

合成电子衍射花样的计算机模拟及应用 *

鲁世强 尚保忠

(南昌航空工业学院材料系, 南昌 330034)

王仁卉

(武汉大学物理系, 武汉 430072)

罗子健

(西北工业大学材料学院, 西安 710072)

曾凡昌

(航空工业总公司, 北京 100034)

摘 要 开发了用于计算和绘制 fcc 基体与孪晶及 fcc 基体与密排六方 ϵ 马氏体 (hcp) 之间两相合成电子衍射花样的计算机程序。利用该程序模拟了 MP159 合金大量低指数基体取向合成电子衍射花样。模拟结果表明, 能准确区分孪晶和 hcp 相的可靠基体取向为 $\langle 011 \rangle$, $\langle 521 \rangle$ 和 $\langle 411 \rangle$, 其中以 $\langle 011 \rangle$ 取向为最佳。根据可靠基体取向, 利用透射电子显微镜研究了 MP159 合金冷变形组织中的相组成。结果表明, 固溶状态下的 fcc 单相组织在冷变形时形成的呈网络分布的片状组织为含有高密度堆垛层错的形变孪晶; 除了一些分布在堆垛层错中的 hcp 单元外, 实验中没有发现 hcp 相存在的充足证据。

关键词 合成衍射花样, 计算机模拟, MP159 合金, 冷变形组织

中图法分类号 TG132.3, TB115

文献标识码 A

文章编号 0412-1961(1999)05-0554-07

COMPUTER SIMULATION OF COMPOSITE ELECTRON DIFFRACTION PATTERNS AND ITS APPLICATION

LU Shiqiang, SHANG Baozhong

Department of Materials Engineering, Nanchang Institute of Aeronautical Technology, Nanchang 330034

LUO Zijian

College of Materials Science and Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072

WANG Renhui

Department of Physics, Wuhan University, Wuhan 430072

ZENG Fanchang

Aviation Industry Corporation, Beijing 100034

Correspondent: LU Shiqiang, Tel: (0791)8219424, E-mail: niatlusq@public.nc.jx.cn

Manuscript received 1998-11-17, in revised form 1999-02-04

ABSTRACT A computer program used to compute and plot composite electron diffraction patterns between fcc matrix and twin, and/or fcc matrix and hexagonal close packed ϵ -martensite(hcp) is developed. Composite electron diffraction patterns of many low index matrix orientations in MP159 alloy are simulated by means of this program. The simulated results reveal that favorable matrix orientations in which deformation twins and hcp-phase can be unambiguously distinguished are $\langle 011 \rangle$, $\langle 521 \rangle$ and $\langle 411 \rangle$. Among them, the most favorable matrix direction is $\langle 011 \rangle$. According to favorable matrix directions, the cold deformed microstructure features in MP159 alloy are investigated by TEM, and the results substantiate that the closely-spaced and intersecting network of fine platelets formed in cold drawing MP159 alloy is deformation twins with high density of stacking faults. Cold deformation strengthening in the alloy derives predominately from it. No ample evidence has been found for the presence of hcp-phase except some hcp units distributed in stacking faults.

KEY WORDS composite electron diffraction patterns, computer simulation, MP159 alloy, cold deformed microstructure

在低层错能的 fcc 合金中, 机械孪晶是一种常见的变形

方式。若 fcc 基体是准稳态, 则形变孪晶和形变诱发 hcp 相均有可能形成^[1-3]。从形变孪晶和 hcp 相的形成机理来看, 两者都是通过 fcc 基体中的 $\{111\}$ 密排面出现堆垛层错所致。这意味着孪晶及 hcp 相与基体具有确定的取向关系, 并且通常二者具有相似的形貌, 导致了从形貌上区分的困难,

* 收到初稿日期: 1998-11-17, 收到修改稿日期: 1999-02-04

作者简介: 鲁世强, 男, 1962 年生, 副教授, 博士生

故需通过选区电子衍射技术来区别形变孪晶和 hcp 相。但利用选区电子衍射和暗场分析技术来区分形变孪晶和 hcp 相仍存在着一定的困难。一方面，由于形变孪晶和 hcp 相与基体的特殊取向关系使得基体斑点和第二相（孪晶、hcp）斑点有些取向完全重合，导致不能区分；另一方面，在某些取向上，由于双衍射而导致区分不可确定；再者，许多情况下的第二相花样既可按孪晶指数化，也可按 hcp 相指数化，导致利用第二相的微衍射来区分孪晶和 hcp 也存在着一一定的困难。显然，若先了解 fcc 基体与孪晶和 hcp 相合成电子衍射花样的这些特点，将大大减少电镜试验时的盲目性，避免错误的判断，使合成电子衍射花样的指数化变得简单可靠，甚至在电镜实验现场就可鉴别出形变孪晶和 hcp 相。Kestenbach^[1] 和 Bowkett 等人^[3] 在研究不锈钢的冷变形组织和淬火组织时就采用了这种方法，即根据确定的取向关系先模拟出大量基体取向时的合成衍射花样，找出能正确区分形变孪晶和 hcp 相的低指数取向，然后在电镜操作时利用双倾斜样品台找出该基体取向的花样，将电镜下的花样与模拟花样对比，即可准确判断出孪晶与 hcp 相存在与否，并将它们准确地分开。文献 [4, 5] 也采用了类似方法研究 Inconel 718 合金晶界析出相的鉴别问题。

