

Ti-Al 系金属间化合物力学性能的电子理论*

李 文[†] 陈岱民 关振中

(中国科学院长春光学精密机械研究所, 长春 130022)

张瑞林

(吉林大学材料科学系, 长春 130023)

(1997 年 9 月 29 日收到; 1998 年 3 月 30 日收到修改稿)

应用固体与分子经验电子理论, 在价电子结构层次, 系统地研究了 Ti-Al 系金属间化合物的力学性能. 根据该理论的基本思想, 比较了相关平行电子理论由电荷密度对力学性能的处理方法, 模型化了价电子结构空间分布图象, 揭示了 Ti-Al 系金属间化合物的脆性本质. 据此提出了能反映金属间化合物均匀变形能力的价电子结构对称性因子 α , 表明 α 与塑性有很好的对应关系, 并给出了其脆性判据. 初步建立了价电子结构与力学性能定量的经验关系.

PACC: 7870B; 7300; 6170; 8140

1 引 言

Ti-Al 系金属间化合物因其优异的高温力学性能与很低的密度, 在未来航空航天等领域有着美好的应用前景, 但因其恶劣的室温脆性, 真正投入商用还很困难^[1,2]. 虽然近年来这方面做了大量工作, 但大多研究仍停留在实验规律上, 很少探讨其内在本质原因, 特别是原子间的化学键作用. 至于联系电子结构来深入解释力学本质, 则报道更少.

这主要有两方面原因. 一是在电子结构层次的定量, 甚至定性处理在物理学特别是在数学上都有很大困难. 从原理上由量子力学的 Schrödinger 方程出发, 能够得到体系内部的所有相互作用, 从而得到体系的全部性质. 然而, 由于实际金属材料的庞杂性, 这样的严格处理几乎是不可能的. 因此可认为, 金属材料真正严格的电子理论尚未建立起来. 二是“经典”或唯象的金属学理论已经表明, 对于以原子无序分布固溶强化的钢铁材料为代表的传统结构材料, 只要在半微观尺度认识原子排布及其变化规律, 然后建立起在一般的金相组织层次上的所谓结构与性能的关系, 从而提出具体工艺手段, 以设计或改性材料就已经足够, 任何试图在更高层次上揭示原子间相互作用的深刻原因, 从而给出真正的微观量级——电子结构与力学性能的关系似乎已没有必要.

然而, 即使仅就脆性而言, 不同的合金系和同一合金系不同的金属间化合物, 有的表现本征脆, 有的表现本征韧, 甚至同一金属间化合物的表现也殊异于传统结构材料. 如

* 吉林省自然科学基金(批准号:963405)资助的课题.

[†] 通讯联系人地址: 长春大学机械工程学院金工室, 长春 130022.

Ni_3Al 在单晶时极韧, δ 值可高达 80%, 而多晶时极脆, δ 值为零. 又如 TiAl 与 Ni_3Al 皆与传统结构材料相反的所谓反常屈服行为, TiAl 表现出随温度升高, 塑性也升高, 但 Ni_3Al 却急剧下降. 而同为一个合金系的金属间化合物 Ti_3Al 与 TiAl_3 , 却几乎没有此现象. 至于 Ni_3Al 初化元素 B 的极微量合金化, Ti-Al 系金属间化合物的环境脆性等许多问题, 皆因与电子结构有密切关系而呈独特性, 以晶体结构和位错行为不易解释. 因此, 要真正揭示金属间化合物的脆性本质, 仅从传统的金属学理论出发, 是根本不可能的. 进入 90 年代, 随金属间化合物研究的深入, 已有研究者在电子结构层次进行了一些开创性的工作. 他们基本上是通过理论计算或实验方法获得电荷密度, 以此为根据定性地解释力学性能, 或也给出一些半定量的结果^[3-6].

