

引文格式: 王郁, 王俊升, 薛程鹏, 等. 微合金化对铝合金高温析出相影响的研究进展 [J]. 航空制造技术, 2021, 64(15): 68-77, 85.

WANG Yu, WANG Juncheng, XUE Chengpeng, et al. Review of microalloying effects on high temperature  $Al_3X$  precipitates in Al alloys[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2021, 64(15): 68-77, 85.

## 微合金化对铝合金高温析出相影响的研究进展\*

王郁<sup>1</sup>, 王俊升<sup>1,2</sup>, 薛程鹏<sup>1</sup>, 王硕<sup>1</sup>, 陈东旭<sup>1</sup>, 张弛<sup>1</sup>

(1. 北京理工大学材料学院, 北京 100081;

2. 北京理工大学前沿交叉科学研究院, 北京 100081)

[摘要] 铝合金材料广泛应用于航空航天等领域,但其高温强度相对于钢铁材料还有一定的差距。通过添加过渡族金属和稀土金属元素可有效控制铝合金高温条件下的析出强化相( $Al_3X$ ),从而提升其高温力学性能。概述了微合金元素对铝合金高温强化影响的国内外研究进展,并结合第一性原理计算阐述了 $Al_3X$ 强化相热力学参数及其性能方面研究的最新进展。

关键词: 微合金化; 铝合金;  $Al_3X$  强化相; 第一性原理计算; 高温力学性能

### Review of Microalloying Effects on High Temperature $Al_3X$ Precipitates in Al Alloys

WANG Yu<sup>1</sup>, WANG Junsheng<sup>1,2</sup>, XUE Chengpeng<sup>1</sup>, WANG Shuo<sup>1</sup>, CHEN Dongxu<sup>1</sup>, ZHANG Chi<sup>1</sup>

(1. School of Materials Science & Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China;

2. Advanced Research Institute for Multidisciplinary Science, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

[ABSTRACT] Al alloys are widely used in aerospace industries, but their high-temperature strength still cannot match with steels. Addition of transition metals and rare earth elements can effectively control the precipitation strengthening phases ( $Al_3X$ ) in Al alloys under high temperature conditions, and therefore their high-temperature mechanical properties can be improved significantly. This paper summarizes the current research progresses of the influence of microalloying elements on the high temperature precipitation strengthening of Al alloys. Combined with first-principles calculation, the latest developments in the thermodynamic parameters and properties of  $Al_3X$  strengthening phase are described.

**Keywords:** Microalloying; Al alloy;  $Al_3X$  strengthening phase; First-principles calculation; High temperature mechanical properties

**DOI:** 10.16080/j.issn1671-833x.2021.15.068

铝是地壳中储量最丰富的金属元素,占地壳总质量的8%。由于铝具有低密度、高比强(刚)度、良好的塑性等诸多优点,被广泛应用于航空航天等领域。但由于纯铝强度相对较低,很难直接作为结构材料使用,因此经过合金化形成铝合金,有利于满足其使用性能

要求<sup>[1-2]</sup>。多数铝合金材料虽然具有良好的强韧性、抗疲劳、耐腐蚀性能,但其高温强度较低,很大程度上限制了其在航空航天等领域的进一步应用。近年来,探究和设计新型高强度、耐高温铝合金已成为国内外铝行业研究热点和难点,得到了广泛的关注。热处理技术、合金

\* 基金项目: 国家自然科学基金面上项目(52073030); 装备预先研究项目领域基金(61409220124)。

化技术等可以改善铝合金的高温力学性能,其中,合金化是一种可以显著提高铝合金性能的有效手段,已经得到了学者们的普遍认可<sup>[3]</sup>。研究发现,过渡族金属和稀土金属元素对铝合金性能有较大的影响<sup>[4]</sup>。通过在铝合金中掺入一定量的过渡族金属和稀土元素可以获得铝基金属间化合物(形成新的弥散强化相),能有效促成晶粒细化并改善合金的组织结构,提高高温强度,是目前优化和改善铝合金强度和耐热性能的有效方法之一。

本文将介绍 8 种微合金元素与铝形成的  $Al_3X$  析出相,着重介绍其结构、力学性能和对铝合金高温强化影响的国内外研究,并列出第一性原理计算出的晶体结构和热力学等参数来进行对比。

## 1 $Al_3X$ 相对铝合金组织和力学性能的影响

通常,铝合金在高温条件下存在许多不同种类的相,如  $Al_3Zr$ 、 $Al_2Cu$ 、 $AlLi$  等,这些析出相种类、分布和相互作用与合金的力学性能密切相关。其中三铝化合物  $Al_3X$  相具有低密度、高熔点、抗氧化性、抗蠕变性、热稳定性和导电性等优异的物理化学性能,对铝合金的力学性能起到了重要作用<sup>[5]</sup>。

$Al_3X$  相有  $L1_2$  结构、 $DO_{22}$  结构和  $DO_{23}$  结构等,该相是在熔炼铸造或后续热处理过程中析出时形成。如  $Al_3Ti$ 、 $Al_3Zr$ 、 $Al_3Hf$ 、 $Al_3Sc$  和  $Al_3La$  等是在熔炼铸造时形成,主要起净化溶体和细化晶粒的作用; $Al_3Li$ 、 $Al_3Sc$ 、 $Al_3Y$  和  $Al_3Lu$  等是在后续热处理过程中析出的与基体共格或半共格,产生应变而提高强度。 $L1_2$  结构的  $Al_3X$  化合物与 Al 基体的结构相似性有利于相干界面,从而最小化表面能并且具有最大化强化效果<sup>[6]</sup>。此外一些  $Al_3X$  相可以在高温下保持稳定,力学性能较好,所有这些优异的性能使它们成为高强度热稳定铝合金理想分散强化相<sup>[6]</sup>。

然而,随着航空航天工业的发展,工程应用上对铝合金材料性能的要求越来越高,亟须提高铝合金的力学性能。研究发现铝和早期过渡金属形成的金属间化合物具有抗氧化、耐腐蚀、相对低密度和高熔点等特点。铝和稀土元素(RE)的金属间化合物因其独特的力学性能,如高的抗拉强度、良好的延展性、高的耐腐蚀性和热稳定性而受到广泛关注。并且,相比于其他合金元素,过渡或稀土元素可以改善铝合金的力学性能和高温强度,满足工程上的需求和应用<sup>[4]</sup>。目前,常见的早期过渡元素为 III B、IV B 族元素 Sc、Y、Ti、Zr、Hf 等,常见的稀土元素有 Sc、Y 和镧系元素等。IV B 族(Ti、Zr、Hf)元素通常会与 Al 形成体心四方  $DO_{22}$  (或  $DO_{23}$ ) 结构,从而导致形成的不同种类的  $Al_3X$  相在性能方面存在一些差异,主要表现在脆性上。Sc、Lu 等一些稀土元素与

Al 形成的  $Al_3X$  化合物通常为立方  $L1_2$  结构,各向异性较小。

微观组织的种类分布会影响力学性能,而材料的力学性能在高温下也会发生不同的变化。因此为了更好地掌握  $Al_3X$  相(其中 X 代表过渡或稀土元素)对 Al 合金力学性能的影响,本文比较以下 8 种  $Al_3X$  相的微观组织、力学性能和热力学稳定性,并进行归纳和总结。

### 1.1 $Al_3Li$

Li 是目前为止世界上发现的最轻金属元素,在铝合金中每添加质量分数 1% 的锂,密度降低 3%,弹性模量提高 6%。而铝锂合金是一类含有锂元素的新型铝合金,具有低密度、高比刚度、高比强度、优良的低温性能、良好的耐腐蚀性能和卓越的超塑性成型性能。因此,铝锂合金在航空航天工业具有关键应用价值<sup>[7]</sup>。

$Al_3Li$  相( $\delta'$ )是一种与铝基体共格的亚稳态纳米共格析出相,通常在热处理工艺过程中出现。其结构具有  $L1_2$  立方结构的高度有序排列,能成为与矩阵具有立方取向关系的球体,且  $\delta'$  相与  $\alpha-Al$  的立方面心主晶格排列相同,具有很小晶格失配<sup>[8]</sup>。此外,该相具有很高的固有弹性模量,是铝合金中加入 Li 能够提高弹性模量的主要原因<sup>[9]</sup>。Laverock 等<sup>[10]</sup> 研究指出  $Al_3Li$  的杨氏模量比 Al 的杨氏模量大得多,这是由它的电子结构决定的。

由于 Al-Li 合金越来越多地应用于航空航天工业中,亟须要继续提高 Al-Li 合金的性能以满足工业需求。因此为了进一步探索  $Al_3Li$  的结构和性能,学者们进行了大量的研究。

在微观组织方面,析出相与基体之间的晶格参数差可以影响界面与能量,从而对力学性能产生影响。 $\delta'$  相和稀 Al-Li 固溶体的晶格常数差异非常小,仅为  $0.02\text{\AA}$ 。相应的析出物与基体的失配导致的界面应变变化也非常小,其变化范围为  $0.08\% \pm 0.02\%$ <sup>[11]</sup>。由于  $\delta'$  相和稀 Al-Li 固溶体之间具有较小的晶格失配和低的界面应变,  $\delta'$  相在晶体学上保持与母体固溶体基体全共格,晶体学取向关系为  $(111)Al_3Li // (111)Al$ ,且细小、均匀、弥散地分布在合金中,能有效改善铝合金的强度和高温抗蠕变性能<sup>[12]</sup>。因此,  $\delta'$  析出相被认为是 Al-Li 合金重要的强化相<sup>[13-14]</sup>。

