

# 代位合金元素对 $\text{Fe}_3\text{Al}$ 金属间化合物结构与塑性的影响<sup>①</sup>

杨玉琪 盛丽珍 黄原定 毛卫民 孙祖庆  
(北京科技大学材料系, 北京 100083)

**摘要** 研究了 Cr、Mo、Ti、Ni、Mn、Si 等代位合金元素对当量成分、 $DO_3$  结构等轴晶  $\text{Fe}_3\text{Al}$  合金真空拉伸性能、 $DO_3$  转变温度  $T_c$ 、 $DO_3$  有序度、位错反相畴、位错组态等的影响, 从合金元素原子在  $\text{Fe}_3\text{Al}$  单胞亚点阵占位、原子解离能、反相畴界能等方面进行了初步探讨。结果表明, 与  $\text{Fe}_3\text{Al}$  相比, Cr 的添加降低合金的  $T_c$  温度、提高真空拉伸延伸率, 与 Cr-Al 原子对交互作用能、反相畴界能的降低有关; 其它三元合金都表现高的  $T_c$  温度与低的塑性。

**关键词**  $\text{Fe}_3\text{Al}$  亚点阵 位错反相畴界 有序无序转变 塑性

研究结果表明, 合金化及适当的热机械处理能使  $\text{Fe}_3\text{Al}$  基合金获得室温强度与塑性的良好配合<sup>[1, 2]</sup>。在众多的固溶合金元素中, 仅有 Cr 元素唯一提高了合金的室温拉伸延伸率<sup>[1, 3]</sup>。合金元素的添加, 不同程度地改变了合金的内禀特性<sup>[3]</sup>, 必定会对合金的微观结构产生影响, 表现出不同的宏观力学行为。

## 1 试样制备

本试验 7 种合金设计成分(原子百分数)分别为  $\text{Fe}-25\text{Al}$ ,  $\text{Fe}-25\text{Al}-5\text{Cr}$ ,  $\text{Fe}-25\text{Al}-5\text{Ti}$ ,  $\text{Fe}-25\text{Al}-5\text{Mo}$ ,  $\text{Fe}-25\text{Al}-5\text{Mn}$ ,  $\text{Fe}-25\text{Al}-3\text{Ni}$ ,  $\text{Fe}-20\text{Al}-5\text{Si}$ 。采用真空电弧炉熔炼。Si 元素的加入使合金热加工塑性大幅度降低,  $\text{Fe}-20\text{Al}-5\text{Si}$  合金在锻造过程中锻裂, 得不到板材, 包括  $\text{Fe}_3\text{Al}$  二元合金在内的其余 6 种合金都能在 1 000 ℃经空气锤自由锻及随后在 950 ~ 600 ℃经多道次轧制成 1.0~1.2 mm 厚的试验用板材。将其在 750 ℃再结晶退火处理 1 h

后, 再在 500 ℃有序化处理 13 d 以得到  $DO_3$  结构的等轴晶组织。

## 2 实验结果与分析

沿轧向切取工作标距为 3 mm × 10 mm 的拉伸试样。真空拉伸试验在 Gleeble-1500 机上进行, 拉伸速率为  $3.3 \times 10^{-3}/\text{s}$ , 真空度为 0.013 Pa。真空中拉伸以排除环境敏感效应, 拉伸前采用电解抛光去除试样表面在热处理过程中形成的氧化膜以排除表面的影响, 试验结果反映了合金元素对其内禀特性的影响。结果表明(图 1), 本试验合金元素对合金真空中的室温拉伸性能产生显著的不同影响。 $\text{Fe}-25\text{Al}$  与  $\text{Fe}-25\text{Al}-5\text{Cr}$  合金已发生屈服, 进入塑性变形阶段。与  $\text{Fe}-25\text{Al}$  合金相比, Cr 元素的加入, 使合金的屈服强度由 841 MPa 降为 695 MPa, 拉伸延伸率由 5.18% 提高到 9.1%, 断裂强度由 990 MPa 提高到 1 084 MPa; 分别加入 Mo、Mn、Ti、Ni 等元素后, 合金还没进入

