ваальсовых сил притяжения микрочастиц, а второе – потенциал сил отталкивания, который часто представляют в виде  $B/r^m$ , где показатель степени  $m > 6$  [3]. Графическое представление зависимости суммарной потенциальной энергии  $\mathcal{E}_\Sigma$  от расстояния между микрочастицами в материале поверхностного слоя детали  $r$  в общем виде дано на рис. 1.

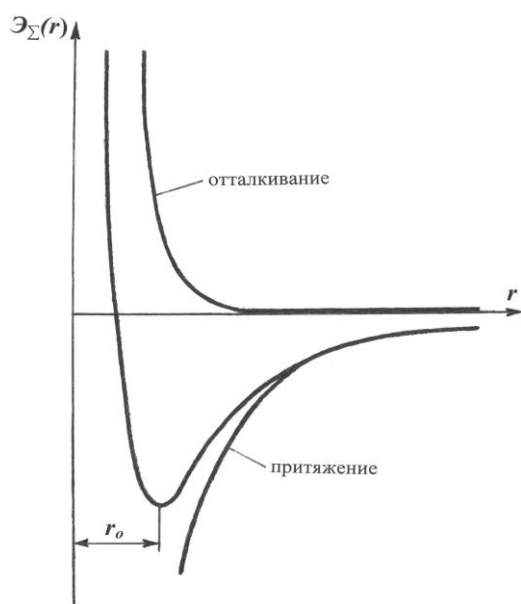


Рисунок 1. Графическая интерпретация зависимости потенциальной энергии  $\mathcal{E}_\Sigma$  от расстояния между микрочастицами  $r$

Анализ результатов выполненных исследований по установлению связей между микрочастицами, выполненный в работе [3], позволил сделать вывод о том, что энергия межмолекулярных связей на 2-3 порядка ниже энергии внутримолекулярных связей, а радиус их действия, наоборот, на порядок больше. Например, если энергия химических сил связи измеряется величиной 100 – 500 ккал/моль, то энергия межмолекулярных сил связи, в частности ван-дер-ваальсовых, определяется величиной порядка 0,08 – 0,3 ккал/моль, а равновесные расстояния  $r_0$  составляют соответственно 1 – 3 Å и 3 – 50 Å. Этот факт, как и многие другие [1, 2, 4, 5] свидетельствуют о том, что, не смотря на

огромное многообразие микрочастиц в модифицированном материале поверхностного слоя детали, отличающихся размерами, электрическими зарядами, химическим составом и т.д., а также природы их взаимодействия, между ними имеется ряд общих закономерностей, справедливых независимо от типа микрочастиц и физико-химической природы связей. Эти закономерности должны учитываться как при анализе напряжённого и деформированного состояния материала поверхностного слоя детали, так и при установлении технологической совместимости используемых компонентов при его модифицировании. К ним относятся следующие положения:

1) как внутримолекулярные, так и межмолекулярные взаимодействия микрочастиц в материале поверхностного слоя детали приводят к появлению так называемых микросил, которые могут быть либо силами притяжения частиц  $F_{np}$ , резко убывающими с увеличением расстояния  $r$ , либо силами отталкивания  $F_{om}$ , неограниченно возрастающими по мере уменьшения расстояния  $r$  между микрочастицами;

2) общая сила взаимодействия микрочастиц  $F$ , представляющая собой сумму микросил  $F_{np}$  и  $F_{om}$ , тесно связана с суммарной потенциальной энергией  $\mathcal{E}(r)$ , которая может быть определена из зависимости, представленной на рис. 1. Исходя из неё, приближённо функция  $\mathcal{E}(r)$  для всех случаев взаимодействия двух микрочастиц может быть выражена следующей формулой:

$$\mathcal{E}(r) = -\frac{A}{r^n} + \frac{B}{r^m}. \quad (2)$$

В формуле (2) первое слагаемое определяет потенциал сил притяжения микрочастиц, а второе – отталкивания. Коэффициенты  $A$ ,  $B$  и показатели степеней  $n$ ,  $m$  определяются природой микрочастиц и сил связей, причём  $m > n$  [3];

