

18

球形石墨微观结构的分形模型

99-102

A Fractal Model of the Microstructure

何宗彦 高芝晖
He Zongyan Gao Zhihui
(重庆大学工程力学系)

TG143.5

摘要 根据铸铁中球形石墨的表面形貌及微区分析,提出其内部角锥体呈多次分枝的分形结构模型,计算出分维值的范围并对分形的形成机理进行了探讨。

关键词 球形石墨; 几何/分维, 球墨铸铁
中国图书资料分类法分类号 TG143.5

ABSTRACT In this paper, a fractal model about the microstructure of spheroidal-graphite is presented through the research on the surface form and the analysis to microregion. The fractal dimension is calculated and the forming mechanism is also discussed.

KEY WORDS spheroidal-graphite; geometry / fractal dimension

0 引 言

按当前流行的理论,铸铁中的球形石墨为一组呈三维辐射状生长的石墨多晶体^[1-4],组成多晶体的每一个单晶体是由外向内逐渐收缩的圆锥体,称为角锥体。石墨的[0001]方向垂直于球体表面。每一角锥体的顶面具有螺位错,当碳原子不断沉积在位错端头上时,角锥体即按旋梯方向生长。当生长充分而相互接触时,熔体中的碳原子还要在这些生长台阶上继续沉积,形成横向(如在[10 $\bar{1}$ 0]晶向上)的长大,使石墨球表面呈不平整的多台阶面并带有许多凸出物。

文献[5]根据分形几何原理^[8-10],建立了球墨表面二次电子象的分维布朗模型,提出以图象处理系统为手段的球墨表面形貌分维计算方法,得出的平均分维是2.11~2.23。

文献[6]采用透射电镜(TEM)对稀土铸铁薄膜试样进行了分析研究,发现球墨内部的角锥体是由许多取向略有差异的微晶所构成而非一个完整的单晶,且角锥体之间在生长过程中存在某种制约关系,而不是独立地由各自的螺旋生长台阶所形成。

文献[7]通过对蠕虫状石墨微观结构的观察,发现在石墨生长改变方向处存在着许多异质点,在石墨内部存在着不少孪晶和位错,文献认为孪晶对石墨在空间改变生长方向有一定作用而位错可为石墨提供生长台阶。

作者根据上述文献,提出球墨内部角锥体呈多次分枝状的分形结构模型,并对其分维和

* 收文日期 1992-01-07

形成机理进行了计算和讨论。

1 分形模型

图1为用稀土、镁及0.005%铈球化的球铁经深腐蚀后呈现的石墨球扫描电镜照(SEM)。可以看出其表面形貌类似于常见的花椰菜(Cauli Flower)。后者的表面具有典型的分形特征,其分维取决于花椰菜内部分形结构的分枝情况。作者认为对于石墨球也是如此,即内部角锥体的结构决定了球外表面的形貌。

以平面图形为例,图2a为从原点O出发的一束辐射状射线,假定射线长度完全随机,则沿射线顶端形成的曲线就具有完全随机的起伏而不是分形。图2b所示射线束,其长度分布具有分形特征,即长射线周围有若干短射线,短射线周围又有若干更短的射线,以此类推。其外沿曲线即呈大圆弧,小圆弧再含更小圆弧的分形形状。

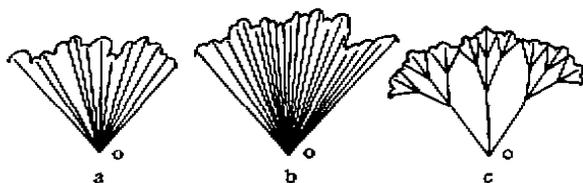


图2 不同情况下平面射线束的外沿曲线形状

图2c则是类似花椰菜的分枝状结构,假定同一级分枝等长且为前一级分枝的若干分之一,容易看出其外沿曲线具有明显的大圆弧包含小圆弧的分形特征。

将射线束作为角锥体排布的二维模型,作者认为角锥体单晶的长度分布不太可能具有分形特征,因此只可能是图2c所示的情况。推广到三维即每一角锥体都是由具有取向差异的亚结构所组成,而这些亚结构又可分为更小的结构,使整个石墨球中的角锥体取向具有这样的特点:粗略地看,尽管都是从中心向外发散,其[0001]方向垂直于球面,但细致分析,每一角锥体内部又含有多级小角锥体,它们的取向具有一定的差异,文献[6]的工作证实了这一假说:在石墨球的同一扇形区域内(在空间即为同一角锥体内)不同点处的衍射谱并不相同(图3)且观察到扇形区域内存在若干衬度不同的微区,这些区域与晶体取向发生变化的范围是一致的,因此这种衬度的变化是晶体取向不同所造成的。