① 国家自然科学基金项目(19335030)及冶金工业部科技司、中国核工业总公司资助项目

收稿日期: 1995-08-24; 修回日期: 1996-01-22 杨玉琪, 女, 49岁, 教授, 硕士

明显的塑性变形阶段就发生脆性断裂，拉伸延伸率依次降为 3.70%、2.10%、4.65% 及 2.15%，断裂强度分别降至 664、553、604 及 522 MPa。从图 1 还得到， $DO_3$  结构  $Fe_3Al$  合金拉伸曲线的典型特点是在屈服以后进入线性硬化阶段，而不是一般无序合金的抛物线硬化，这种曲线形状反映了拉伸过程的不同变形阶段中  $DO_3$  类型超结构位错组态的变化<sup>[4, 5]</sup>。

真空拉伸试样组织为  $DO_3$  结构的等轴晶，SEM 断口形貌观察结果表明<sup>[6]</sup>， $Fe_3Al$  二元合金的解理面上有明显的浅韧窝状的塑性变形痕迹，不同于空气中拉伸的脆性解理断裂形貌，表现出比空气中高的拉伸塑性<sup>[7]</sup>；加 Cr 以后，主要为沿晶断，拉伸延伸率明显高于二元  $Fe_3Al$ ，可能与解理强度的提高有关<sup>[8]</sup>；Mo、Ti、Ni 等元素显著降低拉伸塑性，断口为典型的脆性解理形貌； $Fe-25Al-5Mn$  合金的为解理与沿晶混合断口，拉伸延伸率仅为 2.1%，原因尚待研究。

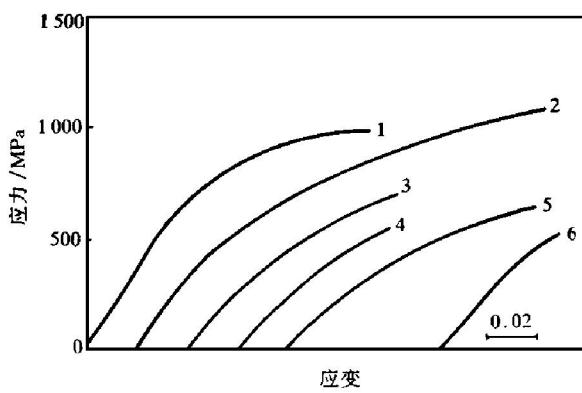


图 1 各试验合金室温真空

(0.013 Pa) 拉伸曲线

1— $Fe-25Al$ ; 2— $Fe-25Al-5Cr$ ; 3— $Fe-25Al-5Mo$ ;  
4— $Fe-25Al-5Mn$ ; 5— $Fe-25Al-5Ti$ ; 6— $Fe-25Al-3Ni$

中子衍射测定与谱线拟合结果得到<sup>[3]</sup>（图 2），本研究代位元素原子在  $DO_3$  结构  $Fe_3Al$  金属间化合物亚点阵中的占位可分为 3 种情况：(1) Cr、Mo、Ti 等原子分别进入  $\beta$  位，它们主要替代 Al 原子次近邻位置的 Fe 原子。(2) Mn、Ni 原子全部进入  $\alpha_1$ 、 $\alpha_2$  位，替代 Al 原子最近邻的 Fe 原子。(3) 合金元素 Si 全部进入

