

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЗНАЧЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНОЙ ЭНЕРГИИ ЧЕРЕЗ РАБОТУ ВЫХОДА ЭЛЕКТРОНА

Мусохранов М.В.¹, Антонюк Ф.И.¹, Калмыков В.В.¹

¹Калужский филиал ФГБОУ ВПО «Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана», Россия (248600, Калуга, ул. Баженова, 2), e-mail:marls77@yandex.ru

Предложено в качестве дополнительного параметра качества поверхностного слоя изделия использовать такой параметр как поверхностная энергия. Для наиболее содержательного описания показателя поверхностной энергии рекомендуется использовать работу выхода электрона (РВЭ), как наиболее чувствительный параметр энергетического состояния поверхностного слоя. РВЭ, в свою очередь, находится через физический параметр – контактную разность потенциалов. Проанализированы составляющие каждой формулы для определения поверхностной энергии, в том числе на предмет возможности определения в производственных условиях. Показана наиболее эффективная область применения каждой зависимости и рекомендована формула для практического использования на машиностроительных предприятиях. Проведен анализ точности расчетов поверхностной энергии и определены наиболее и наименее точные из них.

Ключевые слова: работа выхода электрона, поверхностная энергия, качество поверхности, контактная разность потенциалов.

DETERMINATION OF THE VALUE OF THE SURFACE ENERGY THROUGH ELECTRON WORK FUNCTION

Musokhranov E.N.¹, Antonyuk F.I.¹, Kalmykov V.V.¹

¹Moscow State Technical University n.a. Bauman, Kaluga Branch, Russia (248600, Kaluga, street Bazhenova, 2), e-mail:marls77@yandex.ru

Suggested as an additional parameter of the surface layer quality products use this parameter as the surface energy. For the most meaningful indicator of the surface energy is recommended to use the electron work function (RWE), as the most sensitive parameter of the energy state of the surface layer. RWE, in turn, is through the physical parameter - the contact potential difference. Analyzed the components of each formula to determine the surface energy, including for the possibility of determining in a production environment. Shows the most efficient use of each region according to the formula and is recommended for practical use on the machine-building enterprises. The analysis of the accuracy of the calculations of the surface energy and identify the most and least accurate of them.

Keywords: the electron work function, the surface energy, surface quality, contact potential difference.

Конструирование, технологическое исследование и практическое использование возможны на основании данных о поверхностной энергии. Применение при этом теоретических формул не возможно из-за отсутствия в распоряжении исследователей многих параметров слоя. Возможно, что этот путь решения проблемы потребовал бы в случае его реализации наличия специальной литературы, работы в исследовательских лабораториях. При этом широкое практическое использование энергетических данных не могло бы быть общепринятым.

Одним из решений данной задачи является установление и рекомендации необходимых в конкретных условиях значений энергетического состояния поверхностного слоя, и их применение к коэффициенту трения. Применительно к производственным условиям

получение решения производится за короткий промежуток времени, исчисляемый минутами. В этих условиях наиболее целесообразным является экспериментальный метод.

Работа выхода электрона как мера поверхностной энергии

Проведение эксперимента предполагает не определение поверхностной энергии в окончательном виде, а получение значений некоторых энергетических констант, которые позволили бы определить значение энергии поверхностного слоя, как своеобразного показателя коэффициента трения или заедания.

Многочисленные исследования в области энергетики твердого тела позволяют считать, что для данных целей наибольшее применение может найти определение работы выхода электрона (РВЭ). Ее значение является наиболее емкой физической характеристикой. И на уровень РВЭ оказывают влияние структурные превращения в поверхностном слое контактирующих деталей: искажения и разрушения кристаллических решеток, процесс легирования и др. При контактировании деталей, что является неизменным условием функционирования направляющих элементов, происходит перераспределение электронной плотности. Опираясь на работы [1, 2, 3] можно принять, что передача энергии от одного элемента к другому происходит постоянно. Управление же величинами энергетических уровней вполне возможно соответствующими техническими методами, при которых эти уровни доводятся до нужного значения. Также может быть, что среди выбранных технологом решений окажется оптимальный, который и следует реализовать на практике.

Величина работы выхода электрона может рассматриваться как индикатор энергии поверхности твердого тела. Чем больше значение РВЭ, тем, естественно, больше энергетический потенциал поверхности, и перетекание энергии направляющего элемента будет происходить в направлении от большего значения энергии к меньшему. Если в качестве рабочей гипотезы использовать необходимость равенства РВЭ обеих частей направляющих элементов или достижение минимального значения разности двух РВЭ, то с помощью технологического воздействия на поверхность можно повысить или понизить значение РВЭ и соответственно энергетику поверхности. Поскольку под технологическим воздействием понимается, прежде всего, изменение режимов обработки, то практически является целесообразным несколько изменить значение подачи или скорости резания, и в отдельных случаях – глубину резания. Достижение малых значений разности РВЭ для обеих частей направляющего элемента, но при высоком значении уровня каждой отдельно взятой детали элемента, означает создание трущейся пары сравнительно высокой износостойкости. Во всех случаях проведение экспериментов по РВЭ последние должны проводиться за минутное время.

