

形变 α 黄铜中层错的 X 射线测量

滕凤恩 王煜明

(吉林大学材料科学研究所)

1988 年 3 月 8 日收到

本文是文献[1]的续篇。对于原 A, B, C 三种样品在已测得 $D_{\text{eff}}, \bar{\rho}, \bar{M}, \bar{R}_s$ 和 (E/V) 的基础上,又分别测出了抽出型、插入型和孪生层错几率 α', α'' 和 β 以及层错能 γ , 真正晶块大小 D_0 。

一、引 言

在文献[1]中,对于 Cu-31.55 wt% Zn 材料分成 A, B, C 三组试样各在 344°C, 378°C 和 350°C 下退火 2h 之后, A 和 B 试样作室温拉伸到不同形变度 ϵ , 试样 C 为室温错屑。由文献[2]的方法测出 $D_{\text{eff}}, \bar{\rho}, \bar{M}, \bar{R}_s$ 和 $\langle \frac{E}{V} \rangle$ 。在此基础上,由 Wagner 等人对层错分析法^[3,4],可有如下参量关系。

材料质量相同的黄铜片经充分退火后作为无缺陷的标样,测出 200 和 111 两条衍射峰位 (PM) 处的 Bragg 角 θ_{200}^s 和 θ_{111}^s , 形变试样的物理峰的峰位 (PM) 处的 Bragg 角为 θ_{200}^t 和 θ_{111}^t , 则抽出型与插入型层错几率之差为

$$\alpha' - \alpha'' = \frac{-\pi^2[(2\theta_{200}^t - 2\theta_{200}^s) - (2\theta_{111}^t - 2\theta_{111}^s)]_{\text{PM}}}{77.94(\tan \theta_{200} + 0.5 \tan \theta_{111})} \quad (1)$$

设 111 物理峰的线形质心和峰尖处的 Bragg 角分别为 θ_{CG}^{111} 和 θ_{PM}^{111} , 同样地, 200 物理峰各自相应值为 θ_{CG}^{200} 和 θ_{PM}^{200} , 则插入型层错几率 α'' 和孪生层错几率 β 之间应满足

$$4.5\alpha'' + \beta = \frac{(2\theta_{\text{CG}}^{111} - 2\theta_{\text{PM}}^{111}) - (2\theta_{\text{CG}}^{200} - 2\theta_{\text{PM}}^{200})}{11 \tan \theta_{111} + 14.6 \tan \theta_{200}} \quad (2)$$

设真正晶块大小为 D_0 , 层错宽度为 T , 当假设由 [200] 和 [111] 方向的晶面衍射峰测出的 D_0 和 T 满足 $\left(\frac{1}{D_0} + \frac{1}{\sqrt{1.5}T}\right)^{200} \approx \left(\frac{1}{D_0} + \frac{1}{\sqrt{2}T}\right)^{111}$ 或设 $T \gg D_0$, $D_0^{111} \approx D_0^{200}$ 时, 则有

$$1.5(\alpha' + \alpha'') + \beta = 1.7637a_0 \frac{D_{\text{eff}}^{111} - D_{\text{eff}}^{200}}{D_{\text{eff}}^{111} \cdot D_{\text{eff}}^{200}} \quad (3)$$

$$D_0 = \frac{(4 - \sqrt{3})D_{\text{eff}}^{111} \cdot D_{\text{eff}}^{200}}{4D_{\text{eff}}^{200} - \sqrt{3}D_{\text{eff}}^{111}} \quad (4)$$

其中 a_0 为点阵参数。由文献[5]可知层错宽度最小值 T_{min} 和晶块大小最大值 D_{max} 分别为

$$T_{\min} = 0.82 \left(\frac{2.31}{D_{\text{eff}}^{111}} - \frac{1}{D_{\text{eff}}^{200}} \right)^{-1}, \quad (5)$$

$$D_{\max} = \frac{4 - \sqrt{3}}{\sqrt{3}} \left(\frac{4D_{\text{eff}}^{200} - \sqrt{3} D_{\text{eff}}^{111}}{\sqrt{3} D_{\text{eff}}^{200} \cdot D_{\text{eff}}^{111}} - \frac{2}{\sqrt{6} T_{\min}} \right)^{-1}. \quad (6)$$