在力学性能方面,  $Al_3Li$  可以提高材料弹性模量,改善合金的强度。而  $Al_3Li$  的强化作用是由多种机制引起的,主要为模量强化和有序强化。EL-ATY 等<sup>[8]</sup> 对  $\delta'$  析出强化铝锂合金的机理进行了探索,结果显示由于  $\delta'$  析出相和母体固溶体基体之间的剪切模量的差异而导致模量增强;并且由于位错与析出的  $\delta'$  相之间的相互作用,可能会产生反相边界,从而产生某种有序强化。

Wang 等<sup>[15]</sup>使用第一原理计算系统地研究了 Al-Cu-Li 合金中  $\delta'/\theta/\delta'$  的原子结构及其相对稳定性,结果表明反相 1/2 [110] 结构具有最高的理想拉伸强度。

在热力学稳定性方面, Li 的加入形成  $\text{Al}_3\text{Li}$ , 温度稳定范围是 0~800K<sup>[16]</sup>, 可以降低材料密度并提高材料的弹性模量。Balducci 等<sup>[17]</sup>研究了 Al-Cu-Li 合金的高温性能, 结果表明最低硬度和强度极限在延长保温时间后保持不变。这一极限可与专为高温应用而设计的铝合金相媲美, 甚至更高, 这表明 Al-Cu-Li 合金也可能适用于高温应用。

### 1.2 $\text{Al}_3\text{Ti}$

向铝合金中添加钛在熔炼铸造时会形成  $\text{Al}_3\text{Ti}$  金属间化合物,  $\text{Al}_3\text{Ti}$  相有四方  $\text{DO}_{22}$  和立方  $\text{L1}_2$  两种结构。该相能够使 Al-Ti 合金具有密度低、抗氧化、硬度和弹性模量高等优点, 近年来受到越来越多关注<sup>[18-19]</sup>。

在微观组织方面, 不同结构的  $\text{Al}_3\text{Ti}$  相在性能方面存在一些差异。如 Li 等<sup>[20]</sup>研究表明  $\text{L1}_2\text{-Al}_3\text{Ti}$  比  $\text{DO}_{22}\text{-Al}_3\text{Ti}$  具有更好的延展性, 较小的各向异性 and 更低的德拜温度。目前, 为了将  $\text{Al}_3\text{Ti}$  从四方结构转变为高对称立方  $\text{L1}_2$  结构, 已经进行了许多试验和理论研究。Prakash 等<sup>[21]</sup>认为添加过渡金属与  $\text{Al}_3\text{Ti}$  相互作用是使其达到  $\text{L1}_2\text{-Al}_3\text{Ti}$  到  $\text{DO}_{22}\text{-Al}_3\text{Ti}$  结构转变的一种可能途径, 从而达到提高  $\text{Al}_3\text{Ti}$  的延展性的目的。

在力学性能方面,  $\text{Al}_3\text{Ti}$  相在铝合金中可以细化晶粒, 从而提高合金力学性能, 对  $\alpha$  (Al) 晶粒有非均质形核作用。如 Wang 等<sup>[22-23]</sup>运用第一性原理分子动力学计算发现  $\text{Al}_3\text{Ti}$  是促使铝及铝合金晶粒细化的过渡相, 在凝固过程中溶质中有过量的 Ti 时可原位自生在  $\text{TiB}_2$  的晶体表面, 揭示了大规模生产中为什么需要过量 Ti 的原因。

在热力学稳定性方面, Ti 元素加入形成  $\text{L1}_2\text{-Al}_3\text{Ti}$  和  $\text{DO}_{22}\text{-Al}_3\text{Ti}$  相的温度稳定范围分别为 0~495K 和 495~1380K<sup>[24]</sup>,  $\text{Al}_3\text{Ti}$  是铝基复合材料中常见的强化相, 可用于耐高温铝合金<sup>[25]</sup>。Chao 等<sup>[26]</sup>研究发现 ( $\text{Al}_3\text{Ti} + \text{Al}_2\text{O}_3$ ) / 2024 Al 复合材料在高温下表现出高强度性能, 在 773K 下的应变率为  $1.4 \times 10^{-3} \text{s}^{-1}$  时可达 114.48 MPa 的压缩强度, 而强化原因是  $\text{Al}_3\text{Ti}$  的载荷转移机制, 即在高温时  $\text{Al}_3\text{Ti}$  相可以有效地承载载荷, 因此外载荷可以转移到该相上, 使合金的高温力学性能保持良好。

### 1.3 $\text{Al}_3\text{Zr}$

为了控制抑制再结晶, 通常在高强铝合金的加工过程中添加少量锆。锆在铝中的溶解度不到 0.1%, 可以在初始均质化热处理期间以亚稳态的  $\text{L1}_2$   $\text{Al}_3\text{Zr}$  颗粒形式析出<sup>[27]</sup>。

在微观组织方面,  $\text{Al}_3\text{Zr}$  主要有  $\text{L1}_2$  和  $\text{DO}_{23}$  结构。其中  $\text{L1}_2$  结构较四方晶  $\text{DO}_{23}$  相具有更高的结构对称性与更高的塑性, 但其不能稳定存在, 在高温中易于转变成稳定的  $\text{DO}_{23}$  结构。因此, 已经进行了许多研究以稳定立方  $\text{L1}_2$  相化合物, 从而达到提高力学性能的目的, Moon 等<sup>[28]</sup>研究发现在  $\text{Al}_3\text{Zr}$  中加入 Cu 可以提高  $\text{L1}_2$  结构的稳定性。

在力学性能方面, 该相具有抗溶解和粗化的能力, 能够在变形加工后阻碍再结晶从而提高力学性能。Pozdniakov 等<sup>[29]</sup>研究了 Zr 对 Al-Er-Y 合金性能的影响, 结果表明 Zr 的加入减慢了  $\text{Al}_3$  (Er, Y) 弥散体的粗化。并提升了 Al-Er-Y 合金的再结晶温度。同时, Knipling 等<sup>[30]</sup>发现在 Al-Zr 合金中添加 Ti 也可以促使  $\text{Al}_3\text{Ti}$  成核于  $\text{Al}_3\text{Zr}$  相表面, 从而达到细化晶粒的作用, 同时提高塑性和强度。

在热力学稳定性方面, Zr 元素加入形成  $\text{L1}_2\text{-Al}_3\text{Zr}$  和  $\text{DO}_{23}\text{-Al}_3\text{Zr}$  相, 温度分别稳定在 0~590K 和 0~1853K 处<sup>[31]</sup>, 具有低密度、良好的力学和弹性, 此外它的高温力学性能较好;  $\text{Al}_3\text{Zr}$  在高温下  $\text{L1}_2$  相结构稳定, 因此被认为是高温铝合金强化相。Wang 等<sup>[32]</sup>研究发现在 Al 合金中加入 Zr 后由于 Orowan 绕过强化机制,  $\text{L1}_2\text{-Al}_3\text{Zr}$  相在 500℃ 时会产生 985MPa 的显微硬度。

### 1.4 $\text{Al}_3\text{Hf}$

铝铪 (Al-Hf) 合金具有良好的抗氧化、耐腐蚀、高温强度高、密度低、熔点高等优点, 是一种高温结构材料。铪元素加入可以有效地细化合金晶粒, 在凝固过程中铪元素可与铝反应形成  $\text{Al}_3\text{Hf}$  粒子。

在微观组织方面,  $\text{Al}_3\text{Hf}$  金属间化合物中存在  $\text{L1}_2$ 、 $\text{DO}_{22}$  和  $\text{DO}_{23}$  结构。一些学者对于  $\text{Al}_3\text{Hf}$  3 种结构之间的转变进行了研究。Schubert 等<sup>[33]</sup>对  $\text{Al}_3\text{Hf}$  金属间化合物中的 3 种结构之间的转变进行了探究。试验结果表明  $\text{DO}_{23}\text{-Al}_3\text{Hf}$  和  $\text{DO}_{22}\text{-Al}_3\text{Hf}$  之间的平衡转变温度在 650℃ 左右。在之后的工作中, Srinivasan 等<sup>[31]</sup>通过机械合金化得到了立方晶  $\text{L1}_2\text{-Al}_3\text{Hf}$ , 对  $\text{L1}_2\text{-Al}_3\text{Hf}$  和  $\text{DO}_{23}\text{-Al}_3\text{Hf}$  的稳定性进行探索的结果表明二者之间的转变温度为 750℃。在相的稳定性上, Colinet 等<sup>[34]</sup>确定了这 3 种结构的形成焓的相对稳定性: 顺序为  $\text{DO}_{23} > \text{DO}_{22} > \text{L1}_2$ , 由此可知虽然  $\text{L1}_2$  结构塑性最好, 但最不易在合金中形成, 因此目前已经进行了许多努力来通过形成  $\text{L1}_2$  结构改善  $\text{Al}_3\text{Hf}$  金属间化合物的延展性。Kumar<sup>[35]</sup>研究表明从四方的  $\text{DO}_{22}/\text{DO}_{23}$  到更对称的立方的  $\text{L1}_2$  结构的改变, 可以在一定程度上提高它们的延展性。应变硬化仅在合金的未结晶变形状态得以维持的情况下才有效。而过渡元素铪 (Hf) 在铝合金中形成的亚稳的  $\text{L1}_2\text{-Al}_3\text{Hf}$  弥散体可能是实现高抗再结

