

ПОВЕРХНОСТНАЯ ЭНЕРГИЯ И РАБОТА ВЫХОДА ЭЛЕКТРОНА ПОЛИМОРФНЫХ МОДИФИКАЦИЙ ТИТАНА

И.Г. Шебзухова¹, Л.П. Арефьева²

¹ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им.
Х.М. Бербекова»

360004, Россия, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173

²ФГБОУ ВО «Донской государственный технический университет»

344011, Россия, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1

Irina.Shebzukhova@mail.ru¹, Ludmilochka529@mail.ru²

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.288

Аннотация: В данной работе электронно-статистическим методом проведена оценка поверхностной энергии граней кристаллов титана с учетом вкладов дисперсионной, поляризационной и осцилляционной поправок. Используя аналитическую связь по величинам поверхностной энергии монокристаллов, вычислены значения работы выхода плотноупакованных граней полиморфных модификаций титана с учетом особенностей кристаллической структуры. Показано влияние полиморфного превращения и температуры на анизотропию исследуемых свойств. По величинам поверхностной энергии и межфазной энергии, состоящей из средней конфигурационной энергии и энергии химического взаимодействия двух частей металла, оценена энергия когезии α - и β -титана и показана ее зависимость от температуры. На примере систем вольфрам-титан и молибден-титан показана принципиальная возможность расчета изменения работы выхода в зависимости от концентрации поверхностно-активного компонента в биметаллических системах, что позволяет предсказывать эксплуатационный ресурс материала.

Ключевые слова: поверхностная энергия, работа выхода электрона, анизотропия, полиморфные модификации титана, энергия когезии

1. Введение

Титан занимает десятое место по распространенности в природе и четвертое – по использованию в промышленности. При этом его активная добыча и производство начались лишь в 40-е годы XX века. Способы обработки титана состоят из операций плавки, закалки и старения и являются дорогостоящими, что приводит к высокой стоимости металла. К недостаткам следует отнести некоторые технологические свойства (плохая свариваемость и обработка резанием), возможность воспламенения пыли и стружки при невысоких температурах из-за высокой химической активности чистой поверхности титана [1]. Однако, титан и его сплавы, имеют преимущества перед другими металлическими материалами: малый удельный вес, прочность, коррозионная стойкость, жаростойкость [1].

Титан применяется в различных отраслях промышленности – судо-, ракето-, авиа- и машиностроение, медицина. Развивается переработка вторичного титанового сырья [2]. На основе титана производят деформируемые и литейные сплавы. Некоторые технологические и механические свойства, например, заполняемость формы, микротвердость,

адгезионная прочность, зависят от поверхностной энергии (ПЭ) расплава и кристаллизующихся фаз. Большинство промышленных сплавов содержит до 85% масс титана. Растет интерес к титановым сплавам [3], способным претерпевать мартенситное превращение, вызывающее изменение механических свойств и проявление эффекта памяти формы. Как легирующий элемент титан используется при производстве электродов, так как он снижает рабочую температуру путем понижения работы выхода электрона (РВЭ), что повышает ресурс работы электродов [4].

Измерение величины РВЭ и контактной разности потенциалов [5-8] металла, а также тока хемоэмиссии [9] используется в методах контроля качества поверхности, обработанной наноточением, абразивным шлифованием, подвергавшейся трению входе эксплуатации, методах исследования механизмов реакций гетерогенного катализа.

Из сказанного следует, что для успешного управления технологическими процессами и условиями эксплуатации необходимо знание энергетических характеристик поверхности металла в жидком и твердом состоянии – ПЭ и РВЭ. Значимость теоретических исследований обусловлена отсутствием надежных экспериментальных методов определения ПЭ и достоверных экспериментальных данных анизотропии ПЭ и РВЭ многих металлов [10, 11], в том числе титана.

2. Постановка задачи

Целью работы являлся расчет в рамках электронно-статистического метода ПЭ граней монокристалла титана с учетом вкладов поправок на дисперсионное взаимодействие ячеек Вигнера-Зейтца (ВЗ) и осцилляцию электронной плотности в поверхностном слое, поляризацию поверхностных ионов в поле полубесконечного металла. Ставились задачи установить связь между ПЭ и РВЭ грани кристалла α - и β -титана с учетом особенностей кристаллической структуры и показать влияние полиморфных превращений и температуры на анизотропию ПЭ и РВЭ.

3. Методология расчетов

Используя выражения для хода электронной плотности и потенциала на границе металл-вакуум по Томасу-Ферми (ТФ) с поправками и определяя ПЭ металлического кристалла относительно гиббсовой поверхности раздела, ПЭ при температуре T рассчитывается по формуле:

$$f_{\omega}(hkl) = f_{\omega}^k(hkl) + f_{\omega}^g(hkl) + f_{\omega}^p(hkl) + f_{\omega}^{osc}(hkl) + \Delta f_{\omega}^T(hkl). \quad (1)$$

Слагаемое $f_{\omega}^k(hkl)$ – значение ПЭ металла при 0 К, полученное в рамках электронно-статистической теории при учете квантовых поправок [12, 13].