关于层错能 γ 的计算, 使用两种模型。在文献[5]中, 假设晶块内部和晶界中位错是完全混乱排列, 可以计算出平均位错密度 ρ

$$\rho = (\rho_p \cdot \rho_s)^{\frac{1}{2}}. \quad (7)$$

其中 $\rho_p = \frac{3}{D_{\text{eff}}^2}$, $\rho_s = k \cdot \langle \epsilon_L^2 \rangle / \bar{b}^2$. 对于高斯应变分布, $k = 6\pi$; 对于 fcc 结构且沿

[110]方向的柏氏矢量 $\bar{b} = a_0 / \sqrt{2}$, 则以 $1 \text{ mJ/m}^2 = 1 \text{ erg/cm}^2$ 为单位的层错能为

$$\gamma_0 = \frac{G\omega_0 a_0^3 \rho}{2\sqrt{3} \pi \cdot \alpha}. \quad (8)$$

其中 G 为切变模量, $\alpha = \alpha' - \alpha''$ 称净层错几率, ω_0 为与位错特征以及它们之间相互作用特点有关的常数, 文献[4]中令 $\omega_0 = 1/12$. a_0 和 ρ 意义同上。这是计算层错能 γ 的第一种模型的结果。

下边仍然利用第一种模型, 但我们进行三点修正。修正一, ρ_s 是来取 Wilkens-Wang 位错分布模型而计算出来的晶块内部位错密度值, 而不是上述的比例值 $k\langle \epsilon_L^2 \rangle / \bar{b}^2$, 因为 $\langle \epsilon_L^2 \rangle$ 大小应该是 $\bar{\rho}$ 和组态参量 $\bar{M}$ 这两个自变量的函数, ρ_p 只能反比于 D_{eff}^2 . 修正二, 大量实验结果表明^[6], ω_0 应该随着位错特征组态而变化, 即随着形变度 ϵ 的不同而改变, 不是上述的固定值 ($\omega_0 = 1/12$). 我们作出 ω_0 大约分别可取 $1/12, 1/6, 1/3, 2/3$ 等的可变数。修正三, 此处 $\alpha = \alpha' - \alpha''$, α 可以大于或等于或小于零, 表明 α' 和 α'' 谁占优势。实验发现, 对于 Cu-Zn 合金, $\alpha' > \alpha''$, α'' 始终很小。修正后的层错能为 γ_1 , 它的形式与(8)式相同。

根据 Wilkens-Wang 位错分布模型和 Reed 思想^[6], 我们推导出第二种计算层错能 γ 的模型与公式, 得到层错能 γ_2 如下: 在 fcc 结构中, 层错均在(111)晶面上, (111)晶面间距 $d_{111} = a_0 / \sqrt{3}$, 设(111)晶面内位错都是扩展位错, 根据层错几率定义, $\alpha = \alpha' - \alpha''$ 是指全扩展成层错且宽达到小角边界为止时, 即 $T = D_0$ 时, 净剩有层错面的几率为 α_0 而两层原子面之间体积为 $D_0^2 \cdot d_{111}$, 在此体积内的缺陷晶体中贮存的体弹性能为

$$\left\langle \frac{E}{V} \right\rangle \cdot D_0^2 \cdot d_{111}, \quad (9)$$

则层错带中单位面积上能量可以写成

$$\frac{\left\langle \frac{E}{V} \right\rangle \cdot D_0^2 \cdot d_{111}}{T^2} = \frac{\left\langle \frac{E}{V} \right\rangle \cdot D_0^2 \cdot d_{111}}{D_0^2} = \left\langle \frac{E}{V} \right\rangle \cdot d_{111} \quad (10)$$

又由 Reed 关于层错能公式^[6]中已经知道有下式:

$$\gamma = \frac{k_{111} \omega_0 G_{111} a_0 B^{-0.37}}{\pi \sqrt{3}} \cdot \frac{\langle \epsilon_{50}^2 \rangle_{111}}{\alpha}. \quad (11)$$

由(10)和(11)式, 我们推导出 fcc 结构材料中层错能的新公式为

$$\begin{aligned}
 r_2 &= \omega_0 \frac{\left\langle \frac{E}{V} \right\rangle_{200}^{111} d_{111} D_0^2}{T_{111}^2} \cdot \frac{B^{-0.37}}{\alpha' - \alpha''} \\
 &= \omega_0 \left\langle \frac{E}{V} \right\rangle_{200}^{111} d_{111} \cdot \frac{B^{-0.37}}{\alpha' - \alpha''}. \quad (12)
 \end{aligned}$$