晶性的潜在添加剂<sup>[36]</sup>。

在力学性能方面,初生的  $\text{Al}_3\text{Hf}$  粒子可以作为基体有效的形核质点,与基体共格,纳米级别的  $\text{Al}_3\text{Hf}$  粒子可以通过钉扎效应抑制晶粒的长大。 $\text{Al}_3\text{Hf}$  具有良好的耐腐蚀性、较高的熔点和基材的高温抗氧化性、较高的温度强度、较低的密度以及丰富的铝含量所导致的高熔点等优良性能<sup>[37-38]</sup>。

在热力学稳定性方面, Hf 的加入形成  $\text{L}_{12}\text{-Al}_3\text{Hf}$ 、 $\text{DO}_{22}\text{-Al}_3\text{Hf}$  和  $\text{DO}_{23}\text{-Al}_3\text{Hf}$ , 温度稳定范围分别是 0~650K, 650~750K 和 750~1100K<sup>[39]</sup>, 铝铪 (Al-Hf) 合金高温强度高、密度低、熔点高, 是一种高温结构材料。

### 1.5 $\text{Al}_3\text{Sc}$

到目前为止, Sc 是人们所发现的对铝合金最为有效的合金化元素, Sc 的加入对提高铝合金的性能的作用非常显著。Ti 和 Sc 位于元素周期系统的相邻位置, 它们都是铝和铝合金的有效细化剂, 在熔体中  $\text{Al}_3\text{Sc}$  可以起到细化的作用。并且由于 Al-Sc 合金在时效热处理过程中, 球型纳米尺度的  $\text{Al}_3\text{Sc}$  沉淀物是均匀形成的, 因此 Sc 元素的单位原子百分含量的强度增幅是所有合金元素中最高的<sup>[40-41]</sup>。

在组织和性能方面, Al-Sc 合金具有密度低、室温强度高、高温抗蠕变性能好等优点, 是近年来备受关注的新型结构材料, 微量 Sc 对铝合金合金化作用的主要原因在于生成稳定的  $\text{L}_{12}\text{-Al}_3\text{Sc}$  相, 该相通过抑制再结晶和细化晶粒, 对提高铝合金的强度起着重要作用。 $\text{Al}_3\text{Sc}$  均匀分布在 Al 基体中, 有效地固定了晶界, 有利于获得热稳定的、细粒度的微观结构。并且与  $\text{Al}_3\text{Li}$  相比,  $\text{Al}_3\text{Sc}$  具有更高的结构稳定性和更好的力学性能<sup>[40, 42]</sup>。

Wang 等<sup>[43]</sup> 通过第一性原理计算发现,  $\text{Al}_3\text{Sc}$  析出物具有良好的热力学稳定性, 并且力学性能较好。此外, 在铝合金中加入 Sc 可以细化晶粒, 改善力学性能, 减少热裂, 消除缩松, 使第二相分布更加均匀。Wirtz 等<sup>[44]</sup> 研究发现含 Sc 的铝合金由于其晶粒结构非常细小, 从而比其他铝合金具有更高的抗疲劳裂纹成核性。

在热力学稳定性方面, Sc 元素加入形成  $\text{Al}_3\text{Sc}$  的温度稳定范围为 0~1320K<sup>[45]</sup>, Al-Sc 合金具有密度低、室温强度高、高温抗蠕变性能好等优点。Mondol 等<sup>[3]</sup> 研究发现通过在 2219 合金中加入少量的质量分数为 0.8% Sc, 在热处理后会生成  $\text{Al}_3\text{Sc}$ , 在 200℃ 时, 材料的硬度由于  $\theta'$  的形成而保持稳定。而  $\text{Al}_3\text{Sc}$  相在  $\theta'$  基体界面处可以使  $\theta'$  析出物在高温下保持稳定, 由此可以极大地提高合金在高温下的强度和硬度。

### 1.6 $\text{Al}_3\text{Y}$

在铝中添加少量 Y 等稀土元素, 能够起到净化铝合

金熔体并对铝合金的铸态组织具有强烈细化作用, 从而改善力学性能和耐腐蚀性, 提高铝合金的抗拉强度、耐热性和高温性能等特性<sup>[46]</sup>。在铝合金中使用稀土元素 Y 的主要目的是产生  $\text{Al}_2\text{Y}$ 、 $\text{Al}_3\text{Y}$  相, 快速凝固 Al-Y 合金在时效过程可形成亚稳  $\text{L}_{12}$  结构的  $\text{Al}_3\text{Y}$ <sup>[47]</sup>。

在组织和性能上, 在铝合金中会形成  $\text{L}_{12}$  结构的  $\text{Al}_3\text{Y}$ , 它是 1223K 以上的高温相。该相有许多优异的力学性能, 如细化晶粒、提高高温稳定性等, 一些学者对此进行了研究。Pozdniakov<sup>[29]</sup> 和 Zhang 等<sup>[48]</sup> 研究表明在 Al-Zr-Y 合金中, Y 显著加速了  $\text{Al}_3\text{Zr}$  的析出动力学, 并导致形成了高密度且平均半径较小的  $\text{Al}_3(\text{Zr}, \text{Y})$  弥散体。在 400~500℃ 退火后, 向 Al-Zr 合金中添加 Y 可显著提高其硬度。添加 Y 会导致合金在 250℃、300℃ 和 370℃ 退火期间的热稳定性提高。韩剑等<sup>[49]</sup> 研究表明在铝合金中加入少量 Y 后会形成  $\text{Al}_3\text{Y}$  等相并使铸态组织明显细化。

在热力学稳定性方面, Y 元素加入形成  $\text{Al}_3\text{Y}$  的温度稳定范围为 0~1253K, 该相可以提高铝合金的抗拉强度、耐热性和高温性能等特性<sup>[50]</sup>。

### 1.7 $\text{Al}_3\text{Lu}$

在时效热处理过程中铝和稀土元素镧 (Lu) 可以在铝合金中形成热力学稳定的  $\text{L}_{12}$  结构 ( $\text{Al}_3\text{Lu}$ ) 沉淀物或固体溶解在基体中来改善铝合金的抗蠕变性能<sup>[51]</sup>。

在组织和性能方面,  $\text{Al}_3\text{Lu}$  相力学性能良好, 成本较低。近期, Wang 等<sup>[43]</sup> 通过第一性原理计算发现,  $\text{Al}_3\text{Lu}$  与  $\text{Al}_3\text{Sc}$  在弹性力学性能方面相当, 且成本要低于 Sc, 因此可在合金应用中替代 Sc。Marquis 等<sup>[52]</sup> 研究表明在 Al-Sc 合金中添加 Lu 等稀土元素可以显著降低合金的成本, 增加反相边界的能量, 并且  $\text{Al}_3(\text{Sc}1-x\text{Lu}x)$  与  $\text{Al}_3\text{Lu}$  析出物和  $\alpha\text{-Al}$  基体的晶格参数不匹配, 从而增强了与位错的弹性相互作用, 提高了其高温抗蠕变性。Zhang 等<sup>[53]</sup> 计算研究表明  $\text{Al}_3\text{Lu}$  在 100GPa 以下具有晶格稳定性、机械稳定性和脆性。

在热力学稳定性方面, Lu 的加入形成  $\text{Al}_3\text{Lu}$ , 温度稳定范围分别是 0~1518.39K<sup>[54]</sup>。Pan 等<sup>[51]</sup> 通过计算发现  $\text{Al}_3\text{Lu}$  相的弹性常数和弹性模量随着温度的升高都呈现出缓慢的下降趋势, 且在高温下依然能保持较高的弹性模量和硬度, 证明  $\text{Al}_3\text{Lu}$  相是潜在的高温铝合金强化弥散相。

### 1.8 $\text{Al}_3\text{La}$

铝镧合金是大量块状非晶金属材料的基础, 在玻璃态下具有较低的比重, 表现出高于 980MPa (100kg/mm<sup>2</sup>) 的高强度, 同时具有良好的延展性和耐腐蚀性<sup>[55]</sup>。在熔炼铸造时形成的  $\text{Al}_3\text{La}$  在其量不大的变形过程中, 可以起到钉住晶界的作用, 抑制晶粒长大<sup>[56]</sup>。

在组织和性能方面, Liu 等<sup>[57]</sup>研究了 La 对合金组织、力学性能和热性能的影响,结果表明通过添加 La 元素,可以净化熔体,细化铝合金晶粒,有利于改善力学性能和热性能。Zheng 等<sup>[58]</sup>研究发现在 Al-Si 合金中添加 La 质量分数至 0.06% 时可以使  $\alpha$ -Al 晶粒细化,并提高延展性。

在热力学稳定性方面, La 的加入形成  $Al_3La$ , 温度稳定范围是 0~1439K<sup>[59]</sup>, 具有良好的延展性和耐腐蚀性。Zhao 等<sup>[60]</sup>研究了加入 La 的铝合金的高温性能,结果显示该合金的耐热性良好,具有良好的高温耐久性能。

