

B2 结构 Fe₃Al 单晶在室温拉伸过程中的取向转动*

郑为为 杨王玥

孙祖庆

(北京科技大学材料科学与工程学院, 北京 100083) (北京科技大学新金属材料国家重点实验室, 北京 100083)

摘要 借助于 EBSD 方法, 研究了 8 个位向 B2 结构 Fe₃Al 单晶室温拉伸变形时晶体取向的转动. 结果表明, 无论原始取向如何, 在拉伸过程中晶体拉伸轴总会向着 <110> 方向转动, 也即 <110> 为稳定取向. 当晶体拉伸轴转向取向三角形中部的软取向时, 晶体表现为几何软化、相应的加工硬化率较低. 反之, 当晶体拉伸轴转向 <001>-<101> 对称线时, 晶体表现为几何硬化, 相应的加工硬化率较高. 当拉伸轴处于软取向时, 单晶试样的板面转向 ($\bar{1}11$), 而当拉伸轴处于硬取向时, 板面转向 ($\bar{1}10$). 晶体拉伸轴向 <110> 的转动与多晶 Fe₃Al 基合金 {001}<110> 织构相对应; 板面向 ($\bar{1}11$) 的转动与 {111} 织构对应; 板面向 ($\bar{1}10$) 的转动则对应 {110}<001> 的剪切织构.

关键词 Fe₃Al, 单晶, 转动
中图分类号 TG132.3

B2 结构, 拉伸, 晶体取向, 织构
文献标识码 A **文章编号** 0412-1961(2000)11-1161-04

THE ROTATION OF THE B2-ORDERED Fe₃Al SINGLE CRYSTAL DURING ROOM TEMPERATURE TENSILE

ZHENG Weiwei, YANG Wangyue

School of Materials Science & Engineering, University of Science & Technology Beijing, Beijing 100083

SUN Zuqing

The State Key Laboratory for Advanced Metals and Materials, University of Science & Technology Beijing, Beijing 100083

Correspondent: YANG Wangyue, Tel: (010)62393990, Fax: (010)62392396,

E-mail: zqsun@midwest.com.cn

Manuscript received 2000-04-24, in revised form 2000-07-27

ABSTRACT The rotation of the tensile axis of B2-ordered Fe₃Al single crystals with various orientations was investigated, whatever the tensile axis of the specimen is, it would always rotate towards orientation <110>, showing the orientation <110> to be the stable orientation for this kind of crystals. The crystals whose tensile orientations rotated to the middle part of the orientation triangle exhibit low work-hardening rate, and the plate surface orientations rotate to ($\bar{1}11$). When tensile axis rotated to the highly symmetrical orientation the crystal has very high work-hardening rate, and the plate surface orientations rotate to ($\bar{1}10$). Rotations of the tensile axis towards <110> correspond to the formation of {001}<110> fiber texture of the B2-ordered Fe₃Al polycrystal; rotations of the plate surface towards ($\bar{1}11$) correspond to the {111} texture; rotations of the plate surface towards ($\bar{1}10$) correspond to the shear texture {110}<001>.

KEY WORDS Fe₃Al, single crystal, rotation

单晶体在外应力作用下发生滑移塑性变形时, 受外界条件约束, 会使晶体发生转动. Orlans-Joliet 和 Driver 等^[1]研究了 bcc 结构 Fe₃Si 单晶平面应变压缩条件下的晶体转动, 发现压缩后单晶表面倾向于与 {111} 平行. 有关 bcc 金属拉伸塑性变形行为的研究大多是评价分切应

力-切应变曲线^[2]及一些高对称取向的应力-应变特征的^[3], 而对晶体转动研究还较少. B2 结构是 bcc 衍生的有序结构. 对 B2 结构 FeAl^[4]及 Fe₃Al^[5]的研究表明, 它变形时的滑移方向与 bcc 金属相同为 <111> 方向, 滑移面为 {110}, {112} 或 {123}. Mao 和 Sun 对 Fe-28Al-4Cr(原子分数, %, 下同)合金 B2 相区轧制织构的研究表明^[6], Fe₃Al 基合金的轧制织构与 bcc 金属的冷轧织构大致相同, 晶粒取向集中在 α 线和 γ 线. 在 α 线上所有晶粒都有一个 <110> 方向平行于轧向, 在 γ 线上所

