Доклады Академии наук СССР
1955. Том 103, № 4

ТЕХНИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Б. Я. ПИНЕС *

О МИКРОДЕФОРМАЦИЯХ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКЕ α-Fe У ЗАКАЛЕННОЙ И ОТПУЩЕННОЙ СТАЛИ

(Представлено академиком Г. В. Курдюмовым 14 XII 1954)

1. Ниже приводятся данные рентгенографического исследования стали У-10А после закалки и последующего отпуска при различных температурах. Для определения структурных изменений, соответствующих наблюдаемому размытию линий рентгенограммы, выполнялся гармонический анализ формы линий при помощи методики, описанной в (1).

2. Опыты были выполнены над образцами, имевшими форму параллелепипедов размерами 10 × 10 × × 12 мм, которые подвергались закалке в 20% растворе H_2SO_4 от 960° и отпуску при различных температурах в атмосфере H_2 (в течение 1 часа при каждой температуре). Рентгенограммы получались в излучении Fe-анода. Детально исследовалось размытие линии (211). В качестве стандарта для определения инструментальной ширины использовалась линия (211) рентгенограммы образца, прошедшего отпуск при температуре 700°.

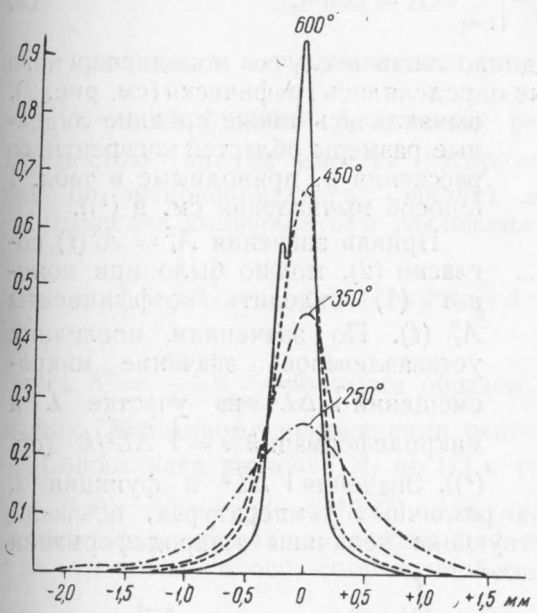


Рис. 1

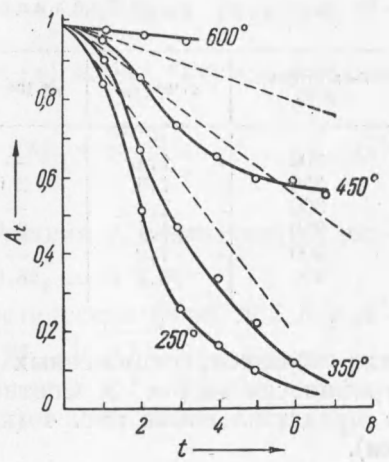


Рис. 2

Кривые почернения линии (211) у образцов, отпущенных при температурах 200, 350, 450 и 600°, приведены на рис. 1. По данным кривых рис. 1 вычислялись (способом, изложенным в (1)) коэффициенты разложения в ряд Фурье A_t функции истинного расширения линий $f(x)$. Значение A_t для линий рентгенограмм, соответствующих разным температурам отпуска, показаны на рис. 2. Зависимость $A_t = A_t(t)$ как

* В экспериментальной части работы принимал участие И. Н. Гольдштейн.

следует из рис. 2 (ср. [1,4]), соответствует наложению двух причин размытия линий: мелкодисперсности зерен (областей когерентного рассеяния) и наличия искажений решетки. Только эти эффекты получаются при отпуске выше 250° [2,3]. Для однозначного разделения эффектов требуется, как известно [5], сопоставить значения коэффициентов A_t у линий, отвечающих разным порядкам отражения от одной и той же плоскости. Ввиду отсутствия таких отражений на наших рентгенограммах пришлось прибегнуть к использованию приближенных способов разложения коэффициентов A_t на множители, обусловленные эффектами «дисперсности» ($A_t^{\text{д}}$) и «искажений» ($A_t^{\text{и}}$), согласно известному соотношению

$$A_t = A_t^{\text{д}} \cdot A_t^{\text{д}}. \qquad (1)$$

Один из примененных способов основан на пренебрежении наличием распределения зерен по размерам. Принималось, что множители $A_t^{\text{д}}$, соответствующие эффекту дисперсности, можно определить при помощи соотношения

$$\frac{\partial A_t^{\text{д}}}{\partial t} = \frac{\partial A_t^{\text{д}}}{\partial t}\bigg|_{t=0} = K = \text{const}, \qquad (2)$$

которое, строго говоря, справедливо лишь в случае монодисперсного образца. По значениям K, которые определялись графически (см. рис. 2), вычислялись также средние линейные размеры областей когерентного рассеяния a, приводимые в табл. 1 (способ вычисления см. в [1]).

