

ХИМИЧЕСКИЙ ДИЗАЙН

(ОТДЕЛЬНЫЙ ОТТИСК2)

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ
МОДЕЛИ МЕЗАХИМИИ В
ПРОПЕДЕВТИКЕ МЕТАХИМИИ



Chem.Lab.NCD

Новосибирск, 2014

**Квазиатомные модели КЛОП и КРЭП в мезаструктуре
физико-химического материаловедения
конструкционных свойств сталей**

Кутолин С.А.

профессор, доктор химических наук,

академик МАН ЦНЗ и РАТ.

Новосибирск, Россия

РЕФЕРАТ: В работе представлены новые теоретические и экспериментальные результаты в области исследования методом компьютерного моделирования свойств конструкционных сталей. Построены модели растворимости в железе элементов на основе их квазиатомного электронного строения и теоретически предсказаны параметры растворимости. На основании построенных моделей рассчитываются такие механические свойства сталей как предел прочности, предел текучести, твердость, относительное удлинение, относительное сужение, ударная вязкость. Ранее опубликованная интегрированная вычислительная среда УСМО (см. Монографию: С.А. Кутолин, В.И. Котюков, Г.М. Писиченко “Кибернетические модели в материаловедении” Новосибирск: Chem. Lab. NCD, 1996. 232 С.) является прекрасным пособием для проведения необходимых расчетов на персональной ЭВМ с использованием результатов настоящей монографии для прогностических анализов в области конструирования свойств сталей с заранее заданными свойствами перед проведением дорогостоящих натуральных экспериментов.

Квазиатомные модели КЛОП и КРЭП

Под квазиатомной моделью вещества понимается такое конденсированное состояние (жидкое или твердое), которое составлено из квазиатомов, т.е. по существу квазичастиц, представляющих такую суперпозицию частиц, что распределение квазичастиц по импульсам совпадает с распределением в идеальном газе. Таким образом, квазиатом представляет

собой атом, окруженный облаком других атомов. В этом смысле конфигурационная модель вещества (КМВ), развитая Г.В. Самсоновым применительно к пониманию квазиатома, представляет собой устойчивую конфигурацию электронов, возникшую в суперпозиции s , p , d , f — электронов. Такая модель уже по существу содержит приближение слабой и сильной кулоновской внутриатомной корреляции, понимает твердое тело как суперпозицию атомной и зонной модели вещества. Эта модель в квантовомеханическом понимании вводит при решении уравнения Шредингера для такой конфигурационной системы гамильтониан Хаббарда, удовлетворяющий интерполяционной теории, в которой проявляются в качестве конечных результатов одноэлектронно-зонная и атомная модель вещества.

В отличие от квантовомеханического подхода метод приближения случайных фаз для квазичастиц классифицирует состояние электронного газа по плотности, рассматривая систему основных, коллективизированных и локализованных состояний (КЛО) как совокупность состояний, где плотность электронов n определяется как функция безразмерного параметра r_s , измеренного в боровских радиусах d_0

$$\frac{1}{n} (\text{см}^3/\text{электрон}) = \frac{4}{3} \pi (r_s \cdot d_0)^3 \quad (1)$$

Статистическая модель (КЛО) М.И. Корсунского с учетом поляронных p -состояний, т. е. состояний, в которых принимают участие состояния типа валентный электрон-фонон, т.е. электрон — колебательные состояния конденсированной системы, позволили вычислить энергию основного состояния квазиатомов и модели КЛОП:

$$E_0 = \frac{2,21}{r_s^2} N_{\text{e}}^{5/3} - \frac{0,916}{r_s} N_{\text{e}}^{1/3} + 0,62 N_{\text{e}}^{4/3} \ln r_s + \\ + \frac{1,79}{r_s} (z - N_{\text{e}})^{4/3} + \frac{2,66}{r_s^{3/2}} (z - N_{\text{e}})^{3/2} + (z - N_{\text{e}}) \left[\frac{a^2}{r_s^2} + \frac{b^2}{r_s^{5/2}} \right], \quad (2)$$

где z — общее число электронов, равное заряду атома; N_{e} — число локализованных электронов; $(z - N_{\text{e}})$ — число локализованных электронов.

