

文章编号: 1004 - 0609(2005)09 - 1376 - 08

Al-Cu-Li-xMg 合金时效初期微结构演变的 Monte Carlo 模拟^①

李世晨, 郑子樵, 刘祖耀, 李 剑, 杨培勇, 殷顺高
(中南大学 材料科学与工程学院, 长沙 410083)

摘 要: 采用基于 MultiStates Ising Model 的 Monte Carlo 算法, 模拟研究了 Al-Cu-Li-xMg 合金时效初期微观结构的演变过程, 结果表明: 时效早期, 在 Al-1.2Cu-5.7Li 合金中微结构的主要形态是 Li 原子团簇、Li-Cu 原子对和空位团簇, 且空位团簇的出现多出现在 Li 原子团簇附近, 形成共生形态; 而 Al-1.2Cu-5.7Li-xMg 合金中, 出现明显的 Cu-Clusters, 而 Li 原子的偏聚过程则受到抑制, 且空位团簇的形态也发生了变化, 多与 Cu-Mg 原子团簇形成共生形态; 微量 Mg 的作用是通过 Mg/Li 原子间存在强烈的相互作用调整 Li 原子团簇的偏聚形态, 导致大量被 Li 原子 Clustering 过程锁定的 Cu 原子和空位被置换出来, 进而影响 Li、Cu 原子团簇的形态和空位的分布形态, 并影响随后的析出相分布形态。

关键词: Al-Cu-Li 合金; Monte Carlo Method; 时效初期

中图分类号: TG 146.2

文献标识码: A

Monte Carlo simulation of microstructural evolution of Al-Cu-Li-xMg alloys during initial ageing stage

LI Shi-Chen, ZHENG Zi-qiao, LIU Zu-yao, LI Jian, YANG Pei-yong, YIN Shun-gao
(School of Materials Science and Engineering, Central South University,
Changsha 410083, China)

Abstract: The Monte Carlo Method, which based on the MultiStates Ising Model, was applied to simulate the microstructural evolution of Al-Cu-Li-xMg alloys during the initial ageing stage. The simulation results show that: there are Li clusters, Li-Cu co-clusters and vacancy-clusters in Al-Cu-Li alloy during the initial ageing stage, and Li clusters exhibit a tendency to co-existed with vacancy clusters; with small addition of Mg, Cu clusters are provoked, while the clustering of Li atoms is restrained, the vacancy clusters have a tendency to co-existed with Cu-Mg co-clusters. Small addition of Mg has strongly effect on the morphology of Li clusters, which can release Cu atoms and vacancies from the locking-state by Li clusters. Therefore, the morphology of precipitates can be affected by the addition of Mg subsequently.

Key words: Al-Cu-Li alloys; Monte Carlo Method; initial ageing stage

Al-Cu-Li 系合金是一种可时效强化的铝锂合金, 新一代的铝锂合金 2195 和 2197 也都是在 Al-Cu-Li 系合金的基础上进行研发的。改善这类铝锂合金室温力学性能的最好方法是进行微合金化处

理。关于 Al-Cu-Li 合金的微合金化, Lebaron^[1], Silcock, Gilmore 和 Starke 等^[2]进行了详细的实验研究与观察, 但是由于合金化元素之间的相互作用十分复杂, 相关的研究常常得出相互矛盾的结论;

① 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(50271084)

收稿日期: 2005-03-02; 修订日期: 2005-07-08

作者简介: 李世晨(1973-), 男, 讲师。

通讯作者: 李世晨, 电话: 0731-88772227; E-mail: S-maloy@mail.csu.edu.cn

而且, 这类研究总体上看, 定性研究多, 定量研究少; 对时效后期阶段研究的多, 对时效早期过程研究的少; 在组织层次上进行静态描述的多, 在原子层次上进行动力学表述的少。作为探索微观结构演变的一种有效手段, 目前, 在国际上已开始采用 Monte Carlo 方法研究有序相转变, 晶粒长大, 及铁磁相转变等相变领域^[3~8], 本文作者采用基于 Multi-States Ising Model 的 Monte Carlo 方法对 Al-Cu-Li-Mg 合金时效早期微观结构的演变过程和机理进行了模拟研究。

1 Monte Carlo 模拟方法

Monte Carlo 方法也被称为随机模拟方法, 有时也称作随机抽样技术或统计方法, 是一种可对随机过程进行模拟统计的数学方法。

1.1 建模及算法

固溶淬火处理后的 Al-Cu-Li 系合金从结构上看是典型的替代式固溶体, 其时效过程的实质是溶质原子通过空位交换机制实现的扩散型相转变过程。尤其是在时效早期, 溶质的原子团聚化和原子短程有序化过程是被看作遵循经典的空位交换机制的。本模拟通过 Monte Carlo 方法模拟合金中空位的随机游走过程实现对时效早期微结构演变过程的模拟研究。为了便于建模, 进行了如下理想化处理: 1) 忽略了原子及原子团簇尺寸对时效过程的影响(即忽略晶格畸变对原子偏聚形态的影响); 2) 原子间的相互作用采用对势方法计算, 只计及最紧邻原子间相互作用; 3) 忽略位错、晶界等其他缺陷对扩散过程的影响; 4) 模拟过程假定空位数量守恒, 忽略时效过程中出现的空位湮没和崩塌成位错环的过程。上述假设和理想化处理对模拟结果有效性的分析, 将在讨论部分中给出。在此基础上, Monte Carlo 方法算法大致如下:

- 1) 完全随机地生成一个溶质原子的初始分布位形, 以模拟过饱和固溶体的状态;
- 2) 生成一个溶质原子分布新位形;
- 3) 计算两种位形的能量变化差值 ΔE ;
- 4) 根据 ΔE , 计算空位跃迁概率 ω , 决定是否接受新位形, 并回到第 2 步;
- 5) 若不接受新位形, 以老位形替代新位形, 回到第 2 步。

上述算法中空位跃迁概率(ω)取决于空位在迁移方向上与最紧邻原子交换位置前后的能量差异

ΔE , 这里采用了 symmetrical solution 方法进行计算:

$$\omega = \frac{\exp\left[\frac{-\Delta E}{KT}\right]}{1 + \exp\left[\frac{-\Delta E}{KT}\right]} \quad (1)$$

式中 ΔE 为空位跃迁而引起的能量变化; K 为玻耳兹曼常数; T 为绝对温度。

在本模拟中原子间的相互作用采用了对势方法, 空位跃迁引起的能量变化为

$$\begin{aligned} \Delta E &= E_{\text{after}} - E_{\text{before}} \\ &= \sum_{i,j}^n (\epsilon_{(j)i} + \epsilon_{(v)i'}) - \sum_{i,j}^n (\epsilon_{(v)i} + \epsilon_{(j)i'}) \end{aligned} \quad (2)$$

式中 $\sum \epsilon_{(j)i}$ 为空位跃迁至 j 位置后与最近邻及次近邻原子形成的空位-原子对的能量和; $\sum \epsilon_{(v)i'}$ 为空位跃迁后, 造成 j 原子跃迁至原空位处与最近邻及次近邻原子形成的原子-原子对能量和; $\sum \epsilon_{(v)i}$ 为空位跃迁前, 与最近邻及次近邻原子形成空位原子对时的能量和; $\sum \epsilon_{(j)i'}$ 为 j 原子在跃迁前与最近邻及次近邻原子形成的原子-原子对的能量和。

1.2 原子间相互作用参数的选定

原子间相互作用可以从已知的热力学和动力学数据中, 按照规则固溶体的基本计算方法推导出来^[9], 具体参数见表 1。

表 1 本模拟工作中采用的原子间及原子与空位间的相互作用参数

Table 1 Interacting parameters in Al between same atom species, between different atom species, and between solute atom and vacancy, utilized in simulation (kJ/mol)

Atom	Al	Cu	Li	Mg	Vacancy
Al	- 54.5	- 49.3	- 37.9	- 34.5	- 21.9
Cu		- 48.5	- 35.7	- 32.2	- 15.8
Li		- 24.4	- 19.2	- 11.8	
Mg			- 16.8	- 10.3	
Vacancy				0	

2 模拟条件

2.1 合金成分

表 2 模拟合金的化学成分

Table 2 Chemical compositions of simulated alloys (mole fraction, %)

Sample No.	Cu	Li	Mg	Al
1	1.2			Bal.
2	1.2	5.7		Bal.
3	1.2	5.7	0.4	Bal.
4	1.2	5.7	0.8	Bal.

2.2 模拟计算条件的选择

1) 模拟时效温度为 453 K。

2) 在本工作中, 为了考察原子分布的动态变化情况, 程序在运算过程当中设置了 12 个断点, 分别为: 1×10^4 , 5×10^4 , 1×10^5 , 5×10^5 , 1×10^6 , 5×10^6 , 1×10^7 , 5×10^7 , 1×10^8 , 5×10^8 , 8×10^8 , 以观察在 453 K (180 °C) 时效条件下, 时效初期不同溶质原子分布形态动态演变过程。

2.3 模拟结果的有效性分析

为了保证模拟程序的有效性, 对纯铝的自扩散过程进行了模拟计算, 模拟计算结果显示体系中各原子层中示踪 Al 原子的浓度的演化规律与用菲克第二定律所描述的扩散演化规律十分吻合, 表明模拟程序可以很好的实现对扩散过程的准确模拟。

3 模拟结果与分析

结合 Al-Cu-Li 系合金在 180 °C 下的等温截面相图, 可知 Al-1.2Cu-5.7Li- x Mg (mole fraction, %)($x = 0.4, 0.8$) 合金中, 可能存在的析出相主要为 T1 相 (Al_2CuLi), δ 相 (Al_3Li) 和 G. P. 区 (Cu 原子偏聚区)。而在时效早期, 溶质原子主要以同类原子团簇, 伴生原子团簇, 短程有序结构等微观结构的形式存在, 并作为析出相前驱结构, 为析出相的形成提供成分起伏和结构起伏的有利条件。因此, 对时效早期原子团簇, 短程有序结构分布形态的研究工作主要集中在对 Cu clusters、Li clusters、Li-Cu co-clusters、空位复合结构的研究上。

3.1 时效早期溶质原子及空位的分布形态

图 1 所示为 Al-1.2Cu-5.7Li- x Mg 合金时效早期的原子团簇在 (100) 晶面上分布形态模拟结果图。从图中可知, 在 Al-1.2Cu 合金中出现了大量 Cu 原子团簇, 这与 Al-Cu 合金时效早期出现 G. P. 区的