## 2 $Al_3X$ 相结构和力学性能的第一性原理研究

### 2.1 晶体结构

高对称性的  $Al_3X$  立方  $L1_2$  结构及相关的四方  $DO_{22}$ 、 $DO_{23}$  结构普遍存在于 X 元素为早期过渡元素和稀土的铝合金中,图 1<sup>[33]</sup> 为  $L1_2$ 、 $DO_{22}$  和  $DO_{23}$  3 种晶体结构。IV B 族(Ti、Zr、Hf)元素与铝形成的  $Al_3X$  相通常会形成四方  $DO_{22}$  或  $DO_{23}$  结构的化合物。这些三铝化合物以其高强度、高温结构材料而受到广泛关注,其中最引人注目的是  $Al_3Ti$ , 因为它是这类材料中密度最小的<sup>[37]</sup>。然而,低对称性的四方  $DO_{22}$ 、 $DO_{23}$  结构使得这些相具有脆性。为了提高塑性,通常将它们转变为高对称性的  $L1_2$  结构,增加的独立滑移系统数量将提高韧性。例如,  $Al_3Ti$  ( $DO_{22}$ ) 可以通过合金化晚期的第 4 周期过渡元素如 Cr、Mn、Fe、Co、Ni、Cu、Zn 等转变为立方的  $L1_2$  结构<sup>[37]</sup>。同样,在  $Al_3Zr$  中加入 Li、Cr、Mn、Fe、Ni、Cu 等元素可以增加  $L1_2$  立方结构的稳定性, Cu、Zn 也可以稳定  $Al_3Hf$  的  $L1_2$  结构<sup>[61]</sup>。 $L1_2$  型  $Al_3X$  化合物由于具有高比强度和弹性模量等优异的力学性能而越来越受到关注<sup>[9, 11-12]</sup>。此外,它们还具有低密度、高熔点、优异的抗氧化性、足够的抗蠕变性、良好的热稳定性和导电性。在时效热处理过程中,许多元素是在铝合金中形成相干  $L1_2$   $Al_3X$  相的潜在添加剂。

目前,已经有许多人通过试验和计算研究了  $Al_3X$  结构的性质。析出相与基体之间的晶格参数差对于界面结构和能量至关重要<sup>[62]</sup>。因此,对三铝化合物的晶格参数  $a$  进行比较是有意义的。表 1 为目前已经得到的一些  $Al_3X$  结构参数的计算值与试验值。从图 2<sup>[11, 22, 24, 63-64]</sup> 可以看出,  $Al_3X$  析出物的形成焓均满足  $\Delta H < 0$ , 表明其结构稳定。其中,形成焓的负值越大,相稳定性越好。因此,可以看出  $Al_3Zr$  和  $Al_3Sc$  相是最稳定的。另外,在由 IV B 族(Ti、Zr 和 Hf)和铝形成的  $Al_3X$  相中,  $L1_2$  结构的稳定性最差,主要出现在  $DO_{22}$  和  $DO_{23}$  的结构中。

### 2.2 力学性能的第一性原理计算

微合金元素在热处理中形成弥散  $Al_3X$  颗粒,基体

共格或半共格,提高力学性能<sup>[4]</sup>。力学性能主要由泊松比  $\nu$ 、剪切模量  $G$ 、体积模量  $B$  和杨氏模量  $E$  决定。如泊松比  $\nu$  小于 0.26, 化合物为脆性。剪切模量  $G$  和体积模量  $B$  是抗体积变化和形状变化指标。弹性常数差 ( $C_{11}-C_{12}$ ) 和杨氏模量对力学性能也有影响。 $C_{11}-C_{12}$  和杨氏模量  $E$  值越小,塑性越好。表 2 为第一性原理计算  $Al_3X$  相力学性能。

弹性常数是用来测量晶体对外界施加应力的阻力<sup>[77-78]</sup>。表 2 分别列出了 8 种金属间化合物的弹性常数  $C_{ij}$  的计算值。对于立方晶体  $L1_2$  结构,只有 3 个独立的非零弹性常数  $C_{11}$ 、 $C_{12}$  和  $C_{44}$ <sup>[11]</sup>。立方晶体的力学稳定性标准条件为  $C_{11} > 0$ ,  $C_{44} > 0$ ,  $C_{11} > C_{12}$ ,  $C_{11} + 2C_{12} > 0$ <sup>[79]</sup>; 对于四方晶体  $DO_{22}$  和  $DO_{23}$  结构,有 6 个独立常数  $C_{11}$ 、 $C_{12}$ 、 $C_{13}$ 、 $C_{33}$ 、 $C_{44}$ 、 $C_{66}$ 。四方晶体的力学稳定性标准条件为  $C_{11} > 0$ ,  $C_{33} > 0$ ,  $C_{44} > 0$ ,  $C_{66} > 0$ ,  $C_{11} > C_{12}$ ,  $C_{11} + C_{33} - 2C_{13} > 0$ ,  $2C_{11} + C_{33} + 2C_{12} + 4C_{13} > 0$ <sup>[80]</sup>。由表 2 中数据可知,这 8 种金属间化合物均具有良好的机械稳定性。

$Al_3X$  多晶的体积模量  $B$ 、剪切模量  $G$ 、杨氏模量  $E$  和泊松比  $\nu$ , 比较数据如表 2 所示。体积模量是对固体<sup>[81]</sup>原子平均结合强度的测量,代表材料对体积变化的阻力。 $Al_3Ti$ 、 $Al_3Zr$  和  $Al_3Hf$  的体积模量较高,而  $Al_3Zr$  和  $Al_3Hf$  的值较小。因此,  $Al_3Ti$ 、 $Al_3Zr$  和  $Al_3Hf$  原子的平均结合强度较强,  $Al_3Li$  和  $Al_3La$  原子的平均结合强度较低。

剪切模量反映了剪切应力作用下对可逆变形的抗力<sup>[77]</sup>。由表 2 中可以看出  $DO_{22}$  和  $DO_{23}$  结构的化合物剪切模量大于  $L1_2$  结构的化合物,意味着它们的抵抗可逆变形能力更高。

杨氏模量是固体刚度的量度。如表 2 所示, Zr、Ti、

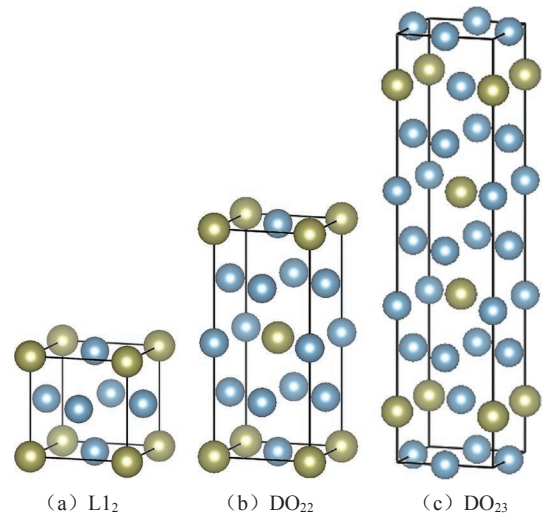


图 1  $Al_3X$  的 3 种晶体结构

Fig. 1 Three crystal structures of  $Al_3X$

表 1  $\text{Al}_3\text{X}$  结构参数的计算值与试验值  
Table 1 Calculated and experimental values of  $\text{Al}_3\text{X}$  structural parameters

$\text{Al}_3\text{X}$ 相	结构	晶格常数 $a/\text{\AA}$	晶格常数 $c/\text{\AA}$	体积模量 $B_0/\text{GPa}$	形成焓 $\Delta H/(\text{kJ} \cdot \text{mol}^{-1})$
$\text{Al}_3\text{Li}$	$\text{L1}_2^a$	4.034 <sup>[11]</sup>	—	64.35 <sup>[65]</sup>	-9.327 <sup>[11]</sup>
	$\text{L1}_2^b$	4.021 <sup>[66]</sup>	—	62.9 <sup>[66]</sup>	—
$\text{Al}_3\text{Lu}$	$\text{L1}_2^a$	4.206 <sup>[62]</sup>	—	78.54 <sup>[51]</sup>	-38.8 <sup>[61]</sup>
	$\text{L1}_2^b$	4.191 <sup>[43]</sup>	—	—	-39.44 <sup>[43]</sup>
$\text{Al}_3\text{Sc}$	$\text{L1}_2^a$	4.105 <sup>[62]</sup>	—	87.05 <sup>[65]</sup>	-44.8 <sup>[62]</sup>
	$\text{L1}_2^b$	4.106 <sup>[43]</sup>	—	91.7 <sup>[67]</sup>	-43.51 <sup>[43]</sup>
$\text{Al}_3\text{Ti}$	$\text{L1}_2^a$	3.985 <sup>[22]</sup>	—	104.27 <sup>[22]</sup>	-35.499 <sup>[22]</sup>
	$\text{L1}_2^b$	3.967 <sup>[31]</sup>	—	—	—
	$\text{DO}_{22}^a$	3.851 <sup>[20]</sup>	8.633 <sup>[20]</sup>	103.7 <sup>[20]</sup>	-38.28 <sup>[20]</sup>
	$\text{DO}_{22}^b$	3.923 <sup>[22]</sup>	8.740 <sup>[22]</sup>	—	—
$\text{Al}_3\text{Zr}$	$\text{L1}_2^a$	4.097 <sup>[63]</sup>	—	103.1 <sup>[63]</sup>	-46.418 <sup>[63]</sup>
	$\text{L1}_2^b$	4.117 <sup>[68]</sup>	—	95.6 <sup>[68]</sup>	—
	$\text{DO}_{23}^a$	4.008 <sup>[24]</sup>	17.297 <sup>[24]</sup>	102.5 <sup>[24]</sup>	-49.106 <sup>[24]</sup>
	$\text{DO}_{23}^b$	4.007 <sup>[69]</sup>	17.286 <sup>[69]</sup>	—	-49 <sup>[69]</sup>
$\text{Al}_3\text{Hf}$	$\text{L1}_2^a$	4.08 <sup>[24]</sup>	—	103.8 <sup>[24]</sup>	-36.828 <sup>[24]</sup>
	$\text{L1}_2^b$	4.05 <sup>[31]</sup>	—	—	—
	$\text{DO}_{22}^a$	3.944 <sup>[24]</sup>	8.910 <sup>[24]</sup>	105.4 <sup>[24]</sup>	-38.649 <sup>[24]</sup>
	$\text{DO}_{22}^b$	3.931 <sup>[34]</sup>	8.930 <sup>[34]</sup>	—	—
	$\text{DO}_{23}^a$	3.987 <sup>[24]</sup>	17.179 <sup>[24]</sup>	10.48 <sup>[24]</sup>	-39.632 <sup>[24]</sup>
	$\text{DO}_{23}^b$	4.010 <sup>[36]</sup>	17.653 <sup>[36]</sup>	—	—
$\text{Al}_3\text{Y}$	$\text{L1}_2^a$	4.263 <sup>[62]</sup>	—	77.25 <sup>[65]</sup>	-41.7 <sup>[62]</sup>
	$\text{L1}_2^b$	4.32 <sup>[6]</sup>	—	—	—
$\text{Al}_3\text{La}$	$\text{L1}_2^a$	4.454 <sup>[62]</sup>	—	62.65 <sup>[62]</sup>	-30.5 <sup>[62]</sup>
	$\text{L1}_2^b$	4.45 <sup>[62]</sup>	—	—	—

