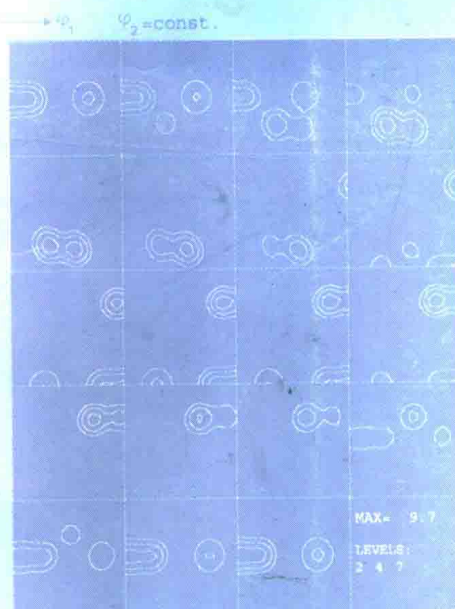


晶体材料织构定量分析

Quantitative Texture Analysis
of Crystalline Materials

毛卫民 张新明 著

Mao and Xinming



冶金工业出版社

晶体材料织构定量分析

毛卫民 张新明 著

北 京
冶金工业出版社
1995

(京)新登字 036 号

图书在版编目(CIP)数据

晶体材料织构定量分析/毛卫民,张新明著. —北京:
冶金工业出版社,1995.7
ISBN 7-5024-1106-2

I. 晶… II. ①毛…②张… III. 晶体织构测定-定量分
析-工程材料 IV. ①TB303②0723

中国版本图书馆 CIP 数据核字(95)第 01853 号

出版人 卿启云(北京沙滩嵩祝院北巷 39 号,邮编 100009)

北京外文印刷厂印刷;蓝地公司激光照排

冶金工业出版社发行;各地新华书店经销

1993 年 3 月第 1 版,1995 年 7 月第 2 次印刷

850mm×1168mm 1/32;7.625 印张;201 千字;235 页;901~2300 册

22.00元

前 言

取向分布函数(Orientation Distribution Function)自本世纪六十年代问世以来受到了各国科学工作者的普遍重视。由于取向分布函数的出现、发展和应用,使人们对于晶体材料的织构有了焕然一新的认识,以致传统的织构概念在一定程度上得到了更新。取向分布函数突破了传统的用一维或二维空间描述三维取向分布的方法。它建立了一个三维空间来描述晶体取向分布,从而克服了传统方法的种种困难,使材料织构的细致、定量分析成为可能。

当前在世界范围内取向分布函数已广泛地深入到材料织构研究的各个领域内,并以很快的步伐应用于工业生产,转变成巨大的生产力。我国研究和应用取向分布函数方法起步较晚,虽经多年努力也取得了一定的成果,但从整体水平上来看,与世界先进水平还有不小差距,这方面的研究和应用普遍不够深入,有关专著很少。对于在欧洲广为流传的邦厄(Bunge)级数展开法尚无专著系统介绍。因此作者把本书奉献给广大读者,希望能够起到一点沟通的作用,以期在广大科研人员的努力下使取向分布函数法在我国的科研和工业生产上尽早发挥它应有的作用。

虽然作者多年来利用取向分布函数做织构分析工作,但对取向分布函数法本身及其应用等方面的了解尚属粗浅。因此本书在内容撰写、次序编排以及资料选取等方面难免有不妥之处,恳请有关专家及广大读者提出宝贵意见。

本书第四章的撰写由中南工业大学张新明教授主持,其它各章由北京科技大学毛卫民负责撰写。在本书的编写过程中受到北京科技大学余永宁教授的多方协助和支持。北京科技大学王开平参加了各章的编写工作。北京科技大学李秀卿参加了誉稿工作。在此本书作者向上述各位同志表示衷心的感谢。

