

# 基于层错能理论的室温高塑性镁合金设计

冯中学<sup>1</sup>, 赵 珊<sup>1</sup>, 史庆南<sup>1</sup>, 易健宏<sup>1</sup>, 谭 军<sup>2</sup>

(1. 昆明理工大学 材料科学与工程学院, 云南 昆明 650093)

(2. 重庆大学 材料科学与工程学院, 重庆 402560)

**摘 要:** 针对大多数镁合金室温塑性差的关键共性问题, 本研究通过镁合金位错特性、层错能对变形机制的影响以及层错能与滑移系临界剪切应力之间的关系等 3 个方面综述了利用层错能改善镁合金室温塑性的理论与实验依据, 在此基础上构建了“层错能-镁合金滑移系临界剪切应力”计算模型, 并利用此模型计算了纯镁、Mg-Al、Mg-Zn、Mg-Y 合金基面、柱面、锥面位错启动所需临界剪切应力。通过比较 Mg 合金、纯镁的非基面与基面滑移的临界分切应力差值, 分析了 Al、Zn、Y 3 种固溶元素对镁合金塑性的影响, 验证了模型的可靠性。最终确定以降低非基面位错 (主要是  $\langle c+a \rangle$  位错) 滑移分切应力为导向, 选择出合适的合金元素, 指导室温高塑性镁合金的成分设计。

**关键词:** 镁合金; 层错能; 滑移系临界分切应力;  $\langle c+a \rangle$  位错; 力学性能

中图分类号: TG146.22

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2022)01-0134-09

镁是迄今为止最轻的结构材料, 镁合金的密度约为铝的 2/3, 铁的 1/4; 同时还具有优异的功能特性而充当功能材料, 比如可作为储能的储氢材料、镁电池和可充电镁离子电池, 还可以作为可降解生物医用材料、高热传导材料、高阻尼材料等。因此结构功能一体化的镁合金得到了材料科学家和企业家们的高度重视<sup>[1-8]</sup>。由于镁合金塑性变形过程中能够启动的滑移系数量有限, 从而导致其室温变形塑性和成形性较差, 这已成为镁合金广泛应用和发展的主要障碍<sup>[4]</sup>。镁合金潜在的锥面滑移系  $\langle c+a \rangle$  位错能够在不启动基面和棱柱面滑移系情况下完美满足 Von-Mises 准则 (即多晶体材料的均匀塑性变形至少需要 5 个独立的滑移系), 而被认为是提升镁合金室温塑性的关键<sup>[5-8]</sup>。目前, 降低层错能是室温下启动锥面滑移系最有效的途径之一, 它不仅能够提升  $\langle c+a \rangle$  位错的滑移和分解能力, 还能够降低基面位错交滑移能力, 促使非基面滑移系的启动<sup>[6]</sup>。研究表明, 可以通过添加微量合金元素如 Y<sup>[9]</sup>、Nd<sup>[10]</sup>, 和多合金元素 Y+Nd<sup>[11]</sup>、Y+Ca<sup>[12]</sup> 等来改善 Mg 合金的组织 and 力学性能, 其增韧机理与镁合金的滑移机制密不可分。因此, 选择理想的合金元素降低镁合金层错能就变得尤为重要。人们需要一种无须大量的精密计算, 只需利用简单的元素信息就能够筛选出适合的合金元素的方法<sup>[13]</sup>。遵循这个想法, 以层错能为基础, 鉴于滑移面临界剪切应力能直观反映滑

移系启动情况, 本研究找到了层错能与滑移系临界剪切应力的关系, 提出了“层错能-镁合金滑移系临界剪切应力”的简单计算模型, 以降低基面与非基面滑移系临界剪切应力差值为导向, 为提升镁合金塑性而筛选出理想的合金元素提供参考。

## 1 镁合金位错特征

迄今为止, 室温条件下镁合金轧制变形困难且容易开裂, 镁合金薄板的生产还仅限于高温轧制。典型的镁合金薄板表现出强的基面织构, 其晶粒取向平行于薄板平面的基面<sup>[14]</sup>。镁合金中  $\langle a \rangle$  与  $\langle c+a \rangle$  位错是最常见的 2 种全位错<sup>[8]</sup>,  $\langle a \rangle$  位错伯氏矢量为  $a/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$ ,  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$  方向为基面(0001)的原子密排方向, 由于基面层错能较低, 因此  $\langle a \rangle$  位错容易分解成 2 个不全位错, 即肖克莱 (Schockley) 不全位错。根据密排六方 (hcp) 晶体中位错伯氏矢量双锥体 (图 1) 所示, 其反应式可表示为:

$$\overline{AB}(\sigma) \rightarrow \overline{A\sigma} + \overline{\sigma B} \quad (1)$$

$$a/3\langle 11\bar{2}0 \rangle = a/3\langle 10\bar{1}0 \rangle + a/3\langle 01\bar{1}0 \rangle \quad (2)$$

一般而言, 在 2 个 Schockley 分位错之间还夹着一片层错区, 这 2 条 Schockley 分位错与中间的层错, 形成了典型的扩展位错。根据扩展位错移动特点, 除非是遇到障碍物, 2 个 Schockley 不全位错之间都间隔着固定

收稿日期: 2021-01-07

基金项目: 云南省科技厅面上项目 (202001AT070041); 国家自然科学基金地区科学基金 (51861016)

作者简介: 冯中学, 男, 1986 年生, 博士, 副教授, 昆明理工大学材料科学与工程学院, 云南 昆明 650093, 电话: 0871-65916002, E-mail: fzxue2003@163.com

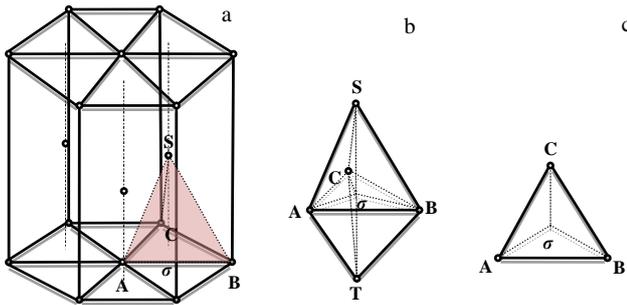


图 1 hcp 晶体中位错的伯氏矢量双锥体示意图

Fig.1 Schematic diagrams of Burgers vector bipyramid of the dislocation in hcp crystal: (a) structure of bipyramid in hcp crystal; (b) structure of bipyramid; (c) projection of each vector of bipyramid in  $\Delta ABC$

