

非共格孪晶界面位移矢量的测定与分析

常 昕 张修睦 杨奇斌 郭可信

(中国科学院金属研究所)

1981年12月9日收到

提 要

模拟计算指出,在孪生取向的面心立方双晶中,二者如无整体位移,除了共格孪晶界面以外,所有的非共格孪晶界面两边最近邻的阵点间距仅为 $0.408a$ (a 为点阵常数)。而原子半径 $r = 0.707a$,故有 $0.299a$ 的部分相叠加。通过两部分晶体的整体位移可以使界面能显著降低。实验测定了 (111) , $(1\bar{1}2)$, $(1\bar{2}1)$ 及 $(7\bar{5}5)$ 四个非共格孪晶界面的位移矢量,它们分别是 $0.254a$, $0.300a$, $0.204a$ 及 $0.126a$ 。

一、引 言

晶界或相界面对材料的力学性能及物理性能影响很大,故界面结构的研究引起了人们广泛的重视^[1],曾提出许多晶界结构的模型。对立方晶系来说重位点阵是一个重要的基本模型^[2-6]。进一步的研究发现阵点的严格相重将引起界面上某些原子的部分体积相叠加,使界面处于高能量高应力状态^[7-9],而界面两侧晶体微小的相对刚性位移将使界面能显著降低,使应力得以松弛。由于原子的刚性位移不改变界面结构的周期性,故我们称刚性位移了的重位界面仍为重位界面。重位界面由八个独立的参数构成^[10],其中三个参数为晶体的取向关系(转轴两个,转角一个)、界面取向两个参数、平移矢量三个参数。要唯一地确定一个重位界面的结构必须同时测定这八个参数,而它们中最主要的是位移矢量的测定。根据晶体学的分析,位移矢量不超过亚点阵单胞所对应的 Wigner-Seitz 胞线度的一半^[11,12],一般来说在 1Å 以下,甚至小到 0.1Å 。在目前的状况下,很难通过电子显微镜的直接原子像来测定,而位移条纹的衍衬分析是一种有效手段。Pond 及其同事测量了Al中 $(\bar{1}55)$ 面及 $(1\bar{2}1)$ 面的位移矢量^[11,12],Vlachavas 及 Nouet 等人测量了金刚石型晶体^[13]及体心立方晶体的位移矢量^[14]。我们在 Pond 及其同事工作^[11,12]的基础上,对面心立方镍固溶体的其它一些非共格孪晶界面的位移矢量进行了测量,并通过模拟计算方法分析了界面原子部分体积相重的规律。

二、实验方法和原理

1. 实验材料和实验方法

测量位移条纹的先决条件是要获得严格的重位点阵取向关系。设 Σ 为晶体点阵与重

位点阵阵点数之比,对于立方晶系来说 $\Sigma = 3, 5, 7 \cdots$ 等一系列奇数^[4], 其中最小的 Σ 为 3, 它对应于孪晶的取向关系, 这是一种严格的重位点阵关系. 我们选择面心立方的镍固溶体为实验材料, 其成分(原子百分数)如下:

Cr	Ni	W	Al	Ti
30.00	63.26	4.92	1.16	0.65

将其轧制成 40 微米后在真空中于 1150°C 保温 30 分钟后, 水淬便得到含有大量孪晶的单相面心立方固溶体. 用窗口法进行电解抛光, 电解液为酒精 700 毫升、冰醋酸 500 毫升、高氯酸 200 毫升及甘油 160 毫升的混合溶液, 得到大片均匀减薄的样品, 然后进行电镜观察.