$\gamma$  位，( $Si+Al$ ) 原子超出当量成分的那部分原子被挤到  $\beta$  位。对于  $DO_3$  结构的  $Fe_3Al(Me)$  合金，如果 Me 占据铝的次近邻位置，那么次近邻原子对由  $Fe_3Al$  的  $Fe-Al$  转变为  $Fe-Al-Me$  时的  $Fe-Fe$ 、 $Fe-Al$ 、 $Al-Me$  对， $Al-Me$  原子对替代了部分  $Fe-Al$  对。合金元素 Cr、Mo、Ti 的占位就属于这类情况。由异类原子间原子对解离能  $D_0^{AB}$  值的计算结果得到<sup>[3]</sup>， $Cr-Al$  对的  $D_0^{AB}$  值(0.6960 eV)，比  $Fe-Al$  对的  $D_0^{AB}$  值(0.7457 eV) 小，表明  $Cr-Al$  原子间的相互作用较弱，即 Cr 元素的添加降低了  $DO_3$  结构的  $Fe_3Al$  金属间化合物的次近邻原子间的结合能，从而降低了合金的反相畴界能( $E_{NNNAPB}$ )，增大超点阵位错的四分位错间距，容易分解成二分位错，使  $Fe-25Al-5Cr$  合金表现出比  $Fe_3Al$  高的室温塑性。分别添加 Mo、Ti 元素后， $Mo-Al$ 、 $Ti-Al$  对的  $D_0^{AB}$  分别提高到 1.1828 eV 及 0.8059 eV，与  $Fe-Al$  对相比， $Ti-Al$ 、 $Mo-Al$  原子间相互

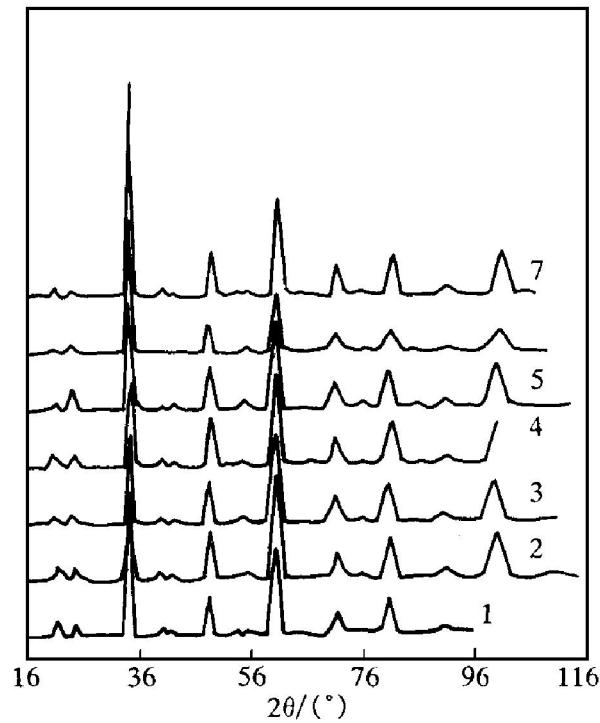


图 2 各试验合金的中子衍射测定

与谱线拟合结果

1— $Fe-25Al$ ; 2— $Fe-25Al-5Cr$ ; 3— $Fe-25Al-5Mo$ ;  
4— $Fe-25Al-5Mn$ ; 5— $Fe-25Al-5Ti$ ; 6— $Fe-25Al-3Ni$ ;  
7— $Fe-20Al-5Si$

作用较强, 增大了合金的次近邻反相畴界能, 四分位错更不易分解, 使合金变得更脆。真空拉伸试验结果(图 1), 对拉断试样表面滑移线(图 3)、薄膜试样位错(图 4)、位错反相畴界形貌(图 5)的观察都证实了这一点。Fe-Al-Cr 合金塑性变形过程中较容易发生交滑移, 拉断试样整个标距范围内布满了细而密的波纹状滑移线(图 3(a)); 二元 Fe<sub>3</sub>Al 试样表面滑移线数量明显少于 Fe-Al-Cr 合金, 滑移线较粗而直(图 3(b)), 表明仅发生了平面滑移, 不容易交滑移, 塑性较低; Fe-Al-Ti 合金的情况与二元合金类似; 分别加入 Mo、Ni、Mn 等元素的三元 Fe<sub>3</sub>Al 合金试样表面只能找到极少量短而且很浅的直线状滑移线, 塑性很低。

