

# 合金元素韧化或脆化 FeAl 金属间化合物的微观机制\*

钟夏平<sup>1)</sup> 邓 文<sup>1)2)</sup> 唐郁生<sup>3)</sup>  
熊良钺<sup>2)4)</sup> 王淑荷<sup>2)4)</sup> 郭建亭<sup>2)4)</sup> 龙期威<sup>2)4)</sup>

1)(广西大学物理系, 南宁 530004)

2)(中国科学院国际材料物理中心, 沈阳 110015)

3)(玉林教育学院物理系, 玉林 537000)

4)(中国科学院金属研究所, 沈阳 110015)

(1998 年 1 月 16 日收到)

通过测量二元 FeAl 以及含 B, Zr 或 Si 的 FeAl 合金的正电子寿命谱参数, 计算合金基体和缺陷处的价电子密度. 结果表明, 当 Al 原子和 Fe 原子结合形成 FeAl 合金时, Al 原子提供价电子与 Fe 原子的 3d 电子形成局域的共价键. FeAl 合金基体的价电子密度很低, FeAl 合金中金属键和共价键共存. FeAl 合金晶界缺陷的开空间大于 Fe 空位或 Al 空位的开空间, FeAl 合金晶界处的金属键合力很弱. 在 FeAl 合金中加入少量的 B, 一部分 B 原子以间隙方式固溶到 FeAl 基体中, 增加基体的价电子密度; 另一部分 B 原子偏聚到 FeAl 合金的晶界上, 也增加了晶界处的价电子密度. 在 FeAl 合金中加入 Zr, 增加了合金中的金属键成分, 使基体中的价电子密度增加, 增强了基体中金属键合力. Zr 原子的加入还降低了 FeAl 合金的有序度, 使合金晶界容易弛豫, 晶界缺陷的开空间变小. Zr 原子在晶界附近出现, 还增加了晶界处的价电子密度. 在 FeAl 中加入 B 或 Zr 有利于提高合金的韧性. 在 FeAl 合金中加入 Si, 晶界处的 Si 原子与邻近的原子形成强的共价键, 使得在晶界处参与形成金属键的价电子密度降低. 在 FeAl 中加入 Si 使合金更脆.

PACC: 7870B; 7300; 6170; 8140

## 1 引 言

FeAl 是 B2 型金属间化合物, 长程有序 FeAl 合金具有良好的高温强度和优异的抗氧化抗腐蚀性能<sup>[1]</sup>. 它的密度为 5.56 g/cm<sup>3</sup>, 熔点为 1250 °C, 杨氏模量为 260.4 GPa. 而且, 这种铝化物价格低廉, 因而应用范围可望比其他金属间化合物更为广泛. 但 FeAl 合金的室温脆性是工程材料应用的主要障碍.

等原子比的 FeAl 合金其室温塑性为零, 随着 Al 含量从 50% 降低到 35%, 塑性逐渐增加. 铝含量大于 40.0% 的 FeAl 合金室温下为沿晶界断裂<sup>[2]</sup>. 一般认为这是由于有害杂

\* 国家自然科学基金(批准号: 59561001)和广西教委基金资助的课题.

质在晶界偏聚导致了晶界弱化<sup>[3]</sup>.FeAl 合金不但晶界弱,晶内键合力也很差,造成了低的解理强度<sup>[4,5]</sup>.

郭建亭等<sup>[6]</sup>系统地研究了合金元素对 FeAl 合金力学性能的影响,结果表明,加入 1%B 和 4%Si,使 FeAl 合金的强度明显提高,但 Si 使合金严重脆化,而 B 在提高合金抗张强度和屈服强度的同时,使延伸率和面缩率得到一定提高.

FeAl 合金的韧化到目前为止尚未取得突破性进展.解决 FeAl 金属间化合物的脆性,必须弄清它的脆性本质.我们通过测量二元 FeAl,含 B、含 Si 和含 Zr 的 FeAl 合金的正电子寿命谱,研究 FeAl 合金中的成键特征、基体和缺陷态的价电子密度,讨论 FeAl 合金脆性的本质;研究合金元素对 FeAl 合金缺陷组态和价电子密度的影响.

