

Al-Pb 互不溶体系机械合金化过程中固溶度的计算^①

方 芳, 朱 敏, 袁 斌, 王 涛
(华南理工大学 机械工程学院, 广州 510641)

[摘 要] 计算了 8 种 fcc 金属(Ag, Al, Au, Cu, Ni, Pb, Pd 和 Pt) 和 Al-Pb 互不溶体系的嵌入原子势(EAM), 并计算了用 EAM 模型计算的结构稳定性。计算结果和实验结果吻合较好, 而且拟合得到的 fcc 模型在结构上是稳定的。运用拟合得到的数据计算了 Pb 在 Al 中的溶解热, 结果与 *ab initio* 计算结果相近。根据机械合金化扩展固溶度的理论, 计算了 Al-Pb 互不溶体系机械合金化后的固溶度, 约为 0.19% (摩尔分数)。

[关键词] Al-Pb 互不溶体系; 嵌入原子势; 机械合金化; 溶解热; 固溶度

[中图分类号] TG 132.3

[文献标识码] A

互不溶合金体系作为材料的重要来源之一, 正逐渐引起人们的关注。由于该体系的混合热为正值($H_{\text{mix}} \geq 0$), 所以很难用传统的铸造法在该种体系中制备超细混合合金。20 世纪 80 年代末, 研究者发现用机械合金化(MA)的方法很容易克服互不溶体系中因组元的密度或熔点相差较大而产生的问题, 得到常规方法难以制备的组织均匀、细小、弥散的合金材料, 并且这些合金表现出特殊的性能, 从而引起研究者的极大兴趣。

值得注意的是互不溶体系在 MA 过程中能发生非平衡相变, 导致亚稳相形成。目前已通过 MA 技术制备得到了过饱和固溶体、非晶、纳米相复合结构等亚稳态结构。这些亚稳态结构常常表现出特殊的力学和物理性能, 例如: Fe-Cu 系的纳米晶过饱和固溶体具有软化效应^[1]; MA 制备得到的 Cu-Co 纳米相复合结构具有巨磁阻效应^[2]; 互不溶 Al-Pb 合金系 MA 后耐磨性明显提高^[3]。这些独特的性能与亚稳相的微观结构有密切关系, 所以弄清互不溶体系 MA 后的微观结构转变是国内外研究者共同感兴趣的课题, 它的进一步研究将会为互不溶合金系的广泛应用提供新的理论支持。但由于互不溶体系 MA 的研究还处于发展阶段, 目前尚未形成成熟的理论来准确地预测该种体系在 MA 过程中亚稳相的形成和转变, 所以仅通过试验还无法验证互不溶合金系机械合金化过程中的相变, 好在近年来伴随计算材料科学的出现和发展, 已经有可能用计算机模拟技术模拟互不溶体系球磨过程中的非平

衡态转变和亚稳相的显微结构, 为实验研究提供依据。

Al-Pb 是一种典型的二元互不溶体系, 主要用作轴瓦和焊剂材料。实验结果表明, 机械合金化能得到组织均匀、细小、弥散分布的 Al-Pb 合金, 而且耐磨性明显提高^[3,4]。为进一步分析 Al-Pb 合金系球磨过程中的非平衡态相变, 本文作者采用嵌入原子法(Embedded Atom Method, 简称 EAM)^[5], 计算了 8 种 fcc 结构金属的 EAM 势函数, 以及 Al-Pb 互不溶合金系的 EAM 势函数, 并用所得 EAM 模型参数计算了 Pb 在 Al 中的溶解热和球磨后 Pb 在 Al 中扩展的固溶度。

1 EAM 模型和溶解热的计算

根据嵌入原子理论, 一个原子集团的总能量为^[5]

$$E_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \sum_{i,j(i \neq j)} \phi(r_{ij}) + \sum_j F_j(\rho) \quad (1)$$

$$\rho_i = \sum_{j(i \neq i)} f(r_{ij}) \quad (2)$$

式中 $\phi(r_{ij})$ 为相距 r_{ij} 的原子 i 和 j 之间的相互作用势; $F_i(\rho)$ 为嵌入函数; ρ_i 为系统中所有其它原子在 i 原子处产生的电子密度。嵌入函数可以理解为一个原子嵌入到系统其他原子后产生局部原子密集时所需能量。