具有 fcc 结构的 MP 合金是一种新型的 Co-Ni 基高温合金，该类合金有很高的强度，其高强度是通过冷变形和时效而获得^[6-8]。冷变形强化与冷变形时形成的呈网络分布的片状组织有关。MP 合金系中最早发展的是 MP35N，许多学者对 MP35N 中的冷变形组织进行了研究，所得结论并不一致，即对呈网络分布的变形组织是孪晶还是 hcp 相或是两者的混合，观点不一^[8-16]。MP159 合金是 Slaney 和 Greenburg 在 MP35N 的基础上开发出的又一种 MP 型高温合金^[9,17]，该合金保留了 MP35N 合金高强度的性能，但其最高使用温度^[18-19]从 MP35N 的 300 ℃增加到 593 ℃。MP159 合金冷变形时的强化效果一般认为是由形变诱发 hcp 相的形成所致^[6,20]，但也有研究者认为是形变孪晶和 hcp 相共同作用的结果^[21]。

本文对 MP159 合金的冷变形组织进行了研究，以期弄清其冷变形强化机理。鉴于冷变形组织鉴别上的困难和复杂性，我们开发了一套合成电子衍射花样模拟的计算机程序，通过模拟结果，优选出能正确鉴别和区分形变孪晶和 hcp 的低指数基体取向，以此指导电镜操作，使变形组织的鉴别和区分变得简单可靠。

1 合成电子衍射花样的计算机模拟

根据 fcc 基体中形变孪晶和 hcp 相的形成机理，形变孪晶和 hcp 相可在 fcc 基体的 4 种 {111} 等价面上形成。由于形变孪晶与基体均属立方晶系，每个 {111} 面只有一种形变孪晶变体；而 hcp 相为密排六方点阵，它可在每个 {111} 面上的三个等价的 <110> 方向形成，即每个 {111} 面上有 3 种 hcp 变体，共有 12 种 hcp 变体。但由于 hcp 具有六次对称，故沿每个 {111} 面上的三个 <110> 方向形成的三种 hcp 变体实际上是一样的。因此，对每个 {111} 面，只需计算其中一种变体的选区电子衍射花样。表 1 为 4 种形变孪晶变体以及每种惯习面上的一种 hcp 变体与基体的取向关系。为了能用矩阵表示出两相的取向关系，需将表 1 中的一对平行晶面和一对平行晶向表示的取向关系转换成三对平行晶面表示的取向关系。记每种惯习面上第 2 相（孪晶或 hcp）与基体具有最低指数的 3 对平行晶面为

$$\left. \begin{aligned} &(h'_1 k'_1 l'_1) // (h_1 k_1 l_1) \\ &(h'_2 k'_2 l'_2) // (h_2 k_2 l_2) \\ &(h'_3 k'_3 l'_3) // (h_3 k_3 l_3) \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

则两相取向关系可由矩阵表示如下^[22]

$$\begin{bmatrix} u' \\ v' \\ w' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h'_1 k'_1 l'_1 \\ h'_2 k'_2 l'_2 \\ h'_3 k'_3 l'_3 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} d_1/d'_1 & 0 & 0 \\ 0 & d_2/d'_2 & 0 \\ 0 & 0 & d_3/d'_3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} h_1 k_1 l_1 \\ h_2 k_2 l_2 \\ h_3 k_3 l_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} = [B] \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \end{bmatrix} \quad (2)$$

$$\begin{bmatrix} h \\ k \\ l \end{bmatrix} = [B]^T \begin{bmatrix} h' \\ k' \\ l' \end{bmatrix} \quad (3)$$

式中， $[uvw]$ 、 (hkl) 分别为基体晶向和晶面指数， $[u'v'w']$ 和 $(h'k'l')$ 分别为与 $[uvw]$ 和 (hkl) 平行的第二相晶向和晶面指数， d_1, d_2, d_3 和 d'_1, d'_2, d'_3 分别为晶面 $(h_1 k_1 l_1)$ 、 $(h_2 k_2 l_2)$ 、 $(h_3 k_3 l_3)$ 和 $(h'_1 k'_1 l'_1)$ 、 $(h'_2 k'_2 l'_2)$ 、 $(h'_3 k'_3 l'_3)$ 的晶面间距。则合成电子衍射花样计算过程如下：

表 1 fcc 基体与形变孪晶或 hcp 相的取向关系

Table 1 The orientation relationships between fcc matrix and second phases

Habit plane	(111)-habit	($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)-habit	($1\bar{1}\bar{1}$)-habit	($1\bar{1}\bar{1}$)-habit
fcc matrix-twins	(111) _M //(111) _T	($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) _M //($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) _T	($1\bar{1}\bar{1}$) _M //($1\bar{1}\bar{1}$) _T	($1\bar{1}\bar{1}$) _M //($1\bar{1}\bar{1}$) _T
	(10 $\bar{1}$) _M //($\bar{1}01$) _T	(101) _M //($\bar{1}0\bar{1}$) _T	(10 $\bar{1}$) _M //($\bar{1}01$) _T	($\bar{1}10$) _M //($1\bar{1}0$) _T
fcc matrix-hcp	(111) _M //(00.1) _H	($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$) _M //(00.1) _H	($1\bar{1}\bar{1}$) _M //(00.1) _H	($1\bar{1}\bar{1}$) _M //(00.1) _H
	(10 $\bar{1}$) _M //($\bar{1}2.0$) _H	(101) _M //($\bar{1}2.0$) _H	(011) _M //($\bar{1}2.0$) _H	($\bar{1}10$) _M //($\bar{1}2.0$) _H

(1) 由基体取向 $[uvw]$ 按式 (2) 求出第二相晶带轴方向 $[u'v'w']$

(2) 按单晶衍射花样计算原理分别求出基体 $[uvw]$ 和第二相 $[u'v'w']$ 取向时的基矢 \vec{r}_1^*, \vec{r}_2^* , 和 $\vec{r}_1'^*, \vec{r}_2'^*$.

