УДК 538.911

АСТАПОВА Елена Степановна*, доктор физико-математических наук, профессор Амурского государственного университета (г. Благовещенск). Автор 204 научных публикаций, в т. ч. 5 монографий и 16 учебно-методических пособий*

БОРИЛКО Антон Сергеевич*, аспирант кафедры физики инженерно-физического факультета Амурского государственного университета (г. Благовещенск). Автор 13 научных публикаций*

АСТАПОВ Иван Александрович*, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Института материаловедения Дальневосточного отделения РАН (г. Хабаровск). Автор 11 научных публикаций*

ВЫБОР АППРОКСИМИРУЮЩЕЙ ФУНКЦИИ ПО СТРУКТУРНЫМ ДАННЫМ ТВЕРДОГО СПЛАВА ВК8

Работа посвящена выбору аппроксимирующей функции для расчета размеров областей когерентного рассеяния на примере образца твердого сплава ВК8. Подобраны коэффициенты аппроксимирующих функций Коши I, Коши II, Лауэ и функции Гаусса с использованием численных методов. Произведена оценка соответствия аппроксимирующих функций экспериментальному профилю по суммарной невязке.

Ключевые слова: *функции Гаусса, Коши, Лауэ, аппроксимация, среднеквадратичное отклонение, блок, тонкая кристаллическая структура.*

Введение. При изучении механизмов модифицирования кристаллических материалов различными методами нельзя оставлять без внимания такие явления, как изменения размеров областей когерентного рассеяния, межплоскостных расстояний и т. д. Для наблюдения таких процессов применяют рентгенометрические исследования. Однако для определения параметров тонкой структуры недостаточно иметь только определяемую прибором зависимость интенсивности дифрагированных рентгеновских лучей от угла отражения. Это объясняется несколькими факторами, а именно: инструментальной погрешностью оборудования и размытием блочного профиля под воздействием микродеформаций [4]. Для решения этой задачи используют возможности моделирования. В результате обработки экспериментального рентгендифракционного профиля можно получить выражения для расчета параметров тонкой структуры. На этом этапе встает вопрос о правильном выборе аналитической функции, которая позволит наиболее точно произвести расчет.

Данная работа освещает некоторые аспекты такого выбора. В работе обсуждаются несколько видов функций, аппроксимирующих физический рентгеновский профиль. В результате математических расчетов с применением численных методов сделан вывод о наиболее подходящей аппроксимирующей функции.

Материалы и методика. В качестве наблюдаемого объекта нами выбран образец твердого сплава ВК8 с составом 8 % Co, 92 % WC.

Рентгеновские исследования проводились с использованием рентгеновского дифрактометра ДРОН-7 при Cu-K_α излучении методом Дебая-Шеррера с фокусировкой по Бреггу-Брентано в интервале углов 2θ от 20° до 90°.

А.Н. Иванов отмечает, что рентгеновский анализ тонкой кристаллической структуры (ТКС) основан на дифракционной модели реального кристалла. При этом используется модель «мозаичного» кристалла. Кристалл, согласно этой теории, состоит из малых упруго деформированных блоков или областей когерентного рассеяния (ОКР). В такой модели параметрами тонкой структуры являются средний размер блока, функция распределения блоков по размерам, средняя величина микродеформаций (МКД) решетки и распределение МКД по длине усреднения. Эти параметры можно связать с реальными дефектами, считая, что блок – это частица: зерно, кристаллит, или что границы блоков состоят из дислокационных стенок и т. п. [4].

В литературе [4, 5] известен более частный случай мозаичной модели – дифракционная модель ТКС, связанная с методом анализа ТКС, называемым методом аппроксимации. В рамках этой модели считается, что кристалл разбит на блоки одного размера D_{hkl} вдоль нормали к «отражающей» плоскости (*hkl*). Блоки кристалла упруго однородно деформированы, а величина МКД в каждом одинакова и равна e_{hkl}.

Для расчета параметров тонкой структуры выбираются дифракционные максимумы на больших углах отражения. Межплоскостные расстояния рассчитываются по формуле Вульфа-Бреггов [3]:

$$n\lambda = 2d_{hkl}\sin\theta_{hkl}, \tag{1}$$

где n – порядок отражения,

λ – длина волны рентгеновского излучения,

d – межплоскостное расстояние,

hkl – индексы граней,

θ – угол отражения.