注: a 为计算值, b 为试验值。

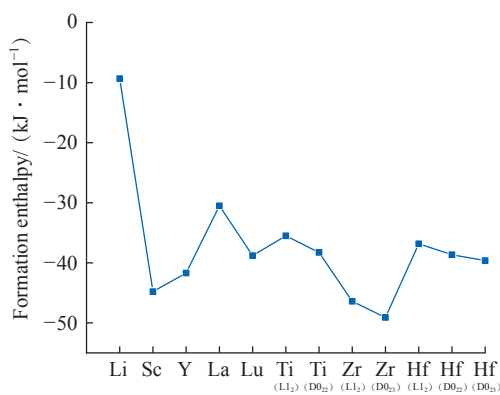


图 2  $\text{Al}_3\text{X}$  的形成焓

Fig. 2 Formation enthalpies of  $\text{Al}_3\text{X}$

Sc 和 Hf 元素形成的  $\text{Al}_3\text{X}$  相杨氏模量较高。其中  $\text{L1}_2$  结构的化合物杨氏模量明显小于其他两种结构, 所以  $\text{L1}_2$  结构的  $\text{Al}_3\text{X}$  化合物刚度最小。

$B/G$  和泊松比  $\nu$  的值决定了固体的脆性和可塑性, 也就是说,  $B/G < 1.75$  或  $\nu < 0.26$  的固体通常是脆性的, 否则为塑性, 并且泊松比与  $B/G$  值越大, 材料的塑性越好<sup>[82]</sup>。从图 3<sup>[62, 65, 74-75, 77]</sup> 中可以看出, 这 8 种化合物均呈脆性, 其中具有  $\text{L1}_2$  结构的  $\text{Al}_3\text{Li}$ 、 $\text{Al}_3\text{Ti}$ 、 $\text{Al}_3\text{Zr}$  和  $\text{Al}_3\text{Hf}$  具有较好的可塑性, 具有  $\text{DO}_{22}$  和  $\text{DO}_{23}$  结构的  $\text{Al}_3\text{X}$  化合物韧性较差。因此,  $\text{Al}_3\text{X}$  3 个结构, 由于  $\text{DO}_{22}$  和  $\text{DO}_{23}$  结构中缺乏足够数量的滑移系统,  $\text{L1}_2$  结构比  $\text{DO}_{22}$  和  $\text{DO}_{23}$  结构更具延展性<sup>[83]</sup>。

表 2 Al<sub>3</sub>X 化合物的力学性能  
Table 2 Mechanical properties of Al<sub>3</sub>X compounds

Al <sub>3</sub> X 相	结构	C <sub>11</sub> /GPa	C <sub>12</sub> /GPa	C <sub>13</sub> /GPa	C <sub>33</sub> /GPa	C <sub>44</sub> /GPa	C <sub>66</sub> /GPa	B/GPa	G/GPa	E/GPa	ν
Al <sub>3</sub> Li	L1 <sub>2</sub> <sup>[11]</sup>	129.7	29.4	—	—	37.7	—	62.8	42.2	103.5	0.236 <sup>[66]</sup>
	L1 <sub>2</sub>	125 <sup>[65]</sup>	34.6 <sup>[65]</sup>	—	—	39.2 <sup>[65]</sup>	—	62.7 <sup>[70]</sup>	42.7 <sup>[70]</sup>	104.4 <sup>[70]</sup>	0.222 <sup>[70]</sup>
Al <sub>3</sub> Lu	L1 <sub>2</sub> <sup>[62]</sup>	159.85	38.43	—	—	60.44	—	78.9	60.54	144.6	0.194
	L1 <sub>2</sub>	159.9 <sup>[62]</sup>	38.4 <sup>[62]</sup>	—	—	60.4 <sup>[62]</sup>	—	79.0 <sup>[71]</sup>	60.6 <sup>[71]</sup>	154.6 <sup>[71]</sup>	0.174 <sup>[71]</sup>
Al <sub>3</sub> Sc	L1 <sub>2</sub> <sup>[62]</sup>	181.62	41.56	—	—	69.34	—	88.24	69.62	165.4	0.188
	L1 <sub>2</sub>	182.6 <sup>[72]</sup>	45.9 <sup>[72]</sup>	—	—	68.4 <sup>[72]</sup>	—	85.9 <sup>[62]</sup>	72.2 <sup>[62]</sup>	169.1 <sup>[62]</sup>	0.172 <sup>[62]</sup>
Al <sub>3</sub> Ti	L1 <sub>2</sub> <sup>[65]</sup>	188.28	65.23	—	—	73.8	—	106.3	68.62	—	0.234
	L1 <sub>2</sub>	189.4 <sup>[65]</sup>	66.9 <sup>[65]</sup>	—	—	76.3 <sup>[65]</sup>	—	104.3 <sup>[20]</sup>	68.4 <sup>[20]</sup>	168.4 <sup>[20]</sup>	0.23 <sup>[20]</sup>
	DO <sub>22</sub> <sup>[20]</sup>	190.4	83.1	43.1	214.7	92.2	125.8	103.7	87.2	204.3	0.17
Al <sub>3</sub> Zr	L1 <sub>2</sub> <sup>[73]</sup>	187.0	61.7	—	—	74.9	—	103.5	69.7	170.7	0.225
	L1 <sub>2</sub>	182.2 <sup>[65]</sup>	67.9 <sup>[65]</sup>	—	—	72.5 <sup>[65]</sup>	—	102.6 <sup>[74]</sup>	66.7 <sup>[74]</sup>	164.5 <sup>[74]</sup>	0.233 <sup>[74]</sup>
	DO <sub>23</sub> <sup>[75]</sup>	201.54	68.61	44.13	199.82	81.59	102.85	106.6	85.7	202.8	0.183
Al <sub>3</sub> Hf	L1 <sub>2</sub> <sup>[65]</sup>	176.88	68.23	—	—	68.6	—	104.5	62.7	—	0.249
	L1 <sub>2</sub> <sup>[76]</sup>	176.6	69.2	—	—	68.5	—	105.0	62.2	155.8	0.25
	DO <sub>22</sub> <sup>[76]</sup>	193.6	87.1	47.4	217.8	92.4	123.3	107.6	86.6	204.8	0.18
	DO <sub>23</sub> <sup>[76]</sup>	205.6	67.5	54.2	200.0	82.5	100.5	106.9	81.5	195.0	0.20
Al <sub>3</sub> Y	L1 <sub>2</sub> <sup>[62]</sup>	158.6	33.2	—	—	61.6	—	75.0	61.7	145.3	0.177
Al <sub>3</sub> La	L1 <sub>2</sub> <sup>[62]</sup>	123.1	32.4	—	—	44.9	—	62.7	45.1	109.1	0.21

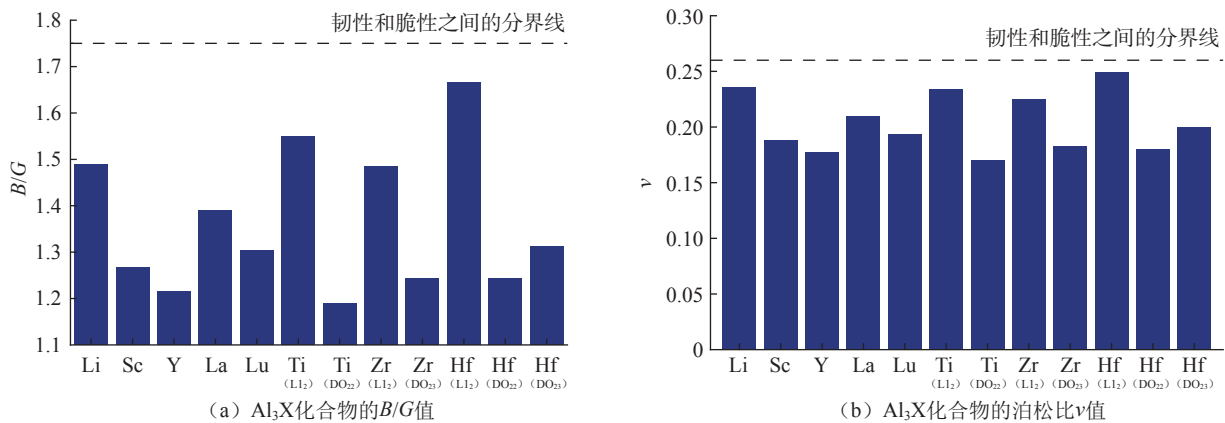


图 3 Al<sub>3</sub>X 金属间化合物的韧性 / 脆性 ( $B/G > 1.75$  和  $\nu > 0.26$  时易延展)  
Fig.3 Ductility/brittleness of Al<sub>3</sub>X intermetallic compounds ( $B/G > 1.75$  and  $\nu > 0.26$  are ductile)

