



基于 X 射线衍射的残余应力测量多参数 协同作用机制研究

谢瑞士, 李园利*, 马拥军

(西南科技大学 分析测试中心 核环境安全技术创新中心, 绵阳 621010)

摘要: X 射线衍射应力测量法因其非破坏性、高精度和广泛适用性而备受关注。然而, 其测量参数的优化匹配机制长期以来缺乏系统性研究。本研究通过构建多参数耦合分析策略, 首次系统揭示了扫描峰位、扫描步长及 $\sin^2\psi$ 测量点数量等关键参数对残余应力测试精度的协同作用机制。实验研究表明, 扫描峰位选择存在显著的角度效应, 当采用 137.282° 的高角度衍射峰时, 其应力计算误差较常规角度降低约 87.64%, 这源于高角度区 2θ 对晶面间距变化更高的灵敏度。扫描步长的优化呈现双因素制约特征, 0.03° 的步长虽可获得最优的峰形拟合度 ($R^2 > 0.92784$), 但需权衡测试效率与噪声干扰的平衡关系。创新性地建立了 $\sin^2\psi$ 法最小数据点判据策略, 当 $\sin^2\psi$ 测量点达到 7 个时, 应力误差可稳定控制在 ± 5.7 MPa 以内, 这为快速检测提供了理论依据。本研究突破传统单参数优化模式, 提出多参数协同优化策略, 为 X 射线衍射残余应力测量领域提供了重要的理论支撑和技术范式。

关键词: 残余应力; X 射线衍射; 测试; 实验技术

中图分类号: TG115.22; O766

文献标志码: A

DOI: [10.12179/1672-4550.20240598](https://doi.org/10.12179/1672-4550.20240598)

Multiparameter Synergistic Mechanisms of Residual Stress Measurement Based on X-ray Diffraction

XIE Ruishi, LI Yuanli*, MA Yongjun

(Analytical and Testing Center, Innovation Center of Nuclear Environmental Safety Technology,
Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, China)

Abstract: X-ray diffraction (XRD) stress measurement has attracted much attention because of its non-destructive nature, high accuracy, and wide applicability. However, the optimization and matching mechanism of its measurement parameters has been lacking for a long time. By constructing a multi-parameter coupling analysis strategy, this study systematically reveals the synergistic mechanism of key parameters such as scanning peak, scanning step, and $\sin^2\psi$ measuring points on residual stress measurement accuracy for the first time. The experimental results indicate that there is a significant angle effect in the selection of the scanning peak position. When the high-angle diffraction peak of 137.282° is used, the stress calculation error is reduced by 87.64% compared with the conventional angle, which is due to the higher sensitivity of the high-angle 2θ region to the change of crystal plane spacing. The optimization of scanning step size is characterized by two-factor constraints. Although the optimal peak shape fitting degree ($R^2 > 0.92784$) can be obtained with the step size of 0.03° , the balance between test efficiency and noise interference needs to be weighed. The minimum data point criterion strategy of $\sin^2\psi$ method is innovatively established. When the $\sin^2\psi$ measurement points reach 7, the stress error can be stably controlled within ± 5.7 MPa, which provides a theoretical basis for rapid detection. This study breaks through the traditional single-parameter optimization model and proposes a multi-parameter cooperative optimization strategy, which provides important theoretical support and technical paradigm for the X-ray diffraction residual stress measurement.

Key words: residual stress; X-ray diffraction; measurement; experimental technology

残余应力对材料的力学性能、物理性能和化学性能均有显著影响^[1-2]。通过测量和调控残余应力, 可以优化材料的屈服强度、抗拉强度、疲劳

寿命等关键性能指标, 提升产品的综合性能^[3-5]。在航空航天、核能、轨道交通等领域, 残余应力的存在可能威胁到工程的安全性^[6-8]。测量残余应

收稿日期: 2024-11-15

基金项目: 西南科技大学实验技术研究项目(21syjs-05)。

作者简介: 谢瑞士, 博士, 副研究员, 主要从事分析测试技术研究。E-mail: rxie@swust.edu.cn

* 通信作者: 李园利, 博士, 副教授, 主要从事同步辐射谱学技术研究。E-mail: yli@swust.edu.cn

力可以确保工程结构的可靠性和安全性,防止因材料失效引发的安全事故。

在众多残余应力测量方法中,X射线衍射法因其非破坏性、高精度和广泛适用性而备受关注^[9]。研究人员对不同样品进行残余应力测量和分析,取得了可观的研究成果。这些研究不仅加深了我们对残余应力产生机理和影响因素的认识,还为优化工艺条件、改进产品设计提供了科学依据。