2 实 验

2.1 样品制备

FeAl 合金的化学成分如表 1 所示.试验合金按照给定的成分配制,用真空感应炉熔炼,并精密铸造成试样毛坯.所有合金经 1000 ℃,12 h,空冷的均匀化热处理.热处理后的试样毛坯机加工成直径为 8 mm 的圆棒.用线切割机从每种试棒中各切出两片厚度为 1 mm 的薄片.将这些薄片的表面磨平并抛光后作为正电子试验样品.

表 1 FeAl 合金的化学成分(at. %)

| 合金 No. | Al   | B   | Si  | Zr  | Fe   |
|--------|------|-----|-----|-----|------|
| 1      | 40.0 | —   | —   | —   | bal. |
| 2      | 40.0 | 1.0 | —   | —   | bal. |
| 3      | 40.0 | —   | —   | 0.2 | bal. |
| 4      | 36.0 | —   | 4.0 | —   | bal. |

2.2 正电子寿命谱测量

正电子寿命谱采用 ORTEC 公司的快-快符合谱仪测量.以 Mylor 膜为衬底的<sup>22</sup>Na 正电子源的强度为  $3.7 \times 10^5 \text{Bq}$ .两块相同的样品把这个源夹起来即构成了样品-源-样品三明治结构.在本实验条件下,仪器分辨函数的半高度 FWHM 为 240 ps.试验在室温(20 ℃)下进行.

3 结果与讨论

3.1 实验结果

扣除源成分( $\tau_s=375 \text{ps}$ ,  $I_s=8.7\%$ )后,正电子寿命谱采用三寿命拟合.所用的解谱程序为 Positrofit extended 程序<sup>[7]</sup>.每条谱包含三个寿命组份:一个短寿命  $\tau_1$ (大约为 180 ps),一个中等寿命  $\tau_2$ (约为 300 ps)和一个长寿命  $\tau_3$ (大约为 1300 ps),对应的强度分别

为  $I'_1$ ,  $I'_2$  和  $I'_3$ . 第三寿命组份强度  $I'_3$  ( $\approx 1\%$ ) 非常小, 是正电子在样品表面湮没的结果. 这里不考虑表面因素. 取

$$I_1 = \frac{I'_1}{I'_1 + I'_2},$$

$$I_2 = \frac{I'_2}{I'_1 + I'_2}.$$

(1)

对强度重新归一化. 第二寿命组份  $\tau_2$  是正电子在微观缺陷态中的寿命, 而正电子在缺陷态的湮没率  $\lambda_2$  可由下式给出,

$$\lambda_2 = \tau_2^{-1}.$$

(2)

根据正电子标准两态捕获模型<sup>[8]</sup>, 可求出正电子在基体中的湮没率  $\lambda_b$  和正电子在基体中的寿命  $\tau_b$ ,

$$\lambda_b = I_1 \tau_1^{-1} + I_2 \tau_2^{-1},$$

$$\tau_b = \lambda_b^{-1}.$$

(3)

表 2 是 FeAl 合金的正电子寿命谱的特征参数.

表 2 FeAl 合金的正电子寿命谱特征参数

| 合金 | $\tau_1/\text{ps}$ | $\tau_2/\text{ps}$ | $I_1/\%$     | $I_2/\%$     | $\tau_b/\text{ps}$ |
|----|--------------------|--------------------|--------------|--------------|--------------------|
| 1  | $186.9 \pm 2$      | $380 \pm 46$       | $93.1 \pm 2$ | $6.9 \pm 2$  | 193.7              |
| 2  | $181.0 \pm 3$      | $309 \pm 40$       | $88.8 \pm 5$ | $11.2 \pm 5$ | 189.8              |
| 3  | $182.7 \pm 2$      | $345 \pm 41$       | $91.2 \pm 2$ | $8.8 \pm 2$  | 190.6              |
| 4  | $184.3 \pm 1$      | $415 \pm 49$       | $94.4 \pm 1$ | $5.6 \pm 1$  | 190.2              |

根据正电子寿命参数可以计算出正电子在合金基体和缺陷态中的湮没率  $\lambda_b$  和  $\lambda_d$ . 根据  $\lambda_b$  和  $\lambda_d$  的值, 按 Brandt 等<sup>[9]</sup>给出的经验公式  $n = (\lambda - 2)/134$ , 可估算出合金基体和缺陷态的电子密度  $n_b$  和  $n_d$  值, 如表 3 所示. 表 4 列出了 Fe, Al, Si, B 和 Zr 的晶体结构、原子半径、电负性和电子构型. 表 5 是几种纯组元的正电子基体寿命.