经典结果相一致。而 Al-1.2Cu-5.7Li 合金中没有明显的 Cu-Clusters, 由于大量 Li 的加入, 出现大量的 Li 原子团簇、Li-Cu 原子对以及空位团, 且空位团簇的出现多出现在 Li 原子团簇附近, 形成共生形态。从模拟结果上看, Al-1.2Cu-5.7Li 合金应该是优先形成富 Li 的 δ 相, 而 G. P. 区的形成则受到抑制, 这与在 2195 合金中观测不到 G. P. 区的实验结果相一致^[10, 11]。而随着微量 Mg 的加入, 又开始出现明显的 Cu-Clusters, 且空位团簇的分布形态也发生了变化, 多与 Cu-Mg 原子团簇形成共生形态, 但是在 Al-1.2Cu-5.7Li- x Mg 的模拟结果中没有发现明显 Mg-Clusters, Mg 原子多以 Mg-Li 原子对, Mg-Cu Vacancy 复合体的形式存在。结果表明微量 Mg 的加入调整了 Li、Cu 原子团簇的形态和空位的分布形态, 继而影响随后的析出相分布形态。

3.2 时效早期 Cu 原子团簇的演化过程

图 2(a) 和 2(b) 所示分别为 Al-1.2Cu-5.7Li- x Mg 合金时效早期的 Cu 原子团簇平均尺寸和基体中剩余浓度的演化曲线, 结果表明: Al-1.2Cu 合金中 Cu 原子在时效早期强烈的偏聚形成大尺寸 Cu Clusters, 造成 Al 基体中剩余 Cu 原子浓度降低; 而加入大量 Li 原子形成 Al-1.2Cu-5.7Li 合金后, Cu 原子的 Clustering 过程受到明显抑制, Cu 原子团簇的平均尺寸大幅下降, 同时剩余溶质原子浓度也出现增大, 这与图 3 所示的 Li/Cu 原子之间存在着强烈交互作用, 形成大量 Li-Cu 原子对, 使得 Cu 原子的可动性大幅降低, 从而造成 Cu 原子的 Clustering 过程受到抑制有关; 类似的作用也出现在对 Al-Cu-Mg(-Ag) 合金时效早期过程的微观结构演变的模拟研究结果中^[12], 由于 Mg/Cu 原子间存在强烈的交互作用而明显降低了 Cu 原子团簇的平均尺寸。但是随着微量 Mg 的加入, 会延缓 Li 原子对 Cu 原子 Clustering 过程的抑制作用, 使 Cu 原子团簇的平均尺寸相对 Al-1.2Cu-5.7Li 合金增大, 但 Cu 原子的偏聚程度仍然比 Al-1.2Cu 合金中的同一过程弱, 且随着 Mg 含量的增加, 这个效应进一步增大。虽然 Mg/Cu 原子间的相互作用与 Li/Cu 原子之间的相互作用存在相似性, 但是 Mg 的加入对 Cu 原子的 Clustering 过程的影响不是 Mg 与 Li 的简单的加和作用, 微量 Mg 的加入延缓了 Li 原子对 Cu 原子的偏聚过程的强烈抑制, 应该有利于 G. P. 区的形成, 这与郑等^[10, 11] 在含 Mg2195 合金研究中的 TEM 观测结论相一致。