* 国家自然科学基金资助项目 59681005

收到初稿日期: 2000-04-24, 收到修改稿日期: 2000-07-27

作者简介: 郑为为, 女, 1972 年生, 博士生

① 1161-1164

TG132.32

TG115.52

有晶粒都有一个 $\langle 111 \rangle$ 方向平行于板法向, 但不同之处在于 Fe_3Al 基合金中还存在 $\{112\}\langle 111 \rangle$ 与 $\{110\}\langle 001 \rangle$ 的剪切织构, 而且研究发现 B2 相区热机械处理后的 Fe_3Al 合金室温下的屈服强度、延伸率、断裂应力都有较大幅度提高^[7]. 这一工艺除了改变晶粒形状及形成氧化膜和贫 Al 层等抑制氢脆之外^[8], 轧制过程中形成的 $\{001\}$ 和 $\{111\}$ 织构对材料力学性能也有重要影响^[9]. 这表明塑性变形时晶体点阵的再取向对提高材料的强度、韧性, 改善加工性具有重要意义.

本文将借助于 EBSD (electron back scattered diffraction) 方法, 研究 B2 结构 Fe_3Al 单晶在室温真空条件下拉伸时的晶体转动, 旨在发现 B2 结构单晶拉伸变形时晶体转动的规律, 并考察其与多晶体形变织构的联系, 以期进一步了解晶体转动与材料宏观力学性能之间的关系.

1 实验方法

采用高纯 Fe 和 Al 真空感应熔炼成 Fe_3Al 母合金. 用 Bridgeman 定向凝固法制成 Fe_3Al 单晶. 单晶经 $1050\text{ }^\circ\text{C}$ 48 h 均匀化退火后, 分析其成分 (原子分数, %, 下同) 为 Fe-30Al. 用极图法测定单晶铸锭的位向, 再用线切割方法把单晶加工成工作标距为 $10\text{ mm} \times 3\text{ mm} \times 1.5\text{ mm}$ 的拉伸试样. 试样先经磨光后, 再置于 $700\text{ }^\circ\text{C}$ 保温 2 h, 油淬, 进行 B2 有序化处理. 用 1:13 的硫酸甲醇电解抛光 (电压为 12 V, 温度为 293 K), 以消除表面残余应力及降低缺口敏感性. 单晶试样在 Gleeble 1500 热模拟机上进行室温真空拉伸变形, 形变速率为 2 mm/min , 真空度为 0.5 Pa . 在扫描电镜下, 用 EBSD 方法测定拉断样品标距部分由断口到肩部的位向改变, 包括板面法线方向及试样拉伸轴方向.

2 实验结果与讨论

2.1 晶体取向转动

晶体在轴向拉应力 σ_A 作用下发生滑移塑性变形时, 能使晶体滑移的力是外力在滑移系上的分切应力 $\tau_R, \tau_r = \sigma_A \cdot \cos \phi \cdot \cos \lambda$, 其中 ϕ 是滑移面法线与外力轴的夹角, λ 是滑移方向与外力轴的夹角. 表 1 列出了 8 个不同取向试样的初始滑移系、Schmid 因子最大的 $\{110\}\langle 111 \rangle$ 滑移系及 λ_0 和 ϕ_0 . 图 1 在取向三角形中标出了各单晶样品拉伸前后的拉伸轴 $[uvw]$ 方向. 结果表明, 在所有实验的 8 个取向单晶中, 取向 1, 2, 3, 6 和 8 的单晶初始开动的滑移系均为 Schmid 因子最大的滑移系, 符合 Schmid 定律; 而取向 4, 5 和 7 的单晶初始滑移系不是 Schmid 因子最大的滑移系, 不符合 Schmid 定律. 由图 1 可以看出, 取向 1, 2, 3 和 8 分别在各自的取向三角形中向 $\langle 001 \rangle$ - $\langle 101 \rangle$ 对称线转动. 在 $\langle 001 \rangle$ - $\langle 101 \rangle$ - $\langle 111 \rangle$ 取向三角形中, 当外力达到临界分切应力时, $(011)[\bar{1}\bar{1}1]$

表 1 初始滑移系、Schmid 因子最大的滑移系、 λ_0 和 ϕ_0
Table 1 The initial slip system, the maximum resolved shear stress (MRSS) slip system, λ_0 and ϕ_0

