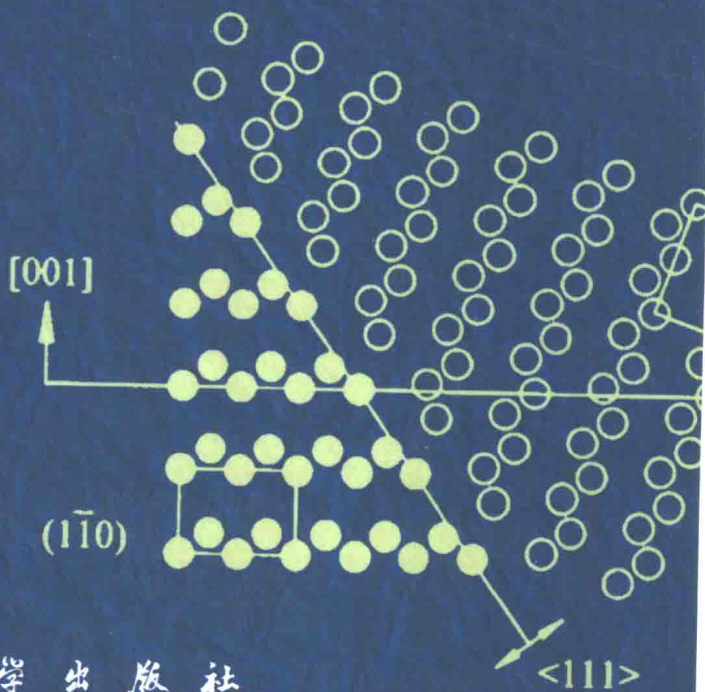
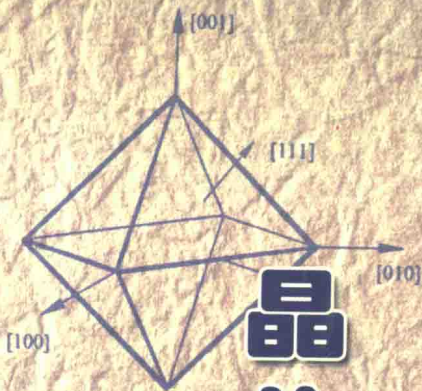


金属材料的

■ 毛卫民 编著

晶体学织构与各向异性



科学出版社
www.sciencep.com

金属材料学



2

金属材料的晶体学织构与各向异性

毛卫民 编著

科学出版社

2002

内 容 简 介

晶体学织构与各向异性是现代先进金属材料十分重要的特性。本书论述了金属材料织构产生的基本过程,并阐述了相关基本理论,同时对20世纪80年代以来材料织构研究方面的最新成果作了一定的介绍。

本书可作为高等学校本科生、研究生的教材,也可供相关专业的教师和科研人员参考使用。

图书在版编目(CIP)数据

金属材料的晶体学织构与各向异性/毛卫民编著. —北京:科学出版社, 2002

ISBN 7-03-010456-0

I. 金… II. 毛… III. ①金属材料-金属晶体-织构 ②金属材料-各向异性 IV. TG14

中国版本图书馆CIP数据核字(2002)第037816号

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

新蕾印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2002年8月第 一 版 开本:720×1000 B5

2002年8月第一次印刷 印张:14

印数:1—2 000 字数:268 000

定价:19.00元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈北燕〉)

前 言

金属材料的综合性能优良、价格低廉、性能可靠、生产工艺成熟、供应稳定、使用方便、易于进行大规模生产,是当今经济建设与社会发展的基础材料。金属材料在 21 世纪仍将是重要工业部门,尤其是机械、国防等工业部门使用的主要材料。但是现代社会的进步与高新技术的快速发展也对传统的金属材料领域提出了严峻的挑战。人们不再满足于金属材料已有的优点与性能水平,甚至不再满足于金属材料性能逐年提高的步伐。近十几年来高技术新材料得到了突飞猛进的发展,其中就包括新金属材料的开发与应用。新金属材料的开发虽然取得了较大的成果,但总的来说是靠牺牲传统金属材料的一些优点来换取某些性能的明显提高。尤其是它较为复杂的制造工艺和较高的制造成本等都使得这类新材料的大范围推广使用受到阻碍。

另一方面,金属材料大多是晶体材料。利用晶体本身存在的各向异性是改善传统金属材料性能的一个重要手段。冶炼技术的进步和现代织构分析技术的出现为这一手段的发展提供了有力的支持。这种手段在于制备出有明显各向异性的织构材料,将其性能优异的晶体学方向转置在材料需要的方向上。这样既保持了金属材料原有的全部传统优点,又可以使必要的性能得到显著的提高。

