

Mg-Al-Zn-Nd 合金微观组织演变及稀土相强化行为

崔晓明, 于智磊, 白朴存, 杜赵新, 康永飞, 刘 飞

(内蒙古工业大学, 内蒙古 呼和浩特 010051)

摘 要: 采用 XRD、SEM 和 TEM 等方法表征了 Mg-Al-Zn-Nd 合金微观组织演变, 研究了合金中稀土相的强化行为。结果表明: 添加 Nd 元素后的实验合金主要由 α -Mg、 $Mg_{17}Al_{12}$ 、 Al_2Nd 和 $Al_{11}Nd_3$ 组成。随着 Nd 含量的增加, $Mg_{17}Al_{12}$ 相尺寸变小, 数量减少, 弥散分布的 Al_2Nd 和 $Al_{11}Nd_3$ 相增多, $Al_{11}Nd_3$ 相由针状向棒状转变, 且 $Al_{11}Nd_3$ 相与基体存在结合能力较强的半共格界面。稀土相强化行为表现为: 在拉伸过程中, 稀土相周围应力集中的增大可能诱发其周围基体形成孪晶结构, 可以协调部分外界应变能的增加; 相比 $Mg_{17}Al_{12}$ 而言, 具有较好结合能力的硬质稀土相不易萌生裂纹, 且呈弥散分布的稀土相对位错运动的钉扎较强; 稀土相的增加导致基体与 $\alpha+\beta$ 共晶组织 (M/E) 界面、岛状 $Mg_{17}Al_{12}$ 相微裂纹源的数量减少。最后, 计算并简要讨论了 $Mg_{17}Al_{12}$ 、 Al_2Nd 和 $Al_{11}Nd_3$ 相的力学特性, 表明这 3 种相均为脆性相。相对 $Mg_{17}Al_{12}$ 相而言, $Al_{11}Nd_3$ 和 Al_2Nd 相的硬度较大。

关键词: Mg-Al-Zn-Nd 合金; 微观组织演变; 稀土相; 强化行为

中图法分类号: TG 146.22

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2020)06-2059-08

镁合金具有密度小, 比强度和比刚度高, 导热性好, 电磁屏蔽性和抗辐射能力强等优点, 因此被广泛应用于汽车制造、电子通讯、航空航天等领域^[1], 其中 AZ 系镁合金应用最为广泛, 但该合金较差的室温力学性能制约了其进一步的发展与应用。合金化是改善镁合金组织及性能的有效措施之一。稀土在镁合金中具有细化组织, 净化合金液等作用, 能够提高合金综合力学性能。

目前, 科研人员在研究稀土 Nd 改性 AZ91 镁合金方面取得了一些成果, 但有关含钕 AZ91 镁合金组织演变的研究结果仍不统一。刘生发等^[3]认为 Nd 质量分数为 0.5% 的组织中形成粒状和针状 Al_3Nd 相。宋雨来等^[4]研究发现 Nd 质量分数大于 0.3% 的镁合金中形成粒状和针状 $Al_{11}Nd_3$ 相。添加适量稀土 (Nd、Y 等) 后的 AZ91 镁合金, 其力学性能得到改善, 主要是归功于细晶强化、第二相强化等作用^[2-4]。然而, 关于拉伸条件下镁合金中稀土相强化行为的报道较少, 特别是有关镁合金中稀土相力学特性、拉伸裂纹萌生与合金力学性能的内在联系还需要深入研究。运用第一性原理计算金属间化合物的力学特性已经在镁合金研发中得到广泛应用^[5,6]。

本工作在前期实验的基础上, 系统研究了随着 Nd 含量的增加, Mg-Al-Zn-Nd 合金微观组织的演变规律, 深入分析了拉伸后合金组织中稀土相的强化行为, 并采用第一性原理计算了实验合金中主要第二相的模量和弹

性常数, 并验证了计算结果。

1 实验过程与计算方法

1.1 实验过程

实验原材料为商用 AZ91D 镁合金及 Mg-20%Nd 中间合金。采用真空电磁感应熔炼炉进行合金熔炼, 熔炼时抽真空 (0.08~0.09 MPa) 并通氩气 (99.95%) 进行保护, 合金液加热到 750 °C 保温 20 min, 采用金属型浇注。利用电感耦合等离子光谱仪 (Optima 7000) 测试合金实际成分见表 1。腐蚀剂选取 0.8 g 苦味酸+10 mL 乙醇+2 mL 去离子水+2 mL 乙酸。合金物相分析利用 D/max-2500/PC 型 X 射线衍射仪完成。微观组织观察使用 FEI Quanta 650 扫描电子显微镜 (SEM) 进行。合金析出相形貌、高分辨像 (HRTEM)、选区电子衍射 (SAED) 及能谱 (EDS) 观察与分析采用 FEI Talos 透射 200X 场发射透射电子显微镜

表 1 实验合金的化学成分

Table 1 Chemical composition of the experimental alloys (wt%)								
Alloy code	Nominal composition				Experimental composition			
	Al	Zn	Nd	Mg	Al	Zn	Nd	Mg
AZN1	9.0	1.0	0.5	Bal.	8.34	0.62	0.27	Bal.
AZN2	9.0	1.0	0.8		8.00	0.58	0.64	
AZN3	9.0	1.0	1.1		8.15	0.58	0.87	
AZN4	9.0	1.0	1.5		8.07	0.53	1.36	