目前基于X射线衍射法的应力测量仪检测残余应力存在一些问题,包括侧重使用单晶样品、使用的靶材导致X射线入射深度低、受限于应力张量计算、需要背底处理等^[10-12]。近年来,已有文献报道了一些测量条件(例如,管电压、管电流、准直管直径)对残余应力结果的影响^[13]。然而,通常在工厂或实验室检测残余应力时,研究人员不会频繁地去调整仪器电学参数和仪器附件配置。此外,X射线衍射法在测量样品残余应力时仍面临一些挑战,如测量参数的选择与优化等^[14-15]。

本文采用X射线衍射仪测量样品的残余应力,探讨测量参数对X射线衍射法残余应力测试结果的影响,通过系统分析关键参数设置下的图谱特征,揭示其背后的物理机制,并提出优化测量参数的策略。具体而言,我们将重点关注扫描峰位、扫描步长以及 $\sin^2\psi$ 测量点个数对残余应力结果的影响。期望为研究人员在X射线衍射残余应力测量实际操作中提供有价值的参考和指导。

1 实验过程

1.1 仪器和样品

采用帕纳科 Empyrean X射线衍射仪,该仪器配备有Cu靶辐射源及先进的半导体阵列探测器,在电压设定为40 kV与电流40 mA的条件下工作。采用的样品为金属铝片体。铝片试样采购自上海思百吉仪器系统有限公司,原始材料为轧制退火态板材(厚度10 mm)。

1.2 样品处理

为了测量机械加工、表面处理等工艺之后的样品表面应力,须小心保护待测试样的原始表面,不能进行任何加工、电化学或化学腐蚀等影响表面应力的操作,用无水乙醇或丙酮轻轻擦拭样品表面即可。

1.3 获得实验数据

测量过程如下:首先,测量广角X射线衍射(XRD)图谱时,扫描范围10-150°,扫描步长0.01-0.1°,时间常数50 s。然后,选择样品的XRD图谱高角度的衍射峰,执行残余应力测量。测试应力图谱时,步长为0.03°,每步停留时间为50 s。为减小测试误差,在应力测试过程中尽可能选择高角度衍射,而实现高角衍射的途径则是选择合适的衍射晶面,后文根据XRD测试结果做出选择。 ψ 角间隔划分应尽量确保各个 $\sin^2\psi$ 值为等间隔,利用衍射仪执行残余应力图谱测量。

计算过程如下:

(1)弹性常数(K)的计算方法

弹性常数(K)与材料的弹性模量(E)及泊松比(ν)直接相关,计算公式为:

$$K = -\frac{E}{2(1+\nu)}$$

代入金属铝材料的杨氏模量和泊松比($E = 70.600$ GPa, $\nu = 0.345$)^[16],得到 $K \approx -25.93$ GPa。

(2)残余应力(σ)的计算方法

(a)晶面间距计算

利用布拉格方程^[17] $2d\sin\theta = n\lambda$,已知衍射峰位 2θ ,计算对应的晶面间距 d 。

当 $n = 1$ (一级衍射)时, $2d\sin\theta = \lambda$,其中 λ 为X射线波长(如Cu靶 $K\alpha$ 波长为0.154 18 nm)

(b)绘制 $\sin^2\psi$ - d 图与拟合斜率 M

在不同倾斜角 ψ (如0°、12.24°、17.45°、21.55°、25.10°、28.31°、31.30°)下测量同一晶面的 d 值。以 $\sin^2\psi$ 为横坐标, d 为纵坐标,通过线性拟合得到斜率 M ^[18]。

(c)残余应力计算

根据公式^[19] $\sigma = K \cdot M$,代入 K 和 M 的数值即可得到残余应力。

2 结果与讨论

2.1 样品的XRD分析

金属铝样品槽的XRD图谱如图1所示,大约38.39°、44.66°、65.01°、78.15°和82.36°处的衍射峰,分别归属于立方相铝的(111)、(200)、(220)和(311)晶面,与粉末衍射标准卡片PDF#85-1327相契合。此外,利用晶体学相关公式,计算了98.97°、111.90°、116.48°和137.28°处的衍射峰对应的晶面指数,分别为(400)、(331)、(420)和

(422)。在 X 射线衍射应力测量时, 一般选取高角度的衍射峰。因此, 在后面等残余应力实验中, 选择(400)、(331)、(420)和(422)晶面的衍射峰作为测试峰。