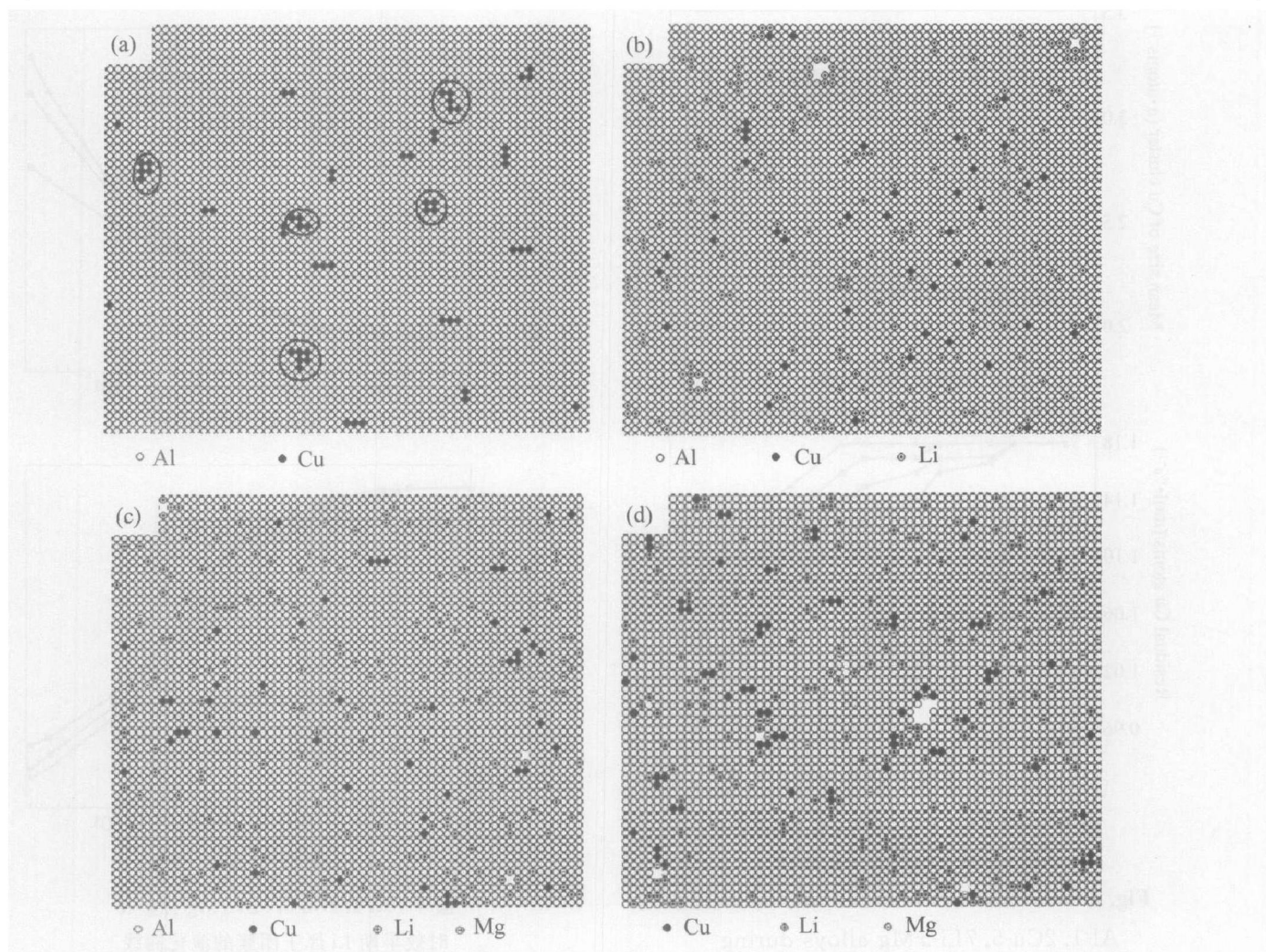


图 1 Al-1.2Cu-5.7Li- x Mg 合金时效早期的溶质原子在(100)晶面上形态演化的模拟结果

Fig. 1 Typical atom configurations on one atom layer of (001) plane in Al-1.2Cu-5.7Li- x Mg alloys during initial stage of ageing

(a) —Al-1.2Cu; (b) —Al-1.2Cu-5.7Li; (c) —Al-1.2Cu-5.7Li-0.4Mg; (d) —Al-1.2Cu-5.7Li-0.8Mg

3.3 时效早期 Li 原子团簇的演化过程

图 4(a) 和 4(b) 所示分别为 Al-1.2Cu-5.7Li- x Mg 合金时效早期的 Li 原子团簇平均尺寸和基体中剩余浓度的演化曲线, 结果表明 Al-1.2Cu-5.7Li 合金中的 Li 原子在时效早期迅速偏聚形成大尺寸 Li Clusters。与此相对应, Li 原子在基体中的剩余原子浓度也相应减少。而与 Cu 的演化过程不同的是: 随着 Mg 的加入, Li 原子团簇的平均尺寸开始减小, 而且 Mg 的含量越多, Li Clusters 的平均尺寸越小, 而剩余溶质 Li 原子的浓度减小。上述结果表明微量 Mg 的加入能够抑制 Li 原子团簇的偏聚过程, 说明 Mg 的添加有利于抑制富 Li 的 δ 相 (Al_3Li) 的形成, 这与 Gilmore 和 Starke 等的试验结果相一致。

3.4 时效早期空位团簇的演化过程

图 5(a) 和 5(b) 所示分别为 Al-1.2Cu-5.7Li- x Mg 合金时效早期的空位周围出现空位与 Li 原子的概率演化曲线。结果表明与 Al-1.2Cu 不同的是: Al-1.2Cu-5.7Li 合金中出现空位团聚的概率大幅增加, 而且空位周围出现 Li 原子的概率也显著增大, 空位周围出现 Li 原子的概率高达 73%, 这表明空位有可能被 Li 原子包围, 在能量上形成局部鞍点组态, 结合图 1, 不难发现在 Al-1.2Cu-5.7Li 合金中空位团簇与 Li 原子团簇往往呈共生形态。根据 Noble 的研究结论^[13], 晶体内的层错造成局部原子密排顺序的改变, 有利于在面心立方的 Al 基体中析出六方结构的 T1 相。而从模拟结果看, 大量空位的偏聚会崩塌产生层错, 为 T1 相的优先形核提供结构起伏的有利条件。Yoshimura 等^[14]的 HRTEM 观测结果也发现时效初期 T1 相的形核往往在 δ 相 (Al_3Li) 旁边, 从本文作者的模