固体与分子经验电子理论^[7](EET)在价电子结构层次提供了一个键距差分析方法, 因其简明实效性, 在合金改性及设计上取得很大成功^[8]. 本文根据 EET 试图初步建立起价电子结构与力学性能的定量关系, 为从根本上弄清 Ti-Al 系金属间化合物的脆性起源及其投入实际应用提供基础理论. 值得强调的是, 由于力学性能来源的复杂性及多重性, 特别是对缺陷的高敏感性, 本文所处理的将主要是完整单晶的本征性质.

2 价电子结构空间分布模型

2.1 模型的建立

电子结构可通过化学键理论或能带理论来获得. 其中心问题是由 *Schrödinger* 方程精确但一般是近似求解描述电子状态的波函数. 由波函数可作出反映电子结构的三维空间电荷密度图象. 借助电荷密度可深刻而又直观地理解原子间化学键的本质. 因此材料的力学性质也必然与电荷密度有着根本的联系. 但是由于实际材料的电荷密度无法精确获得, 而且实际材料的力学性质又有多方面的影响因素, 因而二者的本征关系始终未能建立起来.

EET 没有直接给出“电子波函数”或“原子、分子轨道”等信息, 似乎难以建立起类似电荷密度的概念, 但 EET 建立的基础是由量子力学等发展起来的化学键理论, 最重要的是给出了与材料宏观行为有直接必然联系, 且又有简单对应关系的“经验”概念, 如哑对电子、磁电子、共价电子、晶格电子等. 因此由 EET 的价电子结构分析结果就可能建立起类似于电荷密度, 但又能直观反映物理意义, 且易于联系宏观性能的简洁图象. 从 EET 的基本概念出发可做如下分析.

EET 给出的成键电子主要为共价电子与晶格电子. 晶格电子主要来源于 s 电子, 有时也由等效于 s 的 p 电子构成, 具有离域性质, 因此可认为晶格电子空间分布, 相对共价电子而言, 对三维空间电荷密度有均匀分布的贡献. 共价电子是单占据轨道的一种电子, 是原子间结合的主要基础, 具有定域性质, 对于电荷密度有极强的方向性及不同大小的分布贡献. 由此也可给出类似“电荷密度”的空间图象. 以 TiAl 为例, TiAl 等金属间化合物的价电子结构^[9]作者已由 EET 的键距差方法经计算机分析处理得到. 表 1 给出其计算结

果. 选一原子 Ti(或 Al)为中心, 以 $N_l = \frac{n_l}{n_T}$ (n_l 和 n_T 分别为价电子结构中晶格电子和总价电子数)为半径可作出一空间球, 表示“电荷密度”的基本均匀性. 在球上根据与 Ti(或 Al)原子所成的第一近邻键、第二近邻键或至多第三近邻键的方向及大小可画出一些伸向空

表 1 Ti-Al 和 Fe-Al 系各相的价电子结构

		键名	I_a	n_a
β -Ti	$a = 0.3313$ nm	A	8	0.2806
	$\sigma_{Ti} = A10$	B	6	0.0513
α -Ti	$a = 0.29508$ nm	A	6	0.2472
	$c = 0.46885$ nm	B	6	0.2070
	$\sigma_{Ti} = A10$	C	6	0.0045
Ti ₃ Al	$a = 0.5782$ nm	A	12	0.2560
	$c = 0.4629$ nm	B	12	0.2440
	$\sigma_{Ti} = A13$	C	12	0.2296
	$\sigma_{Al} = A4$	D	12	0.2188
TiAl	$a = 0.4005$ nm	A	4	0.2559
	$c = 0.4070$ nm	B	4	0.2375
	$\sigma_{Ti} = A14$	C	16	0.2283
	$\sigma_{Al} = A4$	D	4	0.0053
TiAl ₃	$a = 0.384$ nm	A	8	0.3316
	$c = 0.8596$ nm	B	8	0.3177
	$\sigma_{Ti} = A14$	C	16	0.1676
	$\sigma_{Al} = A4$	D	16	0.1750
无序 Ti ₃ Al	$a = 0.28816$ nm	A	6	0.2363
	$c = 0.46285$ nm	B	6	0.2134
	$\sigma_{Ti} = A12$	C	6	0.0048
	$\sigma_{Al} = A4$	D	2	0.0007
Al	$a = 0.4049$ nm	A	12	0.2086
	$\sigma_{Ti} = A4$	B	6	0.0045
α -Fe	$a = 0.2866$ nm	A	8	0.3805
	$\sigma_{Fe} = A8$	B	6	0.0879
Fe ₃ Al	$a = 0.28965$ nm	A	16	0.4124
	$\sigma_{Fe} = B12$	B	16	0.3330
	$\sigma_{Al} = A2$	C	16	0.0975
		D	12	0.0717
FeAl	$a = 0.2909$ nm	A	16	0.3790
	$\sigma_{Fe} = B18$	B	6	0.0559
	$\sigma_{Al} = A3$	C	6	0.1290
γ -Fe	$a = 0.3601$ nm	A	12	0.3306
	$\sigma_{Fe} = B11$	B	6	0.0058