Для расчета влияния дисперсионных сил на ПЭ граней металла на основе метода Е.М. Лифшица получена расчетная формула [13]:

$$f_{\omega}^g(hkl) \cong 12,115 \cdot \frac{\hbar}{R^{7/2}} \frac{(1-r/R)^{-2} f \left(\frac{A}{DN} \right)^{2/3} \left(1 - \frac{2}{k-n} \right) n(hkl), \quad (2)$$

где r – радиус иона, R – радиус элементарной сферы (равновеликой ячейки ВЗ), z – число валентных электронов на атом, $\gamma = m^*/m$, m^* – эффективная масса электрона, $n(hkl)$ – плотность частиц на грани (hkl) , \hbar – постоянная Планка, N – число Авогадро, f – коэффициент упаковки, A и D – атомный вес и плотность, k – показатель степени потенциала борновских сил отталкивания ячеек ВЗ за счет перекрытия электронных оболочек ионов, n – показатель степени в решении уравнения ТФ для внутренней области металла [14].

Вклад в ПЭ металла поправки на поляризацию ионов поверхностного слоя под влиянием электрического поля полубесконечного металла можно оценить следующим образом:

$$f_{\omega}^p = -\frac{1}{2} \sum_{j=0}^{\infty} (P_j E_j) n_j - \frac{\alpha}{2} \sum_{j=0}^{\infty} E_j^2 n_j, \quad (3)$$

где $P_j = \alpha E_j$ – средний дипольный момент иона на j -ой плоскости, E_j – напряженность поля в этой плоскости, α – поляризуемость атома металла. Напряженность поля можно оценить через безразмерные координату $\beta = x/s^*$ и потенциал $\chi(\beta) = V(\beta)/V_F^*$ как градиент потенциала, известного из уравнения ТФ

$$E(\beta) = \frac{1}{s^*} \frac{dV(\beta)}{d\beta}, \quad (4)$$

где $V_F^* = V_F \lambda^{-4}$, V_F – потенциал уровня Ферми, λ – вариационный параметр, минимизирующий ПЭ металла на границе с вакуумом при учете обменной поправки. Безразмерный потенциал для внутренней области металла ($\beta \leq 0$) равен [14]:

$$\chi(\beta) = 1 - \frac{1 - \chi(0)}{(1 - \beta/b)^n}, \quad (5)$$

Полагая $E_j(\beta) \cong E(\beta_j)$, с учетом (5) напряженность поля в j -ой плоскости:

$$E_j(\beta) = \frac{nV_F}{sb\lambda^5} \frac{1 - \chi(0)}{(1 - \beta_j/b)^{n+1}}, \quad (6)$$

где $\chi(0)$ – безразмерный потенциал на физической поверхности раздела, $|\beta_j| = j(\delta(hkl) + r + x_{\Gamma})/s$, $b = 2(125/3)^{1/4}$, $n = 6$, x_{Γ} – координата гипсовой поверхности раздела, s – линейный параметр, приводящий уравнение ТФ к безразмерному виду. Подставляя (6) в уравнение (4), рассматривая границу грань металлического кристалла – вакуум, получим поляризационную поправку к ПЭ грани в виде:

$$f_{\omega}^p(hkl) = -18\alpha \frac{V_F^2 [1 - \chi(0)]^2}{s^2 b^2 \lambda^{10}} n(hkl) \sum_{j=1}^{\infty} \left(1 - \frac{\beta_j}{b}\right)^{-14}. \quad (7)$$

Влияние осцилляции электронной плотности в поверхностном слое на ПЭ грани металлического кристалла можно оценить по формуле из [13, 14]. Для определения температурного коэффициента ПЭ граней металлического кристалла использовалась формула [12], учитывающая зависимость всех величин, входящих в (1) при 0 К от температуры.

В рамках электронно-статистического метода установлена связь между ПЭ и РВЭ полубесконечного металла [14, 15]. Представляя полную энергию полубесконечного металла как функцию числа положительных ионов и валентных электронов, энергию, приходящуюся на один атом в поверхностном слое, можно записать в виде

$$E = E_0 - \frac{f_{\omega}(hkl)}{n_v \tau}, \quad (8)$$

где E_0 – энергия ячейки ВЗ в объеме полубесконечного кристалла, второе слагаемое – ПЭ, отнесенная к одной частице, n_v – число частиц в единице объема металла, τ – эффективная толщина поверхностного слоя.