收稿日期: 2019-06-30

基金项目: 内蒙古自治区自然科学基金 (2015MS0526, 2018MS05056); 内蒙古自治区高等学校科研项目 (NJZY17086); 国家自然科学基金 (11362014, 11672140); 高等学校博士学科点专项科研基金 (博导类) (20131514110004)

作者简介: 崔晓明, 男, 1981 年生, 博士, 副教授, 内蒙古工业大学材料科学与工程学院, 内蒙古 呼和浩特 010051, 电话: 0471-6577161, E-mail: cuixiaoming2010@qq.com

(TEM)进行。TEM 试样制备过程包括:机械研磨至厚度为 60 μm 薄片后冲成直径为 $\Phi 3\text{ mm}$ 的圆片,对试样研磨至 25 μm 左右,使用离子减薄仪(Gatan Precision ion polishing system 691)抽真空通氩气制备 TEM 试样,开始工作时离子枪电压设置为 5.0 kV,双枪角度 $\pm 8^\circ$,工作时间 30 min,穿孔后再调整为 2.0 kV,双枪角度 $\pm 2^\circ$,工作时间 10 min。室温拉伸性能测试利用 Gatan DEBEN/MT10204 拉伸台进行。采用商用 AC2 电解抛光液在 -30°C 、20 V 电压条件下抛光 60~120 s 制备 EBSD 试样。利用 QUNTA650 型扫描电子显微镜配置的 EBSD 系统进行织构数据采集,采集步长 0.2 μm ,并使用配套的 HKLChannel5 软件对采集数据进行分析处理。

1.2 计算方法

$\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 、 Al_2Nd 和 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 力学特性第一性原理计算采用基于密度泛函理论的 Castep 软件进行。作者前期对 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 、 Al_2Nd 进行了优化^[7]。在此基础上, $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 交换关联能、赝势、体系总能收敛条件等参数的选取与文献^[7]一致。 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 平面波截断能选取 600.0 eV,布里渊区 k 点均取 $6\times 2\times 2$,优化后得到 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 的平衡晶格常数 $a=0.4455\text{ nm}$, $b=1.3112\text{ nm}$, $c=1.0197\text{ nm}$,与实验值($a=0.4431\text{ nm}$, $b=1.3142\text{ nm}$, $c=1.0132\text{ nm}$)和其他报道计算值^[8]符合较好,平均误差小于 0.64%,这说明本计算结果可信。

2 结果与分析

2.1 XRD 分析

图 1 为不同 Nd 含量实验合金的 XRD 分析结果。可以看出,合金中主要由基体 Mg, $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$, Al_2Nd 和 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相组成。合金中稳定化合物的形成与合金元素的负电性有关,负电性相差超过 ± 0.4 的元素不易形成固溶体而容易形成稳定的中间化合物,并且负电性差值越大形成化合物的倾向越大^[9]。Mg 的负电性为 1.31, Al 为 1.61, Nd 为 1.14。可以看出,Al 与 Nd 的负电性差值大于 Mg 与 Al、Mg 与 Nd 的负电性差值,这表明本实验中形成 Al-Nd 化合物的倾向较大。此外,从 XRD 结果也可以看出,添加 Nd 后的实验合金中存在 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 衍射峰,且随着 Nd 含量的增加, $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 衍射峰相对强度降低,Al-Nd 化合物衍射峰相对强度增强。这是由于 Nd 含量的增加造成高熔点 Al-Nd 化合物的增多导致合金液中 Al 含量逐渐下降,因此共晶反应后合金中的 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 含量逐渐下降。

2.2 SEM 分析

图 2 为不同 Nd 含量实验合金的 SEM 像。从图 2a 可以看出,组织中沿晶界呈半连续网状分布的 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相包括粗大岛状的 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相和片层状 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 二次析

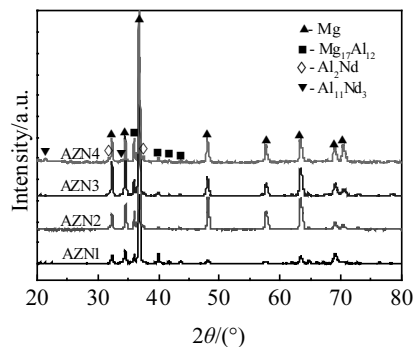


图 1 实验合金的 XRD 图谱

Fig.1 XRD patterns of the experimental alloys

出相,同时在晶界附近析出少量尺寸较小白色 Al_2Nd 颗粒相和 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 针状相。随着 Nd 含量增加(图 2b~2c),合金组织中 Al_2Nd 颗粒相的数量逐渐增加,沿晶界呈半连续网状分布的 $\beta\text{-Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相数量逐渐减少,粗大岛状 $\beta\text{-Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相细化。图 2d 为 Nd 含量为 1.36% 的实验合金微观组织的 SEM 照片。可以看出, Al_2Nd 和 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相数量增加并弥散分布于组织中, $\beta\text{-Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相尺寸、数量进一步变小减少,且沿晶界呈半连续网状分布特征减弱。合金中形成的 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相可能是由于 Nd 含量的增加导致合金中形成了较多的高熔点 Al_2Nd 相, Al_2Nd 相与合金中 Al 元素发生反应进一步转变成为 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相,即 $3\text{Al}_2\text{Nd}+5\text{Al}=\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ ^[9]。