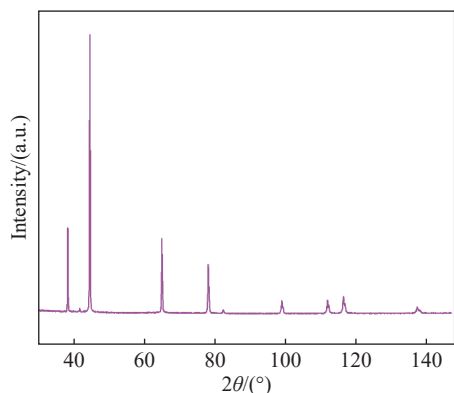


图1 金属铝样品的 XRD 图谱

图2展示了金属铝样品典型的 2θ 与 ψ 关系等高线图。等高线图通常以方位角 φ 和 $\sin^2\psi$ 为坐标轴, 显示不同方向(φ)和倾斜角(ψ)下测得的衍射角 2θ 分布。若等值线呈现规律对称或线性排列, 表明残余应力在平面内分布均匀且符合平面应力假设; 若出现椭圆或非对称分布, 则暗示应力存在各向异性或剪切分量。对比不同工艺处理后样品的等高线图, 可评估残余应力分布的变化, 为优化热处理、加工参数提供依据。图中色彩柱状图代表衍射峰强度, 颜色从黑色、蓝色、绿色、黄色到红色变化, 表明强度依次增加。此外, 图 2a-2d 中的衍射峰值最高点分别为 98.975° 、 111.905° 、 116.480° 、 137.282° ; 每个小图中都有 7 条等高线, 表明每个晶面都测试了 7 个 ψ 角度的衍射图谱。

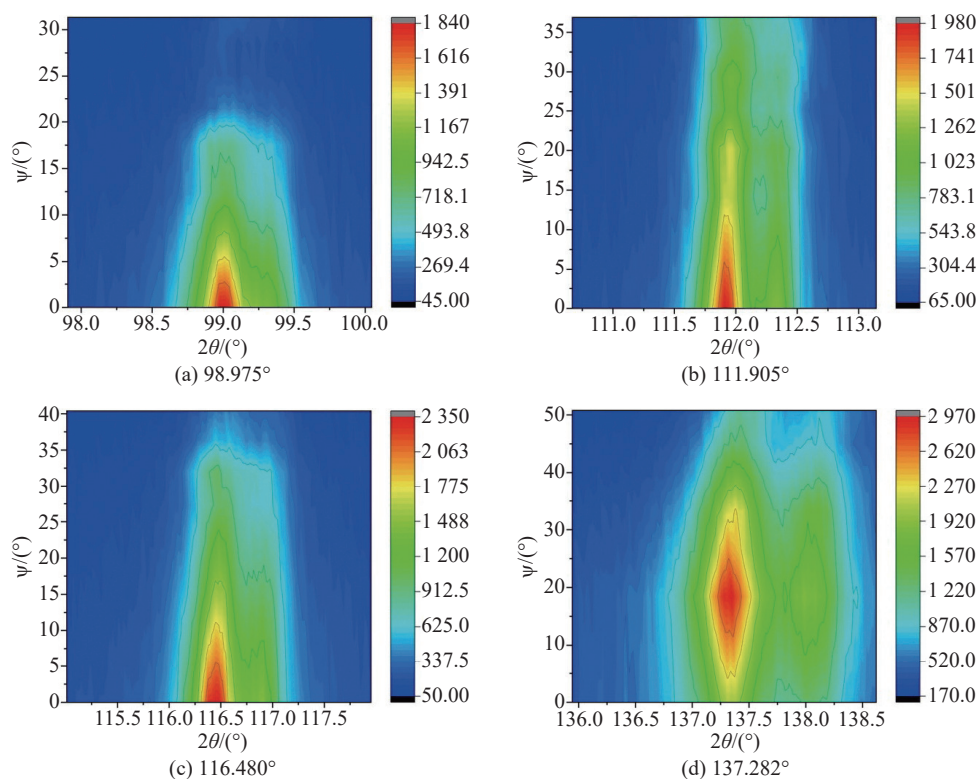


图2 典型的 2θ 与 ψ 关系等高线图

2.2 扫描峰位对残余应力测量值的影响

图3显示了不同扫描峰位时 $\sin^2\psi$ 与 d 的关系图, 其中图 3a-e 的扫描峰位分别为 98.975° 、 111.905° 、 116.480° 、 137.282° 。采用线性拟合方法分别拟合了图 3a-e 中的数据点, 曲线拟合度分别为 0.38956、0.83740、0.79066、0.92784。结果表明, 扫描峰位为 98.975° 时, 曲线拟合度达到最小值; 扫描峰位为 137.282° 时, 曲线拟合度达到

