

ВЛИЯНИЕ ЛАЗЕРНОГО ОБЛУЧЕНИЯ НА СТРУКТУРУ МЕТАЛЛОВ

В.А. Лиопо, А.Ю.Иванов, В.В.Война, С.В. Васильев, А.А. Дрозд
Учреждение Образования Гродненский Государственный университет им. Янки Купалы
230023 ул. Ожешко 22. Гродно, Беларусь, E-mail: liopo@grsu.by

Методом порошковой рентгенографии с последующим построением функций межатомной парной корреляции исследованы изменения структуры меди (точечная группа Fm3m).
Установлено появление тетрагональной модификации в меди, а также в алюминии и в свинце.

Введение

Среди различных способов упрочнения материалов широко и эффективно используется их лазерная обработка импульсами различной длительности и мощности. При этом наблюдается четко выраженное изменение ряда физических свойств материалов [1,2], например, после лазерной обработки многих металлов их твердость может увеличиваться на 10%-30%. При этом не наблюдается ни изменение состава вещества, ни каких-либо выраженных фазовых переходов.

Ранее выполненные нами исследования [1,3-5] показали что на рентгеновских дифрактограммах металлических поликристаллов (Al, Cu, Pb у всех точечная группа Fm3m), подвергшихся воздействию лазерных импульсов с различной длительностью, периодичностью, плотности мощности и энергией квантов, наблюдается изменение интенсивности рефлексов, их положения и профиля. Эти изменения на рентгеновских дифрактограммах в ряде случаев значительно превышали погрешности эксперимента. Это позволило сделать вывод о том, что лазерная обработка металлов вызывает определенные изменения в их атомных конфигурациях. Следовательно, для изучения механизмов структурных изменений необходимо перейти от рентгенографических методов к структурному анализу, что и определило цель данной работы.

Построение корреляционных функций по рентгеновским дифрактограммам поликристаллов

Для исследования атомно-молекулярной структуры кристаллов используются три основных дифракционных метода анализа: "проб и ошибок", Фурье и метод Патерсона. Эти методы основаны на результатах исследования монокристаллов.

Структура кристалла определяется функцией электронной плотности

$$\rho(xyz) = \sum_{hkl} F(hkl) \exp 2\pi i(hx + ky + lz), \quad (1)$$

где $F(hkl)$ – структурная амплитуда, определяемая из интенсивности (I) по формуле

$$F \cdot F^* = |F|^2 = \frac{I}{PLG}, \quad (2)$$

где $|F|^2$ – структурный фактор. F – в общем случае величина комплексная.

PLG – табулированный объединенный фактор поляризации, Лоренца и геометрический. В формулу (2) следует ввести еще ряд факторов, но они слабо зависят от угла дифракции и поэтому их можно считать постоянными. Из

эксперимента можно найти только $|F|^2$,

то есть модуль комплексного числа $F = F_r + iF_i$. Значения фазы

$$\alpha = \arctg \frac{F_i}{F_r}$$

невозможно.

Метод "проб и ошибок" основан на том, что для одного и того же кристалла структур-факторы можно получить двумя способами: из эксперимента ($|F|^2_{\text{exp}}$) и

из расчета ($|F|^2_{\text{calc}}$) по предполагаемой структурной модели ($f_j(xyz)_{\text{mod}}$). Затем производится сравнение

$|F|^2_{\text{calc}} = [F \cdot F^*]_{\text{calc}}$ с $|F|^2_{\text{exp}}$, на основе которого структурная модель либо принимается либо отвергается.

Если в ряд Фурье (1) вместо F подставить F^2 , которые легко определяются (см. 2), то будет найдено распределение Патерсона

$$P(uvw) = \sum F^2(hkl) \cos 2\pi(hu + kv + lw) \quad (3)$$

или распределение межатомных парных векторов в векторном пространстве.

Все методы структурного анализа основаны на монокристаллических

исследованиях и поэтому не пригодны в прямом виде для анализа изменений структуры в поликристаллах, прошедших лазерную обработку.

