

金属-类金属非晶态合金的菱面体单元 结构模型与形成能力的关系^①

张东明 章桥新 张守国*

(武汉工业大学新材料研究所, 武汉 430070; * 东北大学理学院, 沈阳 110006)

摘 要 进一步发展了非晶态合金菱面体单元结构模型的概念, 认为不仅存在(2: 1)菱面体单元结构, 而且存在(1: 1)菱面体单元结构和(4: 1)菱面体单元结构。通过计算上述几种结构的金属-类金属键与类金属含量的关系曲线, 发现其变化趋势和实验得到的非晶态合金形成能力与类金属含量的关系曲线一致, 因而所提出的几种菱面体单元结构模型得到实验支持。

关键词 (2: 1)菱面体单元结构 (1: 1)菱面体单元结构 (4: 1)菱面体单元结构 金属-类金属键
非晶态合金形成能力

非晶态合金的结构问题一直受到许多学者的关注, 到目前为止, 已提出了几种结构模型, 如硬球无规密堆模型^[1]、拓扑无序模型^[2]、微晶模型^[3]、菱面体单元模型^[4, 5]等, 但还没有完全一致的看法。

菱面体单元结构模型已经得到许多实验的支持^[6, 7], 它很好地解释了在类金属含量 $X = 25\%$ 时, 晶化温度、电阻率、杨氏模量等参数出现最大值的现象。但还有些实验, 仅用简单的菱面体单元结构模型是不能解释的, 例如, 用非晶态薄膜厚度(t)来表示的非晶态合金的形成能力^[8], 它的最大值不仅在 $X = 25\%$ 处出现, 而且有些在 $X = 27.5\%$, 另外一些在 $X = 22.5\%$ 处出现。

为此, 我们进一步发展了菱面体单元结构模型(RUSM)的概念, 亦即除(2: 1)菱面体单元结构外, 在非晶态合金中还可能存在(1: 1)菱面体单元结构和(4: 1)菱面体单元结构, 从而在理论上很好地解释了非晶态合金形成能力(t)的变化规律。这一概念的发展, 不仅具有重要的物理意义, 而且还具有重要的实际应用价值。

1 菱面体单元结构模型及计算结果

我们称菱面体单元结构模型^[4, 5]为(2: 1)菱面体单元结构, 它由2个大四面体和1个大八面体构成。其中10个原子组成的大四面体由4个正四面体和1个正八面体组成, 属于单元内的原子数为1.3748个; 19个原子组成的大八面体由8个正四面体和6个正八面体组成, 属于单元内的原子数为5.2504个, (2: 1)菱面体单元结构内共有 $1.3748 \times 2 + 5.2504 = 8$ 个原子。

我们进一步发展的(1: 1)菱面体单元结构是由1个大四面体和1个大八面体组成的多面体单元, 如图1, 属于单元内的原子数为 $1.3748 + 5.2504 = 6.6252$ 个; 而(4: 1)菱面体单元结构是由4个大四面体和1个大八面体组成的多面体单元, 属于单元内的原子数为: $1.3748 \times 4 + 5.2504 = 10.7496$ 个。

不同位置的类金属原子(B)在单元内所占的原子数(N_0)及相应位置的金属-类金属键

① 收稿日期: 1996-03-01; 修回日期: 1996-07-12 张东明, 女, 33岁, 讲师

(n_0) 按表 1 计算^[9]。

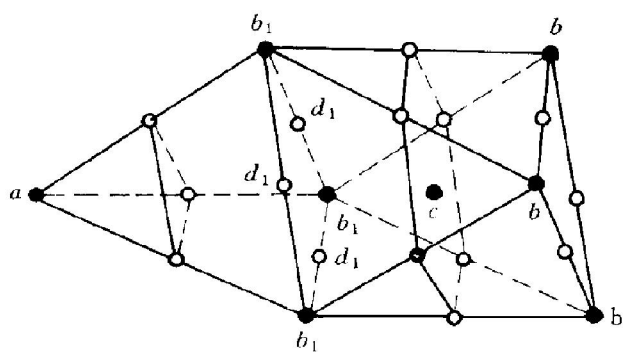


图 1 $A_{72.8}B_{27.2}$ 非晶态合金的(1:1)菱面体单元结构示意图

○—金属原子 A; ●—类金属原子 B

表 1 不同位置 N_0 及 n_0 的计算值

位置	a	b	b_1	c	c_1	d_1
N_0	0.05	0.10	0.15	1	1	0.5
n_0	3	4	5	12	11	8

根据类金属原子 B 的分布及表 1 可算出类金属含量 X 与金属-类金属键 n :