在计算中分别取如下的 $F(\rho)$, $\phi(r)$ 和 $f(r)$ 等函数形式:

① [基金项目] 国家自然科学基金资助项目(59925102)和广东省自然科学基金资助项目(980557)

[收稿日期] 2001- 11- 15; [修订日期] 2001- 12- 17 [作者简介] 方 芳(1974-), 女, 博士研究生。

$$f(r) = f_e \exp\left[-K_1\left(\frac{r}{r_e} - 1\right)\right] \quad (3)$$

$$\phi(r) = D_M \left\{ 1 - \exp\left[-\alpha_M(r - R_M)\right] \right\}^2 - D_M \quad (4)$$

$$F(\rho) = - (E_c - E_t) \left(\frac{\rho}{\rho_e}\right)^{K_2} \left[1 - K_2 \ln\left(\frac{\rho}{\rho_e}\right) \right] \quad (5)$$

式中 ρ_e 表示平衡时总的电荷密度; r_e 为平衡时的原子间距; f_e 取为 1; K_1 , D_M , R_M , α_M 和 K_2 为模型参数, 可以通过拟合纯金属的晶格常数 a_0 、结合能 E_{coh} 、空位形成能 E_v^f 以及弹性常数 C_{11} , C_{12} 和 C_{44} 来确定。

根据 EAM 理论, Al-Pb 互不溶体系的总能量可用下式表示:

$$\begin{aligned} E_{\text{tot}} = & \sum_{i_{\text{Al}}} F_{\text{Al}}(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{i_{\text{Al}} j_{\text{Al}}} \phi_{\text{Al-Al}}(r_{ij}) + \\ & \frac{1}{2} \sum_{i_{\text{Al}} j_{\text{Pb}}} \phi_{\text{Al-Pb}}(r_{ij}) + \sum_{i_{\text{Pb}}} F_{\text{Pb}}(\rho_i) + \\ & \frac{1}{2} \sum_{i_{\text{Pb}} j_{\text{Pb}}} \phi_{\text{Pb-Pb}}(r_{ij}) + \frac{1}{2} \sum_{i_{\text{Pb}} j_{\text{Al}}} \phi_{\text{Pb-Al}}(r_{ij}) \end{aligned} \quad (6)$$

其中共有七个函数 $\phi_{\text{Al-Al}}$, $\phi_{\text{Pb-Pb}}$, $\phi_{\text{Al-Pb}}$, ρ_{Al} , ρ_{Pb} , F_{Al} 和 F_{Pb} , 除 $\phi_{ab}(r_{ij})$, $\phi_{ba}(r_{ij})$ 外, 其余的函数形式和参数均与纯金属中的相同。

Al-Pb 的合金势函数取为 Johnson 方程^[6]:

$$\begin{aligned} \phi_{\text{Al-Pb}} = & \frac{1}{2} \left[\phi_{\text{Al-Al}}(r) \frac{f_{\text{Pb}}(r)}{f_{\text{Al}}(r)} + \right. \\ & \left. \phi_{\text{Pb-Pb}}(r) \frac{f_{\text{Al}}(r)}{f_{\text{Pb}}(r)} \right] \end{aligned} \quad (7)$$

Pb 在 Al 中的溶解热计算采用文献[7]中的方法, 机械合金化后 Al-Pb 的固溶度可根据求出的溶

解热用 E. Ma 的公式^[8]求解。

2 计算结果与讨论

2.1 8 种 fcc 结构金属 EAM 拟合结果

在模拟计算过程中的 r_{cut} 值取为 $1.32a_0$ (a_0 为纯金属的晶格常数), 居第三和第四近邻原子之间。表 1 为 8 种 fcc 纯金属 (Ag, Al, Au, Cu, Ni, Pb, Pd, Pt) 性能参数的实验值和 EAM 模型计算值, 以及两者间的均方根差最小值 (x_{rms})。对比表中的数据可发现, 拟合得到的计算值与实验值吻合较好。表 2 列出了拟合得到的 fcc 结构金属 EAM 模型参数。图 1~3 为 8 种 fcc 金属 EAM 模型中 $\rho(r)$, $\phi(r)$ 和 $F(\rho)$ 函数的变化规律。