Тогда, по крайней мере, основные значения E_0 соответствуют самой интересной, промежуточной области реальных металлов ($r_s = 1,8 + 5,6$). И, соответственно, металлоподобным фазам и легированным сталям. При этом коэффициенты a , b принимают значения в КЛО соответственно 1,79 и 2,66, а модели КЛОП принимаются равными трем.

Укажем, что развитие модели КЛОП как статистического приближения квазиатомной модели вещества имеет свое продолжение в рамках стандартных состояний (КЛОПС) и упругих смещений в твердом теле (КЛОПУС), развитых в последнее время.

С другой стороны, в квантовомеханической системе взаимодействия квазичастиц в области поверхности Ферми укажем, что для электронов в металлоподобных фазах и сплавах

разрыв непрерывности вблизи $|k| = k_F$ существует с точностью до 10^{-4} эВ(!), а скачок функции распределения по импульсам существует и в системе с взаимодействием, однако при этом величина скачка меньше 1, а этот важный теоретический вывод позволяет, используя представления одноэлектронного приближения, строить карты распределения энергии E валентных электронов для квазиатомов конденсированной системы в форме зависимостей $E(k)$ как для металлов, их сплавов, так и карбидов (рис. 1 а-в), используя в качестве приближения обычный потенциал Томаса-Ферми, но заменяя его в практических расчетах такими значениями эффективных потенциалов, которые бы для глубоколежащих уровней карты распределения электронных полос были равны или близки их потенциалам ионизации, а для уровней и подуровней электронных полос описывались бы псевдокулоновским потенциалом типа потенциала Слейтера:

$$V_{\text{эфф}}(r) \cong \frac{e^2}{r} e^{-\lambda r},$$

где λ , см^{-1} , — экранизированный потенциал.

