

УДК 543.442.3

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПЛОТНОСТИ ДИСЛОКАЦИЙ ПО РЕНТГЕНОВСКОМУ АНАЛИЗУ МИКРОИСКАЖЕНИЙ В ПОЛИКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛАХ

Д.Г. Малыхин, В.В. Корнеева

Национальный Научный центр «Харьковский физико-технический институт»

Украина, 61108, г. Харьков, ул. Академическая, 1

E-mail: malykhin@kipt.kharkov.ua

Поступила в редакцию 27 января 2010 г., принята к публикации 30 марта 2010 г.

Проведен анализ рассмотренной ранее рентгеновской модели дифракции на краевых дислокациях и методики анализа дислокационной структуры по первичным параметрам функции Фойгта, используемой при моделировании формы рентгеновских линий. Отмечено, что на точность расчёта плотности краевых дислокаций существенно влияет характер их распределения и приёмы усреднения характеристик. С учётом случайного распределения краевых дислокаций синтезирован профиль дифракции от их окрестностей в линейном приближении дифракции. На основе этого сделано уточнение первичного параметра рентгеновских линий в модели функции Фойгта, используемого для расчёта плотности краевых дислокаций.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: рентгеноструктурный анализ, дифракция, микроискажения, дислокации, модель, расчёт, аппроксимация, функция Фойгта, функция Коши, плотность дислокаций

DETERMINATION OF DISLOCATIONS DENSITY ON ANALYSIS OF MYCROSTRAINS IN POLYCRYSTALLINE MATERIALS

D.G. Malykhin, V.V. Kornyeveva

National Scientific Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"

Ukraine, 61108, Kharkov, Academicheskaja st., 1

An analysis of a pattern of X-ray diffraction on edge dislocations and techniques proposed earlier for analysis of dislocations structure in materials on primary parameters of Voigt function model of X-ray line shape is carried out. It is noted that accuracy of edge dislocations density calculations is considerably depended on character of its distribution and methods of averaging of characteristics. Line shape of diffraction on edge dislocations areas in linear approach of diffraction is built with taking into account of its random distribution. On base of it a more exact value of primary parameter of X-ray lines shape which is using in Voigt model at calculation of dislocations density is determined.

KEY WORDS: X-ray analysis, diffraction, strains, dislocations, pattern, calculation, approximation, Voigt function, Cauchy function, dislocations density

ВИЗНАЧЕННЯ ЩІЛЬНОСТІ ДИСЛОКАЦІЙ ПО АНАЛІЗУ МІКРОСПОТВОРЕНЬ У ПОЛІКРИСТАЛІЧНИХ МАТЕРІАЛАХ

Д.Г. Малыхин, В.В. Корнеева

Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»

Україна, 61108, м. Харків, вул. Академічна, 1

Проведено аналіз розглянутої раніше рентгенівської моделі дифракції на крайових дислокаціях та методики аналізу дислокаційної структури за первинними параметрами функції Фойгту, що застосовується для моделювання форми рентгенівських ліній. Відзначається, що на точність розрахунків щільності крайових дислокацій значно впливає характер їх розподілу та засоби усереднення характеристик. З урахуванням випадкового розподілу дислокацій синтезовано профіль дифракції від довкілля крайових дислокацій у лінійному приближенні дифракції. На базі цього проведено уточнення величини первинного параметру рентгенівських ліній, що застосовується у моделі функції Фогту та використовується для подальшого розрахунку щільності крайових дислокацій.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: рентгеноструктурний аналіз, дифракція, викривлення, дислокації, модель, розрахунок, апроксимація, функція Фойгту, функція Коші, щільність дислокацій

Данная работа касается одного из подходов в рентгеновском анализе дислокационной структуры деформированных металлов (в основном с ГПУ-решёткой), отличительная особенность которого состоит в исключении неоднозначностей, связанных с существованием в материалах межзёренных и межфазных искажений. Общая задача заключается в построении модели рентгеновской дифракции на дислокациях и разработке основы метода определения их плотности по параметрам искажений микроструктуры в деформированных металлах [1,2]. Целью данной работы является уточнение формулы определения плотности дислокаций. Предметом исследования являются неоднородные искажения, существующие в пределах областей когерентного рассеяния (ОКР) и дающие эффект дифракции, описываемый классической функцией Коши. Объектом исходной модели является поле упругих смещений в окрестности краевой дислокации, расположенной в плоскости отражения. Упругие смещения взяты как компоненты комплексно-сопряжённой логарифмической функции $W(z) = (b/2\pi)\ln(x - iy)$, создающей на комплексной плоскости $(Z) = (x, y)$ «разрез» толщиной в вектор Бюргерса b вдоль полуоси x [1]. При этом ось x направлена вдоль плоскости отражения, а вектор b – вдоль направления дифракции (ось y). Формулы дифракции выведены в линейном приближении – с линейным описанием дистанций Δu между парами атомов:

$$\Delta Y_n = nd + \Delta u_n = nd + \varepsilon nd + \frac{\gamma}{2}(nd)^2 + \frac{\delta}{6}(nd)^3 + \dots \approx nd(1 + \varepsilon) \quad (n = \Delta m), \quad (1)$$

где m – порядковый номер чередования плоскостей отражения; u_m – упругое смещение атомов вдоль направления дифракции; ε – проекция нормальных искажений вдоль этого направления; γ и δ – вторая и третья производные смещений атомов по y ; d – межплоскостное расстояние.