最大值。

图4展示了扫描峰位对残余应力的影响趋势图。不同扫描峰位时, 金属铝样品的残余应力计算值分别为 -100.4 ± 46.1 、 -64.5 ± 11.4 、 -64.5 ± 13.2 、 -50.8 ± 5.7 MPa。可以发现, 选择低角度的衍射峰时, 残余应力计算值和误差都较大; 选择高角度的衍射峰时, 残余应力计算值和误差都较小。

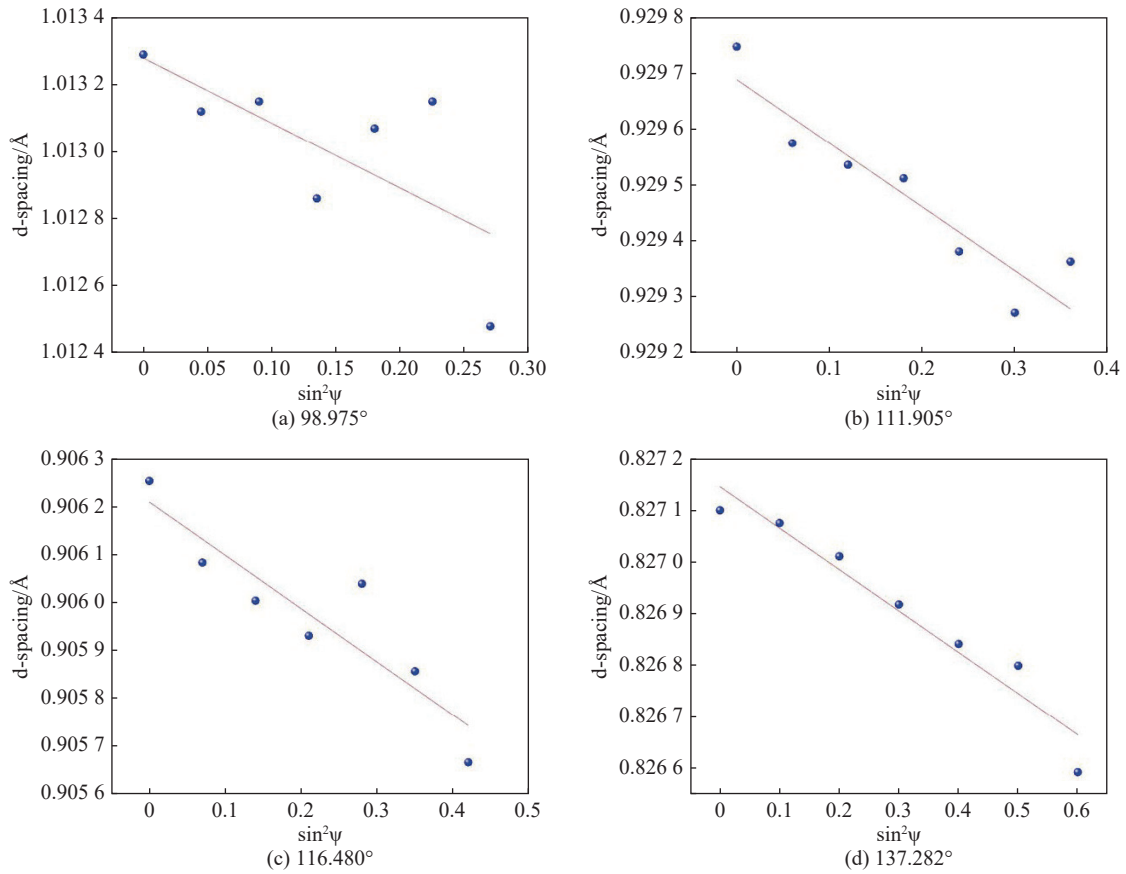
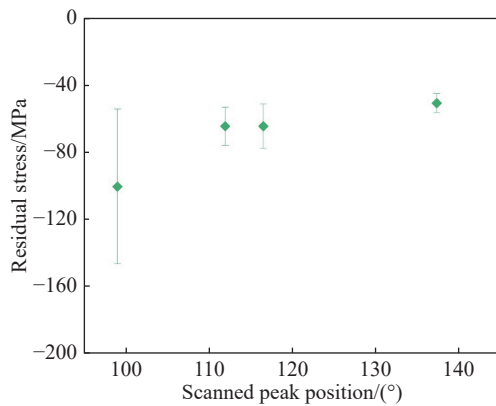
图3 不同扫描峰位时 $\sin^2\psi$ 与 d 的关系图

