

①
59-64

FCC:BCC 部分共格界面台阶结构模型

The Ledge Structural Models of FCC:BCC Partially Coherent Interface

徐启昆
Xu Qikun

康戈文
Kang Geven

TG111.5

(重庆大学冶金及材料工程系)

摘要 用计算机研究了 FCC:BCC 部分共格界面结构随取向关系改变而发生的变化。据此建立了不同位向关系下两相界面台阶结构模型。分析表明,当 $a^{fcc}/a^{bcc} = 1.26$, 位向关系从 $K-S$ 关系变化到 $N-W$ 关系, 表观惯习面与原子惯习面间偏转角随位向而变化, 其值从约 12° 增大到约 30° 。研究发现, 对于不同惯习偏转角的相界台阶模型, 失配位错不是必不可少的结构要素。

关键词 贝氏体相变; 贝氏体组织; FCC:BCC 相界面

中国图书资料分类法分类号 TG111.5

相界面结构

FCC相, BCC相

ABSTRACT The structure of FCC:BCC partially coherent interface is simulated by computer. The results show that the interface structure is varied with the orientation relationships. The structural models of varied orientations are made, which are defined by the lattice parameter ratio $a^{fcc}/a^{bcc} = 1.26$ and ranged from $K-S$ to $N-W$ orientation relationship. The amount of deviation of the apparent habit plane from atomic habit plane $\{111\}_{fcc}$ is a function of orientation, and ranges from ca. 12 degrees to ca. 30 degrees. Computer simulations also found that the misfit dislocations could not be certain to exist on the FCC:BCC partially coherent interface.

KEYWORDS bainite transformation; bainite structure; FCC:BCC interphase interface

0 前言

文献[1]以形貌学和长大动力学证据为基础, 提出在贝氏体铁素体条块宽面上是部分共格结构。Hall et al^[2]研究了类似于 Fe-C 合金贝氏体相变晶体结构的 Cu-0.33% wt Cr 合金, 其基体相 Cu 为 FCC 点阵, 脱溶相 Cr 是 BCC 点阵, Fe-C 合金的 γ/α 界和 Cu-Cr 合金的 Cu/Cr 界点阵常数比 a^{fcc}/a^{bcc} 分别为 1.255 和 1.253^[2], 研究中观测到 FCC:BCC 界面上有间距为 100~1000 Å 的平行位错分布, FCC:BCC 两相间位向关系从 $N-W$ 到 $K-S$ 间变化, 且没有任何单一的位向关系能适用于所有的沉淀相, 不同的位向关系对应不同的脱溶相形貌。Rigsbee 和 Aaronson^[3]以 Hall 和 Russell et al^[4]的思想为基础, 做出了共格区-失配位错-结构台阶三要素 FCC:BCC 部分界面结构模型(R-A 模型), 并用计算机模拟了不同 a^{fcc}/a^{bcc} 比值和不

* 收文日期 1992-10-09

国家自然科学基金58971038资助项目

同位向关系下的界面结构,但没有对 FCC·BCC 两相符合 $K-S$ 位向关系的界面结构进行描述。然而实际材料贝氏体 γ/α 间的晶体学位向关系是多种多样的,不管是上贝氏体还是下贝氏体,既有两相符合 N-W 关系的论证^[5,6],也有符合 $K-S$ 关系的报道^[5~10],又有位向介于两者之间的论述^[11]。因此,不同位向关系下 FCC·BCC 部分共格界面结构的研究对深入了解贝氏体铁素体基元形貌^[12]和贝氏体铁素体长大机制以及贝氏体相变机制就具有非常重大的意义。最近作者^[12]论证了 FCC·BCC 部分共格界面失配位错并不是必不可少的结构要素,多种台阶的存在可以使界面共格坪增大且界面能降低,做出了 N-W 关系下共格坪—单原子结构台阶—三原子结构台阶界面结构模型。本文拟在此基础上进一步研究 FCC·BCC 点阵位向对界面结构的影响。

1 计算机处理试验

计算机处理方法见文献[12]。本文选用点阵常数比 $a^{fcc}/a^{bcc} = 1.26$, FCC 相密排方向 [110] 与 BCC 相密排方向 [111] 之间偏转角选取 $\alpha = 0^\circ, 1.0^\circ, 1.5^\circ, 2.0^\circ, 2.5^\circ, 3.0^\circ, 3.5^\circ, 4.0^\circ, 4.5^\circ, 5.0^\circ$ 和 5.26° , 其中 $\alpha = 0^\circ$ 为 $K-S$ 位向关系, $\alpha = 5.26^\circ$ 为 N-W 位向关系,将符合共格条件的原子对找出,并且把 FCC 相的位向标出。