作 者

1991 年 5 月

目 录

前言

第一章 织构及其测量	1
§ 1-1 织构的概念	1
§ 1-2 织构的存在	3
§ 1-3 织构的极图表达	5
§ 1-4 极密度的 X 射线测量技术(反射法)	8
§ 1-5 极密度分布的归一及赤面极图	11
§ 1-6 极图的局限性和取向分布函数	14
参考文献	17
第二章 邦厄(Bunge)法计算取向分布函数的数学过程	18
§ 2-1 极密度分布函数	18
§ 2-2 取向分布函数	21
§ 2-3 用完整极密度分布计算取向分布函数的原理	24
§ 2-4 X 线衍射的弗里德尔(Friedel)定律	31
§ 2-5 广义连带勒让德函数的富氏展开	34
§ 2-6 立方晶体取向分布函数的对称性	37
§ 2-7 用完整极密度分布计算对称取向分布函数	45
§ 2-8 用不完整极密度分布计算取向分布函数	51
参考文献	58
第三章 取向分布函数分析及定量计算	61
§ 3-1 空间取向的不同表达方法	59
§ 3-2 取向空间及其对称性	65
§ 3-3 取向空间的取向线分析	74
§ 3-4 完整极图和反极图	81
§ 3-5 取向分布函数中的鬼峰现象	82

§ 3-6 取向分布函数定量分析上存在的问题	84
§ 3-7 正态分布函数	85
§ 3-8 织构组分分析法原理	89
参考文献	94
第四章 立方金属中常见的织构	95
§ 4-1 面心立方金属冷轧织构形成的一般规律	96
§ 4-2 体心立方金属冷轧织构形成的一般规律	102
§ 4-3 层错能对轧制织构的影响	109
§ 4-4 初始织构对轧制织构的影响	119
§ 4-5 面心立方金属再结晶织构形成的一般特征	126
§ 4-6 体心立方金属再结晶织构形成的一般特征	132
§ 4-7 轧制织构对再结晶织构的影响	135
§ 4-8 再结晶温度对再结晶织构的影响	140
§ 4-9 初始晶粒尺寸与变形温度对轧制织构的影响	145
参考文献	148
第五章 织构形成理论及其计算机模拟	149
§ 5-1 多晶体变形模型	149
§ 5-2 轧制织构模拟方法	153
§ 5-3 立方金属轧制织构的理论计算	157
§ 5-4 再结晶织构形成理论	170
§ 5-5 模拟再结晶织构的实例	179
§ 5-6 造成选择生长的原子模型	183
参考文献	194
第六章 实际工业生产中的织构问题	195
§ 6-1 冲压制耳	195
§ 6-2 磁性材料	197
§ 6-3 电容器用铝箔	200
§ 6-4 织构对 X 射线物相定量分析的影响及其修正方法	202
§ 6-5 材料宏观性能的计算	208
§ 6-6 深冲钢板中的织构	210
§ 6-7 r 值的在线无损测定	212
参考文献	216

附录 计算取向分布函数所需数据	217
1. 计算展开系数 F_l^{mj} 所需参数 a_l^{mj}	217
2. 计算展开系数 C_l^m 所需参数 $K_l^m(HKL)$	222
3. 计算广义球函数 $S_l^m(g)$ 所需参数 Q_l^m	226
4. 计算取向分布函数所需参数 $B_l^{m\mu}$	237

第一章 结构及其测量

§ 1-1 组织的概念

一、取向的概念

设空间有一由 X, Y, Z 三个相互垂直的坐标轴组成的直角参考坐标系 A 。再设有一个立方晶体坐标系 e ，其坐标轴的排列方式为： $[100]$ 方向平行于 X 轴， $[010]$ 方向平行于 Y 轴， $[001]$ 方向平行于 Z 轴，且三个晶体方向分别同与之平行的 X, Y, Z 坐标轴保持同向。人们把晶体坐标系中晶体基本方向 $\langle 100 \rangle$ 在参考坐标系 A 内的这种排布方式称为初始取向 e (图 1-1a)。

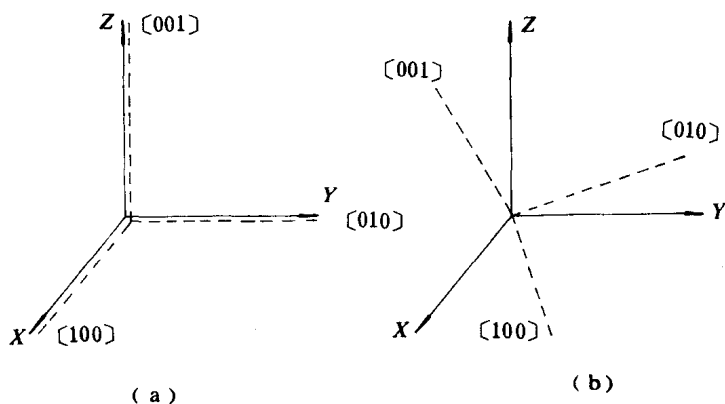


图 1-1 取向的确定

(a) 初始取向； (b) 任意取向

若把一多晶体或任一单晶体放在坐标系 A 内，则每个晶粒坐标系的 $\langle 100 \rangle$ 方向通常不具有上述排列，因此它们不具有起始取向，而只有一般的取向 (图 1-1b)。如果把一具有起始取向 e 的晶体