的距离  $d$ :

$$d = \frac{G\vec{b}_1 \cdot \vec{b}_2}{2\pi\gamma} \quad (3)$$

式中,  $G$  为剪切模量,  $\vec{b}_1$ 、 $\vec{b}_2$  为柏氏矢量,  $\gamma$  为层错能,  $d$  为扩展位错间的距离。在镁合金中, 随着加工温度升高, 层错能  $\gamma$  值降低<sup>[15,16]</sup>, 根据式 (3) 可知, 层错能降低, 扩展位错间的距离  $d$  增加。由于位错的束集需要外力做功, 扩展位错越宽, 所需外力做功越大, 因此镁合

金中随着温度的升高, 2 个分位错之间发生束集的能力减弱。根据不全位错的滑移特点, 不全位错只能在基面滑移, 而不能攀移或者交滑移, 因此, 当镁合金随着加工温度升高时,  $\langle a \rangle$  基面位错的交滑移能力减弱, 基面容纳位错的密度增加, 致使位错产生的弹性应变能增加, 从而驱使柱面或锥面的滑移系参与变形。但是, 由于室温条件下镁合金中基面  $\langle a \rangle$  只有 2 个独立的滑移系, 不能满足 Von-Mises 准则, 从而导致镁合金塑性较差, 并且由于基面位错不能容纳  $c$  轴的变形, 而交滑移又难以产生, 在变形过程中容易造成变形失稳。而  $\langle c+a \rangle$  位错能够容纳  $c$  轴方向的变形, 这对于协调多晶体相邻晶粒之间的变形就显得尤为重要<sup>[8]</sup>。

$\langle c+a \rangle$  位错拥有 5 个独立的滑移系, 与面心立方金属  $\{111\}\langle 110 \rangle$  及体心立方金属  $\{110\}\langle 111 \rangle$  滑移系相似, 能够完全满足 Von-Mises 准则, 能够很好地协调沿  $c$  轴的变形。但是, 与 Shockley 不全位错相比,  $\langle c+a \rangle$  位错伯氏矢量大, 滑移所需外力做功较大, 因此, 与  $\langle a \rangle$  基面位错相比, 镁合金中  $\langle c+a \rangle$  位错不容易发生滑移。此外, 由于锥面层错能较高,  $\langle c+a \rangle$  位错难以分解为不全位错而降低其伯氏矢量, 进一步削弱了其参与塑性变形的能力。并且, 由于  $\langle c+a \rangle$  位错难以移动, 且其能量高, 处于不稳定状态, 它容易转变为不动位错芯结构, 致使其不能容纳塑性应变<sup>[8]</sup>, 如图 2 所示, 图中红色曲线为  $\langle c+a \rangle$  位错。

Nogaret 等人<sup>[17]</sup>利用分子动力学对镁中  $\langle c+a \rangle$  位错

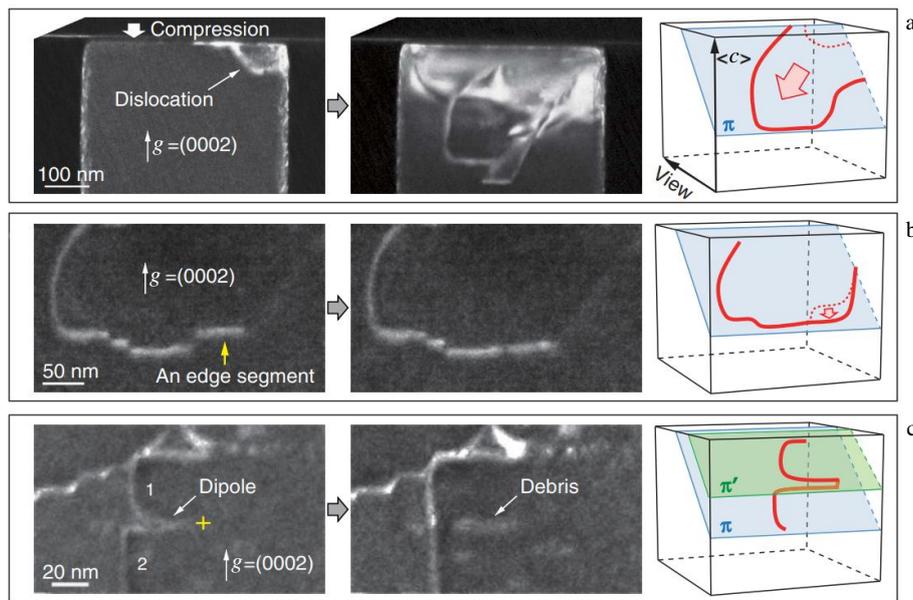


图 2 原位观察镁合金在压缩过程中  $\langle c+a \rangle$  位错的演变行为

Fig.2 In situ observation of the evolution behavior of  $\langle c+a \rangle$  dislocation in magnesium alloy during compression<sup>[8]</sup>: (a)  $\langle c+a \rangle$  dislocation initiation; (b) movement of  $\langle c+a \rangle$  dislocation lines; (c) structural transformation of  $\langle c+a \rangle$  dislocation