在金属材料生产制备的各个环节中,往往会产生不同类型的织构。金属凝固过程中的选择生长会造成柱状晶区的铸造织构。金属塑性变形加工时,各晶粒的取向会发生定向转动,因而形成变形织构。变形后的金属在加热过程中仍会生成再结晶织构。一些研究表明,即使是粉末材料,在其烧结过程中也会产生某种织构,因此实际上很难找到完全没有织构的金属材料。由此可见,织构在金属材料中的存在具有一定的普遍性。

由于金属材料织构的普遍性以及它对材料性能的重要影响,近些年来许多国家投入了大量的精力从事这方面的开发研究,并取得了显著的成果。同时这些成果又以非常快的速度转化为生产力,应用于各种先进金属材料的生产之中。例如超深冲钢板、新一代优质硅钢板、半导体薄膜、电容器铝箔、超导材料、新型稀土永磁材料和磁致伸缩材料等产品的出现或日趋成熟,以及一些现代在线检测技术的开发与应用就是建立在这些研究开发成果的基础之上。金属材料各向异性的开发研究已成为当前材料领域一个极为重要的发展方向。

与世界发达国家相比,我国在这一领域科学研究和生产应用的水平尚有不少差距。同时,许多冶金材料工作领域内的青年工作者也需要一些参考资料,以便了解金属材料的织构和各向异性方面的一些新观念,及其开发应用的状况和前景。

随着科技成果和生产技术的不断更新,现有的一些专业书籍和资料已显得较为陈旧或不全面,很有必要在新的起点上对金属材料的织构和各向异性作一个较为系统的阐述。基于这一认识,作者根据十几年来在这个领域内从事研究工作的经验和体会,参考了一些书刊资料,草拟本书奉献给广大读者。作者在上述领域的理论与实践方面仅有粗浅的认识,也没有能力把金属材料织构和各向异性的问题较全面地概括入本书,因而在本书的编写过程中难免有不妥之处,恳请有关专家及广大读者提出宝贵意见。尽管如此,作者还是希望本书能够对我国材料织构领域在积累资料、更新知识以及开阔视野方面起到一点促进作用,也希望能够借助本书给初步涉及这个领域的读者提供一个方便的入门途径。

面临 21 世纪的严峻挑战,材料科学与工程学科需要加倍努力创新。在本书的编写过程中引用了与作者合作的研究生李波涛、杨芑科、敖强、徐军、杨宏、熊德赣、李敏、朱国辉、陈楠、赵子苏、吴勇、杨第、陈冷等人的研究成果,浙江大学赵新兵教授提供了实验数据。北京科技大学杨平副教授为本书撰写了微区织构和背散射电子分析部分。在此,本书作者向上述各位同志表示衷心的感谢。作者在从事新金属材料的研究过程,以及在本书撰写与成稿过程中曾获得国家自然科学基金委员会(项目编号:59271006, 59671008, 59895151, 50171014)、北京市自然科学基金委员会(项目编号:2002014)及北京市科技合同项目(项目编号:9550310400)的资助,特表示衷心谢意。

作 者
2002 年 1 月

目 录

前言

第一章 结构的测量与表达	(1)
§ 1-1 取向与结构	(1)
一、晶体取向	(1)
二、取向的表达方法	(1)
三、晶体学结构	(4)
§ 1-2 极图与极密度分布	(4)
一、取向的极射赤面投影	(4)
二、多晶体极密度分布	(5)
三、极图的测量	(6)
四、极图数据的整理	(6)
五、反极图	(7)
§ 1-3 取向分布函数	(8)
一、取向分布函数计算原理	(8)
二、多晶体的取向空间	(9)
三、取向分布函数分析	(11)
四、结构组分分析	(13)
§ 1-4 中子衍射结构分析	(14)
一、衍射用中子波	(15)
二、原子对中子的散射与吸收	(15)
三、中子衍射试样	(17)
§ 1-5 结构测量新技术	(18)
一、能谱探测器与位敏探测器	(18)
二、面探测器分析技术	(19)
三、微区结构和背散射电子取向分析技术	(21)
参考文献	(26)
第二章 结构的生成	(28)
§ 2-1 热加工结构	(28)
一、铸造结构	(28)
二、热变形结构	(30)
三、粉末烧结构	(31)
§ 2-2 冷变形结构及其理论计算	(33)
一、金属变形晶体学	(33)