(3) 由式 (3) 求出基体中与 $\vec{r}_1'^*, \vec{r}_2'^*$ 平行的倒易矢 $\vec{r}_1''^*, \vec{r}_2''^*$.

(4) 求出 \vec{r}_1^* 和 $\vec{r}_1''^*$ 之间的夹角 θ , 若 $\theta \neq 0$ 和 $\theta \neq 180^\circ$, 将 \vec{r}_1^* 和 $\vec{r}_1''^*$ 叉乘, 如果叉乘所得矢量 $[u^*v^*w^*]$ 与矢量 $[uvw]$ 平行但反向, 则 θ 取负值, 否则 θ 取正值.

(5) 使基体倒易面 $(uvw)^*$ 和第二相倒易面 $(u'v'w')^*$ 的中心点重合, 并将第二相倒易矢 $\vec{r}_1'^*, \vec{r}_2'^*$, 从基体的 \vec{r}_1^* 方向开始逆时针旋转 θ 角 ($\theta \geq 0$) 或顺时针旋转 $|\theta|$ 角 ($\theta < 0$), 则基体倒易矢 \vec{r}_1^*, \vec{r}_2^* , 和第二相倒易矢 $\vec{r}_1'^*, \vec{r}_2'^*$ 按着它们之间固有的位向矢关系重叠在一起.

(6) 分别将重叠在一起的 \vec{r}_1^*, \vec{r}_2^* 和 $\vec{r}_1'^*, \vec{r}_2'^*$ 为两邻边作特征平行四边形, 并将各自的平行四边形外推则得满足固定取向关系的两相合成电子衍射花样.

上述方法亦可计算和绘制出多于两相的合成电子衍射花样. 按上面介绍的方法, 采用 C 语言编制了合成电子衍射花样模拟的计算机程序. 该程序主要针对 MP159 合金的基体是 fcc 点阵, 第二相为孪晶或 hcp 相的特点来编写, 稍加修改也可用于其它结构的多相合金. 程序可自动计算和绘制出 fcc 及 hcp 单晶电子衍射花样, 或 fcc 基体与孪晶、hcp 的合成电子衍射花样. 程序运行时需输入计算相的点阵常数, 对 MP159 合金, fcc 基体的点阵常数 $a=0.3597$ nm; hcp 第二相的点阵常数 $a=0.2543$ nm, $c=0.4274$ nm.

2 MP159 合金冷变形组织研究

2.1 有利晶体取向的选择

如前所述, 为正确可靠地鉴别 MP159 合金冷变形组织, 事先了解其衍射花样的特点, 找出有利晶体取向是非常必要的. 本节利用所编程序, 模拟了 MP159 合金大量低指数基体取向时的合成衍射花样, 模拟结果见表 2, 一部分模拟衍射花样如图 1-3 所示.

从表 2 可知, 当基体取向位于 $\langle 100 \rangle, \langle 211 \rangle$ 和 $\langle 310 \rangle$ 时, 由于 4 个惯习面上的第二相 (孪晶和 hcp) 花样与基体花样完全重合, 导致区分孪晶和 hcp 不可能. 图 1a 和 2a 为 $[211]$ 基体取向时的合成衍射花样. 当基体取向位于 $\langle 111 \rangle, \langle 521 \rangle, \langle 741 \rangle, \langle 023 \rangle$ 时, 仅会出现 hcp 相的额外斑点, 而不会出现孪晶相的额外斑点, 且对 $\langle 111 \rangle$ 和 $\langle 521 \rangle$ 基体取向, 额外斑点仅来自于 4 种取向 hcp 中的一种, 而对 $\langle 741 \rangle$ 和 $\langle 023 \rangle$ 基体取向, 额外斑点来自于 4 种取向 hcp 中的两种, 此类花样的示例见图 2b, c, d. 这 4 种取向可用于判别 hcp 相存在与否. 但是, 在使用 $\langle 111 \rangle$ 基体取向时, 要注意孪晶的高阶 Laue 斑点问题, 因为当孪晶相很薄时, 孪晶的高阶 Laue 斑点正好与 hcp 相额外斑点重合^[1,3], 导致孪晶和 hcp 区分困难, 此时应倾斜试样至另一有利取向作进一步分析鉴别. 当基体取向位于 $\langle 411 \rangle$ 时, 额外斑点仅来自于孪晶相, 而 hcp 相的斑点与基体斑点完全重合, 所以 $\langle 411 \rangle$ 基体取向可用于判别孪晶的存在. 该取向时的基体与孪晶合成花样如图 1b 所示. 在使用 $\langle 411 \rangle$ 取向时要注意有额外孪晶斑点出现的合成花样与基体 $\langle 011 \rangle$ 取向的单晶花样完全一致. 当基体取向位于 $\langle 011 \rangle, \langle 321 \rangle, \langle 210 \rangle, \langle 221 \rangle, \langle 511 \rangle, \langle 113 \rangle, \langle 014 \rangle$ 和 $\langle 223 \rangle$ 时, 孪晶和 hcp 相都会出现额外斑点, 而且在 $\langle 011 \rangle,$

表 2 对不同惯习面与基体取向 $[uvw]_M$ 平行的孪晶取向 $[u'v'w']_T$ 和 hcp 相取向 $[u'v'w']_H$ 以及合成电子衍射图中额外斑点的出现情况
Table 2 $[u'v'w']_T$ and $[u'v'w']_H$ parallel to matrix $[uvw]_M$, and simulated composite EDP with (O) or without (N) extra spots for the twin or hcp phase in different habit planes