2. 位移条纹的观察与分析

观察始终在双光束条件下进行. 对于孪生取向关系, 基体和孪晶有三分之一的电子衍射斑点相重. 当选择不相重的衍射斑点成像时, 不管是非共格孪晶界面, 还是共格孪晶界面, 都产生等厚条纹, 然而选择相重衍射斑点成像时, 则共格孪晶界面上的条纹消失, 而非共格孪晶界面上仍然出现条纹. 这种条纹与等厚条纹的性质不同, 它是由位移矢量 $\mathbf{R}$ 产生的位相差 $\alpha = 2\pi \mathbf{g} \cdot \mathbf{R}$ 引起的, 我们称这种条纹为位移条纹(见图 5), 图 5(a), (b) 分别为 $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ 及 $(0\bar{2}2)$ 衍射斑点的非共格孪晶界面的双束明场象, 图中箭头所示为经磁转角校正后的倒易矢量方向. 对于这种条纹我们可以利用 Hirsch 及其同事^[5] 所给的层错双束动力衍射条纹强度公式编成电子计算机程序, 算出一系列 α 值的强度曲线, 然后与显

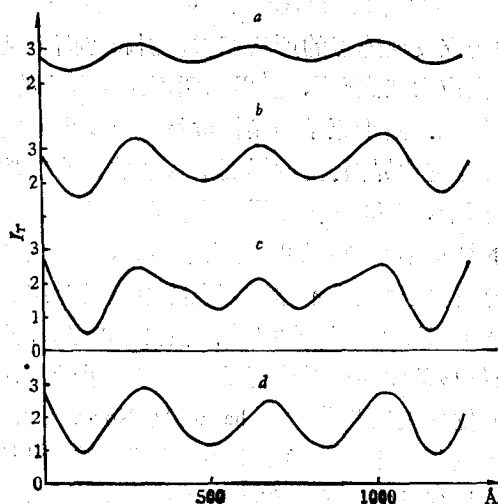


图 1 实验测量的图 5(b) K 面位移条纹强度曲线与模拟计算的曲线相比较 a, b, c 为模拟计算曲线, 它们的 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{R}$ 值分别为 0.05, 0.15, 0.30; d 为实验曲线, $\mathbf{g} = (0\bar{2}2)$

微光度计测量的条纹强度曲线相对比, 那一个 α 值的强度曲线与实验测量相符合即为实验测量的 α 值. 图 1 中 d 为图 5(b) K 面位移条纹强度的实测曲线, 它与图 1 中 b 的计算曲线相类似, 图 1 中 b 的 $\mathbf{g} \cdot \mathbf{R} = 0.15$, 故图 5(b) K 面的 $\alpha = 0.3\pi$. 计算时原子散射因

子采用合金成份按原子百分比计算的平均原子散射因子,在考虑吸收时选择 $\xi_g/\xi'_g=0.1$. 为了唯一地测定位移矢量 $\mathbf{R}$, 需要利用三个不共面的相重衍射斑点进行双光束成像, 测出三个不同的 α 值, 通过计算求出 $\mathbf{R}$.

在操作时要注意: 1. 应选择指数适当地低的电子衍射斑点成象, 一般选择一个 $\{111\}$ 类型, 一个 $\{220\}$ 类型和一个 $\{311\}$ 类型的斑点, 指数太高, 消光距离太大, 条纹数太少, 衬度也不好, 不利于衬度分析. 2. 要选择膜适当地厚, 界面倾角适当地小, 界面位错少或无界面位错的非共格孪晶界面成象. 膜太薄条纹数少且不易形成双光束条件, 倾角太大, 条纹不易分开, 缺陷多使衍衬分析复杂化.

用迹线法测量了界面指数^[16]. 用迹线法分析界面指数的关键是分清膜的上下表面. 我们采用对中暗场象最外一条条纹衬度反转一边为膜的上表面的判据来确定膜的上下表面, 如图 5(c) 中的 AB 及 BC 这一侧即为膜的上表面. 用此方法测得图 5(c) 的 K 界面为基体的 $(1\bar{2}2)$ 及 L 界面为基体的 $(7\bar{6}5)$.