При определении фактических размеров зерен методом аппроксимации считают [4], что распределение интенсивности в линии связано с истинным распределением интенсивности соотношением

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(\theta-\varphi)f(\varphi) = h(\theta)\,, \tag{2}$$

являющимся уравнением Фредгольма [2]. Здесь $h(\theta)$ описывает реальный физический профиль линии на рентгенограмме, $f(\varphi)$ – истинное распределение интенсивности, $g(\theta)$ – аппаратурная функция, определяемая распределением интенсивности в линии контрольного образца.

В результате преобразований, подробно описанных в [2, 4], из выражения (2) можно получить соотношение между истинной шириной линии β и шириной линии образца B и контрольного образца b:

$$B = \frac{\beta b}{\int_{-\infty}^{\infty} g(\varphi) f\varphi) d\varphi}. \tag{3}$$

В этом случае $f(\varphi)$ определяется функцией, выбор которой обусловлен физическими соображениями, $g(\varphi)$ – функцией, аппроксимирующей распределение интенсивности в линии контрольного образца.

Авторами [5] приведен пример расчета параметров ТКС для твердосплавных образцов с легирующим покрытием. В работе использована аппроксимирующая функция Лауэ и приведены конечные выражения для расчета размеров блоков D и размеров МКД $\Delta d/d$, а также выражения для определения погрешностей расчета и погрешности уширения $\Delta\beta/\beta$.

Целью нашей работы является подбор аппроксимирующей функции, наиболее точно описывающей эмпирическую зависимость интенсивности отраженных рентгеновских лучей от угла отражения $I(2\theta)$. Из литературных данных [1, 4, 5] следует, что лучше всего для этой цели подходят функции Гаусса, Коши I, Коши II и функция Лауэ.

Общий вид выбранных функций:

функция Гаусса

$$gauss(2\theta) = C_0 \cdot \exp\left[-\frac{(C_1 - 2\theta)^2}{C_2}\right], \qquad (4)$$

функция Коши I

$$koshi1(2\theta) = \frac{C_0}{C_1 + C_2(2\theta - C_3)^2}, \qquad (5)$$

функция Коши II

$$koshi2(2\theta) = \frac{C_0}{\left[C_1 + C_2(2\theta - C_3)^2\right]^2}, \qquad (6)$$

функция Лауэ

$$laue(2\theta) = \frac{\sin^2(C_0 \cdot 2\theta + C_1)}{(C_0 \cdot 2\theta + C_1)^2} \cdot C_2, \qquad (7)$$

где C_j – коэффициенты.

Для количественной оценки выбора произведен расчет среднеквадратичного отклонения значения функций от эмпирических данных в исследуемых точках по формуле

$$\sigma = \sum_{i=1}^{n} (I_i - F_i)^2, \qquad (8)$$

где σ – среднеквадратичное отклонение,

I_i – эмпирическое значение интенсивности рентгеновского луча в i точке,

F_i – значение аппроксимирующей функции в той же точке,

n – количество точек, описывающих дифракционный пик на рентгенограмме.

Для определения скалярных коэффициентов и нахождения аналитического вида аппроксимирующих функций использовались встроенные функции **lsqnonlin()** и **genfit()** ППП Matlab v.7 и Mathcad v.15 соответственно.

Результаты и обсуждения. В результате рентгеноструктурных исследований нами получен массив данных. Фрагмент этого массива, соответствующий максимальному пику интенсивности, представлен в *табл. 1*.

По экспериментальным данным была построена графическая зависимость. На *рис. 1* представлен график зависимости интенсивности от угла дифракции и отдельно интересующий нас пик с максимальной интенсивностью.

При помощи численных методов с использованием ППП Matlab и Mathcad нами были получены значения коэффициентов C_j, что позволило записать аналитический вид аппроксимирующих функций. Таким образом:

$$gauss(2\theta) = 2,42 \cdot 10^3 \cdot \exp\left[-\frac{(35,705 - 2\theta)^2}{0,013}\right], \quad (9)$$

$$koshi1(2\theta) = \frac{10^5}{38,153 + 5,925 \cdot 10^3 (2\theta - 35,702)^2}, \quad (10)$$

$$koshi2(2\theta) = \frac{8,255 \cdot 10^7}{\left[180,431 + 9,771 \cdot 10^3 \cdot (2\theta - 35,704)^2\right]^2}, \quad (11)$$

$$laue(2\theta) = \frac{\sin^2(9,21 \cdot 10^3 - 196,26 \cdot 2\theta)}{(9,21 \cdot 10^3 - 196,26 \cdot 2\theta)^2} \cdot 1,144 \cdot 10^{10}. \quad (12)$$

Таблица 1

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ИНТЕНСИВНОСТИ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ ОТ УГЛА ОТРАЖЕНИЯ

