

КОНЦЕНТРАЦИОННЫЕ ЗАВИСИМОСТИ СТРУКТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ОЦК-СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА

А.Б. Колымагин, И.С. Монахов

Московский государственный институт электроники и математики НИУ ВШЭ

E-mail: met@miem.edu.ru

В работе [1] представлена модель, описывающая межатомные взаимодействия атомов компонентов в ферромагнитных ОЦК – растворах в сплавах на основе Fe с учетом первых трех координационных сфер. В этой модели размерный фактор (РФ) приводит к возникновению статических смещений атомов из узлов идеальной (средней) кристаллической решетки. Следствием такого смещения атомов является возникновение локальных напряжений, которые приводят к изменению параметра кристаллической решетки и свободной энергии смешения сплавов. На основании модели в [1] сделан вывод о том, что с ростом РФ должно происходить уменьшение размера области стабильности ОЦК-фазы и изменение размера зерна. В связи с этими обстоятельствами представляло значительный интерес проведение экспериментального исследования ОЦК – сплавов систем Fe –(Cr, V, Mo), в которых РФ последовательно изменяется от наименьшего значения в системе Fe –Cr до наибольшего в системе Fe-Mo.

Эксперимент проведен на рентгеновском дифрактометре ДРОН-3, оснащенный автоматизированной системой управления на базе персонального компьютера. Использовалась стандартная схема фокусировки по Брэггу-Брентано, щели Соллера, Co K α излучение.

При съемке на поверхность образцов наносился тонкий слой порошка кремния, который служил эталоном при определении параметра кристаллической решетки сплавов и оценке ширины дифракционных линий. На излучении Co K α кремний имеет два отражения в области углов Θ 60° - 80° и поэтому является удобным эталоном [2]. В ходе измерений регистрировались отражения (220) и (310) железа и (440) и (531) кремния. На рис. 1 представлена дифрактограмма образца Fe-2 ат.% Cr, на которой видны линии ОЦК α -твердого раствора и эталонного кремния.

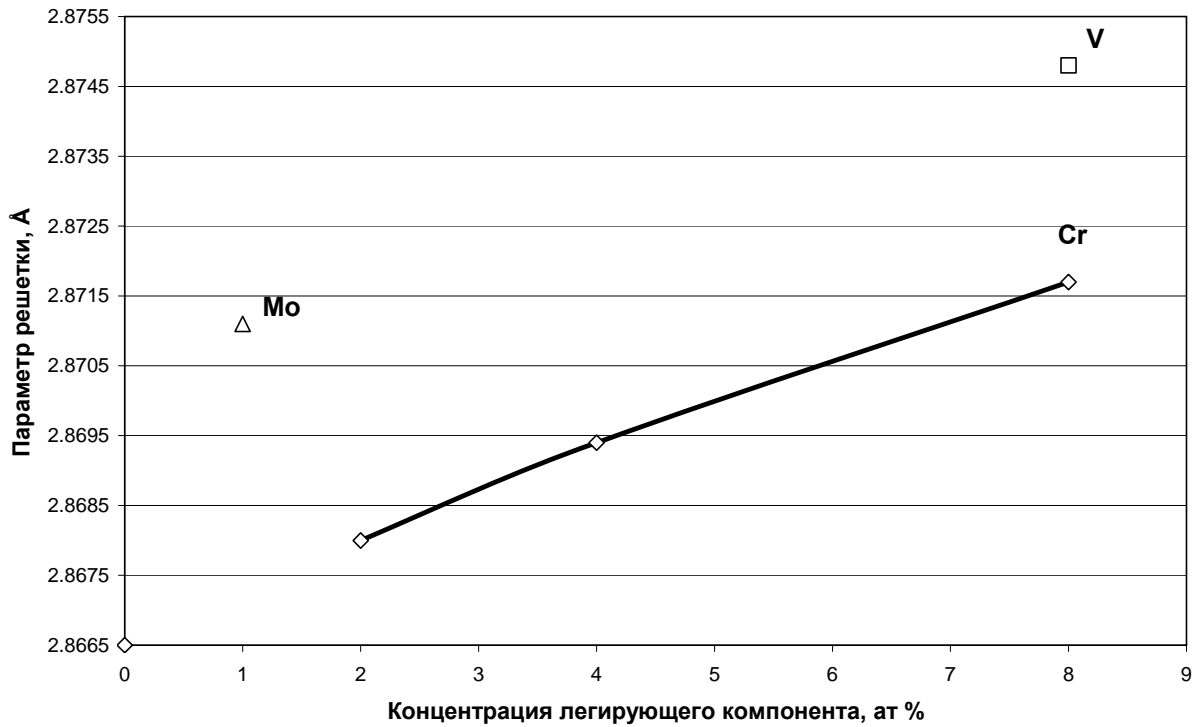


Рис. 1: Дифрактограмма образца Fe-2 ат.% Cr и эталона (Si)

Результаты определения параметра решетки сплавов, полученные методом сравнения с эталоном, представлены на рис. 2. Видно, что увеличение атомного радиуса легирующего элемента приводит к значительному увеличению параметра решетки сплава.