3) если во взаимодействии микрочастиц преобладают силы отталкивания  $F_{om}$ , то частицы удаляются друг от друга; в противном случае они приближаются друг к другу до тех пор, пока усилия притяжения  $F_{np}$  и отталкивания  $F_{om}$  взаимно не уравновесятся. Такое равновесное положение во взаимодействии между микрочастицами соответствует минимуму потенциальной энергии  $\mathcal{E}(r)$ , то есть нижней точке энергетической кривой, представленной на рис. 1. При этом равновесное расстояние  $r_0$  может быть определено согласно рассматриваемого условия при  $F = 0$ , исходя из зависимости

$$F = \frac{d\mathcal{E}(r)}{dr}; \quad (3)$$

4) равновесное состояние микрочастиц в материале поверхностного слоя не обязательно должно соответствовать их неподвижному состоянию. Под влиянием внешних факторов (давления, температуры, воздействия электрических, магнитных полей и т.д.) микрочастицы могут перемещаться в пространстве (в материале поверхностного слоя), создавая флуктуации суммарной потенциальной энергии  $\mathcal{E}(r)$ . Согласно исследованиям, представленным в работе [5], вблизи равновесного состояния  $r_0$  результирующая энергия взаимодействия микрочастиц материала сформировавшегося поверхностного слоя  $\mathcal{E}(r)$  может быть определена по формуле

$$\mathcal{E}(r) = \begin{cases} \beta_1(r - r_0)^2, & 0 \leq r \leq r_0 + \Delta r_{0,1}; \\ \beta_2(r - r_0)^2, & r_0 + \Delta r_{0,1} \leq r \leq r_0 + \Delta r_{0,2}, \end{cases} \quad (4)$$

где  $\beta_1$  и  $\beta_2$  – коэффициенты пропорциональности, зависящие от физико-механических свойств микрочастиц и соотношения расстояния между ними  $r$  и средним размером микрочастиц [5];

$\Delta r_{0,1}$  и  $\Delta r_{0,2}$  – расстояния между микрочастицами, до которых реализуется равновесное положение во взаимодействии их между собой при коэффициентах пропорциональности  $\beta_1$  и  $\beta_2$ , причём  $\beta_1 > \beta_2$ ;

5) в процессе модифицирования материала поверхностного слоя детали или создания на нём многокомпонентного функционального слоя силы взаимодействия  $F$ ,  $F_{np}$ ,  $F_{от}$  имеют определённое направление, поэтому, несмотря на сложную природу их происхождения, схематично их можно изобразить векторами;

6) переход к характеристике макросистем, образуемых большим числом микрочастиц и их комплексов при модифицировании материала поверхностного слоя детали или создания на нём многокомпонентного функционального слоя, может быть осуществлён с помощью принципа аддитивности, получившего достаточно широкое распространение при объяснении многих экспериментальных фактов. Согласно этому принципу свойства всей системы в первом приближении определяются суммированием свойств отдельных элементов. Отсюда вытекает, например, невозможность разрушения материального тела, т.е. разделение его на отдельные части, при всестороннем сжатии, когда все микрочастицы тела сближаются (однако это верно до тех пор, пока не начнётся разрушение электронных оболочек атомов). Следует также иметь в виду, что при рассмотрении макросистем достаточно учитывать взаимодействие лишь ближайших микрочастиц, так как микрочастицы, находящиеся на расстояниях  $r$ , много больших  $r_0$ , практически не взаимодействуют;

7) в случае отсутствия внешнего воздействия на материал поверхностного слоя детали микрочастицы находятся в квазиравновесном устойчивом состоянии [6], при котором в любом условно принятом малом объёме материала поверхностного слоя детали микросилы, силы притяжения и отталкивания между микрочастицами в среднем компенсируют друг друга, а сами микрочастицы находятся в термодинамически равновесном устойчивом состоянии;

8) вследствие флуктуации тепловой энергии, вызванной процессом обработки детали или действием множества случайных эксплуатационных факторов, для микрочастиц материала поверхностного слоя в каждый момент времени имеет место более или менее значительное отклонение их от равновесного состояния и переход материала поверхностного слоя, как системы, в новое равновесное состояние. Следует отметить, что такой переход становится возможным при условии преодоления микрочастицами потенциального барьера, уровень которого определяется их энергией активации [4, 5].