$$(1) \quad X = \frac{\text{类金属原子总数 } N}{\text{单元内原子总数}} \times 100\%,$$

$$N = \sum N_0$$

对(1:1)菱面体单元结构,

$$X = \frac{\sum N_0}{6.6252} \times 100\%$$

对(2:1)菱面体单元结构,

$$X = \frac{\sum N_0}{8} \times 100\%$$

对(4:1)菱面体单元结构,

$$X = \frac{\sum N_0}{10.7496} \times 100\%$$

$$(2) \quad n = \sum n_0, \quad \bar{n} = \frac{n}{N} = \frac{\sum n_0}{\sum N_0}$$

(1:1)菱面体单元结构的 X 及 n 的计算结果见表 2。由此, 我们可作出 $\bar{n}-X$ 曲线, 见图 2(a)。该曲线的 $\bar{n}$ 随 X 增大首先上升, 在 $X = 27.2\%$ 时, $\bar{n}$ 有最大值, 随后 $\bar{n}$ 随 X 增大而下降。

利用上述方法, 可作出(2:1)及(4:1)菱面体单元结构的 $\bar{n}-X$ 曲线, 如图 2(b) 和图 2(c)。它们与图 2(a) 曲线的变化规律相似。只

是(2:1)菱面体单元结构的 $\bar{n}-X$ 曲线在 $X = 25\%$ 处有最大值, 而(4:1)菱面体单元结构的 $\bar{n}-X$ 曲线在 $X = 22.3\%$ 处有最大值。

表 2 (1:1)菱面体单元结构的原子分布, 类金属含量(X) 及金属-类金属键(n)

B 原子分布	N	$X/\%$	n
c	1.00	15.09	12
ac	1.05	15.85	15
bc	1.10	16.60	16
abc	1.15	17.36	19
ab_1c	1.20	18.11	20
$2bc$	1.20	18.11	20
$a2bc$	1.25	18.87	23
ab_1bc	1.30	19.62	24
$3bc$	1.30	19.62	24
$a3bc$	1.35	20.38	27
$a2bb_1c$	1.40	21.13	28
$ab2b_1c$	1.45	21.89	29
$3bb_1c$	1.45	21.89	29
$a3bb_1c$	1.50	22.64	32
$a2b2b_1c$	1.55	23.40	33
$a3b_1bc$	1.60	24.15	34
$3b2b_1c$	1.60	24.15	34
$a3b2b_1c$	1.65	24.90	37
$a2b3b_1c$	1.70	25.66	38
$3b3b_1c$	1.75	26.41	39
$a3b3b_1c$	1.80	27.17	42
$a3bc_1d_1$	1.85	27.92	34
$a2bb_1c_1d_1$	1.90	28.68	35
$3bb_1c_1d_1$	1.95	29.43	36
$a3bb_1c_1d_1$	2.00	30.19	39

2 理论计算与实验比较

增本键, 铃木谦尔等^[8]从实验上做出了 $FeSiB$, $CoSiB$, $NiSiB$ 非晶态合金的形成能力(t) 与 Si、B 含量的关系图。这些图以 Si 含量为纵坐标, B 含量为横坐标, 将所形成的非晶合金的临界厚度 t 值标在纵横坐标对应的点上。我们将它们变换成以 t 为纵坐标, 以类金属 Si、B 含量之和 X 为横坐标的 $t-X$ 图, 其中 $FeSiB$ 的 $t-X$ 曲线如图 3 所示。这些曲线有如下的规律:(1) 曲线随 X 增加, t 上升; 当 X 为某一固定值时, t 有最大值; 当 X 继续增加, t 下降。(2) $X = 25\%$ 时, t 有最大值的曲线最多, 其中 $FeSiB$ 有三条, $CoSiB$ 有二条,