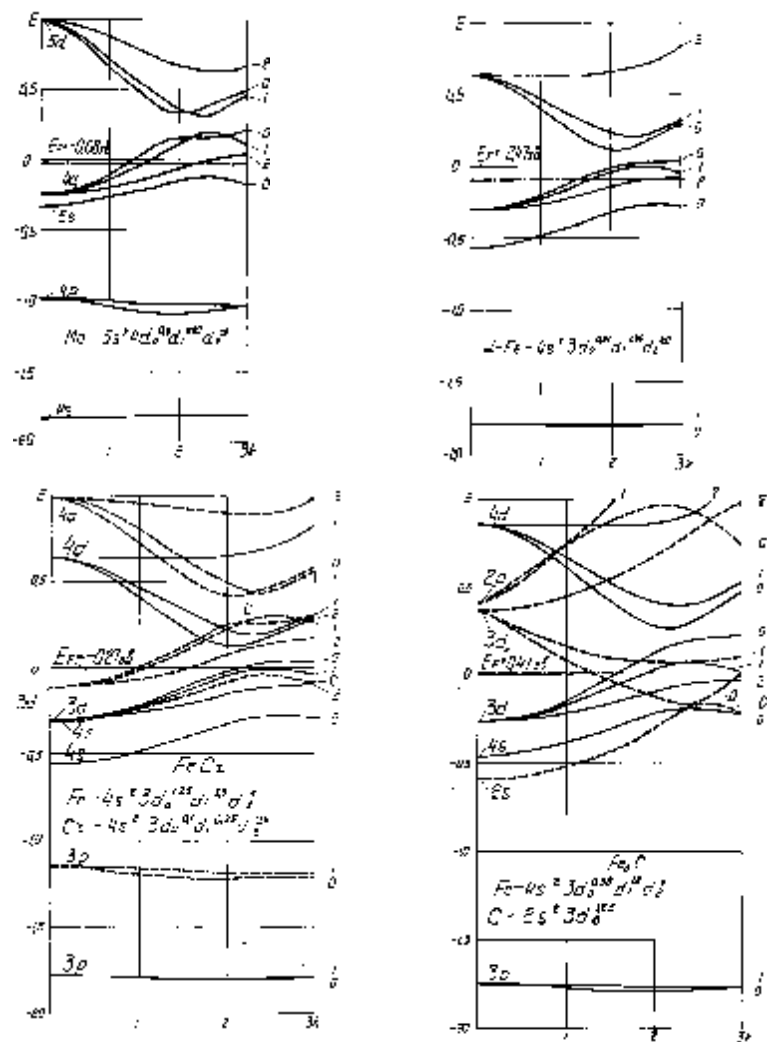


Рис. 1 а-в. Карты(КРЭП) распределения энергии (E) валентных электронов в а.е.м.

(1 а.е.м = 27,2 эВ) в зависимости от квазиимпульса K для металла (Mo , Fe) (а), сплава состава $FeCr$ (б) и карбида железа состава Fe_3C (в).

Сплошные линии металлов Mo , Fe ; пунктирные — хрома, углерода; магнитные числа подуровней 0, 1, 2 проставлены с правой стороны.

Энергия Ферми (E_f), число электронов в полосе, ширина полосы и плотность $n(E)$ состояний в сплавах железа (Fe) с sp -элементами (Θ) [6]

Состав	Число электронов				Ширина spd -полосы, эВ	$n(E)$, эВ ⁻¹			E_f
	Fe	d	s	$p(d)$		Fe	Θ	Σ	
FeAl	2	7	2	0	19,3	0,53	0,13	0,57	-2,18
Fe ₃ C	2	6,35	2	1,65	16,3	0,65	0,22	0,73	0,41
Fe ₃ Si	2	6,20	2	1,80	17,1	0,67	0,22	0,70	-0,28
FeSi	2	6,40	2	1,60	16,32	0,58	0,22	0,74	-1,36
FeSi ₂	2	6,06	2	1,94	17,68	0,64	0,22	0,68	-2,58
Fe ₃ Sn	2	6,4	2	1,6	17,4	0,69	0,21	0,69	-1,9
FeSn	2	6,4	2	1,6	15,0	0,81	0,24	0,80	-1,6
Fe ₄ N	2	3,57	2	5,43	18,77	0,56	0,40	0,69	0,27
Fe ₃ P	2	7,5	2	1,5	15,23	0,67	0,23	0,85	-1,09
Fe ₂ P	2	10	1	0	17,95	0,72	0,15	0,72	2,7

Однако, для изоэнергетических состояний пар электронов, вырожденных по спину, т.е. варьонов, для расчета волновой функции многоэлектронных атомов постоянные экранирования λ , возможные для соответствующих оболочек и подоболочек атомов элементов, могут быть вычислены из теории флуктуаций и таким образом, не только состояния близкие к поверхности Ферми в квазиатомной конденсированной среде, но и сами энергетические состояния в упрощенной модели (рис. 1 а-в) могут быть уточнены в рамках квантово-флуктуационной модели строения тугоплавких соединений в том числе и такие состояния, которые относятся к структуре и энергетике центров дефектообразования. Термодинамические свойства и распределение электронных полос в карбидах d -переходных металлов удачно интерпретируются в рамках модели КваМВ.

Рис. 1 и табл. 1 позволяют сделать некоторые общие замечания относительно электронного строения d -металлов и сплавов железа с sp -элементами в зависимости от их положения в периодической системе элементов. Прежде всего следует отметить, что в большинстве случаев действительное число электронов на подуровнях атомов конденсированной среды оказывается дробным, а положение занятых и свободных уровней отличается не только от положения уровней и числа электронов на них для атомов в свободном состоянии, но и для однородных атомов, находящихся в конденсированном состоянии. Все валентные электроны металлов находятся в s - и d -полосах, а p -электроны атомов углерода переходят в d -полосу. Однако, несмотря на формальное название d -полосы, большая часть электронов в ней находятся в p -состояниях, так как с увеличением значений квазиимпульса (d_0 -

и d_1 - ветви стремятся занять низкоэнергетическую часть d -полосы атомов углерода.