2.3 TEM 分析

图 3 为 AZN4 合金中 Al_2Nd 颗粒相的 TEM 像及 SAED 花样。图 3a 为 Al_2Nd 颗粒相的 TEM 图。可以看出, Al_2Nd 颗粒相尺寸约为 3 μm ,同时发现依附 Al_2Nd 颗粒相存在尺寸约为 2 μm 的 $\text{Al}_8\text{Mn}_4\text{Nd}$ 相。对图 3a 中 $\text{Al}_8\text{Mn}_4\text{Nd}$ 相和 Al_2Nd 相方框选定区域“ A ”和“ B ”分别进行选区电子衍射(SAED),结果分别如图 3b、3c 所示。对图 3b SAED 花样中特征斑点进行标定,确定该相主要为 $\text{Al}_8\text{Mn}_4\text{Nd}$ 。进一步观察图 3b 衍射花样,发现其衍射斑点明锐程度较差,说明 $\text{Al}_8\text{Mn}_4\text{Nd}$ 相中应该存在其他杂质相。然而,图 3c 中的衍射斑点较为明锐,对其 SAED 斑点进行标定,可以确定该相为 Al_2Nd 相,晶带轴方向为 $[011]$ 。

图 4 为不同 Nd 含量实验合金中 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相的 TEM 像及 SAED 花样。图 4a 为 AZN1 合金中 (0.27%Nd) $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相的 TEM 照片,可以看出,合金中存在长度约 2 μm 的 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 针状相,针状相具有类似“针尖”形状的端部结构对基体割裂程度较大。对图 4a 中方框选定区域的放大照片(图 4b)观察发现,在 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 针状相尖端附近存在较明显的位错塞积。这表明 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相具有

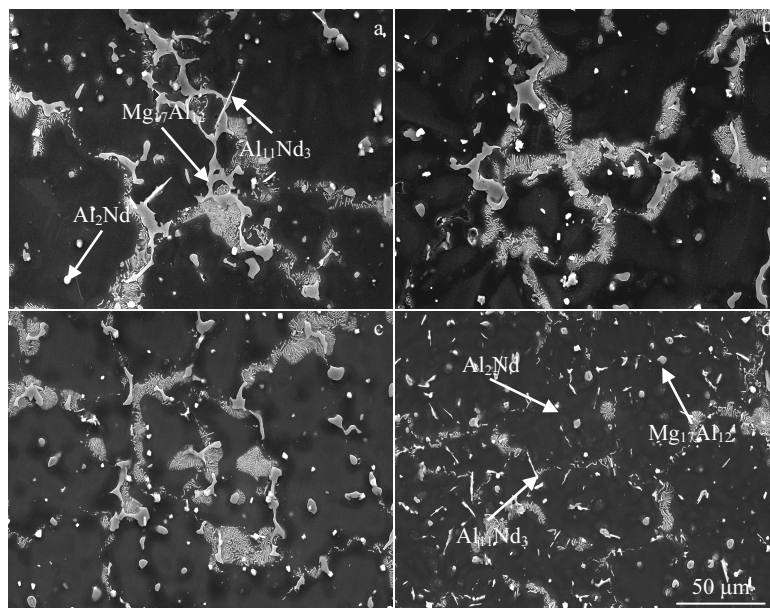


图2 不同Nd含量实验合金微观组织的SEM像

Fig.2 SEM images of the microstructures of the experimental alloys with different Nd contents: (a) 0.27%, (b) 0.64%, (c) 0.87%, and (d) 1.36%

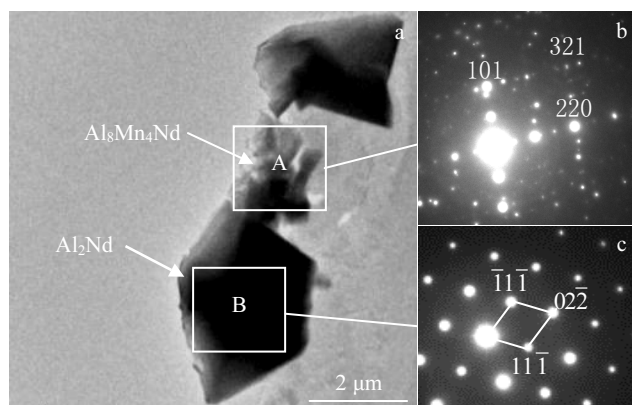
图3 AZN4合金中Al₂Nd相的TEM像及SAED花样

Fig.3 TEM image of the Al₂Nd phase in AZN4 alloy (a), the SAED patterns of the Al₈Mn₄Nd phase (b) and the Al₂Nd phase (c)

抑制位错运动的作用,而且容易在针状相尖端部位形成应力集中,因此,Al₁₁Nd₃针状相尖端位置容易萌生微裂纹。Al₁₁Nd₃相周围形成的位错可能是由于采用金属型铸造成形的铸件中内应力造成的,或者是由于在TEM样品制备过程中引入的。Al₁₁Nd₃相为正交结构,图4c为图4a中Al₁₁Nd₃针状相(虚线方框区域)的选区电子衍射花样,对其衍射斑点进行标定得到晶带轴为[014]。此外,从图4c中还可以看出Mg与Al₁₁Nd₃相存在以下位向关系: $\langle 014 \rangle_{\text{Al}_{11}\text{Nd}_3} \parallel \langle 5\bar{1}43 \rangle_{\text{Mg}}$ 和 $(\bar{1}4\bar{1})_{\text{Al}_{11}\text{Nd}_3} \parallel (01\bar{1}\bar{1})_{\text{Mg}}$ 。