$[uvw]_M$	$[u'v'w']_T$				$[u'v'w']_H$				Extra twin spots				Extra hcp spots			
	(111)	($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)	($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)	($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)	(111)	($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)	($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)	($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)	(111)	($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)	($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)	($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)	(111)	($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)	($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)	($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)
001	22 $\bar{1}$	22 $\bar{1}$	22 $\bar{1}$	22 $\bar{1}$	44.3	04.3	44.3	40.3	N	N	N	N	N	N	N	N
211	255	2 $\bar{1}$ $\bar{1}$	2 $\bar{7}\bar{1}$	2 $\bar{1}\bar{7}$	01.3	11.0	24.3	4 $\bar{2}$.3	N	N	N	N	N	N	N	N
310	158	5 $\bar{7}$ $\bar{4}$	5 $\bar{7}\bar{4}$	158	26.6	86.3	62.3	1 $\bar{2}$.3	N	N	N	N	N	N	N	N
111	111	5 $\bar{1}$ $\bar{1}$	1 $\bar{5}$ $\bar{1}$	1 $\bar{1}\bar{5}$	00.1	88.3	08.3	88.3	N	N	N	N	O	N	N	N
521	11013	11 $\bar{10}$ $\bar{7}$	7 $\bar{145}$	125	14.6	1412.3	43.3	2 $\bar{2}$.3	N	N	N	N	N	N	N	O
741	147	17 $\bar{16}$ $\bar{7}$	13 $\bar{205}$	1823	12.3	2216.3	65.3	15 $\bar{9}$.22	N	N	N	N	O	N	N	O
023	1041	1041	28 $\bar{7}$	2 $\bar{8}$ $\bar{7}$	39.11	69.11	1220.3	208.3	N	N	N	N	O	O	N	N
411	011	8 $\bar{7}$ $\bar{7}$	4 $\bar{115}$	4511	02.3	1010.3	32.3	2 $\bar{3}$.3	O	N	N	N	N	N	N	N
011	411	411	01 $\bar{1}$	01 $\bar{1}$	02.3	22.3	12.0	21.0	N	N	O	O	N	N	O	O
321	123	3 $\bar{2}$ $\bar{1}$	5 $\bar{10}\bar{1}$	1211	24.9	108.0	3 $\bar{1}$.3	46.3	O	O	N	N	O	O	N	N
210	012	4 $\bar{5}$ $\bar{2}$	4 $\bar{5}\bar{2}$	012	48.9	128.3	84.3	4 $\bar{4}$.9	O	N	N	O	O	N	N	O
221	447	8 $\bar{4}$ $\bar{1}$	4 $\bar{8}$ $\bar{1}$	001	33.11	1612.3	412.3	40.3	N	N	N	O	O	N	N	N
511	11111	1 $\bar{1}$ $\bar{1}$	5 $\bar{137}$	5713	024.31	88.3	21.2	1 $\bar{2}$.2	N	O	N	N	O	N	O	O
113	771	311	13 $\bar{1}$	5 $\bar{5}$ $\bar{7}$	66.11	816.9	816.9	160.3	N	O	O	N	O	O	O	N
014	1072	1072	23 $\bar{2}$	2 $\bar{3}$ $\bar{2}$	912.11	312.11	1620.9	204.9	N	N	O	O	O	O	O	O
223	885	401	04 $\bar{1}$	4 $\bar{4}$ $\bar{1}\bar{1}$	66.31	1620.9	420.9	200.3	N	O	O	N	O	O	O	N

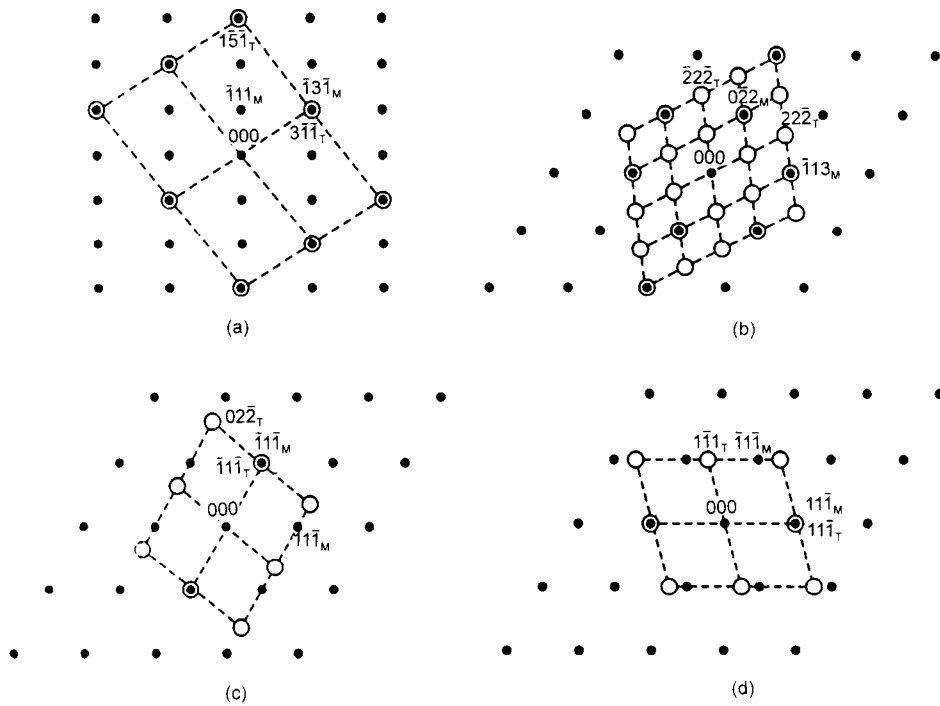


图 1 计算机模拟的 fcc 基体与孪晶合成衍射花样

Fig.1 Computer-simulated composite fcc-twin electron diffraction patterns (● matrix ○ twin)

