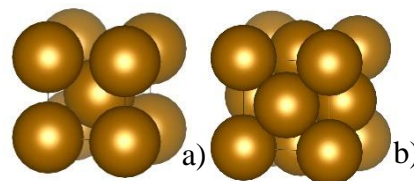


Vairāku dzelzs fāzu pāreju analizēšana ar rentgenabsorbcijas spektroskopiju.

Arturs Cintiņš

Dzelzs (Fe) ir viens no plašāk ikdienā pielietotiem materiāliem. Jau no dzelzs laikmeta to izmanto, lai izgatavotu instrumentus un ieročus. Arī nākotnes spēkstacijās un reaktoros dzelzs ir visu galveno elementu pamatā.

Laika gaitā esam noskaidrojuši, ka dzelzs īpašības mainās gan atkarībā no temperatūras, gan no piemaisījumu daudzuma un sastāva. Istabas temperatūrā tīrai dzelzij ir tilpumā centrēta struktūra un šo fāzi sauc par alfa fāzi (α -Fe) (1. attēls). Šajā fāzē katram dzelzs atomam ir 12 tuvākie kaimiņi (8 atrodas 2.49Å un 6 – 2.87Å attālumā). Tā ir magnētiska (feromagnētiska), un šo īpašību izmantoja pirmajos magnētos un kompasos. Karsējot pirmā izmaiņa, kas notiek pie 769 °C ir pāreja uz nemagnētisko (paramagnētisko) fāzi, joprojām saglabājot tilpumā centrēto struktūru.



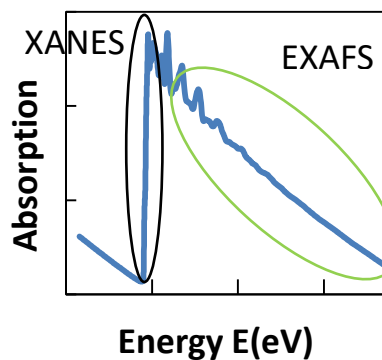
1.attēls. Dzelzs struktūra a) tilpumā centrētai un b) skaldnēs centrētai fāzei.

Turpinot karsēt pie 912 °C dzelzs pēkšņi pāriet uz skaldnēs centrēto fāzi (1.attēls), kuru sauc par gamma fāzi (γ -Fe). Šajā pārejā tam mainās gan tuvāko kaimiņu skaits gan attālums (12 kaimiņu 2.58 Å attālumā). Turpinot karsēt, pie 1392 °C, dzelzs atkal pāriet tilpumā centrētā struktūrā (8 kaimiņu 2.53Å un 6 – 2.93Å attālumā), kuru dēvē par delta fāzi. Tālāk karsējot pie 1538 °C tas izkūst.

Tanī pašā laikā līdz pat šodienai nav pētījumu par to, kas notiek ar lokālo atomāro struktūru visu šo fāžu pāreju laikā. Tas ir – nav skata uz to kā mainās stapatomu relatīvie attālumi, to variācijas un korelācijas. Piemērotākā metode šādu pētījumu veikšanai ir rentgenstaru absorbcija.

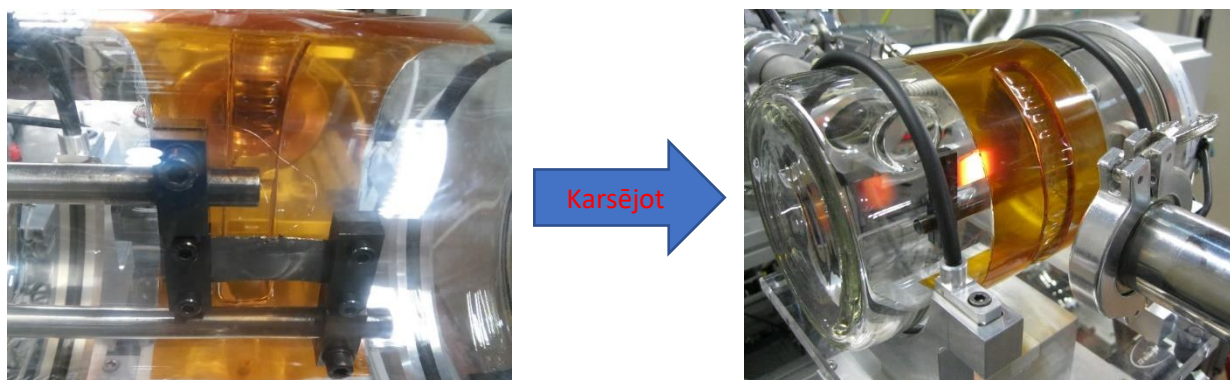
Tamdēļ šī projekta mērķis ir ar rentgenabsorbcijas metodi izpētīt lokālās atomārās struktūras izmaiņas ap dzelzs atomiem pie dažādām temperatūrām (20-1200°C), analizējot Fe K-malas absorbcijas spektrus.

