

镀锌钢-6016 铝合金激光焊接组织性能与第一性原理计算

彭利¹, 周愫武¹, 徐少华², 彭平², 刘金水²

- (1. 湖南大学 汽车车身先进设计制造国家重点实验室, 长沙 410082;
2. 湖南大学 材料科学与工程学院, 长沙 410082)

摘要: 采用基于密度泛函理论的第一性原理方法, 计算 Fe_8Al_8 及 $(\text{Fe}_7\text{X})\text{Al}_8$ ($\text{X}=\text{Pb}, \text{Sn}, \text{Ti}, \text{Cu}, \text{Mn}, \text{Si}, \text{Zn}$) 超胞模型的弹性模量与电子结构, 在分析合金化元素改善 FeAl 金属间化合物力学性质的基础上, 选取降低脆性效果较好的 Cu 和最好的 Pb, 对 1.2 mm 厚 DC56D+ZF 镀锌钢和 1.15 mm 厚 6016 铝合金平板试件进行加入中间夹层 Cu 和 Pb 的激光搭接焊试验。结果表明: FeAl 金属间化合物为脆性相, 其电子结构根源在于 Fe 的 sd 态与 Al 的 sp 态存在电子轨道杂化, 为明显的共价键特征; FeAl 合金化后, 脆性降低, 相应脆性由低到高的顺序为 $(\text{Fe}_7\text{Pb})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Sn})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Ti})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Cu})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Mn})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Si})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Zn})\text{Al}_8$ 、 Fe_8Al_8 , Pb 合金化降低脆性效果最好, 激光搭接焊加入中间夹层 Pb, 钢侧母材与焊缝界面区由母材侧较大晶粒和焊缝的细小晶粒交错形成, 熔池金属与母材铝之间没有明显的分界线, 焊接接头界面熔合良好; 与未加夹层相比, 加入中间夹层 Cu 和 Pb 后, 焊接接头力学性能提高, 其中 Pb 的作用优于 Cu 的, 试样断口均具有韧性断裂特征。

关键词: 镀锌钢; 铝合金; 第一性原理计算; 激光搭接焊; FeAl 脆性金属间化合物; 力学性质
中图分类号: TG113 **文献标志码:** A

Laser lap welding structural properties and first-principle computation of zinc-coated steel and 6016 aluminum alloy

PENG Li¹, ZHOU Dian-wu¹, XU Shao-hua², PENG Ping², LIU Jin-shui²

- (1. State Key Laboratory of Advanced Design and Manufacturing for Vehicle Body, Hunan University, Changsha 410082, China;
2. School of Materials Science and Engineering, Hunan University, Changsha 410082, China)

Abstract: The elastic moduli and electronic structure were calculated by the first-principle method based on the density functional theory for Fe_8Al_8 and $(\text{Fe}_7\text{X})\text{Al}_8$ ($\text{X}=\text{Pb}, \text{Sn}, \text{Ti}, \text{Cu}, \text{Mn}, \text{Si}, \text{Zn}$) supercell model. Analysis on improving the mechanical properties of FeAl intermetallic compounds was done, Cu and Pb were considered as better elements to reduce the brittleness of FeAl intermetallic compound. The laser lap welding experiments with the Cu or Pb metal sandwich addition were carried out with the DC56D+ZF galvanized steel of 1.2 mm-thick and the 6016 aluminum alloy of 1.15 mm-thick. The results show that the FeAl compound is the brittle phase which attributes to the electron orbit hybridization between the states of Fe-sd and Al-sp with obvious covalent bond characteristics. The brittleness of FeAl compound is reduced with the addition of alloying elements, and the brittleness order from low to high is as follows: $(\text{Fe}_7\text{Pb})\text{Al}_8$, $(\text{Fe}_7\text{Sn})\text{Al}_8$, $(\text{Fe}_7\text{Ti})\text{Al}_8$, $(\text{Fe}_7\text{Cu})\text{Al}_8$, $(\text{Fe}_7\text{Mn})\text{Al}_8$, $(\text{Fe}_7\text{Si})\text{Al}_8$, $(\text{Fe}_7\text{Zn})\text{Al}_8$ and Fe_8Al_8 . The laser lap welding experiment with the Pb metal sandwich addition shows the weld joint contact surface with better fusion based on the fact that the metal of steel side and welded joint frontal zone is made of big crystal grain of metal and tiny crystal grain of welded joint, and the boundary between the pool and metal of aluminum is not obvious. The mechanical properties of the welded joints are improved with the Cu or Pb metal sandwich addition, and the specimen fracture characteristic is ductile.

Key words: zinc-coated steel; aluminium alloy; first-principle computation; laser lap welding; FeAl brittle intermetallic compound; mechanical properties

基金项目: 国家高技术研究发展计划重点项目(2007AA042006); 国家自然科学基金资助项目(51071065); 湖南大学汽车车身先进设计制造国家重点实验室自主课题(71075003)

收稿日期: 2010-12-30; **修订日期:** 2011-06-20

通信作者: 周愫武, 教授, 博士; 电话: 13017297124; E-mail: ZDWe_mail@yahoo.com.cn

激光焊是目前研究最为活跃的激光制造技术之一,为面对轻量化、结构功能一体化、低成本及大型装备制造对连接技术的新要求,其研究主要集中在铝、镁和钛等轻质合金的激光焊接、异种材料激光焊接、激光-电弧复合焊接等方面。对于汽车车身多材料结构,要求两种不同类型的材料(如钢-铝、铸铁-铝、铝-镁等)进行连接,其中钢-铝异种材料两者之间的固溶度很低,物理和化学性能差异明显,极易反应生成 FeAl 脆性金属间化合物^[1-2]。由于传统熔焊热输入量大,热源难以准确控制,而激光焊热量集中,应力、应变小,因此,激光焊是钢-铝的理想焊接方法^[3-5], FeAl 脆性金属间化合物也成为影响激光焊接接头性能的主要因素。

抑制或减少 FeAl 脆性金属间化合物产生最有效的方法是通过激光熔钎焊方法使钢母材不熔化,依靠钢热传导熔化铝,但此种方法工艺上较难实现。为此,近年来国内外很多学者采用加入合金元素钎料(如 Cu、Sn、Ti、Mn、Si、Zn 等)^[6-10]的方式,期望通过替换 FeAl 脆性金属间化合物中的元素,形成较高延性与塑性的金属间化合物,以改善焊接接头的力学性能。本文作者针对 FeAl 脆性金属间化合物影响激光焊接接头性能这一关键问题,采用基于密度泛函理论的第一性原理方法,计算 Fe_8Al_8 及 $(\text{Fe}_7\text{X})\text{Al}_8$ ($\text{X}=\text{Pb}, \text{Sn}, \text{Ti}, \text{Cu}, \text{Mn}, \text{Si}, \text{Zn}$) 超胞模型的弹性模量与电子结构,在分析合金化元素改善 FeAl 力学性质的基础上,选取降低脆性效果较好的 Cu 和最好的 Pb,对 1.2 mm 厚 DC56D+ZF 镀锌钢和 1.15 mm 厚 6016 铝合金平板试件进行加入中间夹层 Cu 和 Pb 的激光搭接焊试验,期望为激光焊接多材料车身结构提供重要的理论指导和技术支持。