Имея в виду (8), получено выражение, связывающее РВЭ и ПЭ грани (hkl) в виде [13, 14]:

$$\phi(hkl) = - \left(\frac{\partial E_0}{\partial z} \right)_{\bar{R}} - \frac{1}{n_v \tau} \left(\frac{\partial f_{\omega}(hkl)}{\partial z} \right)_{R,T}. \quad (9)$$

Второе слагаемое в (9) определяет зависимость РВЭ от ориентации кристаллографических граней. Используя (1), определяем производную $(\partial f_{\omega}(hkl)/\partial z)_{R,T}$ и получаем связь РВЭ и ПЭ граней кристалла:

$$\phi(hkl) + \frac{B(hkl)}{z} a^2 f(hkl) = const. \quad (10)$$

Здесь a – постоянная решетки. Выражение для $B(hkl)$, отражающего структурные особенности и анизотропию свойств кристалла при ненулевой температуре, получено в [15]. Для оценки РВЭ грани металлического кристалла выражение (10) представлено в виде [14, 15]:

$$\phi(hkl) = \phi_0 (1 - f_{\omega}(hkl)/f_0), \quad (11)$$

где $\phi_0 = const = \phi_n + \frac{B(hkl)}{z} a^2 f_{\omega}^{xc}$, $f_0 = \phi_0 z / B(hkl) a^2$, ϕ_n – РВЭ поликристалла, f_{ω}^{xc} – поверхностное натяжение (ПН) расплава. По результатам расчета ПЭ и РВЭ граней металлического кристалла можно оценить значение для поликристалла по формулам, приведенным в [14, 15].

Оценка зависимости РВЭ от концентрации второго компонента B в двойных сплавах может быть проведена по правилу аддитивности свойств в непрерывных твердых растворах замещения [16]:

$$\phi = \bar{\phi}_A \cdot (1-x) + \bar{\phi}_B \cdot x, \quad (12)$$

где x – концентрация компонента B в атомных долях. Формула (12) не учитывает сегрегацию поверхностно-активного компонента (ПАК).

Когезия является частным случаем агдезии и определяется как минимум энергии, необходимый для разделения на две части одного образца. Энергию когезии по аналогии с [17] можно записать в виде:

$$-\Delta f_{\omega}^{coh}(hkl) = 2f_{\omega}(hkl) - f_{\omega 12}(hkl), \quad (13)$$

где $f_{\omega 12}(hkl)$ – межфазная энергия контакта металла-металл. Второе слагаемое является суммой средней конфигурационной энергии $f_{\omega}^{geom}(hkl)$ и энергии химического взаимодействия f_{ω}^{chem} двух частей металла [17]

$$f_{\omega 12}(hkl) = f_{\omega}^{geom}(hkl) + f_{\omega}^{chem} = 0.15 \cdot 2 \cdot f_{\omega}(hkl) + f_{\omega}^{chem} = 0.3f_{\omega}(hkl) + f_{\omega}^{chem}. \quad (14)$$

Подставляя (14) в (13), получим

$$-\Delta f_{\omega}^{coh}(hkl) = 1.7f_{\omega}(hkl) - f_{\omega}^{chem}. \quad (15)$$

Величина f_{ω}^{chem} дает малый вклад в полную энергию когезии и ею можно пренебречь [17].

4. Анализ результатов и обсуждение

Проведены вычисления ПЭ четырех граней с малыми индексами Миллера $\alpha-Ti$ (ГПУ структура) и трех граней $\beta-Ti$ (ОЦК структура) с учетом квантовых поправок при 0 К, вкладов в ПЭ поправок на дисперсионное взаимодействие элементарных ячеек ВЗ в поверхностном слое, поляризацию поверхностных ионов в поле полубесконечного металла, осцилляцию электронной плотности в поверхностном слое, ПЭ с учетом всех вкладов при 0 К, температурного коэффициента ПЭ граней кристаллов $\alpha-Ti$ и $\beta-Ti$ (см. рис. 1, Таблицу 1). В Таблице 1 приведены значение ПЭ и РВЭ граней кристаллов $\alpha-Ti$ и $\beta-Ti$, полученные по (1) и (11), температурные вклады в ПЭ граней, рассчитанные при предельных температурах существования фаз и усредненные значения ПЭ \bar{f}_{ω} и РВЭ $\bar{\phi}$, а также литературные данные по ПЭ и РВЭ ϕ^p поликристаллов.

Анализ результатов вычислений показывает, что ПЭ любой грани монокристалла титана пропорциональна полной энергии кристаллической решетки и с увеличением температуры линейно понижается, а РВЭ незначительно увеличивается в пределах каждой модификации. Температурный коэффициент РВЭ положителен и для обеих модификаций титана мал $\sim 10^{-5}$ эВ/К. Дисперсионное взаимодействие ячеек ВЗ вносит положительный вклад в ПЭ и для разных граней $\alpha-Ti$ составляет (3,2-10,0)%, а для $\beta-Ti$ (2,2-9,2)% от ПЭ. Поляризация ионов переходного слоя снижает ПЭ и составляет для разных граней $\alpha-Ti$ (11,7-38,9)%, а для

β -Ti – (8,3-31,8)% от ПЭ. Осцилляция электронной плотности в поверхностном слое вносит положительный вклад, малый по величине, существенно зависит от ориентации и для разных граней α -Ti составляет (0,21-0,71)%, для β -Ti – (0,15-0,60)% от ПЭ. Температурный коэффициент ПЭ граней отрицателен (см. Таблицу 1) и по порядку величины меньше, чем температурный коэффициент ПН.