- (a) $[211]_M//[217]_T$ ((111)-habit) (b) $[411]_M//[011]_T$ ((111)-habit)
- (c) $[011]_M//[011]_T$ ((111)-habit) (d) $[011]_M//[011]_T$ ((111)-habit)

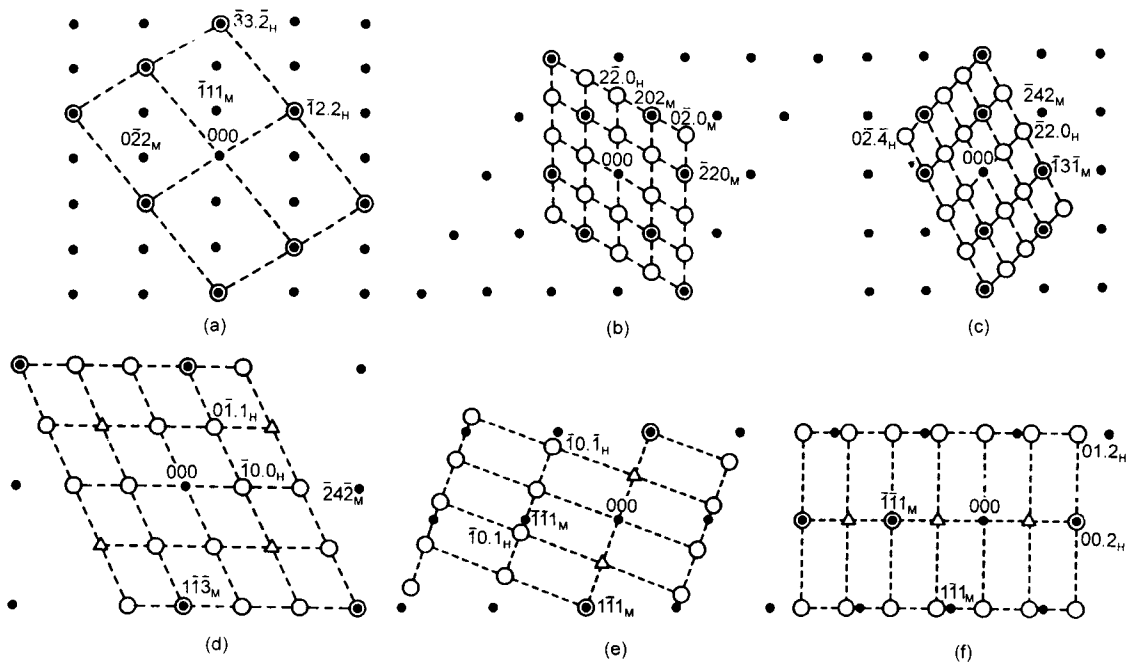


图 2 计算机模拟的 fcc 基体与 hcp 相合成衍射花样

Fig.2 Computer-simulated composite fcc-hcp electron diffraction patterns (● matrix ○ hcp Δ extinction spot)

- (a) $[211]_M//[4 \ 2.3]_H$ ((111)-habit) (b) $[111]_M//[00.1]_H$ ((111)-habit)
- (c) $[521]_M//[2 \ 2.3]_H$ ((111)-habit) (d) $[741]_M//[12.3]_H$ ((111)-habit)
- (e) $[011]_M//[12.0]_H$ ((111)-habit) (f) $[011]_M//[21.0]_H$ ((111)-habit)

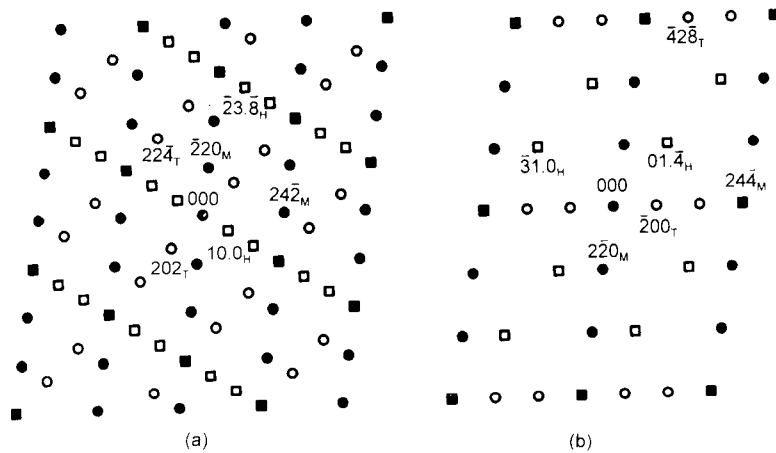


图3 计算机模拟的 fcc 基体 -hcp- 孪晶三相合成衍射花样

Fig.3 Computer-simulated composite fcc-twin-hcp electron diffraction patterns (● matrix ○ twin □ hcp ■ common to all three phases)

(a) $[113]_M // [1\bar{3}\bar{1}]_T // [816.9]_H$ ($(\bar{1}\bar{1}1)$ -habit)

(b) $[223]_M // [0\bar{4}\bar{1}]_T // [420.9]_H$ ($(\bar{1}\bar{1}1)$ -habit)

