

CNIC-01491
SINRE-0092

Isaichev取向关系的矩阵分析
MATRIX ANALYSIS ON ISAICHEV
ORIENTATION RELATIONSHIP
(In Chinese)

中国核情报中心
China Nuclear Information Centre

CNIC-01491
SINRE-0092

Isaichev取向关系的矩阵分析

盛钟琦 萧 洪

(中国核动力研究设计院, 成都, 610041)

摘 要

借助电镜观察了粒状贝氏体小岛回火析出的渗碳体与铁素体之间的取向关系, 利用取向关系转换矩阵特征值和特征向量的计算, 对 Isaichev 关系作了分析。结果表明 Isaichev 关系确实是 Kurdjumov-Sachs(K-S)关系与 Pitsch 关系的复合, 从而确认了这一取向关系下渗碳体析自奥氏体而不是铁素体的观点。同时矩阵计算也说明了珠光体转变中奥氏体、铁素体和渗碳体之间所报道的取向关系是不能同时成立的。

Matrix Analysis on Isaichev Orientation Relationship (*In Chinese*)

SHENG Zhongqi XIAO Hong
(Nuclear Power Institute of China, Chengdu, 610041)

ABSTRACT

By means of TEM technique the orientation relationships of cementite, precipitated from islands of granular bainite during tempering, with ferrite have been observed. By calculating the eigenvalue and eigenvector of transformation matrix, Isaichev relationship has been analyzed. The results indicate that Isaichev relationship indeed is the sum of Kurdjumov-Sachs relationship and Pitsch relationship, so the viewpoint that the cementite with Isaichev relationship precipitates from austenite, in stead of ferrite, is confirmed. Moreover, the matrix calculation shows that three reported orientation relationships among austenite, ferrite and cementite in pearlitic transformation cannot be simultaneously valid.

前言

铁碳合金在回火时析出渗碳体，已发现它与铁素体之间有两种取向关系，即 Bagaryatskii 关系和 Isaichev 关系。尽管两者间的角度差很小，但由于涉及到渗碳体的析出机理而受到了广泛的重视。已有文献用极图法针对 Isaichev 关系的一种空间取向作了分析，由其结果提出了它是 K-S 关系和 Pitsch 关系的复合^[1]，从而认为当具有 Isaichev 关系时渗碳体析自奥氏体而不是析自铁素体，其析出后奥氏体才发生相变成为铁素体，这在机理上不同于析自铁素体的具有 Bagaryatskii 关系的渗碳体。但是 K-S 关系有24种空间取向，另一种观点认为并不是所有取向都能满足上述说法，因此这个问题还未最后定论^[2]。结合电镜观察，本工作利用矩阵计算对 Isaichev 关系作了分析，在此基础上还对珠光体转变中奥氏体、铁素体和渗碳体之间所报道的取向关系作了讨论。

1 试验和计算方法

所用材料为反应堆压力容器用20MnNiMo钢（相当美国SA508C钢），它在正常热处理条件下（加热温度880 °C，冷却速度100~200 °C/min，回火温度650 °C）具有粒状贝氏体组织，该组织由板条状铁素体基体和其间的小岛组成，回火前小岛由于富碳程度不同而具有不同的显微组织，大多数小岛为位错马氏体组织，只有少数富碳程度很高的小岛才具有孪晶马氏体或奥氏体组织^[3]。回火时岛状组织分解析出渗碳体，分解前具有不同组织的小岛其转变动力学也不相同，所以这些小岛的回火组织适于进行渗碳体不同取向关系的研究。利用透射电镜对小岛内析出的渗碳体作了观察，以电子衍射分析确定了小岛中渗碳体和铁素体基体之间的取向关系。

利用自编计算机程序进行了取向关系的矩阵计算，首先计算了 Isaichev 取向关系全部空间取向的转换矩阵及其特征值和特征向量，对其所有空间取向可得到具有24种不同特征值和特征向量的转换矩阵。接着依据渗碳体先以 Pitsch 关系从奥氏体中析出，奥氏体再按K-S 关系的24种空间取向转变成铁素体，从而求出其复合后全部转换矩阵的特征值和特征向量。通过比较这两组计算结果的对应值，并联系透射电镜的观察结果，来确定 Isaichev关系是否是 K-S 关系与 Pitsch 关系的复合。进而对所报道的珠光体转变中取向关系作了类似计算，以讨论其可能性。

