

真空压铸 Mg-7Al(-2Sn)合金组织性能研究 及第一性原理计算

王 峰¹, 孙士杰¹, 毛萍莉¹, 刘 正¹, 安帅杰²

(1. 沈阳工业大学, 辽宁 沈阳 110870)

(2. 辽宁装备制造职业技术学院, 辽宁 沈阳 110161)

摘 要: 利用光学显微镜、扫描电子显微镜、能谱分析、X射线衍射、差热分析及拉伸试验比较分析了 2% Sn (质量分数) 对真空压铸和固溶态 Mg-7Al 合金的组织与力学性能的影响。结果表明, 向 Mg-7Al 合金中添加 2% Sn 元素后, 能够细化晶粒, 抑制 Mg₁₇Al₁₂ 相的生长, 在组织中形成新相 Mg₂Sn, 其以颗粒状弥散分布于基体中; 固溶处理后 Mg-7Al 合金中第二相数目明显减少, AT72 合金基体中仍存在细小颗粒状 Mg₂Sn。由于合金组织细化、第二相数量的增加, Mg₁₇Al₁₂ 相形貌改善以及具有良好热力学性质的 Mg₂Sn 相的析出的综合作用, 使得 AT72 合金表现出比 Mg-7Al 合金更好的室温及高温拉伸力学性能; 固溶处理后的 AT72 合金表现出更为优异的力学性能, 主要强化机制包括: 固溶强化和弥散强化。此外, 利用第一性原理计算从微观理论角度探讨了 Sn 合金化 Mg-7Al 合金力学性能改善的原因。

关键词: Mg-Al 合金; 合金化; 显微组织; 力学性能; 第一性原理

中图分类号: TG146.2⁺2

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2015)07-1668-06

镁合金作为最轻的金属结构材料, 被广泛应用于汽车、航空和电子器材等领域^[1-3]。Mg-Al 系合金是目前应用最为广泛的压铸镁合金, 但由于其主要强化相 Mg₁₇Al₁₂ 相在使用温度超过 120 °C 时易发生粗化和软化, 无法钉扎晶界和阻碍位错的滑移, 导致合金高温性能较差, 在一定程度上限制了其应用范围^[4,5]。近年来研究表明, 通过加入合金化元素, 例如 Ca、Sr、Sb、Si 和 RE 元素, 可以提高 Mg-Al 系合金高温力学性能^[6-10]。然而, 在压铸 AZ91 中添加 Ca 元素时形成的拉夫斯相 Al₂Ca 嵌入到 Mg₁₇Al₁₂ 相中导致合金室温抗拉强度下降^[6], Sb 元素的添加导致合金的塑性降低^[8], 而添加 Si 元素易形成粗大的 Mg₂Si 相导致合金的综合力学性能下降^[9], RE 元素的添加则会造成合金成本的提高。

由于 Sn 元素具有低熔点和低成本的特点, 其作为合金化元素添加到镁合金中以提高合金的力学性能已经引起广泛地关注^[11-15]。Turen^[11]研究了 Sn 元素的添加对 AZ91 合金的显微组织、力学性能和铸造性能的影响, 发现添加 0.5% Sn 元素不仅提高了合金的强度和塑性, 而且合金流动性及热裂敏感性也得到了改善。Yang^[12]等人发现向 ZA84 合金加入 1.0% Sn 元素可在

组织中形成具有高熔点的 Mg₂Sn 相, 其在高温变形过程中能够阻碍位错的滑移和攀移, 从而提高合金的高温力学性能和蠕变性能。目前, 关于 Sn 合金化镁合金的研究大多集中在冷却速度较低的金属型铸造条件, 而对于冷却速度较快的压力铸造 Sn 合金化镁合金的研究较少。为此, 本研究在 Mg-7Al 合金基础上, 采用真空压铸成形, 研究了 2% Sn 元素对真空压铸 Mg-7Al 合金组织及力学性能的影响, 并研究了固溶处理对 Mg-7Al(-2Sn)合金组织性能的影响, 此外, 还利用第一性原理计算从微观理论角度揭示了 Sn 元素的添加对 Mg-7Al 合金力学性能影响的原因。