芯构型进行了模拟,也证实了以上说法,认为 $\langle c+a \rangle$ 位错能够在不动位错芯和可动位错芯 2 种结构中相互转化。但是,目前关于镁合金中 $\langle c+a \rangle$ 位错起源及其分解机制仍然知之甚少<sup>[18]</sup>,关于 $\langle c+a \rangle$ 位错结构转变并未有统一的结论,Ding 等人<sup>[19]</sup>经过模拟并未发现 $\langle c+a \rangle$ 位错由可动位错结构向不动位错结构转变行为。因此, $\langle c+a \rangle$ 位错是否发生结构转变还需要深入的研究。最近实验证明,合金稀土元素可以通过激活镁合金中 $\langle c+a \rangle$ 位错滑移系显著提升镁合金的室温塑性,Sandlöbes 等人<sup>[5,6,20-22]</sup>在 Mg-Y 合金中观察到大量 $\langle c+a \rangle$ 位错和  $I_1$  堆垛层错,认为稀土元素 Y 有助于 $\langle c+a \rangle$ 位错形核,并认为  $I_1$  堆垛层错是 $\langle c+a \rangle$ 位错的起源。Agnew 等人<sup>[23,24]</sup>也发现 Y 元素添加有助于非基面滑移系的启动,此外,Y 元素的添加还有助于削弱镁合金的基面织构,提升镁合金的室温塑性。但值得注意的是,Agnew 等人也论证了该位错与  $I_1$  层错之间的关系,并采用层错形成理论对 $\langle c+a \rangle$ 位错芯结构的形成过程进行了解释,并认为降低  $I_1$  层错能够促使 $\langle c+a \rangle$ 全位错在 $\{11\bar{2}2\}$ 平面上分解为 2 个  $1/2 \langle c+a \rangle$ 分位错,这有助于改善镁合金的室温塑性。

## 2 层错能对变形机制的影响

Mg 合金中有 2 种基面层错  $I_1$  和  $I_2$ 、1 个外延性层错  $E$  和 1 个类孪生结构  $T_2$ 。其中,基面层错  $I_1$  和  $I_2$  是镁中周期有序结构 LPSO 相的基本组成。由于 Mg 的完美晶格的排列方式呈...ABABAB...,如果移动 B 原子层上面的一层原子,使 B 层上面的其他原子层剪切滑移  $1/3[10\bar{1}0]$ 位移就会形成  $I_1$  层错;而把层数相同的 hcp 结构沿相邻的滑移面直接滑移  $1/3[10\bar{1}0]$ 位移就会形成  $I_2$  层错; $E$  层错是在 hcp 堆垛序列中插入一层 C 原子层,形成...ABABCABAB...的序列; $T_2$  层错是关于层错面呈镜面对称的结构,其原子层的堆垛序列为...ABABCABAB...<sup>[25]</sup>。由于  $I_1$  层错与 $\langle c+a \rangle$ 位错有着密切的关系,故目前大多数研究从  $I_1$  层错出发,从而降低层错能。

层错能对变形机制的影响主要体现在以下两方面:一方面,降低层错能不仅降低了位错的形成和移动所需能量,还增加了扩展位错之间的宽度,如式(3)所示,使位错在滑移平面内难以发生束集,位错的攀移或交滑移能力下降,提升了基体的位错密度,从而驱使其他滑移系参与变形。另一方面,降低层错能可降低孪晶的形核和长大所需能量,提升孪晶形核密度和容纳塑性变形的能力,增强孪晶与位错的相互作用,缩短不全位错线滑移长度,提升位错在滑移平面的移动能力,并为位错的增殖提供条件。Meyers 等人<sup>[26]</sup>采用实验测试与理论相

结合的方法,推算出孪晶临界剪切应力 $\sigma_T$ 与层错能 $\gamma$ 和元素偏聚之间的关系,其计算公式如下:

$$\sigma_T = K_2 \left( \frac{\gamma}{Gb} \right)^{1/2} \exp \left( K_1^{1/2} \frac{C}{C + C_{\max}} \right) \quad (4)$$

式中, $G$ 为剪切模量, $b$ 为柏氏矢量的模, $K_1$ , $K_2$ 为经验常数,可以通过实验测试出来, $C_{\max}$ 为溶质元素偏聚的浓度, $C$ 为溶质元素浓度。从式中可以看出,孪晶的临界剪切应力与层错能值的  $1/2$  次方呈正比关系,即层错能越低,孪晶的临界剪切应力越小。

Sandlöbes 等人<sup>[6,7,20,24]</sup>认为,通过向 Mg 中添加 Y 和 RE 元素能够显著降低  $I_1$  固有堆垛层错能,而层错能的降低不仅能够增强锥面 $\langle c+a \rangle$ 位错的移动能力,还有利于 $\langle c+a \rangle$ 位错的形核,最终显著提升镁合金的强度和塑性。此外,降低固有堆垛层错能还能够降低基面位错的交滑移能力,促进非基面位错的滑移,并参与协调变形。不仅如此,Xu 等人<sup>[27]</sup>研究发现,在 Mg-Zn-Y-Zr 系合金中,当层错能降低时,由于溶质元素容易偏聚于层错周围,从而形成长周期有序相(LPSO),并可根据元素在层错偏聚的特性,添加原子直径较大且与基体晶体结构相似的 Zr 元素,提升局部层错能,减小长周期有序相的尺寸,如图 3 所示。因此,调控镁合金中层错能的大小,不仅可以改善镁合金的塑性,还能够调控镁合金中第二相的尺寸。

Suzuki<sup>[28]</sup>在研究 Mg-Zn-Y 系合金时认为,Y 和 Zn 都以固溶的形式存在,基面层错能的降低提高了镁合金的抗蠕变性能。Xu 等人<sup>[27]</sup>也在分析中发现,Y 和 Zn 元素的添加能够降低镁合金的层错能,层错能降低能够增加层错和 $\langle c+a \rangle$ 位错的密度,并能够促使长周期有序相在层错中形成,从而提升 Mg-Zn-Y 系合金的强度和塑性。

此外,降低层错能也对面心立方、体心立方等其他晶体结构金属的变形机制产生影响。比如中科院金属研究所的研究者<sup>[29-31]</sup>利用添加合金元素的方式有目的地降低铜合金的层错能,在研究中也发现降低铜合金的层错能,不仅能够很大程度上提高铜合金加工硬化能力与延伸率,还能够有效提高铜合金的疲劳寿命,这为提升传统金属材料的强度和塑性提供了新的途径。Kim 等人<sup>[32]</sup>研究了层错能对 Fe-Mn-C-Al 孪生诱导塑性(TWIP)钢的变形机制的影响规律,结果证实层错能是影响 TWIP 钢强度和延性的关键参数,极限抗拉强度(UTS)与层错能成线性关系,UTS 随着层错能的减小而增加。不仅如此,Zhang 等人<sup>[33-36]</sup>在研究单相面心立方结构(fcc)CrCoNi 系高熵合金时发现,低层错能可促使全位错分解为 Shockley 分位错,并提升不全位错的移动能力;低层错能不仅降低了孪晶形成所需的临界剪切应力(CRSS),还使不全位错不容易发生束集,