Rentgenabsorbcijas spektroskopijā tiek ierosināti elektroni, kas atrodas dziļās čaulās tuvu kodolam. K-malas gadījumā, tas ir 1s elektrons. Šo spektru struktūru pie pašas absorbcijas malas (2. attēls) (angliski: X-ray absorption near edge structure - XANES) nosaka elektronu brīvo stāvokļu blīvums un attiecīgi elektronu pāreju varbūtības, kas ir jutīgas gan pret simetriju, gan atomu attālumiem, gan valences stāvokļa. Taču spektru tālākā sīkstruktūra (angliski: extended X-ray absorption fine structure – EXAFS), ir atkarīga tikai no atomu savstarpējā izvietojuma.



2. attēls. Rentgenabsorbcijas spektrs Fe K-mala

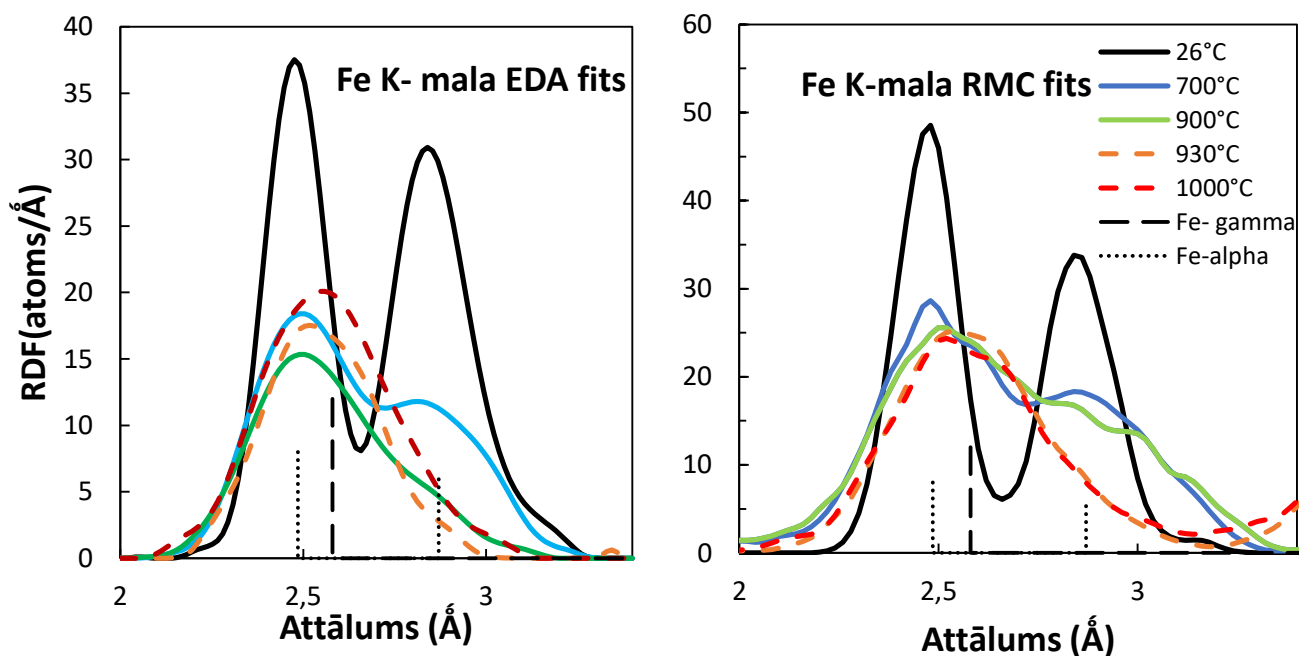
Itālijas sinhrotrona ELETTRA XAFS eksperimentālajā līnijā ar L'Aquila-Camerino krāsni (3. attēls) tika izmērīts tīras dzelzs folijas spektrs. Mērījumi notika vakuumā, lai paraugs neoksidētos, kā arī tas tika iekapsulēts bora nitrīda tabletē, lai nesaskartos ar grafiņa elektrodēm.



3.attēls. L'Aquila-Camerino vakuma krāsnī tiek karsēts tīrs (99,99%) Fe no istabas temperatūras līdz 1200°C, izmantojot augstsprieguma strāvu.

No EXAFS datu analīzes ieguvām radiālā sadalījuma funkciju (RDF – radial distribution function), kas parāda varbūtību sadalījumu starpatomu attālumiem. RDF izmaiņas mainoties temperatūrai labi parāda, kas notiek ar atomāro struktūru, tai skaitā fāžu pārejās.

4. attēlā redzams, kā mainās tuvāko kaimiņu sadalījums pārejot no tilpumā centrētas struktūras



4.attēls. Fe K-mala RDF rekonstrukcijā tradicionālāi metodei, kas ir pa kreisi, un apgrieztā Monto Karlo metode, kas ir pa labi.

ar divām tuvāko kaimiņu grupām uz skaldnēs centrētu struktūru ar vienu tuvāko kaimiņu grupu.