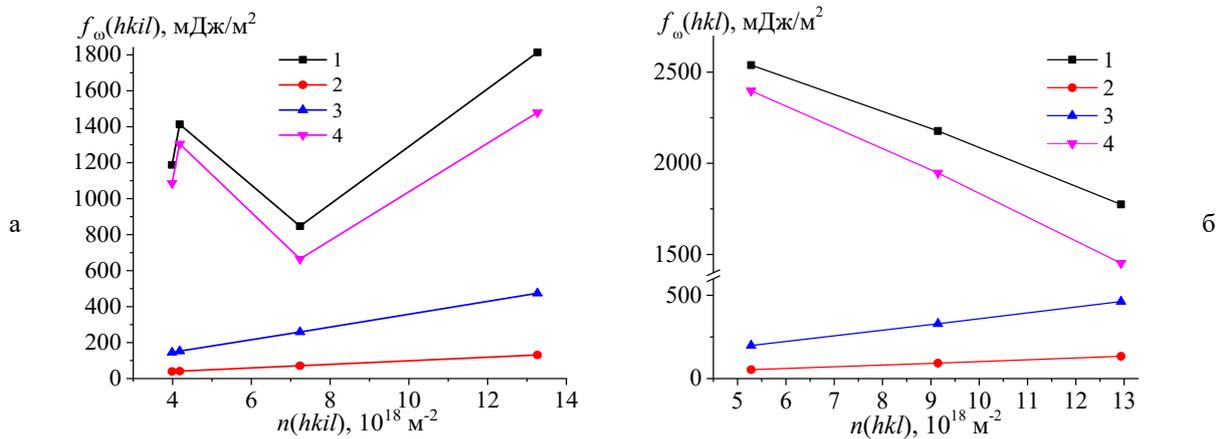


Рис. 1. Поверхностная энергия граней α -Ti (а) и β -Ti (б) при 0 К и вклады в нее: 1 – ПЭ с учетом квантовых поправок, 2 – дисперсионный вклад, 3 – поляризационный вклад, 4 – ПЭ с учетом поляризационного, дисперсионного и осцилляционного вкладов.

Таблица 1. Поверхностная энергия и работа выхода электрона титана.

(hkl)	T, K	$\frac{df_{\omega}(hkl)}{dT}$, $10^{-2}, \text{мДж}/(\text{м}^2 \text{К})$	$-\Delta f_{\omega}^T(hkl)$, $\text{мДж}/\text{м}^2$	$f_{\omega}(hkl)$, $\text{мДж}/\text{м}^2$	\bar{f}_{ω} , $\text{мДж}/\text{м}^2$	$\phi(hkl)$, эВ	$\bar{\phi}$, эВ	ϕ^P , эВ
α-титан								
(0001)	0	-6,581	0	1479,2	1152,3 1097,8	3,967	4,177 4,211	4,0 [10] 4,33 [11]
	1158		76,2	1403,2		4,015		
(10 $\bar{1}$ 0)	0	-3,019	0	664,8		4,471		
	1158		35,0	629,8		4,493		
(11 $\bar{2}$ 0)	0	-5,173	0	1305,0		4,081		
	1158		60,0	1245,2		4,120		
(11 $\bar{2}$ 1)	0	-4,367	0	1085,1	4,226			
	1158		50,6	1034,5	4,257			
β-титана								
(100)	1173	-8,057	94,5	1852,4	1767,5	3,385	3,430	3,65 [10] 3,95 [11]
	1941	-1,075 [18]	156,4	1790,5	1708,8	3,424	3,467	
(110)	1173	-6,458	75,7	1378,3	1650* 1390 \pm 40* 1427*	3,680		
	1941		125,2	1326,8		3,710		
(111)	1173	-9,128	107,1	2290,5		3,090		
	1941		177,2	2220,4		3,136		

* ПН расплава, мН/м [10, 11].

Модификация титана с ГПУ структурой имеет более высокие

значения РВЭ по сравнению с ОЦК структурой, что согласуется с литературными данными [10, 11]. Для плотноупакованных граней $\beta-Ti$ удельная ПЭ минимальна, а РВЭ максимальна, то есть чем больше ретикулярная плотность грани, тем меньше ПЭ и больше РВЭ.