### 3 Al<sub>3</sub>X 相在铝合金中的工程应用

铝合金一直是飞机结构件的主要材料,得到了广泛的工程应用。对于机身来说,强度、刚度、杨氏模量、疲劳裂纹扩展、断裂韧性和耐腐蚀性能都非常重要。这主

要是因为机翼在飞行和滑行期间承受交变载荷,易产生疲劳裂纹,通常使用添加 Zr 的 2024 铝合金,提高 Al<sub>3</sub>Zr 等含量,达到强度高韧性好的目的。尾翼是飞机的尾部,由水平尾翼、垂直尾翼、升降舵和方向舵组成。其中水平尾翼上表面和下表面通常产生弯曲应变,需要较高弹

性模量的铝合金。机翼和机身的支撑结构需要高静态强度、抗疲劳性能,因此多采用微合金化含有抑制再结晶的  $\text{Al}_3\text{Zr}$  相的 7050、7055 等,保证飞机的可靠性、安全性。同时,飞机刹车轮通常使用耐高温的 2219 铝合金,含 Sc 铝制飞机机轮由于  $\text{Al}_3\text{Sc}$  相,表现出了更高的高温力学性能,在使用过程中具有更高的可靠性。与汽车车轮不同,飞机机轮由两部分组成:内侧机轮半部和外侧机轮。制动器应用于内轮,因此在高温下需要强度。此外发动机架、风扇和压缩机的叶片同样需要更高的刚度和高温力学性能<sup>[84]</sup>。

在 Al 中加入 Li 会形成  $\text{Al}_3\text{Li}$  相,可以在降低密度的同时提高材料的强度和弹性模量,有利于提高机身、机翼和尾翼的性能; Zr、Ti、Sc、Hf 等元素加入 Al 合金形成的  $\text{Al}_3\text{X}$  相,不但能够提高塑性,而且能够细化晶粒,提高模量,有利于提高 Al 合金在飞机中的应用。美国普惠航空发动机公司与美国铝业合作,将铝锂合金应用于航空发动机冷端风扇叶片,能够减重 15% 以上,节约燃料消耗。Hf、Lu 的加入,有利于形成  $\text{Al}_3\text{Hf}$ 、 $\text{Al}_3\text{Lu}$  等高温稳定相,可提升耐热强度,有利于飞机机轮、发动机架、风扇、压缩机叶片等零部件减重。

## 4 结论

通过综述近年来的一些文献发现,铝与合金元素形成的  $\text{Al}_3\text{X}$  相能够大幅提高铝合金力学性能,并且均具有良好的机械稳定性。其中  $\text{Al}_3\text{Ti}$ 、 $\text{Al}_3\text{Zr}$  和  $\text{Al}_3\text{Hf}$  原子平均结合强度最强。 $\text{DO}_{22}$  和  $\text{DO}_{23}$  晶体结构的化合物抵抗可逆变形能力高于  $\text{L}_{12}$  结构的化合物, $\text{L}_{12}$  结构的  $\text{Al}_3\text{X}$  化合物刚度最小。

(1) Li 的加入形成  $\text{Al}_3\text{Li}$ , 温度稳定范围为 0~800K, 降低密度的同时提高强度和弹性模量。

(2) Ti 的加入形成  $\text{L}_{12}$  和  $\text{DO}_{22}$  结构的  $\text{Al}_3\text{Ti}$ , 温度稳定范围分别为 0~495K 和 495~1380K, 不仅可用于耐高温铝合金, 而且拥有高的弹性模量。

(3) Hf 的加入形成  $\text{L}_{12}$ 、 $\text{DO}_{22}$  和  $\text{DO}_{23}$  结构的  $\text{Al}_3\text{Hf}$ , 稳定范围分别为 0~650K、650~750K 和 750~1100K, 不仅高温强度高, 而且密度低。

(4) Zr 的加入形成  $\text{L}_{12}$  和  $\text{DO}_{23}$  结构的  $\text{Al}_3\text{Zr}$ , 温度稳定范围分别为 0~590K 和 0~1853K, 不仅能够提升高温力学性能, 细化晶粒, 而且能够阻止再结晶, 提高塑性。

(5) Sc、Y 等元素的加入形成  $\text{Al}_3\text{Sc}$  和  $\text{Al}_3\text{Y}$ , 温度稳定范围分别为 0~1320K 和 0~1253K, 不仅能够促进高温力学性能提高, 而且能够细化晶粒。

(6) La 和 Lu 的加入形成  $\text{Al}_3\text{La}$  和  $\text{Al}_3\text{Lu}$ , 温度稳定范围分别为 0~1518.39K 和 0~1439K, 不仅可以提高高

温强度, 而且硬度高。

$\text{L}_{12}$  型  $\text{Al}_3\text{X}$  化合物是铝合金中常见的强化相, 具有高比强度和弹性模量等优异的力学性能。然而, 单一元素在微合金化的同时也会对材料造成不利的影 响。例如 Zr、Hf 和 Ti 的加入会形成低对称性的  $\text{DO}_{22}$  和  $\text{DO}_{23}$  结构, 该相具有脆性。因此, 微合金元素的组合添加形成  $\text{L}_{12}$  结构将是提升铝合金性能的有效途径。

## 参考文献

- [1] SUN W, ZHU Y, MARCEAU R, et al. Precipitation strengthening of aluminum alloys by room-temperature cyclic plasticity[J]. *Science*, 2019, 363(6430): 972-975.
- [2] GALEVSKY G V, RUDNEVA V V, ALEKSANDROV V S. Current state of the world and domestic aluminium production and consumption[J]. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2018, 411: 012017.
- [3] MONDOL S, ALAM T, BANERJEE R, et al. Development of a high temperature high strength Al alloy by addition of small amounts of Sc and Mg to 2219 alloy[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2017, 687: 221-231.
- [4] CAHN R W. Combining metals and sciences: Ways of investigating intermetallics[J]. *Intermetallics*, 1998, 6(7/8): 563-566.
- [5] SAHA S, TODOROVA T Z, ZWANZIGER J W. Temperature dependent lattice misfit and coherency of  $\text{Al}_3\text{X}$  (X=Sc, Zr, Ti and Nb) particles in an Al matrix[J]. *Acta Materialia*, 2015, 89: 109-115.
- [6] KNIPLING K E, DUNAND D C, SEIDMAN D N. Criteria for developing castable, creep-resistant aluminum-based alloys—A review[J]. *Zeitschrift Für Metallkunde*, 2006, 97(3): 246-265.
- [7] RAJENDRAN V, MUTHU KUMARAN S, JAYAKUMAR T, et al. Microstructure and ultrasonic behaviour on thermal heat-treated Al-Li 8090 alloy[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2009, 478(1/2): 147-153.
- [8] EL-ATY A A, XU Y, GUO X Z, et al. Strengthening mechanisms, deformation behavior, and anisotropic mechanical properties of Al-Li alloys: A review[J]. *Journal of Advanced Research*, 2018, 10: 49-67.
- [9] OVRI H, LILLEODDEN E T. New insights into plastic instability in precipitation strengthened Al-Li alloys[J]. *Acta Materialia*, 2015, 89: 88-97.
- [10] LAVEROCK J, DUGDALE S B, ALAM M A, et al. Fermi surface of an important nanosized metastable phase:  $\text{Al}_3\text{Li}$ [J]. *Physical Review Letters*, 2010, 105(23): 236401.
- [11] TIAN J Z, ZHAO Y H, HOU H, et al. The effect of alloying elements on the structural stability, mechanical properties, and Debye temperature of  $\text{Al}_3\text{Li}$ : A first-principles study[J]. *Materials*, 2018, 11(8): 1471.
- [12] PLETCHER B A, WANG K G, GLICKSMAN M E. Experimental, computational and theoretical studies of  $\delta'$  phase coarsening in Al-Li alloys[J]. *Acta Materialia*, 2012, 60(16): 5803-5817.
- [13] MOGUCHEVA A, BABICH E, KAIBYSHEV R. Microstructure and mechanical properties of an Al-Mg-Sc-Zr alloy subjected to extensive cold rolling[J]. *ICAA13 Pittsburgh*, 2016, 6(11): 254.