注: a, c 为晶格常量; σ 为杂阶; I_a 等同键数; n_a 为共价电子数; A, B, C, D 为键序号, 一般指最强键、次强键、第 3 强键、第 4 强键.

间的圆柱, 柱长表示形成共价键的二个原子的原子间距, 柱径 $N_r = \frac{n_c}{n_T}$ (n_c 为该键上共价电子数)表示这个共价键上共价电子在这些方向对“电荷密度”分布的贡献. 用这些圆柱表示对“电荷密度”的贡献, 只是为了说明共价电子定域性质形象性的简化处理, 实际上它们

当然是以原子或分子轨道对“电荷密度”做出贡献.所得 TiAl 价电子结构空间分布图象如图 1.采用同样的方法及相同的尺度标准,可作出 Ti-Al 系及其他金属间化合物的图象.通过这些图象,可直接分析比较或推测其力学性能.这样,就得到所谓的价电子结构空间分布模型:晶格电子给出了均匀分布的“电荷密度”,共价电子给出了不同方向及大小分布的“电荷密度”,而总“电荷密度”就应由这两方面来决定.

2.2 讨论

1) 晶体的键型和键强度问题

晶体的宏观基本性质可由内部原子的化学键性质来简单地定性判断.经典理论把化学键定性分为离子键、共价键和金属键,这只是与材料性质对应的一种经验方法,皆可由共价键键上电荷密度大小及分布的极限或特殊情况来界定.共价键电荷密度极端的离域性就构成了金属键,而电荷密度中心由键中心偏离某个原子达到某个极端情况就形成了离子键.现代共价理论采用价键(VB)理论和分子轨道(MO)理论通过大量繁琐计算可得到所谓共价键中的离子键成分^[10].这些理论没有处理也没有提出所谓的“金属键成分”,只是 Pauling 曾给出金属中每个原子应平均含有 0.72 个金属轨道的半定量概念^[11].

因为晶格电子对电荷密度均匀性的贡献,相当于金属键的作用,因而由本文模型可提出“金属键成分”概念,其值就是前面给出的 N_i .虽然由该模型难以给出离子键成分,但对同样间距不同原子间形成的各键的强度可作如下分析.根据所提出的模型,每个“圆柱”(即键)的强度可粗略地用该键上共价电子对数来表示.设参考原子 A 与它相近的另一原子 A 形成 A—A 键的键电子对数为 n_{AA} ,同时与该参考原子距离同样远的原子 B 形成

A—B 键的键电子对数为 n_{AB} ,引入参数 $N = \frac{n_{AB} - n_{AA}}{n_{AA}}$ 表示同类原子间形成的键(A—A)与异类原子间形成的键(A—B)强度的差异.它的大小可反映出同距离共价键分布的均匀性.这种均匀性将对塑性变形等性质有很大的影响.

以上结果表明,由所提出的模型可以很简洁地定量处理一些复杂问题.当然,上面给出的一些概念在一定程度上偏离了原概念上的含意,并引入了新的理解,但这些概念的实际意义很明确,并可很好地定量处理力学性质.可以推测,仅从化学键角度考虑, N_i 越大,塑性越好, N 越大,材料将越脆,具体分析仍可以 TiAl 为例,参见下面的讨论.