Существует, по-видимому, корреляция между потенциальной энергией  $\mathcal{E}(r)$  и удельной накопленной энергией материала поверхностного слоя детали  $\mathcal{E}_{yd}$ . Действительно, прочность сцепляемости слоёв и покрытий с основным материалом детали  $\tau_{сц}$  зависит от адгезионной силы  $F_{ад}$ , величина которой определяется сложными процессами, протекающими в материале поверхностного слоя при его формировании. Чтобы условно разъединить модифицированный или многокомпонентный функциональный слой и основной материал поверхности детали, требуется совершить работу, необходимую для проведения возникших между ними сил притяжения, которые составляют большую (основную) часть адгезионной силы  $F_{ад}$ . Для этого необходимо увеличить потенциальную энергию микрочастиц модифицированного или многокомпонентного слоя  $\mathcal{E}(r)$  на определённую величину за счёт сообщения им дополнительной энергии, т.е. совершить некоторую работу  $A_{вн}$ . При этом величина работы  $A_{вн}$  равна произведению числа взаимодействующих микрочастиц модифицированного или многокомпонентного функционального слоя с основным материалом поверхностного слоя детали  $N$  на плотность потока энергии или удельную накопленную энергию деформации  $\mathcal{E}_{yd}$ , передавае-

мую микрочастицами нижним слоям поверхностного слоя, которую можно определить по формулам, приведённым в работах [7 – 11].

В работе [12] предложено энергию адгезии равновесной системы  $\mathcal{E}_{ad}$ , состоящей из основного материала поверхности детали (подложки) и покрытия (или модифицированного слоя), рассматривать как сумму энергий двух подсистем: энергии связи микрочастиц основного металла  $\mathcal{E}_m$  и энергии взаимодействия микрочастиц модифицированного слоя или покрытия  $\mathcal{E}(r)$ , т.е.

$$\mathcal{E}_{ad} = [\mathcal{E}_m \pm \mathcal{E}(r)] \cdot S, \tag{5}$$

где  $S$  – площадь взаимодействия двух подсистем поверхностного слоя детали.

Знак «+» в формуле (5) принимается в случае модифицирования или создания многокомпонентного функционального слоя с использованием высококонцентрированных источников энергии (плазмы, лазера и других), а знак « – » принимается при механическом или электролитическом модифицировании материала поверхностного слоя, нанесении на него покрытия или создании многокомпонентного функционального слоя.

Удельная энергия связи микрочастиц основного металла  $\mathcal{E}_m$  может быть определена по формуле [5]:

$$\mathcal{E}_m = \sum_{i=1}^3 N \left( \mathcal{E}_{\Sigma_i} - W_i n_i K_B \frac{\Theta}{2} \right), \tag{6}$$

где  $W_i$  – вероятность возбуждения степеней свободы микрочастицы, которые приводят к разрыву энергии связи;  $n_i$  – число степеней свободы, которые участвуют в ослаблении бинарного взаимодействия микрочастиц;  $K_B$  – постоянная Больцмана;  $\Theta$  – температура материала поверхностного слоя, Кельвин.

Учитывая, что энергия взаимодействия микрочастиц модифицированного слоя или покрытия  $\mathcal{E}(r)$  определяется по формуле (4), для энергии адгезии  $\mathcal{E}_{ad}$  справедлива следующая зависимость:

$$\mathcal{E}_{ad} = \left[ \sum_{i=1}^3 N \left( \mathcal{E}_{\Sigma_i} - W_i n_i K_B \frac{\Theta}{2} \right) \pm N \left\{ \begin{array}{l} \beta_1 (r - r_0)^2, 0 \leq r \leq r_0 + \Delta r_{0,1}; \\ \beta_2 (r - r_0)^2, r_0 + \Delta r_{0,1} \leq r \leq r_0 + \Delta r_{0,2} \end{array} \right\} \right] S. \tag{7}$$

В общем случае величина энергии  $\mathcal{E}_{ad}$ , определяемая по формуле (7), соответствует накопленной энергии деформации, удельная величина которой  $\mathcal{E}_{y\partial}$  может быть выражена через зависимости, приведённые в работах [7 – 10]:

$$\mathcal{E}_{y\partial} = Q \cdot G \cdot b^2 \cdot \rho; \quad \sigma = \sigma_m + \alpha \cdot G \cdot b \cdot \sqrt{\rho}; \quad G = \frac{\sigma - \sigma_m}{\alpha \cdot b \cdot \sqrt{\rho}};$$

$$\mathcal{E}_{y\partial} = \frac{Q(\sigma - \sigma_m) \cdot \sqrt{\rho}}{\alpha \cdot b}, \tag{8}$$

где  $Q$  – коэффициент пропорциональности;  $Q = 0,5 - 1$  [8 – 10];  $\sigma$  – напряжение, необходимое для движения подвижных дислокаций, Па;  $\sigma_m$  – предел текучести материала детали, Па;  $\rho$  – плотность дислокаций, см<sup>-2</sup>;  $\alpha$  – параметр междислокационного взаимодействия;  $b$  – вектор Бюргерса.