1 计算与实验方法

1.1 计算模型与方法

B2-FeAl 的晶体结构如图 1(a)所示(Fe 原子占据 8 个顶角位置,Al 原子占据体心位置)。其空间群为 $pm\bar{3}m$ 。图 1(b)所示为 FeAl 的 $2\times 2\times 2$ 超胞模型结构(记为 Fe_8Al_8)。图 1(c)所示为经 X($\text{X}=\text{Pb}, \text{Sn}, \text{Ti}, \text{Cu}, \text{Mn}, \text{Si}, \text{Zn}$)合金化后 FeAl 的超胞模型结构(记为 $(\text{Fe}_7\text{X})\text{Al}_8$),合金化时合金化原子置换的是超胞中心的 Fe 原子。

弹性模量与电子结构计算采用基于密度泛函理论

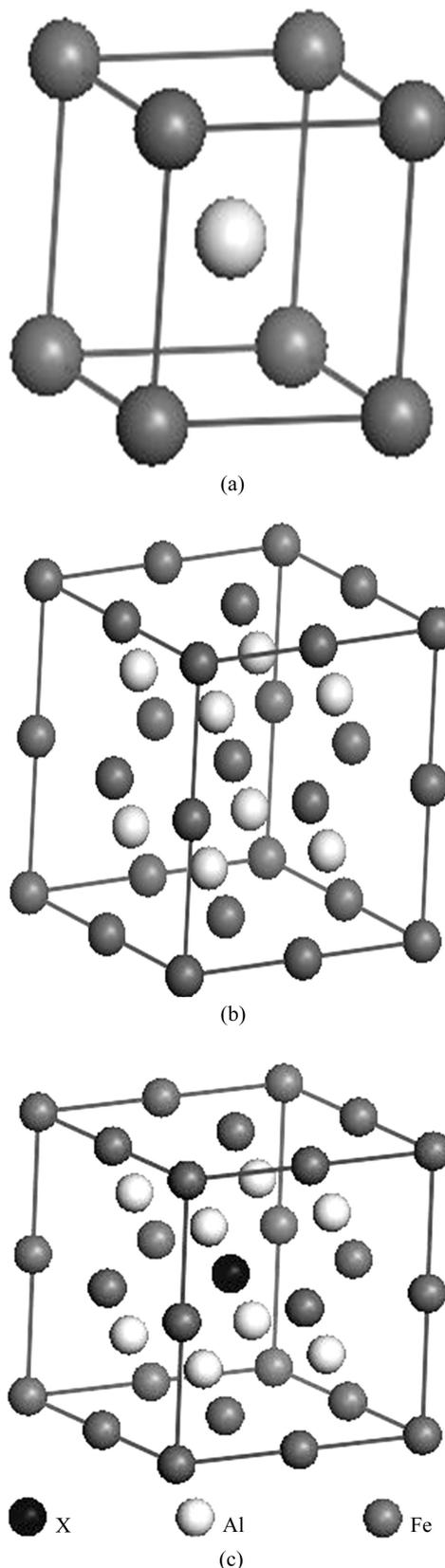


图1 B2-FeAl、 Fe_8Al_8 和 $(\text{Fe}_7\text{X})\text{Al}_8$ ($\text{X}=\text{Pb}, \text{Sn}, \text{Ti}, \text{Cu}, \text{Mn}, \text{Si}, \text{Zn}$)的晶体结构

Fig. 1 Crystal structure models of B2-FeAl (a), Fe_8Al_8 (b) and $(\text{Fe}_7\text{X})\text{Al}_8$ ($\text{X}=\text{Pb}, \text{Sn}, \text{Ti}, \text{Cu}, \text{Mn}, \text{Si}, \text{Zn}$) (c)

Castep 程序软件包^[11-12], 其总能量包括无相互作用的粒子动能、一般的库仑能和多体效应的交换-关联能 3 部分。交换关联能采用广义梯度近似(GGA)中的 Perdew-Burke-Ernzerhof 形式^[13], 计算在最小化的快速傅立叶变换(FFT, Fast-fourier-transform)网格上进行, 采用对正则条件进行弛豫的超软赝势^[14]作为平面波基集, 采用自洽迭代(SCF)方法进行计算, SCF 计算时, 采用结合 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno(BFGS)共轭梯度方法的 Pulay 密度混合方案^[15]处理电子弛豫。本文作者对 FeAl 超胞模型进行几何优化时, 没有改变超胞的晶格常数, 只优化了内部原子的位置, 而采用合金化置换超胞中心的 Fe 原子时, 直接取单点能进行计算。几何结构优化时, 体系总能量的收敛值为 2.0×10^{-5} eV/nm, 每个原子上的力低于 0.5 eV/nm, 公差偏移小于 2.0×10^{-4} nm, 应力偏差小于 0.1 GPa。进行单点能计算时, 动能截断点为 300.0 eV。FFT 网格为 $12 \times 12 \times 12$ 。采用的 K 空间为 0.04 nm^{-1} ; 计算体系弹性常数时, 交换关联函数采用 GGA 中的 PW91^[16]形式, 采用 Fine 网格散点和 smearing energy 进行能量快速收敛。

1.2 实验条件与方法

实验采用 DC025 型板条式 CO₂ 激光器及五轴联动激光加工设备, 激光器最大输出功率为 2 500 W, 连续输出的激光模式为 TEM₀₀, 输出能量近似呈高斯分布。光束发散半角 $\alpha < 0.15 \times 10^{-3}$ rad, 抛物面反射聚焦镜焦距为 200 mm, 焦斑直径为 0.4 mm。实验材料为 100 mm × 30 mm × 1.2 mm 的 DC56D+ZF 镀锌钢和 100 mm × 30 mm × 1.15 mm 的 6016 铝合金的板材。将镀锌钢板、夹层(Cu 或 Pb)与 6016 铝合金组合后用夹具夹紧, 进行激光搭接焊试验, 激光搭接装置如图 2 所示。通过调整焊接工艺参数获得最佳焊接成形, 利用卧式金相显微镜、扫描电镜、微机控制电子