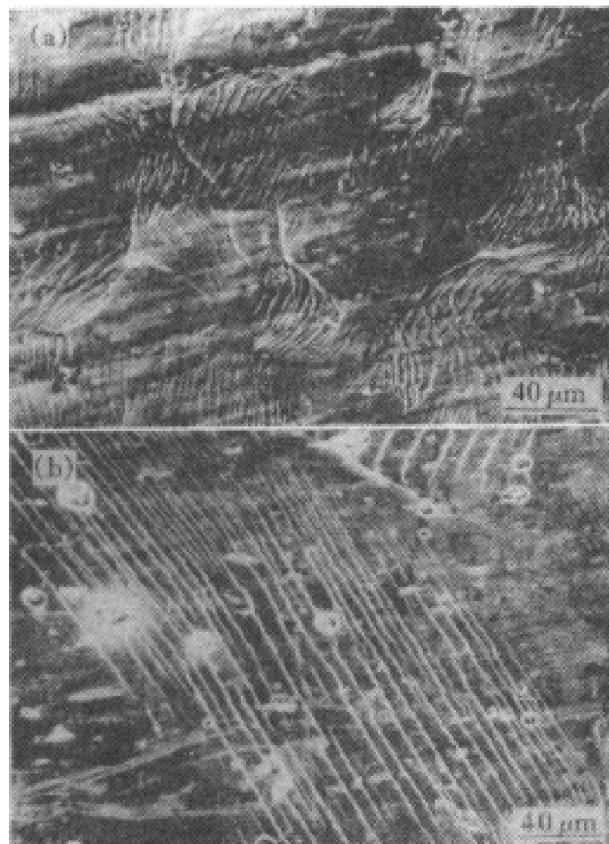


图 3 真空拉断试样表面滑移线观察

(a) —Fe-25Al-5Cr; (b) —Fe-25Al

超结构斑点(111) 的暗场相清晰地显示了二元 Fe<sub>3</sub>Al 合金中的直线状的位错反相畴界(图 5(a)), 在 Fe-25Al-5Ti 与 Fe-25Al-5Mo 合金中偶尔也看到类似现象, 证实了塑性变形过程的平面滑移性质, Mo、Ti 元素的加入不能改变这种滑移特性(图 5(c)、(d))。Fe-Al-Mn

及 Fe-Al-Ni 合金中数量过少的很短的位错都表明它们将比二元 Fe<sub>3</sub>Al 更脆。在 Fe-25Al-5Cr 合金中, 看到间距较宽的 4 根四分位错变成两根部分位错成对的位错组态(图 4)、及曲折台阶状的位错反相畴界形貌(图 5(b)), 表明了加入合金元素 Cr 以后, 合金的四分位错间距变宽,  $DO_3$  超结构位错容易分解成两根部分位错, 拖着 APB 反相畴的不全位错容易在不同滑移系发生交滑移, 导致低的流变应力, 表现出比二元 Fe<sub>3</sub>Al 合金低的屈服强度, 比其它合金高的塑性<sup>[9]</sup>。

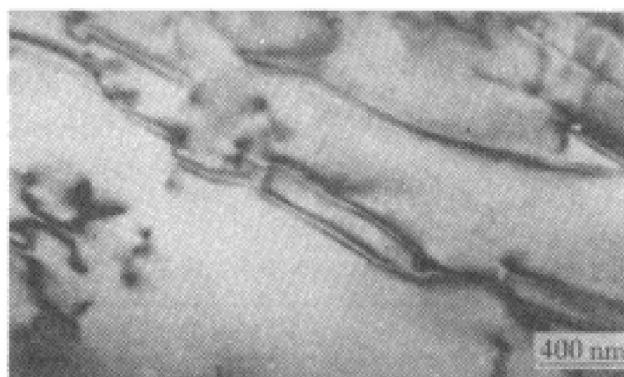


图 4 Fe-25Al-5Cr 合金中位错组态

$DO_3 \rightarrow B2$  转变温度  $T_c$  测定用试验合金粉末在真空中 500 °C 有序化处理 13 d。DTA 差热分析法测定, 在 Perkin-Elmer 系列试验机上进行, 加热速度为 10 °C/min, 氩气保护。 $DO_3 \rightarrow B2$  转变温度  $T_c$  的高低反映了最近邻(NNAPB)与次近邻反相畴界能(NNNAPB)的大小<sup>[10]</sup>。