2 结果和讨论

2.1 粒状贝氏体小岛回火时渗碳体的析出

试样经回火后可观察到小岛中析出了渗碳体，它与铁素体基体之间有两种明显不同的取向关系，大多数小岛中渗碳体与铁素体基体之间为 Bagaryatskii 关系：

$$(100)_c // (110)_\alpha \quad [010]_c // [\bar{1}\bar{1}1]_\alpha$$

少数小岛为 Isaichev 关系（见图1）：

$$(103)_c // (011)_\alpha \quad [010]_c // [\bar{1}\bar{1}1]_\alpha$$

共观察了57个小岛，其中具有Isaichev关系的小岛只有两个，其余55个小岛（包括3个孪晶马氏体小岛和52个位错马氏体小岛）均为 Bagaryatskii 关系，与回火前大多数小岛有位错马氏体组织而孪晶马氏体小岛及奥氏体小岛都很少的观察结果^[3]相比较，说明具有

Isaichev关系的渗碳体应该来自奥氏体小岛，因而电镜观察支持了与铁素体基体有Bagaryatskii关系时渗碳体析自铁素体，而有 Isaichev 关系时析自原奥氏体的观点。

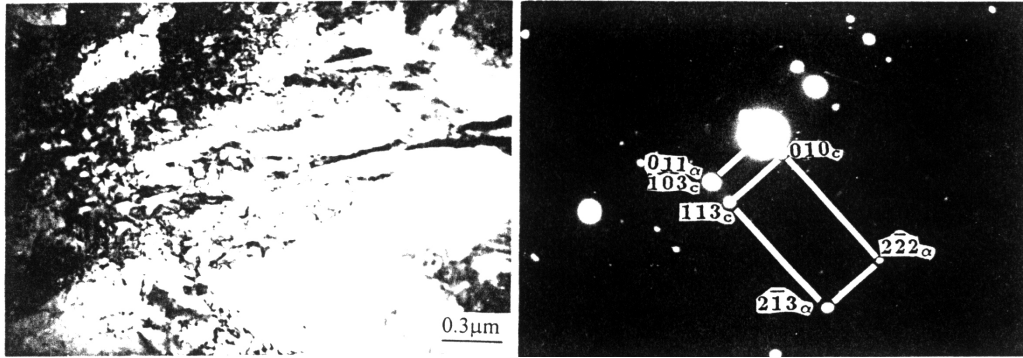


图1 按Isaichev关系析出的渗碳体及其电子衍射谱

2.2 Isaichev 关系的矩阵计算

根据晶面和晶向间的平行关系及有关晶格常数，可以得到 Isaichev 关系的转换矩阵：

$$\Phi_1 = \begin{pmatrix} -1.1542 & -0.0805 & 1.0737 \\ 1.0249 & -1.0249 & 1.0249 \\ 0.8546 & 1.9170 & 1.0624 \end{pmatrix} \quad (1)$$

表1 Isaichev关系转换矩阵的特征值和特征向量

No	特征值	特征向量	No	特征值	特征向量
1	2.2815	(0.0642 0.2773 0.9586)	13	1.8354	(0.6323 0.4520 0.6292)
2	2.2766	(0.1134 0.2623 0.9583)	14	1.8008	(0.6709 0.4556 0.5851)
3	2.1463	(0.2784 0.3757 0.8840)	15	1.7912	(0.3313 0.8841 0.3296)
4	2.1120	(0.3227 0.3876 0.8635)	16	1.7821	(0.3495 0.8859 0.3050)
5	2.0528	(0.4975 0.1204 0.8591)	17	1.7210	(0.5026 0.8606 0.0819)
6	2.0361	(0.4162 0.4039 0.8147)	18	1.7144	(0.7595 0.4857 0.4327)
7	2.0051	(0.5503 0.0945 0.8296)	19	1.7138	(0.5275 0.8485 0.0428)
8	2.0047	(0.4917 0.3290 0.8062)	20	1.7020	(0.7382 0.5692 0.3621)
9	2.0027	(0.0307 0.7077 0.7058)	21	1.6905	(0.8678 0.1486 0.4742)
10	1.9857	(0.0019 0.7305 0.6829)	22	1.6633	(0.8934 0.1844 0.4098)
11	1.8782	(0.1794 0.8368 0.5173)	23	1.6206	(0.8952 0.4124 0.1692)
12	1.8663	(0.1987 0.8456 0.4955)	24	1.6096	(0.9130 0.3950 0.1023)

从不同空间取向的 Isaichev 关系共得到24种转换矩阵，它们的特征值（另有两个虚根舍去）和特征向量的计算结果见表1。每一个特征值下都有4个不同的特征向量，其三个组元的排列次序不变，只是正负号不同。

2.3 Isaichev 关系是 K-S 关系和 Pitsch 关系的复合

K-S 关系为：

$$(\bar{1}01)_\alpha // (111)_\gamma \quad [1\bar{1}1]_\alpha // [0\bar{1}1]_\gamma$$