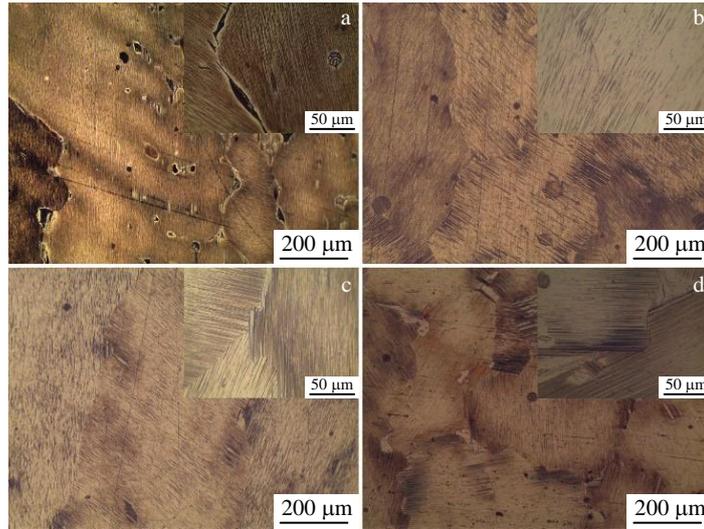


图 3 随 Zr 含量(at%)的增加 LPSO 相的显微组织演变

Fig.3 Microstructure evolution of LPSO phase with increasing Zr content<sup>[27]</sup>: (a) 0 at%, (b) 0.1 at%, (c) 0.2 at%, and (d) 0.3 at%

同时，也为孪晶的形核提供条件，最终获得综合力学性能优异的中熵合金。文章还认为，较低的层错能不仅有利于位错滑移与孪生的协调变形，还能够在保证应变强化的同时，阻碍材料发生颈缩，从而获得高强度、高塑性和高冲击韧性的金属材料。Qian 等人<sup>[37]</sup>分析了层错能对体心立方金属 W 延展性的影响，研究认为，当添加 Mo、Re、Os 等降低 W 层错能的元素时，能够提升 W 的延展性，而添加 Ti、Ta、V 等增加 W 层错能的元素时，高的层错能还会引起 W 的本征脆性。

由于层错能是材料的本征特性，只有改变原子之间的结合能力才能从根本上改变合金的层错能，所以改变镁合金层错能主要采用添加合金元素的方法。目前，改变层错能的类型主要是改变  $I_1$ ，因为  $I_1$  不仅决定了本征层错的产生，还是决定镁合金锥面  $\langle c+a \rangle$  位错的形核和滑动的关键因素，改善  $I_1$  层错不仅能够促使 hcp 结构向 fcc 结构转变，还能够增强镁合金变形稳定性，提升镁合金的强度和塑性<sup>[20]</sup>。而为了寻找到合适的合金元素以降低镁合金的层错能，学者们也做了大量的研究。重庆大学的豆雨辰<sup>[38]</sup>系统地计算了合金元素对镁合金层错能的影响，计算结果显示，合金元素 Al、Bi、Ca、Dy、Er、Ga、Gd、Ho、In、Lu、Nd、Pb、Sm、Sn、Y、Yb 可降低  $I_1$  层错能，有利于提高  $I_1$  型层错的密度，增加锥面  $\langle c+a \rangle$  位错形核点，进而增加镁合金的强度和塑性。但是，第一性原理多用来计算二元镁合金，在计算三元、多元合金体系时，表现出了局限性，这主要受限于镁合金中势函数的缺乏以及较低的计算效率这一现状。

冯中学等人<sup>[15,16]</sup>通过分析  $I_1$ 、 $I_2$ 、非固有层错 ( $E$ )、 $T_2$  原子堆垛所固有的特性，建立了镁合金多元合金体系中

合金元素对层错能影响的数学模型，如式 (5) 所示：

$$\gamma = \frac{1}{N_0^{1/3} V^{2/3}} \left( \sum_i^n X_i \Delta G_i^{\alpha \rightarrow \beta} + \frac{1}{2} \sum_i^n \sum_j^n \Delta W_{ij}^{\alpha \rightarrow \beta} X_i X_j \right) \quad (5)$$

式中， $N_0$  为阿伏伽德罗常数， $V$  为合金的摩尔体积。下标 “ $i$ ”、“ $j$ ” 为不同合金元素代号， $\Delta G_i^{\alpha \rightarrow \beta}$  为合金元素 “ $i$ ” 发生结构转变时吉布斯自由能变化， $X_i$  和  $X_j$  分别为 “ $i$ ” 和 “ $j$ ” 合金元素的摩尔体积， $\Delta W_{ij}^{\alpha \rightarrow \beta}$  为在结构转变过程中 “ $i$ ” 和 “ $j$ ” 合金元素之间的相互作用系数 ( $i \neq j$ )。

该理论模型无须过于大量的精密计算，只需利用简单的元素信息就能够筛选出合适的合金元素从而降低镁合金层错能，并且还能够估算出温度对合金层错能的影响趋势。

### 3 层错能与镁合金滑移系临界剪切应力的关系

重庆大学潘复生团队<sup>[39]</sup>提出了“固溶强化合金增塑”的合金设计思想，即元素固溶后可增大或者减小镁基面或非基面的滑移阻力。当选用的合金元素可以使基面的滑移阻力增加，且元素固溶后基面与非基面滑移阻力差值  $\Delta\tau$  小于纯镁的基面与非基面滑移阻力差值  $\Delta\tau$  时，便可阻碍基面滑移，使非基面滑移更容易开启，在提高强度的同时又增加了塑性。而层错能与各滑移系的阻力有着密切关系。为了更好地说明同一温度下层错能与镁合金塑性成形的关系，潘复生团队对 Moitra 等<sup>[40]</sup>提出的塑性成形参数进行了修正，定义了基面与柱面滑移开动相关参数为  $X_1$ ，基面与锥面滑移开动相关参数为