为了检验目前 EAM 势模型下 fcc 晶格的结构稳定性, 还计算了 8 种金属 fcc 与 bcc 和 fcc 与 hcp 之间的结合能之差 $E_{\text{bf}} = E_c^{\text{fcc}} - E_c^{\text{bcc}}$, $E_{\text{hf}} = E_c^{\text{fcc}} - E_c^{\text{hcp}}$ 。表 3 是用本文中选取的 EAM 模型计算的 8 种 fcc 结构稳定性与实验值以及与文献[16]报道的计算值的比较。从表中数据可以看出, 所拟合的 8 种金属的 fcc 结构具有最大的结合能, hcp 结构具有中间大小的结合能, 而 bcc 结构的结合能为最小, 这与相图计算得到的结果是一致的^[10]。与文献[16]的稳定性计算结果相比, 我们的 EAM 模型计算中使用了较小的截止距离, 得出的结构稳定性与实验值更加吻合。所以认为本文中的 EAM 模型可以更好地预测 fcc 结构的稳定性。

2.2 溶解热计算

fcc 结构的 A-B 固溶体的溶解热定义为: 将一

表 1 纯金属输入和输出物理参数

Table 1 Input and output of pure metal properties

Property	Metal							
	Ag	Al	Au	Cu	Ni	Pb	Pd	Pt
$a_0 / \text{\AA}$	4.09 4.09 ^a	4.05 4.05 ^a	4.079 4.08 ^a	3.615 3.615 ^a	3.52 3.52 ^a	4.9499 4.95 ^a	3.888 3.89 ^a	3.92 3.92 ^a
$C_{11} / (10^5 \text{J} \cdot \text{cm}^{-3})$	1.26 1.24 ^c	0.94 1.14 ^c	1.88 1.86 ^c	1.75 1.70 ^c	2.465 2.465 ^c	0.531 0.491 ^b	2.322 2.341 ^d	3.24 3.47 ^c
$C_{12} / (10^5 \text{J} \cdot \text{cm}^{-3})$	0.921 0.934 ^c	0.679 0.619 ^c	1.55 1.57 ^c	1.198 1.225 ^c	1.472 1.473 ^c	0.397 0.413 ^b	1.77 1.76 ^b	2.63 2.51 ^c
$C_{44} / (10^5 \text{J} \cdot \text{cm}^{-3})$	0.458 0.461 ^c	0.332 0.316 ^c	0.419 0.42 ^c	0.748 0.758 ^c	1.247 1.247 ^c	0.150 0.152 ^b	0.713 0.712 ^b	0.776 0.765 ^c
$E_{\text{coh}} / \text{eV}$	2.852 2.85 ^b	3.34 3.36 ^d	3.90 3.93 ^b	3.53 3.54 ^b	4.44 4.45 ^b	2.02 2.03 ^d	3.86 3.91 ^d	5.74 5.77 ^b
E_v^f / eV	1.10 1.099 ^b	0.75 0.743 ^b	0.90 0.90 ^b	1.30 1.30 ^b	1.60 1.59 ^c	0.58 0.581 ^b	1.40 1.404 ^c	1.50 1.496 ^b
$x_{\text{rms}} / \%$	0.41683	3.53861	0.28722	0.65366	0.02392	1.02432	0.26323	1.41157

1) The top date of each property is calculated value and lower data is experimental value.

2) Superscripts a, b, c, and d represent Refs. [9] ~ [12] respectively.

表2 8种fcc结构金属的EAM模型参数

Table 2 EAM model parameters of eight fcc metals

Metals	EAM model parameter						
	K_1	f_e	D_M/eV	$R_M/\text{\AA}$	$\alpha_M/\text{\AA}^{-1}$	K_2	ρ_e
Ag	24.8111153	1	0.1642850	2.9286039	2.1738317	0.2571740	12.0002069
Al	13.2674675	1	0.1101142	2.8946831	2.2710571	0.3359885	12.0260820
Au	16.7621937	1	0.1341722	2.9100907	2.3405571	0.4514679	12.0059042
Cu	13.5880756	1	0.1921345	2.5917008	2.4003537	0.340159	12.0227156
Ni	12.3454103	1	0.2457952	2.5096438	2.7849581	0.2256223	12.0389376
Pb	22.7697105	1	0.0878186	3.5353518	1.8966371	0.2996257	12.0004816
Pd	10.4704323	1	0.2060399	2.7766418	2.3984122	0.7104539	12.0897112
Pt	23.5862503	1	0.2251112	2.7984149	2.4015169	0.3255438	12.0003443