图4d为AZN4合金中Al₁₁Nd₃相的TEM照片。观察发现,晶界处存在的棒状相长度约4 μm,最大宽度约400 nm。对棒状相衍射花样标定(图4e)后确定其为Al₁₁Nd₃相,晶带轴方向为 $[\bar{2}20]$ 。进一步观察发现,棒状Al₁₁Nd₃相端部宽度方向上与基体结合界面平整,长度方向上单侧存在“凹凸”界面结构。对比图4a和4d可以看出,随着Nd含量的增加,合金中的Al₁₁Nd₃相由针状向棒状转度,合金中Al₁₁Nd₃针状相转变成棒状相的生长方式包括沿针状相宽度方向的“凹凸”界面生长。

2.4 稀土相强化行为分析

图5为不同Nd含量实验合金的室温拉伸力学性能。可以看出在本实验条件下,随着Nd含量的增加,实验合金的抗拉强度呈逐渐升高趋势,Nd含量为1.36%(AZN4)的合金表现出较好的力学性能。实验合金室温力学性能的差异与添加不同含量Nd后的微观组织特征密切相关,例如,析出相种类、大小、分布、体积分数及晶粒尺寸等。本研究重点考察稀土相(Al₁₁Nd₃和Al₂Nd相)对合金强化行为的影响。

为深入理解Al₁₁Nd₃相和Al₂Nd相的强化行为,对AZN4合金拉伸断口附近的Al₁₁Nd₃相和Al₂Nd相微观结构进行了TEM观察。图6为Al₁₁Nd₃相的TEM、HRTEM和EDS分析结果。图6a为棒状Al₁₁Nd₃的TEM明场相,可以看出,在Al₁₁Nd₃相周围存在位错塞积,随着外界应变的继续增加而增加,位错塞积程度的增加将导致Al₁₁Nd₃相周围形成的应力集中增大。当Al₁₁Nd₃相周围

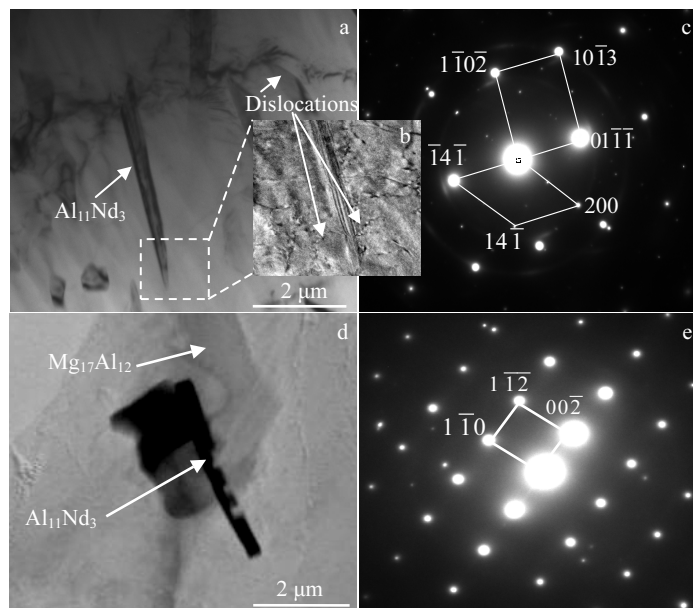


图 4 不同 Nd 含量实验合金中 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相的 TEM 图及其选区电子衍射 (SAED) 花样

Fig.4 TEM images of the $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ phase in AZN1 alloy (a) and AZN4 alloy (d), the enlarge image (b) of the selection area in Fig.4a, the SAED patterns of the needle-like $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ phase (c) and the rod-like $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ (e)

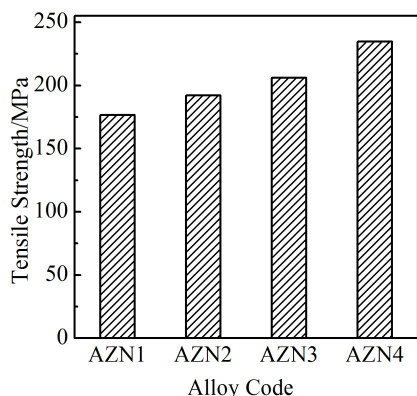


图 5 实验合金的室温拉伸性能

Fig.5 Tensile properties of the experimental alloys with different Nd contents at room temperature

形成的应力大于其自身结合能力时, $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相将萌生微裂纹。从图 6a $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 明场相可以看到, $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 棒状相中间部位沿宽度方向被剪断并形成微裂纹; 当增大的应力达到基体 Mg 形成孪晶所需的临界剪切应力时, 在 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相附近的基体中能够诱发孪晶形成。从图 6b $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 的暗场相可以看出, 在 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 棒状相附近存在的孪晶结构。合金中微裂纹和孪晶的形成将协调部分外界应变能的增加。图 6c 为图 6a 中方框选定区 A 的 HRTEM 形貌。可以看出, 基体 Mg 与棒状 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相的