$X_2$ , 则层错能对基面与非基面滑移系开动的影响如下式:

$$X_1 = \frac{(\gamma_{sf}^B/\gamma_{usf}^B)_X}{(\gamma_{sf}^B/\gamma_{usf}^B)_{Mg}} \bigg/ \frac{(\gamma_{sf}^M)_X}{(\gamma_{sf}^M)_{Mg}} \quad (6)$$

$$X_2 = \frac{(\gamma_{sf}^B/\gamma_{usf}^B)_X}{(\gamma_{sf}^B/\gamma_{usf}^B)_{Mg}} \bigg/ \frac{(\gamma_{sf}^{Pyr}/\gamma_{usf}^{Pyr})_X}{(\gamma_{sf}^B/\gamma_{usf}^{Pyr})_{Mg}} \quad (7)$$

式中,  $\gamma_{sf}^B$  为基面{0001}<10 $\bar{1}$ 0>滑移系的稳定层错能,  $\gamma_{usf}^B$  为基面滑移系的不稳定层错能,  $\gamma_{sf}^M$  为柱面滑移系稳定层错能和非稳定层错能的替代值,  $\gamma_{sf}^{Pyr}$  为锥面上的稳定层错能,  $\gamma_{usf}^{Pyr}$  为锥面上的不稳定层错能, 角标 Mg 为纯 Mg, 角标 X 为 Mg-X 合金。纯镁的  $X_1$  和  $X_2$  值等于 1。  $X_1$  和  $X_2$  值大于 1 时, 表示层错能与滑移系开动相关性较大, 塑性更好。

由式(6)和式(7)可知, Mg-Al 合金随着 Al 含量的增加,  $X_1$  和  $X_2$  值基本均小于 1 且略有下降, 层错能对柱面和锥面的滑移系开动影响比较小。而 Mg-Zn 和 Mg-Y 合金的  $X_1$  和  $X_2$  值基本均大于 1, 说明随着固溶原子含量的增加, 层错能对这 2 个合金的非基面滑移系的开动影响比较大。  $X_2$  值随着固溶原子含量的增加略有上升, 说明层错能对 Mg-Zn 合金中锥面滑移系开动略有影响。  $X_2$  值随着 Y 固溶原子含量的增加上升效果比较明显, 说明层错能变化显著影响 Mg-Y 合金锥面滑移系的开动<sup>[39]</sup>。这 3 种合金元素对非基面滑移系开动的影响顺序为: Y>Zn>Al。

Yasi 等<sup>[41]</sup>采用第一性原理计算给出 Mg 固溶强化的预测模型, 对 Fleischer 模型进行修正, 得出所有溶质的螺型位错与刃型位错对强度贡献的计算公式:

$$\Delta\tau_{CRSS(0001)} = \left[ 0.30(F_{max}^{screw})^{3/2} + 0.22(F_{max}^{edge})^{3/2} \right] c_s^{1/2} \quad (8)$$

式中,  $\Delta\tau$  为基面滑移剪切应力,  $F_{max}^{screw}$  为螺位错的最大相互作用力,  $F_{max}^{edge}$  为刃位错的最大相互作用力,  $c_s$  为溶质浓度。

由于溶质元素的引入会导致尺寸失配和化学失配, 结合这两方面的因素, 其对强度的贡献可近似为一个函数式:

$$\Delta\tau_{CRSS(0001)} \approx 38.9 \left\{ \left( \frac{\epsilon_b}{0.176} \right)^2 + \left( \frac{\epsilon_{SFE}}{5.76} \right)^2 - \frac{\epsilon_b \epsilon_{SFE}}{2.98} \right\} c_s^{1/2} \quad (9)$$

式中,  $\epsilon_b$  为晶格畸变,  $\epsilon_{SFE}$  为层错能。根据计算, Al 固溶所引起的增强效力  $\Delta\tau_{CRSS}/\sqrt{c_s} = 19.8 \text{ MPa}$ 。

对于镁合金滑移面临界剪切应力的计算, 由于固溶原子的引入会导致尺寸失配和化学失配, 尺寸失配与固溶原子加入所引起的晶格畸变有关, 如溶质原子的加入产生的柯氏气团对位错的钉扎作用可看作是尺寸失配的

结果。化学失配与固溶原子加入所引起的原子滑移有关。因此, Mg 合金中滑移面临界剪切应力的计算需考虑这两方面的因素。

#### 4 “层错能-镁合金滑移系临界剪切应力”计算模型的构建

目前, 大多数学者采用第一性原理密度泛函理论 (density functional theory, DFT)、嵌入原子法 (embedded atom method, EAM) 等判定 Mg 合金滑移面 (基面、柱面、锥面) 的位错形核能力和位错的滑移能力, 构建原子模型计算层错能, 模拟计算层错能与滑移系临界剪切应力的函数关系式, 从而预判 Mg 合金变形的难易程度。然而, 这种模拟计算随着所构建模型的原子数量不同, 施加 X、Y、Z 弛豫方向的不同、真空度的不同, 计算结果具有较大的差异, 且误差比较大, 计算方法也比较复杂。

因此, 本研究通过构建简单的“层错能-镁合金滑移系临界剪切应力”计算模型, 得到层错能与滑移面剪切应力的函数关系式; 通过滑移面临界剪切应力的大小直接判定滑移面开动的难易程度, 进而得到溶质固溶强化的增强效力。这对 Mg 合金甚至六方系金属的变形塑性的研究有一定的意义。

对于纯镁, 尺寸失配所需的剪切应力的计算如式(10)所示:

$$\tau_p = \frac{2G}{1-\nu} \exp\left( -\frac{2\pi a}{(1+\nu) \cdot b} \right) \quad (10)$$

式中,  $a$  为滑移面间距,  $b$  为滑移方向上的原子间距,  $\nu$  为材料的泊松比,  $G$  为材料的剪切模量。

化学失配与滑移面剪切应力关系不像尺寸失配一样具有直接关系。稳定层错能越低, 扩展位错的宽度越宽, 扩展位错越不容易束集, 位错的交滑移难以发生。而非稳定层错能  $\gamma_{usf}$  与位错开启的难易程度密切相关。因此本研究根据学者们采用第一性原理计算的 Mg 合金中原子滑移所引起的非稳定层错能的改变, 推导出了层错能与滑移面剪切应力的函数关系式, 如式(11)所示, 从而间接得到化学失配所需的滑移面剪切应力。

$$E = \sigma\epsilon = \tau_p s = \gamma_{usf} \quad (11)$$

式中,  $\sigma$  为应力,  $\epsilon$  为应变,  $\tau_p$  为与层错能有关的滑移面临界剪切应力,  $s$  为单位位错的滑移距离,  $\gamma_{usf}$  为非稳定层错能。对于密排六方晶体,  $\langle a \rangle$  位错的滑移距离为  $a/3\langle 11\bar{2}0 \rangle$ ;  $\langle c \rangle$  位错的滑移距离为  $c\langle 0001 \rangle$ ;  $\langle c+a \rangle$  位错的滑移距离为  $\sqrt{a^2+c^2}\langle 11\bar{2}3 \rangle$ 。