其中 ω_0 对于不同形变度下可分别等于 $1/12, 1/11, 1/10, 1/9, 1/8, 1/7, 1/6, 1/5, 1/4, 1/3, 1/2, 1.6/2$ 等, 因为在不同形变状态下, 具有不同位错组态, 故即使对于同种材料, 其 ω_0 也应取不同数值. $B = \frac{2c_{44}}{c_{12} - c_{11}}$ 为弹性各向异性因子, 此处 $B^{-0.37} = 0.6$. $\left\langle \frac{E}{V} \right\rangle_{200}^{111}$ 为 (111) 晶面平行于试样表面的那些晶粒中的 $\left\langle \frac{E}{V} \right\rangle^{111}$ 和 (200) 晶面平行于试样表面的那些晶粒中的 $\left\langle \frac{E}{V} \right\rangle_{200}$ 的平均形变贮能密度. $\alpha = \alpha' - \alpha''$ 为净层错几率. d_{111} 为 (111) 晶面的面间距. $\left\langle \frac{E}{V} \right\rangle_{200}^{111} = \frac{1}{2} \left[\left\langle \frac{E}{V} \right\rangle^{111} + \left\langle \frac{E}{V} \right\rangle_{200} \right]$.

当 ρ 的各向异性效应十分严重时, 即由不同取向晶粒测出的 ρ 大小差别十分大时, 则 $(\alpha' - \alpha'')_{111} \neq (\alpha' - \alpha'')_{200}$, $\left\langle \frac{E}{V} \right\rangle^{111} \neq \left\langle \frac{E}{V} \right\rangle_{200}$, 故此时作取向平均不尽合理, 应该由 TEM 法测出 T_{111} 和 D_0^{111} , 而 $(\alpha' - \alpha'')_{111}$, $\left\langle \frac{E}{V} \right\rangle^{111}$ 等沿 [111] 方向上的各量可用 X 射线衍射线形分析法求出, 由此算出

$$r_2 = \omega_0 d_{111} \frac{(D_0^{111})^2 \cdot B^{-0.37}}{T_{111}^2} \cdot \frac{\left\langle \frac{E}{V} \right\rangle^{111}}{(\alpha' - \alpha'')_{111}}. \quad (13)$$

其中对于衍射矢量 $\mathbf{g} = [111]$ 时测出的体弹性贮能密度为

$$\left\langle \frac{E}{V} \right\rangle_{111} = \left\langle \frac{E}{V} \right\rangle^{111} = A G_{111} b^2 \bar{\rho}_{111} \ln \frac{2\bar{M}_{111}}{b\sqrt{\bar{\rho}_{111}}}. \quad (14)$$

位错类型因子 $A_{\frac{111}{4\pi}} = \frac{1}{4\pi}$, $A_{\frac{111}{4\pi(1-\nu)}} = \frac{1}{4\pi(1-\nu)}$, 切变模量为 G_{111} , 柏氏矢量为 b , 位错密度为 $\bar{\rho}_{111}$, 分布参量为 $\bar{M}_{111}$, 真正晶块大小为 D_0^{111} , 由层错效应引起的等效碎化效应为 D_F , 它们之间应满足

$$\frac{1}{D_{\text{eff}}^{111}} = \frac{1}{D_0^{111}} + \frac{1}{D_F^{111}} = \frac{1}{D_0^{111}} + \frac{1}{\sqrt{2} T_{111}} + \frac{\sqrt{3}}{4a_0} [1.5(\alpha' + \alpha'') + \beta], \quad (15)$$

$$\frac{1}{D_{\text{eff}}^{200}} = \frac{1}{D_0^{200}} + \frac{1}{D_F^{200}} = \frac{1}{D_0^{200}} + \frac{1}{\sqrt{1.5} T_{200}} + \frac{1}{a_0} [1.5(\alpha' + \alpha'') + \beta]. \quad (16)$$

二、实验测试与计算

实验过程及大量有关位错亚结构的实验结果可参阅文献[1]. 本文仅在上述结果的基础上计算出样品 $A_1, A_2, A_3, B_1, B_2, B_3, B_4, C$ 中层错几率和层错能, 结果见表 1 和表 2.