代位合金元素原子亚点阵占位的中子衍射测定结果及异类原子对间解离能大小的计算<sup>[3]</sup>及  $T_c$  温度测定结果(图 6, 附表)表明, 与二元 Fe<sub>3</sub>Al 合金相比, 异类原子对间解离能较低的含 Cr 合金具有较低的反相畴界能及低的  $T_c$  温度, 较高的真空拉伸延伸率; Ti、Mo、Mn、Ni、Si 等合金元素的加入在提高各类合金中原子对间解离能即反相畴界能的同时均不同程度地提高了  $DO_3 \rightarrow B2$  转变温度, 使合金塑性变形更为困难, 塑性降低。

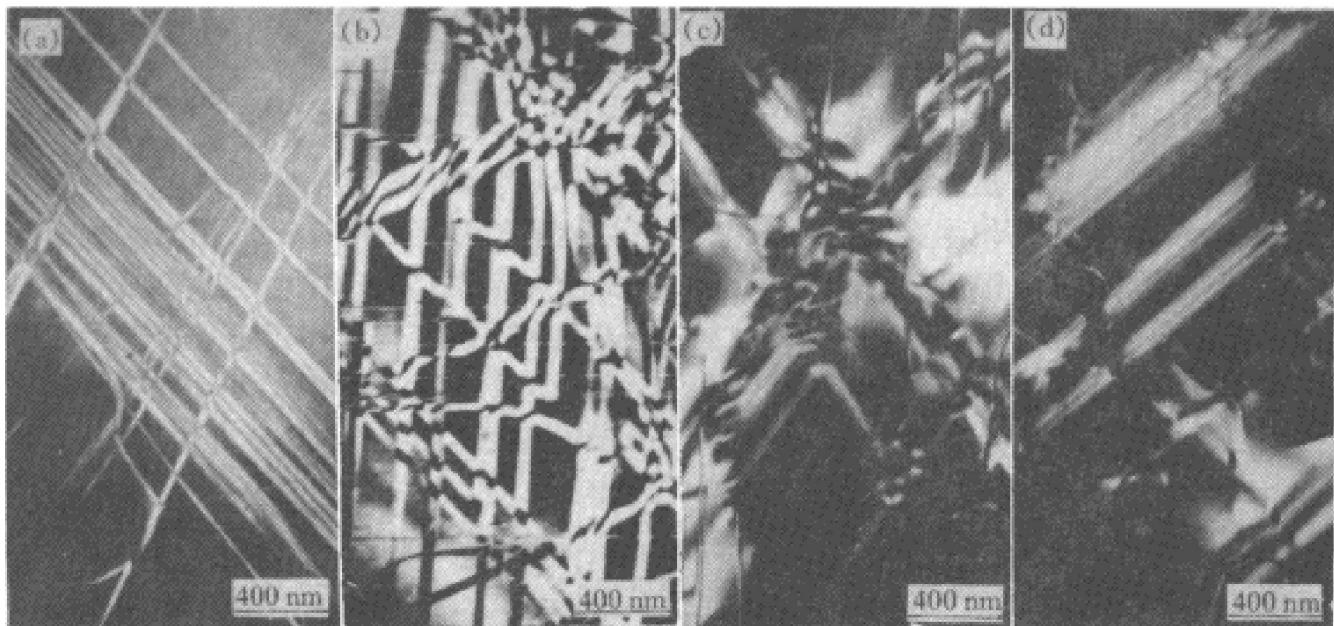


图5 试验合金位错反相畴界形貌

(a) —Fe-25Al; (b) —Fe-25Al-5Cr;  
(c) —Fe-25Al-5Mo; (d) —Fe-25Al-5Ti

附表 各试验合金的  $D0_3 \rightarrow B2$  转变温度  $T_c / ^\circ C$ 

| Fe-25Al     | Fe-25Al-5Cr | Fe-25Al-5Mo | Fe-25Al-5Ti |
|-------------|-------------|-------------|-------------|
| 556         | 548         | 691         | 779         |
| Fe-25Al-5Mn | Fe-25Al-3Ni | Fe-20Al-5Si |             |
| 742         | 727         | 764         |             |