Pitsch 关系为：

$$(455)_\gamma // (100)_c \quad [0\bar{1}1]_\gamma // [010]_c$$

由此可以得到其复合后的转换矩阵为：

$$\Phi_{\text{KS+P}} = \begin{pmatrix} -1.1752 & -0.1295 & 1.0457 \\ 1.0249 & -1.0249 & 1.0249 \\ 0.7883 & 1.9111 & 1.1227 \end{pmatrix} \quad (2)$$

表2 K-S 关系与 Pitsch 关系复合后转换矩阵的特征值和特征向量

No	特征值	特征向量	角度差/(°)	备注
1	2.2817	(0.0493 0.2817 0.9582)	0.89	
2	2.2738	(0.1286 0.2576 0.9577)	0.91	
3	2.1563	(0.2648 0.3719 0.8897)	0.87	
4	2.1011	(0.3361 0.3911 0.8568)	0.88	
5	2.0670	(0.4813 0.1279 0.8672)	1.12	
6	2.0433	(0.3939 0.4242 0.8154)	1.73	
7	2.0078	(0.0413 0.7002 0.7128)	0.84	表1 No. 9
8	1.9927	(0.5151 0.3034 0.8016)	2.01	
9	1.9902	(0.5662 0.0862 0.8198)	1.17	表1 No. 7
10	1.9806	(0.0112 0.7369 0.6759)	0.76	
11	1.8820	(0.1734 0.8339 0.5239)	0.54	
12	1.8628	(0.2044 0.8481 0.4889)	0.52	
13	1.8463	(0.6203 0.4506 0.6420)	1.01	
14	1.7940	(0.3258 0.8833 0.3370)	0.53	表1 No. 15
15	1.7906	(0.6824 0.4563 0.5711)	1.04	表1 No. 14
16	1.7794	(0.3551 0.8863 0.2973)	0.55	
17	1.7233	(0.4952 0.8637 0.0933)	0.80	
18	1.7195	(0.7644 0.4573 0.4545)	2.07	
19	1.7117	(0.5354 0.8441 0.0302)	0.89	
20	1.6998	(0.8589 0.1376 0.4932)	1.36	表1 No. 21
21	1.6994	(0.7304 0.5917 0.3411)	1.82	表1 No. 20
22	1.6559	(0.9001 0.1952 0.3896)	1.37	
23	1.6247	(0.8889 0.4171 0.1893)	1.22	
24	1.6071	(0.9176 0.3890 0.0815)	1.27	

复合后的转换矩阵也有24种。表2列出了它们的特征值和特征向量的计算结果，还有每个特征向量与 Isaichev 关系对应值的角度差，与表1相比有6个值的对应编号稍有偏移，列在备注中。众所周知，在坐标变换时不同向量的方向和长度变化并不一样，所以应当采用在坐标变换中唯一方向不变的特征向量来进行比较。

其中第21项就是文献[1]所用的取向关系。由表2可以看出，K-S 关系和 Pitsch 关系复合后转换矩阵的特征向量与 Isaichev 关系对应值之间的角度差很小，24对值中有半数的差别在1° 以下，只有2对的角度差略大于2° ，所以可以认为这两组转换矩阵是相同的。事实上对应转换矩阵（例如式 (1) 和式 (2)，它们分别是表1和表2的第3项）的各组元都很接近。对照电镜观察结果，计算说明了 Isaichev 关系确实是K-S关系和 Pitsch 关系的复合，从而进一步支持了具有 Isaichev 关系的渗碳体析自奥氏体的观点。

也对西山关系进行了同样的计算，其复合后转换矩阵的特征向量与Isaichev关系对应值之间的角度差较大，24对值中有18对的差别大于2° (最大的一组超过5°)，只有2对的角度差在1° 以下。

2.4 关于珠光体转变的取向关系

目前普遍认为，珠光体转变中在两奥氏体晶粒的晶界上形核的渗碳体与其中一个奥氏体晶粒有 Pitsch 取向关系，晶界上形核的铁素体与该奥氏体晶粒则为 K-S 取向关系，它们一起向晶界另一侧的奥氏体晶粒内部长大，铁素体和渗碳体之间为 Pitsch-Petsch 关系^[2, 4]。尽管它们几乎同时从奥氏体中析出这点与 Isaichev 关系的情况有所不同，但其间的取向关系仍是源于它们与奥氏体的取向关系，所以如果珠光体转变中三相间这一关系成立的话，Pitsch-Petsch 关系也会是 K-S 关系和 Pitsch 关系的复合。