Для большинства карбидов характерно заполнение электронами d -полосы атомов металла за счет перехода валентных электронов от атомов углерода. Таким образом последние являются донорами, а d -полоса атомов металла обладает акцепторными свойствами. Исключением являются атомы титана и ванадия, которые в отличие от всех других d -металлов инжектируют большую часть s - и d -валентных электронов в d -полосу атомов углерода. Просматривается также определенная закономерность в изменении акцепторных свойств и в зависимости от атомного номера и каждом ряду периодической системы. Так, например, если атомы титана и ванадия являются донорами электронов, то следующие за ними цирконий и ниобий уже захватывают из d -полосы атомов углерода 0,54 и 1,72 электрона соответственно. Еще большими акцепторными свойствами обладают гафний и тантал. Такая же закономерность наблюдается и для металлов других групп, переход валентных электронов от атомов металла к атомам углерода следует рассматривать как увеличение электронной плотности в окрестностях либо атомов металла, либо атомов углерода карбида. Общая ширина spd -полосу карбидов уменьшается с увеличением атомного номера в каждом ряду, соответственно увеличивается плотность состояний — $n(E)/\text{эВ}$ — в окрестностях атомов металла и уменьшается вблизи атомов углерода. Под плотностью состояний $(E)/\text{эВ}$ понимается число электронов, приходящихся на один электрон-вольт ширины валентной полосы, а ширина последней отсчитана от дна полосы до уровня Ферми может служить мерой энергии Ферми карбидов.

Следует ожидать, что энергия связи $Me-Me$ и $C-C$, и $Me-C$ в карбидах также определяется плотностью состояний, рассчитанных отдельно для атомов металла и атомов углерода. Как правило, плотность состояний для атомов металла в ряду повышается с увеличением атомного номера. Соответственно и энергия связи между металлическими атомами в карбидах должна расти. Для sp -элементов углерода, кремния и олова установлена обратная зависимость, т.е. увеличение плотности состояний сопровождается уменьшением энергии межатомной связи. Объясняется это тем, что у d -металлов наибольшая плотность состояний приходится на верхний край полосы, а у sp -элементов, а том числе и для углерода, наибольшая плотность s и $d(p)$ состояний находится на дне энергетической зоны. Поэтому у карбидов IV и V групп по мере увеличения атомного номера следует ожидать увеличение энергии связи как между атомами металла, так и между атомами углерода и уменьшение энергии связи между разнородными атомами.

Энергия атомизации карбидов определяется по уравнению:

$$\Omega = \Delta H_{MeC(298)}^\circ - \Delta H_{Me(298)}^\circ - \Delta H_{C(298)}^\circ$$

где $\Delta H_{MeC(298)}^\circ$ — теплота образования карбидов из элементов; $\Delta H_{Me(298)}^\circ$ — теплота сублимации металла; $\Delta H_{C(298)}^\circ$ — теплота сублимации графита.

Энергия связи $Me-Me$ — как составную часть энергии атомизации можно определить по плотности состояний, приходящейся в карбидах на s и d -полосы металла. При этом предполагается прямая зависимость величины энергии связи $Me-Me$ от плотности состояний. Например, энергия межатомной связи в металлическом титане равна 112 ккал/г-атом, а рассчитанная плотность состояний для него составляет 0,46 эл/эВ. В монокарбиде титана плотность состояний, приходящаяся на атом титана, составляет 0,24 эл/эВ и, соответственно, энергия связи $Ti-Ti$ в карбиде будет равна 59 ккал/г-атом. Подобным путем рассчитана энергия связи $C-C$, однако в последнем случае принималась обратная зависимость энергии связи от плотности состояний, приходящейся в карбиде на $sd(p)$ -полосу

углерода. Соответственно энергия связи *Me-C* представляет собой разницу между энергией атомизации и суммой энергий связей *Me-Me* и *C-C*.