Orientation number	The initial slip system	The maximum resolved shear stress (MRSS) slip system	λ_0 deg.	ϕ_0 deg.
1	$(011)[\bar{1}\bar{1}1]$	$(011)[\bar{1}\bar{1}1]$	53	37
2	$(011)[\bar{1}\bar{1}1]$	$(011)[\bar{1}\bar{1}1]$	49	38
3	$(011)[\bar{1}\bar{1}1]$	$(011)[\bar{1}\bar{1}1]$	55	39
4 ¹⁾	$(101)[\bar{1}\bar{1}1]$	$(011)[\bar{1}\bar{1}1]$		
5 ¹⁾	$(110)[\bar{1}\bar{1}1]$	$(101)[\bar{1}\bar{1}1]$		
6	$(011)[\bar{1}\bar{1}1]$	$(011)[\bar{1}\bar{1}1]$	41	60
7 ¹⁾	$(011)[\bar{1}\bar{1}1]$	$(101)[\bar{1}\bar{1}1]$		
8	$(110)[\bar{1}\bar{1}1]$	$(110)[\bar{1}\bar{1}1]$	63	32

1) means that the initial slip system is not the MRSS slip system

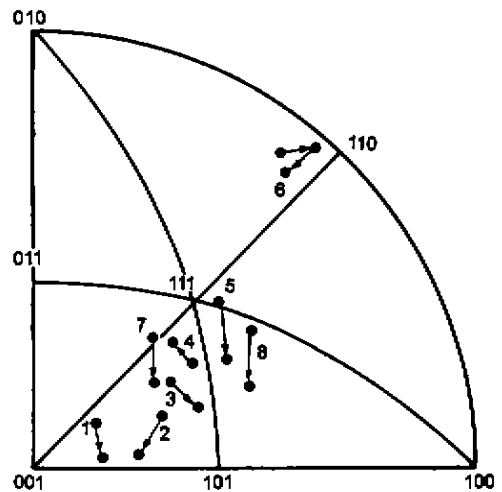


图 1 8 个取向单晶拉伸轴 $[uvw]$ 的转动

Fig.1 Stereographic triangle showing the rotation of tensile axis $[uvw]$

具有最大 Schmid 因子, 它优先开动. 此时力轴的旋转是沿大圆向 $[\bar{1}\bar{1}1]$ 方向转动. 当拉伸轴转动到达 001 - 101 线上时, 另一个 $(0\bar{1}1)[111]$ 共轭滑移系会开动, 使得晶体沿不同的大圆向 $[111]$ 方向转动. 这两个滑移系共同作用使力轴沿 001 - 101 对称线向 $[101]$ 方向转动. 当力轴到达 $[101]$ 时, 这两个滑移系引起的转动处在同一大圆面, 晶体取向达到稳态, 也即 $[101]$ 为稳定取向. 取向 6 单晶的起始拉伸轴距离 $[110]$ 为 8.4° , 最初晶体的转动是向着 $[110]$ 方向, 但它并不是一直转到 $[110]$ 位向, 而是在距 $[110]$ 约 4.8° 时转而远离 $[110]$, 这可能是共轭滑移系 $(0\bar{1}1)[111]$ 开动的结果. 这里有三个取向例外: (1) 位于 001 - 101 - 111 中的取向 4 不是转向 $[101]$ 而是转向 $[011]$ 方向; (2) 位于 111 - 110 - 100 中的取向 5 不向 $[110]$ 转动而是向 $[101]$ 转动; (3) 位于 001 - 011 - 111 三角形内

表 2 各位向变形中开动的滑移系的 Schmid 因子变化
Table 2 The variation of Schmid factors of activated slip systems in all orientations and workhardening rate

Orientation	The variation of Schmid factors of activated slip systems		Workhardening rate, MPa
	Primary slip system	Other operative slip systems	
1	(011) $\uparrow_{0.476}^{0.494}$	(0 $\bar{1}1$) $\uparrow_{0.436}^{0.482}$	900
2	(011) \leftrightarrow	(101) $\uparrow_{0.278}^{0.302}$; (110) \leftrightarrow	736
3	(011) \leftrightarrow	(132) $\uparrow_{0.467}^{0.494}$; (110) $\uparrow_{0.352}^{0.405}$	901
4	(011) $\downarrow_{0.367}^{0.396}$	(110) $\downarrow_{0.319}^{0.367}$; (101) $\uparrow_{0.253}^{0.315}$	1145
5	(110) $\uparrow_{0.30}^{0.41}$		568
6	(011) $\downarrow_{0.455}^{0.465}$	(123) \leftrightarrow ; (112) \leftrightarrow ; (213) \leftrightarrow ; (0 $\bar{1}1$) $\downarrow_{0.392}^{0.428}$	1239
7	(011) $\uparrow_{0.348}^{0.445}$	(110) $\uparrow_{0.275}^{0.326}$; (101) $\downarrow_{0.34}^{0.37}$	739
8	(110) $\uparrow_{0.385}^{0.455}$		651

Note: \uparrow means the increase of Schmid factor; \downarrow means the decrease of Schmid factor; \leftrightarrow means the unchanging of Schmid factor

非常接近 001-111 对称线的取向 7 跨过对称线进入 001-101-111 三角形, 向 [101] 方向转动. 从表 1 中可以看到这三个位向的初始滑移系不是 Schmid 因子最大的滑移系, 实际测定的转动方向就是其初始滑移方向.