表3 8种fcc结构金属结构稳定性比较

Table 3 Stability for eight fcc pure metals

Parameters	Metals							
	Ag	Al	Au	Cu	Ni	Pb	Pd	Pt
$a_0^{\text{bcc}}/\text{\AA}$	3.26	3.23	3.25	2.89	2.81	3.94	3.10	3.12
$a_0^{\text{hcp}}/\text{\AA}$	2.89	2.87	2.89	2.56	2.49	3.50	2.75	2.77
$(E_{\text{fcc}} - E_{\text{bcc}})/\text{eV}$	0.0749	0.01354	0.055	0.0925	0.0797	0.0368	0.0284	0.0948
	0.03 ^a	0.10 ^a	0.04 ^a	0.04 ^a	0.07 ^a	0.10 ^a	0.10 ^a	0.15 ^a
$(E_{\text{fcc}} - E_{\text{hcp}})/\text{eV}$	0.0012	0.0079	0.00786	0.0169	0.0123	0.0055	0.0134	0.0144
	0.003 ^a	0.05 ^a	0.005 ^a	0.006 ^a	0.015 ^a	0.02 ^a	0.02 ^a	0.02 ^a
	0.0012 ^b	0.0003 ^b	0.0005 ^b	0.0012 ^b	0.001 ^b		0.0016 ^b	0.0011 ^b

1) For $(E_{\text{fcc}} - E_{\text{bcc}})/\text{eV}$, the data in top line represent the calculated value by this paper, the data in middle line represent the experimental value of this paper, and the data in bottom line represent the calculated value of Ref. [14]. And the same to $(E_{\text{fcc}} - E_{\text{hcp}})/\text{eV}$.

2) Superscripts a and b represent the Ref. [13] and Ref. [14], respectively.

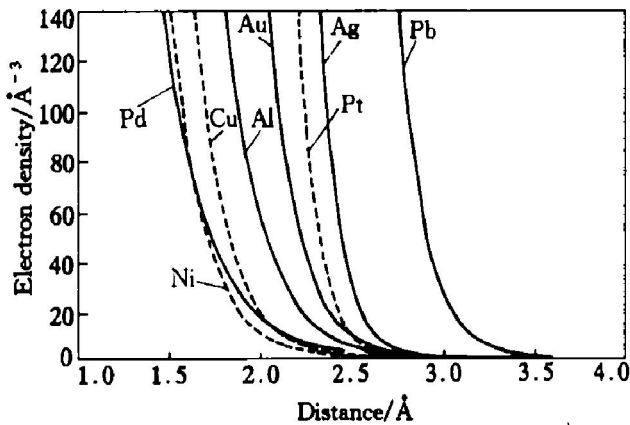


图1 电荷密度函数的变化规律

Fig. 1 Electron density functions for metals Ag, Al, Au, Cu, Ni, Pb, Pd and Pt

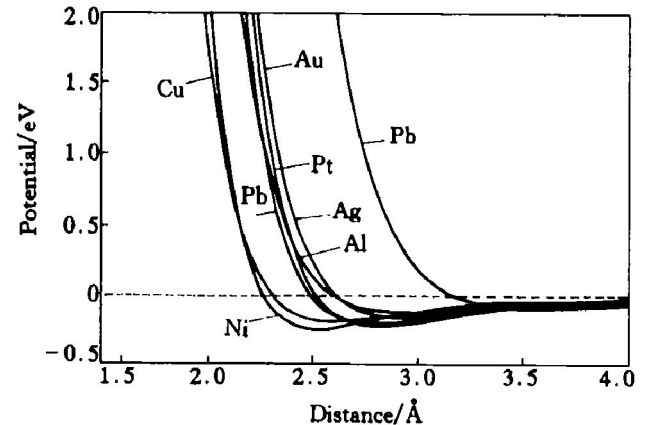


图2 二体势的变化规律

Fig. 2 Potential functions for metals Ag, Al, Au, Cu, Ni, Pb, Pd and Pt

个B原子从纯B金属中取出,放入纯A结构过程中系统总能量的变化^[7]。

a) 在纯A和纯B的fcc结构中,单个A原子和B原子的能量分别可用公式(8)和(9)表示:

$$E_{A-1} = F_A(\bar{\rho}_A) + 6\phi_{aa}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}a_A\right) + 3\phi_{aa}(a_A) + 12\phi_{aa}\left(\frac{\sqrt{6}}{2}a_A\right) \quad (8)$$

$$E_{B-1} = F_B(\bar{\rho}_B) + 6\phi_{bb}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}a_B\right) + 3\phi_{bb}(a_B) + 12\phi_{bb}\left(\frac{\sqrt{6}}{2}a_B\right) \quad (9)$$

