

多晶 X 射线线形傅氏分析方法在合金材料力学性能预测上的应用*

滕凤恩 崔相旭

吉林大学材料科学研究所

1988 年 5 月 16 日收到; 1989 年 4 月 12 日收到修改稿

缺陷组态直接涉及到结构材料的力学性能,特别是位错亚结构(DSS)为最重要的缺陷组态中的第一个。本文评论并叙述了一种由王煜明完善并发展了的关于 DSS 的实用 X 射线线形傅里叶综合分析方法。根据此法进行了定量预测合金材料的力学性能,同时证明本方法的实际应用价值。

一、引 言

王煜明所完善并发展了的不完整多晶体 X 射线衍射线形分析方法有四个特点:(1)既适合于粉末又适合于块状各向异性多晶工业材料中各种缺陷组态的综合分析^[1]。(2)对常见的 fcc, bcc 和 hcp 三种结构已作出一套标准曲线,可以很方便易行地测出位错与层错的多少及分布状态^[2,3]。(3)对比其他人的线形分析法^[4,5],他们都要假定应变线形完全高斯化分布,难于处理有柯西分布的情况,而王煜明方法可以处理柯西分布的应变线形^[6]。(4)大量实验表明,王煜明方法的测试结果与材料力学性能有一一对应关系^[7],这是因为此方法抓住了各种弹塑性材料力学性能的决定因素是材料的位错亚结构这一主要矛盾。正如文献[8,9]所指出的,为了得到综合性能,必须把亚结构强化与固溶强化结合起来,并把 Hall-Petch 关系推广到亚结构。位错亚结构是各种材料中普遍存在的,有承上启下的作用,既是硬化源又是裂纹源。此方法在 Wilkens 的位错有限混乱分布模型基础上^[10,11],又考虑到多晶体 X 射线衍射特点,得到各个相干畴(亚晶块)中的测量结果的平均值(有效晶块大小 D_{eff} , 位错密度 $\bar{\rho}$ 和分布参量 $\bar{M}$)。

二、测试与计算方法

首先进行 Stokes 仪器宽化因数校正^[12], 令形变试样的 hkl 衍射强度分布曲线为 $h(x)$, 而充分退火的可认为无缺陷的标样的 hkl 衍射强度分布曲线为 $g(x)$, 它应是十分窄的,接近于 δ 函数线形, $h(x)$ 和 $g(x)$ 均为钟罩型单值函数,都可以展成傅氏级数表达式,其余弦和正弦系数分别为 $A^h(L)$ 和 $B^h(L)$; $A^s(L)$ 和 $B^s(L)$, 则仅由试

* 国家自然科学基金资助的课题。

样的物理结构变化所决定的物理线形设为 $f(x)$, 它也可以展成傅氏级数, 其傅氏系数为 $A^i(L)$ 和 $B^i(L)$. 因为倒空间中强度分布曲线满足卷积关系时, 其傅氏系数一定满足相乘关系, 经归一化后, 即令 $A(0) = B(0) = 1$, 则有

$$A^h(L) = A^s(L)A^i(L), \quad B^h(L) = B^s(L)B^i(L), \quad (1)$$

式中 $L = tl$, $t = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$,

$$l = \frac{1}{2\Delta s} = \frac{1}{60ds} = \frac{57.3\lambda}{60d(2\theta)\cos 2\theta_{hkl}^m} (\text{\AA}) \quad (2)$$

s 为倒易矢量; $2\Delta s$ 为倒空间中 hkl 峰分布的底宽度, 当把它分成 60 分时, 每分宽度为 ds ; λ 为所用辐射波长; $d(2\theta)$ 为与 ds 相应的以衍射角 $2\theta_{hkl}$ 为标度的大小; $2\theta_{hkl}^m$ 为 hkl 衍射宽峰峰尖 2θ 角位置, 可用适当定位法确定. 分别求得 $A^h(L)$, $B^h(L)$, $A^s(L)$, $B^s(L)$ 之后, 可由下式算出物理线形傅氏系数 $A^i(L)$, $B^i(L)$:

$$A^i(L) = \frac{A^h(L)A^s(L) + B^h(L)B^s(L)}{[A^s(L)]^2 + [B^s(L)]^2}, \quad (3)$$

$$B^i(L) = \frac{B^h(L)A^s(L) - A^h(L)B^s(L)}{[A^s(L)]^2 + [B^s(L)]^2}. \quad (4)$$