表 3 FeAl 合金基体和缺陷态的电子密度

| 合金 | $\lambda_b/\text{ns}^{-1}$ | $\lambda_d/\text{ns}^{-1}$ | $n_b/10^{-2}\text{a. u.}$ | $n_d/10^{-3}\text{a. u.}$ |
|----|----------------------------|----------------------------|---------------------------|---------------------------|
| 1  | 5.16                       | 2.63                       | 2.36                      | 4.70                      |
| 2  | 5.27                       | 3.24                       | 2.44                      | 9.25                      |
| 3  | 5.25                       | 2.90                       | 2.43                      | 6.72                      |
| 4  | 5.26                       | 2.41                       | 2.43                      | 3.06                      |

表 4 几种合金元素的晶体结构、原子半径、电子构型和电负性

| 元素                 | 晶体结构 | 原子半径/nm | 电子构型       | 电负性 |
|--------------------|------|---------|------------|-----|
| $\alpha\text{-Fe}$ | bcc  | 0.124   | $3d^64s^2$ | 1.8 |
| Al                 | fcc  | 0.143   | $3s^23p^1$ | 1.5 |
| Zr                 | hcp  | 0.160   | $4d^25s^2$ | 1.4 |
| Si                 | 金刚石  | 0.132   | $3s^23p^2$ | 1.8 |
| B                  | hcp  | 0.098   | $2s^22p^1$ | 2.0 |

表 5 几种纯金属晶体的正电子基体寿命

| 元素 | $\tau_b/\text{ps}$ | $\lambda_b/\text{ns}^{-1}$ | $n_b/10^{-2}\text{a. u.}$ | 文献   |
|----|--------------------|----------------------------|---------------------------|------|
| Fe | 106                | 9.43                       | 5.54                      | [10] |
| Al | 166                | 6.02                       | 3.00                      | [11] |
| Si | 228                | 4.39                       | 1.78                      | [11] |
| Zr | 165                | 6.06                       | 3.03                      | [11] |

3.2 二元 FeAl 基体中的价电子密度

对于一个独立的粒子系统,正电子湮没率一般可表达为<sup>[12]</sup>

$$\lambda = \pi C r_0^2 \int |\psi(\mathbf{r})|^2 n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \tag{4}$$

对于由简单金属 A, B 组成的二元合金, (4) 式可由局域密度近似表示<sup>[13]</sup>

$$\lambda = \pi C r_0^2 \int |\psi(\mathbf{r})|^2 [n(\mathbf{r})] d\mathbf{r} = \sum_j \int_{a_j} |\psi(\mathbf{r}_j)|^2 \lambda [n(\mathbf{r}_j)] d\mathbf{r}_j \tag{5}$$

式中  $j$  表示第  $j$  个原胞, (5) 式将对整个体积的积分变成了对各个原子的维格纳-赛兹单胞的积分. 为了进一步简化 (5) 式, 假定正电子在合金中的同一元素原子的单胞内的分布相同, 则对于一个二元合金系统, (5) 式可近似表示为

$$\lambda = f_A \lambda_A + f_B \lambda_B \tag{6}$$

其中权重因子  $f_i$  ( $i = A, B$ ) 表示原子单胞 A, B 中找到正电子的概率,  $\lambda_i$  ( $i = A, B$ ) 是相应原胞中的湮没速率. Stott 和 Kubica<sup>[14]</sup> 指出, 对于正电子在合金中均匀分布的情况,  $f_i$  分别等于合金中各成分的原子百分比浓度  $C_i$ , 且  $\lambda_i$  分别近似等于正电子在对应的纯金属中的湮没率.

对二元 FeAl 合金, 从表 5 中看出, 正电子在纯 Fe 和纯 Al 金属基体中的湮没率分别为  $\lambda_b(\text{Fe}) = 9.43 \text{ ns}^{-1}$ ,  $\lambda_b(\text{Al}) = 6.02 \text{ ns}^{-1}$  (表 5), 而且  $f_{\text{Fe}} = 0.60$ ,  $f_{\text{Al}} = 0.40$  (表 1). 把 (6) 式用于 FeAl 合金中, 从理论上可计算出正电子在 FeAl 合金基体中的湮没率  $\lambda_{\text{Cb}}(\text{FeAl})$  为

$$\lambda_{\text{Cb}}(\text{FeAl}) = f_{\text{Fe}} \lambda_b(\text{Fe}) + f_{\text{Al}} \lambda_b(\text{Al}) = 8.07 \text{ ns}^{-1}.$$