Поверхностное натяжение расплава титана, полученное экспериментальными методами, существенно различается от 1390 до 1650 мН/м [10, 11], методом максимального давления в газовом пузырьке получено 1427 мН/м [18]. Как следствие, использование разных данных может приводить к разбросу в значениях РВЭ граней. Однако, для практического применения подобные оценки вполне пригодны.

На практике титан используют как легирующий элемент для вольфрамовых и молибденовых электродов. Сравнение ПЭ этих металлов показывает, что ПЭ титана значительно меньше, чем вольфрама и молибдена (настоящая работа и [15]). Также критерием поверхностной активности служит изменение температуры фазовых переходов в двухфазных системах. Согласно диаграммам состояния $W-Ti$ и $Mo-Ti$, титан снижает температуры ликвидуса и солидуса обеих систем, то есть является ПАК. Поверхностно-активный компонент сегрегируется на поверхности и границах зерен и уменьшает значения ПЭ моно- и поликристаллов.

Оценка зависимости РВЭ от концентрации титана в системах $W-Ti$ и $Mo-Ti$ проведена по (16). Расчеты показывают, что РВЭ сплава меньше, чем РВЭ чистых вольфрама и молибдена (рис. 2). Снижение РВЭ вольфрама $\Delta\bar{\phi}$ при 10% Ti составило -0,0923 эВ, молибдена -0,1003 эВ. Полученные результаты хорошо согласуются с выводами работы [16]. Учет сегрегации ПАК улучшит согласие с экспериментальными данными.

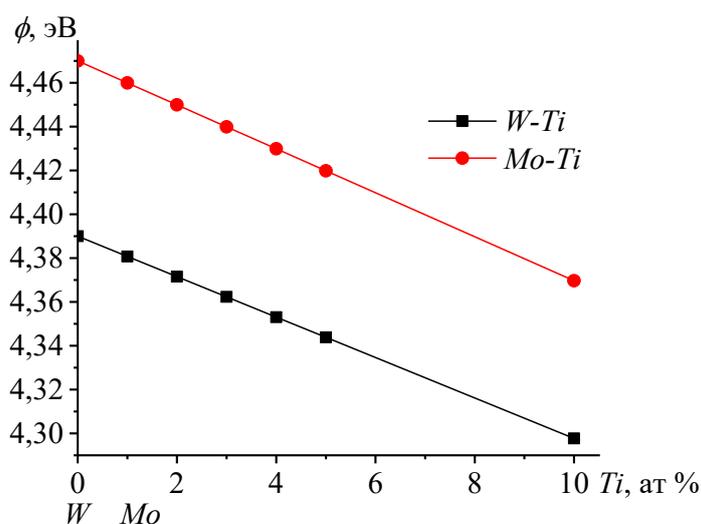


Рис. 2. Зависимость РВЭ поликристаллов молибдена и вольфрама от содержания титана.

Подобные оценочные расчеты можно провести для различных систем, в том числе содержащих более двух компонентов. Таким образом, можно моделировать свойства и прогнозировать, например, интервалы температур эксплуатации и рабочий ресурс материала.

Как известно, деформация и разрушение происходят в первую очередь по плоскостям легкого скольжения и при повышенных температурах можно получить большую степень деформации. Процессы деформации и разрушения напрямую связаны с энергией когезии металла.

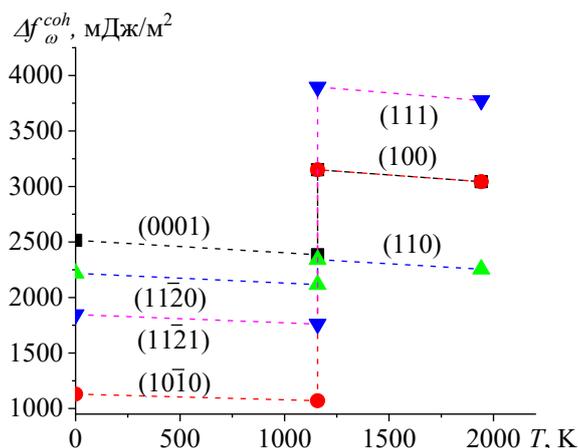


Рис. 3. Энергия когезии титана в зависимости от температуры.

По (17) рассчитана энергия когезии α - и β -Ti (см. рис 3). Видно, что в пределах существования полиморфных фаз с ростом температуры энергия когезии уменьшается более, чем на 100 мДж/м². Низкотемпературная фаза α -Ti имеет меньшую энергию когезии, чем высокотемпературная фаза, что связано с типом кристаллической структуры. Таким образом, можно заключить, что результаты проведенных расчетов хорошо коррелируют с известными технологическими свойствами. Развитая методика расчета энергии когезии может применяться при моделировании свойств и поведения металлов.