В табл. 2-3 приведены рассчитанные по настоящей методике величины энергии связи *Me-Me*, *C-C* и *Me-C*, *Fe-Э*, *Э-Э*, *Fe-Fe*, удовлетворительно согласующиеся с известными экспериментальными данными о свойствах карбидов и соединений железа с *sp*-элементами. Видно, что карбиды *Co₂C*, *Co₃C* и *Ni₃C* имеют отрицательные значения энергии связи *Me-C*. Это свидетельствует о невозможности образования карбидов кобальта и никеля в стандартных условиях. Нестабильным соединением являются и карбид железа, у которого энергия связи *Fe-C* хотя и имеет положительное значение, однако по величине она значительно отличается от энергии связи *Me-C*, рассчитанной для других карбидов. Учитывая сравнительно высокие значения энергии связи *Me-C* для карбидов титана и ванадия, следует предположить существование у них ковалентной связи между разнородными атомами, что подтверждается экспериментально высокими значениями электросопротивления и твердости и пониженными значениями модуля нормальной упругости по сравнению с этими характеристиками для карбидов гафния, титана и других металлов.

Развитый подход к построению квазиатомной модели вещества (КваМВ) позволяет не только количественно оценить энергию химического взаимодействия между атомами в карбидных фазах, но и рассчитать степень ионности (*i*), ковалентности (*q*) и металличности (*η*), где

$$i + q + \eta = 1$$

$$\text{где } i = \frac{E_{\text{н.а.}}(\text{Me}-\text{C})}{\Omega}; \quad q = \frac{E_{\text{н.а.}}(\text{C}-\text{C})}{\Omega}; \quad \eta = \frac{E_{\text{н.а.}}(\text{Me}-\text{Me})}{\Omega}.$$

Таблица 2

Энергия связи ($E_{\text{св}}$) *Me-Me*, *C-C*, *Me-C*
в карбидах *d*-переходных металлов

Карбид	$E_{\text{св}}$ <i>Me-Me</i> , ккал/моль	$E_{\text{св}}$ <i>C-C</i> , ккал/моль	Ω карбида; ккал/моль	$E_{\text{св}}$ <i>Me-C</i> , ккал/моль	η
TiC	59	75	328	194	0,18
ZrC	178	122	364	64	0,49
HfC	207	180	400	13	0,52
VC	91	85	336	160	0,27
NbC	171	145	394	78	0,43
TaC	154	200	395	39	0,39
V ₂ C	62	77	340	201	0,18
Nb ₂ C	224	115	363	24	0,62
Ta ₂ C	195	190	400	15	0,49
MoC	175	150	380	56	0,46
WC	112	200	382	70	0,29
Cr ₇ C ₃	99	170	283	14	0,35
Mo ₂ C	234	145	427	48	0,55

Таблица 3

Энергия связи ($E_{св}$) Э-Э , Fe-Fe , Fe-Э
в соединениях железа с sp -элементами

	Ω энергия атомизации; ккал/моль	Энергия связи в ккал/моль			η
		Fe-Fe	Э-Э	Fe-Э	
FeAl	180	83	38	59	0,21
Fe ₃ C	263,7	101	160	2,7	0,61
Fe ₃ Si	215	105	76	44	0,35
FeSi	227	91	75	61	0,33
FeSi ₂	227	100	76	51	0,34
Fe ₃ Sn	182	107	38	37	0,21
FeSn	192	127	45	20	0,23
Fe ₄ N	216	88	110	18	0,51
Fe ₃ P	218,2	105	51	63	0,23

Исследование природы химического взаимодействия рентгеноэмиссионными методами в сплавах и сопоставление этих результатов с расчетами, производимыми по картам распределения энергии валентных электронов в приближении КваМв, позволило в натурном эксперименте убедиться в необходимости и достаточности моделируемых представлений конденсированной среды в приближении квазиатомного строения карбидов и сплавов [6, 7].