二、塑性变形时晶体取向的变化	(36)
三、多晶体冷变形织构的生成	(38)
四、多晶体变形模型	(42)
五、变形织构模拟的一般过程	(44)
六、冷轧织构的模拟	(45)
§ 2-3 不均匀变形织构	(47)
一、塑性变形的不均匀性	(47)
二、轧制变形的受力状态	(49)
三、不均匀变形织构的生成	(53)
§ 2-4 再结晶织构	(57)
一、金属的再结晶	(57)
二、金属再结晶织构	(58)
三、再结晶的定向生核理论及其相应织构的实际观察	(61)
四、再结晶的选择生长理论及其相应织构的实际观察	(63)
§ 2-5 二次再结晶织构	(65)
一、金属的二次再结晶	(65)
二、金属中的二次再结晶织构	(66)
三、二次再结晶织构与晶粒异常生长	(68)
§ 2-6 相变织构	(70)
一、金属材料固态相变中的织构转换	(70)
二、两相合金的相变织构	(70)
三、相变引起的单相合金的织构	(71)
四、变形诱发相变造成的织构	(75)
§ 2-7 高纯面心立方金属板中的立方织构	(76)
一、立方织构的工业应用及生成理论	(76)
二、立方织构的观察	(77)
三、轧制变形对生成立方织构的影响	(78)
§ 2-8 工程用金属板材冷轧织构的理论分析	(82)
一、工程轧制变形的晶体学理论	(82)
二、实际面心立方金属冷轧织构的形成	(84)
三、塑性变形外应力对体心立方金属冷轧织构的影响	(89)
四、体心立方金属正常冷轧织构的模拟	(95)
参考文献	(96)
第三章 传统金属材料的织构及其应用	(100)
§ 3-1 深冲压铝合金薄板	(100)
一、铝合金薄板的制耳效应	(100)
二、制耳效应的消除	(101)
三、增加铝合金热轧板中立方织构的方法	(102)
§ 3-2 不可热处理强化铝合金的力学性能	(104)

一、不可热处理强化的变形铝合金	(104)
二、5456 轧制铝合金的织构与强度	(104)
三、中间再结晶退火的影响	(107)
四、最终回复退火的影响	(108)
§ 3-3 超深冲无间隙原子钢	(109)
一、无间隙原子钢的发展	(109)
二、无间隙原子钢的各向异性	(110)
三、无间隙原子钢的织构控制	(112)
四、高强度无间隙原子钢的开发	(114)
§ 3-4 高压电子铝箔	(116)
一、高压电子铝箔的特性	(116)
二、生产高压电子铝箔的技术环节	(116)
三、高压电子铝箔的组织结构与织构	(117)
§ 3-5 冷轧电工硅钢板	(118)
一、电工硅钢及其软磁性能	(118)
二、取向硅钢及 {110} <001> 织构的形成	(119)
三、无取向硅钢	(120)
四、高性能电工钢的开发	(123)
参考文献	(125)

第四章 新金属材料的织构及其应用

§ 4-1 金属与合金织构的一些特殊利用	(130)
一、钛合金板的织构与应力腐蚀	(130)
二、锌合金板的织构与性能	(131)
三、钽板织构的利用	(132)
四、锆板的织构与塑性变形各向异性	(133)
§ 4-2 薄膜金属的织构	(134)
一、大规模集成电路芯片用铝膜导线	(134)
二、化学气相沉积金刚石薄膜	(137)
三、冲压钢板的镀锌层	(140)
四、高温超导薄膜	(142)
五、特种功能薄膜材料的织构	(145)
§ 4-3 金属间化合物结构材料的织构	(147)
一、Ti ₃ Al 基合金的织构与力学性能	(147)
二、TiAl 基合金的织构与力学各向异性	(149)
三、Ni ₃ Al 基合金的织构与力学性能	(151)
四、Fe ₃ Al 基合金的织构与力学性能	(152)
§ 4-4 金属间化合物功能材料的织构	(153)
一、CuZn 合金的逆向孪生织构与形状记忆效应	(153)
二、FeCo 合金有序-无序转变对变形和再结晶织构的影响	(158)

三、Nd-Fe-B 合金的组织与永磁性能	(163)
四、(Tb, Dy)Fe ₂ 合金的组织与磁致伸缩性能	(164)
五、InSb 合金的组织与磁阻效应	(165)
参考文献	(166)
第五章 晶体学组织与金属材料检测	(173)
§ 5-1 与取向相关的材料性能及其在线检测技术	(173)
一、与取向分布相关的多晶材料性能的定量计算	(173)
二、多晶体性能函数 M 的确定	(174)
三、 r 值在线检测技术的应用	(176)
四、 r 值在线检测技术的改进	(178)
§ 5-2 纤维组织的定量计算	(180)
一、多晶材料的纤维组织及其检测与分析	(180)
二、纤维组织的极图分析原理	(183)
三、纤维组织定量分析方法	(185)
§ 5-3 多晶体晶界两侧晶粒取向差的统计计算	(186)
一、晶粒间取向差与晶界特性	(187)
二、取向差的实际计算	(187)
三、多晶取向差分布的统计计算	(188)
四、织构材料取向差分布	(189)
§ 5-4 电工钢磁学性能检测	(193)
一、铁基合金的磁晶各向异性	(193)
二、磁各向异性分布函数与磁晶各向异性极图	(194)
三、多晶无取向硅钢组织与磁转矩的定量计算	(196)
四、取向硅钢组织与工程磁学性能	(198)
§ 5-5 深冲压钢板塑性应变比无损检测	(201)
一、塑性应变比(r 值)无损检测原理	(201)
二、 r 值的泰勒模型计算	(202)
三、 r 值检测技术的进一步改进	(203)
§ 5-6 金属材料检验中的一些织构问题	(204)
一、物相定量分析	(204)
二、物相构成的判定分析	(208)
三、其他材料检测中的结构问题	(210)
参考文献	(211)