结合界面为半共格界面, 这说明二者之间的界面结合能力较强。图 6d 为图 6b 中黄色方框选定区域 B 的高分辨像 (HRTEM), 对图 6d 高分辨像中白色方框选定区域 C 放大观察 (图 6e), 可以得到晶面 $(10\bar{1}0)_M$ 与 $(10\bar{1}0)_T$ 沿 $(1\bar{1}02)$ 孪晶界面 (TB) 对称。对图 6d 中白色方框选定区域 C 进行 FFT 转换, 得到其衍射斑点结果如图 6f 所示。对斑点标定后可以看出, 孪晶面为 $(1\bar{1}02)$, 晶带轴方向为 $[\bar{2}4\bar{2}3]$ 。图 6g, 6h, 6i 分别为 Mg、Al 和 Nd 元素面分布图。可以看出, 棒状相主要为 Al 和 Nd 元素, 合金基体 Mg 中存在少量的 Al 和 Nd 元素分布, 棒状 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相中萌生的裂纹没有 Mg、Al 和 Nd 元素分布。

图 7 为 AZN4 合金拉伸断口附近 Al_2Nd 相及其周围微观组织的 TEM 照片。图 7a 为 AZN4 合金中 Al_2Nd 颗粒相 TEM 照片。可以看出, Al_2Nd 颗粒尺寸约为 $3\mu\text{m}$, 并且颗粒相 Al_2Nd 周围存在大量位错, 其内部有微裂纹萌生。图 7b 为 Al_2Nd 颗粒相周围组织的 TEM 照片。可以看出, 组织中存在 $\alpha+\beta$ 共晶组织, 说明图 7b 为晶界附近的组织形貌。进一步观察发现, 基体与 $\alpha+\beta$ 共晶组织 (M/E) 界面分离形成锯齿形边缘的裂纹。对比晶界附近 (图 7b) 颗粒状 Al_2Nd 相、棒状 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相和岛状 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相拉伸后的组织形貌发现, 其中岛状 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相萌生微裂纹的数量最多, 且裂纹宽化严重, 棒状 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相萌生微裂纹的数量次之, 然而颗粒状 Al_2Nd 相没有发现微裂纹萌生。这表明 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 和 Al_2Nd 相的力