1 实 验

将 Mg-7Al 和 Mg-7Al-2Sn (AT72) 合金置于坩埚电阻炉内, 并在 SF₆+N₂ 的混合保护气氛下熔化, 熔化温度为 700 °C, 待合金熔化后在 6500 kN 全自动冷室压铸机和真空压铸设备 (TOYO, BD-350V5) 上将合金压铸成直径为 6 mm 的拉伸试样。该真空系统可以保证压铸充型过程中型腔真空度在 3 ms 内达到 5 kPa。压铸工艺参数为模具温度 180~200 °C, 浇注温度 690~700 °C, 压射速度 3 m/s。真空压铸试样如图 1 所示。

收稿日期: 2014-07-15

基金项目: 辽宁省博士启动基金 (20131083); 辽宁省高校创新团队支持计划 (LT2013004)

作者简介: 王 峰, 男, 1978 年生, 博士, 副教授, 沈阳工业大学材料科学与工程学院, 辽宁 沈阳 110870, 电话: 024-25496616, E-mail: wf9709@126.com

压铸后的一部分拉伸试样进行固溶处理 (400 °C, 20 h)。在 WDW-100 万能试验机上进行室温和高温 (200 °C) 拉伸力学性能试验, 拉伸速度为 3 mm/min, 试验采用每组测试 3 根试样, 取其平均值作为测试结果。高温拉伸时, 试样在 200 °C 下保温 10 min 以确保其温度分布的均匀性。金相试样经研磨、抛光后用腐蚀液 (4% 硝酸乙醇溶液) 腐蚀试样表面 3~5 s, 利用 OLYMPUS BX60 型金相显微镜观察试样的显微组织, 并在带有 EDS 能谱的日本 Hitachi S-3400N 型扫描电镜上进行微区成分分析。利用金相分析软件测定合金组织中第二相的体积分数。利用型号为 D/maxIII A 的 X 射线衍射仪分析确定合金中的相组成。差热分析实验是在型号为 METTLER TOLEDO DSC1 差热分析仪上进行, 温度范围为 30~700 °C, 加热速度为 10 °C/min。

采用基于密度泛函理论的第一性原理平面波赝势方法的 CASTEP 软件包进行计算^[16]。交换关联函数采取广义梯度近似(GGA)中的 PBE 形式^[17]。交换关联能的计算在最小化的快速傅立叶变换(FFT)网格上进行, 采用对正则条件进行弛豫的超软(UltraSoft)赝势作为平面波基集^[18], 并利用自洽迭代(SCF)方法进行计算。优化时, 体系总能量的收敛值为 5.0×10^{-6} eV/atom, 每个原子上的力低于 0.001 eV/nm, 动能截断点设置为 380 eV, K 点网络设置为 $6 \times 6 \times 6$ 。

2 结果与讨论

2.1 Sn 元素对 Mg-7Al 合金显微组织的影响

图 2 为不同状态下真空压铸 Mg-7Al 和 AT72 合金的 XRD 图谱。Mg-7Al 合金是由 α -Mg 和 $Mg_{17}Al_{12}$ 相所组成的, 而 AT72 合金除了含有 α -Mg 和 $Mg_{17}Al_{12}$ 相外, 组织中形成新相 Mg_2Sn 相, 并且 AT72 合金中 $Mg_{17}Al_{12}$ 相的峰值强度降低, 这说明添加 Sn 元素可以抑制 $Mg_{17}Al_{12}$ 相的形成。图 3 为 2 种合金的光学显微照片。从显微组织中可以看出添加 Sn 元素之后, 合金晶粒得到一定的细化, 但组织中仍存在着较大的晶粒。

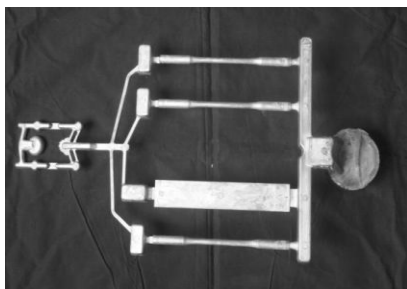


图 1 真空压铸试件

Fig.1 Vacuum die-cast specimens

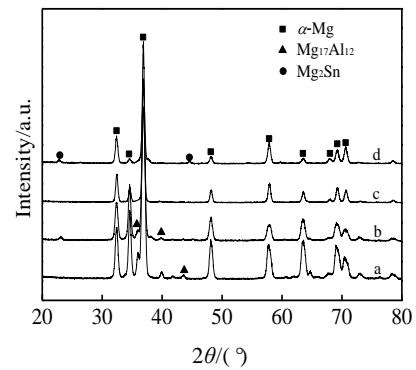


图 2 合金的 XRD 图谱

Fig.2 XRD patterns of the alloys: (a) Mg-7Al, (b) AT72, (c) Mg-7Al-T4, and (d) AT72-T4