第一章 织构的测量与表达

§ 1-1 取向与织构

一、晶体取向

设空间有一由 X, Y, Z 三个互相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方向在参考坐标系 A 内的这种排布方式称为起始取向 e [图 1-1(a)]。

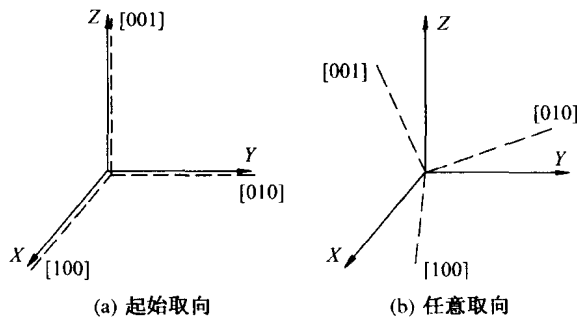


图 1-1 取向的确定

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 $[100]$ 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 1-1(b)]。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。综上所述, 取向描述了物体相对于参考坐标系的转动状态, 晶体取向表达了基本的晶体坐标轴在一参考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^[1]。

二、取向的表达方法

人们通常用晶体的某晶面晶向在参考坐标系中的排布方式来表达晶体的取向。如在立方晶体轧制样品坐标系中用 $(hkl)[uvw]$ 来表达某一晶粒的取向。这种晶粒的取向特征为其 (hkl) 晶面平行于轧面, $[uvw]$ 方向平行于轧向。另

外也可以用 $[rst] = [hkl] \times [uvw]$ 表示平行于轧板横向的晶向, 这样就可以构成一个标准正交矩阵。若在上述参考坐标系中用 g 代表一取向, 则有

$$g = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & g_{13} \\ g_{21} & g_{22} & g_{23} \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u & r & h \\ v & s & k \\ w & t & l \end{bmatrix} \quad (1-1)$$

这样式 1-1 可表达立方晶体中任一晶粒在轧制样品坐标系中的取向。对起始取向 e 有

$$e = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (1-2)$$

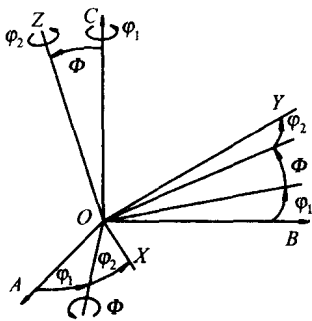


图 1-2 取向的欧拉转动

由于从起始取向出发经过某种转动可将晶体坐标系 $OABC$ 转到任何取向的晶体坐标系 $OXYZ$ 上, 所以也可以用这种转动操作的转角表示晶体取向。一种常用的确定取向的方式即是邦厄 (Bunge) 定义的欧拉角^[2]。图 1-2 给出了从起始取向出发, 按 $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ 的顺序所作的三个欧拉转动。经过这种转动可以实现任意的晶体取向, 因此取向 g 可表示成

$$g = (\varphi_1, \Phi, \varphi_2) \quad (1-3)$$

显然对于起始取向 e 有

$$e = (0, 0, 0) \quad (1-4)$$

若用矩阵表示经任意 $(\varphi_1, \Phi, \varphi_2)$ 转动所获得的取向, 则有

$$g = \begin{bmatrix} \cos\varphi_2 & \sin\varphi_2 & 0 \\ -\sin\varphi_2 & \cos\varphi_2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\Phi & \sin\Phi \\ 0 & -\sin\Phi & \cos\Phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\varphi_1 & \sin\varphi_1 & 0 \\ -\sin\varphi_1 & \cos\varphi_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (1-5)$$

各矩阵相乘后得总的转置矩阵, 且可以证明有下述关系, 即

$$g = \begin{bmatrix} \cos\varphi_1\cos\varphi_2 - \sin\varphi_1\sin\varphi_2\cos\Phi & \sin\varphi_1\cos\varphi_2 + \cos\varphi_1\sin\varphi_2\cos\Phi & \sin\varphi_2\sin\Phi \\ -\cos\varphi_1\sin\varphi_2 - \sin\varphi_1\cos\varphi_2\cos\Phi & -\sin\varphi_1\sin\varphi_2 + \cos\varphi_1\cos\varphi_2\cos\Phi & \cos\varphi_2\sin\Phi \\ \sin\varphi_1\sin\Phi & -\cos\varphi_1\sin\Phi & \cos\Phi \end{bmatrix} \\ = \begin{bmatrix} u & r & h \\ v & s & k \\ w & t & l \end{bmatrix} \quad (1-6)$$