Расчет поверхностной энергии в металлах

РВЭ является сравнительно чувствительной характеристикой состояния поверхностей и так же, как и величина поверхностной энергии, различна для разных граней кристалла. Вследствие большой сложности рассматриваемых явлений строгого теоретического обоснования расчетами пока еще нет.

Это положение относится и к собственно поверхностной энергии. Существуют эмпирические формулы (или теоретические – с эмпирическими коэффициентами).

В работе [4] для расчета поверхностной энергии γ металлов с идеальной решеткой предлагает следующие формулы:

для грани-центрированной решетки

$$\gamma = \frac{ze^2}{2a^3} \cdot \frac{0.0074}{\left[1 - \frac{2\pi}{3} \left(\frac{R_i}{a}\right)^3\right]^2} \quad (1)$$

для объемно-центрированной решетки

$$\gamma = \frac{ze^2}{2a^3} \cdot \frac{0.0087}{\left[1 - \frac{\pi}{3} \left(\frac{R_i}{a}\right)^3\right]^2} \quad (2)$$

где z — валентность; e — заряд электрона; a — постоянная решетки; R_i — радиус иона.

Расчет поверхностной энергии как следствия дополнительной кинетической энергии электронов, связанной с увеличением поверхности, дает

$$\gamma = 56400 \left(\frac{\rho z}{A}\right)^{4/3} \quad (3)$$

где ρ — плотность металла; z — число свободных электронов на один атом; A — относительная атомная масса металла.

Представленные формулы, по-видимому, необходимы для анализа физической сущности явлений. Однако для практических целей они не пригодны, поскольку предполагается, что конструктору приведенные физические данные известны. Более глубокий анализ сущности представленных формул показывает, что они имеют ряд недостатков и с физической стороны, поскольку не отражают свойств материалов.

В работе [5] предлагаются следующие формулы для определения поверхностной энергии:

$$\gamma = \alpha \frac{\rho}{A} \quad (4)$$

где α — коэффициент (7,87-10-4 Дж/см); ρ — плотность металла, кг/дм³; A — относительная атомная масса металла.

$$\gamma = \frac{\alpha \cdot \psi \cdot \varphi^2}{f} \quad (5)$$

где $\psi = 26,07 (\rho z/A)^{2/3} + \varphi$; ρ — плотность; φ — работа выхода электронов; A — атомный вес; z — электронная концентрация; α — эмпирический коэффициент; f — число ближайших соседей у частицы в поверхностном слое.

Формулы указанного вида, по-видимому, достаточно полно отражают физические связи и зависимости. Однако и они не представляют возможности их использования на практике. Так, например, практически (в условиях машиностроительного предприятия) не представляется возможным определить значение f тем более, что также трудно определить, какие «соседи» являются ближайшими, а какие — нет.

Практический интерес может представлять формула [5]

$$\gamma = K \rho v^{3/2} \quad (6)$$

где v — скорость звука в металле или вообще в веществе; ρ — плотность; K — константа.

Собственно скорость звука возможно определять с помощью соответствующей аппаратуры, однако, многие важнейшие показатели поверхностного слоя могут при этом методе не быть учтены. Так же сомнения вызывает и формула [5],

$$\gamma = K_1 Q_f \quad (7)$$

где Q_f — молярная скрытая теплота плавления металла; K_1 — константа.

Итоговый анализ точности расчетов по формулам показал, что наивысшую точность обеспечивают формулы (4) и (6), а наименьшую точность дает формула (7).

Рассмотрение сравнительного большого количества теоретических формул и зависимостей привело к выводу, что одним из важнейших требований к отысканию метода определения γ для нужд практики является простота применения и получаемая точность измерений на предприятиях машиностроения. В этом свете наибольшее внимание привлекла зависимость [6] для определения γ :

$$\gamma = \frac{\varphi \cdot z}{1.885 \cdot 10^{-3} \cdot R^2} \quad (8)$$

где z — число свободных электронов; R — атомный радиус; φ — работа выхода электронов.

Достоинство приведенной зависимости связано с возможностью определения очень простым путем РВЭ непосредственно как в ходе конструирования, так и разработки технологических процессов. В данной формуле ряд физических показателей представлен числовым коэффициентом. Главным же является зависимость γ от φ . Последняя

сравнительно просто определяется экспериментальным путем. По приведенной зависимости были определены значения γ для ряда материалов, широко используемых в машиностроении (таблица 1) [6].