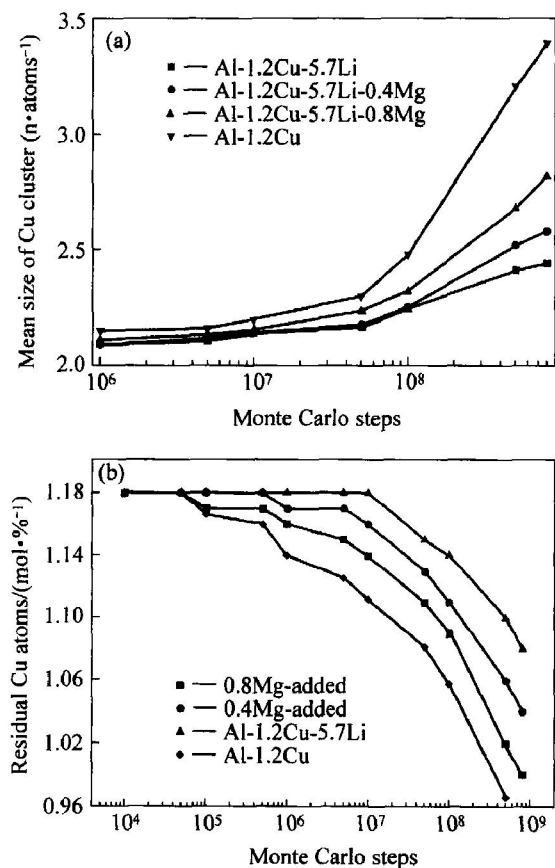


图 2 Al-1.2Cu-5.7Li-xMg 合金时效早期 Cu 原子团簇的演化曲线

Fig. 2 Variation curves of Cu cluster in Al-1.2Cu-5.7Li-xMg alloys during early ageing stage

(a) —Variation curve of mean size of Cu cluster with increase of MCS;
(b) —Variation curve of residual Li concentration with increase of MCS

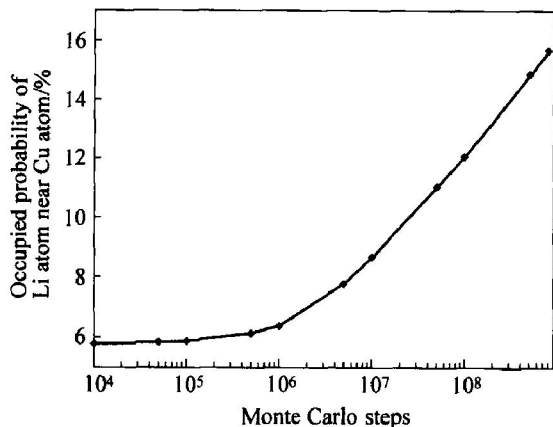


图 3 Al-1.2Cu-5.7Li 时效早期 Cu 原子周围出现 Li 原子的概率演化曲线

Fig. 3 Probability of Li atoms positioned adjacent to Cu atoms in Al-1.2Cu-5.7Li alloy during early ageing stage

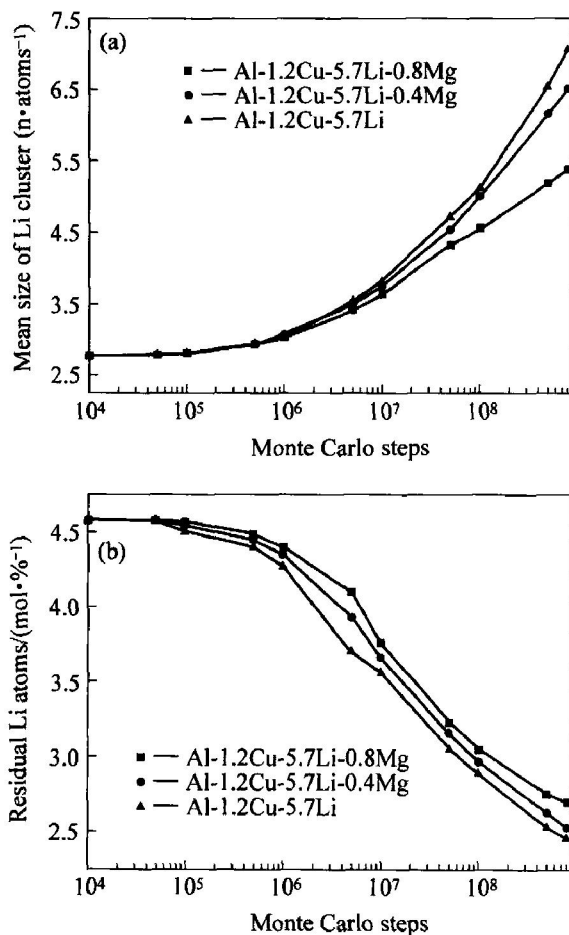


图 4 Al-1.2Cu-5.7Li-xMg 合金在时效早期 Li 原子团簇的演化曲线

Fig. 4 Variation curves of Li cluster in Al-1.2Cu-5.7Li-xMg alloys during early ageing stage

(a) —Variation curve of mean size of Li cluster with increase of MCS;
(b) —Variation curve of residual Li concentration with increase of MCS

拟结果上看, 这与 Li 原子团簇和空位团簇的伴生形态有关, Li 原子的偏聚成为 δ 相 (Al_3Li) 的优先形核位置, 而空位的偏聚造成的层错又为 T1 相的形核提供了有利的结构起伏条件, 促进了 T1 相的形成。以往的解释都是从 Li 的加入降低 Al 基体的内禀层错能的角度去阐述的; 而从目前的结果上看, 仅从 Li 的加入改变空位团簇的分布形态上看, 也可以促进层错的形成, 而有利于六方结构的 T1 相析出。而微量 Mg 的加入, 导致空位周围出现 Li 原子的概率下降, 而出现空位团簇的概率上升, 同时导致空位团簇的分布形态发生明显改变 (如图 1 所示), 空位团簇多出现在 Mg/Cu 原子对附近, 形成 Mg/Cu/Vacancy 复合体。