Ni-Si-B 有三条; $X = 27.5\%$ 时, t 有最大值的曲线较少, 其中 Fe-Si-B 有一条, Co-Si-B 有三条; $X = 22.5\%$ 时, t 有最大值的曲线最少, 仅 Fe-Si-B 有一条。

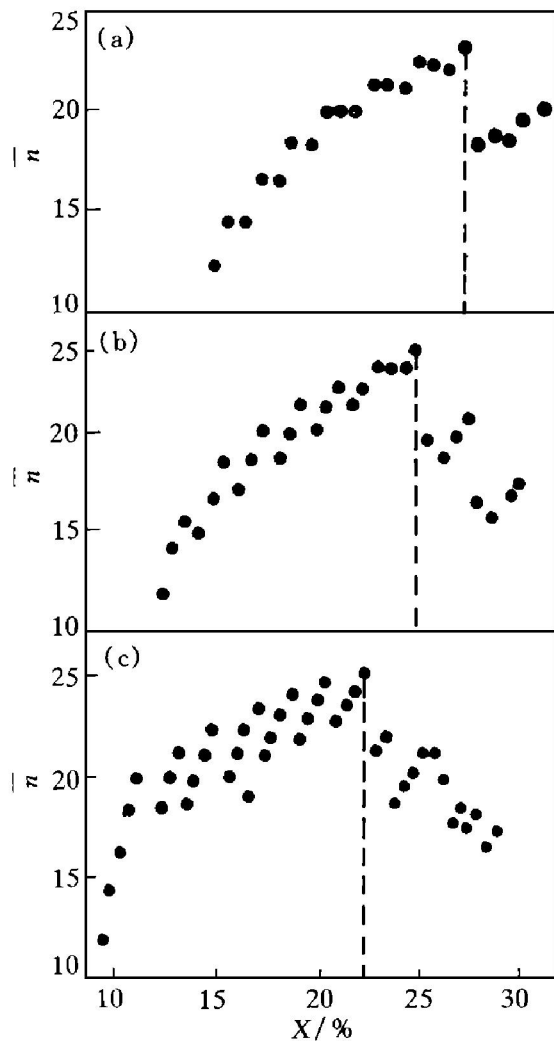


图2 利用菱面体单元结构模型计算的金属-类金属键($\bar{n}$)及相应的类金属含量(X)的关系

- (a) —利于(1:1)RUSM 的计算结果;
- (b) —利用(2:1)RUSM 的计算结果;
- (c) —利用(4:1)RUSM 的计算结果

上述实验结果与我们计算的 n - X 曲线极其相似。因此, 我们认为: 非晶态合金的形成能力是由金属-类金属键 n 决定的, 同时 t 曲线在 $X = 27.5\%$ 处有最大值时, 对应(1:1)菱面体单元结构; t 曲线在 $X = 25\%$ 处有最大值时, 对应(2:1)菱面体单元结构; t 曲线在 $X = 22.5\%$ 处有最大值时, 对应(4:1)菱面体单元结构。至于形成某种菱面体单元结构所对应的特殊条件, 将有待于进一步研究。

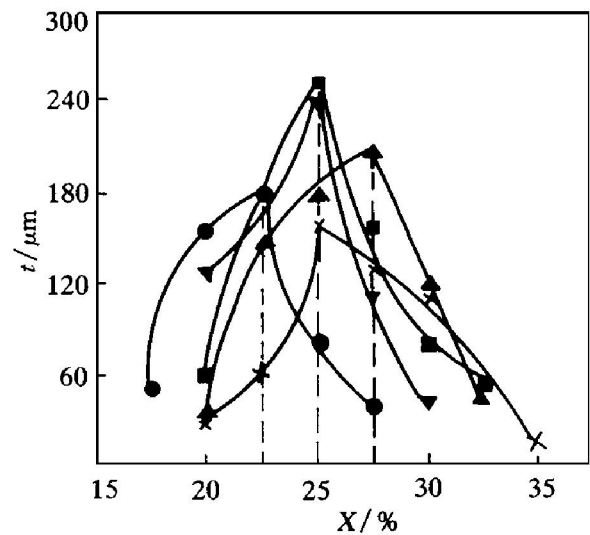


图3 Fe-Si-B 非晶态合金的临界厚度(t)与类金属含量(X)的关系^[2]