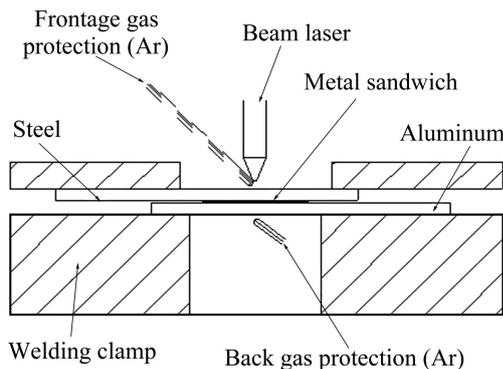


图 2 钢-铝搭接焊原理示意图

Fig. 2 Schematic diagram of principle of steel-aluminum laser lap welding

万能试验机等手段研究焊接接头的金相组织、断口形貌与接头力学性能。

2 结果与分析

2.1 弹性模量分析

表 1 所列为 Fe₈Al₈ 和 Fe₇XAl₈ 超胞弹性常数(C_{11} , C_{12} , C_{44})的计算结果。由表 1 可知, 本研究中 Fe₈Al₈ 超胞弹性常数的计算值与 SIMMONS 和 WANG 等^[17]的实验值及 FU 和 YOO^[18]、VAILHÉ 和 FARKAS^[19]、王月华等^[20]、SHU 等^[21]、孔毅等^[22]的理论计算结果比较接近, 表明本研究所用计算模型与计算方法合理。在此基础上, 利用弹性常数通过如下公式^[23]:

$$B = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3} \quad (1)$$

$$G = \frac{1}{5}(C_{11} - C_{12} + 3C_{44}) \quad (2)$$

$$E = \frac{(C_{11} - C_{12} + 3C_{44})(C_{11} + 2C_{12})}{2C_{11} + 3C_{12} + C_{44}} \quad (3)$$

$$\nu = \frac{3B - E}{6B} \quad (4)$$

表 1 (Fe₇X)Al₈ 的弹性常数的计算值和实验结果

Table 1 Calculated and experimental elastic constants of (Fe₇X)Al₈

Phase	Source	Elastic constant/GPa		
		C_{11}	C_{12}	C_{44}
Fe ₈ Al ₈	Present	218.311	112.943	137.608
	Exp ^[17]	208.260	121.752	126.558
	Cal ^[18]	288.360	128.160	164.846
	Cal ^[19]	192.240	120.150	116.946
	Cal ^[20]	203.182	124.716	104.707
	Cal ^[21]	178.783	131.845	106.213
Cal ^[22]	178.623	131.204	101.727	
(Fe ₇ Pb)Al ₈	Present	242.743	139.464	133.522
(Fe ₇ Sn)Al ₈	Present	248.620	137.584	145.010
(Fe ₇ Ti)Al ₈	Present	236.267	130.905	140.073
(Fe ₇ Cu)Al ₈	Present	214.721	117.286	136.314
(Fe ₇ Mn)Al ₈	Present	217.835	118.030	136.699
(Fe ₇ Si)Al ₈	Present	222.012	118.236	138.793
(Fe ₇ Zn)Al ₈	Present	244.728	115.199	140.373

计算 Fe_8Al_8 及 $(\text{Fe}_7\text{X})\text{Al}_8$ ($\text{X}=\text{Pb}, \text{Sn}, \text{Ti}, \text{Cu}, \text{Mn}, \text{Si}, \text{Zn}$) 超胞模型的体模量(B)、剪切模量(G)、弹性模量(E)、 $C_{11}-C_{12}$ 、剪切模量与体模量的比值(G/B)和泊松比(ν)等参量,结果如表2所列。

由于泊松比(ν)为用来评估材料晶体结构抗剪的稳定性参量, ν 值越大,对应材料结构的塑性越好^[24]。从表2可看出, $(\text{Fe}_7\text{Pb})\text{Al}_8$ 的塑性最好,其次是 $(\text{Fe}_7\text{Sn})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Ti})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Mn})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Cu})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Si})\text{Al}_8$, 而 $(\text{Fe}_7\text{Zn})\text{Al}_8$ 的塑性最差。除了泊松比(ν)外, $C_{11}-C_{12}$ 和 E 也是评估材料材料力学性质的重要参量,即 $C_{11}-C_{12}$ 和 E 值越小,材料的塑性越好^[25]。从表2中的 $C_{11}-C_{12}$ 值来看, $(\text{Fe}_7\text{Cu})\text{Al}_8$ 的塑性最好,其次是 $(\text{Fe}_7\text{Mn})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Pb})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Si})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Ti})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Sn})\text{Al}_8$, 而 $(\text{Fe}_7\text{Zn})\text{Al}_8$ 的塑性最差; 而从 E 值来看, $(\text{Fe}_7\text{Cu})\text{Al}_8$ 的塑性最好,其次为 $(\text{Fe}_7\text{Mn})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Pb})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Si})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Ti})\text{Al}_8$ 和 $(\text{Fe}_7\text{Zn})\text{Al}_8$, 而 $(\text{Fe}_7\text{Sn})\text{Al}_8$ 的塑性最差。对于钢-铝异种金属材料激光焊接,由于容易生成 FeAl 脆性金属间化合物,为了提高焊接接头性能,采用合金化手段降低 FeAl 金属间化合物的脆性更引起关注,为此,本文作者重点分析 Fe_8Al_8 及 $(\text{Fe}_7\text{X})\text{Al}_8$ ($\text{X}=\text{Pb}, \text{Sn}, \text{Ti}, \text{Cu}, \text{Mn}, \text{Si}, \text{Zn}$) 的脆性行为。

通常, G/B 可预测材料的脆性和延性等力学性能^[26-27], 当 $G/B < 0.5$, 材料呈延性, 否则呈脆性。从表2可看出, Fe_8Al_8 的 G/B 值为 0.703, 大于 0.5, 表明 FeAl 金属间化合物为脆性相, 而经 $\text{X}(\text{X}=\text{Pb}, \text{Sn}, \text{Ti}, \text{Cu}, \text{Mn}, \text{Si}, \text{Zn})$ 合金化后, FeAl 超胞模型的 G/B 值分别为 0.579、0.626、0.633、0.674、0.676、0.681 和 0.695, 虽然均大于 0.5, 但与 Fe_8Al_8 的比较, G/B 值有所减小, 表明合金化后 FeAl 金属间化合物的脆

性有所降低, 其脆性由低到高的顺序为: $(\text{Fe}_7\text{Pb})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Sn})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Ti})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Cu})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Mn})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Si})\text{Al}_8$ 、 $(\text{Fe}_7\text{Zn})\text{Al}_8$ 和 Fe_8Al_8 。其中, 经 Pb 合金化后所得的 $(\text{Fe}_7\text{Pb})\text{Al}_8$ 的 G/B 值最小(0.579), 表明 Pb 改善 FeAl 脆性的效果最好。