这样就建立了两种取向表达方式的换算关系。

如果从起始取向出发, 绕某一晶体学方向 $v [hkl] = [v_1 \ v_2 \ v_3]$ 旋转一个角度 γ , 则也可以实现任意的晶体取向^[3], 此时取向 g 可表示成

$$g = \begin{bmatrix} (1 - v_1^2)\cos\gamma + v_1^2 & v_1v_2(1 - \cos\gamma) + v_3\sin\gamma & v_1v_3(1 - \cos\gamma) - v_2\sin\gamma \\ v_1v_2(1 - \cos\gamma) - v_3\sin\gamma & (1 - v_2^2)\cos\gamma + v_2^2 & v_2v_3(1 - \cos\gamma) + v_1\sin\gamma \\ v_1v_3(1 - \cos\gamma) + v_2\sin\gamma & v_2v_3(1 - \cos\gamma) - v_1\sin\gamma & (1 - v_3^2)\cos\gamma + v_3^2 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} u & r & h \\ v & s & k \\ w & t & l \end{bmatrix} \quad (1-7)$$

由式 1-1 所示的取向表达方式可知表达式中共有 9 个变量。但这 9 个变量并不都是独立的。由于该矩阵的标准正交特点，其中必有下列 6 个归一与正交的约束条件，即

$$r^2 + s^2 + t^2 = 1, h^2 + k^2 + l^2 = 1, u^2 + v^2 + w^2 = 1 \quad (1-8)$$

$$r \cdot h + s \cdot k + t \cdot l = 0, h \cdot u + k \cdot v + l \cdot w = 0,$$

$$u \cdot r + v \cdot s + w \cdot t = 0 \quad (1-9)$$

可见 9 个变量中只可能有 3 个变量是独立的。因此取向的自由度是 3。用欧拉角表达取向时 $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ 刚好反映出了取向的三个独立变量。

六方晶体的取向表达式与其 c/a 比值有关。设六方晶体 c 与参考坐标系 Z 向平行， a 与参考坐标系 Y 向平行， a 与 c 的矢量积为 X 向，则可用 $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ 角确定六方晶体的取向^[4]。从六方晶体对称性出发，在四轴坐标系中用 $\{h k i l\}$ $\langle u v t w \rangle$ 表达六方晶体的取向比较直观，方便。其中有 $h + k + i = 0, u + v + t = 0$ 。把这样的晶面晶向指数经三轴坐标系最后可换算成直角坐标系的相应参数。参考式 1-6 可推导出如下关系：

$$\begin{bmatrix} \left(\sqrt{3}u + \frac{\sqrt{3}}{2}v \right) \frac{a}{d_{uvw}} & (2h + k) \frac{c}{d_{hkl}} \\ \frac{3}{2} \frac{va}{d_{uvw}} & \sqrt{3}k \frac{c}{d_{hkl}} \\ \frac{wc}{d_{uvw}} & \sqrt{3}l \frac{a}{d_{hkl}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\varphi_1\cos\varphi_2 - \sin\varphi_1\sin\varphi_2\cos\Phi & \sin\varphi_2\sin\Phi \\ -\cos\varphi_1\sin\varphi_2 - \sin\varphi_1\cos\varphi_2\cos\Phi & \cos\varphi_2\sin\Phi \\ \sin\varphi_1\sin\Phi & \cos\Phi \end{bmatrix} \quad (1-10)$$

式中， a, c 为六方晶体点阵常数，对 d_{uvw}, d_{hkl} 有

$$d_{uvw} = \sqrt{3 \left(u + \frac{v}{2} \right)^2 a^2 + \frac{9}{4} v^2 a^2 + w^2 c^2} \quad (1-11)$$

$$d_{hkl} = \sqrt{(2h + k)^2 c^2 + 3k^2 c^2 + 3l^2 a^2}$$

对于四方晶系可设晶体 c 与参考坐标系 z 向平行， a 与参考坐标系 x 向平行，则可用 $\varphi_1, \Phi, \varphi_2$ 角确定四方晶体的取向^[4]。从四方晶体对称性出发，也可

在直角坐标系中用 $(hkl)[uvw]$ 表达四方晶体的取向, 并有如下关系:

$$\begin{bmatrix} \frac{ua}{r_{uvw}} & \frac{hc}{r_{hkl}} \\ \frac{va}{r_{uvw}} & \frac{kc}{r_{hkl}} \\ \frac{wc}{r_{uvw}} & \frac{la}{r_{hkl}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos\varphi_1\cos\varphi_2 - \sin\varphi_1\sin\varphi_2\cos\Phi & \sin\varphi_2\sin\Phi \\ -\cos\varphi_1\sin\varphi_2 - \sin\varphi_1\cos\varphi_2\cos\Phi & \cos\varphi_2\sin\Phi \\ \sin\varphi_1\sin\Phi & \cos\Phi \end{bmatrix} \quad (1-12)$$