Таблица 1

Т-ра отпуска в °С	$a \cdot 10^8$, см	$a^* \cdot 10^8$, см
200	1,4	—
250	1,6	2,0
300	2,3	—
350	4,4	3,0
400	7,0	—
450	15,2	18,0

Приняв значения $A_t^{\text{д}} = A_t^{\text{д}}(t)$ согласно (2), можно было при помощи (1) отделить коэффициенты $A_t^{\text{и}}(t)$. По значениям последних устанавливалось значение микросмещений $\sqrt{\overline{\Delta L^2}}$ на участке L и микродеформаций $\varepsilon = \sqrt{\overline{\Delta L^2}}/L$ (ср. [1]). Значения $\sqrt{\overline{\Delta L^2}}$ в функции L для образцов, отпущенных при различных температурах, показаны графически на рис. 3. Соответствующие величины микродеформации ε представлены на рис. 4 (крестики).

3. Второй приближенный способ разделения коэффициентов A_t на множители $A_t^{\text{д}}$ и $A_t^{\text{и}}$ основан на аппроксимировании кривой $f(x)$. Как известно, распределение интенсивности у размытой линии $h(x)$ может быть представлено выражением

$$h(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(y)\, g(y-x)\, dx, \qquad (3)$$

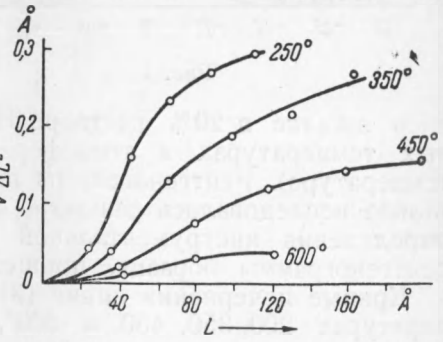


Рис. 3

где $g(x)$ — так называемая кривая инструментальной ширины. Согласно (3), при желании аппроксимировать кривую $f(x)$ какой-либо функцией, дающей «колоколообразное» распределение, нужно удовлетворить условию чтобы в предельном случае, когда размытие исчезает, ап-

проксимирующая функция обращалась бы в так называемую дельта-функцию (а все коэффициенты A_t становились бы равными 1). Можно указать следующие две дельта-подобные функции, которыми аппроксимируется $f(x)$ в предельных «чистых» случаях размытия линий рентгенограммы, соответствующих наличию только дисперсности или только искажений:

$$f_1(x, \beta_1) = \frac{1}{\pi} \frac{\beta_1}{\beta_1^2 + x^2}; \tag{4}$$

$$f_2(x, \beta_2) = \frac{1}{\sqrt{\pi \beta_2}} \exp\left(-\frac{x^2}{\beta_2}\right). \tag{5}$$

Обе функции f_1 и f_2 удовлетворяют условиям: $f \to 0$ при $\beta \to 0$, когда $x \neq 0$, и $f \to \infty$ при $\beta \to 0$, если $x = 0$, причем $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,dx = 1$. Таким образом, как f_1, так и f_2 обращаются в δ-функции при $\beta \to 0$.

Коэффициенты разложения функции $f_1(x)$ в ряд Фурье будут

$$A_t' = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} f_1(x) \cos 2\pi t \frac{x}{\alpha'}\,dx = \exp\left(-\frac{2\pi t \beta_1}{\alpha'}\right) \tag{6}$$

(α' — интервал, в котором ведется разложение). Так как $K' = \left.\frac{\partial A_t'}{\partial t}\right|_{t=0} = \frac{2\pi\beta_1}{\alpha'} \neq 0$, то функция f_1 отвечает размытию, обусловленному дисперсностью (причем имеется распределение линейных размеров зерен по экспоненциальному закону): $A_t' = A_t^{\text{д}}$.

Вычисляя коэффициенты разложения $f_2(x)$ в ряд Фурье, находим

$$A_t'' = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} f_2(x) \cos 2\pi t \frac{x}{\alpha'}\,dx = \exp\left(-\frac{\pi^2 t^2 \beta_2}{\alpha'^2}\right). \tag{7}$$

Здесь $K'' = \left.\frac{\partial A_t''}{\partial t}\right|_{t=0} = 0$; таким образом, функция f_2 соответствует размытию, вызванному искажениями решетки $A_t'' = A_t^{\text{и}}$.

Сопоставляя значение A_t по (7) с теоретической формулой для $A_t^{\text{и}}$ (ср. [1,4]): $A_t^{\text{и}} = \exp(-2\pi^2 l^2 \overline{Z^2})$, где $a_3 \sqrt{\overline{Z_3^2}} = \sqrt{\overline{\Delta L^2}}$, a_3 — период решетки вдоль нормали к отражающей плоскости и l — индекс плоскости относительно оси, сопряженной с a_3, можно показать, что:

$$\varepsilon = \frac{\sqrt{\overline{Z_l^2}}}{t} = \frac{\sqrt{\overline{\Delta L^2}}}{L} = \frac{1}{\alpha' l} \sqrt{\frac{\beta'}{2}},$$

т. е. что функция f_2 описывает размытие линий при наличии о д н о р о д н о й микродеформации, когда $\varepsilon \neq \varphi(L)$, чему соответствует $\beta_2 = \text{const}$. Неоднородному ε, $\varepsilon = \varphi(L)$, будет эквивалентно непостоянство β_2.