表 1 位错、层错、晶块大小随形变度 ε 及外加拉伸应力 σ 变化数据

原始退火温度($^{\circ}\text{C}$)	344	344	344	378	378	378	378	350
形变度 $\varepsilon(\%)$	8	12	24	23	28	35	45	镉屑
外加拉伸应力 (10^7N/m^2)	52.6	54.1	59.5	37.3	40	46.8	51.5	—
有效晶块大小 $D_{\text{eff}}(\text{nm})$	[111]	36.8	31.0	26.4	62.5	52.9	48.7	36.1
	[200]	25.0	22.6	20.0	39.5	34.5	30.5	27.6
位错密度 $\rho(10^{10}/\text{cm}^2)$	[111]	6.49	6.30	5.91	4.10	5.06	4.89	5.21
	[200]	16.59	17.41	18.74	8.50	8.78	11.86	15.18
平均能量 $\langle E \rangle_{200}^{111} (10^6 \text{J/m}^3)$	1.7908	2.0320	1.9858	1.0770	1.2285	1.5844	1.9900	2.5923
平均有效晶块大小 $D_{\text{eff}200}^{111}(\text{nm})$	30.9	26.8	23.2	53.3	43.7	42.8	32.3	14.2
净层错几率 $\alpha = \alpha' - \alpha''$	0.008	0.008	0.008	0.001	0.002	0.004	0.008	0.017
$4.5\alpha'' + \beta$	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.004	0.002	0.004
$1.5(\alpha' + \alpha'') + \beta$	0.008	0.008	0.008	0.004	0.007	0.003	0.006	0.004
抽出型层错几率 α'	0.01	0.01	0.01	0.002	0.002	0.004	0.01	0.034
插入型层错几率 α''	0.002	0.002	0.002	0	0	0	0.002	0.017
孪生层错几率 β	0	0	0	0	0	0	0	0
真正晶块大小 $D_0(\text{nm})$	93.4	70.3	56.7	112.6	89.2	56.8	80.6	25.0
最小层错宽度 $T_{\text{min}}(\text{nm})$	36.0	23.1	21.9	—	—	—	37.1	9.4
最大晶块大小 $D_{\text{max}}(\mu\text{m})$	16	12	9.5	—	—	—	14	4.1
$\rho_p(10^{10}/\text{cm}^2)$	31.4	41.5	55.7	10.5	15.7	16.4	28.8	150
$\rho_s(10^{10}/\text{cm}^2)$	11.5	11.9	14.5	6.3	6.9	8.4	10.2	24.3
$\langle \rho \rangle (10^{10}/\text{cm}^2)$	19.1	22.3	28.4	8.1	10.4	11.7	17.1	60.3
$a_0(\text{nm})$	0.3681	0.3682	0.3681	0.3679	0.3679	0.3679	0.3679	0.3681

表2 取 ω_0 为相同值(1/6)和取 ω_0 为不同值时,利用两种模型计算出的层错能 γ_1 和 γ_2 大小

样 品 号	A_1	A_2	A_3	B_1	B_2	B_3	B_4	C
形变度 $\varepsilon(\%)$	8	12	24	23	28	35	45	铋屑
ω_0	1/6	1/6	1/6	1/6	1/6	1/6	1/6	1/6
$\gamma_1^I(\text{erg/cm}^2)$	11.7	15.1	8.5	6.9	8.1	10.2	10.2	10.6
$\gamma_2^I(\text{erg/cm}^2)$	22.9	13.0	7.7	4.2	5.4	5.4	5.3	3.2
ω_0	1/9	1/5	1/3	1/2	1/2	1/2	1/2	1.6/2
$\gamma_1^{II}(\text{erg/cm}^2)$	17.4	18.0	17.0	20.8	24.3	30.7	30.7	38.2
$\gamma_2^{II}(\text{erg/cm}^2)$	15.3	15.6	15.3	12.8	16.0	16.0	15.8	15.6

三、结果分析与结论

1. 由文献[1]中图1至图6以及上述表1可知,其有效晶块大小 D_{eff} , 位错密度 $\bar{\rho}$, 形变贮能密度 $\langle \frac{E}{V} \rangle$ 等参量随着形变度 ε 或外加应力 σ 而变化的规律相当好(见文献[1]).

2. 真正晶块大小 D_0 , 最小层错宽度 T_{min} 和最大晶块大小 D_{max} 随 σ 的变化规律却不太好. 这是由于我们假设 $\left[\frac{1}{D_0} + \frac{1}{\sqrt{1.5T}} \right]^{200} \simeq \left[\frac{1}{D_0} + \frac{1}{\sqrt{2T}} \right]^{111}$ 或者 $T \gg D_0$, 或者 $D_0^{111} \simeq D_0^{200}$ 的结果. 实际上,各向异性很大,而且层错宽度 T 近似等于真正晶块的大小 D_0 .