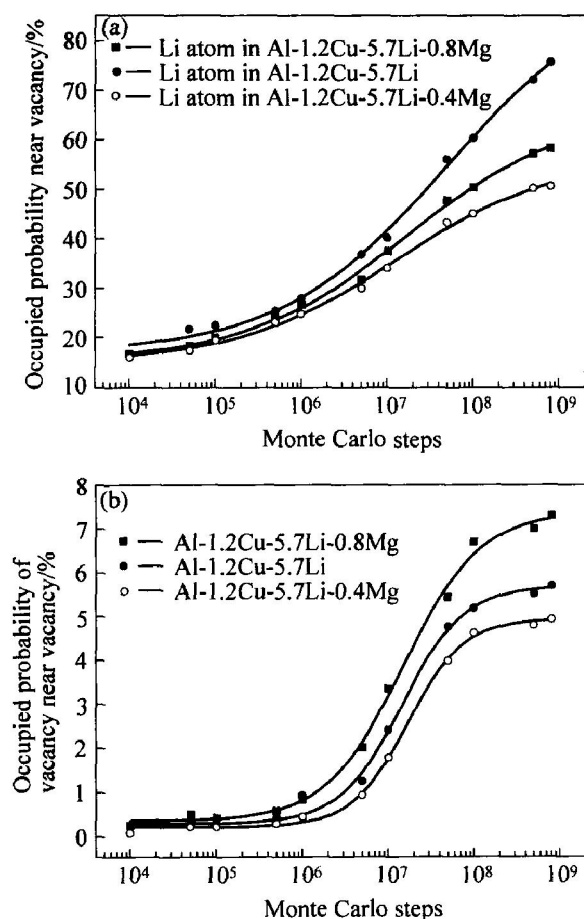


图 5 Al-1.2Cu-5.7Li 和添加 Mg 后体系中
空位周围出现溶质和空位的概率

Fig. 5 Probability of solute atoms and
vacancies positioned adjacent to vacancies in
Al-1.2Cu-5.7Li and Mg-added alloys

(a) —Probability of Li atom; (b) —Probability of vacancies

3.5 微量 Mg 对时效早期原子团簇演化过程的影响分析

图 6 所示为微量 Mg 加入到 Al-1.2Cu-5.7Li 合金系中, Cu 原子周围出现 Li 原子概率的演化曲线, 结果表明: 由于 Mg 的加入, 使得 Cu 原子周围出现 Li 原子的概率有所下降, 这是由于 Mg 的加入导致 Mg 原子“抢夺”了 Cu 原子造成的。在 Al-1.2Cu-5.7Li-Mg 中, Mg 原子由于倾向和 Cu 原子、空位结合而形成 Cu-Mg-空位复合体, 从而缓解 Li 对 Cu 原子的 Clustering 过程的抑制作用, 导致 Cu 原子团聚区的形成。结合图 4 和图 5, 表明 Mg/Li 原子间的相互作用, 降低了 Li 原子的偏聚, 破坏了 Li-Vacancy、Li-Cu 的局部鞍点组态, 导致大量被 Li 原子 Clustering 过程锁定的空位和 Cu 原子被置换出来, 形成 Mg/Cu/Vacancy 复合体有关。综上所述, 微量 Mg 的加入, 对时效早期 Al-

1.2Cu-5.7Li 合金中溶质元素偏聚过程的影响主要是通过 Li 原子的偏聚形态的改变而实现的。在 Al-1.2Cu-5.7Li 合金中, Li 原子的强烈偏聚, 与空位原子团簇和 Cu 原子在局部位置形成能量上的鞍点组态, 抑制了 Cu 的 Clustering 过程, 同时造成自由空位浓度的下降, 延缓了各种微结构的进一步演化; 而 Mg 的加入, 由于 Mg/Li 间存在强烈相互作用, 抑制了 Li 原子的强烈偏聚, 破坏了存在的 Li/Cu、Li/Vacancy 鞍点组态, 释放出了被锁定的 Cu 原子与空位, 从而造成促进 Cu 原子偏聚和空位团聚的现象。

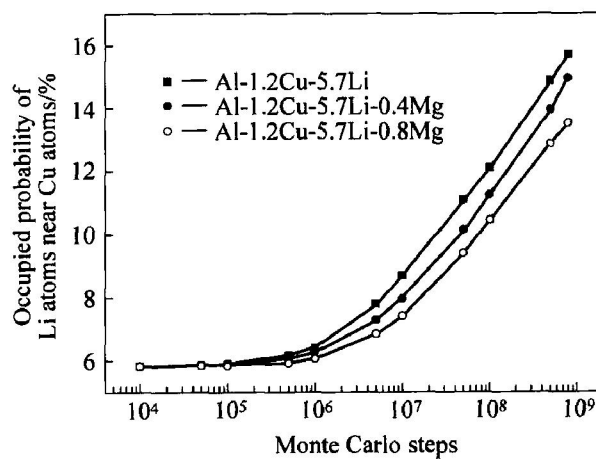


图 6 Al-1.2Cu-5.7Li-Mg 合金时效早期
Cu 原子周围出现 Li 原子概率的演化曲线

Fig. 6 Variation curves of probability of
Li atoms positioned adjacent to Cu atoms in
Al-1.2Cu-5.7Li-Mg alloys during
early ageing stage