事实上不少石墨球的金相照片上仔细观察可以看出这种分枝。图4a为取自大断面球铁中心部位的石墨球偏振光金相照片,箭头所指的深色锥体处可以看出较明显的三级分枝结构。图4b所示偏振光金相中,角锥体偏离中心辐射状取向的趋势十分明显。图5为放大1400倍的石墨球断面金相,显示了角锥体上石墨的层状结构。箭头所指处石墨的[0001]方向已偏离正常的中心辐射方向,应是一大角锥体中的亚结构。在不少文献提供的金相图片(尤其是偏振光照片)中也可以观察到石墨球的这种结构^[11]。这说明上述模型具有一定的事实根据。



图1 石墨球表面形貌的扫描电镜(SEM)照片

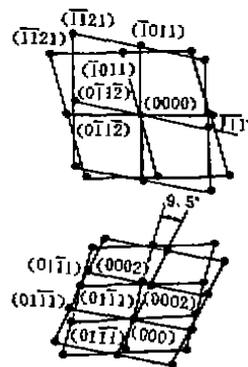


图3 同一角锥体内不同点处的衍射谱

该模型的提出较好地解释了文献[5]作出的结果,它表明石墨球表面的分形形貌并非因为碳原子随机的横向扩张,而是球体内部角锥体呈多级分枝的必然结果。

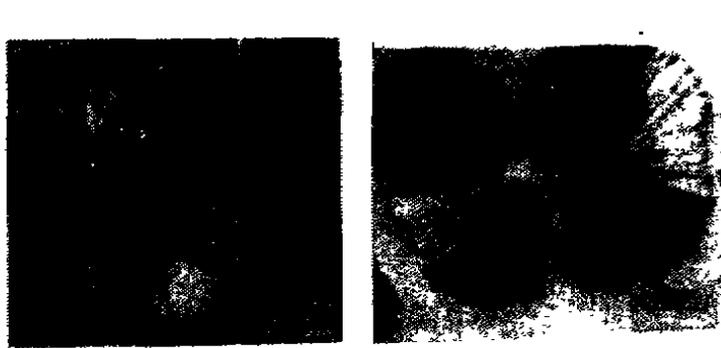


图4 石墨断面的偏振光金相



图5 石墨球断面金相

2 分维计算

按文献[5]提出的分维布朗模型,如果 $g(x)$ 在 $\|\Delta x\|_{\min}$ 和 $\|\Delta x\|_{\max}$ 范围内满足:

$$\left. \begin{aligned} Pr\left\{\frac{y(x+\Delta x)-y(x)}{\|\Delta x\|^H} < y\right\} = F(y) \\ \|\Delta x\| \in (\|\Delta x\|_{\min}, \|\Delta x\|_{\max}) \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

则称 $g(x)$ 为广义分维布朗函数,其中 $\|\cdot\|$ 表示范数, $F(y)$ 为高斯变量的分布函数, H 为分维布朗参数,分维为:

$$FD = 2 + H \quad (2)$$

当 $H = 0$ 时, $FD = 2$, 对应于真正的球面,表示石墨球表面是光滑的。

当 $H = 1$ 时, $FD = 3$, 表示石墨球表面起伏可充满整个空间。

一般情况下 $0 < H < 1$, H 越大,表面起伏越大,形态越复杂。文献[5]计算出当铈量为 0.005% 时, $FD = 2.11$ 。

下面先考虑石墨球大圆截面上外沿曲线的分维计算。设从截面看,一个角锥体单晶可分为 n 个小的角锥体单晶(亚结构)。如图6所示,设 $\angle AOB = \alpha$, $\angle COD = \alpha/n$, 而 $\angle EOD = \alpha/2n$ 。如果 $OD = OB = CO = AO = R$, 则 $CD = 2ED = 2R\sin(\alpha/2n)$, $AB = 2FB = 2R\sin(\alpha/2)$ 。

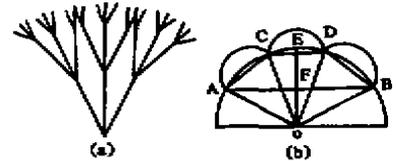


图6 大圆截面上外沿曲线分维计算示意图

由分枝分形的分维计算式^[10]:

$$d_f = \ln N / \ln \beta^{-1} \quad (3)$$

其中:

$$N = n, \beta = \frac{CD}{AB} = \sin \frac{\alpha}{2n} / \sin \frac{\alpha}{2}$$