根据式(11), 临界剪切应力的表达式为:

$$\tau_p = \frac{\gamma_{usf}}{s} \quad (12)$$

根据式 (10) 和式 (12), Mg 合金中固溶原子引起的总的滑移面剪切应力为:

$$\tau = \tau_p + \tau_\gamma \quad (13)$$

在镁合金晶格中, 滑移面分为基面、柱面和锥面。基面滑移是  $\langle a \rangle$  位错滑移, 柱面滑移包括  $\langle a \rangle$  位错滑移和  $\langle c \rangle$  位错滑移, 锥面滑移包括  $\langle a \rangle$  位错滑移和  $\langle c+a \rangle$  位错滑移。众多学者对 Mg 合金中常见的  $\langle a \rangle$  位错滑移和  $\langle c+a \rangle$  位错滑移的层错能进行了计算。常见的原子排列更加紧密的滑移方向为  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$  晶向, 包括该方向的滑移面主要是  $\{0001\}$  基面、 $\{10\bar{1}0\}$  棱柱面和  $\{10\bar{1}1\}$  锥面。此外, 潜在的滑移方向还有  $\langle 11\bar{2}3 \rangle$  晶向, 包括该方向的滑移面主要是锥面。

表 1 为纯镁、Mg-Al 合金、Mg-Zn 合金、Mg-Y 合金常见滑移系的非稳定层错能  $\gamma_{\text{usf}}$ 。根据表 1, 计算了纯

Mg 及 Al、Zn、Y 等元素加入 Mg 中产生非稳定层错能时各滑移系开动所需的临界分切应力  $\tau_\gamma$ , 如表 2 所示。

再由表 2 进一步计算了纯镁中各滑移系开动所需的临界分切应力  $\tau_p$  和固溶强化 Mg 合金的各滑移系总的临界分切应力  $\tau_t$ , 计算结果如表 3 所示。其中, 柱面  $\{10\bar{1}0\}$  和锥面  $\{10\bar{1}1\}$  具有附加面, 计算所得的临界剪切应力值有 2 个。根据表 3, 计算了纯镁及 Mg-Al、Mg-Zn、Mg-Y 合金的非基面与基面的各滑移系临界分切应力差值, 计算结果如表 4 所示。

由表 2 可知, 非稳定层错能对  $\{11\bar{2}2\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$  锥面滑移系启动影响不大。由表 3 可知, 纯镁及 Mg-Al、Mg-Zn 合金中各滑移系开动情况由易到难依次为: 基面  $\langle$  柱面  $\langle$  锥面, 而 Mg-Y 合金的基面比部分柱面滑移的临界分切应力值大, 说明添加 Y 元素能有效抑制基面滑移, 大大

表 1 纯 Mg 及 Mg 合金常见滑移系的非稳定层错能  $\gamma_{\text{usf}}$

Table 1 Unstable stacking fault energies  $\gamma_{\text{usf}}$  of common slip systems in pure Mg and Mg alloys (J/m<sup>2</sup>)<sup>[42,43]</sup>

Slip system	$\gamma_{\text{usf}}(\text{Mg})$	$\gamma_{\text{usf}}(\text{Mg-Al})$	$\gamma_{\text{usf}}(\text{Mg-Zn})$	$\gamma_{\text{usf}}(\text{Mg-Y})$
$\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$	0.148	0.135	0.130	0.214
$\{10\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$	0.351	0.329	0.312	0.128
$\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$	0.389	0.348	0.342	0.312
$\{11\bar{2}2\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$	0.466	0.440	0.417	0.293

表 2 纯 Mg 及 Mg 合金常见滑移系非稳定层错能所需的临界分切应力  $\tau_\gamma$

Table 2 Critical shear stress  $\tau_\gamma$  required for the unstable stacking fault energies of common slip systems in pure Mg and Mg alloys (MPa)

Slip system	$\tau_\gamma(\text{Mg})$	$\tau_\gamma(\text{Mg-Al})$	$\tau_\gamma(\text{Mg-Zn})$	$\tau_\gamma(\text{Mg-Y})$
$\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$	1383.453	1261.934	1215.196	2000.399
$\{10\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$	3281.028	3075.380	2916.469	1196.500
$\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$	3636.239	3252.985	3196.899	2916.469
$\{11\bar{2}2\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$	762.692	720.139	682.495	479.547

表 3 纯 Mg 及 Mg 合金常见滑移系总的临界分切应力  $\tau_t$

Table 3 Total critical shear stress  $\tau_t$  of common slip systems in pure Mg and Mg alloys (MPa)

Slip system	$\tau_p$	$\tau_t(\text{Mg})$	$\tau_t(\text{Mg-Al})$	$\tau_t(\text{Mg-Zn})$	$\tau_t(\text{Mg-Y})$
$\{0001\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$	0.000003	1383.453	1261.934	1215.196	2000.399
$\{10\bar{1}0\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$	11.863945	3292.892	3087.243	2928.333	1208.364
	0.002757	3281.031	3075.382	2916.472	1196.503
$\{10\bar{1}1\} \langle 11\bar{2}0 \rangle$	1275.603294	4911.842	4528.588	4472.502	4192.073
	0.000497	3636.239	3252.986	3196.900	2916.470
$\{11\bar{2}2\} \langle 11\bar{2}3 \rangle$	5892.468228	6655.161	6612.607	6574.963	6372.015