$\langle 321 \rangle$ 和 $\langle 210 \rangle$ 取向, 额外斑点来自相同惯习面的两种第二相, 在 $\langle 221 \rangle$ 和 $\langle 511 \rangle$ 取向, 额外斑点来自不同惯习面的两种第二相, 在 $\langle 113 \rangle$, $\langle 014 \rangle$ 和 $\langle 223 \rangle$ 取向, 额外斑点既有来自相同惯习面, 也有来自不同惯习面的两种第二相, 这些基体取向似乎都可以用来区分孪晶和 hcp. 可是, 仔细观察可发现, 在 $\langle 321 \rangle$, $\langle 210 \rangle$, $\langle 113 \rangle$, $\langle 014 \rangle$ 和 $\langle 223 \rangle$ 取向, 基体和孪晶的双衍射产生了 hcp 相的额外斑点, 同时, 基体和 hcp 相的双衍射又产生了孪晶额外斑点, 这样就导致了孪晶和 hcp 的不可区分, 故在这 8 种孪晶和 hcp 均会出现额外斑点的取向中, 可用于区分孪晶和 hcp 的基体取向为 $\langle 011 \rangle$, $\langle 221 \rangle$ 和 $\langle 511 \rangle$. 图 1c, d 和图 2e, f 表示了基体取向为 $[011]$ 时的合成衍射花样. 图 3 给出了基体取向为 $[321]$ 和 $[223]$ 时产生双衍射的例子.

基于以上模拟结果可知, 能够准确区分孪晶和 hcp 的基体取向有 $\langle 011 \rangle$, $\langle 221 \rangle$, $\langle 511 \rangle$, $\langle 411 \rangle$, $\langle 521 \rangle$, $\langle 741 \rangle$ 和 $\langle 023 \rangle$. 考虑到基体和第二相均处于低指数取向的有利取向为 $\langle 011 \rangle$, $\langle 521 \rangle$ 和 $\langle 411 \rangle$, 但是最有利的取向为 $\langle 011 \rangle$, 因为, 此时同一套合成花样可以判别出孪晶和 hcp 的有无并将它们区分出来.

此外, 由表 2 可看出, 大多数惯习面上的第二相不会出现额外斑点, 即第二相反射与基体反射重合, 在这些重合的情况下, 除 $[521]$ 基体取向时的 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 惯习面和 $[741]$ 取向时的 $(\bar{1}\bar{1}1)$ 和 $(1\bar{1}\bar{1})$ 惯习面外, 其余重合情况时的孪晶和 hcp 相的额外斑点不仅与基体斑点重合, 而且完全一样, 这就是说, 来自第二相的单晶衍射花样在很多情况下, 既可按孪晶指数化, 也可按 hcp 指数化, 故在利用第二相的微衍射来鉴别形变组织时要十分注意.

2.2 MP159 合金冷变形组织鉴别

MP159 合金固溶状态及 48% 冷拉状态的光学显微组织如图 4 所示. 由图可见, 固溶状态时的组织由等轴的 fcc 晶粒组成. 冷拉变形后, 等轴的 fcc 晶粒中出现了相互交织的网络组织. 图 5 为某一区域的一套电子衍射花样和选区暗场像, 其中 $[111]$ 和 $[011]$ 基体取向的衍射花样为同一区域. 图 5a 表明, 在冷变形时形成的薄片之间有相当高的位错密度和位错缠结. 对照图 2b 可看出, 图 5b 中的额外弱斑点正好处于 hcp 相衍射斑点出现的位置; 另外, 这些额外弱斑点的位置也是 fcc 点阵 $[111]$ 带轴 ± 1 阶 Laue 斑点出现的位置^[23]. 现将试样倾转到 $[011]$ 带轴方向, 所获合成衍射花样如图 5d 所示. 对照图 1c, d 和图 2e, f 可知, 图 5d 中除了一套基体强斑点和两套中等强度的孪晶斑点外, 没有 hcp 相的衍射斑点出现, 但有明显的沿基体 $[1\bar{1}\bar{1}]^*$ 和 $[11\bar{1}]^*$ 方向的强度条纹出现, 这说明, 在孪晶条上和沿其边缘有高密度的堆垛层错^[21,24], 故图 5b 中的额外弱斑点有如下几种可能: (1) 为 hcp 相的衍射斑点. 由图 5d 中无 hcp 相衍射斑点以及图 5c 只有极少量亮条, 可说明 hcp 相的含量非常少. (2) 为孪晶的 ± 1 阶 Laue 斑点. 这种可能性极小. 因为孪晶的尺寸效应产生的强度条纹不可能象图 5d 中表现的那样长和明显, 而且高阶 Laue 斑点通常也不会象图 5b 那样在中心点附近出现. (3) 为 (111) 面上堆垛层错引起的沿基体 $[111]^*$ 方向的强度条纹与 Ewald 球相交所致. 由在其它区域所拍摄的 5 张 $\langle 110 \rangle$ 晶带的选区衍射花样可知, 花样的组成、特点同图 5d, 花样中均未出现 hcp 相的衍射斑点. 所以, 图 5b 中的额外弱斑点是由 (111) 面上堆垛层错引起的强度条纹与 Ewald 球相交所引起的. 另

