

Грабар І.Г.

МАКРОМОДЕЛЬ ВЗАЄМОДІЇ АТОМІВ ЛЕГУЮЧИХ ЕЛЕМЕНТІВ З МАТРИЦЕЮ

Показано, що взаємодія атомів легуючих елементів чи атомів домішок з матрицею основного матеріалу може створювати тиски на матрицю до 20 ГПа ат і більше, а матриця на чужорідні атоми – на порядок більші. Запропонована модель кількісної оцінки силових факторів, що, можливо, допоможе побудувати кількісну модель і зрозуміти природу холодного ядерного синтезу.

Ключові слова: легуючі елементи; домішки; тиск на матрицю; подвійні системи; холодний ядерний синтез

Grabar I.G.

MACRO MODEL THE INTERACTION OF ATOMS OF ALLOYING ELEMENTS OF THE MATRIX

It is shown that the interaction of atoms of alloying elements or impurity atoms with a matrix core material can create pressures on the matrix to 20 am GPa or more, and the matrix can do it to foreign atoms - to order more. The model of quantitative assessment of security factors that may help to build a quantitative model and understand the nature of cold fusion.

Keywords: alloying elements; impurities; pressure on the matrix; dual system; Cold fusion

Грабар И.Г.

МАКРОМОДЕЛЬ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМОВ ЛЕГИРУЮЩИХ ЭЛЕМЕНТОВ С МАТРИЦЕЙ

Показано, что взаимодействие атомов легирующих элементов или атомов примесей с матрицей основного материала может создавать давление на матрицу до 20 ГПа ат и более, а матрица на чужеродные атомы - на порядок больше. Предложенная модель количественной оценки силовых факторов, что, возможно, поможет построить количественную модель и понять природу холодного ядерного синтеза.

Ключевые слова: легирующие элементы; примеси; давление на матрицу; двойные системы; холодный ядерный синтез

Вступ.

Розрахунок термодинамічних параметрів легованих сплавів дещо затінив кінетику процесу взаємодії між чужорідним атомом і атомами матриці після затвердіння (кристалізації) сплаву. Вважається, що система, в якій виконувались умови статички до затвердіння, так само будуть виконуватись умови рівноваги і після затвердіння, згідно з відомою аксіоматикою теоретичної механіки. При цьому величезна кількість фазових діаграм подвійних та потрійних систем чомусь вказують на суттєві зміни системи при зміні концентрації легуючого елемента чи домішки.

Постановка задачі.

Дана задача виникає при теоретичному аналізі енергії активації та активаційного об'єму пластичного деформування та руйнування металічних матеріалів. Відносно вдала спроба її вирішення – принаймні, в лінійній постановці, була здійснена автором більше 10 років тому [1-2]. Виявилось, що отримана залежність енергії активації тривалого руйнування за дотримання умов стаціонарності :

$$U_0 \cong kT_s \ln \frac{[1]}{\tau_0} \quad (1)$$

дуже гарно корелює з експериментальними значеннями, отриманими з рівняння Журкова [4-6], і особливо дає гарні наближення для ОЦК і ГЦК металів та їх сплавів, що на даний момент займають більше 90% ринку металічних матеріалів машинобудування.

Даний розв'язок відкрив шлях до постановки цілого ряду нових задач, включаючи наближення для іншого параметру рівняння Журкова – активаційного об'єму, а також до можливості побудови стратегії комп'ютерного дизайну сучасних конструкційних матеріалів та стратегії складного легування сплавів, а також до пояснення багатьох явищ синергетики руйнування металічних матеріалів [3, 9-15]. З (1) слідує, що основний параметр рівняння Журкова – енергія активації – лінійно залежить від температури плавлення металічного матеріалу, і для підвищення характеристик тривалої та короткочасної міцності необхідно максимально можливо підвищувати температуру плавлення сплаву. В той же час, як показує аналіз великої кількості діаграм фазової рівноваги подвійних систем [8], в переважній більшості введення навіть невеликої кількості атомів легуючих елементів приводять до суттєвого зменшення температури плавлення:

$$\frac{dT_s}{dC_i} < 0$$

І лише більшість подвійних діаграм системи алюмінію мають

$$\frac{dT_s}{dC_i} > 0$$

Наш аналіз [1] показав, що атоми легуючого елемента (домішок) створюють надзвичайно великий внутрішній тиск в матриці основи, провокуючи всесторонній її розтяг. При цьому в [1] було показано, що співставлення діаграм подвійних систем з діаграмою температури плавлення основного елемента (матриці) від зовнішнього тиску [7] дозволяє отримати кількісні значення впливу заданої концентрації заданого легуючого елемента на величину цього тиску. В [1] було запропоновано лінійне наближення цієї оцінки. В даній роботі ми пропонуємо загальний розв'язок вказаної задачі, інтерес до якої значно зріс за останні 3 роки на фоні вдалих експериментальних рішень задачі холодного ядерного синтезу (ХЯС) [16-23] та двохрічного стійкого падіння цін на нафту, що, на нашу думку, є взаємопов'язано.

Теоретичні передумови.

Нехай температура плавлення по лінії ліквідуса подвійної діаграми фазової рівноваги описується залежністю:

$$T_s = f(c_i) \quad (2)$$

а залежність температури плавлення від зовнішнього тиску описується залежністю:

$$T_s = \varphi(P) \quad (3)$$

Тоді, позбавляючись в (2) та (3) від параметра T_s , отримуємо залежність тиску легуючих елементів (домішок) від їх концентрації C_i на матрицю основи:

$$P = \varphi^{-1}(T_s) = \varphi^{-1}[f(C_i)] \quad (4)$$

Як показує наш аналіз, P може сягати значень до 1...20 Гпа, що багаторазово перевищує значення реальної міцності більшості сучасних металічних матеріалів, але знаходиться в гарній узгодженості з теоретичною міцністю. Однак концентрація легуючих елементів (домішок) значно менше концентрації атомів матриці

$$C_i \ll C_0$$

що має привести до ще більшого навантаження легуючих (примісних) елементів. Оскільки

$$C_i + C_0 = 1 \quad (5)$$

Тоді функція перевантаження легуючих (примісних) атомів матиме вид:

$$\xi = \frac{P_i}{P_0} = \sqrt[3]{\frac{C_0^2}{C_i^2}} = \sqrt[3]{\left(\frac{1-C_i}{C_i}\right)^2} \quad (6)$$

На рис.1 дана функція зображена графічно, і гарно апроксимується в діапазоні, цікавому для практичних застосувань, наближенням типу

$$\xi = \frac{P_i}{P_0} = \frac{0,6}{C_i^{0,8}} \quad (7)$$

Як слідує з графіка, при концентрації легуючих елементів (домішок) в межах 2...3% (в масових долях), що характерно для великої кількості реальних сплавів, тиск атомів матриці на атоми легуючого елемента (домішок) зростає ще приблизно на порядок, і має сягати значень $p_i = (10...100)$ Гпа ! Такі значення тиску на даний час – на межі можливостей кращих випробувальних та технологічних камер для досліджень поведінки матерії в екстремальних умовах, що імітують умови в надрах планет та зірок, а також в технологічних камерах синтезу штучних матеріалів (діаматнів, фулеронів), та активній зоні ядерних установок.