2) 力学性能来源的解释

(1) Eberhart 等人^[4]通过实验给出了 Cu, CuAu, Ni₃Al 和 TiAl 的电荷密度. Cu 和 CuAu 因极其均匀的电荷密度而表现出良好的塑性, Ni₃Al 因电荷密度均匀性稍差于前者,塑性也将稍差,而 TiAl 因电荷密度呈严重的各向异性将表现出恶劣的本征脆性.

(2) Greenberg 等人^[5]通过量子力学计算给出了 TiAl 不同方向上的电荷密度.指出 Ti-Ti 方向密度较大,而 Al—Al 和 Ti—Al 方向相对较弱,从而导致本征脆性.

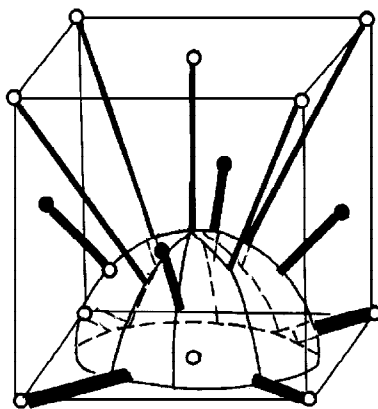


图 1 TiAl 的价电子结构空间分布图象

○为 Ti, ●为 Al

(3) Morinaga 等人^[6]采用原子束法计算了 TiAl 的键级和键组成. 表明 Alp—Tid 共价键太强而 d—d 键太弱, 因而是脆性.

(4) Yoo 等人^[3]采用局域密度泛函(LDF)理论尝试性地计算了 TiAl 等金属间化合物结构不敏感的弹性模量, 初步开辟了一个定量处理金属间化合物力学性质的方法.

现在用所给出的模型来说明 TiAl 的脆性. 由价电子结构参数可定量给出“金属键成分” N_l 和反映共价键分布的 N . 因为 TiAl 的 N_l 很小, N 却较大, 因此可以认为 TiAl 金属键成分少, 导致“电荷密度”基本均匀性太差, 同时共价键分布的对称性也很差, 表明方向性的强化极不一致. 综合这两方面因素或从总的“电荷密度”来考查 TiAl 皆呈本征脆性. 这样就以 TiAl 为例很好地解释了其脆性本质. 类似地可处理其他金属间化合物. 前面几个研究除了理论计算皆相当复杂外, (1)(2)没有给出定量处理; (3)给出的键级等基本参数是相对性的, 因而至多是半定量性质的; (4)虽给出了计算结果, 但与实验值差距很大, 特别是它的处理对象又特别窄. 本文的处理方法非常简单, 可直接与力学过程相对应. 并且定量处理得到的价电子结构参数不是相对值, 有严格明确的物理意义, 正因为如此, 就可通过分析力学行为的内在机制而建立起更深入的联系.

3 由价电子结构给出的均匀变形因子及脆性判据

3.1 均匀变形因子

材料的塑料变形是一个相当复杂的过程, 但从微观原子滑移机制来看, 滑移没有破坏内部原子平移对称性, 就可能继续均匀变形, 从而获得大变形. 这个思想用电荷密度来考虑就是空间分布均匀没有各向异性将是良好塑性的必要条件. 文献[4—6]都是以这种思想处理脆性的. 由价电子结构空间分布模型可做如下分析.