坐标系作某种转动,使它与一单晶体或多晶体内一晶粒的晶体坐标系重合,这样转动过的晶体坐标系就具有了与之重合的晶体坐标系的取向。人们常常用具有起始取向的坐标系转到与实际晶体坐标系重合时所转动的角度来表达该实际晶体的取向。由于坐标系的转动有三个自由度,所以表示一晶体的取向要用三个角度。很显然对于起始取向 e 有

$$e = (0, 0, 0)$$

综上所述,晶体取向表达了该晶体内的基本晶向(如 $\langle 100 \rangle$)在一参考坐标系(如轧制样品坐标系)内排布的方式。可以用具有起始取向的晶体坐标系到达实际晶体坐标系时所转动的角度表达该实际晶体的取向。

二、组织的定义

当多晶体各晶粒的取向聚集到一起时多晶体内就会呈现组织现象。如图 1-2 所示,一轧板中许多晶粒都有类似的取向,即该板内有组织存在。

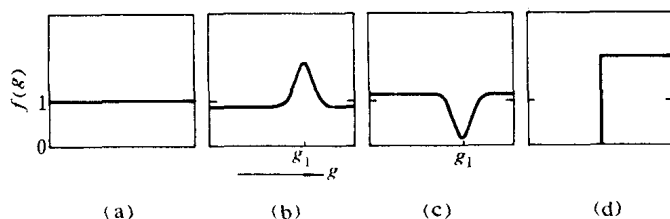


图 1-2 板材的组织现象(立方组织)

一般认为,许多晶粒取向集中分布在某一或某些取向位置附近时称为择优取向。择优取向的多晶体取向结构称为组织。随着组织研究的深入发展,以及工业生产对金属材料组织结构要求的提高,上述组织概念已不能精确地表达组织现象。

假设取向空间是一维空间,空间取向用 g 表示。当多晶材料各晶粒取向完全随机分布或没有组织时,晶体取向密度 $f(g)$ 在取向空间应处处是 1(如图 1-3a)。若多晶体在取向 g_1 处有择优取向

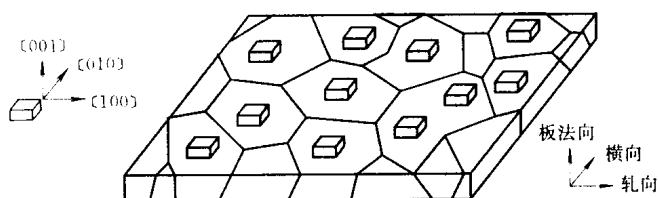


图 1-3 取向密度的不同分布

现象(图 1-3b)则称该晶体内有织构。可以想像还会有一些不属于图 1-3a,b 所示的中间情况,如图 1-3c,d 所示。这两种情况并没有明显的择优取向现象。图 1-3d 是一种极端的假设,从中看不出晶体取向的集中分布。但是由于晶体的各向异性,有图 1-3c,d 所示的取向分布状况的材料必然会在各种物理或化学性能上反映出各向异性来。如果认为这种材料没有织构显然不合理。图 1-3b,c,d 所示的情况都应该认为是织构现象。它们有一个共同点,即这三种情况下的取向分布都明显偏离了取向完全随机分布(图 1-3a)时的状态。因此更确切的织构概念应是:多晶体取向分布状态明显偏离随机分布的现象。

§ 1-2 织构的存在

织构常常产生于物理冶金的各种过程中。在实际生产中很难找到没有织构的非粉末材料。研究表明,即使是粉末材料在其烧结过程中也会产生某种织构。如果对织构的存在没有足够的认识,在不适当的时候忽略织构的存在,往往会造成对材料性质判断上的偏差。

一、铸造织构

在金属的凝固过程中,随着温度的降低结晶核不断长大。热量散失的方向性使晶核长大也具有方向性(如柱状晶区),晶体结晶时生长速度的各向异性会造成选择生长现象,使得只有快速生长方向平行于散热方向(即柱状晶轴方向)的那些晶核能够长大,从

