

ВЛИЯНИЕ АНИЗОТРОПИИ УПРУГИХ СВОЙСТВ НА ВЕЛИЧИНУ ПАРАМЕТРОВ МИКРОСТРУКТУРЫ БОРАТА ЖЕЛЕЗА

Замковская А.И. *, Максимова Е.М.

Крымский федеральный университет им. В. И. Вернадского,
Физико-технический институт, г. Симферополь, Россия

*E-mail: trabem.z@gmail.com

EFFECT OF ANISOTROPY OF ELASTIC PROPERTIES ON ESTIMATION IRON BORATES MICROSTRUCTURE

Zamkovskaya A.I., Maksimova E.M.

V.I. Vernadsky Crimean Federal University, Simferopol, Russia

Annotation. The microstructure of iron borate was determined by X-ray diffraction broadening analysis. XRD measurements were carried out using X-ray diffractometers SmartLab Rigaku with Cu K α radiation. The Williamson–Hall analysis and the modified form of the Williamson–Hall analysis assuming a uniform stress deformation model were used to study the individual contributions of crystallite sizes and strain on the peak broadening of FeBO₃.

Борат железа (FeBO₃) относится к кристаллам средней категории с точечной группой симметрии $\bar{3}m$. По своей структуре FeBO₃ изоморфен кристаллу кальцита CaCO₃, [1]. В данной работе были определены параметры тонкой структуры кристаллов бората железа методом анализа профиля дифракционных пиков с учетом ориентационной зависимости модуля Юнга.

Рентгеновские исследования кристаллов бората железа проводились на рентгеновском дифрактометре SmartLab (Rigaku) на медном излучении, монохроматизированном с помощью кристалла графита. Съёмка проводилась по методу внешнего стандарта. Точность определения положения дифракционных пиков составляла 0.02°.

Для разделения вкладов в уширение дифракционных пиков от областей когерентного рассеяния (ОКР) и микронапряжений использовался классический метод Вильямсона-Холла [2]. Общее уширение пика β_{tot} складывается из уширения от размера областей когерентного рассеяния β_D и из уширения, обусловленного величиной микродеформаций β_ϵ :

$$\beta_{tot} = \beta_\epsilon + \beta_D = 4\epsilon \tan \theta + \frac{K\lambda}{D \cos \theta} \quad (1)$$

Умножим обе части (1) на $\cos(\theta)$:

$$\beta_{tot} \cos \theta = 4\epsilon \sin \theta + \frac{K\lambda}{D} \quad (2)$$

Видно, что если построить зависимость $\beta_{tot} \cos \theta$ от $\sin \theta$ для всех пиков, то вклад микронапряжений ϵ определяется из коэффициента наклона прямой, описываемой уравнением (2). А вклад от малого размера областей когерентного рассеяния - из начальной ординаты, [3].

Для более точного определения параметров тонкой структуры бората железа был использован модифицированный метод Вильямсона-Холла [4], учитывающий анизотропию упругих свойств бората железа для каждого дифракционного пика. Для небольших микронапряжений ε и однородной деформации σ может быть использован закон Гука:

$$\varepsilon = \sigma/Y_{hkl}, \quad (3)$$

где Y_{hkl} – модуль Юнга для направления, перпендикулярного серии плоскостей (h k l).

Результаты вычислений параметров тонкой структуры представлены в таблице.

Параметры тонкой структуры бората железа

Метод	Средний размер ОКР $\langle D \rangle$, нм	Среднее микронапряжение $\langle \varepsilon \rangle$, 10^{-5} отн. ед.
Классический метод Вильямсона-Холла	167,6	3,23
Модифицированный метод Вильямсона-Холла	162,78	1,09

1. Diehl R. Sol. Stat. Com., 17(6), С.743-745 (1975).
2. Zamkovskaya A., Maksimova E., Nauhatsky I., J. Phys.: Conf. Ser. 1135 012020 (2018)
3. Williamson G. K., Hall W. H., Acta Met. P. 22-31 (1953).
4. A. Khorsand Zakab, W.H. Abd. Majida, M.E. Abrishamib Ramin Yousefica, Solid State Sci.13(1), P. 251 (2011)