1) 键型的影响

金属键成分 N_l 基本上反映了键型对塑性的影响. N_l 表示晶格电子球对称性对“电荷密度”在空间均匀分布的贡献, 因此可认为 N_l 值越大, 塑性将越好. 这也可由晶格电子的物理本质来解释. 由于晶格电子能比较自由地游荡在晶格间隙的空间内, 属于对原来原子发生离域化的公有电子, 为使晶体的电子结构分布均匀, 特别是在晶体受到外力作用导致维持晶格结构的共价键络受到不可恢复的破坏时, 晶格电子将“游荡”到原键络薄弱处或受到外力作用的削弱处, 以弥补或调节那里的价电子结构的均匀性, 以利于晶体继续均匀变形而不致破断. 因此, 可以 N_l 来反映晶格电子的这种有利作用, 也称之为键型因子. 由价电子结构空间分布模型知道, N_l 是价电子结构对称性的基本部分. 在理想情况下, 价电子全部为晶格电子时, N_l 有最大值为 1, 变形最易; 在极限情况下, N_l 有极小值为零, 变形最难.

2) 原子排列的影响

由价电子结构空间分布模型知道, EET 主要以共价键, 即“圆柱”作为维系晶体结构的主要化学键力. 对于不同晶体结构的共价键的分布, 可以 $I = I_M / I_T$, I_M 为晶体价电子结构中最强共价键的等同键数, I_T 为不可忽略的共价键的总键数, 来反映原子排列即晶

体结构对塑性变形的影响,称之为晶体结构因子.在理想情况下,晶体的共价电子都分布在最强键上, I 有最大值为1,此时认为晶体最易均匀变形.由定义式可以看出,与传统的考虑晶体结构对塑性变形的影响不同,这里的 I 以价电子结构分析结果为基础,不仅考虑了晶体结构中原子的空间位置形式,还参考了其键参数,因此它不仅反映了晶体结构,也包含了共价键空间分布的影响,从严格的物理意义上讲是一个电子结构参数.

3) 键分布的影响

由EET的价电子结构分析结果可知,最近邻与次近邻共价键基本上决定了晶体结构中原子间的化学键力.因此可以 $N_c = \frac{n_1^{\min} n_2^{\min}}{n_1^{\max} n_2^{\max}}$, n_1^{\max} , n_1^{\min} , n_2^{\max} , n_2^{\min} 分别为最近邻与次近邻键上最多与最少的共价电子对数,来反映同距离共价键分布均匀性对塑性形变的影响,称之为键分布因子.在理想情况下,键上共价电子对数皆一致,有最大值 $N_c = 1$,此时均匀变形最易.

4) 均匀变形因子

由前面分析可看出, I 反映了价电子结构空间分布模型中共价键的空间方向对称性, N_c 反映了其分布在强度上的均匀性, N_l 反映了该模型的基本对称性,三者是互为联系的,能够完整地反映出整个价电子结构空间分布的对称性,因此定义:

$$\alpha = I N_c N_l \quad (1)$$

来定量地表示它们的影响,称 α 为价电子结构对称性因子.宏观上, α 能反映材料均匀变形的能力,因此也称 α 为均匀变形因子.

为了验证 α 的物理意义和实用性,将表1的价电子结构计算结果代入(1)式,计算了Ti-Al系和Fe-Al系金属间化合物的 α 值,同时也把其计算推广到纯金属上,结果如表2所示.表2还列出对应的力学性能指标延伸率 δ 的实验数据^[1-3].

表2 α 计算值和 δ 实验值

相	I	N_c	N_l	α	$\delta/\%$ ^[1-3]
β -Ti	0.571	1.00	0.362	0.207	高
α -Ti	0.500	1.00	0.312	0.156	50
Ti ₃ Al	0.250	0.908	0.233	0.052	5
无序 Ti ₃ Al	0.500	1.00	0.272	0.136	
TiAl	0.250	0.928	0.187	0.043	2
TiAl ₃	0.167	0.914	0.173	0.027	0
Al	1.00	1.00	0.156	0.156	40
α -Fe	0.571	1.00	0.308	0.176	40
γ -Fe	1.00	1.00	0.249	0.249	高
Fe ₃ Al	0.285	0.593	0.480	0.081	18
FeAl	0.571	1.00	0.202	0.115	16

3.2 脆性判据

由表2数据比较纯金属与有序金属间化合物,可见后者的 I , N_c , N_l 皆低,造成 α 值极小导致变形能力极差,即延伸率 δ 值将很小;比较Ti-Al系的有序Ti₃Al与无序Ti₃Al,

后者的 α 值虽低于纯金属,但远高于前者的 α 值.完全无序 Ti_3Al 的延伸率 δ 的实验资料没有查到,但由其 α 值可以预料其 δ 值将很大.这表明,有序 α_2 的脆性主要是由于其 α 值较小引起的,而同样成分的无序合金其 α 值要大很多,因此通过技术手段使晶体结构部分无序化,在不失强度的前提下提高塑性是解决金属间化合物脆性的一个根本途径.