При изучении влияния лазерного облучения на структуру кристаллов мы исходили из следующего.

1. Исследуемые образцы не являются монокристаллами, то есть, возможны случаи равенства d при разных (hkl) , что делает невозможным определение фазы структурной амплитуды
2. Из эксперимента можно найти $I(S)$, где S – вектор обратного пространства равный

$$S = \frac{1}{d} - \frac{2 \sin \theta}{\lambda}, \quad (4)$$

то есть легко определяемый экспериментально. В (4) d – межплоскостное расстояние, θ – брэгговский угол, λ – длина волны рентгеновского излучения.

В общем случае амплитуда рассеянного излучения на объекте с произвольной структурой определяется условием [6]

$$A(S) = \sum_j f_j(xyz) \exp 2\pi i r_j, \quad (5)$$

где f_j – рассеивающая способность j -того рассеивающего центра, r_j – его радиус вектор. Если в качестве рассеивающего центра взят электрон, то

$$A(S) = \int_V \rho(r_j) \exp 2\pi i r_j dV. \quad (6)$$

Интегрирование проводится по всему рассеивающему объему. В этом случае формула (1) примет вид

$$\rho(r_j) = \int_{S=0}^{\infty} A(S) \exp 2\pi i r_j dS. \quad (7)$$

Для кристаллов выполняется условие

$$\begin{aligned} \vec{r}_j &= a\vec{x}_j + b\vec{y}_j + c\vec{z}_j, \\ S &= h\vec{a}^* + k\vec{b}^* + l\vec{c}^*, \end{aligned} \quad (8)$$

где $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \vec{a}^*, \vec{b}^*, \vec{c}^*$ – базисы прямой и обратной решетки соответственно. Для

объектов с произвольной структурой функция Патерсона (3) примет вид

$$P(u) = \frac{1}{V} \int_V \rho(\vec{r}) \cdot \rho(\vec{u} - \vec{r}) d\vec{r}, \quad (9)$$

где u – вектор, связывающий два рассеивающих центра с радиус-векторами $\vec{r}$ и $(\vec{u} - \vec{r})$.

Условие (9) с учетом (7) и $r_j = -r_j$ примет вид

$$P(u) = \int A^2(S) \cos 2\pi S u dS, \quad (10)$$

где $A^2(S)$ определяется с учетом условия (2).

Для использования формулы (10) при анализе поликристаллов необходимо найти средние значения $\cos 2\pi S u$, для чего необходимо перейти к сферическим координатам [6], тогда

$$\begin{aligned} \overline{\cos 2\pi S u} &= \int_{\alpha=0}^{\alpha=\pi} \cos 2\pi S u \cos \alpha \sin \alpha d\alpha d\varphi = \\ &= \frac{\sin 2\pi S u}{2\pi S u} \end{aligned} \quad (11)$$

Формула (10) с учетом (11) примет вид

$$P(u) = \int_S A^2(S) \frac{\sin 2\pi S u}{2\pi S u} dS \quad (12)$$

Условие (12) использовалось нами для расчета корреляционной функции $P(u)$.

Эксперимент выполнен на установке ДРОН – 2.0. Излучение CuK_α

фильтрованное ($\lambda = 1.540 \text{ \AA}$) [7].

Лазерная обработка металла и ее влияние на кристаллическую структуру

Для воздействия на металлы использовалось излучение лазерного модуля, созданного на основе ГОС-1001 ($\lambda = 1.06 \text{ мкм}$), а также рубинового лазера ГОР-100М ($\lambda = 0.69 \text{ мкм}$). В первом случае модуль работал в режиме повторяющихся импульсов с частотой от 5 до 50 кГц; частота повторения импульсов определялась энергией накачки и оптической плотностью использовавшихся пассивных затворов.