而使整个(柱状)晶区各晶粒的某一晶向(能快速生长方向)互相平行,这就形成了铸造组织。

统计和研究表明,体心立方金属(如铁-硅、 β 黄铜、钠等)和面心立方金属(如铝、铜、银、金、铅等)的快速生长方向和枝晶晶轴方向都是 $\langle 100 \rangle$ 方向。

二、形变组织

金属材料进行塑性变形(轧制、挤压、锻造、拉伸等)时晶粒发生转动,结果大多数晶体聚集到某些取向上来,形成组织。在热变形过程中随时发生再结晶,晶体取向不断变化,因此热变形组织往往比较复杂,它随热变形条件而变。但金属冷轧之后的组织比较确定。

面心立方金属冷轧之后的组织受层错能影响很大。一般有铜型组织 $\{112\}\langle 111 \rangle$,S型组织 $\{123\}\langle 634 \rangle$,黄铜型组织 $\{001\}\langle 211 \rangle$ 以及戈斯组织 $\{011\}\langle 100 \rangle$ 等。层错能较高时(如低锌黄铜、铝、铜)铜型和S型组织成分要多一些,层错能低时(如高锌黄铜、银、铁-镍合金)黄铜型组织成分要多一些。

体心立方金属(如铁)冷轧后的组织一般是旋转立方组织 $\{001\}\langle 110 \rangle$ 以及 $\{112\}\langle 110 \rangle$, $\{111\}\langle 110 \rangle$, $\{111\}\langle 112 \rangle$ 等。

三、再结晶组织

变形后的金属在加热过程中会发生再结晶。根据加热工艺的不同可以发生回复,再结晶,晶粒长大及二次再结晶等现象。再结晶是一个生核和核长大的过程,而核在什么地方形成以及哪些核能长大,很大程度上要受到变形晶粒取向的影响,因此再结晶后的材料内会有再结晶组织。

一般面心立方金属轧板的再结晶组织有立方组织 $\{001\}\langle 100 \rangle$,R型组织 $\{124\}\langle 211 \rangle$ 以及黄铜R型组织 $\{236\}\langle 385 \rangle$ 等。体心立方金属轧板的再结晶组织通常是 $\{111\}\langle 110 \rangle$, $\{111\}\langle 112 \rangle$ 组织,以及戈斯组织 $\{011\}\langle 100 \rangle$ 和立方组织 $\{001\}\langle 100 \rangle$ 等。