比较 Ti-Al 系金属间化合物,从 α_2 到 γ 到 TiAl_3 ,三者的 N_c 基本一致, N_1 和 I 变小,而 TiAl_3 的 I 值降低很多,最后导致其 α 值下降最大,造成 TiAl_3 相对 α_2 与 γ 极脆.因此可认为 TiAl_3 的 I 值太小是其脆性的一个主要来源.这是通过合金化改变晶体结构在一定程度上提高其塑性的本质原因.比较 Fe-Al 系各相也有类似的规律.

比较 Ti-Al 系和 Fe-Al 系金属间化合物,后者最大的 α 值很大,达 0.116,虽没有纯金属那么大,但却基本上大于前者的 α 值.表明 Fe-Al 系金属间化合物的脆性不会很大,至少要远小于 Ti-Al 系的 α 值.目前许多最新研究^[12]已经证明 Fe_3Al 和 FeAl 的脆性完全是由空气中的水蒸汽引起的,在真空或干氧中其 δ 值可达 16% 以上,表明它们是本征韧性的.这从 α 值计算中也能得到反映.另一方面,根据其他合金系金属间化合物如 CuAu 和 Ni_3Al 为本征韧性的,也可推测其 α 值应该较大,从而得到它们内部电子结构的有关信息,预测其他宏观性质.

由以上分析可见,所提出的 α 值不仅可完全地定性反映纯金属与金属间化合物,有序与无序金属间化合物,不同合金系各有序金属间化合物以及同合金系各有序金属间化合物的脆性本质差别,甚至可表征它们之间在脆性上精微的相对量的差别,即在定量上 α 值也与其各自延伸率 δ 值有很好的对应关系.根据这些事实以及大量其他合金系金属间化合物 α 值的分析计算结果,可用 α 给出一个脆性的经验判据.若金属间化合物的价电子结构参数 α 值大于 0.08,可能是本征韧性的;小于 0.08,则可能是本征脆性的.以此判断, Ti-Al 系金属间化合物基本上是本征脆性的,而 Fe-Al 系金属间化合物则可能是本征韧性的.根据 CuAu 和 Ni_3Al 为本征韧性的,也可推测其 α 值离 0.08 不远或更大.

以上讨论表明,所提出的均匀变形因子 α 与材料的宏观力学性能延伸率 δ 有很好的对应关系.说明 α 能真实有效地反映金属及合金的价电子结构对变形的本质影响.这样通过 α 值的理论计算,不仅能预测材料塑性的大小,还可分析各种因素影响塑性变形的内在机制,从而提出改善的措施.

4 价电子结构与力学性能的关系

4.1 力学性能分析

Pauling^[11]曾在其经典著作《化学键的本质》中指出:物质的性质一部分决定于该物质所含原子之间的键型,另部分决定于原子的排列和键的分布.原子排列本身在很大程度上又取决于键的性质.材料表现出来的各种力学性能,如强度、弹性、塑性,正是由于其内部原子化学键这三方面性质单独或共同起作用的结果.根据 EET 分析得到的价电子结构及进一步分析得到的均匀分布因子 α ,已基本给出了这三方面的全部信息,再根据决定不同力学性能指标的微观机制,就可能建立起二者的本征关系.