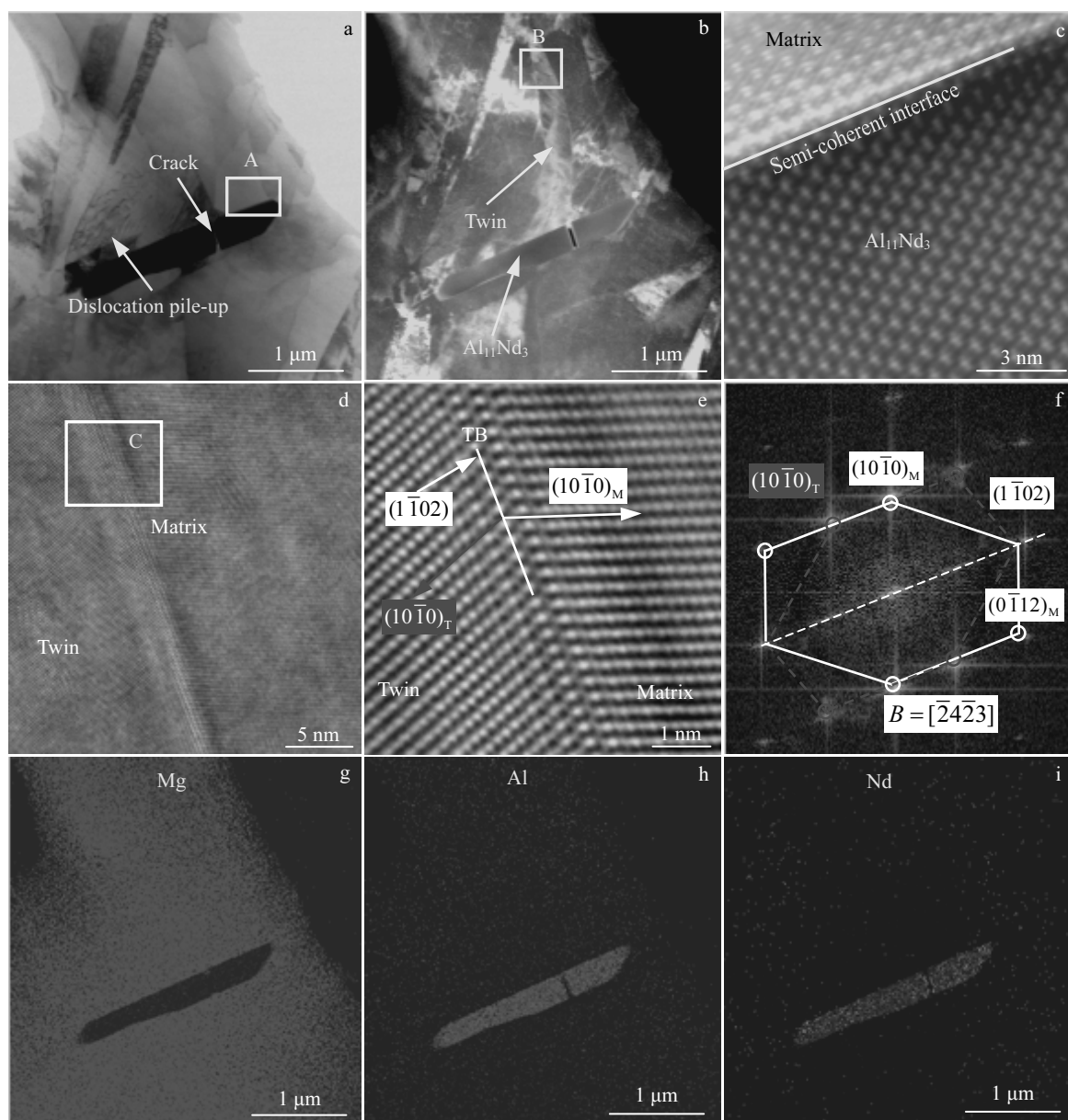


图6 AZN4 合金拉伸断口附近 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相的 TEM、HRTEM 和 EDS 观测结果

Fig.6 TEM bright-field (a) and dark-field (b) images of the $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ near the tensile fracture in AZN4 alloy, the HRTEM image (c) of the selected yellow-colored square area A in Fig.6a, the HRTEM image (d) of the selected yellow-colored square area B in Fig.6b, the corresponding high-magnification (e) and FFT (f) of the selected white-colored square area C in Fig.6d, and the EDS maps of Mg (g), Al (h) and Nd (i)

学特性优于 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相, 因此, 证明合金中弥散分布的稀土相能够有效钉扎位错运动, 从而起到较好的强化作用。

图8为AZN4合金拉伸断口附近组织的EDS面扫描及EBSD结果。图8a~8c分别为Al、Nd、Mg元素的面分布。根据面扫描结果在图8d中标出了部分析出相的位置。图8e为应变场分布云图。图中红色面积区域代表

应变值较大区域, 蓝色面积区域代表应变值相对较小区域。进一步观察发现, 图8e中析出相周围应变场较大, 这表明析出相及其周围组织容易成为萌生裂纹的位置。

通常, 在外界载荷的作用下, 镁合金中萌生的微裂纹相互连接长大, 而且微裂纹的形成能够为主裂纹提供扩展路径, 加速材料的断裂失效过程^[1]。实验合金中, $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相、基体与 $\alpha+\beta$ 共晶组织 (M/E) 界面等位置

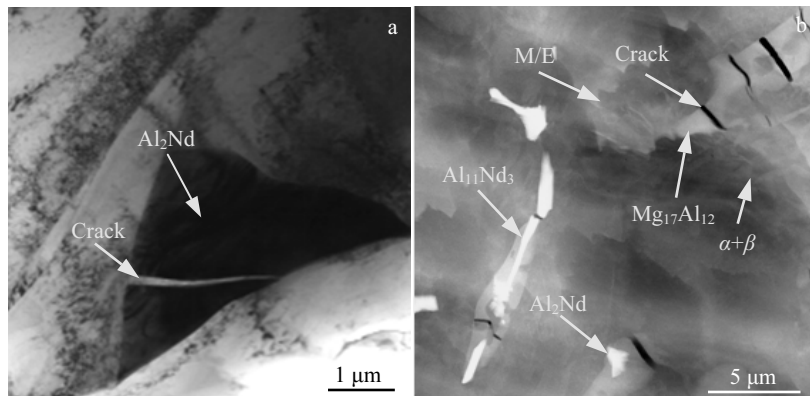
图 7 AZN4 合金拉伸断口附近 Al_2Nd 相及其周围组织的 TEM 照片

Fig.7 TEM images of the Al_2Nd phase near the tensile fracture in AZN4 alloy (a) and the microstructure around the Al_2Nd phase (b)