Были выполнены сравнительные расчёты удельной энергии адгезии микрочастиц  $\mathcal{E}_{ad}$  и удельной накопленной энергии деформации  $\mathcal{E}_{y\partial}$  модифицированного медью поверхностного слоя детали площадью  $S = 1$  см<sup>2</sup> в зависимости от температуры  $\Theta$ . Медный слой толщиной  $10 \pm 0,1$  мкм наносился на плоские пластины из стали 12ХНЗА размером 100x100 мм электролитическим путём по технологии, изложенной в работе [2]. Перед нанесением медного слоя поверхности пластин шлифовались и подвергались

предварительному контролю по параметрам шероховатости  $Ra$ , микротвёрдости  $Hv$ , глубине слоя с изменёнными физико-механическими свойствами  $\Delta H$  и плотности дислокаций  $\rho$ . Для исследования отбирались пластины, имеющие  $Ra = (1,2 - 1,5)$  мкм,  $H_{0,49} = (2,6 - 2,8)$  ГПа,  $\Delta H = (0,30 - 0,32)$  мм,  $\rho = (5 - 6) \cdot 10^{10}$  см<sup>-2</sup>. Согласно данным, приведённым в работах [3 – 5, 12], при вычислении удельной энергии адгезии  $\mathcal{E}_{ad}$  были приняты следующие значения параметров, входящих в зависимость (7):  $n_i = 3$ ,  $r = 5,6 \text{ \AA}$ ,  $r_o = 10 \text{ \AA}$ ,  $N = 3,1 \cdot 10^{14}$ ,  $K_B = 1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К,  $\beta_1 = 0,35$ . Вероятность возбуждения степеней свободы микрочастиц  $W_i$  определялась из функции распределения Максвелла-Больцмана по энергетическим уровням [5].

Расчёты удельной накопленной энергии деформации  $\mathcal{E}_{y\delta}$  проводились как для поверхности пластины после шлифования, так и после нанесения медного слоя. При этом плотность дислокаций материала поверхностного слоя детали  $\rho$  определялась по уширению дифракционных линий, полученных на рентгеновском дифрактометре «ДРОН-3М».

На рис. 2 приведены результаты расчётов  $\mathcal{E}_{y\delta}$  и  $\mathcal{E}_{ad}$  в зависимости от температуры  $\Theta$ , из анализа которых следует, что вычисленная по формуле (7) удельная энергия адгезии  $\mathcal{E}_{ad}$  с погрешностью (10 – 15)% определяет удельную накопленную энергии деформации  $\mathcal{E}_{y\delta}$ . Это позволяет выполнять подбор компонентов для создаваемых на

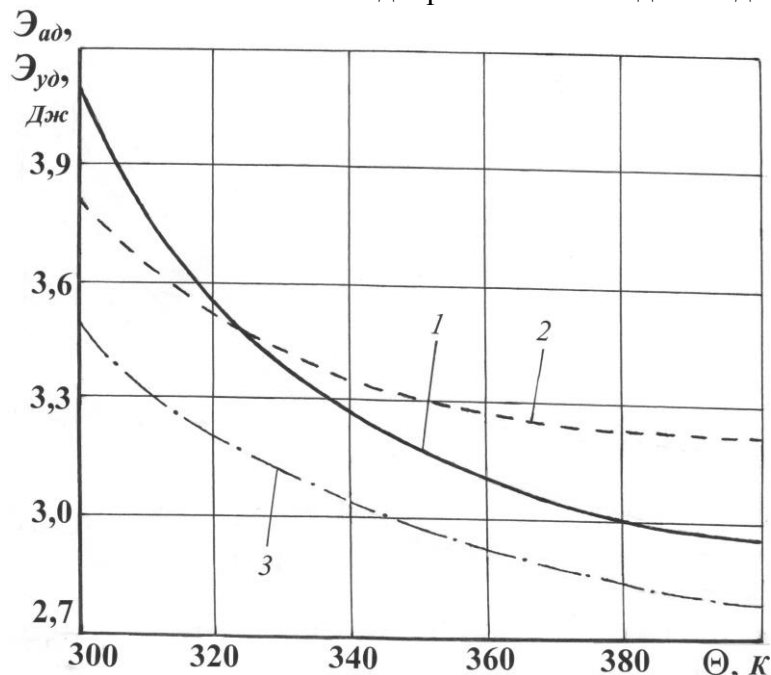


Рисунок 2. Расчётные значения  $\mathcal{E}_{ad}$  и  $\mathcal{E}_{y\delta}$  поверхностей деталей в зависимости от температуры  $\Theta$ : 1 –  $\mathcal{E}_{ad}$  поверхности с медным слоем; 2 –  $\mathcal{E}_{y\delta}$  шлифованной поверхности; 3 –  $\mathcal{E}_{y\delta}$  поверхности с медным слоем.