三、结果与讨论

通过晶体学的分析^[17,18,5], 可以求出以 (111) 为孪生面的基体与孪晶的亚点阵基矢与基体基矢的关系, 如图 2 所示. 并可表示成如下公式:

$$\mathbf{A}^{(dc)} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} \bar{2} & 1 & 1 \\ 1 & \bar{2} & 1 \\ 2 & 2 & 2 \end{bmatrix} \mathbf{A},$$

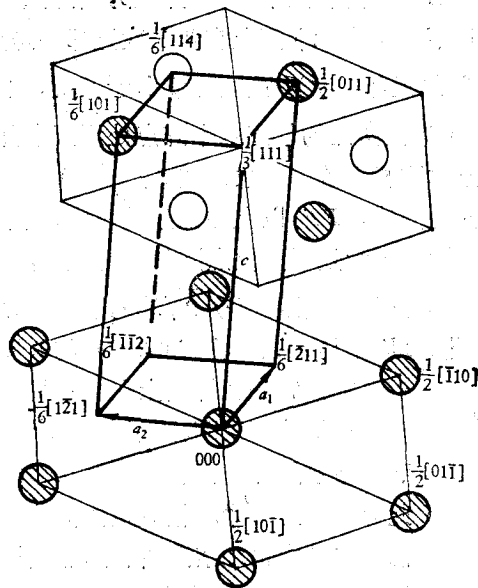


图 2 亚点阵单胞示意图

式中 $\mathbf{A}$ 为基体点阵的基矢列矩阵, $\mathbf{A}^{(dc)}$ 为亚点阵的基矢列矩阵. 由上式可求出亚点阵的度量张量矩阵为

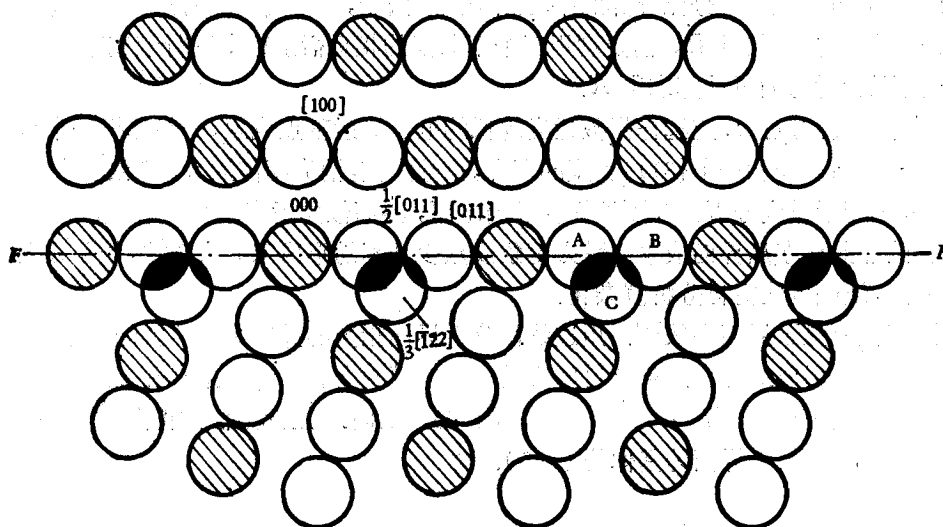


图3 未发生整体位移的(100)界面结构示意图

$$\mathbf{G}^{(dc)} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 1 & 0.5 & 0 \\ 0.5 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} a^2.$$