式中, a, c 为四方晶体常数, 对 r_{uvw} 和 r_{hkl} 有

$$r_{uvw} = \sqrt{u^2a^2 + v^2a^2 + w^2c^2}, r_{hkl} = \sqrt{h^2c^2 + k^2c^2 + 3l^2a^2} \quad (1-13)$$

三、晶体学织构

当多晶体各晶粒的取向聚集到一起时多晶体内就会呈现织构现象。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织构 (preferred orientation distribution)。根据近些年来研究, 许多人认为晶体学织构概念应是: 多晶体取向分布状态明显偏离随机分布的取向分布结构 (deviation of random orientation distribution)。另一方面, 目前也有一些人把晶体学织构的观念进一步拓宽, 认为取向分布本身就是晶体学织构, 因而有了“随机织构” (randomly textured) 的说法。由此可见, 晶体学织构的概念也在不断的发展之中。

§ 1-2 极图与极密度分布

一、取向的极射赤面投影

以金属轧制样品为例, 将轧制样品中具有一定取向的晶体放到标有轧向 RD、板法向 ND 和横向 TD 的球心上。作该晶体所有 $\{HKL\}$ 面的法线, 交球面于若干点, 成球面投影图。图 1-3(a) 给出了一晶体所有 $\{100\}$ 面法线的投影而成的 1、2、3 各点。然后对这些投影点再作极射赤面投影, 使它们与垂直于板法向且过球心的圆面 (即赤面) 有一组交点 (如图 1-3(b) 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 1-3(a) 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, 图 1-3(b) 中只取上半球的那一个作极射赤面头影。投影过的赤面图即为表达该晶体取向的极射赤面投影图或称为极图, 图 1-3(c) 即是相应的 $\{100\}$ 极图。图 1-3 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 1-3(c) 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。

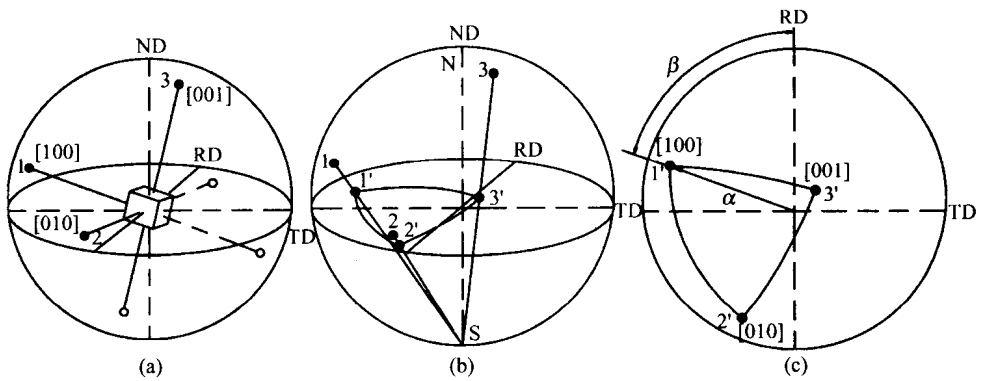


图 1-3 取向的极图投影原理

二、多晶体极密度分布

如果把一多晶体内所有晶粒都作上述的投影，则会在球面上得出许多投影点来。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。通常球面上极密度分布在赤道上的投影分布图称为多晶体的极图。假如多晶体内无织构，极密度分布在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道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 1-4 给出了用 $\{200\}$ 和 $\{111\}$ 极图显示纯铝板中再结晶织构的实例。从图 1-4 可以看出，该样品内的晶粒取向多在立方取向 $\{001\}\langle 100 \rangle$ ，戈斯取向 $\{011\}$

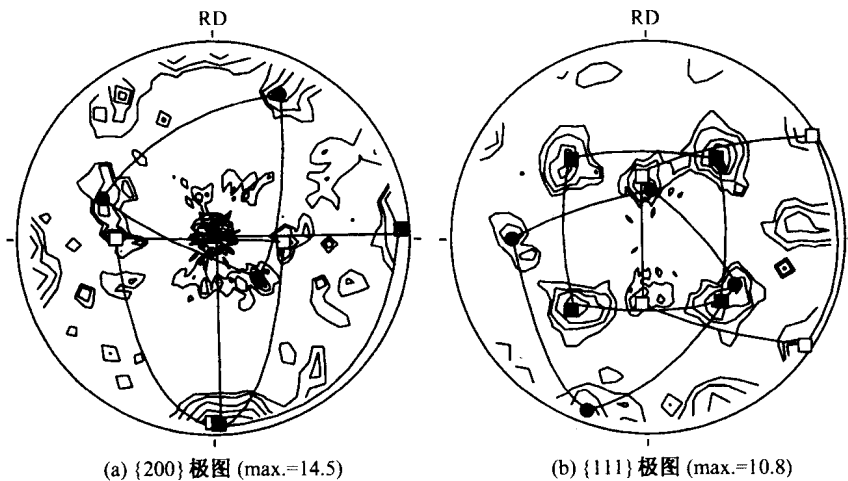


图 1-4 纯铝板再结晶织构(密度水平:1, 2, 4, 7, 10)