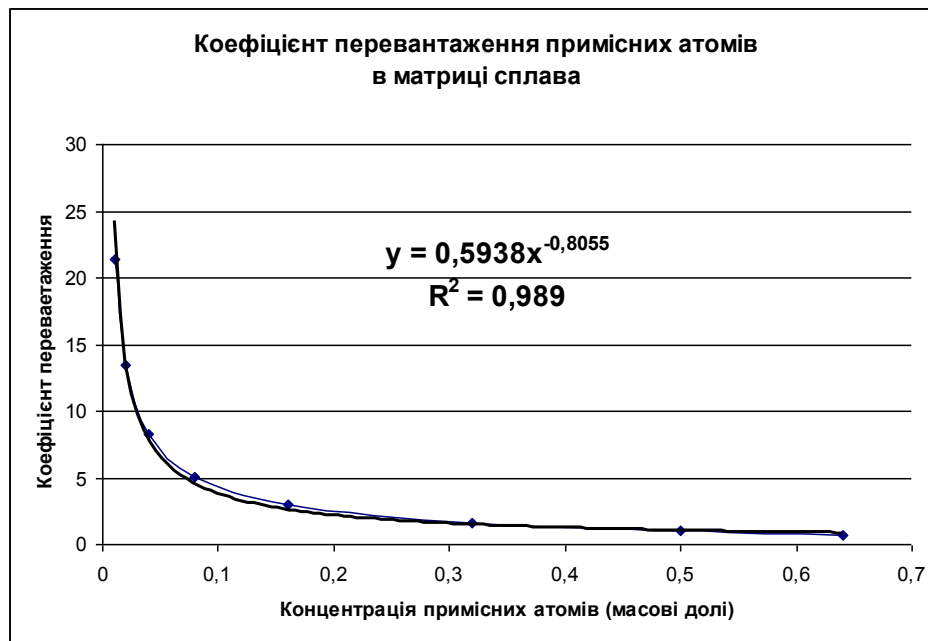


Рис. 1.

В даному випадку такі умови створені природою. При цьому не потрібні екстремальні температури, громіздкі камери, надпотужні приводи. Як вважає автор, така кількісна оцінка значень тиску $p_i = (10 \dots 100)$ Гпа може бути використана для часткових пояснень явищ холодного ядерного синтезу [16-23]. Наприклад, для пояснення результатів дослідів А.Россі – при проникненні атомів водню в кристалічну ґратку нікелю в межах 1% масових долей наші оцінки дають значення тиску матриці на вказані атоми водню в діапазоні 450 Гпа, що, можливо, є одним із чинників трансмутації з величезним виділенням енергії [16-22].

В [23] вказується, що стохастичні низькотемпературні ядерні процеси в нерівновісних твердих тілах, що стимулюються трансформацією пружної енергії в кристалічній ґратці при фазових переходах, механічних впливах, сорбції чи десорбції водню (дейтерію). ХЯС достовірно зафіксований в цілому ряді фізичних та фізико-хімічних процесів за участю дейтерію [23]. Багато таких процесів за участю природного водню мають місце в природних умовах:

- Явище сорбції-десорбції водню в металах;
- Окислювально-відновлюваний вплив на сполуки водню;
- Механічне руйнування та подрібнення водневих порід;
- Тертя.

Але на даний час не створена навіть якісна теорія ХЯС. ХЯС рекомендують замінити на «ядерні процеси, індуковані кристалічною ґраткою» [23], що викликає ще більший практичний інтерес до вказаної проблеми.

Ми в нашій моделі не розглядаємо особливостей міжатомної взаємодії нанорівня, що є предметом дослідження квантової механіки. Ціль даної роботи – отримати макроскопічні оцінки, що узгоджуються з результатами макроскопічних експериментів – $Ts(Ci)$ та $Ts(P)$.

Результати досліджень.

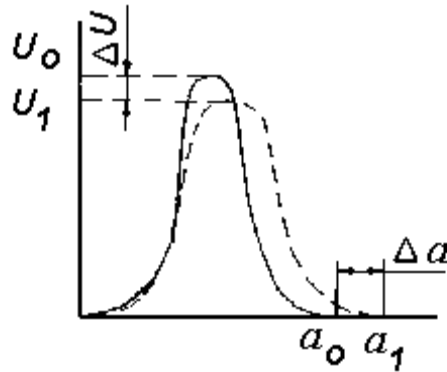


Рис.2. Зміна профілю потенційного рельєфу при його розтягу

З (1) в лінійному наближенні деформування потенційного рельєфу (рис.2) одержуємо залежність температури плавлення від зовнішньої напруги:

$$T_s(\sigma) \cong T_{s0} \left(1 - \frac{\sigma}{E} \right), \quad (8)$$

звідки при стиску ланцюжка ($\sigma = -p$) температура плавлення повинна збільшуватися:

$$T_s(p) \cong T_{s0} \left(1 + \frac{p}{E} \right) \quad (9)$$

що і підтверджують чисельні експериментальні дані [3,7].