得到:

$$d_f = \ln n / \left(\ln \sin \frac{\alpha}{2} - \ln \sin \frac{\alpha}{2n} \right) \quad (4)$$

通过观察,可设 $n = 2, \alpha = 23 \sim 30^\circ$ 。若取为 27° , 由(4)式可算得 $d_f = 1.01$ 。根据分形积和原理^[9](Mandelbrot 经验定理)有:

$$d_f(B \cup F) \geq d_f(B) + d_f(F) \quad (5)$$

其中: B 和 F 分别为两个互不重叠的分形子集,假定角锥体分枝沿各方向分布基本均

匀,由(5)式容易算得这种分枝结构的分维 $d_f \geq 2d_l \approx 2.02$ (6)

可见 d_f 至少应为 2.02,如令 $n = 2.1$ (统计均值)则 $d_f = 1.08$, d_f 至少应为 2.16,与文献[5]测得的结果很接近。

3 形成机理分析

石墨球上述分形结构的形成机理可作如下定性分析:根据晶体学计算,在一定过饱和度下,生长台阶边缘和周围溶液处于平衡状态,螺旋线旋转生长的角速度应为常数^[4],即

$$\frac{v}{r} = \omega = c \quad (7)$$

其中, v 为螺旋线生长的切向速度, r 为螺旋半径。由于螺旋线上各点切向速度相等,故 r 应为常数,可称为临界回转半径,它使得角锥体锥面上的螺旋线半径不可能无限增大,根据文献[6]的工作,相邻角锥体生长也相互制约,但随着锥体沿[0001]方向的生长,其顶面将越来越大,当半径超过临界回转半径时,螺旋线就不能被碳原子填满,新的螺旋位错即可能在未填满处露头,由此处将产生新的螺旋线生长,也即形成新的亚结构分枝(图7a)。当分枝晶体的顶面又不能填满时,又产生新的螺旋线生长,形成更细的分枝。这与文献[7]表明的位错露头可作为石墨生长新台阶的观点一致。正是这种原因造成了分形结构的产生。事实上,当杂质元素干扰石墨的生长时,这种分枝将异常突出。

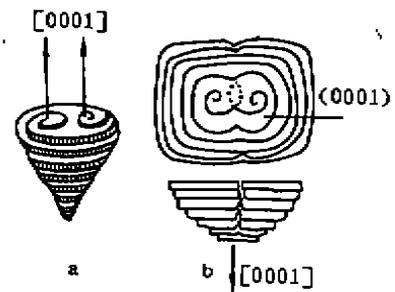


图7 球形石墨生长机理示意图

如果按文献[3]的观点,石墨球是以气泡为核心,由外向内生长而成的,那么分枝的形成可通过符号相反的螺旋位错所引起生长台阶的合并来实现,如图7b所示。

由上述机理可以推断在石墨球内的分枝之间应有不少空隙,这在图3和图4之中可以看到。应当指出,球形石墨的分形生长只是石墨若干生长方式之一,但这一模型的提出无疑拓宽了我们深入认识球形石墨形成过程的思路,从而具有一定的理论和实际意义。

致谢:重庆大学机械工程二系钱翰诚教授为本文提供了金相照片,在此表示衷心感谢。

参 考 文 献

- 1 Double D D, Hellawell A. The Metallurgy of Cast Iron. Geneva, Switzerland. 1975. 509-528
- 2 陈熙琛等. 铁-碳合金中球形石墨的研究. 机械工程学报, 1982, 18(1): 15~23
- 3 张博等. 球墨铸铁. 北京: 机械工业出版社, 1989
- 4 郝石坚等. 现代球墨铸铁. 北京: 煤炭工业出版社, 1989
- 5 李炳成等. 球墨三维微观形貌的分维度量, 材料科学进展, 1990, 4(4): 352~355
- 6 宋维锡, 杨文英. 稀土铸铁中石墨结构的透射电镜分析. 金属学报, 1987, 23(6): B324~B327
- 7 王亚男, 宋维锡. 铸铁中蠕虫状石墨微观结构. 金属学报, 1990, 26(2): B143~B145
- 8 Mandelbrot B B., The Fractal Geometry of Nature. Freeman W. H. and Company San Francisco. 1982
- 9 Falconer K J., Fractal Geometry, Mathematical Foundation and Applications, Wiley, New York, 1990
- 10 李后强, 程光敏. 分形与分维. 成都: 四川教育出版社, 1990. 22
- 11 李炯辉等. 钢铁金相图谱. 上海: 上海科技出版社, 1981. 167-174