2 试验结果

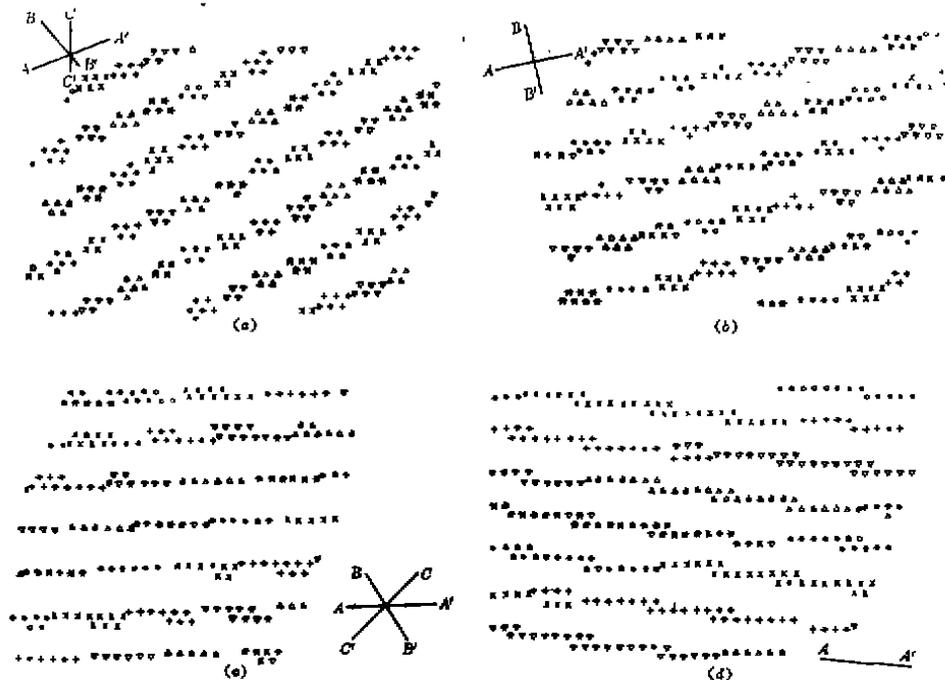


图 1 共格原子对的计算机模拟结果

计算机处理结果表明,在不同的位向关系下,为保持尽可能高的匹配度和尽可能低的界面能量, FCC·BCC 部分共格界面结构将逐渐发生变化。如图 1 所示,图中各标识符号表示 FCC、BCC 不同堆序层的配对情况,“*”表示 A— α 层,“○”表示 B— β 层,“×”表示 C— α 层,

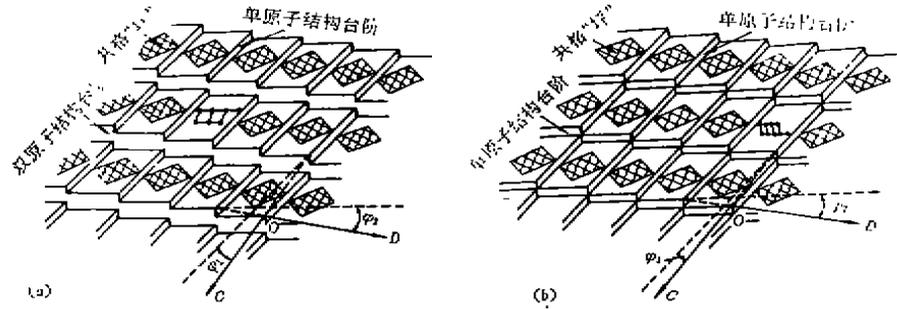


图2 台阶结构模型示意图

“+”表示 A-β 层，“▽”表示 B-α 层，“△”表示 C-β 层。沿 AA' 方向引入单原子台阶，则各位向关系沿 AA' 方向共格坪均可连为一片；沿 BB' (或 CC') 方向引入 K 原子台阶 (K=1, 2, 3)，则整个界面可望取得最大的共格坪比例。对 α=0°，即 K-S 关系，单、双原子混合结构台阶将最为有利。因此，除文献[12]所建共格坪—单原子结构台阶—三原子结构台阶模型外，还可建立如图2、3所示的 FCC:BCC 部分共格界面结构模型。按照这样的模型可以得到如图4所示的 FCC:BCC 部分共格界面结构。