Лінійне наближення (9) повинно виконуватися, принаймні, в області малих приростів параметра p . Взв'язавши похідну, можна отримати:

$$\left. \frac{\Delta T_s}{\Delta p} \right|_{p=0} \cong \frac{T_{s0}}{E} \quad (10)$$

Перехід від розв'язку для ланцюжка до твердого тіла (система ланцюжків) в умовах всебічного стиску потребує введення коефіцієнта пропорційності α :

$$\left. \frac{\Delta T_s}{\Delta p} \right|_{p=0} \cong \alpha \frac{T_{s0}}{K} \quad (11)$$

де K – модуль всебічного стиску.

В таблиці 1 наведені значення приросту внутрішнього тиску в гратці заліза на кожен процент i -ої домішки, отримані методом графічного диференціювання $T_s(P)$ і $T_s(C_i)$ діаграм (рис.3)

Таблиця 1

Приріст внутрішнього тиску в гратці заліза, як функція концентрації i -ої домішки (сплайн

апроксимація діаграм $\frac{dT_s}{dC_i}$ і $\frac{dT_s}{dP}$ в нульовій точці)

Домішки	$\mu_{C_i, P} = \frac{\Delta P}{\Delta C_i}$, ГПа/процент
Водень	20,4
Кисень	13,0
Бор	2,1
Вуглець	1,72
Берилій	0,99
Фосфор	0,79
Марганець	0,11
Цинк	0,07
Кобальт	0,05

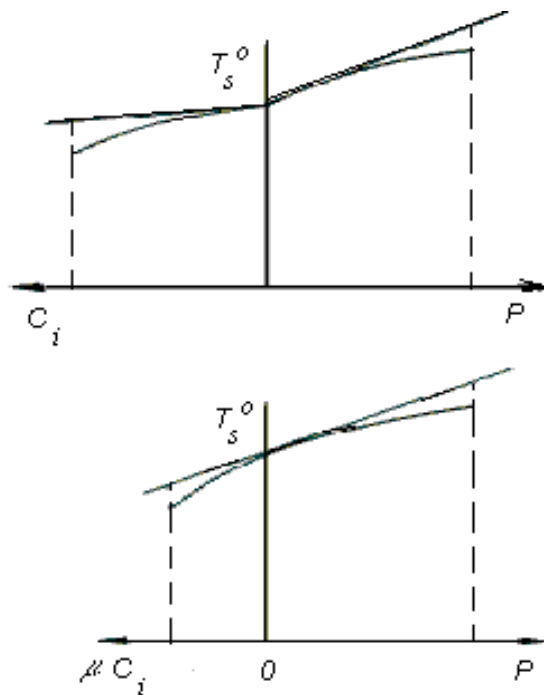


Рис.3. Сплайн-апроксимація діаграм $T_s(P)$ і $T_s(C_i)$ в нульовій точці

Як слідує з таблиці 1, при легуванні заліза воднем на кожен відсоток водню, що проник в кристалічну ґратку заліза, це еквівалентно прикладенню до ґратки заліза всебічних розтягуючих напруг 20,4 ГПа. В той же час, як слідує з рис.2, при цьому перегрузка атомів водню складе буде біля 22, що дає макроскопічне значення тиску залізної матриці на атоми водню $20,4 \cdot 22 = 448,8$ ГПа! Ми залишаємо за межами даної роботи технічні можливості практичної реалізації такого проекту, а саме – можливості впровадження в кристалічну ґратку заліза 0,01 масової долі водню. Аналіз діаграм стану подвійних систем «Fe-H» [8] вказує на можливі технічні труднощі. Однак макрооцінки тиску матриці на впроваджені атоми водню дають гігантські значення, що майже в 1000 разів перевищують експериментальні значення межі міцності, а можливо, і пояснюють ефект надзвичайно високої чутливості сталей до водневої крихкості. Другу позицію в таблиці 1 займає кисень – в лінійному наближенні це 13 ГПа/проц.. Але розміри атома кисню значно більші, і насичення кристалічної ґратки заліза атомами кисню, очевидно, значно складніше, ніж у випадку з воднем.

Висновки.