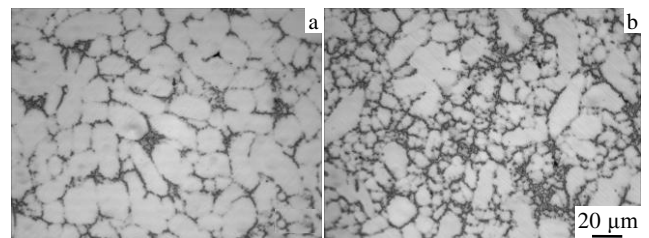


图 3 合金的显微组织

Fig.3 Microstructures of the alloys: (a) Mg-7Al and (b) AT72

与金属型铸造镁合金组织相比^[13], 由于压铸冷却速度较快, 使得合金组织更为细小, Mg-7Al 合金的平均晶粒尺寸为 40~50 μm , 而 AT72 合金的平均晶粒尺寸为 20~30 μm 。为了进一步观察合金组织中相形貌的变化, 对 2 种合金进行了 SEM 与 EDS 分析(图 4)。在 Mg-7Al 合金组织中 α -Mg 基体上分布着较粗大的条状 $Mg_{17}Al_{12}$ 相, 且 $Mg_{17}Al_{12}$ 相的宽度尺寸可达到 5 μm (图 4a, 4c 所示); 在 AT72 合金组织中灰色条状的 $Mg_{17}Al_{12}$ 相细化(宽度尺寸为 2~3 μm), 且分布着一些白色颗粒状的 Mg_2Sn 相(图 4b, 4d 所示)。组织中 Mg_2Sn 相以 2 种形态存在, 一种是单独存在的颗粒相(图 4b 中 Mg_2Sn (I), 直径约为 2 μm), 另外一种是在 $Mg_{17}Al_{12}$ 相中的细小颗粒相(图 4b 中 Mg_2Sn (II), 直径小于 1 μm)。2 种形态的 Mg_2Sn 相的直径尺寸均小于金属型铸造中 Mg_2Sn 相的尺寸^[12], 这主要是由于压铸过程中冷却速度较快所造成的。 Mg_2Sn 相形貌的差异和分布可以由合金凝固过程来解释, 当合金由液相开始凝固时, α -Mg 首先从液相析出, 随着温度降低到 439 °C 时发生二元共晶反应, 形成 α -Mg 与 Mg_2Sn 相(图 4b 中 Mg_2Sn (I) 颗粒相); 当温度继续降低到 430 °C 时, 三元共晶反应发生形成 α -Mg、 $Mg_{17}Al_{12}$ 与 Mg_2Sn (图 4b 中 Mg_2Sn (II) 细小颗粒相)^[14]。此外, 在 Mg-Al-Sn 系合金中 Mg、

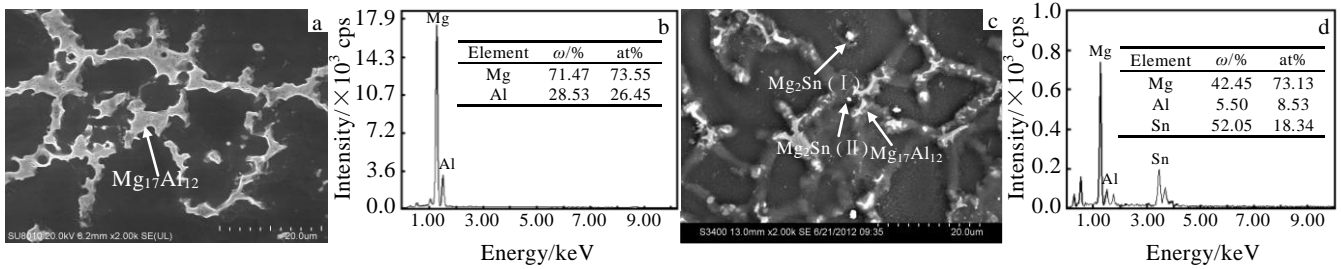


图 4 合金的 SEM 照片及能谱分析

Fig.4 SEM images (a, c) and EDS spectra (b, d) of the alloys: (a, b) Mg-7Al and (c, d) AT72