■ $\{001\}\langle 100 \rangle$, ● $\{124\}\langle 211 \rangle$, □ $\{011\}\langle 100 \rangle$

$\langle 100 \rangle$ 和 R 取向 $\{214\}$ $\langle 121 \rangle$ 附近聚集。

三、极图的测量

图 1-5 给出了利用射线测量极图装置的示意图。该装置可在某 $\{HKL\}$ 晶面 2θ 衍射位置记录衍射强度。测量过程中将样品绕其 X 向轴或 Y 向作 α 转动, 并绕 Z 向作 β 转动, 就可以测到样品不同方位 (α, β) 处 $\{HKL\}$ 晶面的衍射强度。实际应用的 X 射线极密度自动测量装置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 $\{HKL\}$ 极图数据。中子等其他射线源也可以用来测量极图数据。

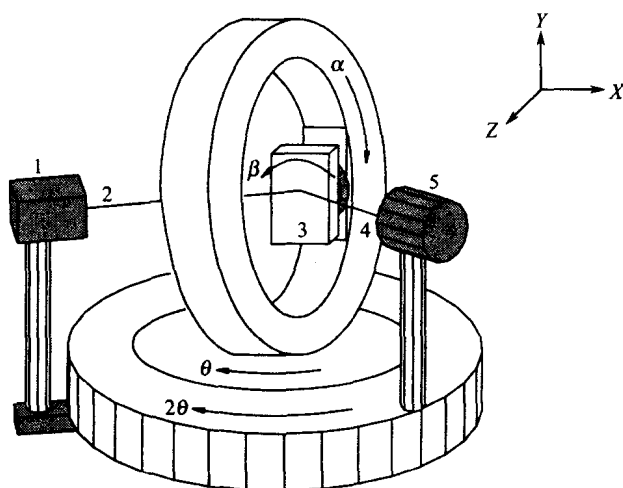


图 1-5 X 射线极密度自动测量装置示意图(反射法)

1—X 射线源;2—X 入射线;3—试样;4—X 衍射线;5—计数器

四、极图数据的整理

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 $\{HKL\}$ 晶面时射线衍射强度并不为零。这时的强度通常称为背底强度 $I_{背}$ 。因此在 2θ 角处获得的实测衍射强度 $I_{实}(\alpha, \beta)$ 实际上含有背底强度 $I_{背}$ 的影响。取一无织构的多晶粉末样品, 可测得其在 2θ 角处的强度 $I_{粉}$, 及在 2θ 附近的背底强度 $I_{背}$ 。当 α 角变大时, $I_{粉}$ 与 $I_{背}$ 随之降低。一般认为 $I_{粉}$ 与 $I_{背}$ 不随 β 角变, 所以它们只是 α 角的函数。这样消除背底影响后对实测样品衍射强度 I 和标准样品衍射强度 $I_{标}$ 有

$$I(\alpha, \beta) = I_{实}(\alpha, \beta) - I_{背}(\alpha) \quad (1-14)$$

$$I_{标}(\alpha) = I_{粉}(\alpha) - I_{背}(\alpha) \quad (1-15)$$

由此可换算出实测极图数值 $p_{实}(\alpha, \beta)$ 为

$$p_{\text{实}}(\alpha, \beta) = \frac{I(\alpha, \beta)}{I_{\text{标}}(\alpha)} \quad (1-16)$$

对实测极图数值 $p_{\text{实}}(\alpha, \beta)$ 进行归一化处理即可获得极密度值 $p(\alpha, \beta)$, 或称极密度分布函数。一般得到完整的实测极密度分布之后方能进行归一化处理。设 N 为归一化因子, $\sin\alpha\Delta\alpha\Delta\beta$ 表示球表面微元, $\Delta\alpha$ 和 $\Delta\beta$ 是测量的角间隔, 则归一化原则条件为

$$\frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha=0}^{\pi/2} \sum_{\beta=0}^{2\pi} p_{\text{实}}(\alpha, \beta) N \sin\alpha \Delta\alpha \Delta\beta = \frac{1}{2\pi} \sum_{\alpha=0}^{\pi/2} \sum_{\beta=0}^{2\pi} p(\alpha, \beta) \sin\alpha \Delta\alpha \Delta\beta \equiv 1 \quad (1-17)$$