В соответствии с (6) и (7), если размытие линии обусловлено обоими эффектами:

$$A_t = A_t^{\text{д}} A_t^{\text{и}} = \exp(-Mt - Nt^2), \quad C_t = -\ln A_t = Mt + Nt^2, \tag{8}$$

где $$M = 2\pi\beta_1/\alpha' \text{ и } N = \pi^2\beta_2/\alpha'^2.$$

Разумеется, величины C_t выражаются формулой (8) лишь в простейшем случае, если эффект дисперсности соответствует экспоненциальному распределению зерен по размерам, а эффект искажений — однородной микродеформации. Более общие случаи можно трактовать

как такие, где M и N являются функциями t. При этом всегда для $t \to 0$ C_t должно обращаться в нуль; для $t \neq 0$ C_t представится полиномом, состоящим не из двух, а из большего числа слагаемых, содержащих t в различной (возрастающей) степени.

Приближенно можно принять, что часть C_t, соответствующая дисперсности, сводится к линейному члену (слагаемые C_t, определяемые искажениями, во всех случаях не содержат линейного члена). Отделив на графике $C_t = C_t(t)$ линейную часть и приняв ее соответствующей $-\ln A_t^{\text{д}}$, мы тем самым фиксируем и значения $A_t^{\text{и}}$, при помощи которых может быть вычислено значение ε. Полученные указанным путем величины ε нанесены на рис. 4 (кружки). По отделенным на графике $C_t = C_t(t)$ величинам $A_t^{\text{д}}$ вычислялись также линейные размеры областей когерентного рассеяния a^*. Они оказались близкими к значениям a, определенным первым из описанных выше способов (см. табл. 1).

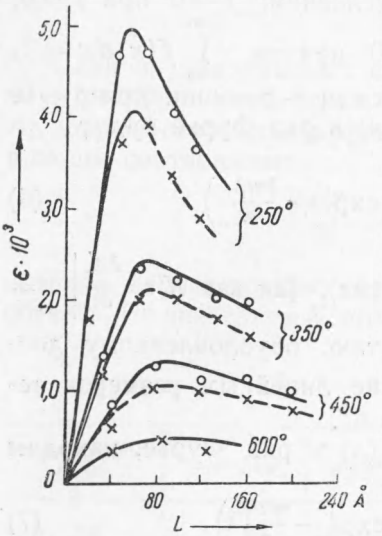


Рис. 4

4. Как видно из данных, приведенных на рис. 4, значения ε, найденные на основе двух приближений, хотя и не совпадают, но отличаются не сильно (не более чем на 20%) и обнаруживают одинаковый ход зависимости от L. Именно величина ε сперва нарастает с L, проходит через максимум при некотором $L = L'$ (порядка 10^{-6} см) и далее спадает. Значение ε в максимуме уменьшается при повышении температуры отпуска, интервал же L', напротив, растет.

Получающееся распределение микродеформации очень неоднородно. Микросмещения нарастают в среднем квадратично с длиной, и уже на столь малых расстояниях, как 10^{-6} см, $d\varepsilon/dL$ меняет знак. Нужно также заметить, что, согласно расчету ([4]), величины $\sqrt{\overline{\Delta L^2}}$ представляют смещения линейных колонн элементарных ячеек, что может и не совпадать со смещениями плоских сеток решетки (в направлении нормали к отражающей плоскости), поскольку корреляция между смещениями разных колонн может и отсутствовать.

Поэтому рентгенографический эффект размытия линий, относимый за счет микродеформации, не всегда должен истолковываться как вызванный изменением межплоскостных расстояний (т. е. наличием напряжений) и может явиться лишь свидетельством хаотической потери локальной упорядоченности в расположении атомов (в смысле дальнего порядка).

Для решения вопроса о характере смещений атомов целесообразно привлечь всю совокупность обнаруживаемых экспериментально характеристик, в частности сведения об интенсивности рентгеновского диффузного фона.

Харьковский государственный университет
им. А. М. Горького

Поступило
2 XI 1954

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] Б. Я. Пинес, Н. Г. Березняк, ЖТФ, **24**, 329 (1954). [2] Г. В. Курдюмов, Л. И. Лысак, ЖТФ, **17**, 993 (1947). [3] Г. В. Курдюмов, Сборн. Применение рентгеновских лучей к исследованию материалов, 1949. [4] B. E. Warren, B. L. Averbach, J. Appl. Phys., **21**, 595 (1950). [5] B. E. Warren, B. L. Averbach, J. Appl. Phys., **23**, 497 (1952).