Al、Sn 的电负性值分别为 1.31、1.61 和 1.96，Mg 和 Sn 元素的电负性值相差最大，所以 Mg_2Sn 相比 $Mg_{17}Al_{12}$ 相更加容易形成^[15]。添加 Sn 元素之后合金基体中的第二相体积分数明显增加 (图 6)。

图 5 为固溶处理后的 Mg-7Al 和 AT72 合金显微组织及 SEM 照片。结合 XRD 图谱 (图 2 中谱线 c 和 d) 分析可知，经过固溶处理后 Mg-7Al 合金晶界上的 $Mg_{17}Al_{12}$ 相已基本溶解到基体中，其组织变为单相 α -Mg 过饱和固溶体；而 AT72-T4 合金晶界上第二相的数量较多，残留的 $Mg_{17}Al_{12}$ 相的形状由铸态时的条状转变为断续的棒状， Mg_2Sn 相由于其熔点较高，在固溶处理过程中仅有一部分溶解到基体中，大部分仍以细小颗粒相形式分布于基体上 (图 5c)。固溶处理后合金基体中第二相数量明显减少，但 AT72-T4 合金中的第二相体积分数仍高于 Mg-7Al 合金 (图 6)。DSC 实验结果表明：在升温过程中，吸热峰开始偏离基线的点所对应的温度为合金开始熔化的温度，Mg-7Al 合金开始熔化温度是 430 °C，而加入 Sn 元素的 AT72 合金是 438 °C (图 7)，即 Sn 的加入提高了合金的开始熔化温度，进而有助于提高组织的热稳定性。此外，Al 作为主溶质元素，其含量较多，且其与 Mg 形成的 $Mg_{17}Al_{12}$ 相熔点低于 Mg_2Sn 相，在合金固溶处理过程中， $Mg_{17}Al_{12}$ 相先于 Mg_2Sn 相分解并溶入基体。Sn 元素与 Al 元素的混合焓值为正，因此 Sn 元素被 Al 排斥，不能与主溶质元素 Al 偏析或者是形成金属间化合物^[19]。因此，固溶处理后 $Mg_{17}Al_{12}$ 相易于溶解在 α -Mg 基体，

而部分 Mg_2Sn 相被残留在基体中。

2.2 Sn 元素对 Mg-7Al 合金力学性能的影响

图 8 和图 9 分别为合金的室温及高温力学性能，本试验中 Sn 元素的添加有助于提高 Mg-7Al 合金的拉伸性能，尤其对合金高温力学性能的改善效果比较显著。

真空压铸 AT72 合金室温和 200 °C 的抗拉强度分别为 258.0 和 150.7 MPa，其比 Mg-7Al 合金分别提高了 25.7% 和 43.0%。在合金拉伸变形过程中第二相的数量及形貌影响着微裂纹的产生与扩展。由于 Sn 元素的添加增加了合金中第二相的数量 (图 6)，且合金在凝固过程中析出弥散分布的颗粒状 Mg_2Sn 相以及对 $Mg_{17}Al_{12}$ 相形貌的改善，这些都能够有效地阻碍位错的运动，造成位错塞积，从而提高合金的强度。

此外，Sn 元素的加入使得合金的组织得到一定的细化，根据 Hall-Petch 公式：

$$\sigma_{0.2} = \sigma_0 + kd^{-0.5} \quad (1)$$

式中， $\sigma_{0.2}$ 是合金的屈服强度， σ_0 是阻止位错滑移的摩擦力， k 为相邻晶粒位向差对位错运动影响系数， d 为晶粒直径。而且镁合金对应的 k 为 280~320 MPa· $\mu m^{0.5}$ ，远高于铝合金 ($k=68$ MPa· $\mu m^{0.5}$)，因此镁合金晶粒的细化更能有效提高合金的屈服强度。镁合金细晶强化效果不仅在室温下明显，而且在高温下 (直到 250 °C) 细晶强化效果也很明显^[20]。因此，AT72 合金在室温及高温下均表现出较高的强度。此外，合金晶粒得到细化后，即在一定体积内晶粒数目增加，在同样的变形