- [14] DURSUN T, SOUTIS C. Recent developments in advanced aircraft aluminium alloys[J]. *Materials & Design* (1980–2015), 2014, 56: 862–871.
- [15] WANG S, ZHANG C, LI X, et al. First-principle investigation on the interfacial structure evolution of the  $\delta'/\theta'/\delta'$  composite precipitates in Al–Cu–Li alloys[J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2020, 58: 205–214.
- [16] MCALISTER A J. The Al–Li (aluminum–lithium) system[J]. *Bulletin of Alloy Phase Diagrams*, 1982, 3(2): 177–183.
- [17] BALDUCCI E, CESCINI L, MESSIERI S, et al. Thermal stability of the lightweight 2099 Al–Cu–Li alloy: Tensile tests and microstructural investigations after overaging[J]. *Materials & Design*, 2017, 119: 54–64.
- [18] MA S M, WANG Y S, WANG X M. The in situ formation of  $Al_3Ti$  reinforcing particulates in an Al–7wt% Si alloy and their effects on mechanical properties[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, 792: 365–374.
- [19] MILMAN Y V, MIRACLE D B, CHUGUNOVA S I, et al. Mechanical behaviour of  $Al_3Ti$  intermetallic and  $L1_2$  phases on its basis[J]. *Intermetallics*, 2001, 9(9): 839–845.
- [20] LI J, ZHANG M, LUO X. Theoretical investigations on phase stability, elastic constants and electronic structures of  $DO_{22}$ – and  $L1_2$ – $Al_3Ti$  under high pressure[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2013, 556: 214–220.
- [21] PRAKASH U, BUCKLEY R A, JONES H, et al.  $DO_{22}$  to  $L1_2$  transition in intermetallic systems[J]. *Journal of Materials Science*, 1992, 27(8): 2001–2004.
- [22] WANG J S, HORSFIELD A, LEE P D, et al. Heterogeneous nucleation of solid Al from the melt by  $Al_3Ti$ : Molecular dynamics simulations[J]. *Physical Review B*, 2010, 82(14): 144203.
- [23] WANG J S, HORSFIELD A, SCHWINGENSCHLÖGL U, et al. Heterogeneous nucleation of solid Al from the melt by  $TiB_2$  and  $Al_3Ti$ : An ab initio molecular dynamics study[J]. *Physical Review B*, 2010, 82(18): 184203.
- [24] GHOSH G, ASTA M. First-principles calculation of structural energetics of Al–TM (TM=Ti, Zr, Hf) intermetallics[J]. *Acta Materialia*, 2005, 53(11): 3225–3252.
- [25] HAN S Z, RHO B S, LEE H M, et al. Effect of alloyed Ti: Zr ratio on phase stability of Al66Mn9 (Ti, Zr) 25 intermetallic compounds[J]. *Intermetallics*, 1996, 4(3): 245–249.
- [26] CHAO Z L, ZHANG L C, JIANG L T, et al. Design, microstructure and high temperature properties of in situ  $Al_3Ti$  and nano- $Al_2O_3$  reinforced 2024Al matrix composites from Al– $TiO_2$  system[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, 775: 290–297.
- [27] ROBSON J D, PRANGNELL P B. Modelling  $Al_3Zr$  dispersoid precipitation in multicomponent aluminium alloys[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2003, 352(1/2): 240–250.
- [28] MOON K I, KIM S C, LEE K S. A study on the microstructure of  $DO_{23}$ ,  $Al_3Zr$  and  $L1_2$  (Al+12.5 at.% Cu) 3Zr intermetallic compounds synthesized by PBM and SPS[J]. *Intermetallics*, 2002, 10(2): 185–194.
- [29] POZDNIAKOV A V, BARKOV R Y, PROSVIRYAKOV A S, et al. Effect of Zr on the microstructure, recrystallization behavior, mechanical properties and electrical conductivity of the novel Al–Er–Y alloy[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2018, 765: 1–6.
- [30] KNIPLING K E, DUNAND D C, SEIDMAN D N. Precipitation evolution in Al–Zr and Al–Zr–Ti alloys during isothermal aging at 375–425 °C[J]. *Acta Materialia*, 2008, 56(1): 114–127.
- [31] SRINIVASAN S, DESCH P B, SCHWARZ R B. Metastable phases in the  $Al_3X$  (X=Ti, Zr, and Hf) intermetallic system[J]. *Scripta Metallurgica et Materialia*, 1991, 25(11): 2513–2516.
- [32] WANG Y, ZHANG Z, WU R Z, et al. Ambient-temperature mechanical properties of isochronally aged 1420–Sc–Zr aluminum alloy[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2019, 745: 411–419.
- [33] SCHUBERT K, MEISSNER H G, ROSSTEUTSCHER W. Einige strukturdaten metallischerphasen (11)[J]. *Naturwissenschaften*, 1964, 51(21): 507.
- [34] COLINET C, PASTUREL A. Phase stability and electronic structure of the  $HfAl_3$  compound[J]. *Physical Review B*, 2001, 64(20): 205102.
- [35] KUMAR K S. Ternary intermetallics in aluminiumrefractory metal–X systems (X=V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn)[J]. *International Materials Reviews*, 1990, 35(1): 293–328.
- [36] HALLEM H, FORBORD B, MARTHINSEN K. An investigation of dilute Al–Hf and Al–Hf–Si alloys[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2004, 387–389: 940–943.
- [37] SENKOV O N, SENKOVA S V, WOODWARD C. Effect of aluminum on the microstructure and properties of two refractory high-entropy alloys[J]. *Acta Materialia*, 2014, 68: 214–228.
- [38] WU H, WEN S P, GAO K Y, et al. Effect of Er additions on the precipitation strengthening of Al–Hf alloys[J]. *Scripta Materialia*, 2014, 87: 5–8.
- [39] WANG T, JIN Z P, ZHAO J C. Thermodynamic assessment of the Al–Hf binary system[J]. *Journal of Phase Equilibria*, 2002, 23(5): 416–423.
- [40] MARQUIS E A, SEIDMAN D N. Nanoscale structural evolution of  $Al_3Sc$  precipitates in Al (Sc) alloys[J]. *Acta Materialia*, 2001, 49(11): 1909–1919.
- [41] RADMILOVIC V, OPHUS C, MARQUIS E A, et al. Highly monodisperse core-shell particles created by solid-state reactions[J]. *Nature Materials*, 2011, 10(9): 710–715.
- [42] KRUG M E, MAO Z G, SEIDMAN D N, et al. Comparison between dislocation dynamics model predictions and experiments in precipitation-strengthened Al–Li–Sc alloys[J]. *Acta Materialia*, 2014, 79: 382–395.
- [43] WANG Y, MENG Y N, WANG J S, et al. Mechanical properties of defective  $L1_2$ – $Al_3X$  (X=Sc, Lu) phase: A first-principles study[J]. *Journal of Rare Earths*, 2021, 39(2): 217–224.
- [44] WIRTZ T, LÜTJERING G, GYSLER A, et al. Fatigue properties of the aluminium alloys 6013 and Al–Mg–Sc[J]. *Materials Science Forum*, 2000, 331–337: 1489–1494.
- [45] RAGHAVAN V. Al–Sc–Zn (aluminum–scandium–zinc)[J]. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 2009, 30(2): 197–198.
- [46] LÜ Y, WANG Q D, ZENG X Q, et al. Effects of rare earths on the microstructure, properties and fracture behavior of Mg–Al alloys[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 1999, 278(1/2): 66–76.
- [47] DUAN Y H, SUN Y, PENG M J, et al. Ab-initio investigations

on elastic properties in  $L1_2$  structure  $Al_3Sc$  and  $Al_3Y$  under high pressure[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2014, 585: 587–593.

[48] ZHANG Y Z, GAO H Y, KUAI Y, et al. Effects of Y additions on the precipitation and recrystallization of Al–Zr alloys[J]. *Materials Characterization*, 2013, 86: 1–8.

[49] 韩剑, 戴起勋, 李桂荣, 等. 稀土钇对 7055 铝合金铸态组织的影响[J]. *材料工程*, 2009, 37(4): 67–70.

HAN Jian, DAI Qixun, LI Guirong, et al. Effect of addition of yttrium on as-cast microstructure of 7055 aluminum alloy[J]. *Journal of Materials Engineering*, 2009, 37(4): 67–70.

[50] PREDEL B. Al–Y (Aluminum–Yttrium)[M]. Berlin: Springer, 1991.

[51] PAN R K, WANG H C, SHI T T, et al. Thermal properties and thermoelasticity of  $L1_2$  ordered  $Al_3RE$  (RE=Er, Tm, Yb, Lu) phases: A first-principles study[J]. *Materials & Design*, 2016, 102: 100–105.

[52] MARQUIS E A, DUNAND D C. Model for creep threshold stress in precipitation-strengthened alloys with coherent particles[J]. *Scripta Materialia*, 2002, 47(8): 503–508.

[53] ZHANG X D, JIANG W. Lattice stabilities, mechanical and thermodynamic properties of  $Al_3Tm$  and  $Al_3Lu$  intermetallics under high pressure from first-principles calculations[J]. *Chinese Physics B*, 2016, 25(2): 342–351.

[54] BENMECHRI A, AMER A S. Linking Ab initio–calphad for the assessment of the aluminum–lutetium system[J]. *International Refereed Journal of Engineering and Science*, 2017, 6(6): 109–112.

[55] HE Y, LIU J H, QIU S T, et al. Microstructure evolution and mechanical properties of Al–La alloys with varying La contents[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2017, 701: 134–142.

[56] ZHANG L, LU M, LI C. Influence of lanthanum on microstructure and properties of 8079 aluminum alloy[J]. *Journal of Qingdao University of Science and Technology (Natural Science Edition)*, 2017, 38(Z1): 135–138.

[57] LIU Q Y, WANG F, QIU X P, et al. Effects of La and Ce on microstructure and properties of SiC/Al composites[J]. *Ceramics International*, 2020, 46(1): 1232–1235.

[58] ZHENG Q J, ZHANG L L, JIANG H X, et al. Effect mechanisms of micro-alloying element La on microstructure and mechanical properties of hypoeutectic Al–Si alloys[J]. *Journal of Materials Science & Technology*, 2020, 47: 142–151.

[59] ZAITSEV A I, ZAITSEVA N E, MAL'TSEV V V, et al. Thermodynamic study of crystalline aluminum-lanthanum alloys[J]. *Doklady Physical Chemistry*, 2004, 395(1–3): 67–71.

[60] ZHAO B B, ZHAN Y Z, TANG H Q. High-temperature properties and microstructural evolution of Al–Cu–Mn–RE (La/Ce) alloy designed through thermodynamic calculation[J]. *Materials Science and Engineering: A*, 2019, 758: 7–18.

[61] MOON K I, LEE S H, KIM S J. The effect of Cu and Zn on the phase stability of  $L1_2$   $Al_3Hf$  intermetallic compound synthesized by mechanical alloying[J]. *Intermetallics*, 2002, 10(8): 793–800.