由以上的分析可以发现, 无论单晶体的初始位向如何, 其变形是否符合 Schmid 定律, 拉伸变形后拉伸轴的最终取向趋向于 $\langle 110 \rangle$, 也即 $\langle 110 \rangle$ 为稳定取向.

2.2 几何硬化与软化

表 2 列出了根据样品表面和侧面滑移线标定的各位向样品变形过程中开动的滑移系及其在拉伸变形前后 Schmid 因子的变化以及各取向单晶室温真空条件下的拉伸性能^[10]. 可以看到, 取向 1, 2, 3, 5, 7 和 8 主滑移系的 Schmid 因子或不变或增大; 取向 4 和 6 的主滑移系的 Schmid 因子则减小. 滑移系 Schmid 因子增大表明晶体取向向着有利于已开动滑移系滑移的方向转动, 材料表现为几何软化, 具有较低的加工硬化水平 (取向 1, 2, 3, 5, 7 和 8); 滑移系的 Schmid 因子减小表明晶体取向转向不利于已开动滑移系滑移的方向, 已开动滑移系要维持位错运动必须增加应力, 材料表现为几何硬化, 具有高的加工硬化率 (取向 4 和 6). 这种几何硬化与应变硬化不同, 它不涉及位错之间的交互作用^[11]. 当晶体的变形符合 Schmid 定律 (即初始变形发生在 Schmid 因子最大的滑移系上) 时, 几何硬化和软化与初始位向条件下 λ_0 和 ϕ_0 的相对值有关. 表 1 中显示取向 1, 2, 3 和 8 在初始位向条件下 $\lambda_0 > 45^\circ > \phi_0$, 晶体取向转动使得初始滑移系的 Schmid 因子增加, 屈服后晶体的塑性变形可以在低应力水平上进行, 材料表现为几何软化. 相反的, 取向 6 初始条件下 $\phi_0 > 45^\circ > \lambda_0$, 旋转使初始滑移系的 Schmid 因子减小, 在初始滑移系上要维持变形, 必须提高应力, 材料表现为几何硬化. 这里需要注意的是取向 6 出现在了 [110] 附近的摆动, 这是由于该位向条件下, 初始开动的滑

移系为 (011)[11 $\bar{1}$], 拉伸轴向 $[\bar{1}11]$ 方向转动. 在力轴转到 [110] 之前, 共轭滑移 (0 $\bar{1}1$)[111] 出现, 使得拉伸轴开始向 [111] 转动. 这有些类似于 fcc 金属的“超射”现象, 但与 fcc 金属不同的是, 共轭滑移系提前出现, 似乎是共轭滑移的潜在硬化与初始滑移的硬化相比较要小得多.

2.3 晶体取向转动与多晶织构的关系

图 2 为本文研究的 8 个取向单晶拉伸变形后, 试样板面 (hkl) 法线方向的转动. 可以看到, 除取向 4 和 6 的板面转向 ($\bar{1}10$) 外, 其它取向单晶的板面或变化很小或转向 ($\bar{1}11$). 多晶合金包含了不同取向的晶粒, 轧制织构是一种择优取向, 反映出在应力作用下不同取向晶粒的转动方向. Mao 等^[6] 对 Fe₃Al 基合金轧制及再结晶织构的研究指出, Fe-28Al-2Cr 在 B2 相区轧制变形时, 正常的轧制织构为 {111} $\langle 112 \rangle$ 和 {001} $\langle 110 \rangle$. 但在大剪切应力作用下, 晶粒取向变化引起不同 Schmid 因子的滑移系

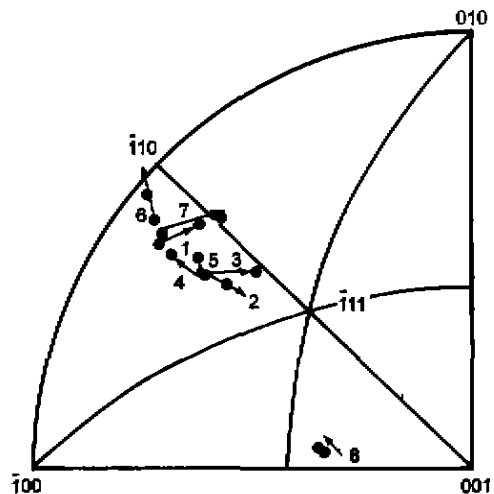


图 2 8 个取向单晶板面 (hkl) 法线的转动

Fig.2 Stereographic triangle showing the rotation of the plate surface (hkl)