表 4 纯 Mg 及 Mg 合金中基面与非基面滑移系临界分切应力差值

**Table 4 Difference of critical shear stress between basal and non-basal slip systems in pure Mg and Mg alloys (MPa)**

Mg-X	$\Delta \tau_{i(Mg-X)}^1$		$\Delta \tau_{i(Mg-X)}^2$		$\Delta \tau_{i(Mg-X)}^3$
X=Mg	1909.439	1897.577	3528.389	2252.786	5271.707
X=Al	1825.310	1813.448	3266.654	1991.052	5350.673
X=Zn	1713.138	1701.277	3257.307	1981.704	5359.768
X=Y	-792.035	-803.896	2191.674	916.071	4371.616

Note: 1: {0001}-{10 $\bar{1}$ 0}; 2: {0001}-{10 $\bar{1}$ 1}; 3: {0001}-{11 $\bar{2}$ 2}

提高了非基面滑移的效率。

表 4 计算了纯镁、Mg-Al、Mg-Zn、Mg-Y 合金中基面与非基面各滑移系的临界分切应力差值,该差值越小,说明非基面滑移系越容易开动。由于 $\Delta \tau_{i(Mg-Y)}^1 < \Delta \tau_{i(Mg-Zn)}^1 < \Delta \tau_{i(Mg-Al)}^1 < \Delta \tau_{i(Mg)}^1$ ,即 Al、Zn、Y 3 种元素固溶于 Mg 中,均有利于柱面滑移系的开动,且 Y 元素能显著影响柱面滑移系的启动。由于 $\Delta \tau_{i(Mg-Y)}^2 < \Delta \tau_{i(Mg-Zn)}^2 < \Delta \tau_{i(Mg-Al)}^2 < \Delta \tau_{i(Mg)}^2$ ,说明 Al、Zn、Y 3 种元素对镁合金{10 $\bar{1}$ 1}锥面<a>位错的滑移启动,由易到难为:Y>Zn>Al。对于镁合金的{11 $\bar{2}$ 2}<11 $\bar{2}$ 3>锥面滑移系,由于 $\Delta \tau_{i(Mg-Y)}^3 < \Delta \tau_{i(Mg)}^3 < \Delta \tau_{i(Mg-Al)}^3 < \Delta \tau_{i(Mg-Zn)}^3$ ,Al、Zn 元素固溶于镁中,其锥面与基面滑移的临界分切应力差值较纯镁的大,说明 Al、Zn 元素的加入对镁合金{11 $\bar{2}$ 2}<11 $\bar{2}$ 3>滑移系的开动影响很小。而 Y 元素加入 Mg 中,其锥面与基面滑移的临界分切应力差值远小于纯镁的临界分切应力差值,说明 Y 元素固溶于 Mg 中,最有利于{11 $\bar{2}$ 2}锥面<c+a>位错的开动。根据 Von-Mises 准则,<c+a>位错具有 5 个滑移系,且能够协调 c 轴变形,故被认为是提升镁合金塑性的关键。所以,Al、Zn、Y 3 种元素固溶于 Mg 中,Mg 合金的塑性由高到低为:Mg-Y>Mg-Al>Mg-Zn。该结论与常见的实验规律相符,证明了本研究提出的“层错能-镁合金滑移系临界剪切应力”计算模型的正确性。

综上所述,根据计算结果可以得出,若要提高镁合金材料的室温塑性,可以降低非基面(主要是<c+a>位错)滑移的临界分切应力为导向,选择出合适的合金元素,指导室温高塑性镁合金的合金成分设计。

## 5 结 语

迄今为止,与传统的可冷轧铝和钢相比,镁合金板材的生产一般在 300 和 450 °C 的高温下进行,提高镁合金室温塑性不仅有利于降低镁合金型材的加工成本,还有利于提升板材的表面质量。以降低非基面与基面滑移的临界分切应力差值作为设计室温高塑性镁合金的指导

准则,利用简单的“层错能-镁合金滑移系临界剪切应力”计算模型,选择出合适的合金元素从而根本上改变镁合金的室温变形机制,驱动镁合金锥面<c+a>位错滑移系参与塑性变形,这是提升镁合金室温塑性行之有效的手段。目前,要实现从根本上改善镁合金室温塑性的目的,有以下几个方面的问题需要进一步厘清:

1) 由于目前理论模型多建立在二元合金体系之上,对于多元合金体系中溶质元素对非稳定层错能和滑移系临界剪切应力的影响机理还有待研究。因此,现有模型对多元合金体系的适用性还有待进一步探讨。

2) 关于锥面<c+a>位错的起源与演变行为还知之甚少,尤其是对<c+a>位错滑移系启动、分解、反应等演变行为的解释,需深入分析影响镁合金中锥面<c+a>位错滑移系启动的关键性因素以及分解机制。

3) 锥面<c+a>位错与其余缺陷之间的相互作用关系,如层错与锥面<c+a>位错形核之间的关系,锥面<c+a>位错滑移、反应、增殖与孪晶类型、尺寸、密度之间的关系等,需要进一步加深了解。

## 参考文献 References

[1] Bommala V K, Krishna M G, Rao C T. *Journal of Magnesium and Alloys*[J], 2019, 7(1): 72

[2] Chen Jiaming(陈家明), Song Denghui(宋登辉), Zhou Tao(周涛) et al. *Journal of Netshape Forming Engineering*(精密成形工程)[J], 2019, 11(4): 129

[3] Zhang Wanneng, Wang Linzhi, Feng Zhongxue et al. *Optik*[J], 2020, 207: 163 842

[4] Lv Huyuan(吕胡缘), Song Denghui(宋登辉), Zhou Tao(周涛) et al. *Journal of Netshape Forming Engineering*(精密成形工程)[J], 2019, 11(3): 117

[5] Sandlöbes S, Friák M, Neugebauer J et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2013, 576: 61

[6] Sandlöbes S, Friák M, Zaefferer S et al. *Acta Materialia*[J], 2012, 60(6-7): 3011