[62] TAO X M, OUYANG Y F, LIU H S, et al. First-principles calculations of the thermodynamic and elastic properties of the  $L1_2$ -based  $Al_3RE$  (RE=Sc, Y, La–Lu)[J]. *International Journal of Materials Research*, 2008, 99(6): 582–588.

[63] GHOSH G, VAYNMAN S, ASTA M, et al. Stability and

elastic properties of  $L1_2$ - (Al, Cu)  $3$  (Ti, Zr) phases: Ab initio calculations and experiments[J]. *Intermetallics*, 2007, 15(1): 44–54.

[64] ANGERS L M, CHEN Y C, FINE M E, et al. Rational design of high temperature aluminum alloys[J]. *Aluminum Alloys: Their Physical and Mechanical Properties*, 1986, 1: 321.

[65] TIAN T, WANG X F, LI W. Ab initio calculations on elastic properties in  $L1_2$  structure  $Al_3X$  and  $X_3Al$ -type (X=transition or main group metal) intermetallic compounds[J]. *Solid State Communications*, 2013, 156: 69–75.

[66] MAO Z, CHEN W, SEIDMAN D N, et al. First-principles study of the nucleation and stability of ordered precipitates in ternary Al–Sc–Li alloys[J]. *Acta Materialia*, 2011, 59(8): 3012–3023.

[67] WOODWARD C, ASTA M, KRESSE G, et al. Density of constitutional and thermal point defects in  $L1_2$   $Al_3Sc$ [J]. *Physical Review B*, 2001, 63(9): 094103.

[68] YANG T X, WEI M Z, DING Z Y, et al. First-principle calculations on the Al/ $L1_2$ - $Al_3Zr$  heterogeneous nucleation interface[J]. *Calphad*, 2020, 69: 101768.

[69] KEMATICK R J, FRANZEN H F. Thermodynamic study of the zirconium–aluminum system[J]. *Journal of Solid State Chemistry*, 1984, 54(2): 226–234.

[70] YU H, DUAN X, MA Y, et al. First principles study of Al–Li intermetallic compounds[J]. *Chinese Journal of Chemical Physics*, 2012, 25(6): 659–665.

[71] ZHANG X D, JIANG W. First-principles investigations on vibrational, thermodynamic, mechanical properties and thermal conductivity of  $L1_2Al_3X$  (X=Sc, Er, Tm, Yb) intermetallics[J]. *Physica Scripta*, 2015, 90(6): 065701.

[72] HYLAND R W Jr, STIFFLER R C Jr. Determination of the elastic constants of polycrystalline  $Al_3Sc$ [J]. *Scripta Metallurgica et Materialia*, 1991, 25(2): 473–477.

[73] BAKARE F, BABALOLA M I, IYORZOR B E. The role of alloying elements on the structural, mechanical and thermodynamic properties of  $Al_3X$  binary alloy system (X=Mg, Sc and Zr): First principle calculations[J]. *Materials Research Express*, 2017, 4(11): 116502.

[74] HU H, ZHAO M Q, WU X Z, et al. The structural stability, mechanical properties and stacking fault energy of  $Al_3Zr$  precipitates in Al–Cu–Zr alloys: HRTEM observations and first-principles calculations[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2016, 681: 96–108.

[75] HUANG H Q, WANG W C, YUAN Q H, et al. Pressure-dependence of mechanical and thermodynamic properties of  $Al_3Zr$  in Al–Li alloys from first-principles calculations[J]. *Philosophical Magazine*, 2019, 99(8): 971–991.

[76] DUAN Y N, WU Z Y, HUANG B, et al. Phase stability and anisotropic elastic properties of the Hf–Al intermetallics: A DFT calculation[J]. *Computational Materials Science*, 2015, 110: 10–19.

[77] WANG J H, LU Y, ZHANG X L, et al. The elastic behaviors and theoretical tensile strength of  $\gamma$ -TiAl alloy from the first principles calculations[J]. *Intermetallics*, 2018, 101: 1–7.

[78] PAN Y, LI Y Q, ZHENG Q H. Influence of Ir concentration on the structure, elastic modulus and elastic anisotropy of NbIr based compounds from first-principles calculations[J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2019, 789: 860–866.

(下转第 85 页)

下适当提高每齿进给量。而切深与切宽的用量应该统筹考虑机床所能提供的扭矩与机床刚度。

### 参考文献

- [1] 朱知寿. 新型航空高性能钛合金材料技术研究与发展 [M]. 北京: 航空工业出版社, 2013.
- ZHU Zhishou. Research and development of new-brand titanium alloys of high performance for aeronautical applications[M]. Beijing: Aviation Industry Press, 2013.
- [2] PETERS M, LEYENS C. Fabrication of titanium alloys[M]// Titanium and Titanium Alloys. Weinheim, FRG: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2005.
- [3] BOYER R R. Aerospace applications of beta titanium alloys[J]. Journal of Metals, 1994, 46(7): 20–23.
- [4] BANIA P J. Beta titanium alloys and their role in the titanium industry[J]. Journal of Metals, 1994, 46(7): 16–19.
- [5] 陈玮, 刘运玺, 李志强. 高强 $\beta$ 钛合金的研究现状与发展趋势 [J]. 航空材料学报, 2020, 40(3): 63–76.
- CHEN Wei, LIU Yunxi, LI Zhiqiang. Research status and development trend of high-strength  $\beta$  titanium alloys[J]. Journal of Aeronautical Materials, 2020, 40(3): 63–76.
- [6] ZLATIN N, FIELD M. Procedures and precautions in machining titanium alloys[M]//Titanium Science and Technology. Boston: Springer, 1973.
- [7] RASHID R R, SUN S, WANG G, et al. Machinability of a near beta titanium alloy[J]. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal of Engineering Manufacture, 2011, 225(12): 2151–2162.
- [8] DONACHIE M J. Titanium[M]. Geauga: ASM International, 2000.
- [9] RASHID R R, SUN S, WANG G, et al. An investigation of cutting forces and cutting temperatures during laser-assisted machining of the Ti–6Cr–5Mo–5V–4Al beta titanium alloy[J]. International Journal of Machine Tools and Manufacture, 2012, 63: 58–69.
- [10] SUN Y, HUANG B, PULEO D A, et al. Enhanced machinability of Ti–5553 alloy from cryogenic machining: Comparison with MQL and flood-cooled machining and modeling[J]. Procedia CIRP, 2015, 31: 477–482.
- [11] 易湘斌, 焦爱胜, 常文春, 等. 不同冷却润滑条件下 TB6 钛合金高速铣削切削力实验研究 [J]. 润滑与密封, 2017, 42(9): 92–97.
- YI Xiangbin, JIAO Aisheng, CHANG Wenchun, et al. Research on cutting force of high speed milling TB6 in different cooling lubricating conditions[J]. Lubrication Engineering, 2017, 42(9): 92–97.
- [12] 李亮. 钛合金的高速粗加工——大进给铣削技术 [J]. 航空制造技术, 2014, 57(12): 32–35.
- LI Liang. High speed rough machining–high feed milling of titanium alloys[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2014, 57(12): 32–35.
- [13] 史琦. TC21 钛合金高性能铣削工艺基础研究 [D]. 南京: 南京航空航天大学, 2013.
- SHI Qi. Research on high performance milling of titanium alloy TC21[D]. Nanjing: Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2013.
- [14] ALTINTAS Y. Manufacturing automation[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 2009.
- [15] ABELE E, HASENFRATZ C, BÜCKER M. Modeling of process forces with respect to technology parameters and tool wear in milling Ti6Al4V[J]. Production Engineering, 2017, 11(3): 285–294.
- [16] 李亮. 钛合金高速铣削机理及其工艺研究 [D]. 南京: 南京航空航天大学, 2004.
- LI Liang. Study on the mechanism and process of high speed milling of titanium alloys[D]. Nanjing: Nanjing University of Aeronautics and Astronautics, 2004.
- [17] EZUGWU E O. High speed machining of aero-engine alloys[J]. Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering, 2004, 26: 1–11.
- [18] BOYER R R, PORTER W J, BARTA E R, et al. Microstructure/properties relationships in Ti–15V–3Cr–3Al–3Sn high strength castings[C]//Proceedings of the Microstructure/Property Relationships in Titanium Aluminides and Alloy. Pittsburgh: The Minerals, Metals and Materials Society, 1991.

通讯作者: 李亮, 教授, 博士, 研究方向为机械制造、金属切削、微细制造。

(责编 阳光)

(上接第 77 页)

- [79] MOUHAT F, COUDERT F X. Necessary and sufficient elastic stability conditions in various crystal systems[J]. Physical Review B, 2014, 90(22): 224104.
- [80] WALLACE D C. Thermodynamics of crystals[J]. American Journal of Physics, 1972, 40(11): 1718–1719.
- [81] HAINES J, LÉGER J M, BOCQUILLON G. Synthesis and design of superhard materials[J]. Annual Review of Materials Research, 2001, 31(1): 1–23.
- [82] PUGH S F. XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals[J]. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 1954, 45(367): 823–843.
- [83] PETTIFOR D G, COTTRELL A H. Electron theory in alloy design[M]. London: The Institute of Materials Minerals and Mining, 1992.
- [84] STARKE E A Jr, STALEY J T. Application of modern aluminium alloys to aircraft[M]//Fundamentals of aluminium metallurgy. Amsterdam: Elsevier, 2011.

通讯作者: 王俊升, 教授, 研究方向为集成计算材料工程, 专注于航空轻质铝合金、镁合金设计、表征和应用的基础研究。

(责编 阳光)