据此得到 FeAl 合金基体价电子密度  $n_{\text{Cb}}(\text{FeAl})$  为

$$n_{\text{Cb}}(\text{FeAl}) = 4.53 \times 10^{-2} \text{ a. u.}$$

但是实验测得的 FeAl 合金基体的价电子密度  $n_{\text{Eb}}(\text{FeAl})$  为

$$n_{\text{Eb}}(\text{FeAl}) = 2.36 \times 10^{-2} \text{ a. u. (表 3)}$$

$n_{\text{Eb}}(\text{FeAl})$  不但比  $n_{\text{Cb}}(\text{FeAl})$  小, 而且也小于纯 Al 基体或纯 Fe 金属基体的自由电子密度  $n_b(\text{Al}) (= 3.00 \times 10^{-2} \text{ a. u.})$  或  $n_b(\text{Fe}) (= 5.54 \times 10^{-2} \text{ a. u.})$ . 因此, 当 Fe 和 Al 组成 FeAl 时, 在 Fe-Al 间不是形成单一的金属键.

Fe 原子中的部分 3d 电子尚未配对 (Fe 的电子构型如表 4 所示), 当 Fe 和多价 Al 原子成键时, Al 原子提供电子与 Fe 的 3d 电子将形成局域的共价键, 导致参与形成金属键的价电子数量减少. 因此, 二元 FeAl 合金基体中的价电子密度较低, 晶内金属键合力较

弱, 因则表现出很低的解理强度<sup>[4]</sup>.

由于 FeAl 合金中金属键和共价键共存, 共价键的饱和性和方向性决定了 FeAl 合金显示出简单的 B2 型体心立方结构. 由于共价键的键合力比较强, 使得 FeAl 合金表现出长程有序的特点, 并具有较高的有序能.

### 3.3 二元 FeAl 合金缺陷态的价电子密度

正电子在二元 FeAl 合金缺陷态中的寿命  $\tau_2(\text{FeAl}) = 380 \pm 46 \text{ ps}$  (表 2), 它大于正电子在 Fe 空位的寿命 ( $\tau_v(\text{Fe}) = 148 \text{ ps}$ ) 或 Al 空位的寿命 ( $\tau_v(\text{Al}) = 240 \text{ ps}$ )<sup>[11]</sup>. FeAl 合金中存在大开空间的缺陷.

由于 FeAl 合金中的共价键成分多而金属键成分少, 共价键的方向性和饱和性决定的 FeAl 晶体中的原子排列高度有序, 合金晶界处的原子不容易弛豫, 使 FeAl 合金晶界处出现开空间大的缺陷. FeAl 合金缺陷态的价电子密度很低,  $n_d(\text{FeAl}) = 4.70 \times 10^{-3} \text{ a. u.}$  (表 3). 这表明 FeAl 合金晶界处的键合力很弱. 因此, FeAl 合金在室温下为沿晶断裂<sup>[2]</sup>.

### 3.4 合金元素对 FeAl 合金价电子和微观缺陷的影响

正电子在 2 号合金 (含 B 的 FeAl 合金) 基体中的寿命  $\tau_b(2) = 189.8 \text{ ps}$ , 小于 1 号合金 (二元 FeAl 合金) 的正电子基体寿命  $\tau_b(1) = 193.7 \text{ ps}$  (表 2). 这表明虽然 B 原子的电负性 (2.0) 较大, 但由于它的原子半径仅为  $0.098 \text{ nm}$ , 小于 Fe 的原子半径 ( $0.143 \text{ nm}$ ) (表 4), 这使得它容易存在于 FeAl 晶格的间隙位置上. 以间隙方式存在于 FeAl 基体中的 B 原子, 提高了合金基体的价电子密度, 即  $n_b(2) > n_b(1)$  (表 3), 因而增强了基体中的键合力. 正电子在 2 号合金缺陷态的寿命  $\tau_2(2) = 309 \pm 40 \text{ ps}$ , 小于  $\tau_2(1)$ , 而且是所有测试样品的  $\tau_2$  中的最小值 (表 2). 这是由于硼原子的尺寸较小, 容易偏聚到 FeAl 合金晶界缺陷上, 偏聚到 FeAl 合金晶界上的硼增加了晶界处的价电子密度,  $n_d(2) > n_b(1)$  (表 3).  $e^+$  在这种硼-缺陷复合体中的寿命比无硼缺陷的短. 俄歇分析也表明 B 在 Fe-40Al 的晶界处强烈偏聚<sup>[6]</sup>. 总之, 在 FeAl 合金中加入少量的硼, 一部分硼原子以间隙方式固溶到 FeAl 基体中, 增强了基体的键合力; 另一部分硼原子偏聚到 FeAl 合金的晶界上, 增加了晶界处的键合力. 因此, 硼提高了 FeAl 合金的延伸率和面缩率, 使 FeAl 合金的室温拉伸断口由沿晶变为穿晶特征.