1) 塑性

晶体塑性主要取决于原子的排列和键的分布,一般而言,晶体结构与键分布越均匀,滑移系越多,变形越均匀,塑性也就越大.因此, α 与表征塑性的延伸率 δ 必然存在着好的定量关系.经过分析计算,发现对于 Ti-Al 系金属间化合物存在如下经验公式:

$$\delta = \delta_0 \alpha^2, \quad (2)$$

式中 δ_0 为拟合数据的可调经验常量,对于 Ti-Al 系, $\delta_0 = 16.581$.

2) 弹性

弹性主要取决于原子本性和原子间键合强度,对材料成分及显微组织不敏感,因此弹性模量 E 与价电子结构的键强度必然存在主要且单调的关系. EET 主要以共价键上的电子对数来表征键强,因此材料的弹性将主要取决于价电子结构的共价键强度.对于 Ti-Al 系,存在如下经验公式:

$$E = E_0 \prod_{i=1}^2 n_i, \quad (3)$$

式中 n_i 为第 i 共价键上的电子对数,一般仅取价电子结构中不可忽略的键中的最强键与次强键. E_0 为经验常量,对于 Ti-Al 系, $E_0 = 2.0291 \times 10^3$ GPa.

3) 强度

受力晶体从变形到断裂一般皆有弹性和塑性两个变形过程.因此强度对于过程或结构极其敏感,即使抛开冶金及缺陷等其他因素,单纯从完整晶体原子间力来讨论,也相当复杂.对于屈服强度 σ_s 而言,由于塑性变形小,没有颈缩发生,因此可理想地认为 σ_s 由完全的弹塑性基本过程决定.而由前面分析知,弹性主要决定于最大原子间力,塑性主要决定于变形的均匀程度,即价电子结构的 α .经过分析计算,发现对于 Ti-Al 系金属间化合物存在如下经验关系式:

$$\sigma_s = \sigma_0 n_A^{1/2} \alpha, \quad (4)$$

式中 σ_0 为经验常量.对于 Ti-Al 系, $\sigma_0 = 2.267 \times 10^4$ MPa.

4.2 计算结果及讨论

根据价电子结构参数,由(1)–(4)式分别计算了 Ti-Al 系金属间化合物的 δ , E , σ_s 值,并把计算推广到纯金属 α -Ti 和 Al 上,所得结果列于表 3.图 2 给出 Ti-Al 系随成分(晶体结构)变化的力学性能实验曲线^[1–3,12],以及含表 3 数据的理论计算值.

表 3 Ti-Al 系各相的力学性能计算值

相	α -Ti	Ti ₃ Al	TiAl	TiAl ₃	Al
δ	0.403	0.046	0.037	0.012	0.403
$E/10^4$ Mpa	10.3	12.6	12.3	21.2	8.82
σ_s /MPa	1734	610.4	497.0	351.6	1616

由图 2 可见,由(2)式计算出的 δ 值与实验曲线完全符合,说明所提出的 δ 计算公式真实有效.由(3)式计算出的弹性模量 E 与实验曲线基本一致,表明由价电子结构的最强与次强键上的共价电子对数是能够定量表征 Ti-Al 系金属间化合物弹性大小的.由(4)式

计算出的 σ_s 值与实验曲线也大致相符, 但由表 3 数据可见, 将公式推广到纯金属上所得结果皆太高, 表明即使仅就单晶原子间作用力来分析, 所得 σ_s 的定量关系也难以全面反映实际情况. 因此, 对于结构极敏感的性能指标, 不考虑材料的实际结构, 特别如显微组织、位错等更大结构的具体行为, 所建立起的价电子结构与力学性能的关系过于简单. 由此也可得出结论, 在处理材料的力学性质特别如金属间化合物的脆性, 必须分不同层次来

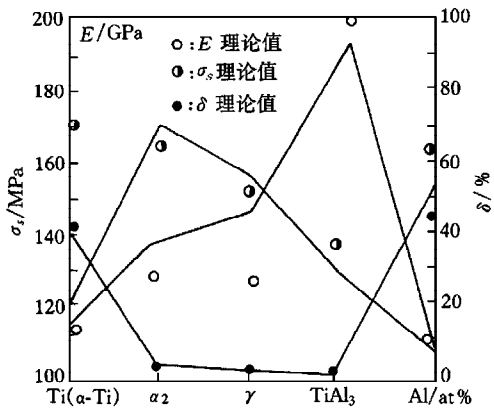


图 2 实验和计算的力学性能曲线

研究, 以达到标本兼治的目的.