图4 不同扫描峰位时残余应力测量值变化趋势

在 X 射线衍射(XRD)技术应用于应力测量实验中, 选择衍射峰的角度确实是一个关键的步骤。通常, 在进行 X 射线衍射应力测量时, 会倾向于选择高角度的衍射峰, 主要原因为: 一方面, 高角度的衍射峰对应着较大的晶面间距, 这使得它们对应力变化更为敏感。当材料受到应力作用时, 其晶格间距会发生微小的变化, 这种变化在高角度衍射峰中更容易被检测出来。另一方面, 在低角度区域, 多重衍射(即一个 X 射线光子在多个晶面之间发生多次反射)的可能性更高。多

重衍射会导致衍射图谱复杂化, 增加分析的难度。选择高角度衍射峰可以减少多重衍射的影响, 其内在机制为: (1)根据布拉格定律 $2d\sin\theta = n\lambda$, 当衍射角 θ 趋近 90° 时, $\sin\theta$ 接近 1, 仅特定晶面间距 d 可满足方程。此时, 其他晶面因难以同时满足多重布拉格条件而被过滤, 显著降低多重衍射概率。(2)高角度衍射形成的圆锥半顶角较小(半径收缩), 与其他晶面的衍射圆锥空间重叠概率降低, 减少了不同晶面信号叠加的干扰, 提升主峰信号纯度。(3)高角度下, 晶格应变引起的峰位移更显著(应变灵敏度正比于 $\cot\theta$), 利于精确测量; 同时, 主峰强度高(结构因子较强), 而多重衍射信号因晶面取向随机化被弱化, 信噪比显著提升。

2.3 扫描步长对残余应力测量值的影响

图 5 显示了不同扫描步长时 $\sin^2\psi$ 与 d 的关系图, 其中图 5a-e 的扫描步长分别为 0.01° 、 0.03° 、 0.05° 、 0.07° 和 0.1° 。采用线性拟合方法分别拟合了图 5a-e 中的数据点, 曲线拟合度分别为 0.88747、0.92784、0.86008、0.89708、0.88628。结果表明,