Pitsch-Petsch 关系为：

$$(131)_\alpha // (100)_\gamma \quad [1\bar{2}5]_\alpha // [001]_\gamma$$

Pitsch-Petsch关系的转换矩阵为：

$$\Phi_{p-p} = \begin{pmatrix} 0.4759 & 1.4277 & 0.4759 \\ -1.6613 & 0.3909 & 0.4886 \\ 0.4295 & -0.8590 & 2.1475 \end{pmatrix} \quad (3)$$

表3是其全部转换矩阵特征值和特征向量的计算结果。

对照表1可以明显看出，它与 Isaichev 关系是完全不同的。既然已经证明 Isaichev 关系是 K-S 关系和 Pitsch 关系的复合，与之完全不同的 Pitsch-Petsch 关系就不可能是这两种关系的复合了。计算表明表2和表3的结果相差很远，两组对应特征向量的角度差大多数超过了10° 。事实上对应的转换矩阵也完全不同，这由比较式(2)和式(3)（它在表3中也是第3项）就可看出。由此看来，珠光体转变中所报道三相间的上述取向关系是不可能同时成立的。

表3 Pitsch–Petch关系转换矩阵的特征值和特征向量

No	特征值	特征向量	No	特征值	特征向量
1	2.3154	(0.1388 0.1073 0.9845)	13	1.8246	(0.4647 0.7261 0.5067)
2	2.3088	(0.0579 0.2122 0.9755)	14	1.8220	(0.0333 0.9383 0.3442)
3	2.2553	(0.2683 0.0133 0.9632)	15	1.7975	(0.7510 0.1780 0.6359)
4	2.0853	(0.1850 0.5526 0.8127)	16	1.7785	(0.1258 0.9828 0.1351)
5	2.0649	(0.4935 0.0265 0.8694)	17	1.7656	(0.2037 0.9790 0.0065)
6	2.0595	(0.3965 0.3863 0.8328)	18	1.7446	(0.7346 0.4590 0.4997)
7	1.9839	(0.2473 0.6620 0.7075)	19	1.7317	(0.6367 0.6807 0.3621)
8	1.9751	(0.0106 0.7439 0.6682)	20	1.7242	(0.5644 0.7904 0.2380)
9	1.9052	(0.5506 0.4520 0.7018)	21	1.6482	(0.7803 0.6231 0.0527)
10	1.8978	(0.4807 0.5800 0.6577)	22	1.6250	(0.9454 0.0746 0.3173)
11	1.8961	(0.2306 0.7921 0.5651)	23	1.6007	(0.9677 0.1467 0.2050)
12	1.8773	(0.6166 0.3744 0.6925)	24	1.6006	(0.9324 0.3609 0.0222)

3 结论

(1) 电镜观察表明，粒状贝氏体的小岛因回火而析出了渗碳体，大多数小島中渗碳体与铁素体基体之间的取向为 Bagaryatskii 关系，只有少数小島为 Isaichev 关系。这与回火前大多数小島具有马氏体组织而奥氏体小島很少的观察结果相对应，从而支持了 Isaichev 关系下渗碳体析自奥氏体而不是铁素体的观点。

(2) 计算了 K-S 关系与 Pitsch 关系复合后得到的全部转换矩阵及其特征值和特征向量，并与从 Isaichev 关系所得到的对应值相比较，结果表明两者符合很好。因而进一步确认了 Isaichev 关系确实是 K-S 关系与 Pitsch 关系的复合，即在这一关系下渗碳体从奥氏体析出后奥氏体再相变为铁素体。

(3) 矩阵计算表明 Pitsch–Petch 关系和 Isaichev 关系是完全不同的，计算表明它和 K-S 关系与 Pitsch 关系复合的结果相差很远，这说明珠光体转变中奥氏体、铁素体和渗碳体三相间所报道的取向关系不可能同时成立。

参 考 文 献

- 1 Huang D, Thomas G. Metallography of Bainitic Transformation in Silicon Containing Steels. Met. Trans., 1977, 8A: 1661
- 2 戚正风. 金属热处理原理. 北京: 机械工业出版社, 1987. 48, 118
- 3 Sheng Z, Xiao H, Peng F, Zou M. Refinement of Grain Structure of 20MnNiMo (SA508C) Steel. China Nuclear Science & Technology Report, CNIC-01154, SINRE-0076. 北京: 原子能出版社, 1997. 5
- 4 Honeycombe R W K. Steels Microstructure and Properties. London: Edward Arnold Ltd, 1981. 43



盛钟琦: 中国核动力研究设计院核燃料及材料国家级重点实验室研究员, 1966年毕业于华中理工大学, 1991年作为高级访问学者赴德国斯图加特大学工作。

SHENG Zhongqi: Professor of National Key Laboratory for Nuclear Fuel and Materials of Nuclear Power Institute of China, graduated from Huazhong University of Science and Technology in 1966, and worked in Stuttgart University as a senior visiting scholar in 1991.