式中 $F_A(\rho)$, $F_B(\rho)$ 和 $\phi_{aa}(r)$, $\phi_{bb}(r)$ 分别为A原子和B原子的嵌入能函数和势函数; $\bar{\rho}_A$ 和 $\bar{\rho}_B$ 为A和B原子的平衡电荷密度,可用下式来计算:

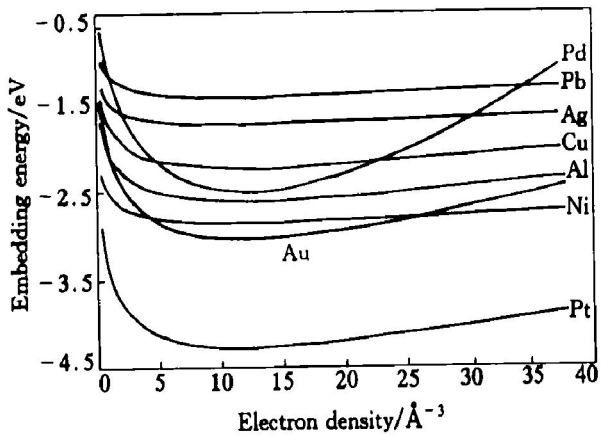


图3 嵌入函数的变化规律

Fig. 3 Embedding energy of metals (Ag, Al, Au, Cu, Ni, Pb, Pd and Pt) as a function of the background electron density

$$\bar{\rho}_A = 12\rho_A\left(\frac{\sqrt{2}}{2}a_A\right) + 6\rho_A(a_A) + 24\rho_A\left(\frac{\sqrt{6}}{2}a_A\right) \quad (10)$$

$$\bar{\rho}_B = 12\rho_B\left(\frac{\sqrt{2}}{2}a_B\right) + 6\rho_B(a_B) + 24\rho_B\left(\frac{\sqrt{6}}{2}a_B\right) \quad (11)$$

式中 ρ_A 和 ρ_B 是原子的电荷密度, a_A 和 a_B 为纯 A 和纯 B 金属的晶格常数。这里我们考虑了最近邻、次近邻和第三近邻间的相互作用, 主要是因为我们的 EAM 模型中选取的截止距离 r_{cut} 在第三和第四近邻原子之间。

b) 一个 B 原子溶入纯 fcc 结构 A 中后的能量为 E_{B-2} :

$$E_{B-2} = F_b(\bar{\rho}_A) + 6\phi_{ab}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}a_A\right) + 3\phi_{ab}(a_A) + 12\phi_{ab}\left(\frac{\sqrt{6}}{2}a_A\right) \quad (12)$$

c) 当 B 原子溶入 A 结构中后, 最靠近 B 原子的 A 原子的能量为 E_{A-2}^1 :

$$E_{A-2}^1 = F_a\left[\bar{\rho}_A - \rho_A\left(\frac{\sqrt{6}}{2}a_A\right) + \rho_B\left(\frac{\sqrt{2}}{2}a_A\right)\right] + \frac{11}{2}\phi_{aa}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}a_A\right) + \frac{1}{2}\phi_{ab}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}a_A\right) + 3\phi_{aa}(a_A) + 12\phi_{aa}\left(\frac{\sqrt{6}}{2}a_A\right) \quad (13)$$

d) 次靠近 B 原子的 A 原子的能量为 E_{A-2}^2 :

$$E_{A-2}^2 = F_a\left[\bar{\rho}_A - \rho_A(a_A) + \rho_B(a_A)\right] + 6\phi_{aa}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}a_A\right) + \frac{5}{2}\phi_{ab}(a_A) + \frac{1}{2}\phi_{ab}(a_A) + 12\phi_{aa}\left(\frac{\sqrt{6}}{2}a_A\right) \quad (14)$$

e) 第三近邻 B 原子的 A 原子的能量为 E_{A-2}^3 :

$$E_{A-2}^3 = F_a\left[\bar{\rho}_A - \rho_A\left(\frac{\sqrt{6}}{2}a_A\right) + \rho_B\left(\frac{\sqrt{6}}{2}a_A\right)\right] + 6\phi_{aa}\left(\frac{\sqrt{2}}{2}a_A\right) + 3\phi_{aa}(a_A) + \frac{23}{2}\phi_{aa}\left(\frac{\sqrt{6}}{2}a_A\right) + \frac{1}{2}\phi_{ab}\left(\frac{\sqrt{6}}{2}a_A\right) \quad (15)$$