- [7] Moitra A, Kim S G, Horstemeyer M F. *Acta Materialia*[J], 2014, 75: 106
- [8] Liu Boyu, Liu Fei, Yang Nan *et al. Science*[J], 2019, 365(6448): 73
- [9] Liu Huaqiang(刘华强), Tang Di(唐 荻), Hu Shuiping(胡水平) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2013, 42(7): 1372
- [10] Cui Xiaoming(崔晓明), Yu Zhilei(于智磊), Bai Pucun(白朴存) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2020, 49(6): 2059
- [11] Wang Xiaoqiang(王小强), Li Quanan(李全安), Zhang Xingyuan(张兴渊). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2008, 37(1): 62
- [12] Wang Rong(王 荣), Le Qichi(乐启炽), Wang Engang(王恩刚) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2020, 49(7): 2451
- [13] Oh H S, Kim S J, Odbadrakh K *et al. Nature Communications*[J], 2019, 10: 2090
- [14] Hirsch J, Al-Samman T. *Acta Materialia*[J], 2013, 61(3): 818
- [15] Feng Zhongxue(冯中学), Zhang Xiyan(张喜燕), Pan Fusheng(潘复生). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(9): 1638
- [16] Feng Zhongxue(冯中学), Zhang Xiyan(张喜燕), Pan Fusheng(潘复生). *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(10): 1765
- [17] Nogaret T, Curtin W A, Yasi J A *et al. Acta Materialia*[J], 2010, 58(13): 4332
- [18] Kumar A, Morrow B M, McCabe R J *et al. Materials Science and Engineering A*[J], 2017, 695: 270
- [19] Ding Zhigang, Liu Wei, Sun Hao *et al. Acta Materialia*[J], 2018, 146: 265
- [20] Sandlöbes S, Friák M, Korte-Kerzel S *et al. Scientific Reports*[J], 2017, 7(1): 10 458
- [21] Sandlöbes S, Zaeferrer S, Schestakow I *et al. Acta Materialia*[J], 2011, 59(2): 429
- [22] Sandlöbes S, Pei Z, Friák M *et al. Acta Materialia*[J], 2014, 70: 92
- [23] Agnew S R, Senn J W, Horton J A. *JOM*[J], 2006, 58(5): 62
- [24] Agnew S R, Capolungo L, Calhoun C A. *Acta Materialia*[J], 2015, 82: 255
- [25] Li Fuhui(李阜徽). *Dissertation for Master*(硕士论文)[D]. Chongqing: Chongqing University, 2016
- [26] Meyers M A, Vöhringer O, Lubarda V A. *Acta Materialia*[J], 2001, 49(19): 4025
- [27] Xu Zhichao, Feng Zhongxue, Shi Qingnan *et al. Materials Transactions*[J], 2017, 58(6): 862
- [28] Suzuki M, Kimura T, Koike J *et al. Scripta Materialia*[J], 2003, 48(8): 997
- [29] An X H, Wu S D, Wang Z G *et al. Progress in Materials Science*[J], 2019, 101: 1
- [30] Liu R, Tian Y Z, Zhang Z J *et al. Acta Materialia*[J], 2018, 144: 613
- [31] Li P, Li S X, Wang Z G *et al. Acta Materialia*[J], 2017, 129: 98
- [32] Kim J K, Cooman B C D. *Materials Science and Engineering A*[J], 2016, 676: 216
- [33] Ding Qingqing, Zhang Yin, Chen Xiao *et al. Nature*[J], 2019, 574(7777): 223
- [34] Zhang Zijiao, Sheng Hongwei, Wang Zhangjie *et al. Nature Communications*[J], 2017, 8: 14 390
- [35] Zhang Zijiao, Mao M M, Wang Jiangwei *et al. Nature Communications*[J], 2015, 6: 10 143
- [36] Gludovatz B, Hohenwarter A, Thurston K V S *et al. Nature Communications*[J], 2016, 7: 10 602
- [37] Qian J, Wu C Y, Fan J L *et al. Journal of Alloys and Compounds*[J], 2018, 737: 372
- [38] Dou Yuchen(豆雨辰). *Thesis for Doctorate*(博士论文)[D]. Chongqing: Chongqing University, 2015
- [39] Liu Tingting(刘婷婷), Pan Fusheng(潘复生). *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 2019, 29(9): 2050
- [40] Moitra A, Kim S G, Horstemeyer M F. *Journal of Physics Condensed Matter*[J], 2014, 26(44): 445 004
- [41] Yasi J A, Hector Jr L G, Trinkle D R. *Acta Materialia*[J], 2010, 58(17): 5704
- [42] Wang Cheng, Zhang Huayuan, Wang Huiyuan *et al. Scripta Materialia*[J], 2013, 69(6): 445
- [43] Pei Z, Zhu L F, Friák M *et al. New Journal of Physics*[J], 2013, 15(4): 43 020

## Room Temperature High-Plasticity Magnesium Alloy Design Based on Stacking Fault Energy Theory

Feng Zhongxue<sup>1</sup>, Zhao Shan<sup>1</sup>, Shi Qingnan<sup>1</sup>, Yi Jianhong<sup>1</sup>, Tan Jun<sup>2</sup>

(1. School of Materials Science and Engineering, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093, China)

(2. School of Materials Science and Engineering, Chongqing University, Chongqing 402560, China)

**Abstract:** To overcome the key scientific issues of poor plasticity of most magnesium alloys at room temperature, this study reviewed the theoretical and experimental basis of using stacking fault energy to improve their room temperature plasticity from three aspects: the dislocation characteristics of magnesium alloy, the influence of stacking fault energy on the deformation mechanism, and the relationship between stacking fault energy and critical shear stress of slip system. On this basis, the calculation model of “stacking fault energy-critical shear stress of magnesium alloy slip system” was established. And the critical shear stresses of pure Mg, Mg-Al, Mg-Zn and Mg-Y alloys at base plane, prismatic plane and pyramidal plane were calculated using this model. The influences of Al, Zn and Y on the plasticity of Mg alloys were analyzed by comparing the critical shear stress difference between the slip system of non-base plane and base plane of Mg alloy and pure Mg, so as to verify the reliability of the model. Finally, we proposed to reduce the slip shear stress of non-base plane dislocations (especially the  $\langle c+a \rangle$  dislocations) as a guideline to select appropriate alloy elements for the design of high plasticity magnesium alloys at room temperature.

**Key words:** magnesium alloy; stacking fault energy; critical shear stress of slip system;  $\langle c+a \rangle$  dislocation; mechanical properties

---

Corresponding author: Tan Jun, Ph. D., Professor, School of Materials Science and Engineering, Chongqing University, Chongqing 402560, P. R. China, Tel: 0086-23-65106134, E-mail: j.tan@cqu.edu.cn