由 $\mathbf{G}^{(dc)}$ 可以看出亚点阵单胞为 $a^{(dc)} = (\sqrt{6}/6)a$, $c^{(dc)}/a^{(dc)} = \sqrt{2}$ 的六角单胞. 每一个亚点阵的阵点在基体的(111)面内有六个最近的近邻, 其阵点间距为 $r = (\sqrt{6}/6)a = 0.408a$, 在基体的上一层和下一层(111)面上有两个次近邻的阵点, 其阵点间距为 $r = (\sqrt{3}/3)a = 0.577a$. 这些最近邻和次近邻间距都小于面心立方晶体中的原子间距 $(\sqrt{2}/2)a = 0.707a$. 如果界面两边的任意两个阵点处于亚点阵的最近邻与次近邻的间距, 则原子之间将发生部分体积相重叠的现象. 图3是(100)界面的示意图, 其中 FF 为基体的(100)面与 $(0\bar{1}1)$ 面的交线, FF 以上的部分为基体, 以下部分为孪晶. 圆圈表示原子位置, 其中带有阴影的圆圈表示处于重位点阵位置的原子, 黑色表示原子体积的重叠部分. 由图3可以看出 A, B 之间的间距为 $(\sqrt{2}/2)a$, 而 A, C 处于最近邻的间距, B, C 处于次近邻的间距. 因此, C 原子与 A 原子将有 $0.299a$ 与 B 原子将有 $0.13a$ 部分体积

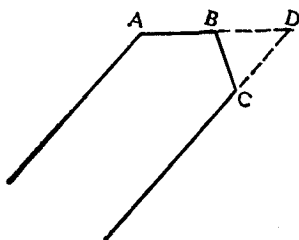


图4 人字形非共格孪晶界面示意图

相叠加, 它们在界面上呈二维周期性重复出现. 电子计算机的模拟计算表明, 除了共格孪晶界面(111)以外, 所有的非共格孪晶界面都有间距为 $0.408a$ 的最近邻阵点存在. 因此界面两边晶体的相对整体位移应该是一种普遍现象. 我们在实验中也观察到所有的非共格孪晶界面都有位移条纹. 实验测量了四个非共格孪晶界面的位移矢量(见表1). 如果界面为刚性结构, 则位移矢量的绝对值应大于 $0.299a$. 而实际上原子并非刚球, 既有一定的弹性, 还可独立运动, 我们称这种原子的相对移动为原子松弛, 原子松弛将使重

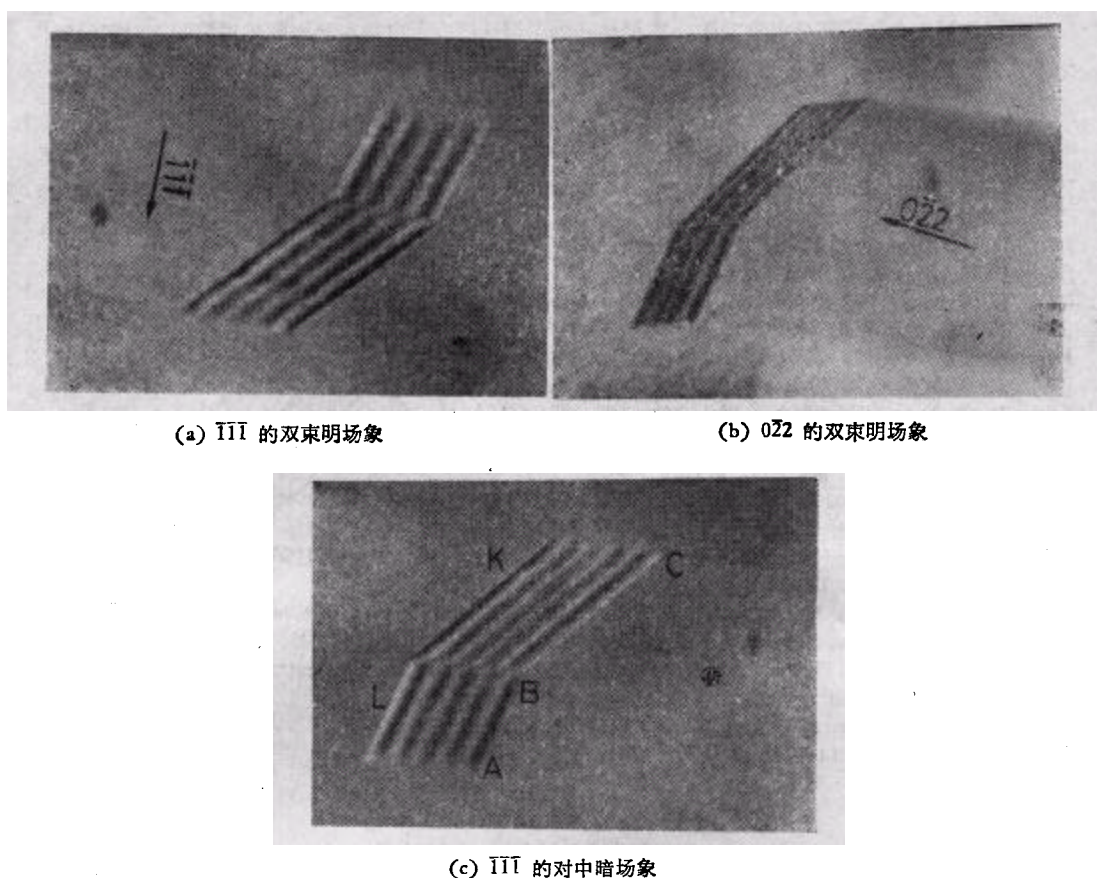
(a) $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ 的双束明场象(b) $0\bar{2}2$ 的双束明场象(c) $\bar{1}\bar{1}\bar{1}$ 的对中暗场象