2θ,°	35,50	35,55	35,60	35,65	35,70	35,75	35,80	35,85	35,90	35,95
I(2θ)	253,5	394,5	849,5	2050,0	2548,5	1868,0	1289,0	561,5	340,5	249,5

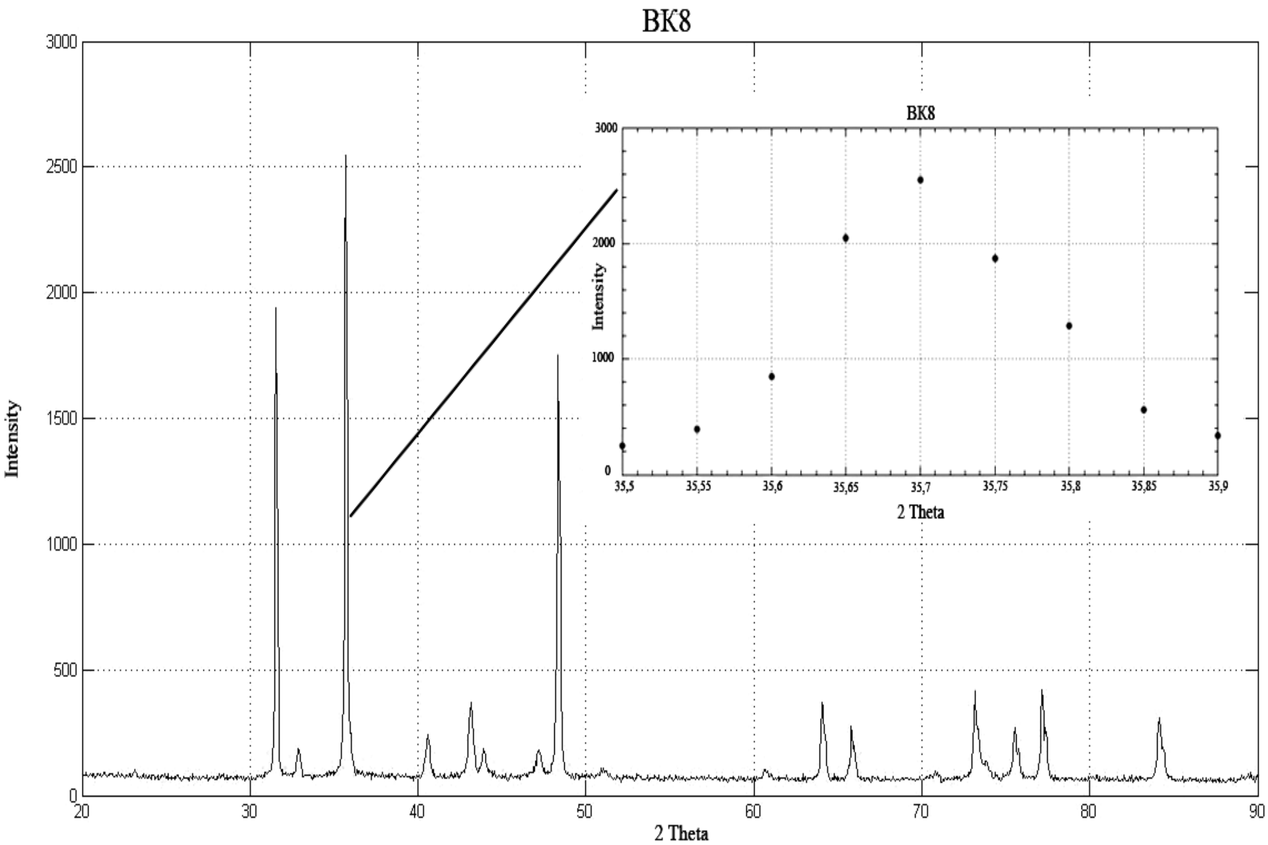

Рис. 1. Профиль экспериментальной рентгеновской линии для образца твердого сплава ВК8

Экспериментальные значения и графики аппроксимирующих функций приведены на *рис. 2*.

В *табл. 2* представлены результаты расчета среднеквадратичного отклонения значений аппроксимирующих функций σ от экспериментальных данных.

Из *табл. 2* видно, что значение σ минимально для функции Коши II, в то время как для функции Лауэ это значение на порядок превосходит все остальные.

С функцией Лауэ (*рис. 3*) связаны трудности подбора начального приближения коэффициентов, необходимых для расчетов. В связи с тем, что функция Лауэ принимает бесконечно большие значения в случае бесконечной малости знаменателя (12), аппроксимированные значения этой функции рассчитаны только в точках, соответствующих 2θ (*рис. 2*), а не на заданной области определения.