2.2 电子结构分析

图3所示为 $\text{X}(\text{X}=\text{Pb}, \text{Sn}, \text{Ti}, \text{Cu}, \text{Mn}, \text{Si}, \text{Zn})$ 合金化前后 FeAl 超胞模型电子态密度图。发现未合金化时, 对于 FeAl(见图3(a)), 对成键有贡献电子的能量主要集中在 $-10 \sim 0$ eV 范围内, 来源于 Al(s)、Al(p)、Fe(s) 和 Fe(d) 的价电子贡献, 其中, $-10 \sim -4$ eV 范围的 Al(s)、Al(p) 与 Fe(s) 的价电子产生了轨道杂化, 而在 $-4 \sim 0$ eV 范围的 Al(p)、Fe(s) 和 Fe(d) 的价电子产生了轨道杂化。Fe 的 sd 态与 Al 的 sp 态存在电子轨道杂化, 表明 FeAl 金属间化合物的成键特征为明显的共价键, 这是其表现为脆性相的电子结构根源。进一步分析发现, 经合金化后 FeAl 超胞模型电子态密度发生了一定改变: 对于 Zn 合金化(见图3(b)), 体系在 $-10 \sim -4$ eV 范围内除了 Al(s)、Al(p) 与 Fe(s) 的价电子产生轨道杂化外, Zn(s) 和 Zn(d) 参与了轨道杂化; 对于 Si 合金化(见图3(c)), 体系在 $-10 \sim -4$ eV 与 $-4 \sim 0$ eV 范围内, 除了 Fe 的 sd 态与 Al 的 sp 态存在电子轨道杂化外, Si(p) 参与了轨道杂化; 对于 Mn 合金化(见图3(d)), 体系在 $-10 \sim -4$ eV 范围内的轨道杂化与 FeAl 的一样, 而在 $-4 \sim 0$ eV 范围内, 多了 Mn(d) 参与杂化; 对于 Cu 合金化(见图3(e)), 体系在 $-4 \sim 0$ eV 范围内的轨道杂化与 FeAl 的一样, 在 $-4 \sim -10$ eV 范围内, Cu(d) 也参与杂化; 对于 Ti 合金化(见图3(f)), 体系在 $-4 \sim -10$ eV 范围内的轨道杂化与 FeAl 的一样,

表2 Fe_8Al_8 和 $(\text{Fe}_7\text{X})\text{Al}_8$ 的模量

Table 2 Moduli of Fe_8Al_8 and $(\text{Fe}_7\text{X})\text{Al}_8$ phases

Phase	Modulus/GPa			G/B	ν	$C_{11}-C_{12}$
	B	G	E			
Fe_8Al_8	148.066	103.638	252.096	0.703	0.216	105.368
$(\text{Fe}_7\text{Pb})\text{Al}_8$	173.890	100.769	253.096	0.579	0.257	103.279
$(\text{Fe}_7\text{Sn})\text{Al}_8$	174.596	109.213	271.111	0.626	0.240	111.036
$(\text{Fe}_7\text{Ti})\text{Al}_8$	166.026	105.116	260.394	0.633	0.239	105.362
$(\text{Fe}_7\text{Cu})\text{Al}_8$	149.764	101.275	247.937	0.674	0.224	97.435
$(\text{Fe}_7\text{Mn})\text{Al}_8$	151.298	101.980	249.813	0.676	0.225	99.805
$(\text{Fe}_7\text{Si})\text{Al}_8$	152.828	104.031	254.375	0.681	0.223	103.776
$(\text{Fe}_7\text{Zn})\text{Al}_8$	158.375	110.129	268.217	0.695	0.218	129.529