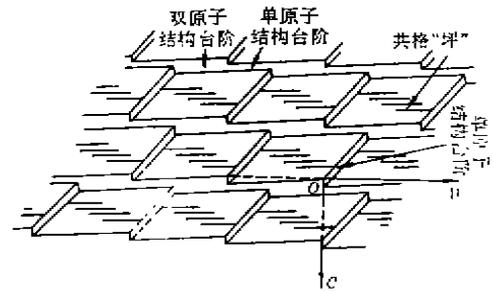
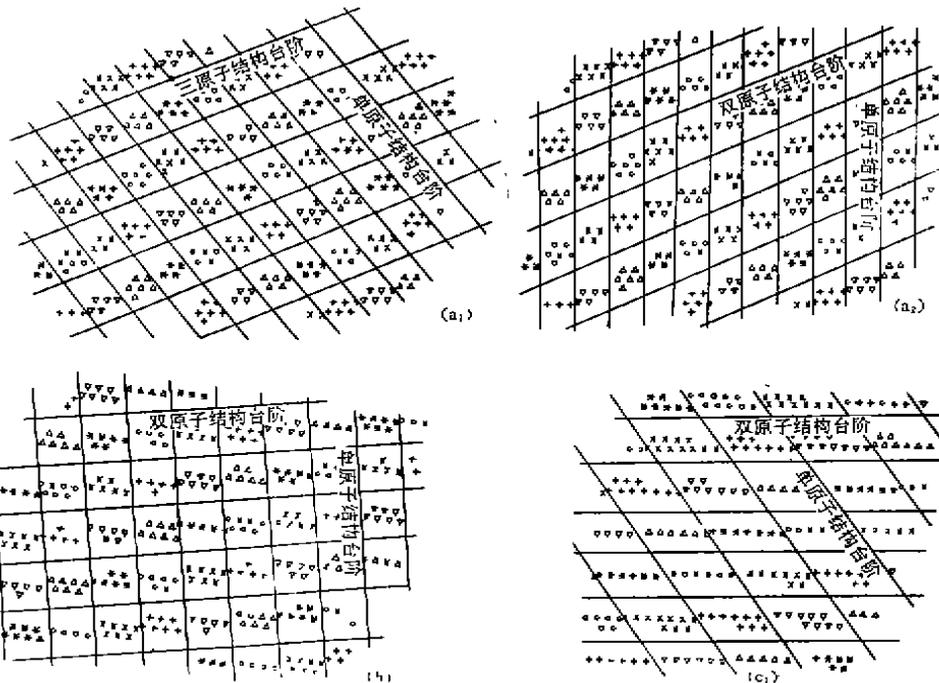


图3 K-S 关系及接近 K-S 关系的台阶结构模型示意图



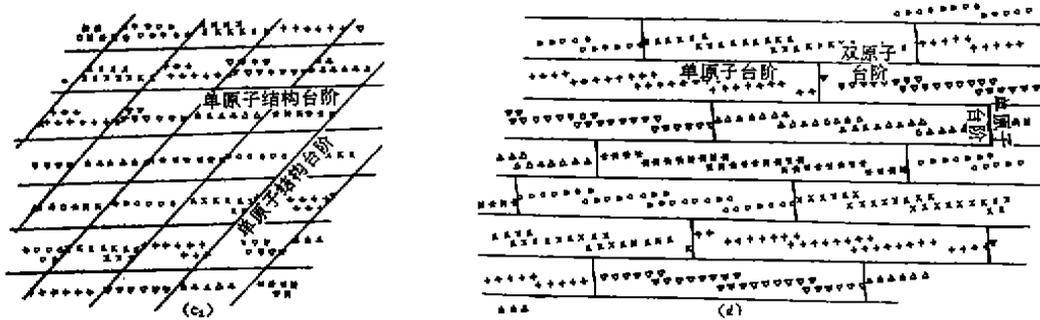


图4 不同位向关系下 FCC/BCC 部分共格界面的台阶结构模型

由各模型可得,表观惯习面(apparent habit plane)为 $\vec{OC} \times \vec{OD}$ 平面,与原子惯习面(atomic habit plane) $\{111\}_{fcc} // \{110\}_{bcc}$ 之间的偏转角:

$$\varphi = \arctg \left[\frac{h \sqrt{l^2 + k^2 w^2} - 2klw \cos \beta}{l w \sin \beta} \right]$$