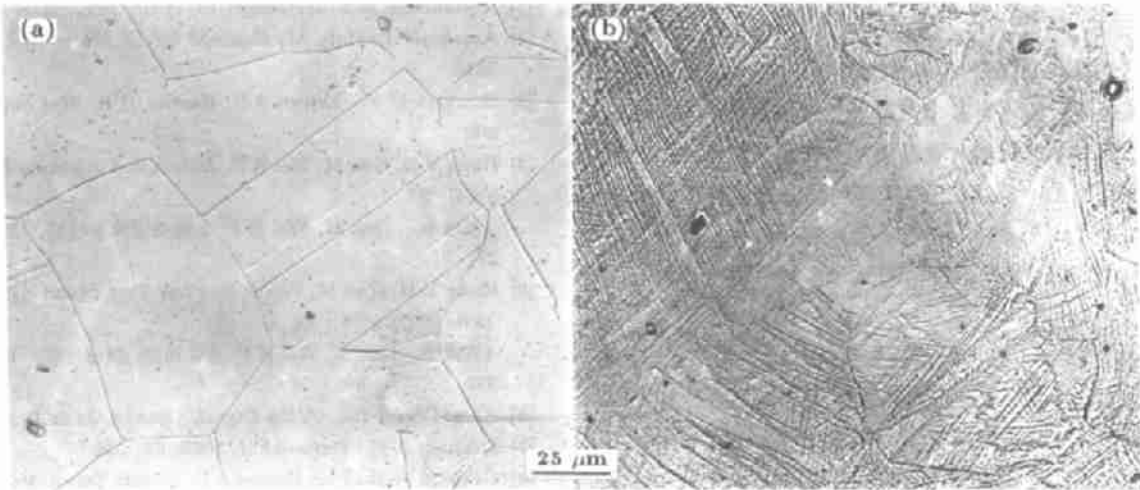


图 4 MP159 合金相组织

Fig.4 Optical micrographs of solution treated (a) and 48% cold drawn (b) MP159 alloy

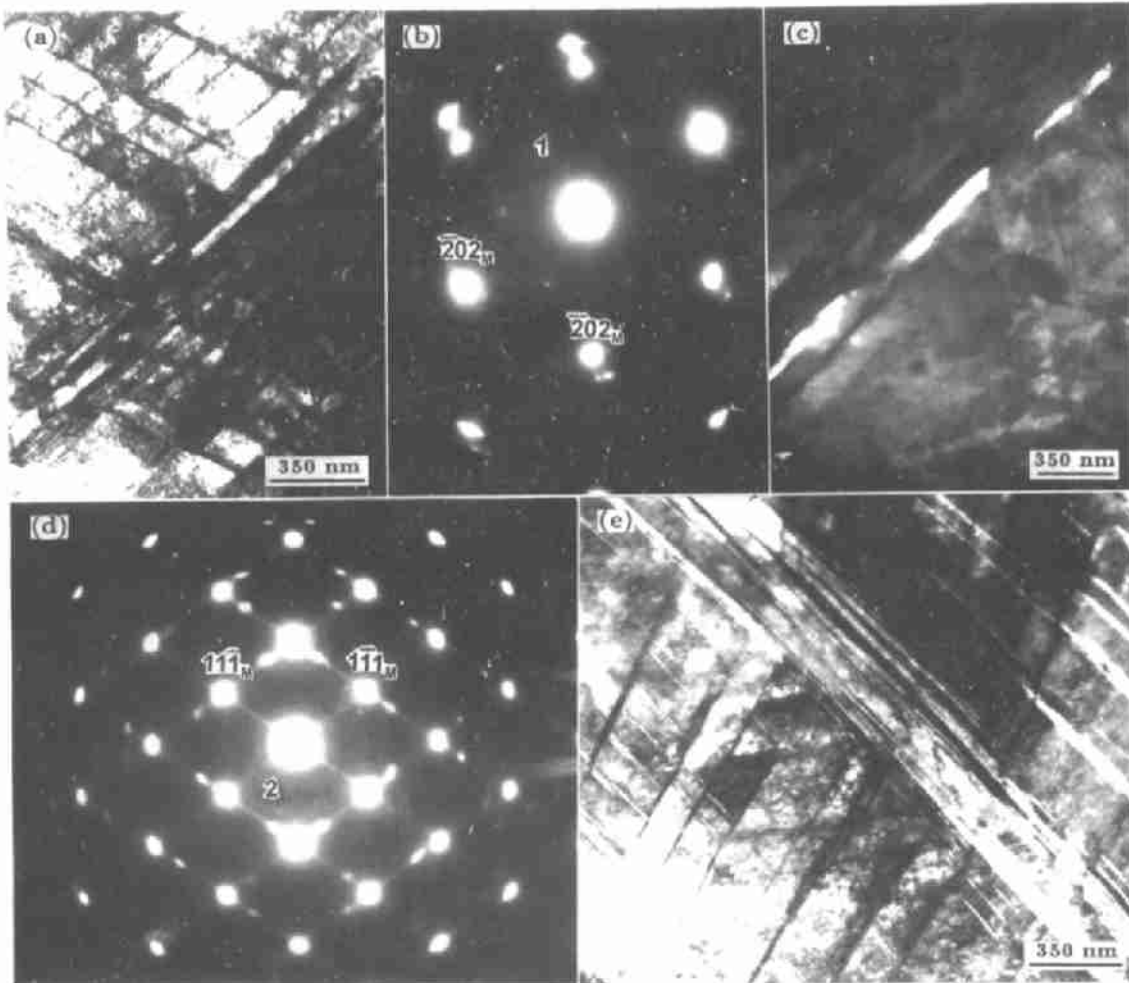


图 5 48% 冷拉 MP159 合金的电子显微组织观察

Fig.5 TEM micrographs of 48% cold drawn MP159 alloy

(a) bright-field image (b) SADP of [111] matrix orientation (c) dark-field of the spot 1
(d) SADP of the [011] matrix orientation (e) dark-field from $g_{(111)}$ (spot 2) of (111)-habit twin

外, 图 5b 中除 [111] 基体花样和额外弱斑点外, 还有一套偏离正带轴的 [411] 基体花样, 这套基体花样是由相邻基体晶粒所引起.