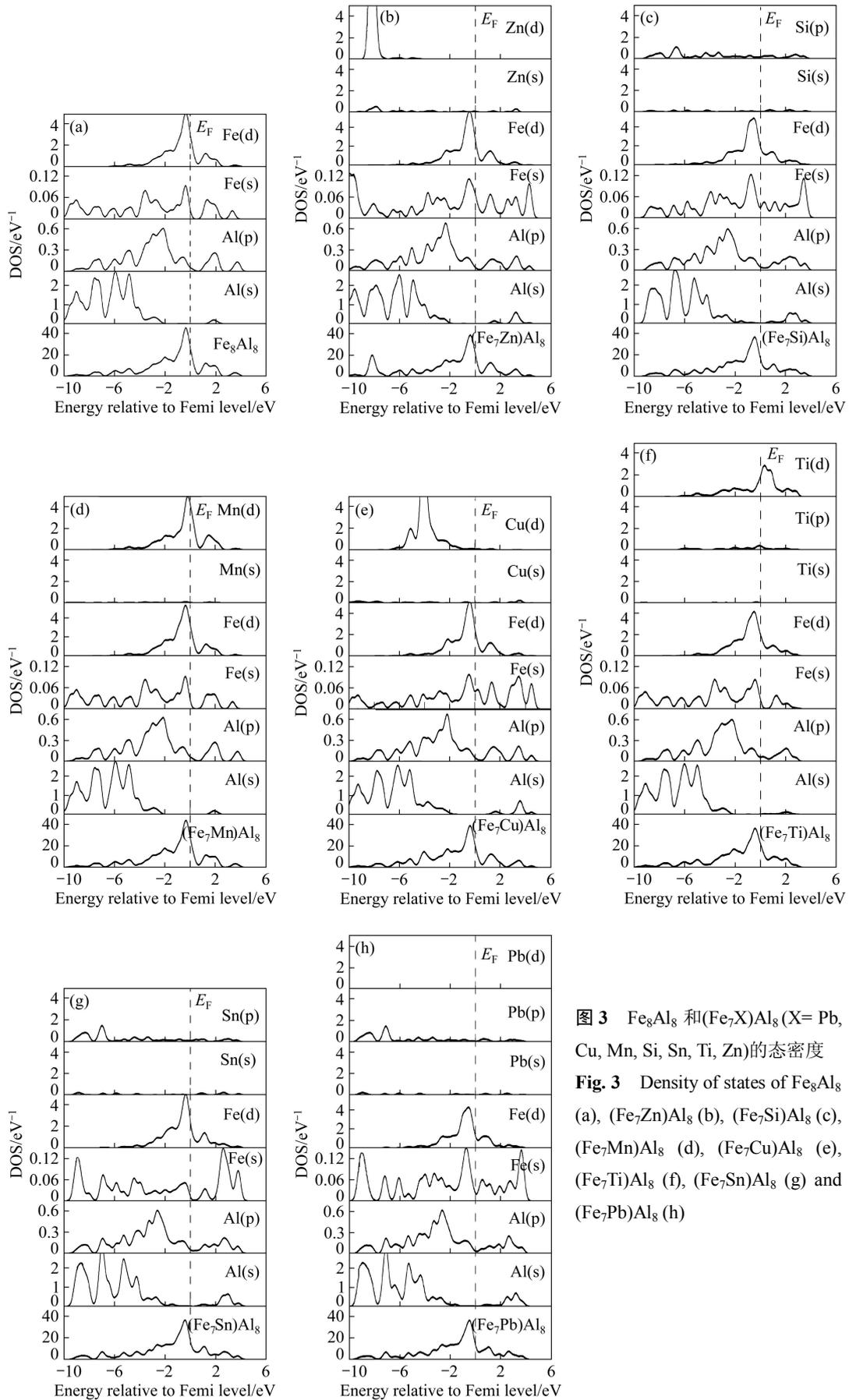


图3 Fe_8Al_8 和 $(Fe_7X)Al_8$ ($X = Pb, Cu, Mn, Si, Sn, Ti, Zn$) 的态密度
Fig. 3 Density of states of Fe_8Al_8 (a), $(Fe_7Zn)Al_8$ (b), $(Fe_7Si)Al_8$ (c), $(Fe_7Mn)Al_8$ (d), $(Fe_7Cu)Al_8$ (e), $(Fe_7Ti)Al_8$ (f), $(Fe_7Sn)Al_8$ (g) and $(Fe_7Pb)Al_8$ (h)

在 $-4\sim 0$ eV 范围内, Ti(d)也参与杂化;而对于 Sn 和 Pb 合金化(分别见图 3(g)和(h)),体系在 $-4\sim 0$ eV 范围内的轨道杂化与 FeAl 的一样,但在 $-4\sim -10$ eV 范围内,分别 Sn(d)和 Pb(p)也参与杂化。这表明,对 FeAl 进行 Zn、Si、Mn、Cu、Ti、Sn、Pb 合金化后,与 FeAl 相比较,体系共价键作用仍明显,合金化前后 FeAl 化合物仍表现脆性行为,较好解释了 2.1 节弹性模量的分析结果。此外,2.1 节的结果还表明,Pb 合金化降低 FeAl 化合物脆性的效果最好,由于仅根据电子态密度(见图 3(f)~(h))较难从共价键作用方面阐述原因,为此本文作者进一步探讨了经 Zn、Si、Mn、Cu、Ti、Sn 和 Pb 合金化前后 FeAl 化合物的离子键特征。

表 3 所列为经 Zn、Si、Mn、Cu、Ti、Sn 和 Pb 合金化前后 FeAl 化合物 Mulliken 电子占据数的计算结果。分析发现,对于 FeAl 化合物,体系中 Al 和 Fe 原子之间的转移电荷总数为 1.28(0.16×8);而经 Zn、Si、Mn、Cu、Ti、Sn 和 Pb 合金化后,转移电荷总数分别为 1.04(0.13×8)、1.44(0.18×8)、1.12(0.14×8)、1.68(0.21×8)、0.96(0.12×8)、1.04(0.13×8)和 0.96(0.12×8),其中, Ti 和 Pb 合金化的转移电荷总数最少(0.96),这表明,对于 FeAl 化合物, Ti 和 Pb 合金化体系存在的离子键作用最弱,而比较起来(见图

表 3 Fe_8Al_8 和 $(\text{Fe}_7\text{X})\text{Al}_8$ (X=Pb, Sn, Ti, Cu, Mn, Si, Zn) 的 Mulliken 电子占据数

Table 3 Mulliken electronic populations of Fe_8Al_8 and $(\text{Fe}_7\text{X})\text{Al}_8$ (X=Pb, Sn, Ti, Cu, Mn, Si, Zn)

Phase	Species	s	p	Total	Charge (e)
Fe_8Al_8	Al	0.89	1.96	2.84	0.16
$(\text{Fe}_7\text{Pb})\text{Al}_8$	Al	0.92	1.95	2.88	0.12
$(\text{Fe}_7\text{Sn})\text{Al}_8$	Al	0.92	1.96	2.87	0.13
$(\text{Fe}_7\text{Ti})\text{Al}_8$	Al	0.89	1.99	2.88	0.12
$(\text{Fe}_7\text{Cu})\text{Al}_8$	Al	0.87	1.93	2.79	0.21
$(\text{Fe}_7\text{Mn})\text{Al}_8$	Al	0.89	1.97	2.86	0.14
$(\text{Fe}_7\text{Si})\text{Al}_8$	Al	0.89	1.93	2.82	0.18
$(\text{Fe}_7\text{Zn})\text{Al}_8$	Al	0.91	1.96	2.87	0.13

3(f)~(h)), Ti 合金化体系在 $-4\sim 0$ eV 范围内的 Fe(d) 和 Al(p)、Fe(s)电子轨道之间的杂化作用稍强,因此, Pb 合金化导致 FeAl 化合物较弱的离子键作用是其降低脆性效果最好的主要原因。

图 4 所示为经 X(X=Pb、Sn、Ti、Cu、Mn、Si、Zn)合金化前后 FeAl 超胞模型原子最密排(110)面的电子密度图。由图 4 可以看出,合金化前 Fe_8Al_8 超胞的(110)面上 Fe 和 Al 原子周围电子排布基本呈方形(见图