对相应的无织构粉末多晶体有

$$p_{\text{粉}}(\alpha, \beta) \equiv 1 \quad (1-18)$$

图 1-6 给出了纯铝无织构样品 $I_{\text{标}}$ 与 $I_{\text{背}}$ 数值的实例。其中虚线为 $I_{\text{背}}$, 实线为相对 $I_{\text{标}}$, 即有: 相对 $I_{\text{标}}(\alpha) = I_{\text{标}}(\alpha)/I_{\text{标}}(0^\circ)$ 。用 X 线反射法通常只能在 $\alpha < \pi/2$ 的范围内测量不完整极密度分布, 因此不能直接归一处理。实用的归一法主要有两种: 一种是用其他测量方法(如 X 射线透射法)补足未能从 X 射线反射法测到的数据, 然后归一处理。另一种是取某些假设进行近似处理。例如设未测到的一小部分极密度数据与无织构时的值一样, 或假设未测到的值与已测到的最近的已知值相等。也可以用外延法根据已知值把未知值推算出来, 以便归一处理。

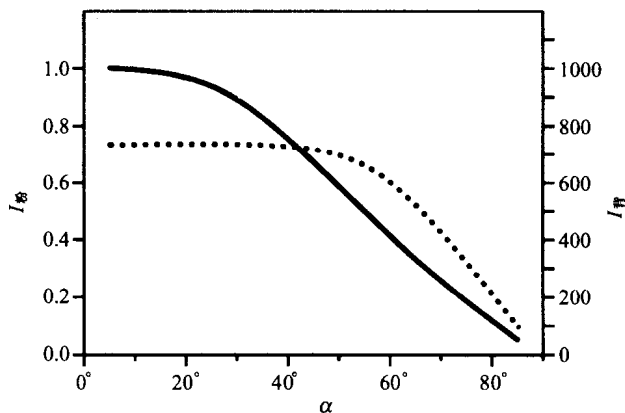


图 1-6 纯铝无织构样品实测 X 射线 $I_{\text{标}}$ (实线)与相对 $I_{\text{背}}$ (虚线)强度

五、反极图

反极图用以在晶体坐标系内表示多晶体内各晶粒特征样品坐标轴方向的分布情况。通常以晶体坐标系内的三个特征坐标轴为坐标参照系, 如立方晶体内可采用 $[100]$ 、 $[010]$ 和 $[001]$ 三个方向组成参考坐标系。参照图 1-3 和 1-4, 反极图的投影和绘制原理与极图相同, 只是其中晶体坐标系和样品坐标系互相调换了位

置。

反极图的传统检测方法比较简单。主要采用短波单色 X 射线,作普通多晶体衍射分析,并尽可能多的获得各种不同晶面的衍射数据^[5,6]。对实测衍射数据作与极图数据相似的整理后,采用极射赤面投影的方法把相关数据投影到反极图赤道投影面上,对离散的反极图数据作连续化处理^[6]即可得到反极图。多数常见材料会有较高的晶体对称性,因此通常不需要如图 1-4 那样绘出全部反极图。例如,具有对称阶数为 24 的 432 立方晶体材料只需要绘出全部反极图的二十四分之一就可以表达出特征样品坐标轴在晶体坐标系中的分布情况,即实际采用的晶体参考坐标轴为 $[001]$ 、 $[011]$ 和 $[111]$ 。图 1-7 示意性地给出了表示加工铝材特定样品坐标轴分布情况的反极图实例^[6]。

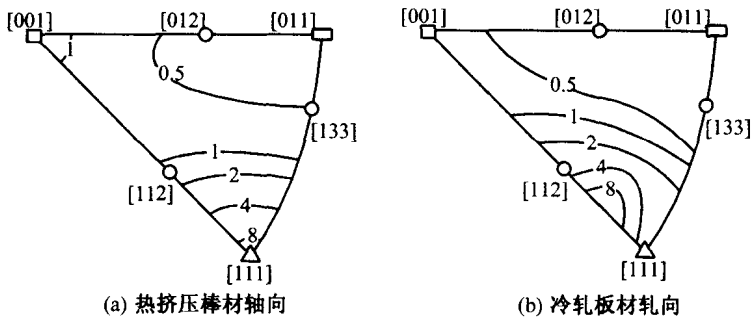


图 1-7 加工铝材反极图示意图

传统反极图的检测方法虽然简便易行,但检测数据往往太少,因而造成测量精度不高。鉴于反极图在一些情况下尚有广泛的应用,因此人们亦发展出利用取向分布函数精确测定反极图的新方法^[2,3,6]。

§ 1-3 取向分布函数

根据式(1-8)和(1-9)可知取向有三个自由度,因此需要用三维空间表达多晶体取向分布。极图或极密度分布函数 $p(\alpha, \beta)$ 所使用的是一个二维的空间,它上面的一个点不足以表示三维空间内的一个取向,因此用极图分析多晶体织构或取向时会产生一定的局限性和困难。为了细致、精确并且定量地分析织构,需要建立一个利用三维空间描述多晶体取向分布的方法,这就是取向分布函数(Orientation Distribution Function)分析法,简称 ODF 法。

一、取向分布函数计算原理

极密度分布函数 $p_{hkl}(\alpha, \beta)$ 表达了多晶体内各晶粒的 $\{HKL\}$ 晶面法线于