扫描步长为 0.1° 时, 曲线拟合度达到最小值; 扫描步长为 0.03° 时, 曲线拟合度达到最大值。

图 6 展示了扫描步长对残余应力的影响趋势

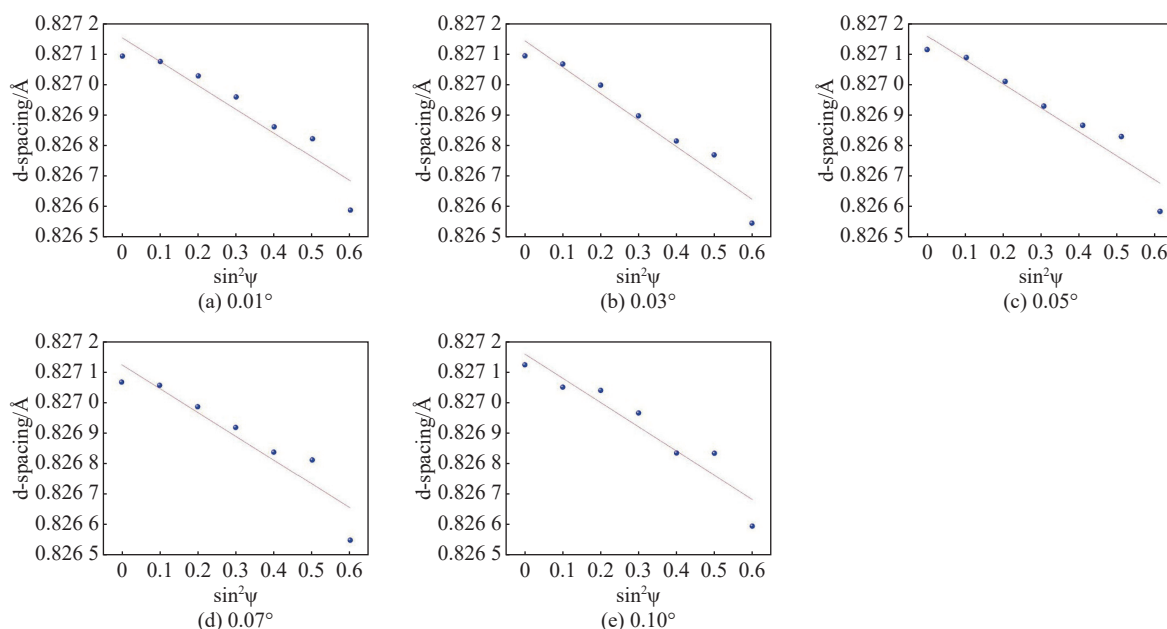


图 5 不同扫描步长时 $\sin^2\psi$ 与 d 的关系图

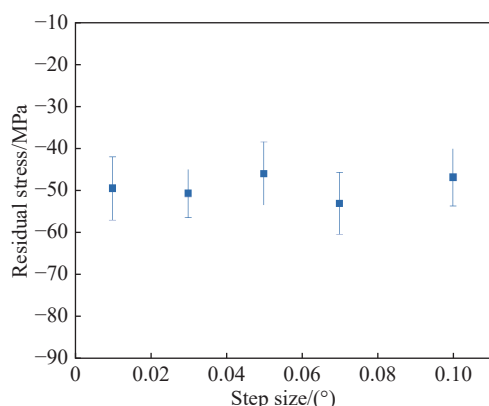


图 6 不同扫描步长时残余应力测量值变化趋势

在测量精度方面, 较小的扫描步长可以提高测量的精度。因为步长越小, 测量的数据点越密集, 能够更准确地捕捉到衍射峰的位置和形状变化, 从而更精确地计算出残余应力。较大的扫描步长可能导致数据点稀疏, 无法充分反映衍射峰的细节, 进而影响残余应力的计算精度。

在结果稳定性方面, 适当的扫描步长有助于获得稳定的衍射图谱, 从而得到更可靠的残余应力测量结果。步长过大或过小都可能导致结果的不稳定。过小的步长可能会增加测量过程中的噪声干扰, 因为探测器在更短的时间内需要处理更

多的数据点。这可能会降低结果的信噪比, 影响残余应力的准确计算。

图。不同扫描步长时, 金属铝样品的残余应力计算值分别为 -49.6 ± 7.5 、 -50.8 ± 5.7 、 -46.1 ± 7.5 、 -53.2 ± 7.3 、 -47 ± 6.8 MPa。

多的数据点。这可能会降低结果的信噪比, 影响残余应力的准确计算。

在实际应用中, 不同材料的晶体结构和衍射特性不同, 需要根据具体材料的特性选择合适的扫描步长。X 射线衍射仪的性能也会影响扫描步长的选择。高性能的仪器通常具有更高的分辨率和稳定性, 可以在较大的步长下获得准确的结果。另外, 根据测量目的的不同, 可以选择不同的扫描步长。例如, 对于需要高精度测量的研究应用, 应选择较小的步长; 而对于一般的工业检测应用, 可以适当放宽步长的要求。

因此, 在 X 射线衍射法测量残余应力时, 扫描步长的选择对测量结果具有重要影响。为了确保测量的准确性和稳定性, 应根据具体材料、仪器性能和测量目的等因素综合考虑, 选择合适的扫描步长, 常用的步长为 0.01 - 0.03° 。

2.4 $\sin^2\psi$ 测量点个数对残余应力测量值的影响

图 7 显示了不同 $\sin^2\psi$ 测量点个数时 $\sin^2\psi$ 与 d 的关系图, 其中图 7a-e 的 $\sin^2\psi$ 数据点个数分别为 3、5、7、9 和 11 个。采用线性拟合方法分别拟合了图 7a-e 中的数据点, 曲线拟合度分别为 0.90788、0.93160、0.92784、0.90534 和 0.87417。结果表明, $\sin^2\psi$ 测量点个数为 11 时, 曲线拟合度

达到最小值； $\sin^2\psi$ 测量点个数为 5 和 7 时，曲线拟合度达到较大值。

图 8 展示了 $\sin^2\psi$ 测量点个数对残余应力的影

响趋势图。不同 $\sin^2\psi$ 测量点个数时，金属铝样品的残余应力计算值分别为 -56.7 ± 12.4 、 -58.3 ± 7.8 、 -50.8 ± 5.7 、 -46.9 ± 5.3 、 -52.1 ± 6.2 MPa。