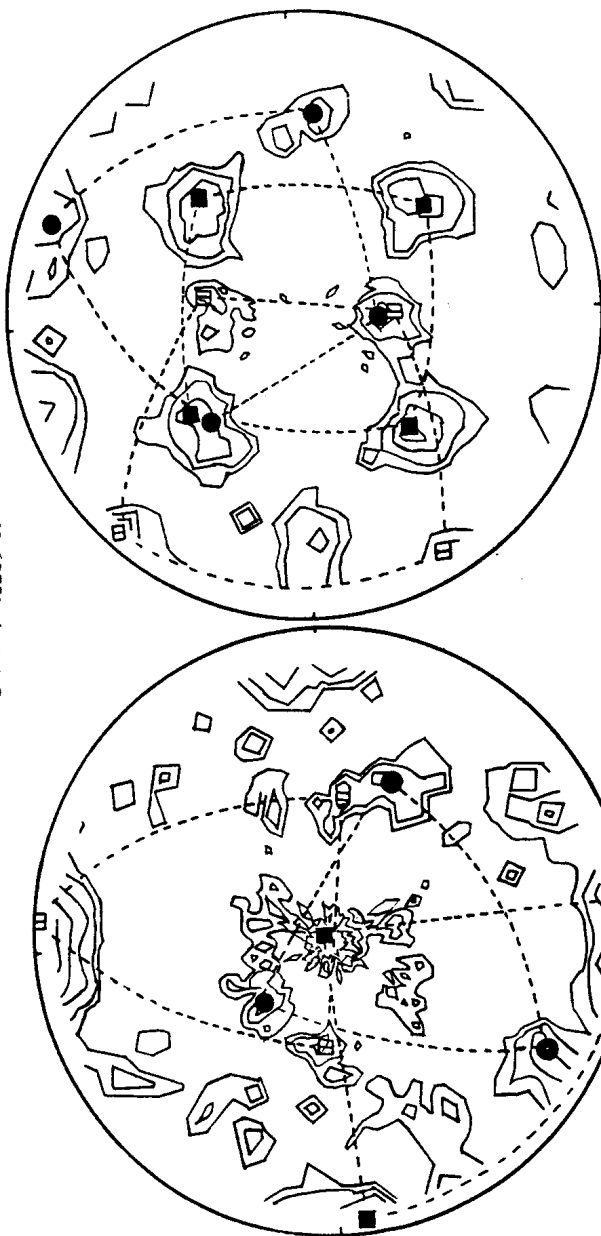
立方金属中常见的各种组织将在第四章中进一步讨论。

§ 1-3 织构的极图表达

极图是常用的表达多晶体取向分布及单晶体取向的一种图形,即是晶体各 $\{HKL\}$ 面法向在样品(如轧制)坐标系内分布状态的一种表达方法。其原理如图 1-4 所示,将轧制样品中具有一定取向的晶体放到标有轧向,板法向和横向的球心上。作该晶体所有 $\{HKL\}$ 面(如 $\{100\}$ 面)的法线,交球面于若干点,成球面投影图(如图 1-4a 所示的 1, 2, 3 各点)。然后对这些投影点再作极射赤面投影。使投影线与垂直于板法向且过球心的圆面(即赤面)有一组交点(如图 1-4b 所示的 1', 2', 3' 各点)。设样品坐标系中板法向与球面的正向交点为 N 极,反向交点为 S 极,则投影线是图 1-4b 中上半球面上各投影交点与下半球 S 极点的连线。一般一个 $\{HKL\}$ 晶面法线在上下球面上各有一个交点(如图 1-4a)。这里只取上半球的交点作极射赤面投影。投影过的赤面图即为表达该晶体取向的赤面极图(图 1-4c, $\{100\}$ 极图)。图 1-4 描述了表达晶体取向的 $\{100\}$ 极图的形成过程。表达该取向的任一 $\{HKL\}$ 极图均可通过与此相同的过程得到。图 1-4c 所示极图上各点的位置可用 α, β 两角表示。 α 角表示 $\{HKL\}$ 晶面法向与样品系板法向的夹角, β 角表示该 $\{HKL\}$ 晶面法向绕板法向转动的角度。这也是一般球坐标系的表示方法。

如果把一多晶体内所有晶粒都作上述的投影,则会在球面和赤面上得出许多点来。把每个点所代表的晶粒体积作为这个点的权重,则这些点在球面上的加权密度分布称为极密度分布。球面上极密度分布在赤面上的投影分布图被称为极图。假如多晶体内无织构,极密度分布在整个球面的分布将是均匀的。反之,极密度分布在极图上不均匀,有些地方极密度值会比较高。根据极密度的高低可算出赤面投影后的极图密度分布。再根据具体情况画出等密度线,即可制成通常分析织构所用的极图。图 1-5 表达的是一纯铝多晶体样品再结晶后的 $\{200\}$ 和 $\{111\}$ 极图。极图所示晶面指数 $\{HKL\}$ 不同。则极密度分布状态不同。从图 1-5 可以看出,该样品

- {001} <100> 立方
- ▣ {011} <100> 戈斯
- {214} <121> R



(b)

(a)