3. 净层错几率 $\alpha = \alpha' - \alpha''$ 随 σ 而变化的情况不同于 $\bar{\rho}$ 随 σ 而变化的那样灵敏,也就是说, σ 和 $\bar{\rho}$ 均发生很大的改变,但 α 还不变. 这是合理的,因为在非平衡状态下,由于外加应力作用,使位错的产生与运动比起层错来要容易得多,层错的产生与变化主要靠不全位错的扩展,由于层错能很大,扩展很难,而且只能扩展到一定大小宽度 $T < D_0$. 从我们的结果可见,当 $\sigma < 46.8$ 时, $\alpha < 0.5\%$, $\alpha' < 0.4\%$, $\alpha'' \simeq \beta \simeq 0$; 而当 $\sigma = 51.5$ 到 59.5 时, $\alpha < 0.8\%$, $\alpha' = 1\%$, $\alpha'' = 0.2\%$, $\beta = 0$; 在铋屑试样中, $\alpha = 1.7\%$, $\alpha' = 3.3\%$, $\alpha'' = 1.6\%$, $\beta = 0$.

4. 因为材料的层错能是材料常数,与形变度 ε 或外加应力 σ 的大小无关. 由表2可知,只有 ω_0 取不同值时,对于1#到8#试样的 ω_0 分别取 1/9, 1/5, 1/3, 1/2, 1/2, 1/2, 1/2, 1.6/2 时, $\gamma_1 = \gamma_1' \simeq \langle \gamma_1' \rangle = 24.6 \text{ erg/cm}^2$; $\gamma_2 = \gamma_2' \simeq \langle \gamma_2' \rangle = 15.3 \text{ erg/cm}^2$, 这个层错能 γ_2 的值与一般文献中引用的值相仿. 而当 ω_0 取同一个值(例如 1/6)时, γ_2' 依次减小,这是不合理的. 这就从不同角度证明了 ω_0 是与位错组态特征有关的待定常数,与文献[4, 6]中观测一致,但比他们的工作前进了一步.

5. 修正后的第一种模型计算出的 γ_1 大小远不如第二种模型计算出的 γ_2 的大小规律性好,这是因为在前者定义中 $\rho = (\rho_p \cdot \rho_s)^{\frac{1}{2}}$, 而 ρ , ρ_p 和 ρ_s 均不是真正位错密度,仅能

说 $\rho_p \propto \frac{1}{D_{eff}^2}$, $\rho_s \propto \langle \epsilon_L^2 \rangle$, 而在 $\langle \epsilon_L^2 \rangle$ 中还有 $\bar{M}$ 变量因素。

6. 初步可以肯定, ω_0 在不同应力状态下应取不同值, 而且随着应力 σ 的增加, ω_0 也有某种规律性的增大。但是, ω_0 到底应与什么组织结构参量有直接关系? 有什么形式的关系? 应该如何确定 ω_0 大小? ω_0 与 $\bar{M}$ 大小有何种关系? 那怕能找到一种半经验性的关于 ω_0 的表达式也好, 这是下一步研究的目标。

- [1] F. Tung *et al.*, *J. Mater. Sci.*, 21(1986), 3223.
- [2] Y. Wang *et al.*, *J. Appl. Cryst.*, 15(1982), 35.
- [3] C. N. J. Wagner, *J. Appl. Phys.*, 36(1965), 2070.
- [4] C. N. J. Wagner, *Mct. Trans.*, 1(1970), 2375.
- [5] M. De Halder and S. P. Sen Gupta, *J. Appl. Phys.*, 48(1977), 3510.
- [6] K. P. Reed *et al.*, *J. Appl. Phys.*, 45(1974), 4705.
- [7] F. Tung *et al.*, to be Published.

X-RAY MEASUREMENTS ABOUT STACKING FAULTS IN DEFORMED ALPHA BRASS

TENG FENG-EN WANG YU-MING

(Institute of Materials Science, Jilin University, Changchun)

ABSTRACT

The probabilities α' , α'' and β of intrinsic, extrinsic and twin stacking faults were measured respectively based on previous determination of D_{eff} , $\bar{\rho}$, $\bar{M}$, $\bar{R}_e$ and $\left\langle \frac{E}{V} \right\rangle$ of samples A, B, C^[1]. The stacking fault energy γ and true subgrain size D_0 were also obtained.