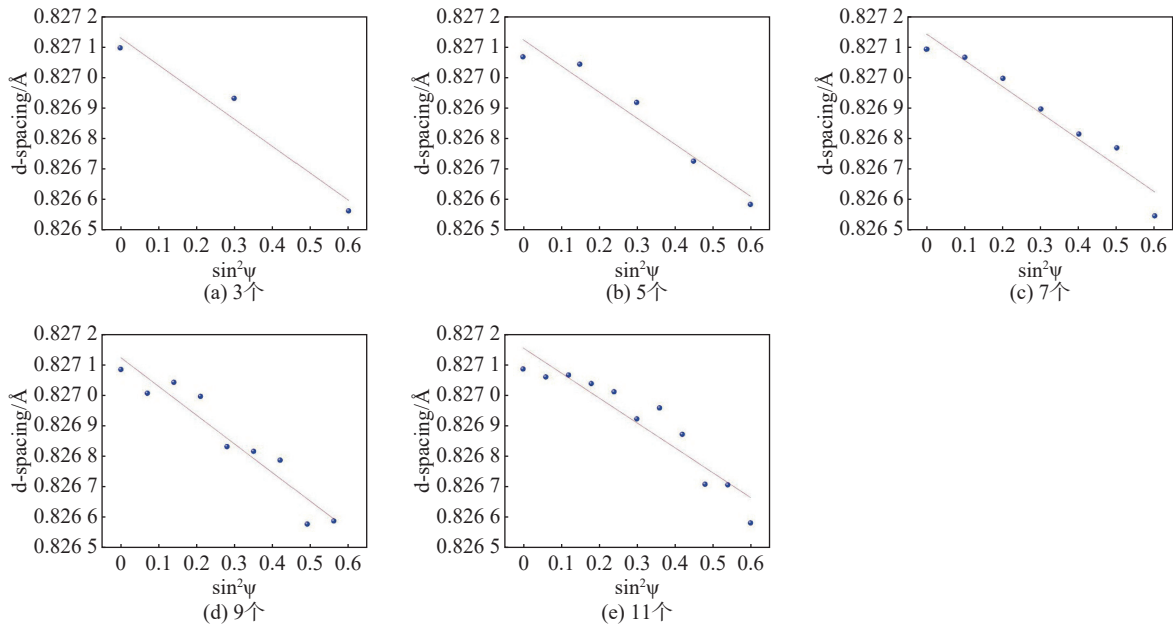


图 7 不同 $\sin^2\psi$ 测量点个数时 $\sin^2\psi$ 与 d 的关系图

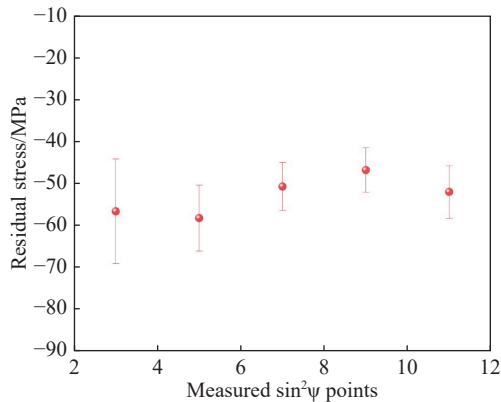


图 8 不同 $\sin^2\psi$ 测量点个数时残余应力测量值变化趋势

在残余应力测量中，增加测量点的数量可以提供更多的数据点，从而更全面地反映被测物体内部的应力分布情况。这有助于减少由于单个测量点误差或异常值对整体测量结果的影响，提高测量的准确性和可靠性。

虽然增加测量点个数可以提高精度，但也会带来额外的测量成本和时间成本。同时，当测量点数量增加到一定程度后，测量精度的提升可能会逐渐趋于饱和，甚至可能出现“过拟合”现象，即额外的测量点对整体结果的影响变得微乎其微。

如果测量点分布过于集中或稀疏，都可能导

致测量结果无法全面反映被测物体的真实应力状态。在数据分析过程中，应注意检查测量数据的合理性和一致性。如果发现异常值或数据分布不符合预期规律，应及时进行复检或修改测量方案。实验结果表明， $\sin^2\psi$ 测量数据点一般达到 7 个就可以较好反映出样品的残余应力结果，并且具有较小的误差值。

3 结束语

本研究系统揭示了扫描峰位、扫描步长及 $\sin^2\psi$ 测量点数量对残余应力测试结果的协同作用机制，提出了多参数协同优化策略，为不同场景下的高精度、高效率测量提供了理论依据与技术路径。主要发现如下：

1) 扫描峰位为 98.975° 时，曲线拟合度达最小值；扫描峰位为 137.282° 时，曲线拟合度达最大值；选择高角度衍射峰，残余应力误差较小。在进行 X 射线衍射法残余应力测试时，可优先选择高角度衍射峰对应的扫描峰位，以降低残余应力误差，提高测量准确性。

2) 扫描步长为 0.1° 时，曲线拟合度达最小值；扫描步长为 0.03° 时，曲线拟合度达最大值；高精度研究应用选较小步长，一般工业检测可放

宽步长要求。根据具体应用场景灵活调整扫描步长: 对于对精度要求高的研究, 采用较小步长保证测量精度; 对于工业检测, 适当放宽步长可提高检测效率, 降低检测成本。