由此可知, MP159 合金在冷变形过程中形成的呈织网络分布的薄片为含有高密度堆垛层错的形变孪晶, 如此形态分布的薄片孪晶起着“亚晶界”的作用, 将原 fcc 晶粒分割成许多细小的“亚晶粒”, 从而对位错的长程运动产生强烈的阻碍, 这是 MP159 合金冷变形强化的主要原因. 此外, 冷变形组织中相当高的位错密度对冷变形强化亦有一定的贡献.

文献 [25] 指出, 当 MP159 合金冷轧减少量达到 31% 时, 就会出现 hcp 相. 并通过选区衍射花样来证实冷变形时形成的薄片条为 hcp. 但事实上, 根据图 2b 很容易辨认出他们的选区衍射花样是基体 $\langle 114 \rangle$ 带轴的合成衍射花样, 花样中的额外斑点应该是孪晶的衍射斑点, 而不是 hcp 相的衍射斑点. 因此, 该文献的透射电镜结果进一步支持了这一观点.

3 结论

(1) 开发了一套利用计算机模拟 fcc 基体与孪晶或 hcp 合成电子衍射花样的计算机程序. 通过模拟可事先了解合成电子衍射花样的特点, 优化出能准确区分形变孪晶和 hcp 的有利基体取向.

(2) 可准确辨别 MP159 合金形变孪晶和 hcp 的有利取向为 $\langle 011 \rangle$, $\langle 521 \rangle$ 和 $\langle 411 \rangle$, 其中 $\langle 011 \rangle$ 为最有利取向. 在许多其它基体取向时, 由于第二相斑点与基体斑点重合或由于双衍射而导致不能辨别出形变孪晶和 hcp. 另外, 在许多情况下, 第二相的衍射花样既可指数化为孪晶也可指数化为 hcp, 从而导致利用第二相的微衍射来判别孪晶和 hcp 变得困难.

(3) MP159 合金在冷变形时形成的相互交织的网络为含有高密度堆垛层错的形变孪晶. 除了一些分布在堆垛层错中的 hcp 单元外, 实验中没有发现 hcp 相的存在, 这说明 MP159 合金冷变形强化效果主要是由呈网络分布的孪晶片所致.

感谢安湖机械厂为本文实验所提供的进口商品化 48% 冷拉 MP159 合金, 同时也感谢中国地质大学(武汉)的刘祥文、吴秀玲和武汉钢铁公司技术中心的李平和、文慕冰在电镜实验方面所给予的帮助.

参考文献

- [1] Kestenbach H J. *Metallogr*, 1977; 10: 189
- [2] Assefpour-Dezfuly M, Bonfield W. *J Mater Sci*, 1984; 19: 2815
- [3] Bowkett M W, Keown S R, Harries D R. *Met Sci*, 1982; 16: 499
- [4] Rong Y H, Gao M, Wei R P. *J Shanghai Jiaotong Univ*, 1997; 31(4): 27
(戎咏华, Gao M, Wei R P. 上海交通大学学报, 1997; 31(4): 27)
- [5] Rong Y H, Gao M, Wei R P. *Phys Test Chem Anal A: Phys Test*, 1997; 33(8): 32
(戎咏华, Gao M, Wei R P. 理化检验: 物理分册, 1997; 33(8): 32)
- [6] Alloy Digest Inc. *Alloy Digest*, Orange, June 1990
- [7] Graham A H. *Trans ASM*, 1969; 62: 930
- [8] Graham A H, Youngblood J L. *Metall Trans*, 1970; 1: 423
- [9] Slaney J S, Nebiolo R A. *Metall*, 1983; 16: 137
- [10] Raghavan M, Berkowitz B J, Kane R D. *Metall Trans*, 1980; 11A: 203
- [11] Hagan F C, Antes H W. *Superalloys*, Warrendale, PA.: TMS-AIME, 1984: 621
- [12] Raghavan M, Berkowitz B J. *Scr Metall*, 1980; 14: 1009
- [13] Drapier J M, Viatour P, Coutsouradis D, Habraken L. *Cobalt*, 1970; 49: 171
- [14] Smith G D, Yates D H. *Met Prog*, 1968(3): 100
- [15] Singh R P, Doherty R D. *Metall Trans*, 1992; 23A: 307
- [16] Singh R P, Doherty R D. *Metall Trans*, 1992; 23A: 321
- [17] Slaney J S. *US Pat 3767385*, 1973
- [18] Kline L, Lawler M. *Aircr Eng*, 1989; 61: 2
- [19] Kline L, Lawler M. *Mater Eng*, 1989; 106: 55
- [20] Bradley E F. *Superalloys*, ASM, Int, 1988: 20
- [21] Mao S P, Zhang Y, Chang X, Zhou J. *J Mater Eng*, 1990; 4: 35
(马淑波, 张 匀, 常 昕, 周 敬. 材料工程, 1990; 4: 35)
- [22] Huang X Y. *Transmission Electron Microscopy*. Shanghai: Shanghai Science and Technology Press, 1979: 252
(黄孝瑛. 透射电子显微学. 上海: 上海科学技术出版社, 1979: 252)
- [23] Li S T. *X-Ray of Metal and Electron Microscopy Technology*. Beijing: Metallurgy Industry Press, 1980: 363
(李树棠. 金属 X 射线与电子显微分析技术. 北京: 冶金工业出版社, 1980: 363)
- [24] Hirsch P, Howie A, Nicholso R B, Pashley D W, Whelan M J. *Electron Microscopy of Thin Crystals*. New York: Robert E Krieger Publishing Co, 1977: 106
- [25] Guangwei H, Di F, Ming Y, Nanseng Y. *J Mater Sci Technol*, 1996; 12: 109