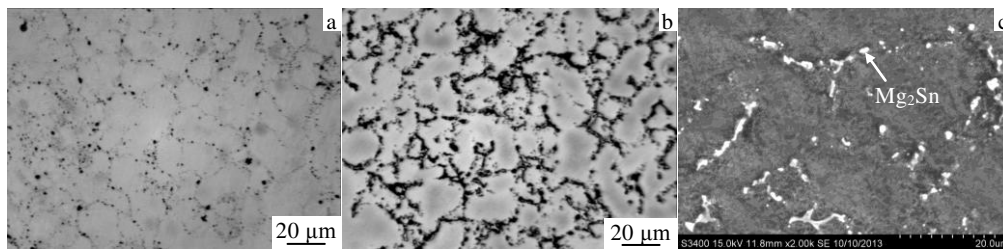


图 5 固溶处理后合金显微组织及 SEM 照片

Fig.5 Microstructures and SEM image of the alloys after solid solution treatment: (a) Mg-7Al, (b) AT72, and (c) SEM image of AT72

量下，变形分散在更多的晶粒上进行，变形的不均匀性便越小，变形引起的应力集中就越小，因此合金的塑性也得到一定程度的提高。

固溶处理后 Mg-7Al 合金中由于 $Mg_{17}Al_{12}$ 相溶解到基体中产生的固溶强化也使得合金的抗拉强度得到一定的改善，但却降低了塑性变形启动的阻力，导致 Mg-7Al 合金的屈服强度有所降低。然而 AT72 合金在经过固溶处理后其室温和高温力学性能均得到一定的改善。一方面是由于 $Mg_{17}Al_{12}$ 相及部分的 Mg_2Sn 相溶解到基体中产生了固溶强化，另一方面是由于在 AT72 合金凝固过程中析出的高温稳定相 Mg_2Sn 在固溶处理后仍有一部分细小的颗粒相弥散在基体中起到弥散强化的作用。

3 第一性原理计算

3.1 合金形成热和结合能

为了揭示 Sn 对 Mg-Al 合金组织中相形成的影响，通过计算比较了 Mg-Al-Sn 合金中主要强化相是 $Mg_{17}Al_{12}$ 和 Mg_2Sn 相的形成能力及晶格稳定性。两相的晶体结构参数和晶格常数列于表 1。 Mg_2Sn 和 $Mg_{17}Al_{12}$ 的合金形成热计算采用如下公式：