Warren 认为^[4]: 物理线形 $f(x)$ 为粒子大小宽化线形 $f^p(x)$ 和应变宽化线形 $f^s(x)$ 卷积而成, 由解卷积可得

$$A^i(L) = A^p(L) \cdot A^s(L), \quad (5)$$

式中物理宽化系数 $A^p(L)$ 和应变宽化系数 $A^s(L)$ 分别为

$$A^p(L) = 1 - \frac{L}{D_{\text{eff}}}, \quad (6)$$

$$A^s(L) = \exp\left[-\frac{2\pi^2 h_0^2 L^2 \langle \epsilon^2 \rangle}{a_0^2}\right]. \quad (7)$$

对于(6)和(7)式, 王煜明作了许多开拓性处理, 首先, 虽然从理论上 $A^p(L)$ 随 L 变化为一直线关系, 斜率为 $\left(-\frac{1}{D_{\text{eff}}}\right)$, D_{eff} 为有效晶块大小, 截距为 1, 但实验上经常出现所谓 *hook* 效应^[13], 他引入一个接近于 1 的因子 a ; 又从实验曲线宽化分析后引入柯西积分宽度 β_c 和高斯积分宽度 β_g , 得到

$$A^p(L) = a - \frac{L}{D_{\text{eff}}}, \quad (8)$$

$$A^s(L) = \exp[-2\beta_c L - \pi\beta_g^2 L^2]. \quad (9)$$

利用 1—2 次最小二乘法可求出如下最佳值 D_{eff} , a , β_c , β_g 和 $k = \beta_c/\sqrt{\pi\beta_g}$. 如何利用实验测量到的 β_c 和 β_g 和总 β , 把方均根 (rms) 应变 $\langle \epsilon^2 \rangle^{\frac{1}{2}}$ 与位错密度平均值 $\bar{\rho}$ 和位错分布参量平均值 $\bar{M}$ 联系起来? 王煜明巧妙地利用一组实验曲线^[2,3], 先求出特征值 ρ^* 和 M^* , 再利用具体结构类型中沿某衍射矢量 g_{hkl} 方向, 对于一定泊松比 ν 下求平均值公式^[2]得到 $\bar{\rho}$ 和 $\bar{M}$, 对具体材料切变模量 G 可计算出应变场范围 $\bar{R}$, 和体弹性贮能密度 $\left\langle \frac{E}{V} \right\rangle$

$$\bar{R}_e = \frac{\bar{M}}{\sqrt{\rho}} \quad (\text{\AA}), \quad (10)$$

$$\left\langle \frac{E}{V} \right\rangle = AGb^2 \rho \ln \frac{\bar{R}_e}{r_0} \quad (\text{J} \cdot \text{m}^{-3}), \quad (11)$$

A 为位错类型因子,螺位错 $A = 1/4\pi$;刃位错 $A = \frac{1}{4\pi(1-\nu)}$; b 为伯氏矢量; r_0 为位错心半径,可取 $r_0 = b/2^{[14]}$.

三、在力学性能预测上的应用

与其他测试方法相比,X射线衍射方法有三个特点:测试中的非破坏性,大面积照射体积内的平均性和对微观组织结构变化的敏感性.这三点在宏观力学性能测试中特别重要.力学性能预测就是由其它物理测量结果预示出广义强度各种参量大小的过程.方法很多,在此仅由上述 X 射线方法测出的 $\left\langle \frac{E}{V} \right\rangle$, D_{eff} 和已计算出的亚边界强度参量 K_2 ,在拉伸试验中的变化规律,预测出其它复杂加载下应力大小.

经过理论考虑^[15,16]和实验数据分析^[11,17],提出: $D_0\sigma_a = C_0[\langle E/V \rangle + K_2 D_{eff}^{-1}]$,式中 σ_a 为宏观拉伸应力; D_0 为与加载方式和材料刚性有关的系数; $\langle E/V \rangle$ 和 D_{eff} 意义同前述, D_{eff} 包括层错效应 D_F 和真正晶块大小 D_0 的倒数和,即 $D_{eff}^{-1} = D_0^{-1} + D_F^{-1}$; C_0 为材料的硬化系数.当预先测定某材料的 D_0 , C_0 , K_2 之后,则由 X 射线线形分析方法测出 $\langle E/V \rangle$ 与 D_{eff} 值,可预测出在各种加载条件下的 σ_a .