Таблица 1

Значения РВЭ и величины поверхностной энергии для ряда машиностроительных материалов

Металл	$\phi \cdot 1019,$ Дж	$\gamma,$ мДж/м ²
30ХГСА	6,59	1430
38ХМЮА	6,56	1420
Cr	6,64	1410
БрАЖМц 10-3-1,5	6,48	1580
БрБ2	6,50	1390
БрОФ7-0,2	6,45	1630
Cu (М2)	6,80	1420
Ni	6,30	1410
Zn	5,58	1000
Sn	5,86	815
БрОС10-10	-	1570
Al	5,28	893
Ni (хим. чист)	5,19	1480

В ряде работ поверхностную энергию связывают с механическими характеристиками. Например, в работе [1] поверхностная энергия связывается с микротвердостью:

$$\gamma = \frac{\eta \cdot H^{1/2}}{\mu} \quad (9)$$

где $\eta = 1,35; 1,10; 1,65$ для гранцентрированной, гексагональная плотноупакованной и объемноцентрированной кубической решеток соответственно; H — микротвердость.

Существуют зависимости, в которых воедино связываются предел текучести σ , поверхностная энергия γ и работа выхода электрона ϕ [5]

$$\sigma = \frac{6,36 \cdot 10^{-3} \cdot \gamma^2}{\phi} \quad (10)$$

Дальнейший анализ формулы позволил прийти к формуле, которую можно считать рабочей [6]

$$\gamma = 7128 \cdot \frac{\varphi}{R^2} - 110 \quad (11)$$

где φ — работа выхода электрона; R — атомный радиус.

В итоге, поверхностная энергия определяется по экспериментальному значению φ и значению физической константы.

Предлагается поверхностную энергию определять по следующему алгоритму:

Определяют величину работы выхода электрона эталонного электрода.

Определяют контактную разность потенциалов между эталонным и измеряемым образцом.

Из соотношения

$$\varphi_{Me} = \varphi_{\text{Э}} - e \cdot V_c$$

определяют работу выхода электрона исследуемого образца. В последнем уравнении: $\varphi_{\text{Э}}$ — работа выхода электрона эталона; e — заряд электрона; φ_{Me} — работа выхода электрона исследуемого образца; V_c — контактная разность потенциала исследуемого образца.

Решение практических проблем будет постоянно совершенствоваться по мере появления в соответствующих конструкторских и технологических бюро дополнительных энергетических данных по поверхностным слоям различных деталей.

Заключение

Теоретический анализ позволяет сделать пока лишь общие выводы.

Установлено, что всякое воздействие на поверхность детали изменяет ее энергетические свойства. Одним из наиболее результативных является технологическое воздействие.

Служебные свойства поверхностных слоев деталей машин определяются наряду с шероховатостью также и энергетикой слоя.

Энергетическая составляющая коэффициентов трения деталей направляющих элементов машин может быть определена экспериментальным методом по значению РВЭ.

Определение РВЭ производится элементарным ощупыванием (касанием) производственных образцов.

Считается особенно целесообразным создавать в конструкторских и технологических бюро “библиотек” образцов с рабочими поверхностями типичными для данного предприятия.

Таким образом, при конструировании нового изделия конструктор, наряду с точностными, прочностными параметрами будет задавать требуемые параметры

поверхностной энергии для улучшения характеристик изделия. Задачей технолога будет выбор оптимального метода получения требуемого показателя качества поверхностного слоя включая энергетические.

Список литературы

1. Костецкий Б. И. Сопротивление изнашиванию деталей машин. Машгиз, 1960. 397 с.
2. Костецкий Б.И. Трение, смазка и износ в машинах. Киев: Техніка, 1970. 395 с. с ил.
3. Крагальский И.В., Добычин М.Н., Комбалов В.С. Основы расчетов на трение и износ. М.: Машиностроение, 1977. 526 с. с ил.
4. Кузнецов В.Д. Поверхностная энергия твердых тел. М., 1954. 265 с.
5. Костецкий Б.И. Структурно-энергетическая приспособляемость материалов при трении. Трение, износ и смазочные материалы. Труды международной конференции. Ташкент, 1985. Т II. 325 с.
6. Кривоглаз М. А., Смирнов А. А. Теория упорядочивающихся сплавов. М.: Физматгиз, 1958. 479 с.,
7. Мусохранов М.В. Поверхностная энергия как показатель качества поверхностного слоя // Справочник. Инженерный журнал. 2005. №12. С.62-64.
8. Мусохранов М. В., Антонюк Ф. И., Калмыков В. В. Поверхностная энергия и процесс схватывания контактирующих поверхностей // Наука и образование: Электронное научно-техническое издание. URL. <http://technomag.bmstu.ru/doc/737377.html>. 2014. № 11.

Рецензенты:

Астахов М.В., д.т.н., профессор, заведующий кафедрой «Прикладная механика», Калужский филиал ФГБОУ ВПО «Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана», г. Калуга.

Шаталов В.К., д.т.н., профессор, заведующий кафедрой «Технологии обработки материалов», Калужский филиал ФГБОУ ВПО «Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана», г. Калуга.