Таблица 2

СРЕДНЕКВАДРАТИЧНОЕ ОТКЛОНЕНИЕ ЗНАЧЕНИЙ АППРОКСИМИРУЮЩИХ ФУНКЦИЙ ОТ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Функция	Гаусса	Коши I	Коши II	Лауэ
σ	$1{,}904\cdot10^5$	$1{,}738\cdot10^5$	$1{,}205\cdot10^5$	$3{,}593\cdot10^6$

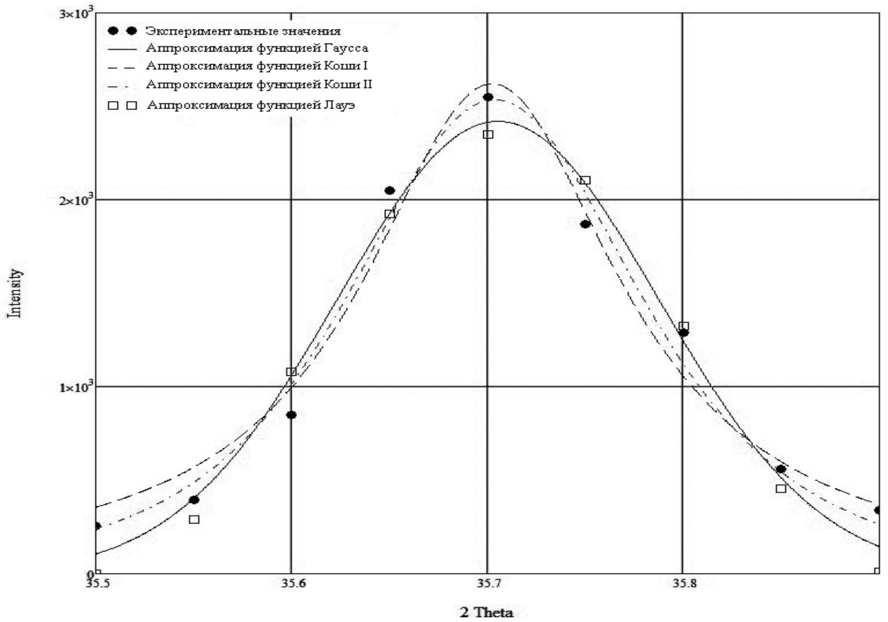

Рис. 2. Экспериментальные данные рентгеноструктурного анализа и аппроксимирующие функции