5. Заключение

Проведена оценка поправок к ПЭ граней переходного металла (титана) с разными кристаллическими решетками. Показано, что дисперсионная и поляризационная поправки приносят существенный вклад в величину ПЭ. Осцилляционная поправка по величине значительно меньше, однако, существенно зависит от ориентации.

Поверхностная энергия граней кристаллов полиморфных фаз титана пропорциональна полной энергии кристаллической решетки и с ростом температуры линейно уменьшается. Работа выхода электрона имеет малый по величине положительный температурный коэффициент. Усредненная ПЭ более рыхлого β -Ti с ОЦК структурой в 1,6 раз больше, чем у α -Ti.

Аналитическая связь РВЭ и ПЭ монокристаллов титана позволяет анализировать анизотропию обеих величин. Учет поправок при расчете ПЭ улучшает согласие результатов расчета РВЭ с известными литературными данными.

На примере двойных тугоплавких сплавов с участием титана показано, что используя правило аддитивности свойств твердых растворов, можно определить влияние ПАК на РВЭ металлических моно- и поликристаллов. Показано, что предложенная методика расчета адекватно передает зависимость энергии когезии металла от плотности упаковки граней и температуры, а также соответствуют типу кристаллической решетки.

Библиографический список:

1. **Торянников, А.Ю.** Микроструктура и свойства титановых сплавов / А.Ю. Торянников, А.А. Барышников // Молодой ученый. – 2021. – № 49 (391). – С. 47-51. – Режим доступа: www.url:https://moluch.ru/archive/391/86400/. – 11.02.2023.
2. **Feng, E.** Sustainable recovery of titanium from secondary resources: A review / E. Feng, D. Gao, Y. Wang et al. // Journal of Environmental Management. – 2023. – V. 339. – Art. № 117818. – 12 p. DOI: 10.1016/j.jenvman.2023.117818
3. **Bignon, M.** Martensite formation in titanium alloys: Crystallographic and compositional effects / M. Bignon, E. Bertrand, P.E.J. Rivera-Díaz-del-Castillo, F. Tancret // Journal of Alloys and Compounds. – 2021. – V. 872. – Art. № 159636. – 16 p. DOI: 10.1016/j.jallcom.2021.159636.
4. **Пат. 2455061 Российская Федерация, МПК В01J 19/08, В82В 3/00, Н05Н 1/24.** Способ получения нанодисперсных порошков в плазме СВЧ-разряда и устройство для его осуществления / Григорьев Г.Ю., Ковальчук М.В., Чайванов Б.Б., Майоров А.С., Туманов Ю.Н.; заявитель и патентообладатель ФГБУ «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт». – № 2010140724/05; заявл. 06.10.20210; опубл. 10.07.2022, Бюл. №19. – 15 с.
5. **Шаронов, Г.В.** Контроль металлических поверхностей, обработанных алмазным наноточением, по работе выхода электрона / Г.В. Шаронов, А.Л. Жарин, Н.И. Мухуров, К.В. Пантелеев // Приборы и методы измерений. – 2015. – Т. 6. – № 2. – С. 196-203.
6. **Герасимов, И.В.** Контроль прижогов лопаток компрессора газотурбинного двигателя методом контактной разности потенциалов / И.В. Герасимов, В.С. Олешко, Д.П. Ткаченко, А.П. Кирпичников // Вестник Казанского технологического университета. – 2012. – Т. 15. – № 17. – С. 146-149.
7. **Самойленко, В.М.** Применение прибора измерения контактной разности потенциалов «Поверхность - 11» в неразрушающем контроле деталей машин / В.М. Самойленко В.С. Олешко // Оборонный комплекс – научно-техническому прогрессу России. – 2011. – № 2. – С. 3-6.
8. **Пантелеев, К.В.** Методы измерений работы выхода электрона для контроля состояния поверхности в процессе трения / К.В. Пантелеев, А.И. Свистун, А.Л. Жарин // Приборы и методы измерений. – 2014. – №2. – С. 107-113.
9. **Харламов, Ф.В.** Метод исследований каталитических реакций на основе эффекта хемоэмиссии электронов / Ф.В. Харламов, В.Ф. Харламов // Химическая физика. – 2010. – Т. 29. – № 5. – С. 30-38.
10. Свойства элементов. Справочник / под общей ред. проф. М.Е. Дрица. – М.: Металлургия, 1985. – 672 с.
11. Свойства элементов: в 2-х ч.: справочник / Т.В. Андреева и др. – М.: Металлургия. – Ч. 1: Физические свойства / под ред. Г. В. Самсонова. – 2-е изд., перераб. и доп. – 1976. – 600 с.
12. **Шебзухова, И.Г.** Зависимость поверхностной энергии граней кристаллов полиморфных фаз актиноидов от температуры / И.Г. Шебзухова, Л.П. Арефьева, Х.Б. Хоконов // Физика металлов и металловедение. – 2008. – Т. 105. – № 4. – С. 366-370.
13. **Шебзухова, И.Г.** Оценка поляризованной и дисперсионной поправок к поверхностной энергии граней металлических кристаллов / И.Г. Шебзухова, Л.П. Арефьева // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов – 2020. – Вып. 12. – С. 319-325. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.319.
14. **Шебзухова, И.Г.** Анизотропия поверхностной энергии и работа выхода электрона ПВ металлов /