式中 h : BCC 相密排面间距; l : 多原子结构台阶沿台阶方向密排面上的投影间距; w : 单原子结构台阶沿台阶方向密排面上的投影间距; β : 单、多原子结构台阶方向在密排面上投影间的夹角; k : 结构台阶原子层数 ($k=1, 2, 3$)

3 分析讨论

3.1 位向与界面结构和 φ 之间的关系

位向关系与表观惯习面偏离原子惯习面的夹角 φ 之间的关系列于表1. 可看出,当 FCC、BCC 两相从 $K-S$ 取向变化到 $N-W$ 取向, φ 值逐渐从约 12° 增大到约 30° , 两相界面结构在 $N-W$ 关系 ($\alpha=5.26^\circ$) 及接近 $N-W$ 关系为共格坪—单原子结构台阶—三原子结构台阶结构([12]的图3); 在 $\alpha=3.0^\circ$ 为共格坪—单原子结构台阶—双原子结构台阶结构(图2a); 在 $K-S$ 及接近 $K-S$ 关系为共格坪—单原子结构台阶—单双混合结构台阶结构(图3); 在这三种结构之间为组合变化结构.

表1 φ 角与 α 角之间的对应关系 ($^\circ$)

α	5.26	5.0	4.5	4.0	3.5	3.0
φ	30	28	28	27	24	23
α	2.5	2.0	1.5	1.0	0	
φ	20	19	18	17	12	

3.2 惯习面

Puruhara et al^[14]指出,当沉淀相在基体晶粒内形成时,其取向关系似乎总能产生低能量的相界面,甚至长期被认为是非共格形核长大的金刚石型立方 Si 晶体从铝基面心立方 α 基体相中脱溶沉淀也不例外. 即使在同一个试样中,也常常能发现多种取向关系,但所有这些位向关系都能产生一个平直的部分共格相界面. Hall et al^[2]从实验证实 Cu-0.33 wt% Cr 合金 FCC/BCC 部分共格界面上没有哪一种取向关系能符合所有的沉淀相粒子的取向. 由本文及文献^[12]所提出模型可看出,在不同的位向关系下 FCC/BCC 部分共格界面具有不同的界面结构,其表观惯习面与原子惯习面亦具有不同的偏转角,本文所述条件下,其值在 $12^\circ \sim$

30°范围内变化。这就解释了贝氏体形成中 α/γ 两相间表观惯习面呈现多样性的原因,这种差异是 FCC:BCC 界面随两相取向关系小范围变化所造成的。

3.3 台阶结构模型与 R-A 模型间的关系

台阶结构模型和 R-A 模型可以很好地联接在一起,如图5所示。可以考虑,贝氏体宽面结构可能存在台阶结构模型界面和 R-A 模型界面的组合。界面取何种结构将取决于界面能和反应动力势等各方面条件怎样有利。

由本文及文献[12]所建模型可以看出,FCC:BCC 部分共格界面上失配位错并不是必不可少的。Furuohara et al^[14]以 R-A 模型相同的方法做出的 hcp:bcc 界面共格坪—结构台阶—失配位错模型同样认为失配位错是部分共格界面所不可缺少的。然而在 Ti-Cr 合金 hcp 结构的 α 相和 bcc 结构的 β 相沿晶界沉淀相 (allotriomorphs) 界面上,虽然

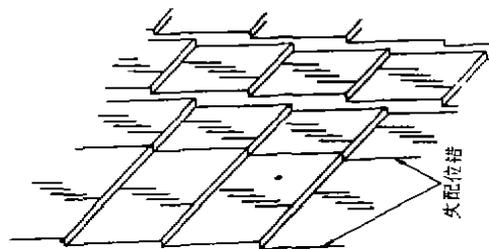


图5 台阶结构模型与 R-A 模型的联接

许多文献^[14~18]论证了两相为部分共格界面,TEM 且已实际观测到台阶,然而在结构台阶和生长台阶上,部分界面从未发现失配位错分布^[14]。Rigsbee et al. [22]对 Fe-0.62 wt% C-2.0 wt% Si 合金贝氏体铁素体宽面与奥氏体界面的观测,实际上也只发现间距远大于 R-A 模型理论值的平行位错,而缺乏高密度位错存在的有力证据。Hall et al. [2]对 Cu-Cr 合金 FCC:BCC 部分共格界面的观测所发现界面位错呈网状,且有少量穿过两相的位错线。可以认为,这种情况为本文及文献[12]所建模型间接提供了证据,说明了界面结构多样性的客观存在。