поверхности детали модифицированных слоёв по их адгезионному взаимодействию с основным материалом, что во многих случаях значительно проще осуществлять в производственных условиях [2, 7].

### 3. Заключение

Таким образом, в процессе формирования поверхностного слоя при механической обработке детали, а также при создании на её поверхности модифицированного

или многокомпонентного функционального слоя в результате внешних воздействий, обусловленных механическими, тепловыми, структурно-фазовыми и другими явлениями, изменяется энергетическое состояние материала поверхности, оказывающее влияние на её эксплуатационные свойства. Изменение энергетического состояния модифицированного материала поверхностного слоя детали, вызванное энергетическим взаимодействием микрочастиц, входящих в его состав, является определяющим фактором технологической совместимости компонентов модифицированного слоя с основным материалом детали.

#### ЛИТЕРАТУРА:

1. Бутенко, В. И. Структура и потенциал трибоконтакта поликристаллических материалов / В. И. Бутенко. – Ростов-на-Дону: ДГТУ, 2018. – 160 с.
2. Бутенко, В. И. Модифицированные и многокомпонентные функциональные слои на поверхностях деталей машин / В.И. Бутенко. – Ростов-на-Дону, 2016. – 235 с.
3. Огибалов, П. М. Механика полимеров / П. М. Огибалов, В. А. Ломакин, Б. П. Кишкин. – Москва: Изд-во МГУ, 1975. – 528 с.
4. Бутенко, В. И. Высокопрочные и сверхпрочные состояния металлов и сплавов / В. И. Бутенко. – Таганрог: Изд-во ТРТУ, 2003. – 219 с.
5. Бутенко, В. И. Физико-технологические основы формирования управляемых структур сталей и сплавов / В. И. Бутенко. – Таганрог: Изд-во ТРТУ, 2004. – 264 с.
6. Бутенко, В. И. Формирование и изнашивание поверхностного слоя детали / В.И. Бутенко. – Таганрог: Изд-во ТРТУ, 1999. – 193 с.
7. Безъязычный, В. Ф. Технологическое обеспечение параметров состояния поверхностного слоя деталей машин при упрочнении в процессе шлифования / В.Ф. Безъязычный, М. А. Прокофьев, А. Н. Сулягин // Упрочняющие технологии и покрытия. – 2012. – №1. – С. 3 – 6.
8. Прокофьев, М. А. Энергетический критерий оптимизации режимов обработки деталей шлифованием / М.А. Прокофьев // Машиностроение – основа технологического развития России (ТМ-2013): Материалы V Междунар. науч.-техн. конф. – Курск: Изд-во Юго-Западного гос. ун-та, 2013. – С. 334 - 336.
9. Прокофьев, М. А. Взаимосвязь скрытой энергии деформации с технологическими условиями механической обработки / М. А. Прокофьев, Н. В. Виноградова // Упрочняющие технологии и покрытия. – 2011. – №1. – С. 3 - 7.
10. Тимофеев, М.В. Методика и аппаратура измерения накопленной энергии деформации в поверхностном слое деталей машин / М.В. Тимофеев, М.А. Прокофьев // Научно-технологические технологии в машиностроении и авиадвигателестроении (ТМ-2012): Материалы IV Междунар. науч.-техн. конф. Ч.II. – Рыбинск: Изд-во РГАТУ, 2012. – С. 25 - 29.
11. Лебедев, В. А. Технология динамических методов поверхностного пластического деформирования / В. А. Лебедев. – Ростов-на-Дону: ДГТУ, 2006. – 183 с.
12. Кабалдин, Ю. Г. Квантово-механическое моделирование энергии адгезии наноструктурных покрытий с режущим инструментом и с обрабатываемым материалом / Ю. Г. Кабалдин, Е. Е. Власов, А. М. Кузьмишина // Упрочняющие технологии и покрытия. – Том 14. – 2018. – №8(64). – С. 339 - 343.

Поступила в редакцию 15.01.2020 г.