1. Запропоновано алгоритм розрахунку тиску чужорідних атомів (легуючих елементів чи домішок) на всебічний розтяг ґратки основного елемента та відповідно стискування цих чужорідних атомів ґраткою основного елемента.

2. Отримані наближені залежності для кількісної оцінки значень даних тисків.

3. На прикладі системи Fe-H показано, що при впровадженні в кристалічну ґратку 1% атомів водню (в масових долях) це приводить до утворення розтягуючи напруг в ґратці заліза більше 20 ГПа, а на атоми водню ґратка заліза створюватиме тиск біля 450 ГПа, що може слугувати поясненню процесу ХЯС (наприклад, в E-cat дослідях А. Россі)

Література:

1. Грабар І.Г. Термоактиваційний аналіз і синергетика руйнування. – Житомир.:ЖІПІ. – 2002. – 312 с.
2. Грабар І.Г. Термоактивационный анализ разрушения ОЦК и ГЦК металлов // Изв.АН СССР.Металлы. 1989. N 3. С.119.
3. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. М.: АН СССР, 1945. 422 с.
4. Регель В.Р., Слущкер А.И., Томашевский Э.Е. Кинетическая природа прочности твердых тел. М.: Наука. 1974. 512 с. 17.
5. Журков С.Н. К вопросу о физической основе прочности // ФТТ. 1980. Т.22. N 11. С.3344.
6. Журков С.Н. Проблема прочности твердых тел. Вестн. АН СССР, 1957, N11. 78 с.
7. Григорович В.К. Металлическая связь и структура металлов. М.: Наука. 1988. 296 с.
8. Диаграммы состояния двойных металлических систем. Справочник: В 3 т.: / Под общ. ред. Н.П. Лякишева. — М.: Машиностроение, 1996 – 2000. — 992 с. 1024 с. 448 с.

9. Хакен Г. Синергетика. Иерархия неустойчивостей в самоорганизующихся системах и устройствах - М.: Мир, 1985 - 411 с.
10. Иванова В.С. Механика разрушения и конструкционная прочность с позиций синергетики.- Вестник машиностроения, 1989, N 12, С.8-12.
11. Иванова В.С., Терентьев В.Ф. Природа усталости металлов. - М.: Металлургия, 1975 - 455 с.
12. Иванова В.С., Шанявский А.А. Количественная фрактография. Усталостное разрушение. - Челябинск: Металлургия. 1988.- 400 с.
13. Баланкин А.С., Любомудров А.А., Севрюков И.Т. Кинетическая теория кумулятивного бронепробивания. -М.: МО СССР. 1989. - 269с.
14. Баланкин А.С. Синергетика и механика деформируемого тела. ЖТФ, 1989, т.59, N 12
15. Олемской А.И. Фрактальная кинетика ползучести твердого тела.ФТТ, 1988, т.30, N 11, С. 3384 - 3394.
16. <http://www.sifferkoll.se/sifferkoll/wp-content/uploads/2014/10/LuganoReportSubmit.pdf>
17. A. F. Ghoniem, Needs, resources and climate change: clean and efficient conversion technologies, Progress in Energy and Combustion Science 37 (2011), 15-51, fig.38.
18. http://www.whatisnuclear.com/physics/energy_density_of_nuclear.html.
19. http://en.wikipedia.org/wiki/File:Energy_density.svg.
20. R. Raiola et al. Enhanced d(d,p)t fusion reaction in metals, Eur. Phys. J. A 27, s01, 79-82 (2006)
21. C.Rolf , Nuclear reactions in stars far below the Coulomb barrier, Progress in Particle and Nuclear Physics 59 (2007) 43-50.
22. n_TOF Collaboration, M.Barbagallo et al. Measurement of ${}^7\text{Be}(n,\alpha){}^4\text{He}$ and ${}^7\text{Be}(n,p){}^7\text{Li}$ cross sections for the Cosmological Lithium Problem, CERN-INTC-2014-049 / INTC-P-417, 05/06/2014
23. Ивасьшин Г.С. Научные открытия в микро- и нанотрибологии// Трение и смазка в машинах и механизмах. 2008. -4:24-7

Стаття надійшла до редакції 20.04.2016.