4 讨论

综合以上结果不难发现, 对时效早期溶质原子团簇、空位复合体等微观结构的演变进行的模拟研究, 有助于在原子层面对时效过程进行深入理解, 并有助于理解微合金化过程中溶质原子间的复杂相互作用是如何影响时效过程和析出相的形态的, 很多实验观测上的结论可以从对溶质原子和空位分布形态的模拟研究结果上得到统一的认识和验证。从研究的结果来看, Al-1.2Cu-5.7Li 合金微合金化中微量元素 (Mg) 的添加作用更多的是通过与 Li 原子的相互作用, 实现调整溶质原子团簇的形态和空位复合体的形态, 进而影响随后的时效过程的。在本工作中采用了一些假设条件来简化模拟计算, 其对模拟结果的影响到底如何, 在此将作初步

探讨。

4.1 忽略晶格畸变对原子偏聚形态的影响

在时效早期原子与原子间的相互作用决定了溶质原子的分布形态,但是随着原子团簇尺寸的增大,忽略晶格畸变对原子团簇演变过程的影响,会使得原子团簇在几何形态上的模拟结果与实际不符,但在时效早期忽略晶格畸变,不会对溶质原子的偏聚过程产生实质性的影响,如对 Al-Cu 合金而言,模拟结果可以明显反映出 Cu 原子的偏聚过程,但不能很好的反映出 G. P. 区的片状析出形态(图 7)。

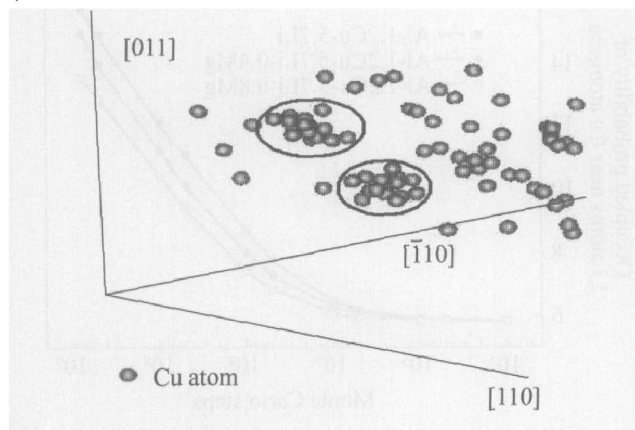


图 7 Al-1.2Cu 在 Monte Carlo 循环步为 8×10^8 时的三维原子簇形态

Fig. 7 Configuration of clusters in Al-1.2Cu alloy simulated for 8×10^8 Monte Carlo steps (3-D)

4.2 原子间的相互作用采用对势方法计算

只计及最紧邻原子间相互作用:对于复杂多体相互作用,目前最有效的方法是采用对势的方法,但由于只计及最紧邻原子间的相互作用,使得溶质原子在短程上的精细结构被平均化处理掉了,因而模拟研究结果反映出的原子偏聚过程的几何形态多是以无定形 Clusters 形态出现,而短程有序结构很难出现在模拟结果中。当采用多体势计算时,可以清晰的反映出时效早期出现的 SRO 结构(如图 8 所示)。由此可见,适当的简化,使得模拟结果的一些细节损失掉了,但是依然在合理的范围内保证模拟结果的有效性。

4.3 忽略位错、晶界等其他缺陷对扩散过程的影响

位错和晶界是扩散的快速通道,其中的机制到目前依然不是十分清楚,而且这一过程通常是一个

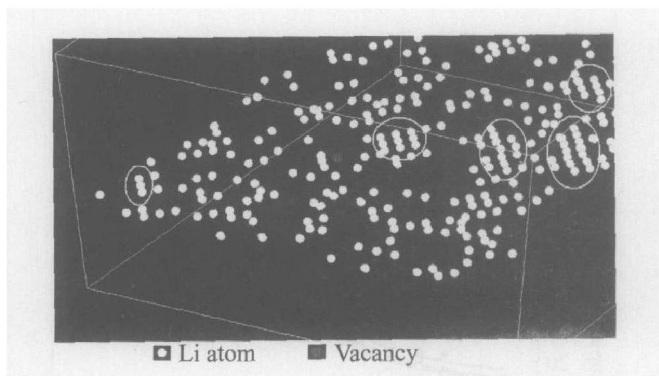


图 8 Al-5.7Li 在 Monte Carlo 步为 8×10^8 时的三维原子簇形态

Fig. 8 Configuration of clusters in Al-5.7Li alloy simulated for 8×10^8 Monte Carlo steps (3-D)

在畸变场作用下的扩散过程,其扩散过程的数学表述相当困难。而采用周期性边界条件,忽略到位错、晶界等其他缺陷对扩散过程的影响,有利于从内禀的角度去了解溶质原子的相互作用到底是如何改变析出相分布形态的。

5 结论

1) 时效早期, Al-1.2Cu-5.7Li 合金中微结构的主要形态是 Li 原子团簇、Li-Cu 原子对和空位团,且空位团簇多出现在 Li 原子团簇附近,形成共生形态。这表明在时效初期, Al-1.2Cu-5.7Li 合金应该是优先形成富 Li 的 δ' 相,而 G. P. 区的形成则受到抑制,这与在 2195 合金中观测不到 G. P. 区的实验结果相一致。