- × —Fe_{85-y}Si₁₅B_y; ▲ —Fe_{87.5-y}Si_{12.5}B_y;
- —Fe_{95-y}Si₅B_y; ■ —Fe_{90-y}Si₁₀B_y;
- ▼ —Fe_{92.5-y}Si_{7.5}B_y

3 结论

(1) 金属-类金属键 $\bar{n}$ 决定了非晶态合金的形成能力: 随 X 增大, $\bar{n}$ 曲线增大, t 升高; 在一定的 X 值, $\bar{n}$ 有最大值, t 也有最大值, 随后随 X 增加, $\bar{n}$ 曲线降低, t 曲线亦降低。

(2) 金属-类金属非晶态合金有如下的结构存在: (1:1) 菱面体单元结构, 在 $X = 27.5\%$ 时, $\bar{n}$ 有最大值, 并有最大的临界厚度 t ; (2:1) 菱面体单元结构, $X = 25\%$ 时 $\bar{n}$ 有最大值, 并有最大的临界厚度 t , 这种结构最多; (4:1) 菱面体单元结构, $X = 22.5\%$ 时 $\bar{n}$ 有最大值, 并有最大的临界厚度 t 。

参考文献

- 1 Gargill G G. J APPL Phys, 1970, 41: 2248.
- 2 Bell R J, Dean P. Phil Mag, 1972, 25: 1381.
- 3 Polk D E. J Non- Cry Sol, 1971, 5: 365.
- 4 Zhang Shouguo, Yu Yang. Materials Science and Engineering, 1991, A134: 1004- 1007.
- 5 Zhang Shouguo, Yu Yang. Materials Science and Engineering, 1991, A134: 1008- 1011.
- 6 Wang Hong, Zhang Shouguo. Materials Science and Engi

- neering, 1988, 97: 395– 397.
- 7 Zhang Shouguo, Qian Cunfu, Geng Yan, Zhang Dongming. Materials Science and Engineering, 1994, A181/A182: 966 – 968.
- 8 增本健, 铃木谦尔等编著. アモルファス金属の基礎. オーム株式会社出版部, 1982: 26.
- 9 Qian Cunfu, Zhang Shouguo, Zhang Dongming. In: Eighth International Conference on Rapidly Quenched and Metastable Materials. Sendai, Japan: The Japan Institute of Metals, 1993, 26E: 7– 11.

RELATIONSHIP BETWEEN RHOMBOHEDRON UNIT STRUCTURE MODEL AND FORMING ABILITY FOR METAL-METALLOID AMORPHOUS ALLOY

Zhang Dongming, Zhang Qiaoxin, Zhang Shouguo*

Advanced Materials Institute, Wuhan University of Technology, Wuhan 430070

* *Science College, Northeastern University, Shenyang 110006*

ABSTRACT The rhombohedron unit structure model (RUSM) concept drawn from (2: 1) RUSM has been extended to (1: 1) RUSM and to (4: 1) RUSM. The tendency of calculated curves of metal-metalloid bonds ($\bar{n}$) vs metalloid content by above RUSM are in good agreement with that of experimental one of critical thickness vs metalloid content for some amorphous alloys. This proves the proposed (1: 1) RUSM and (4: 1) RUSM to be reasonable.

Key words (2: 1) RUSM (1: 1) RUSM (4: 1) RUSM forming ability for amorphous alloy metal-metalloid bonds

(编辑 彭超群)

(From page 106)

INTERFACE BETWEEN Ti-CLADDING cBN AND METAL ALLOY BOND

Wang Mingzhi, Zang Jianbing, Wang Yanhui

Department of Materials Engineering,

Yanshan University, Qinhuangdao 066004

ABSTRACT Well-distributed Ti coatings were formed on the surface of cBN grits by means of magnetron sputtering method. DTA, XRD, SEM and EPMA techniques were used to investigate the reaction and composition of interface between cBN and the coating. Bond strength between coating and bond in the compsite made of Ti-cladding cBN and Cu-Co alloy bond was studied by bend test. Experimental results show that only boride and nitride films are formed on the surfaces of cBN grits, which increases the bond strength between cBN grit and the bond. This effect can be achieved conveniently and economically by using vacuum heat treatment of coated cBN grits.

Key words cBN Ti-coating interface bond

(编辑 彭超群)