3) $\sin^2\psi$ 测量点个数为 5 和 7 时, 曲线拟合度达到较大值; 测量数据点达 7 个可较好反映样品残余应力结果, 且误差值较小。明确了合适的 $\sin^2\psi$ 测量点个数, 避免测量点过少无法准确反映残余应力情况, 或测量点过多导致测量时间和成本增加, 实现高效、准确测量。

参考文献

- [1] HOSSEINI S, FARAJOLLAHI M, EBRAHIMI M. Residual stress, fatigue behavior, and mechanical properties of equal-channel angular pressed commercial pure titanium[J]. *Journal of Materials Research and Technology*, 2024, 28: 3297–3305.
- [2] ZHOU Y, ZHOU S, WAN S, et al. Tuning the interlayer microstructure and residual stress of buffer-free direct bonding GaN/Si heterostructures[J]. *Applied Physics Letters*, 2023, 122(8): 082103.
- [3] SHAHA S K, JAHED H, KACHER J. Additively manufactured Ti55511 alloy: Microstructure and residual stress effect on mechanical properties[J]. *Journal of Manufacturing Processes*, 2023, 94: 348–358.
- [4] MUTHUKUMARAN G, RAI A K, GAUTAM J, et al. A study on effect of multiple laser shock peening on microstructure, residual stress, and mechanical strength of 2.5 Ni-Cr-Mo (EN25) low-alloy steel[J]. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 2023, 32(10): 4361–4375.
- [5] CHEN S X, LIU J Z, CHAN T M. Material properties and residual stresses of welded high strength steel and hybrid I-sections[J]. *Engineering Structures*, 2023, 276: 115293.
- [6] GE J M, DENG Z H, CAO D H, et al. Study on modelling simulation and distribution characteristics of residual stress during robotic weld end grinding of high strength modulated steel[J]. *Journal of Manufacturing Processes*, 2023, 108: 98–113.
- [7] KENDALL O, ABRAHAMS R, PARADOWSKA A, et al. Influence of multi-layer laser cladding depositions and rail curvature on residual stress in light rail components[J]. *Engineering Failure Analysis*, 2023, 150: 107330.
- [8] ZHANG X N, DONG M Y, CAI X, et al. Progress in machining-induced residual stress and microstructural evolution of inhomogeneous materials and composites [J]. *Advanced Composites and Hybrid Materials*, 2023, 6(3): 122.
- [9] LU W L, SUN J L, SU H, et al. Experimental research and numerical analysis of welding residual stress of butt welded joint of thick steel plate[J]. *Case Studies in Construction Materials*, 2023, 18: e01991.
- [10] 万鑫, 詹科, 姜传海. X 射线衍射方法分析粗晶铁硅合金的残余应力[J]. *机械工程材料*, 2014, 38(6): 95–99.
- [11] 马昌训, 吴运新, 郭俊康. X 射线衍射法测量铝合金残余应力及误差分析[J]. *热加工工艺*, 2010, 39(24): 5–8.
- [12] 高玉魁. 单晶结构残余应力的 X 射线衍射分析技术 [J]. *失效分析与预防*, 2010, 5(4): 221–224.
- [13] 李彬, 施芬, 韩振春, 等. 正交法优化 X 射线衍射测量铝合金残余应力[J]. *热加工工艺*, 2013, 42(24): 87–89.
- [14] LAURENCE R C, CANELO-YUBERO D, MAAWAD E, et al. Determination of residual stress in additively manufactured 316L stainless steel benchmark parts through synchrotron X-ray diffraction and neutron diffraction[J]. *Strain*, 2025, 61(2): e70005.
- [15] OUALI N, CHENITI B, BELKESSA B, et al. Residual stresses determination and analysis in dissimilar rotary friction joints using X-ray diffraction method[J]. *Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances*, 2024, 80: e465.
- [16] SMITHELLS C J, BRANDES E A. Metals reference book[M]. 5th ed. London: Butterworths, 1976.
- [17] CULLITY B D, STOCK S R. Elements of X-ray diffraction[M]. 3rd ed. , Upper Saddle River: Prentice Hall, 2001.
- [18] HAUKE V. Structural and residual stress analysis by nondestructive methods: evaluation, application, assessment[M]. Amsterdam: Elsevier, 1997.
- [19] NOYAN I C, COHEN J B. Residual stress: measurement by diffraction and interpretation[M]. New York: Springer-Verlag, 1987.