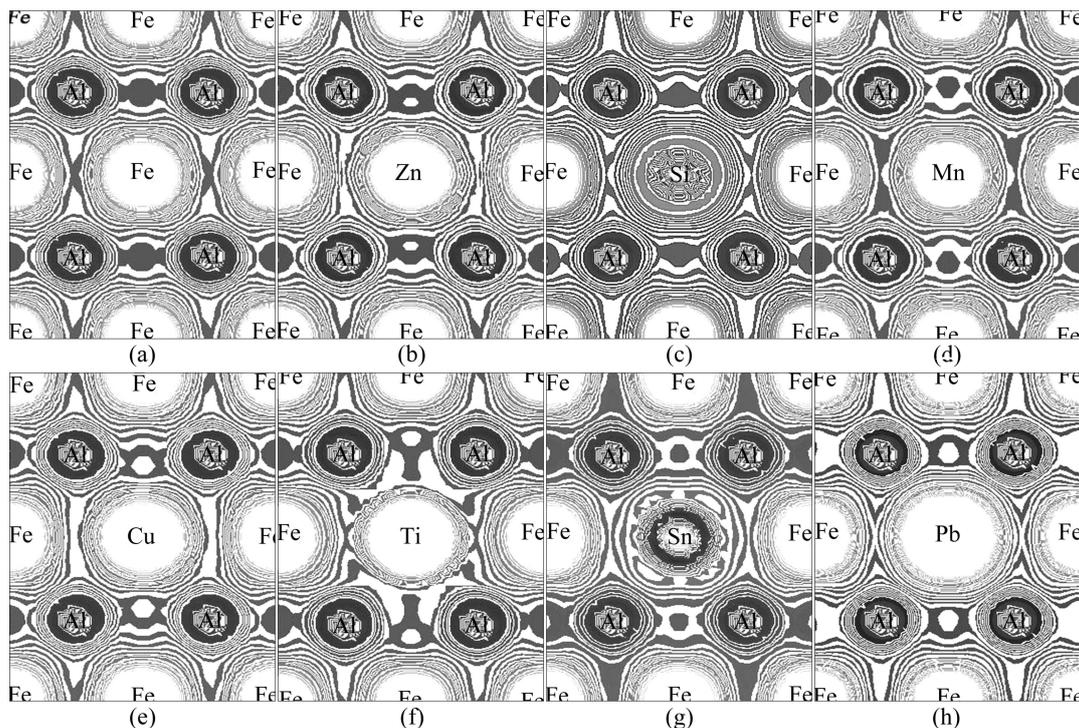


图 4 Fe_8Al_8 和 $(\text{Fe}_7\text{X})\text{Al}_8$ (X=Pb, Cu, Mn, Si, Sn, Ti, Zn)超胞(110)面的电子密度图

Fig. 4 Contour plots of valence electron densities of (110) plane in Fe_8Al_8 (a), $(\text{Fe}_7\text{Zn})\text{Al}_8$ (b), $(\text{Fe}_7\text{Si})\text{Al}_8$ (c), $(\text{Fe}_7\text{Mn})\text{Al}_8$ (d), $(\text{Fe}_7\text{Cu})\text{Al}_8$ (e), $(\text{Fe}_7\text{Ti})\text{Al}_8$ (f), $(\text{Fe}_7\text{Sn})\text{Al}_8$ (g) and $(\text{Fe}_7\text{Pb})\text{Al}_8$ (h)

4(a)), 表明其周围电子成键方向性强, FeAl 具有脆性, 而对 FeAl 进行 Pb、Sn、Ti、Cu、Mn、Si 和 Zn 合金化后, 合金化原子周围的电子排布发生了一定改变, 接近球形(见图 4(b)~(g)), 表明合金化原子的加入影响 Fe 和 Al 原子周围的电子排布, Fe 和 Al 原子成键方向性减弱, 其中, Pb 的加入使 Fe 和 Al 原子成键方向性减弱最明显(见图 4(h)), 因此, Pb 降低 FeAl 金属间化合物脆性的效果最好。

2.3 组织与性能分析

图 5 所示为镀锌钢-6016 铝合金加入降低脆性效果最好的中间夹层 Pb 后激光搭接焊缝界面处结合情况的金相组织。由图 5 可知, 钢侧母材与焊缝界面区由母材侧较大晶粒和焊缝处细小晶粒交错形成, 如图 5(a)所示。而熔池金属与母材铝之间没有明显的分界线, 如图 5(d)所示。这表明加入 Pb 后, 钢-铝激光

焊接接头的界面熔合良好。

图 6 所示分别为不加夹层、加入 Cu 和 Pb 夹层试样的断口形貌。可知, 图 6(a)中试样断口呈明显的脆性特征, 微观形貌为准解理断裂, 并呈疲劳条纹特征; 加入 Cu 后, 试样断口脆性特征不明显(见图 6(b)); 而加入 Pb 后, 试样断口出现了一些抛物线形的韧窝(见图 6(c))。

图 7 所示为焊接接头力学性能的测试结果。可以看出: 当钢-铝不加中间夹层时, 平均抗拉强度约为 39.34 MPa, 伸长率约为 0.97%; 添加 Cu 或 Pb 夹层后, 平均抗拉强度和伸长率均增加, 其中, 添加 Pb 夹层后平均抗拉强度约为 68.51 MPa, 比没有添加夹层的接头平均抗拉强度提高了 75%, 此外, 伸长率也增加明显, 这表明加入 Cu 或 Pb 能有效降低 FeAl 金属间化合物的脆性, 增加其延性, 因而力学性能得到相应改善。