四、实验验证

成分 Cu-31.55wt%Zn 单相 α 黄铜片,沿轧制方向切出 A, B, C 三种拉伸试样,分别在 378, 344, 350 和 370°C 真空退火 2, 2, 4h, 而试样

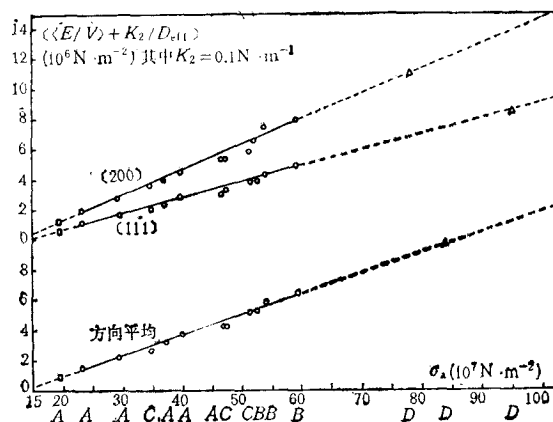


图1 $[\langle E/V \rangle + K_2/D_{eff}]$ 与外加拉伸应力 σ_a 的直线关系

D 为室温锉屑,测出不同形变度 $\Delta L/L_0 = \varepsilon_L$ 下的拉伸应力 σ_a 以及微观形变结构 $\langle E/V \rangle$ 和 D_{eff} 大小^[1],当取 $K_2 = 0.1 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$ 时,作出 $[\langle E/V \rangle + K_2 D_{eff}^{-1}]$ 与 σ_a 关系曲线(见图1),得到十分好的直线关系,见测试图中三条直线.其中[200]和[111]两条直线上实验点分别表示(200)和(111)晶面平行于试样表面那种取向的晶粒的衍射测试结果的平均值,第三条直线上实验点是上述两种取向晶粒的平均.根据此组直线可以进行性能预测.例如低应力区中虚延长线上的“△”表示小形变试样结果,由于测不到 D_{eff} 大小,但可测到 σ_a ,从而利用直线外推可得到 $[\langle E/V \rangle + K_2 D_{eff}^{-1}]$ 大小;在高应力区中虚延长线上的

“ Δ ”表示室温锉屑试样 D , 由于测不到 σ_a 大小, 但可测到 $\langle E/V \rangle$ 和 D_{eff} , 从而利用直线外推可得到 σ_a 大小为 $90 \times 10^7 \text{ N} \cdot \text{m}^{-2}$.

- [1] F. Tung (滕凤恩) *et al.*, *J. Mater. Sci.*, **21** (1986), 3223.
- [2] Y. Wang (王煜明) *et al.*, *J. Appl. Cryst.*, **15** (1982), 35.
- [3] S. Zwui (崔相旭) *et al.*, *J. Mater. Sci. Lett.*, **4** (1985), 1434.
- [4] B.E. Warren, *X-Ray Diffraction*, (1969), pp. 251—314.
- [5] J.L. Langford, *J. Appl. Cryst.*, **11** (1978), 10.
- [6] Y. Wang (王煜明) *et al.*, *J. Mater. Sci. Lett.*, **4** (1985), 635.
- [7] F. Tung (滕凤恩) *et al.*, to be published.
- [8] D. A. Starke, Jr., *Mater. Sci. Eng.*, **29** (1977), 99.
- [9] S.K. Khannanov, *Phys. Met. Metall.*, **60** (1985), 25.
- [10] M. Wilkens, J.A. Simmon *et al.* Ed., “Fundamental Aspects of Dislocation Theory”. (1970), pp. 1195—1121.
- [11] M. Wilkens, *Phys. Stat. Sol. (a)*, **2**, (1970) 359.
- [12] A.R. Stokes, *Proc. Phys. Soc.*, **61** (1948), 382.
- [13] R. Delhez *et al.*, *Fresenius Z. Anal. Chem.*, **312** (1982), 1—16.
- [14] J.E. Bailey and P.B. Hirsch, *Phil. Mag.*, **5** (1960), 57, 485.
- [15] W.A. Wood, *The study of Metal Structures and their Mechanical Properties*, Pergamon Press (1971).
- [16] Nam Psh Arthur P.L. Turner, *Elements of the Mechanical Behavior of Solids*, (1975).
- [17] P. S. Bate *et al.*, *Acta Metall.*, **34** (1986), 1097.

APPLICATION OF X-RAY PROFILE FOURIER ANALYSIS TO PREDICT MECHANICAL PROPERTIES OF ALLOYS

TENG FENG-EN CUI XIANG-XU

Institute of Materials Science, Jilin University, Changchun

(Received 16 May 1988; Revised manuscript received 12 April 1989)

ABSTRACT

The defect configuration relates directly to the mechanical behaviour of structural materials. Especially, dislocation substructure, DSS, is one of the most important configurations. In this paper, a realistic x-ray diffraction profile analysis of DSS, developed by Wang, is reviewed and illustrated. Its application to predicting quantitatively mechanical properties is made.