- И.Г. Шебзухова, Л.П. Арефьева // Журнал технической физики. – 2019. – Т. 89. – № 2. – С. 306-309. DOI: 10.21883/JTF.2019.02.47087.188.
15. **Арефьева, Л.П.** Работа выхода электрона и поверхностная энергия ОЦК- и ГЦК-модификаций 4d- и 5d-металлов / Л.П. Арефьева, И.Г. Шебзухова // Физика твердого тела. – 2016. – Т. 58. – Вып. 7. – С. 1249-1253.
16. **Арзамасов, В.Б.** Работа выхода электрона сплавов тугоплавких металлов / В.Б. Арзамасов, Э.Е. Смирнова, А.А. Строев, И.Л. Полунов, Д.Е. Рыков // Известия МГТУ МАМИ. – 2009. – № 1 (7). – С. 102-104.
17. **Li, Y.** Electron work function, adhesion, and friction between 3d transition metals under light loads / Y. Li, D.Y. Li // *Wear*. – 2005. – V. 259. – I. 7-12. – P. 1432-1436. DOI: 10.1016/j.wear.2005.01.027.
18. **Ниженко, В.И.** Поверхностное натяжение металлов и сплавов. Справочник / В.И. Ниженко, Л.И. Флока. – М.: Металлургия, 1981. – 208 с.

References

1. Toryannikov A.Yu., Baryshnikov A.A. Mikrostruktura i svoystva titanovykh spлавov [Microstructure and properties of titanium alloys] *Molodoy uchenyy [Young scientist]*, 2021, no. 49 (391), pp. 47-51. Available at: <https://moluch.ru/archive/391/86400/> (accessed 11.02.2023).
2. Feng E., Gao D., Wang Y. et al. Sustainable recovery of titanium from secondary resources: A review, *Journal of Environmental Management*, 2023, vol. 339, art. no. 117818, 12 p. DOI: 10.1016/j.jenvman.2023.117818
3. Bignon M., Bertrand E., Rivera-Díaz-del-Castillo P.E.J., Tancret F. Martensite formation in titanium alloys: Crystallographic and compositional effects, *Journal of Alloys and Compounds*, 2021, vol. 872, art. no. 159636, 16 p. DOI: 10.1016/j.jallcom.2021.159636.
4. Grigoriev G.Y., Kovalchuk M.V., Chaivanov B.B., Mayorov A.S. Tumanov Y.N. *Sposob polucheniya nanodispersnykh poroshkov v plazme SVCH-razryada i ustroystvo dlya yego osushchestvleniya* [A method for obtaining nanodisperse powders in microwave discharge plasma and a device for its implementation]. Patent RF no. 2455061, 2021. (In Russian).
5. Sharonov G.V., Zharin A.L., Muhurov N.I., Pantsialeyu K.V. Kontrol' metallicheskih poverkhnostey, obrabotannykh almaznym nanotocheniyem, po rabote vykhoda elektrona [Control of metal surfaces machined in accordance with the diamond nanomachining technology based on the electron work function], *Pribory i metody izmereniy [Devices and Methods of Measurements]*, 2015, vol. 6, no.2, pp. 196-203. (In Russian).
6. Gerasimov I.V., Oleshko V.S., Tkachenko D.P., Kirpichnikov A.P. Kontrol' prizhогоv lopatok kompressora gazoturbinnogo dvigatelya metodom kontaktnoy raznosti potentsialov [Control of cauterization of gas turbine engine compressor blades by the method of contact potential difference], *Vestnik Kazanskogo tekhnologicheskogo universiteta [Bulletin of Kazan Technological University]*, 2012. vol. 15, no. 17. pp. 146-149. (In Russian).
7. Samoylenko V.M. Oleshko V.S. Primeneniye pribora izmereniya kontaktnoy raznosti potentsialov «Poverkhnost' -11» v nerazrushayushchem kontrole detaley mashin [Application of the device of measurement of the contact potential difference «Surface -11» in nondestructive testing of details of machines], *Oboronnyy kompleks – nauchno-tekhnicheskomu progressu Rossii [Defense complex – scientific and technical progress of Russia]*, 2011, no. 2, pp. 3-6. (In Russian).
8. Panteleev K.V. Svistun A.I., Zharin A.L. Metody izmereniy raboty vykhoda elektrona dlya kontrolya sostoyaniya poverkhnosti v protsesse treniya [Methods for work function measurements for the test of a surface in a during friction], *Pribory i metody izmereniy [Devices and Methods of Measurements]*, 2014, no.2, pp. 107-113. (In Russian).
9. Kharlamov F.V. Kharlamov V.F. A method for studying catalytic reactions based on chemi-emission of electrons, *Russian Journal Physical Chemical B*, 2010, vol. 4, no.3, pp. 391-398. DOI: 10.1134/S199079311003005X.
10. *Svoystva elementov. Spravochnik* [Properties of elements. Handbook], ed. M.E. Drits, Moscow, Metallurgiya Publ., 1985, 672 p. (In Russian).
11. *Svoystva elementov. Spravochnik* [Properties of elements. Handbook], Moscow, Metallurgiya Publ., 1976, part 1, 600 p. (In Russian).
12. Shebzhukhova I.G. Aref'eva L.P., Khokonov Kh.B. Temperature dependence of the surface energy of various crystal faces of the polymorphic phases of actinides, *The Physics of Metals and Metallography*, 2008, vol. 105, issue 4, pp. 338-342. DOI: 10.1134/S0031918X08040042.
13. Shebzhukhova, I.G., Aref'eva L.P. Otsenka polarizatsionnoy i dispersionnoy popravok k poverkhnostnoy energii graney metallicheskih kristallov [Estimation of the polarization and dispersion corrections to the surface