图5 非共格孪晶界面位移条纹的电子显微象

表1 非共格孪晶界面位移矢量测定结果

界面指数		位 移 矢 量			
基 体	孪 晶	在基体坐标系中分量	长 度 (单位 a)	垂直于界面分量 (单位 a)	平行于界面分量 (单位 a)
$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$	$(\bar{1}\bar{5}\bar{1})$	$(0.042, 0.241, 0.066)$	0.254	0.077	0.241
$(\bar{1}\bar{2}\bar{2})$	$(\bar{1}\bar{4}\bar{8})$	$(0.109, 0.276, 0.05)$	0.300	0.114	0.278
$(\bar{1}\bar{2}\bar{1})$	$(\bar{1}\bar{2}\bar{1})$	$(0.067, 0.047, 0.092)$	0.204	0.027	0.120
$(\bar{7}\bar{6}\bar{5})$	$(\bar{3}\bar{1}\bar{0}\bar{1})$	$(0.017, 0.12, 0.033)$	0.126	0.042	0.118

叠现象减弱。因此, 有的界面整体位移很小, 有的界面较大, 但一般都在 $0.3a$ 以下, 如 $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$, $(\bar{1}\bar{2}\bar{2})$ 及 $(\bar{1}\bar{2}\bar{1})$ 面位移矢量绝对值在 $0.2-0.3a$, 而 $(\bar{7}\bar{6}\bar{5})$ 则很小, 仅 $0.126a$ 。另外, 垂直于界面的位移矢量很小, 都在 $0.114a$ 以下, 我们认为这些数据是合理的。在实验过程中我们发现非共格孪晶界面往往呈图5所示的人字形, 我们认为这是一种较低的能量状态。如图4所示, 当非共格孪晶界面为平直面时, 界面由 AB (非共格) + BD (非共格) + DC (共格) 组成, 而当界面为人字形时, 界面由 AB (非共格) + BC (非共格) 组成, 显然, 后者的能量比前者要低。

