

“Mg 合金中 Mg_2Sn 析出相多重位向关系的再认识”拓展补充材料

罗旭¹ 石章智^{2,3} 顾新福² 王卫国¹ 陈松¹ 张文征^{1,4}

1 福建理工大学 材料科学与工程学院 福州 350118

2 北京科技大学 材料科学与工程学院 北京 100083

3 辽宁材料实验室材料智能技术研究所 沈阳 110004

4 清华大学 材料科学与工程学院 北京 100084

Supplementary Material for

Revisit to Multiple Orientation Relationships of Mg_2Sn Precipitates in Mg Alloys

LUO Xu¹, SHI Zhangzhi^{2,3}, GU Xinfu², WANG Weiguo¹, CHEN Song¹, ZHANG Wenzheng^{1,4}

1 School of Materials Science and Technology, Fujian University of Technology, Fuzhou 350118, China

2 School of Materials Science and Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China

3 Institute of Materials Intelligent Technology, Liaoning Academy of Materials, Shenyang 110004, China

4 School of Materials Science and Engineering, Tsinghua University, Beijing 100084, China

边边匹配(edge-to-edge)模型^[1]提出了简单和易操作的预测沉淀相位向关系和择优界面的方法,已有较多成功应用的例子,但仍存在部分实验结果难以由该模型预测。近列匹配(near row matching)方法^[2]是继边边匹配模型之后提出的,其物理基础是满足界面形成择优态结构,基于这个要求可计算出沉淀相的初始位向关系和择优界面,后期位向关系和择优界面可能受位错结构优化的影响^[3]。近列匹配和边边匹配方法的第一步均为寻找 1 对匹配好的矢量,细节可能略有不同,但是本质相似。2 个方法的差异主要在于确定位向关系的第二步。

近列匹配方法的第二步是考查不同晶面上沿匹配好矢量格点列的间距。若一相的某晶面上列间距与另一相的差异小于一定判据,则让界面平行于这对晶面。根据界面上是否存在匹配好点团簇,判定界面是否存在择优态。如果是,则称这对晶面为匹配关联面。预测结果包括 1 个本征位向关系: 1 对平行匹配好矢量, 1 对平行匹配关联晶面(含近匹配列)。对于本工作所涉及的二次择优态体系,上述界面亦为存在二次择优态的界面。

边边匹配模型第二步为考查 2 相中含匹配好矢量的晶面间距,并以面间距差异小于一定判据作为条件选取 1 对晶面,该方法强调晶面的边必须与界面上匹配好矢量严格对齐。当

收稿日期 2024-11-21 定稿日期 2025-01-18

作者简介 罗旭,男,1999 年生,硕士生

通讯作者 王卫国, wang_weiguo@vip.163.com, 主要从事金属和无机非金属材料晶界工程研究
张文征, zhangwz@tsinghua.edu.cn, 主要从事金属材料固态相变组织形貌及晶体学研究

面间距并非精确相等时,要求2晶面间绕平行的匹配好矢量转动,于是平行于上述2晶面相干形成的Moiré面的界面上自然满足边边匹配要求。然而,对应不同转角可导致许多满足要求的界面,该模型早期^[1]对转角的约束是让跨不同层的来自两相的1对相同长度的矢量平行,这只能在特殊晶体常数条件下才成立。修正后的模型^[4]采用了1组 Δg 平行法则^[5]约束转角,可用于常规晶体常数下的边边匹配模型预测计算。所预测的位向关系为:1对平行匹配好矢量,含上述矢量1对晶面间距接近的晶面之间绕上述矢量转动,使1组 Δg 平行,满足边边匹配的界面垂直于该组 Δg 。

列匹配方法要求格点列存在界面上,同时允许格点列间存在少量错配,界面必须平行于2相的晶面。相比之下,边边匹配模型要求精确的边边匹配,匹配位置不必须存在格点列,所得的晶面通常具有无理取向特征。在这个意义上,列匹配方法和边边匹配模型的预测结果交集极为有限。当晶体常数非常特殊时,可在某界面上实现严格列匹配,因此终止于这些匹配列上的晶面必然遵循严格的边边匹配。该情况下,2种方法预测结果一致。常规情况下,界面上存在错配,实际位向关系可保持本征位向关系(比如各向同性、少量错配的情况),此时界面通常平行于低指数界面,该位向关系和界面取向不满足边边匹配条件。

近列匹配方法提供满足界面存在择优态的1个初始位向关系,在不破坏择优态的前提下允许实际位向关系在一定范围改变。位错结构的优化可使位向关系稍微偏离本征位向关系^[1],一种偏离是以匹配列为转轴实现1组 Δg 平行,界面垂直于平行的 Δg ,该结果通常与边边匹配模型预测结果一致。但实际系统中还存在以其他方向为转轴的转动,这些转动的结果不能由边边匹配模型预测。因此,结合位错结构优化的近列匹配方法,其理论结果能够解释更多的实验结果,相较于边边匹配模型更具普适性。

参考文献

- [1] Kelly P.M, Zhang M X. Edge-to-edge matching—A new approach to the morphology and crystallography of precipitates [J]. Mater. Forum, 1999, 23: 41
- [2] Zhang W Z, Sun Z P, Zhang J Y, et al. A near row matching approach to prediction of multiple precipitation crystallography of compound precipitates and its application to a Mg/Mg₂Sn system [J]. J. Mater. Sci., 2017, 52: 4253
- [3] Zhang W Z. Singular interfacial structures at two levels: Their roles in the development of phase transformation crystallography [J]. J. Phase Equilib. Diffus., 2024, 25: 256
- [4] Kelly P M, Zhang M X. Edge-to-edge matching model for predicting orientation relationships and habit planes-the improvements [J]. Scr. Mater., 2005, 52: 963
- [5] Zhang W Z, Weatherly G. On the crystallography of precipitation [J]. Prog. Mater. Sci., 2005, 50(2): 181