图 1-4 极图投影原理

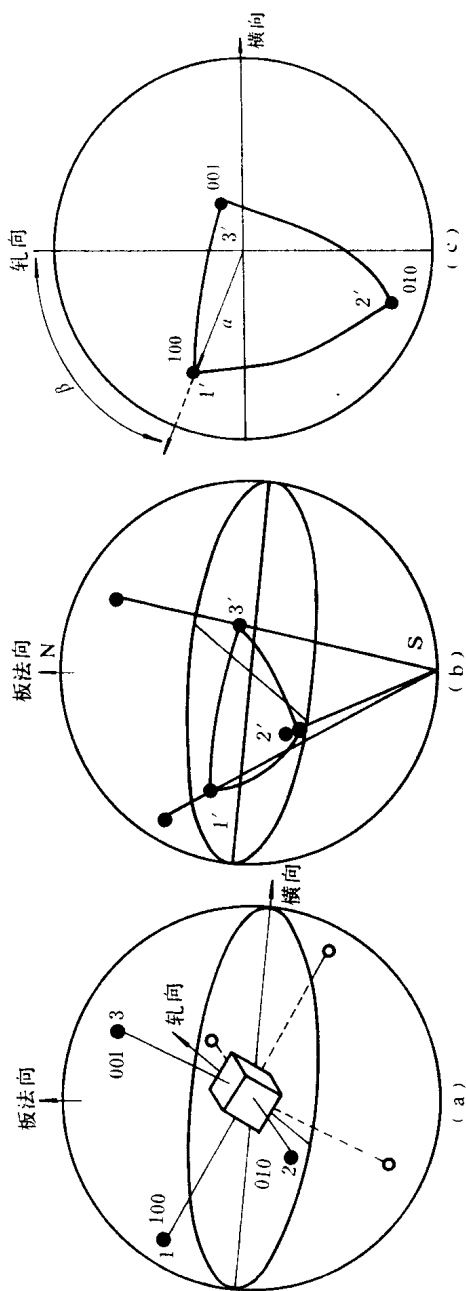


图 1-5 纯铝多晶体再结晶组织(密度水平:1、2、5、10、15)
(a) {200} 极图; (b) {111} 极图

内的晶粒取向多在立方取向 $\{001\}\langle 100\rangle$, 戈斯取向 $\{011\}\langle 100\rangle$ 和R取向 $\{214\}\langle 121\rangle$ 附近聚集。

由于通常球面上极密度分布与它在赤道面上的投影的分布, 二者之间有一定的几何关系(图 1-4), 它们互相换算时要稍作数学处理(见 § 1-5)。

§ 1-4 极密度的 X 射线测量技术 (反射法)

当一束波长为 λ 的单色 X 射线投射到晶体某一 (HKL) 干涉面时, 根据一级反射的布拉格定律有

$$2d_{HKL}\sin\theta=\lambda \quad (1-1)$$

即在与入射线夹角为 2θ 处发生 X 线衍射。式中 d_{HKL} 表示这一干涉面的面间距, θ 为入射线或衍射线与该干涉面的夹角。它如图 1-6 所示是入射线与反射线夹角的一半。如果测量样品时(图 1-7)在 2θ 角处设有计数器, 就可以记录到 $\{HKL\}$ 晶面的衍射强度。如图 1-7 所示, 在测量过程中将样品绕其横向轴(或轧向轴)作 α ($0 \rightarrow \frac{\pi}{2}$) 转动, 和绕板法向作 β ($0 \rightarrow 2\pi$) 转动, 就可以测到样品不同方位 (α, β) 处 $\{HKL\}$ 晶面的衍射强度。图 1-8 展示了一台实际的 X 射线极密度自动测量装置(反射法)。它可以自动完成上面所述的操作。选定不同的 2θ 角就可以测得不同的 $\{HKL\}$ 极密度分布。

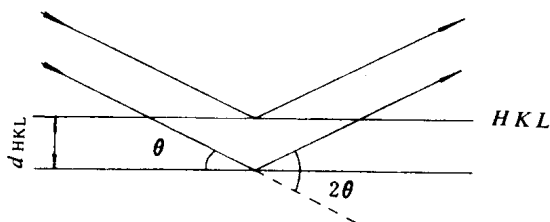


图 1-6 (HKL) 晶面衍射

人们熟知, 当计数器不在衍射角位置或衍射角处没有要测的

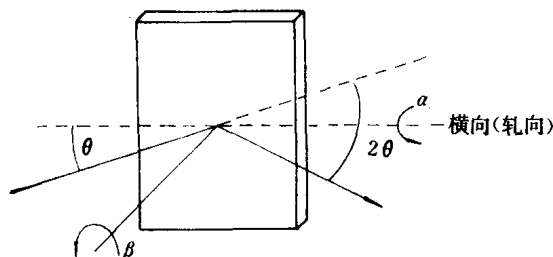


图 1-7 织构样品的 X 线测量几何

$\{HKL\}$ 晶面时衍射强度并不为零。这时的强度通常称为背底强度 I_b 。因此在 $2\theta_{HKL}$ 角处获得的实测衍射强度 $I_s(\alpha, \beta)$ 实际上含有背底强度 I_b 的影响。取一无织构的多晶标准样品, 可测得其在 $2\theta_{HKL}$ 角处的强度为 I_{ob} , 在 $2\theta_{HKL}$ 附近的背底强度为 I_b 。当 α 角变大时 (图 1-4), I_{ob} 与 I_b 随之降低 (图 1-9)。一般 I_{ob} 与 I_b 不随 β 角变, 所以它们只是 α 角的函数。