При таком описании предметом аналитического расчёта дифракционных сумм становится статистическое представление распределения $F(\varepsilon)$ нормальных искажений решётки в пределах ОКР, а профиль $I^\varepsilon(h)$ дифракции от окрестности дислокации (ПДД) наследует полное подобие этого распределения, согласно следующим формулам:

$$I^\varepsilon(h) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-1/2}^{1/2} F(\varepsilon) \exp(2\pi i n(\varepsilon H + h)) d\varepsilon \quad (h = d \cos \theta \Delta 2\theta / \lambda); \quad (2)$$

$$\int_{-1/2}^{1/2} I^\varepsilon(h) \exp(-2\pi i n h) dh = \int_{-1/2}^{1/2} F(\varepsilon) \exp(2\pi i n \varepsilon H) d\varepsilon, \quad (3)$$

где H – порядок отражения; θ – угол дифракции; λ – длина волны рентгеновского излучения. Подобие функций следует из формулы (3), представляющей результат обратного Фурье-преобразования формулы (2), и выполняется при сочетании $h = -\varepsilon H$. Для приведенных нормированных аналогов ПДД $i^\varepsilon(q)$ и $f(q)$, где $q = \varepsilon/\varepsilon_0$, $\varepsilon_0 = b/\pi R$, $q = 1$ при $\varepsilon = \varepsilon_0$, $f(q) = \varepsilon_0 F(\varepsilon)$, а R – радиус окрестности дислокаций, получена следующая формула [1]:

$$i^\varepsilon(q) = f(q) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{(\sqrt{q^2 + \cos^2 \varphi} - |q|)^2}{\cos^2 \varphi \sqrt{q^2 + \cos^2 \varphi}} d\varphi = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \frac{(1 - 2 \cos^2 \varphi) d\varphi}{\sqrt{q^2 + \cos^2 \varphi}}, \quad (4)$$

где φ – угловая координата точек окрестности относительно ядра дислокации.

Разрабатываемый метод согласован с формализмом аппроксимации рентгеновских линий функцией Фойгта. Так, путём подбора параметров свёртки ПДД (4) с функцией Гаусса получено подобие функции Коши, совпадающее с оригиналом в пределах 1% от значения в максимуме при следующем соотношении параметров: $\varepsilon_0 = 2,07 w_c = 1,317 \beta_c$, где w_c и β_c – полуширина (ширина на полувысоте) и интегральная ширина функции Коши.

В результате для определения плотности краевых дислокаций ρ_ε (при условии расположения их в отражающих плоскостях) получена формула, идентичная по своей структуре с классическим прототипом [3]:

$$\rho_\varepsilon = \frac{1}{\pi R^2} = \pi \frac{\varepsilon_0^2}{b^2} \quad \left(\varepsilon_0 = \frac{b}{\pi R} \right). \quad (5)$$

Для данной модели в формуле (5) отсутствует множитель, равный $3/2$ при усреднении по структурно изотропному ансамблю [2], а b равно межплоскостному расстоянию. Расчёт на основе этой формулы даёт значения, превышающие экспериментальные данные [2] на полпорядка – в 2-3 раза. Такое несоответствие связывалось с некорректным определением радиуса R окрестности дислокаций по предложенному критерию, согласно которому значения нормальных искажений на границах окрестностей приравнивались нулю [2]. Считалось, что значение радиуса R , определённого таким образом, зависит от ориентаций соседних дислокаций. С введением определённой операции соответствующего усреднения для данной формулы был выведен дополнительный множитель, равный $3/8$. Это значительно приближало результаты расчёта к экспериментальным данным, однако в такой формальной процедуре не видится достаточного физического и математического обоснования.

Цель данного сообщения – провести анализ приёмов усреднения и представить дополнение к исходной модели, направленное на уточнение расчёта плотности краевых дислокаций. Дополнение включает учёт случайного распределения дислокаций.