正电子在 3 号合金 (含 Zr 的 FeAl 合金) 基体中的寿命  $\tau_b(3) = 190.6 \text{ ps}$ , 小于  $\tau_b(1)$  (表 2). 这说明, 在 FeAl 合金中加入电负性比 Al (1.5) 和 Fe (1.8) 都小的 Zr (1.4) 原子 (表 4), 增加了合金中金属键成分, 使合金基体的价电子密度升高, 即  $n_b(3) > n_b(1)$  (表 3). 正电子在 3 号合金缺陷态的寿命  $\tau_2(3) = 345 \pm 41 \text{ ps}$ , 小于  $\tau_2(1)$  (表 2), 这是由于 Zr 的加入, 增加了合金中金属键的成分, 使电荷分布均匀化并降低合金的有序能, 合金晶界易于弛豫, 在一定程度上导致晶界缺陷的开空间变小, 而且当 Zr 原子在晶界附近出现, 还增加了晶界处的自由电子密度, 即  $n_b(3) > n_d(1)$  (表 3). 在 FeAl 合金中加入 Zr, 有助于改善 FeAl 合金的力学性能.

正电子在 4 号合金 (含 Si 的 FeAl 合金) 缺陷态的寿命  $\tau_2(4) = 415 \pm 49 \text{ ps}$ , 大于  $\tau_2(1)$ , 是所有测试样品的  $\tau_2$  中的最大值 (表 2). Si 的原子半径为  $0.132 \text{ nm}$ , 比 Al 的原子

半径(0.143 nm)小,比 Fe 的原子半径(0.124 nm)大(表 4),它不易于形成间隙原子.由于 Si 原子的电负性(1.8)比 Al(1.5)大,当 Si 原子出现在晶界附近并取代 Al 原子时,Fe-Si 间更倾向于形成共价键.由于共价键电子的局域性,使得晶界处参与形成 Fe-Fe 金属键的价电子数减少,即  $n_d(4) > n_d(1)$ (表 3),晶界处的金属键合力减弱.这种键合力的不均匀性,导致了含硅 FeAl 合金严重变脆<sup>[6]</sup>.正电子在 4 号合金基体中的寿命  $\tau_b(4) = 190.2\text{ps}$ ,小于  $\tau_b(1)$ (表 2).4 号合金的 Al 含量比 1 号合金的 Al 含量低.4 号合金中的 Si 原子可能会更趋向于在晶界偏聚,造成了合金基体中 Fe 原子的比例较高,基体中的价电子密度相对较高,  $n_b(4) > n_b(1)$ (表 3).

## 4 结 论

1)当 Al 原子和 Fe 原子结合形成 FeAl 合金时,Al 原子提供价电子与 Fe 原子的 3d 电子形成局域的共价键.FeAl 合金基体的价电子密度很低,FeAl 合金中金属键和共价键共存.

2)FeAl 合金晶界缺陷的开空间大于 Fe 空位或 Al 空位的开空间,FeAl 合金晶界处的价电子密度低,金属键合力较弱.

3)在 FeAl 合金中加入少量的硼,一部分硼原子以间隙方式固溶到 FeAl 基体中,增加基体的价电子密度;另一部分硼原子偏聚到 FeAl 合金的晶界上,也增加了晶界处的价电子密度.

4)在 FeAl 合金中加入锆,增加了合金中的金属键成分,使基体中的价电子密度增加,增强了基体中金属键合力.Zr 原子的加入还降低了 FeAl 合金的有序度,使合金晶界容易弛豫,在一定程度上使晶界缺陷的开空间变小.Zr 原子在晶界附近出现,还增加了晶界处的价电子密度.