Представление химической среды, в которой взаимодействие между электронами валентной полосы рассматривается как взаимодействие коллективизированных, локализованных и поляронных состояний электронов, позволило представить элементы в виде упрощенных зонных структур (карт распределения), а карты распределения электронных полос (рис. 1) представляют собой зависимости энергии E валентных электронов от величины квазиимпульса $E(k)$ при значениях главного ($n = 1, 2, 3, \dots$), орбитального ($l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$) и магнитного $m = 0, 1, 2, 3$) квантовых чисел (рис. 1). Благодаря m -расщеплению p -полоса разделяется на p_0, p_1, p_{-1} ; d -полоса на $d_0, d_1, d_2, d_{-1}, d_{-2}$ -подполосы. В силу симметрии рассматриваются только положительные значения l .

Кривые $E(k)$ (рис. 1) рассчитаны вплоть до значения

$$k_{\max} = 4 \left(\frac{3}{4} \right)^{2/3} = 2,418 \quad (3)$$

в интервале значений энергий от $E_{\min} = 1,0$ а.е. $E_{\max} = 20$ а.е. (1 а.е. = 27,23 эВ)

Полученные зависимости энергии валентных электронов от величины квазиимпульса $E(k)$ [3-5] раскладывали в ряд по полиномам Чебышева и ограничивались квадратичным членом. Для этого энергия основного состояния электронов для дальнейших расчетов на ЭВМ задавалась рядом

$$E(k) = b_0 P_0(k) + b_1 P_1(k) + b_2 P_2(k) \quad (4)$$

где $P_0(k)$, $P_1(k)$, $P_2(k)$ — полином Чебышева, отражающие инвариантное, линейное и квадратичное изменение $s, p_0, p_1, d_0, d_1, d_2$ — валентных полос элемента;

$$\begin{aligned}
 P_0(k) &= 1 \\
 P_1(k) &= (k - 7) \\
 P_2(k) &= (k^2 - 14k + 35)
 \end{aligned}
 \tag{5}$$

b_1, b_2, b_3 — коэффициенты при соответствующих полиномах Чебышева. Таким образом, каждая кривая изменения энергии валентной полосы от величины квазиимпульса представлялась тремя коэффициентами X_1, X_2, X_3 , отображающими инвариантное, линейное и квадратичное ее изменение. Распределение валентных электронов переходных металлов, имеющих s, d_0, d_1, d_2 -валентные полосы, представлялось двенадцатью коэффициентами Чебышева X_1-X_{12} соответствующими четырем триадам коэффициентов b_1, b_2, b_3 . Для описания полосной структуры p -элементов, имеющих s, p_0, p_1 -валентные полосы, требовалось девять коэффициентов (X_{10}, X_{11} и X_{12} — коэффициенты принимались равными нулю). Коэффициенты рассчитывались исходя из значений функций $E(k)$, взятых в 13 различных точках в интервале изменения квазиимпульса $0 < k < k_{\max}$. Все расчеты производились на ЭВМ.

Использование коэффициентов Чебышева позволяет по уравнению (4) вычислить энергию валентной полосы электронов для соответствующих элементов, применение метода компьютерного моделирования, с использованием коэффициентов Чебышева и значения энергии Ферми (табл. 4), дает возможность установить связь между физико-химическими свойствами сплавов и электронным строением легирующих элементов в форме линейных (9) или дискриминантных зависимостей по классам А, Б, В, Г, позволяющих количественно вычислять свойства (С): температуру превращения элемента в сплаве метасистем начальных участков, предельную растворимость элемента (ат. %) в твердой (α), жидкой (β) фазе.

$$C_{\text{теор}} = \sum \alpha_i X_i + B \tag{6}$$

$C_{\text{теор}}$ — теоретически рассчитываемое свойство; X_i — коэффициенты Чебышева легирующего компонента сплава; B — постоянный член.