Учёт случайного распределения дислокаций проведен с выбором функции распределения расстояний между смежными дислокациями, выраженных через радиус R их окрестностей с математическим ожиданием πR_0^2 площади окрестности дислокации. Использована функция следующего вида:

$$p(R) = \frac{1}{\pi R_0^2} \exp\left(-\frac{R^2}{R_0^2}\right); \quad \left(2\pi \int_0^\infty p(R) R dR = 1\right). \quad (6)$$

На основе формулы (6) проведен синтез ПДД, относящегося к случайному распределению краевых дислокаций. В частности, исходный профиль $f(q)$ (4), обусловленный постоянством радиуса R , преобразовывался в синтезированный профиль $\phi(q)$ посредством следующей рабочей формулы:

$$\phi(q) = \int_0^\infty z f(qz) \exp(-z^2) dz^2 \quad \left(z = \frac{R}{R_0}\right). \quad (7)$$

Далее с целью получить наилучшее подобие функции Коши, как это было проделано ранее [2] для функции $f(q)$ (4), производилась оптимальная свёртка профиля $\phi(q)$ с функцией Гаусса.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

С целью учёта случайного распределения дислокаций в первую очередь проведено определение кажущегося значения $\langle \varepsilon_0 \rangle$ параметра $\varepsilon_0 = b/\pi R$ (5) функции $f(\varepsilon/\varepsilon_0)$ (4), изменённого в результате усреднения по распределению радиусов R (6):

$$\langle \varepsilon_0(R) \rangle = \frac{b}{\pi} \frac{\overline{1}}{R} = \frac{b}{\pi} \frac{2}{R_0^2} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{R^2}{R_0^2}\right) dR = \frac{b\sqrt{\pi}}{\pi R_0^2} = \varepsilon_0(R_0) \sqrt{\pi}. \quad (8)$$

Таким образом, параметр $\varepsilon_0(R_0) = b/\pi R_0$ меньше кажущегося собственного значения на множитель $\sqrt{\pi}$, что значительно приближает расчёт по формуле (5) к соответствию с экспериментальными измерениями, уменьшая результат расчёта в три раза.

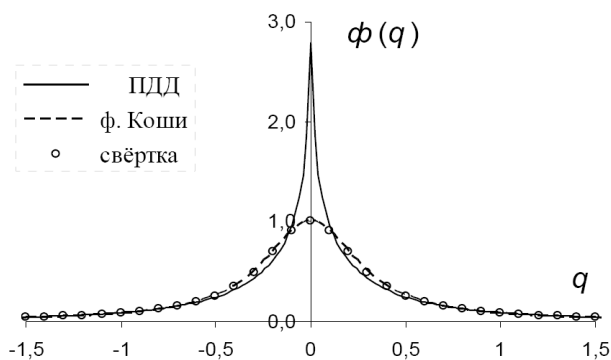


Рис. 1. Профиль дифракции (ПДД) от случайного распределения краевых дислокаций (в линейном приближении) и его свертка с функцией Гаусса, имитирующая функцию Коши.

На рисунке 1 приведен вид профиля $\phi(q)$ (7) и его оптимальная свёртка с функцией Гаусса. Свёртка даёт наилучшее приближение к функции Коши с неточностями не выше 1% от её максимума. Это достигается при $\varepsilon_0 = 1,69w_C = 1,08\beta_C$, что даёт уменьшение ε_0 по сравнению с исходной моделью ($\varepsilon_0 = 2,07w_C$) в 1,22 раза, а плотности дислокаций (формула (5)) – в полтора раза, – и тем самым заметно отличается от параметрического усреднения (8). Из этого следует, что параметрические усреднения, касающиеся функции $f(q)$, а тем более – формальные приёмы, о которых говорилось выше, – далеки от требуемой точности. Учёт случайного распределения краевых дислокаций способом синтеза $\phi(q)$ обладает в этой связи преимуществом и заметно приближает модель к согласию с экспериментом.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, показано, что учёт характера распределения дислокаций является существенным при оптимизации расчёта их плотности.

Существенным является также способ учёта распределения дислокаций при получении конечных характеристик. В этой связи формальные приёмы усреднения могут давать значительную ошибку. Это, в частности, касается приёма усреднения, применённого в работе [2] при оптимизации формулы расчёта плотности краевых дислокаций.

Учёт случайного распределения краевых дислокаций даёт снижение расчётных значений их плотности в полтора раза, приближая эти значения к соответствию с экспериментальными данными. При этом путём соответствующего монтажа профиля дифракции и получения оптимальной свёртки, повторяющей функцию Коши, для параметра ε_0 и его 2θ -углового аналога определены следующие соотношения: $\varepsilon_0 = 1,69w_C = 1,08\beta_C$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Малыхин Д.Г., Корнеева В.В., Старолат М.П. Расчёт рентгеновской дифракции от поля искажений краевых дислокаций // Вісник Харківського університету, сер. фізична: «Ядра, частинки, поля» – 2009. – № 845. – В.1(41). – С. 77-81.
2. Малыхин Д.Г., Корнеева В.В. Применение модели рентгеновской дифракции на дислокациях при анализе микроискажений в поликристаллических материалах // Вісник Харківського університету, сер. фізична: «Ядра, частинки, поля» – 2009. – № 859. – В. 2(42). – С. 83-88.
3. Williamson G.K., Smallman R.E. Dislocation Densities in Some Annealed and Cold-Worked Metals from Measurements on X-Ray Debye-Sherrer Spectrum // Phil. Mag. – 1956. - Vol.1, №1. - P.34-46.