根据以上公式, B 原子溶入 fcc 结构 A 中的溶解热 $\Delta E_{B \rightarrow A}$ 可由公式(16)计算:

$$\Delta E_{B \rightarrow A} = 12E_{A-2}^1 + 6E_{A-2}^2 + 24E_{A-2}^3 + E_{B-2} - 42E_{A-1} - E_{B-1} \quad (16)$$

设 A 为 Al, B 为 Pb, 通过计算得到 Pb 在 Al 中的溶解热为 155.3 kJ/mol, 与 *ab initio* 计算值 146.68 kJ/mol 接近^[15]。这可以说明本文作者计算得到的 Al-Pb 合金 EAM 势函数是可行的。

2.3 机械合金化后 Al-Pb 固溶度计算

E. Ma 提出了机械合金化后固溶度的计算公式^[16]:

$$x_B^{sol} = \exp\left[-\frac{\Omega(1-x_B^{sol})^2 + \Delta G_B - \frac{2\lambda}{r}V_m - \sigma V_m}{R(1+y_b)T}\right] \quad (17)$$

式中 Ω 为溶解热; ΔG_B 为溶质原子 Pb 的 bcc 结构和 fcc 结构的自由能差; $2\lambda/r$ 是为考虑由于球磨产生的大量界面对固溶度的影响而加入的系数, 其中 r 是颗粒半径, λ 为颗粒的表面能; σV_m 是反映由于球的碰撞或伴随位错而产生的较大应力造成的化学势变化^[8], 其中 σ 是应力张量的静力学部分, V_m 是摩尔体积。此外, Pochet 等人首次提出了影响因子 y_b ^[17], 作为被束缚的原子和热激活原子间的比率。对于以上参数可以取一些代表性的数值, 如 $\Omega = 155.3$ kJ/mol, $\Delta G_B = 2.895$ kJ/mol^[18], $y_b = 3$, $\lambda = 1$ J/m², $r = 10$ nm^[1], $V_m = 108.27$ cm³/mol, T 为球磨温度(约为 350 K)。将这些参数代入公式(17), 用数值方法求出机械合金化后 Al-Pb 合金的固溶度约为 0.19% (摩尔分数)。所以认为对于溶解热值超过 100 kJ/mol 的 Al-Pb 合金系, 并不能通过球磨的方法将其固溶度扩展到一个较大的值, 主要是由于 Al-Pb 合金体系的较大正混合热会影响球磨造成的固溶度扩展。这与 Fe-Cu 互不溶体系的情况正好相反: Fe-Cu 系经机械合金化后, 固溶度扩展到 10% (摩尔分数)^[16]。

通过晶格常数的测定、TEM 和 DSC 等方法, 文献[4]分析了 Al-Pb 互不溶体系机械合金化后固

溶度扩展的可能性,认为即使能形成过饱和固溶体,Pb在Al中的固溶度也会很小,约1%(摩尔分数);同时Al-Pb固溶体是一个亚稳相,在适当的热力学条件下会很快地分解;而且形成固溶体所需要达到的临界尺寸很小,无法通过球磨实现。与Al-Pb体系类似,其他一些互不溶合金体系(如Ag-Fe^[16],Cu-W^[18]和Ag-Ni^[19]),也无法通过机械合金化来显著扩展其固溶度。

3 结论

计算了8种fcc结构金属以及Al-Pb互不溶体系的EAM势函数,并用EAM拟合结果计算了Pb在Al中的溶解热,计算结果与*ab initio*结果一致。根据机械合金化固溶度扩展理论计算了球磨后Pb在Al中的固溶度,约为0.19%(摩尔分数)。可见机械合金化并不能大幅度扩展Pb在Al中的固溶度。

[REFERENCES]