Длительность одного пика составляла ~ 100 нс; временная форма была близка к гауссовой. Полная энергия лазерного импульса изменялась от 4 Дж (моноимпульс) до 150 Дж (35 пиков). Среднее значение плотности мощности излучения в одном пике при диаметре пятна фокусировки излучения варьировалась от 0,8 до 2,5 ГВт/см². Однородное пятно фокусировки излучения с резкими краями формировалось построением изображения диафрагмы диаметром 10 мм на поверхности облучаемого образца. Лазер ГОР-100М работал в режиме свободной генерации и позволял получать импульсы с энергией от 5 до 60 Дж с хаотической временной и весьма неоднородной пространственной структурой. Облучение проведено способом сканирования.

В таблице приведены теоретические и экспериментальные значения межатомных расстояний (U), теоретические координационные числа (K), высоты (L) и полуширины максимумов (δ) на экспериментальных кривых корреляционных функций для медного образца.

Таблица

N	Теор. Знач		Исходный образец			Облуч. образец		
	U	K	U	K	δ	U	K	δ
1	2.550	12	2.58	130	7	2.48 2.60	60 60	12
2	3.306	6	3.56	35	5	-	-	-
3	4.416	24	4.50	60	5	4.50	4	10
4	5.100	12	-	-	-	-	-	-
5	5.702	24	5.75	6	6	5.82	6	5
6	6.246	8	-	-	-	-	-	-
7	6.746	48	6.80	5	5	6.50	20	8

Из приведенных в таблице значений можно сделать вывод о том, что при локальном кратковременном нагреве и быстром охлаждении в образце возникают механические напряжения, приводящие к искажениям отдельных

кубических ячеек в тетрагональные. Эта идея была высказана в работах [1,4]. Методика построения корреляционных функций позволила получить результаты, не противоречащие этим работам. Аналогичные результаты получены для образцов Al и Pb.

Заключение

Разработанная методика расчета корреляционных функций по рентгеновским дифрактограммам поликристаллов позволила установить структурные изменения в меди (а также Pb и Al) после лазерного облучения, которые связаны с частичным образованием тетрагональной фазы в области облучения.

Список литературы

1. Chumakov A.N., Ivanov A.Yu., Liopo V.A., Vasil'ev S.V. Dependence of structural changes of monoatomic metals on the regime of their laser treating. / Invited lectures on the IV Yugoslav-Belarusian symp. Belgrade. 2002.- P.129-130.
2. Huillier A.L. Atoms in strong laser fields. // Europhysics news. 2002.-V.33/6. -P.205-207.
3. Ivanov A.Yu., Liopo V.A., Serebriakov A.V., Vasil'ev S.V. The laser treating of transport dielectrics as a method of structure changes operating. // Optics of crystals. - 2001. - V.4358.- P.322-328.
4. Васильев С.В., Иванов А.Ю., Лиопо В.А., Серебряков А.В., Чумаков А.Н. Качественное изменение типа модификации структуры металлов при незначительном изменении их лазерной обработки. / Тез. Белор.-Польск. науч.-практ. семинара. Гродно.-2002. - С.16
5. Васильев С.В., Война В.В., Иванов А.Ю., Лиопо В.А. Изменение структуры полиметилметакрилата при облучении миллисекундными лазерными импульсами. // Квант. электроника. 1998. - Т.25. - No.11. - С.1023-1027.
6. Гинье А. Рентгенография кристаллов. М.: Гос. Изд. ф-м. лит. 1961.-С. 366-368
7. Лиопо В.А., Война В.В. Рентгеновская дифрактометрия. Гродно: Изд. ГрГУ.2003.-176 с.

THE INFLUENCE OF LASER IRRADIATION TO THE STRUCTURE OF METALS

V.A. Liopo, A.Yu. Ivanov, V.V. Voyna, S.V. Vasil'ev, A.A. Drozd
Grodno state university, 230023, Ozeshko str. 22, Grodno, Belarus, E-mail liopo@grsu.by

After laser irradiation of metals with Fm3m point group (Cu, Al, Pb) their structure partially is changed into tetragonal ones. It was determined by method of calculation of twin atomic correlation function. It was used the X-ray polycrystal method which was elaborated *ad hoc*.