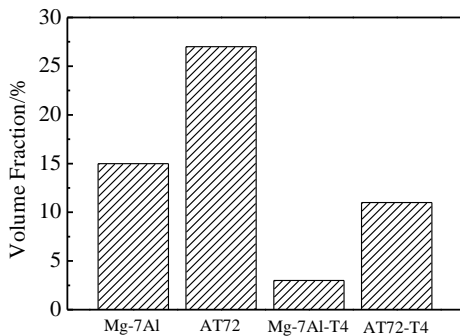


图 6 合金中第二相体积分数

Fig.6 Volume fraction of second phases of the alloys

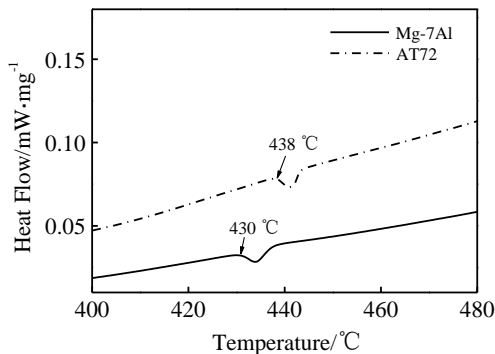


图 7 Mg-7Al 和 AT72 合金 DSC 曲线

Fig.7 DSC curves of Mg-7Al and AT72 alloys

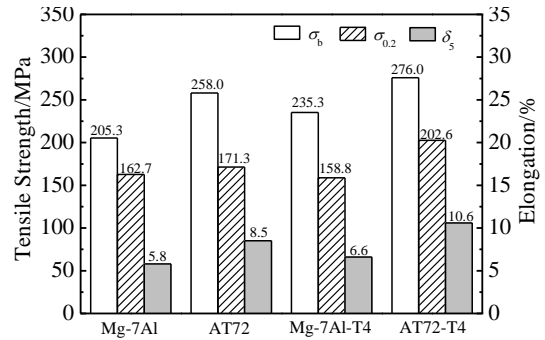


图 8 不同状态 Mg-7Al 和 AT72 合金室温力学性能

Fig.8 Mechanical properties of Mg-7Al and AT72 alloys in different states at room temperature

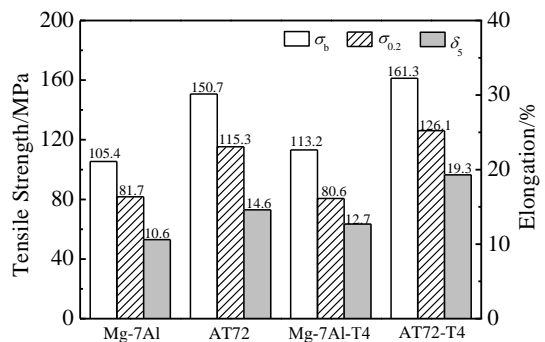


图 9 不同状态 Mg-7Al 和 AT72 合金 200 °C 力学性能

Fig.9 Mechanical properties of Mg-7Al and AT72 alloys in different states at 200 °C

$$\Delta H = \frac{E_{tot}^{AB} - N_A E_{solid}^A - N_B E_{solid}^B}{N_A + N_B} \quad (2)$$

式 (2) 中， ΔH 是合金形成热， E_{tot}^{AB} 是不同相的总能量， N_A 和 N_B 分别是晶胞中原子的个数， E_{solid}^A 和 E_{solid}^B 分别是固态元素 A, B 平均每个原子的能量，Mg, Al 和 Sn 固态下的能量计算值分别是 -973.9493 ， -56.4195 和 -95.4475 eV/atom。

通过计算相的结合能可以进一步比较分析晶体的稳定性，结合能定义为将晶体分解为单个原子所需要的能量。其计算公式如下：

$$E_{coh} = \frac{E_{tot}^{AB} - N_A E_{atom}^A - N_B E_{atom}^B}{N_A + N_B} \quad (3)$$

式 (3) 中， E_{atom}^A 和 E_{atom}^B 表示原胞点阵中 A, B 元素自由原子的能量，Mg, Al 和 Sn 自由原子的能量分别为 -972.4847 ， -52.7251 和 -91.0699 eV/atom。其合金形成热和结合能计算结果列于表 1。计算结果表明，由于 Mg_2Sn 和 $Mg_{17}Al_{12}$ 两相的合金形成热均为负值，两相在 Mg-Al-Sn 合金凝固过程中可稳定存在，且 Mg_2Sn

表 1 形成热与结合能的计算结果

Table 1 Corresponding results of cohesive energy (E_{coh}) and formation enthalpy (ΔH)

Phase	Space group	Lattice constant/nm	Atom coordinates	$\Delta H/\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$	$E_{coh}/\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$
$\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$	I-43m	0.913	Mg (I)(0.000,0.000,0.000)	-5.03	-235.26
			Mg (II)(0.328,0.328,0.328)		
			Mg (III)(0.356,0.356,0.040)		
			Al (0.090, 0.090, 0.274)		
Mg_2Sn	Fm3m	0.669	Mg (0.250, 0.250, 0.250) Sn (0.000, 0.000, 0.000)	-20.65	-255.12