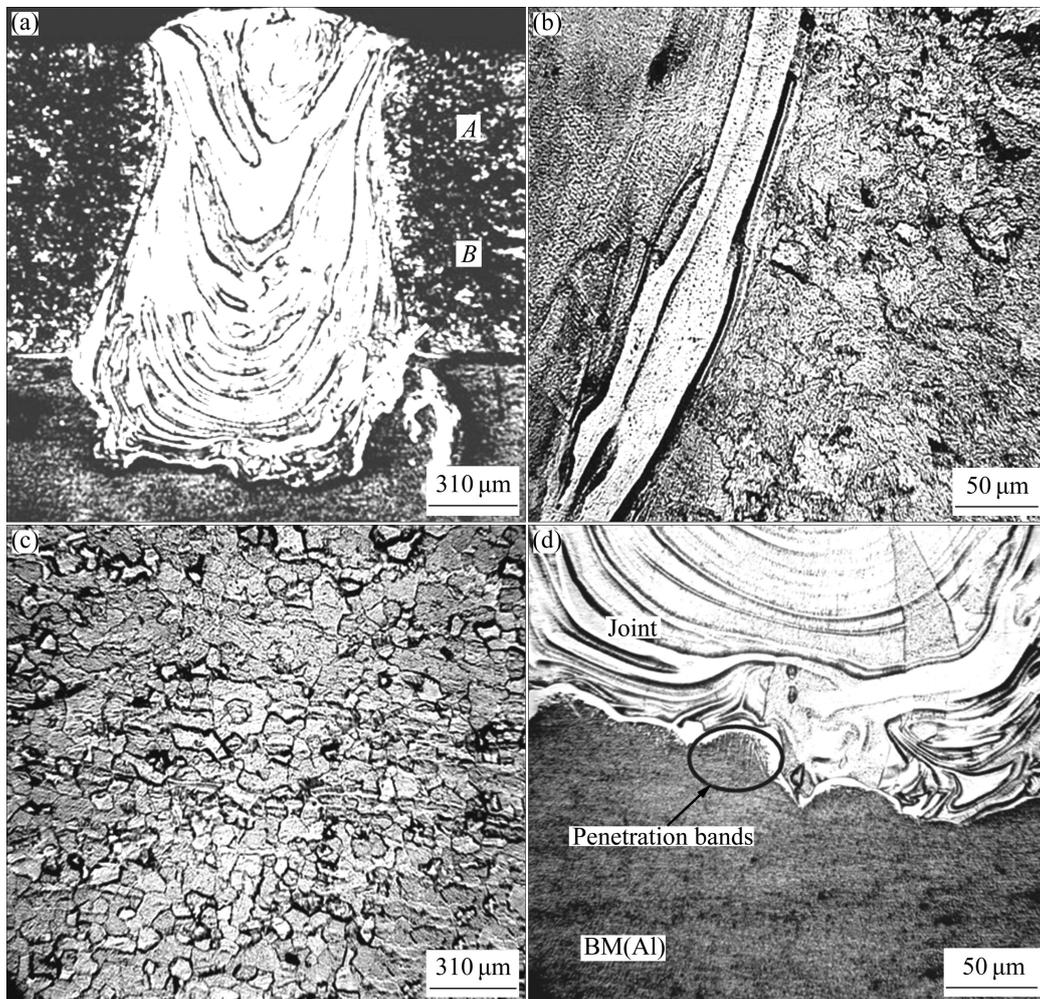


图 5 焊缝组织金相图

Fig. 5 Micrographs of welded seam: (a) Full extent of molten pool; (b) Interfacial layer of zone A; (c) Microstructure of zone B; (d) Micro-forming surface of joint

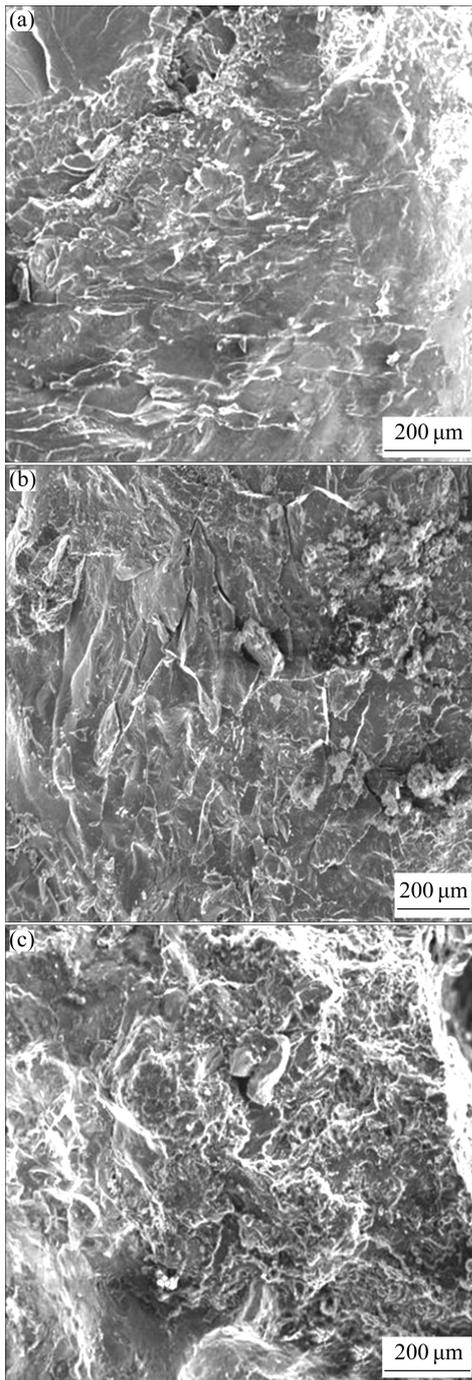


图 6 不同拉伸试样的断口形貌

Fig. 6 Fracture morphologies of tensile samples: (a) Fracture morphology of steel-aluminum sample; (b) Fracture morphology of steel-copper-aluminum sample; (c) Fracture morphology of steel-lead-aluminum sample

3 结论

1) FeAl 金属间化合物为脆性相的电子结构根源

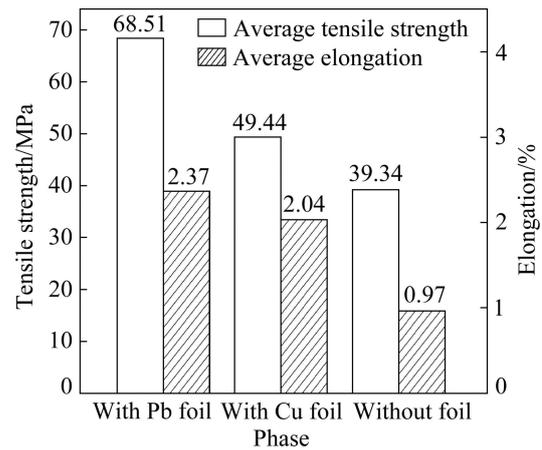


图 7 钢-铅-铝、钢-铜-铝和钢-铝焊接接头的抗拉强度与伸长率

Fig. 7 Tensile strengths and elongations of steel-lead-aluminum, steel-copper-aluminum and steel-aluminum joint

在于 Fe 的 sd 态与 Al 的 sp 态存在电子轨道杂化, 呈明显的共价键特征。

2) FeAl 合金化后脆性降低, 脆性由低到高的顺序为 $(Fe_7Pb)Al_8$ 、 $(Fe_7Sn)Al_8$ 、 $(Fe_7Ti)Al_8$ 、 $(Fe_7Cu)Al_8$ 、 $(Fe_7Mn)Al_8$ 、 $(Fe_7Si)Al_8$ 、 $(Fe_7Zn)Al_8$ 和 Fe_8Al_8 。

3) 镀锌钢-6016 铝合金激光搭接焊加入中间夹层 Pb 后, 钢侧母材与焊缝界面区由母材侧较大晶粒和焊缝处细小晶粒交错形成, 熔池金属与母材铝之间没有明显的分界线, 焊接接头界面熔合良好。

4) 与未加夹层相比, 加入中间夹层 Cu 和 Pb 后, 焊接接头力学性能提高, 其中 Pb 加入优于 Cu, 试样断口均具有韧性断裂特征。

REFERENCES

[1] 李亚江. 特种连接技术[M]. 北京: 机械工业出版社, 2007: 60-100.
LI Ya-jiang. Special connection technology[M]. Beijing: China Machine Press, 2007: 60-100.

[2] 刘中青, 刘 凯. 异种金属焊接技术指南[M]. 北京: 机械工业出版社, 1997: 320-370.
LIU Zhong-qing, LIU Kai. Heterogeneous metal welding technical manual[M]. Beijing: China Machine Press, 1997: 320-370.