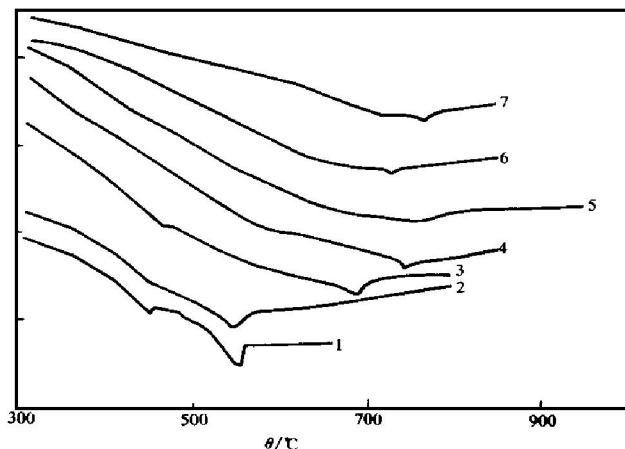


图6 各试验合金的 DTA 测定

曲线(加热速率  $10 ^\circ C / min$ )

1—Fe-25Al; 2—Fe-25Al-5Cr; 3—Fe-25Al-5Mo;  
4—Fe-25Al-5Mn; 5—Fe-25Al-5Ti; 6—Fe-25Al-3Ni;  
7—Fe-20Al-5Si

### 3 结论

(1) 合金元素 Cr 的加入降低  $Fe_3Al$  合金的  $D0_3 \rightarrow B2$  转变温度, 波纹状的表面滑移线及曲折台阶状的位错反相畴界表明交滑移容易进行, 具有高的真空室温拉伸延伸率。

(2) Ti、Mo、Mn、Ni、Si 等合金元素的加入在提高各类合金中原子对解离能即反相畴能的同时均提高了合金的  $T_c$  温度, 降低合金的塑性。

### 参考文献

- McKamey C G, deVan J H, Tortorelli P F et al. J Mater Res, 1991, 6(8): 1779.
- Sun Z Q, Huang Y D, Yang et al. In: Baker I, Darolia R, Whittenberger J D et al ed, High Temperature Ordered Intermetallic Alloys V, MRS Proc, 1993: 885.
- 杨王月等. 材料研究学报, 1996, 10(4): 351.
- Leamy H J, Kayser F X, Marcinkowski M J. Phil Mag, 1969, 20: 763.
- Morris D G, Schneibel J H, Crimp M A ed, Processing, Properties and Applications of Aluminides, TMS, 1994: 117 - 130.
- 杨王月, 盛丽珍, 徐峰等. 北京科技大学学报, 1996, 18(3): 249.
- 孙祖庆, 黄原定, 杨王月等. 北京科技大学学报, 1991, 13(6): 539.
- McKamey C G, Horton J A, Liu C T. J Mater Res, 1989

- 4: 1156.
- 9 Morris D G , Dadras M M , Morris M A. Acta Metall Mater  
, 1993, 41: 97.
- 10 Mendiratta M G , Ehlers S K , Lipsitt H A. Metall Trans  
A, 1987, 18A: 509.

# EFFECTS OF SUBSTITUTIONAL ELEMENTS ON MICROSTRUCTURE AND DUCTILITY OF Fe<sub>3</sub>Al INTERMETALLICS

Yang Wangyue, Sheng Lizhen, Huang Yuanding, Mao Weimin, Sun Zuqing  
*University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083*

**ABSTRACT** The effects of substitutional elements, Cr, Mn, Ti, Ni, Mo, on the tensile properties in vaccum,  $DO_3$  transition temperature  $T_c$ , degree of order in  $DO_3$  state, APD and dislocation configuration of stoichiometric Fe<sub>3</sub>Al based alloy with equiaxed grain have been investigated. The experimental results indicate that in comparison with binary Fe<sub>3</sub>Al, the addition of Cr decreases the temperature  $T_c$  and increases the tensile elongation, which is related with the decrease of interatomic energy and APB energy; other elements increase  $T_c$  and decrease the ductility. Based on the site occupations of alloying elements, atomic dissociation energy and APB energy are also discussed.

**Key words** Fe<sub>3</sub>Al sublattice antiphase boundary order-disorder transition plasticity

(编辑 黄劲松)