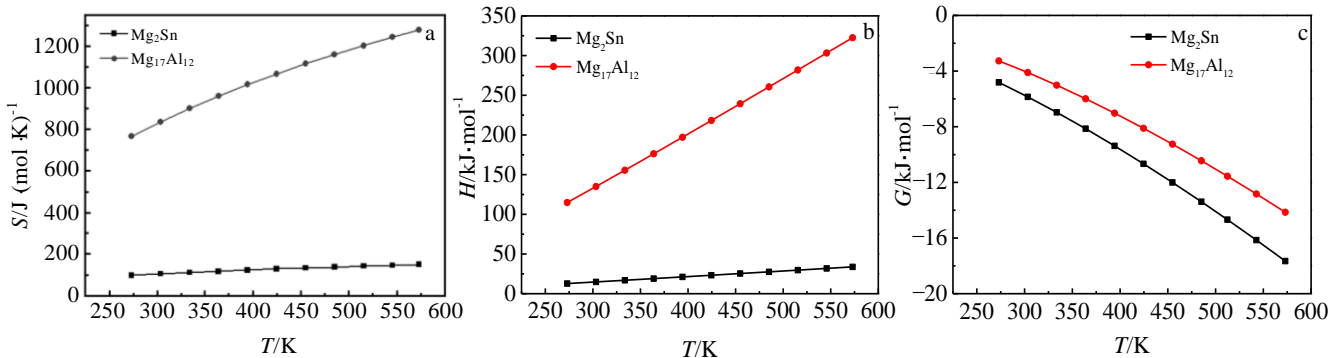


图 10 Mg_2Sn 和 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相不同温度下的熵、焓和吉布斯自由能

Fig.10 Changes of entropies S (a), enthalpies H (b), and Gibbs free energies G (c) of Mg_2Sn and $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ phases with temperature

比 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相具有更低的合金形成热和结合能，这说明 Mg_2Sn 比 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相更易形成且更加稳定。

3.2 热力学性质

由于热力学性能是用来描述相在高温下结构稳定性的，因此，计算了不同温度下 (273~573 K) AT72 合金中主要强化相 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 和 Mg_2Sn 的热力学性能，旨在从微观理论角度分析 Sn 合金化使 Mg-7Al 合金高温稳定性提高的原因。

体系焓 (H) 与 Gibbs 自由能 (G) 分别采用下式进行计算：

$$H = U + \int C_p dT \tag{4}$$

$$G = H - TS \tag{5}$$

式 (4) 和 (5) 中， T 为温度， C_p 为该温度下的等压热容， U 为 0 K、 1.01×10^5 Pa 下体系的形成热， S 为对应温度下的熵。两相的熵 (S)、焓 (H) 与 Gibbs 自由能 (G) 的计算结果如图 10 所示。

随着温度的升高 (从 273~573 K)，合金体系的熵和焓都在增加 (图 10a, 10b)。相的 Gibbs 自由能随着温度的升高逐步减少，比较相同温度下两相的吉布斯自由能可以发现， Mg_2Sn 相的 Gibbs 自由能低于 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相 (图 10c)。由于相的 Gibbs 自由能越小，合金热力学稳定性越好^[21]，根据计算结果显示， Mg_2Sn 相的热力学稳定性优于 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相。因此，添加 Sn 元素的 AT72 合金组织中形成耐热的 Mg_2Sn 相将有助于提高合金的热稳定性。

4 结 论

1) 向 Mg-7Al 合金中添加质量分数 2%Sn 元素能够细化合金组织，形成颗粒状新相 Mg_2Sn ，并抑制 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相的生长。 Mg_2Sn 相以单独存在的颗粒相和分布在 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相中的细小颗粒相形式存在。

2) Sn 元素的添加有助于提高 Mg-7Al 合金的拉伸性能，尤其对合金高温力学性能的改善效果比较显著。这是由于合金组织细化，组织中第二相数量的增加，具有良好热力学性质的 Mg_2Sn 相形成以及对 Mg_2Sn 相形貌的改善综合作用的结果。AT72-T4 合金表现出优异的力学性能是由于 Al 元素的固溶强化及细小 Mg_2Sn 颗粒相的弥散强化作用。

3) Mg_2Sn 相较 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相更容易形成并更加稳定，且 Mg_2Sn 相的热力学性质也优于 $\text{Mg}_{17}\text{Al}_{12}$ 相，Sn 合金化有助于提高 Mg-7Al 合金的高温力学性能。

参考文献 References

[1] Mordike B L, Ebert T. *Mater Sci Eng A*[J], 2001, 302(1): 37
 [2] Agnew S R, Nie J F. *Scr Mater*[J], 2010, 63(7): 671
 [3] Gurutze A, Iñaki H, Jukka V *et al. Adv Eng Mater*[J], 2007, 9(9): 751
 [4] Luo A A. *Int Mater Rev*[J], 2004, 49(1): 13
 [5] Kondori B, Mahmudi R. *Metall Mater Trans A*[J], 2009, 40(8): 2007