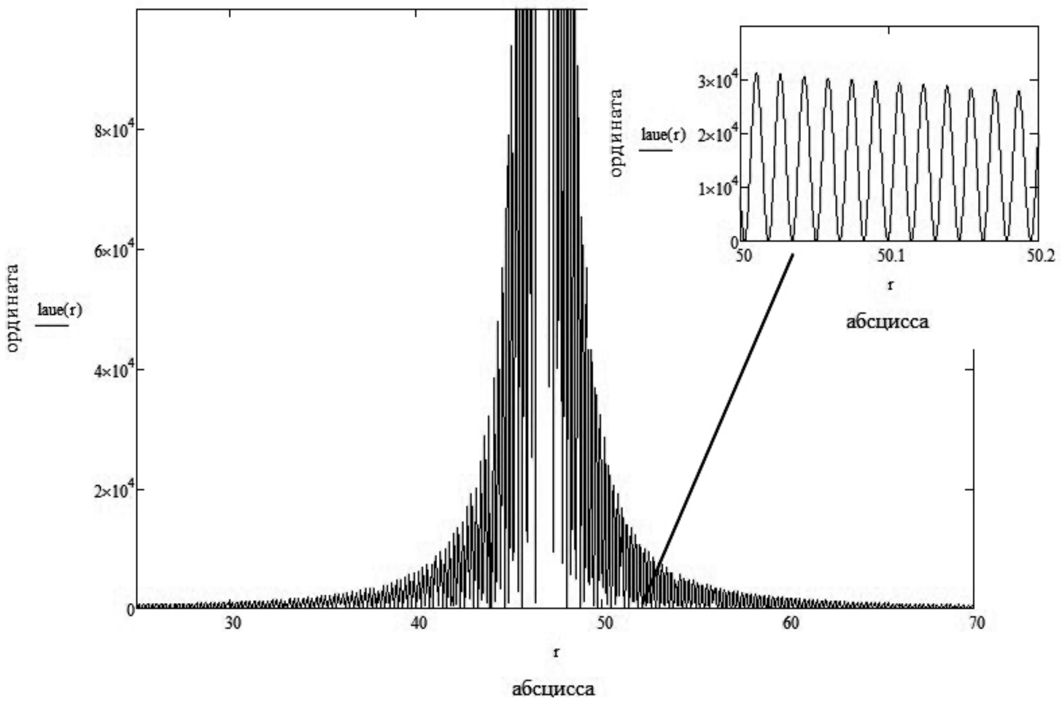

Рис. 3. График функции Лауэ

Заключение. Математическое приближение физического рентгеновского профиля имеет большое значение для расчетов параметров тонкой структуры. В результате приближения эмпирических данных математическими функциями Гаусса, Коши I и II и функцией Лауэ методом численного моделирования для каждой из них были рассчитаны коэффициенты аппроксимации и получен аналитический вид. Определено значение суммарной невязки для всех исследованных функций. Отмечено, что для пика максимальной интенсивности на дифрактограмме образца твердого сплава ВК8 физическому профилю наилучшим образом соответствует функция Коши II.

Список литературы

1. *Астапов И.А., Верхотуров А.Д.* Моделирование процесса модифицирования поверхности твердых сплавов методом ЭИЛ // Информатика и системы управления. 2007. № 2(14). С. 20–30.

2. *Вержбицкий В.М.* Численные методы. Математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения. М., 2001.

3. *Горелик С.С, Скаков Ю.А., Расторгуев Л.Н.* Рентгенографический и электроннооптический анализ. М., 2001.

4. *Иванов А.Н.* Дифракционные методы исследования материалов: конспект лекций. М., 2008.

5. *Кривоглаз М.А.* Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. Киев, 1983.

References

1. Astapov I.A., Verkhoturov A.D. Modelirovanie protsessa modifitsirovaniya poverkhnosti tverdykh splavov metodom EIL [Simulation of the Surface Modification of Solid Alloys by Electrospark Doping]. *Informatika i sistemy upravleniya*, 2007, no. 2 (14), pp. 20–30.

2. Verzhbitskiy V.M. *Chislennye metody. Matematicheskiy analiz i obyknovennye differentsial'nye uravneniya* [Numerical Methods. Mathematical Analysis and Ordinary Differential Equations]. Moscow, 2001.

3. Gorelik S.S, Skakov Yu.A., Rastorguev L.N. *Rentgenograficheskiy i elektronnoop-ticheskiy analiz* [X-Ray and Electron-Optical Analysis]. Moscow, 2001.

4. Ivanov A.N. *Difraktsionnye metody issledovaniya materialov: konspekt lektsiy* [Diffraction Methods of Material Analysis. A Summary of Lectures]. Moscow, 2008.

5. Krivoglaz M.A. *Difraktsiya rentgenovskikh luchey i neytronov v neideal'nykh kristallakh* [X-Ray and Neutron Diffraction in Real Crystals]. Kiev, 1983.

Astapova Elena Stepanovna
Amur State University (Blagoveshchensk, Russia)

Borilko Anton Sergeevich
Postgraduate Student, Amur State University (Blagoveshchensk, Russia)

Astapov Ivan Aleksandrovich
Institute for Material Studies, Far Eastern Branch of the Russian Academy of Sciences (Khabarovsk, Russia)

CHOICE OF APPROXIMATION FUNCTION BASED ON THE STRUCTURAL DATA OF 8 % Co–92 % WC ALLOY

The paper is devoted to the choice of approximation function to calculate the coherent-scattering region, exemplified by the hard alloy with 8 % Co–92 % WC. The constants of approximation functions Cauchy 1, Cauchy 2, Laue and Gaussian function were fitted by means of numerical methods. Function availability estimation was gained with the mean-square residual.

***Keywords**: Gaussian function, Cauchy function, Laue function, approximation, mean-square residual, block, thin crystal structure.*

Контактная информация:
Астапова Елена Степановна
адрес: 675027 г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21;
e-mail: yastapova@mail.ru

Борилко Антон Сергеевич
адрес: 675027 г. Благовещенск, Игнатьевское шоссе, 21;
e-mail: fynjyx511@yandex.ru

Астапов Иван Александрович
адрес: 680042 г. Хабаровск, ул. Тихоокеанская, 153;
e-mail: immaterial_khv@mail.ru

Рецензент – *Шестаков Л.Н.*, доктор физико-математических наук, профессор, первый проректор по образованию и науке Северного (Арктического) федерального университета имени М.В. Ломоносова