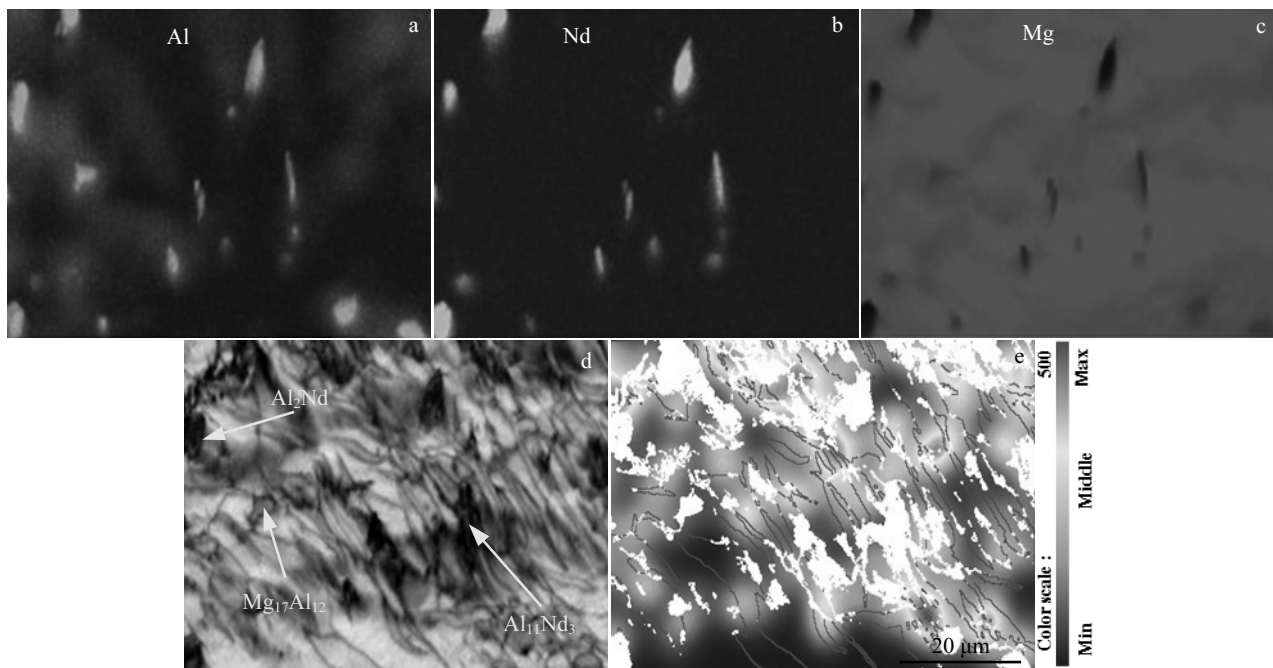


图 8 AZN4 合金拉伸断口附近的 EDS 面扫描及 EBSD 结果

Fig.8 EDS maps of element Al (a), Nd (b) and Mg (c); corresponding EBSD maps of AZN4 alloy near the fracture: (d) band contrast map and (e) strain contouring map

容易作为裂纹源而萌生裂纹，然而具有较好力学特性的稀土相萌生微裂纹需要外界提供较大的载荷。因此，添加稀土 Nd 后形成的稀土相 ($\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 和 Al_2Nd 相) 对提高实验合金的力学性能具有积极作用。稀土相强化行为主要体现在：首先，在拉伸过程中稀土相 ($\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 和 Al_2Nd) 周围应力集中的增大可能诱发稀土相周围基体形成孪晶结构，从而协调部分塑性变形。其次，添加 Nd

元素后合金中 $\alpha+\beta$ 共晶组织减少，导致基体与 $\alpha+\beta$ 共晶组织 (M/E) 界面形成微裂纹源的数量减少。最后，随着 Nd 含量的增加，岛状 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相尺寸变小、数量减少，其内部萌生裂纹的倾向也减小，同时合金中具有较好力学特性和界面结合能力的 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 和 Al_2Nd 相的增加能够进一步提高实验合金的抗拉强度。

为了进一步理解本实验合金中主要第二相的力学特

表2 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 、 Al_2Nd 和 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相的模量及弹性常数 C_{44} 计算结果
 Table 2 Calculation results of Young's modulus E , shear modulus G , G/B and elastic constant C_{44} for $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$, Al_2Nd and $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ phases

Phase	Source	E/GPa	G/GPa	G/B	C_{44}/GPa
$\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$	Present	103.42	42.61	0.71	61.30
	Cal. ^[10]	121.44	49.78	0.69	45.46
Al_2Nd	Present	111.50	48.20	0.89	47.98
	Cal. ^[6]	79.62	32.49	0.67	33.32
$\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$	Present	80.55	34.18	0.81	34.40
	Cal. ^[6]	79.62	32.49	0.67	33.32

性, 对 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 、 Al_2Nd 和 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相的弹性常数及模量进行了计算。计算得到这 3 种析出相弹性常数结果均满足力学稳定性的要求。表 2 为实验合金中 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 、 Al_2Nd 和 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相的模量及弹性常数 C_{44} 计算结果。其中有关 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 的计算结果, 作者没有找到可参考的计算值, 从 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相平衡晶格常数误差小于 0.5% 的优化结果可以认为, 本研究 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 力学特性计算结果可信。在 Al_2Nd 和 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 中, 除 G/B 的值与引用计算值稍有偏差, 其余计算结果与引用参考文献中的计算值均符合较好, 而 G/B 值存在偏差是由于本研究的计算采用了 Castep, 参考文献中使用的是 VASP 软件。通常材料的硬度与其杨氏模量(E)和剪切模量(G)密切相关, 一般来说, E 和 G 越大, 材料的硬度越高^[5]。从表 2 模量计算结果可以看出, Al_2Nd 和 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 的剪切模量和杨氏模量均高于 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$, 说明 Al_2Nd 和 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 硬度较高。弹性常数 C_{44} 表征材料抵抗剪切变形能力, 也能反映材料的硬度, C_{44} 值越大, 对应材料的硬度越高^[6]。从这 3 种相的 C_{44} 值可以看出, Al_2Nd 和 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 对应较高的 C_{44} 值, 也表明了他们能够作为硬质相提高合金抵抗外力发生变形的能力。 G/B 值可预测金属材料的延性和脆性等力学性质^[10], 若 $G/B < 0.5$, 材料呈延性, 否则呈脆性。从本工作计算的 G/B 结果可知, $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 、 Al_2Nd 和 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 均呈脆性。以上计算结果与本实验结论相符。