- [6] Lin L, Wang F, Yang L *et al. Mater Sci Eng A*[J], 2011, 528(15): 5283
- [7] Fan Jinping(范晋平), Xu Bingshe(许并社), Wang Shebin(王社斌) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2012, 41(10): 1721
- [8] Yuan G Y, Sun Y S, Ding W J. *Scr Mater*[J], 2000, 43(11): 1009
- [9] Srinivasan A, Swaminathan J, Pillaic U T S *et al. Mater Sci Eng A*[J], 2008, 485(1-2): 86
- [10] Liu Zili(刘子利), Zhou Guibin(周桂斌), Liu Xiqin(刘希琴) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2013, 42(1): 99
- [11] Turen Y. *Mater Des*[J], 2013, 49: 1009
- [12] Yang M B, Pan F S. *Mater Des*[J], 2010, 31(1): 68
- [13] Li R G, Xu Y, Qi W *et al. Mater Charact*[J], 2008, 59(11): 1643
- [14] Luo A A, Fu P H, Peng L M *et al. Metall Mater Trans A*[J], 2012, 43(1): 360
- [15] Chen J H, Chen Z H, Yan H G *et al. J Alloy Compd*[J], 2008, 461(1-2): 209
- [16] Shi D M, Wen B, Melnik R *et al. J Solid State Chem*[J], 2009, 182(10): 2664
- [17] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M. *Phys Rev Lett*[J], 1996, 7(18): 3865
- [18] Vanderbilt D. *Phys Rev B*[J], 1990, 41(11): 7892
- [19] Elsayed F R, Sasaki T T, Mendis C L *et al. Mater Sci Eng A*[J], 2013, 566: 22
- [20] Stjohn D H, Easton M A, Qian M *et al. Metall Mater Trans A*[J], 2013, 44(7): 2935
- [21] Yang Xiaomin(杨晓敏), Hou Hua(侯 华), Zhao Yuhong(赵宇宏) *et al. Rare Metal Materials and Engineering*(稀有金属材料与工程)[J], 2014, 43(4): 875

Microstructure, Mechanical Properties and First Principle Calculation of Mg-7Al (-2Sn) Alloys Prepared by Vacuum Die-casting

Wang Feng¹, Sun Shijie¹, Mao Pingli¹, Liu Zheng¹, An Shuaijie²

(1. Shenyang University of Technology, Shenyang 110870, China)

(2. Liaoning Equipment Manufacturing Vocational and Technical College, Shenyang 110161, China)

Abstract: The effects of 2 wt% Sn on the microstructures and the mechanical properties of the die-cast Mg-7Al alloy and the solution-treated alloy were studied by optical microscope (OM), scanning electron microscopy (SEM), energy dispersive spectrometer (EDS), X-ray diffraction (XRD), differential scanning calorimetry (DSC) and tensile tests. The results show that after 2 wt% Sn is added into the Mg-7Al alloys, the grains are refined, the growth of Mg₁₇Al₁₂ phase is suppressed and a few dispersed Mg₂Sn particles with granular morphology are formed. After solution treatment the second phases of Mg-7Al alloys drastically decrease while fine granular Mg₂Sn phases are still on the AT72 alloy matrix. AT72 alloy exhibits better tensile properties at both room and elevated temperature than Mg-7Al alloys due to the refinement of grains, increase of second phases, optimum morphology of Mg₁₇Al₁₂ and precipitation of Mg₂Sn with better thermodynamic properties. The mechanical properties are improved after solid-solution treatment, which is attributed to solid-solution strengthening and dispersion strengthening. In addition, from the view of microscopic theory, the effect of Sn on the improvement of the mechanical properties of Mg-7Al alloy at elevated temperatures was discussed by first-principle calculation.

Key words: Mg-Al alloy; alloying; microstructure; mechanical properties; first principle

Corresponding author: Wang Feng, Ph. D., Associate Professor, School of Materials Science and Engineering, Shenyang University of Technology, Shenyang 110870, P. R. China, Tel: 0086-24-25496616, E-mail: wf9709@126.com