2) Al-1.2Cu-5.7Li-xMg 合金中,出现明显的 Cu clusters,而 Li 原子团簇的偏聚过程则受到抑制,且空位团簇的形态也发生了变化,多与 Cu-Mg 原子团簇一起形成 Mg-Cu-Vacancy 复合体。同时, Mg 原子多以 Mg-Li 原子对, Mg-Cu-Vacancy 复合体的形式存在。

3) Al-1.2Cu-5.7Li-xMg 合金中微量 Mg 的作用是通过 Mg/Li 原子间存在强烈的相互作用调整 Li 原子团簇的偏聚形态,破坏 Li/Vacancy、Li/Cu 之间存在的鞍点组态,导致大量被 Li 原子 Clustering 过程锁定的 Cu 原子和空位被置换出来,形成 Mg-Cu-Vacancy 进而影响 Li、Cu 原子团簇的形态和空位的分布形态,从而影响随后的析出相分布形态的。

4) 从模拟计算的结果看, HRTEM 观察到的

时效早期 Al-Cu-Li 合金中 T1 相伴生 δ 相 (Al_3Li) 而形核的现象, 可以从 Li 的加入改变空位团簇的分布形态来加以说明, 以往的解释都是从 Li 的加入降低 Al 基体的内禀层错能的角度去阐述的。

5) 对 Al-Cu-Li 合金的微合金化元素的选择, 从热力学上看, 应该优先选择与 Li 原子存在强烈相互作用的元素。

REFERENCES

- [1] Lebaron J M. US 2381219, 1945.
- [2] Blackburn L, Jr Starke E A. Aluminum-Lithium Alloy V[M]. United Kingdom: Birmingham, 1989. 751.
- [3] Gao J, Thompson R G. Real time-temperature models for monte carlo simulations of normal grain growth[J]. Acta Mater, 1996, 44(11): 4565 - 4570.
- [4] Saito Y, Harada H. The monte-carlo simulation of ordering kinetics in Ni-base superalloys[J]. Materials Science and Engineering A, 1997, 223A(1-2): 1 - 9.
- [5] Deurinck P, Creemers C. Monte-carlo simulation of Cu segregation and ordering at the (110) surface of $\text{Cu}_{75}\text{Pd}_{25}$ [J]. Surface Science, 1998, 419: 62 - 77.
- [6] 刘祖耀, 郑子樵, 陈大揪, 等. 正常晶粒长大的计算机模拟(I) [J]. 中国有色金属学报, 2003, 13(6): 1357 - 1360.
LIU Zuyao, ZHENG Ziqiao, CHEN Daqin, et al. Computer simulation of grain growth (I): modified transition probability[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2003, 13(6): 1357 - 1360.
- [7] 刘祖耀, 李世晨, 郑子樵, 等. 正常晶粒长大的计算机模拟(II) [J]. 中国有色金属学报, 2004, 14(1): 122 - 126.
LIU Zuyao, LI Shichen, ZHENG Ziqiao, et al. Computer simulation of grain growth(II): influence of shape and orientation of second phase particles on grain growth[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2004, 14(1): 122 - 126.
- [8] LI Jian, ZHENG Ziqiao, LIU Zuyao, et al. The modification of computer simulation of the normal grain growth[J]. Trans Nonferrous Met Soc China, 2004, 14(6): 1156 - 1161.
- [9] Hirosawa S, Sato T, Kamio A, et al. Classification of the role of micralloying elements in phase decomposition of Al based alloys[J]. Acta Mater, 2000, 48: 1797 - 1806.
- [10] 郑子樵, 黄碧萍, 尹登峰. 微量 Ag 和 Mg 在 2195 合金种合金化作用[J]. 中南工业大学学报, 1998, 29(1): 42 - 45.
ZHENG Ziqiao, HUANG Biping, YIN Dengfeng. Alloying role of Ag and Mg in 2195 Alloy[J]. Journal of Central South University of Technology, 1998, 29(1): 42 - 45.
- [11] Huang B P, Zheng Z Q. Independent and combined roles of precipitation kinetics of $\text{Al-Cu-Li(Mg)-(Ag)-Zr-Ti}$ alloys[J]. Acta Mater, 1998, 46(12): 4381 - 4393.
- [12] 李世晨, 郑子樵. 计算机模拟 Al-Cu(Mg)-(Ag) 合金时效初期原子分布状态[J]. 中南工业大学学报, 2000, 31(5): 441 - 444.
LI Shichen, ZHENG Ziqiao. Computer simulation of distribution of the solutes in Al-Cu(Mg)-(Ag) on initial aging stages[J]. Journal of Central South University of Technology, 2000, 31(5): 441 - 444.
- [13] Noble B, Thompson G E. T1(Al_2CuLi) precipitation in aluminum-copper-lithium[J]. Journal of Metal Science, 1972, 6: 167 - 172.
- [14] Yoshimura R, Konno T J, Abe E. Transmission electron microscopy study of the early stage of precipitates in aged Al-Li-Cu alloys[J]. Acta Mater, 2003, 51: 2891 - 2903.

(编辑 陈爱华)