曹涵清同志参加了部分实验工作, 武汉钢铁公司钢铁研究所电镜实验室陈乾惕等同志对实验工作给予大力支持, 作者一并表示衷心的感谢。

参 考 文 献

- [1] L. E. Murr, *Interfacial Phenomena in Metals and Alloys*, Addison-Wesley Publishing Company, (1975).
- [2] M. L. Kromberg, F. H. Wilson, *Trans. AIME*, **185**(1949), 501.
- [3] S. Ranganathan, *Acta Cryst.*, **21**(1966), 197.
- [4] H. Grimmer, W. Bollmann, D. H. Warrington, *Acta Cryst. A*, **30** (1974), 197.
- [5] 杨奇斌, 物理学报, **29**(1980), 1517.
- [6] 杨奇斌, 物理学报, **29**(1980), 1526.
- [7] M. J. Weins, H. Gleiter and B. Chalmers, *J. Appl. Phys.*, **42**(1971), 2639.
- [8] B. Chalmers, H. Gleiter, *Phil. Mag.*, **23**(1971), 1541.
- [9] P. H. Pumphrey, T. F. Malis and H. Gleiter, *Phil. Mag.*, **34**(1976), 227.
- [10] D. A. Smith, *Scripta Met.*, **9**(1975), 359.
- [11] R. C. Pond, *Proc. R. Soc. Lond. A*, **357**(1977), 453.
- [12] R. C. Pond, *Proc. R. Soc. Lond. A*, **357**(1977), 471.
- [13] D. Vlachavas and R. C. Pond, *Electron Microscopy and Analysis* (1979), p. 195.
- [14] G. Nouet and P. Delavignette, *Phys. Stat. Sol.*, **62**(1980), 187.
- [15] P. B. Hirsch, A. Howie, R. B. Nicholson, D. W. Pashley and M. J. Whelan, *Electron Microscopy of Thin Crystals*, Robert E. Krieger Publishing Co. Inc., (1977), 225.
- [16] O. Johari and G. Thomas, *The Stereographic Projection and Its Applications*. Techniques of Metals Research, ed. R. F. Bunshah, Interscience, New York.
- [17] R. Bonnet, F. Durand, *Scripta Met.*, **9**(1975), 935.
- [18] R. Bonnet, *Scripta Met.*, **10**(1976), 801.

DETERMINATION AND ANALYSIS OF DISPLACEMENT VECTORS AT THE INCOHERENT TWIN BOUNDARIES

CHANG XIN ZHANG XIU-MU YANG QI-BIN GUO KE-XIN

(Institute of Metal Research, Academia Sinica)

ABSTRACT

Computer simulation calculation shows that if there were no rigid translation of adjacent grains, the shortest distance between lattice points at all the incoherent twin boundaries would be $0.408a$, where a is the lattice parameter, except for coherent ones. This distance is smaller than atomic diameter $0.707a$, therefore atomic overlap occurs. The interface energy can be greatly reduced by a rigid translation of these two crystals. The displacement vectors of four interfaces $(1\bar{1}1)$, $(1\bar{2}2)$, $(1\bar{2}1)$ and $(\bar{7}65)$ were determined experimentally, they are $0.254a$, $0.300a$, $0.204a$ and $0.126a$ respectively.

更正

第 31 卷第 3 期“液态金属及非晶态中的电导率——相干势近似”一文的图 13—17 中有些线条粗细不分明,现重绘如下:

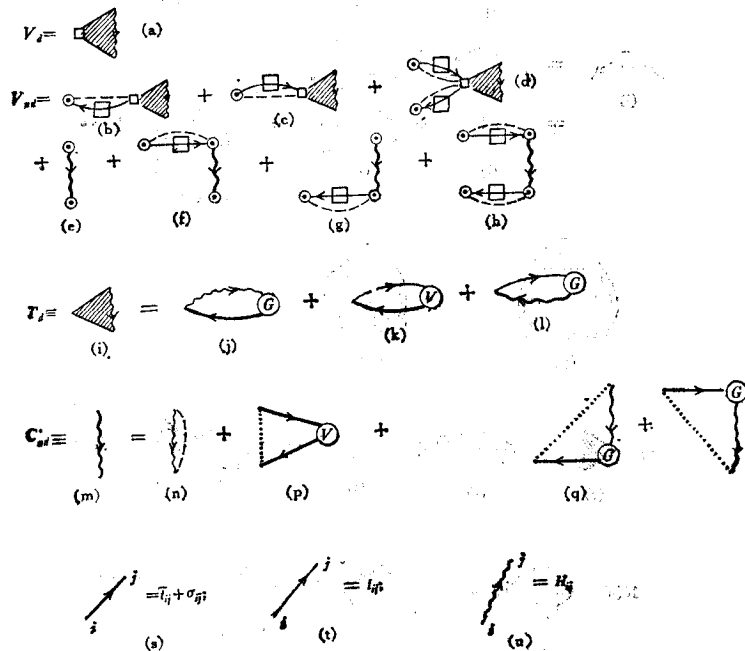


图 13

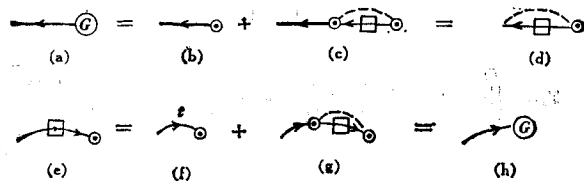


图 14

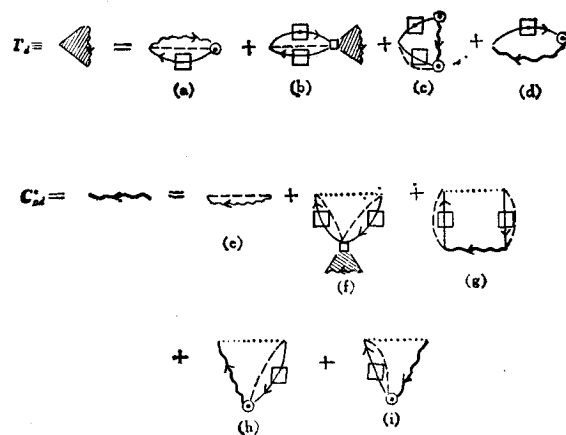


图 15

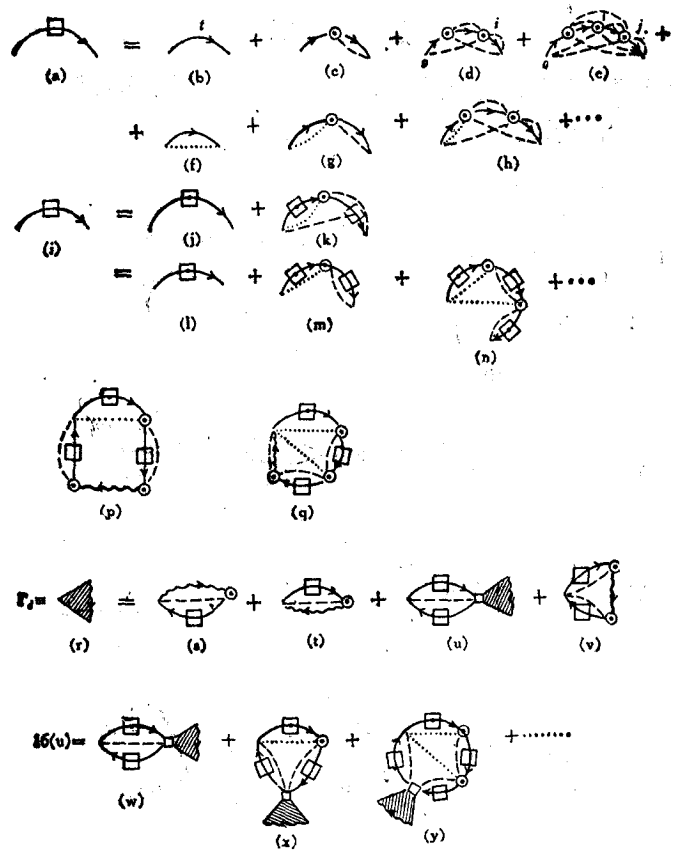


图 16

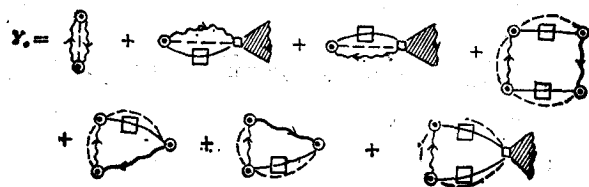


图 17