Таблица 4

Численные значения коэффициентов Чебышева и энергии Ферми легирующих элементов 2–5

Элемент	Уровень Ферми; E_F , эВ	Значения коэффициентов Чебышева			Уровень валентности полюс
		b_1	b_2	b_3	
С	4,35	-0,343	0,065	-0,016	s
		0,140	-0,029	0,008	p_0
		0,254	-0,047	0,011	p_1
Mn	-10,60	-0,311	0,058	-0,014	s
		-0,044	0,010	-0,003	d_0
		-0,031	0,008	-0,003	d_1
		-0,082	0,016	-0,004	d_2

Продолжение табл. 4

Элемент	Уровень Ферми; E_F , эВ	Значения коэффициентов Чебышева			Уровень валентности полос
		b_1	b_2	b_3	
V	2,04	-0,134	0,025	-0,006	s
		0,103	-0,014	0,001	d_0
		0,109	-0,014	0,001	d_1
		0,028	-0,001	-0,001	d_2
Ti	2,58	-0,091	-0,018	-0,005	s
		0,129	-0,019	0,002	d_0
		0,165	-0,025	0,003	d_1
		0,091	-0,013	0,001	d_2
Nb	-0,54	0,162	0,030	-0,007	s
		0,043	-0,003	-0,001	d_0
		0,029	0,000	-0,001	d_1
		-0,063	0,014	-0,004	d_2

В табл. 5 приведены результаты компьютерного моделирования (С) сплавов на основе железа: α , β , T_n как функции необходимого и достаточного числа коэффициентов Чебышева X_i . При этом как показывает анализ высокие значения коэффициентов корреляции свидетельствуют о функциональной зависимости между искомым свойством и электронным строением легирующих квазиатомов компонентов в пределах класса легирующих элементов: А — ферритизаторов; В — аустенизаторов; В — перлитизаторов и т.д.

Таблица 5

Влияние электронного строения квазиатомов
на растворимость элементов в мезаструктуре железа

Класс элементов по [2]	Уравнение связи	Коэффициент корреляции модели
А	$T_n = (1258,9 + 813,3 X_4 - 33979,3 X_9 - 27809,1 X_{12} + 57,0 X_9)$	0,99
	$\alpha = (79,53 + 1684,98 X_3 - 148,11 X_4 + 2518,77 X_8 + 548,02 X_{10})$	0,98
	$\beta = (43,14 - 1122,74 X_{11} - 5,875 X_{13})$	0,97
Б	$T_n = (1458,1 + 22034,46 X_9 - 24330,39 X_{12} + 27809 X_{12} + 1,517 X_{13})$	0,99
	$\alpha = (20,75 + 194,02 X_{12} + 0,981 X_{13})$	0,87
	$\beta = (25,06 + 358,14 X_{12} + 0,982 X_{13})$	0,87
В	$T_n = (1362,9 + 83989,8 X_6 - 81468,9 X_9)$	0,68
	$\alpha = (17,64 + 1740,93 X_3 - 7500,69 X_6 + 7724,24 X_9 - 2,877 X_{13})$	0,94
	$\beta = (9,90 - 7756,56 X_6 + 9608,57 X_9 - 84,69 X_{10})$	0,85
Г	$T_n = (1291,2 + 1494,59 X_4 - 36532,59 X_{12})$	0,92
	$\alpha = (-2,05 - 3571,50 X_6 - 652,56 X_8)$	0,97
	$\beta = (14,48 + 57,35 X_{10} - 2,79 X_{13})$	0,99

Таблица 6

Экспериментальные [2] и расчетные значения параметров растворимости элементов в железе

Класс	Элемент	Температура превращения; $T_{\text{п}}, \text{C}$		Предельная растворимость в жидкой фазе; $\alpha, \%$ ат		Предельная растворимость в твердой фазе; $\beta, \%$ ат	
		эксп.	расч.	эксп.	расч.	эксп.	расч.
	Al	1232	1241	53,0	52,1	59,0	47,1
	Si	1250	1250	20,0	19,8	25,0	33,6
	V	1468	1453	33,0	34,2	33,0	32,3
A	Cr	1507	1472	23,0	26,8	23,0	26,8
	Zn	708	778	43,0	42,5	90,0	92,7
	Mo	1445	1495	24,0	19,8	24,0	21,3
	W	1540	1532	14,0	14,7	12,0	12,2
	Mn	1473	1473	9,6	9,6	13,0	13,2
	Co	1499	1502	16,5	13,2	19,5	15,3
	Ni	1512	1507	3,8	8,2	5,2	9,5

О инновации материала исследований.