消除背底对实测样品和标准样品衍射强度的影响后, 实际强度 I 和 I_0 分别为

$$I(\alpha, \beta) = I_s(\alpha, \beta) - I_b(\alpha) \quad (1-2)$$

$$I_0(\alpha) = I_{ob}(\alpha) - I_b(\alpha) \quad (1-3)$$

设 $\Delta\Omega$ 是实测 $I(\alpha, \beta)$ 和 $I_0(\alpha, \beta) = I_0(\alpha)$ 所代表的球表面微元, 它是测量角间隔 $\Delta\alpha, \Delta\beta$ 的函数。 $\Delta\Omega$ 区内的总强度应分别是 $I(\alpha, \beta)\Delta\Omega$ 和 $I_0(\alpha)\Delta\Omega$, 因而得到相对于标准样强度的实测相对强度 $J(\alpha, \beta)$

$$J(\alpha, \beta) = \frac{I(\alpha, \beta)\Delta\Omega}{I_0(\alpha)\Delta\Omega} = \frac{I(\alpha, \beta)}{I_0(\alpha)} \quad (1-4)$$

由此, 相对衍射强度 $J(\alpha, \beta)$ 排除了图 1-9 所示的 α 角因素对衍射强度的影响。所以对实测极密度 $\hat{p}(\alpha, \beta)$ 有

$$\hat{p}(\alpha, \beta) = \frac{J(\alpha, \beta)}{\Delta\Omega} = \frac{I(\alpha, \beta)}{I_0(\alpha)\Delta\Omega} \quad (1-5)$$

由实测值算得的极密度 $\hat{p}(\alpha, \beta)$ 还需进行归一化处理才能得

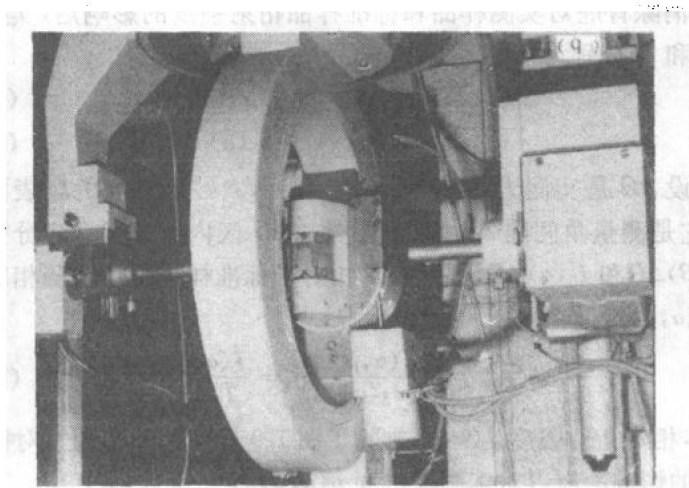
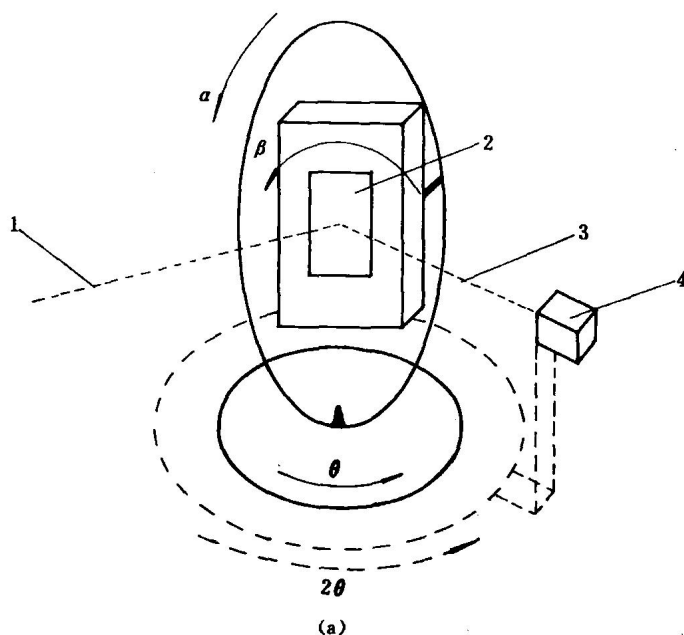


图 1-8 X 射线极密度自动测量装置(反射法)

(a) 测量原理, 1-入射 X 射线; 2-样品; 3-衍射 X 射线;
4-计数器; (b) 测量装置