应当指出,Aaronson 等^[1~4,11,15,17,20]在建立 FCC:BCC 界面结构模型方面的功绩是不可磨灭的,但是本研究放弃失配位错并建立随取向变化的系列台阶结构界面修正模型将有利于更好解释界面结构与组织形貌之间的关系和贝氏体相变机制。

4.4 结构台阶

本研究所建 FCC:BCC 部分共格界面结构模型,两个方向的结构台阶均不可动。界面移动只能靠高度为几百埃以上^[17]的生长台阶横移铺展复盖整个宽面,才能保持界面原结构。本界面模型排除了将结构台阶当作是相变位错^[18]或螺型位错^[19]的可能性。

4 结 论

1) FCC:BCC 部分共格界面结构随两相的取向关系改变而改变。在 N-W 关系和接近 N-W 关系,为共格坪—单原子结构台阶—三原子结构台阶结构;在 K-S 取向和 N-W 取向之间,两相密排方向夹角 $\alpha=3^\circ$ 的情况,为共格坪—单原子结构台阶—双原子结构台阶结构;在 K-S 关系和接近 K-S 关系,为共格坪—单原子结构台阶—单双原子混合台阶的结构;在这三种结构之间,是一般结构。

2) 从 K-S 关系到 N-W 关系,FCC:BCC 部分共格界面上,表观惯习面与原子惯习面之间的偏转角逐渐从 12° 增大到约 30° 。

3) 对于不同表观惯习面与原子惯习面偏转角的 FCC:BCC 部分共格界面结构模型,其失配位错都不是必不可少的结构要素。

胡振纪、方鸿生教授参与了本文的讨论,郑海梅同志参加了部分实验工作,特此致谢。

参 考 文 献

- 1 Aaronson H. I.; Decompositon of Austenite by Diffusional Processes, P. 387, New York, (1962)
- 2 Hall M. G., Aaronson H. I. and Kinsman K. R.; Surface Sci. , 1972, 31, 257
- 3 Rigsbee J. M and Aaronson H. I.; Acta Metal. , 1979, 27, 351
- 4 Russell K. C., Hall M. g., Kinsman K. R and Aaronson H. I.; Metall. Trans. , 1974, 5, 1503
- 5 Smith G. V., Mehl R. F.; Trans. AIME. , 1942, 150, 211
- 6 下木修司, 平野贤一. 日本金属学会会报, 1969, (8), 3, 194
- 7 Shackleton D. N, Kelly P. M.; Acta Metall. , 1967, 15, 979
- 8 Pitsch W. Acta Metall. , 1962, 10, 897
- 9 徐祖耀, 顾文桂, 俞学节. 金属学报, 1982, 19(1), A12
- 10 Huang D. H, Thomas G. Met. Trans, 1977, 8A, (11), 1661
- 11 Sandvik B. P. J, Met. Trans. 1982, 13A(5), 777, 789
- 12 康戈文, 徐启昆. 重庆大学学报, 1992, 15(5), 57
- 13 徐启昆, 周正. 材料科学进展, 1991, 5(4), 301
- 14 Furuvara T, Lee H. J, Menon E. S. K and Aaronson H. I, Met. trans. 1990, 21A, 1627
- 15 Aaronson H, I and Russell K. C.; Proc. Int. Conf. on solid-solid phase Transformations, H. I. Aaronson, D. E. Laughlin, R. F. Sekerka, and C. M. Wayman, ed. , TMS-AIME, Warrendale, PA, 1983, P. 371
- 16 Van der Merwe J. H, J. Appl. phys. , 1963, 34, 117, 123, 3420
- 17 Kinsman K. R, Eichen E and Aaronson H. I, Met. Trans. , 1975, 6A, 303
- 18 Christian J. W and Crocker A. G.; Dislocations in Solids, F. R. N. Nabarro ed. , vol. 3, North-Holland, Amsterdam, 1980
- 19 Sandvik B. P. J and Wayman C. M, Met. Trans. , 1983, 14A, 809
- 20 Rigsbee J. M and Aaronson H. I, Acta Metal. , 1979, 27, 365