第一层次: 电子结构. 通过表征力学性质的价电子结构参数(如 α)推断其本质性质.

第二层次: 晶体结构. 在前者基础上, 分析晶体结构中的滑移系、解理面, 特别是位错结构及行为等, 以获得宏观力学行为的内在机制.

第三层次: 组织结构. 在前两者基础上, 通过对晶界、相界、表面及显微组织等较大结构的具体分析, 得到实用高效的组织结构与性能及处理工艺的关系.

在合金的改性或设计时, 只有从电子理论、凝聚态物理、材料科学及连续介质力学等学科全面地认识由低到高各个层次, 针对不同层次提出具体措施, 才能最终解决实际问题. 如通过 α 值计算, TiAl_3 完全是本征脆性, 属第一层次问题. 通过热处理等工艺手段改善或设计第三层次的结构, 是不可能改变其脆性本质的. FeAl 的 α 值较高, 是本征韧性的, 因此通过其他技术手段或防范措施, 是可能改变其室温脆性的.

- [1] Zhong Zeng-yong, Han Ya-fang, *J. Iron Steel Res.*, **9**(1997), 1(in Chinese).
- [2] R. A. Varin, M. B. Winnicka, *Mater. Sci. Eng.*, **A137**(1991), 93.
- [3] M. H. Yoo *et al.*, *Acta Metall. Mater.*, **41**(1993), 987.
- [4] M. E. Eberhart *et al.*, *Phil. Mag.*, **A68**(1993), 455.
- [5] B. F. Greenberg *et al.*, *Scr. Metall.*, **22**(1988), 859.
- [6] M. Morinaga *et al.*, *Acta Metall. Mater.*, **38**(1990), 25.
- [7] Zhang Rui-lin, *The Empirical Electron Theory of Solids and Molecules* (Jilin Science and Technology Press, Changchun, 1993) (in Chinese).
- [8] Liu Zhi-lin, *The Valence Electron Structure and Composition Design of Alloys* (Jilin Science and Technology Press, Changchun, 1990)(in Chinese).
- [9] Li Wen, Dissertation, Jilin University, 1995 (in Chinese).
- [10] C. A. Carlson, *Valence* (2nd edition), Translated into Chinese by She Jing-zeng (Science Press, Beijing, 1986) (in Chinese).
- [11] L. Pauling, *The Nature of the Chemical Bond*, 3rd edition (Cornel University Press, New York, 1960).
- [12] Lin Dong-liang, *Mater. Mech. Eng.*, **18**(1994), 8(in Chinese).

ELECTRON THEORY OF MECHANICAL PROPERTIES OF INTERMETALLICS IN Ti-AL ALLOY SYSTEM *

LI WEN CHEN DAI-MIN GUAN ZHEN-ZHONG

(*Changchun Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica, Changchun 130022*)

ZHANG RUI-LIN

(*Department of Materials Science, Jilin University, Changchun 130023*)

(Received 29 September 1997; revised manuscript received 30 March 1998)

ABSTRACT

The mechanical properties of intermetallics in Ti-Al alloy system are studied systematically from the view point of valence electron by the empirical electron theory (EET). First, according to the basic thinking of the EET, space topology of valence electron structure is modelled, and the embrittlement nature of intermetallics in Ti-Al system is concisely brought to light. Second, the valence electron structure symmetry factor α , which has a good relationship to the plasticity is proposed from the model, and the embrittlement criterion is summed up. Finally, the empirical relation between valence electron structures and mechanical properties can be established.

PACC: 7870B; 7300; 6170; 8140

* Project supported by the Natural Science Foundation of Jilin Province (Grant No. 963405), China.