[3] 雷 振, 王旭友, 王伟波, 林尚扬. 铝/镀锌钢复合热源熔-钎接头中的 Al-Fe 金属间化合物层分析[J]. 焊接学报, 2007, 28(11): 65-71.
LEI Zhen, WANG Xu-you, WANG Wei-bo, LIN Shang-yang. The aluminum/galvanizes in the steel compound heat source melt-rock drill attachment Al-Fe intermetallic compound level

- analysis[J]. Transactions of the China Welding Institution, 2007, 28(11): 65-71.
- [4] 倪加明, 李俐群, 陈彦宾, 封小松. 铝/钛异种合金激光熔焊焊接接头特性[J]. 中国有色金属学报, 2007, 17(4): 617-626.
NI Jia-ming, LI Li-qun, CHEN Yan-bin, FENG Xiao-song. Characteristics of laser welding-brazing joint of Al/Ti dissimilar alloys[J]. The Chinese Journal of Nonferrous Metals, 2007, 17(4): 617-626.
- [5] TORKAMANY M J, TAHAMTAN S, SABBAGHZADEH J. Dissimilar welding of carbon steel to 5754 aluminum alloy by Nd:YAG pulsed laser[J]. Materials Design, 2010, 31(1): 458-465.
- [6] 张秉刚, 何景山, 曾如川, 冯吉才. LF2铝合金与Q235钢加入中间 Cu 层电子束焊接接头组织及形成机理[J]. 焊接学报, 2007, 28(6): 37-42.
ZHANG Bing-gang, HE Jing-shan, ZENG Ru-chuan, FENG Ji-cai. Microstructures and formation of EBW joint of aluminum alloy LF2 to steel Q235 with transition metal Cu[J]. Transactions of the China Welding Institution, 2007, 28(6): 37-42.
- [7] 张盛海, 陈凯, 肖荣诗, 左铁钊. 填充粉末对铝合金高功率 CO₂ 激光焊接的影响[J]. 中国激光, 2005, 32(6): 860-864.
ZHANG Sheng-hai, CHEN Kai, XIAO Rong-shi, ZUO Tie-chuan. Influence of metal powder on high power CO₂ laser welding of aluminum alloy[J]. Chinese Journal of Lasers, 2005, 32(6): 860-864.
- [8] 宋建岭, 林三宝, 杨春利, 马广超. 合金元素改善铝/钢异种金属接头性能的研究[J]. 航空制造技术, 2008, 50(12): 26-30.
SONG Jian-ling, LIN San-bao, YANG Chun-li, MA Guang-chao. Research on alloy agent for improving welded joint properties of aluminum to steel dissimilar material[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2008, 50(12): 26-30.
- [9] 吕学勤, 杨尚磊, 吴毅雄, 石忠贤. 铝合金与不锈钢的过渡层钎焊[J]. 焊接学报, 2004, 25(1): 95-101.
LÜ Xue-qin, YANG Shang-lei, WU Yi-xiong, SHI Zhong-xian. Aluminum alloy and stainless steel transitional layer braze welding[J]. Transactions of the China Welding Institution, 2004, 25(1): 95-101.
- [10] SIERRA G, PEYRE P, DESCHAUX B F. Galvanized steel to aluminum joining by laser and GTAW processes[J]. Materials Characterization, 2008, 59(12): 1705-1715.
- [11] SEGALL M D, LINDAN P L D, PROBERT M J, PICKARD C J, HASNIP P J, CLARK S J, PAYNE M C. First-principles simulation: Ideas, illustrations and the CASTEP code[J]. J Phys: Condens Matter, 2002, 14: 2717-2743.
- [12] MARLO M, MILMAAN V. Density-functional study of bulk and surface properties of titanium nitride using different exchange-correlation functionals[J]. Phys Rev B, 2000, 62: 2899-2907.
- [13] WHITE J A, BIRD D M. Implementation of gradient-corrected exchange-correlation potentials in car-par-rinello total-energy calculations[J]. Phys Rev B, 1994, 50: 4954-4957.
- [14] VANDERBILT D. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism[J]. Phys Rev B, 1990, 41: 7892-7895.
- [15] FRANCIS G P, PAYNE M C. Finite basis set corrections to total energy pseudopotential calculations[J]. J Phys: Condens Matter, 1990, 2: 4395-4404.
- [16] PERDEW J P, CHEVARY J A, VOSKO S H, JASKSON K A, PEDERSON M P, SINGH D J, FIOLETTI C. Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation[J]. Phys Rev B, 1992, 46: 6671-6687.
- [17] SIMMONS G, WANG H. Single crystal elastic constants and calculated aggregate properties[M]. Cambridge: MIT Press, 1971.
- [18] FU C L, YOO M H. Deformation behavior of B2 type aluminides: FeAl and NiAl[J]. Acta Metallurgica et Materialia, 1992, 40(4): 703-711.
- [19] VAILHÉ C, FARKAS D. Shear faults and dislocation core structure simulations in B2 FeAl[J]. Acta Materialia, 1997, 45(11): 4463-4473.
- [20] 王月华, 刘艳侠, 郑君刚, 马振宁. FeAl 合金 Finnis-Sinclair 多体势的构置及应用[J]. 沈阳师范大学学报: 自然科学版, 2008, 26(3): 290-296.
WANG Yue-hua, LIU Yan-xia, ZHENG Jun-gang, MA Zhen-ning. Construction and application of Finnis-Sinclair many-body potential for FeAl alloy[J]. Journal of Shenyang Normal University: Natural Science, 2008, 26(3): 290-296.
- [21] SHU Xiao-lin, HU Wang-yu, XIAO Han-ning, ZHANG Bang-wei, DENG Hui-qiu. Vacancies and antisites in B2 FeAl and DO₃ Fe₃Al with a modified analytic EAM model[J]. Journal of Materials Science and Technology, 2001, 17(6): 601-604.
- [22] 孔毅, 胡望宇, 黄杨程, 舒小林. B2 FeAl 合金晶格动力学的嵌入原子模型计算[J]. 稀有金属材料与工程, 2003, 32(2): 87-92.
KONG Yi, HU Wang-yu, HUANG Yang-cheng, SHU Xiao-lin. Lattice dynamical study of B2 FeAl alloy by using the embedded atom method[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2003, 32(2): 87-92.
- [23] HONG S Y, FU C L. Phase stability and elastic moduli of Cr₂Nb by first-principles calculations[J]. Intermetallics, 1999, 7: 5-9.
- [24] WANG J Y, ZHOU Y C. Polymorphism of Ti₃SiC₂ ceramic: First-principles investigations[J]. Phys Rev B, 2004, 69: 144108-144121.
- [25] MATTESINI M, AHUJA R, JOHANSSON B. Cubic Hf₃N₄ and Zr₃N₄: A class of hard materials[J]. Phys Rev B, 2003, 68: 184108-184112.
- [26] PUGH S F. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals[J]. Philos Mag, 1954, 45: 823-843.
- [27] YU W Y, WANG N, XIAO X B, TANG B Y, PENG L M, DING W J. First-principles investigation of the binary AB₂ type Laves phase in Mg-Al-Ca alloy: Electronic structure and elastic properties[J]. Solid State Science, 2009, 11(8): 1400-1407.

(编辑 陈卫萍)