5)在 FeAl 合金中加入硅,晶界处的 Si 原子与邻近的原子形成强的共价键,使得在晶界处参与形成金属键的价电子密度降低.

- [1] C. G. McKamey, J. A. Horton and C. T. Liu, *Scripta Metall.*, **22**(1988), 1679.
- [2] A. V. Seybolt, J. H. Westbrook, *Acta Metall.*, **12**(1964), 449.
- [3] J. H. Westbrook, *Met. Rev.*, **9**(1965), 415.
- [4] C. T. Liu, E. H. Lee and C. G. McKamey, *Scripta Metall.*, **23**(1989), 875.
- [5] C. T. Liu, C. G. McKamey and E. H. Lee, *Scripta Metall.*, **24**(1990), 385.
- [6] Guo Jianting, Sun Chao, Tan Minghui, Li Hui and Lai Wanhui, *Acta Metallurgica Sinica*, **26A**(1990), 20(in Chinese).
- [7] P. Kirkegaard and M. Eldrup, *Comput. Phys. Commu.*, **7**(1974), 401.
- [8] W. Brandt and R. Paulin, *Phys. Rev.*, **B5**(1970), 2430.
- [9] W. Brandt and J. Reinheimer, *Phys. Rev.*, **B2**(1970), 3104.
- [10] Y. Shirai, H. E. Schaefer and A. Seeger, Positron Annihilation, ICFA-8, Edited by L. Dorikens-Vanpraet, M. Dorikens and D. Segers (Singapore, New Jersey, Hong Kong, 1988), p. 419.
- [11] W. Brandt, A. Dupasquier, Positron Solid-State Physics, North Holland, Amsterdam(New York, Oxford, 1983), p. 200.

- [12] D.G. Lack, R.N. West, *J. Phys. F: Met. Phys.*, **4**(1974), 2179.  
[13] R.N. West, *Adv. Phys.*, **22**(1973), 263.  
[14] M.J. Stott and Kubica, *Phys. Rev.*, **B11**(1975), 1.

## THE MICROSCOPIC MECHANISM OF ALLOYING ELEMENTS AFFECTING THE DUCTILITY OR BRITTLENESS OF FeAl INTERMETALLICS \*

ZHONG XIA-PING<sup>1)</sup> DENG WEN<sup>1)(2)</sup> TANG YU-SHENG<sup>3)</sup> XIONG LIANG-YUE<sup>2)(4)</sup>  
WANG SHU-HE<sup>2)(4)</sup> GUO JIAN-TING<sup>2)(4)</sup> LONG QI-WEI<sup>2)(4)</sup>

1)( *Physics Department, Guangxi University, Nanning 530004* )

2)( *International Centre for Materials Physics, Academia Sinica, Shenyang 110015* )

3)( *Physics Department, Yulin Education College, Yulin 537000* )

4)( *Institute of Metal Research, Academia Sinica, Shenyang 110015* )

(Received 16 January 1997)

### ABSTRACT

The valence electron densities of bulk and microdefects in binary FeAl, and FeAl doping with B, Zr or Si have been calculated by using the positron lifetime parameters of the alloys. The density of valence electron is low in the bulk of FeAl alloy. It indicates that, in Fe atom the 3d electrons have well-localized properties and tend to form covalent bonds with Al atoms, thus the bonding nature in FeAl is a mixture of metallic and covalent. The large-open-volume defects occur in grain boundaries in FeAl and the cohesion of the grain boundaries is weak due to the low density of valence electron there. When a small amount of B atoms is added into FeAl alloy, some of B atoms segregate to the grain boundaries and increase the valence electron density; this will strengthen the bonding cohesion in the grain boundaries. The other B atoms are dissolved interstitially into the bulk, they interact with Fe and Al, increase the density of valence electrons and thus the bonding cohesion in the bulk. The addition of Zr into FeAl results in the increase of the density of valence electrons in the bulk and grain boundary. Whereas, if FeAl is alloyed with Si, the density of valence electrons in the grain boundary will decrease. B and Zr are found to be beneficial elements for improving the brittleness of FeAl alloy, while Si exhibits an opposite effect.

PACC: 7870B; 7300; 6170; 8140

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China under the Grant No. 59561001.