3 结 论

1) Mg-Al-Zn-Nd 实验合金主要由 $\alpha\text{-Mg}$ 、 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 、 Al_2Nd 和 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 组成。随着 Nd 含量的增加, $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相尺寸变小、数量减少, 而 Al_2Nd 和 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相增多且弥散分布于基体中。 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相由针状向棒状转变, $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 针状相转变成棒状相的生长方式包括沿针状相宽度方向的“凹凸”界面生长。棒状 $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 相与基体存在半共格界面。

2) 稀土相强化行为表现在: 在拉伸过程中, 稀土相周围应力集中的增大可能诱发其周围基体形成孪晶结

构, 可以协调部分外界应变能的增加。其次, 相比 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 而言, 具有较好结合能力的硬质稀土相分布弥散且不易萌生裂纹, 因此, 呈弥散分布的稀土相钉扎位错运动较强。最后, 稀土相的增加导致合金中 $\alpha+\beta$ 共晶组织和岛状 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相减少, 使得基体与 $\alpha+\beta$ 共晶组织 (M/E) 界面、岛状 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相内部形成微裂纹源的数量减少。

3) $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 、 Al_2Nd 和 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相的弹性常数及模量计算结果表明, 这 3 种相均为脆性相。相对 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 而言, $\text{Al}_{11}\text{Nd}_3$ 和 Al_2Nd 的硬度较大, 有利于提高合金抵抗外力发生变形的能力。

参考文献 References

- [1] Fu W, Wang R H, Zhang J Y et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2018, 720: 98
- [2] Ren L B, Quan G F, Zhou M Y et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2017, 690: 195
- [3] Liu Shengfa(刘生发), Wang Huiyuan(王慧源), Kang Liugen(康柳根) et al. *The Chinese Journal of Nonferrous Metals*(中国有色金属学报)[J], 2006, 16(3): 464
- [4] Song Yulai(宋雨来), Liu Yaohui(刘耀辉), Zhu Xianrong(朱先勇) et al. *Journal of Jilin University*(吉林大学学报)[J], 2006(3): 289
- [5] Ouyang Y F, Liu F L, Chen H M et al. *Physica B*[J], 2011, 406: 3681
- [6] Zhou D W, Liu J S, Xu S H et al. *Physica B*[J], 2010, 405: 2863
- [7] Cui Xiaoming(崔晓明), Bai Puncun(白朴存), Hou Xiaohu(侯小虎) et al. *Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2016, 45(4): 1045
- [8] Hyuk Kim S, Hyang Kim D, Kim N J et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 1997, 226: 1030
- [9] Su M, Zhang J, Feng Y et al. *Journal of Alloys and Compounds*[J], 2017, 691: 634
- [10] Tao X M, Ouyang Y F, Liu H S et al. *Computational Materials Science*[J], 2008, 44: 392

Microstructure Evolution and Strengthening Behavior of Rare-earth-containing Phases in Mg-Al-Zn-Nd Alloy

Cui Xiaoming, Yu Zhilei, Bai Pucun, Du Zhaoxin, Kang Yongfei, Liu Fei

(Inner Mongolia University of Technology, Hohhot 010051, China)

Abstract: The microstructure evolution of the Mg-Al-Zn-Nd alloy was characterized by XRD, SEM and TEM, and the strengthening behavior of the rare-earth-containing phases in the alloys was studied. Results show that the microstructure consists of the α -Mg, $Mg_{17}Al_{12}$, Al_2Nd and $Al_{11}Nd_3$ phases in the experimental alloys. Meanwhile, as increases the content of Nd element, the size and the number of the $Mg_{17}Al_{12}$ phase gradually decrease; however, the number of the dispersed Al_2Nd and $Al_{11}Nd_3$ phases increases. Moreover, the shape of the $Al_{11}Nd_3$ phase changes from needle-like to the rod-like with the increasing of Nd content, and the semi-coherent interface with strong binding ability exists between $Al_{11}Nd_3$ phase and matrix Mg. Furthermore, the strengthening behavior of the rare-earth-containing phases includes the following aspects: During tension, the increase of stress concentration around the rare-earth-containing phases may induce the formation of twin around the matrix Mg, which can coordinate the increase of some external strain energy. Compared with $Mg_{17}Al_{12}$ phase, the hard rare-earth-containing phases with good binding ability initiate micro-cracks hardly; therefore, the dispersed rare-earth-containing phases play an important role in pinning dislocation movement. The number increasing of the rare-earth-containing phases results in the number decreasing of the micro-cracks sources, which initiate at the interface between matrix and eutectic structure (M/E), as well as the island-like $Mg_{17}Al_{12}$ phase. Finally, the mechanical properties of the $Mg_{17}Al_{12}$, the Al_2Nd and the $Al_{11}Nd_3$ phases were calculated and briefly discussed, indicating these three kinds of phases are all brittle phases. Compared with the $Mg_{17}Al_{12}$, the hardness of $Al_{11}Nd_3$ and Al_2Nd are higher.

Key words: Mg-Al-Zn-Nd alloy; microstructure evolution; rare-earth-containing phases; strengthening behavior

Corresponding author: Liu Fei, Ph. D., Lecturer, School of Materials Science and Engineering, Inner Mongolia University of Technology, Hohhot 010051, P. R. China, Tel: 0086-471-6577161, E-mail: ngdliufei@163.com