Получены модели, позволяющие с позиции электронного строения теории КЛЮП и КРЭП разделить элементы на классы по растворимости в мезоструктуре железа. Согласно оценкам, разделение элементов зависит от положения энергии уровня Ферми ($X_{1,3}$) и перераспределение электронов между s , d , d_0 и d_2 -валентными состояниями электронов (коэффициенты X_1 , X_5 и X_{12}). Погрешность построений модели не ниже 20% отн. Методом компьютерного моделирования получены уравнения, позволяющие рассчитывать и прогнозировать параметры растворимости элементов в железе. Предельные растворимости элементов в железе в жидкой (α) и твердой фазе (β) в каждом классе по разному зависят от распределения валентных электронов.

Полученные уравнения позволяют рассчитывать и прогнозировать численные значения предельных растворимостей элементов в железе с относительной погрешностью в пределах 25%. Это вполне приемлемая точность, учитывая сложность постановки задачи.

Результаты настоящих теоретических исследований использованы при решении конкретных практических разработок (см., например, «Повышение работоспособности и ресурса пары трения "тормозной диск - колодка"»: тема диссертации и автореферата по специальности ВАК 05.16.01, Тольятти, 2004г., кандидат технических наук Болдырев, Денис Алексеевич; «Комбинированное влияние технологических параметров модифицирования и микролегирования на структуру и свойства конструкционных чугунов» тема диссертации и автореферата по специальности ВАК 05.16.01, Москва, 2009г., доктор технических наук Болдырев, Денис Алексеевич)

ЛИТЕРАТУРА

1. *Кутюлин С.А., Кутюлин В.А.* Структурно-теплофизическая теория вязкости магматических расплавов. Препринт №15. Новосибирск: ИГТ СО АН СССР, 1988. 31 С.
2. *Гуляев Б.Б.* Синтез сплавов. М.: Металлургия, 1984. 158 С.
3. *Кутюлин С.А., Козик В.В., Мулер П.Б., Шахгусейнов Т.Ф., Третьякова Г.С., Фролов Ю.А.* Карбидные фазы и литейные стали. Моделирование, статистическая достоверность, механизмы флуктуации дефектов и физико-химические свойства. / Томск: ТГУ, 1986. 60 С. Деп в Черметинформации 20.02.87, № Зд/3939.
4. *Кутюлин С.А., Чернобровкин Д.И.* Пленочное материаловедение редкоземельных соединений. М: Металлургия, 1981. 178 С.
5. *Кутюлин С.А., Нейч А.И.* Физическая химия цветного стекла. М.: Стройиздат, 1988. 284 С.
6. *Ващюков И.А., Кутюлин С.А.* Распределение электронных полос в соединениях железа с *sp*-элементами // Изв. Вузов. Сер. Черная металлургия. 1979. Т. 1, С. 104–107.
7. *Дутчак Я.И., Кутюлин С.А., Ващюков И.А.* и др. Исследование природы химвзаимодействий в сплавах // Металлофизика. 1975. Вып. 75. С. 114–120.
8. *Котюков В.И.* Методы построения многофакторных кусочно-линейных моделей объектов управления: Автореф. на соиск. уч. степени д-ра техн. наук. Томск, ТПИ, 1987. 38 С.
9. *Кутюлин С.А., Котюков В.И.* Прогнозирование на ЭВМ типа кристаллической структуры бинарных тугоплавких соединений на основании состава и электронного строения их компонентов // Журн. физ. химии. 1979. Т. 53, №10. С. 2446–2450.
10. *Кутюлин С.А., Котюков В.И.* Прогнозирование на ЭВМ типа реакции кристаллизации бинарных соединений на основании электронного строения компонентов // Журн. физ. химии. 1979. Т. 53, №5. С. 1083–1087.