energy of the faces of metal crystal], *Fiziko-khimicheskiye aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physico-chemical aspects of studying clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2020, issue 12, pp. 319-325. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.319.

14. Shebzukhova, I.G., Arefeva L.P. Anisotropy of the surface energy and work function of IIB metals, *Technical Physics*, 2019, vol. 64, issue 2, pp. 274-277. DOI: 10.1134/S1063784119020208.

15. Arefeva L.P., Shebzukhova, I.G. Electron work function and surface energy of body-centered and face-centered cubic modifications of 4d- and 5d-metals, *Physics of the Solid State*, 2016, vol. 58, issue 7, pp. 1289-1294. DOI: 10.1134/S1063783416070040.

16. Arzamasov V.B., Smirnova E.E., StroeV A.A., Polunov I.L., Rykov D.E. Rabota vykhoda elektrona splavov tugoplavkikh metallov [Electron work function of refractory metal alloys], *Izvestiya MGTU MAMI*, 2009, no. 1 (7), pp.102-104. (In Russian).

17. Li Y., Li D.Y. Electron work function, adhesion, and friction between 3d transition metals under light loads, *Wear*, 2005, vol. 259, issue 7-12, pp. 1432-1436. DOI: 10.1016/j.wear.2005.01.027.

18. Nizhenko V.I., Floka L.I. *Poverkhnostnoye natyazheniye metallov i splavov. Spravochnik* [Surface tension of metals and alloys. Handbook], Moscow, Metallurgiya Publ., 1981, 208 p. (In Russian).

Original paper

SURFACE ENERGY AND ELECTRON WORK FUNCTION FOR POLIMORPHYC MODIFICATIONS OF TITANIUM

I.G. Shebzukhova, L.P. Arefeva

¹*Kabardino-Balkarian State University named after H.M. Berbekov, Nalchik, Russia*

²*Don State Technical University, Rostov-on-Don, Russia*

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.288

Abstract: In this work, the surface energy of titanium crystal faces was estimated using the electron-statistical method, taking into account the contributions of the dispersion, polarization, and oscillation corrections. Using an analytical relationship, the values of the work function of close-packed faces of polymorphic modifications of titanium are calculated from the values of the surface energy of single crystals taking into account the crystal structure. The influence of polymorphic transformation and temperature on the anisotropy of the studied properties is shown. Based on the values of the surface and interfacial energies, which consist of the average configurational energy and the energy of chemical interaction of two parts of the metal, the cohesive energy of α - and β -titanium is estimated and its dependence on temperature is shown. On the example of tungsten-titanium and molybdenum-titanium systems, the fundamental possibility of calculating the change in the work function depending on the concentration of the surface-active component in bimetallic systems is shown, which makes it possible to predict the service life of the material.

Keywords: surface energy, electron work function, anisotropy, polymorphic modifications of titanium, cohesion energy.

Шебзухова Ирина Гусейновна – д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры теоретической и экспериментальной физики ФБГОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова»

Арефьева Людмила Павловна – д.ф.-м.н., доцент, доцент кафедры «Материаловедение и технологии металлов» ФБГОУ ВО «Донской государственный технический университет»

Irina G. Shebzukhova – Dr. Sc., Professor, Department of Theoretical and Experimental Physics, Kabardino-Balkarian State University named after H.M. Berbekov

Ludmila P. Arefeva – Dr. Sc., Docent, Department of Material Science and technology of metals, Don State Technical University

Поступила в редакцию/received: 28.07.2023; после рецензирования/revi sed: 29.08.2023; принята/accepted: 04.09.2023.