- [1] Zhu M, Li B L, Gao Y, et al. Microstructure characteristics of nanophase composite synthesized by mechanical alloying of immiscible Pb-Al and Fe-Cu system [J]. *Scripta Mater*, 1997, 36: 447- 453.
- [2] Mahon S W. Magnetoresistance and structure state of Cu-Co, Cu-Fe compounds obtained by mechanical alloying [J]. *Mater Sci Forum*, 1996, 225 - 227: 157 - 162.
- [3] Zhu M, Gao Y. Improvement of the wear behaviour of Al-Pb alloys by mechanical alloying [J]. *Wear*, 2000, 242: 47- 53.
- [4] Zhu M, Che X Z, Li Z X, et al. Mechanical alloying of immiscible Pb-Al binary system by high energy ball milling [J]. *J Material Science*, 1998, 33: 5873- 5881.
- [5] Daw M S, Baskes M I. Embedded-atom method-derivation and application to impurities, surfaces and other defects in metals [J]. *Phy Rev*, 1984, B29: 6443- 6453.
- [6] Johnson R A. Alloy metals with the embedded-atom method [J]. *Phy Rev*, 1989, B15: 12554- 12559.
- [7] Grujicic M, Zhou X W. Analysis of Fe-Ni-Cr-N austenite using the embedded-atom method [J]. *CALPHAD*, 1993, 17: 383- 387.
- [8] Ma E, Sheng H W, He P J, et al. Solid-state alloying in nanostructured binary systems with positive heat of mixing [J]. *Material Science and Engineering*, 2000, 286: 48- 57.
- [9] Kittel C. *Introduction to Solid State Physics*, 5th ed [M]. New York: Wiley, 1976. 297.
- [10] Smithells C J. *Smithells Metals Reference Book*, 6th ed [M]. London: Butter Worths, 1983. 14- 20.
- [11] Simmons G, Wang H. *Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties: A handbook* [M]. Cambridge, MA: MIT Press, 1971. 302.
- [12] Weast R C. *Handbook of Chemistry and Physics* [M]. Boca Raton, FL: CRC, 1984. 74.
- [13] Baskes M I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities [J]. *Phy Rev*, 1992, B46: 2727- 2742.
- [14] Cai J, Ye Y Y. Simple analytical embedded-atom-potential model including a long-range force for fcc metals and their alloys [J]. *Phy Rev*, 1996, B54: 8398 - 8410.
- [15] Landa A, Wynblatt P, Siegel D J, et al. Development of glue-type potentials for the Al-Pb system: Phase diagram calculation [J]. *Acta Materialia*, 2000, 48: 1753 - 1761.
- [16] Ma E, He J H, Schilling P J. Mechanical alloying of immiscible elements: Ag-Fe contrasted with Cu-Fe [J]. *Phy Rev*, 1997, B55: 5542- 5545.
- [17] Pochet P, Tominez E, Chaffron L. Order-disorder transformation in Fe-Al under ball-milling [J]. *Phy Rev*, 1995, B52: 4006- 4011.
- [18] Gaffet E, Louison C, Harmelin M. Metastable phase transformations induced by ball-milling in the Cu-W system [J]. *Material Science Engineering*, 1991, 134: 1380- 1387.
- [19] Xu J, Herr U, Klassen T. Formation of supersaturated solid solutions in the immiscible Ni-Ag system by mechanical alloying [J]. *J Appl Phys*, 1996, 79: 3935- 3939.

Solubility after mechanical alloying for Al-Pb immiscible alloy system

FANG Fang, ZHU Min, YUAN Bin, WANG Tao

(School of Mechanical Engineering, South China University Technology,
Guangzhou 510641, China)

[Abstract] The physical properties along with the structure stability for Ag, Al, Au, Cu, Ni, Pb, Pd and Pt are calculated by embedded atom method (EAM). The calculated results of pure metals are in general agreement with the experimental values. Structure stability calculation shows that fcc structure is much more stable than bcc and hcp structures for eight fcc pure metals. The heat of solution for Pb in Al by our Al-Pb EAM potential is calculated and the result is close to the *ab initio* calculated value. By the calculated heat of solution the solubility for Al-Pb after mechanical alloying is also calculated and the result is about 0.19% (mole fraction).

[Key words] Al-Pb immiscible alloy system; EAM potential; mechanical alloying; heat of solution; solubility

(编辑 朱忠国)