开动,从而导致“约束变形”,会形成 $\{110\}\langle 001\rangle$ 剪切织构。取向4和6单晶在初始滑移系作用下晶体取向转向 $001-111-110$ 线上的高对称位置,诱发不同Schmid因子的滑移系开动,出现多系滑移,与多晶轧制中的约束变形相似,它们的板面 (hkl) 都转向 $(\bar{1}10)$ 。单晶体拉伸变形时拉伸轴向 $\langle 110\rangle$ 的转动与多晶 $\{001\}\langle 110\rangle$ 织构相似,板面趋向于 $(\bar{1}11)$ 的转动则与多晶 $\{111\}$ 织构相对应,而板面向 $(\bar{1}10)$ 转动对应 $\{110\}\langle 001\rangle$ 的剪切织构。

3 结论

(1) B2结构 Fe_3Al 单晶室温拉伸变形时,不论单晶体初始位向如何,其变形是否符合Schmid定律,晶体拉伸轴均趋于向 $\langle 110\rangle$ 方向转动, $\langle 110\rangle$ 为稳定取向。但当取向接近于 $\langle 110\rangle$ 方向时又远离 $\langle 110\rangle$ 方向,形成在 $\langle 110\rangle$ 方向附近的摆动。这种摆动是多系滑移的结果。

(2) 当晶体拉伸轴转向取向三角形中部的软取向时,晶体表现为几何软化,相应的加工硬化率较低。反之,当晶体拉伸轴转向对称线时,晶体表现为几何硬化,相应的加工硬化率较高。

(3) 当拉伸轴处于软取向时,单晶试样的板面转向 $(\bar{1}11)$ 。而拉伸轴处于硬取向时,单晶试样的板面向 $(\bar{1}10)$ 转动。

(4) B2结构 Fe_3Al 单晶合金拉伸塑性变形时,晶体拉伸轴向 $\langle 110\rangle$ 的转动与多晶 Fe_3Al 基合金 $\{001\}\langle 110\rangle$ 织构相对应;板面向 $(\bar{1}11)$ 的转动与 $\{111\}$ 织构对应;

板面向 $(\bar{1}10)$ 的转动则对应 $\{110\}\langle 001\rangle$ 的剪切织构。

感谢刘庆、黄晓旭和朱国辉博士在本晶体取向测试中给予的大力协助。

参考文献

- [1] Orlans-Joliet B, Driver J H, Montheillet F. *Acta Metall Mater*, 1990; 38: 581
- [2] Keh A S. *Philos Mag*, 1965; 12: 9
- [3] Carpay F M A, Chin G Y, Mahajan S, Rubin J J. *Acta Metall*, 1975; 23: 1473
- [4] Yoshimi K, Hanada S. In: Darolia R, Lenvandowski J J, Liu C T, Martin P L, Miracle D B, Nathal M Y eds, *Structural Intermetallics*, Warrendale, Pennsylvania: The Mineral, Metals & Materials Society, 1993: 475
- [5] Mckamey C G, Devan J H, Tortorell P H, Sikka V K. *J Mater Res*, 1991; 6: 1779
- [6] Mao W M, Sun Z Q. *Scr Metall Mater*, 1993; 29: 217
- [7] Sun Z Q, Huang Y D, Yang W Y, Chen G L. *Mater Res Soc Symp Proc*, 1993; 288: 885
- [8] Sun Z Q, Huang Y D, Yang W Y, Mao W M, Chen G L. *Acta Metall Sin*, 1993; 29: A354
(孙祖庆, 黄原定, 杨王玥, 毛卫民, 陈国良. 金属学报, 1993; 29: A354)
- [9] Sun Z Q, Mao W M. *Acta Metall Sin (Eng Lett)*, 1995; 8: 369
- [10] Zheng W W, Yang W Y, Liu Q, Sun Z Q. *Acta Metall Sin*, 1998; 34: 1137
(郑为为, 杨王玥, 刘庆, 孙祖庆. 金属学报, 1998; 34: 1137)
- [11] Hertzberg R W. *Fracture Mechanics of Engineering Materials*. 2nd ed, New York: Wiley, 1983: 88