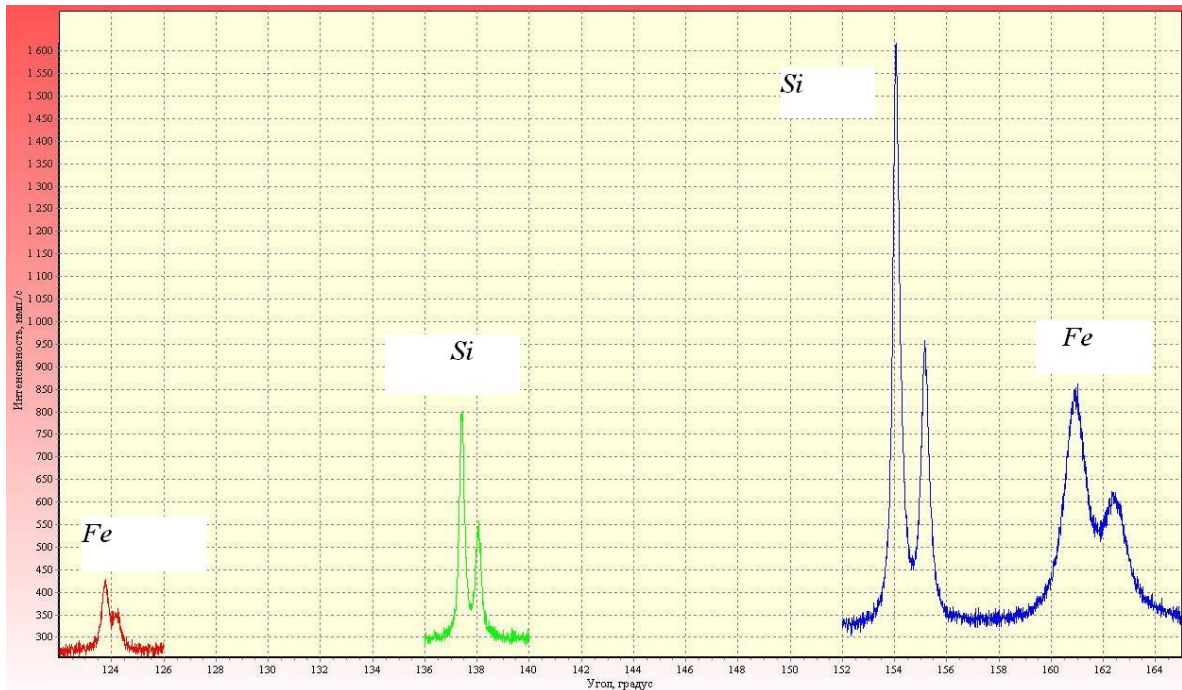


Рис. 2: Влияние размерного фактора на параметр решетки сплавов

Полученные экспериментальные результаты использованы также для оценки размеров областей когерентного рассеяния (ОКР) в сплавах. На всех рентгенограммах можно отметить увеличение полуширины дифракционных линий по мере увеличения концентрации легирующих компонентов, а также их атомного радиуса.

На экспериментальную полуширину дифракционной линии кроме физических факторов (размеры ОКР и величина микронапряжений) оказывают влияние инструментальные факторы: дисперсия (в сторону уширения линии), вклад которой возрастает при увеличении угла дифракции, а также различные факторы, зависящие от настройки прибора. Результирующая экспериментальная кривая формируется в результате процедуры свертки функций, описывающих физические и инструментальные факторы.

Для учета инструментальных факторов использовался метод сравнения с эталоном, в качестве которого был выбран кристалл кремния. При этом предполагалось, что размеры ОКР эталонного кремния настолько велики, что практически не влияют на полуширину линий кремния, которая зависит от инструментальных факторов и дисперсии, для которой учитывалась угловая зависимость. Отделение фона, разделение α -дублета и определение полуширины линий проводилось с помощью стандартной программы PDWin 4.0.

Следует отметить, что полученные таким образом оценки являются приближенными и позволяют лишь выявить интересную тенденцию влияния легирования. Для получения надежных оценок потребуются измерения по крайней мере двух порядков отражения от выбранных плоскостей и обработка результатов, учитывающая возможный вклад микронапряжений.

В предположении, что функции, описывающие физическое и инструментальное уширение, могут быть приближенно описаны гауссовскими кривыми, суммарную полуширину линии β можно выразить следующим образом:

$$\beta^2 = \beta_{\phi}^2 + \beta_{\varepsilon}^2 \quad (1),$$

где β_{ϕ} – полуширина функции, описывающей физические факторы, β_{ε} – полуширина функции, описывающей инструментальные факторы.

Из формулы (1) находилась величина β_{ϕ} , с помощью которой оценивались размеры ОКР:

$$L_{ОКР} = \frac{\lambda}{\beta_{\phi} \cos \theta} \quad (2),$$

где λ – длина волны используемого рентгеновского излучения, θ – угол дифракции.

Таблица. Результаты оценки размеров областей когерентного рассеяния (ОКР) сплавов систем Fe-(Cr,V,Mo), составы сплавов даны в ат.%.

Состав	100%Fe	Fe-2Cr	Fe-4Cr	Fe-8Cr	Fe-8V	Fe-1Mo
L_ОКР_по линии (220) А	2600	880	750	740	1100	770
L_ОКР_по линии (310) А	2000	750	520	510	–	580

Полученные экспериментальные результаты подтверждают теоретический вывод об уменьшении размера ОКР в ОЦК- твердых растворах систем Fe-(Cr, V, Mo) с ростом размерного фактора.

1. Удовский А.Л. Металлы, 2011, № 5, с. 121-143.
2. Монахов И.С., Новоселова Е.Г., Смирнов И.С., Удовский А.Л. Влияние легирования на структурные характеристики и физические свойства сплавов Fe-Cr и Fe-V. Труды XXI международной конференции «Радиационная физика твердого тела», Изд-во ФГБНУ «НИИ ПМТ», 2011, том 1, с. 139-147.